

UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA



UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS
DE GRAN CANARIA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE DOCTORADO

FÍSICA, MATEMÁTICAS, GEOLOGÍA Y CLIMA

–**ABAKO**–

**Un modelo para el estudio de la cinética de
poblaciones y propiedades radiativas de plasmas bajo
condiciones de no-equilibrio**

Tesis doctoral presentada por Ricardo J. Florido Hernández.

*Dirigida por el Dr. Juan Miguel Gil de la Fe, el Dr. Rafael Rodríguez Pérez
y el Dr. Juan Manuel Martín González.*

Los directores,

Fdo.: Dr. Gil de la Fe,

Fdo.: Dr. Rodríguez Pérez,

Fdo.: Dr. Martín González

El doctorando,

Fdo.: Ricardo J. Florido Hernández

Las Palmas de Gran Canaria, junio de 2007.

A mis padres,
a mi hermana.

A la memoria de mis abuelos,
Juan y Concha.

Agradecimientos

Este trabajo de tesis se ha realizado bajo la dirección de los doctores D. Juan Miguel Gil de la Fe, D. Rafael Rodríguez Pérez y D. Juan Manuel Martín González, a quienes deseo expresar mi más profunda gratitud por su apoyo científico, su amistad y los medios puestos a mi alcance. También quiero agradecer al Instituto de Fusión Nuclear de la Universidad Politécnica de Madrid y en particular al Dr. Emilio Mínguez Torres la ayuda prestada en todo momento. Gracias a su colaboración ha sido posible establecer importantes contactos que han contribuido sin duda al enriquecimiento de este trabajo.

Quisiera agradecer al Dr. Roberto Mancini su amabilidad y su atención durante mi estancia en Febrero de 2004 en el Departamento de Física de la Universidad de Nevada, en Reno. El trabajo realizado durante aquellos días fue un importante impulso para desarrollar la tesis que ahora se presenta.

Asimismo, agradezco a mis compañeros del Departamento de Física de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria la amistad y la camaradería propicia para hacer algo más llevadero este trabajo. Entre ellos quisiera destacar a todos los miembros del Grupo de Investigación de Interacción Radiación Materia, a José Luis Trenzado y a Mercedes Pacheco. Gracias de verdad por el disparate oportuno, las risas y la frescura.

De forma muy especial quiero expresar mi gratitud a Rafael Rodríguez. Su colaboración en el tramo final de esta tesis ha sido inestimable. A él le debo todos los cálculos espectrales que se presentan en este trabajo. Le agradezco también las ideas que han surgido de nuestras discusiones en estos últimos meses y su particular eficacia. Es un auténtico privilegio trabajar a su lado.

Quisiera agradecer a Juan Manuel Martín la total disposición que mostró para empezar a trabajar conmigo cuando la tesis era tan sólo una posibilidad. En cierta forma, él fue mi puerta de entrada al Departamento de Física de la ULPGC.

A Pablo Martel le agradezco sinceramente su presencia y su ayuda siempre que la he necesitado. Gracias también por haber apostado sin fisuras por mí desde el primer momento.

Gracias a Jesús García, por haber sido habitual compañero de *fatigas internacionales* y particularmente por su ayuda y apoyo para lograr que *se hiciera justicia*.

A Juan Miguel Gil le agradezco su confianza constante y su entusiasmo. Mi sensación de entendimiento científico con él ha sido una gran ayuda. Además de esto, gracias por formar parte de ese grupo de gente que merece realmente la pena.

De mi etapa de estudiante de Física en la Universidad de La Laguna, quiero recordar especialmente a dos personas. A Javier Herreros le debo muchos de los buenos momentos de entonces. Gracias por su amistad y por ser tan auténtico. Pocas son las personas con un modo de pensar tan parecido al mío como el de Inés de Vega. En ella me he visto reflejado en numerosas ocasiones. Le agradezco su especial complicidad.

Gracias por supuesto a mis amigos, por sus ánimos y por soportar mis desplantes y negativas por tener que *terminar la tesis*. Entre todos, sería injusto no destacar a Daniel Ramírez. Nadie como él ha sabido estar presente en muchos episodios de mi vida, en los importantes y en los que no, en los buenos y en los malos ratos. Gracias por ser.

Nada de lo que ahora soy, nada de lo que tengo hubiese sido posible sin el apoyo y el cariño de mi familia, de mis padres y mi hermana. Ellos siempre han estado ahí, aguantando de forma incondicional mis malos humos, mi carácter particular y mis ausencias. A partir de ahora, espero sinceramente dedicarles el tiempo que de verdad se merecen.

Por último, a Lidi le agradezco su nítida presencia en mi vida, su genial manera de quererme y entenderme. Sin duda a ella le debo la serenidad y la estabilidad que me han permitido acabar, por fin, este trabajo.

Índice general

Prólogo	xix
1. Introducción	1
1.1. Concepto de plasma y objetivo de la física de plasmas	1
1.2. Áreas temáticas de la física de plasmas y aplicaciones	3
1.2.1. Plasmas de aplicación tecnológica	3
1.2.2. Plasmas no neutros	5
1.2.3. Plasmas astrofísicos y espaciales	7
1.2.4. Plasmas de fusión	8
1.3. Clasificación y parámetros básicos de un plasma	16
2. Elementos de un modelo colisional-radiativo	27
2.1. Determinación de la estructura atómica	28
2.1.1. Aproximación de campo central	28
2.1.2. Correcciones al modelo de campo central	35
2.1.3. Características del potencial central	45
2.1.4. El modelo de Thomas-Fermi	47
2.1.5. El método de Hartree-Fock	49
2.1.6. El método del potencial paramétrico	54
2.1.7. Efectos relativistas	58
2.1.8. Mejoras en la obtención de la estructura energética	64
2.1.9. Transiciones radiativas	67
2.1.10. Efectos de plasma	68
2.2. Procesos atómicos en plasmas	76
2.2.1. Clasificación de los procesos atómicos	77
2.2.2. Decaimiento espontáneo, absorción y emisión estimulada	80
2.2.3. Excitación y desexcitación colisional	80
2.2.4. Ionización colisional y recombinación a tres cuerpos	81

2.2.5.	Fotoionización y recombinación radiativa	81
2.2.6.	Autoionización y captura electrónica	82
2.3.	Determinación de la distribución de poblaciones en plasmas	83
2.3.1.	El equilibrio local termodinámico	83
2.3.2.	El modelo Corona	86
2.3.3.	Distribución de poblaciones en la situación de no-equilibrio y el modelo colisional-radiativo	87
3.	Descripción del modelo cinético propuesto –ABAKO–	91
3.1.	Descripción general	91
3.2.	Criterios de notación	98
3.3.	Determinación de los datos atómicos	101
3.3.1.	Consideraciones preliminares	101
3.3.2.	Diferentes propuestas de potenciales analíticos	102
3.3.3.	Determinación de energías totales	107
3.3.4.	Determinación de las fuerzas de oscilador	109
3.3.5.	Datos atómicos procedentes de fuentes externas	110
3.3.6.	Corrección por continuum-lowering	110
3.4.	Expresiones de los coeficientes de tasas	112
3.4.1.	Emisión espontánea	115
3.4.2.	Excitación colisional y desexcitación colisional	116
3.4.3.	Ionización colisional y recombinación a tres cuerpos	119
3.4.4.	Recombinación radiativa	121
3.4.5.	Autoionización y captura electrónica	123
3.5.	Ecuaciones del modelo colisional-radiativo	128
3.5.1.	Ecuaciones de tasas en plasmas ópticamente delgados	132
3.5.2.	Ecuaciones de tasas en plasmas ópticamente gruesos	133
3.6.	Cálculo de propiedades radiativas	156
3.7.	Estructura y resolución de la matriz de tasas y otros detalles técnicos	160
4.	Análisis y validación de ABAKO	165
4.1.	Comportamiento de ABAKO en los límites de baja y alta densidad	166
4.2.	Estudio de plasmas ópticamente delgados	173
4.2.1.	Comparación con otros códigos de la bibliografía	173
4.2.2.	Comparación con datos experimentales	235
4.3.	Estudio de plasmas ópticamente gruesos	239
4.3.1.	El átomo de dos niveles	239

4.3.2. Comparación con datos experimentales	255
4.3.3. Medios no-homogéneos	271
5. Conclusiones y líneas futuras	285
5.1. Conclusiones	285
5.2. Líneas futuras	289
A. Constantes fundamentales y equivalencias	291
A.1. Constantes fundamentales	291
A.2. Equivalentes energéticos	291
B. Relaciones entre las secciones eficaces de procesos atómicos inversos	293
B.1. Excitación y desexcitación colisional	293
B.2. Ionización colisional y recombinación a tres cuerpos	294
B.3. Absorción, emisión estimulada y emisión espontánea	296
B.4. Fotoionización, recombinación estimulada y recombinación radiativa	298
C. Perfiles de línea	301
C.1. Perfil Lorentz	301
C.2. Perfil Doppler	302
C.3. Perfil Voigt	303
D. Solución formal de la ecuación de transferencia radiativa	307
D.1. Solución de una EDO de primer orden utilizando un factor integrante	307
D.2. Solución formal de la ecuación de transferencia radiativa	308
E. Deducción de los coeficientes de acoplamiento radiativo	309
Bibliografía	317

Índice de figuras

1.1. Dependencia de la energía de enlace promedio por nucleón con el número másico.	10
1.2. Descripción esquemática de un tokamak.	12
1.3. Etapas del confinamiento inercial.	14
1.4. Clasificación de los diferentes tipos de plasmas en función de sus condiciones de densidad y temperatura.	17
3.1. Representación esquemática de los criterios utilizados para asignar el valor de energía correspondiente a un estado atómico.	100
3.2. Diagrama de niveles energéticos y conexiones a través de los procesos atómicos incluidos en el modelo CR.	114
3.3. Discretización del medio con geometría plana y anchura L en N_C celdas homogéneas.	142
3.4. Geometría del transporte radiativo en el interior del medio.	142
3.5. Patrón característico de la matriz CR.	162
4.1. Comportamiento de la ionización media con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 10 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.	169
4.2. Comportamiento de las poblaciones iónicas con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 10 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.	169
4.3. Comportamiento de la ionización media con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 50 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.	170
4.4. Comportamiento de las poblaciones iónicas con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 50 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.	170
4.5. Ionización media de un plasma de C frente a la densidad electrónica para $T = 10 \text{ eV}$. Influencia del CL y del tratamiento explícito o no de los estados de autoionización.	172
4.6. Análisis de la acumulación de población en estados excitados de un plasma de C sobre una malla extensa de n_e y diferentes valores de T	172
4.7. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$	185
4.8. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de C con $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	185

4.9. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.	186
4.10. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.	186
4.11. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	191
4.12. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 5 \text{ eV}$.	191
4.13. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 7 \text{ eV}$.	192
4.14. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 10 \text{ eV}$.	192
4.15. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	193
4.16. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 5 \text{ eV}$.	193
4.17. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 7 \text{ eV}$.	194
4.18. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 10 \text{ eV}$.	194
4.19. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	195
4.20. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 5 \text{ eV}$.	195
4.21. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 7 \text{ eV}$.	196
4.22. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 10 \text{ eV}$.	196
4.23. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	197
4.24. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 5 \text{ eV}$.	197
4.25. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 7 \text{ eV}$.	198
4.26. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 10 \text{ eV}$.	198
4.27. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 7 \text{ eV}$. Comparación de los resultados cuando se utiliza el modelo PA para generar los datos atómicos o bien se calculan con FAC.	204
4.28. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 5 \text{ eV}$. Comparación de los resultados cuando se utiliza el modelo PA para generar los datos atómicos o bien se calculan con FAC.	204
4.29. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de C para las densidades $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Diferencias entre un tratamiento explícito o implícito de los estados doblemente excitados.	208
4.30. Balance recombinación-ionización por ion en un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	210
4.31. Contribución fraccional de la autoionización por especie iónica en un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	210
4.32. Análisis de la distribución de población entre los estados excitados de la especie Be-like en un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	212
4.33. B-plot de la especie Be-like en un plasma de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 3 \text{ eV}$.	212
4.34. Contribución fraccional de la autoionización por especie iónica en un plasma de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 7 \text{ eV}$.	214

4.35. B-plot de la especie Li-like en un plasma de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 7 \text{ eV}$	214
4.36. Análisis de la distribución de población entre los estados excitados de la especie Be-like en un plasma de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 5 \text{ eV}$	216
4.37. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. 218	
4.38. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 10 \text{ eV}$	220
4.39. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 20 \text{ eV}$	220
4.40. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 45 \text{ eV}$	221
4.41. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 60 \text{ eV}$	221
4.42. Poblaciones iónicas de un plasma de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 45 \text{ eV}$. Comparación de los resultados obtenidos con ABAKO al usar PA o FAC.	223
4.43. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Efectos de la corrección por CL.	223
4.44. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de Al con $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. 228	
4.45. Poblaciones iónicas de un plasma de Al con $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 70 \text{ eV}$	228
4.46. Poblaciones iónicas de un plasma de Al con $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 150 \text{ eV}$	229
4.47. Poblaciones iónicas de un plasma de Al con $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 800 \text{ eV}$	229
4.48. Variación de la ionización media con la temperatura en plasmas de Al con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. 233	
4.49. Efecto del continuum-lowering en la determinación de la ionización media de plasmas de Al con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$	233
4.50. Análisis de la distribución de estados de carga de un plasma de Au obtenido en la EBIT-II del LLNL.	237
4.51. Análisis del espectro de emisión de un plasma de Au obtenido en la EBIT-II del LLNL. 238	
4.52. Función fuente del sistema de dos-niveles para $B = 1$, espesor total $\tau_{tot} = 10^4$ y $\epsilon = 10^{-8}$, 10^{-6} , 10^{-4} y 10^{-2} . Comparación entre los resultados obtenidos con ABAKO y el trabajo de Avrett-Hummer.	243
4.53. Función fuente del sistema de dos-niveles para perfil Doppler y Voigt ($a = 0.01$), con $B = 1$, $\epsilon = 10^{-4}$ y espesores totales $\tau_{tot} = 10^2$, 10^4 , 10^6 y 10^8 . Comparación entre los resultados obtenidos con ABAKO y la solución exacta de Avrett-Hummer.	245
4.54. Función fuente del sistema de dos-niveles para perfil Lorentz, con $B = 1$, $\epsilon = 10^{-4}$ y espesores totales $\tau_{tot} = 10^2$, 10^4 , 10^6 y 10^8 . Comparación entre los resultados obtenidos con ABAKO y la solución exacta de Avrett-Hummer.	245
4.55. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\tau_{tot} = 10^4$ y distintos valores de ϵ . Convergencia de ABAKO a la solución exacta a medida que se incrementa el número de celdas.	248

4.56. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\epsilon = 10^{-4}$ y distintos valores de τ_{tot} , típicos en plasmas de laboratorio. Convergencia de ABAKO a la solución exacta a medida que se incrementa el número de celdas.	250
4.57. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\epsilon = 0.5$ y distintos valores de τ_{tot} , típicos en plasmas de laboratorio. Convergencia de ABAKO a la solución exacta a medida que se incrementa el número de celdas.	251
4.58. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\tau_{tot} = 10^4$ y $\epsilon = 10^{-4}, 10^{-8}$. Comparación entre el modelo de Apruzese <i>et al.</i> y ABAKO.	253
4.59. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\tau_{tot} = 10^8, 10^2$ y $\epsilon = 10^{-4}$. Comparación entre el modelo de Apruzese <i>et al.</i> y ABAKO.	254
4.60. Análisis de la distribución de poblaciones iónicas de un plasma de Xe experimental obtenido por Chenais-Popovics <i>et al.</i>	257
4.61. Análisis de la distribución de poblaciones iónicas de un plasma de Xe experimental obtenido por Chenais-Popovics <i>et al.</i> Se muestra de qué manera afecta al cálculo (a) la modificación del valor de T_e y (b) tratar el plasma como ópticamente delgado o grueso.	257
4.62. Espectro de emisión de un plasma de Xe obtenido por Chenais-Popovics <i>et al.</i>	258
4.63. Espectro de emisión de un plasma de Xe obtenido por Chenais-Popovics <i>et al.</i> Se muestra de qué manera afecta al cálculo (a) la modificación del valor de T_e y (b) tratar el plasma como ópticamente delgado o grueso.	259
4.64. Análisis de la distribución de poblaciones iónicas de un plasma de Au generado en el NOVA, en el LLNL.	261
4.65. Análisis de la distribución de poblaciones iónicas de un plasma de Au generado en el NOVA, en el LLNL. Comparación entre los casos ópticamente delgado y grueso.	261
4.66. Espectro de emisión de un plasma de Au generado en el NOVA, en el LLNL.	262
4.67. Espectro de emisión de un plasma de Au generado en el NOVA, en el LLNL. Diferencias en el espectro al tratar el plasma como ópticamente delgado o grueso.	263
4.68. Análisis de la distribución de poblaciones iónicas del plasma de Au de un hohlraum de fusión generado con NOVA, en el LLNL.	265
4.69. Análisis de la distribución de poblaciones iónicas del plasma de Au de un hohlraum de fusión generado con NOVA, en el LLNL. Se muestran los cálculos asumiendo primero un plasma ópticamente delgado y luego grueso.	265
4.70. Espectro de emisión del plasma de Au de un hohlraum de fusión generado con NOVA, en el LLNL.	266
4.71. Espectro de emisión del plasma de Au de un hohlraum de fusión generado con NOVA, en el LLNL. Se ilustran los cambios producidos por los efectos de opacidad.	267

4.72. Espectro de emisión de un plasma de Al obtenido en el LULI. Se muestra una estimación de ABAKO para $n_e = 8 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $T = 400 \text{ eV}$ y $L = 2 \text{ }\mu\text{m}$	270
4.73. Espectro de emisión de un plasma de Al obtenido en el LULI. Se muestra una estimación de ABAKO para $n_e = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $T = 470 \text{ eV}$ y $L = 5 \text{ }\mu\text{m}$	270
4.74. Dos cálculos sobre el espectro de emisión de Al con diferentes valores de los parámetros característicos del plasma.	271
4.75. Variación de la ionización media con la posición en el interior de un plasma de Al con $T = 600 \text{ eV}$, $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $L = 1500 \text{ }\mu\text{m}$	273
4.76. Variación de las poblaciones iónicas con la posición en el interior de un plasma de Al con $T = 600 \text{ eV}$, $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $L = 1500 \text{ }\mu\text{m}$	273
4.77. Variación de las densidades de los niveles de He-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.	274
4.78. Variación de las densidades de los niveles de He-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre el cálculo grueso homogéneo y el no-homogéneo, efectuado con 40 celdas.	275
4.79. Variación de las densidades de los niveles de H-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.	276
4.80. Variación de las densidades de los niveles de H-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre el cálculo grueso homogéneo y el no-homogéneo, efectuado con 40 celdas.	277
4.81. Variación de la temperatura y densidad electrónica con la posición en el interior de un plasma de Al. Se muestra la aplicabilidad de ABAKO en un medio con condiciones físicas no uniformes.	279
4.82. Variación de la ionización media con la posición en el interior del plasma de Al. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.	281
4.83. Variación de las poblaciones iónicas con la posición en el interior del plasma de Al. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.	281
4.84. Variación de las densidades de los niveles de He-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.	282
4.85. Variación de las densidades de los niveles de Li-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.	283
C.1. Comparación entre perfiles de línea Lorentz, Doppler y Voigt con $a = 0.25$	304
C.2. Comparación entre perfiles de línea Lorentz, Doppler y Voigt con $a = 0.5$	304
C.3. Comparación entre perfiles de línea Lorentz, Doppler y Voigt con $a = 1$	304
E.1. Discretización de la lámina de anchura L en N_C celdas homogéneas.	313

Índice de tablas

2.1. Desdoblamiento de una configuración electrónica en términos LS	38
2.2. Desdoblamiento en niveles de la estructura energética correspondiente a un acoplamiento LS	41
2.3. Desdoblamiento de una configuración electrónica de campo central en términos jj	42
2.4. Ejemplo de desdoblamiento en niveles de la estructura energética correspondiente a un acoplamiento jj	45
2.5. Procesos atómicos en plasmas.	78
3.1. Lista de procesos atómicos incluidos un modelo CR general y símbolos utilizados para los correspondientes coeficientes de tasas.	129
3.2. Tiempos de cálculo de los métodos directo e iterativo para la inversión de la matriz CR.	163
4.1. Descripción de los códigos participantes en las últimas ediciones del <i>Non-LTE Code Comparison Workshop</i>	176
4.2. Conjunto de configuraciones utilizado por ABAKO para cada secuencia isoelectrónica, desde Kr-like hasta H-like. Consúltense en el texto los detalles relativos a la notación utilizada, así como criterios de selección más específicos.	181
4.3. Condiciones de densidad y temperatura de los casos de C propuestos en el NLTE-4.	184
4.4. Errores relativos en \bar{Z} para plasmas de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$	187
4.5. Errores relativos en \bar{Z} para plasmas de C con $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	187
4.6. Errores relativos en \bar{Z} para plasmas de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	188
4.7. Errores relativos en \bar{Z} para plasmas de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	188
4.8. Desviaciones en las distribuciones iónicas de los distintos códigos respecto a ATOMIC para plasmas de C con $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$	199
4.9. Desviaciones en las distribuciones iónicas de los distintos códigos respecto a ATOMIC para plasmas de C con $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	199
4.10. Desviaciones en las distribuciones iónicas de los distintos códigos respecto a ATOMIC para plasmas de C con $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	200

4.11. Desviaciones en las distribuciones iónicas de los distintos códigos respecto a ATOMIC para plasmas de C con $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	200
4.12. Dimensiones de la base de datos atómicos de C generada con el modelo de potenciales analíticos (PA) o con FAC (FAC).	201
4.13. Errores relativos en el cálculo de \bar{Z} en plasmas de C al ejecutar ABAKO con dos fuentes distintas de datos atómicos, el modelo atómico propio PA y FAC.	203
4.14. Desviaciones en el cálculo de las poblaciones iónicas en plasmas de C al ejecutar ABAKO con dos fuentes distintas de datos atómicos, el modelo atómico propio PA y FAC.	203
4.15. Ionizaciones medias en plasmas de carbono calculadas por ATOMIC utilizando datos atómicos en configuración media (CA) o en estructura fina (FS).	206
4.16. Ionizaciones medias en plasmas de carbono calculadas por ABAKO utilizando el modelo de potencial analítico (PA) o datos atómicos procedentes de FAC (FAC).	206
4.17. Condiciones de densidad y temperatura de los casos de C propuestos en el NLTE-3.	217
4.18. Errores relativos en \bar{Z} para plasmas de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$	218
4.19. Desviaciones en las distribuciones iónicas de los distintos códigos respecto a NOMAD para plasmas de C con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$	219
4.20. Corrección (en eV) por CL del potencial de ionización de los distintos estados de carga de C a diferentes temperaturas y con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$	224
4.21. Condiciones de densidad y temperatura de los casos de Al propuestos en el NLTE-3.	227
4.22. Errores relativos en \bar{Z} para plasmas de Al con $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$	231
4.23. Desviaciones en las distribuciones iónicas de los distintos códigos respecto a ATOMIC para plasmas de Al con $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$	231
4.24. Corrección en eV del potencial de ionización debido al CL en plasmas de Al con $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Se indica también qué porcentaje representa dicha corrección respecto al potencial de ionización del ion correspondiente en situación aislada.	234
4.25. Comparación de la ionización media experimental de un plasma de Au bajo condiciones Corona con los cálculos de diferentes modelos cinéticos.	235
4.26. Análisis de un plasma de Au obtenido en la EBIT-II del LLNL. Tasas totales de ionización y recombinación del ion As-like y contribución fraccional de cada proceso atómico.	237
4.27. Datos relativos al estudio de la convergencia de la función fuente del átomo de dos-niveles a la solución exacta al variar el número de celdas.	247
4.28. Ionización media de un plasma de Xe ópticamente grueso, con parámetros característicos $n_{ion} = 4.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 450 \text{ eV}$ y $L = 160 \mu\text{m}$. Comparación del resultado de ABAKO con la medida experimental y los cálculos de otros modelos.	255

4.29. Ionización media de un plasma de Au ópticamente grueso, con parámetros característicos $n_e = 6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 2200 \text{ eV}$ y $R = 100 \text{ }\mu\text{m}$. Comparación del resultado de ABAKO con la medida experimental y los cálculos de otros modelos.	260
4.30. Ionización media de un plasma de Au generado en un hohlraum de fusión. Comparación del resultado de ABAKO con la medida experimental y otros modelos.	264

Prólogo

La cinética de poblaciones en plasmas de NLTE es una gran amalgama que se nutre de muchas áreas diferentes, como la teoría de la estructura y la espectroscopía atómica, la teoría de colisiones atómicas, la mecánica estadística y también la simulación numérica. Por otro lado, los estudios cinéticos y, en general, la física atómica de plasmas resultan de interés en el contexto de otros campos de la física, como en la astrofísica, para el estudio de atmósferas estelares, y en las investigaciones relacionadas con el desarrollo de la fusión nuclear, ya sea por confinamiento magnético o inercial. Por todo esto, uno de los mayores esfuerzos realizados en esta tesis doctoral ha sido el de reunir, organizar y formalizar bajo un mismo lenguaje todas aquellas formalismos necesarios para el desarrollo de un nuevo código cinético. Así pues, al margen de su aportación como trabajo de investigación, esta memoria ha sido redactada con una intención claramente didáctica, procurando recoger y poner al alcance, al menos de forma cualitativa, pero en un sólo documento, los elementos básicos para introducirse en el área de la física atómica de plasmas.

Esta memoria recoge el trabajo de cinco años en el Departamento de Física de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, desde abril de 2002, dedicados al estudio de la cinética de poblaciones en plasmas bajo condiciones de NLTE. La idea de la tesis doctoral surgió tras la cesión por parte de los doctores D. Emilio Mínguez, de la Universidad Politécnica de Madrid, y D. Roberto Mancini, de la Universidad de Reno, del código colisional-radiativo M3R. Seguidamente, nuestro grupo de investigación comenzó a adaptarlo para que pudiese nutrirse de los datos atómicos generados por los modelos de potenciales analíticos desarrollados con anterioridad en el seno del grupo. Así nació ATOM3R, modelo con el que tuvimos la oportunidad de participar en el *Third Non-LTE Code Comparison Workshop*, celebrado en Gaithersburg (EEUU) en diciembre de 2003. Esta reunión fue una valiosa fuente de aprendizaje en la que además se pusieron claramente de manifiesto las necesidades de mejora en el código. Éste fue el motor que impulsó el desarrollo de ABAKO, el modelo que se presenta en esta tesis.

El capítulo introductorio es de corte divulgativo. En él se habla del plasma como *cuarto estado de la materia*, se discute su presencia y sus principales aplicaciones tecnológicas en la sociedad actual. También se presentan las principales áreas de investigación en física de plasmas y los pro-

blemas a los que se pretende dar respuesta. Se hace especial hincapié en el tema de la fusión termonuclear, por haber sido, en cierta forma, el telón de fondo de las principales líneas de investigación de nuestro grupo. Finalmente se dedica una sección a definir los conceptos y parámetros fundamentales que permiten la caracterización de un plasma, así como las principales hipótesis de trabajo que luego serán utilizadas en la tesis.

El capítulo 2 es de revisión teórica. En él se presentan los tres elementos esenciales para la construcción de un modelo colisional-radiativo: el cálculo de la estructura atómica, el modelado de los procesos atómicos que tienen lugar en el plasma y, finalmente, la determinación de la distribución de poblaciones. A priori, puede percibirse un cierto desequilibrio en los contenidos del mismo, ya que la parte dedicada a la estructura atómica se trata con mucho más detalle que las dos últimas secciones. Sin embargo, se ha hecho así porque estas cuestiones son tratadas con detenimiento en el siguiente capítulo, ya que la contribución original de este trabajo se centra precisamente en el análisis de los distintos procesos atómicos y en la propuesta de un nuevo modelo para el cálculo de la distribución de poblaciones.

Como acabamos de comentar, en el capítulo 3 se presenta ABAKO, el modelo cinético objeto de esta tesis doctoral. La composición de este bloque pretende ser autocontenida, de tal manera que el capítulo 2 pueda utilizarse para aclarar ciertas cuestiones o profundizar en otras. Se comienza con una descripción general del modelo en la que se exponen sus principales características y su rango de aplicabilidad. A continuación se detalla el módulo de cálculo atómico en el que se hace uso de los potenciales analíticos desarrollados por el grupo de investigación en trabajos anteriores. En la siguiente sección se tratan de forma individual cada uno de los procesos atómicos incluidos en el modelo y se exponen las expresiones analíticas utilizadas para la determinación de los coeficientes de tasas, indicando sus principales ventajas y desventajas. En este capítulo se describe el mecanismo utilizado en ABAKO para incluir de forma explícita los estados autoionizantes, cuestión que ha demostrado ser decisiva para la posterior obtención de resultados competitivos. En la sección 3.5 se exponen las ecuaciones básicas del modelo colisional-radiativo, cuya resolución permite encontrar la distribución de poblaciones. ABAKO es capaz de tratar con plasmas ópticamente delgados y ópticamente gruesos. En la sección dedicada a este último caso se expone una de las más importantes aportaciones de esta tesis, un nuevo modelo para el transporte radiativo de líneas enmarcado en el formalismo del factor de escape. Las dos últimas secciones están dedicadas a la descripción del módulo para el cálculo de propiedades radiativas y a la explicación de las técnicas numéricas más relevantes utilizadas en el código.

En el capítulo 4 se procede al análisis y validación de ABAKO. Inicialmente se lleva a cabo un test de consistencia interna en el que se comprueba el correcto comportamiento del modelo en los límites de baja y alta densidad electrónica. La validación de los resultados obtenidos para el caso de plasmas ópticamente delgados se efectúa esencialmente a través de la comparación con

otros códigos cinéticos de reconocido prestigio. Por otro lado, el estudio de los plasmas ópticamente gruesos se realiza en tres partes. En primer lugar, el átomo de dos niveles se utiliza como banco de pruebas para el modelo de transporte radiativo propuesto, ya que este sistema posee solución exacta. A continuación, la técnica del factor de escape, en la versión implementada en ABAKO, se emplea para el análisis de distintos experimentos en plasmas homogéneos de iones complejos, encontrando unos resultados que se comparan favorablemente con los datos experimentales. En la última sección se muestra la aplicabilidad del modelo de transporte desarrollado sobre un medio no-homogéneo con variaciones espaciales de densidad y temperatura, situación en la que otros conocidos modelos de la literatura dejan de ser válidos.

Finalmente, en el capítulo 5 se exponen las principales conclusiones de este trabajo y se enumeran algunas de las líneas de investigación que con él se abren.

Ricardo J. Florido Hernández

Junio de 2007

1

Introducción

1.1 Concepto de plasma y objetivo de la física de plasmas

Cuando la materia ordinaria se somete a una temperatura suficientemente alta, las partículas que la componen, átomos y/o moléculas, adquieren la energía necesaria para romper las ligaduras que las mantenían unidas, de tal manera que los sólidos se convierten en líquidos y los líquidos en gases. Si la temperatura continúa aumentando las moléculas pueden llegar a disociarse y parte de los átomos se *ionizarán*, esto es, perderán algunos de los electrones ligados al núcleo atómico para dar lugar, de forma separada, a iones cargados positivamente y electrones libres. Estas partículas pueden ahora interactuar entre sí a través de diferentes mecanismos o *procesos atómicos*. Los iones, por ejemplo, podrán emitir o absorber radiación electromagnética o intercambiar energía con los electrones libres mediante colisiones, alterando como consecuencia el estado energético de los electrones ligados. También puede ocurrir una *ionización* si la energía absorbida es suficiente para arrancar un electrón ligado o incluso propiciar el proceso inverso, conocido como *recombinación*, donde un electrón del entorno es capturado por un ion para quedar finalmente ligado al núcleo. Además, las partículas de las que estamos hablando están cargadas y, en consecuencia, cada una de ellas se verá afectada por los campos electromagnéticos de las demás o por los campos externos que puedan estar presentes. El conjunto de las interacciones electromagnéticas y los procesos atómicos *radiativos y colisionales* de los que hemos hablado propicia en el sistema la aparición de fenómenos de tipo colectivo, como pueden ser el establecimiento de corrientes eléctricas o la aparición de conductas de carácter ondulatorio. Decimos entonces que se ha formado un *plasma*.

Así, se define un plasma como un sistema formado por constituyentes neutros, como átomos o neutrones, por constituyentes cargados, como iones, electrones o protones, y caracterizado por

ciertas condiciones bajo las cuales se manifiestan de forma evidente comportamientos de tipo colectivo.

El plasma es considerado el *cuarto estado de la materia*, además de los tres que nos resultan más familiares, sólido, líquido y gaseoso. Aunque es el más desconocido y el último que se ha estudiado en profundidad, es el estado que más abunda en el universo, estimándose que más del 99 % de la materia se encuentra en estado de plasma.

La evolución dinámica de un plasma está gobernada por las interacciones electromagnéticas que se establecen entre sus partículas componentes, que como es sabido son de largo alcance. A diferencia, por ejemplo, de un gas, en el que sus propiedades dependen fundamentalmente de las colisiones atómicas o moleculares, que sólo tienen lugar cuando átomos y moléculas se encuentran localmente, las interacciones entre partículas cargadas se extienden a gran distancia de las mismas. Esta característica es la que facilita y acentúa la aparición de fenómenos colectivos en el plasma, pues lo que ocurre en una pequeña porción del mismo puede influir en otros puntos lejanos. Un efecto de esa facilidad para los fenómenos colectivos es la sorprendente variedad de fenómenos ondulatorios que podemos encontrar en estos sistemas.

Las ondas en un plasma se forman como respuesta a una alteración de su estado de equilibrio. Es posible, por ejemplo, separar del equilibrio a los electrones, creando así una concentración de carga y en consecuencia un campo eléctrico. Como respuesta al campo creado los electrones oscilarán con una cierta frecuencia, que es muy rápida debido a su pequeña masa y que recibe el nombre de *frecuencia del plasma*. Pero también los iones oscilan si se les aparta del equilibrio (a una frecuencia más lenta debido a que su masa es mayor), creando de esta forma otro tipo de oscilaciones. Por otra parte, el plasma tiene todas las características de un fluido, entre ellas la de mantener *ondas de sonido*, que transmiten la sobrepresión de una zona a las circundantes y constituyen otro tipo de fenómeno ondulatorio. Si además tenemos en cuenta la influencia de los campos magnéticos, el espectro posible de ondas en un plasma aumenta espectacularmente.

Asimismo, como consecuencia conjunta del largo alcance de las interacciones y de los comportamientos de tipo colectivo, el plasma es un medio *no lineal*. Este hecho hace que la dinámica de estos sistemas sea muy rica y también muy compleja, pudiendo aparecer inestabilidades, movimientos caóticos de las partículas y fenómenos de turbulencia.

Otra de las propiedades atribuidas a un plasma es su *cuasi neutralidad*. Los plasmas que resultan de un proceso de ionización suelen contener igual número de portadores de carga positiva que negativa, de tal manera que, considerando un volumen de dimensiones macroscópicas, éstas cargas se neutralizan entre sí. Sin embargo, localmente y a nivel microscópico podemos encontrar acumulaciones de carga de ambos signos. Éstas son las razones que nos llevan a decir que un plasma es *cuasi neutro*. No obstante, existen también los plasmas *no neutros*, que contienen sólo partículas de un mismo signo.

Según lo expuesto, puede decirse que el objetivo de la *física de plasmas* es la descripción de los procesos elementales que sufren sus constituyentes a partir de principios conocidos que gobiernan su conducta microscópica, para, en última instancia, ser capaz de explicar el complejo comportamiento macroscópico de estos sistemas. A grandes rasgos, la comprensión del comportamiento de un plasma se fundamenta en una teoría cinética específica, donde la evolución de las funciones de distribución de las partículas cargadas está gobernada por la ecuación de Liouville y las ecuaciones de Maxwell, y en modelos modificados de mecánica de fluidos, donde se generalizan las ecuaciones de la hidrodinámica para incluir la fuerza electromagnética. Como cabe imaginar, en la búsqueda de una descripción satisfactoria de estos sistemas intervienen numerosas disciplinas, como la mecánica estadística, la dinámica de fluidos, la electrodinámica y la física atómica. La interacción entre todas ellas, la puesta en común de sus técnicas características y el importante desarrollo de la tecnología de computadores, que ha permitido elaborar modelos de simulación cada vez más sofisticados y realistas, han hecho de la física de plasmas una disciplina con entidad propia dentro de la física actual. Sin duda, a ello también ha contribuido de forma significativa la presencia que los plasmas han ido ganando en la sociedad, bien por sus innumerables aplicaciones tecnológicas, por su importancia en el estudio del espacio exterior o por ser ingrediente fundamental en el desarrollo de la fusión nuclear como fuente energética del futuro.

1.2 Áreas temáticas de la física de plasmas y aplicaciones

Aunque nuestra vida se desarrolla en el 1 % del universo donde la materia no está ionizada y en principio pueda parecer que los plasmas poco tienen que ver con nuestro día a día, lo cierto es que la ciencia del plasma está presente en nuestra sociedad de numerosas maneras. En este sentido, vamos a introducir a continuación las principales áreas temáticas enmarcadas dentro de la ciencia del plasma, con el objetivo de conocer cuáles son sus implicaciones y aplicaciones más importantes en la sociedad actual, hacia dónde va encaminada la investigación en las distintas áreas y a qué problemas se pretende dar respuesta [1].

1.2.1 Plasmas de aplicación tecnológica

Durante los últimos 50 años, los plasmas han tenido un gran impacto en la sociedad, contribuyendo de forma significativa a una mejora en la calidad de vida y generando a la vez interesantes desafíos científicos. Generalmente, los plasmas de aplicación tecnológica son de temperaturas bajas en relación con plasmas de otro tipo, del orden de $10^4 - 10^5 \text{ K}$ ($1 - 10 \text{ eV}$)¹ y su comportamiento está dominado por los procesos colisionales.

¹En física de plasmas es habitual expresar la temperatura en unidades equivalentes de energía, a este respecto conviene tener presente que $1 \text{ eV} \equiv 1.16 \times 10^4 \text{ K}$.

La aplicación tecnológica más común de estos plasmas la encontramos quizá en las lámparas de descarga o lámparas fluorescentes. En los últimos 15 años, en la industria de la iluminación se han desarrollado, por ejemplo, las lámparas de descarga de alta intensidad y las lámparas fluorescentes compactas de bajo consumo. Además, la radiación procedente de fuentes de este tipo tiene importantes aplicaciones en el campo medioambiental para la eliminación de residuos y purificación de aguas, ya que la radiación UV emitida por estas lámparas provoca la destrucción de microorganismos y productos orgánicos contaminantes. La misma radiación se usa también para acelerar el crecimiento de algas y cultivos agrícolas.

Los plasmas de baja temperatura están también presentes en los láseres de gases, donde se incluye el láser de He-Ne, el primer láser de gas de la historia. Las posibles aplicaciones, no sólo tecnológicas, de los láseres de gases son innumerables y muchas son de sobra conocidas: metrología, holografía, comunicaciones, litografía óptica, etc. Además los láseres de CO_2 de alta potencia son usados a diario para llevar a cabo cortes y soldaduras industriales, mientras que los de baja potencia se utilizan en diversos campos de la medicina, como la cirugía y la dermatología.

Pero sin lugar a dudas, el papel fundamental de los plasmas dentro de la sociedad actual se encuentra en el procesamiento de materiales. En este sentido, los plasmas están presentes en la mayores industrias de manufacturación a nivel mundial, como son la industria armamentística, automoción, biomedicina, computación, tratamiento de residuos, la industria textil y del papel, la industria aeroespacial y las telecomunicaciones. En particular, en la industria de la microelectrónica, la técnica de *grabado* de semiconductores mediante el uso de plasmas ha supuesto un gran avance en el proceso de fabricación de circuitos integrados, llegando a sustituir la técnica anterior basada en procedimientos químicos (donde se *atacaba* con ácido la superficie del semiconductor). La técnica basada en plasmas es más rápida, más precisa y permite trabajar en la dirección deseada sobre la superficie a tratar (es una técnica anisótropa, cosa que no ocurre en el procedimiento químico). Esto ha posibilitado la fabricación de dispositivos semiconductores más pequeños ($< 0.25 \mu m$), lo que se ha traducido a su vez en la implementación de una mayor cantidad de componentes electrónicos en un mismo chip. Además, desde el punto de vista medioambiental esta tecnología es más limpia, porque evita el uso de ácidos.

Por otro lado, las fuentes de plasma proporcionan iones positivos y negativos para los aceleradores de haces iónicos. Estas fuentes después se utilizan para la implantación de iones y generación de defectos en materiales semiconductores. Con la misma técnica se consigue modificar ciertas propiedades de los materiales, como pueden ser la dureza, el límite de fatiga, la adhesión, la fricción, sus propiedades dieléctricas, etc.

El hecho de que un plasma esté constituido por partículas cargadas y que éstas sean susceptibles de participar o provocar con facilidad reacciones químicas, ha propiciado también su utilización en el tratamiento de residuos. La interacción con un plasma provoca la ruptura de ciertos enlaces

químicos y la generación de otros nuevos, posibilitando la eliminación de polvos metálicos o la transformación de peligrosos residuos tanto orgánicos como inorgánicos en otros productos no contaminantes.

Asimismo, la tecnología del plasma interviene en los procesos industriales de separación de isótopos, bien para el enriquecimiento de combustibles nucleares o para la obtención de productos usados en pruebas diagnósticas y tratamientos de medicina nuclear; existen también sistemas de propulsión de vehículos espaciales basados en plasmas y, por mencionar una última aplicación más cercana a nuestra vida cotidiana, los plasmas son parte fundamental de los actuales televisores de pantalla plana. Igualmente, los plasmas están presentes en tecnologías aún no desarrolladas por completo, pero que se espera estén disponibles en un futuro no muy lejano, como son las antenas de plasmas y el láser de rayos-X.

Sin embargo, aunque las implicaciones tecnológicas de los plasmas de baja temperatura son incuestionables, muchos fenómenos no tienen aún explicaciones satisfactorias. La mayoría de las aplicaciones de estos plasmas involucran complejas interacciones entre electrones, átomos, iones y moléculas y son muy sensibles tanto a las condiciones de la superficie reactiva, como a las del propio plasma. Es necesario por tanto el desarrollo de modelos más sofisticados para la descripción de estos complejos fenómenos, conjuntamente con propuestas experimentales que permitan validar las predicciones teóricas. En este sentido, cualquier investigación básica que permita medir o calcular propiedades fundamentales de estos plasmas y entender mejor los mecanismos colisionales que los dominan contribuirá en última instancia a la optimización y mejora de cualquiera de las tecnologías actuales y también al desarrollo de las tecnologías futuras.

1.2.2 Plasmas no neutros

Durante las últimas tres décadas, los logros alcanzados en el campo de los plasmas no neutros han sido espectaculares, siendo actualmente una área de investigación muy activa dentro de la física de plasmas. Es por ello que, aunque no son objeto de esta tesis, es justo comentar aquí las principales características que los definen y sus aplicaciones tecnológicas más importantes.

Un plasma no neutro es esencialmente una colección de partículas cargadas en la que no existe una neutralidad de carga de forma global. Entre ellos distinguiremos como más importantes, los plasmas monocomponentes, formados exclusivamente por electrones o por iones. En este contexto, muchos de los fundamentos físicos que gobiernan el comportamiento de estos plasmas han sido descritos satisfactoriamente, incluyendo cuestiones decisivas relativas a los estados de equilibrio, la estabilidad y el confinamiento del plasma. De hecho, existe un teorema que describe bajo qué condiciones podría confinarse indefinidamente un plasma de este tipo con geometría cilíndrica [2]. Poco tiempo después de este resultado, fue posible confinar en el laboratorio un plasma de electrones durante varios minutos y actualmente es posible hacerlo durante horas. Estos tiempos

de confinamiento son suficientes para que el plasma alcance un estado de equilibrio térmico, lo que posibilita desde el punto de vista teórico el uso de las leyes de la mecánica estadística del equilibrio. Desde el punto de vista experimental, ha sido posible reproducir estados de equilibrio termodinámico y estudiar desviaciones controladas del equilibrio y fenómenos de transporte de partículas y energía.

Además de su importancia para la comprensión de aspectos fundamentales del comportamiento de los plasmas en general y de otras disciplinas como la dinámica de fluidos y la física atómica, los plasmas no neutros tienen numerosas aplicaciones prácticas, por ejemplo, en la generación de radiación coherente por haces intensos de partículas cargadas, en el desarrollo una nueva generación de relojes atómicos de precisión, en técnicas de análisis químico mediante métodos mejorados de espectroscopía de masas y en la acumulación, almacenamiento y transporte de antimateria, como positrones y antiprotones.

Asimismo, los plasmas no neutros son parte esencial de la *trampa de iones mediante haces de electrones*, EBIT. La EBIT es un dispositivo experimental desarrollado en el Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL, en EEUU en 1988 [3]; aunque hoy en día otras instituciones poseen también uno de estos equipos, por ejemplo, el NIST (EEUU), la Oxford University (Reino Unido), el Max-Planck Institut (Alemania) y la University of Electro-Communications (Japón). En un dispositivo EBIT se usa un haz de electrones confinados magnéticamente y con energías del orden de cientos de keV, para ionizar, atrapar y generar estados excitados de iones de una gran variedad de elementos químicos. El haz de electrones es prácticamente monoenergético y esta energía puede modificarse a razón de aproximadamente 50 eV/ns , o sea, en un tiempo menor que los tiempos característicos de los procesos de interacción electrón-ion. Como resultado, es posible generar los iones seleccionando una energía para el haz de electrones, y luego prepararlos utilizando una segunda energía. Del análisis de la radiación emitida posteriormente por los iones es posible determinar (i) la posición de las líneas espectrales, decisiva a la hora de obtener de forma precisa la energía de los niveles atómicos, (ii) la intensidad de las líneas espectrales, que permite medidas de secciones eficaces de ionización colisional, excitación colisional y recombinación dielectrónica, (iii) la evolución temporal de líneas espectrales, que permite el estudio de fenómenos transitorios como la emisión de radiación por captura electrónica y también la determinación de tiempos de vida de estados metaestables y (iv) información acerca del perfil de línea, que posibilita la determinación de la temperatura de los iones atrapados a partir de medidas del ensanchamiento por efecto Doppler.

Técnicas muy similares a las anteriores han sido usadas para acumular y almacenar partículas de antimateria, como positrones y antiprotones. Estos experimentos han proporcionado una manera controlada de estudiar las propiedades de estas partículas y las interacciones de la antimateria con la materia ordinaria.

Muchas de las cuestiones comentadas aquí, así como los avances de los últimos años tanto desde el punto de vista teórico como experimental han sido expuestos en diversas reuniones internacionales sobre plasmas no neutros [4, 5].

1.2.3 Plasmas astrofísicos y espaciales

Se agrupan en esta área los estudios de todos aquellos fenómenos asociados con los plasmas que de forma natural aparecen más allá de los límites del planeta Tierra.

Así, si desde la superficie de nuestro planeta nos vamos *adentrando* en el espacio interestelar, el primer plasma que encontramos es la región conocida como *ionosfera*, que se extiende desde unos 80 a 300 km sobre la superficie terrestre. En la ionosfera, la radiación procedente del Sol ioniza las partículas de la atmósfera, que adquieren entonces las propiedades típicas de un plasma. La ionosfera juega un papel decisivo en el terreno de las comunicaciones, porque refleja las ondas de radio emitidas desde un cierto punto de la Tierra y posibilita la recepción de estas señales a distancias mucho mayores de lo que sería posible con ondas que viajan por la superficie terrestre.

Más allá de la ionosfera, nos encontramos con la *magnetosfera*, que es la región donde el campo magnético terrestre afecta al movimiento de las partículas cargadas procedentes del Sol. En la magnetosfera pueden distinguirse a su vez otras regiones de plasmas, constituidas por partículas completamente ionizadas que han sido atrapadas y confinadas por el campo magnético terrestre.

Los plasmas bajo influencia de campos magnéticos son una importante área de investigación en astrofísica. Por ejemplo, no es extraño encontrar un plasma fluyendo continuamente desde una estrella bajo influencia de su propio campo magnético. En particular, el plasma que emerge del Sol hacia el espacio interestelar es lo que conocemos como *viento solar*. Son las partículas procedentes del viento solar las que luego quedan atrapadas en la magnetosfera.

La física de plasmas es relevante en casi cualquier área de la astrofísica; desde los ejemplos ya citados, donde podemos incluir el estudio de las ionosferas y magnetosferas de otros planetas; pasando por el análisis de los plasmas del interior del Sol, la corona solar, el propio viento solar y la interacción de éste con otros objetos y el medio interestelar en general; hasta los plasmas estelares e interestelares altamente conductivos y los sistemas de muchos cuerpos dominados por la interacción gravitatoria, como son los conglomerados de estrellas o las galaxias.

Muchos de estos plasmas pueden provenir de fenómenos todavía no conocidos o explicados y dar origen a los más diversos procesos. Por citar un ejemplo, el estudio de los plasmas espaciales ha permitido explicar la existencia de los intensos campos magnéticos asociados a las estrellas de neutrones. Por otro lado, la posibilidad abierta hoy en día de recoger desde los satélites la radiación procedente del universo sin el filtro al que la somete nuestra atmósfera, se convierte en una fuente de información muy valiosa de cara a descifrar fenómenos aún desconocidos. En

este sentido, la investigación básica y las simulaciones relacionadas con plasmas bajo condiciones astrofísicas pueden resultar decisivas a la hora de interpretar las observaciones.

1.2.4 Plasmas de fusión

La problemática mundial en torno al agotamiento de las reservas de combustibles fósiles y la necesidad de encontrar una alternativa capaz de asumir la demanda energética de nuestra civilización que, a la vez, sea respetuosa con el medio ambiente, ha promovido la creación de ambiciosos proyectos internacionales encaminados hacia la construcción de una central de fusión nuclear con producción energética apta para aprovechamiento civil. La posición que ocupan los plasmas en estas investigaciones es sin duda determinante, pero el tema es tan amplio que es del todo imposible exponerlo en este trabajo. En cualquier caso, como los plasmas de fusión han motivado mayoritariamente la realización de esta tesis doctoral y como el desarrollo de la fusión nuclear es una cuestión tan decisiva y de tanta actualidad, vamos a dedicar un apartado algo más extenso que los anteriores para exponer sus conceptos e ideas fundamentales.

La fusión nuclear es el proceso mediante el cual los núcleos ligeros se unen para formar núcleos más pesados, y es el proceso que genera la energía del Sol y de las estrellas. Desde que la ciencia se dio cuenta por primera vez, en los años veinte del siglo pasado, de cuál era el verdadero origen de la cantidad ingente de energía que radia el Sol, ha sido un sueño de la humanidad aprender a controlar esta fuente de energía en la Tierra. Al inicio de los estudios de la fusión nuclear se predijo que un reactor basado en la fusión podría entrar en funcionamiento en unos veinte años, pero esta estimación resultó ser demasiado optimista. Actualmente los conocimientos sobre esta fuente de energía limpia y prácticamente inagotable son mucho más detallados.

En un supuesto reactor de fusión se fusionan núcleos de átomos ligeros (principalmente isótopos del hidrógeno, esto es, deuterio y tritio), liberando mucha energía en el proceso. La reacción de fusión se produce a temperaturas extremas, del orden de 10^8 K, y a estas temperaturas la materia se encuentra en estado de plasma. La energía que se libera en las reacciones de fusión puede usarse para generar electricidad o para fabricar más combustible.

La fusión como método de generación de energía tiene importantes ventajas medioambientales y de seguridad. Puesto que la reacción de fusión no es una reacción en cadena, no es posible que se pierda el control de la misma. En cualquier momento se puede parar la reacción, cerrando sencillamente el suministro de combustible. Además, éste es muy fácil de obtener, está disponible en cualquier parte y hay suficiente para la generación de energía durante millones de años. Asimismo, la fusión no produce gases que contribuyan al efecto invernadero. La reacción en sí sólo produce helio, que es un gas no nocivo.

El aspecto de seguridad más importante que debe tenerse en cuenta en un reactor de fusión es la presencia de tritio, un gas radioactivo que se produce dentro del mismo reactor. Debido a esto,

no hay necesidad de transporte de material radioactivo desde fuera hacia el reactor. La cantidad de tritio que se necesita en cada momento es muy pequeña, así que una central basada en este principio nunca contendría una gran cantidad del mismo. La pared del reactor de fusión, expuesta a las radiaciones provenientes del plasma, sí se vuelve radioactiva después de un tiempo, pero la mayor parte de esta radioactividad desaparecerá en un plazo de unos cincuenta años, de tal modo que los reactores de fusión no suponen una carga para las generaciones futuras.

La meta de la investigación internacional en el campo de la fusión es diseñar un prototipo de central de generación de energía de fusión, que cumpla con los requisitos de la sociedad, esto es, que sea seguro, fiable, sostenible, económicamente viable y que no dañe el medioambiente.

Principios de la fusión termonuclear controlada

Una reacción química en la que la masa total de los productos finales es menor que la masa total de los reactivos es una reacción *exotérmica*, es decir, en dicho proceso se libera energía. Puede averiguarse si una reacción es exotérmica o no analizando las masas y los núcleos atómicos involucrados en ella. Así, la masa m de un núcleo con número atómico Z y número másico A , difiere de la suma de las masas de los Z protones y los $A - Z$ neutrones que lo componen en una cantidad

$$\Delta m = Zm_p + (A - Z)m_n - m, \quad (1.1)$$

donde m_p y m_n son la masa del protón y del neutrón respectivamente. Este *defecto de masa* Δm es positivo para un núcleo estable y, entonces, para separar el núcleo en sus componentes sería necesario suministrar una cantidad de energía igual a la *energía de ligadura*,

$$B = \Delta mc^2. \quad (1.2)$$

La cantidad de energía liberada Q en una reacción exotérmica puede calcularse como el equivalente energético de la diferencia de masas entre productos f y reactivos i , o también como la diferencia entre las correspondientes energías de ligadura,

$$Q = \left(\sum_i m_i - \sum_f m_f \right) c^2 = \sum_f B_f - \sum_i B_i. \quad (1.3)$$

Una magnitud particularmente útil en este tipo de análisis es la energía de ligadura promedio por nucleón B/A , que se muestra en la figura 1.1 en función de A . Como se ve, B/A crece rápidamente con A , alcanza un máximo de 8.7 MeV para $A = 56$ y luego decrece de forma suave. Según lo dicho, una reacción será exotérmica cuando los productos finales tengan una B/A mayor que los reactivos. Se puede observar en la figura que esto ocurre en reacciones de fisión donde un núcleo pesado se rompe en fragmentos más ligeros, o en reacciones de fusión, en las que dos núcleos ligeros se unen para formar un núcleo más pesado. La acusada pendiente que muestra la gráfica en su

región inicial, hace que, en líneas generales, de la fusión de átomos ligeros se libere mayor cantidad de energía que en la fisión de átomos pesados.

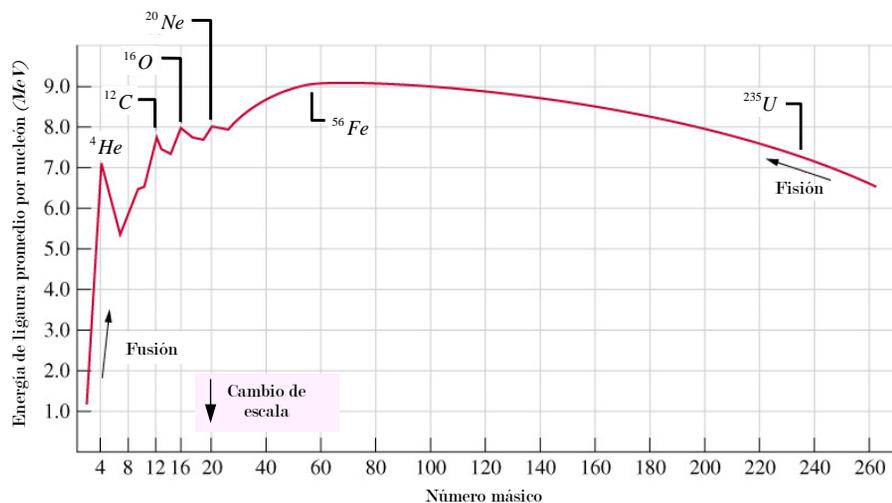


Figura 1.1. Dependencia de la energía de enlace promedio por nucleón con el número másico.

Para que se dé una reacción de fusión y se forme un núcleo de más de un constituyente es preciso que ambos se acerquen a distancias del orden del alcance de las fuerzas nucleares. Para superar las fuerzas de repulsión coulombiana, dos protones tendrán que superar dicha fuerza que actúa como barrera, antes de que la atracción de las fuerzas nucleares entre en juego. Las fuerzas de repulsión coulombianas son proporcionales a la carga de los núcleos que interactúan, y por ello, los plasmas de la familia del hidrógeno (isótopos como el deuterio D o el tritio T) son los más adecuados para conseguir fusión. Existen diversos tipos de reacciones de fusión aprovechables desde el punto de vista energético. De entre todas las que implican isótopos de hidrógeno, la reacción D-T es la que presenta una mayor *sección eficaz* o probabilidad de realización con el menor aporte energético posible. La reacción es la siguiente,



En nuestro planeta el deuterio es abundante en el agua del mar, pero el tritio no existe en estado natural ya que es radiactivo con una vida media de 12.36 años y hay que producirlo. Sin embargo, los neutrones resultantes pueden aprovecharse para generar el tritio a partir de litio, esto es,



En un reactor de fusión, los neutrones, que se llevan el 80 % de la energía producida, se absorberán en el *manto* que envolverá la parte central del reactor y que contiene el litio que se transformará

en tritio y helio. El litio natural es un elemento abundante en la corteza terrestre y en menores concentraciones en el mar.

Asimismo, el espesor del manto debería ser lo suficientemente grande (del orden de un metro) para frenar los neutrones producidos por las reacciones de fusión. Al frenar los neutrones, el manto se calienta y el refrigerante que circula en su interior transfiere el calor fuera del área del reactor para producir vapor de agua que generará finalmente electricidad de un modo convencional.

Condición de ignición y métodos de confinamiento

Para que la fusión dé lugar a una producción neta de energía, el plasma de D-T debe alcanzar una temperatura suficientemente elevada. El objetivo es alcanzar la llamada *condición de ignición* y lograr la combustión del plasma de forma mantenida. Esto sucederá cuando el calentamiento del combustible a través de los propios productos de la reacción de fusión (esencialmente el helio) supera las pérdidas energéticas debidas a otros mecanismos y entonces deja de ser necesaria una fuente externa para mantener la reacción.

La condición de ignición queda expresada en una ecuación conocida como *criterio de Lawson* [6, 7],

$$nT\tau > u_0, \quad (1.6)$$

donde n es la densidad de partículas, T es la temperatura, τ el tiempo de *confinamiento* y u_0 un cierto valor umbral. La interpretación de esta ecuación es sencilla. Las partículas deben calentarse hasta una temperatura elevada para que al chocar entre sí puedan superar la repulsión entre los núcleos y fusionarse, pero a la vez la densidad debe ser también suficiente para garantizar una alta frecuencia de colisión. Por último, estas condiciones deben mantenerse un tiempo suficiente para que el proceso sea eficiente.

Según lo dicho, para alcanzar las condiciones ideales de fusión termonuclear es necesario confinar el plasma. Existen varios mecanismos de confinamiento que comentaremos a continuación. Hay que decir que, independientemente del método de confinamiento empleado, si nos centramos en una misma reacción de fusión, la de D-T, la temperatura que habrá que alcanzar es del orden de $T \approx 10^8 \text{ K}$. Sin embargo, la densidad y el tiempo de confinamiento son característicos de cada procedimiento.

Confinamiento gravitatorio

Es el método que mejores resultados da, como se demuestra en el Sol y las estrellas en general. En estos objetos se genera energía mediante reacciones de fusión con tiempos de confinamiento de miles de años. La gravedad en estos sistemas es tan intensa que confina las partículas en un espacio lo suficientemente restringido (pero tan grande como una estrella) para que se produzcan las reacciones de fusión. Sin embargo, resulta imposible aplicar este método en la Tierra, ya que

no disponemos de métodos para generar un campo gravitatorio suficientemente fuerte como para vencer la repulsión electrostática.

Confinamiento magnético

Una de las características del plasma es que se puede confinar mediante campos magnéticos. En efecto, en presencia de un campo magnético, las partículas cargadas que lo componen se ven obligadas a describir trayectorias en forma de espiral alrededor y a lo largo de las líneas de campo, de tal manera que es posible confinarlas en dispositivos con configuraciones magnéticas apropiadas. Una de las configuraciones más existentes es la del *tokamak*², que presenta una geometría toroidal (ver figura 1.2) y en la que los campos magnéticos se disponen de tal manera que el plasma queda confinado en el interior del toroide. La componente dominante del campo magnético es la componente toroidal, que se genera mediante corrientes en bobinas exteriores al plasma. Sin embargo, este campo por sí solo no es suficiente para lograr el confinamiento. Para alcanzar condiciones de equilibrio se precisa un campo magnético poloidal. En un tokamak este campo lo produce la corriente toroidal del plasma. Esta corriente se induce en el plasma al actuar como secundario de un transformador. Además se requiere un campo magnético vertical aplicado exteriormente que se acople con la corriente anterior y produzca una fuerza hacia dentro en la dirección del radio mayor del toroide.

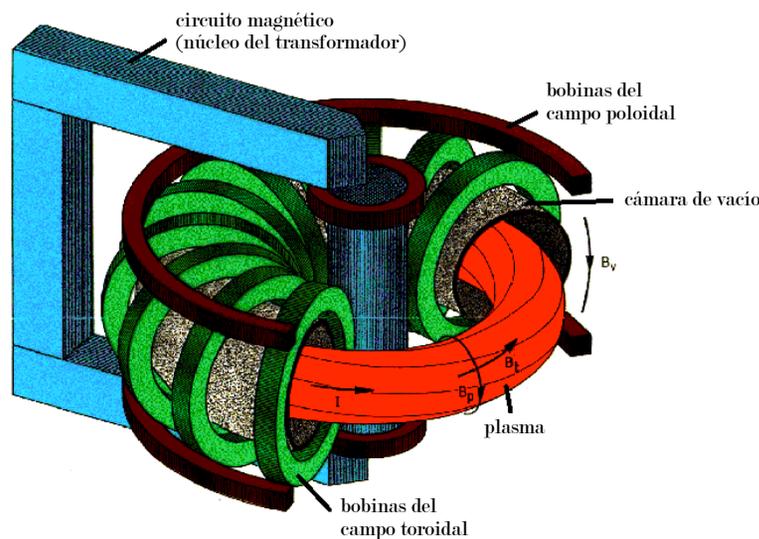


Figura 1.2. Descripción esquemática de un tokamak.

No obstante, se han propuesto otras posibles configuraciones. En el *stellarator* la componente poloidal se genera mediante corrientes que circulan en bobinas externas, su particular configuración

²El término *tokamak* es el acrónimo en ruso para *cámara magnética toroidal*.

complica tanto el estudio teórico como el experimental, pero la ausencia de corriente toroidal evita ciertas inestabilidades asociadas a la corriente del plasma. Otra configuración que ha suscitado gran interés es la denominada *reversed field pinch*, en la que el campo toroidal cambia de sentido cerca de la frontera de la región en la que se localiza el plasma. Se ha demostrado que este dispositivo es más estable desde el punto de vista hidrodinámico.

Las mayores dificultades en el confinamiento magnético son debidas a las *inestabilidades* del plasma. En su movimiento en torno a las líneas de campo, las partículas del plasma colisionan. Estas colisiones provocan pequeños desplazamientos haciendo que una fracción de partículas escape de la región de confinamiento y alcance las paredes del reactor. Como estas partículas son muy energéticas hacen saltar átomos del material que compone las paredes y éstos entran en el plasma. Normalmente, las paredes están formadas por materiales con número atómico muy superior al del hidrógeno, así que cuando estas *impurezas* entran en el plasma absorben gran cantidad de la energía invertida para mantener la temperatura del mismo. El resultado es que el plasma se enfría y la fusión termonuclear ya no es posible. Muchos de los esfuerzos de las investigaciones en el campo del confinamiento magnético están encaminados a la solución de este tipo de problemas.

En este procedimiento, la densidad del plasma confinado depende de la intensidad del campo magnético. Sabiendo que éste tiene un límite tecnológico superior en torno a los 100 kG , la densidad del plasma no suele superar los 10^{15} cm^{-3} . Para satisfacer el criterio de Lawson el tiempo de confinamiento debe ser del orden de $\tau \approx 1 \text{ s}$.

Las mayores instalaciones de confinamiento magnético en el mundo son las que se mencionan a continuación. El *Joint European Torus* (JET), cerca de Oxford en el Reino Unido, es el tokamak donde se han alcanzado los mayores logros científicos hacia la construcción de una planta de fusión nuclear. Fue donde, en 1997, se consiguió producir 16 MW de potencia de fusión durante un tiempo de 0.85 s , lo que hasta ahora supone el récord mundial de obtención de energía procedente de fusión nuclear. El TFTR estuvo operativo en Princeton (EEUU) hasta 1997 y de sus experimentos se obtuvieron también resultados muy importantes. El JT-60U es otro tokamak que opera desde 1991 en Naka-Machi (Japón), el Tore Supra lo hace desde 1988 en Cadarache (Francia) y en él se han obtenido plasmas de más de 4 minutos de duración. Pero sin duda, la esperanza de la fusión nuclear por confinamiento magnético es el proyecto ITER, actualmente en vía de desarrollo. ITER es un tokamak diseñado para proporcionar 500 MW de potencia de fusión durante un tiempo de confinamiento de aproximadamente 50 minutos. En este ambicioso proyecto participan la Unión Europea, EEUU, Japón y Rusia. En 2005 se decidió el lugar en el que se construirán las instalaciones, en Cadarache (Francia), y se estima que los primeros experimentos se lleven a cabo en 2010. Las informaciones más recientes acerca del proyecto ITER pueden consultarse en su sitio web [8].

Confinamiento inercial

La idea básica del confinamiento inercial es aparentemente sencilla. En una pequeña cápsula esférica, cuyo diámetro es de unos 2 mm , se encuentra el combustible para la reacción de fusión, entonces, utilizando láseres de alta potencia, rayos-X o haces de partículas cargadas, se calienta y se comprime la cápsula hasta las condiciones necesarias de temperatura y densidad para que la reacción tenga lugar. El proceso puede esquematizarse de la manera que se indica en la figura 1.3. En un primer paso, el blanco es irradiado para provocar, en segundo lugar, la *ablación* de su superficie y, como consecuencia, la compresión del interior de la cápsula hasta una densidad más de mil veces superior que la densidad típica de un líquido. Se produce entonces una ignición central, en la zona denominada *punto caliente*, que se propaga hacia fuera incendiando la capa de combustible frío comprimido y liberando una gran cantidad de energía. Para lograr una producción energética apta para el consumo, este procedimiento debería repetirse hasta alcanzar unas $10 - 20$ explosiones por minuto.

Al contrario que en el confinamiento magnético, en este caso no es necesario aplicar ningún campo para confinar el plasma, la ignición dura mientras el combustible se mantiene confinado por su propia inercia. Los tiempos de confinamiento típicos, que ahora podrían interpretarse como tiempos de libre expansión de la materia, son del orden de $\tau \approx 10^{-11}\text{ s}$. Este valor es mucho más pequeño que en el caso del confinamiento magnético, así que, para satisfacer el criterio de Lawson (1.6), la densidad debe ser mucho mayor, del orden de $n \approx 10^{24}\text{ cm}^{-3}$.

Existen dos mecanismos principales para la iluminación de la cápsula, el *directo* y el *indirecto*. En el primero de ellos un conjunto de haces de luz láser de alta potencia cuidadosamente ajustados inciden directamente sobre el blanco depositando la cantidad de energía necesaria para iniciar la ablación y activar el proceso. En el mecanismo indirecto, la cápsula con el combustible se coloca en

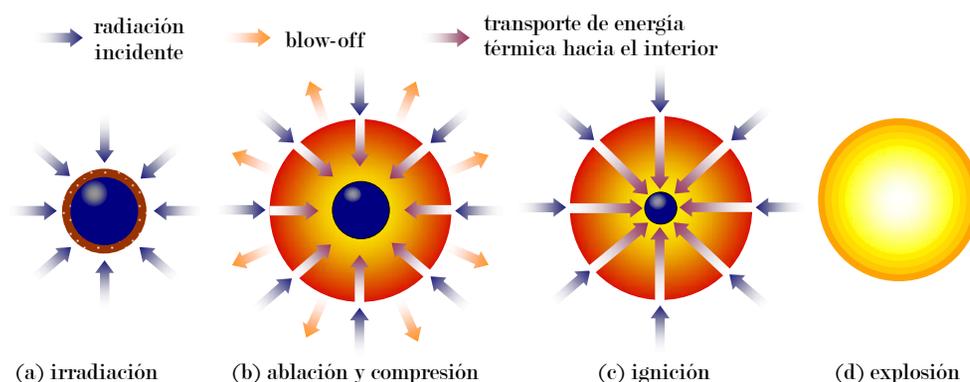


Figura 1.3. Etapas del confinamiento inercial.

el interior de una cavidad denominada *hohlraum*³. El *hohlraum* suele ser de forma cilíndrica con dos orificios en sus tapas por los que penetra la radiación láser. En lugar de incidir directamente en la cápsula, la luz alcanza las paredes del *hohlraum* y se convierte con una eficiencia por encima del 90 % en un intenso flujo de rayos-X. Precisamente para garantizar que prácticamente toda la radiación incidente sea absorbida y luego reemitida en forma de rayos-X, el *hohlraum* está constituido por un material con un número atómico alto, habitualmente oro. Finalmente son los rayos-X los que convergen en la cápsula iniciándose así el proceso antes descrito. Se está investigando también la viabilidad de un *hohlraum* esférico, que tendría cuatro orificios de entrada para el láser dispuestos en una configuración tetraédrica.

Las cápsulas que se usan como combustible están compuestas por un núcleo central formado a su vez por una mezcla de D-T gaseoso y que, llegado el momento, se convertirá en el llamado punto caliente; rodeando este volumen central se encuentra una delgada capa de D-T congelado, que es el principal combustible para la ignición. Cuando la cápsula se comprime esta capa sirve también para mantener la región central a la temperatura requerida para que la fusión tenga lugar. Antes de iniciarse el proceso, las cápsulas deben conservarse a una temperatura cercana a los 18 K, necesaria para mantener el equilibrio entre la capa de gas y la sólida. Finalmente, la capa más superficial está formada por el material sobre el que incide la radiación y en el que tendrá lugar la ablación. Se manejan dos materiales diferentes, cada uno con sus ventajas y desventajas. Por un lado está la poliamida, un polímero que presenta una excepcional combinación de estabilidad térmica y mecánica, y con un comportamiento óptimo a altas temperaturas ($> 350 \text{ eV}$). Por otro lado están los materiales ligeros de bajo número atómico, como por ejemplo el berilio, adecuado en un rango de temperatura algo inferior ($\approx 250 \text{ eV}$). La capa de berilio suele además doparse con un elemento con número atómico alto, típicamente cobre, para mejorar la absorción de los rayos-X.

El gran desafío de la fusión por confinamiento inercial es conseguir una irradiación lo más uniforme posible del blanco y evitar las inestabilidades hidrodinámicas que pueden surgir tanto en la fase de ablación como en la ignición del punto caliente. Así pues, en el proceso de fabricación de blancos hay que minimizar las irregularidades tanto en la superficie de ablación como en la capa congelada de D-T. Estas irregularidades favorecen la expansión de ciertas inestabilidades, provocando, por ejemplo, que las capas de combustible frío y caliente se mezclen, y haciendo fracasar el proceso de ignición. Otras inestabilidades tienen que ver con la interacción láser-plasma que se da desde que la radiación entra en el *hohlraum* y antes de que sea absorbida en las paredes del mismo. Durante los últimos años se han hecho importantes progresos en el estudio y entendimiento de las inestabilidades, sin embargo hay que seguir trabajando hasta aprender cómo controlarlas. El éxito de la fusión inercial pasa sin duda por ello.

³*Hohlraum* significa en alemán *espacio vacío*.

Los principales experimentos y progresos en el área del confinamiento inercial usando láseres de alta potencia han tenido lugar en instalaciones como NOVA en Livermore (EEUU), OMEGA en Rochester (EEUU), GEKKO-XII en Osaka (Japón), VULCAN en Oxford (Reino Unido), PHEBUS en Limeil (Francia),... No obstante, en la actualidad se encuentran en fase de construcción dos instalaciones de similares características destinadas a mostrar en un futuro no muy lejano la viabilidad de una ignición controlada. La *National Ignition Facility* (NIF) [9] en el *Lawrence Livermore National Laboratory* (LLNL) dispondrá de 192 láseres diseñados para producir una energía de 1.8 MJ y una potencia de 500 TW de luz ultravioleta. El proyecto se haya culminado en un 80%. En 2002 se activaron cuatro haces para llevar a cabo algunas ensayos preliminares. No obstante, los primeros experimentos de ignición están previstos para 2010. El otro gran proyecto es el *Laser MegaJoule* (LMJ) cerca de Burdeos (Francia). El LMJ [10] tendrá 240 haces de luz láser que serán capaz de proporcionar una energía cercana a los 2 MJ. Desde 2004 se han realizado algunos experimentos en el LIL, un prototipo del LMJ, pero los primeros experimentos de fusión están programados para 2012.

Paralelamente al uso de láseres de alta potencia como herramienta para el confinamiento inercial, se han investigado y desarrollado otras alternativas, como la utilización de haces iónicos. Los haces de partículas cargadas se han mostrados más eficientes que los láseres para la deposición de la energía sobre el blanco, sin embargo, presentan otro tipo de problemas y es que al ser partículas cargadas del mismo signo, su transporte y sobre todo su focalización resulta una compleja tarea. Los haces iónicos no parecen, por tanto, adecuados para una acción directa sobre el blanco, pero sí que podrían utilizarse en el mecanismo indirecto y en este sentido, la descripción de la interacción con las paredes del hohlraum y la física de la conversión energética a rayos-X parece más sencilla que en el caso de la radiación láser. A priori, los iones más pesados serían los más adecuados, pero los aceleradores necesarios en este caso resultan muy costosos, así que también se ha investigado la opción de utilizar iones ligeros. Otra alternativa que ha cobrado mucha fuerza en los últimos años es la utilización de una nueva manera de producción de rayos-X en un tipo de dispositivo conocido como *Z-pinch* y mediante el uso de una tecnología denominada *potencia pulsada*. Los principales avances de esta técnica y las investigaciones para su perfeccionamiento se desarrollan mayoritariamente en el *Sandia National Laboratory* (SNL) en Albuquerque (EEUU).

1.3 Clasificación y parámetros básicos de un plasma

Según hemos visto en los apartados anteriores, en el universo existe una gran variedad de plasmas que se extienden sobre un amplio rango de condiciones de densidad y temperatura y que, desde un punto de vista físico, exhiben también comportamientos muy distintos. Como es lógico, las teorías y modelos desarrollados intentan describir las particularidades de aquellos plasmas que son

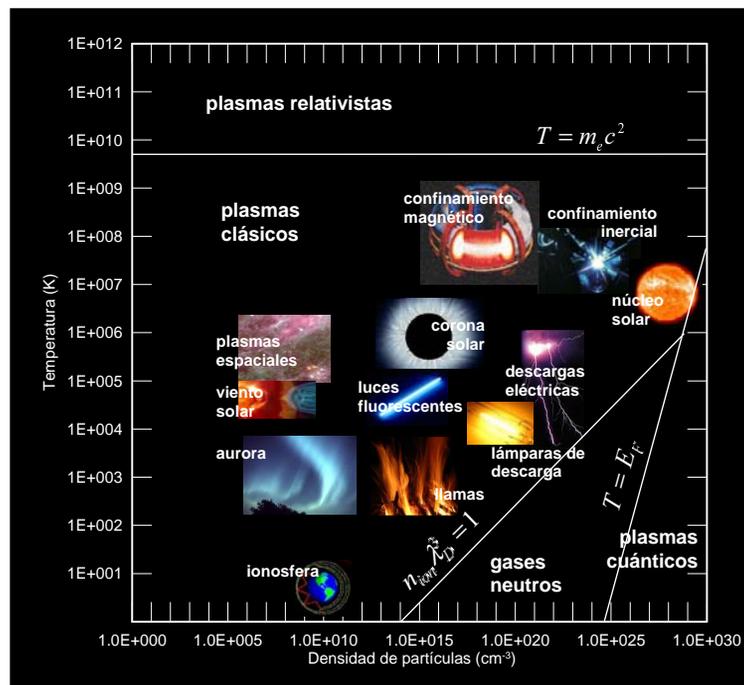


Figura 1.4. Clasificación de los diferentes tipos de plasmas en función de sus condiciones de densidad y temperatura.

de interés en cada caso. Resulta interesante entonces conocer cuáles son los órdenes de magnitud característicos de los distintos tipos de plasmas, ya que eso nos puede dar una idea a priori de cuáles son los fenómenos a los que un modelo particular debería prestar especial atención. En la figura 1.4 se establece una clasificación de los plasmas en función de su densidad y su temperatura. Encontramos una primera región de temperaturas muy altas que se corresponde con los *plasmas relativistas*, donde es necesario incluir efectos relativistas para el tratamiento de los electrones libres debido a las grandes velocidades que pueden llegar a alcanzar. En la región de más alta densidad se sitúan los *plasmas cuánticos* o *degenerados*, donde hay que utilizar la estadística cuántica de Fermi para describir el comportamiento de los electrones libres. La mayor de las regiones que se distinguen en la figura pertenece a los *plasmas clásicos* y en ella se localiza la gran mayoría de los plasmas estudiados en las distintas áreas temáticas; desde los que se originan en fenómenos naturales como el de la *aurora boreal*, en una llama o en las descargas eléctricas en tormentas, pasando por los plasmas de aplicación tecnológica, por los de interés astrofísico y hasta los plasmas de fusión. Las condiciones características en esta región hacen que sea posible utilizar las leyes de la mecánica y la estadística clásica para el tratamiento de los electrones libres y la traslación de los iones. Finalmente, puede identificarse una región, asociada con los gases neutros, donde no se dan las condiciones adecuadas para la formación de un plasma.

Como apuntábamos antes, esta primera clasificación es útil para hacernos una idea de cuáles son las regiones de interés en las diferentes áreas de la física de plasmas. Sin embargo, atendiendo a los procesos que a nivel microscópico pueden ocurrir en estos sistemas y a partir de la definición de ciertos parámetros característicos, es posible llevar a cabo otras clasificaciones. Esto es lo que vamos a hacer a continuación.

Cualquiera que sea el tipo de plasma objeto de estudio, en general, éste será un sistema extenso gobernado por un conjunto de leyes que determinarán a su vez su evolución en el espacio y en el tiempo, es decir, las magnitudes que caracterizan el plasma dependerán tanto del punto del espacio \mathbf{r} como del instante de tiempo t considerados. Esta dependencia espacio-temporal es una cuestión que debemos tener presente, pero que será abordada más adelante.

Así pues, como nuestro propósito en este momento es el de introducir algunas ideas fundamentales para la comprensión de estos sistemas, supondremos inicialmente un plasma homogéneo y en situación estacionaria, formado por⁴ *iones*, compuestos a su vez por núcleos de número atómico Z y *electrones ligados* (que ocupan estados cuánticos de energías negativas ligados a un ion), y *electrones libres* (caracterizados por estados de energía positiva). Denotaremos por n_{ion} a la densidad de iones (número de iones por unidad de volumen). Además, dependiendo del número de electrones perdidos, los iones pueden estar en diferentes *estados de carga* o *de ionización*. Sea entonces ζ la carga del ion y N_ζ la densidad de iones con carga ζ . Lógicamente se cumplirá

$$\sum_{\zeta=0}^Z N_\zeta = n_{ion}. \quad (1.7)$$

Además, en ausencia de haces de partículas externos, como cada ion de carga ζ contribuye con ζ electrones libres, la densidad de electrones libres, n_e , vendrá dada por

$$n_e = \sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_\zeta, \quad (1.8)$$

ecuación que representa la condición de *neutralidad de carga*.

El *estado de carga promedio* o *ionización media*, \bar{Z} , se define como

$$\bar{Z} = \frac{\sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_\zeta}{\sum_{\zeta=0}^Z N_\zeta} = \frac{n_e}{n_{ion}}. \quad (1.9)$$

Usando una expresión similar a (1.9), es posible calcular los momentos estadísticos de orden superior de la distribución de iones. Por ejemplo, el momento estadístico de orden dos se calcula como $\overline{Z^2} = \left(\sum_{\zeta=0}^Z \zeta^2 N_\zeta \right) / n_{ion}$. Esta expresión es útil para determinar la desviación estándar,

$$\sigma_Z = \left(\overline{Z^2} - \bar{Z}^2 \right)^{1/2}, \quad (1.10)$$

⁴Podríamos decir que el plasma también está formado por *fotones*, ya que aún en ausencia de fuentes de radiación externas, los iones van a emitir y absorber radiación electromagnética, por lo que el plasma generará su propio campo de radiación. No obstante, como la fenomenología asociada a la radiación se irá introduciendo poco a poco en secciones posteriores, por simplicidad, no hemos hecho mención explícita a ella en este punto.

que nos da una idea de cuál es el intervalo de iones con densidad no nula que componen el plasma.

En un plasma de densidad n_{ion} , el volumen disponible para cada ion será $V_i = 1/n_{ion}$. Se define entonces el *ion esfera* como la esfera de radio R_i que tiene el mismo volumen promedio V_i . Por tanto, el *radio del ion esfera* queda definido como

$$R_i = \left(\frac{3}{4\pi n_{ion}} \right)^{1/3}. \quad (1.11)$$

Así, por ejemplo, para $n_{ion} \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $R_i \approx 1.3 \times 10^{-5} \text{ m}$; mientras que para $n_{ion} \approx 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $R_i \approx 6.2 \times 10^{-9} \text{ m}$. Es habitual exigir que se satisfaga la condición de neutralidad de carga dentro del ion esfera. En consecuencia, como éste contiene en promedio un ion de carga \bar{Z} , también en promedio habrá \bar{Z} electrones libres dentro del ion esfera.

Por otro lado, teniendo en cuenta que un plasma está formado por un gran número de iones y electrones y que, por tanto, es un sistema de muchas partículas, muchas de sus propiedades pueden obtenerse a partir de las leyes de la termodinámica y la mecánica estadística. Así pues, es de esperar que cada tipo de partículas tenga asociada una distribución de velocidades y energías,

$$f_{\mathbf{v}}(\mathbf{v})d\mathbf{v} = f_{\varepsilon}(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (1.12)$$

donde $f_{\mathbf{v}}(\mathbf{v})d\mathbf{v}$ es la fracción de iones o electrones cuya velocidad pertenece al intervalo $[\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v}]$ y $f_{\varepsilon}(\varepsilon)d\varepsilon$ es la fracción de iones o electrones cuya energía está en el rango $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$. Si el plasma es isótropo, es decir, no existe en él una dirección preferente, podremos utilizar,

$$\begin{aligned} f_v(v)dv &= \iiint_{v_x^2+v_y^2+v_z^2=v^2} f_{\mathbf{v}}(\mathbf{v})d\mathbf{v} \\ &= \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} f_{\mathbf{v}}(v)v^2 dv \sin\theta d\theta d\varphi = 4\pi v^2 f_{\mathbf{v}}(v)dv, \end{aligned} \quad (1.13)$$

que es la fracción de iones o electrones cuyo módulo de la velocidad está comprendido entre v y $v + dv$, con independencia de la dirección de movimiento.

Consideremos ahora el subsistema formado exclusivamente por los electrones libres. De acuerdo con las leyes de la mecánica estadística, si el sistema está en equilibrio y la densidad de electrones no es muy alta, las distribuciones de velocidad y energía vendrán dadas por

$$f_v^{(e)}(v)dv = \left(\frac{m_e}{2\pi T_e} \right)^{3/2} 4\pi v^2 \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2T_e}\right) dv, \quad (1.14a)$$

$$f_{\varepsilon}^{(e)}(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\varepsilon}{T_e} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T_e}\right) \frac{d\varepsilon}{T_e}. \quad (1.14b)$$

Las expresiones (1.14) son las conocidas distribuciones de velocidad y energía de Maxwell-Boltzmann, donde v es la velocidad de los electrones, ε su energía cinética y T_e la temperatura electrónica (en unidades de energía). Cuando los electrones en el plasma responden a las ecuaciones (1.14), es posible caracterizar la distribución por un único parámetro, la temperatura. Sin embargo, para que esto ocurra es necesario que se satisfagan una serie de condiciones. En primer lugar, se

supone que el plasma es no-relativista, es decir, la velocidad de los electrones es aún pequeña en comparación con la velocidad de la luz. En segundo lugar, debe haber transcurrido un tiempo suficiente para que el sistema termalice, esto es, para que alcance el equilibrio térmico. El *tiempo de termalización electrónico* está dado por el tiempo promedio entre colisiones electrón-electrón [7,11],

$$\tau_{ee} = \frac{2\pi\epsilon_0^2 m_e^{1/2} T_e^{3/2}}{e^4 n_e \ln \Lambda}, \quad (1.15)$$

donde $\ln \Lambda$ se calcula usando

$$\Lambda = \frac{3}{2} \left(\frac{\epsilon_0^3 T_e^3}{\pi e^6 n_e} \right)^{1/2}. \quad (1.16)$$

Por ejemplo, para un plasma con $T_e \approx 100 \text{ eV}$ y $n_e \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, resulta $\tau_{ee} \approx 1 \text{ ns}$ y con $n_e \approx 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $\tau_{ee} \approx 4 \text{ fs}$. Estos tiempos son bastantes más pequeños que los tiempos característicos de evolución del plasma a las densidades correspondientes, así que, en general, en plasmas astrofísicos y de laboratorio, T_e es una magnitud bien definida. Sin embargo, esto no sucede en plasmas generados por láseres de femtosegundos, donde deben considerarse distribuciones no-maxwellianas de velocidad y energía.

Por otro lado, las ecuaciones (1.14) dejan de ser válidas cuando la densidad es muy alta. En este caso, trataríamos con plasmas cuánticos y entran en juego efectos de intercambio electrónico, entonces, en lugar de la distribución de equilibrio de Maxwell-Boltzmann, debería utilizarse la de Fermi-Dirac,

$$f_v^{(e)}(v)dv = \frac{2(2m_e)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{v^2 dv}{1 + \exp[(p^2/2m_e - \epsilon_F)/T_e]}, \quad (1.17a)$$

$$f_\epsilon^{(e)}(\epsilon)d\epsilon = \frac{\sqrt{2}(m_e c^2)^{3/2}}{\pi^2 (\hbar c)^3} \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{1 + \exp[(\epsilon - \epsilon_F)/T_e]}, \quad (1.17b)$$

donde ϵ_F es el *potencial químico* o *energía de Fermi* de los electrones.

Si nos centramos ahora en los iones, éstos también pueden seguir una distribución de tipo Boltzmann,

$$f_\epsilon^{(i)}(\epsilon)d\epsilon = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\epsilon}{T_i} \right) \exp\left(-\frac{\epsilon}{T_i}\right) \frac{d\epsilon}{T_i}, \quad (1.18)$$

donde ϵ es la energía cinética del ion y T_i la temperatura iónica. Como la masa m_i de un ion es mucho mayor que la de un electrón, sólo aparecerán efectos de degeneración a densidades extremadamente altas, inalcanzables actualmente para cualquier experimento de laboratorio. En consecuencia, en espectroscopía de plasmas la estadística de Fermi-Dirac para iones muy rara vez se utiliza.

El correspondiente *tiempo de termalización iónica* τ_{ii} viene determinado por la relación [7,11]

$$\tau_{ii} = \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} \left(\frac{T_i}{T_e} \right)^{3/2} \frac{1}{Z^2} \tau_{ee}. \quad (1.19)$$

Si por un momento consideramos que T_e y T_i son del mismo orden, entonces

$$\frac{\tau_{ii}}{\tau_{ee}} \approx \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} \gg 1, \quad (1.20)$$

lo que quiere decir que los electrones alcanzan el equilibrio mucho antes que los iones.

De lo que hemos comentado en los últimos párrafos, debemos prestar atención al hecho de que, en general, la temperatura iónica T_i no tiene por qué ser igual a la electrónica T_e . Esto sólo ocurrirá cuando iones y electrones hayan termalizado entre ellos, es decir, después de que haya transcurrido un tiempo conocido como *tiempo de equipartición energética electrón-ion* [7, 11],

$$\tau_{ei} = \frac{3\varepsilon_0^2 m_e c^2 m_i c^2}{8(2\pi)^{1/2} \bar{Z} n_e e^4 \ln \Lambda} \left(\frac{T_e}{m_e c^2} + \frac{T_i}{m_i c^2} \right)^{3/2}. \quad (1.21)$$

En líneas generales puede asumirse que $\tau_{ei} \gg \tau_{ii}, \tau_{ee}$.

La diferencia entre la temperatura iónica y electrónica es significativa, por ejemplo, en plasmas generados por láseres cuyos pulsos tienen una duración del orden de los nanosegundos (o menor). En estos casos, la energía es absorbida inicialmente por los electrones libres y sólo se transfiere a los iones después de unas decenas de nanosegundos, gracias a las colisiones entre iones y electrones. Por tanto, en las primeras etapas de la evolución temporal, las dos temperaturas son bastante diferentes.

De aquí en adelante, siempre que hagamos referencia a una temperatura T , sin especificar otra cosa, estaremos suponiendo que iones y electrones han termalizado y que, por tanto, $T = T_e = T_i$.

Hasta ahora hemos expuesto un conjunto de ideas generales aplicables al plasma una vez que se éste se ha formado. A este respecto, tiene sentido entonces preguntarse qué es lo que debe ocurrir para que la materia alcance este estado. La condición para formar un plasma es que la energía cinética media de un electrón, representada por la temperatura T_e , sea sustancialmente mayor que la energía coulombiana necesaria para ligar el electrón al ion [7]. Este requisito expresa la necesidad de que para alcanzar el estado de plasma es necesario que los átomos se ionicen. La energía de ligadura de la que hablábamos antes puede estimarse como $\bar{Z}e^2/4\pi\epsilon_0 R_i$, ya que a una distancia mayor que R_i , el electrón no estaría asociado al ion. La condición de formación del plasma puede entonces expresarse como

$$\frac{\bar{Z}e^2}{4\pi\epsilon_0 R_i} \ll T_e \Rightarrow \frac{\bar{Z}e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{4\pi n_{ion}}{3} \right)^{1/3} \frac{1}{T_e} \ll 1. \quad (1.22)$$

En este punto conviene introducir la longitud de Debye del plasma λ_D , como

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 T_e}{\bar{Z}e^2 n_{ion}} \right)^{1/2} = \left(\frac{\epsilon_0 T_e}{e^2 n_e} \right)^{1/2}. \quad (1.23)$$

Así, para $T_e \approx 100 \text{ eV}$ y $n_e \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, se obtiene $\lambda_D \approx 7.4 \times 10^{-7} \text{ m}$; si $n_e \approx 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, entonces $\lambda_D \approx 7.4 \times 10^{-11} \text{ m}$. Este parámetro es una estimación del alcance efectivo del potencial de Coulomb de un ion en el seno de un plasma, que deja de ser infinito debido al apantallamiento provocado por los electrones en torno al ion [7, 12, 13].

Despreciando los factores numéricos y teniendo en cuenta la definición (1.23), la condición de formación del plasma queda de la siguiente manera,

$$n_{ion} \lambda_D^3 \gg 1. \quad (1.24)$$

En la figura 1.4 existe una región en la que no se dan las condiciones adecuadas para cumplir la inecuación anterior y, por tanto, no es posible la formación de un plasma.

La expresión (1.24) permite definir un *plasma ideal* a partir del caso límite

$$n_{ion}\lambda_D^3 \rightarrow \infty. \quad (1.25)$$

De esta expresión se deduce que en un plasma ideal la energía cinética de una partícula del plasma es infinitamente grande en comparación con la energía coulombiana y, en consecuencia, las interacciones entre las partículas serán muy débiles, pudiendo considerarse además que no se dan apenas colisiones entre iones, ni entre iones y electrones libres. En esta situación, para la determinación de muchas magnitudes termodinámicas son válidas expresiones típicas de gases ideales.

Sin embargo, en un plasma no ideal esto no ocurre y resulta útil introducir algún parámetro que nos proporcione información acerca de en qué casos las interacciones entre las partículas de un plasma son importantes o por el contrario pueden despreciarse.

Puede estimarse la distancia de máxima aproximación entre dos iones promedio, R_a , como aquella distancia en la que la energía cinética de uno de los iones es igual a la energía de repulsión electrostática entre ambos. Asumiendo que la energía cinética de los iones viene representada a través de su temperatura, T_i , encontramos

$$T_i = \frac{\bar{Z}^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_a} \Rightarrow R_a = \frac{\bar{Z}^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 T_i}. \quad (1.26)$$

Se define entonces el *parámetro de acoplamiento ion-ion* de un plasma a partir de la relación [14]

$$\Gamma_{ii} = \frac{R_a}{R_i} = \frac{\bar{Z}^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_i T_i} = \frac{2a_0 I_H \bar{Z}^2}{R_i T_i}. \quad (1.27)$$

De forma análoga, también podrían definirse un *parámetro de acoplamiento electrón-ion* y otro *electrón-electrón*, si bien en la literatura rara vez se utilizan y cuando se habla del parámetro de acoplamiento se entiende que se hace referencia al acoplamiento ion-ion.

En base a los valores del parámetro de acoplamiento podemos establecer una nueva clasificación de los plasmas. Para $\Gamma < 0.1$, hablamos de plasmas *débilmente acoplados*, en este caso, la temperatura es alta, las interacciones ion-ion son pequeñas, tanto iones como electrones se mueven prácticamente libres en el espacio y el movimiento de una de estas partículas sólo afecta débilmente a las partículas restantes más cercanas. En el otro extremo, para $\Gamma > 10$, encontramos los plasmas *fuertemente acoplados*. Este caso se favorece bajo condiciones de baja temperatura y alta densidad, por lo que existen correlaciones entre las partículas constituyentes del plasma, las interacciones ion-ion son intensas y los desplazamientos de éstos influyen de forma inmediata, como consecuencia de sus interacciones electrostáticas, en los movimientos de las partículas cercanas.

Por otro lado, hay que tener en cuenta que todos los parámetros que hemos presentado hasta ahora son válidos desde un punto de vista global y *promediado* del plasma y que, en general y

como adelantábamos al principio de esta sección, la mayoría de las magnitudes que hemos definido dependen del instante de tiempo t y del punto del espacio \mathbf{r} considerados. Así, podemos hablar de densidades iónicas parciales con dependencia espacio-temporal, $N_c(\mathbf{r}, t)$, así como de una densidad y una temperatura *locales e instantáneas*, $n_{ion}(\mathbf{r}, t)$ y $T(\mathbf{r}, t)$.

Esta dependencia espacial y temporal define, en los plasmas reales, un conjunto de longitudes y tiempos característicos que conviene repasar, ya que pueden ser útiles a la hora de abordar diferentes puntos de vista o trabajar bajo ciertas hipótesis en la resolución de un problema concreto.

En relación con las variaciones espaciales, la primera longitud característica tiene que ver con los gradientes de densidad o de temperatura que pueden existir entre diferentes regiones del plasma. Así, definimos

$$L_{plasma} = \left| \frac{n_{ion}}{\nabla n_{ion}} \right| \quad \text{o} \quad L_{plasma} = \left| \frac{T}{\nabla T} \right|. \quad (1.28)$$

Si las variaciones de densidad y temperatura son muy acusadas de unas regiones a otras del espacio, está claro que L_{plasma} será pequeña y viceversa. De igual modo, si el plasma ocupa un volumen $V \sim L^3$ y ocurre, por ejemplo, que $L < L_{plasma}$, se podrá considerar que el plasma es *homogéneo*, mientras que, si $L > L_{plasma}$, el plasma es *no-homogéneo*.

En párrafos anteriores y por exigencias propias en la exposición de la teoría correspondiente, se introdujeron otras longitudes características en órdenes de magnitud más pequeños (a escala atómica), tales como el radio de ion-esfera, la longitud de Debye, etc., de las que ya no es necesario volver a hablar.

En relación con la dependencia temporal, el primer tiempo característico que vamos a introducir tiene que ver con la evolución temporal del plasma,

$$t_{plasma} = \left| \frac{n_{ion}}{\partial n_{ion}/\partial t} \right| \quad \text{o} \quad t_{plasma} = \left| \frac{T}{\partial T/\partial t} \right|. \quad (1.29)$$

Lógicamente, si la temperatura o la densidad evolucionan muy rápidamente en el tiempo, entonces t_{plasma} será pequeño; mientras que si las variaciones son lentas, entonces t_{plasma} será mayor.

Ya en escala atómica, a partir de la *frecuencia del plasma*⁵ [7, 13] suele definirse otro tiempo característico,

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e}}, \quad \tau_p = \frac{2\pi}{\omega_p}. \quad (1.30)$$

La frecuencia ω_p se deduce de un sencillo modelo monodimensional en el que se supone un pequeño desplazamiento de la nube electrónica para ajustarse a los cambios en la distribución iónica. Se llega entonces a la ecuación de un oscilador armónico cuya frecuencia característica es precisamente ω_p . Según esto, τ_p da entonces una idea del tiempo de respuesta de la nube de electrones libres frente a los cambios en la distribución espacial de los iones, cuyo movimiento es, en

⁵En realidad puede definirse una frecuencia de plasma para cada tipo de partículas, pero la más útil resulta ser la correspondiente a los electrones. Así que, cuando en la literatura se habla del término *frecuencia del plasma*, normalmente se está haciendo referencia a la versión electrónica.

general, más lento que el de los electrones, debido a que su masa es mayor. Para tener una idea de su orden de magnitud, si $n_e \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, entonces $\tau_p \approx 10^{-12} \text{ s}$; y para $n_e \approx 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $\tau_p \approx 10^{-16} \text{ s}$. Como podemos observar, incluso a baja densidad, estos tiempos son bastante pequeños y casi podríamos decir que los electrones se adaptan de forma instantánea al movimiento iónico. Este hecho es el que permite justificar, salvo en situaciones muy particulares, una aproximación muy utilizada en teoría cinética de plasmas, la de suponer que el movimiento electrónico tiene lugar sobre una distribución estática de iones.

Asimismo, si estimamos la distancia recorrida por la nube electrónica en una oscilación del plasma a través de $v_t \tau_p$, donde $v_t = \sqrt{2T_e/m_e}$, nos encontramos con que, salvo un factor numérico, esta distancia coincide con la longitud de Debye λ_D .

Una nueva escala temporal está relacionada con la frecuencia a la que ocurren los procesos atómicos en el plasma. Sin embargo, debido a que en un plasma se da una amplia variedad de procesos y a que cada uno de ellos presenta en general una compleja dependencia con las condiciones de densidad y temperatura, no es posible escribir una sencilla fórmula analítica para determinar estos tiempos característicos. Esta cuestión y otras muchas relacionadas con los procesos atómicos en plasmas serán tratadas en detalle en el capítulo siguiente. No obstante, conviene saber que es habitual hablar del *tiempo promedio entre dos ionizaciones* τ_{ion} o *entre dos recombinaciones* τ_{rec} . A modo de ejemplo, el tiempo promedio con el que ocurre un determinado proceso colisional (ya sea una ionización o una recombinación) se calcularía como

$$\tau_{col} = \frac{1}{n_e \langle \sigma v \rangle} \quad (1.31)$$

donde v es la velocidad del electrón y σ es la *sección eficaz* o *área efectiva* del proceso colisional en cuestión. El símbolo $\langle \dots \rangle$ nos indica que hay que promediar sobre la distribución de velocidades de los electrones libres. Asumiendo una distribución maxwelliana, en este promedio se encuentra de forma implícita la dependencia con la temperatura.

Los procesos atómicos tanto radiativos como colisionales que tienen lugar en el plasma son los mecanismos microscópicos que hacen posible los fenómenos macroscópicos de transporte e intercambio energético con el exterior del plasma, definiendo además la evolución temporal del plasma hacia un estado de equilibrio. Estos procesos son también los responsables de la distribución de población entre las distintas especies iónicas y no sólo eso, sino que dentro de cada especie iónica determinan la distribución de población entre los diferentes estados energéticos del ion. En este sentido, si llamamos τ_a al tiempo característico del proceso atómico dominante en el plasma, cuando $\tau_a \ll t_{plasma}$, puede considerarse que los procesos atómicos ocurren (dentro de un intervalo de duración $\sim t_{plasma}$) bajo condiciones constantes de densidad y temperatura, o igualmente, que los procesos atómicos son lo suficientemente rápidos para redistribuir las poblaciones antes de que ocurra cualquier cambio en la densidad total de iones o en la temperatura. Cuando en un plasma se satisface esta condición, decimos que se encuentra en situación de *estado estacionario*. Esta

aproximación se usa frecuentemente para calcular la distribución de población y posteriormente distintas propiedades radiativas del plasma. La aproximación es válida en muchos de los plasmas generados en el laboratorio y en casi todos los plasmas astrofísicos. Sin embargo, en plasmas generados por láseres pulsados de alta potencia, la situación de estado estacionario no es válida y hay que tratar adecuadamente la evolución temporal.

2

Elementos de un modelo colisional-radiativo

El objetivo de la física atómica de plasmas es, en esencia, el estudio de las propiedades de los iones y electrones inmersos en un medio ionizado y el análisis de la radiación electromagnética emitida por el medio. En el contexto de esta disciplina se analiza la estructura atómica desde un punto de vista microscópico, focalizando su interés en tres aspectos fundamentales. El primero es la determinación del potencial atómico o iónico y el estudio de la influencia que el plasma ejerce sobre éste y, por tanto, sobre las funciones de onda de los electrones ligados y las energías de nivel. La segunda cuestión se centra en la descripción de los procesos colisionales y radiativos en el interior del plasma, sus secciones eficaces y sus tasas características. Estos procesos, que son los responsables de la ionización y excitación de los iones, determinan las distribuciones de carga y población de estados excitados. Por último, también es importante la obtención y el estudio de los espectros de emisión y absorción del plasma.

Esta tesis doctoral ha tenido como fin último el desarrollo de un modelo versátil para el cálculo de las distribuciones de población en plasmas bajo un amplio rango de condiciones y características diferentes. En este sentido, el trabajo se enmarca dentro del segundo de los aspectos mencionados anteriormente, convirtiéndose además en una herramienta especialmente útil para abordar el tercero, el análisis espectroscópico. Sin embargo, antes de emprender cualquiera de estas tareas, es necesario detenerse en la primera de las cuestiones mencionadas, esto es, hay que saber cuáles son los modelos y las fuentes que tenemos a nuestro alcance para determinar la estructura atómica, en particular, energías de ligadura y probabilidades de transición de cualquier ion en el plasma. Como veremos, estos datos atómicos son imprescindibles para luego determinar los coeficientes de tasas de los diferentes procesos atómicos, que definirán a su vez las características del modelo colisional-radiativo desarrollado.

Así pues, en este capítulo abordaremos en primer lugar la cuestión de la determinación de la estructura atómica. En segundo lugar, pasaremos a clasificar y describir los procesos atómicos que deben ser tenidos en cuenta al tratar con plasmas en situación de NLTE. Finalmente se presentará un planteamiento general del problema de la determinación de las distribuciones de poblaciones en plasmas de no-equilibrio y cuáles son las soluciones propuestas desde los diferentes modelos colisional-radiativos que podemos encontrar en la literatura.

2.1 Determinación de la estructura atómica

Consideremos un átomo o ion con un núcleo de número atómico Z y N electrones. La ecuación de Schrödinger estacionaria de un átomo multielectrónico,

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2.1)$$

es una ecuación fundamental de la mecánica cuántica y también el punto de partida de la mayoría de los cálculos atómicos. En esta ecuación, E es la energía total del átomo, Ψ es la función de onda total y H el operador hamiltoniano del sistema. En principio, todas las interacciones que tienen lugar en el sistema están incluidas en H . De hecho, para un tratamiento detallado del mismo, el hamiltoniano debería incluir los siguientes términos [15]:

- La energía cinética de los electrones y su energía potencial en el campo electrostático coulombiano generado por el núcleo (supuesto puntual y con masa infinita).
- La repulsión electrostática entre los electrones.
- Las interacciones magnéticas de los espines de los electrones con sus movimientos orbitales (interacciones espín-órbita).
- Efectos tales como las interacciones espín-espín entre electrones, diferentes efectos relativistas, correcciones radiativas y correcciones nucleares (debidas a la masa finita del núcleo, su extensión finita, momentos dipolares magnéticos nucleares, etc.).

No obstante, la resolución del átomo multielectrónico es un problema muy complejo y resulta necesario desarrollar métodos aproximados para determinar las propiedades de interés del sistema. Así, las diferentes elecciones para el operador hamiltoniano van a definir las distintas aproximaciones y modelos atómicos con los que abordar el problema.

2.1.1 Aproximación de campo central

Como punto de partida en el tratamiento del átomo multielectrónico es habitual considerar de los cuatro términos anteriores sólo los dos primeros y desprestigiar los efectos aludidos en los

dos últimos. En esta situación el hamiltoniano del átomo con N electrones vendría dado por

$$H = \sum_{i=1}^N h_i + \sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}, \quad (2.2a)$$

$$h_i = \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right), \quad (2.2b)$$

donde h_i representa el hamiltoniano de un átomo monoeléctrico. En las ecuaciones anteriores las sumas se extienden sobre todos los electrones ligados, ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío, e es la carga del electrón, m_e su masa en reposo, \mathbf{p}_i es el momento lineal del electrón i -ésimo, \mathbf{r}_i su posición respecto al núcleo y $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ la distancia entre los electrones con posiciones \mathbf{r}_i y \mathbf{r}_j .

Si reescribimos el hamiltoniano (2.2) utilizando unidades atómicas ($m_e = 1$, $e = 1$, $4\pi\epsilon_0 = 1$, $\hbar = 1$), la ecuación de Schrödinger para el sistema de N electrones resulta

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = E \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N), \quad (2.3)$$

donde q_i denota el conjunto de coordenadas espaciales (continuas) \mathbf{r}_i y coordenadas de espín (discretas) del electrón i .

Ahora bien, el problema fundamental del átomo multielectrónico reside en que el término de repulsión electrostática no permite resolver analíticamente la ecuación de Schrödinger y resulta necesario, por tanto, recurrir a modelos aproximados que evitan este obstáculo. El punto de partida de prácticamente todos los modelos para átomos multielectrónicos es la *aproximación de campo central* [15, 16]. En esta aproximación, basada en un *modelo de partícula independiente*, se supone que cada electrón se mueve independientemente de los otros en el campo electrostático producido por el núcleo y los restantes $N - 1$ electrones, además se asume que este campo ha sido promediado temporalmente sobre el movimiento de los $N - 1$ electrones y que, en consecuencia, presenta simetría esférica. Bajo estas consideraciones, el problema puede formularse de la manera siguiente

$$H = H_0 + H_{ee}, \quad (2.4)$$

donde

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V(r_i) \right], \quad (2.5)$$

$$H_{ee} = \sum_{i=1}^N \left[-V(r_i) - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}. \quad (2.6)$$

El objetivo consiste entonces en buscar un potencial efectivo central $V(r)$ de manera que el término H_{ee} sea lo suficientemente pequeño para ser tratado según la teoría de perturbaciones. Los métodos desarrollados para la construcción de este potencial se comentarán en una sección posterior. Supongamos, por tanto, en lo que sigue que el potencial $V(r)$ es una función conocida.

Si H_0 es la aproximación de orden cero al hamiltoniano del sistema H , entonces la aproximación de orden cero $\Psi^{(0)}$ a la función de onda Ψ cumplirá

$$H_0\Psi^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_N) = E^{(0)}\Psi^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_N). \quad (2.7)$$

Ahora bien, el hamiltoniano H_0 es separable, ya que, puede expresarse como la suma de N hamiltonianos individuales,

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h_i^{(0)}, \quad (2.8)$$

$$h_i^{(0)} = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V(r_i), \quad (2.9)$$

y, por tanto, la ecuación (2.7) admite la solución

$$\Psi^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_N) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\cdots\psi_N(q_N), \quad (2.10)$$

$$E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \cdots + \varepsilon_N. \quad (2.11)$$

Las funciones $\psi_i(q_i)$ y las cantidades ε_i satisfacen, a su vez, la ecuación de Schrödinger mono-electrónica

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V(r_i)\right]\psi_i(q_i) = \varepsilon_i\psi_i(q_i), \quad (2.12)$$

que gobierna el comportamiento de un único electrón en el campo central $V(r)$. Vamos entonces a centrarnos en el problema mono-electrónico. Por simplicidad, prescindiremos por el momento del subíndice i .

El hamiltoniano $h^{(0)}$ es independiente de las coordenadas de espín, así que, si \mathbf{s} representa el momento angular de espín de cada electrón, se cumple

$$[h^{(0)}, \mathbf{s}] = 0. \quad (2.13)$$

Esto significa que es posible encontrar autofunciones de $h^{(0)}$ que sean también autofunciones de los operadores \mathbf{s}^2 y s_z asociadas a los números cuánticos s y m_s . Según lo dicho, los orbitales $\psi(q)$ pueden expresarse como el producto de una función dependiente de las coordenadas espaciales \mathbf{r} por una autofunción de espín $s = 1/2$ (como corresponde a los electrones),

$$\psi(q) = u(\mathbf{r})\chi_{\frac{1}{2}m_s}. \quad (2.14)$$

Sea \mathbf{l} el momento angular orbital de un electrón. Si expresamos el operador ∇^2 en coordenadas esféricas,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \quad (2.15)$$

y recordamos que \mathbf{l}^2 puede representarse por el siguiente operador diferencial

$$\mathbf{l}^2 = \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \quad (2.16)$$

como el potencial $V(r)$ presenta simetría esférica, resulta evidente que

$$\left[h^{(0)}, \mathbf{I}^2 \right] = \left[h^{(0)}, l_z \right] = 0. \quad (2.17)$$

Podremos entonces encontrar soluciones de la ecuación de Schrödinger monoeléctronica que sean simultáneamente autofunciones de $h^{(0)}$, \mathbf{I}^2 y l_z (y de \mathbf{s}^2 y s_z según dijimos antes). De hecho, el término del orbital $\psi(q)$ dependiente de las coordenadas espaciales puede separarse en una parte radial y una parte angular,

$$u(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi), \quad (2.18)$$

donde la función $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ es un armónico esférico y l y m_l son los números cuánticos asociados a \mathbf{I}^2 y l_z , respectivamente. La función radial $R(r)$ es ahora una solución de la ecuación de Schrödinger radial

$$-\frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) + V(r)R(r) = \varepsilon R(r), \quad (2.19)$$

con condiciones de contorno $R(0) = R(\infty) = 0$. Este es un problema de Sturm-Liouville con infinitos autovalores y autofunciones posibles, que vamos a denotar como ε_{nl} y $R_{nl}(r)$ respectivamente. El entero n es útil para ordenar las soluciones, de tal forma que, para un valor de l , $n = l + 1$ se corresponde con el menor de los autovalores, $n = l + 2$ con el siguiente y así sucesivamente, mientras que, la autofunción caracterizada por $n = l + 1$ no tendrá ningún nodo, la correspondiente a $n = l + 2$ tendrá uno, etc. En definitiva, el entero n asume el mismo papel que el número cuántico principal en la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno.

Según esto, cada orbital podrá especificarse completamente a partir de los números cuánticos (n, l, m_l, m_s) ,

$$\psi_{nlm_l m_s}(q) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)\chi_{1/2m_s}. \quad (2.20)$$

Finalmente, la función de onda total del átomo multieletrónico en la aproximación de orden cero será

$$\Psi^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_N) = \prod_{i=1}^N \psi_{n_i l_i m_{l_i} m_{s_i}}(q_i) \quad (2.21)$$

y la energía total

$$E^{(0)} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{n_i l_i}, \quad (2.22)$$

siendo $(n_i, l_i, m_{l_i}, m_{s_i})$ el conjunto de números cuánticos asociados al electrón i .

Debido a que el potencial es central, las energías ε_{nl} obtenidas al resolver (2.19) son independientes del número cuántico magnético y además tampoco dependen de los números cuánticos de espín. Por tanto, cada energía monoeléctronica tendrá una *degeneración* $g_l = 2(2l + 1)$, donde el factor 2 proviene de los posibles valores de m_s ($m_s = \pm 1/2$, degeneración asociada al espín) y el factor $(2l + 1)$ es el número de posibles valores de m_l ($m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$). Además, existe degeneración de intercambio, ya que cualquier función de onda obtenida a partir de (2.21)

mediante una permutación de las coordenadas electrónicas es igualmente una solución de (2.7) con la misma energía (2.22).

Ahora bien, teniendo en cuenta que los electrones son fermiones, la función de onda de un sistema de N electrones debe ser antisimétrica frente a la permutación del conjunto de coordenadas de dos electrones cualesquiera, esto es, debe cambiar de signo al llevar a cabo dicha permutación. En consecuencia, la función de onda (2.21) es inaceptable desde el punto de vista físico. No obstante, el requisito anterior se satisface si la función de onda, en lugar de ser producto directo de orbitales, se expresa en forma de *determinante de Slater*

$$\Psi^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \cdots & \psi_1(q_N) \\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \cdots & \psi_2(q_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(q_1) & \psi_N(q_2) & \cdots & \psi_N(q_N) \end{vmatrix}, \quad (2.23)$$

donde el subíndice de los orbitales hace referencia al correspondiente conjunto de números cuánticos, o en notación de Dirac,

$$\Psi^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_N) \equiv |n_1 l_1 m_{l_1} m_{s_1}, n_2 l_2 m_{l_2} m_{s_2}, \dots, n_N l_N m_{l_N} m_{s_N}\rangle. \quad (2.24)$$

El factor $1/\sqrt{N!}$ se introduce para que, asumiendo orbitales normalizados, la nueva función de onda (2.23) también lo esté. El determinante de Slater resulta ser una combinación lineal de productos directos del estilo (2.21) y, por tanto, es también solución de (2.7) con energía (2.22). Asimismo, si dos orbitales estuviesen caracterizados exactamente por el mismo conjunto de números cuánticos, entonces, dos filas del determinante serían iguales y, en consecuencia, éste se anularía. Por tanto, para obtener una función de onda no nula es preciso que todos los orbitales difieran entre sí al menos en uno de los cuatro números cuánticos que lo especifican. Este hecho no es más que una forma de expresar el conocido *principio de exclusión de Pauli*.

En la aproximación de campo central, la energía total del átomo depende únicamente del número de electrones que ocupan cada uno de los niveles individuales de energía ε_{nl} . Por tanto, la energía total está determinada completamente por la *configuración electrónica*, es decir, por la distribución de los electrones respecto a los números cuánticos n y l . Se dice que los electrones que vienen caracterizados por el mismo valor de n pertenecen a la misma *capa*, mientras que a los electrones que perteneciendo a la misma capa poseen un mismo l se les denomina *electrones equivalentes* y pertenecen todos a una misma *subcapa*. Así pues, una configuración c vendrá especificada de la siguiente manera [16],

$$c \equiv (n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \cdots (n_\alpha l_\alpha)^{w_\alpha}, \quad \sum_{i=1}^{\alpha} w_i = N, \quad (2.25)$$

donde debemos recordar que para un valor del número cuántico principal n , el número cuántico orbital puede tomar los valores $l = 0, 1, \dots, n-1$ y que sus valores numéricos suelen representarse por letras del alfabeto

$l:$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	...
	\uparrow	...										
	s	p	d	f	g	h	i	k	l	m	n	...

Como ya se ha dicho, cada subcapa está especificada por el par de números cuánticos (nl) , mientras que el estado cuántico de cada electrón está determinado por el conjunto $(nlm_l m_s)$. En consecuencia, el número máximo de electrones en una subcapa nl coincide con la *degeneración de la subcapa*, que ya introdujimos, esto es, $g_l = 2(2l + 1)$. Además, para una configuración dada c con energía $E_c^{(0)}$, existirán g_c estados cuánticos diferentes del tipo (2.23) asociados con c ,

$$\Psi_1^{(0)}, \Psi_2^{(0)}, \dots, \Psi_i^{(0)}, \dots, \Psi_{g_c}^{(0)}.$$

Las funciones del conjunto son ortonormales entre sí, cada una de ellas es solución de la ecuación (2.7) y se corresponden con los distintos valores que pueden tomar los números cuánticos de cada electrón conservando siempre la distribución especificada en c . La *degeneración* g_c asociada a una configuración viene dada por

$$g_c = \prod_{i=1}^{\alpha} d_i, \quad d_i = \frac{g_i!}{w_i!(g_i - w_i)!}, \quad (2.26)$$

donde $i \equiv nl$, d_i es el número de maneras posibles de distribuir w_i electrones entre los g_i estados individuales con energía ε_{nl} .

Para dejar claro lo que hemos comentado hasta ahora y teniendo en cuenta lo que se tratará en secciones posteriores, conviene poner un ejemplo. Consideremos la configuración $1s^2 2s^2 2p^2$ correspondiente a un átomo de 6 electrones. Según la expresión (2.26), hay 15 determinantes diferentes asociados con la configuración anterior y con la misma energía $E^{(0)} = 2\varepsilon_{1s} + 2\varepsilon_{2s} + 2\varepsilon_{2p}$. De acuerdo con el principio de exclusión de Pauli y como sucede siempre que tenemos una subcapa cerrada, sólo existe una posibilidad para colocar los dos electrones en la subcapa $1s$ (un electrón con $m_s = 1/2$ y el otro con $m_s = -1/2$) y lo mismo ocurre con los dos electrones en la $2s$. Entonces, los determinantes de Slater van a diferir sólo en los valores de los números cuánticos m_l y m_s de los dos electrones de la subcapa $2p$. Si omitimos la parte correspondiente a las subcapas $1s$ y $2s$, los determinantes pueden representarse como $|2pm_l m_s, 2pm'_l m'_s\rangle$ y las 15 posibilidades saldrían al considerar que $m_l, m'_l = -1, 0, 1$ y $m_s, m'_s = \pm 1/2$ y teniendo en cuenta que el par $m_l m_s$ no puede ser igual a $m'_l m'_s$.

Llegados a este punto, creemos necesario hacer una puntualización. Resolver el espectro del átomo multielectrónico es equivalente al problema de la diagonalización del hamiltoniano exacto H en un espacio de funciones de dimensión infinita. Ante la imposibilidad práctica de encontrar una solución de este problema, como punto de partida, suele trabajarse en la aproximación de campo central. Por tanto, ahora el problema se reduce a la diagonalización del hamiltoniano H_0 . Según lo que hemos comentado, al menos desde el punto de vista formal, este problema es mucho

más sencillo, ya que bajo esta aproximación el estado del átomo queda especificado a través de la configuración electrónica. Esto significa que el espacio total puede subdividirse en subespacios más pequeños, cada uno de dimensión g_c , asociado a una configuración particular c y una energía $E_c^{(0)}$. Los elementos de matriz de H_0 entre estados pertenecientes a subespacios diferentes serán nulos, por lo que, el problema se reduce a la diagonalización de H_0 en el subespacio correspondiente a cada configuración. Si el problema original era la diagonalización de una matriz de dimensión infinita, en la aproximación de campo central, pasamos a tener infinitas diagonalizaciones de matrices finitas.

En este contexto, la estructura energética de un átomo con N electrones estará constituida por un conjunto (infinito) de niveles energéticos, cada uno de ellos asociado con una energía $E_c^{(0)}$, una configuración c y un conjunto de g_c determinantes de Slater. Entre todas las configuraciones posibles con N electrones, llamamos *configuración fundamental* a aquella configuración electrónica que dé lugar al mínimo valor de la energía [16]. Las restantes configuraciones reciben el nombre de *configuraciones excitadas*.

Por otro lado, el conjunto de todas las autofunciones de H_0 forma un conjunto completo. Por tanto, la función de onda exacta Ψ puede desarrollarse en términos de las componentes de este conjunto,

$$\Psi = \sum_{k=1}^{\infty} C_k \Psi_k^{(0)}. \quad (2.27)$$

No obstante, si efectivamente la perturbación H_{ee} es despreciable, en primer orden de teoría de perturbaciones, la función de onda Ψ puede desarrollarse solamente en el subespacio asociado a una única configuración,

$$\Psi \approx \Psi^{(1)} = \sum_{k=1}^{g_c} C_k \Psi_k^{(0)}. \quad (2.28)$$

Esta descripción se denomina *aproximación monoconfiguracional*.

Pueden obtenerse, aún, mejores resultados, si se desarrolla la función Ψ en un subespacio mayor correspondiente a la selección de M configuraciones,

$$\Psi \approx \sum_{c=1}^M \sum_{k=1}^{g_c} C_k^c \Psi_k^{(0)c}. \quad (2.29)$$

Esta descripción se denomina *aproximación multiconfiguracional*.

Como añadido importante debemos comentar que además de clasificar las funciones de onda del átomo multielectrónico en términos de los momentos angulares orbital y de espín, éstas pueden describirse en función del concepto que se conoce como *paridad*.

Así, el hamiltoniano del sistema es una función de las coordenadas \mathbf{r}_i de cada electrón y de los correspondientes momentos lineales \mathbf{p}_i ¹. La ecuación de Schrödinger se satisface para todos los valores de las coordenadas \mathbf{r}_i y, en particular, también debe cumplirse si todas las \mathbf{r}_i son

¹Si se incluyen interacciones magnéticas, el hamiltoniano también puede depender de los momentos angulares \mathbf{l}_i y \mathbf{s}_i , aunque por simplicidad aquí no haremos explícita tal dependencia.

reemplazadas por $-\mathbf{r}_i$ (y, por tanto, todos los \mathbf{p}_i se sustituyen por $-\mathbf{p}_i$, ya que $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$), esto es,

$$H(-\mathbf{r}_i, -\mathbf{p}_i)\Psi(-\mathbf{r}_i) = E\Psi(-\mathbf{r}_i). \quad (2.30)$$

Las coordenadas de espín no se ven afectadas por este cambio y el momento angular orbital tampoco, puesto que $\mathbf{l}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$.

Para un átomo aislado en ausencia de campos externos se cumple

$$H(-\mathbf{r}_i, -\mathbf{p}_i) = H(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i), \quad (2.31)$$

ya que ni las energías cinéticas ni las distancias entre partículas que intervienen en la interacción coulombiana se ven afectadas al cambiar los signos de \mathbf{r}_i y \mathbf{p}_i . Esto significa que $\Psi(\mathbf{r}_i)$ y $\Psi(-\mathbf{r}_i)$ son soluciones de la misma ecuación de Schrödinger con el mismo autovalor E . Si E es un estado no-degenerado, esto sólo puede ser cierto cuando una de las funciones es simplemente múltiplo de la otra,

$$\Psi(\mathbf{r}_i) = a\Psi(-\mathbf{r}_i). \quad (2.32)$$

Esta última relación utilizada una segunda vez implica

$$\Psi(\mathbf{r}_i) = a^2\Psi(\mathbf{r}_i), \quad (2.33)$$

y, por tanto, los únicos posibles valores de a son $+1$ y -1 . Así, se dice que $\Psi(\mathbf{r}_i)$ tiene *paridad par* cuando $a = +1$ y *paridad impar* cuando $a = -1$.

En coordenadas esféricas la inversión del vector \mathbf{r} implica

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r, \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta, \\ \varphi &\rightarrow \pi + \varphi. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Esto significa que la inversión de coordenadas en un orbital (2.20) resulta

$$R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)\chi_{1/2m_s} \rightarrow (-1)^l R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)\chi_{1/2m_s}, \quad (2.35)$$

Luego, la paridad de un determinante de Slater (2.23) viene dada por

$$a = (-1)^{\sum_i l_i}. \quad (2.36)$$

2.1.2 Correcciones al modelo de campo central

La aproximación atómica de partícula independiente en presencia de un campo central, o aproximación de orden cero, sirve como punto de partida para tratar el problema del átomo multielectrónico con hamiltonianos más realistas siguiendo la teoría de perturbaciones independientes del tiempo.

Consideremos entonces en este apartado y de forma breve, las principales correcciones al modelo de campo central. La primera corrección importante al hamiltoniano de campo central (2.5) es el término

$$H_{ee} = \sum_{i=1}^N \left[-V(r_i) - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.37)$$

que representa la diferencia entre la interacción culombiana de los electrones y el promedio de la repulsión electrónica contenida en el potencial central.

La segunda corrección, que ya se había mencionado en la lista de términos a tener en cuenta al principio de la sección, se debe a las interacciones magnéticas de los espines de los electrones con sus movimientos orbitales (interacciones espín-órbita). En el contexto del modelo de partícula independiente, este término se puede escribir como

$$H_{so} = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (2.38)$$

donde \mathbf{l}_i es el operador momento angular orbital del electrón i , \mathbf{s}_i es su operador momento angular de espín y la función $\xi(r_i)$ viene dada por

$$\xi(r_i) = \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{r_i} \frac{dV}{dr_i}, \quad (2.39)$$

siendo α la constante de estructura fina. Es posible demostrar que los electrones pertenecientes a subcapas cerradas no contribuyen en la expresión (2.38) y que, por tanto, la suma se extiende sólo sobre electrones en subcapas abiertas.

El procedimiento seguido para describir los efectos de H_{ee} y H_{so} en el contexto de teoría de perturbaciones va a depender de la importancia relativa de estos términos. Así, los datos experimentales confirman que, en un buen número de casos, donde Z toma un valor pequeño o intermedio, la repulsión electrónica es mucho más intensa que la interacción espín-órbita [15, 17]. No obstante, mientras que la interacción electrostática entre electrones en el seno del campo generado por un núcleo de carga Z es aproximadamente proporcional a Z , la energía de interacción espín-órbita es proporcional a Z^4 . Por tanto, el protagonismo de esta crece rápidamente con Z y resulta ser la corrección fundamental en átomos con Z alto. Así pues, para tratar perturbativamente las correcciones al campo central, se seguirá en cada caso un *esquema de acoplamiento* diferente, que dará lugar a una estructura energética también diferente. Para elementos desde el principio hasta la mitad de la tabla periódica se trabaja en *acoplamiento LS*, mientras que el *acoplamiento jj* es el más adecuado al tratar con elementos pesados. De forma general, en la estructura energética real de los distintos elementos se observa una transición más o menos continua desde la estructura característica del acoplamiento *LS* hasta la del acoplamiento *jj* conforme pasamos de elementos ligeros a elementos pesados, lo que significa que también existen otros esquemas de *acoplamiento intermedio* [16, 17]. Los detalles de cómo llevar a cabo los distintos acoplamientos y procedimientos

relacionados, como la suma de momentos angulares, pueden consultarse en la bibliografía [16–18]. Aquí nos limitaremos a comentar las características principales de los dos esquemas más comunes.

Acoplamiento LS

Consideremos nuevamente el hamiltoniano central H_0 y sean \mathbf{L} y \mathbf{S} el momento angular orbital total y el momento angular de espín total, respectivamente,

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i, \quad (2.40a)$$

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i. \quad (2.40b)$$

Puede demostrarse que tanto \mathbf{L} como \mathbf{S} conmutan con H_0 , esto es,

$$[H_0, \mathbf{L}] = 0, \quad (2.41a)$$

$$[H_0, \mathbf{S}] = 0. \quad (2.41b)$$

En consecuencia, es posible obtener autofunciones de H_0 que también sean autofunciones de los operadores \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 , L_z y S_z , caracterizadas por el conjunto de números cuánticos (L, S, M_L, M_S) . Según hemos visto, podemos restringir nuestro análisis a cada uno de los subespacios asociados con una configuración electrónica c . En este sentido, un determinante de Slater del tipo (2.23) está expresado en la representación (n, l, m_l, m_s) y resulta ser una autofunción de los operadores L_z y S_z , pero no necesariamente de \mathbf{L}^2 y \mathbf{S}^2 . El nuevo conjunto de g_c autofunciones, denotadas como $|\gamma LSM_L M_S\rangle$, puede obtenerse construyendo combinaciones lineales de determinantes de Slater, esto es,

$$|\gamma LSM_L M_S\rangle = \sum_{\mu=1}^{g_c} C_{\lambda\mu} |n_1 l_1 m_{l_1} m_{s_1}, \dots, n_N l_N m_{l_N} m_{s_N}\rangle, \quad (2.42)$$

donde γ aglutina el resto de números cuánticos necesarios para especificar el estado atómico, μ es el índice para etiquetar a cada uno de los determinantes de Slater del conjunto asociado con la configuración c y λ es la etiqueta correspondiente para las funciones $|\gamma LSM_L M_S\rangle$.

La ecuación (2.42) expresa realmente un cambio en el conjunto de funciones que forman la base escogida para tratar el problema, pasamos de la representación de determinantes de Slater a la *representación LS* . Este esquema de trabajo se conoce como *acoplamiento LS* o *Russell-Saunders*. La expresión de los coeficientes $C_{\lambda\mu}$ está determinada, de forma general, por la teoría de suma de momentos angulares y las reglas del *álgebra de Racah*. Los detalles relacionados con este tema pueden consultarse en la bibliografía [16, 17]. Asimismo, debe quedar claro que, como no se ha añadido aún ningún término perturbativo al hamiltoniano de campo central, las g_c funciones del tipo $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ son autofunciones de H_0 con la misma energía $E_c^{(0)}$, esto es, todavía no se ha roto la degeneración.

Por otro lado, de acuerdo con la teoría de adición de momentos angulares, una determinada configuración electrónica c dará lugar a un conjunto de *términos* en representación LS . La notación que suele usarse para especificar cada término es

$$c \ 2S+1L, \quad (2.43)$$

donde el valor $2S + 1$ se denomina *multiplicidad* del término. Dentro del subespacio de dimensión g_c correspondiente a una misma configuración c , cada término LS define a su vez un subespacio menor al que pertenecen todas las autofunciones de \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 , L_z y S_z caracterizadas por un mismo valor de los números cuánticos L y S . La dimensión de este subespacio o, lo que es lo mismo, la degeneración del término g_{LS} viene dada por

$$g_{LS} = (2S + 1)(2L + 1). \quad (2.44)$$

Así, si una configuración c da lugar a M términos LS diferentes, se cumplirá

$$g_c = \sum_{\{LS\}=1}^M g_{LS}. \quad (2.45)$$

Es posible que lo que acabamos de contar quede más claro si continuamos con el ejemplo relativo a la configuración $1s^2 2s^2 2p^2$. En la tabla 2.1 podemos ver cuáles son los términos LS asociados con la configuración, sus degeneraciones y sus autofunciones.

Una vez descrito el acoplamiento LS , veamos cómo tratar las correcciones a la aproximación de campo central. Si la interacción electrónica es mucho mayor que la interacción espín-órbita,

$$H_{ee} \gg H_{so}, \quad (2.46)$$

al hamiltoniano de campo central añadiremos en primer lugar el término H_{ee} despreciando la corrección de espín-órbita H_{so} . El objetivo es ahora encontrar energías y autofunciones del hamiltoniano

$$H = H_0 + H_{ee}. \quad (2.47)$$

Como la contribución de repulsión electrónica no presenta simetría esférica, el momento angular orbital monoeléctrico \mathbf{l}_i ya no es una constante del movimiento (no es un buen número cuántico)

Configuración	g_c	Término	g_{LS}	$ LSM_L M_S\rangle$
$1s^2 2s^2 2p^2$	15	1S	1	$ 0000\rangle$
		1D	5	$ 20M_L 0\rangle$
		3P	9	$ 11M_L M_S\rangle$

Tabla 2.1. Desdoblamiento de una configuración electrónica en términos LS .

y la representación no acoplada de configuraciones ya no es adecuada para describir la estructura energética del átomo. Es decir, los determinantes de Slater no son autofunciones del hamiltoniano (2.47) y, por tanto, la repulsión electrónica va a romper, al menos en parte, la degeneración del nivel de energía $E^{(0)}$.

Puede comprobarse que la perturbación H_{ee} conmuta con el momento angular orbital \mathbf{L} y con el espín \mathbf{S} ,

$$[H_{ee}, \mathbf{L}] = 0, \quad (2.48a)$$

$$[H_{ee}, \mathbf{S}] = 0, \quad (2.48b)$$

esto significa que el esquema de acoplamiento LS es el adecuado para resolver la estructura energética del hamiltoniano (2.47). De acuerdo con la teoría de perturbaciones estacionarias, las correcciones a la energía $E_c^{(0)}$ se obtienen diagonalizando la perturbación H_{ee} dentro del subespacio de dimensión g_c asociado. Los estados $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ son autofunciones de H_{ee} y los autovalores correspondientes están caracterizados por los números cuánticos L y S , independientes de M_L y M_S .

Las funciones $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ son también autofunciones de $H = H_0 + H_{ee}$, pero en el subespacio asociado a la energía $E_c^{(0)}$, ya que la teoría de perturbaciones ignora los elementos de matriz de la perturbación entre estados pertenecientes a subespacios diferentes [19].

La nueva estructura energética en acoplamiento LS puede describirse de la manera siguiente. Si una configuración c da lugar a M términos LS , cada energía $E_c^{(0)}$ se desdoblará en un conjunto de M nuevos niveles energéticos E_{LS} y, a su vez, cada energía E_{LS} estará asociada a un término LS con una degeneración g_{LS} . En este subespacio, las funciones del conjunto $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ con L y S fijos y $M_L = -L, \dots, L$ y $M_S = -S, \dots, S$ son autofunciones del hamiltoniano perturbado (2.47) con la misma energía E_{LS} .

El segundo paso en el cálculo perturbativo es tener en cuenta el término de espín-órbita H_{so} . Esta perturbación contempla la interacción del momento angular orbital individual de cada electrón con su momento angular de espín, en consecuencia, H_{so} no conmuta de forma separada con \mathbf{L} y con \mathbf{S} y, por tanto, las funciones $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ no serán autofunciones del hamiltoniano

$$H = H_0 + H_{ee} + H_{so}. \quad (2.49)$$

Conviene entonces buscar una nueva representación, adecuada para resolver la estructura energética del hamiltoniano (2.49). Analizando la forma de la perturbación H_{so} resulta fácil comprobar que ésta conmuta con \mathbf{L}^2 , con \mathbf{S}^2 y también con el momento angular total \mathbf{J} , definido por

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (2.50)$$

En resumen,

$$[H_{so}, \mathbf{L}^2] = 0, \quad (2.51a)$$

$$[H_{so}, \mathbf{S}^2] = 0, \quad (2.51b)$$

$$[H_{so}, \mathbf{J}] = 0. \quad (2.51c)$$

Esto significa que la interacción espín-órbita va a dar lugar a unos nuevos niveles de energía que se obtienen tras diagonalizar la perturbación H_{so} dentro de cada subespacio de dimensión g_{LS} asociado a una energía E_{LS} . En efecto, será posible encontrar autofunciones de H_{so} , que también lo sean de los operadores \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 , \mathbf{J} y J_z , y que estarán caracterizadas por los números cuánticos (L, S, J, M_J) . De acuerdo con la teoría de suma de momentos angulares, las nuevas funciones $|\gamma LSJM_J\rangle$ vendrán dadas por una combinación lineal de funciones $|\gamma LSM_L M_S\rangle$, esto es,

$$|\gamma LSJM_J\rangle = \sum_{\mu=1}^{g_{LS}} D_{\lambda\mu} |\gamma LSM_L M_S\rangle, \quad (2.52)$$

donde $\lambda \equiv LSJM_J$ y $\mu \equiv LSM_L M_S$. Como H_{so} no depende de la orientación del momento angular total, las nuevas energías, que denotaremos por E_J , van a estar caracterizadas por los números cuánticos L , S y J , siendo independientes de M_J , por lo que tendrán una degeneración asociada $g_J = 2J + 1$.

Tras el segundo paso en el cálculo perturbativo, la nueva estructura energética puede describirse como sigue. Si un término LS da lugar a M valores diferentes de J , cada energía E_{LS} se desdoblará en un conjunto de M nuevos niveles energéticos E_J y, a su vez, cada energía E_J estará g_J veces degenerada. De acuerdo con esto, debe cumplirse

$$g_{LS} = \sum_{\{J\}=1}^M g_J. \quad (2.53)$$

Dentro del subespacio asociado al autovalor E_{LS} , las funciones del conjunto $|\gamma LSJM_J\rangle$ con L , S y J fijos, y $M_J = -J, \dots, J$ son autofunciones del hamiltoniano (2.49) con la misma energía E_J . A los nuevos términos de la estructura energética se les llama simplemente *niveles* y suelen representarse de la manera siguiente,

$$c^{2S+1} L_J. \quad (2.54)$$

En la tabla 2.2 se muestra, a modo de ejemplo, la estructura final de niveles derivada del acoplamiento LS correspondiente a una configuración electrónica de partida $1s^2 2s^2 2p^2$.

Acoplamiento jj

Para la descripción de este esquema de acoplamiento jj vamos a seguir un camino análogo al utilizado para exponer el acoplamiento LS . Partimos de nuevo del hamiltoniano central H_0 . En la expresión (2.8) se ponía de manifiesto que H_0 es suma de hamiltonianos individuales h_i .

Configuración	g_c	Término	g_{LS}	$ LSM_L M_S\rangle$	Nivel	g_J	$ LSJM_J\rangle$
$1s^2 2s^2 2p^2$	15	1S	1	$ 0000\rangle$	1S_0	1	$ 0000\rangle$
		1D	5	$ 20M_L 0\rangle$	1D_2	5	$ 202M_J\rangle$
		3P	9	$ 11M_L M_S\rangle$	3P_0	1	$ 1100\rangle$
					3P_1	3	$ 111M_J\rangle$
					3P_2	5	$ 112M_J\rangle$

Tabla 2.2. Desdoblamiento en niveles de la estructura energética correspondiente a un acoplamiento LS .

Consideremos, por otro lado, el acoplamiento del momento angular orbital de un electrón \mathbf{l}_i con su momento angular de espín \mathbf{s}_i , para dar lugar al momento angular total monoelectrónico \mathbf{j}_i ,

$$\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i. \quad (2.55)$$

Resulta evidente que el momento angular \mathbf{j}_i del electrón i conmuta con el hamiltoniano individual h_j del electrón j . Pero además, como cada h_i es central, entonces $[h_i, \mathbf{l}_i] = 0$, y como también es independiente de las coordenadas de espín, $[h_i, \mathbf{s}_i] = 0$, por tanto,

$$[h_i, \mathbf{j}_i] = 0. \quad (2.56)$$

De manera análoga a lo expresado en las ecuaciones (2.12) y (2.20), el estado de un electrón puede especificarse completamente como un orbital monoelectrónico ψ_{nljm_j} caracterizado por los números cuánticos (n, l, j, m_j) . Además, si $\mu \equiv nlm_l m_s$ y $\lambda \equiv nljm_j$, de acuerdo con la suma de momentos angulares, se cumplirá una relación del tipo

$$\psi_{nljm_j} = \sum_{\mu=1}^{g_l} C_{\lambda\mu} \psi_{nlm_l m_s}, \quad (2.57)$$

donde $g_l = 2(2l + 1)$. La ecuación (2.57) expresa un cambio en el conjunto de funciones que forman la base escogida para representar el estado de un electrón, pasando de los orbitales $\psi_{nlm_l m_s}$ a los ψ_{nljm_j} .

Como cada hamiltoniano h_i conmuta con \mathbf{j}_i , también se cumplirá

$$[H_0, \mathbf{j}_i] = 0, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.58)$$

y será posible obtener autofunciones de H_0 que también lo sean de cada uno de los momentos angulares individuales \mathbf{j}_i . Parece lógico que estas funciones sean un determinante de Slater de los orbitales ψ_{nljm_j} , esto es,

$$\Psi_{jj} = |n_1 l_1 j_1 m_{j_1}, \dots, n_N l_N j_N m_{j_N}\rangle. \quad (2.59)$$

Éste es el procedimiento conocido como *acoplamiento jj* .

De manera análoga a lo que ocurría en la representación LS , existe un conjunto de g_c funciones Ψ_{jj} asociadas a una misma configuración c y una energía $E_c^{(0)}$, puesto que no se ha incluido aún ningún término perturbativo que rompa la degeneración.

Por otro lado, si partimos de una configuración electrónica c , en representación jj se obtendrá un nuevo conjunto de configuraciones c_{jj} o términos jj del tipo

$$c_{jj} \equiv (n_1 l_1)_{j_1}^{w_1} (n_2 l_2)_{j_2}^{w_2} \cdots (n_\alpha l_\alpha)_{j_\alpha}^{w_\alpha}, \quad \sum_{i=1}^{\alpha} w_i = N, \quad (2.60)$$

siendo w_i el número de electrones en el orbital $n_i l_i j_i$. Cada configuración c_{jj} tiene una degeneración asociada g_{jj} dada por

$$g_{jj} = \prod_{i=1}^{\alpha} d_i, \quad d_i = \frac{g_i!}{w_i! (g_i - w_i)!}, \quad (2.61)$$

siendo $g_i \equiv g_{j_i} = (2j_i + 1)$ la ocupación máxima del orbital $n_i l_i j_i$ (degeneración del orbital) y $d_i \equiv d_{n_i l_i j_i}$ el número de maneras posibles de distribuir w_i electrones entre los g_i orbitales $n_i l_i j_i$.

Esto significa que, dentro del subespacio de dimensión g_c correspondiente a una misma configuración c , cada configuración c_{jj} define a su vez un subespacio de dimensión g_{jj} , al que pertenecen g_{jj} funciones independientes del estilo (2.59), que se obtendrían manteniendo fijos la terna $n_i l_i j_i$ de todos los electrones y variando los m_{j_i} de cada uno de ellos, pero siempre en concordancia con el principio de exclusión de Pauli.

Según lo dicho, si una configuración electrónica c da lugar a M configuraciones c_{jj} , tiene que cumplirse

$$g_c = \sum_{\{jj\}=1}^M g_{jj}. \quad (2.62)$$

En la tabla 2.3 se resume en qué consiste el acoplamiento jj partiendo de la configuración $1s^2 2s^2 2p^2$. A este respecto hay que decir que al escribir los términos jj suele especificarse sólo los números cuánticos de los electrones pertenecientes a orbitales incompletos.

Una vez que se han expuesto las características fundamentales del acoplamiento jj , veamos cómo introducir las correcciones al campo central. Si la interacción espín-órbita resulta ser mucho mayor que la interacción electrónica,

$$H_{so} \gg H_{ee}, \quad (2.63)$$

Configuración	g_c	Término	g_{jj}	$ jm_j, j'm'_j\rangle$
$1s^2 2s^2 2p^2$	15	$1s^2_{1/2} 2s^2_{1/2} 2p^2_{1/2} \equiv (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$
		$1s^2_{1/2} 2s^2_{1/2} 2p^1_{1/2} 2p^1_{3/2} \equiv (\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$	8	$ \frac{1}{2} m_j, \frac{3}{2} m'_j\rangle$
		$1s^2_{1/2} 2s^2_{1/2} 2p^2_{3/2} \equiv (\frac{3}{2}, \frac{3}{2})$	6	$ \frac{3}{2} m_j, \frac{3}{2} m'_j\rangle$

Tabla 2.3. Desdoblamiento de una configuración electrónica de campo central en términos jj .

podremos despreciar el término H_{ee} y ocuparnos del hamiltoniano

$$H = H_0 + H_{so}. \quad (2.64)$$

En esta situación, carece de significado hablar separadamente del momento angular orbital y del momento angular de espín de un electrón, ya que sólo se conservará el momento angular total individual \mathbf{j}_i [17]. Por esta razón, la representación jj es la más adecuada para tratar el problema.

El término de espín-órbita no es más que la suma de las interacciones espín-órbita individuales $h_{so,i} = \xi(r_i)\mathbf{l}_i\mathbf{s}_i$. Podemos, por tanto, definir un nuevo hamiltoniano individual h'_i dado por

$$h'_i = h_i + h_{so,i} = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V(r_i) + \xi(r_i)\mathbf{l}_i\mathbf{s}_i, \quad (2.65)$$

de tal forma que el hamiltoniano (2.64) se obtiene como

$$H = \sum_{i=1}^N h'_i. \quad (2.66)$$

Puede comprobarse además que el nuevo hamiltoniano individual conmuta con el correspondiente momento angular total,

$$[h'_i, \mathbf{j}_i] = 0, \quad (2.67)$$

por lo que, los orbitales $\psi_{n_i l_i j_i m_{j_i}}$ serán autofunciones de h'_i con autovalor $\varepsilon_{n_i l_i j_i} (2j_i + 1)$ veces degenerado.

De acuerdo con la teoría de perturbaciones, los nuevos niveles de energía del átomo multielectrónico se obtienen al diagonalizar el hamiltoniano (2.64) en el subespacio de dimensión g_c asociado a la configuración c y la energía $E_c^{(0)}$. Debido a las características de la representación jj , la perturbación resulta ser diagonal en los subespacios de dimensión g_{jj} asociados a cada uno de los términos jj procedentes de la configuración c .

Por tanto, la estructura energética del hamiltoniano perturbado (2.64) en acoplamiento jj puede describirse de la manera siguiente. Si una configuración de campo central c da lugar a M términos jj , se romperá la degeneración asociada a la energía $E_c^{(0)}$ y ésta se desdoblará en M nuevos niveles energéticos E_{jj} . A su vez, cada energía E_{jj} , con degeneración g_{jj} , estará asociada a una configuración en representación jj . En base a la ecuación (2.66), las g_{jj} funciones independientes (de las que ya hablamos) pertenecientes al subespacio del término jj correspondiente, son en este subespacio autofunciones del hamiltoniano perturbado (2.64) con la misma energía E_{jj} , dada por

$$E_{jj} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{n_i l_i j_i}. \quad (2.68)$$

De forma análoga al acoplamiento LS , el segundo paso en el cálculo perturbativo es añadir una nueva perturbación al hamiltoniano multielectrónico que, en este caso, resulta ser la corrección de repulsión electrostática H_{ee} . Por tanto, el nuevo hamiltoniano es el mismo que ya habíamos escrito en (2.49),

$$H = H_0 + H_{so} + H_{ee} \quad (2.69)$$

El término H_{ee} no conmuta con los momentos angulares individuales \mathbf{j}_i y, en consecuencia, se romperá la degeneración asociada a la energía E_{jj} . De forma similar a lo que comentábamos en el esquema LS , las nuevas energías se obtendrán tras diagonalizar la perturbación H_{ee} en el espacio de dimensión g_{jj} asociado al autovalor E_{jj} . Obtendremos autofunciones de H_{ee} que también serán autofunciones de cada operador \mathbf{j}_i^2 , de \mathbf{J} y de J_z , donde el momento angular total (que es el mismo operador que se definió al tratar la representación LS) al trabajar en representación jj conviene introducirlo como

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N \mathbf{j}_i. \quad (2.70)$$

En la nueva representación, las autofunciones se especifican como $|\eta j_1 \dots j_N J M_J\rangle$ y vienen dadas, a su vez, por una combinación lineal de funciones de configuración jj , es decir,

$$|\eta j_1 \dots j_N J M_J\rangle = \sum_{\mu=1}^{g_{jj}} D_{\lambda\mu} |n_1 l_1 j_1 m_{j_1}, \dots, n_N l_N j_N m_{j_N}\rangle, \quad (2.71)$$

donde μ es un índice que corre sobre los estados $|n_1 l_1 j_1 m_{j_1}, \dots, n_N l_N j_N m_{j_N}\rangle$ y λ sobre los $|\eta j_1 \dots j_N J M_J\rangle$.

Las nuevas energías E_J van a estar caracterizadas por los números cuánticos j_i , con $i = 1, \dots, N$ y J . Como $[H_{ee}, \mathbf{J}] = 0$, las energías son independientes de M_J y, por tanto, cada nivel presenta una degeneración $g_J = 2J + 1$.

Finalmente, después del segundo paso en el cálculo perturbativo, la nueva estructura energética queda de la manera siguiente. Si una configuración jj da lugar a M valores diferentes de J , cada energía E_{jj} se desdoblará en un conjunto de M nuevos niveles energéticos E_J y, a su vez, cada energía E_J estará $g_J = 2J + 1$ veces degenerado. Según esto, debe cumplirse

$$g_{jj} = \sum_{\{J\}=1}^M g_J \quad (2.72)$$

Dentro del subespacio de dimensión g_{jj} asociado al autovalor E_{jj} , las funciones $|\eta j_1 \dots j_N J M_J\rangle$ con los j_i y J fijos, y $M_J = -J, \dots, J$ son autofunciones del hamiltoniano (2.69) con la misma energía E_J . Los niveles procedentes de un esquema de acoplamiento jj suelen representarse de la siguiente manera,

$$(j_1, j_2, \dots, j_N)_J. \quad (2.73)$$

Por mantener un paralelismo con el acoplamiento LS , en la tabla 2.4 se muestra la estructura de niveles derivada del acoplamiento jj correspondiente a la configuración electrónica de partida $1s^2 2s^2 2p^2$. Como la subcapa $2p$ es la única que no está completa en la configuración, se ha omitido por simplicidad los valores de j de los electrones en subcapas llenas.

Llegados a este momento conviene aclarar una cuestión. Si tomamos como punto de partida una configuración electrónica de campo central (descripción nl), al añadir las dos correcciones H_{ee} y H_{so} al hamiltoniano de orden cero, ya sea siguiendo un esquema LS o un esquema jj , se

Configuración	g_c	Término	g_{jj}	$ jm_j, j'm'_j\rangle$	Nivel	g_J	$ jj'JM_J\rangle$
$1s^2 2s^2 2p^2$	15	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})_0$	1	$ \frac{1}{2}\frac{1}{2}00\rangle$
		$(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$	8	$ \frac{1}{2}m_j, \frac{3}{2}m'_j\rangle$	$(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})_1$	3	$ \frac{1}{2}\frac{3}{2}1M_J\rangle$
		$(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$			$(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})_2$	5	$ \frac{1}{2}\frac{3}{2}2M_J\rangle$
		$(\frac{3}{2}, \frac{3}{2})$	6	$ \frac{3}{2}m_j, \frac{3}{2}m'_j\rangle$	$(\frac{3}{2}, \frac{3}{2})_0$	1	$ \frac{3}{2}\frac{3}{2}00\rangle$
					$(\frac{3}{2}, \frac{3}{2})_2$	5	$ \frac{3}{2}\frac{3}{2}2M_J\rangle$

Tabla 2.4. Ejemplo de desdoblamiento en niveles de la estructura energética correspondiente a un acoplamiento jj .

llega a un mismo conjunto de niveles de energía caracterizados en última instancia por el número cuántico J , es decir, un mismo conjunto de valores de J . Por simplicidad en la notación, la energía de estos niveles la hemos denotado como E_J , en los dos esquemas de acoplamiento. Sin embargo, aunque puede establecerse una relación unívoca entre los valores de J procedentes de términos LS y los valores de J procedentes de términos jj , debe quedar claro que las energías asociadas a un mismo nivel J procedentes de los dos esquemas de acoplamiento no tienen por qué coincidir. La razón es que estos niveles proceden de un cálculo perturbativo con suposiciones diferentes en cada caso. En el esquema de acoplamiento LS se considera $H_0 \gg H_{ee} \gg H_{so}$, mientras que al trabajar en acoplamiento jj se presupone $H_0 \gg H_{so} \gg H_{ee}$. En el primer paso del cálculo perturbativo, la energía de campo central se desdobra en términos LS en un caso y en términos jj en el otro, estableciendo un diagrama de ramificación distinto en cada esquema de acoplamiento, debido a que la importancia relativa de los términos perturbativos es también distinta. Cuando abordamos el segundo paso del cálculo perturbativo y pasamos a la descripción en niveles, se estarán corrigiendo ligeramente las energías de los términos del paso anterior, por lo que, definitivamente, la estructura energética final en los dos casos, en general, no va a ser la misma.

2.1.3 Características del potencial central

En la sección anterior habíamos supuesto conocido el potencial central $V(r)$ para centrarnos en el análisis de la estructura energética en la aproximación de campo central y el tratamiento perturbativo de las correcciones a dicha aproximación. Por tanto, vamos ahora a comentar cuáles son las principales características de la función $V(r)$, esencialmente, cuál es el comportamiento esperado a pequeñas y grandes distancias del núcleo. Dejaremos para las secciones inmediatamente posteriores los métodos desarrollados para la determinación de la función $V(r)$, algo que constituye el verdadero problema del átomo multielectrónico. Recordemos que el objetivo es encontrar una función potencial que recoja en la medida de lo posible la complejidad del problema, de tal

forma que las correcciones al potencial sean lo suficientemente pequeñas como para garantizar la aplicabilidad de la teoría de perturbaciones.

El principal efecto que sobre un electrón del átomo causan los restantes electrones es apantallar la atracción central coulombiana que sufre el electrón debido a la presencia del núcleo. Resulta lógico, por tanto, suponer que gran parte del término de repulsión electrónica debería tener simetría esférica. Así, se puede suponer que el potencial efectivo viene dado por [15]

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + S(r). \quad (2.74)$$

La forma de $S(r)$, que se conoce como *función de apantallamiento*, es fácil de predecir a pequeñas y grandes distancias del núcleo. Si se considera un electrón a una distancia r_i del núcleo muy grande comparada con las distancias al núcleo r_j de los $N - 1$ electrones restantes, se puede suponer que $r_{ij} \approx r_i$ y, por tanto, el potencial que sufre el electrón viene dado aproximadamente por

$$-\frac{Z}{r_i} + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{r_i} = -\frac{Z - N + 1}{r_i}, \quad (2.75)$$

que se corresponde con el potencial coulombiano nuclear apantallado por los $N - 1$ electrones restantes. Conforme disminuye la distancia r_i , el apantallamiento es cada vez menos significativo, de tal forma que cuando el electrón está muy cerca del núcleo puede suponerse que $r_{ij} \approx r_j$ y, por tanto, el potencial será aproximadamente igual a

$$-\frac{Z}{r_i} + \left\langle \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{r_j} \right\rangle = -\frac{Z}{r_i} + cte, \quad (2.76)$$

donde se ha realizado un promedio sobre las distancias de los restantes $N - 1$ electrones. Vemos que en el límite $r_i \rightarrow 0$ el potencial que actúa sobre el electrón es exclusivamente el debido a la atracción nuclear. Según lo dicho, el potencial central $V(r)$ debe cumplir

$$V(r) \rightarrow -\frac{Z}{r}, \quad r \rightarrow 0 \quad (2.77a)$$

$$V(r) \rightarrow -\frac{Z - N + 1}{r}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (2.77b)$$

Sin embargo, la determinación del potencial a distancias intermedias es un problema mucho más difícil. Hay que tener claro que en este caso el potencial $V(r)$ –que representa la atracción del núcleo más la repulsión media de los otros electrones– va a depender de los detalles de la distribución de carga debida a los electrones y que, en consecuencia, es imposible que un mismo potencial $V(r)$ describa con exactitud todo el espectro de un átomo o ion multielectrónico. En lo que sigue comentaremos brevemente cuáles son los principales métodos desarrollados para resolver este problema, que son también, como es lógico, los métodos utilizados en los códigos computacionales para el cálculo de la estructura atómica que podemos encontrar en la bibliografía.

2.1.4 El modelo de Thomas-Fermi

Uno de los modelos más simples para la determinación del potencial atómico es el modelo de Thomas-Fermi. El interés en dedicarle este apartado se debe a varios motivos: en primer lugar, porque las correcciones introducidas en algunas versiones de los procedimientos autoconsistentes que luego trataremos están basadas en el modelo de Thomas-Fermi; en segundo lugar, porque fue el precursor de los modelos basados en potenciales paramétricos analíticos, como el que se usa en el código colisional-radiativo desarrollado en este trabajo y, finalmente, como también veremos, porque el modelo ha sido a la larga adaptado para tratar el problema de la determinación del potencial atómico, no en situación aislada, sino en el seno de plasmas de alta densidad fuertemente acoplados.

Existe una amplia bibliografía acerca de la teoría atómica de Thomas-Fermi y sus primeras versiones aparecen en la mayoría de los libros de textos [15, 16, 18, 20]. Aquí nos limitaremos a presentar un resumen del modelo.

La teoría de Thomas-Fermi fue desarrollada para el cálculo del estado fundamental de átomos o iones con un gran número de electrones y está basada en consideraciones estadísticas y semiclásicas. Los N electrones del sistema se tratan como un gas de Fermi en el estado fundamental, pero confinados a una esfera de radio r_0 (que podría ser ∞) debido a la acción de un potencial central $V(r)$ que hay que determinar. Como valor de la energía cinética de los electrones $T(r)$ se toma la energía correspondiente al gas de Fermi compatible con la densidad electrónica en cada punto del espacio. Si $n(r)$ es la densidad de electrones (también a determinar), entonces

$$T(r) = \frac{1}{2} [3\pi^2 n(r)]^{2/3}. \quad (2.78)$$

Asimismo, tratando como continua la densidad electrónica, otra de las aproximaciones del modelo consiste en utilizar la ecuación de Poisson de la electrostática,

$$\nabla^2 V(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rV(r)] = -4\pi n(r). \quad (2.79)$$

Por otro lado, la energía total, que debe ser independiente de r (estamos interesados en analizar la situación estacionaria) y negativa (de lo contrario los electrones no estarían ligados al átomo), vendrá dada por

$$E = T(r) + V(r). \quad (2.80)$$

Como se supone que los N electrones están confinados a una esfera de radio r_0 , debe cumplirse la siguiente *condición de normalización*,

$$\int_0^{r_0} n(r) 4\pi r^2 dr = N. \quad (2.81)$$

Ahora se exige que la energía del sistema sea mínima, introduciendo la ligadura (2.81), esto es,

$$\delta \left(E - V_0 \int_0^{r_0} n(r) 4\pi r^2 dr \right) = 0, \quad (2.82)$$

donde el parámetro V_0 es un multiplicador de Lagrange. De esta última expresión se deduce una las ecuaciones fundamentales del modelo, que establece la relación entre $n(r)$ y $V(r)$,

$$n(r) = \begin{cases} \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} \Phi(r)^{3/2}, & r \leq r_0, \\ 0, & r > r_0. \end{cases} \quad (2.83)$$

donde se ha introducido la función $\Phi(r) = V_0 - V(r)$. Si el átomo está aislado y toda la carga contenida en la esfera de radio r_0 , es de esperar que $n(r_0) = 0$. De esta condición se deduce que $V_0 = V(r_0) = -(Z - N)/r_0$ y, por tanto, $\Phi(r_0) = 0$.

A estas ecuaciones se añade una condición más. Para $r \rightarrow 0$ la mayor contribución al potencial electrostático será la debida al núcleo, por tanto, tendremos

$$\lim_{r \rightarrow 0} r\Phi(r) = Z. \quad (2.84)$$

Con el objetivo de simplificar las expresiones obtenidas, se introduce la variable adimensional x y la función $\chi(x)$, de la siguiente manera,

$$r = bx, \quad b = \frac{(3\pi)^{2/3}}{2^{7/3}} Z^{-1/3}, \quad r\Phi(r) = Z\chi(x). \quad (2.85)$$

Con estos cambios, la relación (2.83) se convierte en

$$n(r) = \begin{cases} \frac{Z}{4\pi b^3} \left[\frac{\chi(x)}{x} \right]^{3/2}, & x \leq x_0, \\ 0, & x > x_0, \end{cases} \quad (2.86)$$

mientras que la ecuación (2.79) puede reescribirse como

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = x^{-1/2}\chi^{3/2}, \quad x \leq x_0, \quad (2.87a)$$

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = 0, \quad x > 0. \quad (2.87b)$$

La condición de normalización (2.81) y la condición de contorno para $r = 0$ expresada en (2.84) quedarían, respectivamente, de la siguiente manera,

$$x_0\chi'(x_0) = \frac{N - Z}{Z}, \quad (2.88a)$$

$$\chi(0) = 1, \quad (2.88b)$$

Además, la solución también debe satisfacer

$$\chi(x_0) = 0. \quad (2.88c)$$

La ecuación diferencial no-lineal y de segundo orden (2.87a) se conoce como *ecuación de Thomas-Fermi* y es una ecuación *universal*, ya que no depende de Z ni de ninguna constante física. Para átomos neutros ($Z = N$), la ecuación de Thomas-Fermi sujeta a las condiciones (2.88)

conduce a una *función universal* $\chi(x)$, que se obtiene por integración numérica y que aparece tabulada en numerosos libros de texto. Sin embargo, para átomos ionizados existe una familia de soluciones posibles para $\chi(x)$. En cada caso particular, con el conjunto de ecuaciones (2.87a) y (2.88), se conforma un procedimiento iterativo que permite determinar numéricamente la función $\chi(x)$, la densidad electrónica $n(r)$ y el potencial $V(r)$.

Según lo expuesto, el potencial $V(r)$ puede reescribirse de la forma siguiente,

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + S(r), \quad (2.89)$$

donde $S(r) = -Z[\chi(x) - 1]/r + V_0$ es la función de apantallamiento de la que ya habíamos hablado al principio de este apartado. El ajuste de la función de apantallamiento obtenida numéricamente mediante la propuesta de diferentes expresiones analíticas dependientes de uno o más parámetros dio lugar a los primeros *potenciales analíticos*. Esta manera de abordar el problema del átomo multielectrónico será tratada más adelante.

El potencial de Thomas-Fermi podría utilizarse ahora en la ecuación de Schrödinger (2.19) para obtener la parte radial de los orbitales monoeléctricos. Sin embargo, se ha comprobado que la aplicabilidad del método de Thomas-Fermi está limitada a distancias intermedias, ya que, según el modelo, la densidad electrónica diverge en el origen y se sobrestima a distancias grandes. Asimismo, el mayor problema radica en que el potencial $V(r)$ se calcula clásicamente para una distribución continua de carga y, por tanto, incluye la interacción electrostática de cada electrón consigo mismo. Esto significa que, para un valor grande de r , $rV(r)$ tiende a $-(Z - N)$, en lugar de hacerlo al valor correcto $-(Z - N + 1)$. Se han desarrollado mejoras al modelo de Thomas-Fermi para incluir los efectos de intercambio electrónico (modelo de Thomas-Fermi-Dirac), que no serán comentadas aquí. Los detalles pueden encontrarse en la bibliografía [16, 20].

2.1.5 El método de Hartree-Fock

Vamos a presentar a continuación las ecuaciones básicas de una aproximación más elaborada conocida como *método autoconsistente de Hartree-Fock*. La mayoría de los códigos más sofisticados que podemos encontrar actualmente en la literatura para la resolución de la estructura atómica de un átomo multielectrónico están basados en este procedimiento.

En concordancia con el principio de exclusión de Pauli, en el método de Hartree-Fock se asume que la función de onda de un sistema de N electrones es un determinante de Slater o, en otras palabras, un producto antisimétrico de orbitales monoeléctricos. Utilizando un *método variacional* [19], el objetivo es encontrar el mejor determinante de Slater mediante la optimización de los orbitales individuales. Asimismo, como la función de onda total del átomo multielectrónico sólo puede representarse mediante una suma infinita de determinantes, el método de Hartree-Fock puede verse como un primer paso para la obtención de las funciones de onda y las energías del átomo.

El punto de partida es el hamiltoniano siguiente,

$$H = H_1 + H_2, \quad (2.90)$$

donde

$$H_1 = \sum_{i=1}^N h_i, \quad (2.91)$$

$$h_i = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \quad (2.92)$$

y

$$H_2 = \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}. \quad (2.93)$$

Si E_0 es la energía del estado fundamental del sistema, de acuerdo con el principio variacional, se tiene [19]

$$E_0 \leq E[\Psi] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad (2.94)$$

donde Ψ es una función de prueba que se supone normalizada,

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1. \quad (2.95)$$

En el método de Hartree-Fock la función de prueba es un determinante de Slater, o sea,

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \cdots & \psi_1(q_N) \\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \cdots & \psi_2(q_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(q_1) & \psi_N(q_2) & \cdots & \psi_N(q_N) \end{vmatrix}, \quad (2.96)$$

donde recordemos que $\psi_\lambda(q_i)$ es un orbital monoeléctrico asociado al conjunto de números cuánticos $(n_\lambda, l_\lambda, m_{l_\lambda}, m_{s_\lambda})$ en función de las coordenadas espaciales y de espín del electrón i -ésimo. Se requiere además que los orbitales sean ortonormales,

$$\langle \psi_\mu | \psi_\lambda \rangle = \int \psi_\mu^*(q) \psi_\lambda(q) dq = \delta_{\lambda\mu}, \quad (2.97)$$

donde el símbolo $\int dq$ implica una integración sobre las coordenadas espaciales y una suma sobre las coordenadas de espín.

Teniendo en cuenta la forma en la que actúan los operadores H_1 y H_2 sobre los determinantes, se llega a que el valor esperado del hamiltoniano es

$$E[\Psi] = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_\lambda I_\lambda + \frac{1}{2} \sum_\lambda \sum_\mu (J_{\lambda\mu} - K_{\lambda\mu}), \quad (2.98)$$

siendo

$$I_\lambda = \langle \psi_\lambda | h_i | \psi_\lambda \rangle, \quad (2.99)$$

$$J_{\lambda\mu} = \left\langle \psi_\lambda \psi_\mu \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| \psi_\lambda \psi_\mu \right\rangle, \quad (2.100)$$

que se denomina *término directo*, y

$$K_{\lambda\mu} = \left\langle \psi_\lambda \psi_\mu \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| \psi_\mu \psi_\lambda \right\rangle, \quad (2.101)$$

que se conoce como *término de intercambio*.

Una vez obtenido el funcional $E[\Psi]$, el segundo paso en el cálculo variacional es exigir que $E[\Psi]$ sea estacionario respecto a las variaciones de los orbitales y sujeto al requisito de ortonormalidad de los mismos. Para satisfacer estas condiciones se introducen N^2 multiplicadores de Lagrange, que denotamos como $\varepsilon_{\lambda\mu}$. La ecuación variacional resulta entonces

$$\delta \left(E - \sum_\lambda \sum_\mu \varepsilon_{\lambda\mu} \langle \psi_\mu | \psi_\lambda \rangle \right) = 0. \quad (2.102)$$

Ahora bien, los N^2 multiplicadores de Lagrange pueden ser considerados como los elementos de una matriz hermítica. Teniendo esto en cuenta, resulta conveniente llevar a cabo una transformación unitaria sobre los orbitales monoeléctricos, de tal forma que la matriz de multiplicadores sea diagonal, con elementos $E_\lambda \delta_{\lambda\mu}$. Tras la transformación unitaria, los nuevos orbitales sólo difieren de los anteriores en un factor de fase y el valor esperado del hamiltoniano no se verá afectado. Supongamos de aquí en adelante que dicha transformación ha sido efectuada, sin indicarlo explícitamente en la notación para no complicarla. En esta nueva situación, la ecuación variacional queda

$$\delta \left(E - \sum_\lambda E_\lambda \langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle \right) = 0. \quad (2.103)$$

Teniendo en cuenta la expresión del valor esperado $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ y desarrollando la ecuación (2.103), se llega a un sistema de N ecuaciones integrodiferenciales acopladas, conocidas como *ecuaciones de Hartree-Fock*,

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \mathcal{V}(q_i) \right] \psi_\lambda(q_i) = E_\lambda \psi_\lambda(q_i). \quad (2.104)$$

Suele definirse el hamiltoniano de Hartree-Fock h_{HF} como

$$h_{HF} = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \mathcal{V}(q_i), \quad (2.105)$$

lo que permite reescribir la ecuación (2.104) de la forma

$$h_{HF} \psi_\lambda(q_i) = E_\lambda \psi_\lambda(q_i). \quad (2.106)$$

El potencial Hartree-Fock $\mathcal{V}(q_i)$ viene dado por

$$\mathcal{V}(q_i) = -\frac{Z}{r_i} + \mathcal{V}^d(q_i) - \mathcal{V}^{ex}(q_i). \quad (2.107)$$

A su vez, el *potencial directo* se define como

$$\mathcal{V}^d(q_i) = \sum_{\mu} V_{\mu}^d(q_i), \quad (2.108)$$

mientras que el *potencial de intercambio* resulta ser

$$\mathcal{V}^{ex}(q_i) = \sum_{\mu} V_{\mu}^{ex}(q_i). \quad (2.109)$$

En las expresiones anteriores el operador *directo* $V_{\mu}^d(q_i)$ se define como

$$V_{\mu}^d(q_i)(\bullet) = \left[\int \psi_{\mu}^*(q_j) \frac{1}{r_{ij}} \psi_{\mu}(q_j) dq_j \right] (\bullet), \quad (2.110)$$

que da cuenta de la repulsión electrostática debida al electrón j , cuando su posición es promediada sobre el orbital ψ_{λ} . También se ha introducido el operador no-local de *intercambio* $V_{\mu}^{ex}(q_i)$ a través de la relación

$$V_{\mu}^{ex}(q_i)(\bullet) = \left[\int \psi_{\mu}^*(q_j) \frac{1}{r_{ij}} (\bullet) dq_j \right] \psi_{\mu}(q_i). \quad (2.111)$$

Desde el punto de vista formal, la ecuación (2.104) es muy similar a la ecuación de Schrödinger monoeléctronica para cada orbital ψ_{λ} . Sin embargo, la expresión (2.104) no es realmente una ecuación de autovalores, ya que el potencial de Hartree-Fock \mathcal{V} depende de los propios orbitales a través de los operadores V_{μ}^d y V_{μ}^{ex} . De hecho, para resolver el sistema de ecuaciones de Hartree-Fock se procede de forma *iterativa*, siendo ésta una de las características genuinas del método. El cálculo se llevaría a cabo de la siguiente manera:

- El punto de partida es un conjunto aproximado de orbitales, $\psi_{\alpha}^{(1)}, \psi_{\beta}^{(1)}, \dots, \psi_{\nu}^{(1)}$.
- Se calcula una expresión aproximada del potencial de Hartree-Fock, $\mathcal{V}^{(1)}$.
- Se resuelven numéricamente las ecuaciones de Hartree-Fock utilizando el potencial $\mathcal{V}^{(1)}$ y de esta forma se obtiene un nuevo conjunto de orbitales, $\psi_{\alpha}^{(2)}, \psi_{\beta}^{(2)}, \dots, \psi_{\nu}^{(2)}$.
- Con los nuevos orbitales se determina un nuevo potencial $\mathcal{V}^{(2)}$ y así sucesivamente.
- El proceso se repite hasta obtener un conjunto de orbitales que dé lugar a un potencial $\mathcal{V}^{(n)}$ idéntico (dentro del grado de convergencia deseado) al potencial $\mathcal{V}^{(n-1)}$ obtenido en el paso anterior. El proceso entonces se detiene y el potencial determinado de esta manera se conoce como *potencial autoconsistente*.

Una vez obtenido el conjunto de orbitales de forma autoconsistente, ahora éstos pueden utilizarse para construir la función de onda del sistema (2.96) y determinar la energía correspondiente a partir de la expresión (2.98). En este punto, conviene hacer notar que la energía del sistema no coincide con la suma de los *pseudo*-autovalores individuales E_{λ} . De hecho, es sencillo demostrar que

$$E[\Psi] = \sum_{\lambda} E_{\lambda} - \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} (J_{\lambda\mu} - K_{\lambda\mu}). \quad (2.112)$$

Además, de acuerdo con un resultado conocido como *teorema de Koopman* [15], la cantidad E_λ representa aproximadamente la energía necesaria para liberar un electrón que ocupa el orbital ψ_λ , es decir, la *energía de ionización* del electrón.

Aunque el proceso de autoconsistencia descrito anteriormente pueda resultar a priori sencillo, lo cierto es que no está exento de ciertas complicaciones e inestabilidades [16]. Tanto los algoritmos numéricos utilizados para resolver las ecuaciones HF, como las funciones prueba deben ser cuidadosamente seleccionadas para evitar divergencias en el proceso iterativo. En cualquier caso, aún pasando por alto estos problemas, las ecuaciones HF son complejas desde el punto de vista numérico y su solución lleva aparejado un importante coste computacional. Por esta razón, en su momento se desarrollaron diversos métodos más sencillos casi siempre orientados a la obtención de una expresión simplificada del potencial de intercambio. Alguno de estos métodos son:

- *Hartree* (H). Se desprecia el potencial de intercambio.
- *Hartree-Fock-Slater* (HFS). El potencial directo se calcula siguiendo el método HF original, pero el potencial de intercambio se aproxima por una expresión estadística de electrones libres similar a la que se emplea en el modelo Thomas-Fermi-Dirac del átomo.
- *Hartree-plus-Statistical-Exchange* (HX). Los términos directos y los términos diagonales de intercambio, $V_\lambda^{ex}(q_i)\psi_\lambda(q_i)$, se calculan a partir de las expresiones originales, pero se utiliza una aproximación estadística para los términos de intercambio no-diagonales, $V_\mu^{ex}(q_i)\psi_\lambda(q_i)$.

Hay que decir, sin embargo, que la rápida evolución que la tecnología de computadores ha experimentado en los últimos años ha hecho que las ventajas de estos tratamientos aproximados sean cada vez menos significativas y actualmente el método HF completo se aplica de manera habitual en los cálculos atómicos a gran escala.

Otra cuestión que conviene mencionar en el contexto del método HF es la llamada *energía de correlación*. Como se ha visto, el HF es un método variacional en el que la función de onda prueba para el átomo (ion) multielectrónico es un determinante de Slater cuyos orbitales individuales están optimizados. Es evidente entonces que tanto la función de onda total Ψ_{HF} como la energía total E_{HF} obtenidas mediante este método son únicamente aproximaciones a la energía exacta E_{exact} y la función de onda exacta Ψ_{exact} del hamiltoniano (2.90). La diferencia entre la energía exacta y la energía HF se denomina energía de correlación,

$$E_{corr} = E_{exact} - E_{HF}. \quad (2.113)$$

Hay que matizar que la cantidad E_{exact} que figura en (2.113) es la energía exacta del hamiltoniano no-relativista (2.90) y que, por tanto, no coincide con la energía experimental. Físicamente, la correlación tiene un sentido claro si se interpreta como la influencia interelectrónica en la dinámica de un sistema de N electrones sometidos a un potencial externo. Se trata, por tanto, de una

propiedad colectiva. Debido a la imposibilidad, hasta el momento, de disponer de un cálculo exacto para un sistema de más de dos partículas interaccionantes, no se puede obtener una función de onda completamente correlacionada. Ciertamente, debido al hecho que la función de onda HF es completamente antisimétrica, algún efecto de correlación está incluido en la energía HF, por lo que, normalmente, se conoce como efectos de correlación los efectos de correlación restantes entre electrones no incluidos en la función de onda HF.

2.1.6 El método del potencial paramétrico

En la mayoría de los experimentos relacionados con la espectroscopía de plasmas, ya sean de interés astrofísico, tecnológico o para los programas de desarrollo de la fusión nuclear, los átomos se encuentran en diferentes estados de ionización y distribuidos en una gran variedad de estados excitados. A la hora de interpretar los datos experimentales, determinar las propiedades ópticas del plasma y validar o desechar los modelos teóricos propuestos, es necesario llevar a cabo un cálculo atómico preciso y a gran escala. Sin embargo, aún teniendo en cuenta el explosivo avance de la tecnología de computadores en las últimas décadas, un cálculo de tal magnitud utilizando métodos autoconsistentes es un problema complejo que se traduce además en tiempos de cálculo excesivamente elevados.

Una alternativa para determinar los orbitales y energías monoeléctricas con una complejidad intermedia, a medio camino entre el modelo TF y el modelo HF, es la utilización de *potenciales paramétricos o analíticos*. Este método tiene su origen en la teoría atómica de TF y consiste, en esencia, en la propuesta de una expresión analítica para la función de apantallamiento, introducida de tal manera que se satisfagan los límites a pequeñas y grandes distancias del núcleo comentados en el apartado 2.1.3. Así, en la ecuación radial monoeléctrica se asume para el potencial efectivo una forma analítica conveniente, tal como

$$V(r; \alpha_i) = -\frac{1}{r} [(N-1)e^{-\alpha_1 r} + \alpha_2 r e^{-\alpha_3 r} + \dots + \alpha_n r^m e^{-\alpha_n r + Z - N + 1}], \quad (2.114)$$

que depende del conjunto de parámetros α_i . Con frecuencia estos parámetros se determinan a partir de un ajuste (de tipo *mínimos cuadrados*) entre energías calculadas y energías experimentales, en este caso, el procedimiento se convierte en un método *semi-empírico* que no resulta del todo apropiado para el desarrollo de un código versátil de estructura atómica.

Otra opción es determinar los parámetros del potencial mediante la minimización de las energías asociadas con la configuración fundamental y unos pocos estados excitados, con lo que el método se convierte en un procedimiento *ab initio*. Una vez que los parámetros han sido fijados, éstos pueden almacenarse para cálculos posteriores.

La utilización de potenciales paramétricos evita el proceso iterativo típico de los métodos HF reduciendo considerablemente los tiempos de cálculo. Además, proporcionan valores de las energías

de nivel y otras propiedades atómicas bastante aceptables, por lo que han sido aplicados con éxito en numerosos problemas de la física de plasmas, especialmente en aquéllos con un grado de ionización medio/alto.

Puede encontrarse una buena revisión de los distintos modelos analíticos que han ido apareciendo en la literatura en [21, 22]. Aquí nos limitaremos a comentar de forma breve dos aportaciones significativas, que han trascendido no sólo como herramientas para el cálculo de la estructura energética, sino como elementos integrantes de otros códigos más amplios, reconocidos internacionalmente en el contexto de la cinética de plasmas y el cálculo de sus propiedades radiativas.

La primera de estas aportaciones es la debida a Klapisch *et al.* En un primer trabajo [23], los autores propusieron una expresión para el potencial idéntica a (2.114), pero se dieron cuenta de que para que el método fuera realmente eficiente, especialmente para átomos de la mitad de la tabla periódica hacia adelante, era necesario modificar esa expresión por otra que tuviera en cuenta de forma más explícita la estructura de capas y subcapas característica de una configuración electrónica. Esto les llevó a formular en trabajos posteriores [24–26] una nueva expresión para el potencial, dada por

$$V_k(r; \alpha) = -\frac{1}{r} [w_k f(l, \alpha, r) + Z - N + 1], \quad (2.115)$$

donde $k \equiv nl$, w_k es el número de electrones en la subcapa y

$$f(l, \alpha, r) = e^{-\alpha r} \sum_{i=0}^{2l+1} \left(1 - \frac{i}{2l+1}\right) \frac{(\alpha r)^i}{i!}. \quad (2.116)$$

Los parámetros de este potencial se obtienen resolviendo numéricamente las ecuaciones radiales monoeléctricas dentro de un proceso iterativo que se detiene cuando se alcanza un mínimo en la energía.

Entre las principales ventajas del modelo de Klapisch cabe citar, en primer lugar, que los parámetros del potencial dependen de los orbitales ocupados por los electrones, por lo que se puede emplear, ajustando convenientemente los parámetros, para tratar cualquier tipo de configuración excitada. Por otro lado, las funciones de onda que se obtienen son directamente ortogonales debido a que se trabaja con la misma función potencial para todos los electrones, lo que evita el cálculo de integrales de solapamiento radiales. Asimismo, la extensión del modelo al caso relativista² ahorra un tiempo considerable de cálculo respecto al correspondiente método autoconsistente y, en comparación, los errores que se comenten son bastante pequeños.

El método del potencial paramétrico de Klapisch se encuentra en dos versiones en diferentes códigos de computación, a saber, el MAPPAC [23, 25] para el caso no-relativista y el RELAC [27], que representa la generalización relativista; además, constituye uno de los módulos fundamentales

²Hasta ahora los métodos expuestos para la determinación de la estructura atómica están basados en una descripción no-relativista. Aquí, por necesidades en la exposición se ha hecho una mención a la situación relativista, que, sin embargo, será tratada en el apartado 2.1.7.

de HULLAC [28], un código integrado para el cálculo de la estructura atómica y secciones eficaces de procesos atómicos colisionales y radiativos, al que dedicaremos algunas líneas más adelante. Asimismo, debido a las características antes comentadas, este modelo sigue empleándose en la actualidad para el cálculo de magnitudes atómicas de iones en configuraciones excitadas y también como precursor de otras ideas de potenciales analíticos.

Una segunda propuesta que también ha cosechado grandes éxitos es el potencial paramétrico de Rogers, presentado inicialmente en [29] y mejorado en [30]. Se trata, al igual que el caso anterior, de un potencial cuyos parámetros dependen de la capa considerada y que, por tanto, permite resolver en principio cualquier clase de configuración excitada.

Para discutir este potencial resulta conveniente definir una configuración electrónica a partir de dos componentes. La primera de ellas se denomina *configuración padre*, que está constituida por todos los electrones de la configuración excepto uno. El electrón excluido define la segunda componente de la configuración o *electrón móvil*. De esta forma, la configuración padre determina el potencial efectivo en todas las subcapas permitidas para el electrón móvil, pudiendo ocupar éste un orbital ligado o pertenecer incluso al continuo.

El potencial efectivo para todas las subcapas permitidas al electrón móvil se construye introduciendo un término tipo Yukawa para cada capa ocupada en la configuración padre. La expresión del mismo es

$$V_k(r) = -\frac{1}{r} \left(Z - \nu + \sum_{n=1}^{n'} w_n e^{-\alpha_n r} \right), \quad (2.117)$$

donde w_n es el número de electrones en la capa con número cuántico principal n , n' el valor máximo de n en la configuración padre, $\nu = \sum_{n=1}^{n'} w_n$ es el número de electrones en el ion padre y α_n el parámetro de apantallamiento para los electrones en la capa n .

El método para obtener los parámetros del potencial depende de si el ion se encuentra en la configuración fundamental o en alguna excitada. Asimismo, las configuraciones excitadas se clasifican en dos tipos diferentes: (i) excitaciones dentro de la capa de valencia de la configuración padre fundamental y (ii) excitaciones que implican una redistribución de la ocupación de la capa. Los autores proponen una técnica distinta para el cálculo de los parámetros del potencial en cada tipo de excitación que, en los dos casos, depende en última instancia de los parámetros obtenidos para la configuración fundamental. En resumen, los parámetros se van obteniendo por series isoelectrónicas, comenzado por el ion de dos electrones, y resolviendo iterativamente una ecuación de Dirac para obtener los parámetros que a su vez permitan reproducir las energías de ionización experimentales. En cualquier caso, convendría consultar la bibliografía para conocer los detalles del procedimiento.

Este modelo fue implementado por los autores en OPAL [31, 32], un código numérico ampliamente reconocido y que ha sido extensamente utilizado con éxito para calcular opacidades en plasmas de interés astrofísico.

La generalización del potencial de Rogers para la situación relativista fue llevada a cabo hace ya algún tiempo por Mabong *et al.* [33].

Finalmente, hay que decir que dentro de nuestro grupo de investigación se han desarrollado diversos modelos de potenciales analíticos que abarcan un amplio conjunto de situaciones: iones aislados en estado fundamental [21, 34, 35], iones aislados en estados excitados [22, 36] e iones inmersos en plasmas [37, 38], siempre en situación relativista. No obstante, dado que el conjunto de estos modelos constituye el bloque de cálculo de la estructura atómica del modelo cinético desarrollado en este trabajo, dejaremos su exposición para un capítulo posterior.

Otra alternativa, ya antigua, pero todavía utilizada en física de plasmas y astrofísica, es el denominado *modelo hidrogenoide apantallado* (SHM). Este modelo es útil cuando no se precisan datos atómicos de gran calidad, ya que aunque permite calcular con desviaciones aceptables los niveles energéticos, con otras propiedades atómicas sus resultados no son tan satisfactorios. En este modelo, el átomo multielectrónico se reinterpreta como si fuera un átomo de un electrón. Así, en el momento de calcular las energías y los orbitales monoeléctricos, en virtud de cuál sea el orbital que ocupa un electrón dado, se considera que éste siente un potencial formalmente idéntico al de un átomo de un sólo electrón, pero evaluado con una carga efectiva que contempla los efectos del apantallamiento de la carga nuclear por parte de los electrones más internos y un término corrector debido al apantallamiento externo, esto es,

$$V_k(r) = -\frac{Q_k}{r} + A_k, \quad (2.118)$$

donde k hace referencia al conjunto de números cuánticos característico de cada orbital monoeléctrico. Las expresiones que permiten calcular Q_k y A_k en los distintos SHM que pueden encontrarse en la literatura son muy parecidas entre sí y casi siempre dependen de un conjunto denominado *constantes de apantallamiento*, $\sigma(k, k')$, donde cada una de ellas vendría a dar cuenta del apantallamiento que sufriría un electrón en el orbital k debido a otro localizado en el orbital k' . Al plantear el problema en términos de un potencial hidrogenoide, las funciones de onda asociadas a cada orbital, así como los autovalores correspondientes se calculan de forma analítica, ya que como es sabido tanto la ecuación de Schrödinger como la de Dirac son resolubles de forma exacta para el átomo de hidrógeno. En consecuencia, a costa de perder exactitud, el algoritmo de un SHM es extraordinariamente rápido.

Quizá el SHM más usado en el contexto de la física de plasmas haya sido el propuesto por More [39], cuya estructura energética sólo distingue capas ($k \equiv n$); los modelos de Perrot [40] y Faussurier *et al.* [41] incluyen desdoblamiento en subcapas ($k \equiv nl$). Otros modelos, como el de Nikiforov *et al.* [42] y uno desarrollado en el seno de nuestro grupo de investigación [43, 44], difieren de los anteriores en que no utilizan un conjunto de constantes para la evaluación de las cargas y el apantallamiento externo y además proporcionan una estructura de niveles relativista ($k \equiv nlj$).

2.1.7 Efectos relativistas

La teoría expuesta en las secciones precedentes ha estado basada fundamentalmente en una mecánica cuántica no-relativista y sólo en el momento de tratar las correcciones al campo central, hablamos de un término perturbativo al que puede atribuirse un origen relativista, la interacción espín-órbita. Sin embargo, aunque la aproximación no-relativista es aceptable para el estudio de átomos ligeros, incluso en estos casos, los efectos relativistas deben ser considerados si se pretende que el espectro atómico procedente de un cálculo teórico presente un acuerdo razonable con las medidas experimentales. Además, al estudiar iones pesados o sistemas muy ionizados la importancia de los efectos relativistas aumenta de forma significativa. Por tanto, cuando se piensa en desarrollar un método computacional general, con la intención de que sea aplicable a una gran variedad de sistemas, es esencial tener en cuenta estos efectos de forma más rigurosa.

Existe una cierta ambigüedad a la hora de definir qué es un *efecto relativista*, considerado en principio como toda aquella contribución no incluida en el tratamiento no-relativista y que a la vez no tenga su origen en la teoría cuántica de campos. Para evitar estas controversias adoptaremos aquí el mismo criterio expresado en [45] y consideraremos que un efecto particular es relativista si procede de alguna de las diferencias existentes entre la ecuación de Schrödinger y la ecuación de Dirac para un sistema dado.

En este contexto, el hamiltoniano del sistema del átomo de N -electrones se escribe como

$$H = \sum_{i=1}^N h_{D,i} + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}. \quad (2.119)$$

La diferencia respecto al hamiltoniano (2.2) radica en que el hamiltoniano de partícula independiente $h_{D,i}$ es ahora el hamiltoniano de Dirac,

$$h_{D,i} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + c^2\beta - \frac{Z}{r_i}. \quad (2.120)$$

En la ecuación anterior, β es una matriz cuadrada y $\boldsymbol{\alpha} \equiv (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ es un vector de tres componentes, siendo cada una de ellas también una matriz de las mismas dimensiones que β . De acuerdo con la teoría desarrollada por Dirac, las matrices de este conjunto deben anticonmutar y esto sólo será posible si son al menos de dimensión 4×4 [46]. No existe una única representación de las *matrices de Dirac*, aunque una elección muy extendida y particularmente útil para estudiar el límite no-relativista es la que se expone a continuación,

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma_k \\ \sigma_k & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad k \equiv x, y, z, \quad (2.121)$$

donde las σ_k son las matrices de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.122)$$

mientras que la matriz β viene dada por

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (2.123)$$

siendo

$$\mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.124)$$

Según esta formulación, la función de onda Ψ solución de la ecuación $H\Psi = E\Psi$ será un *espinor* de 4 componentes.

De forma análoga a la situación no-relativista, el estudio del átomo multielectrónico relativista también puede abordarse siguiendo, bien una aproximación de campo central, en cuyo caso conviene reescribir el hamiltoniano (2.119) de la forma

$$H = H_0 + H_{ee}, \quad (2.125a)$$

$$H_0 = \sum_{i=1}^N [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + c^2\beta + V(r_i)], \quad (2.125b)$$

$$H_{ee} = \sum_{i=1}^N \left[-V(r_i) - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.125c)$$

o bien un método Hartree-Fock, en el que el problema se formularía como

$$H = H_1 + H_2, \quad (2.126a)$$

$$H_1 = \sum_{i=1}^N c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + c^2\beta - \frac{Z}{r_i}, \quad (2.126b)$$

$$H_2 = \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}. \quad (2.126c)$$

Por otro lado, independientemente del método elegido para tratar el problema, siempre será necesario encontrar un conjunto de operadores que conmuten, en este caso, con h_D (prescindimos momentáneamente del subíndice i) y que permitan definir una forma funcional adecuada para los orbitales monoeléctronicos. En este sentido, a diferencia de lo que ocurría en la situación no-relativista, ninguna componente de \mathbf{l} , ni tampoco \mathbf{l}^2 conmutan con el hamiltoniano de Dirac [15, 45, 46], esto es,

$$[h_D, \mathbf{l}^2] \neq 0, \quad [h_D, \mathbf{l}] \neq 0. \quad (2.127)$$

También puede demostrarse

$$[h_D, \mathbf{s}^2] = 0, \quad [h_D, \mathbf{s}] \neq 0, \quad (2.128)$$

asimismo,

$$[h_D, \mathbf{j}] = 0. \quad (2.129)$$

La conclusión que puede extraerse de estas relaciones de conmutación es que ahora existe una interacción que acopla el momento angular orbital con el de espín, e impide la separación de sus variables asociadas. En consecuencia, es imposible encontrar orbitales monoeléctricos que sean simultáneamente autofunciones de los operadores h_D , \mathbf{l}^2 , \mathbf{s}^2 , l_z y s_z , pero sí del conjunto h_D , \mathbf{j}^2 y j_z . Este tipo de orbitales, ψ_{nljm_j} , son funciones de cuatro componentes y se conocen como *espinores de Dirac monoeléctricos*³,

$$\psi_{nljm_j}(q) = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nlj}(r)\Omega_{ljm_j}(\theta, \varphi) \\ iQ_{nlj}(r)\Omega_{l'jm_j}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}, \quad (2.130)$$

donde $\Omega_{lsjm_j}(\theta, \varphi)$ es un bi-espinor esférico definido a través de la relación

$$\Omega_{lsjm_j}(\theta, \varphi) = \sum_{m_l, m_s} \langle l\frac{1}{2}m_l m_s | l\frac{1}{2}jm_j \rangle Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \chi_{\frac{1}{2}m_s}, \quad (2.131)$$

siendo $\langle l\frac{1}{2}m_l m_s | l\frac{1}{2}jm_j \rangle$ el conjunto de coeficientes de Clebsch-Gordon correspondientes a la suma de los momentos angulares \mathbf{l} y \mathbf{s} . En la ecuación (2.130) se ha introducido también

$$l' = l \pm 1, \quad \text{para } j = l \pm \frac{1}{2}. \quad (2.132)$$

En la teoría relativista se define el número cuántico κ como

$$\kappa = (l - j)(2j + 1), \quad (2.133)$$

de tal forma que es habitual expresar los espinores monoeléctricos de la manera siguiente

$$\psi_{n\kappa m_j}(q) = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r)\Omega_{ljm_j}(\theta, \varphi) \\ iQ_{n\kappa}(r)\Omega_{l'jm_j}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}. \quad (2.134)$$

Al sustituir estos orbitales en la ecuación de Dirac monoeléctrica resultante de la aplicación de la aproximación de campo central [45] o de la utilización de un método autoconsistente [46–48], se llega a un sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden acopladas para las funciones $P_{n\kappa}(r)$ y $Q_{n\kappa}(r)$. La resolución numérica de este sistema, que tiene su análogo no-relativista en la ecuación de Schrödinger radial (2.19) o en la ecuación HF monoeléctrica (2.104), permite la construcción de los espinores $\psi_{n\kappa m_j}$.

Como las funciones $\psi_{n\kappa m_j}$ son autofunciones del momento angular total individual \mathbf{j} , es lógico que al llevar a cabo un cálculo atómico relativista se trabaje en un esquema equivalente al acoplamiento jj . Al igual que entonces, la función de onda del sistema de N -electrones vendrá dada por un determinante de Slater

$$\Psi_{Djj} = |n_1\kappa_1 m_{j_1}, \dots, n_N\kappa_N m_{j_N}\rangle, \quad (2.135)$$

³Del conjunto de números cuánticos utilizado para etiquetar el orbital, sólo j y m_j son buenos números cuánticos, el resto se mantienen por conservar el referente no-relativista y cumplen una función meramente descriptiva.

donde la diferencia respecto al determinante (2.59) radica en que ahora cada uno de los elementos es un espinor de cuatro componentes $\psi_{n_i \kappa_i m_{j_i}}$. De la misma manera, los estados del átomo pueden generarse de acuerdo con las configuraciones electrónicas del tipo [16]

$$c_{jj} \equiv (n_1 l_1)_{j_1}^{w_1} (n_2 l_2)_{j_2}^{w_2} \cdots (n_\alpha l_\alpha)_{j_\alpha}^{w_\alpha}, \quad \sum_{i=1}^{\alpha} w_i = N, \quad (2.136)$$

existiendo también g_{jj} , ecuación (2.61), determinantes Ψ_{Djj} asociados con la misma configuración c_{jj} . A partir de aquí la determinación de la estructura energética es idéntica, al menos desde el punto de vista formal, al caso no-relativista, por lo que resulta de aplicación lo expuesto en secciones anteriores. La exposición completa de la teoría relacionada, así como los aspectos numéricos y computacionales del cálculo relativista están fuera del alcance de este trabajo y deberían consultarse en la bibliografía [46].

Según hemos visto, para incluir los efectos relativistas de manera rigurosa es necesario resolver la ecuación de Dirac para el átomo multielectrónico. No obstante, ésta es una tarea difícil y muy costosa desde el punto de vista computacional, que aún en la actualidad lleva aparejada tiempos de cálculo bastante elevados. Afortunadamente, en muchos problemas de interés, especialmente en aquéllos en los que intervienen los electrones de las capas más externas, basta con seguir una vía alternativa consistente en añadir a la ecuación de Schrödinger las correcciones relativistas de más bajo orden. Estas correcciones se deducen después de llevar a cabo un desarrollo de la ecuación relativista en serie de potencias de $1/c$. Esta manera de tratar el problema se conoce como *aproximación semi-relativista*. Se toma como punto de partida el hamiltoniano (2.119) y entonces se aproxima el hamiltoniano de partícula independiente $h_{D,i}$ por el correspondiente hamiltoniano no-relativista más correcciones relativistas. El hamiltoniano del sistema multielectrónico quedaría de la forma siguiente

$$H_{sr} = \sum_{i=1}^N h_i + \sum_{i < j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.137)$$

donde

$$h_i = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + h_{mc,i} + h_{D,i} + h_{so,i}. \quad (2.138)$$

Aquí $h_{mc,i}$ es el término de *corrección de masa* o la corrección relativista a la energía cinética,

$$h_{mc,i} = -\frac{\mathbf{p}_i^4}{8c^2}, \quad (2.139)$$

$h_{Dar,i}$ es el *término de Darwin* a un cuerpo, está relacionado con la ilocalizabilidad relativista del electrón [16] y viene dado por

$$h_{Dar,i} = -\frac{Z}{8c^2} \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_i} \right) = \frac{\pi Z}{2c^2} \delta(\mathbf{r}_i), \quad (2.140)$$

finalmente $h_{so,i}$ es la corrección de espín-órbita⁴,

$$h_{so,i} = \frac{Z}{2c^2} \frac{1}{r_i^3} \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i. \quad (2.141)$$

Los términos $h_{mc,i}$ y $h_{Dar,i}$ son independientes del espín y además conmutan con \mathbf{l}_i y l_z , por lo que darían lugar sólo a un desplazamiento y no a un desdoblamiento de los niveles no-relativistas. La interacción espín-órbita, como ya sabemos, conmuta con el momento angular \mathbf{j}_i , y provocará un desdoblamiento (ruptura de la degeneración) de los niveles no-relativistas. Según esto, el esquema natural de trabajo de la aproximación semi-relativista es el acoplamiento jj .

No obstante, en el contexto relativista es posible afinar aún más para mejorar la descripción del átomo multielectrónico. Hasta ahora la interacción electrón-electrón ha venido siempre dada por el potencial instantáneo de Coulomb $1/r_{ij}$, sin embargo, este término es insuficiente para describir dicha interacción en el caso relativista. En primer lugar, la repulsión coulombiana no es un invariante de Lorentz y, por tanto, no es apropiada para una teoría relativista. En segundo lugar, desprecia las propiedades magnéticas del electrón, introducidas a través del movimiento orbital y de espín. Finalmente, la velocidad de la luz es finita en un modelo relativista y en consecuencia es de esperar que aparezcan de algún modo efectos de retardo.

Para tener en cuenta las interacciones magnéticas y los efectos de retardo hasta el orden $1/c^2$, se introduce la *corrección de Breit* [45, 46], dada por

$$B_{ij} = -\frac{1}{2r_{ij}} \left[(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j) + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right]. \quad (2.142)$$

El hamiltoniano del átomo de N -electrones se expresaría entonces como

$$H = \sum_{i=1}^N h_{D,i} + \sum_{i<j=1}^N \left(\frac{1}{r_{ij}} + B_{ij} \right). \quad (2.143)$$

Cuando los efectos electrodinámicos no son importantes, este hamiltoniano, a pesar de no ser un invariante de Lorentz, conduce a unos resultados en buena concordancia con datos experimentales. Conviene, no obstante, añadir que, de forma similar a lo que ocurría en la aproximación semi-relativista, para reducir el coste computacional asociado a la resolución del hamiltoniano (2.143), pero al mismo tiempo incluir de forma aproximada las interacciones magnéticas y los efectos de retardo, la corrección de Breit se desarrolla en serie de potencias para llegar al llamado *hamiltoniano de Breit-Pauli* [45], válido en un cálculo perturbativo hasta primer orden y que viene dado por

$$H_{BP} = H_{nr} + H_{rs} + H_{fs}, \quad (2.144)$$

donde H_{nr} es el hamiltoniano multielectrónico no-relativista. El operador de *desplazamiento relativista* H_{rs} conmuta con \mathbf{L} y \mathbf{S} , por lo que daría lugar sólo a un desplazamiento de los niveles

⁴La expresión dada aquí para el término espín-órbita no coincide con la expresión (2.38). La razón es que esta última es realmente una aproximación para el átomo multielectrónico en el contexto del modelo de campo central, que deriva a su vez de la expresión exacta para el átomo monolectrónico [15, 16].

no-relativistas. Este término engloba a su vez varias contribuciones,

$$H_{rs} = H_{mc} + H_{D1} + H_{D2} + H_{oo} + H_{ssc}, \quad (2.145)$$

donde H_{mc} es la corrección de masa sobre todos los electrones,

$$H_{mc} = \sum_{i=1}^N h_{mc,i} = -\frac{1}{8c^2} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^4, \quad (2.146)$$

H_{D1} y H_{D2} son los *términos de Darwin* a uno y dos cuerpos respectivamente,

$$H_{D1} = -\frac{Z}{8c^2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \frac{1}{r_i}, \quad (2.147)$$

$$H_{D2} = \frac{1}{4c^2} \sum_{i<j=1}^N \nabla_i^2 \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.148)$$

H_{ssc} es el término de *contacto espín-espín*,

$$H_{ssc} = -\frac{8\pi}{3c^2} \sum_{i<j=1}^N (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) \delta(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j), \quad (2.149)$$

y, finalmente, H_{oo} es el término *órbita-órbita*,

$$H_{oo} = -\frac{1}{2c^2} \sum_{i<j=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{p}_i) \mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} \right]. \quad (2.150)$$

El operador de *estructura fina* incluye las interacciones entre el momento angular orbital y de espín de todos los electrones. En consecuencia, no conmuta ni con \mathbf{L} ni con \mathbf{S} , pero sí con el momento angular total \mathbf{J} y dará lugar a una ruptura de la degeneración en la estructura energética no-relativista. El operador de estructura fina viene dado por

$$H_{fs} = H_{so} + H_{soo} + H_{ss}. \quad (2.151)$$

Aquí H_{so} es el término de *espín-órbita*,

$$H_{so} = \frac{Z}{2c^2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i^3} \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (2.152)$$

H_{soo} es el término de *espín-otra-órbita*, que da cuenta de la interacción del espín de un electrón con el momento angular orbital de otro electrón,

$$H_{soo} = -\frac{1}{2c^2} \sum_{i<j=1}^N \frac{\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_i}{r_{ij}^3} (\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j), \quad (2.153)$$

y H_{ss} es el término *espín-espín*,

$$H_{ss} = \frac{1}{c^2} \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3 \frac{(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right]. \quad (2.154)$$

De acuerdo con lo que hemos comentado, resulta conveniente diagonalizar el hamiltoniano de Breit-Pauli en una base de autofunciones de los operadores \mathbf{J} y J_z .

2.1.8 Mejoras en la obtención de la estructura energética

Nos ocuparemos aquí de los procedimientos que se han desarrollado para mejorar los resultados obtenidos por el método HF convencional. Gracias a ellos es posible lograr funciones de onda y valores de energía más cercanos a la solución exacta del problema en el sentido comentado anteriormente, por lo que, representan también una manera de incluir los efectos de correlación electrónica en el cálculo energético.

Ya hemos apuntado en varias ocasiones que los determinantes de Slater obtenidos a partir de la aproximación de campo central o siguiendo un método HF, no son autofunciones del hamiltoniano total no-relativista del átomo multielectrónico. Sin embargo, las funciones del tipo $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ obtenidas como combinaciones lineales de determinantes asociados a una misma configuración electrónica (que ya fueron descritas al tratar el acoplamiento LS) son mejores aproximaciones a las autofunciones exactas que los propios determinantes y por supuesto dan lugar a una estructura energética más realista. Recordemos que para la obtención de estos niveles energéticos, si partimos de una aproximación de campo central, es necesario llevar a cabo el cálculo perturbativo que describimos en un apartado anterior, mientras que si se ha utilizado un método HF, carece de sentido hablar de perturbación, ya que la repulsión electrónica se incluye de forma explícita en el modelo.

Es frecuente que a estas funciones, asociadas a los distintos términos LS procedentes de una misma configuración electrónica, se les llame también *funciones de estado configuracionales* o, simplemente, de la expresión inglesa abreviada, CSFs [45]. Una CSF representa una aproximación *monoconfiguracional*.

Asimismo, si trasladamos el razonamiento que acaba de exponerse al contexto relativista, resulta evidente que en este caso las CSFs no serán más que funciones del tipo $|\eta j_1 \dots j_N J M_J\rangle$, asociadas a los diferentes niveles J procedentes de una misma configuración relativista y que se obtienen como combinaciones lineales de determinantes de Slater relativistas.

Aún pueden lograrse mejores energías y funciones de onda trabajando con combinaciones lineales de CSFs. En la teoría no-relativista tendríamos

$$|\gamma LSM_L M_S\rangle = \sum_{i=1}^M c_i |\gamma_i LSM_L M_S\rangle. \quad (2.155)$$

En esta descripción, que representa una aproximación *multiconfiguracional*, se mezclan estados con los mismos valores de L y S , pero pertenecientes a distintas configuraciones electrónicas. Las funciones así obtenidas se denominan *funciones de estado atómico* o también ASFs [45]. Los coeficientes del desarrollo se conocen como *coeficientes de la mezcla*.

De forma similar, en un modelo relativista, una ASF se construye a partir de una combinación lineal que incluye CSFs con el mismo valor de J , pero asociadas a configuraciones relativistas

distintas,

$$|\eta JM_J\rangle = \sum_{i=1}^M c_i |\eta_i JM_J\rangle. \quad (2.156)$$

Interacción de configuraciones

Vamos a describir ahora el procedimiento para obtención de funciones de onda mejoradas conocido como *interacción de configuraciones* (CI). Supongamos conocido un conjunto de CSFs $|\gamma_i LS\rangle$ y que queremos averiguar los coeficientes de mezcla correspondientes a un cálculo energético llevado a cabo con una ASF. En la mayoría de los casos, las CSFs son ortonormales, así que la condición de normalización implica

$$\langle \gamma LS | \gamma LS \rangle = \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1. \quad (2.157)$$

Si se aplica ahora el principio variacional, para exigir que $\langle \gamma LS | H | \gamma LS \rangle$ sea estacionario respecto a las variaciones de los coeficientes del desarrollo (2.155), cumpliéndose además la condición de normalización para la ASF, se llega a la siguiente ecuación de autovalores,

$$\sum_{j=1}^M H_{ij} c_j = E c_i, \quad i = 1, \dots, M, \quad (2.158)$$

donde $H_{ij} = \langle \gamma_i LS | H | \gamma_j LS \rangle$. Como la matriz hamiltoniana es hermítica, la ecuación de autovalores tiene M soluciones ortonormales,

$$\mathbf{c}_k = (c_{1k}, \dots, c_{Mk})^t, \quad k = 1, \dots, M, \quad \mathbf{c}_k^t \mathbf{c}_l = \delta_{kl}, \quad (2.159)$$

con los correspondientes autovalores (degenerados o no),

$$E_1 \leq \dots \leq E_k \leq \dots \leq E_M. \quad (2.160)$$

Si en cualquiera de los procedimientos descritos hasta ahora, se había restringido el estudio de H al subespacio asociado a una única configuración electrónica, el problema de diagonalización planteado aquí equivale a extender el análisis al espacio de funciones asociado a M configuraciones diferentes. La matriz hamiltoniana tendrá una estructura de bloques, donde los bloques diagonales son idénticos a las matrices que aparecen cuando se trabaja separadamente con cada configuración. Los bloques no-diagonales son los que introducen la interacción entre diferentes configuraciones. Si tenemos en cuenta las propiedades de ortogonalidad de las CSFs, sólo existirán elementos de interacción no nulos entre configuraciones que den lugar a términos LS comunes, así, por ejemplo, las configuraciones sp y sd no interaccionan. Por esta razón, las ASFs se contruyen ya con estados pertenecientes a distintas configuraciones, pero asociados al mismo término LS .

Como es de suponer, cada uno de los autovalores resultantes de la diagonalización se identifica con un nuevo nivel de energía, asociado a su vez con una ASF, de acuerdo con (2.155). Hay que

decir además que si bien la CI proporciona funciones de onda mejoradas y nuevos valores de las energías, no rompe la degeneración correspondiente a cada término LS .

Al margen de las reglas de selección derivadas de las propiedades de simetría de las CSFs, los efectos de interacción entre configuraciones son importantes cuando la magnitud de los elementos de los bloques no-diagonales es grande en comparación con las diferencias de energía entre los niveles existentes antes de incluir CI [16]. Esto suele suceder entre configuraciones pertenecientes a una misma capa o *complejo*, tales como $3s^23p^w - 3p^{w+2}$ o $3s3p^{w+1} - 3p^{w+2}$. Los efectos también son significativos entre miembros de una serie Rydberg, $nl^w n' l' - nl^w n'' l'$.

Cuando en un cálculo energético se incluye CI carece de rigor asociar cualquier energía resultante con una etiqueta donde se especifique la configuración electrónica, ya que lo que se pone de manifiesto precisamente con la CI es que los estados del átomo no pueden asignarse, en general, a una configuración electrónica pura. No obstante, al llevar a cabo el cálculo suele ocurrir que el coeficiente asociado a una CSF en la mezcla es mayor que el resto de coeficientes y se utiliza entonces la etiqueta del término LS predominante para designar también el nivel obtenido mediante CI.

Aunque aquí se haya expuesto el procedimiento de interacción de configuraciones utilizando funciones no-relativistas, el formalismo se aplica de idéntica forma en la situación relativista, donde las CSFs vendrían dadas por los estados $|\eta j_1 \dots j_N J M_J\rangle$ y construyendo las ASFs de acuerdo con (2.156).

Método de Hartree-Fock multiconfiguracional

Si como función prueba para un posterior cálculo variacional se utilizara una ASF como la indicada en (2.155) o en (2.156), la condición de estacionariedad respecto a las variaciones de los orbitales monoelectrónicos conduciría a un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas parecidas a las de HF. Pero además, estas ecuaciones estarían también acopladas al problema de autovalores (problema de CI) derivado del principio variacional aplicado sobre los coeficientes de mezcla. En este caso, estos dos problemas deben resolverse de forma simultánea. Cuando se trabaja sobre una ASF no-relativista, este procedimiento se conoce como *método de Hartree-Fock multiconfiguracional* (MCHF) y aunque no es complicado deducir las ecuaciones fundamentales del mismo, el proceso es algo engorroso y además escapa de los objetivos de este trabajo. Si se es aún más ambicioso y se utilizan ASFs relativistas, el cálculo se llevaría a cabo siguiendo un *método de Dirac-Fock multiconfiguracional* (MCDF). En este caso, las ecuaciones son todavía más complicadas y el cálculo requiere de un esfuerzo computacional mucho mayor. Los detalles de ambos métodos, así como los aspectos computacionales relacionados se pueden consultar en la bibliografía [45, 47, 48].

No obstante, a modo descriptivo, los pasos a dar en un cálculo energético utilizando un método MCHF/MCDF son los siguientes:

- Se inicializan los orbitales monoeléctricos, se construyen las CSFs y se seleccionan las configuraciones que participarán en cada ASF.
- Se resuelve el problema de autovalores y se obtienen los coeficientes de mezcla.
- Se resuelven las ecuaciones HF, se mejoran los orbitales y se plantea un nuevo problema de autovalores. El proceso se repite hasta alcanzar la convergencia deseada sobre los coeficientes de mezcla. Según esto, en cada paso del procedimiento MCHF/MCDF hay que resolver un problema de CI.

2.1.9 Transiciones radiativas

Cuando un átomo se encuentra en el seno de un campo de radiación, debido a la interacción del átomo con la radiación electromagnética, éste puede experimentar una transición desde un estado inicial a de energía E_a a otro estado b de energía E_b a través de la absorción o la emisión de un fotón de energía

$$h\nu_{ab} = |E_a - E_b|. \quad (2.161)$$

Dependiendo de las propiedades de los estados inicial y final, las transiciones radiativas pueden clasificarse en transiciones ligado-ligado, ligado-libre y libre-libre.

Transiciones ligado-ligado

La probabilidad por unidad de tiempo de que un átomo sufra una transición desde un estado ligado a a un estado ligado b mediante la absorción de un fotón de energía $h\nu_{ab}$ viene dada por

$$\begin{aligned} W_{ab} = & \frac{4\alpha^3(h\nu_{ab})^3 n_{ph}}{3} |\langle b | \mathbf{D} | a \rangle|^2 \\ & + \frac{4\alpha^3(h\nu_{ab})^3 n_{ph}}{3} |\langle b | \mathbf{M} | a \rangle|^2 \\ & + \frac{\alpha^5(h\nu_{ab})^5 n_{ph}}{10} |\langle b | \mathbf{Q} | a \rangle|^2 + \dots, \end{aligned} \quad (2.162)$$

donde \mathbf{D} es el operador momento dipolar eléctrico, \mathbf{M} es el operador momento dipolar magnético y \mathbf{Q} el operador momento cuadrupolar eléctrico. Asimismo, n_{ph} representa el número de fotones con energía $h\nu_{ab}$ existentes en el campo de radiación.

La probabilidad por unidad de tiempo de emisión de un fotón de energía $h\nu_{ab}$ debida a la transición inducida por el campo desde el estado b al estado a resulta ser igual a la de absorción, $W_{ab} = W_{ba}$.

Existe aún una probabilidad de emisión espontánea (no inducida) que se expresa como

$$\begin{aligned} W_{ba}^s = & \frac{4\alpha^3(h\nu_{ab})^3}{3} |\langle b | \mathbf{D} | a \rangle|^2 \\ & + \frac{4\alpha^3(h\nu_{ab})^3}{3} |\langle b | \mathbf{M} | a \rangle|^2 \\ & + \frac{\alpha^5(h\nu_{ab})^5}{10} |\langle b | \mathbf{Q} | a \rangle|^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.163)$$

La probabilidad de emisión espontánea está relacionada con una magnitud f_{ba} llamada *fuerza de oscilador* a través de

$$W_{ba}^s = 2(h\nu_{ab})^2 \alpha^3 |f_{ba}|. \quad (2.164)$$

También es posible establecer una relación el ritmo de emisión espontánea y los de absorción y emisión estimulada, por lo que la determinación de las fuerzas de oscilador resultan una cuestión fundamental en espectroscopía atómica. La teoría al respecto es sumamente extensa y no tiene cabida en este apartado, por lo que se recomienda acudir a textos específicos de la bibliografía [16,17]. No obstante, los detalles acerca de este tema directamente relacionados con el modelo que se presenta en esta tesis serán convenientemente tratados en el capítulo 3.

Transiciones ligado-libre y libre-libre

Por transiciones ligado-libre entendemos aquéllas en las que, como consecuencia de su interacción con el campo de radiación, uno de los electrones ligados del átomo deja de serlo y pasa al continuo (se convierte en un electrón libre) o viceversa, un electrón libre es capturado por el átomo y queda ligado al mismo. Son mecanismos ligado-libre, la fotoionización, la recombinación estimulada y la recombinación radiativa. Su descripción detallada es aún más compleja que la de los procesos ligado-ligado, precisamente por la presencia del electrón libre, que obliga a trabajar con funciones de onda de estados electrónicos del continuo.

Los procesos libre-libre engloban todos aquellos mecanismos de interacción de un electrón libre con el campo de radiación, normalmente en presencia de un átomo. El *bremssstrahlung* y el *bremssstrahlung inverso* pertenecen a este tipo de procesos.

El marco teórico relacionado con los mecanismos radiativos que involucran estados del continuo puede consultarse en la bibliografía especializada [16,17]. En este trabajo, volveremos a hablar brevemente de este tema cuando nos ocupemos de la descripción de los procesos atómicos en plasmas en 2.2, mientras que, al igual que en los procesos ligado-ligado, los detalles que afectan al desarrollo del modelo objeto de esta tesis serán expuestos en el capítulo 3.

2.1.10 Efectos de plasma

Todo lo que hemos comentado en las secciones anteriores es aplicable para la determinación de la estructura energética de átomos o iones multielectrónicos en situación aislada. Sin embargo, tal y como comentamos en 1.3, en un plasma no ideal será necesario tener en cuenta las interacciones del ion considerado con la nube de electrones libres y con el resto de iones.

En principio, para obtener una descripción completa de las interacciones de un ion inmerso en un plasma con todas las demás partículas, habría que resolver unas 10^{23} ecuaciones de Schrödinger/Dirac acopladas con 10^{23} funciones de onda desconocidas. Evidentemente este problema es

imposible de resolver y se hace necesario recurrir a modelos aproximados para analizar la influencia del plasma sobre el potencial atómico.

Tal influencia está estrechamente ligada a la densidad del plasma, de tal forma, que, en función de cuál sea su valor, es posible distinguir cualitativamente varios tipos de comportamiento [49]. A bajas densidades la distancia entre iones es grande en comparación con sus radios medios y, por tanto, la interacción entre ellos es débil. Los efectos del plasma sobre las magnitudes atómicas son pequeños, con la excepción quizá de los estados excitados más externos, los cuales, por otro lado, apenas estarán poblados. Según la definición (1.27) del parámetro de acoplamiento Γ , en este caso, $\Gamma \ll 1$, y los iones pueden tratarse como si estuviesen en situación aislada. Al aumentar la densidad, los pozos de potencial de iones cercanos comienzan a solapar, lo que se traduce en un apantallamiento efectivo del potencial por parte de los electrones libres. No obstante, podría decirse que los iones todavía conservan su individualidad. A densidades más altas, los iones vecinos comparten mediante enlace covalente la densidad de carga asociada a los electrones ligados más alejados del núcleo. Los electrones más internos aún permanecen ligados al pozo de potencial de cada ion. En esta situación se habla de un comportamiento *cuasi-molecular*. Si la densidad continúa aumentando, son los electrones internos los que sienten la influencia de un grupo de iones vecinos. Por último, a densidades muy altas, cuando $\Gamma \gg 1$, los pozos de potencial están demasiado juntos para admitir estados ligados y entonces se forma un gas homogéneo de electrones de energía negativa.

Las diferencias entre los modelos que encontramos en la literatura para incluir los efectos de plasma en el potencial atómico están principalmente relacionadas con las siguientes cuestiones. La primera es el nivel de descripción con el que se trata a los electrones ligados. Esto es, en unos casos se utiliza el aparato completo de la mecánica cuántica y en otros se acude a métodos estadísticos. Algo similar ocurre con los electrones libres, ¿reciben un riguroso tratamiento mecanocuántico o –como suele ser habitual– se describen estadísticamente? y, en este último caso, ¿se utiliza la estadística de Maxwell-Boltzmann o la de Fermi-Dirac? Finalmente, también es importante saber a partir de qué distancia el modelo en cuestión considera los iones como objetos separados y trata en detalle la interacción entre ellos, o bien, a partir de qué distancia el entorno de un ion dado se considera un fondo continuo descrito de forma estadística. Para ilustrar este tipo de cuestiones describiremos a continuación algunos de los modelos más sencillos y conocidos para incluir los efectos de plasmas en diferentes regiones de temperatura y densidad.

El modelo de Debye-Hückel

Inicialmente, el modelo de Debye-Hückel (DH) se ideó para estudiar la polarización de las moléculas de disolvente en torno a los iones de las moléculas disociadas en una disolución. Fue más

tarde cuando se puso de manifiesto su utilidad para la descripción del potencial atómico local en plasmas.

Supongamos un ion puntual sin estructura con carga nuclear Z localizado en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. La primera ecuación que debe satisfacer el potencial eléctrico en torno al ion es la ecuación de Poisson,

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = -4\pi \left[\sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_{\zeta}(\mathbf{r}) - n_e(\mathbf{r}) \right], \quad (2.165)$$

donde $N_{\zeta}(\mathbf{r})$ es la densidad de iones con carga ζ y $n_e(\mathbf{r})$ la densidad electrónica. Cuando las distribuciones espaciales de todas las especies iónicas y de los electrones son conocidas, entonces utilizando la ecuación anterior sería posible determinar el potencial $V(\mathbf{r})$.

En segundo lugar, como base de la teoría DH, se asume que tanto iones como electrones siguen las leyes de la estadística de Boltzmann y, por tanto, las distribuciones espaciales vienen dadas por

$$N_{\zeta}(\mathbf{r}) = N_{\zeta} \exp \left[-\frac{V(\mathbf{r})}{T} \right], \quad (2.166a)$$

$$n_e(\mathbf{r}) = n_e \exp \left[+\frac{V(\mathbf{r})}{T} \right]. \quad (2.166b)$$

Aquí N_{ζ} y n_e representan las respectivas *densidades medias* sobre la totalidad del plasma. Este conjunto de ecuaciones nos indica que, conocido el potencial, podríamos calcular la distribución de estados de carga y la densidad electrónica en cualquier punto del interior del plasma.

En principio, insertando (2.166) en (2.165) llegaríamos a una ecuación diferencial para el potencial, a partir de la cual éste podría ser determinado. Sin embargo, este procedimiento conduce a un problema altamente no-lineal, de difícil resolución numérica. Es posible obtener una solución más simple recurriendo a la aproximación

$$\frac{V(\mathbf{r})}{T} \ll 1. \quad (2.167)$$

En esta situación, la energía potencial de un electrón en el campo generado en torno al ion es mucho menor que su energía cinética, representada a través de la temperatura T . De acuerdo con la definición (1.27) esto nos sitúa en la región $\Gamma \ll 1$, correspondiente a los plasmas débilmente acoplados.

Cuando se satisface (2.167), la exponencial en (2.166) puede desarrollarse en serie de potencias. Manteniendo sólo los términos de primer orden, se llega a una expresión linealizada de (2.165) dada por

$$\begin{aligned} \nabla^2 V(\mathbf{r}) &= -4\pi \left\{ \sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_{\zeta} \left[1 - \frac{V(\mathbf{r})}{T} \right] - n_e \left[1 + \frac{V(\mathbf{r})}{T} \right] \right\} \\ &= -4\pi \frac{V(\mathbf{r})}{T} \left(-\sum_{\zeta=0}^Z \zeta^2 N_{\zeta} - n_e \right) \\ &= \frac{4\pi(\bar{Z}^2 + \bar{Z})}{T} n_{ion} V(\mathbf{r}) = \frac{1}{D^2} V(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.168)$$

donde

$$D = \sqrt{\frac{T}{4\pi e^2 n_{ion} (\bar{Z}^2 + \bar{Z})}} \quad (2.169)$$

es la *longitud de apantallamiento de Debye*⁵. Para escribir la segunda igualdad hemos usado la relación $n_e = \sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_{\zeta}$.

Si el potencial tiene simetría esférica, sus derivadas respecto a las coordenadas angulares θ y φ son nulas y entonces la acción del operador laplaciano se reduce a

$$\nabla^2 V(r) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial V}{\partial r} \right). \quad (2.170)$$

Sustituyendo $V(r)$ por su expresión en términos de la función de apantallamiento $S(r)$, esto es, $V(r) = \frac{Ze}{r} S(r)$, la ecuación (2.170) se transforma en

$$\frac{d^2 S}{dr^2} = \frac{1}{D^2} S(r), \quad (2.171)$$

cuya solución, con el comportamiento correcto en $r = 0$ y $r \rightarrow \infty$, es

$$S(r) = e^{-r/D}. \quad (2.172)$$

De esta manera, el *potencial de Debye-Hückel* resulta

$$V(r) = \frac{Z}{r} e^{-r/D}. \quad (2.173)$$

Esta expresión sustituida en (2.166) permite la obtención de las distribuciones espaciales de iones y electrones.

Por otro lado, se define la *esfera de Debye* como aquella esfera de radio D en torno al ion considerado. De acuerdo con (2.173), se interpreta que la influencia del ion central se extiende solamente a aquellos iones en el interior de la esfera de Debye, y viceversa, el ion sólo siente la influencia de los iones pertenecientes a la misma. El número de iones N_D en la esfera de Debye es

$$N_D = \frac{4}{3} \pi D^3 n_{ion} = \left(\frac{D}{R_i} \right)^3, \quad (2.174)$$

siendo R_i el radio de ion esfera, ecuación (1.11).

El radio de Debye decrece conforme la densidad de iones aumenta. Así, a una densidad suficientemente alta ocurrirá $D < R_i$. Lógicamente, en esta región el modelo de DH deja de ser válido, ya que, en promedio, la esfera de Debye contendría menos de un ion y el tratamiento estadístico (2.166) no estaría justificado. La teoría de DH tampoco es válida a pequeñas distancias, cuando $r \leq \frac{Z}{T}$, porque en esta situación es imposible asumir la aproximación (2.167).

En resumen, la teoría de Debye-Hückel es aplicable sólo en plasmas de baja densidad y alta temperatura, $\Gamma \lesssim 0.1$, donde la distancia interatómica promedio es grande y la interacción de un ion con el resto de las partículas del plasma es relativamente débil. Bajo estas condiciones, la estructura electrónica interna del ion no influye sobre las interacciones ion-ion y electrón-ion y éste puede tratarse como un objeto puntual sin estructura interna.

⁵Obsérvese que es una definición distinta de la dada por la expresión (1.23) para λ_D .

El modelo de ion esfera

Bajo la terminología de *modelos de ion esfera* se engloban todos aquellos modelos que asumen neutralidad de carga en el interior de la esfera de radio $R_i = \left(\frac{3}{4\pi n_{ion}}\right)^{1/3}$. En otras palabras, todas estas propuestas consideran un núcleo de carga Z y el mismo número Z de electrones –ligados más libres– dentro del volumen ocupado por el ion esfera. Con esta suposición se asegura que el potencial electrostático y el campo sean exactamente nulos sobre la frontera del ion esfera. Se asume también que las distribuciones de carga de iones y electrones se cancelan mutuamente fuera de estos límites, resultando un potencial y un campo nulos en cualquier punto externo al ion esfera.

Una de las mayores limitaciones de la teoría de DH es que no tiene en cuenta la estructura electrónica interna ni otras propiedades mecanocuánticas del ion. Es adecuado solamente para la determinación de magnitudes medias, como el potencial o la densidad electrónica. Sin embargo, para propósitos espectroscópicos, por ejemplo, es necesaria una descripción más detallada de la estructura interna del ion. El modelo de ion esfera intenta superar este problema resolviendo en detalle la ecuación de Schrödinger o Dirac para los electrones ligados, mientras que los electrones libres son tratados estadísticamente, generalmente siguiendo la teoría de Fermi-Dirac.

Este modelo considera un ion con carga nuclear Z y N electrones ligados, localizado en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ y $\zeta = Z - N$ electrones libres ocupando el resto del volumen del ion esfera. Los efectos de plasma se tienen en cuenta precisamente mediante el confinamiento del ion y los ζ electrones libres al interior de la esfera de radio R_i .

Las ecuaciones básicas del modelo de ion esfera son las siguientes. El potencial total viene dado por

$$V(r) = \begin{cases} V_N(r) + V_{e,b}(r) + V_{e,f}(r) + V_{xc}(r), & \text{si } r < R_i, \\ 0, & \text{si } r \geq R_i. \end{cases} \quad (2.175)$$

Aquí, $V_N(r) = Z/r$ es el potencial nuclear, $V_{e,b}(r)$ y $V_{e,f}(r)$ son los potenciales generados por los electrones ligados y libres, respectivamente. El potencial electrónico total es $V_e(r) = V_{e,b}(r) + V_{e,f}(r)$. El término $V_{xc}(r)$ es el potencial de intercambio, que se añade para determinar con mayor exactitud las energías de nivel y las funciones de onda asociadas a los electrones ligados.

La parte electrónica del potencial debe satisfacer la ecuación de Poisson,

$$\nabla^2 V_{e,b}(r) = 4\pi n_{e,b}(r), \quad (2.176a)$$

$$\nabla^2 V_{e,f}(r) = 4\pi n_{e,f}(r), \quad (2.176b)$$

donde $n_{e,b}(r)$ y $n_{e,f}(r)$ son las densidades locales de electrones ligados y libres.

Para el potencial de intercambio $V_{xc}(r)$ puede usarse, por ejemplo, uno tipo Slater,

$$V_{xc}(r) = \frac{3}{2\pi} [3\pi^2 n_e(r)]^{1/3}, \quad (2.177)$$

con $n_e(r) = n_{e,b}(r) + n_{e,f}(r)$ o cualquier otra propuesta más elaborada, como las que se mencionan en [49].

En el modelo de ion esfera, la ecuación de Poisson se complementa con otras ecuaciones específicas para electrones ligados y libres. Concretamente, para obtener la densidad de electrones ligados, se resuelve la ecuación de Schrödinger –o la de Dirac, en una versión más elaborada– para cada uno de los N electrones ligados. En el caso no-relativista y bajo la aproximación de campo central, el objetivo es encontrar la solución de la ecuación monoeléctronica radial (2.19)

$$-\frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) + V(r)R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl}R_{nl}(r). \quad (2.178)$$

En esta ecuación $V(r)$ es el potencial electrostático total (2.175). Como condición de contorno se exige que la función de onda radial se anule a una distancia infinita del núcleo, $R_{nl}(r) \rightarrow 0$ para $r \rightarrow \infty$ y no que se anule sobre la frontera del ion esfera. De esta manera, por efecto túnel, existe una cierta probabilidad de encontrar un electrón ligado en el exterior del ion esfera. Ésta es una característica importante del modelo, ya que las funciones de ondas de los electrones en orbitales muy excitados pueden extenderse sobre dos o más iones, permitiendo la formación de estados cuasi-moleculares de corta duración.

Tras la obtención de los autovalores ε_{nl} y las autofunciones $R_{nl}(r)$, la densidad de electrones ligados se calcula como

$$n_{e,b}(r) = \sum_{n,l} w_{nl} R_{nl}(r)^2, \quad (2.179)$$

donde la suma se extiende sobre todos los orbitales monoeléctronicos nl ocupados y w_{nl} representa la ocupación del orbital.

El comportamiento de los electrones libres se describe mediante la estadística de Fermi-Dirac. En particular, la densidad $n_{e,f}(r)$ se evalúa de la siguiente manera

$$n_{e,f}(r) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2mc^2T}{\hbar^2c^2} \right)^{3/2} F_{1/2} \left(\frac{\mu + V(r)}{T}; \left| \frac{V(r)}{T} \right| \right), \quad (2.180)$$

donde $F_{1/2}(x; \beta)$ es la *integral incompleta de Fermi-Dirac*

$$F_q(x; \beta) = \int_{\beta}^{\infty} \frac{y^q dy}{1 + \exp(y - x)}. \quad (2.181)$$

Además, para satisfacer la neutralidad de carga, dentro del ion esfera debe haber ζ electrones libres, por tanto,

$$\zeta = 4\pi \int_0^{R_i} n_{e,f}(r) r^2 dr, \quad (2.182)$$

condición que permite determinar el potencial químico μ .

Las ecuaciones que hemos presentado, que constituyen los elementos básicos del modelo de ion esfera, se resuelven siguiendo un procedimiento iterativo.

- Se arranca con unas estimaciones iniciales de la densidad de electrones ligados $n_{e,b}(r)$, libres $n_{e,f}(r)$ y del potencial químico μ . Para $n_{e,b}(r)$ puede utilizarse la densidad correspondiente

al caso aislado y para $n_{e,f}(r)$ se asume una distribución homogénea, $n_{e,f}(r) = \zeta / (4\pi R_i^3/3)$. Para calcular el potencial químico, puede utilizarse la expresión correspondiente al límite de baja temperatura $\mu = \frac{(\hbar c)^2}{2m_e c^2} (3\pi^2 n_{e,f})^{2/3}$.

- Se calcula el potencial electrónico $V_e(r) = V_{e,b}(r) + V_{e,f}(r)$ resolviendo la ecuación de Poisson (2.176a).
- Se evalúa el potencial total $V(r)$ utilizando (2.175).
- Se resuelve la ecuación de Schrödinger radial (2.178) con el potencial $V(r)$ y se determinan las funciones de onda $R_{nl}(r)$ y energías ε_{nl} de todos los estados ocupados.
- Mediante la expresión (2.179) se obtiene una densidad de electrones ligados $n_{e,b}(r)$ mejorada.
- Mediante la expresión (2.180) se obtiene una densidad de electrones libres mejorada.
- Se utiliza (2.182) para determinar un valor del potencial químico μ .
- Se repite el proceso a partir del segundo paso hasta alcanzar convergencia.

La densidad del plasma influye en los resultados obtenidos con este procedimiento a través de las condiciones de contorno impuestas sobre el potencial, es decir, a través de la condición de neutralidad de carga en el interior del ion esfera. Por otro lado, los efectos de la temperatura del plasma se introducen en el modelo al evaluar la distribución espacial de electrones libres con la expresión (2.180).

La gran ventaja de los modelos de ion esfera reside en que los electrones ligados reciben un tratamiento mecanocuántico detallado. Sólo los efectos debidos al plasma en torno al ion se describen de forma aproximada. Es más, aunque aquí hayamos hecho referencia a la resolución de la ecuación de Schrödinger radial para calcular funciones de onda y energías monoeléctricas, en un modelo de ion esfera, puede implementarse cualquier otra técnica más sofisticada, de las que hemos comentado en este capítulo, para determinar la estructura energética del ion. Eso sí, en este caso, el potencial se construirá teniendo en cuenta la contribución de los electrones libres y la condición de neutralidad de carga. En el límite de baja densidad, el modelo de ion esfera debe reproducir los resultados correspondientes al método seleccionado en la situación aislada. Por otro lado, el tratamiento detallado de los electrones ligados permite la utilización de los modelos de ion esfera con fines espectroscópicos y para el análisis de la influencia del plasma sobre las energías y las funciones de onda de los niveles atómicos.

Ionización por presión, continuum-lowering y desplazamiento de líneas

En la sección anterior discutimos las modificaciones sufridas por el potencial atómico cuando el ion objeto de estudio se encuentra inmerso en un plasma e interacciona con los iones y electrones

libres de su entorno. Si estamos interesados en determinar la estructura energética de un ion en esta situación deberíamos resolver una ecuación del estilo

$$H\Psi_k = \left[-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - V(\mathbf{r}) - V_{pl}(\mathbf{r}) \right] \Psi_k = E_k \Psi_k, \quad (2.183)$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial para el caso aislado y $V_{pl}(\mathbf{r})$ el potencial adicional generado por los iones cercanos y los electrones libres. Este potencial va a modificar los autovalores E_k y autofunciones Ψ_k respecto a sus valores en situación aislada.

Es posible averiguar alguno de los efectos de este *potencial de plasma* $V_{pl}(\mathbf{r})$ sobre las propiedades iónicas sin necesidad de conocer su forma explícita. Sabemos que la mayor contribución de $V_{pl}(\mathbf{r})$ en el interior del volumen ocupado por el ion es debida a los electrones libres, mientras que los iones vecinos tienen una influencia apreciable a distancias mayores, a partir de la periferia del ion. Por tanto, dentro del volumen iónico $V_{pl}(\mathbf{r})$ es negativo, luego $-V_{pl}(\mathbf{r})$ contribuye como un término de energía positiva en el hamiltoniano (2.183). El potencial de plasma, por tanto, desplaza hacia arriba los autovalores respecto al caso aislado, o sea, reduce la energía de ligadura. La distribución de electrones libres en torno al núcleo produce un efecto de apantallamiento del potencial nuclear. En consecuencia, los electrones ligados sienten una fuerza de atracción hacia éste ligeramente menor cuando el ion está inmerso en el plasma que cuando está aislado.

Es importante destacar que a densidades suficientemente altas, la energía de ligadura de un estado puede llegar a anularse, para cruzar así el límite del espectro continuo. El desplazamiento de un estado ligado al continuo como consecuencia de los efectos de plasma recibe en la literatura el nombre de *ionización por presión*.

El fenómeno de reducción de la energía de ligadura cuando la densidad del plasma aumenta se conoce como *disminución del potencial de ionización* o, de forma más común, *continuum lowering* (CL). El CL y los formalismos desarrollados para evaluar la disminución ΔI de la energía de ionización de los estados ligados siguen siendo en la actualidad tema de debate. Son muchas las propuestas que podemos encontrar en la literatura, por ejemplo [39, 50–55], sin embargo, para discutir cualitativamente sus efectos nos basta con una sencilla aproximación propuesta en [49]

$$\Delta I_\zeta = \frac{3}{2} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} \hbar c \alpha \zeta n_{ion}^{1/3}. \quad (2.184)$$

En primer lugar, esta corrección es común para todos los estados del ion de carga ζ . Luego, todos los estados son desplazados una cantidad constante, independientemente de sus energías en situación aislada, sus números cuánticos o cualquier otra propiedad. En segundo lugar, la corrección es proporcional a $n_{ion}^{1/3}$, luego cambios grandes en la densidad no producirán efectos tan significativos sobre la energía de ionización. Por último, la corrección es proporcional al número medio ζ de electrones libres en el interior del ion esfera y, por tanto, su efecto será mayor en las especies más ionizadas. Los estados iónicos para los cuales ΔI_ζ sea mayor que su energía de ligadura dejan de estar ligados. Han sufrido una ionización por presión.

Finalmente, es lógico pensar que si el potencial de plasma modifica las energías de los estados iónicos, pueda producirse también un desplazamiento en las líneas espectrales generadas como consecuencia de transiciones radiativas entre dichos estados. A este respecto suele hablarse de un desplazamiento estático debido a las variaciones espaciales del potencial producidas a su vez por los electrones libres, mientras que el desplazamiento dinámico se genera como consecuencia de las colisiones ion-ion y electrón-ion. Una instructiva discusión sobre este tema puede encontrarse en [49].

2.2 Procesos atómicos en plasmas

El segundo elemento básico de todo modelo cinético es el destinado al cálculo de secciones eficaces y coeficientes de tasas de los distintos procesos atómicos, tanto colisionales como radiativos, que tienen lugar en el seno de un plasma y que determinan en última instancia la distribución de estados de carga y estados excitados. A este respecto existen esencialmente dos formas de proceder. Si se persigue un alto grado de precisión, los valores de los coeficientes de tasas pueden obtenerse usando métodos mecanocuánticos avanzados y existe numerosa bibliografía especializada donde se proponen nuevos procedimientos para el cálculo de secciones eficaces de los diferentes procesos, se mejoran los ya existentes o se presentan resultados correspondientes a casos muy concretos (un tipo de ion, un conjunto determinado de transiciones, un intervalo particular de temperatura...). El problema es que, en el contexto de cálculos cinéticos, el número de coeficientes de tasas que se necesitan, además en una amplia variedad de condiciones, es tan grande, que impide la aplicación sistemática de las técnicas antes mencionadas y es necesario llegar a un compromiso entre precisión y coste computacional. La alternativa en estos casos y también cuando no se requiere una extraordinaria precisión es recurrir a las fórmulas analíticas recomendadas en la literatura para el cálculo de los coeficientes de tasas. Como el objetivo de este trabajo es el desarrollo de un código versátil para el cálculo de poblaciones en un amplio rango de condiciones del plasma, nos decantaremos por esta segunda opción, preocupándonos entonces de que la elección de los elementos constituyentes del módulo colisional-radiativo (determinación de la estructura atómica y cálculo de los coeficientes de tasas) conlleve una pérdida de precisión admisible y que, en cualquier caso, ésta quede justificada en base a una reducción significativa del coste computacional.

El objetivo entonces de esta sección es clasificar y describir brevemente su comportamiento en función de la temperatura y la densidad del plasma. Las expresiones más relevantes propuestas en la literatura para el cálculo de los coeficientes de tasas de cada uno de ellos serán expuestas en el siguiente capítulo, donde volveremos a incidir en este tipo de cuestiones cuando nos ocupemos del cálculo de los coeficientes de tasa en modelo desarrollado en esta tesis doctoral. Los aspectos

teóricos relacionados con el cálculo a partir de principios mecanocuánticos escapan de nuestros propósitos y pueden ser consultados en la bibliografía [15, 16, 56-58].

2.2.1 Clasificación de los procesos atómicos

Los constituyentes del plasma, esto es, electrones, iones y fotones, interactúan a través de sus campos electromagnéticos, transfiriendo energía de unas partículas a otras. Las interacciones de mayor interés en la física de plasmas son aquellas en las que un ion interactúa con un electrón o con un fotón para dar lugar a un cambio en su estado de ionización o excitación. Los procesos más frecuentes son los que aparecen en la tabla 2.2.1.

Existen varios criterios para clasificar los procesos atómicos, uno de ellos es atender al tipo de partículas que intervienen en la interacción. En este sentido, la lista incluye dos transiciones iónicas en las que un ion decae espontáneamente desde un estado excitado a otro estado de menor energía, sin interacción con ninguna otra partícula. Estos procesos son:

- *Emisión o decaimiento espontáneo.* Un ion excitado decae a un estado de energía menor (fundamental o excitado), emitiendo un fotón cuya energía es igual a la diferencia de energía entre los estados inicial y final.
- *Autoionización.* En este caso el estado inicial es un estado autoionizante del ion, constituido por una doble excitación, esto es, dos electrones se encuentran en orbitales excitados, o bien por la excitación de un electrón desde un orbital muy interno a otro externo. Durante la autoionización un electrón se desexcita y el otro utiliza esta energía para escapar al continuo. El resultado final es un ion que ha aumentado en una unidad su estado de carga más un electrón libre.

Los procesos *fotón-ion* incluyen:

- *Fotoabsorción.* Un fotón del campo de radiación cuya energía coincide con la diferencia entre dos estados iónicos es absorbido, induciendo una transición desde el estado de menor energía al de mayor energía.
- *Emisión estimulada.* El campo de radiación alrededor del ion induce una transición desde un estado excitado a un estado más bajo, emitiéndose un fotón cuya energía coincide con la diferencia entre estados. Este proceso es el inverso de la fotoabsorción.
- *Fotoionización.* La energía de un fotón del campo de radiación es utilizada por un electrón ligado para escapar al continuo, produciendo una ionización.

Los procesos *electrón-ion* son los más numerosos:

- *Ionización colisional o por impacto electrónico.* Un electrón impacta con un ion expulsando uno de los electrones ligados al continuo.

Reacción	Proceso directo	Tasa ($cm^{-3}s^{-1}$)	Proceso inverso	Tasa ($cm^{-3}s^{-1}$)
$X_j^{+\zeta} \Leftrightarrow X_i^{+\zeta} + \gamma$	Decaimiento espontáneo	$N_{\zeta j} A_{\zeta j \rightarrow \zeta i}$	Absorción	$N_{\zeta i} B_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}$
$X_i^{+\zeta} + e^- \Leftrightarrow X_j^{+\zeta+1} + e^- + e^-$	Ionización colisional	$n_e N_{\zeta i} I_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}$	Recombinación a 3-cuerpos	$n_e^2 N_{\zeta+1j} R_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3$
$X_i^{+\zeta} + e^- \Leftrightarrow X_j^{+\zeta} + e^-$	Excitación colisional	$n_e N_{\zeta i} E_{\zeta i \rightarrow \zeta j}$	Desexcitación colisional	$n_e N_{\zeta j} D_{\zeta j \rightarrow \zeta i}$
$X_i^{+\zeta} + \gamma \Leftrightarrow X_j^{+\zeta+1} + e^-$	Fotoionización	$N_{\zeta i} P_{\zeta i, \zeta+1j}$	Recombinación radiativa	$n_e N_{\zeta+1j} R_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r$
$X_i^{+\zeta} \Leftrightarrow X_j^{+\zeta+1} + e^-$	Autoionización	$N_{\zeta i} A_{\zeta i \rightarrow \zeta+1i}$	Captura electrónica	$n_e N_{\zeta+1j} C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}$
$X_i^{+\zeta} + e^- \Leftrightarrow X_i^{+\zeta} + e^- + \gamma$	Bremsstrahlung	$N_{\zeta i} n_e F_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}$	Bremsstrahlung inverso	$N_{\zeta i} n_e F_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^e$

Tabla 2.5. Procesos atómicos en plasmas.

- *Recombinación a tres cuerpos.* Es el proceso inverso de la ionización colisional. Dos electrones libres entran a la vez en el volumen de un ion. Uno de los electrones es capturado por el ion, disminuyendo su estado de carga, mientras que el otro electrón absorbe la energía sobrante.
- *Recombinación radiativa.* Un electrón libre colisiona con un ion y queda ligado a éste, con la energía extra se emite de forma espontánea un fotón.
- *Fotorrecombinación o recombinación estimulada.* El proceso sólo se diferencia del anterior en que la emisión del fotón es inducida por el campo de radiación. Este proceso es el inverso de la fotoionización.
- *Captura electrónica.* En este caso un electrón libre es capturado para dar lugar a un estado excitado del ion. El excedente energético es absorbido por otro de los electrones ligados, del tal forma que el estado final del ion es un estado autoionizante, doblemente excitado. Éste es el proceso inverso de la autoionización.
- *Excitación colisional o por impacto electrónico.* Un electrón libre en las cercanías de un ion, cede parte de su energía a uno de los electrones ligados dando lugar a un estado iónico de mayor energía.
- *Desexcitación colisional o por impacto electrónico.* Este proceso es el inverso del anterior. Se produce una transición desde un estado excitado o otro estado de menor energía y la energía que se libera es absorbida por un electrón libre.

Los procesos *ion-ion* pueden también ionizar, recombinar excitar o desexcitar cualquiera de los iones que interaccionan. De hecho, por cada proceso electrón-ion existe un proceso ion-ion paralelo y no tiene sentido introducir estos últimos de forma separada. No obstante, el proceso de *intercambio de carga* es exclusivo de las interacciones ion-ion y en él, un electrón de un ion salta al otro ion participante en la interacción alterando así la distribución de carga. En cualquier caso, los procesos ion-ion tienen unas tasas asociadas mucho más pequeñas que las correspondientes a los procesos electrón-electrón y, en general, se desprecian en los cálculos de espectroscopía de plasmas.

Entre los procesos *fotón-fotón* encontramos dos que poseen tasas relativamente altas, son:

- *Bremsstrahlung.* La denominación del proceso es una palabra alemana que significa *radiación de frenado*. En este caso, un electrón libre que se mueve en las proximidades de un ion es acelerado por el campo coulombiano del ion y como consecuencia se emite un fotón.
- *Bremsstrahlung inverso.* Aquí un electrón cercano a un ion absorbe un fotón del campo de radiación.

En física de plasmas existen muchos más procesos, más complejos –interacciones entre muchos cuerpos, dobles ionizaciones o excitaciones, . . . – que pueden llegar a ser importantes bajo algunas

condiciones particulares, pero para la mayoría de los propósitos de interés la lista dada aquí es más que suficiente.

Existen otros criterios de clasificación para los procesos atómicos, por ejemplo, atendiendo al número de partículas que intervienen inicialmente en la interacción. En este sentido, la mayoría de los procesos mencionados son a *dos-partículas*. El decaimiento espontáneo y la autoionización son procesos a *una-partícula* y lógicamente participan *tres-partículas* en la recombinación a tres cuerpos.

Asimismo, decimos que un proceso es *radiativo*, cuando implica la absorción o la emisión de un fotón, mientras que los procesos *colisionales* son aquellos en los que no intervienen fotones.

2.2.2 Decaimiento espontáneo, absorción y emisión estimulada

Estos tres procesos son una consecuencia de la interacción del átomo con la radiación electromagnética. Pueden representarse a través de la reacción



La probabilidad de transición atómica es la tasa a la que un ion en un estado excitado ζj decae un estado inferior ζi . Así, el coeficiente de Einstein \mathcal{A} es una medida del número de transiciones atómicas espontáneas del estado ζj al estado ζi que sufre un átomo por unidad de tiempo. En cada una de esas transiciones se emite un fotón γ de energía $h\nu$.

El coeficiente de Einstein \mathcal{A} está estrechamente relacionado con otros dos coeficientes, el de fotoabsorción, \mathcal{B}^a , y el de emisión inducida, \mathcal{B}^e . El primero de ellos describe la absorción directa de radiación por un ion inicialmente en el estado ζi que, como consecuencia de la misma, pasa al estado ζj . El ion absorbe del campo de radiación un fotón de energía $h\nu = E_{\zeta j} - E_{\zeta i}$. El coeficiente \mathcal{B}^e describe el fenómeno en el que fotones con energía $h\nu$ en las proximidades de un ion en un estado ζj son capaces de inducir una transición desde ζj a ζi . Este proceso, que es la base de funcionamiento del láser, es particularmente importante en plasmas con una densidad de radiación alta.

2.2.3 Excitación y desexcitación colisional

En el proceso de excitación por impacto electrónico, un electrón se encuentra con un ion de carga ζ en el estado ζi . Como resultado de la interacción, el ion se excita y alcanza el estado ζj de mayor energía, mientras que el electrón pierde una energía $E_{ij} = E_{\zeta j} - E_{\zeta i}$. La desexcitación colisional es el proceso inverso, en el que un ion excitado ζj y un electrón colisionan. En el estado final, el ion se desexcita y queda un estado ζi de menor energía, mientras que el electrón absorbe la energía extra. En ninguno de los procesos el ion cambia su estado de carga, sólo su estado de excitación,



El coeficiente de tasa de excitación colisional es pequeño cuando la temperatura es mucho menor que la energía de transición, $T \ll E_{ij}$. Después aumenta de forma algo abrupta hasta un máximo en torno a $T \approx E_{ij}$ y finalmente decrece lentamente para temperaturas mayores. Sin embargo, cuando la temperatura supera unas pocas veces el valor de la energía de transición, la energía de la mayoría de los electrones es demasiado alta para provocar la excitación hasta un estado del espectro discreto y entonces el proceso de ionización colisional se convierte en el más probable. Por otro lado, el coeficiente de tasa es proporcional a la fuerza de oscilador, que toma sus máximos valores para aquellas transiciones entre dos estados poco excitados. Para transiciones entre dos estados muy excitados, tanto la fuerza de oscilador como el coeficiente de tasa de excitación decaen de forma significativa.

2.2.4 Ionización colisional y recombinación a tres cuerpos

La ionización por impacto electrónico es probablemente el proceso más importante en plasmas calientes, particularmente en los ópticamente delgados. El proceso inverso, la recombinación a tres cuerpos, cobra importancia sólo en los plasmas de alta densidad. La ionización colisional ocurre cuando un electrón libre colisiona con un ion y expulsa uno de los electrones ligados. La recombinación a tres cuerpos ocurre cuando dos electrones libres entran a la vez en el volumen asociado a un ion y uno de los dos queda atrapado en un estado ligado, mientras que el otro absorbe la energía extra. De forma esquemática,



El comportamiento del coeficiente de tasa de ionización colisional es muy similar al de la excitación. Conforme la temperatura crece, el coeficiente de tasa aumenta rápidamente y alcanza un máximo cuando la temperatura es unas pocas veces el valor del umbral de ionización. A temperaturas superiores, el coeficiente de tasa decae lentamente. Este comportamiento es común a todas las especies iónicas, cualquiera que sea su estado, fundamental o excitado.

A una temperatura dada, los estados altamente excitados se ionizan con mayor facilidad que aquéllos más cercanos al estado fundamental. La recombinación a tres cuerpos también ocurre con mayor probabilidad hacia los estados más excitados del ion. En consecuencia, éstos estados se ven involucrados en procesos de ionización y recombinación que ocurren a una alta frecuencia, por lo que sus poblaciones suelen ser inestables.

2.2.5 Fotoionización y recombinación radiativa

En el proceso de fotoionización, un electrón en un estado ligado absorbe un fotón con energía suficiente y se convierte en un electrón libre. El proceso inverso es la recombinación radiativa, en el que un electrón libre es capturado en uno de los estados ligados del ion, emitiendo un fotón que

toma exceso de energía y de momento. Así,

$$X_i^\zeta + \gamma \Leftrightarrow X_j^{\zeta+1} + e^-. \quad (2.188)$$

El proceso de fotoionización es importante en plasmas calientes sólo si la densidad local asociada al campo de radiación, es decir, la densidad de fotones, es suficientemente alta para inducir una tasa de fotoionización comparable a la de ionización colisional. Esto sucede cuando el plasma es ópticamente grueso. Entonces, el camino libre medio de los fotones es más pequeño que las dimensiones del plasma y la probabilidad de reabsorción de los fotones en el interior del plasma es alta. En plasmas ópticamente delgados, cuyas dimensiones características son más pequeñas que el camino libre medio, el efecto de la fotoionización es despreciable.

2.2.6 Autoionización y captura electrónica

La excitación de un electrón de un orbital interno o de dos o más electrones en cualquier orbital puede dar lugar a un estado ζi que cae energéticamente por encima del umbral de ionización del ion con carga ζ . Estos estados interactúan con otros con la misma energía total, formados por estados ligados del siguiente ion más un electrón libre. Como resultado de esta interacción se produce la autoionización o decaimiento Auger del estado ζi mediante la expulsión espontánea de un electrón acompañada de una redistribución de los restantes electrones ligados, que da lugar a un estado final $\zeta + 1j$. El proceso inverso se denomina captura electrónica. Los dos mecanismos quedan representados a través de

$$X_i^\zeta \Leftrightarrow X_j^{\zeta+1} + e^-. \quad (2.189)$$

Es importante destacar que a diferencia de otros procesos en los que intervienen electrones libres, la captura electrónica es un proceso resonante. Esto significa que el electrón debe tener una energía específica igual a la diferencia energética entre los estados iónicos inicial y final, esto es, $\varepsilon = E_{ij}$. En otros procesos, el excedente energético o el aporte de energía necesario para cumplir la ecuación de balance se traducía en la emisión/absorción de un fotón o en la variación de la energía cinética de los electrones libres involucrados en el proceso. Asimismo, como ζi es un estado autoionizante y, por tanto, $E_{\zeta i} > I_\zeta$, ahora la energía de transición vendrá dada por

$$E_{ij} = E_{\zeta i} - I_\zeta - E_{\zeta+1j}. \quad (2.190)$$

La importancia de los estados autoionizantes, los mecanismos de autoionización y captura electrónica y otros canales indirectos, como el de excitación-autoionización, en el balance de poblaciones y la determinación de propiedades radiativas, en particular la emisividad, ha sido subrayada en numerosos trabajos. Se ha contrastado, por ejemplo, que el mecanismo de excitación-autoionización puede incrementar de forma significativa la tasa total de ionización [59,60]. Ha quedado demostrado, con el respaldo de datos experimentales, que en condiciones de baja densidad los procesos

de autoionización y captura electrónica dominan el balance cinético entre los distintos estados de carga [61]; aunque también hay evidencias de la importancia de estos mecanismos en regiones de más alta densidad [62–64]. Asimismo, el análisis de las líneas satélite y, en general, la emisión procedente de los niveles autoionizantes representa una herramienta particularmente útil para la diagnosis espectroscópica [65, 66].

2.3 Determinación de la distribución de poblaciones en plasmas

Los procesos de ionización y recombinación en el plasma determinan las abundancias relativas entre los distintos estados de carga. Por ejemplo, en un plasma donde la tasa de ionización es mayor que la de recombinación, cada vez más electrones ligados pasarán al continuo, de tal forma que la carga de los iones va aumentando continuamente. Es lo que se conoce como un *plasma de ionización*. Por otro lado, un *plasma de recombinación* es aquél donde la tasa de recombinación es mayor que la de ionización y en consecuencia los iones se van cargando progresivamente de electrones. Cuando la tasa de ionización se iguala a la de recombinación se alcanza un *estado estacionario*. En esta situación, la distribución de estados de carga es constante, independiente del tiempo. Los estados excitados se comportan de una manera similar. Los rápidos procesos de excitación y desexcitación, incluyendo el decaimiento espontáneo, determinan el estado de excitación medio de los iones y, de nuevo, se establece un estado estacionario cuando la tasa de excitaciones coincide con la de desexcitaciones más decaimientos. Según esto, la ionización media \bar{Z} de un plasma en estado estacionario va depender directamente de los valores relativos de las tasas de los procesos directo e inverso e implícitamente de la temperatura electrónica y la densidad iónica. En los siguientes apartados describiremos bajo qué condiciones se alcanza el estado estacionario y cuáles son los modelos que se manejan para la determinación de la distribución de poblaciones en dicho estado.

2.3.1 El equilibrio local termodinámico

Entre los diferentes estados estacionarios que se pueden alcanzar en un plasma, el de equilibrio local termodinámico, LTE, tiene unas características muy particulares. Es el estado más cercano al de equilibrio termodinámico total, TE, como el que describen los métodos de la mecánica estadística. En TE los tres tipos de partículas –iones, electrones y fotones– están en equilibrio, lo que significa que la tasa de cada proceso coincide exactamente con la tasa de su inverso. En un plasma de estas características, las distribuciones de velocidades para iones y electrones siguen una distribución Maxwell-Boltzmann, la distribución de estados excitados es de tipo Boltzmann y los fotones tienen una función de distribución de energía planckiana.

La situación LTE ocurre en los plasmas cuyas dimensiones son significativamente más pequeñas que el camino libre medio de los fotones emitidos en su interior, pero mucho mayores que la longitud recorrida por los electrones entre colisiones con un ion. El camino libre medio de los fotones en un plasma de hidrógeno a $T = 10 - 1000 \text{ eV}$ es mayor que el camino libre medio de los electrones en un factor 10^4 o más. En un plasma de aluminio sobre el mismo intervalo de temperaturas, el camino libre medio de los fotones es unas 300 veces mayor. En LTE, los fotones son capaces de recorrer una distancia relativamente larga desde su punto de emisión, después pueden escapar del plasma o ser reabsorbidos en otro punto que puede tener condiciones de densidad y temperaturas distintas. Por tanto, los fotones no están necesariamente en equilibrio con las partículas materiales. Sin embargo, la frecuencia de colisiones entre iones y electrones es muy alta, por lo que sus distribuciones de velocidades y estados excitados son las mismas que en condiciones de equilibrio total.

La distribución de estados de cargas en situación de LTE puede calcularse a partir de principios básicos. Consideremos un plasma compuesto por iones de número atómico Z y electrones, a temperatura T y con una densidad electrónica n_e . La distribución de carga se obtiene minimizando la función energía libre de Helmholtz, F , que viene dada por la ecuación

$$F(T) = -T \ln \Xi(T), \quad (2.191)$$

donde $\Xi(T)$ es la función de partición del sistema completo. En buena aproximación, la función de partición puede escribirse como

$$\Xi(T) = \Xi_e(T) \prod_{\zeta=0}^Z \Xi_{\zeta}(T). \quad (2.192)$$

Hemos comentado que, en cierta forma, son los procesos entre iones y electrones van a determinar la situación LTE. En particular, el balance entre los estados de carga estará controlado por los procesos de ionización colisional y recombinación a tres cuerpos. Así, para una reacción del tipo



la conservación de la carga exige

$$-\delta(M_{\zeta-1}) = \delta(M_{\zeta}) = \delta(M_e), \quad (2.194)$$

donde M_e , $M_{\zeta-1}$ y M_{ζ} son el número total de electrones, iones de carga $\zeta - 1$ e iones de carga ζ , respectivamente. La variación de la energía libre respecto al número de partículas da

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial M_{\zeta-1}} \delta M_{\zeta-1} + \frac{\partial F}{\partial M_{\zeta}} \delta M_{\zeta} + \frac{\partial F}{\partial M_e} \delta M_e. \quad (2.195)$$

Las condiciones de equilibrio se obtienen minimizando la energía libre, $\delta F = 0$. Sustituyendo (2.194) en (2.195), la condición de equilibrio resulta

$$-\frac{\partial F}{\partial M_{\zeta-1}} + \frac{\partial F}{\partial M_{\zeta}} + \frac{\partial F}{\partial M_e} = 0. \quad (2.196)$$

Para un sistema de M partículas indistinguibles, la función de partición viene dada por

$$\Xi(T) \frac{1}{M!} [Z(T)]^M, \quad (2.197)$$

donde $Z(T)$ es la función de partición de cada partícula. Usando la fórmula de Stirling, $M! \approx (M/e)^M$, para $M \rightarrow \infty$, la expresión anterior se escribe como

$$\Xi(T) \approx \left(\frac{eZ}{M} \right)^M, \quad (2.198)$$

donde $e = \sum_n 1/n! = 2.718\dots$

Teniendo esto presente, al calcular las derivadas parciales de F obtenemos

$$-T \left[-\ln \left(\frac{Z_{\zeta-1}}{M_{\zeta-1}} \right) + \ln \left(\frac{Z_{\zeta}}{M_{\zeta}} \right) + \ln \left(\frac{Z_e}{M_e} \right) \right] = 0, \quad (2.199)$$

donde z_e , $z_{\zeta-1}$ y z_{ζ} son las funciones de partición de las partículas individuales.

La ecuación anterior puede reescribirse como

$$\frac{M_{\zeta} M_e}{M_{\zeta-1}} = \frac{Z_{\zeta}(T) Z_e(T)}{Z_{\zeta-1}(T)}. \quad (2.200)$$

Las partes cinéticas de las funciones de partición de los iones de carga ζ y $\zeta - 1$ son iguales y se cancelan. Por otro lado, al evaluar el cociente entre las dos funciones de partición internas debemos tener cuidado, ya que cada una utiliza su propio estado fundamental de energía como punto de referencia. La diferencia entre estos dos puntos de referencia es $I_{\zeta-1} - \Delta I_{\zeta-1}$, que es el potencial de ionización del estado de carga $\zeta - 1$ corregido por el valor de continuum-lowering, $\Delta I_{\zeta-1}$. Insertando esta relación en (2.200) y reemplazando el número de partículas por las correspondientes densidades, $M_e = n_e V$, $M_{\zeta-1} = N_{\zeta-1} V$ y $M_{\zeta} = N_{\zeta} V$, se obtiene

$$\frac{N_{\zeta} n_e}{N_{\zeta-1}} = 2 \left(\frac{m_e T}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \frac{Z_{\zeta}(T)}{Z_{\zeta-1}(T)} \exp \left(-\frac{I_{\zeta-1} - \Delta E_{\zeta-1}}{T} \right), \quad (2.201)$$

que es la conocida ecuación de Saha. Junto con (2.201) deben satisfacerse dos ecuaciones más, la primera es el requerimiento de que la suma de todas las densidades parciales sea igual a la densidad total de iones,

$$\sum_{\zeta=0}^Z N_{\zeta} = n_i, \quad (2.202)$$

y, en segundo lugar, la condición de neutralidad en el plasma, que se expresa como

$$n_e = \sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_{\zeta}. \quad (2.203)$$

Otra cuestión es la manera en que se distribuye la población entre los diferentes estados excitados de un ion en situación LTE. Para empezar, si m es cualquier estado de un ion ζ con M_{ζ} estados excitados, debe cumplirse

$$N_{\zeta} = \sum_{m=0}^{M_{\zeta}} N_{\zeta m}. \quad (2.204)$$

Asimismo, como en un plasma que satisface la condición LTE, los procesos colisionales son mucho más frecuentes que los radiativos, la distribución de población sobre los estados excitados será de tipo Boltzmann,

$$N_{\zeta m} = N_{\zeta} \frac{g_{\zeta m} e^{-E_{\zeta m}/T}}{Z_{\zeta}(T)}, \quad (2.205)$$

donde $E_{\zeta m}$ es la energía del estado excitado medida respecto al fundamental.

2.3.2 El modelo Corona

Nos movemos ahora al extremo de los plasmas ópticamente delgados de muy baja densidad. Este tipo de plasmas aparecen con relativa frecuencia bajo condiciones astrofísicas –en la corona solar, por ejemplo– y en algunas situaciones de laboratorio –como en el caso de los tokamaks–. La situación de estado estacionario en este tipo de plasmas se conoce como *equilibrio Corona*.

Mientras que la deducción de las ecuaciones básicas en LTE estuvo basada en argumentos fundamentados de la física estadística, en el extremo de baja densidad se puede extraer una gran cantidad de información a partir de consideraciones intuitivas. En concreto, es posible llevar a cabo una buena estimación de las poblaciones de los estados fundamental y excitados sin necesidad de recurrir a expresiones complicadas. Así, en plasmas de muy baja densidad, iónica o electrónica, la tasa de excitación colisional es tan baja en relación con la tasa de decaimiento espontáneo que podemos suponer, casi con total seguridad, que un electrón excitado en un cierto nivel energético decaerá al estado fundamental antes de experimentar una segunda excitación. La gran mayoría de los iones estarán, por tanto, en su estado fundamental. Esto es,

$$N_{\zeta m} = \begin{cases} N_{\zeta}, & \text{para } m = 0, \\ 0, & \text{para } m \neq 0. \end{cases} \quad (2.206)$$

Es más, en plasmas ópticamente delgados de baja densidad los procesos de fotoionización y fotoexcitación tienen unas tasas asociadas muy pequeñas y lo mismo ocurre para la recombinación a tres cuerpos. De hecho, los procesos dominantes son la ionización por impacto electrónico y los procesos de recombinación a dos cuerpos, recombinación radiativa y recombinación dielectrónica. La distribución de estados de carga se calcula igualando las tasas de estos procesos,

$$n_e N_{\zeta-1} \mathcal{I}_{\zeta-1 \rightarrow \zeta} = n_e N_{\zeta} (\mathcal{R}_{\zeta \rightarrow \zeta-1}^r + \mathcal{R}_{\zeta \rightarrow \zeta-1}^d). \quad (2.207)$$

Por tanto, se llega a

$$\frac{N_{\zeta}}{N_{\zeta-1}} = \frac{\mathcal{I}_{\zeta-1 \rightarrow \zeta}}{\mathcal{R}_{\zeta \rightarrow \zeta-1}^r + \mathcal{R}_{\zeta \rightarrow \zeta-1}^d}, \quad \zeta = 1, \dots, Z \quad (2.208)$$

Como $N_{\zeta} = N_{\zeta 0}$, la ecuación (2.208) expresa una relación entre las densidades de los estados fundamentales de dos iones adyacentes. Escribiendo (2.208) para todos los estados de carga, obtenemos un conjunto de $Z + 1$ ecuaciones lineales homogéneas recursivas para las $Z + 1$ densidades

N_{ζ} . De la misma forma que en el caso LTE, este conjunto se completa con las ecuaciones (2.202) y (2.203) para la densidad total de iones y conservación de la carga.

Es importante destacar que la ecuación (2.208) es independiente de las densidades iónica y electrónica. Por tanto, la distribución de estados de carga en equilibrio Corona es también independiente de la densidad.

2.3.3 Distribución de poblaciones en la situación de no-equilibrio y el modelo colisional-radiativo

En el caso más general, las condiciones del plasma serán tales que no se podrá garantizar ni una situación LTE ni tampoco la de equilibrio Corona. Estamos, lógicamente, en el régimen de no-equilibrio, NLTE. En este caso, la distribución de poblaciones se determinará a partir de las ecuaciones del llamado modelo colisional-radiativo, CR.

El modelo CR es una generalización de los dos anteriores. Esto es, las ecuaciones básicas CR tienden al equilibrio Corona para baja densidad y la situación LTE en el extremo de alta densidad. Sin embargo, al contrario de lo que ocurría en estas dos situaciones, la distribución de poblaciones bajo condiciones NLTE no puede determinarse a partir de principios básicos, y sólo podrá conocerse tras resolver un conjunto de ecuaciones de tasas que tienen en cuenta todos los procesos atómicos capaces de incrementar o disminuir la población de un estado particular. En este conjunto de ecuaciones intervienen todos los procesos atómicos a los hemos hecho alusión con anterioridad, incluyendo aquéllos dependientes del campo de radiación.

El punto de partida es el conjunto de las ecuaciones de tasas más la ecuación de transferencia radiativa,

$$\frac{\partial N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta' m'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-, \quad (2.209)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e})}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) = -\kappa(\mathbf{r}, t, \nu) I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) + j(\mathbf{r}, t, \nu). \quad (2.210)$$

Sabemos que en el caso más general, para poder obtener las poblaciones $N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)$ en cada punto del espacio y en cualquier instante de tiempo, sería necesario resolver las ecuaciones anteriores de forma autoconsistente.

Conviene recordar que los términos $\mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+$ y $\mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-$ aglutinan, respectivamente, todos los mecanismos responsables de poblar o despoblar un estado ζm dado. Nuestra intención es escribir estos términos de forma explícita, pero para ello debemos comentar antes algunas cuestiones acerca de las magnitudes que intervienen en la ecuación de transporte radiativo. $I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e})$ es la intensidad específica de radiación en el punto \mathbf{r} , en el instante t , a la frecuencia ν , propagándose en la dirección del vector unitario \mathbf{e} . Las magnitudes $\kappa(\mathbf{r}, t, \nu)$ y $j(\mathbf{r}, t, \nu)$ son los coeficientes de absorción y emisión, respectivamente. Tanto el uno como el otro juegan un papel decisivo a la hora

de determinar las propiedades espectrales del plasma. No daremos ahora detalles acerca de cómo evaluarlos, ya que esta cuestión será abordada más adelante, pero conviene tener presente que para hacerlo es preciso conocer las poblaciones $N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)$ de todos los niveles atómicos.

Por otro lado, en el tratamiento del transporte radiativo resulta útil definir la *intensidad media* como el promedio de la intensidad específica sobre todas las direcciones del espacio,

$$J(\mathbf{r}, t, \nu) = \frac{1}{4\pi} \int_S I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) d\Omega = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (2.211)$$

Debemos hacer una aclaración acerca de los procesos inducidos por el campo de radiación. Como se sabe, la absorción y la emisión estimulada provocan transiciones entre estados del espectro discreto y junto con la emisión espontánea conforman el grupo de los procesos radiativos *ligado-ligado*. Por otro lado, la fotoionización y la recombinación estimulada conectan estados del espectro discreto con estados del continuo. Constituyen, junto con la recombinación radiativa, los procesos radiativos *ligado-libre*⁶. Pues bien, en relación con los procesos inducidos ligado-ligado debemos tener presente que ni $\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a$ ni $\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e$ son exactamente los correspondientes coeficientes de tasa, sino los conocidos coeficientes de Einstein de absorción y emisión estimulada, respectivamente.

Llegados a este punto, definimos

$$J_{ij}^a(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \int_0^\infty \phi_{ij}^a(\mathbf{r}, t, \nu) J(\mathbf{r}, t, \nu) d\nu, \quad (2.212)$$

$$J_{ji}^e(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \int_0^\infty \phi_{ji}^e(\mathbf{r}, t, \nu) J(\mathbf{r}, t, \nu) d\nu, \quad (2.213)$$

donde $\phi_{ij}^a(\mathbf{r}, t, \nu)$ es el perfil de absorción y $\phi_{ji}^e(\mathbf{r}, t, \nu)$ el de emisión y podríamos hablar también del perfil de emisión espontánea $\phi_{ji}^s(\mathbf{r}, t, \nu)$. Obsérvese que los perfiles dependen de \mathbf{r} y de t como consecuencia de la posible variación espacio-temporal de las condiciones del plasma. Omitiremos de aquí en adelante esta dependencia, salvo en las situaciones donde sea importante especificarla.

Con estas consideraciones, el coeficiente de tasa de absorción viene dado por

$$\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a \quad (2.214)$$

y el de emisión estimulada como

$$\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e. \quad (2.215)$$

En términos de los coeficientes de Einstein, la sección eficaz de absorción se escribe como $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a \phi_{ij}^a(\nu)$ y la de emisión como $\sigma_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e \phi_{ji}^e(\nu)$ [67]. Así, por establecer una analogía con la expresión general (3.57) para la determinación los coeficientes de tasas, en el caso de los procesos inducidos ligado-ligado, éstos pueden calcularse como

$$\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a = \int_0^\infty \frac{4\pi}{h\nu} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a(\nu) J(\nu) d\nu, \quad (2.216)$$

⁶También existen los procesos *libre-libre*, como el bremsstrahlung, pero como éstos no alteran la población de los estados iónicos no se incluyen en las ecuaciones de tasas.

$$\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e = \int_0^\infty \frac{4\pi}{h\nu} \sigma_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e(\nu) J(\nu) d\nu. \quad (2.217)$$

Por otro lado, los coeficientes de tasas de los procesos radiativos ligado-libre se expresan de la siguiente manera, para la fotoionización tenemos

$$\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} = \int_{\nu_{th}}^\infty \frac{4\pi}{h\nu} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j}^{pho}(\nu) J(\nu) d\nu, \quad (2.218)$$

mientras que para la recombinación estimulada⁷

$$\mathcal{P}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^e = \int_0^\infty v \sigma_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon) J(\nu) f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (2.219)$$

Ya estamos en disposición de escribir de forma explícita el sistema de ecuaciones de tasas. En el caso más general, que contempla una evolución espacio-temporal del plasma, éste viene dado por

$$\frac{\partial N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta'j} N_{\zeta'j}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta'j \rightarrow \zeta i}^+ - \sum_{\zeta'j} N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta'j}^-,$$

donde

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta'j} N_{\zeta'j}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta'j \rightarrow \zeta i}^+ = & \\ & \sum_j N_{\zeta - 1j}(\mathbf{r}, t) [\mathcal{P}_{\zeta - 1j \rightarrow \zeta i} + n_e \mathcal{I}_{\zeta - 1j \rightarrow \zeta i} + \mathcal{A}u_{\zeta - 1j \rightarrow \zeta i}] \\ & + \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}, t) [\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^a J_{ji}^a + n_e \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}] \\ & + \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}, t) [\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e + \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}] \\ & + \sum_j N_{\zeta + 1j}(\mathbf{r}, t) n_e [\mathcal{P}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^e + \mathcal{R}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^3 + \mathcal{C}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}], \end{aligned} \quad (2.220)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta'j} N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta'j}^- = & \\ & N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_j n_e [\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}^e + \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}^3 + \mathcal{C}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}] \\ & + N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} [\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^e J_{ij}^e + \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}] \\ & + N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} [\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a + n_e \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}] \\ & + N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_j [\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} + n_e \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} + \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j}]. \end{aligned} \quad (2.221)$$

En un medio estático, $\mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta i} = 0$, y en estado estacionario, $\frac{\partial N_{\zeta i}}{\partial t} = 0$, el sistema a resolver se reduce al caso

$$\sum_{\zeta'i'} N_{\zeta'i'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta'i' \rightarrow \zeta i}^+ - N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_{\zeta'i'} \mathbb{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta'i'}^- = 0. \quad (2.222)$$

⁷Más detalles en el apéndice B.

El problema que hemos planteado requiere la solución conjunta de las ecuaciones de tasas y la ecuación de transferencia radiativa. Esta es una tarea complicada que ha dado lugar a un ingente número de trabajos sobre el tema y para la que se han propuesto diferentes técnicas y métodos. En relación con la solución de la ecuación de la ecuación de transferencia pueden distinguirse los métodos aproximados, los métodos directos y los métodos iterativos.

Los métodos aproximados están basados en conceptos probabilísticos y es posible encontrar una excelente revisión de los mismos en [68]. No entraremos aquí en más detalles. Esta cuestión será abordada suficientemente en el próximo capítulo, puesto que el modelo de transporte radiativo que se propone en este trabajo puede englobarse en este grupo.

Se conoce por métodos directos básicamente a los propuestos por Feautrier y Rybicki. Ambos métodos transforman la ecuación de transferencia en una forma integro-diferencial que precisa del establecimiento de dos condiciones de contorno para su completa solución. Este tipo de procedimiento resuelve el problema del transporte con dependencia direccional, esto es, sin efectuar ningún tipo de promedio angular, como ocurre en los métodos aproximados. Lógicamente, el coste computacional es mucho más alto y es necesario establecer dos mallas de integración para resolver el problema, una espacial y otra angular.

Los métodos iterativos constituyen en realidad un conjunto de técnicas para aliviar la complejidad que se deriva de la aplicación de los métodos directos. Entre ellos se encuentran la técnica de iteración Λ y el procedimiento de linealización completa. La teoría asociada a estas técnicas no puede resumirse de forma sencilla y escapa por completo de los objetivos de esta tesis doctoral, por lo que para su conocimiento recomendamos acudir a la bibliografía [67, 69]. El mayor inconveniente de los mismos es el considerable incremento del tiempo de cálculo a medida que se tratan problemas complejos, como el que hemos planteado en esta sección, esto es, el transporte radiativo en iones de muchos niveles.

La resolución del sistema de ecuaciones de tasas y muchos más detalles relacionados con el modelo CR serán expuestos en el próximo capítulo por constituir el grueso de esta tesis doctoral.

3

Descripción del modelo cinético propuesto

–ABAKO–

3.1 Descripción general

Ya se ha mencionado en varias ocasiones la importancia que tiene en la actualidad el desarrollo de modelos CR para el estudio de plasmas bajo condiciones de NLTE. Los cálculos cinéticos de este tipo se iniciaron hace aproximadamente tres décadas, con una motivación principalmente astrofísica, pero en los últimos años el interés por estos modelos se ha reforzado considerablemente debido a sus múltiples aplicaciones, por ejemplo, en el estudio de materiales de Z -alto importantes en las reacciones de fusión por confinamiento inercial, en las investigaciones sobre láseres de rayos-X o en el análisis de elementos de Z -bajo para el modelado de dispositivos típicos del confinamiento magnético.

Importantes grupos de investigación a nivel internacional han desarrollado sus propios códigos CR, utilizando diferentes formalismos y también distintos niveles de aproximación –comentados en el capítulo anterior–. Esto ha generado la necesidad de llevar a cabo estudios sistemáticos que permitan evaluar la exactitud de los modelos e identificar aquellas deficiencias en las que es preciso continuar trabajando. Con esta idea se han celebrado en los últimos años diversas reuniones [70–73] que han tenido por objetivo la comparación y contrastación de los resultados de los distintos modelos CR al abordar un conjunto de cálculos cinéticos específicos. Aunque estos encuentros han contribuido a identificar regiones en las condiciones del plasma o situaciones donde la cinética de poblaciones parece sencilla de describir, la tónica general ha estado siempre gobernada por las discrepancias observadas. Este hecho pone claramente de manifiesto que el estudio de la cinética

de poblaciones en plasmas de no-equilibrio es en la actualidad un campo abierto, de mucho interés, que puede ser abordado desde diferentes puntos de vista y en el que no existe consenso en la definición del camino hacia el modelo CR *definitivo*.

Las discrepancias encontradas entre los códigos tienen su origen en varios factores. Uno de ellos tiene que ver con las diferentes descripciones de la estructura atómica adoptadas por cada modelo –desde la más simple, basada en el concepto de átomo medio (AA), pasando por las de complejidad intermedia, como los modelos de configuración media (DCA o CA) o superconfiguración (SC), hasta la descripción más detallada, la de estructura fina (DLA o FS). Otra fuente de discrepancia es el carácter aproximado de los coeficientes de tasas de los procesos atómicos incluidos en la matriz CR. En la literatura uno puede encontrar expresiones analíticas recomendadas para los procesos atómicos más relevantes y aunque algunas conducen a mejores resultados que otras, ninguna de ellas se caracteriza por su particular exactitud. Para lograr esto último, los coeficientes de tasas deberían calcularse directamente para cada transición entre cada pareja de estados atómicos utilizando métodos mecanocuánticos avanzados. Sin embargo, cualquier cálculo cinético conlleva una evaluación masiva de coeficientes de tasas que imposibilita la aplicación de estas técnicas en cálculos a gran escala. No queda entonces otro remedio que llegar a un compromiso entre exactitud y viabilidad computacional.

De cara al trabajo presentado en esta tesis es importante reforzar esta última idea. Está claro que los elementos fundamentales que conforman un modelo CR descansan sobre la base teórica de la física atómica. En este sentido, la teoría de la estructura atómica está bien establecida desde 1935 [18] y en la actualidad pueden encontrarse precisos métodos mecanocuánticos para la determinación de las secciones eficaces de los distintos procesos atómicos. Sin embargo, cuando tratamos con plasmas en el que intervienen iones con una estructura energética de capa abierta, nos encontramos enseguida con la dificultad de tener que tratar con millones de niveles atómicos caracterizados por su momento angular total J y quizá billones de transiciones colisionales y radiativas conectando estos niveles. Es imposible entonces llevar a cabo, de forma general, cálculos cinéticos con este grado de descripción.

Desde hace años, el grupo de LANL lidera los esfuerzos para incorporar en un modelo CR los más avanzados formalismos mecanocuánticos en la determinación de la estructura atómica y las secciones eficaces. En un conjunto de diferentes trabajos [74–79], el grupo pone de manifiesto los logros alcanzados en este sentido, en parte debidos a los avances en la tecnología computacional, pero a la misma vez deja bien claro cuáles son los problemas y las serias limitaciones con las que se encuentran para llevar a cabo cálculos en serie. Aún en una descripción CA, las dificultades ya aparecen al tratar elementos parcialmente ionizados con Z -intermedio y Z -alto, y los autores han adoptado diferentes fórmulas para sortearlas, como reducir el número de iones incluidos en el modelo, limitar las configuraciones electrónicas hasta un valor máximo del número cuántico

principal n , etc. Sólo han podido realizarse estudios completos en estructura fina en elementos sencillos de Z -bajo [76, 79]. Otros códigos incluyen cálculos detallados en estructura fina pero sólo para modelar los estados fundamentales y un conjunto limitado de estados excitados, mientras que el resto se trata de forma promediada o aproximada [80]; en otros casos es posible trabajar en estructura fina porque se estudian situaciones en las que sólo es necesario tratar un ion de forma detallada, utilizando un modelo atómico más simple para los otros estados de carga [81].

Por otro lado, hay situaciones en las que un cálculo detallado no sólo es inviable sino también innecesario [82]. Especialmente en iones complejos con un número elevado de electrones, los niveles atómicos de energía e incluso los coeficientes de tasas de los procesos atómicos presentan propiedades estadísticas bien fundamentadas, que pueden ser útiles para evitar los cálculos directos, *nivel a nivel*. Estos hallazgos son los que han inspirado el desarrollo de los modelos CR basados en el concepto de superconfiguración [83, 84]. Esta aproximación se ha mostrado muy eficiente en el tratamiento de plasmas con Z -alto [61, 85–87]. Sin embargo, hay que decir que el coste computacional de este tipo de modelos es también muy elevado, sus resultados son bastante sensibles al número de superconfiguraciones incluidas en el modelo, por lo que es necesario llevar a cabo un procedimiento iterativo hasta alcanzar convergencia en los mismos y, por último, su rango de aplicación es limitado, ya que se asume que las configuraciones pertenecientes a una misma superconfiguración se distribuyen siguiendo la estadística de Boltzmann y esta hipótesis no se cumple en condiciones puras de NLTE [82].

Centrándonos ahora en los modelos diseñados para trabajar en un esquema DCA, suele ocurrir con relativa frecuencia que muchos de ellos no disponen de un módulo de cálculo atómico propio y por tanto tienen que recurrir a otros códigos para generar los datos necesarios [63, 80, 88]. Este hecho introduce una labor de preprocesamiento de datos que convierte la producción de cálculos en serie en una incómoda tarea.

Con todo lo dicho, el uso combinado de modelos atómicos sencillos con expresiones analíticas para la determinación de los coeficientes de tasas es una de las pocas alternativas para el diseño de un modelo CR capaz de llevar a cabo cálculos a gran escala y aplicable a un amplio rango de condiciones del plasma y valores de Z . A priori el precio a pagar es la pérdida de exactitud de los resultados obtenidos, pero se ha demostrado que este tipo de modelos pueden predecir de forma bastante razonable parámetros como la ionización media, la distribución de población entre las distintas especies iónicas e incluso ser útiles para estudios algo más sofisticados relacionados con la cinética y la espectroscopía de plasmas [89–91].

Ésta es la filosofía que hemos adoptado para el desarrollo del modelo CR objeto de esta tesis y cuyas características se describen en este capítulo. Ha sido bautizado con el nombre de ABAKO, que resulta ser el acrónimo de *Analytical expressions BAsed Kinetics cOde*. ABAKO es un código para el estudio de la cinética de poblaciones en plasmas que basa su versatilidad en la utilización de modelos

analíticos tanto para la determinación de la estructura atómica como para la evaluación de los coeficientes de tasas asociados a los procesos atómicos. Puede utilizarse para el estudio de cualquier elemento, ya sea de Z -bajo o Z -alto, en un amplio rango de condiciones de densidad y temperatura. Dispone de un módulo propio para el cálculo atómico que utiliza herramientas que ya habían sido desarrolladas por nuestro grupo de investigación. En concreto, las energías de los estados de cada especie iónica se determinan en el contexto de una aproximación de partícula independiente relativista. La ecuación de Dirac monoeléctrica se resuelve con un potencial efectivo analítico que puede ser cualquiera de los propuestos por el grupo en trabajos anteriores [21, 22, 34–38]. En el modelo no se incluyen efectos de CI. Utilizando biespinores monoeléctricos se determinan también las fuerzas de oscilador en la aproximación dipolar eléctrica. De esta forma, a costa de una pérdida de precisión, por otro lado asumible en el contexto de un cálculo de poblaciones, es posible abordar el cálculo de la estructura atómica de iones complejos con un pequeño coste computacional. Este módulo será descrito en detalle en la siguiente sección. No obstante, para aquellas situaciones que requieran de una precisa determinación de la estructura atómica, ABAKO incorpora la posibilidad de utilizar datos externos –procedentes de bases de datos u otros códigos más complejos– suministrados a través de un fichero escrito en el formato adecuado.

Por otro lado, debemos tener en cuenta que en la descripción proporcionada por el modelo analítico cada nivel atómico está representado por una configuración electrónica relativista del tipo

$$(n_1 l_1)_{j_1}^{w_1} (n_2 l_2)_{j_2}^{w_2} \cdots (n_\lambda l_\lambda)_{j_\lambda}^{w_\lambda}, \quad \sum_{i=1}^{\lambda} w_i = N, \quad (3.1)$$

siendo N el número de electrones de la especie iónica considerada. Esto significa que ABAKO es capaz de llevar a cabo cálculos cinéticos de tipo DCA comparables, en lo que al número de niveles se refiere, a los que proporcionan otros códigos con modelos atómicos más sofisticados. Uno de los puntos débiles atribuidos a los modelos de la misma naturaleza que ABAKO es su incapacidad para abordar con ciertas garantías la determinación de propiedades espectrales. Esto se debe esencialmente a que los módulos de cálculo atómico suelen estar constituidos por modelos muy sencillos, normalmente de tipo hidrogenoide, que proporcionan una descripción muy *gruesa* de la estructura atómica, con los niveles energéticos caracterizados sólo a través del número cuántico principal n . Evidentemente esta descripción es insuficiente en un cálculo espectroscópico. Así que, tras la determinación de las poblaciones, algunos modelos intentan solucionar estas deficiencias acudiendo a otros códigos para mejorar la descripción energética en las especies de interés y recurriendo a hipótesis de carácter estadístico para redistribuir la población asignada a los niveles hidrogenoides entre los niveles detallados [91]. Este hecho introduce fundamentalmente dos inconvenientes. En primer lugar, son numerosas las situaciones, particularmente bajo condiciones de NLTE, en las que las poblaciones de nivel no se distribuyen de acuerdo a sus pesos estadísticos y, en consecuencia, como comentan los propios autores [91], los resultados obtenidos bajo esta aproximación

serán imprecisos. Por otro lado, el modelo en cuestión ya no constituye un código cerrado, puesto que necesita de otros para poder abordar cierto tipo de cálculos, introduciendo además una tarea de postprocesamiento que de alguna forma interrumpe la producción continua de resultados. Así, es importante resaltar que el módulo atómico implementado en ABAKO elimina las deficiencias que presentan otros modelos de naturaleza analítica en el sentido que acabamos de comentar. Los cálculos cinéticos de ABAKO se realizan en una descripción DCA relativista, que potencialmente posee una riqueza de niveles suficiente para llevar a cabo estimaciones razonables de propiedades espectrales. Asimismo, otra característica destacable del modelo es su autosuficiencia, ya que ninguna de las etapas del cálculo cinético depende de los resultados de códigos externos para ser completada.

Pasemos ahora a describir las principales características del modelo CR propiamente dicho. El punto de partida es la ecuación que gobierna la evolución espacio-temporal de la densidad o población de iones $N_{\zeta m}$ con carga ζ en el estado atómico m , dada por

$$\frac{dN_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)}{dt} = \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta' m'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-, \quad (3.2)$$

y que también puede escribirse como

$$\frac{\partial N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta' m'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-, \quad (3.3)$$

donde \mathbf{v} es la velocidad del ion considerado, el término¹ $\mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+$ agrupa todos los coeficientes de tasas de aquellos procesos atómicos asociados a una transición $\zeta' m' \rightarrow \zeta m$ y que contribuyen a poblar el estado ζm , análogamente $\mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-$ representa el conjunto de contribuciones que provocan la despoblación del estado ζm .

En teoría cinética de plasmas es muy común suponer, y así se hace en ABAKO, que los electrones se adaptan de forma instantánea a los cambios en la distribución espacial de iones. Esto es equivalente a estudiar el movimiento electrónico y la cinética de poblaciones sobre una distribución estática de iones. Bajo esta aproximación, la ecuación anterior da lugar a la ecuación de tasas dependiente del tiempo,

$$\frac{\partial N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta' m'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-. \quad (3.4)$$

En esta tesis sólo se abordarán cálculos en situación estacionaria, lo que significa que $\frac{\partial N_{\zeta m}}{\partial t} = 0$. En principio, no sería complicado implementar en ABAKO la posibilidad de llevar a cabo cálculos dependientes del tiempo, así que ésta es una de las nuevas capacidades que se introducirán en un futuro próximo. En lo que ahora nos ocupa, la aproximación de estado estacionario es válida

¹Los términos \mathbb{R}^+ y \mathbb{R}^- dependen de las condiciones de densidad y temperatura del plasma. Como éstas pueden variar en el espacio y en el tiempo, \mathbb{R}^+ y \mathbb{R}^- dependen también de \mathbf{r} y t , aunque este hecho se ha omitido para no complicar la notación.

cuando los procesos atómicos son lo suficientemente rápidos para redistribuir las poblaciones antes de que ocurra cualquier cambio en la densidad total de iones o en la temperatura. De esta forma se obtiene,

$$\sum_{\zeta'm'} N_{\zeta'm'}(\mathbf{r}) \mathbb{R}_{\zeta'm' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta'm'} N_{\zeta m}(\mathbf{r}) \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta'm'}^- = 0. \quad (3.5)$$

Otra importante cuestión es que, dependiendo de su tamaño, de las condiciones de densidad y temperatura y de cómo afectan estos parámetros a la importancia relativa de los procesos inducidos por el campo de radiación en la cinética de poblaciones, un plasma puede ser *ópticamente delgado* u *ópticamente grueso*². En el primero de los casos, la radiación emitida escapa del plasma sin ser reabsorbida, mientras que en el segundo, parte de los fotones emitidos en una región del espacio pueden ser nuevamente absorbidos en la misma región o en otros puntos del plasma. En ausencia de fuentes externas de radiación, cuando el plasma es delgado los procesos atómicos inducidos por el campo pueden despreciarse en las ecuaciones de tasas, de tal forma que éstas pasan a depender únicamente de los procesos colisionales y los procesos radiativos espontáneos. Así que, en un plasma delgado, las poblaciones atómicas de estado estacionario se obtienen directamente mediante la inversión de la matriz CR. Sin embargo, en un plasma ópticamente grueso el sistema de ecuaciones de tasas depende de la intensidad de la radiación y por tanto debe resolverse de forma simultánea y autoconsistente con la ecuación de transferencia radiativa. En su forma más general, esta ecuación viene dada por

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e})}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) = -\kappa(\mathbf{r}, t, \nu) I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) + j(\mathbf{r}, t, \nu), \quad (3.6)$$

mientras que en situación estacionaria se obtiene

$$\mathbf{e} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) = -\kappa(\mathbf{r}, \nu) I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) + j(\mathbf{r}, \nu), \quad (3.7)$$

donde I es la *intensidad específica* o *intensidad de radiación espectral*, ν es la frecuencia de los fotones, \mathbf{e} es un vector unitario en la dirección de propagación, κ es el *coeficiente de absorción* y j el *coeficiente de emisión*.

El transporte radiativo es el mecanismo responsable de la redistribución de energía en el interior del medio, mediante la emisión y absorción de fotones en lugares distintos del espacio. El campo de radiación acopla las diferentes regiones del plasma y su influencia provoca que, en general, las poblaciones de nivel varíen con el punto del espacio considerado –el medio es no-homogéneo–, incluso cuando las condiciones de densidad y temperatura se mantengan uniformes. La importancia del transporte radiativo en el estudio de atmósferas planetarias y estelares es vital [67] y también ha quedado demostrada su influencia en el balance poblacional y las propiedades espectrales de

²Esta clasificación no debe interpretarse de forma rígida. La casuística es muy amplia y dependiendo de las características del plasma puede ocurrir, por ejemplo, que su espectro discreto sea ópticamente grueso y el espectro continuo no, que sólo un número de líneas del espectro discreto sean gruesas y las otras delgadas, etc

plasmas densos generados por láser [92]. Según esto, un determinado código cinético será realmente completo únicamente si tiene la capacidad de incorporar en sus cálculos los efectos del transporte radiativo o los efectos de opacidad, como también se denominan. Ahora bien, la resolución exacta de la ecuación de transporte para cada una de las transiciones radiativas que ocurren en el plasma es un problema muy costoso; además, como las poblaciones de los niveles iónicos dependen del campo de radiación y éste a su vez de las poblaciones, el problema debe resolverse de forma iterativa hasta alcanzar convergencia. Por todo esto, en la literatura han ido apareciendo diferentes aproximaciones y técnicas numéricas para el tratamiento del transporte de radiación bajo condiciones de NLTE [67, 68, 93–96] y también otro tipo de formalismos que evitan la resolución directa de la ecuación de transferencia [97–101].

Con el objetivo de que ABAKO pueda utilizarse en el estudio de plasmas ópticamente gruesos, el código es capaz de llevar a cabo cálculos cinéticos que incluyen efectos de opacidad sobre las transiciones del espectro ligado-ligado. Ahora bien, la filosofía de ABAKO es la de utilizar aquellas aproximaciones que permitan ampliar el rango de aplicación del modelo al mayor número de situaciones, con un coste computacional asumible y sin sacrificar en exceso la calidad de los resultados. En consecuencia, ABAKO no resuelve de forma directa la ecuación de transporte radiativo, sino que utiliza un modelo original, desarrollado por nuestro grupo de investigación, basado en el concepto de factor de escape [102–104]. Así, el formalismo que se expone en este trabajo establece, a partir de principios fundamentales y haciendo uso de la solución formal de la ecuación de transporte radiativo, un marco teórico general aplicable a cualquier modelo cinético sustentado en la idea del factor de escape. Partiendo de estas expresiones generales, en la sección 3.5.2 presentaremos, por un lado, las características particulares del modelo que finalmente ha sido implementado en ABAKO para un medio con geometría plana, estableciendo las ecuaciones que permiten definir los llamados *coeficientes de acoplamiento radiativo*. A este respecto, el modelo es conceptualmente similar al que se describe originalmente en [97]. Por otro lado, en el contexto del marco teórico planteado, deduciremos las ecuaciones básicas de otros modelos propuestos en la literatura [97, 99, 100, 105], pondremos claramente de manifiesto bajo qué conjunto de aproximaciones tales modelos son aplicables y veremos qué ventajas presenta frente a éstos la propuesta formulada en ABAKO.

Por último, de las ecuaciones generales del modelo planteado extraeremos, como caso particular, las correspondientes a un plasma ópticamente grueso homogéneo. Esto es, aquella situación en la que tanto la distribución espacial de poblaciones como las condiciones de densidad y temperatura son uniformes en todo el medio. Esta aproximación es equivalente a incluir los efectos de la radiación sólo de forma promediada. Así, bajo la descripción de plasma homogéneo y utilizando los resultados obtenidos en [106–108], ABAKO incluye la posibilidad de llevar a cabo cálculos cinéticos con

efectos promediados de opacidad para cualquiera de las tres geometrías básicas –plana, cilíndrica y esférica–.

Los detalles más técnicos relacionados con los métodos de resolución de la matriz de tasas, requisitos computacionales, limitaciones actuales, etc. serán expuestos en la sección 3.7.

3.2 Criterios de notación

Creemos conveniente en este punto fijar y comentar algunos criterios generales acerca de la notación que vamos a utilizar en los siguientes apartados. Nuestra intención es simplificar la redacción de los mismos y evitar explicaciones redundantes acerca del significado de las distintas variables.

Para empezar debemos tener presente que cualquier cálculo cinético sobre un plasma de número atómico Z involucra, a priori, los $Z + 1$ estados de carga o iones asociados a dicho elemento. Si ζ representa la carga de la especie iónica, entonces

$$\zeta = 0, \dots, Z.$$

Así, $\zeta = 0$ hará referencia a la especie neutra y $\zeta = Z$ al ion desnudo. El número de electrones ligados del ion con carga ζ es igual $Z - \zeta$. Asimismo, dentro de cada ion podremos distinguir diferentes niveles o estados atómicos, que etiquetaremos de forma general como ζm . Si M_ζ es el número total de niveles asociado al estado de carga ζ , entonces

$$m = 0, \dots, M_\zeta - 1.$$

De esta forma $\zeta 0$ representa el estado fundamental del ion con carga ζ y ζm con $m > 0$ cualquier estado excitado. Si el cálculo de poblaciones se efectúa sobre una ventana de iones, desde la especie con carga ζ_1 hasta la especie con carga ζ_2 , entonces el número total N_L de niveles incluidos en el modelo CR viene dado por

$$N_L = \sum_{\zeta=\zeta_1}^{\zeta_2} M_\zeta$$

Para referirnos a los estados ζm de un ion hablaremos indistintamente de *estados* o *niveles*. No obstante, debemos tener presente que en una descripción DCA no-relativista, cada estado se corresponde en realidad con una configuración del tipo

$$\zeta m \equiv (n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_\lambda l_\lambda)^{w_\lambda}, \quad \sum_{i=1}^{\lambda} w_i = Z - \zeta,$$

mientras que en el caso DCA relativista, como ocurre en el módulo atómico propio de ABAKO, tendremos

$$\zeta m \equiv (n_1 l_1)_{j_1}^{w_1} (n_2 l_2)_{j_2}^{w_2} \dots (n_\lambda l_\lambda)_{j_\lambda}^{w_\lambda}, \quad \sum_{i=1}^{\lambda} w_i = Z - \zeta.$$

Si en cualquiera de las dos situaciones n_{max} es el máximo valor del número cuántico principal contemplado en los cálculos, entonces el número de orbitales de una configuración será

$\lambda = \frac{n_{max}(n_{max}+1)}{2}$ en el primer caso y $\lambda = n_{max}^2$ en el segundo. Asimismo, en una descripción DCA resulta útil definir el vector de ocupación $\mathbf{w}_{\zeta m}$ como el que se construye a partir de las ocupaciones de cada orbital dentro de la configuración ζm , esto es,

$$\mathbf{w}_{\zeta m} \equiv \{w_1, w_2, \dots, w_\lambda\}$$

Por otro lado, cuando estamos trabajando con datos atómicos en descripción DTA/DLA, cada estado ζm hará referencia a un verdadero término/nivel en el sentido atómico. En DTA el estado vendrá etiquetado en última instancia por su momento angular de espín S y su momento angular orbital L , mientras que en descripción DLA el nivel en cuestión se caracteriza por el valor del momento angular total J .

Sea cual sea el esquema de estructura atómica elegido, cada estado lleva asociada una degeneración o peso estadístico $g_{\zeta m}$, que se determina de la forma

$$\begin{aligned} (i) \quad \text{DCA no-relativista:} \quad & g_{\zeta m} = \prod_{i=1}^{\lambda} \frac{(4l_i+2)!}{w_i![(4l_i+2)-w_i]!} \\ (ii) \quad \text{DCA relativista:} \quad & g_{\zeta m} = \prod_{i=1}^{\lambda} \frac{(2j_i+1)!}{w_i![(2j_i+1)-w_i]!} \\ (iii) \quad \text{DTA:} \quad & g_{\zeta m} = (2S+1)(2L+1) \\ (iv) \quad \text{DLA:} \quad & g_{\zeta m} = 2J+1 \end{aligned}$$

La energía de cada nivel ζm viene dada por la cantidad positiva $E_{\zeta m}$ medida respecto al estado fundamental de la especie iónica correspondiente. Esto significa que, para todo ζ , $E_{\zeta 0} = 0$. Sin embargo, sabemos que si tomamos un nivel de referencia común para todas las especies iónicas, podríamos decir que existen saltos energéticos entre los estados de dos iones diferentes. En particular, el potencial de ionización I_{ζ} del ion con carga ζ coincide con la distancia energética entre los estados fundamentales de los iones con carga ζ y $\zeta + 1$. Un estado concreto con energía $E_{\zeta m} > I_{\zeta}$ es un estado autoionizante del ion ζ . Si, como suele ocurrir en física atómica, situamos el cero de energía común para todas las especies iónicas en el estado fundamental del núcleo desnudo, entonces la energía $E_{\zeta m}^*$ del estado ζm en esta escala viene dada por

$$E_{\zeta m}^* = - \sum_{\zeta'=\zeta}^{Z-1} I_{\zeta'} + E_{\zeta m}$$

La explicación quizá quede más clara atendiendo al diagrama que se presenta en la figura 3.1.

En el contexto del modelo CR, conviene recordar que $N_{\zeta m}$ representa la población del estado ζm medida en número de partículas por unidad de volumen. Si el cálculo cinético incluye los iones desde ζ_1 hasta ζ_2 , entonces debe cumplirse

$$\sum_{\zeta=\zeta_1}^{\zeta_2} \sum_{m=0}^{M_{\zeta}-1} N_{\zeta m} = n_{ion},$$

Por último, debemos tener presente que, de forma habitual, utilizaremos el cm como unidad de longitud. Esto significa que las densidades de partículas –electrónica, iónica o poblaciones– se expresan en cm^{-3} . Como unidad de energía se usará el eV . Además, la temperatura se medirá en unidades equivalentes de energía³, así que su valor también vendrá dado en eV .

Los criterios establecidos aquí son de aplicación general para los apartados que siguen. No obstante, en la discusión de algún aspecto particular es posible que estas normas requieran alguna matización o aclaración extra, que serán expuestas llegado el caso.

3.3 Determinación de los datos atómicos

Para la determinación de todas aquellas magnitudes atómicas necesarias en un cálculo cinético, ABAKO dispone de un módulo propio que sigue la metodología de los potenciales paramétricos o analíticos, expuesta en la sección 2.1.6. Se trata de un modelo desarrollado en la aproximación de campo central, en una descripción DCA relativista y basado en el uso del conjunto de potenciales analíticos propuestos en trabajos anteriores por nuestro grupo de investigación. La validez de estos potenciales ya ha sido contrastada en diversas publicaciones y es por ello que, en este trabajo, nos limitaremos a la presentación de sus ecuaciones más representativas. Los detalles de cada propuesta particular pueden consultarse en la bibliografía [21, 22, 34–38].

3.3.1 Consideraciones preliminares

Supongamos un ion con número atómico Z , N electrones ligados y, consecuentemente, con carga $\zeta = Z - N$. Siguiendo un esquema relativista, en la aproximación de campo central, el hamiltoniano del sistema viene dado por –sección 2.1.7–

$$H \approx \sum_{i=1}^N [c\alpha \cdot \mathbf{p}_i + c^2\beta + U(r_i)]. \quad (3.8)$$

En el caso que nos ocupa, $U(r)$ es uno de los potenciales analíticos a los que hemos hecho alusión y que posteriormente describiremos.

El procedimiento utilizado para determinar la estructura energética del ion se fundamenta en la obtención de las funciones de onda monoeléctricas y autovalores asociados a los distintos orbitales relativistas. Así, consideremos un estado cualquiera ζm representado, en esquema DCA, a través de la siguiente configuración electrónica

$$\zeta m \equiv (n_1 l_1)_{j_1}^{w_1} (n_2 l_2)_{j_2}^{w_2} \cdots (n_\lambda l_\lambda)_{j_\lambda}^{w_\lambda}, \quad \sum_{i=1}^{\lambda} w_i = Z - \zeta. \quad (3.9)$$

³Pueden consultarse los factores de equivalencia en el apéndice A.

Nos planteamos entonces la resolución de la ecuación de Dirac monoeléctrica estacionaria para cada uno de los orbitales nlj ocupados,

$$[c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + c^2\beta + U(r)] \psi_{nljm_j} = \varepsilon_{nlj} \psi_{nljm_j}. \quad (3.10)$$

En esta ecuación, ε_{nlj} es el autovalor asociado al orbital nlj y ψ_{nljm_j} el correspondiente espinor de Dirac monoeléctrico

$$\psi_{nljm_j} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nlj}(r)\Omega_{ljm_j}(\theta, \varphi) \\ iQ_{nlj}(r)\Omega_{l'jm_j}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}, \quad (3.11)$$

donde $l' = l \pm 1$ para $j = l \pm \frac{1}{2}$.

Reescribiendo convenientemente el producto $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$ y teniendo en cuenta ciertas propiedades de los bi-espinores esféricos $\Omega_{ljm_j}(\theta, \varphi)$, es posible demostrar [46] que la ecuación (3.10) se reduce al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales para las componentes radiales $P_{nlj}(r)$ y $Q_{nlj}(r)$

$$\begin{aligned} \frac{dP_{nlj}(r)}{dr} &= -\frac{\kappa}{r}P_{nlj}(r) + \frac{1}{c}[\varepsilon_{nlj} - U(r)]Q_{nlj}(r), \\ \frac{dQ_{nlj}(r)}{dr} &= \frac{\kappa}{r}Q_{nlj}(r) - \frac{1}{c}[\varepsilon_{nlj} - U(r) - 2c^2]P_{nlj}(r), \end{aligned} \quad (3.12)$$

siendo $\kappa = (l - j)(2j + 1)$ el número cuántico relativista.

Como el potencial $U(r)$ es una función analítica conocida, para resolver el sistema (3.12) no es necesario iniciar ningún proceso de autoconsistencia, sino que basta con aplicar directamente un algoritmo para la resolución numérica de problemas de tipo Sturm-Liouville [21]. De esta forma, habremos encontrado los autovalores ε_{nlj} y las funciones $P_{nlj}(r)$ y $Q_{nlj}(r)$ para cada orbital nlj .

3.3.2 Diferentes propuestas de potenciales analíticos

Lógicamente, los autovalores y los orbitales relativistas dependerán de la función potencial elegida. Nuestro grupo de investigación ha desarrollado tres tipos de potencial que contemplan diferentes situaciones y grados de complejidad relativos a la estructura energética de iones multielectrónicos. Describiremos a continuación las principales características de cada uno de ellos.

La primera opción disponible en ABAKO, presentada en [21, 34], es el potencial $U_{ig}(r)$ para iones aislados en estado fundamental, dado por

$$U_{ig}(r) = -\frac{1}{r}[(N - 1)\phi(r) + Z - N + 1], \quad (3.13)$$

donde $\phi(r)$ es la función de apantallamiento⁴, para la que se propone la siguiente expresión

$$\phi(r) = \begin{cases} e^{-a_1 r^{a_3}} & \text{si } N \geq 12, \\ (1 - a_2 r) & \text{si } N = 2, 3 \text{ o } 8 \leq N \leq 11, \\ e^{-a_1 r} & \text{si } 4 \leq N \leq 7. \end{cases} \quad (3.14)$$

⁴En general, un potencial central aislado siempre puede escribirse de la forma (3.13). Lo que en realidad distingue a cada modelo es la expresión propuesta para la función de apantallamiento $\phi(r)$.

Los parámetros a_1 , a_2 y a_3 del potencial se obtuvieron como resultado de la minimización de la expresión

$$\Xi^2 = \sum_{k=1}^{r_{max}} \left[\frac{U_{ig}(r_k) - U_{ref}(r_k)}{U_{ref}(r_k)} \right]^2, \quad (3.15)$$

tomando como potencial de referencia $U_{ref}(r)$ el potencial autoconsistente relativista del código DAVID [109]. En esta última ecuación la suma se extiende sobre todos los puntos r_k de la malla radial. Para el procedimiento de minimización se utilizó un método Nelder-Mead no-lineal. Así, como resultado, para cada secuencia isoelectrónica, desde $N = 2$ hasta $N = 92$, los parámetros se determinan a través de un polinomio de cuarto grado en Z [35],

$$a_k(N, Z) = c_{4k}Z^4 + c_{3k}Z^3 + c_{2k}Z^2 + c_{1k}Z + c_{0k}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (3.16)$$

Recordemos, sin embargo, que el potencial $U_{ig}(r)$ fue desarrollado sólo para iones en su estado fundamental. Así, en [22, 36], se propone una técnica para el tratamiento de los estados excitados del ion. En un contexto DCA relativista, dada una configuración electrónica de partida, a la que llamaremos *configuración padre*, es posible obtener una configuración excitada mediante la promoción de un electrón ligado desde un orbital inicial $\gamma \equiv n_\gamma l_\gamma j_\gamma$ hasta un orbital final más externo $\eta \equiv n_\eta l_\eta j_\eta$. Se sugiere entonces para el potencial $U_{ix}(\mathbf{r})$ asociado a la configuración excitada una expresión dada por

$$U_{ix}(\mathbf{r}) = U(r) + \delta U(\mathbf{r}), \quad (3.17)$$

donde $\delta U(\mathbf{r})$ es la corrección de configuración excitada sobre el potencial central $U(r)$ de la configuración padre. Asumiendo que la contribución al potencial electrostático de un electrón que ocupa un orbital η cualquiera es

$$u(\mathbf{r})_\eta = \int_V \frac{|\psi_\eta(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (3.18)$$

entonces, teniendo en cuenta el procedimiento de generación de la configuración excitada, se propone para $\delta U(\mathbf{r})$ la siguiente expresión

$$\delta U(\mathbf{r}) = -u_\gamma(\mathbf{r}) + u_\eta(\mathbf{r}) = - \int_V \frac{|\psi_\gamma(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \int_V \frac{|\psi_\eta(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (3.19)$$

Ahora bien, para continuar trabajando en la aproximación de campo central, la corrección de configuración excitada debe ser central. Con este objetivo se lleva a cabo el promedio angular de la contribución monolectrónica (3.18), para obtener

$$\begin{aligned} u_\eta(r) = \langle u_\eta(\mathbf{r}) \rangle &= \sum_{\substack{l=0 \\ l \text{ par}}}^{2l_\eta} D(l, l_\eta) \left[\frac{1}{r^{l+1}} \int_0^r P_\eta^2(r) r^l dr + r^l \int_r^\infty P_\eta^2(r) \frac{1}{r^{l+1}} dr \right] \\ &- \sum_{\substack{l=0 \\ l \text{ par}}}^{2l'_\eta} D(l, l'_\eta) \left[\frac{1}{r^{l+1}} \int_0^r Q_\eta^2(r) r^l dr + r^l \int_r^\infty Q_\eta^2(r) \frac{1}{r^{l+1}} dr \right], \end{aligned} \quad (3.20)$$

donde $D(l, l_\eta) = \frac{2l_\eta+1}{2l+1} \langle l_\eta l_\eta 0 | 000 \rangle^2$ y siendo $P_\eta(r)$ y $Q_\eta(r)$ las componentes radiales obtenidas con el potencial $U(r)$.

Finalmente, la corrección central $\delta U(r)$ viene dada por

$$\delta U(r) = -u_\gamma(r) + u_\eta(r), \quad (3.21)$$

y como expresión para el potencial central $U_{ix}(r)$ asociado a la configuración excitada se propone

$$U_{ix}(r) = U(r) + \delta U(r). \quad (3.22)$$

En ABAKO es posible utilizar el procedimiento que acabamos de describir sustituyendo $U(r)$ por $U_{ig}(r)$ y obtener así una mejor descripción de las configuraciones excitadas generadas por el tránsito de un electrón a partir del estado fundamental. A priori, la técnica podría volver a aplicarse de forma secuencial sobre un potencial ya corregido para incluir nuevos estados excitados. Sin embargo, en la práctica, esta técnica es de difícil implementación, ya que para evaluar la corrección $\delta U(r)$, es necesario ir almacenando, en cada paso, los orbitales involucrados en la transición que fueron obtenidos con el potencial del paso anterior. De esta manera, a partir de un cierto número de estados excitados el cálculo se vuelve intratable.

Por otro lado, tanto el potencial $U_{ig}(r)$ como $U_{ix}(r)$ han sido desarrollados en un contexto de átomo aislado. Sin embargo, sabemos que en un plasma, un ion no se encuentra en tal situación, sino que se verá afectado por el resto de iones y tanto el potencial atómico como la estructura energética sufrirán alteraciones respecto a la situación aislada. Así, nuestro grupo propuso en [37, 38] una metodología para incluir los efectos de plasma en el potencial. En este contexto, el potencial total $U_t(\mathbf{r})$ debido al ion y al plasma viene dado por

$$U_t(\mathbf{r}) = U_N(\mathbf{r}) + U_p(\mathbf{r}), \quad (3.23)$$

siendo $U_N(\mathbf{r})$ el potencial creado por los N electrones ligados y por el núcleo y $U_p(\mathbf{r})$ el potencial debido al resto de iones y electrones libres del plasma.

Teniendo en cuenta la relación que establece la ecuación de Poisson entre potencial $U(\mathbf{r})$ y densidad de carga $\rho(\mathbf{r})$, se obtiene

$$\nabla^2 U_t(\mathbf{r}) = \nabla^2 U_N(\mathbf{r}) - 4\pi\rho_p(\mathbf{r}). \quad (3.24)$$

Asumiendo simetría esférica para todos los potenciales y definiendo la función de carga $f(r)$ como $f(r) = -rU(r)$, entonces (3.24) puede escribirse como

$$\frac{d^2 f_t(r)}{dr^2} = \frac{d^2 f_N(r)}{dr^2} + 4\pi r \rho_p(r). \quad (3.25)$$

Se usa entonces la aproximación linealizada de Debye-Hückel (véase 2.1.10), que propone para $\rho_p(r)$ la siguiente expresión

$$\rho_p(r) = \frac{a^2}{4\pi r} f_t(r), \quad (3.26)$$

donde a es el radio de Debye inverso

$$a = \frac{1}{D} = \left[\frac{4\pi n_{ion}(\bar{Z} + \overline{Z^2})}{T} \right]^{1/2}. \quad (3.27)$$

De esta manera, la ecuación (3.25) se transforma en

$$\frac{d^2 f_t(r)}{dr^2} - a^2 f_t(r) = \frac{d^2 f_N(r)}{dr^2}. \quad (3.28)$$

Ahora bien, el potencial efectivo que ve un electrón en el orbital η –que es el que interviene en la ecuación de Dirac monoeléctronica (3.10)– difiere del potencial total en la contribución del propio electrón a la distribución de carga, esto es, $U_{ef}(r) = U_t(r) - U_e(r)$ o $f_{ef}(r) = f_t(r) - f_e(r)$, donde $f_e(r)$ es la función de carga del electrón óptico. Teniendo presente esta relación, la función de carga para el sistema formado por los $N - 1$ electrones ligados más el núcleo vendrá dada por $f_{N-1}(r) = f_N(r) - f_e(r)$. Finalmente, a partir de (3.28) se obtiene

$$\frac{d^2 f_{ef}(r)}{dr^2} - a^2 f_{ef}(r) = \frac{d^2 f_{N-1}(r)}{r^2} + a^2 f_e(r). \quad (3.29)$$

Suponiendo que $f_{N-1}(r)$ y $f_e(r)$ son funciones conocidas, la solución de esta ecuación diferencial viene dada por

$$f_{ef}(r) = f_{N-1}(r) + C e^{-ar} - \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-a|s-r|} [f_{N-1}(s) + f_e(s)] ds, \quad (3.30a)$$

$$C = \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-as} [f_{N-1}(s) + f_e(s)] ds, \quad (3.30b)$$

donde la constante C se obtiene imponiendo sobre las funciones de carga el comportamiento asintótico correcto a pequeñas y grandes distancias del núcleo,

$$\lim_{r \rightarrow 0} f_{N-1}(r) = Z, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} f_{N-1}(r) = Z - N + 1, \quad (3.31a)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} f_e(r) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} f_e(r) = -1, \quad (3.31b)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} f_{ef}(r) = Z, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} f_{ef}(r) \neq \pm\infty. \quad (3.31c)$$

Los efectos de plasma aparecen de forma explícita en el modelo a través del radio inverso de Debye a , que depende de parámetros característicos del plasma como la temperatura y los momentos estadísticos \bar{Z} y $\overline{Z^2}$. De hecho, cuando $a = 0$ se recupera el caso aislado, esto es, $\lim_{a \rightarrow 0} U_{ef}(r) = U_{N-1}(r)$.

La ecuación (3.30) permite la determinación de $f_{ef}(r)$ mediante un proceso iterativo. Se empieza con unas funciones $f_{N-1}(r)$ y $f_e(r)$ correspondientes a la situación aislada y se obtiene el potencial efectivo $U_{ef}(r)$. Con este potencial se determinan las autofunciones monoeléctronicas y éstas se utilizan para calcular unas nuevas funciones $f_{N-1}(r)$ y $f_e(r)$. El proceso se repite hasta alcanzar la autoconsistencia. Sin embargo, en el contexto de un cálculo cinético, la cantidad de

datos atómicos necesarios es en general tan grande, que el procedimiento autoconsistente aumentaría considerablemente el tiempo de computación, anulando así las ventajas que tiene, a priori, la utilización de potenciales paramétricos.

Así, para evitar el proceso iterativo, la función $f_{N-1}(r)$ se aproxima por la correspondiente al caso aislado $f_{i,N-1}(r)$, mientras que para la función de carga del electrón óptico se utiliza su comportamiento asintótico a largas distancias, $f_e(r) \approx -1$. El potencial efectivo obtenido de esta manera, que denotaremos como $U_n^I(r)$, viene dado por

$$U_n^I(r) = U_i(r) - \frac{1}{r} \left[1 + C e^{-ar} + \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-a|s-r|} s U_i(s) ds \right]. \quad (3.32)$$

En esta expresión $U_i(r)$ puede ser cualquier potencial para el sistema aislado de $N - 1$ electrones y $C = -1 - \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-as} s U(s) ds$.

Expresando $U_i(r)$ en la forma general (3.13), entonces (3.32) puede reescribirse en términos de una función de apantallamiento arbitraria $\phi(r)$ como

$$U_n^I(r) = -\frac{1}{r} \left\{ (N - 1) [\phi(r) - \chi(r)] + [Z - N + (N - 1) \chi(0)] e^{-ar} + 1 \right\}, \quad (3.33)$$

donde la *función de apantallamiento estructural del plasma* $\chi(r)$ viene dada por

$$\chi(r) = \frac{a}{2} \int_0^\infty e^{-a|s-r|} \phi(s) ds. \quad (3.34)$$

En ABAKO puede utilizarse para $\phi(r)$ la expresión (3.14).

Según se discute en [37] el potencial $U_n^I(r)$ resulta adecuado para incluir los efectos de plasma cuando éste es débilmente acoplado. Para plasmas fuertemente acoplados es mejor utilizar otra expresión derivada en el contexto del modelo de ion esfera (ver 2.1.10),

$$U_n^{II}(r) = U_i(r) - U_i(R_i) + \frac{\bar{Z}}{2R_i} \left[1 - \left(\frac{r}{R_i} \right)^2 \right], \quad (3.35)$$

donde recordemos que el radio de ion esfera viene dado por $R_i = \left(\frac{3}{4\pi n_{ion}} \right)^{1/3}$.

En resumen, el módulo propio de ABAKO para la determinación de datos atómicos puede utilizarse con los siguientes potenciales analíticos:

- El potencial $U_{ig}(r)$ para iones aislados en estado fundamental, definido por la ecuación (3.13) y la expresión (3.14) para la función de apantallamiento $\phi(r)$.
- El potencial $U_{ix}(r)$ para iones aislados en estados excitados, definido por la ecuación (3.17) y la expresión (3.21) para la corrección de configuración excitada.
- El potencial $U_n^I(r)$ dado por (3.33) o $U_n^{II}(r)$ dado por (3.35), que incluyen efectos de plasma en los cálculos atómicos en los casos de acoplamiento débil y acoplamiento fuerte, respectivamente.

3.3.3 Determinación de energías totales

El procedimiento seguido para calcular la energía total del estado atómico ζm es el siguiente. Una vez seleccionado el potencial analítico, se resuelve la ecuación de Dirac y se determinan los autovalores y las componentes radiales de cada orbital relativista $\eta \equiv n_\eta l_\eta j_\eta$. Entonces, se calcula la densidad $\rho_{\zeta m}(r)$ de electrones ligados,

$$\rho_{\zeta m}(r) = \sum_{\eta=1}^{\lambda} w_\eta \frac{[P_\eta(r) + Q_\eta(r)]^2}{r^2}, \quad (3.36)$$

que satisface la condición

$$\int_V \rho_{\zeta m}(r) d\mathbf{r} = N. \quad (3.37)$$

Entonces, la energía $E_{\zeta m}^*$ –sobre una escala común para todos los estados de carga– se evalúa mediante una expresión establecida en el contexto de la teoría del funcional de la densidad [110]

$$E_{\zeta m}^* = \sum_{\eta=1}^{\lambda} w_\eta \varepsilon_\eta - \int_V \rho_{\zeta m}(r) U(r) d\mathbf{r} - \int_V \rho_{\zeta m}(r) \frac{Z}{r} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \int_V \frac{\rho_{\zeta m}(r) \rho_{\zeta m}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + E_{xc}[\rho_{\zeta m}], \quad (3.38)$$

siendo ε_η el conjunto de autovalores determinado con el potencial analítico seleccionado y $U(r)$ dicho potencial –aunque si hemos resuelto la ecuación de Dirac monoeléctronica usando un potencial con efectos de plasma, en la expresión anterior, $U(r)$ debe sustituirse por el potencial en situación aislada–.

Asimismo, en la aproximación de *densidad local* se asume que la energía de intercambio y correlación $E_{xc}[\rho]$ viene dada por [111]

$$E_{xc}[\rho] = \int_V \rho(r) \epsilon_{xc}[\rho(r)] d\mathbf{r}, \quad (3.39)$$

donde ϵ_{xc} es la contribución de intercambio y correlación a la energía total debida a cada electrón en un gas homogéneo de electrones no-interaccionantes con densidad ρ . En situación aislada se utiliza para ϵ_{xc} la expresión propuesta en [112],

$$\epsilon_{xc}[\rho] = -\frac{3}{4\pi r_s \alpha} - b \left[(1 + x^3) \ln(1 + 1/x) + \frac{1}{2}x - x^2 - \frac{1}{3} \right], \quad (3.40)$$

donde $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$, $b = 0.0333$, $x = r_s/11.4$ y $r_s = [\frac{4}{3}\pi\rho(r)]^{-1/3}$. Cuando se introducen efectos de plasma se acude a una expresión más apropiada, dada por [113,114]

$$\epsilon_{xc}[\rho] = \epsilon_{ex}[\rho] + \epsilon_{corr}[\rho], \quad (3.41)$$

con

$$\epsilon_{ex}[\rho] = -0.4073 \frac{\tanh(\tau^{-1})}{r_s}, \quad (3.42)$$

$$\epsilon_{corr}[\rho] = -0.6109 r_s^{1/2} (-0.081 + 1.127\tau^2 + 3.756\tau^4) (1 + 1.291\tau^2 + 3.53\tau^4) \tanh(\tau^{1/2}), \quad (3.43)$$

donde r_s ya ha sido definido y $\tau = 2 \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{2/3} r_s^2 T$.

En ABAKO, el procedimiento que acabamos de describir se utiliza para calcular y establecer la estructura de niveles sobre el estado fundamental $\zeta 0$ de un mismo estado de carga ζ . Así, la energía $E_{\zeta m}$ de un nivel atómico, tal y como se utiliza en el modelo CR, viene dada por

$$E_{\zeta m} = E_{\zeta m}^* - E_{\zeta 0}^*. \quad (3.44)$$

Sobre una escala energética común, la posición de las energías de los estados fundamentales de las distintas especies iónicas no se determina de esta manera, sino que se fija externamente, utilizando datos experimentales de potenciales de ionización disponibles en la literatura [115], o bien, calculando éstos con códigos computacionales más sofisticados [116]. Esto significa que, dado el potencial de ionización I_ζ , queda fijada la distancia energética entre los estados fundamentales de los iones con carga ζ y $\zeta + 1$, esto es, $I_\zeta = E_{\zeta+10}^* - E_{\zeta 0}^*$. La energía del estado fundamental $\zeta 0$ se fija a través de $E_{\zeta 0}^* = -\sum_{\zeta'=0}^{\zeta-1} I_{\zeta'}$. Este modo de proceder queda justificado si somos conscientes de la precisión limitada de los métodos basados en potenciales analíticos y, por otro lado, tenemos en cuenta la importancia de los valores de los potenciales de ionización para una adecuada determinación del balance poblacional.

Por último, aunque son varios los modelos de potencial disponibles, los cálculos que se presentan en este trabajo se han llevado a cabo con el potencial $U_{ig}(r)$. Los motivos que nos han llevado a tomar esta decisión son varios. En primer lugar, aunque el potencial $U_{ig}(r)$ haya sido desarrollado para tratar adecuadamente estados fundamentales, nada impide su utilización para calcular la energía de estados excitados. Al cambiar la configuración electrónica cambia la ocupación de los orbitales relativistas y, en consecuencia, la energía total asociada. Es posible entonces obtener con $U_{ig}(r)$ una energía para el estado excitado ζm distinta de la del estado fundamental $\zeta 0$. Lógicamente, estos valores no serán tan exactos como aquellos obtenidos con el potencial $U_{ix}(r)$. Sin embargo, con éste sólo es posible tratar los estados excitados que difieran del fundamental en el tránsito de un único electrón. Además, para lograr una estimación razonable de las propiedades ópticas de un plasma, es necesario incluir en el modelo CR un gran número de estados excitados y muchos de ellos se distinguen de la configuración fundamental como consecuencia de la redistribución de varios electrones. Así pues, para este tipo de cálculos el potencial $U_{ix}(r)$ no resulta adecuado. Finalmente, tampoco usaremos los potenciales con efectos de plasma $U_n^I(r)$ y $U_n^{II}(r)$ porque éstos dependen de la distribución de poblaciones a través de \bar{Z} y $\overline{Z^2}$. Esto implica que el cálculo atómico debe resolverse de forma autoconsistente con las ecuaciones de tasas. Sin embargo, en un cálculo cinético donde pueden intervenir miles de niveles y cientos de miles de transiciones, tener que determinar en cada iteración todos los datos atómicos hace que el procedimiento sea completamente ineficiente desde el punto de vista computacional. Así, como ocurre en la mayoría de los modelos CR de la literatura, ABAKO trabaja con datos atómicos de átomo aislado que se corrigen a posteriori utilizando un modelo sencillo de *continuum lowering*. Esta metodología

aproximada se ha mostrado suficiente para el tratamiento de los efectos de plasma en un cálculo de poblaciones. Volveremos a hablar de este asunto al final de esta sección.

A pesar de lo que acabamos de comentar, consideramos oportuno describir el conjunto de potenciales disponibles en ABAKO porque, al margen de los cálculos cinéticos, el código también puede utilizarse como fuente de obtención de datos atómicos para otros propósitos.

3.3.4 Determinación de las fuerzas de oscilador

En el modelo que estamos describiendo la interacción del sistema atómico con la radiación electromagnética se estudia en el contexto de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Además, trabajaremos bajo la aproximación dipolar eléctrica. Esto significa que, siguiendo un tratamiento clásico de la radiación, en el desarrollo multipolar del potencial vector del campo electromagnético, se consideran despreciables todos los términos a excepción del primero, que es el correspondiente al momento dipolar eléctrico. Por tanto, ABAKO no incluye transiciones radiativas de dipolo magnético, ni de cuadrupolo eléctrico, etc.

Bajo estas consideraciones, nos centraremos en la determinación de la fuerza de oscilador dipolar eléctrica (de absorción) f_{ij} asociada a la transición $\zeta_i \rightarrow \zeta_j$, con $E_{\zeta_i} < E_{\zeta_j}$. Los vectores de ocupación de los niveles involucrados en la transición son

$$\mathbf{w}_{\zeta_i} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta, \dots, w_{\eta'}, \dots, w_\lambda\}, \quad (3.45)$$

$$\mathbf{w}_{\zeta_j} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta - 1, \dots, w_{\eta'} + 1, \dots, w_\lambda\}. \quad (3.46)$$

Según [16,17], en descripción DCA, las propiedades atómicas del sistema multielectrónico pueden escribirse de forma más o menos sencilla en términos de magnitudes monoeléctricas. En particular, en ABAKO la fuerza de oscilador f_{ij} se calcula de la siguiente manera [117]

$$f_{ij} = w_\eta \left(1 - \frac{w'_\eta}{2j_{\eta'} + 1}\right) f_{\eta\eta'}, \quad (3.47)$$

siendo $f_{\eta\eta'}$ la fuerza de oscilador monoeléctrica asociada a la transición entre los orbitales relativistas $\eta \equiv n_\eta l_\eta j_\eta$ y $\eta' \equiv n_{\eta'} l_{\eta'} j_{\eta'}$, que a su vez viene dada por

$$f_{\eta\eta'} = \frac{2}{3} (\varepsilon_{\eta'} - \varepsilon_\eta) (2j_{\eta'} + 1) \begin{pmatrix} j_\eta & 1 & j_{\eta'} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \left\{ \int_0^\infty [P_\eta(r)P_{\eta'}(r) + Q_\eta(r)Q_{\eta'}(r)] r dr \right\}^2, \quad (3.48)$$

donde $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ es el símbolo β - j correspondiente. Obsérvese que en este esquema de trabajo, f_{ij} es proporcional al número de electrones en el orbital de partida y también a la fracción de huecos disponibles en el orbital de llegada.

El símbolo β - j introduce de forma automática las reglas de selección para la transición $\eta \rightarrow \eta'$ o, equivalentemente, para $\zeta_i \rightarrow \zeta_j$. En la aproximación dipolar eléctrica, la transición está permitida sólo cuando se satisface

$$\Delta l = l_{\eta'} - l_\eta = \pm 1, \quad \Delta j = j_{\eta'} - j_\eta = 0, \pm 1. \quad (3.49)$$

Por último, sólo a título informativo, recordemos que es posible calcular la fuerza de oscilador de emisión f_{ji} utilizando también la expresión (3.47), aunque modificando convenientemente el orden de los estados inicial y final. Así, mientras que la fuerza de oscilador de absorción es positiva, $f_{ij} > 0$, la de emisión es negativa, $f_{ji} < 0$. La relación entre ambas es

$$g_{\zeta i} f_{ij} = -g_{\zeta j} f_{ji}. \quad (3.50)$$

Las reglas de selección para f_{ji} son las mismas que definimos en (3.49).

3.3.5 Datos atómicos procedentes de fuentes externas

Como es de suponer la precisión con la que se determina la estructura energética a través de este modelo es menor que la proporcionada por cálculos autoconsistentes o por otros códigos basados en potenciales paramétricos más sofisticados [28, 116]. Sin embargo, como pondremos de manifiesto en esta tesis, el modelo atómico de ABAKO proporciona un nivel de descripción de la estructura suficiente para una adecuada determinación del balance de poblaciones, así como para una estimación razonable de ciertas propiedades espectrales. Además, el uso de los potenciales analíticos representa un ahorro considerable en el tiempo de computación empleado en la obtención de los datos atómicos.

En cualquier caso, para aquellas situaciones donde sea necesario trabajar en una descripción más fina de la estructura atómica –DTA o DLA– y sea preciso determinar con mayor precisión las energías de nivel y las fuerzas de oscilador, ABAKO ofrece la posibilidad de utilizar el modelo CR con datos atómicos procedentes de otras fuentes –datos experimentales, bases de datos u otros códigos computacionales– y llevar el cálculo de poblaciones en la descripción correspondiente. Para ello, basta con escribir los datos en el formato adecuado y almacenarlos en un fichero para que luego ABAKO pueda leerlos. En particular, en este trabajo presentaremos algunos cálculos en los que se han utilizados datos atómicos procedentes de FAC [116].

3.3.6 Corrección por continuum-lowering

ABAKO introduce los efectos de plasma en sus cálculos cinéticos mediante la consideración del continuum-lowering o disminución efectiva de los potenciales de ionización (véase 2.1.10). Para ello se utiliza el modelo de Stewart-Pyatt [50] en la versión que se describe en [51]. Así, el potencial de ionización I_{ζ} del ion con carga ζ obtenido en la situación aislada se corrige de la siguiente manera

$$I'_{\zeta} = I_{\zeta} - \Delta I_{\zeta}. \quad (3.51)$$

Según [51], la corrección o disminución del potencial de ionización ΔI_{ζ} viene dada por

$$\Delta I_{\zeta} = 3I_H \frac{a_0}{R_{\zeta}} (\zeta + 1) \left\{ \left[1 + \left(\frac{D}{R_{\zeta}} \right)^3 \right]^{2/3} - \left(\frac{D}{R_{\zeta}} \right)^2 \right\}, \quad (3.52)$$

siendo $D = \sqrt{\frac{T}{4\pi e^2 n_{ion} (\bar{Z}^2 + \bar{Z})}}$ el radio de Debye y $R_\zeta = \left[\frac{3(\zeta+1)}{4\pi n_e} \right]^{1/3}$.

En ABAKO, el formalismo de Stewart-Pyatt se interpreta de acuerdo con un *tratamiento tradicional* de la estructura energética de los iones en un plasma. Se distinguen dos tipos de estados, los que pertenecen al espectro discreto y los que pertenecen al continuo. Además, aquellos estados ζi del espectro discreto cuya energía es inferior al umbral de ionización constituyen el conjunto de los *estados ligados puros* o simplemente *estados ligados*⁵, mientras que aquéllos con una energía superior a I_ζ son los estados de autoionización, esto es, estados discretos inmersos en el espectro continuo. Así, una vez que hemos determinado la estructura energética del ion ζ , el valor I_ζ determina el número de estados ligados y el número de estados autoionizantes. Al aplicar la corrección ΔI_ζ , el potencial de ionización desciende hasta I'_ζ y estados que antes eran ligados pasan ahora a ser autoionizantes. Además, sabemos que la aplicación de la corrección por continuum-lowering conlleva una reducción drástica del número de estados ligados considerados. En ABAKO esta reducción se efectúa de la siguiente manera. Una vez obtenido el nuevo valor del potencial de ionización I'_ζ , entre el conjunto de estados con energía menores que I'_ζ , se determina el valor máximo n_{max} alcanzado por el número cuántico principal en cualquiera de las configuraciones electrónicas asociadas a dichos estados. Se interpreta entonces que el pozo de potencial no soporta aquellos estados monoeléctricos en los que el número cuántico principal n sea mayor que n_{max} . En consecuencia, todos aquellos estados autoionizantes cuyas configuraciones electrónicas incluyan un orbital nlj ocupado tal que $n > n_{max}$ son eliminados del modelo CR.

Por otro lado, es importante hacer notar que la corrección (3.52) depende de la distribución de poblaciones a través de \bar{Z} y \bar{Z}^2 . Asimismo, según acabamos de comentar en el párrafo anterior, la corrección por CL influye en la estructura energética de los iones que componen el plasma. En consecuencia, un cálculo cinético con efectos de plasma exige un procedimiento iterativo en el que, tomando como punto de partida el cálculo sin CL, se utiliza la distribución de poblaciones en un paso del proceso para evaluar la expresión (3.52), entonces se corrige la estructura energética y se vuelve a calcular las poblaciones de nivel. El proceso se repite entonces hasta lograr la autoconsistencia, hecho que suele ocurrir en no más de 10 iteraciones. Los detalles concretos del procedimiento se describen en la sección 3.7.

⁵Se hace aquí un abuso del lenguaje, ya que los estados de autoionización son también estados ligados.

3.4 Expresiones de los coeficientes de tasas

Nos interesa recordar en este momento que el sistema de ecuaciones de tasas puede expresarse de forma genérica como⁶

$$\frac{\partial N_{\zeta m}}{\partial t} = \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta' m'} \mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta m} \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^- \quad (3.53)$$

Independientemente de si se llevan a cabo cálculos dependientes del tiempo o en situación estacionaria, los coeficientes $\mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+$ y $\mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-$ se construyen de la misma forma. Al primero contribuyen todas aquellas transiciones colisionales o radiativas que tienen como llegada el estado ζm , mientras en el segundo participan las que tienen el estado ζm como punto de partida. Un mismo proceso atómico puede intervenir tanto en \mathbb{R}^+ como en \mathbb{R}^- , pero teniendo como protagonista en cada caso una pareja diferente de estados atómicos. Por ejemplo, el estado ζm puede aumentar su población como consecuencia de una excitación colisional desde un estado $\zeta m'$ de menor energía, contribuyendo así al término \mathbb{R}^+ ; pero, por otro lado, el estado ζm podría despoblarse por excitación colisional hasta el estado $\zeta m''$ de mayor energía, lo que supone una contribución en \mathbb{R}^- . En consecuencia, para evaluar los términos de población \mathbb{R}^+ y despoblación \mathbb{R}^- , que constituyen además los elementos de la matriz CR, habrá que determinar los coeficientes de tasa de cada proceso atómico individual. Dedicaremos este apartado a describir cuáles son las expresiones utilizadas en ABAKO para abordar este cálculo.

En el modelo CR implementado en ABAKO se tratan de forma expresa los estados fundamental, simple y doblemente excitados de todos los iones que intervienen en el cálculo. Los distintos procesos atómicos establecen ahora conexiones entre los estados de iones adyacentes, para determinar en última instancia el balance de poblaciones. Los procesos incluidos explícitamente en el modelo son:

- excitación colisional / desexcitación colisional,
- ionización colisional / recombinación a tres cuerpos,
- autoionización / captura electrónica,
- decaimiento espontáneo,
- recombinación radiativa,

donde se indica también en qué casos se considera tanto el proceso atómico directo como su inverso. En la figura 3.2 se muestra de forma esquemática la estructura energética de iones vecinos y cuáles son las conexiones que se establecen entre los diferentes niveles de energía.

En general, los procesos atómicos pueden tener un carácter espontáneo (decaimiento espontáneo y autoionización), pueden estar inducidos por las colisiones con los electrones libres del plasma

⁶Para la discusión que se plantea no es importante hacer explícita la dependencia con \mathbf{r} y t , así que se ha omitido por simplicidad.

(excitación e ionización colisional, recombinación a tres cuerpos, radiativa y captura electrónica) o inducidos por el campo de radiación (absorción y emisión estimulada, fotoionización y fotorecombinación), aunque éstos últimos no están en la lista de procesos atómicos considerados en ABAKO.

Los coeficientes de tasas de aquellos procesos que involucran la colisión con un electrón libre se determinan integrando la correspondiente sección eficaz colisional $\sigma(\varepsilon)$ sobre la función de distribución energética $f(\varepsilon)$ de los electrones libres. En concreto, el coeficiente de tasa vendría dado por

$$\langle v\sigma \rangle = \int_{E_{th}}^{\infty} v\sigma(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (3.54)$$

donde ε es la energía del electrón incidente y $v = \sqrt{2\varepsilon/m_e}$ su velocidad. El límite inferior de la integral E_{th} es la *energía umbral* de excitación o de ionización, esto es, la mínima energía que debe tener el electrón para que el proceso en cuestión pueda ocurrir. En caso de conocer la sección eficaz de desexcitación o de recombinación, la integral se evaluaría sobre todo el rango de energía permitido para los electrones libres, esto es, $\varepsilon \in [0, \infty)$. Sin embargo, como veremos posteriormente, es común evaluar los coeficientes de tasas de estos procesos inversos a partir de los coeficientes de los procesos directos utilizando el principio de balance detallado. Finalmente, para obtener la tasa asociada a uno de estos procesos basta con efectuar la operación $N_i n_e \langle v\sigma \rangle$, donde N_i representa la densidad de iones en el estado inicial. No obstante, hay que decir que si el proceso depende del encuentro del ion con dos o más partículas, entonces habría que modificar la expresión (3.54), para incluir en el integrando la función de distribución asociada a cada una de la partículas que intervienen en el proceso y efectuar el promedio oportuno. La tasa se determinará a su vez multiplicando por las densidades correspondientes. Así, por ejemplo, la tasa de recombinación a tres cuerpos se calcula como $N_i n_e^2 \langle \langle v_1 v_2 \sigma \rangle \rangle$.

Por otro lado, ABAKO trabaja en una escala de tiempos siempre superior al tiempo de termalización electrónico definido en la ecuación (1.15), lo que significa que puede considerarse que los electrones libres han alcanzado un estado de equilibrio y, en consecuencia, la función de distribución $f(\varepsilon)$ será la de Maxwell-Boltzmann,

$$f(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\varepsilon^{1/2}}{T^{3/2}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right). \quad (3.55)$$

No obstante, es importante tener presente que existen muchas situaciones en las que la distribución de electrones libres no se corresponde con la de equilibrio. Se ha predicho y hasta detectado distribuciones no-maxwellianas en plasmas de laboratorio en diferentes contextos – tokamaks, plasmas generados por láser, plasmas de potencia pulsada, plasmas astrofísicos– que se generan debido a la acción de campos eléctricos intensos o fenómenos resonantes en la interacción láser-plasma. En consecuencia, en todos los campos de la física de plasmas existe un creciente interés por el estudio de los electrones no-maxwellianos [118], también llamados electrones *calientes* o *supratérmicos*. La

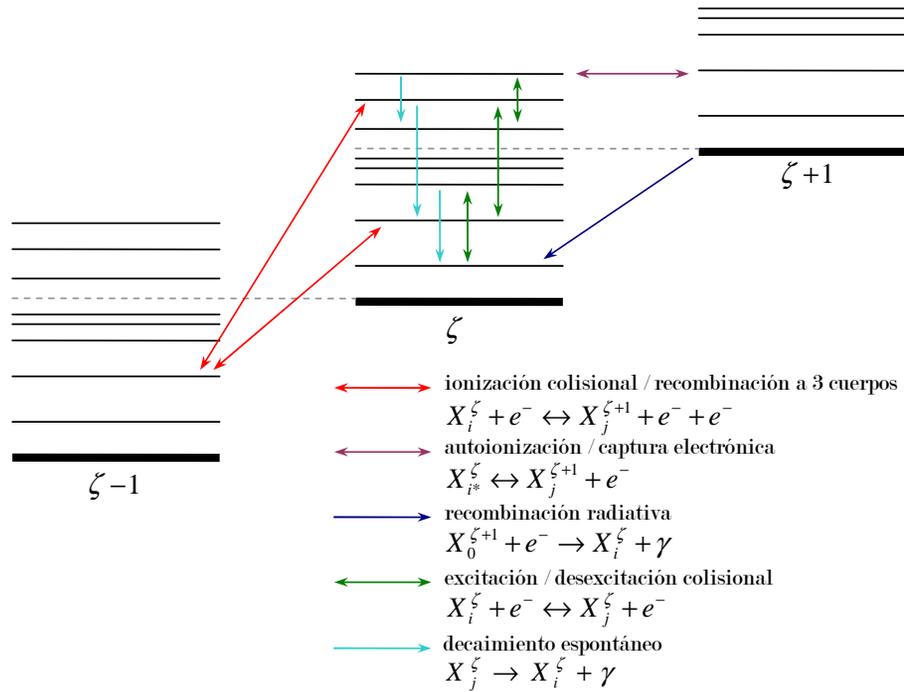


Figura 3.2. Diagrama de niveles energéticos de los estados fundamentales, simple y doblemente excitados de iones adyacentes. Se indica mediante flechas cuáles son los procesos atómicos incluidos en el modelo, responsables de la transferencia de población entre los distintos estados.

manera habitual de incluir efectos de este tipo en el modelo cinético consiste en suponer que una fracción p del total de electrones libres se distribuye siguiendo una función no-maxwelliana, esto es,

$$f(\varepsilon) = (1 - p)f_{Max}(\varepsilon) + pf_{hot}(\varepsilon). \quad (3.56)$$

En esta última ecuación $f_{Max}(\varepsilon)$ es la distribución maxwelliana y $f_{hot}(\varepsilon)$ la distribución utilizada para modelar los electrones calientes. Para este último caso, es habitual proponer una segunda distribución maxwelliana – lo que en conjunto se conoce como una distribución *bimaxwelliana*, pero caracterizada por otra temperatura, mayor que la asociada al grueso de electrones libres. Asimismo, se utiliza una distribución gaussiana cuando los electrones supratérmicos son generados mediante fenómenos de resonancia láser-plasma, mientras que en situaciones de interés astrofísico es común usar una ley de potencias. En la actualidad, ABAKO utiliza siempre una distribución maxwelliana para los electrones libres, pero una de las próximas mejoras será precisamente la de incorporar los efectos debidos a los electrones supratérmicos.

También hemos dicho que los procesos atómicos inducidos por el campo de radiación no son tratados de forma explícita en nuestro modelo. En este sentido, debemos tener presente que, en ausencia de campo externo, las tasas de absorción y fotoionización en un plasma delgado son

efectivamente nulas. Sin embargo, en presencia de una fuente externa, estos procesos van a influir en el balance poblacional de un plasma delgado. En estos casos, el campo de radiación es conocido y no es necesario ningún cálculo de transporte radiativo porque no hay efectos de reabsorción. Así, si $\sigma(\nu)$ representa la sección eficaz de absorción o fotoionización y $f_{ph}(\nu)$ es la función de distribución frecuencial de fotones, el coeficiente de tasa asociado al proceso inducido en cuestión vendría dado por

$$\langle c\sigma \rangle_{ph} = \int_{E_{th}/h}^{\infty} c\sigma(\nu) f_{ph}(\nu) d\nu, \quad (3.57)$$

siendo c la velocidad de la luz, h la constante de Planck, ν la frecuencia del fotón y E_{th} la energía umbral de absorción o fotoionización, según el caso. Si n_{ph} es la densidad total de fotones, entonces $N_{ph}(\nu) = n_{ph} f_{ph}(\nu)$ representa el número de fotones con frecuencia ν por unidad de volumen. En un proceso inducido es más frecuente hablar directamente de la tasa asociada, que se calcula como $n_{ph} \langle c\sigma \rangle_{ph} = \int_{E_{th}/h}^{\infty} c\sigma(\nu) N_{ph}(\nu) d\nu$. Está previsto implementar próximamente la posibilidad de llevar a cabo cálculos cinéticos en plasmas delgados incluyendo procesos inducidos por un campo de radiación especificado externamente. Incluir esta posibilidad en el tratamiento de plasmas gruesos es algo más complejo y hablaremos de ello en un apartado posterior.

Con estas consideraciones, ya estamos en condiciones de detallar las expresiones propuestas en ABAKO para el cálculo de los coeficientes de tasa de cada procesos atómico. Esto es lo que presentamos a continuación.

3.4.1 Emisión espontánea

En el caso de la emisión o decaimiento espontáneo, un ion en un estado excitado decae a un estado de energía menor, emitiendo un fotón γ cuya energía $h\nu$ es igual a la diferencia energética entre los estados inicial y final. La transición queda representada a través de la reacción

$$X_j^\zeta \Rightarrow X_i^\zeta + \gamma. \quad (3.58)$$

En general, y así se hace en ABAKO, la tasa de emisión espontánea viene dada por el correspondiente coeficiente de Einstein, a saber

$$\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} = \frac{4\pi\alpha}{hm_e c^2} E_{ij}^2 \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta j}} f_{ij}, \quad (3.59)$$

o bien,

$$\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} = 4.34 \times 10^7 E_{ij}^2 \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta j}} f_{ij} \quad (s^{-1}), \quad (3.60)$$

donde $E_{ij} = E_{\zeta j} - E_{\zeta i} = h\nu$ es la energía de transición y f_{ij} la fuerza de oscilador de absorción dipolar eléctrica. ABAKO no contempla ningún otro tipo de transiciones multipolares eléctricas o magnéticas.

En el contexto de una descripción DCA, un decaimiento radiativo implica necesariamente un cambio en la ocupación de los orbitales monoeléctricos de las configuraciones inicial y final. En

ABAKO sólo se conectan de forma directa configuraciones que difieren exclusivamente en el tránsito de un electrón. Esto es, si el vector de ocupación del estado ζj es

$$\mathbf{w}_{\zeta j} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta, \dots, w_{\eta'}, \dots, w_\lambda\}, \quad (3.61)$$

existirá un orbital η y otro η' de tal forma que la ocupación del estado final ζi sea

$$\mathbf{w}_{\zeta i} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta + 1, \dots, w_{\eta'} - 1, \dots, w_\lambda\}. \quad (3.62)$$

3.4.2 Excitación colisional y desexcitación colisional

En el proceso de excitación colisional, un electrón libre impacta con un ion en un cierto estado cediéndole parte de su energía. En consecuencia, el ion pasa a un estado más excitado que el inicial. Esto es,

$$X_i^\zeta + e^- \Leftrightarrow X_j^\zeta + e^-. \quad (3.63)$$

De igual forma a lo que acabamos de comentar para la emisión espontánea, dos estados podrán conectarse vía excitación colisional cuando sus vectores de ocupación difieran en el tránsito de un único electrón. Así, para el estado inicial y final podemos considerar, respectivamente,

$$\mathbf{w}_{\zeta i} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta, \dots, w_{\eta'}, \dots, w_\lambda\}, \quad (3.64)$$

$$\mathbf{w}_{\zeta j} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta - 1, \dots, w_{\eta'} + 1, \dots, w_\lambda\}. \quad (3.65)$$

Para el cálculo de la sección eficaz de excitación colisional en ABAKO se utiliza la fórmula propuesta por Van Regemorter [119], ampliamente conocida y utilizada en la literatura,

$$\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^{exc}(\varepsilon) = \frac{8\pi^2 a_0^2}{\sqrt{3}} \left(\frac{I_H}{E_{ij}} \right)^2 \frac{g(\varepsilon/E_{ij})}{\varepsilon/E_{ij}} f_{ij}, \quad (3.66)$$

donde ε es la energía del electrón incidente, $E_{ij} = E_{\zeta j} - E_{\zeta i}$ es la energía umbral de excitación y f_{ij} es la fuerza de oscilador de absorción dipolar eléctrica. La función $g(u)$ es el denominado *factor Gaunt*, para el que usamos la expresión propuesta por Mewe [120],

$$g(u) = A + \frac{B}{u} + \frac{C}{u^2} + D \ln u. \quad (3.67)$$

Los parámetros A , B , C y D se obtienen mediante ajustes a cálculos teóricos avanzados o datos experimentales. No obstante, en ABAKO se sigue el criterio general propuesto por el autor, en el que asigna un valor $A = 0.15$ para transiciones con $\Delta n = n_{\eta'} - n_\eta = 0$ y $A = 0.6$ cuando $\Delta n \neq 0$, mientras que para el resto de parámetros considera $B = C = 0$ y $D = 0.28$.

Para obtener el coeficiente de tasa de excitación colisional promediamos la sección eficaz sobre la distribución maxwelliana de electrones libres, según la ecuación (3.54). Esto resulta

$$\mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} = \frac{16\sqrt{2}\pi^2 a_0^2}{\sqrt{3\pi m_e}} \frac{I_H^2 f_{ij}}{E_{ij} T^{1/2}} \bar{g}(E_{ij}/T) e^{-E_{ij}/T}, \quad (3.68)$$

siendo T la temperatura electrónica y $\bar{g}(u)$ el factor gaunt promediado, que a su vez viene dado por

$$\bar{g}(u) = A + (Bu - Cu^2 + D) e^u E_1(u) + Cu. \quad (3.69)$$

Al evaluar las constantes se llega a

$$\mathcal{E}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j} = 1.58 \times 10^{-5} \frac{f_{ij}}{E_{ij} T^{1/2}} \bar{g}(E_{ij}/T) e^{-E_{ij}/T} \quad (\text{cm}^3 \text{s}^{-1}), \quad (3.70)$$

No obstante, hay que decir que Sampson y Zhang [121] hacen una dura crítica a la sección eficaz de Van Regemorter. Basándose en la comparación de los resultados obtenidos con (3.66) y utilizando códigos computacionales desarrollados en un contexto relativista [122] llegan a las siguientes conclusiones. En primer lugar, la expresión (3.66) es proporcional a la fuerza de oscilador dipolar eléctrica, por lo que sólo contempla aquellas excitaciones asociadas a transiciones permitidas en la aproximación dipolar. Pues bien, para $\Delta n \geq 1$ los resultados arrojados por (3.66) no son satisfactorios, ya que en este caso las transiciones prohibidas por la aproximación dipolar son dominantes y/o para las transiciones permitidas, la ecuación (3.66) da lugar a desviaciones significativas respecto a los cálculos más sofisticados. Para $\Delta n = 0$ los resultados obtenidos al utilizar la fórmula de Van Regemorter son algo mejores, pero aún así los errores rondan el 30–40%. En [121] los autores desaconsejan el uso de (3.66) y sugieren la implementación de técnicas más elaboradas aparecidas en la literatura, la utilización de datos tabulados de calidad o incluso la posibilidad de acudir a otras parametrizaciones de la sección eficaz de excitación colisional, como las propuestas en [123–126].

A pesar de estas consideraciones, la fórmula de Van Regemorter todavía se utiliza frecuentemente en el contexto de los códigos cinéticos, probablemente porque su implementación es extremadamente sencilla y porque, como en las ecuaciones de tasas interviene el coeficiente de tasa –un promedio sobre la sección eficaz–, el cálculo de poblaciones no es tan sensible a los errores cometidos en $\sigma_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^{exc}(\varepsilon)$. Aún así, en atención a los comentarios expuestos en [121], pero conservando la filosofía de utilizar expresiones analíticas que permitan una rápida evaluación de los coeficientes de tasa, implementamos en ABAKO la técnica descrita en [125, 126]. Sin embargo, a la hora de llevar a cabo cálculos cinéticos, en la mayoría de los casos, este procedimiento introdujo problemas de convergencia en la resolución del sistema de ecuaciones de tasas. En [91] se apuntan también algunos problemas derivados de este formalismo. Así pues, optamos finalmente por la implementación en ABAKO de la fórmula (3.66), dejando para un futuro el análisis detallado de otros procedimientos más elaborados y su posible incorporación en el código.

Abordemos ahora la determinación del coeficiente de tasa de desexcitación colisional, el proceso inverso de la excitación. En este caso, se produce una transición desde un estado excitado a otro de menor energía y la energía que se libera es absorbida por un electrón libre en las cercanías del ion que sufre la desexcitación.

Cuando la distribución de electrones libres es maxwelliana, el coeficiente de desexcitación colisional $\mathcal{D}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}$ puede obtenerse a partir del principio de balance detallado, aun cuando éste es válido sólo en situación de equilibrio. Así, sean $N_{\zeta_i}^{LTE}$ y $N_{\zeta_j}^{LTE}$ las poblaciones de los estados involucrados en los procesos de excitación y desexcitación. Téngase en cuenta que estamos considerando $E_{\zeta_i} < E_{\zeta_j}$. En situación de LTE, el principio de balance detallado exige que el número de excitaciones por unidad de volumen y unidad de tiempo sea exactamente igual al número de desexcitaciones. Esto significa que

$$N_{\zeta_i}^{LTE} n_e \mathcal{E}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j} = N_{\zeta_j}^{LTE} n_e \mathcal{D}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}. \quad (3.71)$$

Ahora bien, en LTE la población de los distintos niveles pertenecientes a una misma especie iónica se distribuye siguiendo la estadística de Boltzmann. La población de un estado cualquiera ζm vendrá dada por

$$N_{\zeta m}^{LTE} = N_{\zeta}^{LTE} \frac{g_{\zeta m} e^{-E_{\zeta m}/T}}{Z_{\zeta}(T)}, \quad (3.72)$$

donde N_{ζ}^{LTE} es la población total del ion con carga ζ en situación de LTE y $Z_{\zeta}(T)$ la función de partición.

Según esto, el cociente entre poblaciones conduce al resultado

$$\frac{N_{\zeta_i}^{LTE}}{N_{\zeta_j}^{LTE}} = \frac{g_{\zeta_i}}{g_{\zeta_j}} e^{E_{ij}/T}. \quad (3.73)$$

Despejando de (3.71) el coeficiente de desexcitación y sustituyendo la ecuación (3.73), se obtiene

$$\mathcal{D}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i} = \frac{g_{\zeta_i}}{g_{\zeta_j}} e^{E_{ij}/T} \mathcal{E}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}. \quad (3.74)$$

Utilizando en esta última ecuación la expresión (3.68), el coeficiente de tasa de desexcitación viene finalmente dado por

$$\mathcal{D}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i} = \frac{16\sqrt{2}\pi^2 a_0^2}{\sqrt{3\pi m_e}} \frac{g_{\zeta_i}}{g_{\zeta_j}} \frac{I_H^2 f_{ij}}{E_{ij} T^{1/2}} \bar{g}(E_{ij}/T). \quad (3.75)$$

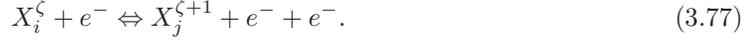
Como puede verse, con la excepción de la temperatura, la ecuación anterior depende exclusivamente de variables atómicas microscópicas, que no están en absoluto ligadas a una condición de equilibrio. Por tanto, aun siendo el punto de partida una expresión válida sólo para LTE, como el resultado obtenido es independiente de que los iones se encuentren o no en dicha situación, la ecuación (3.75) es aplicable de forma general; aunque, eso sí, debido a la presencia del parámetro T , la distribución de electrones libres debe ser maxwelliana.

Para una distribución arbitraria $f(\varepsilon)$ de los electrones libres, el coeficiente de desexcitación no podría calcularse mediante la ecuación (3.74), sino integrando la correspondiente sección eficaz sobre la función $f(\varepsilon)$. La sección eficaz de desexcitación colisional se determinaría a su vez a partir de la sección eficaz de excitación utilizando la fórmula de Klein-Rosseland (ver apéndice B),

$$g_{\zeta_j} \varepsilon \sigma_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^{dex}(\varepsilon) = g_{\zeta_i}(\varepsilon + E_{ij}) \sigma_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^{exc}(\varepsilon + E_{ij}). \quad (3.76)$$

3.4.3 Ionización colisional y recombinación a tres cuerpos

La ionización colisional tiene lugar cuando un electrón impacta con un ion, cediendo parte de su energía a alguno de los electrones ligados, que la utiliza entonces para vencer dicha ligadura y convertirse en un electrón libre. El ion resultante aumenta en una unidad su estado de carga. El proceso inverso es la recombinación a tres cuerpos. El balance entre los dos mecanismos se expresa a través de la reacción



En ABAKO, el estado ζi puede ionizarse por impacto electrónico para dar lugar al estado $\zeta + 1j$ sólo cuando los vectores de ocupación de los estados involucrados difieran en la ionización de un único electrón. Así, si para el estado inicial tenemos

$$\mathbf{w}_{\zeta i} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta, \dots, w_\lambda\} \quad (3.78)$$

el vector de ocupación del estado final debe cumplir

$$\mathbf{w}_{\zeta+1j} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta - 1, \dots, w_\lambda\} . \quad (3.79)$$

Para calcular la sección eficaz de ionización colisional empleamos una fórmula muy conocida debida a Lotz. El autor propone en una serie de trabajos [127–129] una sencilla expresión analítica válida justo en el contexto que acabamos de comentar. La fórmula depende de tres parámetros ajustables en cada caso. El autor proporciona sus valores para la ionización del estado fundamental de iones de elementos desde el hidrógeno hasta el zinc. No obstante, a efectos prácticos, cuando no se conoce el valor de los parámetros o cuando estamos interesados en evaluar la sección eficaz de ionización de estados excitados, el autor sugiere la utilización de una expresión general dependiente de un único parámetro [128]. ABAKO trabaja siguiendo este último criterio, donde la sección eficaz de ionización colisional viene dada por

$$\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{ion}(\varepsilon) = C \pi a_0^2 I_H^2 w_\eta \frac{\ln(\varepsilon/E_{ij})}{\varepsilon E_{ij}}, \quad \forall \varepsilon > E_{ij}, \quad (3.80)$$

siendo C una constante para la que el autor recomienda el valor $C = 2.77$, w_η es el número de electrones en el orbital objeto de la ionización antes de que ésta ocurra, ε es la energía del electrón incidente y E_{ij} es ahora la energía de ionización, calculada a su vez a través de la expresión

$$E_{ij} = I_\zeta - E_{\zeta i} + E_{\zeta+1j}. \quad (3.81)$$

Al promediar la sección eficaz sobre la distribución maxwelliana de electrones libres obtenemos el coeficiente de tasa de ionización colisional,

$$\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = C \sqrt{\frac{8\pi}{m_e}} a_0^2 I_H^2 \frac{w_\eta}{T^{1/2} E_{ij}} E_1(E_{ij}/T), \quad (3.82)$$

o también

$$\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} = 1.09 \times 10^{-6} C \frac{w_\eta}{T^{1/2} E_{ij}} E_1(E_{ij}/T) \quad (cm^3 s^{-1}). \quad (3.83)$$

Como alternativa a la fórmula de Lotz (3.80), ABAKO ofrece la posibilidad de utilizar otra conocida expresión debida a Burgess y Chidichimo [130],

$$\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j}^{ion}(\varepsilon) = C \pi a_0^2 I_H^2 w_\eta \frac{\ln(\varepsilon/E_{ij})}{\varepsilon E_{ij}} W(\varepsilon/E_{ij}), \quad (3.84)$$

siendo

$$W(\varepsilon/E_{ij}) = \begin{cases} 0, & \varepsilon \leq E_{ij}, \\ [\ln(\varepsilon/E_{ij})]^{\beta E_{ij}/\varepsilon}, & E > E_{ij}, \end{cases} \quad (3.85)$$

y con

$$\beta = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{100\zeta + 91}{4\zeta + 3} \right)^{1/2} - 5 \right]. \quad (3.86)$$

La sección eficaz (3.84) sólo se diferencia de la Lotz en la presencia del factor $W(\varepsilon/E_{ij})$, que introduce algunas mejoras para valores pequeños de ζ y energías ε próximas al umbral de ionización. Además, los autores establecen una serie de criterios para la asignación de los valores correspondientes a los parámetros C y w_η que permiten incluir en (3.84) los efectos debidos a mecanismos indirectos de ionización, como la excitación-autoionización. Sin embargo, de cara a su implementación en ABAKO, este hecho no representa una gran ventaja, ya que en nuestro modelo los estados autoionizantes son tratados de forma explícita y, en consecuencia, la excitación-autoionización queda automáticamente contemplada. Así pues, la fórmula (3.84) se utiliza en su versión para ionización directa, donde w_η tiene exactamente el mismo significado que en (3.80) y $C = 2.7$, de acuerdo con la prescripción de los autores.

El correspondiente coeficiente de tasa para una distribución maxwelliana viene dado por

$$\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} = C \sqrt{\frac{8\pi}{m_e}} a_0^2 I_H^2 \frac{w_\eta}{T^{1/2} E_{ij}} E_1(E_{ij}/T) \bar{W}, \quad (3.87)$$

o bien

$$\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} = 1.09 \times 10^{-6} C \frac{w_\eta}{T^{1/2} E_{ij}} E_1(E_{ij}/T) \bar{W} \quad (cm^3 s^{-1}), \quad (3.88)$$

con $\bar{W} = [\ln(1 + T/E_{ij})]^{\beta/(1+T/E_{ij})}$.

Las expresiones que hemos propuesto para la sección eficaz de ionización colisional y el correspondiente coeficiente de tasa son válidas en un contexto DCA, en el que los vectores de ocupación $\mathbf{w}_{\zeta i}$ y $\mathbf{w}_{\zeta + 1j}$ difieren en la ionización en un único electrón. Si estuviésemos trabajando en una descripción DTA o DLA, podríamos asociar varios términos o niveles, respectivamente, a un mismo vector de ocupación. Así, si ζi y $\zeta + 1j$ son los términos/niveles inicial y final, para continuar utilizando las expresiones aquí propuestas en un esquema DTA/DLA, habrá que multiplicar la sección eficaz y expresiones derivadas por el denominado *factor de ramificación* b , que viene dado por

$$b = \frac{g_{\zeta + 1j}}{g_{\zeta + 1j}^{tot}}, \quad (3.89)$$

siendo $g_{\zeta+1j}$ la degeneración del término/nivel final y $g_{\zeta+1j}^{tot}$ la degeneración de la configuración con vector de ocupación $\mathbf{w}_{\zeta+1j}$, es decir, la correspondiente degeneración en descripción DCA. El factor b nos da la probabilidad de que al ionizarse un electrón en un orbital monoeléctrico del estado inicial se alcance justamente el término/nivel $\zeta+1j$ entre todos los posibles términos/niveles asociados al mismo vector de ocupación $\mathbf{w}_{\zeta+1j}$.

Por otro lado, para determinar el coeficiente de recombinación a tres cuerpos $\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3$ vamos a seguir un procedimiento muy similar al del apartado anterior. Así, en situación de LTE los procesos directo e inverso están exactamente balanceados y, por tanto,

$$N_{\zeta i}^{LTE} n_e \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} = N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e^2 \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3. \quad (3.90)$$

Ahora bien, la población en LTE de un estado cualquiera ζm venía dada por

$$N_{\zeta m}^{LTE} = N_{\zeta}^{LTE} \frac{g_{\zeta m} e^{-E_{\zeta m}/T}}{Z_{\zeta}(T)}. \quad (3.91)$$

Si utilizamos esta ecuación en (3.90) y además tenemos en cuenta que el balance entre poblaciones iónicas está determinado por la ecuación de Saha,

$$\frac{N_{\zeta+1}^{LTE} n_e}{N_{\zeta}^{LTE}} = 2 \left(\frac{2\pi m_e T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{Z_{\zeta+1}(T)}{Z_{\zeta}(T)} e^{-I_{\zeta}/T} \quad (3.92)$$

puede llegarse fácilmente a

$$\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3 = \frac{1}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e T} \right)^{3/2} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} e^{E_{ij}/T} \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}. \quad (3.93)$$

Nuevamente, aunque la relación (3.93) haya sido deducida partiendo de una hipótesis de equilibrio, ésta sólo depende de magnitudes atómicas y de la temperatura. Por tanto, la ecuación será válida en cualquier situación siempre y cuando la distribución de electrones libres sea maxwelliana.

Para una distribución arbitraria, habría que recurrir a la relación microscópica entre las secciones eficaces de ionización colisional y recombinación a tres cuerpos. Sin embargo, el hecho de que la recombinación sea un proceso donde intervienen dos electrones libres, impide en este caso la obtención de una relación sencilla, análoga a la de Klein-Rosseland (3.76). En el apéndice B se aporta más información a este respecto.

3.4.4 Recombinación radiativa

En el proceso de recombinación radiativa un electrón libre colisiona con un ion y queda ligado a éste, se emite entonces un fotón que acumula el excedente energético. Lógicamente, el estado iónico final está una vez menos ionizado que el inicial,



En el esquema de trabajo de ABAKO, los vectores de ocupación de los estados inicial $\zeta + 1j$ y final ζi verifican

$$\mathbf{w}_{\zeta+1j} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta - 1, \dots, w_\lambda\}, \quad (3.95)$$

$$\mathbf{w}_{\zeta i} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta, \dots, w_\lambda\}. \quad (3.96)$$

Para determinar el coeficiente de tasa de recombinación radiativa vamos a seguir un camino algo diferente al de anteriores apartados. El principio de balance detallado, que es una relación macroscópica entre mecanismos directos e inversos, involucra en este caso, además de la recombinación radiativa, los procesos de fotoionización y recombinación estimulada –inducidos por el campo de radiación y no considerados en ABAKO de forma explícita–. La expresión del balance en esta situación es más complicada que en casos anteriores y de cara a la evaluación del coeficiente de recombinación radiativa es mucho más sencillo utilizar la relaciones microscópicas existentes entre las secciones eficaces de los procesos. Los detalles acerca de esta cuestión pueden consultarse en el apéndice B.

El punto de partida es entonces la relación existente entre la sección eficaz de fotoionización y la de recombinación radiativa, conocida como fórmula de Milne,

$$\sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{rad}(\varepsilon) = \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} \frac{(h\nu)^2}{2m_e c^2} \frac{1}{\varepsilon} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu), \quad (3.97)$$

siendo ν la frecuencia del fotón y ε la energía del electrón libre.

Para calcular la sección eficaz de fotoionización utilizaremos la ya célebre fórmula de Kramers [131],

$$\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu) = \frac{64\pi\alpha a_0^2}{3\sqrt{3}} I_H \frac{w_\eta}{n_\eta} \frac{E_{ij}^2}{(h\nu)^3}, \quad (3.98)$$

aquí w_η es el número de electrones en el orbital η tras la recombinación y n_η el número cuántico principal correspondiente. La energía de transición (o energía umbral de fotoionización) viene dada por

$$E_{ij} = I_\zeta - E_{\zeta i} + E_{\zeta+1j}. \quad (3.99)$$

Por otro lado, el principio de conservación de la energía establece

$$h\nu = E_{ij} + \varepsilon, \quad (3.100)$$

siendo $h\nu$ la energía del fotón.

Si ahora sustituimos (3.98) y (3.100) en (3.97), se obtiene la siguiente expresión para la sección eficaz de recombinación radiativa

$$\sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{rad}(\varepsilon) = \frac{64\pi\alpha a_0^2}{3\sqrt{3}m_e c^2} I_H \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} \frac{w_\eta}{n_\eta} \frac{E_{ij}^2}{\varepsilon (E_{ij} + \varepsilon)}. \quad (3.101)$$

El coeficiente de tasa se determina promediando sobre la distribución maxwelliana de electrones libres,

$$\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r = \frac{64\sqrt{\pi}\alpha^2 a_0^2}{3\sqrt{3}m_e c} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} \frac{w_\eta}{n_\eta} \frac{I_H^{1/2} E_{ij}^2}{T^{3/2}} E_1(E_{ij}/T) e^{E_{ij}/T}, \quad (3.102)$$

y esto resulta

$$\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r = 7.05 \times 10^{-15} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} \frac{w_{\eta}}{n_{\eta}} \frac{E_{ij}^2}{T^{3/2}} E_1(E_{ij}/T) e^{E_{ij}/T} \quad (\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}). \quad (3.103)$$

Por otro lado, de igual forma a lo que comentamos en el apartado anterior, las expresiones (3.98) y (3.102) pueden utilizarse directamente en un contexto DCA. Si estamos trabajando en un esquema DTA o DLA habrá que multiplicar la sección eficaz de fotoionización y las expresiones deducidas a partir de ésta por el factor de ramificación $b = g_{\zeta+1j}/g_{\zeta+1j}^{\text{tot}}$, interpretado exactamente de la misma manera que en (3.89).

Por último, se sabe que la fórmula de Kramers es una aproximación muy pobre para el tratamiento de la fotoionización de electrones de orbitales internos [16]. Sin embargo, aquellas transiciones que tienen como punto de llegada el estado fundamental del ion $\zeta + 1$ se corresponden mayoritariamente con la fotoionización de un electrón externo de un estado simplemente excitado del ion ζ . Si pensamos ahora en términos de la recombinación radiativa, lo que acabamos de decir equivale a considerar sólo aquellas transiciones del tipo $\zeta + 1, 0 \rightarrow \zeta i$. Pues bien, éste es el criterio que hemos adoptado en ABAKO para garantizar que la fórmula de Kramers se utiliza únicamente en aquellas situaciones para las que resulta una aproximación razonable. En conclusión, el modelo CR sólo incluye recombinaciones radiativas desde el estado fundamental del ion con carga $\zeta + 1$.

3.4.5 Autoionización y captura electrónica

La excitación de un electrón de un orbital interno o de dos o más electrones en cualquier orbital puede dar lugar a un estado ζi que cae energéticamente por encima del umbral de ionización del ion con carga ζ . Estos estados interactúan con otros con la misma energía total, formados por estados ligados del siguiente ion más un electrón libre. Como resultado de esta interacción se produce la autoionización o decaimiento Auger del estado ζi mediante la expulsión espontánea de un electrón acompañada de una redistribución de los restantes electrones ligados, que da lugar a un estado final $\zeta + 1j$. El proceso inverso se denomina captura electrónica. Los dos mecanismos quedan representados a través de

$$X_i^{\zeta} \Leftrightarrow X_j^{\zeta+1} + e^{-}. \quad (3.104)$$

Es importante destacar que a diferencia de otros procesos en los que intervienen electrones libres, la captura electrónica es un proceso resonante. Esto significa que el electrón debe tener una energía específica igual a la diferencia energética entre los estados iónicos inicial y final, esto es, $\varepsilon = E_{ij}$. En otros procesos, el excedente energético o el aporte de energía necesario para cumplir la ecuación de balance se traducía en la emisión/absorción de un fotón o en la variación de la energía cinética de los electrones libres involucrados en el proceso. Asimismo, como ζi es un estado autoionizante y, por tanto, $E_{\zeta i} > I_{\zeta}$, ahora la energía de transición vendrá dada por

$$E_{ij} = E_{\zeta i} - I_{\zeta} - E_{\zeta+1j}. \quad (3.105)$$

La importancia de los estados autoionizantes, los mecanismos de autoionización y captura electrónica y otros canales indirectos, como el de excitación-autoionización, en el balance de poblaciones y la determinación de propiedades radiativas, en particular la emisividad, ha sido subrayada en numerosos trabajos. Se ha contrastado, por ejemplo, que el mecanismo de excitación-autoionización puede incrementar de forma significativa la tasa total de ionización [59,60]. Ha quedado demostrado, con el respaldo de datos experimentales, que en condiciones de baja densidad los procesos de autoionización y captura electrónica dominan el balance cinético entre los distintos estados de carga [61]; aunque también hay evidencias de la importancia de estos mecanismos en regiones de más alta densidad [62–64]. Asimismo, el análisis de las líneas satélite y, en general, la emisión procedente de los niveles autoionizantes representa una herramienta particularmente útil para la diagnosis espectroscópica [65,66].

Sin embargo, aún en la actualidad no todos los modelos CR contemplan un tratamiento explícito de los estados autoionizantes y esto es debido a varios factores. En primer lugar, para la evaluación mecanocuántica de la probabilidad de transición por autoionización [16,132], el estado final se representa a través del producto de la función de onda del ion por la función de onda del electrón libre. El hecho de trabajar con estados del espectro continuo complica el tratamiento numérico y también el álgebra de momentos angulares a tener en cuenta, lo que hace muy costoso este tipo de cálculos. Asimismo, la consideración detallada de estos estados conlleva un aumento significativo del número total de configuraciones asociadas a una misma especie iónica, lo que traducido al contexto de un cálculo cinético implicaría tener que resolver un sistema de ecuaciones de tasas cuya dimensión sería del orden de $10^5 - 10^6$, restringiendo enormemente la versatilidad del modelo y la posibilidad de llevar a cabo cálculos a gran escala. Finalmente, la presencia de los estados doblemente excitados no sólo abre la puerta de la autoionización y la captura electrónica, sino que habilita otro conjunto de canales –al que ya nos hemos referido– debido a las conexiones que ahora se establecen entre los propios estados doblemente excitados y entre éstos y los estados excitados ordinarios dentro de una misma especie iónica. Aquellos modelos que determinan los coeficientes de tasas mediante procedimientos mecanocuánticos avanzados pueden encontrarse con serias limitaciones a la hora de abordar un cálculo cinético de estas características y en cualquier caso siempre llevarán aparejado un ingente esfuerzo computacional.

Según lo dicho, es evidente que este tipo de formalismos no tiene cabida dentro del contexto en el que ABAKO se desarrolla y se hace necesario entonces encontrar una simplificación apropiada para el tratamiento de los procesos de autoionización y captura electrónica. Bajo esta perspectiva una de las alternativas más frecuentes consiste en evitar el tratamiento explícito de los estados autoionizantes e incluir una de las aproximaciones analíticas existentes para el coeficiente de recombinación dielectrónica [133], entendiendo como tal el proceso de captura electrónica seguido de un decaimiento espontáneo hasta alguno de los estados ligados ordinarios del ion. Este mecanismo

representa la vía de *estabilización radiativa* de los estados doblemente excitados. En la recombinación dielectrónica, los estados inicial y final pertenecen siempre al espectro discreto y así, los estados autoionizantes, la autoionización y la captura electrónica desaparecen como tal del modelo CR. Sin embargo, hemos comprobado que en cálculos cinéticos a densidades bajas/moderadas este formalismo no proporciona buenos resultados. Al comparar con cálculos que sí incluyen un tratamiento explícito de la autoionización, se obtuvieron de forma sistemática ionizaciones medias más bajas de lo que cabría esperar y en el cálculo de poblaciones iónicas detectamos algunos comportamientos anómalos, como la aparición bajo ciertas condiciones de una distribución de poblaciones iónicas con dos máximos locales. Por tanto, a la vista de estos resultados, quedaba claro que de cara al desarrollo de un código cinético fiable, era necesario incorporar de forma expresa en el modelo CR los procesos de autoionización y captura electrónica. Sin embargo, hasta la fecha no se ha propuesto ninguna expresión analítica capaz de determinar de forma razonable y sistemática el coeficiente de autoionización o la sección eficaz de captura electrónica. Por esta razón, hemos recurrido a una aproximación propuesta en la literatura [58, 134] para estimar el valor medio de la tasa de autoionización y basada en aproximar la sección eficaz de captura electrónica por la de excitación colisional. A pesar de no ser una idea reciente, según nuestro conocimiento, ABAKO es el primer código basado en aproximaciones analíticas que utiliza este modelo para el tratamiento explícito de los estados autoionizantes bajo una descripción DCA y la producción de cálculos cinéticos a gran escala. En lo que respecta a este trabajo, nuestro interés es mostrar que, aunque la idea en la que se basa el tratamiento de la pareja autoionización/captura electrónica en ABAKO no es nueva, su adaptación para trabajar con el modelo de potenciales analíticos o de forma más general con una descripción de partícula independiente, produce, con un coste computacional mucho menor, resultados competitivos frente otros modelos mucho más sofisticados.

Exponemos a continuación de qué manera se ha implementado esta idea en el modelo CR.

En primer lugar vamos a determinar el coeficiente de tasa para la captura electrónica. Sea entonces $\sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{cap}(\varepsilon)$ la sección eficaz correspondiente. El coeficiente de tasa se obtiene promediando la sección eficaz sobre la distribución de electrones libres. Sin embargo, antes apuntábamos que este proceso es de carácter resonante y esto significa que sólo aquellos electrones con una energía ε dentro de un intervalo de anchura ΔE en torno a la energía de transición E_{ij} podrán provocar el proceso⁷. Luego, el coeficiente de captura electrónica se calcula como

$$C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i} = \int_{\Delta E} v \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{cap}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.106)$$

siendo $v = \sqrt{2\varepsilon/m_e}$ la velocidad del electrón incidente.

Suponiendo ahora que el intervalo de integración es suficientemente pequeño y que tanto la sección eficaz como la distribución de electrones libres varían lentamente en su interior, es posible

⁷De forma equivalente, la sección eficaz de captura electrónica es cero para energías ε del electrón incidente fuera del intervalo mencionado.

calcular la integral como el producto del integrando evaluado en $\varepsilon = E_{ij}$ por la anchura ΔE , esto es,

$$C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i} \approx \left(\frac{2E_{ij}}{m_e} \right)^{1/2} \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{cap}(E_{ij}) f(E_{ij}) \Delta E. \quad (3.107)$$

Esta expresión para el coeficiente de tasa puede utilizarse para una distribución arbitraria de electrones libres, siempre que la sección eficaz de captura electrónica y la anchura de la resonancia sean conocidas.

La siguiente consideración va precisamente encaminada hacia la obtención de una expresión para ΔE . Es razonable suponer que el electrón capturado pasa a ocupar un orbital externo ligado al ion de carga ζ , ya que son precisamente estos orbitales los que más interacción tienen con estados del continuo y, por tanto, los más susceptibles de sufrir una autoionización o de capturar un electrón libre. Entonces, la diferencia de energías entre los estados inicial y final será aproximadamente igual a la energía de ligadura del electrón, que puede estimarse a su vez mediante una expresión hidrogenoide,

$$E_{ij} \approx \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^2}, \quad (3.108)$$

donde n es el valor del número cuántico principal del orbital ocupado por el electrón capturado y Z_{eff} la carga nuclear efectiva vista por dicho electrón, que en un orbital muy externo coincidirá con $Z_{eff} = \zeta + 1$. La anchura ΔE se calcula entonces como el espaciado entre niveles de una serie Rydberg,

$$\Delta E \approx \left| \frac{dE_{ij}}{dn} \right| \Delta n \approx \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^3}, \quad (3.109)$$

siendo $\Delta n = 1$ la mínima variación posible para el número cuántico principal.

De esta forma, el coeficiente de captura electrónica resulta

$$C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i} \approx \left(\frac{2E_{ij}}{m_e} \right)^{1/2} \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^3} \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{cap}(E_{ij}) f(E_{ij}). \quad (3.110)$$

La principal aproximación de este modelo consiste en utilizar para la sección eficaz de captura electrónica la expresión de la sección eficaz de excitación colisional,

$$\sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{cap}(\varepsilon) \approx \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta+1m}^{exc}(\varepsilon), \quad (3.111)$$

donde $\zeta + 1m$ es un estado ligado del ion con carga $\zeta + 1$ al que llamaremos *estado auxiliar* y que se caracteriza por tener la misma energía total que el estado autoionizante ζi . En nuestra notación esto se escribe como

$$E_{\zeta+1m} = E_{\zeta i} - I_{\zeta}. \quad (3.112)$$

Finalmente, de acuerdo con el formalismo descrito, el coeficiente de tasa de captura electrónica se obtiene como

$$C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i} \approx \left(\frac{2E_{ij}}{m_e} \right)^{1/2} \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^3} \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta+1m}^{exc}(E_{ij}) f(E_{ij}). \quad (3.113)$$

Si ahora utilizamos la fórmula de Van Regemorter (3.66) para la sección eficaz de excitación y suponemos una distribución maxwelliana para los electrones libres, se llega a

$$C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i} = \frac{16\pi\sqrt{2\pi}a_0^2 I_H^2}{\sqrt{3}m_e} \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^3} f_{jm} \frac{g(1)}{E_{ij} T^{3/2}} e^{-E_{ij}/T} \quad (3.114)$$

o también

$$C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i} = 1.58 \times 10^{-5} \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^3} f_{jm} \frac{g(1)}{E_{ij} T^{3/2}} e^{-E_{ij}/T} \quad (cm^3 s^{-1}), \quad (3.115)$$

con E_{ij} y T en eV . En la última ecuación f_{jm} es la fuerza de oscilador de absorción para la transición $\zeta + 1j \rightarrow \zeta + 1m$ y $g(1)$ es el factor Gaunt evaluado en 1, que según (3.67) viene dado por

$$g(1) = \begin{cases} 0.60, & \Delta n = 0 \\ 0.15, & \Delta n \neq 0. \end{cases} \quad (3.116)$$

Ahora, para determinar el coeficiente de autoionización emplearemos el mismo procedimiento que en apartados anteriores. El principio de balance detallado nos permite escribir

$$N_{\zeta i}^{LTE} \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e C_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}. \quad (3.117)$$

Utilizando la distribución de Boltzmann para estados excitados y la ecuación de Saha, es fácil llegar a

$$\mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = 2 \left(\frac{2\pi m_e}{h^2} \right)^{3/2} \frac{g_{\zeta+1j}}{g_{\zeta i}} T^{3/2} e^{E_{ij}/T} C_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}. \quad (3.118)$$

Con esta expresión es posible calcular el coeficiente de autoionización a partir del de captura electrónica, siempre y cuando la distribución de electrones libres sea maxwelliana. No obstante, si utilizamos el resultado (3.107) para una distribución maxwelliana encontramos

$$\mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = \frac{16\pi m_e}{h^3} \frac{g_{\zeta+1j}}{g_{\zeta i}} E_{ij} \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{cap} (E_{ij}) \Delta E. \quad (3.119)$$

Es interesante hacer notar que en esta última expresión ha desaparecido la dependencia con T . No podía ser de otra manera, ya que la autoionización es un proceso espontáneo, que no precisa del encuentro con un electrón libre para tener lugar y, por tanto, es independiente de la manera en la que éstos se distribuyen.

Finalmente, si repetimos la aproximación $\sigma_{\zeta+1 \rightarrow \zeta i}^{cap} (E_{ij}) \approx \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta+1m}^{exc} (E_{ij})$ y sustituimos las expresiones (3.66) para la sección eficaz y (3.109) para ΔE , entonces se obtiene

$$\mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = \frac{16\pi I_H}{\sqrt{3}h} \frac{g_{\zeta+1j}}{g_{\zeta i}} \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^3} \frac{f_{jm}}{E_{ij}} g(1), \quad (3.120)$$

o bien,

$$\mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = 9.55 \times 10^{16} \frac{g_{\zeta+1j}}{g_{\zeta i}} \frac{I_H Z_{eff}^2}{n^3} \frac{f_{jm}}{E_{ij}} g(1) \quad (s^{-1}). \quad (3.121)$$

Por último, para llegar a las expresiones implementadas en el código, es importante tener en cuenta la relación existente entre los vectores de ocupación de los estados inicial ζi , auxiliar

$\zeta + 1m$ y final $\zeta + 1j$, eligiendo el orden correspondiente a una autoionización. Los dos primeros se diferencian en la ionización de un electrón y los dos últimos en el tránsito de uno de ellos. De esta forma, entre estados inicial y final, además de tener un número diferente de electrones, puede existir una redistribución de la ocupación electrónica. Esta cuestión puede representarse como,

$$\mathbf{w}_{\zeta i} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta, \dots, w_{\eta'}, \dots, w_\delta, \dots, w_\lambda\}, \quad (3.122)$$

$$\mathbf{w}_{\zeta+1m} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta, \dots, w_{\eta'}, \dots, w_\delta - 1, \dots, w_\lambda\}, \quad (3.123)$$

$$\mathbf{w}_{\zeta+1j} \equiv \{w_1, \dots, w_\eta + 1, \dots, w_{\eta'} - 1, \dots, w_\delta - 1, \dots, w_\lambda\}. \quad (3.124)$$

Cuando en ABAKO se aborda el cálculo de $\mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}$ o de $\mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}$, el estado auxiliar $\zeta + 1m$ es aquél que, entre todos los estados del ion $\zeta + 1$, tiene una energía total $E_{\zeta+1m}$ lo más parecida posible a $E_{\zeta i} - I_\zeta$, satisfaciendo además la relación entre $\mathbf{w}_{\zeta i}$ y $\mathbf{w}_{\zeta+1m}$.

Asimismo, si suponemos que la expulsión del electrón o la captura del mismo, según el proceso, ocurre en un orbital externo el ion, podemos tomar $Z_{eff} = \zeta + 1$.

Con estas consideraciones, las expresiones que finalmente se utilizan en ABAKO para el cálculo de los coeficientes de tasa de autoionización y captura electrónica son, respectivamente,

$$\mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = \frac{16\pi I_H g_{\zeta+1j}}{\sqrt{3}h g_{\zeta i}} \frac{I_H (\zeta + 1)^2}{n_\delta^3} \frac{f_{jm}}{E_{ij}} g(1), \quad (3.125)$$

$$\mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i} = \frac{16\pi\sqrt{2\pi}a_0^2 I_H^2}{\sqrt{3}m_e} \frac{I_H (\zeta + 1)^2}{n_\delta^3} \frac{f_{jm}g(1)}{E_{ij}T^{3/2}} e^{-E_{ij}/T}, \quad (3.126)$$

con

$$g(1) = \begin{cases} 0.60, & \text{si } n_{\eta'} - n_\eta = 0, \\ 0.15, & \text{si } n_{\eta'} - n_\eta \neq 0. \end{cases} \quad (3.127)$$

3.5 Ecuaciones del modelo colisional-radiativo

Vamos a exponer en este apartado las ecuaciones básicas del modelo colisional-radiativo propuesto en esta tesis. Empezaremos desde un punto lo más general posible, para luego obtener, siguiendo un orden creciente de complejidad, las ecuaciones particulares de cada una de las situaciones contempladas en ABAKO, a saber, plasmas ópticamente delgados y plasmas ópticamente gruesos.

Nuestro punto de partida es el conjunto de las ecuaciones de tasas más la ecuación de transferencia radiativa, tal y como se expuso al principio de este capítulo,

$$\frac{\partial N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta' m'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-, \quad (3.128)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e})}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) = -\kappa(\mathbf{r}, t, \nu) I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) + j(\mathbf{r}, t, \nu). \quad (3.129)$$

Coeficiente	Proceso atómico
$\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a$	absorción
$\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e$	emisión estimulada
$\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}$	emisión espontánea
$\mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}$	excitación colisional
$\mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}$	desexcitación colisional
$\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}$	fotoionización
$\mathcal{P}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e$	recombinación estimulada
$\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r$	recombinación radiativa
$\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}$	ionización colisional
$\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3$	recombinación a tres cuerpos
$\mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}$	autoionización
$\mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}$	captura electrónica

Tabla 3.1. Lista de procesos atómicos incluidos un modelo CR general y símbolos utilizados para los correspondientes coeficientes de tasas.

Sabemos que en el caso más general, para poder obtener las poblaciones $N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)$ en cada punto del espacio y en cualquier instante de tiempo, sería necesario resolver las ecuaciones anteriores de forma autoconsistente.

Conviene recordar que los términos $\mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+$ y $\mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-$ aglutinan, respectivamente, todos los mecanismos responsables de poblar o despoblar un estado ζm dado. Nuestra intención es escribir estos términos de forma explícita, pero para ello debemos comentar antes algunas cuestiones acerca de las magnitudes que intervienen en la ecuación de transporte radiativo. Como dijimos en su momento $I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e})$ es la intensidad específica de radiación en el punto \mathbf{r} , en el instante t , a la frecuencia ν , propagándose en la dirección del vector unitario \mathbf{e} . Las magnitudes $\kappa(\mathbf{r}, t, \nu)$ y $j(\mathbf{r}, t, \nu)$ son los coeficientes de absorción y emisión, respectivamente. Tanto el uno como el otro juegan un papel decisivo a la hora de determinar las propiedades espectrales del plasma. No daremos ahora detalles acerca de cómo evaluarlos, ya que esta cuestión será abordada más adelante, pero conviene tener presente que para hacerlo es preciso conocer las poblaciones $N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)$ de todos los niveles atómicos.

Por otro lado, en el tratamiento del transporte radiativo resulta útil definir la *intensidad media* como el promedio de la intensidad específica sobre todas las direcciones del espacio,

$$J(\mathbf{r}, t, \nu) = \frac{1}{4\pi} \int_S I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) d\Omega = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (3.130)$$

Asimismo, antes de escribir las ecuaciones de tasas, en la tabla 3.1 recordamos la lista de los procesos atómicos más importantes en el contexto de un modelo CR general. Aparecen también todos los mecanismos dependientes del campo de radiación, ya que, aunque no son tratados de forma explícita en ABAKO, nos interesa mantenerlos en las ecuaciones de cara a la discusión que estamos iniciando.

Debemos hacer una aclaración más acerca de los procesos inducidos por el campo de radiación. Como se sabe, la absorción y la emisión estimulada provocan transiciones entre estados del espectro discreto y junto con la emisión espontánea conforman el grupo de los procesos radiativos *ligado-ligado*. Por otro lado, la fotoionización y la recombinación estimulada conectan estados del espectro discreto con estados del continuo. Constituyen, junto con la recombinación radiativa, los procesos radiativos *ligado-libre*⁸. Pues bien, en relación con los procesos inducidos ligado-ligado debemos tener presente que ni $\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a$ ni $\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e$ son exactamente los correspondientes coeficientes de tasa, sino los conocidos coeficientes de Einstein de absorción y emisión estimulada, respectivamente.

Llegados a este punto, definimos

$$J_{ij}^a(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \int_0^\infty \phi_{ij}^a(\mathbf{r}, t, \nu) J(\mathbf{r}, t, \nu) d\nu, \quad (3.131)$$

$$J_{ji}^e(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \int_0^\infty \phi_{ji}^e(\mathbf{r}, t, \nu) J(\mathbf{r}, t, \nu) d\nu, \quad (3.132)$$

donde $\phi_{ij}^a(\mathbf{r}, t, \nu)$ es el perfil de absorción y $\phi_{ji}^e(\mathbf{r}, t, \nu)$ el de emisión y podríamos hablar también del perfil de emisión espontánea $\phi_{ji}^s(\mathbf{r}, t, \nu)$. Obsérvese que los perfiles dependen de \mathbf{r} y de t como consecuencia de la posible variación espacio-temporal de las condiciones del plasma. Omitiremos de aquí en adelante esta dependencia, salvo en las situaciones donde sea importante especificarla.

Con estas consideraciones, el coeficiente de tasa de absorción viene dado por

$$\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a \quad (3.133)$$

y el de emisión estimulada como

$$\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e. \quad (3.134)$$

En términos de los coeficientes de Einstein, la sección eficaz de absorción se escribe como $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a \phi_{ij}^a(\nu)$ y la de emisión como $\sigma_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e \phi_{ji}^e(\nu)$ [67]. Así, por establecer una analogía con la expresión general (3.57) para la determinación los coeficientes de tasas, en el caso de los procesos inducidos ligado-ligado, éstos pueden calcularse como

$$\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a = \int_0^\infty \frac{4\pi}{h\nu} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a(\nu) J(\nu) d\nu, \quad (3.135)$$

$$\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e = \int_0^\infty \frac{4\pi}{h\nu} \sigma_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e(\nu) J(\nu) d\nu. \quad (3.136)$$

⁸También existen los procesos *libre-libre*, como el bremsstrahlung, pero como éstos no alteran la población de los estados iónicos no se incluyen en las ecuaciones de tasas.

Por otro lado, los coeficientes de tasas de los procesos radiativos ligado-libre se expresan de la siguiente manera. Para la fotoionización tenemos

$$\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} = \int_{\nu_{th}}^{\infty} \frac{4\pi}{h\nu} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j}^{pho}(\nu) J(\nu) d\nu, \quad (3.137)$$

siendo $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j}^{pho}(\nu)$ la correspondiente sección eficaz; mientras que para la recombinación estimulada puede escribirse

$$\mathcal{P}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^e = \int_0^{\infty} v \beta_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon) J(\nu) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.138)$$

donde $\beta_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon)$ representa una *pseudo* sección eficaz de fotorrecombinación⁹.

Ya estamos en disposición de escribir de forma explícita el sistema de ecuaciones de tasas. En el caso más general, que contempla una evolución espacio-temporal del plasma, éste viene dado por

$$\frac{\partial N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta' j} N_{\zeta' j}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' j \rightarrow \zeta i}^+ - \sum_{\zeta' j} N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta' j}^-,$$

donde

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta' j} N_{\zeta' j}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' j \rightarrow \zeta i}^+ = & \\ & \sum_j N_{\zeta - 1j}(\mathbf{r}, t) [\mathcal{P}_{\zeta - 1j \rightarrow \zeta i} + n_e \mathcal{I}_{\zeta - 1j \rightarrow \zeta i} + \mathcal{A}u_{\zeta - 1j \rightarrow \zeta i}] \\ & + \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}, t) [\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^a J_{ji}^a + n_e \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}] \\ & + \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}, t) [\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e + \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}] \\ & + \sum_j N_{\zeta + 1j}(\mathbf{r}, t) n_e [\mathcal{P}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^e + \mathcal{R}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}^3 + \mathcal{C}_{\zeta + 1j \rightarrow \zeta i}], \end{aligned} \quad (3.139)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta' j} N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta' j}^- = & \\ & N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_j n_e [\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}^e + \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}^3 + \mathcal{C}_{\zeta i \rightarrow \zeta - 1j}] \\ & + N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} [\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^e J_{ij}^e + \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}] \\ & + N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} [\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a + n_e \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}] \\ & + N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_j [\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} + n_e \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j} + \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta + 1j}]. \end{aligned} \quad (3.140)$$

En un medio estático, $\mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta i} = 0$, y en estado estacionario, $\frac{\partial N_{\zeta i}}{\partial t} = 0$, el sistema a resolver se reduce al caso

$$\sum_{\zeta' i'} N_{\zeta' i'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' i' \rightarrow \zeta i}^+ - N_{\zeta i}(\mathbf{r}, t) \sum_{\zeta' i'} \mathbb{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta' i'}^- = 0. \quad (3.141)$$

⁹Más detalles en el apéndice B.

En ABAKO trabajaremos siempre en esta última situación.

3.5.1 Ecuaciones de tasas en plasmas ópticamente delgados

La particularización del sistema de ecuaciones de tasas al caso de un plasma ópticamente delgado es muy sencilla. Bajo esta aproximación y en ausencia de fuentes externas, pueden despreciarse en las ecuaciones de tasas todos aquellos procesos dependientes del campo de radiación. Así, desaparecen los términos correspondientes a la absorción y emisión estimulada, fotoionización y fotorrecombinación. Este hecho simplifica considerablemente la determinación de las poblaciones de nivel, ya que el sistema es ahora independiente de la intensidad de radiación y no es necesario resolver de forma conjunta la ecuación de transporte radiativo.

Por otro lado, la consideración de un plasma como ópticamente delgado se ve favorecida cuando su densidad decrece suficientemente y siempre en ausencia de gradientes significativos entre diferentes regiones del espacio, ya que de lo contrario no podrían despreciarse los efectos de opacidad. Por la misma razón, el plasma debe ser de pequeñas dimensiones. De todo esto, puede deducirse que si el plasma es delgado también puede considerarse homogéneo. Aun en un hipotético caso, donde siendo el plasma delgado, nos encontrásemos regiones del espacio caracterizadas por condiciones distintas, podríamos resolver el problema como un conjunto de plasmas delgados homogéneos independientes, uno por cada región. Esto sería posible porque el mecanismo que establece la conexión entre las diferentes regiones es el transporte de radiación, que en este caso se considera despreciable.

Según lo dicho, puede prescindirse de la dependencia en \mathbf{r} , con lo que, en situación estacionaria, el sistema de ecuaciones de tasas para un plasma ópticamente delgado es

$$\begin{aligned}
& \sum_j N_{\zeta-1j} [n_e \mathcal{I}_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i} + \mathcal{A}u_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}] + \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta j} n_e \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \\
& + \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j} [\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}] + \sum_j N_{\zeta+1j} n_e [\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3 + \mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}] \\
& - N_{\zeta i} \sum_j n_e [\mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^3 + \mathcal{C}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}] - N_{\zeta i} \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} [\mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}] \\
& - N_{\zeta i} \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} n_e \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} - N_{\zeta i} \sum_j [n_e \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} + \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}] = 0.
\end{aligned} \tag{3.142}$$

Esta última expresión representa un sistema lineal de ecuaciones homogéneo para las poblaciones $N_{\zeta i}$. En consecuencia, para poder obtener una solución distinta de la trivial, una de las ecuaciones del sistema se sustituye por la condición de ligadura

$$\sum_{\zeta, i} N_{\zeta i} = n_{ion}, \tag{3.143}$$

que expresa la conservación de partículas en el plasma.

3.5.2 Ecuaciones de tasas en plasmas ópticamente gruesos

Cuando los efectos de opacidad son importantes, para determinar la distribución de población entre las distintas especies iónicas que componen el plasma es necesario resolver de forma simultánea la ecuación de transporte radiativo y las ecuaciones de tasas, ya que en éstas intervienen los procesos atómicos inducidos por el campo de radiación generado por el propio plasma. No obstante, ya adelantábamos que para el tratamiento de los plasmas ópticamente gruesos y con el objetivo de evitar la resolución explícita de la ecuación de transporte, en ABAKO se utiliza el formalismo de los factores de escape. Esta aproximación permite introducir los efectos de reabsorción en el modelo CR a través de la resolución iterativa de las ecuaciones de tasas. Así pues, el objetivo de este apartado es exponer paso a paso la manera en que se ha implementado esta técnica en ABAKO, tanto para el tratamiento de los plasmas gruesos homogéneos como no-homogéneos.

En el caso general de un plasma grueso no-homogéneo, el sistema de ecuaciones de tasas en la situación estacionaria viene dado por

$$\begin{aligned}
& \sum_j N_{\zeta-1j}(\mathbf{r}) [\mathcal{P}_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{I}_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r}) + \mathcal{A}u_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r})] \\
& + \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}) [\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^a J_{ji}^a(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r})] \\
& + \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}) [\mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e(\mathbf{r}) + \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r})] \\
& + \sum_j N_{\zeta+1j}(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}) [\mathcal{P}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e(\mathbf{r}) + \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3(\mathbf{r}) + \mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r})] \\
& - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_j n_e(\mathbf{r}) [\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^e(\mathbf{r}) + \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^r(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^3(\mathbf{r}) + \mathcal{C}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}(\mathbf{r})] \\
& - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} [\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^e J_{ij}^e(\mathbf{r}) + \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\mathbf{r})] \\
& - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} [\mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\mathbf{r})] \\
& - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_j [\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\mathbf{r}) + \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\mathbf{r})] = 0.
\end{aligned} \tag{3.144}$$

Para la discusión que hemos comenzado nos interesa hacer explícita la dependencia espacial \mathbf{r} . Debemos tener presente que en el caso de los coeficientes de tasas esta dependencia es consecuencia directa de la variación de las condiciones del plasma, en particular de la temperatura $T(\mathbf{r})$, que como ya hemos visto aparece de forma explícita en la mayoría de las expresiones utilizadas para calcular los coeficientes. Sin embargo, estamos despreciando la dependencia espacial que, también como consecuencia del cambio de dichas condiciones o más concretamente debido a los efectos de plasma, podrían presentar magnitudes puramente atómicas, como energías de nivel, degeneracio-

nes, etc. Por esta última razón, los coeficientes de Einstein de absorción, emisión y decaimiento espontáneo se consideran independientes de \mathbf{r} .

En general, los efectos de opacidad se manifiestan tanto en los procesos ligado-ligado, como en aquéllos en los que intervienen estados del continuo. Sin embargo, conviene matizar que, por ejemplo, aun cuando los efectos de reabsorción son apreciables, en función de las condiciones del plasma, no todas las líneas del espectro ligado-ligado son ópticamente gruesas. Es más, a pesar de las grandes densidades que llegan a alcanzar en comparación con los casos astrofísicos, en los plasmas de laboratorio, debido a su pequeño tamaño, la radiación del continuo suele comportarse como ópticamente delgada [95]. Actualmente, el tratamiento que se da en ABAKO a los plasmas ópticamente gruesos contempla sólo la influencia del transporte radiativo sobre los procesos ligado-ligado, no obstante, según lo dicho, este hecho no supone una limitación significativa en la aplicabilidad del modelo. A efectos prácticos, lo que acabamos de comentar se traduce simplemente en que los procesos de fotoionización y recombinación estimulada quedan excluidos del modelo CR.

Centrémonos ahora en el problema concreto del transporte de líneas del espectro ligado-ligado. A partir de este momento nuestro objetivo será establecer las ecuaciones básicas generales de un modelo de transporte radiativo basado en el concepto de *factor de escape*, definidas convenientemente en el contexto de la cinética de poblaciones en plasmas.

Así, consideremos una línea cualquiera $\zeta i \leftrightarrow \zeta j$ del espectro ligado-ligado. La tasa neta de decaimiento radiativo desde el nivel ζj al ζi viene dada por

$$N_{\zeta j}(\mathbf{r}) [\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e(\mathbf{r})] - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a(\mathbf{r}). \quad (3.145)$$

Es fácil ver que, agrupando de forma adecuada los términos correspondientes a los procesos radiativos ligado-ligado, la tasa de decaimiento radiativo aparecería de forma explícita en el sistema de ecuaciones de tasas (3.144). Por otro lado, para evitar la resolución expresa de la ecuación de transferencia radiativa, debemos encontrar una manera de eliminar la intensidad de radiación de las ecuaciones de tasas.

Así, el factor de escape $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ se introduce de forma natural como una manera alternativa de reescribir la tasa neta de decaimiento radiativo $\zeta j \rightarrow \zeta i$, esto es,

$$N_{\zeta j}(\mathbf{r}) [\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e(\mathbf{r})] - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a(\mathbf{r}) = N_{\zeta j}(\mathbf{r}) \Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}. \quad (3.146)$$

Al despejar $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ se obtiene

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = 1 - \frac{N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a(\mathbf{r}) - N_{\zeta j}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e(\mathbf{r})}{N_{\zeta j}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}}. \quad (3.147)$$

Si utilizamos ahora las relaciones existentes entre los coeficientes de Einstein, esto es,

$$g_{\zeta i} \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a = g_{\zeta j} \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e \quad (3.148)$$

$$\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e, \quad (3.149)$$

entonces se obtiene para el factor de escape

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = 1 - \frac{c^2}{2h\nu_{ij}^3} \left[\frac{N_{\zeta i} g_{\zeta j}}{N_{\zeta j} g_{\zeta i}} J_{ij}^a(\mathbf{r}) - J_{ji}^e(\mathbf{r}) \right]. \quad (3.150)$$

Desde el punto de vista formal, esta última ecuación es un resultado interesante, ya que pone de manifiesto que el factor de escape no depende explícitamente de ningún proceso atómico, sino de magnitudes atómicas características de los niveles involucrados en la transición, de sus poblaciones y del campo de radiación.

Obsérvese que al introducir $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ el balance entre los procesos radiativos ligado-ligado se expresa sólo en términos del decaimiento espontáneo. Dicho de otra forma, el factor de escape $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ permite definir una tasa equivalente de decaimiento espontáneo $\mathcal{A}'_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r}) = \Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}$ que incluye implícitamente los efectos de la absorción y la emisión estimulada.

Utilizando la definición de $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$, las ecuaciones de tasas pueden expresarse de la manera siguiente,

$$\begin{aligned} & \sum_j N_{\zeta-1j}(\mathbf{r}) [n_e(\mathbf{r}) \mathcal{I}_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r}) + \mathcal{A}u_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r})] \\ & + \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}) \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r}) \\ & + \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j}(\mathbf{r}) [\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r})] \\ & + \sum_j N_{\zeta+1j}(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}) [\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3(\mathbf{r}) + \mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\mathbf{r})] \\ & - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_j n_e(\mathbf{r}) [\mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^r(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^3(\mathbf{r}) + \mathcal{C}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}(\mathbf{r})] \\ & - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} [\Lambda_{ij}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\mathbf{r})] \\ & - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} n_e(\mathbf{r}) \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\mathbf{r}) \\ & - N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \sum_j [n_e(\mathbf{r}) \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\mathbf{r}) + \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\mathbf{r})] = 0. \end{aligned} \quad (3.151)$$

En primer lugar, nótese que los procesos inducidos ligado-libre ya no aparecen en las ecuaciones por haber sido eliminados del modelo CR. Al margen de este hecho, la expresión (3.151) es exacta desde el punto de vista formal. La introducción del factor de escape nos permite reescribir el sistema de tal forma que el campo de radiación ya no aparece de forma explícita. Esto no significa, ni mucho menos, que hayamos conseguido desacoplar las ecuaciones de tasas de la ecuación de transporte radiativo, ya que el campo de radiación sigue estando presente, ahora de forma implícita, a través de la definición de $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$.

Por tanto, el siguiente paso será encontrar la manera de transformar la ecuación (3.147) que da $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ para conseguir desacoplar de forma efectiva el balance poblacional y el transporte radiativo. Es precisamente en este punto donde entran en juego los diferentes modelos y aproximaciones que podemos encontrar en la literatura para el cálculo del factor de escape. No obstante, antes de abordar de forma específica el cálculo del factor de escape y exponer la solución adoptada en ABAKO, vamos a continuar trabajando sobre la expresión general (3.147).

Recordemos que para evaluar los términos $J_{ij}^a(\mathbf{r})$ y $J_{ji}^e(\mathbf{r})$ es necesario integrar la intensidad media sobre los perfiles de absorción y emisión respectivamente. Ahora bien, en ABAKO se trabaja bajo la suposición de redistribución completa¹⁰ lo que implica

$$\phi_{ij}^{(a)}(\nu) = \phi_{ji}^{(e)}(\nu) = \phi_{ji}^{(s)}(\nu) = \phi_{ij}(\nu) = \phi_{ji}(\nu), \quad (3.152)$$

y, por tanto, también ocurre $J_{ij}^a(\mathbf{r}) = J_{ji}^e(\mathbf{r}) = J_{ij}(\mathbf{r}) = J_{ji}(\mathbf{r})$. Asimismo, para $\phi_{ij}(\nu)$ habitualmente utilizaremos un perfil tipo Voigt, que contempla el ensanchamiento natural de las líneas y el debido al efecto Doppler (véase el apéndice C). Para la evaluación de la función Voigt se utiliza la técnica descrita en [135].

Bajo la aproximación de redistribución completa, la ecuación (3.150) se expresa como

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = 1 - \frac{c^2}{2h\nu_{ij}^3} \left[\frac{N_{\zeta i} g_{\zeta j}}{N_{\zeta j} g_{\zeta i}} - 1 \right] J_{ij}(\mathbf{r}). \quad (3.153)$$

Por otro lado, se define la *función fuente monocromática* $S_{ij}(\mathbf{r})$, en su versión para redistribución completa, como

$$S_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{N_{\zeta j}(\mathbf{r}) \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}}{N_{\zeta i}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a - N_{\zeta j}(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{1}{\frac{g_{\zeta j} N_{\zeta i}(\mathbf{r})}{g_{\zeta i} N_{\zeta j}(\mathbf{r})} - 1}. \quad (3.154)$$

De esta forma, se obtiene para el factor de escape

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = 1 - \frac{1}{S_{ij}(\mathbf{r})} J_{ij}(\mathbf{r}). \quad (3.155)$$

¹⁰En general, a través de los mecanismos de interacción de la radiación electromagnética con los átomos que componen el medio, los fotones pueden cambiar su dirección de propagación y también su frecuencia. Este hecho permite definir una *función de redistribución* direccional y frecuencial que da cuenta del estado los fotones antes y después de la interacción. Sin embargo, esta descripción del campo de radiación es muy compleja y es habitual llevar a cabo algunas simplificaciones. En particular, en la teoría de formación de líneas espectrales, el aspecto más importante de la redistribución es la variación de la frecuencia de los fotones. La redistribución angular no es tan importante porque en el lugar donde ocurre la absorción/emisión, la radiación es prácticamente isotrópica y el proceso se describe razonablemente utilizando una función de redistribución promediada angularmente. Ahora bien, rigurosamente la frecuencia del fotón emitido depende de la frecuencia del fotón absorbido. Esta *correlación* da lugar a un perfil de línea de absorción distinto al de emisión. Por el contrario, si los fotones se redistribuyen de forma totalmente independiente, sin que exista correlación alguna entre los procesos de absorción y emisión, entonces sólo tiene sentido hablar de un único perfil de línea o, equivalentemente, considerar que los perfiles de absorción y emisión son idénticos. Esta situación se conoce como *decoherencia* o *redistribución completa* y resulta ser una buena aproximación cuando, en el proceso de interacción con la radiación, los átomos/iones del medio también son fuertemente perturbados por colisiones con otras partículas [67].

En este punto es importante tratar algunas cuestiones relacionadas con la ecuación de transferencia radiativa. Para empezar, en el contexto de la física de plasmas, es muy frecuente estudiar el problema del transporte de radiación en la situación estacionaria. De esta forma la correspondiente derivada temporal se anula y la ecuación de transferencia resulta

$$\mathbf{e} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) = -\kappa(\mathbf{r}, t) I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) + j(\mathbf{r}, t). \quad (3.156)$$

También podemos ver que el término $\mathbf{e} \cdot \nabla I$ no es más que la derivada direccional de la intensidad sobre la dirección de propagación \mathbf{e} , también llamada *dirección del rayo*. Si s es la coordenada espacial sobre dicha dirección, entonces la ecuación anterior puede escribirse como

$$\frac{\partial I(s, \nu)}{\partial s} = -\kappa(s, t) I(s, \nu) + j(s, \nu). \quad (3.157)$$

La ecuación anterior puede verse como una ecuación diferencial de primer orden cuya solución, como se indica en el apéndice D, viene dada por

$$I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) \equiv I(s, \nu) = I(s_0, \nu) e^{-\tau(s_0, s; \nu)} + \int_{s_0}^s j(s', \nu) e^{-\tau(s', s; \nu)} ds', \quad (3.158)$$

donde s_0 es un punto sobre la superficie frontera del medio y $\tau(s, s'; \nu)$ es el *espesor óptico*, que de forma general se calcula como

$$\tau(s_1, s_2; \nu) = \int_{s_1}^{s_2} \kappa(s, \nu) ds. \quad (3.159)$$

La expresión (3.158) se conoce como *solución formal* de la ecuación de transporte radiativo y su interpretación es sencilla. La intensidad en un punto s del plasma es igual a la intensidad procedente del exterior atenuada por el factor exponencial debido a la absorción en el interior del plasma, más la intensidad emitida en la dirección del rayo atenuada por la absorción ocurrida entre el punto de emisión s' y el punto considerado s . Es importante darse cuenta de que, aunque hayamos sido capaces de escribir una solución para la intensidad de radiación, para resolver realmente el problema es necesario haber determinado con anterioridad los coeficientes de absorción y emisión en todos los puntos del plasma. Sólo en una situación de equilibrio termodinámico total, estos coeficientes son funciones sencillas. En el caso particular de NLTE, para calcular $\kappa(s, \nu)$ y $j(s, \nu)$ hay que conocer las poblaciones de nivel y por tanto resolver las ecuaciones de tasas, pero éstas dependen de la intensidad de radiación. En resumen, vuelve a ponerse de manifiesto la necesidad de resolver de forma autoconsistente el sistema de ecuaciones de tasas y la ecuación de transporte radiativo.

En cualquier caso, vamos a utilizar la solución formal de la ecuación de transporte para derivar para algunas expresiones que nos serán de utilidad en el procedimiento que estamos desarrollando. En primer lugar, en ausencia de fuentes externas, el primer sumando del segundo miembro en (3.158) se anula y, por tanto,

$$I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) \equiv I(s, \nu) = \int_{s_0}^s j(s', \nu) e^{-\tau(s', s; \nu)} ds'. \quad (3.160)$$

Según (3.155), para evaluar $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ hay que determinar previamente $J_{ij}(\mathbf{r})$ y para ello podemos hacer uso de la expresión anterior. Así,

$$\begin{aligned} J_{ij}(\mathbf{r}) &= \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, \nu) J(\mathbf{r}, \nu) d\nu = \frac{1}{4\pi} \int_S \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, \nu) I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) d\nu d\Omega \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_S \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, \nu) \left[\int_{s_0}^s j(s', \nu) e^{-\tau(s', s; \nu)} ds' \right] d\nu d\Omega \end{aligned} \quad (3.161)$$

Recordemos que el término entre corchetes representa una integral sobre la dirección o el camino seguido por el rayo y que, en consecuencia, dependerá de la dirección seleccionada en la integral que efectúa el promedio sobre todas ellas.

Si ahora sustituimos la expresión (3.161) en (3.155) se obtiene,

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = 1 - \frac{1}{S_{ij}(\mathbf{r})} \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, \nu) J(\mathbf{r}, \nu) d\nu, \quad (3.162a)$$

o bien,

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = 1 - \frac{1}{S_{ij}(\mathbf{r})} \frac{1}{4\pi} \int_S \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, \nu) \left[\int_{s_0}^s j(s', \nu) e^{-\tau(s', s; \nu)} ds' \right] d\nu d\Omega. \quad (3.162b)$$

Las expresiones anteriores nos indican la manera de evaluar el factor de escape $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ asociado a la línea $\zeta_i \leftrightarrow \zeta_j$ en cada punto \mathbf{r} del espacio. Sin embargo, pensando en su implementación en un código cinético, la expresión (3.162) no es útil desde el punto de vista práctico, ya que el cálculo del factor de escape para todo punto \mathbf{r} sería inabordable. Sin embargo, en buena aproximación, es posible dividir el plasma en un conjunto de N_C regiones o celdas *homogéneas*. Bajo estas consideraciones, cada celda q tendrá, en general, una forma arbitraria y ocupará un volumen V^q . En cualquier punto \mathbf{r} del interior de q , la temperatura tomará el mismo valor T^q , la densidad electrónica n_e^q y las poblaciones de los iones responsables de la absorción y emisión de radiación en la línea considerada vendrán dadas por $N_{\zeta_i}^q$ y $N_{\zeta_j}^q$, respectivamente¹¹. De esta forma, es posible determinar el factor de escape Λ_{ji}^q asociado a la región q del espacio promediando sobre todos los puntos del interior de q , $\Lambda_{ji}^q = \frac{1}{V^q} \int_{V^q} \Lambda_{ji}(\mathbf{r}) dV$. Teniendo en cuenta (3.162) resulta

$$\Lambda_{ji}^q = 1 - \frac{1}{S_{ij}^q} \frac{1}{V^q} \int_{V^q} \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, \nu) J(\mathbf{r}, \nu) d\nu dV, \quad (3.163a)$$

o equivalentemente

$$\Lambda_{ji}^q = 1 - \frac{1}{S_{ij}^q} \frac{1}{4\pi V^q} \int_{V^q} \int_S \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, \nu) \left[\int_{s_0}^s j(s', \nu) e^{-\tau(s', s; \nu)} ds' \right] d\nu d\Omega dV. \quad (3.163b)$$

¹¹El procedimiento que ahora empezamos a describir también es válido para tratar los efectos del transporte radiativo en un medio donde tanto la temperatura como la densidad electrónica son uniformes. En este caso, para dos celdas cualesquiera p y q , ocurrirá $T^p = T^q$ y $n_e^p = n_e^q$, pero, en general, debido a los efectos de absorción, las poblaciones serán diferentes en cada zona del espacio, $N_{\zeta_i}^p \neq N_{\zeta_i}^q$. En relación con lo que acabamos de comentar, también podría suceder que aún en presencia de gradientes de temperatura o densidad, existan en el medio regiones de tamaño considerable donde estas magnitudes permanezcan constantes y sea entonces necesario dividir las en regiones más pequeñas para tratar adecuadamente el transporte de radiación y obtener de forma precisa la distribución espacial de las poblaciones de nivel. El formalismo que se describe en este apartado contempla todas estas posibilidades.

Tengamos presente que no hay pérdida de generalidad por el hecho de calcular el factor de escape promediado sobre el volumen de cada celda. Sólo hay que pensar que tomando el límite $V^q \rightarrow 0$ a ambos lados de (3.163) recuperaríamos el resultado (3.162).

Por otro lado, tras dividir el medio en diferentes regiones, es fácil ver que la ecuación de tasas (3.151) se transforma en

$$\begin{aligned}
& \sum_j N_{\zeta-1j}^q \left[n_e^q \mathcal{I}_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}^q + \mathcal{A} u_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}^q \right] \\
& + \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta j}^q n_e^q \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q + \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j}^q \left[\Lambda_{ji}^q \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e^q \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q \right] \\
& + \sum_j N_{\zeta+1j}^q n_e^q \left[\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{(r)q} + n_e^q \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{(3)q} + \mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^q \right] \\
& - N_{\zeta i}^q \sum_j n_e^q \left[\mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^{(r)q} + n_e^q \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^{(3)q} + \mathcal{C}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^q \right] \\
& - N_{\zeta i}^q \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} \left[\Lambda_{ij}^q \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e^q \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q \right] - N_{\zeta i}^q \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} n_e^q \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q \\
& - N_{\zeta i}^q \sum_j \left[n_e^q \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^q + \mathcal{A} u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^q \right] = 0.
\end{aligned} \tag{3.164}$$

Llegado este punto, es importante destacar que la expresión (3.151), mediante la cual se establece el sistema de ecuaciones de tasas, junto con la ecuación (3.162) que permite la determinación del factor de escape –o de forma equivalente, en la versión discretizada del medio, las ecuaciones (3.163) y (3.164)– representan un conjunto de ecuaciones básicas común a cualquier modelo cinético que, bajo la hipótesis de redistribución completa, utilice el formalismo del factor de escape para el tratamiento del transporte radiativo ligado-ligado. Éste era precisamente uno de los objetivos que nos planteamos al comienzo de este apartado.

En el contexto de este marco teórico, las expresiones concretas que definen y caracterizan a cada modelo particular se obtendrán entonces a partir de las ecuaciones generales planteadas, manipulándolas convenientemente y realizando sobre ellas las aproximaciones oportunas. Por ejemplo, el simple hecho de especificar un tipo concreto de geometría va a simplificar considerablemente la evaluación de las integrales de superficie y volumen que aparecen en (3.162) y (3.163). En este sentido y ante la imposibilidad de obtener una expresión concreta del factor de escape válida para una geometría arbitraria, los modelos que encontramos en la bibliografía suelen desarrollarse sobre alguna de las tres geometrías básicas –plana, cilíndrica o esférica–. Asimismo, antes apuntábamos que de cara al desarrollo de un código computacional para el cálculo de poblaciones, la expresión realmente útil para la determinación del factor de escape es (3.163). A este respecto, independientemente del modelo en cuestión y al margen de la integral que resulta de hacer explícita la solución formal de la ecuación de transporte, siempre habrá que abordar tres procesos de integración – uno sobre frecuencia, otro sobre superficie y un tercero sobre volumen–. Pues bien, veremos que el orden

en el que se lleven a cabo estas integrales va a influir de forma significativa en la obtención de una expresión más o menos conveniente para el cálculo del factor de escape y en las características que finalmente definan al modelo en cuestión.

En resumen, en este apartado hemos planteado un conjunto de ecuaciones básicas, formuladas claramente en el contexto del estudio de la cinética de poblaciones en plasmas ópticamente gruesos, que definen y permiten la evaluación del factor de escape y que, por tanto, resultan de aplicación en cualquier modelo de transporte radiativo basado en esta técnica. Estas ecuaciones representan un importante punto de referencia en esta tesis doctoral, ya que, a partir de ellas vamos a deducir, por un lado, las ecuaciones particulares del modelo implementado en ABAKO y también las de otros modelos de características similares que pueden encontrarse en la bibliografía. Esto nos servirá, a su vez, para dejar constancia de la peculiaridades y las ventajas o desventajas que presentan cada uno de ellos.

El modelo de transporte radiativo propuesto en ABAKO

El formalismo que se utiliza en ABAKO para el transporte de línea cuando las condiciones del plasma varían de un punto a otro del espacio ha sido desarrollado únicamente para el caso de geometría plana. La técnica, que está inspirada en algunas de las ideas expresadas en [97, 106], es original de nuestro grupo de investigación y sus principales características ya fueron expuestas en [136, 137]. Así pues, dedicaremos este apartado a presentar de forma detallada los fundamentos básicos del modelo y sus ecuaciones más representativas, necesarias por otro lado para la implementación del mismo en el código cinético. Con el objetivo de preservar una mayor claridad en la exposición hemos dejado para el apéndice E la deducción de todas aquellas expresiones que requieren de manipulaciones algebraicas extensas.

Consideremos entonces un plasma en el que las poblaciones de nivel dependen del punto del espacio considerado, $N_{\zeta i}(\mathbf{r})$. En general, tanto la temperatura como la densidad electrónica también dependerán de \mathbf{r} , esto es,

$$n_e(\mathbf{r}) \neq cte, \quad T(\mathbf{r}) \neq cte'. \quad (3.165)$$

Supongamos ahora que la geometría representativa del plasma objeto de estudio es la de una lámina infinita de anchura L . Como se indica en la figura 3.3, a continuación dividimos la lámina en N_C láminas más delgadas o *celdas* de tal forma que, en el interior de cada una de ellas, tanto las condiciones del plasma como las poblaciones de nivel puedan considerarse constantes. Con este procedimiento estamos discretizando el problema inicial y en lugar de trabajar con la variable continua z , pasamos a tener N_C celdas homogéneas, donde, para una celda particular q de anchura $\Delta z_q = z_{q+1} - z_q$, la temperatura vale T^q , la densidad electrónica n_e^q y la población del nivel ζi es $N_{\zeta i}^q$. Debemos tener presente que la discretización no supone ningún tipo de limitación de cara a la aplicación del modelo que vamos a describir. Pensemos simplemente que, de haber optado por

la resolución numérica de la ecuación de transferencia radiativa, también hubiese sido necesario llevar a cabo un mallado espacial con el mismo criterio que hemos establecido aquí. Ahora bien, lógicamente los perfiles de densidad y temperatura sobre la anchura total del plasma influirán a la hora de fijar el número de celdas N_C necesarias para conseguir una discretización realista. Si las variaciones de las condiciones del plasma son suaves, esto nos permitirá reducir el número de celdas, mientras que si existen cambios bruscos habrá que aumentar el número de celdas y reducir el tamaño de las mismas.

Con estas condiciones, nuestro punto de partida es el sistema de ecuaciones de tasas (3.164) y la expresión (3.163) que determina el factor de escape. Nos interesa, en primer lugar, particularizar esta última ecuación para geometría plana. Así pues, la expresión general (3.162) para $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ se reescribiría como

$$\Lambda_{ji}(z) = 1 - \frac{1}{S_{ij}(z)} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{ij}(z, \nu) J(z, \nu) d\nu, \quad (3.166)$$

y la ecuación (3.163) para el factor de escape Λ_{ji}^q quedaría de la siguiente forma

$$\Lambda_{ji}^q = 1 - \frac{1}{S_{ij}^q} \frac{1}{\Delta z_q} \int_{z_q}^{z_{q+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{ij}(z, \nu) J(z, \nu) d\nu dz. \quad (3.167)$$

Para que el procedimiento que hemos iniciado sea realmente útil debemos ser capaces de escribir una expresión para Λ_{ji}^q –o equivalentemente para $\Lambda_{ji}(z)$ – que, introducida en las ecuaciones de tasas, permita determinar las poblaciones de nivel en cada celda q sin tener que evaluar de forma expresa la intensidad de radiación. Para ello, centremos en primer lugar nuestra atención en la intensidad media $J(z, \nu)$. Como se muestra en la figura 3.4, el problema que estamos tratando presenta geometría axial, esto es, la intensidad de radiación es independiente de φ , $I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) \equiv I(z, \nu, \theta, \varphi) = I(z, \nu, \theta)$. De esta forma, la intensidad media puede calcularse como

$$J(z, \nu) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I(z, \nu, \theta) \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{1}{2} \int_0^\pi I(z, \nu, \theta) \sin \theta d\theta, \quad (3.168)$$

y al hacer el cambio de variable $\mu = \cos \theta$ se obtiene

$$J(z, \nu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I(z, \nu, \mu) d\mu. \quad (3.169)$$

Asimismo, es habitual desdoblar la integral anterior en dos términos de la forma siguiente

$$J(z, \nu) = \frac{1}{2} \left[\int_{-1}^0 I(z, \nu, \mu) d\mu + \int_0^1 I(z, \nu, \mu) d\mu \right]. \quad (3.170)$$

El segundo sumando representa la contribución a la intensidad media debida a la radiación que se propaga *hacia delante*, esto es, en aquellas direcciones asociadas al sentido positivo de z . Por otro lado, el primer sumando se corresponde con la radiación que se propaga *hacia atrás*, en todas aquellas direcciones para las que z decrece.

Definimos ahora la nueva variable \tilde{z} idéntica a z , pero con sentido positivo hacia la izquierda. Si $\tilde{\mu} = \cos \tilde{\theta}$ nos da la dirección de propagación de la radiación respecto al sentido positivo de \tilde{z} ,

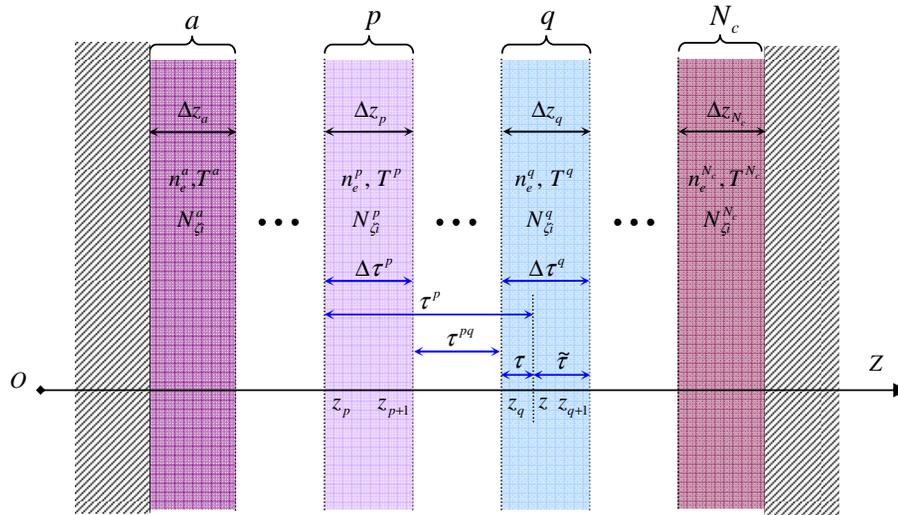


Figura 3.3. Discretización de la lámina de anchura L en N_C celdas homogéneas.

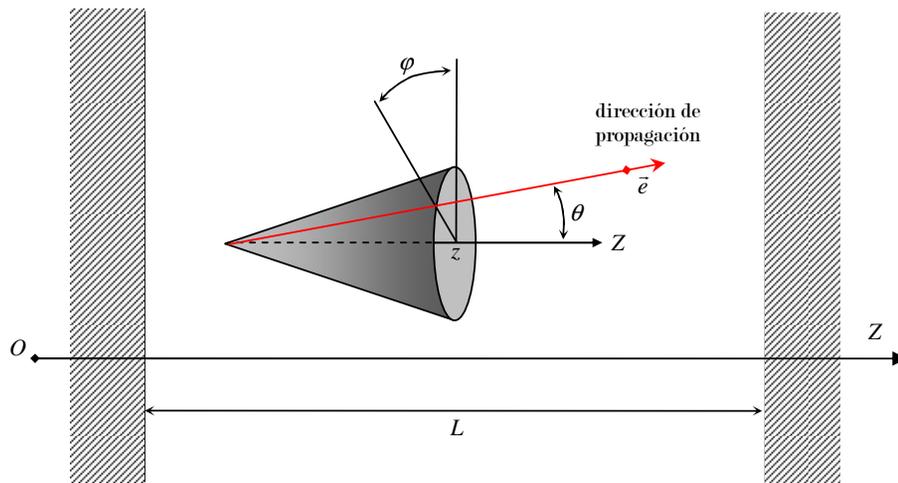


Figura 3.4. Geometría del transporte radiativo en el interior de la lámina.

entonces es posible escribir para la intensidad media

$$J(z, \nu) = \frac{1}{2} \left[\int_0^1 I(\tilde{z}, \nu, \tilde{\mu}) d\tilde{\mu} + \int_0^1 I(z, \nu, \mu) d\mu \right]. \quad (3.171)$$

Por otro lado, según se indica en el apéndice D, la solución formal de la ecuación de transferencia radiativa para geometría plana en una dirección arbitraria μ viene dada por

$$I(z, \nu, \mu) = I(z_0, \nu, \mu) e^{-\tau(z_0, z, \nu)/\mu} + \frac{1}{\mu} \int_{z_0}^z j(z', \nu) e^{-\tau(z', z, \nu)/\mu} dz'. \quad (3.172)$$

El término $I(z_0, \nu, \mu)$ es la intensidad incidente en el borde z_0 de la lámina. Así pues, en ausencia de fuentes externas $I(z_0, \nu, \mu) = 0$. Por otro lado, la función $\tau(z_0, z, \nu)$ representa, de forma general, el espesor óptico entre los puntos z_0 y z medido sobre la dirección del eje OZ^{12} y calculado como

$$\tau(z_0, z, \nu) = \int_{z_0}^z \kappa(z', \nu) dz'. \quad (3.173)$$

Teniendo en cuenta que $\frac{d\tau}{dz} = -\kappa(z, \nu)$ y utilizando la notación $\tau^q = \tau(z_q, z, \nu)$, la ecuación (3.172) se reescribe como

$$I(z, \nu, \mu) = \frac{1}{\mu} \int_0^{\tau^0} S(z', \nu) e^{-\tau'/\mu} d\tau'. \quad (3.174)$$

Vamos a utilizar la ecuación anterior para escribir la intensidad de radiación que se propaga hacia delante. Si tenemos presente la discretización en celdas homogéneas y siendo z un punto interior de la celda q , entonces para $0 \leq \mu \leq 1$ se obtiene

$$\begin{aligned} I(z, \nu, \mu) &= \sum_{p=1}^{q-1} \int_{\tau^{p+1}}^{\tau^p} S(z', \nu) e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} + \int_0^{\tau^q} S(z', \nu) e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} \\ &= \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \int_{\tau^{p+1}}^{\tau^p} e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} + S^q(\nu) \int_0^{\tau^q} e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} \\ &= \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \left[e^{-\tau^{p+1}/\mu} - e^{-\tau^p/\mu} \right] + S^q(\nu) \left[1 - e^{-\tau^q/\mu} \right]. \end{aligned} \quad (3.175)$$

Es posible escribir una ecuación análoga para la intensidad que se propaga hacia atrás. Con \tilde{z} representamos, usando una coordenada diferente, el mismo punto perteneciente a la celda q al que nos referíamos anteriormente. De esta forma, para $0 \leq \tilde{\mu} \leq 1$ se tiene

$$I(\tilde{z}, \nu, \tilde{\mu}) = S^q(\nu) \left[1 - e^{-\tau^{q+1}/\tilde{\mu}} \right] + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \left[e^{-\tau^p/\tilde{\mu}} - e^{-\tau^{p+1}/\tilde{\mu}} \right]. \quad (3.176)$$

Ahora sustituimos los resultados (3.175) y (3.176) en (3.171) y llegamos a la siguiente expresión para la intensidad media

$$\begin{aligned} J(z, \nu) &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^{p+1}/\mu} - e^{-\tau^p/\mu} \right] d\mu + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^q/\mu} \right] d\mu \right. \\ &\quad \left. + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^{q+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^p/\tilde{\mu}} - e^{-\tau^{p+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} \right\}. \end{aligned} \quad (3.177)$$

¹²Téngase en cuenta que el espesor óptico correspondiente al camino real recorrido por el fotón sería $\tau(z_1, z_2, \nu)/\mu$.

A su vez, esta última ecuación puede utilizarse para determinar $\Lambda_{ji}^q(z)$ de acuerdo con (3.166) y luego sustituir este resultado en (3.167). Finalmente, encontramos la siguiente expresión para el factor de escape Λ_{ji}^q

$$\begin{aligned}
1 - \Lambda_{ji}^q = & \frac{1}{2} \frac{1}{S_{ij}^q} \frac{1}{\Delta z_q} \int_{z_q}^{z_{q+1}} dz \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \left\{ \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^{p+1}/\mu} - e^{-\tau^p/\mu} \right] d\mu \right. \\
& + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^q/\mu} \right] d\mu + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^{q+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} \\
& \left. + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^p/\tilde{\mu}} - e^{-\tau^{p+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} \right\}. \tag{3.178}
\end{aligned}$$

Por otro lado, de cara a la obtención de la expresión final de Λ_{ji}^q es también importante fijar el orden en el que se van a evaluar las tres integraciones que aparecen en (3.178). A este respecto, hemos decidido adoptar el mismo criterio que se propone en [106] y llevar a cabo, en primer lugar, el promedio sobre las posibles direcciones de propagación de la radiación –integral sobre μ –, a continuación el promedio sobre todos los puntos de la celda considerada –integral sobre z – y, por último, la integral frecuencial sobre el perfil de línea.

Tal y como se indica en el apéndice E, tras efectuar las dos primeras integraciones se obtiene

$$\begin{aligned}
1 - \Lambda_{ji}^q = & \frac{1}{S_{ij}^q} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \left\{ S^q(\nu) \left[1 - \frac{1}{\Delta\tau^q} \left(\frac{1}{2} - E_3(\Delta\tau^q) \right) \right] \right. \\
& + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} S^p(\nu) \frac{1}{2\Delta\tau^q} \left[E_3(\tau^{pq}) - E_3(\tau^{pq} + \Delta\tau^q) \right. \\
& \left. \left. + E_3(\tau^{pq} + \Delta\tau^p + \Delta\tau^q) - E_3(\tau^{pq} + \Delta\tau^p) \right] \right\}, \tag{3.179}
\end{aligned}$$

donde $\Delta\tau^q$ es el espesor óptico de la celda q y τ^{pq} el espesor óptico asociado a la distancia entre los bordes más cercanos de la celda p y la celda q (figura 3.3).

Es importante destacar que, con la excepción de la hipótesis de redistribución completa, este último resultado para Λ_{ji}^q sigue siendo exacto desde un punto de vista formal. Téngase en cuenta que la integral que queda por efectuar es la integral frecuencial, lo que significa que los detalles de la geometría del plasma son tratados de forma exacta en el modelo propuesto.

La expresión (3.179) aún no es adecuada para su implementación en el modelo CR, porque tanto las funciones fuente de cada celda como los espesores ópticos incluyen contribuciones de todas las líneas del espectro discreto y también del espectro continuo y esto hace que el cálculo sea inabordable. Por tanto, es necesario hacer algunas aproximaciones y continuar trabajando sobre dicha expresión. Como el proceso es un poco largo, para dar continuidad a esta exposición, comentaremos aquí solamente los resultados finales. Los detalles de la deducción pueden consultarse en el apéndice E.

Así pues, a partir de aquí trabajaremos bajo las siguientes aproximaciones:

- En general, la función fuente $S^q(\nu)$ asociada a una celda dada q contiene contribuciones tanto del espectro discreto como del continuo. Pues bien, asumiremos que esta última contribución es despreciable, para considerar exclusivamente la aportación debida a las transiciones del espectro ligado-ligado.
- Suponemos que no hay solapamiento entre líneas distintas del espectro ligado-ligado. De esta manera y con la suposición anterior, la función fuente en cada celda puede aproximarse por la correspondiente función fuente monocromática.

Con estas consideraciones, se demuestra que el factor de escape Λ_{ji}^q viene dado por

$$\Lambda_{ji}^q = C_{ji}^q - \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} C_{ji}^{pq}, \quad (3.180)$$

siendo

$$C_{ij}^q = \int_0^\infty d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} F(\Delta\tau_{ij}^q), \quad (3.181)$$

$$C_{ij}^{pq} = \frac{1}{2} \int_0^\infty d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} [F(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q) - F(\tau_{ij}^{pq}) - F(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q + \Delta\tau_{ij}^p) + F(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p)], \quad (3.182)$$

y con $F(\tau) = \frac{1}{2} - E_3(\tau)$.

En las ecuaciones anteriores,

$$\Delta\tau_{ij}^q = \kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^q(\nu) \Delta z_q, \quad (3.183)$$

$$\tau_{ij}^{pq} = \tau_{ij}^{qp} = \sum_{r=p+1}^{q-1} \kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^r(\nu) \Delta z_r, \quad p < q, \quad (3.184)$$

y $\kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^q$ es el coeficiente de absorción en la celda q , dado por

$$\kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^q(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N_{\zeta_i}^q \frac{g_{\zeta_j}}{g_{\zeta_i}} \frac{c^2}{2h\nu_{ij}^3} \mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i} \phi_{ij}^q(\nu) \left(1 - \frac{g_{\zeta_i}}{g_{\zeta_j}} \frac{N_{\zeta_j}^q}{N_{\zeta_i}^q} \right). \quad (3.185)$$

La ecuación (3.180) tiene una interpretación sencilla. El primer sumando representa la probabilidad de que un fotón asociado a la transición $\zeta_j \rightarrow \zeta_i$ y emitido en algún punto de la celda q escape de la misma. Por otro lado, el sumatorio en (3.180) representa los efectos que la radiación emitida en otras zonas del plasma provoca en la celda q . En concreto, individualmente, cada término de la suma se interpreta como la corrección a la emisión espontánea en q debida al hecho de que un fotón emitido en la celda p pueda viajar a través de la lámina para ser finalmente absorbido en la zona q . En este sentido, los C_{ji}^{pq} son bautizados como *coeficientes de acoplamiento radiativo*.

Teniendo en cuenta la definición (3.154) para la función fuente monocromática, se obtiene para el factor de escape

$$\Lambda_{ji}^q = C_{ji}^q - \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{N_{\zeta_j}^p}{N_{\zeta_j}^q} \frac{g_{\zeta_j} N_{\zeta_i}^q - g_{\zeta_i} N_{\zeta_j}^q}{g_{\zeta_j} N_{\zeta_i}^p - g_{\zeta_i} N_{\zeta_j}^p} C_{ji}^{pq}. \quad (3.186)$$

Al introducir la ecuación (3.186) en (3.164) resulta un sistema de ecuaciones no-lineales para las poblaciones de nivel. La no-linealidad no sólo es debida al factor que multiplica a C_{ji}^{pq} en la ecuación anterior, sino que también se introduce de forma implícita a través de las expresiones utilizadas para evaluar tanto C_{ji}^q como C_{ji}^{pq} , ya que éstas dependen de los espesores ópticos y éstos, a su vez, de las poblaciones de nivel.

La cuestión ahora se centra en cómo resolver el sistema de ecuaciones no-lineales. Hemos comprobado que una buena manera de proceder es la siguiente. En primer lugar, definimos

$$\tilde{C}_{ji}^{pq} = \frac{g_{\zeta j} N_{\zeta i}^q - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^q}{g_{\zeta j} N_{\zeta i}^p - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^p} C_{ji}^{pq}. \quad (3.187)$$

Esto nos permite escribir para el factor de escape

$$\Lambda_{ji}^q = C_{ji}^q - \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{N_{\zeta j}^p}{N_{\zeta j}^q} \tilde{C}_{ji}^{pq}. \quad (3.188)$$

Sustituyendo esta expresión en el sistema de ecuaciones de tasas (3.164), éste resulta

$$\begin{aligned} & \sum_j N_{\zeta-1j}^q \left[n_e^q \mathcal{T}_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}^q + \mathcal{A}u_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}^q \right] + \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta j}^q n_e^q \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q \\ & + \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j}^q \left[C_{ji}^q \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e^q \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q \right] - \sum_{\substack{p \\ (p \neq q)}} \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} N_{\zeta j}^p \tilde{C}_{ji}^{pq} \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \\ & + \sum_j N_{\zeta+1j}^q n_e^q \left[\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{(r)q} + n_e^q \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{(3)q} + C_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^q \right] \\ & - N_{\zeta i}^q \sum_j n_e^q \left[\mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^{(r)q} + n_e^q \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^{(3)q} + C_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^q \right] \\ & - N_{\zeta i}^q \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} \left[C_{ij}^q \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e^q \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q \right] + \sum_{\substack{p \\ (p \neq q)}} \sum_{\substack{j \\ (j < i)}} N_{\zeta i}^p \tilde{C}_{ij}^{pq} \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} \\ & - N_{\zeta i}^q \sum_{\substack{j \\ (j > i)}} n_e^q \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q - N_{\zeta i}^q \sum_j \left[n_e^q \mathcal{T}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^q + \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^q \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.189)$$

Obsérvese que, al aparecer las sumas sobre celdas, la expresión anterior tiene el aspecto de un sistema lineal de ecuaciones donde las incógnitas son las poblaciones $N_{\zeta i}^q$ para cada nivel ζi y en cada celda q . Realmente el sistema es no-lineal por las razones que expusimos anteriormente, pero podemos utilizar entonces el método de Newton y proceder de forma iterativa. Así, los coeficientes C_{ji}^q y \tilde{C}_{ji}^{pq} , responsables de introducir las componentes no-lineales en el sistema, se evalúan con las poblaciones del paso anterior y en el paso actual se resuelve un sistema lineal para las $N_{\zeta i}^q$. El proceso se repite hasta alcanzar convergencia.

La dimensión del sistema que hay que resolver en cada iteración es $N_C \times N_L$. La expresión (3.189) proporciona $N_C \times N_L - 1$ ecuaciones linealmente independientes que, como de costumbre,

se completan con la conservación de partículas

$$\sum_p \sum_{\zeta,i} N_{\zeta i}^p = n_{ion}. \quad (3.190)$$

Podríamos pensar en evaluar directamente Λ_{ji}^q utilizando las poblaciones de un paso anterior e intentar resolver el sistema (3.164) para las poblaciones pertenecientes a una misma celda. Sin embargo, este procedimiento no es estable numéricamente debido a que de forma explícita las diferentes regiones del plasma sólo estarían acopladas a través de la condición de cierre.

En conclusión, la ecuación (3.188) para Λ_{ji}^q , junto con las expresiones (3.181) y (3.182) para la evaluación de los coeficientes de acoplamiento radiativo, conforman las ecuaciones fundamentales de nuestro modelo de transporte radiativo.

Por último, una vez que hemos planteado las ecuaciones del modelo para el caso de un plasma no-homogéneo, resulta muy sencillo obtener las correspondientes al caso homogéneo. En esta situación se considera que la población de cualquier nivel atómico ζi se distribuye uniformemente sobre todo el medio y que, en consecuencia, toma el mismo valor $N_{\zeta i}$ en todos los puntos del espacio. Asimismo, tanto la densidad electrónica como la temperatura se consideran también constantes en todo el medio, siendo sus valores n_e y T , respectivamente.

Las ecuaciones para un plasma homogéneo se obtienen cuando se particulariza la situación no-homogénea para el caso de una única celda, $N_C = 1$. De esta forma, el sistema de ecuaciones de tasas resulta

$$\begin{aligned} & \sum_j N_{\zeta-1j} [n_e \mathcal{I}_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i} + \mathcal{A}u_{\zeta-1j \rightarrow \zeta i}] + \sum_{(j < i)}^j N_{\zeta j} n_e \mathcal{E}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \\ & + \sum_{(j > i)}^j N_{\zeta j} [\Lambda_{ji}^r \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} + n_e \mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}] + \sum_j N_{\zeta+1j} n_e [\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3 + \mathcal{C}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}] \\ & - N_{\zeta i} \sum_j n_e [\mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^r + n_e \mathcal{R}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}^3 + \mathcal{C}_{\zeta i \rightarrow \zeta-1j}] - N_{\zeta i} \sum_{(j < i)}^j [\Lambda_{ij} \mathcal{A}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} + n_e \mathcal{D}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}] \\ & - N_{\zeta i} \sum_{(j > i)}^j n_e \mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} - N_{\zeta i} \sum_j [n_e \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} + \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}] = 0. \end{aligned} \quad (3.191)$$

A la hora de evaluar el factor de escape, la suma en celdas desaparece y se obtiene

$$\Lambda_{ji} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{ij}(\nu) \frac{1}{\tau_{ij}} F(\tau_{ij}) d\nu. \quad (3.192)$$

Aunque el modelo de transporte radiativo para plasmas no-homogéneos ha sido desarrollado exclusivamente para geometría plana, en el caso homogéneo, ABAKO utiliza los resultados obtenidos en [106–108] e incorpora la posibilidad de llevar cálculos cinéticos para las tres geometrías básicas –plana, cilíndrica y esférica–. A este respecto, en la ecuación (3.192), el espesor óptico se calcula como $\tau_{ij} \equiv \tau_{ij}(\nu) = \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\nu) L$, siendo L la dimensión característica del plasma, que en geometría plana representa la anchura de la lámina y en los casos cilíndrico y esférico representa el radio

correspondiente. El funcional $F(\tau)$ depende también de la geometría considerada. Así, como ya hemos demostrado y como también se indica en [107], para la lámina infinita se obtiene

$$F(\tau) = \frac{1}{2} - E_3(\tau). \quad (3.193)$$

Para el cilindro infinito, el cálculo de $F(\tau)$ se lleva a cabo mediante interpolación sobre una función definida numéricamente en [108], mientras que en el caso esférico se demuestra [106]

$$F(\tau) = \frac{3}{4} \left\{ 1 - \frac{1}{\tau^2} \left[\frac{1}{2} - \left(\tau + \frac{1}{2} \right) e^{-2\tau} \right] \right\}. \quad (3.194)$$

Comentarios acerca del modelo propuesto y comparación con otros modelos de la bibliografía

Los trabajos de Irons [102–104] constituyen las referencias básicas donde se expone y se revisa el marco teórico relacionado con el concepto del factor de escape y los métodos para su evaluación. También es muy ilustrativa la exposición que se hace del tema en [68]. Cuando un fotón de una cierta energía viaja a través de un medio puede ser capturado en un punto de su interior o bien puede escapar del mismo. Dichos mecanismos son complementarios y, en este sentido, en los artículos anteriores, se habla del carácter dual asociado al factor de escape, ya que puede definirse en términos de la fuga de fotones hacia el exterior del plasma o a través de la captura de fotones en su interior. Esta distinción establece a su vez dos formalismos diferentes en torno al concepto de factor de escape, cuyo análisis nos va a permitir contrastar y poner de manifiesto las características más relevantes del modelo de transporte radiativo propuesto en esta tesis.

En el primero de los casos, el factor de escape se define a partir de consideraciones de tipo probabilístico y representa el procedimiento más utilizado en el contexto de los plasmas de laboratorio. Ésta es la descripción en la que se enmarca el modelo de transporte radiativo desarrollado por Apruzese *et al.* [97–99], uno de los más conocidos y utilizados en la bibliografía con el objeto de evitar la resolución simultánea de la ecuación de transporte y las ecuaciones de tasas. Este modelo ha servido de base a otros trabajos publicados con posterioridad [100, 101, 105] que, en consecuencia, utilizan el mismo formalismo. Otros trabajos desarrollados también bajo el mismo marco teórico son [106–108]. Así pues, por ser un referente para la contrastación del modelo propuesto en ABAKO, resulta conveniente exponer las ecuaciones más representativas de este formalismo. Como se indica, por ejemplo, en [102], esta teoría se basa en el concepto de *probabilidad de escape*. El punto de partida es la definición de la probabilidad de que un fotón de frecuencia ν se propague en una cierta dirección \mathbf{e} una distancia desde el punto de emisión s hasta el punto s_0 , equivalente al espesor óptico $\tau(s_0, s; \nu)$, sin ser absorbido. Dicha probabilidad viene dada por $e^{-\tau(s_0, s; \nu)}$. Promediando ahora sobre todas las frecuencias asociadas a una misma línea se obtiene el llamado

factor de transmisión¹³,

$$T(\tau_{ij}) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{ij}(\nu) e^{-\tau_{ij}(s_0, s; \nu)} d\nu. \quad (3.195)$$

Tengamos presente que en la expresión anterior se considera el perfil de línea independiente del punto del espacio considerado. Sin embargo, el factor de transmisión conserva tal dependencia a través del espesor óptico. Asimismo, el espesor óptico incluye solamente la contribución debida a la línea considerada y se calcula como $\tau_{ij}(s_1, s_2; \nu) = \kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}(\nu)(s_2 - s_1)$, donde el coeficiente de absorción monocromático es también independiente de \mathbf{r} .

Por último, el promedio de $T(\tau_{ij})$ sobre todas las direcciones del espacio determina la *probabilidad de escape*,

$$\theta_{ji}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_S T(\tau_{ij}) d\Omega, \quad (3.196a)$$

esto es,

$$\theta_{ji}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_S \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{ij}(\nu) e^{-\tau_{ij}(s_0, s; \nu)} d\nu d\Omega, \quad (3.196b)$$

donde $\mathbf{r} \equiv (s, \mathbf{e})$ y siendo s_0 un punto de la superficie S que delimita el medio. En algunos trabajos se habla indistintamente de probabilidad de escape o factor de escape, mientras que en otros se reserva esta última denominación para el promedio de $\theta_{ji}(\mathbf{r})$ sobre todos los puntos del volumen ocupado por el medio.

Como apuntábamos antes, existe una segunda descripción, quizá más común en la literatura astrofísica, en la que se introduce el concepto de factor de escape como una técnica para reescribir de manera alternativa la tasa neta de emisión radiativa entre dos niveles atómicos dados [68, 102, 104, 138]. Éste es el formalismo que hemos adoptado en ABAKO. En este caso, el factor de escape se identifica con el llamado *coeficiente de Biberman-Holstein* o también *net radiative bracket*, denotado por $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ y cuya definición se establece a partir de la ecuación (3.147). De acuerdo con esta visión, es $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$, y no $\theta_{ji}(\mathbf{r})$, la magnitud que de manera natural interviene en las ecuaciones de tasas, tal y como se ha expuesto en esta tesis.

Asimismo, en todos estos trabajos [68, 102, 138] se comenta que $\theta_{ji}(\mathbf{r})$ y $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ representan conceptos relacionados, pero también se deja bien claro que son magnitudes diferentes. Por otro lado, en [68] y [138] se dice que, al abordar el problema de la determinación de las poblaciones de nivel y plantear las correspondientes ecuaciones de tasas, es frecuente aproximar el factor $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ por $\theta_{ji}(\mathbf{r})$ y se enumeran las condiciones bajo las cuales sería lícita tal suposición. Es más, teniendo en cuenta que es una cuestión de interés para el trabajo que se presenta en esta tesis, vamos a poner claramente de manifiesto en qué situación podría considerarse $\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = \theta_{ji}(\mathbf{r})$. Para ello, recuperamos la expresión (3.162),

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) = 1 - \frac{1}{S_{ij}(\mathbf{r})} \frac{1}{4\pi} \int_S \int_0^{\infty} \phi_{ij}(\mathbf{r}, \nu) \left[\int_{s_0}^s j(s', \nu) e^{-\tau(s', s; \nu)} ds' \right] d\nu d\Omega. \quad (3.197)$$

¹³Aunque no es costumbre habitual en la bibliografía del tema, vamos a incluir en la notación el subíndice ji para subrayar el hecho de que las magnitudes definidas están asociadas a una línea concreta del espectro ligado-ligado y para facilitar el establecimiento de posibles correspondencias con expresiones aparecidas en secciones anteriores.

Supongamos, en primer lugar, que el perfil de línea es independiente de \mathbf{r} , $\phi_{ij}(\mathbf{r}, \nu) \approx \phi_{ij}(\nu)$. Tengamos en cuenta, por ejemplo, que, si consideramos el ensanchamiento de la línea por efecto Doppler, en esta aproximación el medio debe ser isotérmico. Por otro lado, asumiremos que las poblaciones de nivel tampoco varían con el punto de espacio considerado y que, en consecuencia, para cualquier nivel atómico ζ_i podemos escribir $N_{\zeta_i}(\mathbf{r}) \approx N_{\zeta_i}$. Bajo estas condiciones, tanto el coeficiente de emisión como el de absorción son constantes en todo el medio, $j(\mathbf{r}, \nu) \approx j(\nu)$ y $\kappa(\mathbf{r}, \nu) \approx \kappa(\nu)$, y, en particular, el espesor óptico puede calcularse como $\tau(s_1, s_2; \nu) \approx \kappa(\nu)(s_2 - s_1)$. Aplicando estas aproximaciones sobre (3.197) resulta

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \approx 1 - \frac{1}{S_{ij}} \frac{1}{4\pi} \int_S \int_0^\infty \phi_{ij}(\nu) j(\nu) \left[\int_{s_0}^s e^{-\kappa(\nu)(s-s')} ds' \right] d\nu d\Omega. \quad (3.198)$$

Tras efectuar la integral entre corchetes se obtiene

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \approx 1 - \frac{1}{S_{ij}} \frac{1}{4\pi} \int_S \int_0^\infty \phi_{ij}(\nu) \frac{j(\nu)}{\kappa(\nu)} \left[1 - e^{-\kappa(\nu)(s-s_0)} \right] d\nu d\Omega. \quad (3.199)$$

Supongamos ahora que tanto el coeficiente de absorción como el de emisión incluyen exclusivamente la contribución de la línea considerada. Esto es, se desprecia el fondo de radiación procedente del continuo y también el solapamiento con otras líneas del espectro ligado-ligado. Así, $\kappa(\nu) \approx \kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}(\nu)$ y $j(\nu) \approx j_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}(\nu)$. Sabiendo que $S_{ij} = \kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}(\nu) / j_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}(\nu)$ y que el perfil de línea está normalizado, se llega finalmente a

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{4\pi} \int_S \int_0^\infty \phi_{ij}(\nu) e^{-\tau_{ij}(s_0, s; \nu)} d\nu d\Omega. \quad (3.200)$$

El segundo miembro de esta última expresión es idéntico a la ecuación (3.196) que define $\theta_{ji}(\mathbf{r})$. Por tanto, a través del procedimiento que acabamos de presentar se pone de manifiesto bajo qué condiciones es posible considerar

$$\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \approx \theta_{ji}(\mathbf{r}). \quad (3.201)$$

En conclusión, en el momento de abordar un cálculo cinético, siendo $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ la magnitud que permite reescribir convenientemente las ecuaciones de tasas, rigurosamente, ésta sólo podrá sustituirse por $\theta_{ji}(\mathbf{r})$ cuando se den las siguientes condiciones:

- Redistribución frecuencial completa.
- La distribución de poblaciones se considera uniforme, dicho de otra forma, el medio debe ser homogéneo.
- No hay variaciones locales del perfil de línea. En el caso de incluir ensanchamiento por efecto Doppler, este hecho implica una distribución uniforme de temperatura; y si se considera ensanchamiento colisional o Stark, la densidad electrónica debería ser la misma en todos los puntos del medio.

- No hay solapamiento entre líneas del espectro discreto y la intensidad de la radiación del espectro continuo es despreciable.

Aunque es posible establecer la definición de $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ –ecuación (3.147)– sin necesidad de asumir redistribución completa, lo cierto es que habitualmente se hace uso de tal aproximación –ecuación (3.153)– para facilitar la obtención de una expresión para $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ adecuada para su posterior implementación en un código computacional. En este sentido, la hipótesis de redistribución completa es una aproximación compartida tanto por los modelos basados en la evaluación de $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ como por aquéllos que trabajan con $\theta_{ji}(\mathbf{r})$. Sin embargo, una diferencia importante entre ambos formalismos es que, como acabamos de ver, $\theta_{ji}(\mathbf{r})$ sólo es aplicable sobre medios homogéneos. Por tanto, es llamativo que en muchos casos se utilice esta magnitud para cálculos cinéticos en plasmas gruesos en los que el resultado final da lugar a una distribución no-uniforme de poblaciones. A esta cuestión se hace referencia en [139], cuando se dice que $\theta_{ji}(\mathbf{r})$ representa una aproximación *global* que, sin embargo, es aplicada *localmente*. Asimismo, debemos también tener presente que despreciar la radiación del continuo y la contribución de otras líneas distintas de la considerada es una aproximación asumida desde las primeras etapas del formalismo de la probabilidad de escape. En cambio, en el contexto de $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$, desde el punto de vista teórico, no habría ningún problema para incluir tales contribuciones a través de la intensidad media $J(\mathbf{r}, \nu)$; aunque, es cierto que, con el objeto de reducir el coste computacional, suele utilizarse también la misma aproximación.

Por último, otra diferencia entre $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ y $\theta_{ji}(\mathbf{r})$, subrayada en [139], es que la primera de estas magnitudes podría tomar valores mayores que la unidad, mientras que la segunda, definida en un contexto probabilístico, está limitada a los valores comprendidos entre cero y uno. Esto significa que en el formalismo asociado a $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ es posible obtener una tasa neta de emisión de línea superior a la correspondiente tasa de emisión espontánea, justificando así la amplificación de la radiación emitida en un línea del espectro debido a los efectos de emisión estimulada. A través de $\theta_{ji}(\mathbf{r})$ carecería de sentido abordar este tipo de cuestiones, así como otras relacionadas con una posible inversión de población.

En conclusión, la discusión planteada ha servido para poner de manifiesto con carácter general las diferencias existentes entre los dos formalismos más utilizados en la literatura para la evaluación del factor de escape. Lógicamente, aquellos modelos desarrollados en el contexto probabilístico heredarán todos los inconvenientes que hemos expuesto asociados a la magnitud $\theta_{ji}(\mathbf{r})$. Por el contrario, el modelo de transporte radiativo propuesto en ABAKO, basado en el factor de escape $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$, es de aplicación en el caso de plasmas gruesos no-homogéneos, permitiendo variaciones locales del perfil de línea y cálculos cinéticos en presencia de gradientes de temperatura y densidad electrónica.

Nos interesa ahora pasar a un análisis más específico. El modelo de Apruzese *et al.* –como apuntábamos antes, un importante referente entre las propuestas basadas en la probabilidad de

escape— es, al menos desde un punto de vista conceptual, similar al modelo de transporte radiativo desarrollado en ABAKO, ya que, en los dos casos, los efectos de opacidad se introducen mediante la definición de coeficientes de acoplamiento radiativo. Es importante entonces sacar a relucir las diferencias entre ambos modelos y, en particular, dejar constancia explícita de las aproximaciones asumidas en el de Apruzese como consecuencia de su origen probabilístico. El modelo que se propone en ABAKO es más exacto y general, hasta el punto de que, como vamos a demostrar a continuación, haciendo aproximaciones sobre sus ecuaciones básicas es posible obtener la expresión de los coeficientes de acoplamiento radiativo debida a Apruzese. Para ello, consideremos nuevamente el medio con geometría plana al que hacíamos referencia en la figura 3.3 y recuperemos la expresión (E.19) que utilizamos en el proceso deductivo de nuestro modelo. Si escribimos $E_2(\tau)$ en su forma integral, esta expresión resulta

$$1 - \Lambda_{ji}^q = \frac{1}{S_{ij}^q} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \left\{ S^q(\nu) \left[1 - \frac{1}{\Delta\tau^q} \int_0^{\Delta\tau^q} d\tau \int_0^1 d\mu e^{-\tau/\mu} \right] + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} S^p(\nu) \frac{1}{2\Delta\tau^q} \left[\int_{\tau^{pq}}^{\tau^{pq} + \Delta\tau^q} d\tau \int_0^1 d\mu e^{-\tau/\mu} - \int_{\tau^{pq} + \Delta\tau^p}^{\tau^{pq} + \Delta\tau^p + \Delta\tau^q} d\tau \int_0^1 d\mu e^{-\tau/\mu} \right] \right\}. \quad (3.202)$$

Ahora, sobre la ecuación anterior vamos a hacer el mismo conjunto de aproximaciones bajo las cuales podía establecerse $\Lambda_{ji}(\mathbf{r}) \approx \theta_{ji}(\mathbf{r})$. Consideremos pues que el perfil de línea es el mismo en todas las celdas, esto es, $\phi_{ij}^q(\nu) \approx \phi_{ij}(\nu)$ y, por otro lado, que los coeficientes de absorción y emisión se determinan sólo a partir de la contribución de la línea $\zeta_i \leftrightarrow \zeta_j$. De esta forma, $S^q(\nu) \approx S_{ij}^q$ y $\tau \approx \tau_{ij}$. Si además reordenamos las integrales para efectuar primero la integral frecuencial, luego la integral sobre μ y, por último, sobre τ , la ecuación (3.202) se expresa de la siguiente manera

$$1 - \Lambda_{ji}^q \approx 1 - \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} \int_0^{\Delta\tau_{ij}^q} d\tau \int_0^1 d\mu \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}(\nu) e^{-\tau/\mu} + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} \frac{1}{2\Delta\tau_{ij}^q} \left[\int_{\tau_{ij}^{pq}}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \int_0^1 d\mu \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}(\nu) e^{-\tau/\mu} - \int_{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \int_0^1 d\mu \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}(\nu) e^{-\tau/\mu} \right]. \quad (3.203)$$

Obsérvese que la integral frecuencial coincide con la definición (3.195) del factor de transmisión $T\left(\frac{\tau}{\mu}\right)$ o de $P_e\left(\frac{\tau}{\mu}\right)$, como se denota en [97, 99]. La última ecuación puede reescribirse, por tanto,

como

$$1 - \Lambda_{ji}^q \approx 1 - \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} \int_0^{\Delta\tau_{ij}^q} d\tau \int_0^1 d\mu P_e \left(\frac{\tau}{\mu} \right) + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} \frac{1}{2\Delta\tau_{ij}^q} \left[\int_{\tau_{ij}^{pq}}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \int_0^1 d\mu P_e \left(\frac{\tau}{\mu} \right) - \int_{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \int_0^1 d\mu P_e \left(\frac{\tau}{\mu} \right) \right]. \quad (3.204)$$

En el modelo de Apruzese se define la probabilidad promediada angularmente $\bar{P}_e(\tau)$ de que un fotón de línea viaje un espesor óptico τ sin ser absorbido como $\bar{P}_e(\tau) = \int_0^1 d\mu P_e \frac{\tau}{\mu}$. Así, se llega a la siguiente expresión

$$\Lambda_{ji}^q \approx \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} \int_0^{\Delta\tau_{ij}^q} d\tau \bar{P}_e(\tau) - \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} \frac{1}{2\Delta\tau_{ij}^q} \left[\int_{\tau_{ij}^{pq}}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \bar{P}_e(\tau) - \int_{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \bar{P}_e(\tau) \right]. \quad (3.205)$$

Esta última ecuación es importante en la discusión que estamos llevando a cabo, ya que la expresión que multiplica al cociente entre funciones fuentes es exactamente la que se propone en [97] para los coeficientes de acoplamiento radiativo, que aquí denotaremos como c_{ji}^{pq} . Así,

$$c_{ji}^{pq} = \frac{1}{2\Delta\tau_{ij}^q} \left[\int_{\tau_{ij}^{pq}}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \bar{P}_e(\tau) - \int_{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p}^{\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p + \Delta\tau_{ij}^q} d\tau \bar{P}_e(\tau) \right], \quad (3.206)$$

además, definimos c_{ji}^q como

$$c_{ji}^q = \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} \int_0^{\Delta\tau_{ij}^q} d\tau \bar{P}_e(\tau). \quad (3.207)$$

Por tanto,

$$\Lambda_{ji}^q \approx c_{ji}^q - \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} c_{ji}^{pq}. \quad (3.208)$$

Podemos utilizar esta última expresión para establecer una primera comparación con el modelo propuesto en ABAKO, en particular, con la ecuación (3.180). En lugar de trabajar a partir de principios fundamentales, como ocurre en ABAKO, en [97] se define directamente la probabilidad de que un fotón de línea emitido q sea absorbido en la celda p a través de

$$\bar{P}_e(\tau_{ij}^{pq}) - \bar{P}_e(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p), \quad (3.209)$$

y es el promedio de tal probabilidad sobre todos los puntos de la celda q da lugar a la expresión (3.206) para los c_{ji}^{pq} . Podemos decir entonces que en el modelo de Apruzese, los coeficientes de acoplamiento radiativo se obtienen a partir de consideraciones fenomenológicas.

Por otro lado, sabemos que el cociente de funciones fuentes monocromáticas puede escribirse como

$$\frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} = \frac{N_{\zeta j}^p g_{\zeta j} N_{\zeta i}^q - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^q}{N_{\zeta j}^q g_{\zeta j} N_{\zeta i}^p - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^p}. \quad (3.210)$$

Pues bien, para llegar finalmente a la ecuación de tasas que aparece en [97] debemos imponer

$$\frac{N_{\zeta j}^p g_{\zeta j} N_{\zeta i}^q - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^q}{N_{\zeta j}^q g_{\zeta j} N_{\zeta i}^p - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^p} \approx \frac{N_{\zeta j}^p}{N_{\zeta j}^q}, \quad (3.211)$$

o lo que es lo mismo

$$\frac{g_{\zeta j} N_{\zeta i}^q - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^q}{g_{\zeta j} N_{\zeta i}^p - g_{\zeta i} N_{\zeta j}^p} \approx 1. \quad (3.212)$$

Tal aproximación sólo puede asumirse con todo rigor cuando las poblaciones de los niveles involucrados en la transición son idénticas en los puntos de emisión y absorción, dicho de otro modo, cuando la distribución de poblaciones es uniforme en todo el medio. No podía ser de otra manera, ya que el modelo de Apruzese se desarrolla en un contexto probabilístico y ésta fue una de las conclusiones de la comparación general entre los métodos basados en la evaluación del factor θ_{ji} y aquéllos basados en Λ_{ji} . No obstante, tengamos en cuenta que en [97] se fuerza una cierta dependencia espacial en las poblaciones al mantener la posibilidad de que el cociente $N_{\zeta j}^p/N_{\zeta j}^q$ sea distinto de uno. Éste es un claro ejemplo de cómo el formalismo de la probabilidad de escape se aplica de forma local –aunque estrictamente no podría hacerse– para posibilitar la obtención de una distribución no-uniforme de poblaciones debida a los efectos del transporte radiativo.

En conclusión, hemos puesto de manifiesto que el modelo de transporte radiativo desarrollado en esta tesis doctoral engloba la propuesta presentada en [97] y, en consecuencia, también otros trabajos posteriores que se derivan de ella. En concreto, las ecuaciones del modelo [97] se obtienen a partir de las de ABAKO en el caso particular de que el medio sea homogéneo y no existan variaciones espaciales de las condiciones de temperatura y densidad.

Alcanzado este punto, nos queda aún un asunto que discutir. Independientemente de que el modelo en cuestión tenga como punto de partida la probabilidad de escape, como [97], o el balance entre los procesos radiativos ligado-ligado, como sucede en ABAKO, la determinación de los coeficientes de acoplamiento conlleva siempre la evaluación de las tres integrales ya mencionadas en este apartado. En [97, 100] se sigue el siguiente orden de integración: primero la integral frecuencial, luego la integral angular y por último el promedio espacial. En [98] se lleva a cabo una parametrización analítica la integral sobre frecuencia en función del espesor óptico para perfiles de línea tipo Doppler y tipo Lorentz, con errores máximos del 4 % y 8 %, respectivamente. En [99] se hace lo propio para un perfil Voigt. En este caso, el error medio ronda el 20 %, aunque puede llegar hasta el 40 %. Dicha parametrización permite después evaluar analíticamente las dos integrales restantes, por lo que el modelo en su conjunto es muy eficiente desde el punto de vista computacional. Sin embargo, como la integral frecuencial es la primera en calcularse, los errores derivados del ajuste paramétrico van a propagarse a través de las integrales dependientes de la geometría del plasma, por lo que, el error global del método siempre será algo mayor que el cometido en la parametrización. En ABAKO, sin embargo, seguimos la idea sugerida en [106], de forma que la integral angular y el promedio sobre cada celda se llevan a cabo antes que la integral frecuencial,

lo que nos permite resolver de forma exacta los detalles relativos a la geometría del plasma. Así, los errores cometidos en la evaluación de los coeficientes C_{ji}^q y C_{ji}^{pq} proceden exclusivamente de la evaluación numérica de la integral frecuencial correspondiente. En nuestro modelo, este cálculo es el más exigente desde el punto de vista computacional, aunque los tiempos de computación siguen siendo asumibles en el contexto de un cálculo cinético completo –del orden de unas pocas horas–. No obstante, este punto constituye actualmente una desventaja frente al modelo de Apruzese, que, por otro lado, no parece difícil de solventar. La rapidez de dicho modelo es consecuencia directa del ajuste paramétrico sobre la integral frecuencial. Por tanto, como línea futura, sería interesante analizar las posibilidades de parametrización de las expresiones (3.181) y (3.182), con la ventaja de que, en este caso, las otras dos integrales ya están resueltas y no habría propagación de errores. Por otro lado, el orden de integración que adoptamos en ABAKO subraya la dependencia del factor de escape con el perfil de línea $\phi_{ij}(\nu)$ y, según [106], tal procedimiento resulta conveniente para evaluar la contribución al factor de escape de los fotones pertenecientes tanto al centro de la línea como a las alas –además, de acuerdo con [104], esto último constituye un criterio de calidad para cualquier aproximación utilizada en el cálculo de $\Lambda_{ji}(\mathbf{r})$ –. Asimismo, el hecho de que la integral frecuencial sea la última en ser evaluada hace particularmente sencillo trabajar con otro tipo de perfiles, distinto a los más habituales –Doppler, Lorentz o Voigt–. Por ejemplo, como se sugiere en [106], podrían utilizarse funciones apropiadas para incluir el ensanchamiento debido al efecto Stark. A priori, un algoritmo adecuado de integración numérica nos permitiría en ABAKO evaluar la integral frecuencial sobre el nuevo perfil. Esta versatilidad no es compartida por el modelo de Apruzese, donde este ejercicio difícilmente podría llevarse a cabo, ya que no existe la parametrización correspondiente. En este caso, habría que evaluar numéricamente la integral frecuencial y también las dos restantes, puesto que ahora no podrían llevarse a cabo de forma analítica.

Por otro lado, independientemente del formalismo utilizado para la evaluación del factor de escape, debemos tener en cuenta que si la geometría representativa del medio es infinita en alguna de las direcciones del espacio, esto puede dar lugar a la aparición de divergencias en el momento de calcular el promedio angular. En particular, cuando el término de emisión estimulada domina sobre el de absorción, el coeficiente $\kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}(\nu)$ se vuelve negativo y también el espesor óptico. Esto último significa que existe alguna frecuencia para la que, de forma neta, no se destruyen sino se crean nuevos fotones. En consecuencia, la intensidad de la radiación a dicha frecuencia no se atenúa a medida que se propaga por el medio, sino se amplifica. Por tanto, si $\tau_{ij} < 0$, las divergencias aparecerán cuando, efectuando el promedio angular, evaluemos la contribución asociada a una de las direcciones con longitud infinita. En el modelo que hemos propuesto, desarrollado para geometría plana, cuando $\tau_{ij} < 0$, el problema se soluciona asumiendo de forma artificial que $\tau_{ij} = 0$. De esta forma, podemos evaluar sin complicaciones los coeficientes C_{ji}^q y C_{ji}^{pq} y, aún así, mantener la

posibilidad de que $\Lambda_{ji}^q > 1$ e incluir parcialmente los efectos de la emisión estimulada, ya que el cociente S_{ij}^p/S_{ij}^q podría tomar valores negativos.

Por último, en relación con el procedimiento iterativo para la resolución del sistema de ecuaciones (3.189), en ABAKO no se ha implementado aún ningún método de aceleración de la convergencia. Teniendo en cuenta que en la literatura se han propuesto algunas técnicas a este respecto [140,141], ésta es una mejora en el código que pensamos abordar próximamente. Asimismo, estamos particularmente interesados en extender el formalismo que se ha descrito en este apartado a las otras geometrías básicas –cilíndrica y esférica– y también en estudiar la posibilidad de incluir en el modelo de transporte los efectos debidos a la radiación del continuo y al solapamiento de líneas del espectro discreto.

3.6 Cálculo de propiedades radiativas

Una vez resuelto el sistema de ecuaciones de tasas y conocida, por tanto, la distribución de poblaciones en el plasma, ABAKO dispone de un módulo, denominado RAPCAL [142], para el cálculo de las principales propiedades radiativas, tales como la emisividad y la opacidad multifrecuenciales, opacidades medias, función fuente e intensidad específica. Algunas de estas magnitudes ya han sido mencionadas en secciones anteriores por necesidades de la exposición. Ahora volveremos a retomarlas para describir adecuadamente este nuevo módulo.

Denotamos por $j(\nu)$ y $\kappa(\nu)$ el coeficiente de emisión y absorción, respectivamente. Tanto uno como otro incluyen las contribuciones debidas al espectro ligado-ligado, ligado-libre y libre-libre, esto es,

$$j(\nu) = j_{bb}(\nu) + j_{bf}(\nu) + j_{ff}(\nu) \quad (3.213)$$

$$\kappa(\nu) = \kappa_{bb}(\nu) + \kappa_{bf}(\nu) + \kappa_{ff}(\nu). \quad (3.214)$$

Exponemos seguidamente de qué manera se evalúa cada contribución.

La emisividad ligado-ligado viene dada por

$$j_{bb}(\nu) = \sum_{\zeta} \sum_{i,j} j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\nu), \quad (3.215)$$

con

$$j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N_{\zeta j} \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \phi_{ij}(\nu). \quad (3.216)$$

De forma análoga, para la absorción ligado-ligado tenemos

$$\kappa_{bb}(\nu) = \sum_{\zeta} \sum_{i,j} \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\nu), \quad (3.217)$$

siendo

$$\kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} (N_{\zeta i} \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a - N_{\zeta j} \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e) \phi_{ij}(\nu). \quad (3.218)$$

Utilizando las relaciones existentes entre los coeficientes de Einstein –ver apéndice B–, es posible reescribir la ecuación anterior en términos del coeficiente de decaimiento espontáneo,

$$\kappa_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N_{\zeta_i} \frac{g_{\zeta_j}}{g_{\zeta_i}} \frac{c^2}{2h\nu_{ij}^3} \mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i} \phi_{ij}(\nu) \left(1 - \frac{g_{\zeta_i}}{g_{\zeta_j}} \frac{N_{\zeta_j}}{N_{\zeta_i}} \right). \quad (3.219)$$

En las ecuaciones anteriores, $\phi_{ij}(\nu)$ representa el perfil de línea tanto de emisión como de absorción, ya que trabajamos bajo la hipótesis de redistribución completa. En este sentido, debemos tener presente que si la línea es demasiado ancha, como ocurre al trabajar en un esquema UTA, esta aproximación puede introducir errores significativos. No obstante, en los cálculos que se presentan en esta tesis doctoral nunca se ha hecho uso de la técnica UTA.

Por otro lado, para la evaluación del perfil de línea hemos considerado los ensachamientos natural, por efecto Doppler y por impacto electrónico. Según el apéndice C, el perfil Doppler adopta la forma de una gaussiana y su semianchura a mitad de altura $HWHM$ viene dada por

$$HWHM_{Dop} = \sqrt{\ln 2} \Gamma_{Dop} = \sqrt{\frac{2 \ln 2 T_i}{Mc^2}} \nu_{ij}, \quad (3.220)$$

donde T_i es la temperatura iónica y M la masa del ion. El perfil natural es lorentziano y en este caso

$$HWHM_{nat} = \frac{\Gamma_{nat}}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \left(\sum_{m < i} \mathcal{A}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_m} + \sum_{m < j} \mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_m} \right). \quad (3.221)$$

El ensanchamiento por impacto electrónico se considera también lorentziano y para determinar su $HWHM$ utilizamos una fórmula semiempírica propuesta en [143, 144],

$$HWHM_{col} = \frac{\Gamma_{col}}{4\pi} = n_e \frac{8\pi}{6} \frac{\hbar^2}{m_e^2} \left(\frac{2m_e}{\pi T} \right)^{1/2} \frac{\pi}{\sqrt{3}} \left(0.9 - \frac{1.1}{\zeta + 1} \right) \sum_{\mu} \left[\frac{3n_{\mu}}{2(\zeta + 1)} \right]^2 (n_{\mu}^2 - l_{\mu}^2 - l_{\mu} - 1). \quad (3.222)$$

En la expresión anterior $\mu = \eta, \eta'$, siendo η y η' los orbitales relativistas involucrados en la transición. Asimismo, $n_{\eta}, n_{\eta'}, l_{\eta}$ y $l_{\eta'}$ son los valores del número cuántico principal y angular en dichos orbitales.

Para contemplar de forma conjunta todos los ensanchamientos se utiliza, finalmente, un perfil Voigt, en el que el parámetro de ensachamiento a se calcula como

$$a = \frac{\Gamma_{nat} + \Gamma_{col}}{4\pi \Gamma_{Dop}}. \quad (3.223)$$

La emisividad ligado-libre se determina de la siguiente manera

$$j_{bf}(\nu) = \sum_{\zeta, i} \sum_{\zeta, j} j_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\nu), \quad (3.224)$$

siendo

$$j_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\nu) = \frac{h(h\nu)}{4\pi} N_{\zeta+1j} n_e f(\varepsilon) \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}} \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{rad}(\varepsilon). \quad (3.225)$$

Es frecuente utilizar la relación de Milne (3.97) para escribir la sección eficaz de recombinación radiativa en términos de la sección eficaz de fotoionización y así se obtiene

$$j_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\nu) = \frac{h}{2\pi c^2} \left(\frac{1}{2m_e} \right)^{3/2} N_{\zeta+1j} n_e f(\varepsilon) \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} \frac{(h\nu)^3}{\varepsilon^{1/2}} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu). \quad (3.226)$$

En ABAKO se asume una distribución $f(\varepsilon)$ de tipo Maxwell-Boltzmann a temperatura T para los electrones libres y la sección eficaz de fotoionización $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu)$ se evalúa haciendo uso de la fórmula de Kramers (3.98). Además, como ya hemos visto, debemos tener presente que la energía umbral de fotoionización E_{ij} , la energía del electrón libre ε y la energía del fotón $h\nu$ están ligadas a través de la ecuación

$$h\nu = E_{ij} + \varepsilon. \quad (3.227)$$

La absorción ligado-libre viene dada por

$$\kappa_{bf}(\nu) = \sum_{\zeta, i} \sum_{\zeta, j} \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\nu). \quad (3.228)$$

Empleando las relaciones de Einstein-Milne para los procesos radiativos del espectro continuo –ver apéndice B–, también es posible escribir el coeficiente de absorción para una transición ligado-libre $\zeta i \rightarrow \zeta + 1j$ en función de la sección eficaz de fotoionización. Esto es,

$$\kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\nu) = N_{\zeta i} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu) \left[1 - \frac{N_{\zeta+1j} n_e f(\varepsilon)}{N_{\zeta i}} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j} g(\varepsilon)} \right], \quad (3.229)$$

donde $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados con energía ε del gas ideal de electrones libres, dada por

$$g(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_e}{h^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}. \quad (3.230)$$

La expresión (3.229) contempla la disminución de la absorción causada por la recombinación estimulada.

El coeficiente de emisión por bremsstrahlung se evalúa como [17]

$$j_{ff}(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} n_e \sum_{\zeta} N_{\zeta} \int_{h\nu}^{\infty} \frac{d\sigma_{\zeta}^{bre}}{d\nu} \left(\frac{2\varepsilon}{m_e} \right)^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.231)$$

donde la sección eficaz diferencial de bremsstrahlung $\frac{d\sigma_{\zeta}^{bre}}{d\nu}$ se calcula siguiendo una expresión semiclásica debida a Kramer,

$$\frac{d\sigma_{\zeta}^{bre}}{d\nu} = \frac{16\pi}{3\sqrt{3}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^3 \frac{1}{m_e^2 c^3} \frac{\zeta^2 m_e}{h\nu 2\varepsilon}. \quad (3.232)$$

En ocasiones, la ecuación anterior se corrige multiplicando por el factor Gaunt libre-libre g_{ff} , incluyendo así efectos cuánticos no-relativistas. No obstante, actualmente en ABAKO se considera $g_{ff} = 1$.

Asumiendo una distribución maxwelliana para los electrones libres, la ecuación (3.231) se reduce finalmente a

$$j_{ff}(\nu) = \frac{32\pi^2 e^4 a_0^2 \alpha^3}{\sqrt{3} (2\pi m_e)^{3/2} h} \left(\frac{m_e}{2\pi T} \right)^{1/2} \frac{1}{Z^2} n_{ion} n_e e^{-h\nu/T}. \quad (3.233)$$

El coeficiente de absorción libre-libre viene dado por [17]

$$\kappa_{ff}(\nu) = \sum_{\zeta} N_{\zeta} \sigma_{\zeta}^{ibr}(\nu) \left(1 - e^{-h\nu/T}\right), \quad (3.234)$$

donde nuevamente se utiliza una expresión semiclásica para la sección eficaz $\sigma_{\zeta}^{ibr}(\nu)$ de bremsstrahlung inverso,

$$\sigma_{\zeta}^{ibr}(\nu) = \frac{16\pi^2 e^2 h^2 \alpha}{3\sqrt{3} (2\pi m_e)^{3/2}} \frac{\zeta^2 n_e}{T^{1/2} (h\nu)^3}. \quad (3.235)$$

Así, es trivial obtener

$$\kappa_{ff}(\nu) = \frac{16\pi^2 e^2 h^2 \alpha}{3\sqrt{3} (2\pi m_e)^{3/2}} \frac{\overline{Z^2} n_{ion} n_e}{T^{1/2} (h\nu)^3} \left(1 - e^{-h\nu/T}\right). \quad (3.236)$$

Para determinar la opacidad total $k(\nu)$, se tiene en cuenta también la absorción κ_{scatt} debida a la dispersión Thomson de fotones por parte de los electrones libres. Para este cálculo se utiliza una sencilla y conocida aproximación [145],

$$\kappa_{scatt} = n_e \sigma^{Thom}, \quad (3.237)$$

con $\sigma^{Thom} = 6.65 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$.

Finalmente, la opacidad total viene dada por

$$k(\nu) = \frac{1}{\rho} [\kappa(\nu) + \kappa_{scatt}], \quad (3.238)$$

siendo ρ la densidad volúmica de materia.

El módulo de propiedades radiativas implementado en ABAKO proporciona también las opacidades medias de Planck k_P y Rosseland k_R , definidas de la forma siguiente

$$k_P = \int_0^{\infty} d\nu \tilde{B}(\nu, T) [k(\nu) - \kappa_{scatt}/\rho] \quad (3.239)$$

$$\frac{1}{k_R} = \int_0^{\infty} d\nu \frac{\partial \tilde{B}(\nu, T)}{\partial T} \frac{1}{k(\nu)}, \quad (3.240)$$

donde $\tilde{B}(\nu, T)$ es la función de distribución de Planck normalizada,

$$\tilde{B}(\nu, T) = \frac{15}{\pi^4 T} \frac{u^3}{e^u - 1}, \quad u = \frac{h\nu}{T}. \quad (3.241)$$

Por otro lado, la función fuente $S(\nu)$ se determina como

$$S(\nu) = \frac{j(\nu)}{\rho k(\nu)}. \quad (3.242)$$

El cálculo de la intensidad emitida se efectúa suponiendo que el plasma es homogéneo y que posee la geometría de una lámina de anchura L . Bajo estas condiciones, la intensidad $I(\nu)$ viene dada por

$$I(\nu) = S(\nu) \left[1 - e^{-\tau(\nu)}\right], \quad (3.243)$$

donde el espesor óptico se evalúa como $\tau(\nu) = \rho k(\nu)L$.

La intensidad calculada a través de la expresión (3.243) incluye de manera automática los posibles efectos de amplificación, absorción de líneas y modificación de la forma del perfil. Aunque para la determinación de las poblaciones de nivel, nuestro tratamiento de los efectos de opacidad no contempla el solapamiento de líneas, a posteriori, el cálculo de la intensidad de radiación usando (3.243) sí tiene en cuenta este fenómeno.

Asimismo, cuando el plasma es ópticamente delgado para todas las frecuencias, ocurre $\tau(\nu) \ll 1$. En esta situación, es posible usar la aproximación $e^{-\tau(\nu)} \approx 1 - \tau(\nu)$ y entonces la intensidad se determina como

$$I(\nu) \approx j(\nu)L. \quad (3.244)$$

3.7 Estructura y resolución de la matriz de tasas y otros detalles técnicos

Sea cual sea la situación objeto de estudio, estemos tratando con plasmas delgados o gruesos, homogéneos o no, a la hora de calcular las poblaciones de nivel, siempre llegará el momento de resolver el sistema de ecuaciones de tasas. En el caso más general de un plasma no-homogéneo, como ya sabemos, es habitual discretizar el medio en N_C regiones homogéneas, de tal forma que en cada una ellas la densidad, la temperatura y las poblaciones de nivel son constantes. En este contexto, el sistema en estado estacionario queda representado a través de la expresión

$$\sum_{\zeta'm'} N_{\zeta'm'}^q \mathbb{R}_{\zeta'm' \rightarrow \zeta m}^{+,q} - \sum_{\zeta'm'} N_{\zeta m}^q \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta'm'}^{-,q} = 0, \quad \forall \zeta m, \quad \forall q, \quad \text{con } q = 1, \dots, N_C, \quad (3.245)$$

donde ahora $N_{\zeta m}^q$ es la población de iones en el estado ζm existente en la celda q .

Cuando la densidad electrónica en cada celda n_e^q es conocida, éste resulta ser un sistema lineal de ecuaciones para las $N_{\zeta m}^q$, con la particularidad de que en situación estacionaria las ecuaciones no son linealmente independientes. Así, para poder determinar de forma única las poblaciones, una de las ecuaciones se sustituye por aquélla que expresa la condición de neutralidad de carga o conservación de partículas en el plasma. Por otro lado, si N_L es el número total de niveles incluidos en el modelo CR, para plasmas no-homogéneos la dimensión del sistema será igual a $N_L \times N_C$; mientras que en el caso homogéneo, como $N_C = 1$, el número de ecuaciones coincidirá con N_L . Como podemos imaginar, en el contexto de una descripción DCA relativista, como la que se utiliza en ABAKO, basta con que el cálculo cinético involucre iones con $\gtrsim 6$ electrones, para ya tener que enfrentarnos a la resolución de sistemas con una dimensión del orden $10^4 - 10^5$. Si los cálculos se realizaran en estructura fina, el tamaño del sistema llegaría fácilmente hasta 10^6 . Con el objetivo entonces de minimizar los requisitos computacionales se han llevado a cabo dos acciones fundamentales.

Por un lado, la matriz CR tiene un gran número de elementos nulos porque los procesos atómicos sólo conectan estados bien dentro de la misma especie iónica o bien entre iones adyacentes. Además, dentro de este esquema, no todas las transiciones son posibles. Para ilustrar claramente este hecho, en la figura 3.5 (arriba) se muestra el patrón característico de la matriz CR, correspondiente en este ejemplo a un cálculo sobre un plasma de C ópticamente delgado. Los puntos representan elementos de matriz distintos de cero. De forma general se distingue una estructura de cajas, cada una de ellas asociada con una especie iónica distinta. Los elementos dentro de una caja se corresponden esencialmente con transiciones dentro de la misma especie iónica, a través de los mecanismos de excitación y desexcitación colisional y decaimiento espontáneo. Los coeficientes de matriz que conectan estados pertenecientes a bloques distintos se corresponden con los mecanismos de ionización y recombinación incluidos en el modelo. En el ejemplo, el número total de niveles es $N_L = 2605$, que representa también la dimensión de la matriz. En el diagrama resulta evidente el gran número de elementos nulos de la matriz CR. Concretamente, sólo 51359 elementos son distintos de cero, cifra que no alcanza siquiera el 1% sobre los N_L^2 posibles. Cuando tratamos con un plasma no-homogéneo la estructura que acabamos de describir se replica tantas veces como número de celdas y aparecen elementos de matriz no-nulos conectando celdas distintas, que se corresponden con los coeficientes de acoplamiento radiativo. Como ejemplo, representamos en la figura 3.5 (abajo) el patrón de la matriz CR en un cálculo no-homogéneo. Según lo que acabamos de exponer, es fundamental almacenar la matriz en forma *sparse* –trabajar exclusivamente con los elementos distintos de cero– para reducir los requisitos de memoria computacional y a la postre también el tiempo de cálculo.

Una vez que la matriz de tasas ha sido calculada y almacenada debemos elegir un algoritmo para la resolución del correspondiente sistema lineal de ecuaciones. Los métodos existentes se clasifican básicamente en dos categorías, los *directos* y los *iterativos*. Los métodos directos se basan en la conocida factorización triangular de la matriz de coeficientes. La solución se obtiene tras un número finito de operaciones, normalmente conocido de antemano, y garantizan un grado de exactitud igual al grado de definición inicial del problema. Los métodos iterativos precisan de una condición inicial para iniciar un proceso que proporciona una aproximación a la solución del problema en cada iteración. El proceso se detiene cuando se satisface un criterio de convergencia fijado externamente. El número de iteraciones necesario para alcanzar dicha convergencia varía con la matriz del problema en cuestión, con la condición inicial y con el propio criterio elegido, de tal manera que es imposible estimar a priori el número de operaciones necesarias para lograr una solución satisfactoria. Sin embargo, para cierta clase de problemas, como la que aquí nos ocupa, una técnica iterativa apropiada puede conducir a una solución del problema de forma mucho más rápida que un método directo. Los requisitos de memoria de un método iterativo son menores que los de un método directo y, además, para el tratamiento de sistemas lineales de grandes dimensiones

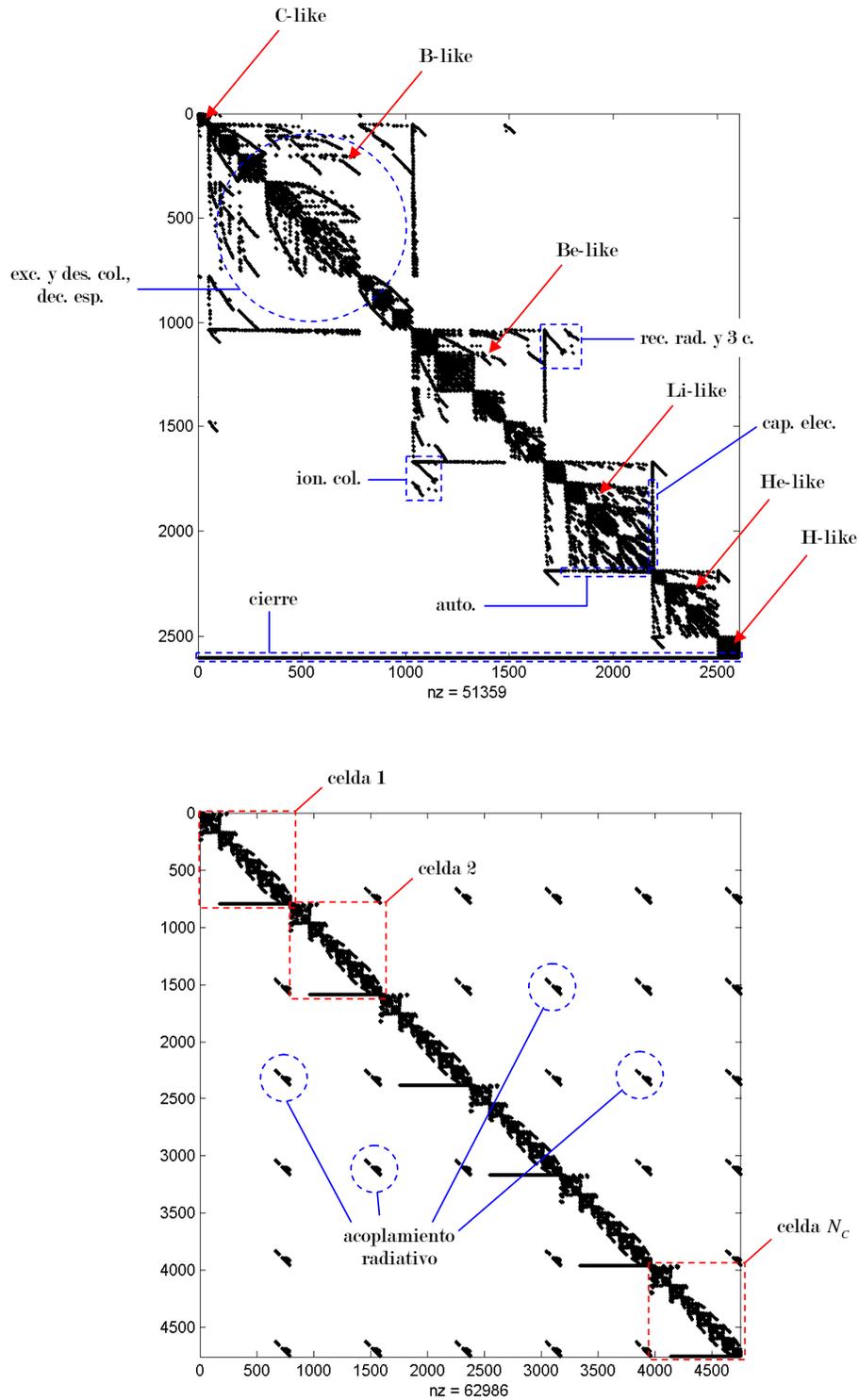


Figura 3.5. Patrón característico de la matriz CR, (arriba) en un cálculo ópticamente delgado, (debajo) en cálculo ópticamente grueso no-homogéneo.

Nº de niveles	Tiempo de cálculo (<i>s</i>)	
	Método directo	Método iterativo
1000	1	<1
1500	3	<1
2000	4	1
2500	8	1
3000	14	2
3500	16	3
4000	33	4
5000	66	6
6000	84	10
7000	261	13
8000	1451	18

Tabla 3.2. Tiempos de cálculo de los métodos directo e iterativo para la inversión de la matriz CR.

representan en muchas ocasiones la única vía de solución. Los detalles acerca de estas técnicas y los distintos algoritmos existentes pueden consultarse en [146].

Está claro, por tanto, que los métodos iterativos constituyen la elección más apropiada para llevar a cabo la inversión de la matriz CR. Entre los diferentes algoritmos existentes, ABAKO utiliza el *Generalized Minimum Residual Method* (GMRES) y el *Biconjugate Gradient* (BCG), ambos implementados en la librería numérica CXML [147]. Estos algoritmos demostraron ser los más eficientes en la resolución de los sistemas de ecuaciones típicos de la cinética de plasmas. La implementación de estas técnicas en los códigos cinéticos es relativamente reciente, como se desprende de [78]. Las primeras pruebas realizadas en ABAKO se describen en [148]. Allí se puso claramente de manifiesto la conveniencia de la utilización del algoritmo iterativo BCG frente a un método directo [149]. Así, la tabla 3.2 muestra los tiempos empleados por ambos métodos para resolver problemas cinéticos de distintas dimensiones. Los cálculos se realizaron sobre un PC convencional con procesador Intel Pentium IV a 3.0 GHz y 1 Gb de memoria RAM. La utilización del método iterativo supone una reducción sustancial del coste computacional a medida que aumenta el tamaño de la matriz. Por otro lado, antes comentábamos que el número de iteraciones necesarias para alcanzar convergencia dependía de la elección de la condición inicial. A este respecto, hemos comprobado que, en un cálculo CR, es una buena elección tomar como punto de partida la solución Corona o la correspondiente a LTE, en función de si la densidad electrónica del problema concreto puede considerarse baja o alta, respectivamente.

Cuando se incluyen efectos de opacidad, se tiene en cuenta la corrección por CL o cuando la densidad electrónica no es un parámetro conocido del plasma, pero sí la densidad de iones, no basta una única resolución del sistema de ecuaciones para hallar la solución del problema. Cualquiera de estos casos introduce un procedimiento iterativo en el que las ecuaciones de tasas deben resolverse en repetidas ocasiones hasta alcanzar convergencia. En cada caso, suele tomarse como condición inicial aquella en la que no se incluye el efecto que posteriormente quiere tratarse. Por ejemplo, en un cálculo con CL, se utiliza como condición inicial la situación sin CL. Desde ese momento, la solución en un paso determinado se usa como punto de partida para el caso siguiente. La convergencia se alcanza cuando cada una de las poblaciones de nivel $p_{\zeta i}^{(k)}$ que en el paso k -ésimo supere un umbral p_{th} satisfaga la condición

$$\left| \frac{p_{\zeta i}^{(k)} - p_{\zeta i}^{(k-1)}}{p_{\zeta i}^{(k-1)}} \right| < \epsilon. \quad (3.246)$$

De forma muy habitual suele tomarse $p_{th} = 10^{-6}$ y $\epsilon = 10^{-4}$. También es importante destacar que en un cálculo concreto, pueden tener lugar procesos iterativos anidados. En estos casos, hasta que no se haya alcanzado convergencia en el más interno, no comienza el siguiente paso en el inmediatamente más externo. Cuando existen, el orden de los procesos iterativos de dentro hacia afuera es: por efectos de opacidad, por CL y por densidad de iones.

En la actualidad, el módulo de datos atómicos de ABAKO es capaz de manejar hasta 10000 niveles y 150000 transiciones radiativas por especie iónica, aunque en el conjunto del modelo CR el número máximo de niveles es 10^5 y el número máximo de transiciones 10^7 , valor que sirve también como límite para el número de elementos no nulos de la matriz de tasas.

ABAKO está esencialmente escrito en Fortran77, con pequeños trozos de código en Fortran90, y puede correr bajo Windows o Unix. Por el momento no se han implementado técnicas de computación en paralelo, aunque sí se ha iniciado un análisis preliminar para su actualización en este sentido. Todos los cálculos que se presentan en esta tesis se realizaron en dos PCs convencionales bajo Windows XP Professional SP2, uno con procesador Intel Pentium IV a 3.0 GHz y otro con Intel Pentium Mobile a 1.7 GHz, ambos con una memoria RAM de 1 Gb.

4

Análisis y validación de ABAKO

En este capítulo expondremos los principales resultados obtenidos en esta tesis y que han permitido la validación del modelo ABAKO como herramienta para el estudio de la cinética de poblaciones de plasmas en estado estacionario y bajo condiciones de NLTE. Los cálculos realizados contemplan además numerosas situaciones diferentes. Así, por ejemplo, se estudiaron plasmas de elementos con número atómico bajo, como el C, cuya estructura de niveles es relativamente sencilla de describir, pero también elementos con Z -alto, como el Xe y el Au, donde la variedad de posibles configuraciones electrónicas en los distintos iones complica de forma considerable la estructura energética.

La validación de ABAKO se ha llevado a cabo en tres fases que se describen a continuación:

i) Comportamiento de ABAKO en los límites de baja y alta densidad

El objetivo de esta primera fase ha sido el de chequear la consistencia interna del modelo propuesto estudiando su comportamiento en las situaciones extremas de densidad electrónica. Veremos que las ecuaciones CR de ABAKO reproducen, como cabía esperar, los resultados del modelo Corona a baja densidad y los de las ecuaciones de Saha-Boltzmann (LTE) a alta densidad.

ii) Estudio de plasmas ópticamente delgados

En este apartado hemos llevado a cabo una exhaustiva comparación con otros códigos de primera línea internacional en el caso de plasmas de C y Al. Nuestra intención es aprovechar las características relativamente sencillas de estos elementos de bajo Z para analizar cada una de las piezas que componen el código desarrollado. Finalmente abordamos el estudio de un experimento realizado con un plasma de Au en condiciones de baja densidad y mostramos por primera vez las capacidades de ABAKO para el cálculo de propiedades radiativas.

iii) Estudio de plasmas ópticamente gruesos

Nuestro objetivo en este caso es esencialmente validar el modelo implementado en ABAKO para incluir los efectos de opacidad. Para ello hemos llevado a cabo en primer lugar un estudio detallado relativo a un sistema muy simple, como es el átomo de dos niveles. El interés del mismo radica en que este problema tiene solución exacta y supone por tanto un buen examen para el modelo que hemos desarrollado. A continuación hemos usado datos ya publicados de experimentos con plasmas de Xe y Au para contrastar los resultados de ABAKO en plasmas ópticamente gruesos bajo la aproximación homogénea. Se muestra también las posibilidades de ABAKO para abordar problemas de diagnosis espectroscópica en el análisis de una experiencia con plasmas de Al de alta densidad. Por último, para la situación no-homogénea, hemos realizado un estudio comparativo interno sobre Al, primero bajo condiciones físicas uniformes y finalmente en presencia de gradientes de temperatura y densidad.

4.1 Comportamiento de ABAKO en los límites de baja y alta densidad

El primer paso de cara a la validación de ABAKO no es más que un test de consistencia interna. Se sabe que el modelo CR, el adecuado para efectuar estudios cinéticos bajo condiciones de NLTE, reproduce las ecuaciones básicas del modelo Corona y de la situación LTE en las regiones extremas de baja y alta densidad, respectivamente [150–152]. Así, nuestro objetivo en este apartado es chequear el correcto comportamiento de las ecuaciones específicas de ABAKO en dichos límites¹.

Consideremos como punto de partida el sistema de ecuaciones de tasas (3.142) para un plasma ópticamente delgado en estado estacionario. Sumando sobre todos los estados i del ion con carga ζ se llega a [150]

$$\frac{N_\zeta}{N_{\zeta-1}} = \frac{i_{\zeta-1}}{r_\zeta^{2b} + n_e r_\zeta^{3b}}, \quad (4.1)$$

donde se ha introducido

$$i_\zeta = \sum_{i,j} x_{\zeta i} (\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j} + n_e^{-1} \mathcal{A}u_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}), \quad (4.2)$$

$$r_\zeta^{2b} = \sum_{i,j} x_{\zeta j} (\mathcal{R}_{\zeta j \rightarrow \zeta-1 i}^r + \mathcal{C}_{\zeta j \rightarrow \zeta-1 i}), \quad (4.3)$$

$$r_\zeta^{3b} = \sum_{i,j} x_{\zeta j} \mathcal{R}_{\zeta j \rightarrow \zeta-1 i}^3, \quad (4.4)$$

siendo $x_{\zeta i} = N_{\zeta i}/N_\zeta$ la población del estado ζi relativa a la población total del estado de carga ζ .

En el caso de baja densidad, los procesos de recombinación a dos cuerpos dominan sobre la recombinación a tres y puede considerarse

$$r_\zeta^{2b} \gg n_e r_\zeta^{3b}. \quad (4.5)$$

¹Un estudio similar ya fue llevado a cabo con una versión preliminar del modelo [153].

Bajo estas condiciones (4.1) se convierte en

$$\frac{N_\zeta}{N_{\zeta-1}} = \frac{i_{\zeta-1}}{r_\zeta^{2b}}, \quad (4.6)$$

que resulta ser la ecuación básica del modelo Corona (sección 2.3.2). No obstante, debemos hacer dos puntualizaciones. En primer lugar, para que (4.6) responda con precisión al comportamiento característico de este modelo, hay que sustituir en (4.2) y (4.3) la distribución de poblaciones propia de esta situación, esto es, los estados excitados se hallan despoblados y la población se concentra en los estados fundamentales, luego

$$N_{\zeta i} = \begin{cases} N_\zeta, & \text{para } i = 0, \\ 0, & \text{para } i \neq 0. \end{cases} \quad (4.7)$$

En segundo lugar, aunque en el caso de baja densidad los estados autoionizantes no están poblados, éstos pueden realmente contribuir al balance de poblaciones de forma indirecta, a través del mecanismo de excitación-autoionización. Esto es, un determinado estado autoionizante podría poblarse por excitación colisional y a continuación seguir dos posibles vías, acabar decayendo al estado fundamental por sucesivos decaimientos espontáneos (lo que se conoce como *estabilización radiativa*) o bien incrementar por autoionización la población del estado de carga inmediatamente superior. Análogamente, un ion de carga ζ en estado fundamental podría por captura electrónica dar lugar a un estado autoionizante del ion $\zeta - 1$. Ahora éste podría estabilizarse radiativamente o sufrir una autoionización, devolviendo la población al ion de partida.

Por tanto, en su versión Corona, ABAKO determina la distribución de poblaciones iónicas utilizando la ecuación (4.6), pero teniendo en cuenta

$$i_\zeta = \sum_j \mathcal{I}_{\zeta 0 \rightarrow \zeta+1j} + \sum_{j^*} b_{\zeta j^*} \mathcal{E}_{\zeta 0 \rightarrow \zeta j^*}, \quad (4.8)$$

$$r_\zeta^{2b} = \sum_j \mathcal{R}_{\zeta 0 \rightarrow \zeta-1j}^r + \sum_{j^*} b'_{\zeta j^*} \mathcal{C}_{\zeta 0 \rightarrow \zeta-1j^*}, \quad (4.9)$$

donde j^* denota un estado autoionizante, el *branching ratio* $b_{\zeta j^*}$ es una medida de la probabilidad de autoionización frente a la estabilización radiativa y viene dado por

$$b_{\zeta j^*} = \frac{\sum_j \mathcal{A}_{u_{\zeta j^* \rightarrow \zeta+1j}}}{\sum_j \mathcal{A}_{u_{\zeta j^* \rightarrow \zeta+1j}} + \sum_j \mathcal{A}_{\zeta j^* \rightarrow \zeta j}}, \quad (4.10)$$

el *branching ratio* para estabilización radiativa se calcula como $b'_{\zeta j^*} = 1 - b_{\zeta j^*}$. Como característica importante del conjunto de ecuaciones que acabamos de describir está el hecho de que el modelo Corona es independiente de n_e .

En cambio, en el límite de alta densidad, la recombinación a tres cuerpos es dominante y ocurre

$$r_\zeta^{2b} \ll n_e r_\zeta^{3b}, \quad (4.11)$$

entonces (4.1) puede formularse como

$$\frac{N_{\zeta}}{N_{\zeta-1}} = \frac{i_{\zeta-1}}{n_e r_{\zeta}^{3b}}, \quad (4.12)$$

donde además el proceso de autoionización puede despreciarse frente al de ionización colisional y, por tanto,

$$i_{\zeta} = \sum_{i,j} x_{\zeta i} \mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}. \quad (4.13)$$

Como vemos, en el caso de alta densidad, el balance poblacional está controlado por los procesos colisionales, hecho que se corresponde con la situación de LTE. Así, si hacemos uso de la distribución de Boltzmann para estados excitados

$$N_{\zeta i} = N_{\zeta} \frac{g_{\zeta i} e^{-E_{\zeta i}/T}}{Z_{\zeta}(T)}, \quad (4.14)$$

y sustituimos convenientemente $x_{\zeta i}$ en (4.13) y (4.4), la ecuación (4.12) se convierte en la conocida ecuación de Saha, que nos permite determinar la distribución de poblaciones iónicas en LTE,

$$\frac{N_{\zeta} n_e}{N_{\zeta-1}} = 2 \left(\frac{m_e T}{2\pi \hbar^2} \right)^2 \frac{Z_{\zeta}(T)}{Z_{\zeta-1}(T)} \exp \left(-\frac{I_{\zeta-1}}{T} \right). \quad (4.15)$$

Nos interesa ahora comprobar numéricamente que las ecuaciones del modelo CR de ABAKO satisfacen efectivamente el comportamiento que acabamos de describir. Para ello, tomando como base un plasma de C hemos llevado a cabo una serie de cálculos cinéticos sobre una extensa malla de densidad electrónica y diferentes valores de temperatura. Los cálculos se han realizado utilizando el sistema de ecuaciones de tasas (3.142), al que nos referiremos como modelo CR; las ecuaciones (4.6), (4.8) y (4.9), que constituyen el modelo Corona; y la ecuación de Saha (4.15) para LTE. Los datos atómicos necesarios han sido calculados con el modelo de potenciales analíticos propio de ABAKO. Aunque hemos llegado a tratar casos con una densidad electrónica suficientemente alta como para que los efectos del CL sean apreciables, no hemos incluido esta corrección en nuestros cálculos porque nuestro objetivo, en este momento, no es extraer conclusiones físicas de las situaciones tratadas, sino chequear la consistencia matemática y numérica de las ecuaciones del modelo propuesto. Los efectos del CL serán tratados con detenimiento en una sección posterior.

Como muestra del estudio que ahora nos ocupa, en la figura 4.1 se representa el comportamiento de la ionización media para el caso $T = 10 \text{ eV}$. Puede observarse que en la región de baja densidad, el modelo CR converge, como cabía esperar, al resultado Corona. Asimismo, en la zona de alta densidad, a partir de aproximadamente $n_e = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, la ionización media del modelo CR reproduce satisfactoriamente el comportamiento LTE. Debemos hacer notar que, en el límite de alta densidad, la progresiva disminución de la ionización media con la densidad electrónica deja de tener sentido físico a partir de cierto valor de n_e . Teniendo en cuenta la ligadura $n_e = \bar{Z} n_{ion}$, para alcanzar una alta densidad electrónica con una baja ionización media, es necesario que la densidad de iones sea también alta. En consecuencia, n_{ion} aumentará hasta tal punto que ya

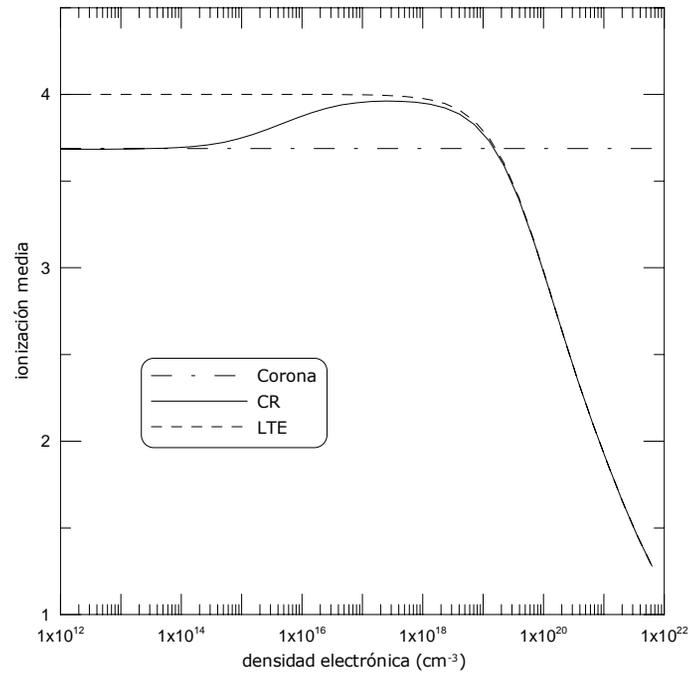


Figura 4.1. Comportamiento de la ionización media con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 10 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.

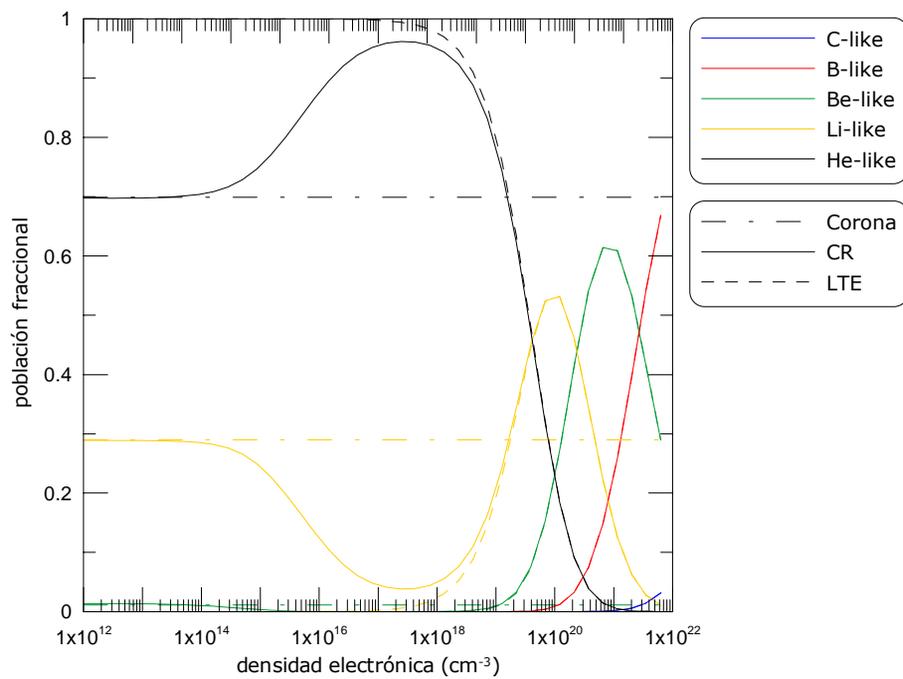


Figura 4.2. Comportamiento de las poblaciones iónicas con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 10 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.

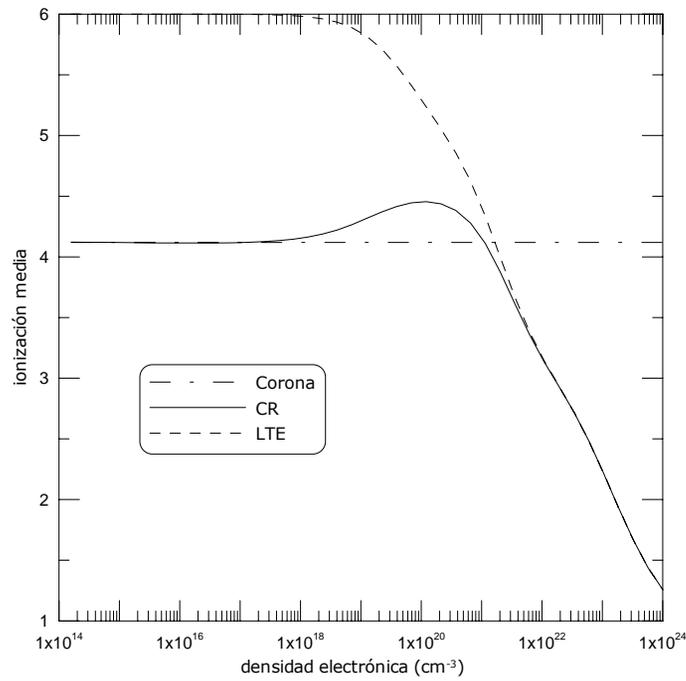


Figura 4.3. Comportamiento de la ionización media con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 50 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.

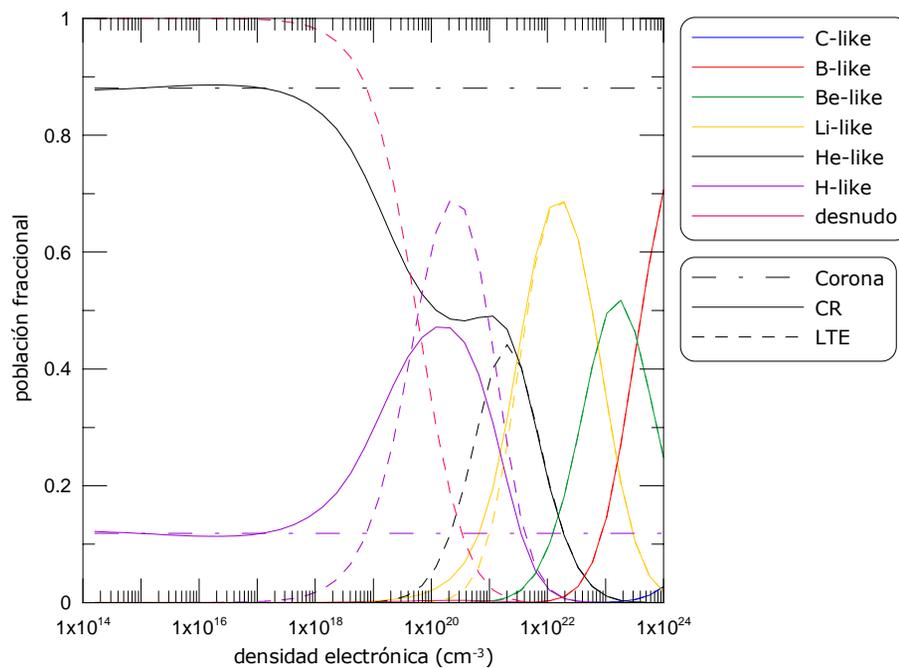


Figura 4.4. Comportamiento de las poblaciones iónicas con la densidad electrónica en plasmas de C con $T = 50 \text{ eV}$. Comparación entre los modelos Corona, CR y LTE.

no podremos distinguir los iones como entes individuales, formándose entonces agregados atómicos que, en función de la temperatura, podrían llegar a ser de tipo molecular. En esta situación, nuestra descripción del sistema basada en iones individuales con electrones ligados, electrones libres, y su estadística correspondiente, deja de ser válida. Es más si la densidad es suficientemente alta, es posible que ni siquiera se satisfaga la condición (1.24) necesaria para alcanzar el estado de plasma.

Por otro lado, en la región comprendida entre $n_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y $n_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, la ionización media del modelo CR muestra una conducta propia, distinta a la de Corona o LTE. Ésta es claramente una región de NLTE. Avanzando desde valores pequeños de densidad, en esta zona, la densidad electrónica es de una magnitud suficiente para que el proceso de excitación colisional cobre cada vez más importancia. De esta forma se pueblan los estados excitados favoreciendo entonces una posterior ionización por impacto electrónico. Este mecanismo justifica el incremento en \bar{Z} entre $n_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ y $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. A partir de entonces, es la recombinación a tres cuerpos quien adquiere un papel dominante y la ionización media acaba disminuyendo conforme aumenta la densidad electrónica.

La convergencia del modelo CR a las situaciones Corona y LTE puede analizarse aún con mayor profundidad estudiando el comportamiento de las poblaciones iónicas. Esto es lo que se muestra en la figura 4.2. Más allá de \bar{Z} , las poblaciones de cada una de las especies iónicas de C calculadas con el modelo CR reproducen convenientemente los resultados Corona y LTE, para baja y alta densidad respectivamente. Cuando la densidad es pequeña, el plasma está constituido mayoritariamente por He-like, Li-like y algo de Be-like. En la región NLTE tenemos solamente He-like y Li-like, mientras que cuando ya se ha alcanzado la situación LTE aparecen las especies Li-, Be-, B- y una pequeña fracción de C-like. Por poner otro ejemplo, en las figuras 4.3 y 4.4 representamos el comportamiento de \bar{Z} y de las poblaciones fraccionales para un valor distinto de temperatura, $T = 50 \text{ eV}$. La discusión de las mismas es análoga a la que acabamos de hacer para $T = 10 \text{ eV}$.

Por razones de brevedad, en esta memoria presentamos sólo una parte de nuestro estudio de la conducta de ABAKO en los límites de baja y alta densidad. El análisis fue mucho más extenso y los resultados mostraron siempre una completa coherencia con el comportamiento esperado en las regiones extremas de densidad electrónica. No sólo se estudiaron ionizaciones medias y poblaciones iónicas, sino que también se inspeccionó la influencia de los estados excitados y de cada proceso individual [153,154] sobre el balance poblacional y se llevaron a cabo algunos cálculos espectroscópicos [154]. Así, por ejemplo, en la figura 4.5 se muestra de qué manera se altera el comportamiento de \bar{Z} con n_e , para $T = 10 \text{ eV}$, cuando se introduce la corrección por CL o se anula el tratamiento explícito de los estados autoionizantes, incluyendo de forma indirecta su influencia en la cinética de poblaciones a través de la fórmula de Burgess para recombinación dielectrónica [133]. Teniendo en cuenta que a baja densidad la corrección por CL es despreciable, las diferencias que se observan

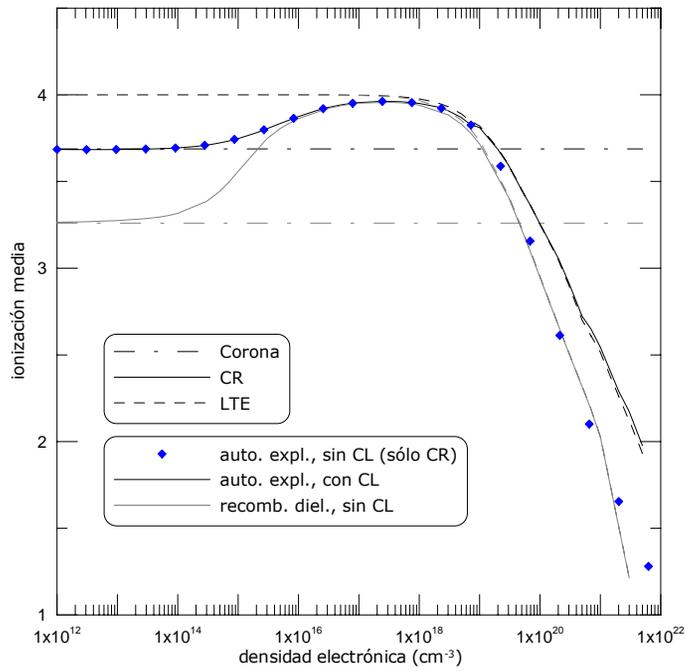


Figura 4.5. Ionización media de un plasma de C frente a la densidad electrónica para $T = 10 \text{ eV}$. Influencia del CL y del tratamiento explícito o no de los estados de autoionización.

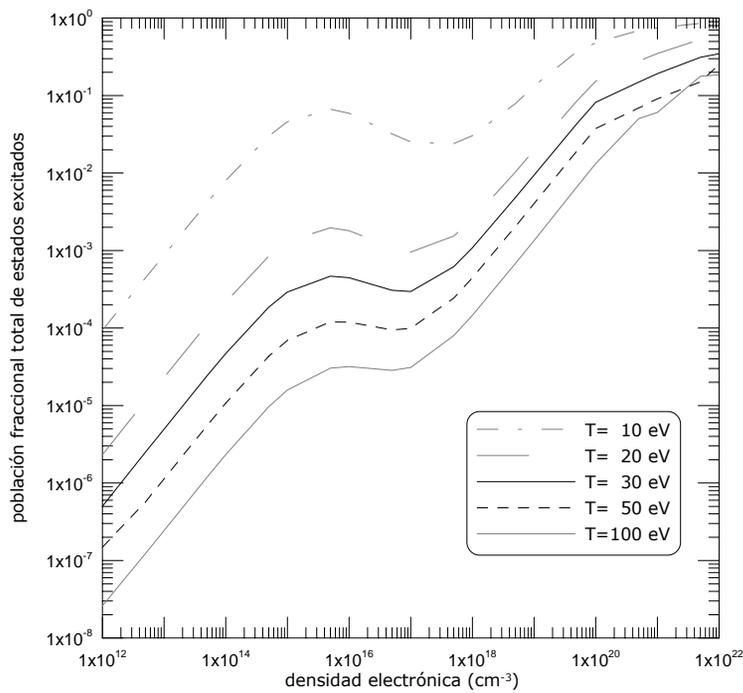


Figura 4.6. Análisis de la acumulación de población en estados excitados de un plasma de C sobre una malla extensa de n_e y diferentes valores de T .

en esta región en los cálculos Corona y CR son debidas exclusivamente al tratamiento explícito o no de los estados autoionizantes. A lo largo de esta tesis incidiremos en numerosas ocasiones en esta cuestión, poniendo de manifiesto la importancia del tratamiento explícito para la realización de estudios cinéticos fiables. En la zona intermedia de densidad la incidencia de estos estados deja de ser significativa. A partir de entonces, para densidades altas, la corrección por CL adquiere un papel preponderante. Para finalizar, en la figura 4.6 mostramos un sencillo análisis acerca la acumulación de población en estados excitados. En particular, calculamos la población fraccional p_{ex} acumulada en el conjunto de todos los estados excitados de cada especie iónica. Esta población se evalúa como $p_{ex} = 1 - \sum_{\zeta} p_{\zeta 0}$, donde $p_{\zeta 0} = N_{\zeta 0}/n_{ion}$ es la población fraccional del estado fundamental $\zeta 0$. Como tendencia global encontramos que la retención de población en los estados excitados es mayor conforme aumenta n_e y disminuye T . Este comportamiento ya había sido observado en un interesante estudio que se hace al respecto del tema en [155]. Estos resultados son de una clara relevancia para la realización y optimización de cálculos espectroscópicos.

4.2 Estudio de plasmas ópticamente delgados

4.2.2 Comparación con datos experimentales

Para ilustrar su capacidad en el estudio de la cinética de poblaciones en plasmas de iones más complejos, mostramos en este apartado la comparación de los resultados obtenidos por ABAKO con las medidas experimentales relativas a un plasma de oro publicadas en [165]. Este trabajo representó la primera y, podríamos decir que prácticamente la única, determinación experimental del balance de carga de un plasma de oro bajo condiciones Corona. El experimento se llevó a cabo en el LLNL, donde se utilizó el dispositivo EBIT-II para crear un plasma de Au en estado estacionario caracterizado por una distribución Maxwell-Boltzmann de electrones libres con $T = 2500 \text{ eV}$ y una densidad electrónica $n_e \approx 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. La distribución de poblaciones iónicas fue inferida a través una detallada comparación de la intensidad de las líneas del espectro de emisión de rayos-X experimental con los cálculos atómicos obtenidos con el código HULLAC. Concretamente, las líneas analizadas se corresponden con las transiciones $5f_{5/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ y $5f_{7/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ del espectro *M-shell* de los iones de Au comprendidos entre el Br-like y Ni-like. Los detalles específicos relativos al procedimiento experimental pueden consultarse en el trabajo ya citado.

	\bar{Z}
experimental [165]	46.8 ± 0.75
RIGEL/MCXSN [165]	49.5
RIGEL/ENRICO [165]	43.7
MIST [165]	42.7
AVERROES [61]	46.4
FLYCHK [91]	48.5
ABAKO	47.2

Tabla 4.25. Comparación de la ionización media experimental de un plasma de Au bajo condiciones Corona con los cálculos de diferentes modelos cinéticos.

Hemos realizado una recopilación de los trabajos conocidos en los que distintos códigos cinéticos contrastan sus resultados con las medidas experimentales publicadas en [165]. Así, la tabla 4.25 muestra la ionización media determinada con ABAKO y el cálculo de cinco modelos más. RIGEL [166] es un código basado en superconfiguraciones, en el que se aplican técnicas Monte Carlo para la determinación de la distribución de estados de carga. Ha sido mayoritariamente utilizado en el estudio de plasmas de alta densidad generados por láser. Con RIGEL se presentan dos tipos de cálculos, correspondientes a dos fuentes distintas de datos atómicos: MCXSN obtiene los coeficientes de tasas para RIGEL a partir de un modelo hidrogenoide de *superceldas*, mientras que ENRICO resuelve explícitamente la ecuación de Dirac los procesos de recombinación radiativa y decaimiento Auger. MIST [167] es un código diseñado para simular el transporte de impurezas en tokamaks

de baja densidad y utiliza un modelo de átomo medio como base para la determinación de la estructura atómica. AVERROES y FLYCHK ya han sido comentados en apartados anteriores.

Los datos que se desprenden de la tabla 4.25 son muy positivos de cara al objetivo perseguido en esta tesis doctoral. Sólo AVERROES y ABAKO dan lugar a un resultado en concordancia con el dato experimental, mientras que el resto de los difieren de éste entre 2 y 4 estados de carga.

En la figura 4.50 se muestra la correspondiente distribución de poblaciones iónicas. Ahora, la contrastación no es tan satisfactoria como en el caso de la ionización media, –evidenciando que cuanto más global sea el carácter una magnitud más sencilla será su predicción–, aunque nuevamente AVERROES y ABAKO son los modelos que mejor describen el comportamiento experimental. Se observa también que el cálculo de AVERROES es algo mejor que el de ABAKO. Si determinamos la desviación de ambas distribuciones respecto a la experimental, resulta 0.35 para AVERROES y 0.44 para ABAKO. No obstante, estas diferencias son hasta cierto punto razonables. Recordemos que AVERROES es un sofisticado código de superconfiguración en el que, además, las tasas de los distintos procesos atómicos radiativos y colisionales son calculadas mediante rigurosos métodos mecanocuánticos. Pero es más, el cálculo llevado a cabo para su comparación con el experimento de la EBIT-II se corresponde con una versión especial del modelo, que se describe en [61]. En ella se establece un costoso proceso de refinamiento de la estructura electrónica de los iones involucrados en el cálculo que se repite hasta alcanzar convergencia en los resultados. El propio autor afirma que este procedimiento es muy exigente desde el punto de vista computacional –tanto en los requisitos de memoria como en tiempo de cálculo– y que no ha sido pensado para la realización de cálculos a gran escala. Por otro lado, la distribución de poblaciones que se obtiene con FLYCHK, el código de características más parecidas a ABAKO, se aleja con claridad de la experimental, con una desviación igual a 0.57. Estas circunstancias refuerzan la valía de los resultados cosechados por ABAKO, donde no ha sido necesaria ninguna modificación para reproducir cualitativamente los resultados experimentales. Además, hay que decir que para este caso ABAKO incluye aproximadamente 42000 configuraciones relativistas distribuidas entre los iones que van del Kr al Ni-like, por lo que, a pesar de su relativa sencillez, es capaz de manejar suficiente información para un análisis detallado de la cinética de poblaciones. Sobre un PC convencional, el cálculo se lleva a cabo en unas pocas horas.

Asimismo, estos resultados sirven para confirmar la validez del procedimiento que se ha implementado en ABAKO para el cálculo de los coeficientes de tasa de autoionización y captura electrónica. En [61] se subraya la importancia que tienen los estados muy excitados en un cálculo de baja densidad como éste, ya que abren numerosos canales de autoionización/captura electrónica que son los que acaban controlando el balance de poblaciones iónicas. Esto justamente es lo que observamos con ABAKO. Como muestra de ello, en la tabla 4.26 presentamos un cálculo para As-like de la tasa total de ionización y recombinación, pesadas por la población fraccional de los

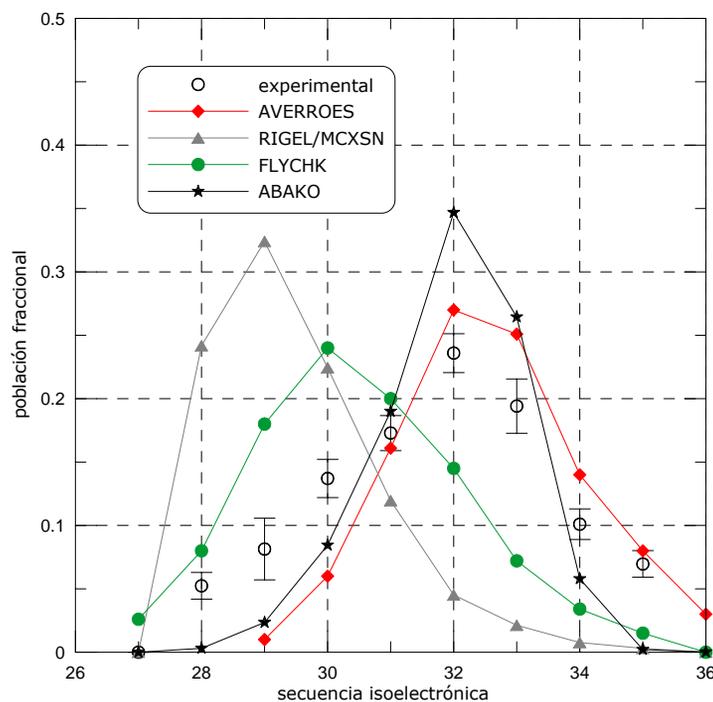


Figura 4.50. Comparación de la distribución de estados de carga de un plasma de Au con $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 2500 \text{ eV}$ obtenida por distintos modelos cinéticos, entre ellos ABAKO, y la determinada experimentalmente en la EBIT-II del LLNL.

estados iniciales y sumadas sobre todos los estados finales. Se indican también las contribuciones parciales a dichas tasas debidas a ionización colisional/recombinación a tres cuerpos, fotoionización/recombinación radiativa y autoionización/captura electrónica. El predominio de esta última pareja de procesos queda claramente demostrado.

	ion. tot. (s^{-1})	col.	foto.	auto.	rec. tot. (s^{-1})	3-c.	rad.	cap.
AVERROES	256.16	0.123	0.000	0.876	244.91	0.000	0.024	0.976
ABAKO	166.50	0.157	0.000	0.843	82.90	0.000	0.018	0.982

Tabla 4.26. Tasas totales de ionización y recombinación del ion As-like y contribución fraccional de cada proceso atómico. Se muestran los cálculos de AVERROES y ABAKO.

Por último, en la figura 4.51 se muestra una comparación entre el espectro de emisión *M-shell* experimental y el obtenido por ABAKO en el rango que va de los 3100 a los 3500 eV. Para este último cálculo la intensidad *en crudo* ha sido suavizada mediante su convolución con un perfil gaussiano, con el objeto de tener en cuenta la resolución espectral, estimada en $\Delta E \approx 5 \text{ eV}$ [165]. Hay diferencias manifiestas entre ambos espectros, sin embargo, no es objetivo de este trabajo

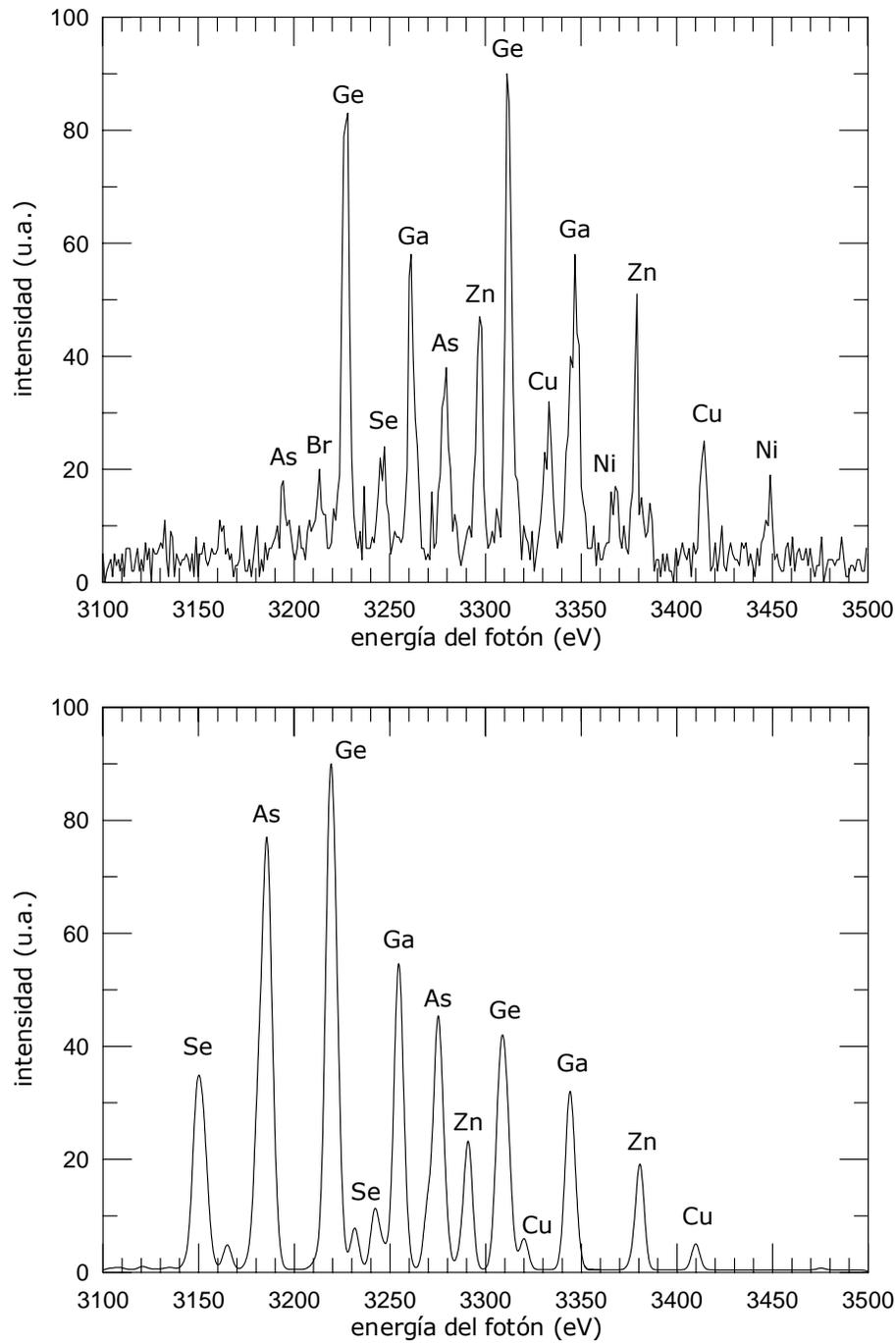


Figura 4.51. Espectro de emisión de un plasma de Au con $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ y $T = 2500 \text{ eV}$. Arriba se muestra el resultado experimental de la EBIT-II, abajo la simulación de ABAKO.

la fiel reproducción de los rasgos espectrales de un plasma con iones complejos como éste. Esta tarea no está siquiera al alcance de los modelos más sofisticados. Aún así, teniendo presente la sencillez del modelo atómico utilizado en ABAKO, la estimación espectral que hemos obtenido no es en absoluto despreciable. En el espectro experimental aparecen dos líneas asociadas con cada ion que se corresponden con las transiciones $5f_{5/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ y $5f_{7/2} \rightarrow 3d_{5/2}$. La primera de ellas es en cada caso la de mayor energía. Estos rasgos se manifiestan también en el caso de ABAKO. Asimismo, se distingue en un desplazamiento de las energías de transición unos 10 eV hacia valores menores, algo que, por otro lado, es un error aceptable para un modelo de partícula independiente. Las discrepancias en las intensidades de cada línea se explican simplemente con el análisis de la distribución de poblaciones iónicas. Por ejemplo, en el caso de ABAKO cobran mucha importancia las líneas de As-like, particularmente la que se sitúa en ≈ 3185 eV. Esto parece justificarse atendiendo a la abundancia de este ion en el plasma. La población fraccional de As-like es 0.26 en ABAKO y 0.19 en el experimento. Asimismo, en el espectro experimental aparecen por ejemplo líneas de Br y Ni-like, inapreciables en la estimación de ABAKO, ya que la población correspondiente es prácticamente despreciable.

4.3 Estudio de plasmas ópticamente gruesos

En la aproximación de medio ópticamente delgado, los fotones no interactúan con los iones del plasma. Sin embargo, cuando las dimensiones de éste son considerables o cuando la densidad es alta, es muy probable que un fotón con una energía próxima a la de alguna transición del espectro ligado-ligado se encuentre con un ion en el estado más bajo de dicha transición y sea absorbido antes de escapar del plasma. Estos *efectos de opacidad* alteran el balance poblacional entre los distintos niveles atómicos y modifican las propiedades espectrales del plasma. Así, el objetivo de este apartado es validar las herramientas de las que dispone ABAKO para el tratamiento de dichos efectos. En primer lugar, contrastaremos el modelo de transporte radiativo desarrollado sobre un sistema simple como es el átomo de dos-niveles y para el cual existe solución exacta. Después, trataremos la influencia de la radiación bajo la aproximación de plasma homogéneo, para mostrar su utilidad mediante la contrastación con datos experimentales de la bibliografía. Finalmente, se expondrá la capacidad del modelo desarrollado para abordar el problema del transporte de radiación en medios no-homogéneos, con la presencia de gradientes espaciales de densidad y temperatura.

4.3.1 El átomo de dos niveles

Avrett y Hummer presentaron en [168] la solución exacta al problema del transporte radiativo en estado estacionario para un átomo ideal de dos-niveles en un medio plano-paralelo finito o semi-infinito y condiciones uniformes de temperatura y densidad. El trabajo, que se desarrolla

en un contexto de marcado interés astrofísico, es altamente didáctico. Sus principales resultados no se aplican a ninguna situación concreta, sino que los autores se centran en la comprensión y explicación detallada de la física del transporte de radiación.

El átomo de dos-niveles resulta pues un excelente y obligado banco de pruebas para todo modelo de transporte de nuevo desarrollo, que pretenda aplicarse después sobre un átomo con muchos niveles. En [97–100] se comparan algunos de los modelos de transporte radiativo que mencionamos en la sección 3.5.2 con el trabajo de Avrett y Hummer. Nuestro objetivo en este apartado es hacer lo propio con la idea que hemos desarrollado en ABAKO.

Cuando trabajamos con un átomo de dos niveles energéticos, superior u e inferior l , bajo la hipótesis de redistribución completa, el sistema de ecuaciones de tasas en estado estacionario (3.144) se reduce a

$$N_l(\mathbf{r}) [\mathcal{B}_{l \rightarrow u}^a J_{ul}(\mathbf{r}) + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{E}_{l \rightarrow u}(\mathbf{r})] - N_u(\mathbf{r}) [\mathcal{B}_{u \rightarrow l}^e J_{ul}(\mathbf{r}) + \mathcal{A}_{u \rightarrow l} + n_e(\mathbf{r}) \mathcal{D}_{u \rightarrow l}(\mathbf{r})] = 0. \quad (4.20)$$

En el caso que nos ocupa es habitual reescribir las ecuaciones de tasas en términos de la función fuente $S_{ul}(\mathbf{r})$ y el *parámetro de extinción* de fotones $\epsilon(\mathbf{r})$, dado por

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \frac{n_e(\mathbf{r}) \mathcal{D}_{u \rightarrow l}(\mathbf{r})}{n_e(\mathbf{r}) \mathcal{D}_{u \rightarrow l}(\mathbf{r}) + \mathcal{A}_{u \rightarrow l} [1 - e^{-E_{ul}/T(\mathbf{r})}]^{-1}}, \quad (4.21)$$

que representa una medida de la importancia relativa entre la tasa de desexcitación colisional y la de decaimiento radiativo.

De esta manera, es posible establecer una formulación más general del problema, eliminando la necesidad de calcular los coeficientes de tasas para una transición, temperatura y densidad particulares. Así, recordando que la función fuente se expresa como

$$S_{ul}(\mathbf{r}) = \frac{N_u(\mathbf{r}) \mathcal{A}_{u \rightarrow l}}{N_l(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{l \rightarrow u}^a - N_u(\mathbf{r}) \mathcal{B}_{u \rightarrow l}^e} \quad (4.22)$$

y utilizando la ecuación (4.20) junto con la relación existente entre las tasas de excitación y desexcitación colisional, $\mathcal{E}_{l \rightarrow u} = \mathcal{D}_{u \rightarrow l} \frac{g_u}{g_l} e^{-E_{ul}/T}$, se llega a una conocida expresión para la función fuente del sistema de dos-niveles [169, 170],

$$S_{ul}(\mathbf{r}) = [1 - \epsilon(\mathbf{r})] J_{ul}(\mathbf{r}) + \epsilon(\mathbf{r}) B(\mathbf{r}), \quad (4.23)$$

donde $B(\mathbf{r}) = B[T(\mathbf{r})]$ es la función de Planck a la temperatura $T(\mathbf{r})$.

Ahora bien, siguiendo el formalismo utilizado en ABAKO, la ecuación (3.155) permite expresar la intensidad media de radiación $J_{ul}(\mathbf{r})$ en términos de la función fuente $S_{ul}(\mathbf{r})$ y el factor de escape $\Lambda_{ul}(\mathbf{r})$,

$$J_{ul}(\mathbf{r}) = [1 - \Lambda_{ul}(\mathbf{r})] S_{ul}(\mathbf{r}). \quad (4.24)$$

Sustituyendo la ecuación anterior en (4.23) se obtiene

$$[1 + \Lambda_{ul}(\mathbf{r}) \eta(\mathbf{r})] S_{ul}(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r}), \quad (4.25)$$

siendo $\eta(\mathbf{r}) = \frac{1-\epsilon(\mathbf{r})}{\epsilon(\mathbf{r})}$.

Si en lugar de trabajar con la variable continua \mathbf{r} , dividimos el medio en N_C celdas, es posible escribir una expresión similar a la anterior para cada zona q ,

$$(1 + \Lambda_{ul}^q \eta^q) S_{ul}^q = B(T^q). \quad (4.26)$$

Por otro lado, habíamos obtenido para el factor del escape la expresión

$$\Lambda_{ul}^q = C_{ul}^q - \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{S_{ul}^p}{S_{ul}^q} C_{ul}^{pq}, \quad (4.27)$$

donde los coeficientes de acoplamiento radiativo C_{ul}^q y C_{ul}^{pq} vienen dados por (3.181) y (3.182), respectivamente.

La sustitución de (4.27) en (4.26) da lugar a

$$(1 + \eta^q C_{ul}^q) S_{ul}^q - \epsilon'^q \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} C_{ul}^{pq} S_{ul}^p = B^q, \quad (4.28)$$

que representa un sistema de ecuaciones lineales para los valores de la función fuente S_{ul}^q en cada celda. Como los coeficientes de acoplamiento radiativo son independientes de las variables desconocidas S_{ul}^q , el modelo de transporte radiativo desarrollado en ABAKO transforma el problema del átomo de dos-niveles en un sistema de ecuaciones lineales. Además, teniendo presente que los detalles del transporte radiativo asociados a la geometría del medio fueron resueltos de forma exacta, el sistema (4.28) es, en el límite $N_C \rightarrow \infty$, una representación de la solución exacta del problema del átomo de dos-niveles.

Para confirmar esto último, hemos contrastado los resultados arrojados por ABAKO con los de Avrett y Hummer, que en su momento fueron obtenidos bajo condiciones físicas constantes. Conviene tener presente que, cuando la temperatura es constante, $T^q = T$ para toda celda q , $B(T)$ representa simplemente un factor de escala para la intensidad y sólo es necesario estudiar la dependencia con ϵ , que a su vez es también constante en todo el medio. Además, al existir una única línea, es posible especificar una posición determinada dentro de la lámina a través del espesor óptico de la línea en dicha posición. Por este motivo, es habitual analizar las soluciones del átomo de dos-niveles utilizando τ como variable independiente, en lugar de la coordenada espacial z .

En la figura 4.52 se muestran los resultados obtenidos para la función fuente, en el caso $B = 1$ –o equivalentemente S/B –, en un medio con espesor total $\tau_{tot} = 10^4$ y diferentes valores de ϵ . Se representa sólo hasta $\tau_{tot}/2$ porque el problema es simétrico respecto al plano situado en la mitad del medio. Se asume que el perfil de línea es de tipo Doppler. Este hecho facilita la evaluación numérica de la integral frecuencial que aparece en las expresiones de los coeficientes C_{ul}^q y C_{ul}^{pq} , ya que la dependencia exponencial del perfil permite la utilización de la fórmula de cuadratura de Gauss-Hermite. Realizamos un estudio previo acerca de la evaluación numérica de estas integrales y

encontramos que con una fórmula de 20 puntos el error no supera el 0.1%. En cualquier caso, para garantizar que nuestra comparación con la solución exacta de Avrett-Hummer no dependiera de los resultados numéricos de las integrales sobre el perfil de línea, éstas fueron determinadas con una fórmula de cuadratura de 40 puntos, lo que, según nuestro estudio, reduce el error a valores menores que el 0.01%. Por otro lado, los cálculos de ABAKO que se muestran en la figura se han llevado a cabo subdividiendo la lámina en 3000 zonas distribuidas logarítmicamente, aunque por razones de claridad en la representación, en ésta aparece un número de puntos mucho menor. Las celdas más próximas a la frontera del medio son las de menor espesor óptico, con la intención de recoger mejor la rápida variación de la función fuente en esta zona. Como puede verse, la confrontación con el trabajo de Avrett-Hummer es altamente satisfactoria, ya que los resultados obtenidos por ABAKO reproducen con gran precisión la solución exacta en todo el rango de valores de ϵ analizado.

La interpretación física de estos resultados ha sido comentada en detalle en [168]. Cuando $\epsilon \ll 1$, la tasa de emisión espontánea es mucho mayor que la de desexcitación colisional. Así, cuando un fotón es absorbido, hay una alta probabilidad de que sea reemitido por decaimiento espontáneo, recorriendo una distancia del orden de su camino libre medio antes de ser reabsorbido. Este proceso se repite numerosas ocasiones hasta que el fotón escapa del plasma o es *destruido*. La *destrucción* tiene lugar cuando la energía del fotón se transforma en energía térmica del plasma a través de una desexcitación colisional. Para un espesor óptico fijo, como ocurre en la figura 4.52, S se aleja más del resultado propio de la situación LTE, donde $S = B$, conforme más pequeño es el valor de ϵ , ya que disminuye la probabilidad de desexcitación colisional y aumentan las posibilidades de que el fotón escape del plasma. Asimismo, cuando $\epsilon \rightarrow 1$, la tasa de decaimiento espontáneo es despreciable frente a la de desexcitación colisional y la función fuente puede llegar a alcanzar el valor de equilibrio B .

Para un valor dado del parámetro de extinción, la función fuente se aproxima a B cuando el espesor total del medio aumenta. Por el contrario, cuando τ_{tot} es pequeño, los fotones pueden escapar con facilidad a través de la frontera de la lámina, por lo que S es siempre menor que B .

Como puede deducirse de estos comentarios, existe una ligadura entre ϵ y τ_{tot} que determina el comportamiento de la función fuente. En [168] se dice que el medio es *efectivamente grueso* cuando la función fuente llega a *termalizar* y entonces $S \approx B$. En este caso, tratando con un medio de dimensión finita, la función fuente resultante muestra un comportamiento muy similar a la del caso semi-infinito desde el borde hasta la mitad de la lámina. Por el contrario, cuando no se alcanza la situación de equilibrio y claramente $S < B$ para todo τ , el medio es *efectivamente delgado*. La relación entre τ_{tot} y ϵ que permite establecer tal clasificación depende de la forma del perfil de

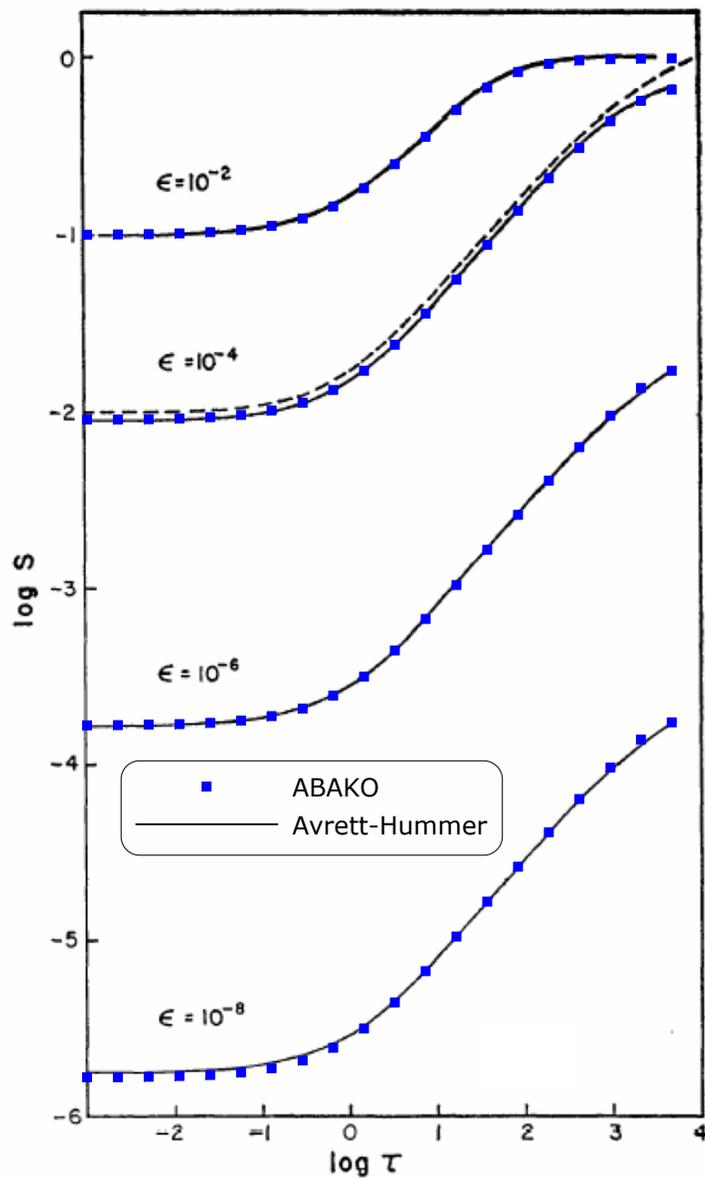


Figura 4.52. Función fuente para $B = 1$, espesor total $\tau_{tot} = 10^4$ y $\epsilon = 10^{-8}$, 10^{-6} , 10^{-4} y 10^{-2} . Se muestra la comparación entre los resultados obtenidos con ABAKO y el trabajo de Avrett-Hummer. La línea discontinua indica la solución exacta para un medio semi-infinito con $\epsilon = 10^{-4}$.

línea. Así, puede considerarse que el medio es efectivamente grueso cuando

$$\text{Doppler: } \epsilon\tau_{tot} \gtrsim 1, \quad (4.29a)$$

$$\text{Lorentz: } \epsilon\tau_{tot}^{1/2} \gtrsim 1, \quad (4.29b)$$

$$\text{Voigt: } \epsilon(\tau_{tot}/a)^{1/2}, \quad 100/\tau_{tot} < a < 0.1. \quad (4.29c)$$

Si estas desigualdades se satisfacen en el sentido opuesto, el medio es *efectivamente delgado*.

La comparación de los resultados de Avrett-Hummer con los de ABAKO para un valor fijo $\epsilon = 10^{-4}$ y un amplio rango de espesores τ_{tot} se muestra en la figura 4.53. En esta ocasión, además, se incluyen cálculos utilizando un perfil Voigt. El estudio análogo para perfil Lorentz aparece en la figura 4.54.

En relación con el procedimiento de cálculo de los coeficientes de acoplamiento radiativo, hay que decir que al trabajar con un perfil tipo Voigt o Lorentz la evaluación de la integral frecuencial es algo más costosa, ya que la dependencia de cualquiera de estas funciones con la frecuencia impide la utilización de una fórmula de cuadratura sencilla. Por esta razón, en estos casos dividimos el intervalo de integración en tres tramos de la manera siguiente,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\nu)G[\phi(\nu)]d\nu = 2 \int_0^{\infty} \dots = 2 \left\{ \int_0^{2FWHM} \dots + \int_{2FWHM}^{\nu_{\infty}} \dots + \int_{\nu_{\infty}}^{\infty} \dots \right\}, \quad (4.30)$$

donde ν es la frecuencia del fotón medida respecto al centro de la línea y $G[\phi(\nu)]$ representa el funcional que aparece en el integrando de las expresiones de los coeficientes C_{ul}^q o C_{ul}^{pq} . El primer tramo de integración recoge la contribución debida a la parte central o *core* del perfil, el segundo tramo representa la contribución debida a las alas y con el último tramo se determina la región de alta frecuencia. La anchura a mitad de altura $FWHM$ viene dada por⁶

$$FWHM = \frac{\Gamma}{2\pi}, \quad \text{para perfil Lorentz,} \quad (4.31)$$

$$FWHM \approx 2a + 1.7, \quad \text{para perfil Voigt.} \quad (4.32)$$

Para la evaluación numérica del primer y segundo tramo utilizamos la regla del trapecio con 100 y 400 puntos, respectivamente, lo que asegura un error máximo del 0.01 % en los casos estudiados.

A partir de ν_{∞} tanto ϕ como G se aproximan por sus expresiones asintóticas para $\nu \rightarrow \infty$, de tal manera que el tercer tramo de integración puede resolverse analíticamente. La frecuencia ν_{∞} se calcula como

$$\nu_{\infty} = \text{máx} \left(10FWHM, 100\sqrt{a'\Delta\tau^q/\pi} \right), \quad (4.33)$$

siendo $a' = \Gamma/2\pi$ para perfil Lorentz y $a' = a$ para el caso Voigt.

Como puede verse, en todos los casos, el acuerdo entre ABAKO y la solución exacta es excelente. Estos resultados son de una gran importancia, ya que, por un lado, ponen de manifiesto

⁶Ver apéndice C.

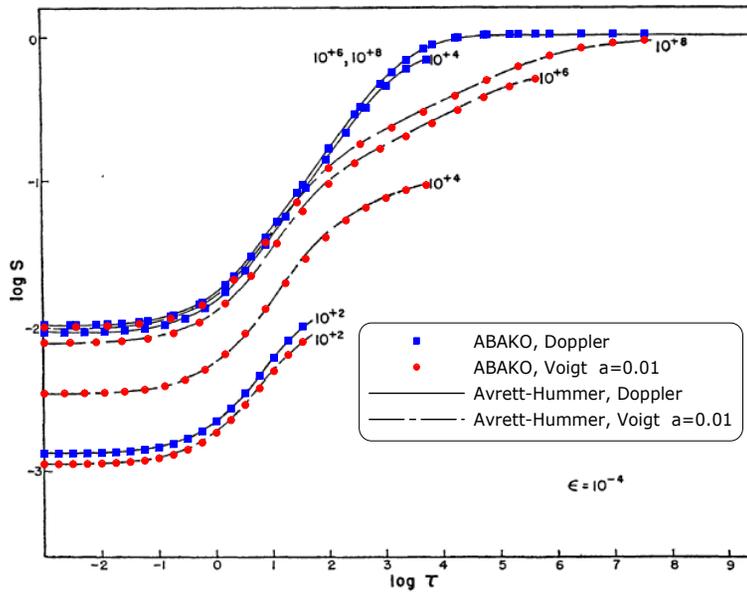


Figura 4.53. Función fuente para perfil Doppler y Voigt ($a = 0.01$), con $B = 1$, $\epsilon = 10^{-4}$ y espesores totales $\tau_{tot} = 10^2, 10^4, 10^6$ y 10^8 . Comparación entre los resultados obtenidos con ABAKO y la solución exacta de Avrett-Hummer.

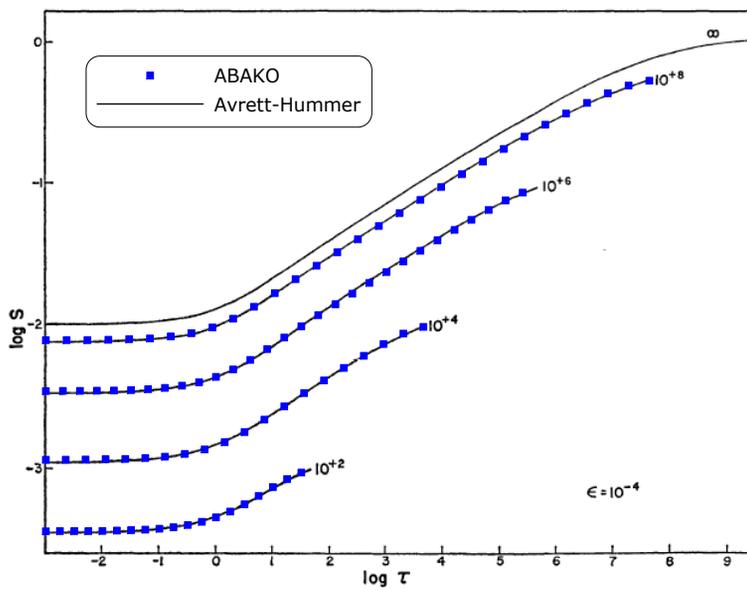


Figura 4.54. La misma representación anterior, pero utilizando un perfil Lorentz.

que ABAKO puede tratar sin problemas los efectos que el ensanchamiento natural y colisional introducen en el transporte de líneas y, por otro, confirman en términos generales la validez del modelo propuesto.

Nos resta comentar el comportamiento de la función fuente observado en las figuras 4.53 y 4.54. Para ello conviene tener presente los criterios (4.29) que permiten calificar un medio como efectivamente grueso o delgado.

Fijémonos en la figura 4.53. Para $\tau_{tot} = 10^2$ las funciones fuentes para los perfiles Doppler y Voigt son muy similares, ya que en este caso la transferencia radiativa ocurre para frecuencias en el core del perfil Doppler. Para $\tau_{tot} = 10^6$ y $\tau_{tot} = 10^8$, la función fuente Voigt sigue el comportamiento Doppler para valores pequeños de τ y luego se aleja, ya que la transferencia pasa a las alas del perfil. Para $\tau_{tot} = 10^4$, las funciones fuente Doppler y Voigt difieren considerablemente sobre todo el rango de valores de τ . Sin embargo, de las relaciones 4.29 vemos que, para perfil Doppler, el medio es efectivamente grueso, $\epsilon\tau_{tot} = 1$, mientras que en el caso Voigt es efectivamente delgado, $\epsilon(\tau_{tot}/a)^{1/2} = 0.1$, lo que justifica tal diferencia. Con $\tau_{tot} = 10^2$, el medio es efectivamente delgado para ambos perfiles y con $\tau_{tot} = 10^6$, 10^8 es efectivamente grueso.

Las funciones fuente para perfil Lorentz, que aparecen en la figura 4.54, proporcionan un límite inferior para S , conforme el ensachamiento colisional es cada vez más importante. Para $\tau_{tot} = 10^8$ la función fuente se aproxima a la del caso semi-infinito, ya que entramos en la región efectivamente gruesa, $\epsilon^2\tau_{tot} = 1$. En el caso del perfil Lorentz, la transición entre los casos efectivamente delgado y grueso es extremadamente gradual.

En resumen, con los resultados que acabamos de exponer, se comprueba que el modelo de transporte radiativo de ABAKO reproduce con gran precisión los resultados de Avrett-Hummer para diferentes tipos de perfil –Doppler, Voigt y Lorentz– y en amplio rango de valores del espesor τ_{tot} y el parámetro de extinción ϵ . Además, como adelantábamos al comienzo de este apartado, ABAKO converge adecuadamente a la solución exacta al incrementar el número de celdas en las que se subdivide el medio. En este sentido, las ecuaciones de ABAKO en el límite $N_C \rightarrow \infty$ constituyen una representación formal alternativa de la solución de Avrett-Hummer.

Sin embargo, nuestro objetivo último es aplicar el modelo desarrollado para el tratamiento de los efectos de opacidad en un plasma constituido por iones complejos. En esta situación, no trabajaremos con una única línea sino con miles o cientos de miles. Si además llevamos a cabo una partición muy fina del medio, el problema se vuelva completamente inabordable desde el punto de vista computacional. Por tanto, antes de tratar el transporte radiativo en el átomo multielectrónico y con el objetivo de hallar posibles simplificaciones del problema, es conveniente analizar de qué manera se deteriora la solución del átomo de dos-niveles cuando disminuimos el número de celdas, o dicho de otra forma, cuántas celdas son necesarias para obtener una solución aproximada con un margen de error aceptable.

Perfiles	Doppler, Voigt (a=0.01, 0.001), Lorentz
N_C	20, 40, 100, 200, 600, 3000
τ_{tot}	1, 10, 10^2 , 10^4 , 10^6 , 10^8
ϵ	10^{-8} , 10^{-6} , 10^{-4} , 10^{-2} , 0.1, 0.5

Tabla 4.27. Datos relativos al estudio de la convergencia de la función fuente del átomo de dos-niveles a la solución exacta al variar el número de celdas.

En este sentido hemos llevado a cabo un exhaustivo análisis de las propiedades de convergencia de la función fuente S a la solución exacta conforme aumentamos el número de celdas N_C . El estudio se ha realizado para los tres tipos de perfil habituales, en un amplio rango de valores de τ_{tot} , desde 1 a 10^8 , y ϵ , desde 10^{-8} hasta 0.5. Los datos concretos se indican en la tabla 4.27.

A modo de ejemplo, en la figura 4.55 presentamos los cálculos realizados con perfil Doppler para un medio de espesor total $\tau_{tot} = 10^4$ y diferentes valores de ϵ . En todos los casos, la curva etiquetada como solución exacta S^{ex} se corresponde con el cálculo obtenido al subdividir el medio en 3000 zonas. En términos generales, las mayores desviaciones del resultado exacto ocurren en la región de transición hacia la termalización. Para τ pequeño el error es prácticamente constante para cada valor de N_C , mientras que en la región termalizada donde $S \approx B$, el error cometido es prácticamente inapreciable, incluso cuando el número de celdas es pequeño. La convergencia mejora en todo el rango de valores de τ cuando el parámetro de extinción de fotones ϵ aumenta. Así, para $\epsilon = 10^{-6}$, el cálculo con $N_C = 20$ es hasta un factor 2 mayor que el cálculo exacto y son necesarias 600 zonas para lograr un error por debajo del 10 % en todos los puntos del medio. En cambio, con $\epsilon = 10^{-4}$, bastan 100 zonas, y cuando $\epsilon = 0.5$, el cálculo con sólo 20 zonas no supera el 4 % de error.

Por otro lado, antes comentábamos nuestro interés en aplicar el modelo de transporte radiativo desarrollado en ABAKO sobre iones de muchos niveles y, más concretamente, sobre plasmas de laboratorio, típicos por ejemplo en los experimentos de confinamiento magnético o inercial. Ahora bien, de acuerdo a la información que hemos extraído de la figura 4.55, son necesarias al menos 100 celdas para, en términos generales, simular el transporte de una línea con un margen de error en torno al 10 %. Sin embargo, un cálculo con 100 celdas y miles de niveles elevaría excesivamente el coste computacional.

Afortunadamente, un valor $\tau_{tot} = 10^4$ es poco habitual en un plasma de laboratorio. En estos casos, el espesor suele ser como máximo de orden $\tau_{tot} \approx 10^2 - 10^3$, mientras que el límite inferior del parámetro de extinción se sitúa en $\epsilon \approx 10^{-4}$. Conviene entonces ilustrar las propiedades de convergencia del modelo en este tipo de situaciones. Así, en la figura 4.56 mostramos los resultados obtenidos para un valor fijo $\epsilon = 10^{-4}$ y espesores totales $\tau_{tot} = 1, 10$ y 100. Además de la solución

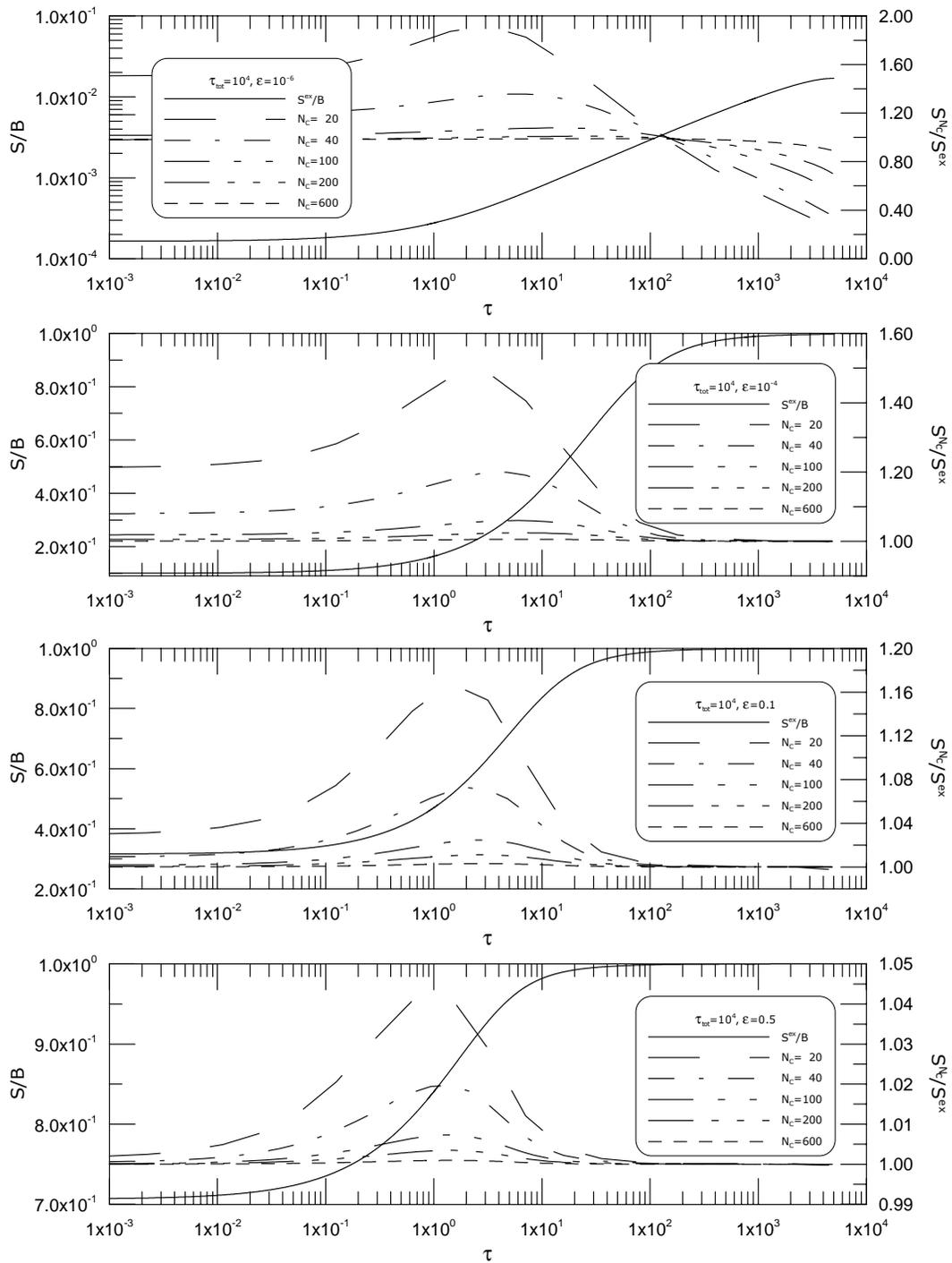


Figura 4.55. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\tau_{tot} = 10^4$ y distintos valores de ϵ . Se ilustra la convergencia de ABAKO a la solución exacta a medida que se incrementa el número de celdas. Préstese atención a los cambios en las escalas verticales.

exacta S^{ex} —considerada una vez más como el cálculo con 3000 celdas— aparece el resultado obtenido al utilizar una única celda, S^1 . Esto tiene como objetivo dar una idea del error cometido al tratar los efectos de opacidad en un plasma con condiciones físicas constantes usando la técnica del factor de escape, esto es, bajo la aproximación de plasma homogéneo. Como vemos, el cálculo con una celda resulta una aproximación razonable sólo cuando τ_{tot} es pequeño. El resultado lógicamente empeora cuando, al crecer τ_{tot} , se amplía también el rango de variación de la función fuente. Así, para $\tau_{tot} = 1$ el error medio se sitúa en el 3%, para $\tau_{tot} = 10$ alcanza el 20% y cuando $\tau_{tot} = 100$ crece hasta el 48%. Por otro lado, los resultados con $N_C = 20$ están dentro de un margen de error medio del 2% para $\tau_{tot} \leq 10$ y del 10% cuando $\tau_{tot} \leq 100$. Con $N_C = 40$ se asegura un error menor que el 2% en todos los casos.

Como dijimos, el valor $\epsilon = 10^{-4}$ representa aproximadamente una cota mínima del parámetro de extinción en plasmas de laboratorio y la gran mayoría de las líneas suelen tener un valor de ϵ asociado varios órdenes de magnitud mayor. En lo que respecta a nuestro estudio, este hecho ratifica la aplicabilidad del modelo desarrollado, puesto que sus propiedades de convergencia mejoran cuando ϵ aumenta. Esto es lo que ponemos de manifiesto en la figura 4.57, donde se presentan los resultados obtenidos para $\epsilon = 0.5$ y los mismos espesores anteriores. Ahora, el cálculo con una única zona proporciona ya una aproximación aceptable con un error medio inferior al 5% en todos los casos, la utilización de 20 celdas garantiza un error medio por debajo del 1.5%, mientras que con 40 celdas el error desciende hasta el 0.9%.

Así pues, el estudio que hemos realizado nos permite concluir que con valores del espesor total y del parámetro de extinción típicos de plasmas de fusión, basta una partición del medio de aproximadamente $N_C = 40$ zonas para resolver con gran precisión el problema del transporte radiativo en el átomo de dos-niveles. En términos generales, una división en la que el espesor óptico de cada zona q satisfaga $\Delta\tau^q < 5$ parece suficiente para obtener una estimación bastante aceptable de la solución. Este resultado es muy interesante, ya que una discretización de estas características permite abordar el transporte de líneas en plasmas con iones complejos.

El estudio de la convergencia a la solución exacta en el átomo de dos-niveles cuando se emplea un perfil Voigt o Lorentz muestra un comportamiento muy similar al caso Doppler, sin que se modifiquen las principales conclusiones que aquí se han expuesto. Por esta razón, hemos creído innecesario incluir comentarios específicos al respecto.

Por último, para terminar esta sección, sí es importante destacar que ABAKO puede competir sin ninguna dificultad con otros modelos de transporte radiativo propuestos en la literatura. En este sentido, como ya hemos expuesto en alguna ocasión en esta memoria, uno de los modelos más conocidos y utilizados es el propuesto por Apruzese *et al.* [97]. Pues bien, en las figuras 4.58 y 4.59 se muestra una comparativa entre los resultados publicados por Apruzese y ABAKO en el cálculo de la función fuente del sistema de dos-niveles para diferentes valores del espesor óptico

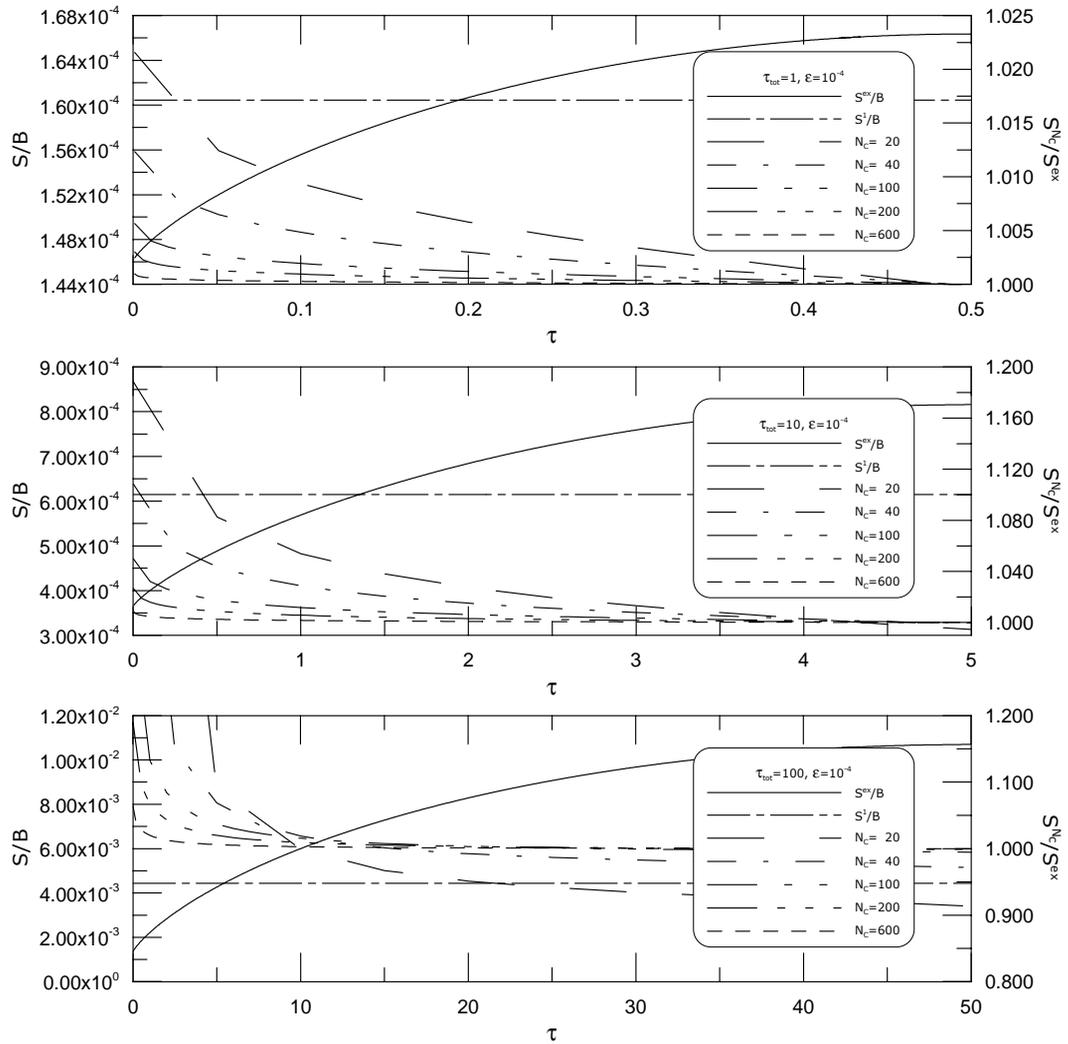


Figura 4.56. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\epsilon = 10^{-4}$ y distintos valores de τ_{tot} , típicos en plasmas de laboratorio. Se ilustra la convergencia de ABAKO a la solución exacta a medida que se incrementa el número de celdas. Préstese atención a los cambios en las escalas verticales.

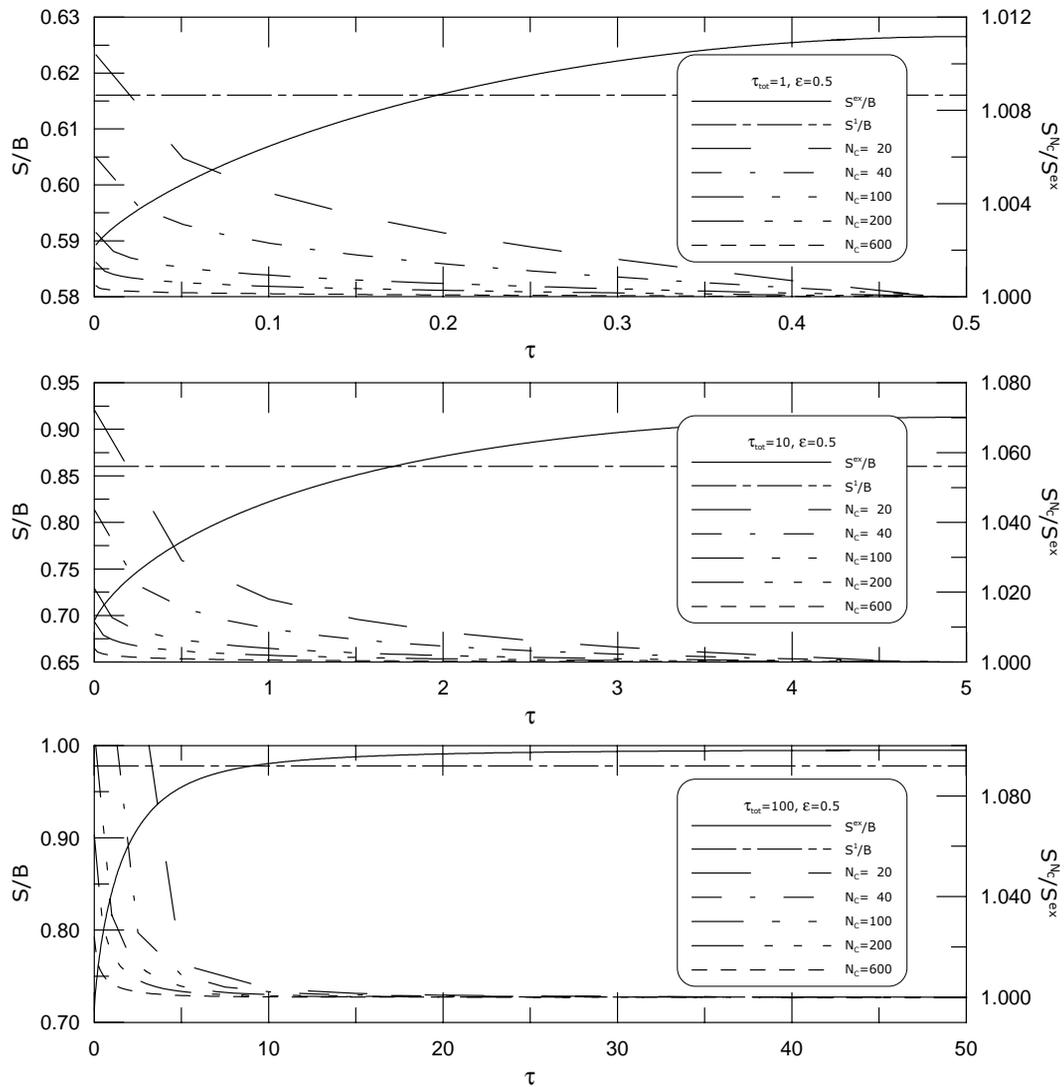


Figura 4.57. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\epsilon = 0.5$ y distintos valores de τ_{tot} , típicos en plasmas de laboratorio. Se ilustra la convergencia de ABAKO a la solución exacta a medida que se incrementa el número de celdas. Préstese atención a los cambios en las escalas verticales.

y el parámetro de extinción. Un análisis detallado de las figuras nos llevaría a la conclusión de que, en términos generales, el error cometido por ABAKO es ligeramente inferior al cometido por Apruzese. En particular, en el caso $\tau_{tot} = 10^2$, característico de plasmas de laboratorio, el resultado de ABAKO es claramente más exacto.

A la vista de estos resultados, puede parecer que ABAKO no representa una mejora especialmente significativa respecto a otras propuestas. Sin embargo, es importante subrayar que, como afirma el propio autor [98], la principal desventaja del modelo de Apruzese radica en que sus expresiones analíticas de la probabilidad de escape sólo son válidas bajo condiciones físicas uniformes. En presencia de gradientes de densidad y/o temperatura, la eficacia del modelo se deteriora considerablemente y la única manera de reestablecerla es llevar a cabo nuevos ajustes para cada situación particular, una cuestión que evidentemente resulta muy poco práctica y de dudosa aplicabilidad. Por el contrario, el modelo desarrollado en ABAKO es directamente aplicable en condiciones variables de densidad y temperatura y si las comparaciones se han restringido a las que mostramos en este apartado es debido al limitado rango de validez del modelo de Apruzese.

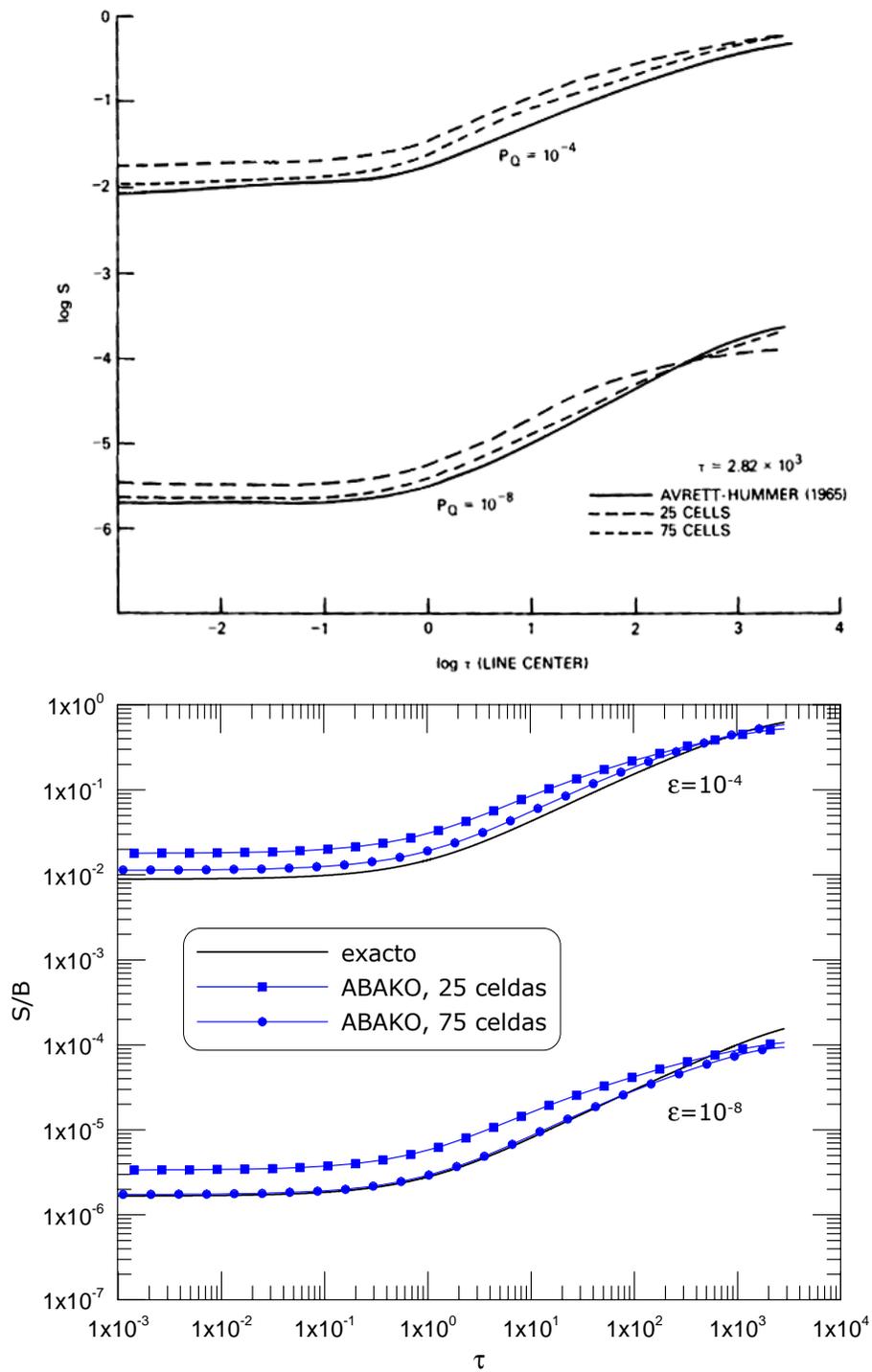


Figura 4.58. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\tau_{tot} = 10^4$ y $\epsilon = 10^{-4}, 10^{-8}$. Se muestra una comparación entre el modelo de Apruzese *et al.* (arriba) y ABAKO (abajo).

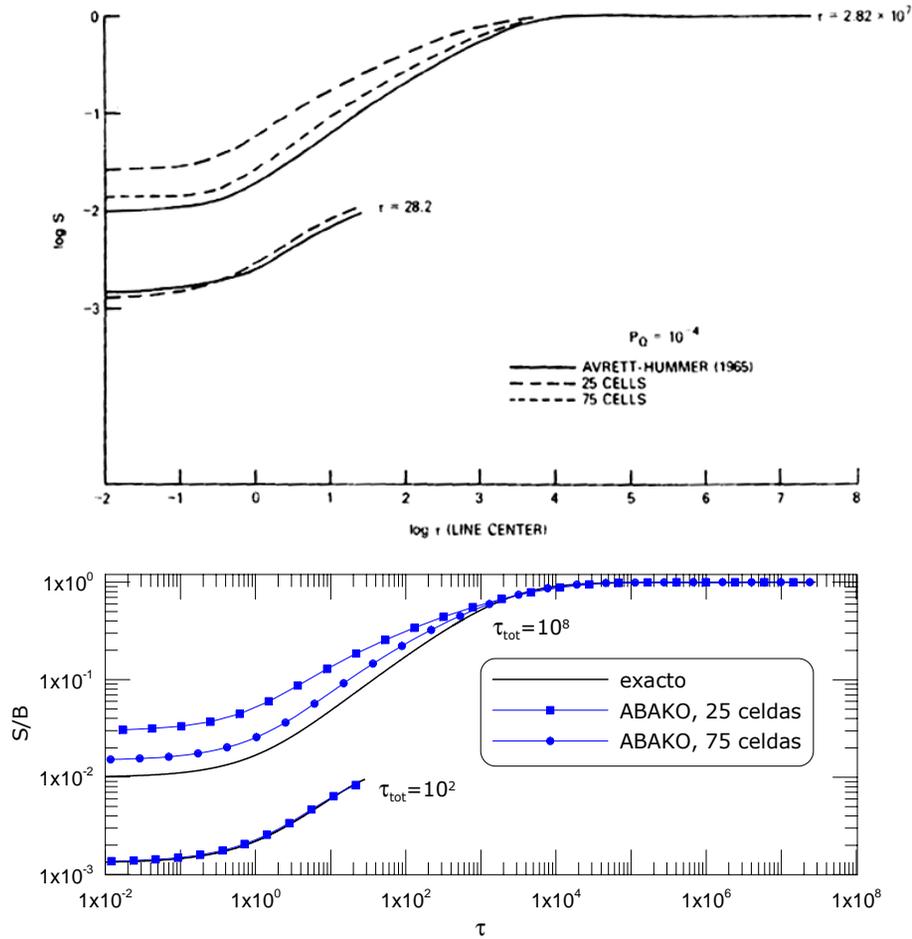


Figura 4.59. Función fuente del sistema de dos-niveles para $\tau_{tot} = 10^8$, 10^2 y $\epsilon = 10^{-4}$. Se muestra una comparación entre el modelo de Avrett *et al.* (arriba) y ABAKO (abajo).

4.3.2 Comparación con datos experimentales

Abardaremos en este apartado el estudio de algunos casos con referente experimental en los que se asume un plasma homogéneo, con condiciones uniformes de densidad y temperatura, y donde los efectos radiativos se revelan importantes para un adecuado análisis de la cinética de poblaciones y las características espectrales.

Plasma de xenón

En las instalaciones del LULI en Francia, Chenais-Popovics *et al.* [87] recogieron medidas procedentes de un *chorro* de plasma de Xe excitado por láser. El experimento se llevó a cabo con el objetivo de proporcionar un banco de pruebas que sirviera para contrastar y mejorar los códigos atómicos de NLTE. El análisis de los datos procedentes de *scattering* Thomson y del espectro de emisión de rayos-X demostraron que el plasma es estacionario durante el pulso del láser. Para conocer los detalles concretos del experimento puede acudirse a la bibliografía. Las condiciones características del plasma medidas experimentalmente son: $n_{ion} = 4.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 415 \pm 40 \text{ eV}$ y $n_e = 1.30 \pm 0.05 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

	\bar{Z}
experimental	27.4 ± 1.5
SOSA [87]	26.5
AVERROES [87]	26.8
ABAKO	26.6

Tabla 4.28. Ionización media de un plasma de Xe ópticamente grueso, con parámetros característicos $n_{ion} = 4.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 450 \text{ eV}$ y $L = 160 \mu\text{m}$. Comparación del resultado de ABAKO con la medida experimental y los cálculos de otros modelos.

En lo que sigue presentaremos los resultados obtenidos con ABAKO al simular el experimento de Chenais-Popovics. El cálculo se ha llevado a cabo considerando que el plasma es ópticamente grueso. Concretamente, hemos trabajado bajo la aproximación de plasma homogéneo con simetría plana y en concordancia con la descripción experimental hemos tomado como anchura de la lámina $L = 160 \mu\text{m}$. Asimismo, al utilizar la densidad iónica como dato de entrada ha sido necesario arbitrar un segundo procedimiento iterativo –además del que ya introduce el factor de escape– para resolver las ecuaciones de tasas, ya que al desconocer la densidad electrónica el sistema correspondiente se vuelve no-lineal. La tabla 4.28 muestra una comparación de la ionización media predicha por ABAKO junto con la medida experimental y el cálculo de otros dos modelos. Las características de AVERROES ya han sido descritas con anterioridad. El valor etiquetado como SOSA no procede de

un cálculo *ab initio* a partir de los parámetros medidos del plasma, sino que utilizando un modelo conocido como *Spin-Orbit-Split-Array* –la versión relativista del UTA–, las poblaciones iónicas son ajustadas por un procedimiento de mínimos cuadrados para la mejor reproducción posible del espectro de emisión experimental [87]. Con los datos de las poblaciones iónicas se obtiene entonces la ionización media. La conclusión inmediata que se desprende de la tabla es que el resultado de ABAKO es muy cercano al obtenido experimentalmente y compite con el de los otros modelos. Asimismo, la densidad electrónica converge al valor $n_e = 1.26 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, también en acuerdo con la medida experimental.

En la figura 4.60 se presenta el análisis de la distribución de estados de carga. Como puede observarse la predicción de ABAKO es muy similar a la AVERROES, mientras que el cálculo SOSA discrepa de los dos anteriores. Creemos tener una explicación para este comportamiento. Tanto ABAKO como AVERROES no han asumido el valor experimental central de temperatura $T = 415 \text{ eV}$, sino $T = 450 \text{ eV}$. Esto es así porque, tal y como se sugiere en muchos de los trabajos donde se ha analizado este experimento [78, 87] y como veremos después, las medidas espectrales se reproducen mejor tomando como valor de temperatura el límite superior de la correspondiente horquilla experimental. Sin embargo, según [87], en el ajuste SOSA se tomó $T_e = 400 \text{ eV}$. Desconocemos los motivos de esta decisión. Por tanto, pensamos que la diferencia observada entre la distribución SOSA y los otros modelos es consecuencia de haber considerado un valor distinto de la temperatura electrónica. Profundizando un poco más en este sentido, debemos decir que el cálculo de ABAKO con $T = 415 \text{ eV}$ da lugar a una ionización media de $\bar{Z} = 26.4$. La correspondiente distribución de poblaciones se muestra en la figura 4.61.

Resulta aún más interesante comprobar de qué manera se reflejan los efectos de opacidad en nuestros cálculos. Si consideramos el plasma ópticamente delgado, con $T = 415 \text{ eV}$, se obtiene un valor de ionización media $\bar{Z} = 25.4$, alejado ya del dato experimental. Lógicamente, la distribución de estados de carga también difiere de forma notoria respecto al caso ópticamente grueso, como se observa en la figura 4.61. El incremento de la ionización media cuando se incluyen los efectos de opacidad está causado por la fotoexcitación de los iones hasta estados más excitados, lo que a su vez facilita una posterior ionización, incluso a densidades electrónicas relativamente baja. Dicho de otra forma, el hecho de contemplar la reabsorción de fotones permite alcanzar una distribución parcial de LTE a un valor de densidad electrónica muy inferior al que sería necesario para lograr el LTE sólo a través de los procesos colisionales. En el caso particular que nos ocupa, es evidente que sólo al tratar el plasma como ópticamente grueso se consigue reproducir el dato experimental.

Para finalizar, la figura 4.62 muestra el espectro de rayos-X medido experimentalmente en el rango de longitudes de onda que va de los 9 a los 16 Å. Junto a éste se muestra la estimación obtenida con ABAKO y otros códigos, como AVERROES y ATOMIC [78]. Al igual que los otros modelos, el cálculo de ABAKO tiene en cuenta el ensanchamiento debido a la resolución espectral,

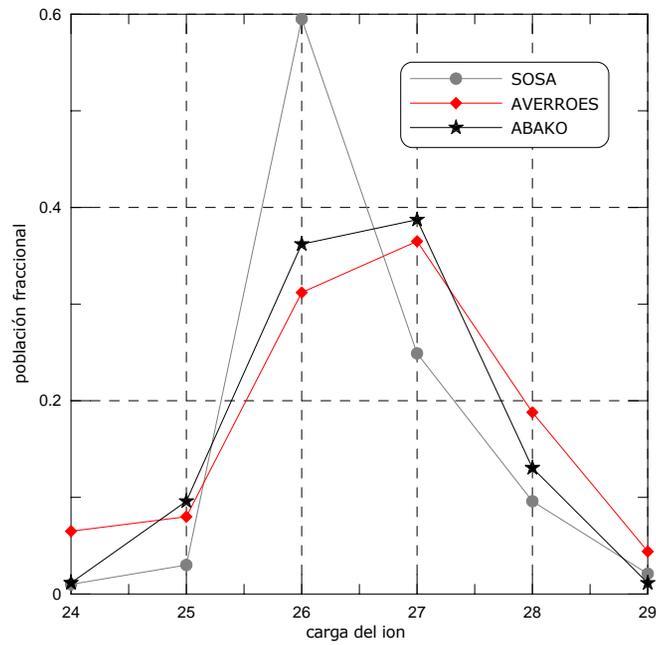


Figura 4.60. Distribución de poblaciones iónicas de un plasma de Xe ópticamente grueso con parámetros característicos $n_{ion} = 4.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 450 \text{ eV}$ y $L = 160 \mu\text{m}$. Comparación del resultado de ABAKO con otros modelos.

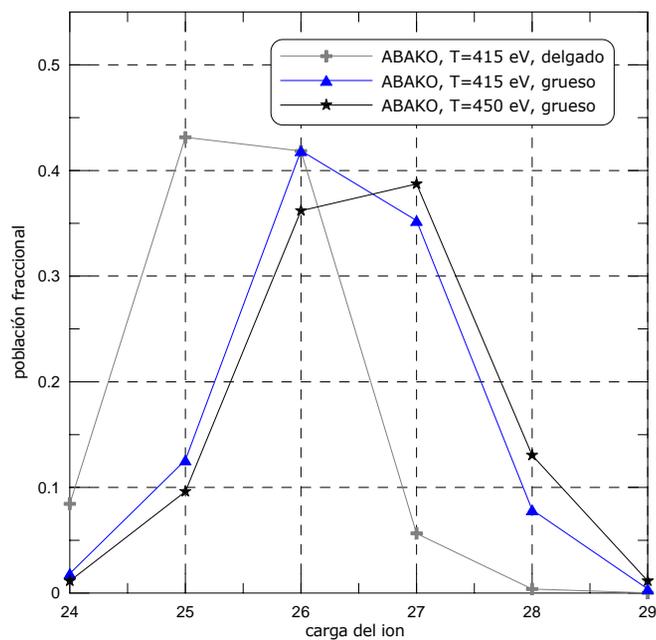


Figura 4.61. Distribución de poblaciones iónicas del plasma de Xe objeto de análisis. Se muestra de qué manera afecta al cálculo (a) la modificación del valor de T_e y (b) tratar el plasma como ópticamente delgado o grueso.

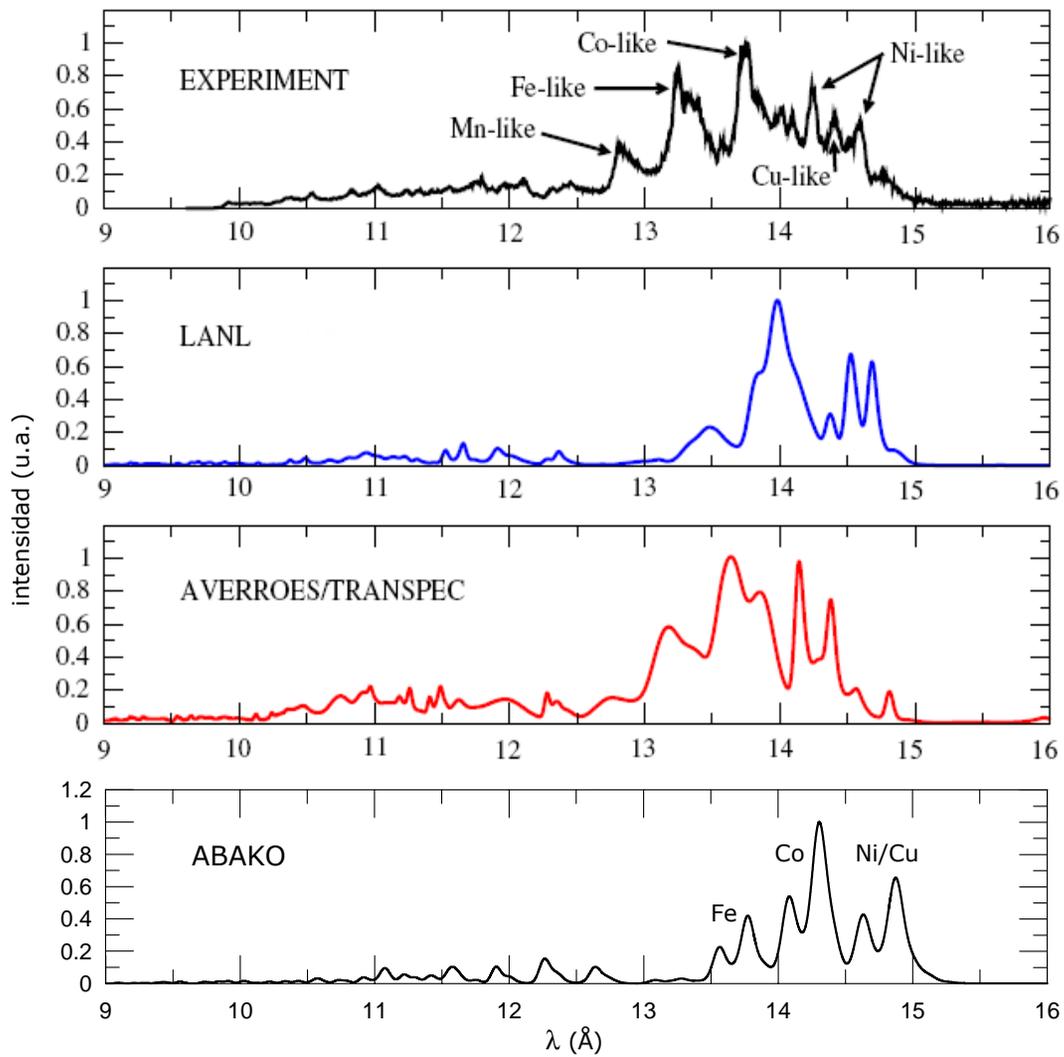


Figura 4.62. Espectro de emisión del plasma de Xe descrito en [87]. Se muestra el resultado experimental y los obtenidos por AVERROES [87], ATOMIC/LANL [78] y ABAKO.

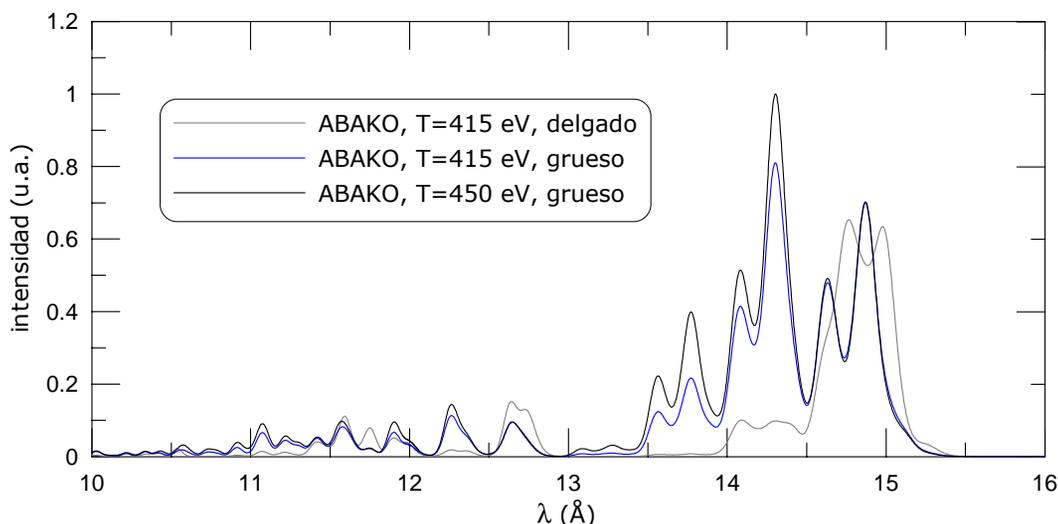


Figura 4.63. Espectro de emisión del plasma de Xe descrito en [87]. Se muestra de qué manera afecta al cálculo (a) la modificación del valor de T_e y (b) tratar el plasma como ópticamente delgado o grueso.

que resulta ser $\Delta\lambda \approx 50 \text{ m}\text{\AA}$. Las líneas más intensas que se observan a partir de los 12.5 \AA se corresponden con transiciones $4f_{7/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ y $4f_{5/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ de distintos iones de Xe, desde el Cu-like hasta el Mn-like. De acuerdo con nuestro análisis, la transición $4f_{7/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ tiene siempre la mayor longitud de onda. El espectro de AVERROES es el que mejor describe el comportamiento experimental. Sin embargo, el cálculo de ABAKO es capaz de describir la características espectrales más significativas. De forma análoga a lo ocurrido en un caso analizado anteriormente, las energías de transición predichas por ABAKO se desplazan hacia energías menores, esto es, hacia mayores longitudes de onda. En cualquier caso, nuestra estimación no es mucho peor que la obtenida por el código ATOMIC de LANL. Este último cálculo sigue una descripción SOSA e incluye 1235292 configuraciones relativistas. Con sólo 15358 configuraciones repartidas sobre el mismo conjunto de iones, ABAKO consigue un resultado similar.

Como última muestra de los efectos antes comentados en relación con la modificación de la temperatura electrónica y la reabsorción de fotones, en la figura 4.63 repetimos el espectro de emisión para el caso ópticamente grueso a $T = 450 \text{ eV}$ y añadimos el cálculo a $T = 415 \text{ eV}$. Además, presentamos el resultado obtenido al suponer el plasma ópticamente delgado. En este caso, desaparecen los rastros espectrales de Fe y Co-like y se magnifican los de Ni y Cu-like como consecuencia del desplazamiento de la distribución de estados de carga hacia especies menos ionizadas. Las diferencias con el caso grueso son muy significativas, poniéndose de manifiesto la importancia de incluir los efectos de opacidad para reproducir con ciertas garantías el espectro de emisión.

Como conclusión, el análisis del experimento de Chenais-Popovics reafirma los buenos resultados cosechados hasta el momento por ABAKO, poniendo de manifiesto a su vez su capacidad para llevar a cabo estimaciones razonables de propiedades espectrales. A la vista de los datos presentados, ABAKO podría utilizarse, por ejemplo, como herramienta para el diseño inicial de experimentos en plasmas de laboratorio.

Plasmas de oro

Un nuevo experimento que podemos analizar es el que se describe en [171]. En el láser NOVA del LLNL se generó un plasma de Au a partir de una lámina de $200 \mu m$ de diámetro y 1000 \AA de grosor, enterrada a su vez en una chapa cuadrada de Be de un $1 mm^2$ y una anchura $12 \mu m$. En su momento, el experimento significó la primera medida precisa de la distribución de estados de carga de un plasma ionizado de alto-Z. Las medidas indicaron unos valores de densidad y temperatura electrónica de $n_e = 6 \times 10^{20} cm^{-3} \pm 20 \%$ y $T = 2200 eV \pm 10 \%$.

	\bar{Z}
experimental [171]	49.3 ± 0.5
RIGEL [171]	49.1
AVERROES [86]	49.6
FLYCHK [91]	49.6
ABAKO	49.2

Tabla 4.29. Ionización media de un plasma de Au ópticamente grueso, con parámetros característicos $n_e = 6 \times 10^{20} cm^{-3}$, $T_e = 2200 eV$ y $R = 100 \mu m$. Comparación del resultado de ABAKO con la medida experimental y los cálculos de otros modelos.

Siguiendo el mismo esquema que en otros casos analizados con anterioridad, la tabla 4.29 muestra una comparación entre la ionización media experimental, la obtenida con ABAKO y valores de otros códigos recopilados en la bibliografía. En la figura 4.64 se representa la distribución de poblaciones iónicas. En el caso de la ionización media, el valor predicho por ABAKO es el más cercano al experimental. Sin embargo, según el estimador que venimos usando, la curva de poblaciones de RIGEL presenta una desviación igual a 0.14, mientras que para ABAKO resulta 0.26. Teniendo en cuenta que RIGEL es un código basado en superconfiguraciones y que el comportamiento de éstos mejora al aumentar la densidad, parece lógico que su resultado sea algo mejor que el de ABAKO. Recordemos, no obstante, que en el caso del plasma de Au bajo condiciones Corona que ya estudiamos, las predicciones de RIGEL discrepaban considerablemente de las medidas experimentales. ABAKO en cambio mostraba un buen comportamiento. Este tipo de circunstancias

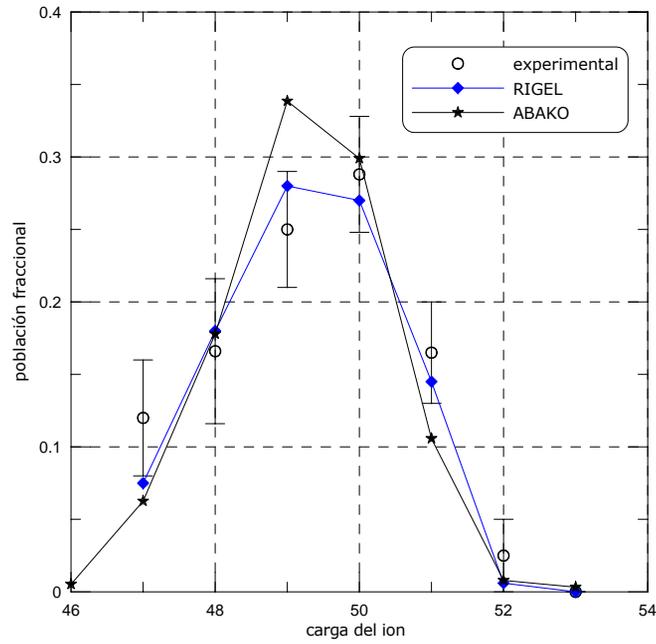


Figura 4.64. Distribución de poblaciones iónicas del plasma de Au analizado. Comparación del resultado de ABAKO, el de RIGEL y las medidas experimentales.

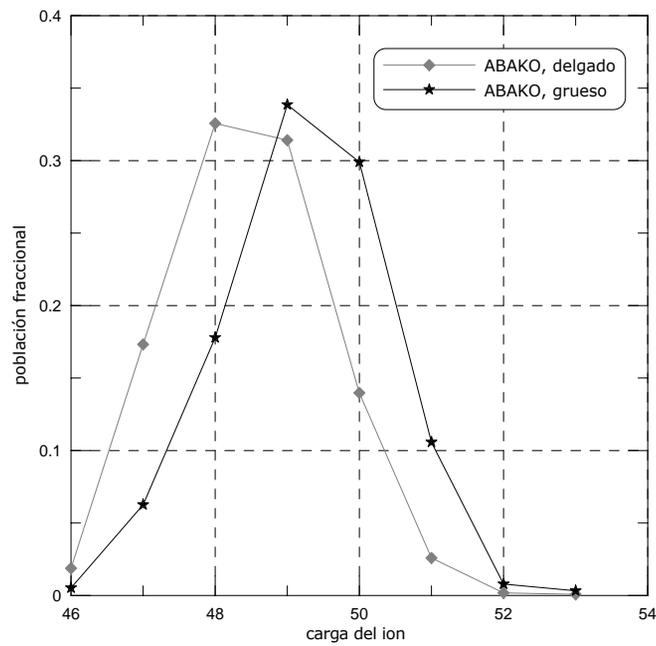


Figura 4.65. Distribución de poblaciones iónicas del plasma de Au analizado. Se muestra de qué manera afecta al cálculo tratar el plasma como ópticamente delgado o grueso.

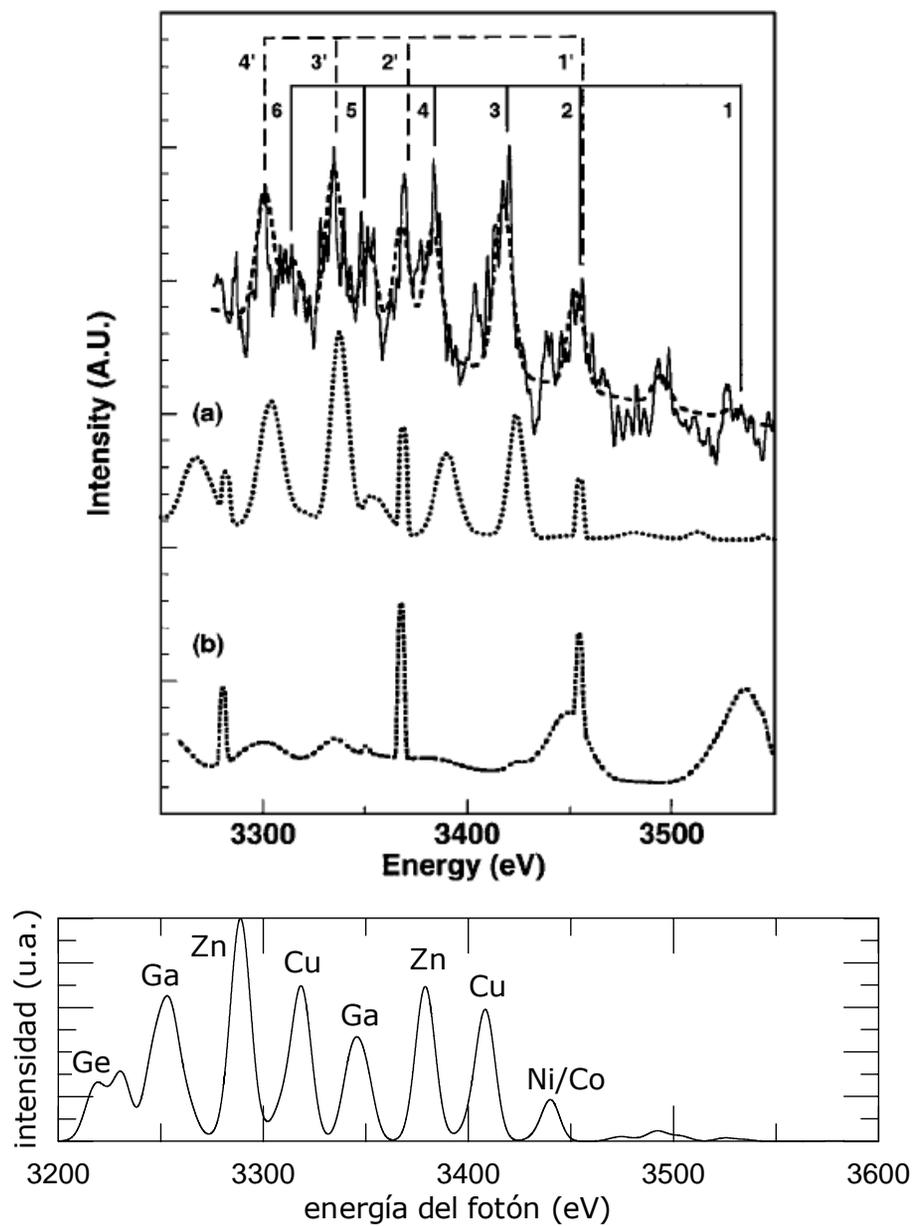


Figura 4.66. Espectro de emisión del plasma de Au descrito en [171]. De arriba a abajo encontramos el espectro experimental, el obtenido por RIGEL, el cálculo también de RIGEL sin incluir procesos atómicos a dos electrones y finalmente el espectro obtenido con ABAKO.

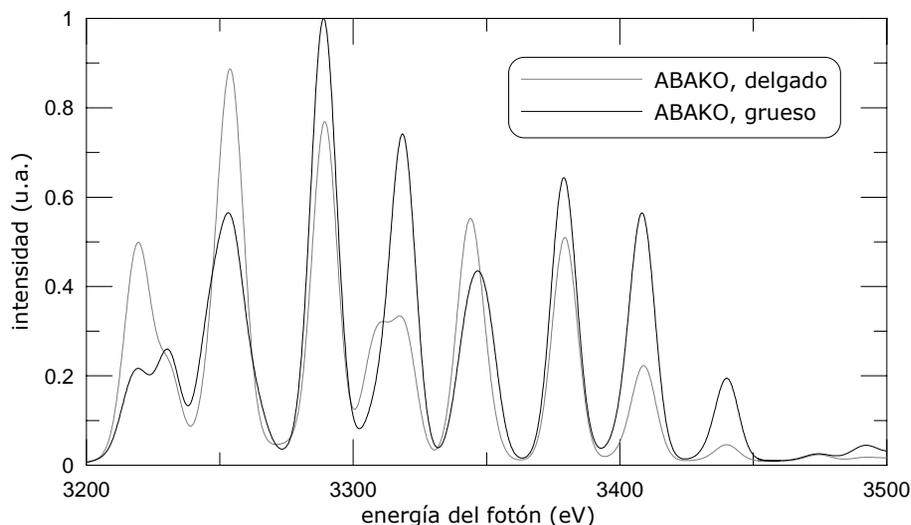


Figura 4.67. Espectro de emisión del plasma de Au objeto de análisis. Obsérvense las diferencias en el espectro al tratar el plasma como ópticamente delgado o grueso.

subrayan la consistencia del modelo que presentamos en este trabajo, confirmando su aplicabilidad en un amplio rango de condiciones.

En los cálculos que estamos ahora exponiendo, se han incluido los efectos de opacidad bajo la aproximación de plasma homogéneo. Para calcular el ensanchamiento por efecto Doppler hemos tenido en cuenta que la temperatura iónica alcanza un valor de $T_{ion} = 2000 \text{ eV}$. Asimismo, de acuerdo con la descripción experimental y las particularidades de nuestro modelo, hemos supuesto una geometría cilíndrica caracterizada por un radio $R = 100 \mu\text{m}$. Si tratamos el plasma como ópticamente delgado, la ionización media baja hasta $\bar{Z} = 48.5$ y la distribución de poblaciones resultante es la que mostramos en la figura 4.65.

De forma análoga a casos anteriores, las poblaciones iónicas se infieren a partir del espectro de emisión y concretamente del análisis de las líneas $5f_{7/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ y $5f_{5/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ de los iones que van del Co-like al Ge-like. Los datos experimentales y el espectro de RIGEL se ilustran en la figura 4.66. El cálculo de ABAKO no describe con precisión la muestra experimental, pero proporciona una estimación razonable del espectro. En particular, nuestro resultado es comparable al de RIGEL. En la figura aparece también un cálculo de este mismo código, pero sin incluir los procesos de autoionización y recombinación dielectrónica. Como ya está suficientemente probada la importancia de estos procesos en la determinación de las propiedades radiativas, no hemos considerado necesario repetir con ABAKO el mismo tipo de cálculo.

Sin embargo, sí nos interesa mostrar la importancia de los efectos de opacidad, ya que son objeto de análisis en este apartado. Así, en la figura 4.67 se establece una comparación entre los correspondientes espectros de emisión cuando el plasma es tratado como ópticamente delgado o

bien se incluyen los efectos de la radiación sobre el espectro discreto bajo la aproximación de plasma homogéneo.

En todos estos cálculos hemos aplicado la corrección debida a la resolución espectral experimental, $E/\Delta E \approx 300$.

Otro experimento manejado en el contexto de los códigos de NLTE y también llevado a cabo en el NOVA, es el plasma de Au generado sobre un hohlraum de fusión por confinamiento inercial [172]. Nuestras expectativas de lograr una correcta descripción de las medidas experimentales son algo menores en este caso. Los motivos son varios. Para empezar el diseño experimental no garantiza un cinética poblacional de estado estacionario. En segundo lugar, el plasma se genera en un ambiente radiativo externo caracterizado por una temperatura $T_{rad} = 190 \pm 20 \text{ eV}$ y se detecta también un fracción $f_{hot} = 0.1$ de electrones supratérmicos y energía $E_{hot} = 20 \text{ keV}$. ABAKO aún no es capaz de trabajar con un campo de radiación externo, ni tampoco incluir efectos de electrones calientes, así que nuestros cálculos se limitarán a la utilización de los parámetros más habituales, densidad y temperatura electrónica. La densidad se determinó a partir de una simulación hidrodinámica, resultando $n_e = 1.4 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. El diagnóstico de scattering Thomson revela $T_e = 2600 \text{ eV} \pm 10\%$. Por otro lado, en los cálculos de ABAKO se incluyeron efectos de opacidad, para lo que asumimos, de acuerdo con la descripción experimental, que la máxima longitud recorrida por los fotones en el interior del plasma de Au es $L = 200 \mu\text{m}$.

	\bar{Z}
experimental [172]	51 ± 1
RIGEL [172]	50.5
FLYCHK [91]	50.4
ABAKO	50.5

Tabla 4.30. Ionización media de un plasma de Au generado en un hohlraum de fusión. Comparación del resultado de ABAKO con la medida experimental y otros modelos.

En la tabla 4.30 mostramos una comparación de ionizaciones medias. Tanto el resultado de ABAKO como el de los otros modelos indican un buen acuerdo con el resultado experimental. Sin embargo, al analizar las distribuciones de poblaciones iónicas, figura 4.68, observamos que la curva experimental presenta un extraño comportamiento, con dos máximos locales de población en las especies Ga y Co-like. En [172] se sugiere que esta conducta puede deberse a las desviaciones existentes respecto a la situación estacionaria. Como parece lógico, ni ABAKO ni RIGEL, que hacen uso de esta hipótesis, describen correctamente el resultado experimental. Aún así, es importante comentar que la distribución obtenida con ABAKO se asemeja más a la distribución medida que el

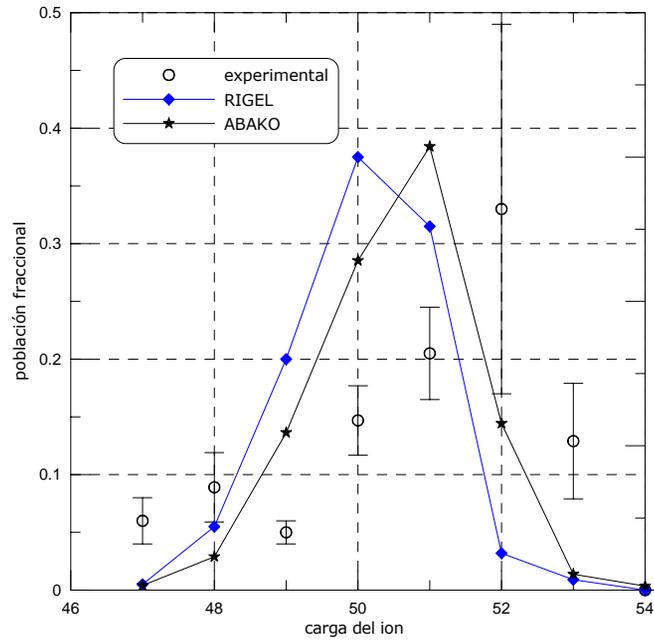


Figura 4.68. Distribución de poblaciones iónicas del plasma de Au descrito en [172]. Contrastación del resultado obtenido por ABAKO.

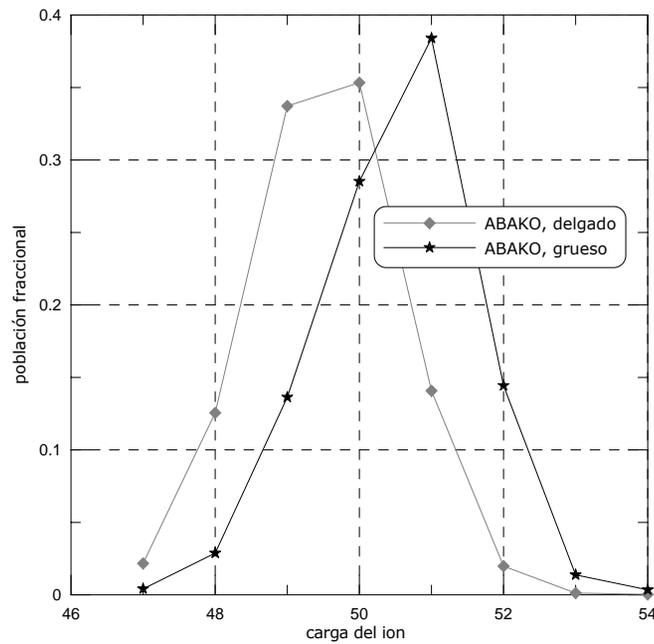


Figura 4.69. Distribución de poblaciones iónicas del plasma de Au descrito en [172]. Se muestran los cálculos asumiendo primero un plasma ópticamente delgado y luego grueso.

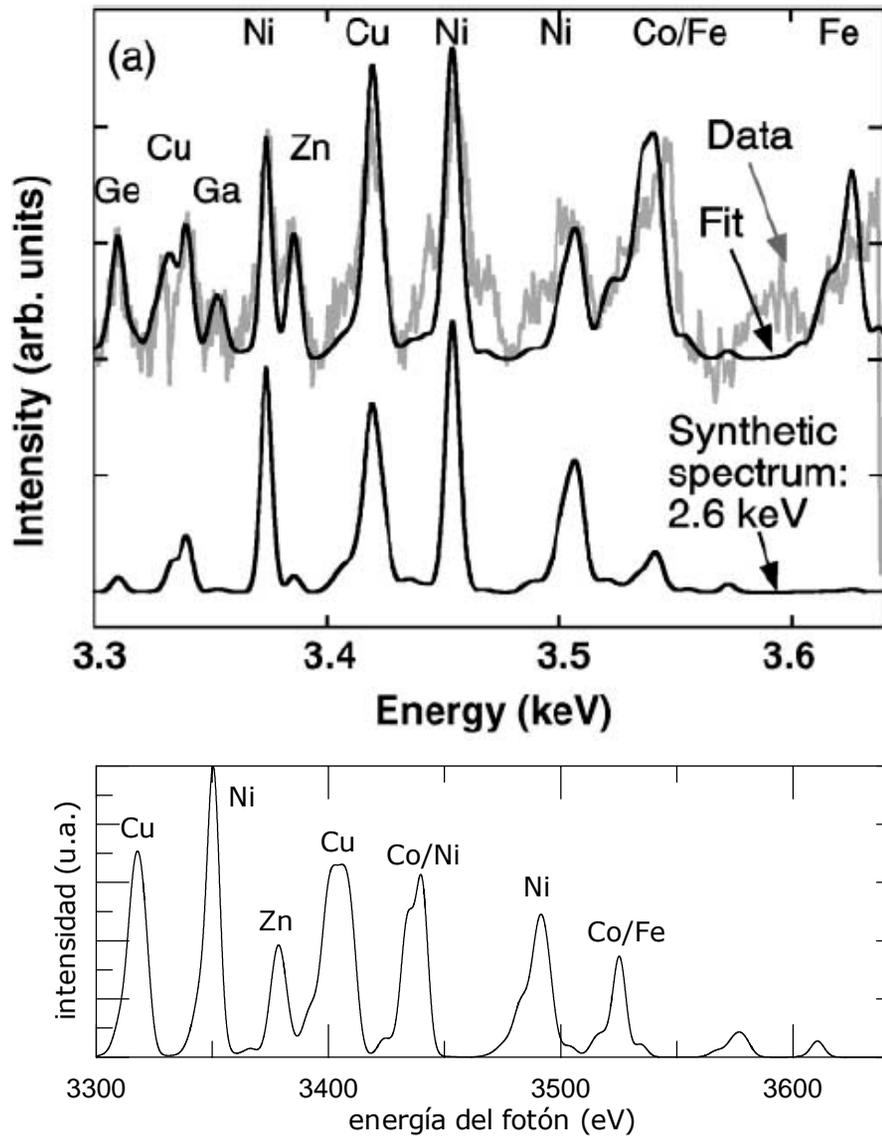


Figura 4.70. Espectro de emisión del plasma de Au descrito en [172]. Arriba encontramos el espectro experimental y sobre él un ajuste multi-gaussiano efectuado para inferir la distribución de poblaciones. En el centro se muestra el espectro obtenido por RIGEL y abajo el correspondiente a ABAKO.

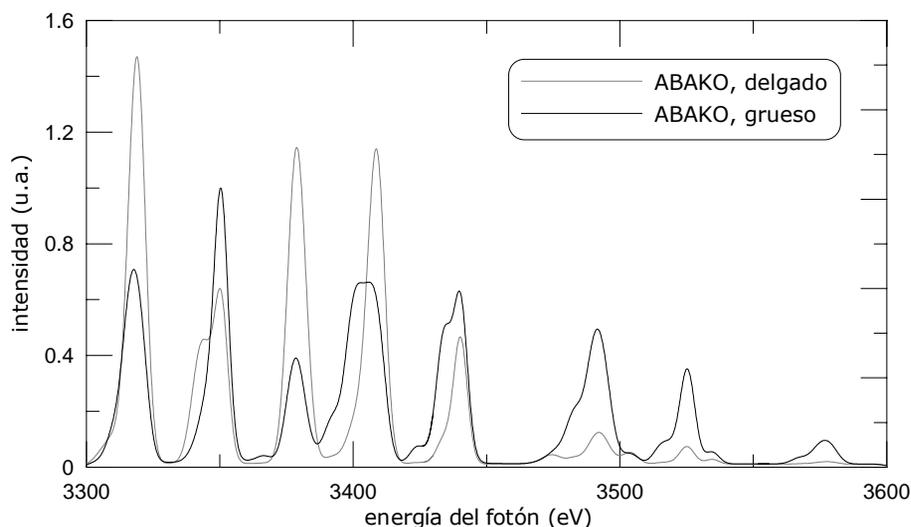


Figura 4.71. Espectro de emisión del plasma de Au descrito en [172]. Se ilustran los cambios producidos por los efectos de opacidad.

cálculo más sofisticado de RIGEL, que incluye la fracción de electrones supratérmicos y el campo externo de radiación.

Por seguir con nuestro hilo argumental, la figura 4.69 muestra la distribución de estados de carga suponiendo un plasma ópticamente delgado. En esta situación, la ionización media resulta $\bar{Z} = 49.3$, como es lógico, menor que el caso grueso.

Para terminar, la figura 4.70 ilustra la contrastación de los espectros de emisión producidos por RIGEL y ABAKO con el encontrado experimentalmente. El espectro es de las mismas características que otros ya comentados. Los rasgos espectrales se deben a las transiciones $5f \rightarrow 3d$ de las especies más abundantes en el plasma. Como puede verse, el resultado de ABAKO es capaz de describir *grosso modo* el espectro experimental, presentando características similares a la de RIGEL. Se mantiene, claro está, el desplazamiento de las energías de transición hacia valores más pequeños. No obstante, esta cuestión podría solucionarse utilizando datos atómicos externos de mayor precisión o haciendo uso de un potencial paramétrico más sofisticado.

La figura 4.71 muestra las diferencias entre los espectros obtenidos con ABAKO en los casos delgado y grueso. Como ya se ha evidenciado en situaciones anteriores, los efectos de opacidad pueden producir tanto una amplificación como una atenuación de las líneas. Esto se debe esencialmente a la redistribución de población entre los estados excitados provocada por la reabsorción de fotones. Asimismo también es posible una alteración de la forma de las líneas. Este hecho se justifica teniendo en cuenta que realmente existe un solapamiento entre las líneas y que, por ejemplo, fotones emitidos en el centro de una línea pueden ser absorbidos en las alas de otra y viceversa.

En las comparaciones con experimentos de la bibliografía que hemos analizado hasta ahora, hemos usado siempre como fuente de datos atómicos el modelo propio de ABAKO basado en potenciales analíticos. Como ha quedado patente, aunque nuestros cálculos espectrales proporcionan una estimación aceptable de los resultados observados experimentalmente, ni la riqueza y ni la precisión de estos datos son suficientes para lograr una fiel reproducción del espectro. En consecuencia, el modelo de potenciales analíticos nunca resultará adecuado para abordar problemas de diagnóstico espectrocópico, esto es, la deducción de las condiciones de densidad y temperatura del plasma a través de la contrastación de los espectros teórico y experimental. Sin embargo, aunque no es un objetivo fundamental de esta tesis doctoral, nos gustaría resaltar que, propiamente, el modelo colisional-radiativo sí está capacitado para tratar este tipo de problemas, tan sólo hay que trabajar con una descripción de la estructura atómica más precisa, que puede proceder una fuente externa.

Como ejemplo, vamos a presentar un estudio preliminar de diagnóstico sobre los datos experimentales de un plasma de Al, resultado de un conjunto de experimentos llevados a cabo en la Ecole Polytechnique en Francia y en los que nuestro grupo de investigación tuvo la oportunidad de participar [173]. En las experiencias se utiliza un láser de Nd que trabaja a una longitud de onda de $1053 \mu\text{m}$ y con un pulso de 600 ps . La energía de salida es cercana a los 80 J en forma de haz circular de 4 cm de radio. Para irradiar el blanco, se cuadruplica la frecuencia ω del haz inicial haciéndolo pasar por un cristal no-lineal KDP. El haz de 4ω obtenido permite depositar en el blanco 25 J en 500 ps .

Para lograr el confinamiento del plasma se utiliza un blanco en forma de sándwich constituido por tres capas: una capa de C una capa central de Al, típicamente de $20 \mu\text{m}$ de grosor, y nuevamente otra de C. El plasma creado tras el impacto láser tiene una duración de aproximadamente 100 ns y en él podemos distinguir principalmente dos regiones: una región Corona externa y una región interna de alta densidad situada en torno al cráter creado por el láser. En la región densa, el valor de la densidad electrónica se estimó entre 10^{22} y 10^{24} cm^{-3} y la temperatura entre los 200 y los 600 eV . En estas condiciones, el plasma de aluminio se encuentra muy ionizado, de manera que los estados de carga más abundantes son He-like, H-like y el ion desnudo. En el experimento se recoge la radiación emitida por la región de alta densidad en una dirección casi perpendicular a la del haz láser.

Para nuestros cálculos construimos un base de datos atómicos entre Be-like Al y el núcleo desnudo utilizando el código FAC, lo que nos permite trabajar con una estructura energética precisa en descripción DLA. Para llevar a cabo la diagnosis e intentar reproducir el espectro experimental, simplemente nos hemos dedicado a variar las condiciones del plasma, densidad electrónica, temperatura y dimensión característica, en torno a los valores estimados en el diseño experimental. Decíamos antes que éste era solamente un *ensayo* de diagnóstico espectrocópico porque el proceso

de búsqueda de los parámetros óptimos y la contrastación de los espectros teórico y experimental no están sistematizados.

En la figura 4.72 representamos un espectro de emisión experimental junto con una estimación de ABAKO en la que los parámetros característicos del plasma son $n_e = 8 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $T = 400 \text{ eV}$ y $L = 2 \text{ }\mu\text{m}$. Todos los valores están dentro del margen estimado en el diseño de la experiencia. Las líneas experimentales se corresponden con la serie Lyman de H-like, $\text{Ly}\alpha$ ($n = 2 \rightarrow n = 1$), $\text{Ly}\beta$ ($n = 3 \rightarrow n = 1$), $\text{Ly}\gamma$ ($n = 4 \rightarrow n = 1$), $\text{Ly}\delta$ ($n = 5 \rightarrow n = 1$) y $\text{Ly}\epsilon$ ($n = 6 \rightarrow n = 1$), y las de He-like, $\text{He}\beta$ ($n = 3 \rightarrow n = 1$), $\text{He}\gamma$ ($n = 4 \rightarrow n = 1$), $\text{He}\delta$ ($n = 5 \rightarrow n = 1$) y $\text{He}\epsilon$ ($n = 6 \rightarrow n = 1$). Los detalles junto a la $\text{Ly}\alpha$ se corresponden con la emisión debida a la estabilización radiativa de estados doblemente excitados de He-like y Li-like. En esta ocasión, ABAKO es capaz de reproducir con mayor exactitud el espectro. El hecho de trabajar con datos atómicos de mayor calidad se refleja, por ejemplo, en que el desplazamiento en la posición de las líneas es ahora mínimo. También se ajusta mejor la magnitud de los picos, en parte porque los valores de las fuerzas de oscilador son más precisos. Por otro lado, debemos tener en cuenta que los espectros que habíamos analizado hasta ahora involucraban especies más complejas y una cinética de poblaciones también más complicada.

En cualquier caso, es evidente que no todos los detalles espectrales se reproducen de forma adecuada. En nuestra estimación, la intensidad de la $\text{Ly}\alpha$ es algo baja, no se observan las líneas $\text{He}\epsilon$ y $\text{Ly}\epsilon$, ni las líneas satélite y en general los perfiles son más delgados que en el caso experimental. Asimismo, debemos tener en cuenta que nuestro modelo para ensachamiento Stark es muy sencillo y que para la sección eficaz de fotoionización se utiliza la fórmula semiclásica de Kramer. Con todo esto, no conseguimos encontrar ninguna terna de parámetros con la que describir convenientemente la totalidad del espectro. En la figura 4.73 mostramos otra estimación en la que, de acuerdo con el límite de Inglis-Teller [49], hemos bajado la densidad electrónica para intentar recuperar las líneas $\text{He}\epsilon$ y $\text{Ly}\epsilon$. Concretamente, para este cálculo hemos considerado $n_e = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $T = 470 \text{ eV}$ y $L = 5 \text{ }\mu\text{m}$. Como puede observarse, aparecen las líneas $\text{He}\epsilon$ y $\text{Ly}\epsilon$, el nivel del espectro continuo muestra un mejor acuerdo con el experimental, pero empeoran las $\text{Ly}\gamma$ y $\text{He}\gamma$, que ahora son demasiado intensas.

Tras nuestro análisis creemos que el espectro experimental no se corresponde con una región del plasma de condiciones uniformes, sino que se ha recogido la radiación procedente de puntos con distintos valores de densidad y temperatura. Algo así se sugiere en [173], donde se indica que en el primer diseño experimental –al que parece corresponder el espectro que hemos analizado– genera integraciones espaciales sobre regiones donde la densidad es más pequeña que la deseada, existiendo sólo una accesibilidad parcial a la región densa del cráter.

Por último y a modo casi didáctico, en la figura 4.74 presentamos una comparación interna donde se pone de manifiesto de qué manera se refleja en el espectro la variación de los parámetros

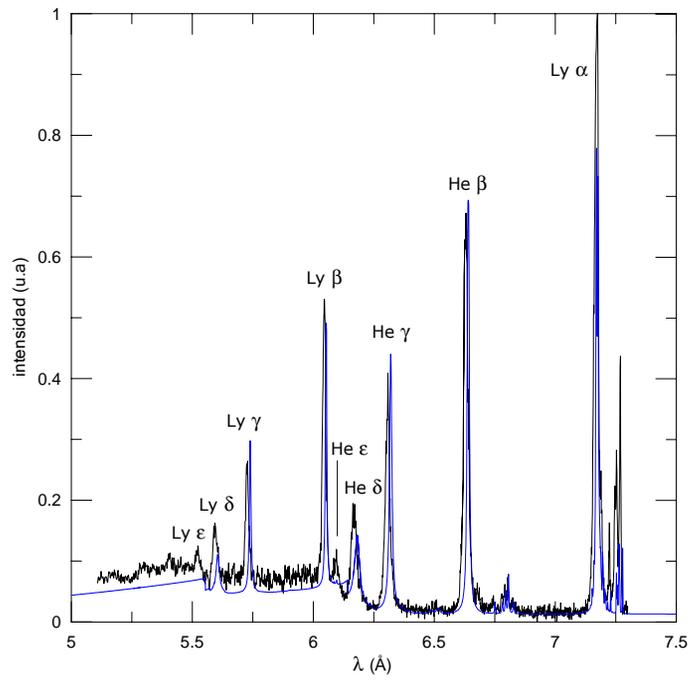


Figura 4.72. Espectro de emisión de un plasma de Al obtenido en el LULI. Sobre éste, en azul, se muestra una estimación de ABAKO para $n_e = 8 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $T = 400 \text{ eV}$ y $L = 2 \text{ } \mu\text{m}$.

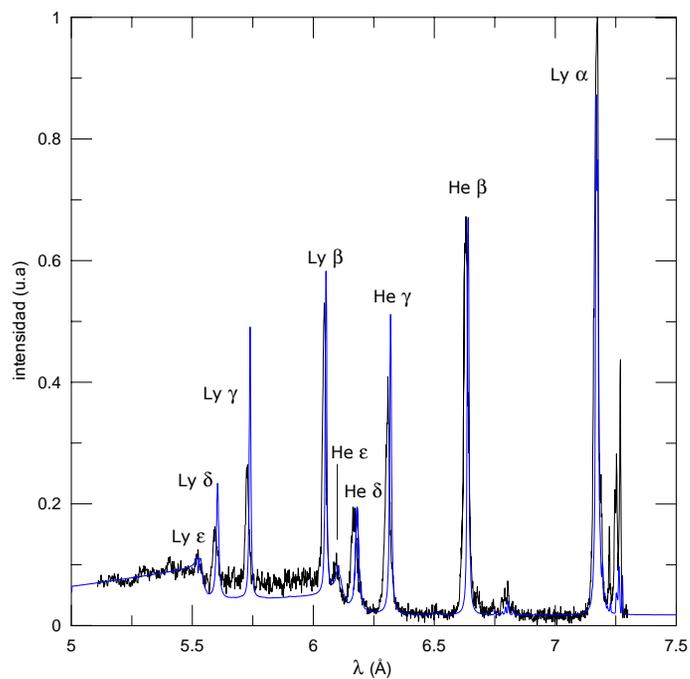


Figura 4.73. Espectro de emisión de un plasma de Al obtenido en el LULI. Sobre éste, en azul, se muestra una estimación de ABAKO para $n_e = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $T = 470 \text{ eV}$ y $L = 5 \text{ } \mu\text{m}$.

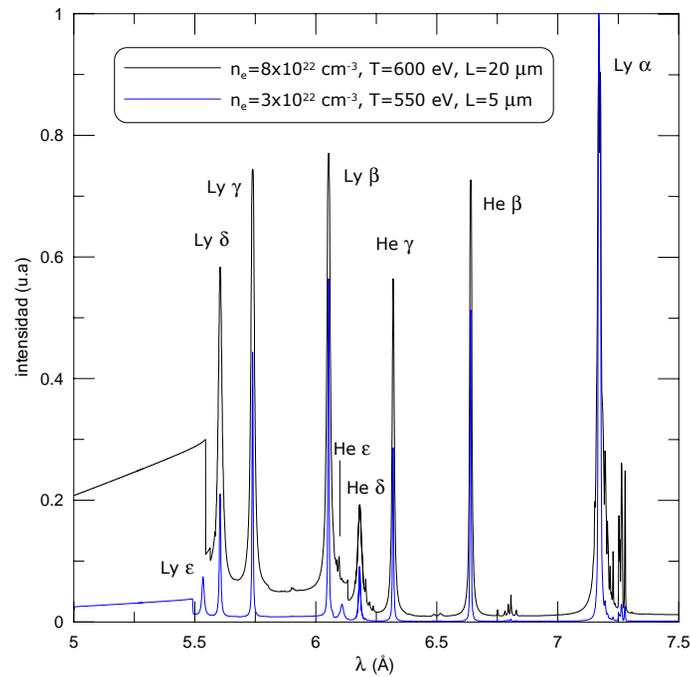


Figura 4.74. Dos cálculos sobre el espectro de emisión de Al con diferentes valores de los parámetros característicos del plasma.

característicos del plasma. Se observa por ejemplo que para que las líneas satélite ganen en intensidad es necesario aumentar su tamaño. Asimismo, al bajar la densidad se consigue reforzar la $Ly\alpha$ en detrimento de las líneas de He.

4.3.3 Medios no-homogéneos

Presentaremos en esta sección algunos ejemplos donde se ilustra la capacidad del modelo para el problema del transporte radiativo en átomos de muchos niveles en medios no-homogéneos, esto es, en aquéllos donde las poblaciones de nivel y, por tanto, las poblaciones iónicas dependen del punto del espacio considerado. Asimismo, abordaremos en primer lugar la situación donde las condiciones de densidad y temperatura del plasma permanecen constantes, para luego tratar el caso en el que dichas magnitudes presentan dependencia espacial.

Condiciones uniformes

Como ejemplo para ilustrar los efectos de opacidad en un plasma con condiciones físicas uniformes formado por iones de muchos niveles, seguiremos uno empleado ya por *Apruzese et al.* en [97]. Consideremos un plasma de Al con la geometría de una lámina infinita de grosor $L = 1500 \mu m$. Supondremos que en todo el medio la temperatura vale $T = 600 eV$ y $n_e = 10^{20} cm^{-3}$. Para nuestros

cálculos, hemos construido con nuestro modelo de potenciales analíticos una base de datos atómicos de aproximadamente 1000 configuraciones relativistas desde Li-like hasta el ion desnudo y un total 8270 transiciones radiativas. Todas las líneas han sido transportadas. En [97] se concluye que en las condiciones elegidas las poblaciones apenas se diferencian cuando se utiliza un perfil Doppler o un perfil Voigt. En consecuencia, los resultados que aquí presentamos se realizaron asumiendo un perfil Doppler, ya que es menos costosa la evaluación de la integral frecuencial de los coeficientes de acoplamiento radiativo. Por otro lado, el medio fue dividido en 40 celdas distribuidas linealmente, aunque para efectuar las comparaciones pertinentes mostraremos también los cálculos realizados bajo la aproximación homogénea, esto es, con una única celda. Una cuestión a destacar es que, al contrario de lo que ocurría en el átomo de dos niveles, ahora no es posible especificar una posición en el medio a través de un valor del espesor óptico, ya que asociada a esa posición existen muchas líneas posibles –iones en diferentes estados energéticos distintos capaces pueden sufrir transiciones distintas–, cada una con su espesor óptico particular. Así pues, las magnitudes de interés se representarán frente a la coordenada espacial z , sobre un eje perpendicular al plano de la lámina. La posición $z = 0 \mu m$ indica uno de los bordes del medio, $z = 750 \mu m$ indica el centro del mismo.

En la figura 4.75 mostramos el comportamiento de la ionización media y en la 4.76 se hace lo propio con las poblaciones iónicas. La diferencia del cálculo en situación delgada con aquéllos que incluyen efectos de opacidad es manifiesta. El resultado no-homogéneo muestra un progresivo aumento de la ionización media con z . Este comportamiento se debe a que según nos adentramos en el medio los fotones emitidos tienen cada vez menos posibilidades de escapar del plasma y acaban siendo reabsorbidos. Esto eleva la población de los estados excitados, facilitando a la postre la ionización de la especie correspondiente. Asimismo, teniendo en cuenta la escala vertical de la figura, podríamos pensar que el cálculo en aproximación homogénea es una buena aproximación de la situación no-homogénea. Esto no es tan evidente cuando analizamos las poblaciones iónicas. Mientras que en el ion desnudo sólo aparecen pequeñas diferencias, en He y H-like se observa una importante redistribución de población. La especie más ionizada, H-like, es cada vez más abundante conforme nos internamos en el plasma, debido al mecanismo antes comentado.

El análisis resulta aún más interesante al estudiar la distribución de población dentro de cada ion. Así, en la figura 4.77 representamos las densidades del estado fundamental y primeros estados excitados del He-like en función de z . El hecho más evidente es que, la población de los estados excitados es, en el caso ópticamente grueso, claramente superior a la del caso delgado. Respecto al fundamental, la población de los primeros estados excitados se incrementa unas 30 veces. Lógicamente, esto afecta de forma directa a los espectros característicos de emisión o absorción.

Otro efecto debido a la reabsorción de fotones es la inversión de población que se produce en relación a la situación delgada. En este último caso, la configuración más abundante tras el estado

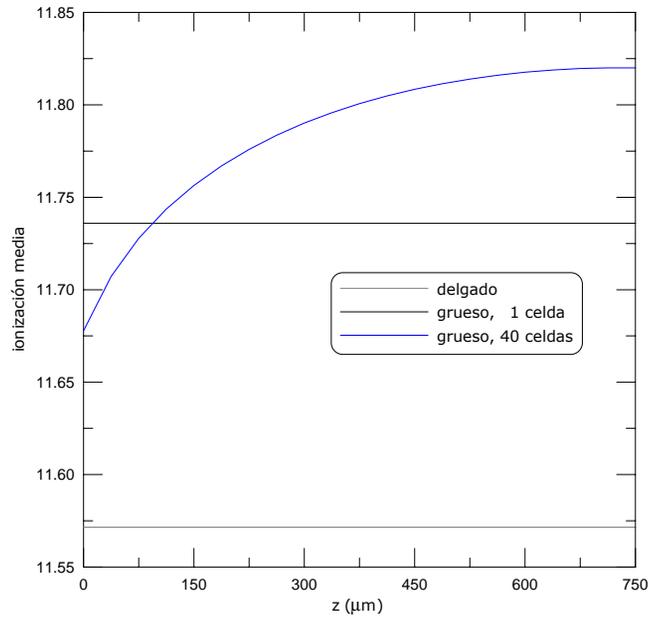


Figura 4.75. Variación de la ionización media con la posición en el interior de un plasma de Al con $T = 600 \text{ eV}$, $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $L = 1500 \text{ μm}$.

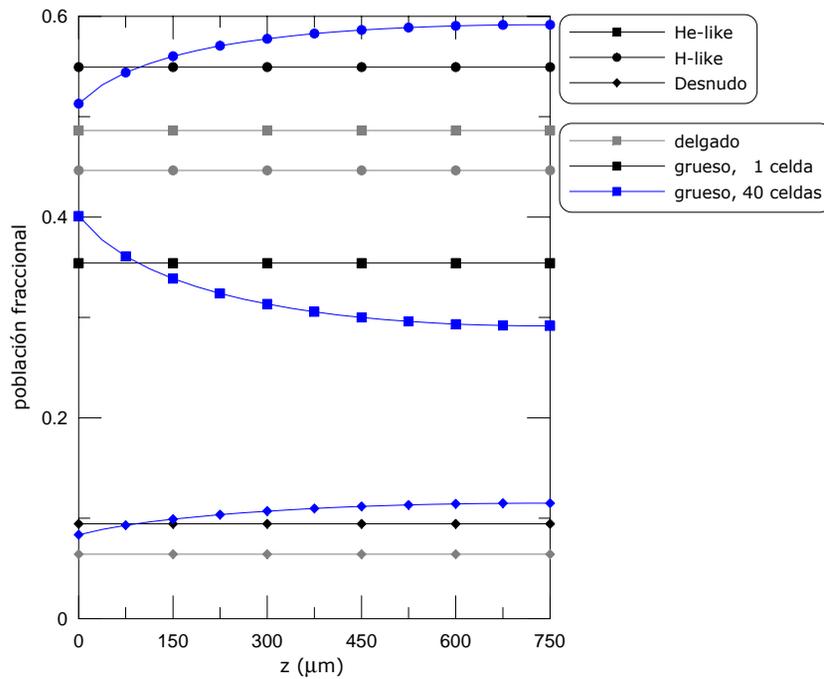


Figura 4.76. Variación de las poblaciones iónicas con la posición en el interior de un plasma de Al con $T = 600 \text{ eV}$, $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $L = 1500 \text{ μm}$.

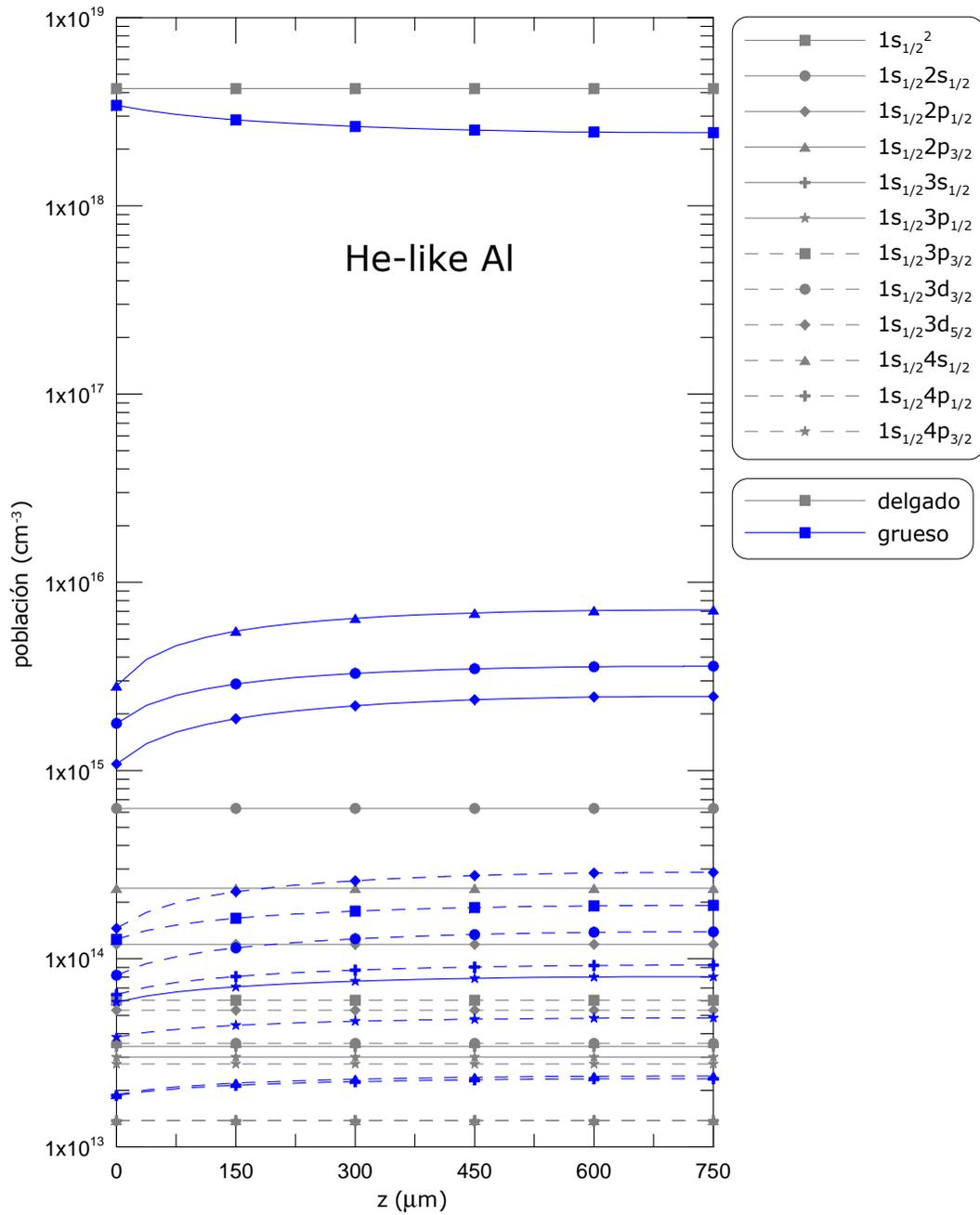


Figura 4.77. Variación de las densidades de los niveles de He-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.

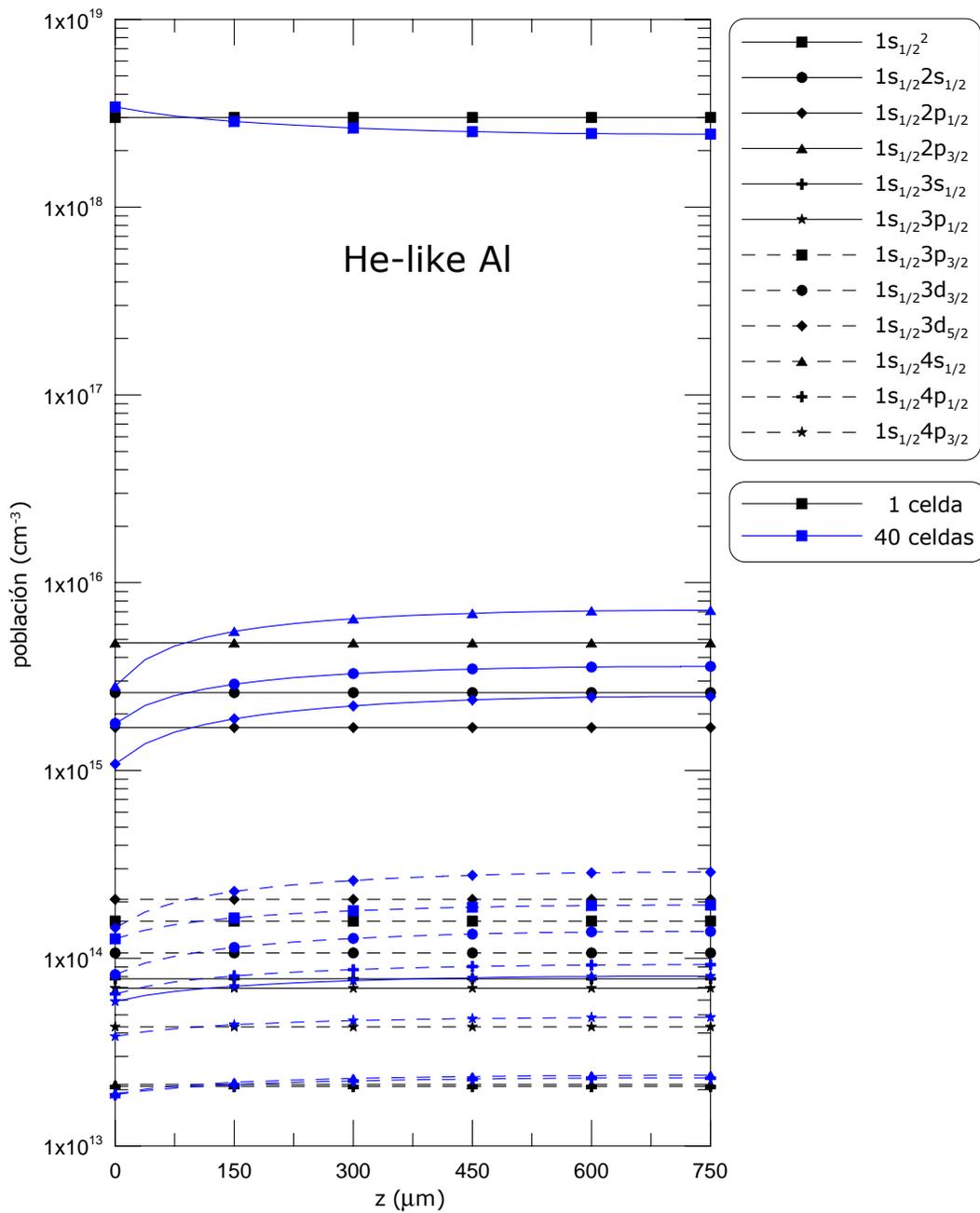


Figura 4.78. Variación de las densidades de los niveles de He-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre el cálculo grueso homogéneo y el no-homogéneo, efectuado con 40 celdas.

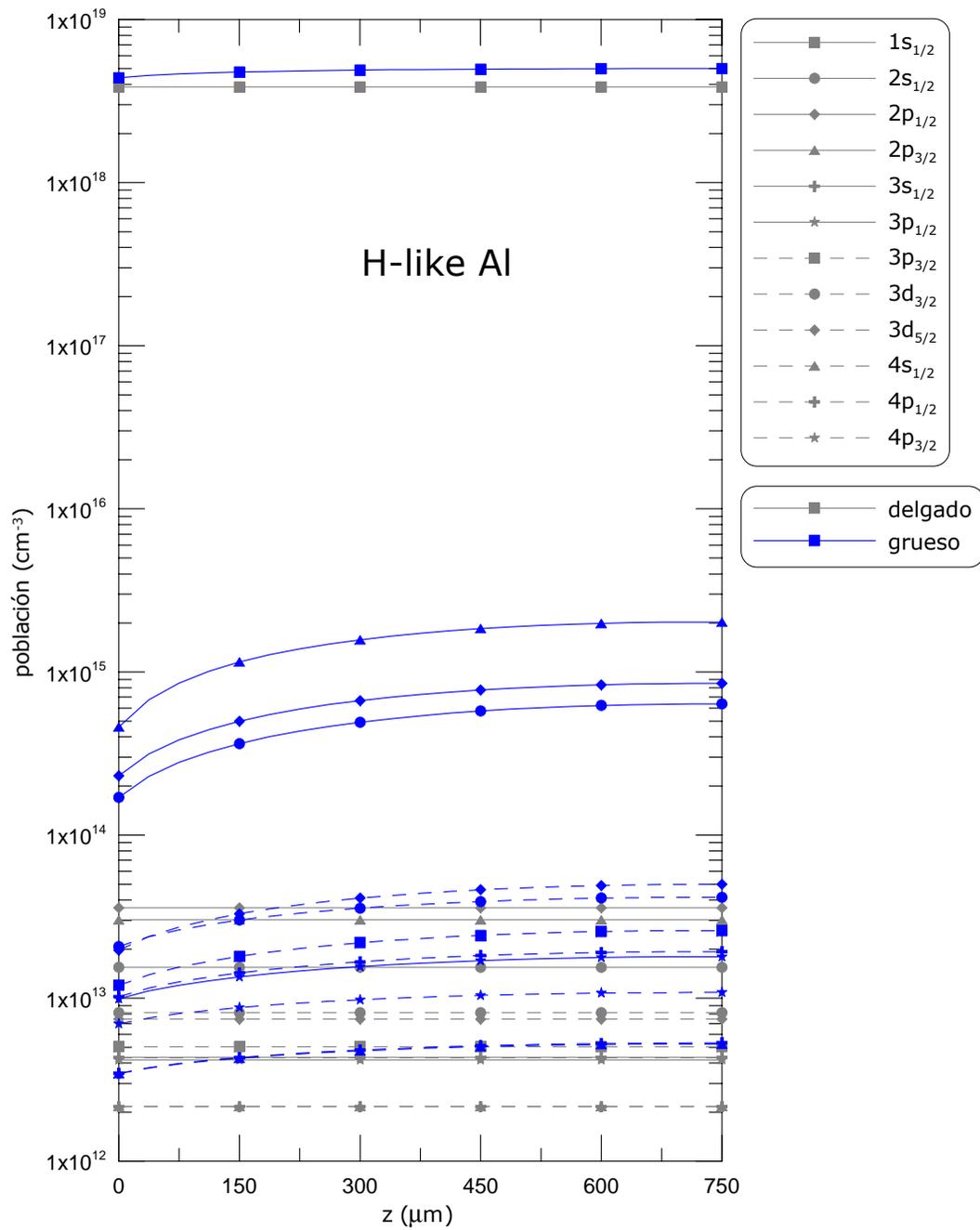


Figura 4.79. Variación de las densidades de los niveles de H-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.

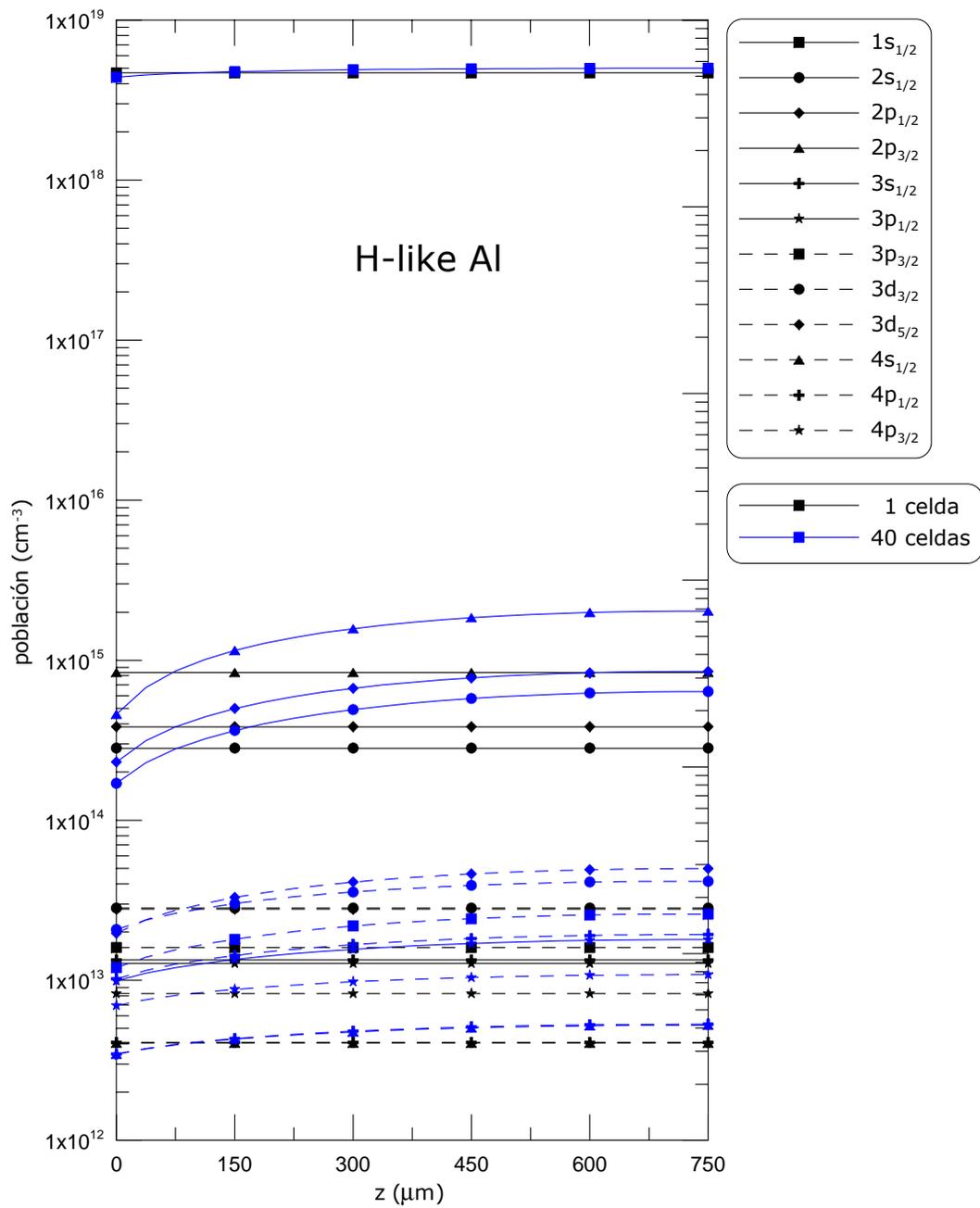


Figura 4.80. Variación de las densidades de los niveles de H-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre el cálculo grueso homogéneo y el no-homogéneo, efectuado con 40 celdas.

fundamental es $1s_{1/2}^2$, luego $1s_{1/2}2p_{3/2}$ y después $1s_{1/2}2p_{1/2}$. En el cálculo grueso este orden se altera, el estado excitado más abundante es $1s_{1/2}2p_{3/2}$, luego $1s_{1/2}^2$ y finalmente $1s_{1/2}2p_{1/2}$.

Por último, vemos también que, aunque las condiciones de densidad y temperatura sean constantes, los efectos de opacidad provocan la aparición de gradientes espaciales en las densidades de los estados excitados. Dichos gradientes son más acusados en aquellos niveles que de forma global muestran mayores diferencias respecto al cálculo delgado.

Para hacernos una idea del error cometido al tratar el plasma con única celda mostramos la figura 4.78. En el centro del plasma y sobre los primeros estados excitados, la diferencia se sitúa aproximadamente en un factor 1.5.

En términos cualitativos, sobre el H-like se observa un comportamiento muy similar, que se ilustra en las figuras 4.79 y 4.80.

Condiciones con dependencia espacial

En este último apartado vamos a aplicar el modelo de transporte implementado en ABAKO al caso de un medio no-homogéneo, con perfiles de densidad y temperatura dependientes de la posición del espacio considerada. Queremos subrayar que nuestro objetivo no es llevar a cabo un estudio exhaustivo de la física del problema en cuestión, sino poner de manifiesto la capacidad del modelo que hemos desarrollado en esta tesis doctoral para el tratamiento de este tipo de situaciones. Tengamos en cuenta que según Apruzese, autor de un modelo de transporte de características parecidas al de ABAKO y que hemos citado muchas veces en este trabajo, la principal desventaja de su modelo es que deja de ser válido en presencia de gradientes de temperatura o densidad [97,98]. Por tanto, el simple hecho de que ABAKO pueda utilizarse bajo estas condiciones supone en sí mismo un importante logro.

Utilizaremos como ejemplo un perfil de densidad y temperatura que se obtuvo tras la realización de una simulación hidrodinámica bidimensional sobre los experimentos de Al llevados a cabo en el LULI y de los ya hablamos en un apartado anterior [173,174]. Concretamente, las condiciones variables sobre las que trabajaremos corresponden a una dirección espacial particular de la expansión del plasma y se extienden sobre un total de $200 \mu m$. El perfil se muestra en la figura 4.81. La coordenada z se mide sobre el eje de disparo del láser. El valor $z = 0$ indica la posición del cráter formado tras el disparo, z aumenta conforme nos alejamos del cráter.

Sin embargo, nosotros usaremos este perfil de forma completamente independiente, al margen de su procedencia. No estableceremos conexiones entre los resultados obtenidos y el experimento en cuestión, ya que para ello sería necesario llevar a cabo un análisis profundo y detallado, que ya no puede abordarse como parte de esta tesis doctoral. Así pues, para nuestro objetivo actual, hemos supuesto que las condiciones descritas en la figura 4.81 se corresponden con las de un plasma de Al con geometría plana en la dirección de la coordenada z y una anchura total de $L = 200 \mu m$. En

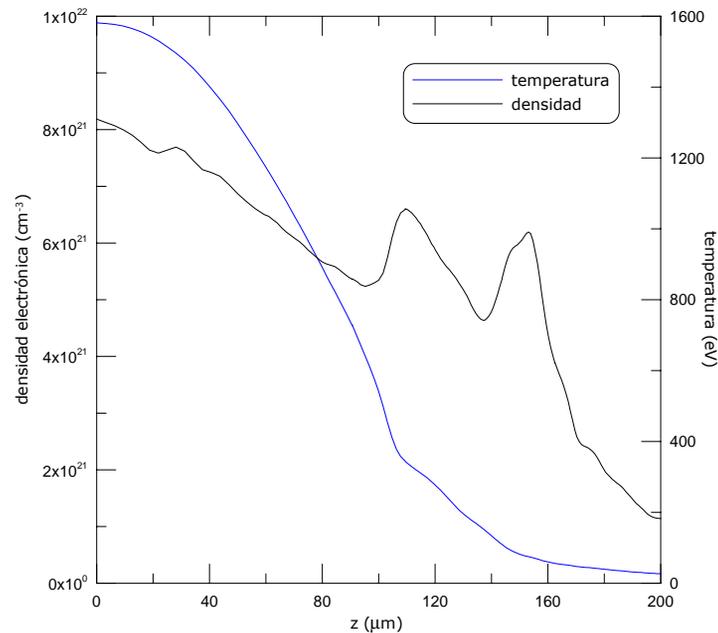


Figura 4.81. Variación de la temperatura y densidad electrónica con la posición en el interior de un plasma de Al. Es el ejemplo utilizado para mostrar la aplicabilidad de ABAKO en un medio con condiciones físicas no uniformes.

nuestros cálculos hemos usado una base de datos atómicos entre F-like Al y el ion desnudo generada con el módulo propio de ABAKO. Al igual que cuando tratamos la situación bajo condiciones uniformes, todas las líneas incluidas en el modelo fueron transportadas, asumiendo para ellas un perfil Doppler.

En la figura 4.82 representamos la variación espacial de la ionización. Como viene siendo habitual, presentamos también el resultado obtenido en la situación delgada. Teniendo en cuenta que en toda la extensión del plasma, la variación de la densidad electrónica se mantiene dentro de un orden de magnitud, la temperatura va a ejercer un papel dominante sobre la cinética de poblaciones, ya que varía desde los 1580 eV hasta unos 25 eV. Este hecho justifica el comportamiento de la ionización media de forma global. El plasma está muy ionizado para valores pequeños de z y constituido por especies menos ionizadas según aumenta z –si pensamos por un momento en el origen de los datos, el plasma está muy caliente en las proximidades del cráter y se va enfriando conforme nos alejamos de él–. En términos cualitativos, los efectos de opacidad son los mismos, independientemente de que las condiciones físicas sean uniformes o no. Así, como puede observarse, el cálculo grueso contribuye a un aumento de la ionización media para cualquier valor de z . Llama la atención el hecho de que a partir de las 130 μm , los cálculos delgado y grueso son muy similares.

La figura 4.83 muestra el comportamiento de las poblaciones iónicas. Hasta $z = 130 \mu m$ el transporte de líneas provoca una importante redistribución de la población. Por ejemplo, para

$z = 80 \mu m$, el cálculo grueso indica que el 80 % del plasma está compuesto por núcleos desnudos de Al y que el 17 % son iones hidrogenoides. En el caso delgado, la población está equitativamente repartida, un 46 % de núcleos desnudos y un 48 % de H-like Al. La ligera deformación que se observa en las curvas de H-like y He-like del cálculo grueso en torno a $z = 110 \mu m$ parece corresponderse con el máximo local de densidad electrónica que se alcanza en ese punto. A partir de las 130 μm , especies cada vez menos ionizadas van cobrando importancia de forma progresiva conforme disminuye la temperatura. Es justo en esta región donde los comportamientos ópticamente delgado y ópticamente grueso difieren mínimamente.

Lograremos un análisis más profundo estudiando el comportamiento de las poblaciones de nivel dentro un ion concreto. Esto es lo que mostramos en la figura 4.84 para He-like, en la región que va de las 100 a las 150 μm , donde la contribución de este ion resulta significativa. Las discrepancias entre las dos situaciones no son muy acusadas para el estado fundamental. Sin embargo, en los primeros estados excitados podemos encontrar hasta 3 órdenes de magnitud de diferencia. En el H-like encontramos una conducta análoga. A este respecto, debemos comentar que los experimentos del LULI citados se centraban en la obtención del espectro de emisión procedente de las zonas próximas al punto de impacto del láser. Ésta es precisamente la región donde las especies más ionizadas son las más abundantes. Así, a la vista de las figuras que hemos ido presentando y con vistas a afrontar un procedimiento de diagnóstico espectroscópica, resulta esencial incluir los efectos de opacidad y, por tanto, contar con un modelo de transporte radiativo como el de ABAKO, capaz de trabajar bajo condiciones físicas no uniformes. Por otro lado, el comportamiento de las poblaciones de nivel de Li-like, figura 4.85, pone de manifiesto algo que ya se intuía del análisis de la distribución de estados de carga. A partir de $z = 130 \mu m$ la cinética de poblaciones queda dominada por los procesos colisionales, ya que los cálculos delgado y grueso muestran un gran parecido. Sería necesario un estudio detallado de los espesores ópticos de las líneas más intensas de cada ion a las densidades y temperaturas correspondientes para explicar adecuadamente este fenómeno. Tal estudio es viable y puede ser uno de los primeros trabajos en los que sacar partido a las capacidades de la herramienta presentada a lo largo de esta tesis doctoral, ABAKO.

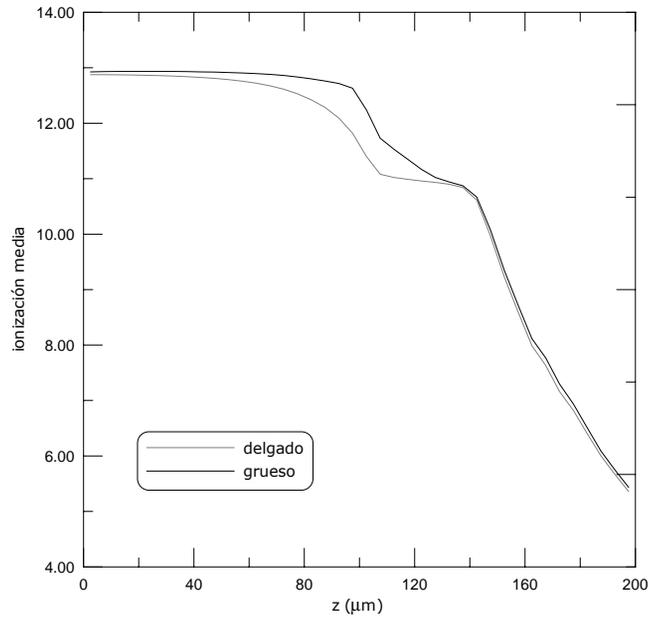


Figura 4.82. Variación de la ionización media con la posición en el interior del plasma de Al. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.

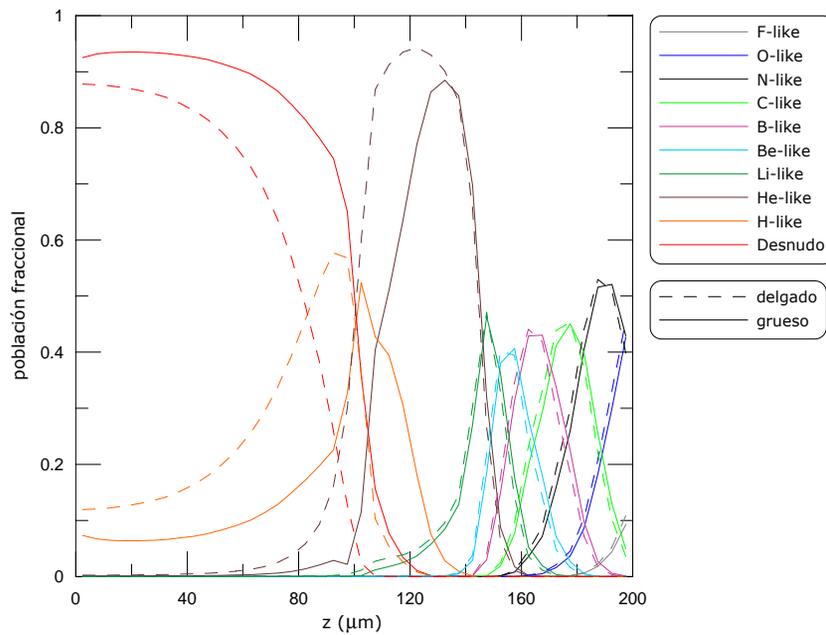


Figura 4.83. Variación de las poblaciones iónicas con la posición en el interior del plasma de Al. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.

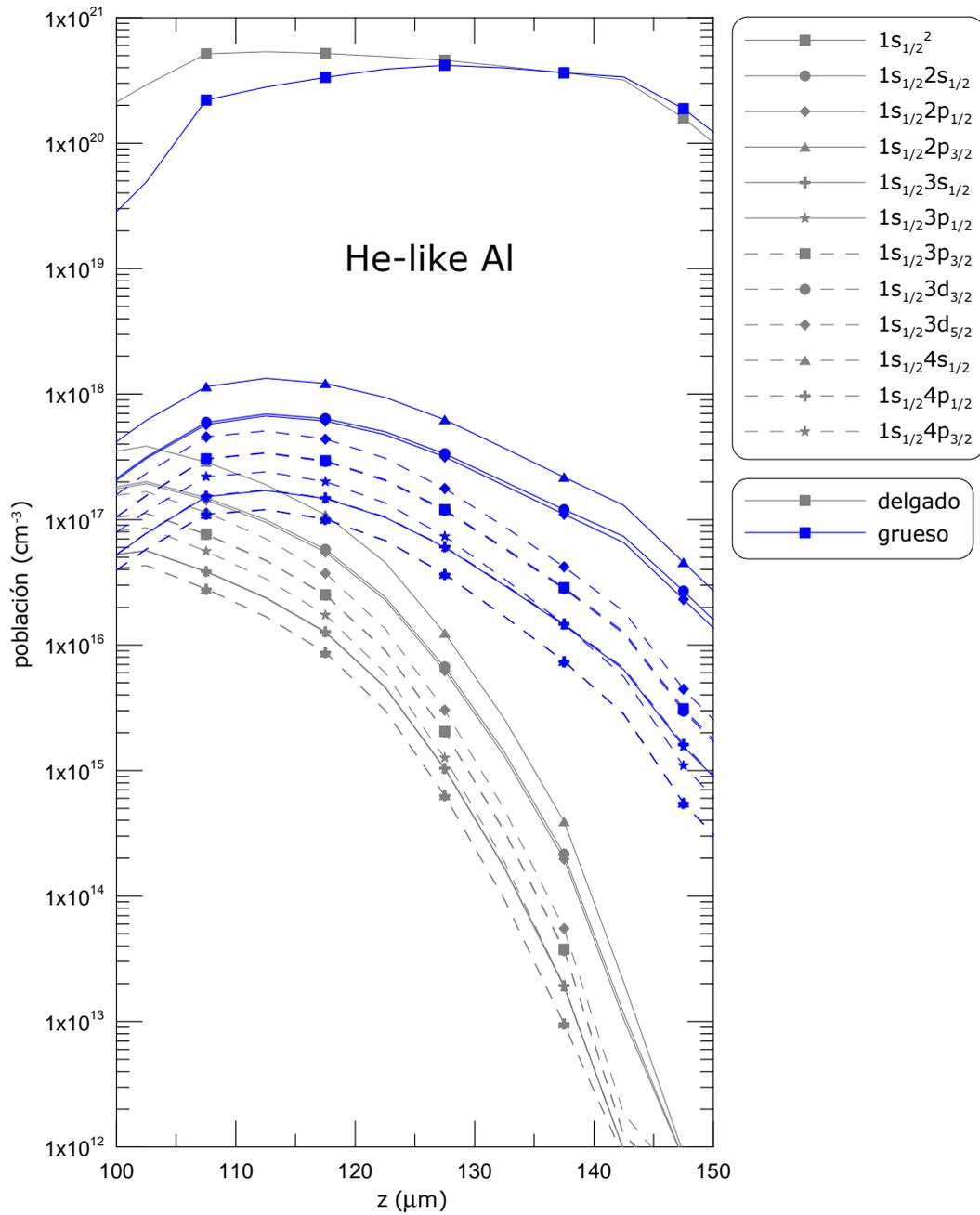


Figura 4.84. Variación de las densidades de los niveles de He-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.

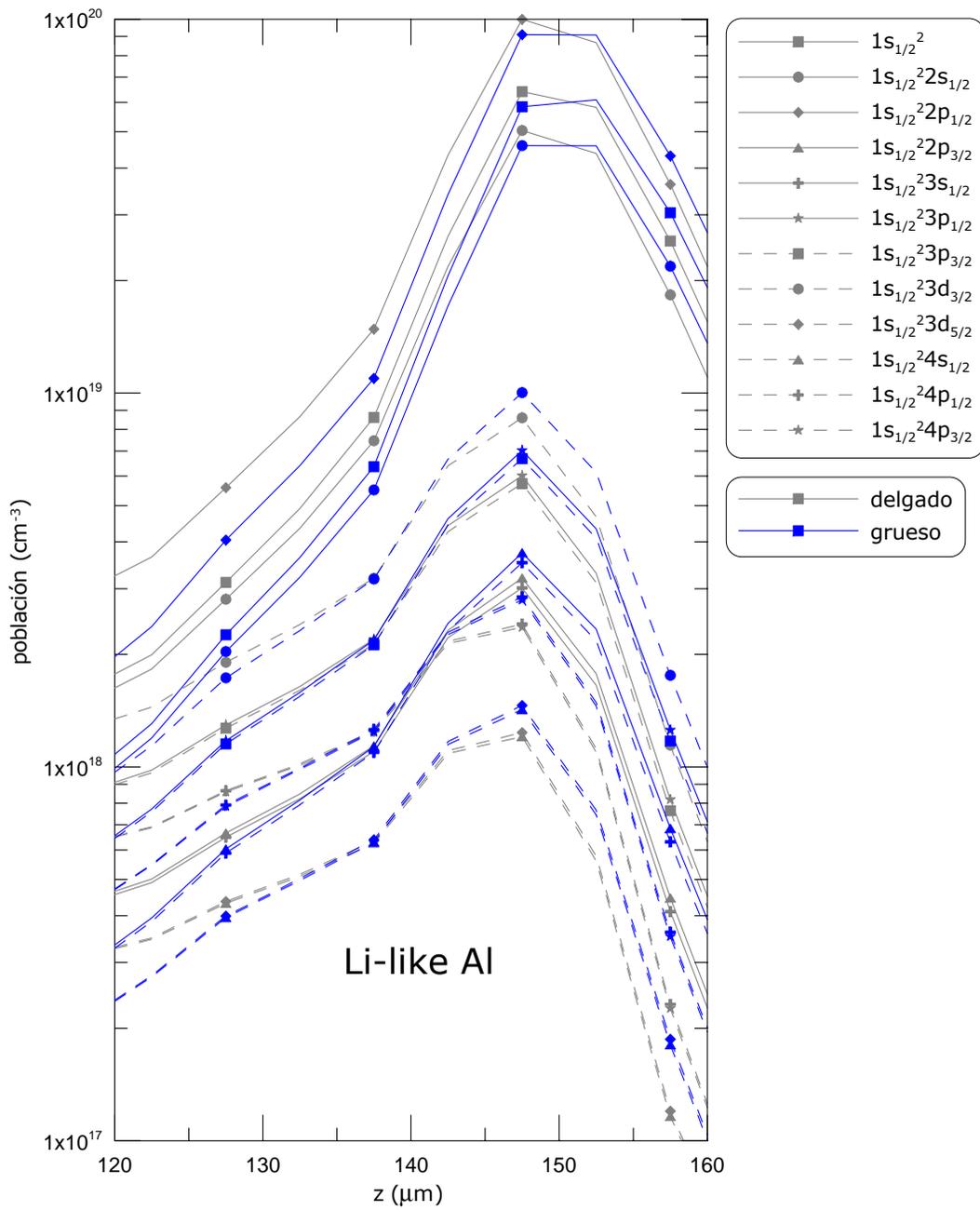


Figura 4.85. Variación de las densidades de los niveles de Li-like Al con la posición en el interior del plasma. Se muestra una comparación entre los cálculos ópticamente delgado y grueso.

5

Conclusiones y líneas futuras

5.1 Conclusiones

Las principales conclusiones que se derivan del trabajo realizado en esta tesis doctoral, suficientemente explicadas en los distintos apartados, se pueden resumir en:

1. Hemos desarrollado un nuevo código computacional llamado ABAKO, *Analytical expressions BAsed Kinetics cOde*, destinado al estudio de la cinética de poblaciones y las propiedades radiativas de plasmas en estado estacionario bajo condiciones de no-equilibrio local termodinámico.
2. ABAKO es aplicable sobre un amplio rango de condiciones físicas y situaciones distintas. Puede utilizarse para el análisis de plasmas con densidades y temperaturas de interés en diferentes áreas, astrofísica, litografía EUV, fusión por confinamiento magnético y, particularmente, fusión por confinamiento inercial. Es útil para el tratamiento de plasmas tanto ópticamente delgados, como ópticamente gruesos, ya que incorpora los efectos de opacidad sobre el espectro ligado-ligado a través de un modelo derivado de la técnica del factor de escape. En el caso de los plasmas ópticamente gruesos, ABAKO es capaz de abordar el transporte de radiación en situación homogénea, con condiciones físicas y poblaciones constantes, o bien, en situación no-homénea, sobre condiciones constantes o en presencia de variaciones espaciales de temperatura y densidad. A priori, el código desarrollado es aplicable sobre plasmas de elementos de cualquier valor del número atómico Z y constituido por iones en cualquiera de sus posibles estados de ionización. El conjunto de los cálculos descritos pueden llevarse a cabo sin un excesivo coste computacional.

3. ABAKO está compuesto esencialmente por dos módulos bien diferenciados, uno destinado al cálculo de la estructura atómica y otro que constituye el modelo colisional-radiativo, propiamente dicho. Finalmente, dispone de un módulo adicional para el cálculo de propiedades radiativas, como el coeficiente de absorción y emisividad multifrecuenciales, intensidad, etc.
4. ABAKO está basado en el uso de expresiones analíticas, tanto para la determinación de la estructura atómica, como para la construcción de la matriz colisional-radiativa. En consecuencia, se cimienta sobre una serie de modelos sencillos, que proporcionan en conjunto resultados competitivos, que permiten la introducción de modificaciones o mejoras de forma sencilla y que facilitan la obtención de conclusiones relativas a la física del problema objeto de estudio, algo que se pierde con relativa frecuencia en los modelos más sofisticados.
5. El cálculo de la estructura atómica se fundamenta en el uso de potenciales paramétricos desarrollados con anterioridad por nuestro grupo de investigación. Estos modelos se desarrollan bajo la aproximación de campo central, en un contexto relativista enmarcado en la teoría del funcional de la densidad. El uso de estos potenciales facilita considerablemente la obtención de la gran cantidad de datos atómicos necesarios después en el cálculo de poblaciones. Se demuestra que la calidad de estos datos es suficiente para el análisis poblacional y también para una estimación cualitativa razonable de las propiedades radiativas. En cualquier caso, para aquellas situaciones en las que sea necesario una determinación precisa de la estructura atómica, ABAKO ofrece la posibilidad de trabajar con datos procedentes de fuentes externas, que pueden ser bases de datos u otros códigos computacionales.
6. El modelo colisional-radiativo incorpora de forma explícita los siguientes procesos atómicos: ionización colisional y recombinación a tres cuerpos, excitación y desexcitación colisional, decaimiento espontáneo, recombinación radiativa, autoionización y captura electrónica. Con la excepción de la última pareja de procesos, los coeficientes de tasa de los procesos directos se evalúan mediante expresiones analíticas conocidas en la literatura. Los coeficientes de tasa de los procesos inversos se evalúan haciendo uso del principio de balance detallado.
7. Uno de los logros más significativos alcanzados en ABAKO es su capacidad para trabajar con estados autoionizantes. No se conoce en la literatura ninguna expresión analítica adecuada para determinar la tasa de autoionización. Por este motivo, se ha recurrido a una aproximación consistente en la evaluación de la sección eficaz del proceso inverso, la captura electrónica, a través de la sección eficaz de excitación colisional. A pesar de no ser una idea reciente, según nuestro conocimiento, ABAKO es el primer código basado en aproximaciones analíticas que utiliza este modelo para el tratamiento explícito de los estados autoionizantes bajo una descripción DCA relativista y la producción de cálculos cinéticos a gran escala. La adaptación de esta técnica para trabajar a su vez con el modelo de potenciales analíticos

- o, de forma más general, con una descripción de partícula independiente, produce, con un coste computacional mucho menor, resultados competitivos frente a otros modelos mucho más elaborados.
8. Para la resolución del sistema de ecuaciones de tasas se han empleado técnicas de almacenamiento *sparse* y un algoritmo basado en un método iterativo. Esto permite incluir en el modelo un gran número de niveles, necesarios por otra parte para el tratamiento de iones con un número significativo de electrones.
 9. En la línea del formalismo del factor de escape, se ha propuesto una técnica novedosa para el tratamiento del problema de transporte de líneas basada en la discretización espacial del medio y la definición de los llamados coeficientes de acoplamiento radiativo. El modelo ha sido desarrollado para un medio con geometría plana y es aplicable tanto en medios homogéneos como no-homogéneos. Los coeficientes de acoplamiento radiativo se determinan integrando sobre el perfil de línea un funcional que recoge de forma exacta los detalles dependientes de la geometría del medio. Esto ha sido posible aplicando al caso no-homogéneo el orden sugerido por Mancini *et al.* para evaluar los tres procesos de integración que aparecen en la expresión del factor de escape: integral de superficie, integral de volumen e integral frecuencial.
 10. Los resultados de ABAKO han sido ampliamente validados en numerosas situaciones. En el caso particular de plasmas de bajo Z ópticamente delgados y en un amplio rango de condiciones de densidad y temperatura, su comportamiento compite con otros modelos de primera línea internacional cualquiera que sean sus características, ya estén basados en cálculos detallados, en superconfiguraciones o en expresiones analíticas.
 11. En varios problemas de los que hemos abordado en esta tesis se pone de manifiesto la importancia de los mecanismos de autoionización y captura electrónica. Los resultados obtenidos en estos casos han confirmado la validez del modelo implementado en ABAKO para el tratamiento de estos procesos.
 12. En el caso de plasmas de alto Z , nuestros resultados han sido contrastados favorablemente con datos experimentales de Xe y Au. ABAKO proporciona ionizaciones medias y curvas de distribución de estados de carga próximas a las observadas experimentalmente. En la actualidad, no conocemos ningún resultado publicado en el que un mismo modelo CR haya sido capaz de producir, como ABAKO, unos valores de ionización media dentro del margen de error experimental sobre el conjunto de la experiencia de Xe y las tres de Au que hemos analizado. Además, se han llevado a cabo estimaciones razonables, comparables a las de otros códigos más complejos, de los espectros de emisión *M-shell* característicos de estos plasmas.

13. Prácticamente los mismos ejemplos anteriores fueron utilizados para validar la eficacia del modelo del factor de escape e incluir los efectos de opacidad bajo la aproximación de plasma homogéneo. La redistribución de población que tiene lugar como consecuencia de la reabsorción de fotones demostró ser fundamental para la obtención de resultados óptimos.
14. Nuestro grupo de investigación tuvo la oportunidad de participar en una experiencia con plasmas de Al llevada a cabo en el LULI (Francia). Del análisis de uno de los espectros obtenidos se desprende que, sustituyendo los datos atómicos procedentes de nuestro modelo de potenciales analíticos por datos externos de mayor calidad, ABAKO está capacitado para abordar problemas de diagnosis espectroscópica. En este ejemplo, nuestra estimación muestra un acuerdo bastante razonable con el espectro de emisión experimental. Nuestro estudio nos ha permitido concluir, además, que la radiación recogida no procede de una región del plasma con condiciones constantes, sino que el espectro integra zonas con condiciones físicas distintas.
15. Utilizamos el átomo de dos niveles como banco de pruebas para la técnica de transporte de líneas que hemos desarrollado. Como se demostró teóricamente, al incrementar el número de zonas espaciales, nuestros resultados reproducen con gran precisión la solución exacta de Avrett-Hummer para diferentes tipos de perfil y un amplio rango de valores del espesor total del medio τ_{tot} y el parámetro de extinción de fotones ϵ . Para un número de celdas fijo, la convergencia a la solución exacta se deteriora conforme aumenta τ_{tot} y disminuye ϵ , es decir, cuando se refuerza la situación *efectivamente delgada* en el medio. No obstante, en plasmas de laboratorio, donde $\tau_{tot} \lesssim 10^2 - 10^3$ y $\epsilon \gtrsim 10^{-4}$, la situación es favorable. Una subdivisión del medio donde el espesor de cada celda satisfaga $\Delta\tau \leq 5$ garantiza un error inferior al 10% en la mayoría de los casos.
16. En la aplicación del modelo de transporte radiativo sobre plasmas con iones de muchos niveles hemos distinguido dos situaciones: medios con condiciones físicas uniformes y con dependencia espacial. En el primero de los casos hemos puesto de manifiesto fenómenos ya conocidos, como, por ejemplo, que los efectos de opacidad favorecen la ionización del plasma, incrementando la población de los estados excitados.
17. El modelo de transporte desarrollado en ABAKO puede usarse sobre perfiles de densidad y temperatura con dependencia espacial. Este hecho representa un importante avance frente a otras propuestas de la literatura. Como ejemplo, hemos trabajado sobre un perfil de condiciones asociado a las experiencias realizadas en el LULI que antes mencionamos. En términos cualitativos los efectos del transporte de líneas son los mismos que en la situación uniforme.

5.2 Líneas futuras

Entendemos que esta tesis doctoral abre nuevas líneas de investigación en dos sentidos diferentes. Por un lado, el trabajo presentado en esta memoria se corresponde con el desarrollo y validación de una herramienta, que ahora puede utilizarse en el estudio de problemas más concretos y específicos, de interés en diversas áreas que ya han sido mencionadas. Las posibilidades a este respecto son numerosas y no vamos a enumerarlas aquí. Sin embargo, consideramos que las futuras líneas de trabajo, ligadas directamente al desarrollo de ABAKO, son aquellas acciones destinadas a su mejora y perfeccionamiento. Entre ellas podemos destacar las siguientes:

1. Implementación de un modelo híbrido de estructura atómica, que utilice datos con gran calidad para el estado fundamental y primeros estados excitados y datos procedentes de potenciales paramétricos para el resto de niveles.
2. Mejorar el tratamiento del continuum-lowering usando un formalismo basado en probabilidades de ocupación.
3. Adaptar el procedimiento de cálculo de los coeficientes de tasas de procesos atómicos con impacto electrónico para la inclusión de los efectos debidos a la presencia de electrones supratérmicos.
4. Mejorar la expresión para la determinación del coeficiente de tasa de excitación colisional incluyendo un término no proporcional a la fuerza de oscilador dipolar. De esta forma será posible contemplar también aquellas excitaciones prohibidas por las reglas de selección asociadas a las transiciones radiativas.
5. Adaptar el modelo para que pueda tratar situaciones en presencia de un campo externo de radiación.
6. Implementación de técnicas de aceleración de la convergencia en los procesos iterativos que se establecen al incluir los efectos de opacidad y continuum-lowering.
7. Adaptar el código para extender su aplicabilidad a problemas con dependencia temporal.
8. Extender el modelo de transporte radiativo desarrollado a las otras geometrías básicas, cilíndrica y esférica.
9. Extender el formalismo desarrollado para el transporte de líneas del espectro discreto también al espectro continuo.
10. Analizar las posibilidades de parametrización en función del espesor óptico de la expresión del factor de escape en situación homogénea y para las tres geometrías básicas, plana, cilíndrica y esférica.

11. Realización de un estudio previo para la estimación del espesor de todas las transiciones incluidas en el modelo. Aquéllas que resulten ser *efectivamente delgadas* podrían omitirse a la hora de efectuar el transporte, lo que supondría un ahorro considerable del tiempo de cálculo.
12. Analizar en detalle las posibilidades de ABAKO como herramienta de diagnosis espectroscópica. Adaptar el módulo de propiedades radiativas para la realización de cálculos sistemáticos e implementar un algoritmo de optimización y análisis espectroscópico.

A

Constantes fundamentales y equivalencias

A.1 Constantes fundamentales

Magnitud	Símbolo	Valor numérico	Unidades
velocidad de la luz en el vacío	c	2.997925×10^8	ms^{-1}
permitividad eléctrica en el vacío	ϵ_0	8.854187×10^{-12}	Fm^{-1}
constante de Planck	h	6.626069×10^{-34}	Js
carga elemental	e	1.602176×10^{-19}	C
constante de estructura fina	α	7.297353×10^{-3}	
constante de Rydberg, $\alpha^2 m_e c / 2h$	R_∞	10973732	m^{-1}
equivalente energético, $R_\infty hc$	I_H	13.605692	eV
radio de Bohr	a_0	0.529177×10^{-10}	m
masa del electrón	m_e	9.109382×10^{-31}	kg
número de Avogadro	N_A	6.022142×10^{23}	mol^{-1}
constante de Boltzmann	k	1.380650×10^{-23}	JK^{-1}

A.2 Equivalentes energéticos

Equivalente energético de	Equivalencia
-	$(1 J) = 6.241510 \times 10^{18} eV$
longitud	$(1 m^{-1}) hc = 1.239842 \times 10^{-6} eV$
temperatura	$(1 K) k = 8.617342 \times 10^{-5} eV$
masa	$(1 kg) c^2 = 5.609589 \times 10^{35} eV$

B

Relaciones entre las secciones eficaces de procesos atómicos inversos

B.1 Excitación y desexcitación colisional

Consideremos los mecanismos de excitación y desexcitación colisional entre los estados ζi y ζj , representados como



La energía del electrón varía como consecuencia de la colisión. Si toma el valor ε' antes de la excitación y ε tras ésta, entonces el principio de conservación de la energía exige

$$E_{\zeta i} + \varepsilon = E_{\zeta j} + \varepsilon', \quad (\text{B.2})$$

o bien

$$\varepsilon = E_{ij} + \varepsilon' \quad (\text{B.3})$$

Supongamos que nos encontramos en una situación de LTE y que, por tanto, en virtud del principio de balance detallado, las tasas diferenciales de excitación y desexcitación están exactamente balanceadas,

$$N_{\zeta i}^{LTE} n_e d\mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j} = N_{\zeta j}^{LTE} n_e d\mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}, \quad (\text{B.4})$$

donde $d\mathcal{E}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}$ y $d\mathcal{D}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}$ son los coeficientes de tasas diferenciales de excitación y desexcitación colisional.

Si detallamos los coeficientes de tasas en términos de las correspondientes secciones eficaces, se llega a

$$N_{\zeta i}^{LTE} n_e v \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^{exc}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = N_{\zeta j}^{LTE} n_e v' \sigma_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^{dex}(\varepsilon') f(\varepsilon') d\varepsilon', \quad (\text{B.5})$$

siendo $v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}}$ y $v' = \sqrt{\frac{2\varepsilon'}{m_e}}$ la velocidad del electrón libre antes y después de su encuentro con el ion.

A la vista de la expresión (B.3) ocurre $d\varepsilon = d\varepsilon'$ y entonces llegamos a la igualdad

$$N_{\zeta_i}^{LTE} n_e v \sigma_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^{exc}(\varepsilon) f(\varepsilon) = N_{\zeta_j}^{LTE} n_e v' \sigma_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^{dex}(\varepsilon') f(\varepsilon'). \quad (\text{B.6})$$

En LTE las poblaciones satisfacen la distribución de Boltzmann y el cociente $\frac{N_{\zeta_j}^{LTE}}{N_{\zeta_i}^{LTE}}$ resulta

$$\frac{N_{\zeta_j}^{LTE}}{N_{\zeta_i}^{LTE}} = \frac{g_{\zeta_j}}{g_{\zeta_i}} e^{-E_{ij}/T}, \quad (\text{B.7})$$

por tanto, la ecuación (B.6) se reduce a

$$g_{\zeta_i} \varepsilon \sigma_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^{exc}(\varepsilon) f(\varepsilon) = g_{\zeta_j} e^{-E_{ij}/T} \varepsilon' \sigma_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^{dex}(\varepsilon') f(\varepsilon'). \quad (\text{B.8})$$

En LTE la función de distribución de electrones libres es maxwelliana, luego

$$f(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\varepsilon^{1/2}}{T^{3/2}} e^{-\varepsilon/T}. \quad (\text{B.9})$$

Finalmente, sustituyendo (B.9) en (B.8) y teniendo presente (B.3), se obtiene

$$g_{\zeta_i} (\varepsilon' + E_{ij}) \sigma_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^{exc}(\varepsilon' + E_{ij}) = g_{\zeta_j} \varepsilon' \sigma_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^{dex}(\varepsilon'). \quad (\text{B.10})$$

A pesar de haber sido deducida a partir de la hipótesis de LTE, esta última relación sólo depende de magnitudes puramente atómicas y, por tanto, es de validez general. La ecuación (B.10) se conoce como *fórmula de Klein-Rosseland* y establece la relación microscópica existente entre las secciones eficaces de excitación y desexcitación colisional.

B.2 Ionización colisional y recombinación a tres cuerpos

La deducción de la relación entre las secciones eficaces de ionización colisional y recombinación a tres cuerpos es algo más compleja que en otros procesos, debido principalmente a que la sección eficaz se define de forma natural para procesos a dos cuerpos y en esta ocasión hay a un proceso a tres. Para obtener esta relación con todo rigor es necesario introducir algunas cuestiones relativas a la teoría atómica de colisiones, algo que, sin embargo, escapa a los propósitos de este trabajo. Por tanto, en este apartado seguiremos un procedimiento deductivo análogo al utilizado en el resto de procesos que son tratados en este apéndice. Nuestro objetivo es poner de manifiesto que independientemente de que los procesos sean radiativos o colisionales, a dos o a tres cuerpos, la utilización del principio de balance detallado permite establecer relaciones atómicas microscópicas entre los mecanismos directo e inverso.

Los procesos de ionización colisional y recombinación a tres cuerpos entre los estados ζ_i y $\zeta + 1j$ quedan descritos esquemáticamente a través de la reacción



Si ε es la energía del electrón incidente, ε' su valor tras ser dispersado por el ion y ε_b la energía del electrón que resulta expulsado, entonces el principio de conservación de la energía se expresa de la siguiente manera

$$E_{\zeta i} + \varepsilon = I_{\zeta} + E_{\zeta j} + \varepsilon' + \varepsilon_b, \quad (\text{B.12})$$

o bien

$$\varepsilon = E_{ij} + \varepsilon' + \varepsilon_b, \quad (\text{B.13})$$

donde $E_{ij} = I_{\zeta} - E_{\zeta i} + E_{\zeta+1j}$ es la energía umbral de ionización colisional.

Supongamos ahora que nos encontramos en una situación de LTE. En consecuencia, la tasa diferencial de ionización por impacto electrónico estará exactamente balanceada con la de recombinación a tres cuerpos. Esta relación se escribe como

$$N_{\zeta i}^{LTE} n_e d\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} = N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e^2 d\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3 \quad (\text{B.14})$$

siendo $d\mathcal{I}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}$ y $d\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^3$ los coeficientes de tasas diferenciales de ionización colisional y recombinación a tres cuerpos, respectivamente.

Cuando son tres las partículas que intervienen en el estado final del proceso, la energía puede distribuirse arbitrariamente entre ellas. Para este caso, todavía puede definirse una sección eficaz de manera análoga a lo que se hace cuando el estado final está compuesto únicamente por dos partículas, sólo que en esta nueva situación la *sección eficaz* tiene unidades de área por unidad de energía, es decir, es en realidad una *sección eficaz diferencial* respecto a la energía de la tercera partícula involucrada [58]. Teniendo esto presente, es posible reescribir (B.14) expresando los coeficientes de tasas diferenciales en función de las correspondientes secciones eficaces, esto es,

$$N_{\zeta i}^{LTE} n_e v \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{ion}(\varepsilon; \varepsilon_b) f(\varepsilon) d\varepsilon d\varepsilon_b = N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e^2 v' v_b \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{r3b}(\varepsilon', \varepsilon_b) f(\varepsilon') f(\varepsilon_b) d\varepsilon' d\varepsilon_b, \quad (\text{B.15})$$

donde $v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}}$ y $v' = \sqrt{\frac{2\varepsilon'}{m_e}}$ son las velocidades del electrón libre antes y después de la colisión y $v_b = \sqrt{\frac{2\varepsilon_b}{m_e}}$ es la velocidad adquirida por el electrón que inicialmente estaba ligado al ion.

Al diferenciar la relación (B.13) y utilizarla en (B.15) se llega a

$$N_{\zeta i}^{LTE} n_e v \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{ion}(\varepsilon; \varepsilon_b) f(\varepsilon) = N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e^2 v' v_b \sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{r3b}(\varepsilon', \varepsilon_b) f(\varepsilon') f(\varepsilon_b), \quad (\text{B.16})$$

En la ecuación anterior $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{ion}(\varepsilon; \varepsilon_b)$ tiene unidades de *área/energía* y $\sigma_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{r3b}(\varepsilon', \varepsilon_b)$ de *área \times área \times tiempo*. La sección eficaz total de ionización –con la que trabajamos en 3.4.3– viene dada por [58] $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{ion}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \int_0^{\varepsilon - E_{ij}} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{ion}(\varepsilon; \varepsilon_b) d\varepsilon_b$.

Recurramos ahora a varias relaciones características de la situación de LTE. En primer lugar, la población de los estados excitados dentro de un ion se distribuye de acuerdo con la estadística de Boltzmann,

$$N_{\zeta i}^{LTE} = N_{\zeta}^{LTE} \frac{g_{\zeta i} e^{-E_{\zeta i}/T}}{Z_{\zeta}(T)}, \quad (\text{B.17})$$

por otro lado, las poblaciones iónicas se relacionan a través de la ecuación de Saha,

$$\frac{N_{\zeta+1}^{LTE} n_e}{N_{\zeta}^{LTE}} = 2 \left(\frac{2\pi m_e T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{Z_{\zeta+1}(T)}{Z_{\zeta}(T)} e^{-I_{\zeta}/T}, \quad (\text{B.18})$$

y, finalmente, la distribución de electrones libres $f(\varepsilon)$ es maxwelliana (B.9).

Al utilizar estas tres expresiones en (B.16) y considerando (B.13) se llega a

$$g_{\zeta i} \varepsilon \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}^{ion}(\varepsilon; \varepsilon_b) = \frac{16\pi m_e}{h^3} g_{\zeta+1 j} \varepsilon' \varepsilon_b \sigma_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^{r3b}(\varepsilon', \varepsilon_b). \quad (\text{B.19})$$

Algunos textos se refieren a esta ecuación como *relación de Fowler*, que establece una ligadura entre la sección eficaz diferencial de ionización colisional y la sección eficaz de recombinación a tres cuerpos. Aunque ha sido deducida partiendo de la hipótesis de LTE, la expresión (B.19) es de validez general, ya que en ella sólo intervienen magnitudes atómicas microscópicas.

B.3 Absorción, emisión estimulada y emisión espontánea

Consideremos los procesos de fotoabsorción, emisión estimulada y emisión espontánea entre los estados ζi y ζj , representados a través de la relación

$$X_i^{\zeta} + \gamma \Leftrightarrow X_j^{\zeta}. \quad (\text{B.20})$$

Si la energía del fotón γ es $h\nu_{ij}$, entonces la ecuación de conservación de la energía se escribe como

$$E_{\zeta i} + h\nu_{ij} = E_{\zeta j}, \quad (\text{B.21})$$

o bien,

$$h\nu_{ij} = E_{ij}. \quad (\text{B.22})$$

Por otro lado, sean $\phi_{ij}^a(\nu)$, $\phi_{ji}^e(\nu)$ y $\phi_{ji}^s(\nu)$ los perfiles normalizados de absorción, emisión estimulada y emisión espontánea, respectivamente. Supongamos ahora que nos encontramos en situación de LTE y que, por tanto, la tasa neta de absorción está exactamente balanceada con la de emisión. Esto se expresa de la siguiente forma

$$N_{\zeta i}^{LTE} \mathcal{B}_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^a J_{ij}^a - N_{\zeta j}^{LTE} \mathcal{B}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^e J_{ji}^e = N_{\zeta j}^{LTE} \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}, \quad (\text{B.23})$$

donde

$$J_{ij}^a = \int_0^{\infty} \phi_{ij}^a(\nu) J(\nu) d\nu, \quad (\text{B.24a})$$

$$J_{ji}^e = \int_0^{\infty} \phi_{ji}^e(\nu) J(\nu) d\nu, \quad (\text{B.24b})$$

y siendo $J(\nu)$ la intensidad de radiación media.

Ahora bien, en LTE ocurre que $J(\nu) = B(\nu)$, donde $B(\nu)$ es la función de distribución de Planck, dada por

$$B(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/T} - 1}. \quad (\text{B.25})$$

Integrando en frecuencia y teniendo en cuenta que $B(\nu)$ apenas varía sobre el perfil de línea [67], es posible escribir

$$(N_{\zeta_i} \mathcal{B}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^a - N_{\zeta_j} \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e) B(\nu_{ij}) = N_{\zeta_j} \mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}. \quad (\text{B.26})$$

Si ahora sustituimos la expresión para $B(\nu_{ij})$ y reordenamos términos, se llega a

$$\frac{\mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i} / \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e}{\frac{N_{\zeta_i} \mathcal{B}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^a}{N_{\zeta_j} \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e} - 1} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu_{ij}/T} - 1}. \quad (\text{B.27})$$

Por otro lado, sabemos que en LTE las poblaciones siguen la distribución de Boltzmann, si además tenemos en cuenta (B.22), entonces

$$\frac{\mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i} / \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e}{\frac{g_{\zeta_i} \mathcal{B}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^a e^{h\nu_{ij}/T}}{g_{\zeta_j} \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e} - 1} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu_{ij}/T} - 1}. \quad (\text{B.28})$$

La igualdad anterior debe ser cierta para cualquier valor de T , esto nos permite identificar términos y obtener las conocidas relaciones entre los coeficientes de Einstein,

$$\mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e, \quad (\text{B.29})$$

$$g_{\zeta_i} \mathcal{B}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^a = g_{\zeta_j} \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e. \quad (\text{B.30})$$

Por último, de acuerdo con lo que se ha expuesto en este apartado y recordando la expresión (3.57) para la evaluación de los coeficientes de tasas de procesos radiativos inducidos, no es difícil deducir la relación entre las secciones eficaces de absorción y emisión y los correspondientes coeficientes de Einstein,

$$\sigma_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^a(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} \mathcal{B}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^a \phi_{ij}^a(\nu), \quad (\text{B.31})$$

$$\sigma_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} \mathcal{B}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e \phi_{ji}^e(\nu). \quad (\text{B.32})$$

De esta manera, bajo redistribución completa, la relación entre las secciones eficaces de absorción y emisión estimulada es

$$g_{\zeta_i} \sigma_{\zeta_i \rightarrow \zeta_j}^a(\nu) = g_{\zeta_j} \sigma_{\zeta_j \rightarrow \zeta_i}^e(\nu). \quad (\text{B.33})$$

B.4 Fotoionización, recombinación estimulada y recombinación radiativa

Consideremos los procesos de fotoionización, recombinación estimulada y recombinación radiativa entre los estados ζi y $\zeta + 1j$, representados a través de la relación

$$X_i^\zeta + \gamma \Leftrightarrow X_j^{\zeta+1} + e^-. \quad (\text{B.34})$$

Si la energía del fotón γ es $h\nu$, entonces el principio de conservación de la energía exige

$$h\nu = E_{ij} + \varepsilon, \quad (\text{B.35})$$

donde E_{ij} representa la energía de transición o energía umbral de fotoionización, dada por

$$E_{ij} = I_\zeta - E_{\zeta i} + E_{\zeta+1j}. \quad (\text{B.36})$$

Supongamos ahora que nos encontramos en una situación de LTE y que, por tanto, la tasa neta de fotoionización –inducida por fotones con energía perteneciente al intervalo $h\nu \pm d(h\nu)$ – está exactamente balanceada con la de recombinación radiativa –debida al encuentro de un ion con electrones de energía $\varepsilon \pm d\varepsilon$ –. Esta ecuación de equilibrio diferencial se expresa de la siguiente manera

$$N_{\zeta i}^{LTE} d\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j} - N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e d\mathcal{P}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e = N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e d\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r, \quad (\text{B.37})$$

donde $d\mathcal{P}_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}$, $d\mathcal{P}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e$ y $d\mathcal{R}_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^r$ son los coeficientes de tasas diferenciales de fotoionización, recombinación estimulada y recombinación radiativa, respectivamente.

En los procesos correspondientes, interesa hacer explícita la dependencia sobre la función de distribución de fotones o de electrones libres. Por este motivo, la relación (B.37) se reescribe como

$$N_{\zeta i}^{LTE} p_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\nu) B(\nu) d(h\nu) - N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e p_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon) B(\nu) f(\varepsilon) d\varepsilon = N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e r_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (\text{B.38})$$

siendo $B(\nu) \equiv B(\nu, T)$ la función de distribución de Planck a temperatura T y $f(\varepsilon)$ la función de distribución de energía de electrones libres, que en situación de LTE se corresponde con una distribución maxwelliana de temperatura T . La comparación entre (B.37) y (B.38) sirve también para establecer la definición de los coeficientes $p_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\nu)$, $p_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon)$ y $r_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\varepsilon)$.

Si en (B.38) despejamos $B(\nu)$ se llega a

$$\frac{r_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\varepsilon) / p_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon)}{\frac{N_{\zeta i}^{LTE}}{N_{\zeta+1j}^{LTE} n_e} \frac{p_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\nu)}{p_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon)} \frac{1}{f(\varepsilon)} - 1} = B(\nu). \quad (\text{B.39})$$

Nos interesa ahora trabajar con el cociente $N_{\zeta i}^{LTE} / N_{\zeta+1j}^{LTE}$ que aparece en el denominador de la expresión anterior. En LTE se satisface la distribución de Boltzmann para las poblaciones,

$$N_{\zeta i} = N_\zeta \frac{g_{\zeta i} e^{-E_{\zeta i}/T}}{Z_\zeta(T)}, \quad (\text{B.40})$$

por tanto,

$$\frac{N_{\zeta i}^{LTE}}{N_{\zeta+1 j}^{LTE}} = \frac{N_{\zeta}^{LTE}}{N_{\zeta+1}^{LTE}} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1 j}} \frac{Z_{\zeta+1}(T)}{Z_{\zeta}(T)} \frac{e^{-E_{\zeta i}/T}}{e^{-E_{\zeta+1 j}/T}}. \quad (\text{B.41})$$

Pero además, las poblaciones iónicas se relacionan a través de la ecuación de Saha,

$$\frac{N_{\zeta+1}^{LTE} n_e}{N_{\zeta}^{LTE}} = 2 \left(\frac{2\pi m_e T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{Z_{\zeta+1}(T)}{Z_{\zeta}(T)} e^{-I_{\zeta}/T}. \quad (\text{B.42})$$

Combinando (B.41) y (B.42) y utilizando también la ecuación (B.35), encontramos

$$\frac{N_{\zeta i}^{LTE}}{N_{\zeta+1 j}^{LTE}} = n_e \frac{1}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e T} \right)^{3/2} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1 j}} e^{(h\nu - \varepsilon)/T}. \quad (\text{B.43})$$

Ahora sustituimos en (B.39) la ecuación (B.43) y las expresiones (B.9) y (B.25) para la distribución maxwelliana $f(\varepsilon)$ y la función de Planck $B(\nu)$, respectivamente. De esta forma se obtiene

$$\frac{r_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}(\varepsilon)/p_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon)}{\frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1 j}} \frac{\varepsilon^{-1/2}}{4\pi} \left(\frac{h^2}{2m_e} \right)^{3/2} \frac{p_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}(\nu)}{p_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon)} e^{h\nu/T} - 1} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/T} - 1}. \quad (\text{B.44})$$

De manera similar al procedimiento seguido en apartados anteriores, la última ecuación es válida para cualquier valor de T y, por tanto, ha de cumplirse

$$r_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}(\varepsilon) = \frac{2h\nu^3}{c^2} p_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon), \quad (\text{B.45})$$

$$\frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1 j}} \frac{\varepsilon^{-1/2}}{4\pi} \left(\frac{h^2}{2m_e} \right)^{3/2} \frac{p_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}(\nu)}{p_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon)} = 1. \quad (\text{B.46})$$

Despejando $p_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon)$ de (B.46) y sustituyendo en (B.45) también es posible escribir

$$r_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}(\varepsilon) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1 j}} \frac{\varepsilon^{-1/2}}{4\pi} \left(\frac{h^2}{2m_e} \right)^{3/2} p_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}(\nu). \quad (\text{B.47})$$

Nuestro objetivo es encontrar la relación existente entre las secciones eficaces de los procesos atómicos que ahora nos ocupan, por tanto, debemos hacer aparecer estas magnitudes en las ecuaciones que estamos manejando. Un análisis dimensional y la contrastación de nuestras ecuaciones con el formalismo teórico estándar de la literatura [17, 58, 67] permite establecer

$$r_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}(\varepsilon) = v \sigma_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^{rad}(\varepsilon), \quad (\text{B.48})$$

$$h p_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}(\nu) = \frac{4\pi}{h\nu} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}^{pho}(\nu), \quad (\text{B.49})$$

donde $v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m_e}}$ es la velocidad del electrón libre involucrado en el proceso y $\sigma_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^{rad}(\varepsilon)$ y $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}^{pho}(\nu)$ las secciones eficaces de recombinación radiativa y fotoionización, respectivamente.

Ahora, basta sustituir (B.48) y (B.49) en (B.47) para llegar a la conocida *relación de Milne* entre las secciones eficaces de recombinación radiativa y fotoionización,

$$\sigma_{\zeta+1 j \rightarrow \zeta i}^{rad}(\varepsilon) = \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1 j}} \frac{1}{2m_e c^2} \frac{(h\nu)^2}{\varepsilon} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1 j}^{pho}(\nu). \quad (\text{B.50})$$

Las tasas asociadas a estos dos últimos procesos dependen bien de la distribución de electrones o bien de la distribución de fotones, dicho de otra manera, dependen del encuentro de un ion con un único tipo de partículas, electrones o fotones. En cambio, en la recombinación estimulada, el encuentro ion-electrón está influenciado (inducido) por el campo de radiación y, por tanto, su tasa muestra una doble dependencia, sobre electrones y fotones. No es habitual en este caso hablar de una sección eficaz de recombinación estimulada, pero sí de un coeficiente $\beta_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon)$ asociado a dicho proceso y definido por analogía con la expresión (B.48),

$$p_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^e(\varepsilon) = v \beta_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon). \quad (\text{B.51})$$

El coeficiente $\beta_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon)$ no tiene unidades área, pero el producto $\beta_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon)J(\nu)$ sí.

Sustituyendo (B.51) y (B.49) en (B.46) encontramos la relación existente entre la sección eficaz de fotoionización y el coeficiente de recombinación estimulada, esto es,

$$\beta_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}^{phr}(\varepsilon) = \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} \frac{h^2}{4m_e} \frac{1}{\varepsilon} \frac{1}{h\nu} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu). \quad (\text{B.52})$$

C

Perfiles de línea

C.1 Perfil Lorentz

Con la excepción del estado fundamental, todos los niveles atómicos ζ_i de un ion/átomo decaen al cabo de un *tiempo de vida* finito τ_{ζ_i} . De acuerdo con el principio de incertidumbre, la energía E_{ζ_i} de un nivel particular no puede determinarse de forma exacta, sino que tiene asociada una incertidumbre \hbar/τ_{ζ_i} . En consecuencia, para una transición $\zeta_i \leftrightarrow \zeta_j$, existe una cierta probabilidad de que se emitan o absorban fotones con energías pertenecientes al intervalo centrado en $E_{ij} = |E_{\zeta_j} - E_{\zeta_i}|$ y de anchura $\hbar \left(\frac{1}{\tau_{\zeta_i}} + \frac{1}{\tau_{\zeta_j}} \right)$. Esto es, debido a la incertidumbre en las energías de nivel, la línea se *ensancha* y es posible definir una función de distribución o *perfil de línea* para la intensidad de radiación asociada a dicha transición [15,67]. En la situación que hemos descrito, el perfil de línea $F_{Lor}(\nu)$ adopta la forma de una función lorentziana,

$$F_{Lor}(\nu) = \frac{(\Gamma_{rad}/4\pi)^2}{(\nu - \nu_{ij})^2 + (\Gamma_{rad}/4\pi)^2}, \quad (\text{C.1})$$

siendo ν la frecuencia del fotón y $\nu_{ij} = E_{ij}/h$ la frecuencia en el centro de la línea. El parámetro Γ_{rad} se conoce como *ensanchamiento natural* y viene dado por

$$\Gamma_{rad} = \frac{1}{\tau_{\zeta_i}} + \frac{1}{\tau_{\zeta_j}}, \quad (\text{C.2})$$

donde, a su vez,

$$\frac{1}{\tau_{\zeta_i}} = \sum_{m < i} \mathcal{A}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_m}, \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{1}{\tau_{\zeta_j}} = \sum_{m < j} \mathcal{A}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_m}, \quad (\text{C.4})$$

y $\mathcal{A}_{\zeta_i \rightarrow \zeta_m}$ es el coeficiente de Einstein para el decaimiento espontáneo.

Es habitual trabajar con un perfil de línea normalizado $\phi_{Lor}(\nu)$, esto es, aquél que satisface

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{Lor}(\nu) d\nu = 1. \quad (C.5)$$

De esta última condición y utilizando (C.1) se deduce

$$\phi_{Lor}(\nu) = \frac{\Gamma_{rad}}{4\pi^2} \frac{(\Gamma_{rad}/4\pi)^2}{(\nu - \nu_{ij})^2 + (\Gamma_{rad}/4\pi)^2}. \quad (C.6)$$

Por otro lado, sabemos que los iones que conforman el plasma sufren colisiones con otras partículas del mismo. En cada colisión existe una cierta probabilidad de que un ion en el estado ζ_j experimente una transición no-radiativa a otro estado de menor energía, contribuyendo de esta manera a una disminución del tiempo de vida del estado ζ_j . Podría definirse entonces el tiempo de decaimiento colisional τ'_{ζ_j} del estado ζ_j a partir de

$$\frac{1}{\tau'_{\zeta_j}} = n_e \sum_{m < j} \mathcal{D}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_m}, \quad (C.7)$$

siendo $\mathcal{D}_{\zeta_j \rightarrow \zeta_m}$ el coeficiente de tasa de desexcitación colisional.

De acuerdo con lo dicho, el ensanchamiento total de la línea Γ resulta entonces

$$\Gamma = \Gamma_{rad} + \Gamma_{col} = \left(\frac{1}{\tau_{\zeta_i}} + \frac{1}{\tau_{\zeta_j}} \right) + \left(\frac{1}{\tau'_{\zeta_i}} + \frac{1}{\tau'_{\zeta_j}} \right), \quad (C.8)$$

En esta situación, el perfil continúa siendo lorentziano, con la única diferencia de que en las expresiones (C.1) y (C.6) habría que utilizar Γ en lugar de Γ_{rad} .

Es útil dar una expresión para determinar la semianchura a mitad de altura HWHM en el caso del perfil lorentziano. Es fácil deducir que

$$HWHM_{Lor} = \frac{\Gamma}{4\pi}. \quad (C.9)$$

C.2 Perfil Doppler

Teniendo en cuenta que los iones en el medio están en continuo movimiento, las frecuencias características de emisión o absorción de radiación van a sufrir variaciones, respecto a la situación estática, provocadas por el efecto Doppler. Como sabemos, dichas variaciones dependen de la velocidad de los iones. Ahora bien, asumiendo que éstos se comportan como un gas ideal no-relativista a temperatura¹ T y que, por tanto, la distribución de velocidades es de tipo maxwelliana, no es difícil demostrar que el efecto Doppler provoca también un ensanchamiento de la línea, caracterizado por un perfil de tipo gaussiano [15, 67], esto es,

$$F_{Dop}(\nu) = \exp \left[-\frac{(\nu - \nu_{ij})^2}{\Gamma_{Dop}^2} \right], \quad (C.10)$$

¹Téngase en cuenta que ésta es la temperatura iónica y no la electrónica.

donde Γ_{Dop} –que también suele denotarse como $\Delta\nu_D$ – es el *ensanchamiento Doppler*, dado por

$$\Gamma_{Dop} = \sqrt{\frac{2T}{Mc^2}}\nu_{ij}, \quad (C.11)$$

siendo M la masa del ion. Si A es el peso atómico, entonces $M = A/N_A$ y el ensachamiento Doppler puede calcularse como

$$\Gamma_{Dop} = 4.634 \times 10^{-5} \sqrt{\frac{T}{A}}\nu_{ij}, \quad (C.12)$$

con T en eV y A en g/mol .

El perfil Doppler normalizado $\phi_{Dop}(\nu)$ queda definido a partir de la expresión

$$\phi_{Dop}(\nu) = \frac{1}{\Gamma_{Dop}\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(\nu - \nu_{ij})^2}{\Gamma_{Dop}^2}\right]. \quad (C.13)$$

La semianchura a mitad de altura en el caso del perfil Doppler viene dada por

$$HWHM_{Dop} = \sqrt{\ln 2}\Gamma_{Dop} \quad (C.14)$$

C.3 Perfil Voigt

En general, cuando observamos una línea espectral procedente, por ejemplo, de un plasma de laboratorio o de una atmósfera estelar, estamos viendo realmente los efectos combinados los dos tipos de ensanchamiento que acabamos de describir. En este caso, la forma de la línea viene dada por la convolución de las dos distribuciones correspondientes [16, 67] y la función resultante se conoce como *perfil Voigt*.

Con el cambio de variable $x = (\nu - \nu_{ij})/\Gamma_{Dop}$ y teniendo en cuenta las ecuaciones (C.1) y (C.10), la convolución se escribe como

$$\int_{-\infty}^{\infty} F_{Dop}(y) F_{Lor}(x - y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{a^2 e^{-y^2}}{(x - y)^2 + a^2} dy, \quad (C.15)$$

donde el *parámetro de ensanchamiento* a viene dado por

$$a = \frac{\Gamma}{4\pi\Gamma_{Dop}}. \quad (C.16)$$

Para determinar el perfil Voigt normalizado $\phi_{Voigt}(\nu)$, conviene tener en cuenta el resultado $\int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{(x-y)^2 + a^2} dy \right] dx = \frac{\pi^{3/2}}{a}$. Así, es fácil deducir

$$\phi_{Voigt}(\nu) \equiv \phi_{Voigt}(x) = \frac{a}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{(x - y)^2 + a^2} dy. \quad (C.17)$$

En el caso del perfil Voigt, la semianchura a mitad de altura puede estimarse como [175]

$$HWHM_{Voigt} \approx a + 0.85. \quad (C.18)$$

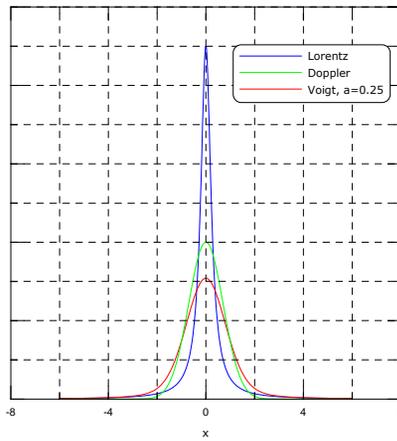


Figura C.1. Comparación entre perfiles de línea Lorentz, Doppler y Voigt con $a = 0.25$.

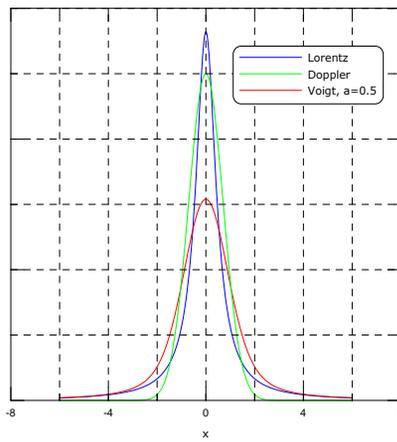


Figura C.2. Comparación entre perfiles de línea Lorentz, Doppler y Voigt con $a = 0.5$.

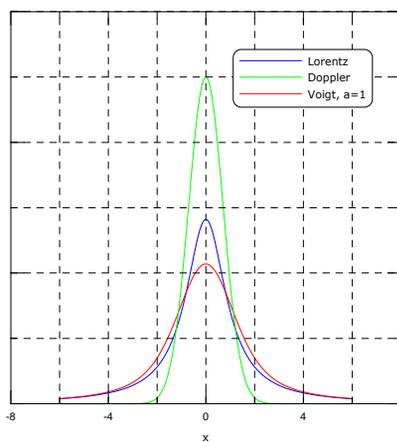


Figura C.3. Comparación entre perfiles de línea Lorentz, Doppler y Voigt con $a = 1$.

Es interesante analizar el comportamiento del perfil Voigt para valores extremos del parámetro a . Así, cuando $a \ll 1$ el ensachamiento Doppler es dominante y es posible obtener una representación esquemática del perfil dada por [67]

$$\phi_{Voigt}(x) \approx \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} + \frac{a}{\pi x^2}. \quad (\text{C.19})$$

De esta última expresión se deduce que en la porción central de la línea el efecto Doppler adquiere un papel dominante, mientras que en las alas –para valores grandes de x – prevalece el ensanchamiento natural. En particular, para el caso límite $a \rightarrow 0$ se recupera el resultado (C.13).

Por otro lado, cuando el ensanchamiento natural predomina sobre el Doppler y, en consecuencia, $a \gg 1$, la función Voigt muestra un comportamiento muy similar al lorentziano en todo el rango de frecuencias [67].

En las figuras C.1, C.2 y C.3 se ilustra de qué manera se modifica el perfil de línea al convolucionar las funciones lorentziana y gaussiana. Pueden observarse también los comportamientos asintóticos que acabamos de describir.

D

Solución formal de la ecuación de transferencia radiativa

D.1 Solución de una EDO de primer orden utilizando un factor integrante

Supongamos que estamos interesados en encontrar la solución $y(x)$ de una ecuación diferencial ordinaria (EDO) de primer orden del tipo

$$\frac{dy(x)}{dx} + p(x)y(x) = g(x). \quad (\text{D.1})$$

Buscamos entonces una función $r(x)$ denominada *factor integrante* tal que

$$r(x) \frac{dy(x)}{dx} + r(x)p(x)y(x) = \frac{d}{dx}[r(x)y(x)]. \quad (\text{D.2})$$

Para que se satisfaga esta condición debe cumplirse $r(x)p(x) = \frac{dr(x)}{dx}$. Integrando esta última ecuación se obtiene

$$\int_{r(x_0)}^{r(x)} \frac{dr}{r} = \int_{x_0}^x p(x') dx', \quad (\text{D.3})$$

$$r(x) = r(x_0) \exp \left[\int_{x_0}^x p(x') dx' \right]. \quad (\text{D.4})$$

Por conveniencia tomamos $r(x_0) = 1$ y entonces el factor integrante resulta

$$r(x) = \exp \left[\int_{x_0}^x p(x') dx' \right]. \quad (\text{D.5})$$

Ahora multiplicamos la ecuación diferencial (D.1) por $r(x)$ y teniendo en cuenta la relación (D.2) llegamos a

$$\frac{d}{dx}[r(x)y(x)] = r(x)g(x). \quad (\text{D.6})$$

De esta última ecuación es fácil obtener $y(x)$,

$$\int_{x_0}^x \frac{d}{dx'} [r(x') y(x')] dx' = \int_{x_0}^x r(x') g(x') dx' \quad (\text{D.7})$$

$$y(x) = \frac{y(x_0)}{r(x)} + \frac{1}{r(x)} \int_{x_0}^x r(x') g(x') dx'. \quad (\text{D.8})$$

Sustituyendo la expresión (D.5) para el factor integrante, la solución de la EDO viene finalmente dada por

$$y(x) = y(x_0) \exp \left[- \int_{x_0}^x p(x') dx' \right] + \int_{x_0}^x g(x') \exp \left[- \int_{x'}^x p(x'') dx'' \right] dx'. \quad (\text{D.9})$$

D.2 Solución formal de la ecuación de transferencia radiativa

Nuestro punto de partida es la ecuación de transferencia radiativa en estado estacionario escrita sobre la dirección del rayo (3.157),

$$\frac{\partial I(s, \nu)}{\partial s} = -\kappa(s, \nu) I(s, \nu) + j(s, \nu). \quad (\text{D.10})$$

Esta ecuación puede interpretarse como una EDO del mismo tipo que (D.1). Por tanto, teniendo en cuenta las indicaciones del apartado anterior y, en particular, la expresión (D.9), la solución de (D.10) viene dada por

$$I(s, \nu) = I(s_0, \nu) \exp \left[- \int_{s_0}^s \kappa(s', \nu) ds' \right] + \int_{s_0}^s j(s', \nu) \exp \left[- \int_{s'}^s \kappa(s'', \nu) ds'' \right] ds'. \quad (\text{D.11})$$

Ahora bien, recordando que el espesor óptico $\tau(s_1, s_2; \nu)$ se define como

$$\tau(s_1, s_2; \nu) = \int_{s_1}^{s_2} \kappa(s, \nu) ds, \quad (\text{D.12})$$

la ecuación (D.11) se reescribe como

$$I(s, \nu) = I(s_0, \nu) e^{-\tau(s_0, s; \nu)} + \int_{s_0}^s j(s', \nu) e^{-\tau(s', s; \nu)} ds', \quad (\text{D.13})$$

lo que se conoce como *solución formal de la ecuación de transferencia radiativa*.

Por otro lado, en geometría plana, la dirección OZ representa la dirección perpendicular a las superficies que delimitan el medio. Asimismo, sea θ el ángulo que forma la dirección de propagación con el eje OZ y sea $\mu = \cos\theta$. De esta forma, s y z satisfacen la relación $s = z/\mu$. Entonces, la solución formal de la ecuación de transferencia particularizada para geometría plana viene dada por

$$I(z, \nu, \mu) = I(z_0, \nu, \mu) e^{-\tau(z_0, z; \nu)/\mu} + \frac{1}{\mu} \int_{z_0}^z j(z', \nu) e^{-\tau(z', z; \nu)/\mu} dz'. \quad (\text{D.14})$$

E

Deducción de los coeficientes de acoplamiento radiativo

El objetivo de este apéndice es exponer el proceso deductivo que hemos seguido para llegar a las expresiones utilizadas en ABAKO para el cálculo de la probabilidad de escape C_{ij}^q y los coeficientes de acoplamiento radiativo C_{ij}^{pq} . Dichas expresiones constituyen el núcleo fundamental del modelo propuesto para el transporte de líneas en plasmas no-homogéneos con geometría plana.

Por completitud en el apéndice, creemos conveniente repetir los primeros pasos de la deducción, aunque ya hayan sido expuestos en la sección 3.5.2. Así, nuestro punto de partida es la expresión que nos da el factor de escape Λ_{ji}^q asociado a la transición $\zeta_j \rightarrow \zeta_i$ en la celda q ,

$$\Lambda_{ji}^q = \frac{1}{\Delta z_q} \int_{z_q}^{z_{q+1}} \Lambda_{ji}(z) dz. \quad (\text{E.1})$$

Si recordamos la expresión general (3.155) para Λ_{ji} y (3.161) para J_{ij} , y particularizamos para la situación de geometría plana llegamos a

$$\Lambda_{ji}(z) = 1 - \frac{1}{S_{ij}(z)} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{ij}(z, \nu) J(z, \nu) d\nu. \quad (\text{E.2})$$

Centremos ahora nuestra atención en la intensidad media $J(z, \nu)$. El problema que estamos tratando presenta simetría axial, esto es, la intensidad de radiación es independiente de φ , $I(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{e}) \equiv I(z, \nu, \theta, \varphi) = I(z, \nu, \theta)$. De esta forma, la intensidad media puede calcularse como

$$J(z, \nu) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I(z, \nu, \theta) \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{1}{2} \int_0^\pi I(z, \nu, \theta) \sin \theta d\theta. \quad (\text{E.3})$$

y al hacer el cambio de variable $\mu = \cos \theta$ se obtiene

$$J(z, \nu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I(z, \nu, \mu) d\mu. \quad (\text{E.4})$$

Es habitual desdoblar la integral anterior en dos términos de la forma siguiente

$$J(z, \nu) = \frac{1}{2} \left[\int_{-1}^0 I(z, \nu, \mu) d\mu + \int_0^1 I(z, \nu, \mu) d\mu \right]. \quad (\text{E.5})$$

El segundo sumando representa la contribución a la intensidad media debida a la radiación que se propaga *hacia delante*, esto es, en aquellas direcciones asociadas al sentido positivo de z . Por otro lado, el primer sumando se corresponde con la radiación que se propaga *hacia atrás*, en todas aquellas direcciones para las que z decrece.

Definimos ahora la nueva variable \tilde{z} idéntica a z , pero con sentido positivo hacia la izquierda. Si $\tilde{\mu} = \cos \tilde{\theta}$ nos da la dirección de propagación de la radiación respecto al sentido positivo de \tilde{z} , entonces es posible escribir para la intensidad media

$$J(z, \nu) = \frac{1}{2} \left[\int_0^1 I(\tilde{z}, \nu, \tilde{\mu}) d\tilde{\mu} + \int_0^1 I(z, \nu, \mu) d\mu \right]. \quad (\text{E.6})$$

Por otro lado, la solución formal de la ecuación de transferencia radiativa para geometría plana en una dirección arbitraria μ viene dada por

$$I(z, \nu, \mu) = I(z_0, \nu, \mu) e^{-\tau(z_0, z, \nu)/\mu} + \frac{1}{\mu} \int_{z_0}^z j(z', \nu) e^{-\tau(z', z, \nu)/\mu} dz'. \quad (\text{E.7})$$

El término $I(z_0, \nu, \mu)$ es la intensidad incidente en el borde z_0 de la lámina. Así pues, en ausencia de fuentes externas $I(z_0, \nu, \mu) = 0$. Por otro lado, la función $\tau(z_0, z, \nu)$ representa, de forma general, el espesor óptico entre los puntos z_0 y z medido sobre la dirección del eje OZ y calculado como

$$\tau(z_0, z, \nu) = \int_{z_0}^z \kappa(z', \nu) dz'. \quad (\text{E.8})$$

Teniendo en cuenta que $\frac{d\tau}{dz} = -\kappa(z, \nu)$ y utilizando la notación $\tau^q = \tau(z_q, z, \nu)$, la ecuación (E.7) se reescribe como

$$I(z, \nu, \mu) = \frac{1}{\mu} \int_0^{\tau^0} S(z', \nu) e^{-\tau'/\mu} d\tau'. \quad (\text{E.9})$$

Vamos a utilizar la ecuación anterior para escribir la intensidad de radiación que se propaga hacia delante. Si tenemos presente la discretización en celdas homogéneas y siendo z un punto interior de la celda q , entonces para $0 \leq \mu \leq 1$ se obtiene

$$\begin{aligned} I(z, \nu, \mu) &= \sum_{p=1}^{q-1} \int_{\tau^{p+1}}^{\tau^p} S(z', \nu) e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} + \int_0^{\tau^q} S(z', \nu) e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} \\ &= \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \int_{\tau^{p+1}}^{\tau^p} e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} + S^q(\nu) \int_0^{\tau^q} e^{-\tau'/\mu} \frac{d\tau'}{\mu} \\ &= \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \left[e^{-\tau^{p+1}/\mu} - e^{-\tau^p/\mu} \right] + S^q(\nu) \left[1 - e^{-\tau^q/\mu} \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Es posible escribir una ecuación análoga para la intensidad que se propaga hacia atrás. Con \tilde{z} representamos, usando una coordenada diferente, el mismo punto perteneciente a la celda q al que

nos referíamos anteriormente. De esta forma, para $0 \leq \tilde{\mu} \leq 1$ se tiene

$$I(\tilde{z}, \nu, \tilde{\mu}) = S^q(\nu) \left[1 - e^{-\tau^{q+1}/\tilde{\mu}} \right] + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \left[e^{-\tau^p/\tilde{\mu}} - e^{-\tau^{p+1}/\tilde{\mu}} \right]. \quad (\text{E.11})$$

Ahora sustituimos los resultados (E.10) y (E.11) en (E.6) y llegamos a la siguiente ecuación para la intensidad media

$$J(z, \nu) = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^{p+1}/\mu} - e^{-\tau^p/\mu} \right] d\mu + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^q/\mu} \right] d\mu \right. \\ \left. + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^{q+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^p/\tilde{\mu}} - e^{-\tau^{p+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} \right\}. \quad (\text{E.12})$$

A su vez, esta última ecuación puede utilizarse para determinar $\Lambda_{ji}(z)$ de acuerdo con (E.2) y luego sustituir este resultado en (E.1). Finalmente, encontramos la siguiente expresión para el factor de escape Λ_{ji}^q

$$1 - \Lambda_{ji}^q = \frac{1}{2} \frac{1}{S_{ij}^q} \frac{1}{\Delta z_q} \int_{z_q}^{z_{q+1}} dz \int_0^\infty d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \left\{ \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^{p+1}/\mu} - e^{-\tau^p/\mu} \right] d\mu \right. \\ \left. + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^q/\mu} \right] d\mu + S^q(\nu) \int_0^1 \left[1 - e^{-\tau^{q+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} \right. \\ \left. + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \int_0^1 \left[e^{-\tau^p/\tilde{\mu}} - e^{-\tau^{p+1}/\tilde{\mu}} \right] d\tilde{\mu} \right\}. \quad (\text{E.13})$$

En la expresión anterior hay que llevar a cabo tres procesos de integración. Realizaremos en primer lugar la integración sobre la dirección de propagación de la radiación –sobre μ –, luego el promedio sobre todos los puntos pertenecientes a la celda q –sobre z – y finalmente la integral en frecuencia pesada por el perfil de línea. Reordenamos la expresión anterior según este criterio para obtener

$$1 - \Lambda_{ji}^q = \frac{1}{2} \frac{1}{S_{ij}^q} \int_0^\infty d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \frac{1}{\Delta z_q} \int_{z_q}^{z_{q+1}} dz \left\{ \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \int_0^1 d\mu \left[e^{-\tau^{p+1}/\mu} - e^{-\tau^p/\mu} \right] \right. \\ \left. + S^q(\nu) \int_0^1 d\mu \left[1 - e^{-\tau^q/\mu} \right] + S^q(\nu) \int_0^1 d\tilde{\mu} \left[1 - e^{-\tau^{q+1}/\tilde{\mu}} \right] \right. \\ \left. + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \int_0^1 d\tilde{\mu} \left[e^{-\tau^p/\tilde{\mu}} - e^{-\tau^{p+1}/\tilde{\mu}} \right] \right\}. \quad (\text{E.14})$$

Ahora debemos tener en cuenta que [176]

$$\int_0^1 d\mu e^{-\tau/\mu} = E_2(\tau), \quad (\text{E.15})$$

siendo $E_2(\tau)$ la función integral exponencial de segundo orden.

De esta forma, la ecuación (E.14) queda

$$\begin{aligned}
1 - \Lambda_{ji}^q &= \frac{1}{2} \frac{1}{S_{ij}^q} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \frac{1}{\Delta z_q} \int_{z_q}^{z_{q+1}} dz \\
&\times \left\{ \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) [E_2(\tau^{p+1}) - E_2(\tau^p)] \right. \\
&+ S^q(\nu) [1 - E_2(\tau^q)] + S^q(\nu) [1 - E_2(\tau^{q+1})] \\
&\left. + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) [E_2(\tau^p) - E_2(\tau^{p+1})] \right\}.
\end{aligned} \tag{E.16}$$

Conviene en este punto recordar la definición del espesor óptico (E.8) y tener presente que, como cada celda q es homogénea, $\kappa(z, \nu)$ tiene el mismo valor $\kappa^q(\nu)$ en todos los puntos pertenecientes a q . De esta forma, es sencillo ver que la integral sobre z puede transformarse en una integral sobre τ

$$\frac{1}{\Delta z_q} \int_{z_q}^{z_{q+1}} dz \longrightarrow \frac{1}{\Delta \tau^q} \int_0^{\tau^q} d\tau, \tag{E.17}$$

donde $\Delta \tau^q = \kappa^q(\nu) \Delta z_q$ es el espesor óptico de la celda q .

Por otro lado, sea τ^{pq} el espesor óptico asociado a la distancia entre los bordes más cercanos de la celda p y la celda q . Asimismo, $\tau = \tau^q$ es el espesor óptico asociado al camino recorrido en el interior de la celda q . De esta forma, como puede verse en la figura E.1, es posible establecer las siguientes relaciones,

$$\begin{array}{ll}
\text{- para } p < q: & \text{- para } p > q: \\
\tau^{p+1} = \tau^{pq} + \tau, & \tau^p = \tau^{pq} + \tilde{\tau} = \tau^{pq} + \Delta \tau^q - \tau, \\
\tau^p = \tau^{pq} + \Delta \tau^p + \tau & \tau^{p+1} = \tau^{pq} + \Delta \tau^p + \tilde{\tau} = \tau^{pq} + \Delta^p + \Delta \tau^q - \tau.
\end{array}$$

Con estas consideraciones, la ecuación (E.16) se transforma en

$$\begin{aligned}
1 - \Lambda_{ji}^q &= \frac{1}{2} \frac{1}{S_{ij}^q} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \\
&\times \left\{ \sum_{p=1}^{q-1} S^p(\nu) \left[\frac{1}{\Delta \tau^q} \int_{\tau^{pq}}^{\tau^{pq} + \Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau - \frac{1}{\Delta \tau^q} \int_{\tau^{pq} + \Delta \tau^p}^{\tau^{pq} + \Delta \tau^p + \Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau \right] \right. \\
&+ S^q(\nu) \left[1 - \frac{1}{\Delta \tau^q} \int_0^{\Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau \right] + S^q(\nu) \left[1 - \frac{1}{\Delta \tau^q} \int_0^{\Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau \right] \\
&\left. + \sum_{p=q+1}^{N_C} S^p(\nu) \left[\frac{1}{\Delta \tau^q} \int_{\tau^{pq}}^{\tau^{pq} + \Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau - \frac{1}{\Delta \tau^q} \int_{\tau^{pq} + \Delta \tau^p}^{\tau^{pq} + \Delta \tau^p + \Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{E.18}$$

Agrupando términos,

$$\begin{aligned}
1 - \Lambda_{ji}^q &= \frac{1}{S_{ij}^q} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \left\{ S^q(\nu) \left[1 - \frac{1}{\Delta \tau^q} \int_0^{\Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau \right] \right. \\
&\left. + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} S^p(\nu) \frac{1}{2\Delta \tau^q} \left[\int_{\tau^{pq}}^{\tau^{pq} + \Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau - \int_{\tau^{pq} + \Delta \tau^p}^{\tau^{pq} + \Delta \tau^p + \Delta \tau^q} E_2(\tau) d\tau \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{E.19}$$

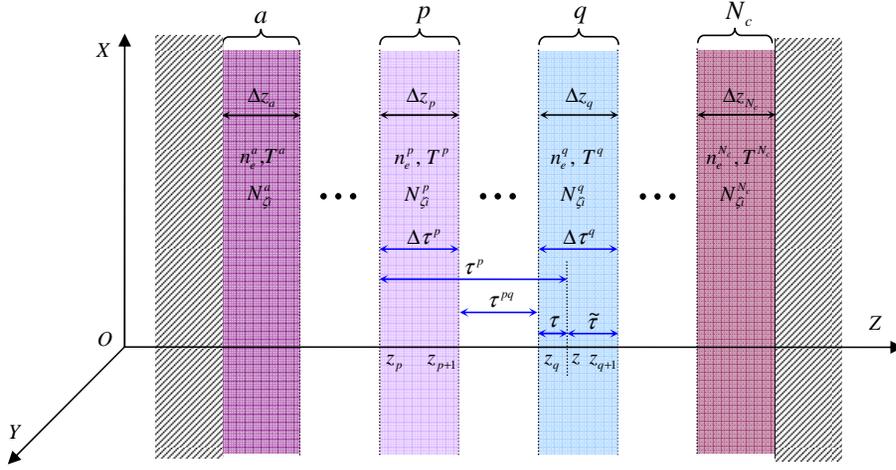


Figura E.1. Discretización de la lámina de anchura L en N_C celdas homogéneas.

Las integrales sobre τ son muy sencillas de resolver si tenemos en cuenta la siguiente relación entre funciones integrales exponenciales de órdenes consecutivos [176],

$$\frac{dE_n(\tau)}{d\tau} = -E_{n-1}(\tau). \quad (\text{E.20})$$

Se obtiene,

$$\begin{aligned} 1 - \Lambda_{ji}^q = & \frac{1}{S_{ij}^q} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \left\{ S^q(\nu) \left[1 - \frac{1}{\Delta\tau^q} \left(\frac{1}{2} - E_3(\Delta\tau^q) \right) \right] \right. \\ & + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} S^p(\nu) \frac{1}{2\Delta\tau^q} [E_3(\tau^{pq}) - E_3(\tau^{pq} + \Delta\tau^q) \\ & \left. + E_3(\tau^{pq} + \Delta\tau^p + \Delta\tau^q) - E_3(\tau^{pq} + \Delta\tau^p)] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.21})$$

Con esta última expresión se completan los dos procesos de integración dependientes de la geometría del plasma. Es importante destacar que, para llegar a este punto, salvo la suposición inicial de redistribución completa, no se ha introducido ningún tipo de aproximación adicional. Por tanto, en el modelo que estamos describiendo la geometría del plasma es tratada de forma exacta.

Tan sólo resta llevar a cabo la integral sobre el perfil de línea. Sin embargo, antes de abordar este cálculo es necesario hacer algunas aproximaciones, pues de lo contrario la expresión anterior no sería operativa para su implementación en un código cinético. Veamos por qué.

En (E.21), la función fuente $S^q(\nu)$ en una celda dada q se calcula como

$$S^q(\nu) = \frac{j^q(\nu)}{\kappa^q(\nu)}, \quad (\text{E.22})$$

siendo $j^q(\nu)$ y $\kappa^q(\nu)$ los correspondientes coeficientes de emisión y absorción. Ahora bien, cada uno de ellos incluye las contribuciones debidas al espectro ligado-ligado, ligado-libre y libre-libre,

esto es,

$$j^q(\nu) = j_{bb}^q(\nu) + j_{bf}^q(\nu) + j_{ff}^q(\nu) \quad (\text{E.23})$$

$$\kappa^q(\nu) = \kappa_{bb}^q(\nu) + \kappa_{bf}^q(\nu) + \kappa_{ff}^q(\nu). \quad (\text{E.24})$$

Estas mismas consideraciones deben tenerse en cuenta a la hora de calcular los espesores ópticos, ya que

$$\Delta\tau^q \equiv \Delta\tau^q(\nu) = \kappa^q(\nu) \Delta z_q, \quad (\text{E.25})$$

$$\tau^{pq} \equiv \tau^{pq}(\nu) = \sum_{r=p+1}^{q-1} \kappa^r(\nu) \Delta z_r, \quad p < q. \quad (\text{E.26})$$

Según lo dicho y de acuerdo con (E.21), para determinar el factor de escape Λ_{ji}^q asociado con cada transición $\zeta_j \rightarrow \zeta_i$ del espectro ligado-ligado es necesario evaluar tanto el coeficiente de emisión como el de absorción para todas las frecuencias del espectro discreto y continuo y, además, repetir el cálculo en cada una de las celdas en las que se ha dividido el plasma. Una vez que hayamos evaluado todas estas funciones, entonces tendríamos que calcular numéricamente la integral frecuencial. Por si fuera poco, como los coeficientes de absorción y emisión dependen de las poblaciones de nivel, todo el proceso debería resolverse de forma iterativa. Es evidente entonces que un cálculo de estas características sería inabordable desde un punto de vista práctico. Así pues, veamos qué tipo de aproximaciones pueden llevarse a cabo para simplificar la igualdad (E.21) y transformarla en una expresión manejable en el contexto de un modelo CR.

En primer lugar, supondremos que los efectos de la radiación del continuo son siempre despreciables frente a los producidos por la radiación de espectro discreto. Tal suposición sólo se justifica atendiendo al hecho de que, en muchas ocasiones, las condiciones físicas de un plasma de laboratorio permiten tratar la radiación del continuo como ópticamente delgada y, en consecuencia, los efectos de reabsorción se manifiestan exclusivamente en las líneas del espectro ligado-ligado. A este respecto, debemos tener presente que los más conocidos modelos de transporte radiativo basados en factores o probabilidades de escape trabajan bajo la misma suposición.

Despreciando entonces las transiciones que involucran estados del continuo, queda

$$j^q(\nu) \approx j_{bb}^q(\nu), \quad (\text{E.27})$$

$$\kappa^q(\nu) \approx \kappa_{bb}^q(\nu). \quad (\text{E.28})$$

Asimismo, la emisividad ligado-ligado viene dada por

$$j_{bb}^q(\nu) = \sum_{\zeta} \sum_{i,j} j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q(\nu), \quad (\text{E.29})$$

con

$$j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N_{\zeta j}^q \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \phi_{ij}^q(\nu), \quad (\text{E.30})$$

mientras que para la absorción ligado-ligado tenemos

$$\kappa_{bb}^q(\nu) = \sum_{\zeta} \sum_{i,j} \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q(\nu), \quad (\text{E.31})$$

siendo

$$\kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N_{\zeta i}^q \frac{g_{\zeta j}}{g_{\zeta i}} \frac{c^2}{2h\nu_{ij}^3} \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \phi_{ij}^q(\nu) \left(1 - \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta j}} \frac{N_{\zeta j}^q}{N_{\zeta i}^q} \right). \quad (\text{E.32})$$

Con estas expresiones podemos evaluar la función fuente en cada celda y los espesores ópticos que intervienen en la integral frecuencial (E.21). Ahora bien, el integrando está pesado por el perfil asociado a una línea concreta del espectro y, por tanto, al valor de la integral (E.21) sólo contribuirá de forma efectiva el intervalo de frecuencias centrado en ν_{ij} y de anchura $\Delta\nu_{ij}^q$ donde $\phi_{ij}^q(\nu)$ toma valores no nulos significativos.

Así pues, de cara a la evaluación de la integral frecuencial, las sumas (E.29) y (E.31) pueden restringirse al conjunto de transiciones cuyos perfiles tomen valores apreciables sobre el intervalo $\left[\nu_{ij} - \frac{\Delta\nu_{ij}^q}{2}, \nu_{ij} + \frac{\Delta\nu_{ij}^q}{2} \right]$. Si además asumimos que no existe solapamiento alguno entre las distintas líneas del espectro, entonces sólo tendremos que evaluar los términos asociados con la transición considerada $\zeta i \longleftrightarrow \zeta j$. Ahora bien, con nuestra atención ya centrada en una línea particular, sí que debemos tener en cuenta las contribuciones correspondientes a las diferentes regiones del espacio, ya que, sus valores van a ser apreciables esencialmente sobre el mismo intervalo frecuencial, sólo con la diferencia de que la anchura del perfil de línea variará de acuerdo con las condiciones físicas de la zona en cuestión.

En definitiva, para la evaluación de (E.21) consideraremos

$$j^q(\nu) \approx j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q(\nu), \quad (\text{E.33})$$

$$\kappa^q(\nu) \approx \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q(\nu). \quad (\text{E.34})$$

De esta forma,

$$S^q(\nu) \approx S_{ij}^q = \frac{j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}^q(\nu)}{\kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q(\nu)} = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \frac{1}{\frac{g_{\zeta j} N_{\zeta i}^q}{g_{\zeta i} N_{\zeta j}^q} - 1}, \quad (\text{E.35})$$

y también

$$\Delta\tau^q \approx \Delta\tau_{ij}^q = \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^q(\nu) \Delta z_q, \quad (\text{E.36})$$

$$\tau^{pq} \approx \tau_{ij}^{pq} = \sum_{r=p+1}^{q-1} \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}^r(\nu) \Delta z_r, \quad p < q. \quad (\text{E.37})$$

Con estas consideraciones, la expresión que nos permite determinar el factor de escape Λ_{ji}^q resulta

$$\Lambda_{ji}^q = \int_0^\infty d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \left\{ \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} \left[\frac{1}{2} - E_3(\Delta\tau_{ij}^q) \right] + \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} \frac{1}{2\Delta\tau_{ij}^q} [E_3(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q) - E_3(\tau_{ij}^{pq})] \right. \\ \left. - E_3(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q + \Delta\tau_{ij}^p) + E_3(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p) \right\}. \quad (\text{E.38})$$

Por otro lado, definimos

$$C_{ij}^q = \int_0^\infty d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} F(\Delta\tau_{ij}^q), \quad (\text{E.39})$$

$$C_{ij}^{pq} = \frac{1}{2} \int_0^\infty d\nu \phi_{ij}^q(\nu) \frac{1}{\Delta\tau_{ij}^q} [F(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q) - F(\tau_{ij}^{pq}) - F(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^q + \Delta\tau_{ij}^p) + F(\tau_{ij}^{pq} + \Delta\tau_{ij}^p)], \quad (\text{E.40})$$

con $F(\tau) = \frac{1}{2} - E_3(\tau)$.

El término C_{ij}^q da cuenta de la posibilidad de que un fotón asociado a la transición $\zeta_j \rightarrow \zeta_i$ escape de la celda q . Los C_{ij}^{pq} son los *coeficientes de acoplamiento radiativo*, que introducen en el factor de escape los efectos debidos al hecho de que un fotón emitido en la celda p pueda ser absorbido en la celda q influyendo en el balance de poblaciones.

Con estas definiciones y teniendo en cuenta que

$$\frac{S_{ij}^p}{S_{ij}^q} = \frac{N_{\zeta_j}^p g_{\zeta_j} N_{\zeta_i}^q - g_{\zeta_i} N_{\zeta_j}^q}{N_{\zeta_j}^q g_{\zeta_j} N_{\zeta_i}^p - g_{\zeta_i} N_{\zeta_j}^p}, \quad (\text{E.41})$$

el factor de escape Λ_{ji}^q se calcula finalmente como

$$\Lambda_{ji}^q = C_{ij}^q - \sum_{\substack{p=1 \\ p \neq q}}^{N_C} \frac{N_{\zeta_j}^p g_{\zeta_j} N_{\zeta_i}^q - g_{\zeta_i} N_{\zeta_j}^q}{N_{\zeta_j}^q g_{\zeta_j} N_{\zeta_i}^p - g_{\zeta_i} N_{\zeta_j}^p} C_{ij}^{pq}. \quad (\text{E.42})$$

Bibliografía

- [1] National Research Council, editor. *Plasma Science: From Fundamental Research to Technological Applications*. National Academy Press (1995).
- [2] T. M. O’Neil. A confinement theorem for nonneutral plasmas. *Phys. Fluids* **23**, 2216–2218 (1980).
- [3] M. A. Levine, R. E. Marrs, J. R. Henderson, D. A. Knapp, M. B. Schneider. The electron beam ion trap: a new instrument for atomic physics measurements. *Phys. Scr.* **T22**, 157–163 (1988).
- [4] M. Schauer, T. Mitchell, R. Nebel, editores. *Non-neutral Plasma Physics V: Workshop on Non-Neutral Plasmas*, **692** de *AIP Conference Proceedings* (2003).
- [5] F. Anderegg, F. Driscoll, L. Schweikhard, editores. *Non-neutral Plasma Physics IV: Workshop on Non-Neutral Plasmas*, **606** de *AIP Conference Proceedings* (2002).
- [6] A. Atzeni, J. Meyer-Ter-Vehn. *The Physics of Inertial Fusion*. Oxford University Press (2004).
- [7] K. Nishikawa, M. Wakatani. *Plasma Physics*. Springer-Verlag (1993).
- [8] ITER. Sitio web: www.iter.org.
- [9] National Ignition Facility. Sitio web: www.llnl.gov/nif.
- [10] Laser MegaJoule. Sitio web: www-lmj.cea.fr.
- [11] L. Spitzer. *Physics of Fully Ionized Gases*. Interscience Publishers (1962).
- [12] M. I. Boulos, P. Fauchais, E. Pfender. *Thermal Plasmas*. Plenum Press (1994).
- [13] R. D. Hazeltine, F. L. Waelbroeck. *The Framework of Plasma Physics*. Perseus Books (1998).
- [14] S. Ichimaru. Strongly couple plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1017–1059 (1982).

- [15] B. H. Bransden, C. J. Joachain. *Physics of atoms and molecules*. Longman Scientific & Technical (1991).
- [16] R. D. Cowan. *The theory of atomic structure and spectra*. University of California Press (1981).
- [17] I. I. Sobelman. *Atomic Spectra and Radiative Transitions*. Springer-Verlag (1992).
- [18] E. U. Condon, G. H. Shortley. *The Theory of Atomic Spectra*. Cambridge University Press (1989).
- [19] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë. *Quantum Mechanics*. Wiley-Interscience (1977).
- [20] L. Sprunch. Pedagogic notes on Thomas-Fermi theory (and on some improvements): atoms, stars, and the stability of bulk matter. *Rev. Mod. Phys.* **63**, 151–209 (1991).
- [21] P. Martel. *Análisis y determinación de una familia de potenciales analíticos para el cálculo de átomos ionizados en plasmas densos y calientes*. Tesis Doctoral, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (1993).
- [22] R. Rodríguez. *Determinación y análisis de un potencial analítico para iones en configuraciones excitadas en el seno de plasmas*. Tesis Doctoral, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (2001).
- [23] M. Klapisch. New method for calculating radial functions and classification of atomic spectra. *C. R. Acad. Sci. B* **265**, 914– (1967).
- [24] M. Aymar, M. Crance, M. Klapisch. *J. Physique Coll.* **31**, C4, 141–148 (1970).
- [25] M. Klapisch. Program for atomic wavefunction computations by parametric potential method. *Comput. Phys. Commun.* **2**, 239–260 (1971).
- [26] M. Klapisch, J. L. Schwob, B. S. Fraenkel, J. Oreg. 1s-3p KBeta-like x-ray-spectrum of highly ionized ion. *J. Opt. Soc. Am.* **67**, 148–155 (1977).
- [27] E. Koenig. Fonctions d'onde atomiques relativistes dans l'approximation du champ central: Application AUCSI. *Physica* **62**, 393–408 (1972).
- [28] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, J. Oreg. HULLAC, an integrated computer package for atomic processes in plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 169–188 (2001).
- [29] F. J. Rogers. Analytical electron-ion effective potentials for Z less-than-or-equal-to 55. *Phys. Rev. A* **23**, 1008–1014 (1981).

- [30] F. J. Rogers, B. G. Wilson, C. A. Iglesias. Parametric potential method for generating atomic data. *Phys. Rev. A* **38**, 5007–5020 (1988).
- [31] F. J. Rogers, C. A. Iglesias. Radiative atomic Rosseland mean opacities tables. *Astrophys. J. Suppl.* **79**, 507–568 (1992).
- [32] C. A. Iglesias, F. J. Rogers. Updated OPAL opacities. *Astrophys. J.* **464**, 943–953 (1996).
- [33] S. Mabong, G. Maynard, K. Katsonis. Parametric potential for modeling of highly charged heavy ions. *Laser Part. Beams* **14**, 575–586 (1996).
- [34] P. Martel, L. Doreste, E. Mínguez, J. M. Gil. A parametric potential for ions from helium to iron isoelectronic sequences. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **54**, 621–636 (1995).
- [35] P. Martel, J. G. Rubiano, J. M. Gil, L. Doreste, E. Mínguez. Analytical expressions for the n-order momenta of charge distribution for ions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **60**, 623–633 (1998).
- [36] R. Rodríguez, J. G. Rubiano, J. M. Gil, P. Martel, E. Mínguez, R. Florido. Development of an analytical potential to include excited configurations. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **75**, 723–739 (2002).
- [37] J. M. Gil. *Propuesta de un potencial efectivo analítico para iones inmersos en plasmas*. Tesis Doctoral, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (2000).
- [38] J. M. Gil, P. Martel, E. Mínguez, J. G. Rubiano, R. Rodríguez, F. H. Ruano. An effective analytical potential including plasma effects. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **75**, 539–557 (2002).
- [39] R. M. More. Electronic energy-levels in dense-plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **27**, 345–357 (1982).
- [40] F. Perrot. Fast calculation of electronic-structure in plasmas - the screened hydrogenic model with l-splitting. *Phys. Scr.* **39**, 332–337 (1989).
- [41] G. Faussurier, C. Blancard, A. Decoster. New screening coefficients for the hydrogenic ion model including l-splitting for fast calculations of atomic structure in plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **58**, 233–260 (1997).
- [42] A. F. Nikiforov, V. G. Novikov, A. D. Solomyannaya. Analytical wave functions in self-consistent field models for high-temperature plasma. *Laser Part. Beams* **14**, 765–779 (1996).
- [43] J. G. Rubiano. *Un modelo hidrogenoide apantallado relativista para el cálculo de propiedades ópticas de plasmas de fusión por confinamiento inercial*. Tesis Doctoral, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria (2001).

- [44] J. G. Rubiano, R. Rodríguez, J. M. Gil, F. H. Ruano, P. Martel, E. Mínguez. A screened hydrogenic model using analytical potentials. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **72**, 575–588 (2002).
- [45] F. C. Fischer, T. Brage, P. Jönsson. *Computational Atomic Structure*. Institute of Physics (2000).
- [46] P. Strange. *Relativistic Quantum Mechanics*. Cambridge University Press (1998).
- [47] J. P. Desclaux, D. F. Mayers, F. O'Brien. Relativistic atomic wave functions. *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **4**, 631–642 (1971).
- [48] I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers, N. C. Pyper. An atomic multiconfigurational dirac-fock package. *Comput. Phys. Commun.* **21**, 207–231 (1980).
- [49] D. Salzmänn. *Atomic Physics in Hot Plasmas*. Oxford University Press (1998).
- [50] J. C. Stewart, K. D. Pyatt. Lowering of ionization potentials in plasmas. *Astrophys. J.* **144**, 1203–1211 (1966).
- [51] R. M. More. Atomic physics in inertial confinement fusion. Informe Técnico UCRL-84991, LLNL (1981).
- [52] G. Massacrier. Self-consistent schemes for the calculation of ionic structures and populations in dense plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **51**, 221–228 (1994).
- [53] G. Chiu, A. Ng. Pressure ionization in dense plasmas. *Phys. Rev. E* **59**, 1024–1032 (1999).
- [54] D. V. Fisher, Y. Maron. Characterization of electron states in dense plasmas and its use in atomic kinetics modeling. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81**, 147–165 (2003).
- [55] B. Saha, S. Fritzsche. Be I isoelectronic ions embedded in hot plasma. *Phys. Rev. E* page 036405 (2006).
- [56] J. Eichler, W. E. Meyerhof. *Relativistic Atomic Collisions*. Academic Press (1995).
- [57] V. P. Shevelko, L. A. Vainshtein. *Atomic Physics for Hot Plasmas*. Institute of Physics Publishing (1993).
- [58] I. I. Sobelman, L. A. Vainshtein, E. A. Yukov. *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*. Springer-Verlag (1995).
- [59] J. C. Weisheit. Atomic physics and non-equilibrium plasmas. Informe Técnico UCID-20744, LLNL (1986).

- [60] Z. Q. Wu, B. A. Zhang, Y. B. Qiu. Effect of excitation-autoionization in non-local thermodynamic equilibrium plasmas. *Chinese Physics* **9**, 519–522 (2000).
- [61] O. Peyrusse, C. Bauche-Arnoult, J. Bauche. Calculation of the charge state distribution of a highly ionized coronal Au plasma. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38**, L137–L143 (2005).
- [62] J. R. Albritton, B. G. Wilson. Non-LTE ionization and energy balance in high-Z laser plasmas including two-electron transitions. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1594–1597 (1999).
- [63] Yu. V. Ralchenko, Y. Maron. Accelerated recombination due to resonant deexcitation of metastable states. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 609–621 (2001).
- [64] T. Kawachi. Population kinetics of lithiumlike and berylliumlike ions in low temperature dense recombining plasma. *Phys. Rev. E* **67**, 016409 (2003).
- [65] V. L. Jacobs. Autoionization phenomena in plasma radiation processes. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **54**, 195–205 (1995).
- [66] R. Doron, E. Behar, P. Mandelbaum, J. L. Schwob. A two-step collisional-radiative model for interpreting spectra originating from autoionizing levels. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **65**, 161–172 (2000).
- [67] D. Mihalas. *Stellar Atmospheres*. W. H. Freeman and Company (1970).
- [68] G. B. Rybicki. *Methods in radiative transfer*, Escape probability methods, 21–64. Cambridge University Press (1984).
- [69] A. Peraiah. *An introduction to radiative transfer*. Cambridge University Press (2002).
- [70] R. W. Lee, J. K. Nash, Y. Ralchenko. Review of the NLTE kinetics code workshop. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **58**, 737–742 (1997).
- [71] C. Bowen, A. Decoster, C. J. Fontes, K. B. Fournier, O. Peyrusse, Yu. V. Ralchenko. Review of the NLTE emissivities code comparison virtual workshop. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81**, 71–84 (2003).
- [72] C. Bowen, R. W. Lee, Yu. Ralchenko. Comparing plasma population kinetics codes: Review of the NLTE-3 Kinetics Workshop. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99**, 102–119 (2006).
- [73] J. G. Rubiano, R. Florido, C. Bowen, R. W. Lee, Y. Ralchenko. Review of the 4th NLTE code comparison workshop. *High Energy Density Phys.* (2007), doi:10.1016/j.hedp.2007.02.027.
- [74] C. J. Fontes, J. Abdallah Jr., R. E. Clark, D. P. Kilcrease. Non-LTE modeling of gold plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **65**, 223–230 (2000).

- [75] J. Abdallah Jr., H. L. Zhang, C. J. Fontes, D. P. Kilcrease, B. J. Archer. Model comparisons for high-Z non-LTE steady-state calculations. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 107–116 (2001).
- [76] S. D. Loch, C. J. Fontes, J. Colgan, M. S. Pindzola, C. P. Ballance, D. C. Griffin, M. G. O'Mullane, H. P. Summers. Collisional-radiative study of lithium plasmas. *Phys. Rev. E* **69**, 066405 (2004).
- [77] P. Hakel, M. E. Sherill, S. Mazevet, J. Abdallah Jr., J. Colgan, D. P. Kilcrease, N. H. Magee, C. J. Fontes, H. L. Zhang. The new Los Alamos opacity code ATOMIC. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99**, 265–271 (2006).
- [78] C. J. Fontes, J. Colgan, H. L. Zhang, J. Abdallah Jr. Large-scale kinetics modeling of non-LTE plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99**, 175–185 (2006).
- [79] J. Colgan, C. J. Fontes, J. Abdallah Jr. Collisional-radiative studies of carbon plasmas. *High Energy Density Physics* **2**, 90–96 (2006).
- [80] S. B. Hansen. *Development and application of L-shell spectroscopic modeling for plasma diagnostics*. Tesis Doctoral, University of Nevada (2003).
- [81] A. Sasaki, T. Utsumi, K. Moribayashi, T. Tajima, H. Takuma. Development of a collisional radiative model of X-ray lasers. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **65**, 501–509 (2000).
- [82] O. Peyrusse. Complex atom physics and radiative properties of hot dense plasmas. *Nucl. Fusion* **44**, S202–S207 (2004).
- [83] A. Bar-Shalom, J. Oreg, M. Klapisch. Non-LTE superconfiguration collisional radiative model. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **58**, 427–439 (1997).
- [84] O. Peyrusse. A superconfiguration model for broadband spectroscopy of non-LTE plasmas. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**, 4303–4321 (2000).
- [85] A. Bar-Shalom, J. Oreg, M. Klapisch. Recent developments in the SCROLL model. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **65**, 43–55 (2000).
- [86] O. Peyrusse. On the superconfiguration approach to model NLTE plasma emission. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 571–579 (2001).
- [87] C. Chenais-Popovics, V. Malka, J. C. Gauthier, S. Gary, O. Peyrusse, M. Rabec-Le Gloahec, I. Matsushima, C. Bauche-Arnoult, A. Bachelier, J. Bauche. X-ray emission of a xenon gas jet plasma diagnosed with Thomson scattering. *Phys. Rev. E* **65**, 046418 (2002).

- [88] H. A. Scott. CRETIN—a radiative transfer capability for laboratory plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 689–701 (2001).
- [89] R. W. Lee, J. T. Larsen. A time-dependent model for plasma spectroscopy of K-shell emitters. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **56**, 535–556 (1996).
- [90] H. K. Chung, W. L. Morgan, R. W. Lee. FLYCHK: an extension to the K-shell spectroscopy kinetics model FLY. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81**, 107–115 (2003).
- [91] H. K. Chung, M. H. Chen, W. L. Morgan, Y. Ralchenko, R. W. Lee. FLYCHK: Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements. *High Energy Density Physics* **1**, 3–12 (2005).
- [92] J. P. Apruzese, J. Davis, K. G. Whitney, J. W. Thornhill, P. C. Kepple, R. W. Clark. The physics of radiation transport in dense plasmas. *Phys. Plasmas* **9**, 2411–2419 (2002).
- [93] D. Mostacci, L. M. Montierth, J. P. Dinguirard, R. L. Morse. X-ray line emission from laser-produced spherical plasma flows. *Phys. Fluids B* **1**, 2106–2120 (1989).
- [94] D. C. Eder, H. A. Scott. The calculation of line transfer in expanding media. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **45**, 189–204 (1991).
- [95] O. Peyrusse. A model for the simulation of nonequilibrium line transfer in laboratory plasmas. *Phys. Fluids B* **4**, 2007–2017 (1992).
- [96] I. Hubeny, T. Lanz. Non-LTE line-blanketed model atmospheres of hot stars. I. Hybrid complete linearization/accelerated lambda iteration method. *Astrophys. J.* **439**, 875–904 (1995).
- [97] J. P. Apruzese, J. Davis, D. Duston, K. G. Whitney. Direct solution of the equation of transfer using frequency- and angle-averaged photon escape probabilities, with application to a multistage, multilevel aluminum plasma. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **23**, 479–487 (1980).
- [98] J. P. Apruzese. Direct solution of the equation of transfer using frequency- and angle-averaged photon-escape probabilities for spherical and cylindrical geometries. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **25**, 419–425 (1981).
- [99] J. P. Apruzese. An analytical Voigt profile escape probability approximation. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **34**(447-452) (1985).
- [100] J. J. MacFarlane, P. Wang, G. A. Moses. A model for computing radiation transport in non-LTE plasmas. Informe Técnico UWFD-822, Fusion Technology Institute, University of Wisconsin (1990).

- [101] J. L. Giuliani, G. M. Petrov, J. P. Apruzese, J. Davis. Non-local radiation transport via coupling-constants for the radially inhomogeneous Hg-Ar positive column. *Plasma Sources Sci. Technol.* **14**, 236–249 (2005).
- [102] F. E. Irons. The escape factor in plasma spectroscopy–I. The escape factor defined and evaluated. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **22**, 1–20 (1979).
- [103] F. E. Irons. The escape factor in plasma spectroscopy–II. The case of radiative decay. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **22**, 21–36 (1979).
- [104] F. E. Irons. The escape factor in plasma spectroscopy–III. Two case studies. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **22**, 37–44 (1979).
- [105] J. J. MacFarlane. NLTE – a collisional-radiative code for computing the radiative properties of non-LTE plasmas. Informe Técnico UWFD-1050, Fusion Technology Institute, University of Wisconsin (1997).
- [106] R. C. Mancini, R. F. Joyce, C. F. Hooper Jr. Escape factors for Stark-broadened line profiles. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 2975–2987 (1987).
- [107] R. C. Mancini. Notas privadas (1998).
- [108] R. C. Mancini. Notas privadas (2003).
- [109] D. A. Libermann, A. Zangwill. A relativistic program for optical-response in atoms using a time-dependent local density approximation. *Comput. Phys. Commun.* **32**, 75–82 (1984).
- [110] A. K. Rajagopal. Theory of inhomogeneous electron systems: spin-density-functional. *Adv. Chem. Phys.* **41**, 59–193 (1980).
- [111] W. Kohn, L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.* **140**, 1133–1138 (1965).
- [112] O. Gunnarsson, B. I. Lundqvist. Exchange and correlation in atoms, molecules, and solids by spin-density functional formalism. *Phys. Rev. B* **13**, 4274–4298 (1976).
- [113] M. Dharma-wardana, R. Taylor. Exchange and correlation potentials for finite temperature quantum calculations at intermediate degeneracies. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14**, 629–646 (1981).
- [114] U. Gupta, A. K. Rajagopal. Density functional formalism at finite temperatures with some applications. *Phys. Rep.* **87**, 259–311 (1982).
- [115] Yu. Ralchenko, A. E. Kramida, J. Reader. NIST Atomic Spectra Database. Sitio web: physics.nist.gov/PhysRefData/ASD.

- [116] M. F. Gu. Indirect X-ray line-formation processes in iron L-shell ions. *Astrophys. J.* **582**, 1241–1250 (2003).
- [117] S. J. Rose. Calculations of the radiative opacity of laser-produced plasmas. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 1667–1681 (1992).
- [118] S. B. Hansen, A. S. Shlyaptseva. Effects of the electron energy distribution function on modeled X-ray spectra. *Phys. Rev. E* **70**, 036402 (2004).
- [119] H. Van Regemorter. Rate of collisional excitation in stellar atmospheres. *Astrophys. J.* **136**, 906–915 (1962).
- [120] R. Mewe. Interpolation formulae for the electron impact excitation of ions in the H-, He-, Li-, and ne-sequences. *Astron. & Astrophys.* **20**, 215–221 (1972).
- [121] D. H. Sampson, H. L. Zhang. Use of the Van Regemorter formula for collision strengths or cross sections. *Phys. Rev. A* **45**, 1556–1561 (1992).
- [122] H. L. Zhang, D. H. Sampson, A. K. Mohanty. Fully relativistic and quasirelativistic distorted-wave methods for calculating collision strengths for highly charged ions. *Phys. Rev. A* **40**, 616–632 (1989).
- [123] L. B. Golden, D. H. Sampson. Electron-impact cross-sections and rates for $nl \rightarrow n'l'$ transitions in hydrogenic ions and hydrogen. *Astrophys. J.* **170**, 181–190 (1971).
- [124] L. B. Golden, D. H. Sampson. Scaled Coulomb-Born-Oppenheimer collision strengths for hydrogenic ions in the limit $z = \infty$. *Astrophys. J. Suppl.* **38**, 19–28 (1978).
- [125] L. B. Golden, R. E. Clark, S. J. Goett, D. H. Sampson. Scaled collision strengths for hydrogenic ions. *Astrophys. J. Suppl.* **45**, 603–612 (1981).
- [126] D. H. Sampson, H. L. Zhang. Semiempirical formulae for electron impact excitation and ionization of hydrogenic ions. *Astrophys. J.* **335**, 516–524 (1988).
- [127] W. Lotz. An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section. *Z. Physik* **206**, 205–211 (1967).
- [128] W. Lotz. Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from hydrogen to calcium. *Z. Physik* **216**, 241–247 (1968).
- [129] W. Lotz. Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from scandium to zinc. *Z. Physik* **220**, 466–472 (1969).
- [130] A. Burgess, M. C. Chidichimo. Electron impact ionization of complex ions. *Mon. Not. R. Astr. Soc.* **203**, 1269–1280 (1983).

- [131] H. A. Kramers. On the theory of X-ray absorption and of the continuous X-ray spectrum. *Philos. Mag.* **46**, 836–871 (1923).
- [132] J. P. Connerade. *Highly excited atoms*. Cambridge University Press (1998).
- [133] A. Burgess. A general formula for the estimation of dielectronic recombination coefficients in low-density plasmas. *Astrophys. J.* **141**, 1588–1590 (1965).
- [134] H. R. Griem. *Principles of plasma spectroscopy*. Cambridge University Press (1997).
- [135] S. R. Drayson. Rapid computation of Voigt profile. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **16**, 611–614 (1976).
- [136] R. Florido, J. M. Gil, R. Rodríguez, J. G. Rubiano, P. Martel, E. Mínguez. Line photon transport in a non-homogeneous plasma using radiative coupling coefficients. En *4th International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications*, 993–996. EDP Sciences (2005).
- [137] R. Florido, J. M. Gil, R. Rodríguez, J. G. Rubiano, P. Martel, E. Mínguez. Line photon transport in a non-homogeneous plasma using radiative coupling coefficients. *J. Phys. IV* **133**, 993–996 (2006).
- [138] Y. T. Lee, R. A. London, G. B. Zimmerman. Application of escape probability to line transfer in laser-produced plasmas. *Phys. Fluids B* **2**, 2731–2740 (1990).
- [139] A. M. Dumont, S. Collin, F. Paletou, S. Coupé, O. Godet, D. Pelat. Escape probability methods versus "exact" transfer for modelling the X-ray spectrum of Active Galactic Nuclei and X-ray binaries. *Astron. & Astrophys.* (2003).
- [140] L. Auer. *Numerical radiative transfer*, Acceleration of convergence, 101–109. Cambridge University Press (1987).
- [141] J. J. MacFarlane. Non-LTE radiative transfer with lambda-acceleration: convergence properties using exact full and diagonal lambda-operators. *Astron. & Astrophys.* **264**, 153–158 (1992).
- [142] R. Rodríguez, J. M. Gil, R. Florido, J. G. Rubiano, P. Martel, E. Mínguez. Code to calculate optical properties for plasmas in a wide range of densities. *J. Phys. IV* **133**, 981–984 (2006).
- [143] M. S. Dimitrijevic, N. Konjevic. Stark widths of doubly-ionized and triply-ionized atom lines. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **24**, 451–459 (1980).
- [144] M. S. Dimitrijevic, N. Konjevic. Simple estimates for Stark-broadening of ion lines in stellar plasmas. *Astron. & Astrophys.* **172**, 345–349 (1987).

- [145] R. J. Rutten. *Radiative Transfer in Stellar Atmospheres*. Sterrekundig Instituut Utrecht (2003).
- [146] Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. PWS Publishing Company (1995).
- [147] CXML Team. *Compaq Extended Math Library Reference Guide*. Compaq Computer Corporation (1999).
- [148] R. Florido, J. M. Gil, R. Rodríguez, J. G. Rubiano, P. Martel, E. Mínguez. Using sparse matrices techniques and iterative solvers in the calculation of level populations for NLTE plasmas. En *32nd EPS Conference on Plasma Physics*, **29C**, P-5.124. European Physical Society (2005).
- [149] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, S. Ostrouchov, D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide*. SIAM (1995).
- [150] D. Salzmänn. Population probabilities of the excited levels of ions in a steady-state plasma. I. Basic equations and results. *Phys. Rev. A* **20**, 1704–1712 (1979).
- [151] D. Salzmänn. Non-LTE population probabilities of the excited ionic levels in a steady state plasma. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **27**, 359–372 (1982).
- [152] Y. T. Lee. A model for ionization balance and L-shell spectroscopy of non-LTE plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 131–145 (1987).
- [153] R. Florido, J. M. Gil, R. Rodríguez, J. G. Rubiano, P. Martel, E. Mínguez. Atom3r, a code for calculation of NLTE plasma populations. low and high density limits behaviour. En *28th European Conference on Laser Interaction with Matter*, 389–413 (2005).
- [154] J. M. Gil, R. Rodríguez, R. Florido, J. G. Rubiano, P. Martel, E. Mínguez. Determination of Corona, LTE and NLTE regimes of optically thin carbon plasmas. Enviado a *Laser Part. Beams*, (2007).
- [155] K. Lee, D. E. Kim. Effect of excited states on the ionization balance in plasmas via the enhancement of ionization and recombination rate coefficients. *Phys. Rev. E* **60**, 2224–2230 (1999).
- [156] R. C. Mancini, E. Mínguez. M3R: a NLTE atomic kinetics model for plasmas. En *First NLTE code comparison workshop*, Gaithersburg (1996).
- [157] O. Peyrusse. X-ray spectroscopy studies using the TRANSPEC code. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **51**, 281–289 (1994).

- [158] H. A. Scott, R. W. Mayle. GLF – A simulation code for X-ray lasers. *Appl. Phys. B* **58**, 35–43 (1994).
- [159] Yu. Ralchenko. A guide to Internet atomic databases for hot plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99**, 499–510 (2006).
- [160] A. Sasaki, T. Kawachi. Kinetics modeling of Ni-like multiple charged ions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81**, 411–419 (2003).
- [161] A. F. Nikiforov, V. G. Novikov, V. B. Uvarov, V. V. Dragalov, A. D. Solomyannaya. THERMOS opacity code. En *Third International Opacity Workshop Code Comparison Study, WorkOp-III*. Max-Planck Institute für Quantenoptik (1995).
- [162] H. K. Chung, M. H. Chen, R. W. Lee. Extension of atomic configuration sets of the Non-LTE model in the application to the $K\alpha$ diagnostics of hot dense matter. *High Energy Density Phys.* doi:10.1016/j.hedp.2007.02.001(2007).
- [163] S. B. Hansen, J. Bauche, C. Bauche-Arnoult, M. F. Gu. Hybrid atomic models for spectroscopic plasma diagnostics. *High Energy Density Phys.* doi:10.1016/j.hedp.2007.02.032 (2007).
- [164] D. G. Hummer, D. Mihalas. The equation of state for stellar envelopes. I. An occupation probability formalism for the truncation of internal partition functions. *Astrophys. J.* **331**, 794–814 (1988).
- [165] K. L. Wong, M. J. May, P. Beiersdorfer, K. B. Fournier, B. Wilson, G. V. Brown, P. Springer. Determination of the charge state distribution of a highly ionized coronal Au plasma. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 235001 (2003).
- [166] B. G. Wilson, J. R. Albritton, D. A. Liberman. En *4th International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter*. World Scientific (1991).
- [167] R. A. Hulse. Numerical studies of impurities in fusion plasmas. *Nucl. Technol. Fusion* **3**, 259–272 (1983).
- [168] E. H. Avrett, D. G. Hummer. Non-coherent scattering II: Line formation with a frequency independent source function. *Mon. Not. R. Astr. Soc.* **130**, 295–331 (1965).
- [169] S. Cuperman, F. Engelmann, J. Oxenius. Nonthermal impurity radiation from a spherical plasma. *Phys. Fluids* **6**, 108–115 (1963).
- [170] S. Cuperman, F. Engelmann, J. Oxenius. Nonthermal impurity radiation from a spherical plasma. 2. *Phys. Fluids* **7**, 428–438 (1964).

- [171] M. E. Foord, S. H. Glenzer, R. S. Thoe, K. L. Wong, K. B. Fournier, B. G. Wilson, P. T. Springer. Ionization processes and charge-state distribution in a highly ionized high-Z laser-produced plasma. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 992–995 (2000).
- [172] S. H. Glenzer, K. B. Fournier, B. G. Wilson, R. W. Lee, L. J. Suter. Ionization balance in inertial confinement fusion hohlraums. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 045002 (2001).
- [173] R. Schott, F. Philippe, P. Angelo, E. Dufour, A. Poquerusse, E. Leboucher-Dalimier, P. Sauvau, P. Velarde, F. Ogando, E. Mínguez, J. M. Gil, J. G. Rubiano, R. Rodríguez, P. Martel, R. Mancini. Access to spectrally resolved ultra-dense hot low z emissivities and opacities. En *16th International Conference on Spectral Line Shapes*, **12**, 340–351. American Institute of Physics (2002).
- [174] F. Ogando, P. Velarde. Development of a radiation transport fluid dynamic code under AMR scheme. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 541–550 (2001).
- [175] R. C. Mancini. Notas privadas (1999).
- [176] M. Abramowitz, I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover (1972).