



Universidad de Valladolid

**Estudio del ensanchamiento
Stark en la transición 3s-3p
en la serie isoelectrónica del Berilio
Simulaciones de Dinámica Molecular**

**Study of the Stark broadening of the
3s-3p spectral lines in Be-like ions
Molecular Dynamics simulations**

Memoria presentada por

Diego González Herrero
para optar al grado de Doctor
por la Universidad de Valladolid

en Valladolid, a 11 de Enero de 2015

II

Dr. Marco Antonio Gigosos Pérez, Catedrático de Óptica de la Universidad de Valladolid,

CERTIFICA

que la memoria que aquí se presenta ha sido realizada bajo mi dirección por DIEGO GONZÁLEZ HERRERO y constituye su Tesis Doctoral para optar al Grado de Doctor en el marco del Programa de Doctorado de Física de la Universidad de Valladolid.

Firmado en Valladolid el 11 de Enero de 2016

IV

Casi sin darme cuenta ya han pasado más de cuatro años desde que empecé este proyecto, y lo que un día parecía un objetivo lejano hoy se ha hecho realidad. Esta tesis es el resultado de cuatro años en los que he disfrutado, he pasado algún que otro mal rato, he conocido gente y he vivido experiencias únicas. Pero sobre todo, gracias a mi director Marco, he aprendido lo que es la pasión por la ciencia y gran parte de la física que se.

Han sido muchas experiencias, aquí y allá. Experiencias que siempre he tenido la suerte de poder afrontar rodeado de la gente que quiero. Son muchas las personas que de un modo u otro han contribuido a que hoy esté escribiendo estas líneas, y a todas ellas quiero darles las gracias.

A mi familia, en especial a mis padres, Tina y César, por creer siempre en mí, por darme todo lo que tengo, y ser los culpables de todo lo que consiga.

A mi hermano Mario, por aguantarme, como hermano y como amigo, por ser ese contrapunto que muchas veces me falta y que en muchas ocasiones es indispensable.

A mi novia Olga, por estar siempre ahí, por comprenderme, por ser mi apoyo y mi guía, por todo.

A todos mis compañeros de departamento, en especial a Ale y a Teruca, por escucharme en los malos momentos y por compartir risas y cervezas en los buenos.

A todos mis amigos, los de toda la vida y los que he ido haciendo a lo largo de los años en la universidad, porque siempre me habéis apoyado. En especial a María, a la que, aunque ahora vea menos, quiero como a una hermana.

A todos, de verdad, gracias por estar ahí y ser una parte importante de mi vida. Sin todos vosotros este trabajo no hubiera sido posible.

No os dejéis engañar
con que la vida es poco.
Bebedla a grandes tragos
porque no os bastará
cuando hayáis de perderla.

Bertolt Brecht

Que ser valiente no salga tan caro,
que ser cobarde no valga la pena.

Joaquín Sabina

VIII

Índice general

1. Introducción	1
1.1. La espectroscopía de plasmas	1
1.2. Un poco de historia: el ensanchamiento Stark	2
1.3. Las series isoelectrónicas y el escalado con Z	6
1.4. Propósito de este trabajo	8
2. Ensanchamiento de líneas espectrales	11
2.1. Mecanismos de ensanchamiento de líneas espectrales	12
2.2. Ensanchamiento Stark	14
2.3. Modelo de impacto: Colisiones fuertes	18
2.4. Modelo de impacto: Colisiones débiles	22
3. Procesos de correlación controlada	37
3.1. Procesos autorregresivos de media móvil	38
3.2. Secuencias de campo con correlación controlada	41
3.3. Aplicación a sistemas SP	43
3.4. Cálculos numéricos: comparación con el modelo de impacto	45
4. Simulaciones por computador	53
4.1. Evolución del emisor	54
4.2. Generación de las secuencias de campo	56
4.2.1. Partículas independientes	56
4.2.2. Dinámica Molecular	58
5. La serie isoelectrónica del Berilio $3s - 3p$	95
5.1. Estructura de estados	96
5.2. Cálculos con Partículas Independientes	99
5.3. Cálculos con Dinámica Molecular	108
5.3.1. Equilibrado de los plasmas y generación de campos	110

5.3.2.	Tiempo de recombinación y colisiones fuertes	111
5.3.3.	Resultados	116
5.4.	Comparación con los datos experimentales	121
5.5.	Escalado con Z	124
6.	Conclusiones	133
6.1.	Otros resultados obtenidos en este trabajo	135
A.	Cálculo numérico del radio de Weisskopf	139
B.	Operador de anchura en un sistema SP	145
B.1.	Lyman- α	146
B.2.	Sistema $s - p$	149
C.	Cálculo de la función de distribución radial: HNC	157
D.	Energías y probabilidades de transición	161
E.	Selección de las secuencias de campo válidas	165
F.	Anchura y Shift: Partículas Independientes	169
G.	Gases equilibrados (Dinámica Molecular)	173
H.	Anchura y Shift: Dinámica Molecular	177
I.	Índice, resumen y conclusiones en inglés	183
I.1.	Index	184
I.2.	Summary	185
I.3.	Conclusions	208
J.	Bibliografía	213

1

Introducción

1.1. La espectroscopía de plasmas

El análisis de los espectros como herramienta de diagnóstico juega un papel muy importante en la ciencia moderna. Entre otras cosas debido a que es una técnica de diagnóstico no invasiva que permite identificar compuestos y determinar ciertas características de los mismos, como su densidad y temperatura. En el caso de plasmas de laboratorio, que son accesibles para el experimentador, existen otras técnicas alternativas. Sin embargo cuando se trata de objetos estelares, completamente inaccesibles, la espectroscopía de plasmas se convierte en una herramienta indispensable.

Pero, antes de nada, hablemos de lo que es un plasma. El término *plasma* fue acuñado por Langmuir en 1928 (Langmuir, 1928) y básicamente es un gas formado por partículas cargadas, generalmente iones y electrones, que a escala macroscópica se puede considerar neutro (en promedio hay el mismo número de cargas positivas que negativas por unidad de volumen). El hecho de estar constituido por partículas cargadas, en lugar de por átomos o moléculas neutras, hace que estos sistemas tengan unas características muy particulares.

En primer lugar, como es obvio, los electrones se verán atraídos por los iones, y tenderán a recombinarse para formar átomos neutros. Esto hace que para mantener un plasma sea necesario un aporte de energía constante para evitar una recombinación inmediata. Este aporte de energía puede ser interno (como resultado de reacciones químicas) o externo, como es habitual en los plasmas de laboratorio, mediante descargas eléctricas, radiación de microondas, etc. Este aporte de energía, además de ionizar los átomos y mantener el plasma, hace que los propios iones (o los átomos neutros que pueden existir) se exciten, y como resultado emitan luz. Por este motivo, la espectroscopía es una herramienta muy

apropiada para estudiar este tipo de sistemas.

La naturaleza cargada de las partículas que forman el plasma hace que la dinámica de las mismas esté dominada por las fuerzas eléctricas que existen entre ellas, a diferencia de lo que sucede en los gases. Esto hace que los plasmas como fluidos, se comporten de manera completamente diferente a cualquier otro sistema.

Además, los campos eléctricos que crean las partículas que forman el plasma, pueden perturbar a los emisores de luz, y por lo tanto modificar el espectro de emisión de estos, dando lugar a lo que se conoce como efecto Stark. Este fenómeno, que no es el único que puede alterar los espectros, puede ensanchar las líneas espectrales y desplazarlas respecto de su frecuencia sin perturbar. La manera en la que el efecto Stark deforma el perfil del espectro está directamente relacionado con la densidad de carga en el plasma y su temperatura, por lo que se puede utilizar como una medida indirecta de estos parámetros del plasma.

Para poder hacer esto, una vez obtenidas las medidas espectroscópicas es necesario comparar los espectros con algún modelo que nos permita extraer de la forma de los perfiles la densidad y la temperatura del plasma. Esta es la clave de la espectroscopía de plasmas: disponer de un buen modelo que sea capaz de ser fiel a lo que realmente sucede en el interior del plasma, y de hecho eso ha sido la piedra angular en este campo durante los últimos años.

1.2. Un poco de historia: el ensanchamiento Stark

Ya desde los primeros años en los que se abordó el estudio del ensanchamiento de las líneas espectrales se consideraron por separado las perturbaciones producidas por las partículas rápidas (los electrones) y las lentas (generalmente, los iones).¹

El efecto de los campos rápidos se aborda dentro del marco de la teoría de colisiones. Cuando las colisiones son fuertes y rápidas, la anchura de la línea se debe a la frecuencia de dichas colisiones y se utiliza el formalismo de Lorentz (Lorentz, 1906). Por el contrario, cuando las colisiones son débiles, la pérdida de correlación en la emisión se debe a

¹Esta separación de los campos iónico y electrónico no fue del todo acertada, ya que, como se vio posteriormente, ambos campos pueden ser mezcla de un campo rápido y otro lento. Lo acertado sería separar los campos en campos rápidos y lentos, independientemente de quien los crea. En la mayoría de las circunstancias esta clasificación coincide con la original, aunque bajo ciertas condiciones pueden ser diferentes.

un efecto acumulativo de dichas colisiones. Ambas situaciones dan lugar a un perfil de tipo Lorentziano.

Por otro lado, cuando los campos vistos por el emisor varían muy despacio, el efecto que producen tiene que ver con la distribución estadística de estos campos. El efecto es similar al del ensanchamiento Doppler: el resultado es una superposición de líneas espectrales desplazadas individualmente por efecto del campo. En estos casos, el cálculo del espectro pasa por conocer la función de distribución estadística de los campos. Los primeros trabajos al respecto suponen un plasma ideal en el que las partículas no interaccionan unas con otras. Fue Holstmark (Holstmark, 1919) el primero que calculó la función de distribución de campo en un plasma sin interacción. Más adelante, en el año 1957, Ecker mejora el cálculo de Holstmark introduciendo el apuntalamiento de Debye en sus cálculos (Ecker, 1957).

En el año 1959 se publica la primera revisión sobre el ensanchamiento de líneas espectrales (Margenau and Lewis, 1959). En ella se recopila toda la información que había hasta la fecha sobre este campo. Desde las primeras publicaciones de Lorentz (Lorentz, 1906) hasta la formulación moderna del ensanchamiento Stark (Anderson, 1949), incluyendo los resultados de Holstmark y Ecker sobre las distribuciones de campo.

Durante los años sesenta y finales de los cincuenta es cuando se desarrollan los trabajos fundamentales sobre el ensanchamiento Stark. En cuanto a las distribuciones de campo, Mozer y Baranger (Baranger and Mozer, 1959; Mozer and Baranger, 1960) dan un paso más e introducen las correlaciones entre partículas debido a la interacción entre ellas en el cálculo del campo, llegando a unas expresiones que mediante resolución numérica dan la distribución de campo en función del parámetro de acoplamiento del plasma. Sin embargo, un error de carácter numérico en el artículo original de Mozer y Baranger hizo que su trabajo fuera relegado a un segundo plano y fuera Hooper el que ocupara su lugar. Hooper llegó al mismo resultado algunos años más tarde pero utilizando un razonamiento totalmente diferente (Hooper, 1966). De hecho en el trabajo de Pfennig and Trefftz (1966) se recalcularon las funciones de distribución con las expresiones dadas por Mozer y Baranger y se comprobó que el resultado era el mismo que daba Hooper en su artículo. Respecto a este tema, en los últimos años hay que destacar el método APEX (Iglesias, 1983) que mejora el resultado dado por Hooper y permite el cálculo de distribuciones de campo para emisores cargados.

Durante esos años además aparecen numerosos trabajos que sientan las bases y desarrollan lo que se conocerá como teoría estándar. Son cálculos semiclásicos en los que el emisor se trata dentro del marco de

la mecánica cuántica mientras que la radiación se considera un objeto clásico. Además, sigue presente la separación entre el efecto de los iones (que son tratados bajo la aproximación cuasi estática) y de los electrones (tratados dentro de la teoría de colisiones). De entre todos los trabajos cabe destacar los de H. Griem (Griem *et al*, 1959; Griem and Shen, 1961; Griem *et al*, 1962; Griem, 1962, 1966), Sahal-Bréchet (1969), Cooper and Oertel (1967), Smith and Hooper (1967), Smith *et al* (1969), etc.

Estos modelos son los primeros que permiten hacer cálculos realistas. De hecho, Hans Griem publicó un libro en 1964 en el que recopilaba toda la información sobre el tema y elaboraba unas tablas de espectros para su uso en diagnosis de plasma (Griem, 1964).

En 1973, aparece un trabajo de Kelleher and Wiese (1937) en el que se pone de manifiesto que el movimiento de los iones juega un papel importante en la forma de las líneas espectrales (en las teorías desarrolladas hasta ese momento se suponía que a todos los efectos los iones se comportaban como si estuvieran estáticos). Este efecto de la dinámica de los iones (que ya había sido predicho por Dufty (1970)) abrió las puertas al desarrollo de nuevos modelos en los que se incluyera el efecto del movimiento iónico.

Frisch and Brissaud *et al* (1971) (Brissaud and Frisch *et al*, 1971) habían propuesto un par de años antes una técnica nueva diferente a todas las anteriores que es conocida como Método del Modelo de Microcampo (MMM). La idea de esta técnica es suponer que la secuencia de campo que ve el emisor se puede “emular” mediante una muestra de un proceso estocástico. El cálculo se lleva a cabo mediante consideraciones estadísticas sobre dicha secuencia temporal. Esta técnica, a pesar de dar buenos resultados, fue criticada por algunos autores, alegando que se basaba en consideraciones matemáticas más que físicas (Smith *et al*, 1981) o que no tenía en cuenta ciertas informaciones físicas, como las secciones eficaces de colisión, (Lee, 1973).

El Método del Modelo del Microcampo propició la aparición de las simulaciones por computador. El principal punto débil del MMM era que para fijar los parámetros del proceso estocástico necesitaba hacer ciertas aproximaciones (a veces poco justificadas). Con las simulaciones por computador desaparece este problema, ya que estas son capaces de reproducir las secuencias temporales que ve el emisor sin necesidad de hacer aproximaciones matemáticas.

La primera publicación de un cálculo de líneas espectrales hecho mediante simulación por computador fue publicado en 1979 (Stamm and Voslamber, 1979). El esquema del cálculo es el mismo que en el MMM, con la diferencia de que ahora las secuencias de campo eléctrico se cal-

culan mediante una simulación de los perturbadores, de modo que los momentos estadísticos de la secuencia de campo están todos considerados de modo natural.

Para generar las secuencias de campo que ve el emisor, las simulaciones por computador consideran un modelo de plasma muy sencillo formado por perturbadores (partículas cargadas) y emisores (neutros y cargados). Se calcula el movimiento de las partículas y se recrea el campo que generarían sobre los emisores, obteniéndose así las secuencias temporales de campo que ven los emisores. Una vez hecho esto se obtiene la evolución del emisor resolviendo de forma numérica la ecuación de Schrödinger y con ello el detalle de la emisión del átomo. El perfil se calcula promediando sobre un gran número de secuencias de campo con diferentes configuraciones del plasma.

El formalismo utilizado por Stamm no permitía un uso generalizado de estas técnicas para el cálculo de espectros, sino que más bien estaba enfocado a estudiar algunos detalles de los modelos analíticos. Uno de estos detalles que tuvo especial importancia fue el modelo *mu-ion* (Seidel and Stamm, 1982), el cual sería utilizado posteriormente por la mayoría de las simulaciones.

El principal inconveniente de las simulaciones es su alto costo de cómputo, lo que en ocasiones las hace imposibles de llevar a cabo. Por una lado, si se tiene en cuenta las interacciones entre las partículas, el cálculo de las trayectorias de los perturbadores se convierte en algo prohibitivo en la mayoría de los casos. Por otro lado, la resolución de las ecuaciones diferenciales que rigen la evolución del emisor puede ser muy costosa, ya que el número de estados involucrados puede ser muy grande. Respecto a este problema, Gigosos *et al* (1985) desarrollaron un algoritmo que reduce notablemente el costo de computación de estas ecuaciones para el caso del Hidrógeno.

Desde esta primera publicación las simulaciones por computador han estado en constante evolución y han sido muchos los trabajos que se han publicado al respecto. Por mencionar algunos de los trabajos más destacados podemos señalar los de Calisti *et al* (1988), Hegerfeldt and Kesting (1988), Frerichs (1989), Gigosos and Cardeñoso (1996), Poquérusse *et al* (1996), Halenka *et al* (2002), Talin *et al* (2003) y Stambulchik *et al* (2007).

Todas estos trabajos tratan de simulaciones de partículas independientes, donde no se tienen en cuenta las interacciones entre partículas. Los cálculos con interacciones ha empezado a ser factibles hace sólo unos pocos años (debido a la mejora en la velocidad de cómputo de los ordenadores actuales), y de hecho en los años previos y durante la elaboración

de este trabajo se han obtenido los primeros resultados empleando una técnica de simulación completa, teniendo en cuenta todas las interacciones entre las partículas (Calisti *et al*, 2005; González-Herrero *et al*, 2013; González-Herrero and Gigosos, 2015; Lara, 2013).

En los últimos años se han llevado a cabo varios trabajos comparando los resultados de las simulaciones con medidas experimentales, mostrando un acuerdo excelente entre ambos (Gigosos *et al*, 2014; Lara *et al*, 2012b). Además de esto se ha utilizado la técnica de simulación por computador para la obtención de tablas de espectros de diferentes líneas espectrales para su uso en diagnosis de plasmas (Gigosos and Cardenoso, 1996; Gigosos and González, 2009; Gigosos *et al*, 2014; Lara *et al*, 2012a; Talin *et al*, 2003).

Actualmente está aceptado que las simulaciones por computador son los métodos de cálculo mas precisos a la hora de calcular líneas espectrales, de hecho no es raro que se tomen las simulaciones por computador como referencia para contrastar los resultados de otros métodos de cálculo (Pardini *et al*, 2013) ².

1.3. Las series isoelectrónicas y el escalado con Z

A pesar de todos estos avances todavía hay ciertos asuntos que siguen sin resolverse. Uno de estos es el escalado de las líneas espectrales con la carga del emisor en las series isoelectrónicas.

Incluso a día de hoy, que se conocen numerosos métodos para calcular cualquier línea espectral, este tipo de asuntos resultan muy interesantes. La estructura atómica de los emisores de una serie isoelectrónica tienen la misma estructura de niveles, por lo que cabría esperar algún tipo de regularidad en todas las líneas espectrales de la misma serie. Si se encontrara una sistemática en la forma de las líneas, bastaría calcular unos pocos elementos de la serie y extrapolar al resto.

Según los modelos teóricos, el ensanchamiento de las líneas debería ser proporcional a la sección eficaz del emisor, que es proporcional al inverso del cuadrado de la carga del emisor. Sin embargo las medidas experimentales no muestran esta tendencia que predice el modelo semi-clásico (Bottcher *et al*, 1988; Glenzer *et al*, 1992; Glenret *et al*, 1994).

El razonamiento de los modelos teóricos es muy sencillo: Las líneas de estas transiciones son líneas muy aisladas cuyo ensanchamiento se

²Una de las excepciones en las que las simulaciones parecen no estar de acuerdo con los experimentos es en las líneas aisladas (y en el escalado con Z), que es justamente el objeto de este trabajo.

debe principalmente al efecto de las colisiones fuertes de los perturbadores. Bajo esta aproximación la anchura de la línea es proporcional a la sección eficaz del emisor, que resulta que –aproximadamente– va como el inverso del cuadrado de la carga efectiva del emisor (Z) (Griem, 1964). Como ya hemos dicho, esta dependencia no se observa en las medidas experimentales, sino que todo parece indicar que la anchura decrece como algo parecido a Z^{-1} (Bottcher *et al*, 1988; Hegazy *et al*, 2003).

Estas discrepancias podrían deberse a varios motivos. Como por ejemplo que la suposición que hemos adoptado (que la anchura se debe a las colisiones fuertes) no fuera del todo cierta y hubiera otros fenómenos que afectaran al perfil (como el ensanchamiento por colisiones débiles o el ensanchamiento cuasi estático). También pudiera ser que hubiera algún otro mecanismo que no se ha contemplado y que de alguna manera pudiera incrementar la anchura de las líneas a medida que aumenta la carga del emisor. O por el contrario que el tratamiento de las colisiones fuertes, que se supone dominante, no se esté haciendo correctamente (Alexiou, 1994). Esta última hipótesis es la que se ha venido considerando en los últimos años, por lo que la mayoría los esfuerzos se han centrado en mejorar el modelo de colisiones fuertes, en concreto en refinar el cálculo de la sección eficaz introduciendo consideraciones cuánticas.

La idea del ensanchamiento por colisiones fuertes consiste en suponer que solo las colisiones muy cercanas (con un parámetro de impacto muy pequeño) tienen efecto en el ensanchamiento de la línea. Cuando una de estas colisiones tiene lugar, el electrón –o el ión– pasa tan cerca del emisor que distorsiona completamente la emisión del mismo, rompiendo completamente su coherencia. Hasta ahora se ha pensado que el punto débil a este planteamiento, y por lo tanto el motivo de las discrepancias con los experimentes, es que si el electrón se encuentra muy próximo al ión, quizás un tratamiento clásico (como se venía haciendo en el modelo semi clásico) no sea adecuado y sea necesario hacer un tratamiento cuántico del conjunto a la hora de calcular la sección eficaz de la colisión (Elabidi *et al*, 2004).

Esta idea resulta sumamente complicada, y la prueba es que hasta la fecha los resultados de este tipo de cálculos, si bien parecen reproducir mejor los datos experimentales, dependen enormemente del número de estados involucrados en el cálculo cuántico y de cómo se lleve a cabo (Alexiou *et al*, 2014; Duan *et al*, 2014). En este planteamiento la hipótesis de Lorentz sigue presente, la anchura depende de la estadística de colisiones, la diferencia entre los cálculos semi-clásicos y los cálculos cuánticos radica en cómo calculan las secciones eficaces.

El cálculo cuántico sólo tiene sentido cuando el electrón está muy

cerca del ión, a distancias del orden del radio atómico (ya que de otra manera se recuperaría el resultado clásico), sin embargo en estas situaciones hace ya mucho que el campo eléctrico que crea el electrón es tan intenso que la correlación de la emisión se ha perdido completamente, por lo que poco importa ya cómo se modifique a partir de ahora la estructura del emisor. Este tipo de cálculos complica enormemente el problema y no permite sacar ningún resultado claro, más allá del mero valor numérico de la anchura.

Otro de los problemas que se presentan en este asunto es que las medidas experimentales disponibles corresponden a condiciones de densidad y temperatura bastante diferentes, lo que obliga a re escalar los resultados para poder ver la tendencia con la carga del emisor. Este re escalado se lleva a cabo suponiendo que la dependencia con la densidad y temperatura de la anchura de las líneas son las dadas por el modelo de Lorentz, por lo que de nuevo estamos introduciendo una suposición que no sabemos a ciencia cierta su validez.

En los últimos años han sido varios los autores que han abordado este problema desde diferentes perspectivas. Incluyendo en el cálculos los efectos cuadrupolares (Alexiou, 1994), teniendo en cuenta una población de niveles de no equilibrio (Iglesias, 2005), , refinando el cálculo de la sección eficaz introduciendo correcciones cuánticas (Elabidi *et al*, 2004, 2009; Griem and Ralachenko, 2000; Ralchenkoa *et al*, 2001), o incluso introduciendo efectos relativistas en el cálculo de la sección eficaz (Duan *et al*, 2014, 2012). Sin embargo todavía a día de hoy, como lo confirman los últimos trabajos publicados, no hay una respuesta satisfactoria que explique estas discrepancias con los experimentos (Duan *et al*, 2014; Elabidi *et al*, 2009).

1.4. Propósito de este trabajo

Utilizando las simulaciones por computador como herramienta principal vamos a estudiar las líneas de las transiciones entre los niveles $3s$ y $3p$ de los primeros cuatro elementos cargados de la serie isoelectrónica del Berilio (B II, C III, N IV y O V). El objetivo principal es establecer, si existe, una dependencia con Z de la anchura de estas líneas y encontrar el origen de las discrepancias entre los resultados experimentales y los cálculos teóricos.

Antes de analizar los cálculos de las simulaciones se ha querido estudiar con detalle las dos aproximaciones que más pueden influir en el cálculo que nos ocupa (La aproximación de colisiones fuertes y la de

débiles), para luego poder comparar con más facilidad los resultados de las simulaciones con las predicciones de los modelos y poder detectar los puntos débiles de estos.

Dentro de las simulaciones por computador, podemos diferenciar dos técnicas de cálculo diferentes. La más sencilla es conocida como *Partículas Independientes* y no tiene en cuenta las interacciones entre partículas. La otra técnica que utilizaremos, mucho más realista, la llamaremos *Dinámica Molecular* e incluye todas las correlaciones entre partículas debido su interacción.

La técnica de Partículas Independientes utiliza el mismo modelo de plasma que la mayoría de los cálculos teóricos (que tampoco tienen en cuenta las correlaciones entre partículas), con la diferencia de que no utiliza ninguna aproximación adicional. Por lo tanto los cálculos llevados a cabo mediante esta técnica nos permitirán comprobar que tipo de fenómenos son los causantes de la anchura de la línea y si las aproximaciones hechas por los modelos teóricos tienen o no sentido.

Por otro lado, la técnica de Dinámica Molecular introduce un fenómeno que no se tiene en cuenta en ningún otro método de cálculo: todas las correlaciones entre partículas están incluidas en el cálculo. Esto hace que esta técnica sea particularmente realista, ya que además de mejorar el modelo del plasma tampoco utiliza ninguna aproximación adicional. La inclusión de las interacciones entre partículas tiene importantes consecuencias. Ahora la carga del emisor, y del resto de partículas, afecta al comportamiento de los campos, lo que introduce una dependencia con Z que no estaba contemplada en cálculos anteriores. Además aparece un fenómeno nuevo que produce un ensanchamiento adicional y que también depende de la carga de emisor: La recombinación de los emisores. Estos dos fenómenos hacen que los resultados obtenidos mediante esta técnica den una dependencia con Z muy diferente al resto de modelos, y que podría ser la causa de las discrepancias con los experimentos.

Los cálculos de Dinámica Molecular ya se habían llevado a cabo en anteriores trabajos (Lara, 2013), sin embargo sólo se habían hecho para emisores neutros y de carga 1 y en plasmas débilmente acoplados. En este caso, para poder estudiar las series isoelectrónicas ha sido necesario generalizar la técnica de simulación a plasmas con iones multicargados. Durante el proceso de desarrollo de la técnica de cálculo se han llevado a cabo varios estudios sobre ciertos aspectos de los plasmas, como el campo medio o el proceso de equilibrado. Todos los detalles acerca de estos estudios así como los pormenores de las técnicas de simulación se pueden encontrar en el capítulo 4 de este trabajo.

2

Ensanchamiento de líneas espectrales

En este capítulo se hace un pequeño resumen de lo que es el ensanchamiento de líneas espectrales, en concreto del formalismo utilizado para el cálculo de espectros de ensanchamiento Stark.

De un modo más específico se desarrollan con detalle lo que se conocen como la aproximación de colisiones débiles y la aproximación de colisiones fuertes. Aunque ambos modelos son de sobra conocidos, resulta muy ilustrativo hacer el desarrollo paso a paso para poner de manifiesto las aproximaciones que hacen cada uno de ellos y cuales son sus puntos débiles.

2.1. Mecanismos de ensanchamiento de líneas espectrales

Antes de hablar de como se calcula el espectro, vamos a intentar entender desde un punto de vista cualitativo cómo se produce el proceso de emisión y que fenómenos pueden influir en él. En primer lugar, lo que siempre debemos tener en cuenta es que las líneas espectrales que se registran en un espectrómetro, o en cualquier dispositivo de medida, son un fenómeno colectivo que involucra un gran número de emisores atómicos y que además lleva implícito un promedio temporal. El hecho de que los perfiles de las líneas sean fenómenos colectivos es fácil de comprender, la luz que llega al dispositivo de medida procede de una zona extensa, o lo que es lo mismo, de muchos emisores, por lo que el resultado será el promedio de las emisiones individuales de cada uno de ellos.

Para entender el proceso de ensanchamiento de las líneas espectrales, partamos de un sistema lo mas sencillo posible, compuesto únicamente por dos niveles cuya diferencia de energía es $\hbar\omega$. Supongamos un gas compuesto por esa especie atómica, bajo la estimulación adecuada, si cada átomo no se viera influido por el resto del gas y todos los emisores estuvieran en reposo, cada uno emitiría una línea espectral a una frecuencia ω , idéntica para todos ellos. En este supuesto, lo que se observaría en el espectro sería una línea infinitamente estrecha a la frecuencia ω (suponiendo que el aparato de medida no introduce ninguna anchura adicional). Sin embargo, eso no es del todo cierto, incluso para un sistema en el que cada emisor está aislado. El proceso de emisión de un átomo es finito, la emisión dura un tiempo determinado, lo que se traduce en el espectro en frecuencia de una cierta anchura. Esta anchura intrínseca al proceso de emisión es lo que se conoce comúnmente como *anchura natural* y hace que el perfil espectral sea una función lorentziana (Bethe and Salpeter, 1957).

El siguiente paso es considerar que los emisores ya no están fijos, cada uno se mueve con una velocidad diferente de modo que el conjunto obedece a la ley de Maxwell de distribución de las velocidades en un gas. Al estar los emisores en movimiento, la radiación que le llega al instrumento de medida se verá afectada por el efecto Doppler. La luz que llega ahora al receptor tendrá una frecuencia dada por $\omega(1 + v/c)$ donde v es la velocidad del emisor (supuesto el observador en reposo) y c la velocidad de la luz. Teniendo en cuenta la distribución de velocidades en el gas, el perfil de la línea espectral resulta ser una función gaussiana (Sobel'man, 1972). Llegados a este punto hemos pasado de una línea

espectral ideal de anchura cero a un perfil espectral que es la convolución de una función lorentziana, debido al ensanchamiento natural, y una función gaussiana, dada por el ensanchamiento doppler.

Añadamos ahora a nuestro plasma las interacciones entre partículas, ahora cada emisor ya no está aislado y se verá afectado por el resto de partículas del plasma. Como resultado de estas interacciones con el resto de partículas, el átomo se "deformará", cambiando su estructura interna y su frecuencia de emisión. Esto hace que en general, dos emisores no emitan exactamente a la misma frecuencia. Cada uno de ellos tendrá unos vecinos diferentes, que modificarán su estructura de una determinada manera, haciendo que emita a una frecuencia ligeramente diferente de la del átomo sin perturbar. Al final, la luz que recoge el detector será la suma de las emisiones individuales de cada uno de los emisores. La dispersión en frecuencias por el efecto del resto de partículas del plasma se traducirá en una anchura adicional de la línea. Este ensanchamiento que se deriva de la interacción del emisor con otras partículas se conoce como *ensanchamiento por presión*. Dentro del ensanchamiento por presión podemos diferenciar dos fenómenos atendiendo a la naturaleza de las fuerzas que lo provocan: el *ensanchamiento de Van der Waals*, cuando los partículas que perturban al emisor son neutros, y el *ensanchamiento Stark* cuando los perturbadores son partículas cargadas. Ambos procesos se basan en el mismo fenómeno, las "colisiones" entre partículas –ya sean debidas a fuerzas de Van der Waals o a fuerzas eléctricas– modifican el modo en el que el átomo emite, lo que en el promedio se traduce en una pérdida de coherencia la emisión y en un ensanchamiento de la línea.

Resumiendo tenemos cuatro fenómenos que contribuyen al ensanchamiento de una línea espectral: ensanchamiento natural, ensanchamiento Doppler, ensanchamiento de Van der Waals y ensanchamiento Stark. En el tema que nos ocupa, que es el ensanchamiento de líneas espectrales en plasmas, dado que el número de cargas eléctricas libres es muy alto, el ensanchamiento de Van der Waals es totalmente despreciable frente al ensanchamiento Stark. El ensanchamiento Doppler dependerá de la temperatura del plasma (a mayor temperatura mayor ensanchamiento por Doppler), pero, en general en los plasmas que se van a estudiar es mucho más pequeño que el ensanchamiento Stark por lo que puede no tenerse en cuenta. Por último el ensanchamiento natural es ridículo comparado con cualquiera de los anteriores, de hecho, la anchura que suele introducir el instrumento de medidas para registrar experimentalmente el espectro suele ser mayor que la anchura natural. En consecuencia, de todos los mecanismos de ensanchamiento el que juega el papel fundamental en el ensanchamiento de líneas espectrales en plasmas es el efecto Stark, por

lo que de ahora en adelante nos centraremos únicamente en él.

2.2. Ensanchamiento Stark

Ya hemos comentado que cuando se trata de plasmas, el fenómeno predominante de ensanchamiento de las líneas espectrales es el ensanchamiento Stark. En esta sección vamos a resumir brevemente el formalismo que se utiliza a la hora de calcular perfiles espectrales cuando se tiene en cuenta el ensanchamiento Stark.

El perfil espectral emitido por un átomo emisor se calcula como la transformada de Fourier completa del promedio de la función de autocorrelación del momento dipolar de los emisores. El promedio se entiende hecho sobre la colectividad de emisores en el interior del plasma (Anderson, 1949).

$$I(\omega) = \operatorname{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \{C(t)\} \quad (2.1)$$

$$C(t) = \operatorname{tr} [\mathbf{D}(0) \cdot \mathbf{D}(t) \rho] \quad (2.2)$$

$$\mathbf{D}(t) = U^+(t) \mathbf{D}(0) U(t) \quad (2.3)$$

Donde, $U(t)$ es el operador de evolución temporal del emisor en el instante t , el cual obedece a la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = H(t) U(t) \quad (2.4)$$

$C(t)$ es la función de autocorrelación dipolar y $\mathbf{D}(t)$ el operador dipolar del emisor. La traza del producto de operadores en la expresión (2.2) da cuenta del promedio sobre los posibles estados iniciales cuya población viene dada por la matriz de densidad ρ . Estas expresiones no son exclusivas del ensanchamiento Stark, sino que son totalmente generales. La información de las perturbaciones que sufre el emisor está incluida en el hamiltoniano del sistema H . Este hamiltoniano, como es habitual, se puede expresar como suma de una parte constante –el hamiltoniano del átomo sin perturbar H_0 – más un término que puede depender del tiempo y que da cuenta de todas las perturbaciones externas $V(t)$.

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad (2.5)$$

En el caso concreto del ensanchamiento Stark, el término $V(t)$ da cuenta únicamente de la acción del campo eléctrico sobre el emisor. Es habitual a la hora de calcular la contribución coulombiana al hamiltoniano truncar

el desarrollo en serie en el término de orden dos –considerar únicamente las interacciones dipolares, considerando que el término cuadrupolar y los de más alto orden son despreciables–. Bajo esa aproximación (aproximación dipolar) la expresión (2.5) puede escribirse

$$H(t) = H_0 + q_e \mathbf{R} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (2.6)$$

Donde \mathbf{R} el operador posición, $\mathbf{E}(t)$ el campo eléctrico que ve el emisor y q_e la carga del emisor. Esta aproximación se conoce como aproximación dipolar.

A la vista de todo esto, resulta evidente que para obtener el espectro todo pasa por resolver la ecuación de Schrödinger para el sistema emisor obteniendo así el operador evolución del sistema. La resolución de esta ecuación no es sencilla, y sólo en determinadas circunstancias admite una solución analítica (Gigosos *et al*, 2007). Sin embargo, en determinadas condiciones físicas, se pueden hacer ciertas aproximaciones que simplifican el cálculo y permiten obtener ciertas expresiones analíticas para la anchura y el desplazamiento de las líneas. Estas aproximaciones están relacionadas con los diferentes ritmos de evolución de los elementos que intervienen en el proceso, principalmente la evolución de los campos perturbadores y del propio dipolo emisor.

Antes de resumir brevemente las aproximaciones más habituales, vamos a establecer los tiempos típicos de cada uno de los fenómenos que intervienen en el proceso. En primer lugar tenemos el tiempo característico de los campos eléctricos que ve el emisor. Estos campos son los generados por el resto de las partículas del plasma, y su escala de tiempos es el cociente entre la distancia típica entre partículas y su velocidad típica: $\tau_c = r_0/v_0$. Por otro lado el tiempo típico de la evolución del dipolo, por definición (expresiones (2.1) y (2.2) está relacionado con la semianchura de la línea, $\tau_d \approx 1/\Delta\omega_{1/2}$. Finalmente, tenemos la escala de tiempos asociada al efecto Stark, que está relacionada con el desplazamiento en energía de los niveles involucrados en la transición. Este tiempo característico es una manera de medir la magnitud del efecto Stark típico. La variación de energía de un determinado nivel debido a un campo E_0 viene dado aproximadamente por

$$\Delta\mathcal{E} \sim \hbar\omega \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\chi}{\hbar\omega}\right)^2} - 1 \right) \quad (2.7)$$

siendo $\chi \equiv q_e a_0 S E_0$, con $a_0 S$ el elemento reducido de la matriz R del emisor, a_0 el radio de Böhr, y ω la separación en frecuencia de los niveles involucrados. Cuando la separación de los niveles es mucho mayor que el

efecto del campo típico: $\hbar\omega \gg \chi$, entonces estamos en la zona de efecto Stark cuadrático :

$$\Delta\mathcal{E}^C \sim \frac{q_e^2 a_0^2 S^2 E_0^2}{2\hbar\omega} \quad (2.8)$$

En el caso contrario, $\hbar\omega \ll \chi$, estaremos en la zona de efecto Stark Lineal,

$$\Delta\mathcal{E}^L \sim q_e a_0 S E_0 \quad (2.9)$$

Definimos el tiempo Stark como el inverso de este desplazamiento en energías:

$$\tau_S = \frac{\hbar}{\Delta\mathcal{E}} \quad (2.10)$$

Llamamos tiempo Stark al inverso del desplazamiento en frecuencias producido por el desplazamiento Stark típico. En este tiempo, la diferencia entre la fase de un emisor perturbado por el campo típico y un emisor sin perturbar, es igual a 1.

La relación entre τ_S y τ_c nos da una estimación de cuál es el fenómeno físico que da cuenta del ensanchamiento de la línea. El desplazamiento Stark típico (y, por tanto, el inverso del tiempo Stark característico, τ_S) nos da una idea de la magnitud de la posible anchura de la línea. Si en ese tiempo característico, τ_S el campo eléctrico no ha cambiado, entonces efectivamente el efecto Stark es estático y lo que marca la anchura de la línea es su magnitud típica y su distribución estadística ($\tau_S < \tau_c$). Por el contrario, cuando $\tau_S \gg \tau_c$ (y, por tanto, el efecto Stark es débil) estaremos en el caso de campos muy rápidos y nuestra consideración de efecto Stark estático carece de sentido. En ese caso, la anchura de la línea vendrá dada por la dinámica de los campos y no por su estadística.

Supongamos un plasma en el que el tiempo Stark sea del orden del tiempo típico de los campos y que además los campos varíen mucho más despacio que el operador evolución del átomo, $\tau_c \gg \tau_d$. En ese caso podemos suponer que el ensanchamiento se debe principalmente a la estadística de campos, y además durante el tiempo que tarda el dipolo emisor en perder la correlación (τ_d) los campos generados por el resto del plasma apenas han cambiado, por lo que a todos los efectos se pueden considerar como un campo constante en el tiempo. Podemos entonces suponer en la ecuación (2.4) el hamiltoniano no depende del tiempo y en esas condiciones es posible resolver la ecuación de manera analítica. Esta aproximación se conoce como *aproximación de campo cuasi estático* y la principal dificultad radica en obtener la distribución de campo correcta en el interior del plasma para hacer el promedio adecuadamente.

En el extremo opuesto, cuando se da que $\tau_c \ll \tau_S$, el efecto Stark típico no es lo suficientemente fuerte como para perturbar la estructura

del emisor, y por lo tanto su emisión. Sólo las partículas que se acercan lo suficiente al emisor son capaces de generar campos suficientemente intensos como para alterar su emisión. Y en ese caso, los campos son tan rápidos que pueden tratarse dentro del marco de la teoría de colisiones. Esto se puede ver desde el punto de vista del emisor como que el campo evoluciona tan rápido que el átomo no tiene tiempo de apreciar el detalle de su evolución, sino que ve el campo como una sucesión de colisiones instantáneas. A su vez, dentro de esta situación, podemos diferenciar entre dos tipos de colisiones: Aquellas que son *fuertes* y tienen un gran efecto en el emisor (hacen que la coherencia de la emisión se rompa totalmente) y las que son *débiles* y únicamente modifican ligeramente la fase del emisor. Cuando nos encontramos con colisiones *débiles*, la autocorrelación del operador dipolar se pierde por el efecto acumulado de este tipo de colisiones. Cuando esto sucede, la evolución del dipolo es mucho más lenta que la de los campos, $\tau_c \ll \tau_d$ lo que permite hacer una serie de aproximaciones que como veremos en la siguiente sección permite obtener una expresión analítica para la anchura de la línea espectral. Esto es lo que se conoce habitualmente en la bibliografía como *aproximación de impacto* (Griem, 1966), aunque para ser más precisos debería denominarse aproximación de colisiones débiles y rápidas. Por otro lado, cuando las colisiones provocan cambios en la fase del emisor comparables a π , una sola colisión rompe completamente la coherencia de la emisión, podemos hablar de colisiones *fuertes* y en este caso el ensanchamiento de la línea depende únicamente de la frecuencia de estas colisiones *fuertes*. Este tipo de ensanchamiento se suele conocer como *ensanchamiento de Lorentz* (Lorentz, 1906).

En general los campos perturbadores no cumplirán ninguna de estas condiciones, sin embargo podemos asumir que el campo total se puede separar de tal manera que cada una de las partes cumpla con una de las condiciones antes descritas. De esta manera podemos pensar que la anchura de la línea es la suma de las anchuras debidas al campo cuasi estático, a las colisiones débiles (anchura de impacto) y a las colisiones fuertes (anchura de Lorentz). El problema de este planteamiento está en cuantificar en que proporción contribuye cada uno de estos fenómenos. Cuando alguno de ellos es predominante el procedimiento habitual es calcular con detalle ese término y al resultado “corregirlo” de manera aproximada con la contribución de los demás. En el caso que nos atañe, las transiciones SP, en la mayoría de las condiciones experimentales, los dos mecanismos de ensanchamiento dominantes son la anchura debida a las colisiones fuertes y la debida a las débiles. En estas líneas la anchura debida a la estadística de campos es despreciable y toda la anchura

esta provocada por fenómenos de impacto (ya sean colisiones fuertes o débiles). La clave está en averiguar que parte de la anchura se debe a las colisiones débiles, y por lo tanto puede tratarse aplicando el modelo de impacto, y que parte a las colisiones fuertes, y que por lo tanto deberá tratarse dentro del marco del ensanchamiento de Lorentz.

2.3. Modelo de impacto: Colisiones fuertes

Antes de abordar el ensanchamiento producido por colisiones fuertes, vamos a ver que es lo que entendemos por este tipo de colisiones y porqué es necesario hacer un tratamiento diferente al de las débiles.

Como hemos comentado y como veremos en la sección siguiente, para que la aproximación de colisiones débiles sea válida es necesario, además de que los campos sean rápidos, que el tiempo que tarda en perderse la correlación del dipolo sea mucho mayor que el tiempo Stark. Esto quiere decir que no pueden existir cambios de fase bruscos en la emisión, ya que si esto sucediera la función de correlación experimentaría una caída muy rápida y contradeciría la hipótesis de partida. Las colisiones responsables de estos cambios bruscos en la fase del emisor son las que denominaremos colisiones fuertes. Por lo tanto, el efecto de estas colisiones no puede ser incluido en el modelo de colisiones débiles y debe analizarse por separado.

Uno de los primeros problemas que surgen es como determinar el límite a partir del cual consideramos que una colisión es fuerte o débil. Está claro que para que una colisión sea fuerte debe provocar un cambio de fase grande, de tal manera que el valor de la fase antes y después de la colisión no estén correlacionados. ¿Pero como de grande?. Podemos tomar como valor umbral π (media oscilación), o 2π , una oscilación completa, o cualquier valor dentro de ese orden. Esto hace que el criterio de colisión fuerte no esté bien definido y provoca que haya cierta arbitrariedad en la elección. Además, como veremos más adelante esta elección tiene mucha importancia en el resultado final.

Para hacer este razonamiento vamos a suponer un emisor muy sencillo con solo dos niveles de energía y una única frecuencia de emisión ω_0 . Supongamos entonces un caso en el que sólo hay colisiones fuertes, el resto de fenómenos (ensanchamiento cuasi estático y colisiones débiles) no juegan ningún papel ¹. Cuando una de estas colisiones tiene lugar se produce un cambio aleatorio en la fase de la emisión. Como consecuencia

¹En términos de las escalas de tiempo características esto significa que el tiempo Stark es mucho mayor que el tiempo del dipolo. O lo que es lo mismo que el efecto Stark típico apenas afecta a la emisión, y por lo tanto solo aquellos campos anormalmente intensos (colisiones fuertes) son capaces de perturbar la emisión.

la emisión antes y después de la colisión son independientes, sus fases no guardan ninguna correlación. Además, entre una colisión y la siguiente el emisor se comporta como si estuviera aislado, por lo que su frecuencia de emisión se corresponde con la del átomo sin perturbar. En definitiva lo que tenemos es que la emisión es una sucesión incoherente de trenes de onda donde todos ellos tienen la misma frecuencia ω_0 . Cada uno de estos trenes de onda tendrá una duración τ_i , y vendrá caracterizado por una fase aleatoria ϕ_i que es constante a lo largo de todo el tren i -ésimo (ver figura 2.1). De esta manera podemos escribir la emisión del átomo como

$$f(t) = \exp [i\omega_0 t + \phi_i] \quad (2.11)$$

donde ϕ_i es la fase de la emisión durante el tramo i . La duración de cada tren de onda sigue la estadística de la frecuencia entre colisiones fuertes. Que viene dada por la siguiente expresión:

$$W(\tau) = \frac{1}{\tau_0} \exp \left[-\frac{\tau}{\tau_0} \right] \quad (2.12)$$

donde τ_0 es el tiempo medio entre colisiones.

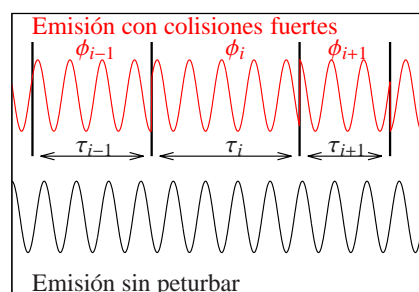


FIGURA 2.1 - Figura explicativa del efecto de las colisiones fuertes en la emisión de un átomo.

Calculemos entonces la función de correlación de la emisión:

$$\begin{aligned} \{C(t)\} &= \{f(0)f^*(t)\} \\ &= \{\exp [i(\omega_0 t + \phi)]\} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Si la fase ϕ fuera siempre constante, el promedio sería igual a la función. Sin embargo, este valor de la fase cambia aleatoriamente cada cierto tiempo τ , que sigue la distribución dada por (2.12). Lo que hace que el

promedio de la función de correlación sea

$$\begin{aligned}\{C(t)\} &= \exp[i\omega_0 t] \exp[-t/\tau_0] \\ &= \exp\left[\left(i\omega_0 - \frac{1}{\tau_0}\right)t\right]\end{aligned}\quad (2.14)$$

donde hemos tomado la fase inicial de la emisión igual a cero.

Para calcular el espectro sustituimos esta expresión en la ecuación (2.2)

$$\begin{aligned}I(\omega) &= \operatorname{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \exp[i\omega t] \exp\left[\left(i\omega_0 - \frac{1}{\tau_0}\right)t\right] \\ &= \operatorname{Re} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dt \exp\left[\left(i(\omega - \omega_0) - \frac{1}{\tau_0}\right)t\right]\end{aligned}\quad (2.15)$$

finalmente integrando y tomando la parte real llegamos a

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2}\quad (2.16)$$

donde hemos definido el parámetro γ como

$$\gamma = \frac{1}{\tau_0}\quad (2.17)$$

La ecuación (2.16) nos dice que según la aproximación de colisiones fuertes el perfil del espectro es una lorentziana centrada en ω_0 y cuya anchura a altura mitad es 2γ . Teniendo en cuenta que τ_0 es el tiempo típico entre colisiones, el parámetro γ no es más que la frecuencia típica de esas colisiones. Podemos expresar esta magnitud en función de la sección eficaz del átomo

$$\gamma = \frac{1}{\tau_0} = Nv\sigma_{cf}\quad (2.18)$$

donde N es la densidad de perturbadores, v su velocidad típica y σ_{cf} la sección eficaz de las colisiones fuertes del átomo emisor. Esta relación sólo es válida cuando los perturbadores se comportan como partículas independientes, no hay interacciones entre los perturbadores ni entre estos y el emisor. En caso contrario, esta relación no es tan sencilla y sería necesario introducir una dependencia con el grado de acoplamiento del plasma y con la carga del emisor. En cualquier supongamos que esta expresión es una buena aproximación. La sección eficaz se calcula como

$$\sigma_{cf} = \pi r_w^2\quad (2.19)$$

donde r_w es el radio de Weisskopf (Weisskopf, 1933) y está directamente relacionado con la definición de colisión fuerte: es el parámetro de impacto mas grande que puede tener una colisión para que provoque un cambio de fase total en la emisión igual a π ².

El cambio de fase que experimenta el operador dipolar, básicamente es proporcional al desplazamiento en frecuencia ($\Delta\omega$) debido al campo multiplicado por la duración de la colisión (Δt). Podemos escribir entonces que el cambio de fase en la emisión $\Delta\phi$ es

$$\Delta\phi = \Delta\omega \Delta t \quad (2.20)$$

donde la duración de la colisión es

$$\Delta t = \frac{b}{v} \quad (2.21)$$

siendo v la velocidad de la partícula y b el parámetro de impacto de la colisión. Análogamente a la expresión (2.7), el cambio de frecuencia de la emisión es

$$\Delta\omega = \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\chi}{\hbar\omega_0} \right)^2} - 1 \right) \quad (2.22)$$

En esta expresión, si el efecto Stark es débil ($\hbar\omega_0 \gg \chi$), el efecto Stark es cuadrático y el cambio de fase viene dado por

$$\Delta\omega^C = \frac{1}{b^4} \quad (2.23)$$

Por otro lado ,cuando el efecto Stark es intenso comparado con la energía de la transición ($\hbar\omega_0 \ll \chi$), el efecto Stark es lineal y el cambio en frecuencia es

$$\Delta\omega^L = \frac{1}{b^2} \quad (2.24)$$

teniendo en cuenta que $v \propto \sqrt{T}$, y tomando como criterio de colisión fuerte que $\Delta\phi = \pi$, el radio de Weisskopf dependerá de la temperatura como

$$r_w^L \propto \frac{1}{v} \propto \frac{1}{\sqrt{T}} \quad (2.25)$$

$$r_w^C \propto \frac{1}{v^{1/3}} \propto \frac{1}{T^{1/6}} \quad (2.26)$$

²Aquí hemos tomado π como el cambio de fase umbral, aunque se podría haber tomado también 2π o $\pi/2$ por ejemplo.

Otra forma de calcular el radio de Weisskopf es de forma numérica. El procedimiento no podría ser más sencillo: Calculamos el cambio de fase que origina una colisión en función de su parámetro de impacto hasta que encontremos el valor adecuado. Para ello es necesario resolver de manera numérica las ecuaciones (2.2)-(2.4). Los detalles de este cálculo así como una ejemplo se pueden consultar en el anexo A.

Este procedimiento nos permite obtener el radio de Weisskopf para diferentes temperaturas (este valor no depende de la densidad). Este tipo de cálculos ya se hicieron para el Estroncio (Gigosos *et al*, 2006), y de hecho los resultados que se han obtenido aquí para el Boro II son similares: se observan dos tendencias claramente diferenciadas en la dependencia del radio de Weisskopf (r_W) con la temperatura. Para temperaturas bajas y medias el r_W va como $T^{-1/6}$ (como ya anticipaba la expresión (2.26), y para temperaturas altas como $T^{-1/2}$. Teniendo en cuenta que la anchura en este modelo viene dada por la expresión (2.18), la anchura de la línea dependerá de la temperatura como $T^{-1/2}$ para temperaturas altas (efecto Stark lineal) y como $T^{1/6}$ para temperaturas bajas (efecto Stark cuadrático).

Además, en cualquiera de los dos casos, el radio de Weisskopf es proporcional a la matriz R del emisor (ver la expresión (2.7)), que depende de la carga del emisor como Z^{-1} . Teniendo en cuenta que la sección eficaz es proporcional a r_w^2 , su dependencia con la carga del emisor será del tipo Z^{-2} . Volviendo a la expresión (2.18) comprobamos que la anchura también debería escalar con la carga como Z^{-2} .

En general el modelo nos suministra la información de cómo depende la anchura de la línea de la densidad, la temperatura y la carga del emisor. Sin embargo el valor cuantitativo de la anchura depende enormemente del valor del radio de Weisskopf elegido, o lo que es lo mismo de cómo definamos las colisiones fuertes. Además de esto, el modelo no tiene en cuenta la influencia de la carga del emisor en la trayectoria de las partículas (cabe esperar, que si un ión está más cargado, atraiga hacia si más electrones y en consecuencia la frecuencia de colisiones fuertes aumente) ni tampoco el grado de acoplamiento del plasma.

2.4. Modelo de impacto: Colisiones débiles

Una vez explicado el tratamiento para las colisiones fuertes, vamos a abordar el caso de las colisiones débiles. En este supuesto, el campo eléctrico es visto igualmente como una sucesión de colisiones, la diferencia es que ahora estas colisiones individualmente no son capaces de romper

totalmente la coherencia de la emisión. La pérdida de correlación en este caso se debe al efecto acumulativo de cada una de estas colisiones.

Para poder aplicar esta aproximación debemos suponer que la evolución del campo eléctrico es mucho más rápida que la del dipolo emisor, y además que el efecto de la estadística de campo no juega ningún papel (el tiempo Stark típico es pequeño comparado con el tiempo de correlación del dipolo).

$$\tau_c \ll \tau_S \ll \tau_d \quad (2.27)$$

Ya se ha comentado que si bien a este modelo se le conoce como *modelo de impacto* por motivos históricos, realmente sólo contempla las colisiones débiles, ya que las fuertes deben tratarse siguiendo el formalismo de Lorentz descrito en la sección anterior.

Vamos a hacer el desarrollo para el caso más general posible: Supondremos que todos los estados involucrados evolucionan y se pueden mezclar por efecto del campo externo. Desarrollemos la expresión (2.2) teniendo en cuenta la ecuación (2.3) y suponiendo que los estados están uniformemente poblados ($\rho = 1$)

$$C(t) = \text{tr} [\mathbf{D}(0) \cdot U^+(t)\mathbf{D}(0)U(t)] \quad (2.28)$$

Como la traza no cambia ante permutaciones cíclicas podemos reescribir la ecuación anterior en la forma:

$$\begin{aligned} C(t) &= \text{tr} [U(t)\mathbf{D}(0)U^+(t) \cdot \mathbf{D}(0)] \\ &= \text{tr} [\mathbf{D}(0) \cdot U(t)\mathbf{D}(0)U^+(t)] \end{aligned} \quad (2.29)$$

A la vista de la ecuación (2.29) podemos redefinir el operador $\mathbf{D}(t)$ como

$$\mathbf{D}(t) = U(t)\mathbf{D}(0)U^+(t) \quad (2.30)$$

sin que ello afecte al resultado final, ya que conduce a la misma función de correlación, y por lo tanto al mismo espectro.

Tomemos entonces la expresión (2.30) y derivemos respecto del tiempo:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{D}(t) = \frac{d}{dt}U(t)\mathbf{D}(0)U^+(t) + U(t)\mathbf{D}(0)\frac{d}{dt}U^+(t) \quad (2.31)$$

La derivada de la función $U(t)$ la tenemos en (2.4) y la de su adjunta es

$$\frac{d}{dt}U^+(t) = -\frac{1}{i\hbar}U^+(t)H(t) \quad (2.32)$$

Sustituyendo en la expresión (2.31) llegamos a

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{D}(t) &= \frac{1}{i\hbar}H(t)U(t)\mathbf{D}(0)U^+(t) - U(t)\mathbf{D}(0)\frac{1}{i\hbar}U^+(t)H(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H(t)U(t)\mathbf{D}(0)U^+(t) - U(t)\mathbf{D}(0)U^+(t)H(t)]\end{aligned}\quad (2.33)$$

Multiplicando por $i\hbar$ y utilizando la relación dada por (2.30) llegamos finalmente a:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\mathbf{D}(t) = H(t)\mathbf{D}(t) - \mathbf{D}(t)H(t)\quad (2.34)$$

En el caso más general, cada elemento \mathbf{D}_{ij} de las matrices \mathbf{D} conecta un estado inicial $|\psi_i\rangle$ con un estado final $|\psi_j\rangle$. Resulta conveniente trabajar en el espacio de estados de la forma $|i, j\rangle \equiv |\psi_i\rangle \otimes |\psi_j\rangle$, llamado espacio de Liouville. En este nuevo espacio, las matrices \mathbf{D} se transforman en vectores y la ecuación diferencial de la expresión (2.34) puede reescribirse en este espacio como:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\|\mathbf{D}(t)\rangle\rangle = \mathcal{L}\|\mathbf{D}(t)\rangle\rangle\quad (2.35)$$

Cada elemento de la matriz $\mathcal{L}\mathbf{D}$ viene dado por la expresión

$$\begin{aligned}(\mathcal{L}\mathbf{D})_{ij} &= \sum_k H_{ik}\mathbf{D}_{kj} - \sum_k \mathbf{D}_{ik}H_{kj} \\ &= \sum_{n,m} (H_{in}\delta_{jm} - \delta_{in}H_{mj})\mathbf{D}_{nm}\end{aligned}\quad (2.36)$$

Donde \mathcal{L} es el Liouvillano del sistema, que se puede expresar de forma compacta como:

$$\mathcal{L} = H \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes H^t\quad (2.37)$$

Además en este espacio, la expresión (2.30) se transforma en

$$\mathbf{D}(t) = \mathcal{U}(t)\mathbf{D}(0)\quad (2.38)$$

Donde $\mathcal{U}(t) = U(t) \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes U(t)^+$.

Vemos que la ecuación (2.35) es formalmente idéntica a la ecuación (2.4). Ahora el papel del Hamiltoniano lo juega el Liouvillano definido en (2.37). Este Liouvillano marca la evolución del vector $\mathbf{D}(t)$, y análogamente a lo que sucedía con el Hamiltoniano, podemos separarlo en una parte constante y en otra que eventualmente puede depender del tiempo.

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{V}(t)\quad (2.39)$$

Donde los operadores \mathcal{L}_0 y \mathcal{V} se construyen de la siguiente manera:

$$\mathcal{L}_0 = H_0 \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes H_0^+ \quad (2.40)$$

$$\mathcal{V}(t) = \mathbf{E}(t) \cdot (\mathbf{R} \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \mathbf{R}^t) = \mathbf{E}(t) \cdot \mathcal{R} \quad (2.41)$$

$$\mathcal{R} = \mathbf{R} \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \mathbf{R}^t \quad (2.42)$$

Por otro lado, conviene separar en la evolución del dipolo atómico la parte de oscilación fija –la señal portadora, ligada a las diferencias de energía de los estados sin perturbar– y las modulaciones producidas por las perturbaciones. Para ello hacemos

$$\tilde{\mathbf{D}}(t) = \exp(i\mathcal{L}_0 t/\hbar) \mathbf{D}(t) \quad (2.43)$$

$$\tilde{\mathcal{V}}(t) = \exp(i\mathcal{L}_0 t/\hbar) \mathcal{V}(t) \exp(-i\mathcal{L}_0 t/\hbar) \quad (2.44)$$

De ahora en adelante omitiremos los símbolos $\|\!\|$ para simplificar la notación. Con estas dos nuevas variables, la ecuación (2.35) queda de la forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{\mathbf{D}}(t) = \tilde{\mathcal{V}}(t) \tilde{\mathbf{D}}(t) \quad (2.45)$$

reescribiendo esta ecuación en forma integral tenemos:

$$\tilde{\mathbf{D}}(t) = \tilde{\mathbf{D}}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{\mathcal{V}}(t') \tilde{\mathbf{D}}(t') \quad (2.46)$$

Hacemos el desarrollo hasta segundo orden (introduciendo de nuevo esta misma expresión en la integral)

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{D}}(t) &= \tilde{\mathbf{D}}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{\mathcal{V}}(t') + \\ &\quad \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \tilde{\mathcal{V}}(t') \int_0^{t'} dt'' \tilde{\mathcal{V}}(t'') \tilde{\mathbf{D}}(t'') \end{aligned} \quad (2.47)$$

Si volvemos sobre la ecuación (2.1) vemos que lo que realmente aparece en la integral es el promedio de la función de correlación, que a su vez es básicamente el promedio del operador $\mathbf{D}(t)$.

$$\begin{aligned} \{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} &= \tilde{\mathbf{D}}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \{\tilde{\mathcal{V}}(t')\} + \\ &\quad \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \{\tilde{\mathcal{V}}(t') \tilde{\mathcal{V}}(t'') \tilde{\mathbf{D}}(t'')\} \end{aligned} \quad (2.48)$$

En esta expresión, la primera integral es cero, ya que $\tilde{\mathcal{V}}(t') = \mathbf{E}(t) \cdot \tilde{\mathcal{R}}$, donde $\tilde{\mathcal{R}}$ es constante y $\mathbf{E}(t)$ es un vector isótropo.

$$\{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} = \tilde{\mathbf{D}}(0) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \{\tilde{\mathcal{V}}(t') \tilde{\mathcal{V}}(t'') \tilde{\mathbf{D}}(t'')\} \quad (2.49)$$

Para continuar con el desarrollo vamos a utilizar lo que es propiamente la *aproximación de impacto*. Como ya hemos dicho, bajo esta aproximación suponemos que el dipolo evoluciona mucho más despacio que los campos ($\tau_c \ll \tau_d$). En el integrando tenemos un promedio a dos tiempos, $\tilde{\mathcal{V}}(t')$ por un lado y $\tilde{\mathcal{V}}(t'')\tilde{\mathbf{D}}(t'')$ por otro. Sin embargo $\tilde{\mathcal{V}}(t'')$ evoluciona mucho más rápido que $\tilde{\mathbf{D}}(t'')$ por lo que la correlación entre ambos se pierde muy rápidamente y podemos considerar que son independientes.

$$\{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} \approx \tilde{\mathbf{D}}(0) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \{\tilde{\mathcal{V}}(t') \tilde{\mathcal{V}}(t'')\} \{\tilde{\mathbf{D}}(t'')\} \quad (2.50)$$

Además, si tenemos en cuenta que la correlación $\tilde{\mathcal{V}}(t')\tilde{\mathcal{V}}(t'')$ se pierde para tiempos del orden de τ_c y que $\tau_d \gg \tau_c$ podemos suponer que en todo el intervalo de integración de t'' el momento dipolar se mantiene constante:

$$\{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} \approx \tilde{\mathbf{D}}(0) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \{\tilde{\mathcal{V}}(t') \tilde{\mathcal{V}}(t'')\} \{\tilde{\mathbf{D}}(t')\} \quad (2.51)$$

Es importante resaltar que el hecho de truncar el desarrollo en serie en el segundo orden (o lo que es lo mismo suponer que $\mathbf{D}(t)$ es constante en el intervalo de integración en t'') implica que no pueden existir cambios bruscos en el operador $\mathbf{D}(t)$. Esto significa que las colisiones fuertes (aquellas que provocan cambios grandes en el operador $\mathbf{D}(t)$) deben ser excluidas del cálculos, ya que en caso contrario no se podría hacer el paso de (2.50) a (2.51). Este el motivo por el que un nombre más adecuado para este modelo sería *modelo de colisiones débiles y rápidas* en lugar de *modelo de impacto*.

Desarrollemos ahora el promedio de la correlación que aparece en la expresión (2.51):

$$\{\tilde{\mathcal{V}}(t') \tilde{\mathcal{V}}(t'')\} = q^2 \{\mathbf{E}(t') \cdot \tilde{\mathcal{R}}(t') \mathbf{E}(t'') \cdot \tilde{\mathcal{R}}(t'')\} \quad (2.52)$$

Teniendo en cuenta el carácter vectorial de los operadores \mathcal{R} y del campo

eléctrico, podemos desarrollar esa expresión componente a componente:

$$\begin{aligned} \{\tilde{\mathcal{V}}(t')\tilde{\mathcal{V}}(t'')\} &= q^2 \left\{ \sum_{i=x,y,z} \{E_i(t')\tilde{\mathcal{R}}_i(t') \sum_{j=x,y,z} E_j(t'')\tilde{\mathcal{R}}_j(t'')\} \right. \\ &= q^2 \sum_{i,j=x,y,z} \{E_i(t')E_j(t'')\} \tilde{\mathcal{R}}_i(t')\tilde{\mathcal{R}}_j(t'') \quad (2.53) \end{aligned}$$

Nótese que el producto de los operadores $\tilde{\mathcal{R}}$ se ha sacado del promedio ya que es un operador constante que depende sólo del emisor considerado. El producto entre elementos del campo eléctrico sólo será distinto de cero cuando $i \neq j$, si además consideramos que el sistema es isótropo, no hay ninguna dirección privilegiada, tenemos que $\{E_i(t')E_j(t'')\} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\{\mathbf{E}(t') \cdot \mathbf{E}(t'')\}$ Por lo tanto la expresión (2.53) conduce a

$$\begin{aligned} \{\tilde{\mathcal{V}}(t')\tilde{\mathcal{V}}(t'')\} &= q^2 \frac{q^2}{3} \{\mathbf{E}(t') \cdot \mathbf{E}(t'')\} \tilde{\mathcal{R}}(t') \cdot \tilde{\mathcal{R}}(t'') \\ &\equiv \frac{q^2}{3} \Gamma(t' - t'') \tilde{\mathcal{R}}(t') \cdot \tilde{\mathcal{R}}(t'') \quad (2.54) \end{aligned}$$

Donde hemos definido $\Gamma(t) = \{\mathbf{E}(t') \cdot \mathbf{E}(t'')\}$ como la función de correlación del campo eléctrico. Nótese que esta función sólo depende de la diferencia $t' - t''$. Expresemos la ecuación anterior en términos de los operadores \mathcal{R} utilizando que $\tilde{\mathcal{R}}(t) = e^{i\mathcal{L}_0 t} \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0 t}$

$$\begin{aligned} \{\tilde{\mathcal{V}}(t')\tilde{\mathcal{V}}(t'')\} &= \\ &= \frac{q^2}{3} \Gamma(t' - t'') e^{i\mathcal{L}_0 t'/\hbar} \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0 t'/\hbar} \cdot e^{i\mathcal{L}_0 t''/\hbar} \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0 t''/\hbar} \\ &= \frac{q^2}{3} \Gamma(t' - t'') e^{i\mathcal{L}_0 t'/\hbar} \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0(t' - t'')/\hbar} \cdot \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0 t''/\hbar} \\ &= e^{i\mathcal{L}_0 t'/\hbar} G(t' - t'') e^{-i\mathcal{L}_0 t''/\hbar} \quad (2.55) \end{aligned}$$

Donde hemos definido la matriz $G(t' - t'')$ como:

$$G(t' - t'') \equiv \frac{q^2}{3} \Gamma(t' - t'') \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0(t' - t'')/\hbar} \cdot \mathcal{R} e^{i\mathcal{L}_0(t' - t'')/\hbar} \quad (2.56)$$

Volviendo a la expresión (2.51) y sustituyendo allí la expresión obtenida en (2.55) tenemos que

$$\begin{aligned} \{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} &\approx \tilde{\mathbf{D}}(0) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \times \\ &\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{i\mathcal{L}_0(t')/\hbar} G(t' - t'') e^{-i\mathcal{L}_0(t')/\hbar} \{\tilde{\mathbf{D}}(t')\} \quad (2.57) \end{aligned}$$

Llegados a este punto, en el término de la derecha sólo la función $G(t' - t'')$ depende de la variable t'' , por lo que la segunda integral sólo afecta a esta función. Definamos entonces una nueva matriz $K(t)$ como la integral de la matriz $G(t' - t'')$

$$K(t) \equiv \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau G(\tau) \quad (2.58)$$

Teniendo entonces que

$$\{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} \approx \tilde{\mathbf{D}}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\mathcal{L}_0(t')/\hbar} K(t') e^{-i\mathcal{L}_0(t')/\hbar} \{\tilde{\mathbf{D}}(t')\} \quad (2.59)$$

Siguiendo el mismo convenio que hasta ahora, podemos definir

$$\tilde{K}(t) = e^{i\mathcal{L}_0 t/\hbar} K(t) e^{-i\mathcal{L}_0 t/\hbar} \quad (2.60)$$

de modo que

$$\{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} \approx \tilde{\mathbf{D}}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \tilde{K}(t') \{\tilde{\mathbf{D}}(t')\} \quad (2.61)$$

La función $\tilde{K}(t)$ es fundamentalmente la integral de la correlación del campo hasta un cierto tiempo t . Cuando t sea lo suficientemente grande (típicamente $t > \tau_c$) la función $\tilde{K}(t)$ alcanzará un valor constante. Dado que hemos dado por válida la aproximación de impacto, el tiempo que tarda la función $\tilde{K}(t)$ en alcanzar su valor límite es despreciable frente al tiempo de evolución del dipolo y se puede suponer que la función $\tilde{K}(t)$ toma su valor asintótico instantáneamente, siendo constante a lo largo de todo el tiempo de integración. Esto es lo que se hace habitualmente para calcular el conocido como *Operador de anchura*. Sin embargo, podemos proceder sin esa suposición, y estudiar que sucede en el transitorio – para aquellos tiempos en los que la correlación del campo todavía no se ha perdido–. De esta manera vamos a encontrar una expresión similar a la que se da usualmente para el Operador de anchura pero que depende explícitamente del tiempo. Nótese que la aproximación de impacto sigue siendo necesaria, ya que de lo contrario no hubiéramos podido hacer el paso de (2.49) a (2.51).

Tomemos la expresión (2.61) y obtengamos su ecuación diferencial equivalente

$$i\hbar \frac{d}{dt} \{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} = \tilde{K}(t) \{\tilde{\mathbf{D}}(t)\} \quad (2.62)$$

Expresemos esta integral en función de las variables originales (sin tilde) utilizando para ello las expresiones (2.43) y (2.60)

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} \mathbf{D}(t) \right) &= e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} K(t) e^{-\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} \mathbf{D}(t) \\
i\hbar \left(e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} \frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar} \mathbf{D}(t) + e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} \frac{d}{dt} \mathbf{D}(t) \right) &= e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} K(t) \mathbf{D}(t) \\
e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{D}(t) &= e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} K(t) \mathbf{D}(t) + e^{\frac{i\mathcal{L}_0 t}{\hbar}} \mathcal{L}_0 \mathbf{D}(t) \\
i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{D}(t) &= (K(t) + \mathcal{L}_0) \mathbf{D}(t) \quad (2.63)
\end{aligned}$$

Ecuación diferencial cuya solución es:

$$\mathbf{D}(t) = \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t (\mathcal{L}_0 + K(t')) dt' \right) \mathbf{D}(0) \quad (2.64)$$

de esta expresión podemos deducir que el operador evolución del sistema en el espacio de Liouville no es más que

$$\mathcal{U}(t) = \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t (\mathcal{L}_0 + K(t')) dt' \right) \quad (2.65)$$

Tomemos ahora la ecuación de Schrödinger en el espacio de Liouville para el operador evolución y hagamos el promedio,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \{ \mathcal{U}(t) \} = \{ \mathcal{L}(t) \mathcal{U}(t) \} \equiv M(t) \{ \mathcal{U}(t) \} \quad (2.66)$$

donde hemos definido la matriz $M(t)$ como

$$M(t) \equiv \{ \mathcal{V}(t) \mathcal{U}(t) \} \{ \mathcal{U}(t) \}^{-1} \quad (2.67)$$

Con esto, la solución de esta ecuación diferencial será

$$\mathcal{U}(t) = \exp \left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' M(t') \right) \quad (2.68)$$

Comparando esta expresión con la que hemos obtenido en (2.64), y si la aproximación de impacto es cierta, entonces:

$$M(t) = \mathcal{L}_0 + K(t) \quad (2.69)$$

Podemos definir el operador de anchura generalizado como

$$\Phi(t) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' K(t') \quad (2.70)$$

De modo que el operador dipolar se puede expresar como

$$\mathbf{D}(t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\mathcal{L}_0 - \Phi(t)\right)\mathbf{D}(0) \quad (2.71)$$

Para tiempos suficientemente largos ($t \gg \tau_c$) la función $K(t)$ toma un valor constante y el operador de anchura generalizado se reduce al operador de anchura ordinario multiplicado por el tiempo.

El primer término de la exponencial nos da la frecuencia de emisión del sistema sin perturbar, mientras que el segundo término –el operador anchura– da cuenta del efecto del campo externo. En concreto, la parte real de Φ está relacionada con el ensanchamiento de la línea y su parte imaginaria con el desplazamiento en frecuencia.

Calculemos ahora el operador de anchura generalizado tomando las expresiones (2.56) y (2.58) y sustituyendo en (2.70)

$$\Phi(t) = \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0 t''/\hbar} \cdot \mathcal{R} e^{i\mathcal{L}_0 t'/\hbar} \quad (2.72)$$

En el espacio de Liouville cada elemento no es más que una transición entre dos estados de energía del átomo emisor. Podemos identificar a cada elemento del espacio de Liouville con dos índices $\|i, j\rangle\rangle$, donde el índice i da cuenta del estado inicial de la transición y el índice j del final. Los operadores de este espacio relacionan dos elementos del tipo $\|i, j\rangle\rangle$, por lo que podemos etiquetar los elementos de las matrices que representan a estos operadores (\mathcal{L} o Φ) con cuatro índices que dan cuenta de los estados inicial y final de las dos transiciones que relacionan. Podemos reescribir la expresión (2.72) elemento a elemento

$$\Phi_{i\alpha}^{j\beta}(t) = \sum_{k,\gamma} \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_{j\beta} - \omega_{k\gamma})t''} \mathcal{R}_{i\alpha}^{k\gamma} \cdot \mathcal{R}_{k\gamma}^{j\beta} \quad (2.73)$$

donde $\omega_{ij} = \omega_i - \omega_j$. Cada elemento $\Phi_{i\alpha}^{j\beta}$ es el elemento de matriz que conecta los estados $\|i, \alpha\rangle\rangle$ y $\|j, \beta\rangle\rangle$, donde a su vez cada uno de estos estados es una transición entre dos niveles. En el caso más general, los subíndices i, j, α y β se refieren a cualquier nivel del sistema. De modo que los elementos de matriz que conectan los elementos $\|i, \alpha\rangle\rangle$ y $\|j, \beta\rangle\rangle$, se puede entender como una transición entre transiciones $\|i, \alpha\rangle\rangle \rightarrow \|j, \beta\rangle\rangle$.

La expresión (2.73) nos da en el caso más general la expresión del operador de anchura elemento a elemento. Sin embargo, en algunos casos se puede aplicar una aproximación adicional. Cuando la línea a estudiar

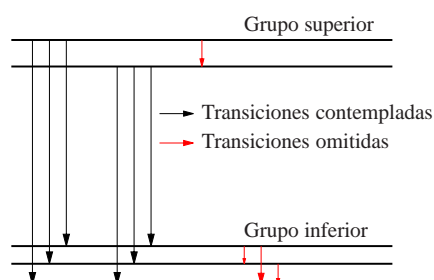


FIGURA 2.2 - Esquema de las transiciones dipolares contempladas en el cálculo cuando la separación entre el grupo superior y el inferior es mucho mayor que las que existen entre niveles del mismo estado

es tal que existen dos grupos de estados separados una energía mucho mayor que la diferencia de energía entre los estados del mismo grupo, las transiciones dipolares a estudiar se suelen limitar a transiciones que vayan de un estado del grupo superior a uno del inferior. La razón es bien sencilla, el espectro se calcula sólo para un cierto intervalo de frecuencias centrado en la frecuencia principal ω_0 , relacionada con la energía entre el grupo superior y el inferior. Las transiciones dentro del mismo grupo tendrán una frecuencia mucho menor que ω_0 y por lo tanto las líneas resultantes estarán muy alejadas de la ventana espectral contemplada, de modo que se pueden omitir sin que ello afecte al resultado. Obviamente, cuanto mayor sea la diferencia de energías mayor validez tendrá esta suposición.

Esta aproximación, que se puede hacer la mayoría de las veces, implica que el operador dipolar sólo tienen elementos distintos de cero en las cajas de fuera de la diagonal.

$$\mathbf{D}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d}(t) \\ \mathbf{d}^+(t) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

La matriz \mathbf{d} es de dimensión $n \times m$ donde n es el número de estados del grupo superior y m el del inferior. Obviamente, la matriz \mathbf{D} es de dimensión $(n + m) \times (n + m)$. Es importante darse cuenta en este punto de que si bien la estructura del operador \mathbf{D} que aparece en la función de correlación es diagonal por cajas, el hamiltoniano del sistema no tiene porqué serlo (todos los estados evolucionan conjuntamente y se mezclan).

Por otro lado, si como se ha supuesto los dos grupos de estados están muy separados en energías, cabe esperar que el campo perturbador no mezcle estados de diferentes grupos. Si los grupos están lo suficientemente distanciados en energía, el campo perturbador no es lo suficientemente

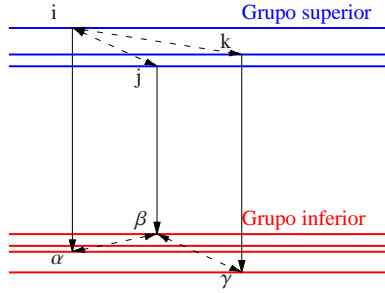


FIGURA 2.3 - Esquema de transiciones dentro de la aproximación de *no-quenching*. Los estados que mezcla el campo perturbador son siempre del mismo grupo.

intenso como para conectar estados pertenecientes a diferentes grupos. Los grupos superior e inferior evolucionan independientemente. Esto es lo que se conoce en la bibliografía como aproximación de *no-quenching* y tiene como resultado que ahora el hamiltoniano es diagonal por cajas: el hamiltoniano del grupo superior y el del inferior son independientes.

$$\begin{aligned} H(t) &= \begin{pmatrix} H_s(t) & 0 \\ 0 & H_i(t) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} H_{s0} & 0 \\ 0 & H_{i0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{R}_s & 0 \\ 0 & \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{R}_i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.75)$$

Y por lo tanto el operador evolución tendrá la misma estructura:

$$U(t) = \begin{pmatrix} U_s(t) & 0 \\ 0 & U_i(t) \end{pmatrix} \quad (2.76)$$

Donde $U_s(t)$ y $U_i(t)$ son soluciones de las ecuaciones diferenciales

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_s(t) = H_s(t) U_s(t) \quad (2.77)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_i(t) = H_i(t) U_i(t) \quad (2.78)$$

Si ahora hacemos estas simplificaciones en la expresión (2.34)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d} \\ \mathbf{d}^+ & 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} H_s & 0 \\ 0 & H_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d} \\ \mathbf{d}^+ & 0 \end{pmatrix} - \\ &\quad \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d} \\ \mathbf{d}^+ & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_s^+ & 0 \\ 0 & H_i^+ \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.79)$$

Y desarrollando los productos matriciales llegamos a dos ecuaciones para \mathbf{d} equivalentes:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{d} = H_s \mathbf{d} - \mathbf{d} H_i^+ \quad (2.80)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{d}^+ = H_i \mathbf{d}^+ - \mathbf{d}^+ H_s^+ \quad (2.81)$$

Donde se puede comprobar que efectivamente la ecuación (2.81) es lo que resulta al tomar adjuntos en (2.80). Nótese que formalmente estas dos ecuaciones son idénticas a la expresión (2.35). Además podemos redefinir los operadores de las expresiones (2.40), (2.41) y (2.42) como

$$\mathcal{L}_0 = H_{s0} \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes H_{i0}^t \quad (2.82)$$

$$\mathcal{V} = \mathbf{E}(t) \cdot (\mathbf{R}_s \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \mathbf{R}_i^t) = \mathbf{E}(t) \cdot \mathcal{R} \quad (2.83)$$

$$\mathcal{R} = \mathbf{R}_s \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \mathbf{R}_i^t \quad (2.84)$$

(el superíndice t indica trasposición). Con estas nuevas definiciones el desarrollo anterior se puede repetir de manera idéntica y se llega a las mismas expresiones. Sin embargo, ahora en la expresión (2.73) los subíndices están restringidos a un determinado grupo: Los índices latinos denotan estados del nivel superior y los griegos del inferior.

Teniendo en cuentas las aproximaciones que hemos utilizado, este modelo será aplicable a situaciones en las que los tiempos característicos cumplan la relación dada por (2.27) y además no existan colisiones fuertes, entendiéndose como tal las colisiones que provocan cambios de fase grandes (comparados con π) en la emisión.

Mientras que en el caso de las colisiones fuertes la expresión a la que se llega no presenta ningún problema, el resultado al que se ha llegado aquí, para las colisiones débiles, es algo más delicado. En la expresión final para el operador de anchura aparece la correlación del campo, en concreto su integral (2.73). Sin embargo, si calculamos la integral del campo de Coulomb, esta diverge, y lo hace por dos motivos. El primero se debe a las colisiones fuertes, ya que el potencial de Coulomb presenta una divergencia en el origen.³ Y el segundo se debe a que el potencial de Coulomb decae como $1/r$, lo que no es suficiente para que su integral converja.

Para evitar estas divergencias, habitualmente se recurre a truncar el intervalo de integración. Para distancias cortas se utiliza el *radio de*

³Esto no debería sorprendernos, ya que una de las suposiciones del modelo es precisamente esa, que no existen colisiones fuertes que provoquen grandes cambios en el emisor.

Weisskopf, del cual ya hemos hablado, y para evitar la divergencia a largas distancias se utiliza el radio de Debye, que de alguna manera tiene en cuenta el debilitamiento del campo por el efecto de apantallamiento y de correlación entre partículas. Sin embargo, estos dos nuevos parámetros añaden una complejidad adicional al modelo, y hacen que el resultado final dependa también de la elección de estos parámetros.

Si nos fijamos en la expresión (2.73), la anchura de la línea parece ser proporcional al cuadrado del operador \mathcal{R} , al igual que sucedía en el modelo de colisiones fuertes. Sin embargo aquí la situación es más complicada, ya que hay de por medio una transformada de fourier que también tiene información de las intensidades de las líneas y de las probabilidades de transición, lo que hace que la dependencia sea más complicada.

A la hora de manejar los resultados, suele ser interesante expresar la función de correlación sin la frecuencia principal (la frecuencia de la línea si no existiera efecto Stark). En las expresiones anteriores, las matrices H_{0u} y H_{0l} tiene un término que es proporcional a la matriz unidad y que da cuenta de la energía entre el grupo superior y el inferior $H_{0u} = \mathcal{E}_u + \tilde{H}_{0u}$ y $H_{0l} = \mathcal{E}_l + \tilde{H}_{0l}$. Teniendo en cuenta esto, podemos trabajar omitiendo estas constantes sustituyendo los operadores U_u por $U_u \exp(-i\mathcal{E}_u t/\hbar)$ y U_l por $U_l \exp(-i\mathcal{E}_l t/\hbar)$. Con estas nuevas definiciones, podemos reescribir la función de correlación como

$$C(t) = e^{i\omega_0 t} \text{tr} (U_u^+ \mathbf{d} U_l \cdot \mathbf{d}^+) + e^{-i\omega_0 t} \text{tr} (U_l^+ \mathbf{d}^+ U_u \cdot \mathbf{d}) \quad (2.85)$$

donde ahora $\omega_0 = (\mathcal{E}_u - \mathcal{E}_l)/\hbar$. Escribamos

$$\text{tr} (U_l^+ \mathbf{d}^+ U_u \mathbf{d}) \equiv C_R(t) + iC_I(t) \quad (2.86)$$

donde $C_R(t)$ y $C_I(t)$ son funciones reales del tiempo. Con esta definición podemos expresar la función de correlación como

$$C(t) = 2C_R(t) \cos(\omega_0 t) + 2C_I(t) \sin(\omega_0 t) \quad (2.87)$$

Podemos trabajar entonces con la “función de correlación compleja” $\tilde{C}(t)$

$$\tilde{C}(t) = C_R(t) + iC_I(t) \quad (2.88)$$

que ya no contiene la información de la frecuencia ω_0 . Esta forma de expresar la función de correlación es muy conveniente, ya que si la anchura se debe unicamente a fenómenos de impacto (a mecanismos de ensanchamiento homogéneos en el tiempo) la función $\tilde{C}(t)$ se puede ajustar a una exponencial compleja del tipo $\exp[(-\gamma + i\sigma)t]$, donde γ es la anchura de la línea y σ el desplazamiento en frecuencia.

En el anexo B se puede ver las expresiones finales del operador de anchura para dos casos muy particulares: la línea Lyman- α y una transición $s - p$ con quenching.

3

Procesos de correlación controlada

Para poder poner a prueba el modelo de colisiones débiles sin necesidad de tener que recurrir al radio de Weisskopf (recordemos que en este modelo aparece la integral de la correlación del campo, que, en el caso de campo de Coulomb, diverge) vamos a generar unas secuencias de campo ficticias cuya función de correlación sea conocida y converja.

Con la ayuda de un proceso Autoregresivo de Media Móvil (ARMA) vamos a generar secuencias de campo cuya función de correlación sea suma de dos exponenciales. Con estas secuencias de campo y para una transición $S - P$ como la descrita en el anexo B calcularemos el perfil sin ninguna aproximación y utilizando el modelo de colisiones débiles. Comprobaremos de esta manera la validez del modelo y cómo se comporta cuando las suposiciones hechas en el mismo dejan de ser válidas.

3.1. Procesos autorregresivos de media móvil

Las secuencias de campo que vamos a utilizar para nuestro cálculo ficticio no van a ser más que una sucesión de números aleatorios cuya correlación es conocida. Para obtener tal secuencia vamos a utilizar lo que se conocen como *procesos auto regresivos de media móvil* (del inglés AutoRegressive Moving Average) y que de ahora en adelante llamaremos procesos ARMA. Este tipo de procesos es la combinación de dos más sencillos: los procesos autoregresivos y los procesos de media móvil (George, 1976). Nuestro objetivo es obtener una secuencia de campo cuya correlación venga fijada de antemano, y que eventualmente, pueda tener anticorrelación (pueda tomar valores negativos).

La manera más sencilla de conseguir esto es utilizando un proceso ARMA(2,1). Se trata de una combinación de un proceso autorregresivo de orden 2 con uno de media móvil de orden 1. En estas secuencias de campo artificiales, la distribución probabilística del módulo del campo será de tipo Normal (en lugar de seguir la distribución de Hooper o la de Holstmark). Además la función de correlación será una suma de exponenciales, como veremos más adelante. Estas dos características, que viene dadas por el formalismo que se utiliza en los procesos ARMA, a pesar de no ser realistas no afectan para nada a la aplicabilidad de la aproximación de colisiones débiles y rápidas.

Para obtener las expresiones que nos permitan obtener estas secuencias, vamos a partir de un generador de números aleatorios de distribución gaussiana con media nula y cuya desviación cuadrática media es σ_x^2 . Consideremos una secuencia temporal obtenida de acuerdo con la regla

$$f_t = \alpha_1 f_{t-1} + \alpha_2 f_{t-2} + \beta_0 x_t + \beta_1 x_{t-1} \quad (3.1)$$

donde x_t es el valor generado por nuestro generador de números aleatorios en el paso t -ésimo. Esta expresión es la que se corresponde a un proceso ARMA(2,1). No vamos a entrar aquí en cómo se llega a esta expresión; únicamente veremos qué valor deben tomar los parámetros α_1 , α_2 , β_0 , β_1 , para que la función de correlación sea la suma de dos exponenciales preestablecidas.

Calculemos la correlación de una secuencia generada de esta manera multiplicando la expresión anterior por f_{t-k}

$$\begin{aligned} \gamma_k &\equiv \langle f_t f_{t-k} \rangle \\ &= \alpha_1 \langle f_{t-1} f_{t-k} \rangle + \alpha_2 \langle f_{t-2} f_{t-k} \rangle + \\ &\quad \beta_0 \langle x_t f_{t-k} \rangle + \beta_1 \langle x_{t-1} f_{t-k} \rangle \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde $k > 1$. Tenemos que

$$\langle f_{t-1}f_{t-k} \rangle = \langle f_t f_{t+1-k} \rangle = \gamma_{k-1} \quad (3.3)$$

ya que el proceso es estacionario. Por otro lado, como los valores de x_t y x_{t-1} son “posteriores”, respectivamente, a f_{t-k} y f_{t-k} no guardan ninguna correlación con ellos, de modo que los dos últimos promedios de (3.2) son nulos. Por tanto,

$$\gamma_k = \alpha_1 \gamma_{k-1} + \alpha_2 \gamma_{k-2}, \quad k > 1 \quad (3.4)$$

La expresión (3.4) determina una serie temporal –ecuación de diferencias– cuya solución es de la forma

$$\gamma_k = A_1 g_1^k + A_2 g_2^k \quad (3.5)$$

Para determinar A_1 y A_2 escribimos

$$\gamma_{k-1} = A_1 g_1^{k-1} + A_2 g_2^{k-1} \quad (3.6)$$

$$\gamma_{k-2} = A_1 g_1^{k-2} + A_2 g_2^{k-2} \quad (3.7)$$

y sustituimos (3.6) y (3.7) en la ecuación (3.4) y despejamos

$$\begin{aligned} 0 &= \gamma_k - \alpha_1 \gamma_{k-1} - \alpha_2 \gamma_{k-2} \\ &= A_1 g_1^k \left(1 - \alpha_1 \frac{1}{g_1} - \alpha_2 \frac{1}{g_1^2} \right) + A_2 g_2^k \left(1 - \alpha_1 \frac{1}{g_2} - \alpha_2 \frac{1}{g_2^2} \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

La relación (3.4) está garantizada siempre y cuando $1/g_1$ y $1/g_2$ sean las raíces del polinomio

$$1 - \alpha_1 x - \alpha_2 x^2 = 0 \quad (3.9)$$

En nuestro caso, deseamos que la función de autocorrelación γ_t tenga la estructura (3.5) –suma de dos exponenciales conocidas– de modo que las cantidades α_1 y α_2 son los coeficientes del polinomio cuyas raíces conocemos. Es decir,

$$\alpha_1 = g_1 + g_2 \quad (3.10)$$

$$\alpha_2 = -g_1 g_2 \quad (3.11)$$

Ponemos

$$g_1 = \exp(-1/\tau_1), \quad g_2 = \exp(-1/\tau_2) \quad (3.12)$$

De modo que la función de correlación es efectivamente la suma de dos exponenciales decrecientes. Como se puede comprobar, si no se necesitara obtener funciones de autocorrelación con parte negativa (anticorrelación) todo se simplificaría bastante ya que la función de correlación podría ser simplemente una exponencial. Para hallar los valores de los dos parámetros que nos quedan calculemos la correlación para los casos particulares con $k = 0$ y $k = 1$. En primer lugar

$$\begin{aligned}
\gamma_0 &= \langle f_t f_t \rangle \\
&= \alpha_1 \langle f_t f_{t-1} \rangle + \alpha_2 \langle f_t f_{t-2} \rangle + \beta_0 \langle f_t x_t \rangle + \beta_1 \langle f_t x_{t-1} \rangle \\
&= \alpha_1 \gamma_1 + \alpha_2 \gamma_2 + \beta_0 (\beta_0 \langle x_t x_t \rangle) \\
&\quad + \beta_0 (\alpha_1 \langle f_{t-1} x_{t-1} \rangle + \beta_1 \langle x_{t-1} x_{t-1} \rangle) \\
&= \alpha_1 \gamma_1 + \alpha_2 \gamma_2 + \beta_0^2 \sigma_x^2 + \beta_1 \alpha_1 \beta_0 \sigma_x^2 + \beta_1^2 \sigma_x^2 \\
&= \alpha_1 \gamma_1 + \alpha_2 \gamma_2 + (\beta_0^2 + \beta_1 \alpha_1 \beta_0 + \beta_1^2) \sigma_x^2 \tag{3.13}
\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \langle f_t f_{t-1} \rangle \\
&= \alpha_1 \langle f_{t-1} f_{t-1} \rangle + \alpha_2 \langle f_{t-2} f_{t-1} \rangle + \beta_0 \langle x_t f_{t-1} \rangle + \beta_1 \langle x_{t-1} f_{t-1} \rangle \\
&= \alpha_1 \gamma_0 + \alpha_2 \gamma_1 + \beta_1 \beta_0 \langle x_{t-1} x_{t-1} \rangle \\
&= \alpha_1 \gamma_0 + \alpha_2 \gamma_1 + \beta_0 \beta_1 \sigma_x^2 \tag{3.14}
\end{aligned}$$

A partir de la expresión (3.13) establecemos

$$(\beta_0^2 + \beta_1 \alpha_1 \beta_0 + \beta_1^2) = \frac{1}{\sigma_x^2} (\gamma_0 - \alpha_1 \gamma_1 - \alpha_2 \gamma_2) \tag{3.15}$$

Consideramos que la función γ_k es conocida, de hecho es lo que queremos fijar antes de generar la secuencia de valores, y es de la forma dada en (3.5). Por lo tanto, el lado derecho de la expresión (3.15) es conocido, así como también lo son los parámetros α_1 y α_2 , que se han calculado de acuerdo a (3.10)-(3.12). De la misma manera, a partir de (3.14) tenemos,

$$\beta_0 \beta_1 = \frac{1}{\sigma_x^2} (\gamma_1 (1 - \alpha_2) - \alpha_1 \gamma_0) \tag{3.16}$$

donde el lado derecho de la ecuación también es conocido. Reescribimos las ecuaciones (3.14) y (3.15) en la forma

$$\begin{aligned}
(\beta_0^2 + \beta_1 \alpha_1 \beta_0 + \beta_1^2) &= a \\
\beta_0 \beta_1 &= b \tag{3.17}
\end{aligned}$$

donde $a = \frac{1}{\sigma_x^2} (\gamma_0 - \alpha_1 \gamma_1 - \alpha_2 \gamma_2)$ y $b = \frac{1}{\sigma_x^2} (\gamma_1 (1 - \alpha_2) - \alpha_1 \gamma_0)$. El sistema se puede resolver fácilmente haciendo

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{b}{\beta_0} \\ \beta_0^4 + (\alpha_1 b - a)^2 \beta_0^2 + b^2 &= 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

La segunda ecuación limita los posibles valores de los parámetros β_0 y β_1 una vez fijados α_1 y α_2 ya que debe cumplirse que

$$(\alpha_1 b - a)^2 - 4b^2 \geq 0 \quad (3.19)$$

En caso contrario el problema habría que resolverlo en el plano complejo o bien no sería estacionario. Esa situación se da cuando el área de la zona de anticorrelación supera el área de la zona de correlación, lo que en el caso que nos ocupa no tiene sentido, ya que la función de autocorrelación tiene que tener siempre transformada de Fourier positiva (o nula). No hay que olvidar que la transformada de Fourier de una función de autocorrelación no es más que el cuadrado del módulo de una transformada de Fourier. El área de la función de correlación es el valor de la transformada de Fourier a frecuencia cero.

3.2. Secuencias de campo con correlación controlada

Disponemos ya de expresiones para obtener una secuencia de números aleatorios con correlación conocida. La secuencia de campo la construiremos a partir de esta secuencia para cada una de las tres componentes cartesianas —independientes estadísticamente—. Aunque ya lo hemos anunciado antes, conviene repetir que las secuencias que se van a calcular con este procedimiento no son realistas y no pretenden emular el campo que ve un emisor, sino que son un mero experimento académico para comprobar el rango de validez de la aproximación de impacto.

Cada componente x, y y z del campo se generará con un proceso ARMA(2,1), de manera que la función de correlación de cada componente sea

$$\gamma(t) = a_1 \exp(-t/\tau_1) + a_2 \exp(-t/\tau_2) \quad (3.20)$$

Teniendo en cuenta que $\Gamma(t) = \mathbf{E}(0) \cdot \mathbf{E}(t) = E_x(0)E_x(t) + E_y(0)E_y(t) + E_z(0)E_z(t)$, la función de correlación total será

$$\begin{aligned} \Gamma(t) &= 3\gamma(t) \\ &= A_1 \exp(-t/\tau_1) + A_2 \exp(-t/\tau_2) \end{aligned} \quad (3.21)$$

con $A_1 = 3a_1$ y $A_2 = 3a_2$.

Una vez fijados los parámetros A_1 , A_2 , τ_1 y τ_2 , se obtienen los valores de a_1 y a_2 y se calculan los parámetros α_1 , α_2 , β_0 y β_1 necesarios para calcular la secuencia de campo. Los parámetros α los obtenemos directamente con las expresiones (3.10) - (3.11). Una vez calculados, vamos a la expresión (3.18) y después de calcular los valores de a y b , despejamos los valores de β_0 y β_1 . Una vez conocidos los cuatro parámetros calculamos tres secuencias de valores, cada una de ellas correspondiente a cada una de las componentes del campo. Para ellos utilizamos la relación de recurrencia dada por (3.1).

	A_1	τ_1	A_2	τ_2
Caso A	1.000	1.000	0.001	0.001
Caso B	1.000	1.000	-0.500	2.000

Tabla 3.1: Parámetros de los procesos ARMA(2,1).

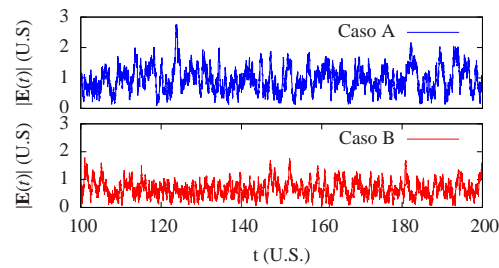


FIGURA 3.1 - Módulo del campo generado con un proceso ARMA(2,1) para los dos casos descritos en la tabla (3.1).

Para hacer el estudio lo más genérico posible, se han calculado dos tipos de secuencias de campo, con y sin anticorrelación. Los valores de los parámetros A_1 , A_2 , τ_1 y τ_2 se muestran en la tabla (3.1)

El aspecto de las secuencias de campo generadas con este procedimiento se pueden observar en la figura 3.1 y su función de correlación en 3.2. En la figura 3.1 podemos observar como a diferencia de una secuencia de campo realista, no existen *colisiones* fuertes en las secuencias de campo (valores mucho más grandes que el resto y que duran muy poco tiempo). Por otro lado la distribución estadística de los campos generados así responde a la ley de distribuciones gaussianas y dependerá de la desviación cuadrática media del generador de números aleatorios.

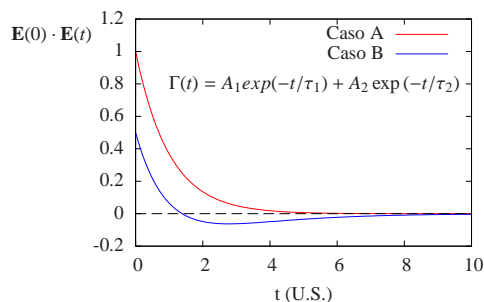


FIGURA 3.2 - Funciones de correlación de los campos generados mediante un proceso ARMA(2,1) de acuerdo a los parámetros de la tabla (3.1).

3.3. Aplicación a sistemas SP

Los campos generados mediante el proceso ARMA nos permiten aplicar la aproximación de impacto directamente, ya que conocemos la función de correlación del campo. A la hora de comparar los resultados del modelo con los del cálculo completo podríamos comparar directamente el perfil de la línea o su anchura, sin embargo resulta mucho más ilustrativo comparar por ejemplo la matriz K definida en la ecuación (2.58). En el modelo de impacto, el operador de anchura se define precisamente como la integral de la matriz K . Comparar estas matrices K nos da la misma información que comparar el operador de anchura, con la diferencia de que cuando se hace el cálculo completo, la matriz K es mucho más fácil de obtener.

El sistema que vamos a estudiar es un sistema SP como el descrito en el anexo B. Recordemos que este sistema está compuesto únicamente por un nivel p y uno s . Como se puede ver en el desarrollo matemático está definido únicamente por un parámetro ω , que no es más que la diferencia de energías entre los niveles s y p . Aprovechando el resultado que hemos obtenido para el operador de anchura en un sistema SP (anexo B) y la expresión de la función de correlación del campo generado con el proceso ARMA vamos a calcular la expresión de cada uno de los elementos de la matriz K en función de los cuatro parámetros que intervienen en el proceso ARMA. Para ello partamos de la expresión (2.70) que relaciona el operador de anchura con la matriz $K(t)$, la cual podemos reescribir como

$$K(t) = -i\hbar \frac{d}{dt} \Phi(t) \quad (3.22)$$

Resulta evidente que la estructura de la matriz $K(t)$ será la misma que la dada por la expresión (B.35) pero sustituyendo la función $\mu(t, \Omega)$ por

$\nu(t, \Omega)$

$$\begin{aligned}\nu(t, \Omega) &= -i\hbar \frac{d}{dt} \mu(t, \Omega) \\ &= -i \frac{qe^2}{3\hbar} \int_0^t dt' \Gamma(t') e^{-i\Omega t'}\end{aligned}\quad (3.23)$$

Tomemos ahora la expresión de la función de correlación del campo dada por el proceso ARMA(2,1) (expresión (3.21)) e introduzcámosla en la expresión (3.23).

$$\begin{aligned}\nu(t, \Omega) &= -i \frac{qe^2}{3\hbar} \int_0^t dt' \left(A_1 e^{-t'/\tau_1} + A_2 e^{-t'/\tau_2} \right) e^{i\Omega t'} \\ &= \frac{qe^2}{3\hbar} \left(I(A_1, \tau_1, \Omega, t) + I(A_2, \tau_2, \Omega, t) \right)\end{aligned}\quad (3.24)$$

Donde hemos definido $I(A, \tau, \Omega, t)$ como:

$$I(A, \tau, \Omega, t) \equiv -i \int_0^t dt' A e^{i\Omega t' - t'/\tau}\quad (3.25)$$

Que se puede resolver trivialmente, resultando:

$$I(A, \tau, \Omega, t) = \frac{-iA}{i\Omega - 1/\tau} \left(e^{i\Omega t - t/\tau} - 1 \right)\quad (3.26)$$

Para obtener por separado la parte imaginaria y la parte real de esa expresión multiplicamos y dividimos por $i\Omega + 1/\tau$ y expresamos la exponencial compleja en forma trigonométrica.

$$\begin{aligned}I(A, \tau, \Omega, t) &= \frac{iA}{\Omega^2 + 1/\tau^2} (i\Omega + 1/\tau) \times \\ &\quad \left(e^{-t/\tau} \cos(\Omega t) - 1 + ie^{-t/\tau} \sin(\Omega t) \right)\end{aligned}\quad (3.27)$$

operando y agrupando llegamos a:

$$\text{Re}(I) = \frac{A}{\Omega^2 + 1/\tau^2} \left[\Omega - \left(\Omega \cos(\Omega t) + \frac{1}{\tau} \sin(\Omega t) \right) e^{-t/\tau} \right]\quad (3.28)$$

$$\text{Im}(I) = \frac{-A}{\Omega^2 + 1/\tau^2} \left[\frac{1}{\tau} - \left(\frac{1}{\tau} \cos(\Omega t) - \Omega \sin(\Omega t) \right) e^{-t/\tau} \right]\quad (3.29)$$

Para calcular la matriz $K(t)$ basta calcular la función $\nu(t, \Omega)$ que no es más que la suma de dos funciones $I(A, \tau, \Omega, t)$, cada una de ellas

3.4. Cálculos numéricos: comparación con el modelo de impacto 45

con los parámetros correspondientes del proceso ARMA –que se pueden consultar en la tabla 3.1.

Para recuperar el resultado de la aproximación de impacto como se entiende habitualmente –suponer que la integral de la correlación adquiere un valor constante inmediatamente– basta con hacer el límite para $t \rightarrow \infty$.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (I(A, \tau, \Omega, t)) = \frac{A}{\Omega^2 + 1/\tau^2} \left(\Omega - i\frac{1}{\tau} \right) \quad (3.30)$$

Por lo tanto el valor límite para tiempos largos de la matriz $\nu(t)$ es:

$$\text{Re}(\nu(t \rightarrow \infty)) = \Omega \left(\frac{A_1}{\Omega^2 + 1/\tau_1^2} + \frac{A_2}{\Omega^2 + 1/\tau_2^2} \right) \quad (3.31)$$

$$\text{Im}(\nu(t \rightarrow \infty)) = -\frac{1}{\tau_1} \frac{A_1}{\Omega^2 + 1/\tau_1^2} - \frac{1}{\tau_2} \frac{A_2}{\Omega^2 + 1/\tau_2^2} \quad (3.32)$$

3.4. Cálculos numéricos: comparación con el modelo de impacto

Con los campos generados mediante el proceso ARMA como se ha descrito en las secciones anteriores, vamos estudiar el comportamiento de un sistema SP como el descrito en el anexo B. Por un lado vamos a aplicar el modelo de impacto, como se ha descrito en la sección anterior y por otro vamos a realizar el cálculo numérico completo sin suponer ningún tipo de aproximación. La comparación de los resultados la vamos a hacer a través de la matriz K que en general es una matriz que depende del tiempo.

Dentro del modelo de impacto, la expresión de cada uno de los elementos de la matriz K en función de los parámetros del proceso ARMA se ha calculado en el anexo B. En el cálculo completo, calcularemos esta matriz a partir de la la matriz M definida en (2.67) y teniendo en cuenta la relación entre M y K (relación (2.69))

$$K = \{ \mathcal{L}(t) \mathcal{U}(t) \} \{ \mathcal{U}(t) \}^{-1} - \mathcal{L}_0 \quad (3.33)$$

Esto supone que a la hora de hacer el cálculo, hay que almacenar en cada paso temporal las matrices $\mathcal{U}(t)$ y $\mathcal{L}(t)$ completas, para después hacer el promedio. Una vez promediado un número suficiente de secuencias de campo, se calcula la matriz K utilizando la expresión (3.33). Este cálculo se lleva a cabo de la misma manera que cuando el campo generado proviene de una simulación (ya sea de dinámica molecular o de partículas independientes) y se explica brevemente en el siguiente capítulo. La

única diferencia es que en este caso es necesario almacenar mucha más información (las matrices completas).

En lo que respecta al sistema atómico del emisor, en el caso de un sistema SP como el que se ha considerado aquí, toda la estructura del sistema queda determinada por un solo parámetro: la separación entre los niveles ω . Por otro lado, para una secuencia de campo dada (unos valores de los parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \beta_0, \beta_1$ fijos) esta se puede re escalar variando la unidad de tiempo t_0 y la escala del campo E_0 . Esto hace que en principio, para una secuencia de campo con una correlación dada (esto es unos parámetros ARMA fijos), tengamos tres parámetros libres, que podemos variar para recrear diferentes condiciones. Sin embargo, a la hora de hacer los cálculos, lo que realmente aparece en las expresiones es $\omega_0 t_0$ y χt_0 , siendo $\chi = q_e a_0 S E_0$, con S el elemento reducido de la matriz R . Por lo tanto únicamente existen dos parámetros independientes. De ahora en adelante y sin pérdida de generalidad vamos a tomar como unidad de tiempo t_0 , de manera que nuestros dos parámetros libres sean ω , la separación entre niveles, y χ .

Dado que vamos a aplicar la aproximación de impacto, es importante conocer cómo son las escalas de tiempo de nuestro problema. El tiempo típico del efecto Stark τ_c viene determinado directamente por los dos parámetros libres ω y χ de acuerdo con la expresión (2.7). El tiempo típico del dipolo τ_d , como siempre, es nuestra incógnita y dependerá de la anchura de la línea. Por último el tiempo típico del campo eléctrico está relacionado con la pérdida de correlación del mismo, por lo que dependerá de los parámetros que fijan la función de correlación en el proceso ARMA.

Vamos a analizar dos supuestos con dos funciones de correlación diferentes (ver la sección 2 de este capítulo). En el primer caso (Caso A), la correlación de los campos generados con el proceso ARMA sólo toma valores positivos y básicamente cae como una exponencial cuyo tiempo de caída es $\tau_1 = 1$, por lo que $\tau_c = 1$. En el caso B, donde la correlación viene dada por la suma de dos exponenciales, tomaremos el tiempo característico del campo como el mayor de los dos, que resulta ser $\tau_c = 2$.

Debido a la estructura de la matriz $K(t)$, sólo vamos a mostrar los resultados numéricos para los elementos distintos de cero, ya que los que son idénticamente cero lo son por las simetrías del sistema y no tiene nada que ver con la aproximación de impacto. Además, como se puede ver en el anexo B, de todos los elementos de la matriz $K(t)$ únicamente existen cuatro diferentes.

3.4. Cálculos numéricos: comparación con el modelo de impacto 47

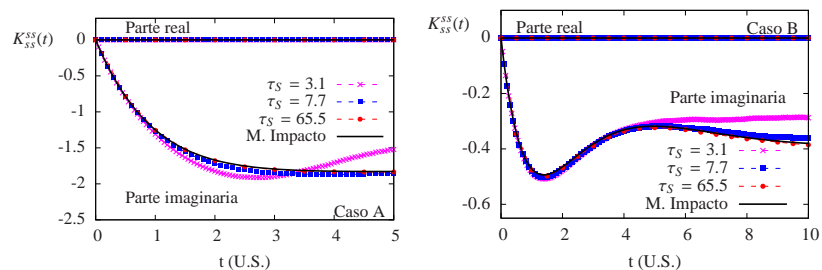


FIGURA 3.3 - Evolución temporal del elemento K_{ss}^{ss} con $\omega = 0.32$ para campos del Caso A (izquierda) y Caso B (derecha)

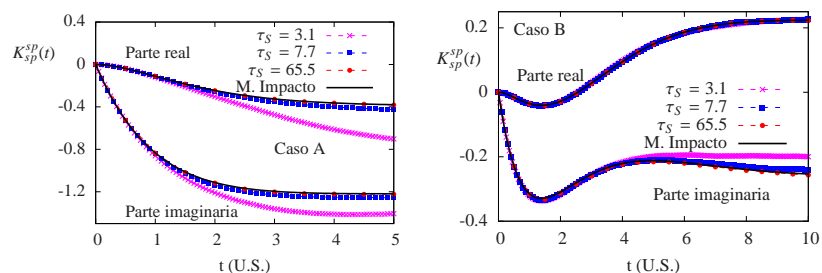


FIGURA 3.4 - Evolución temporal del elemento K_{sp}^{sp} con $\omega = 0.32$ para campos del Caso A (izquierda) y Caso B (derecha)

En las figuras 3.3 a 3.6 se muestra la evolución temporal de cada uno de los elementos significativos de $K(t)$ para un mismo valor del tiempo óptico, en concreto $\omega = 0.32$ U.S. y para diferentes valores de χ (o lo que es lo mismo para diferentes valores del tiempo Stark). Junto con los resultados del cálculo completo se ha dibujado el resultado del modelo de impacto (que sólo depende ω).

Recordemos que para que la aproximación de impacto fuese válida tiene que suceder que el tiempo asociado al efecto Stark típico sea mucho mayor que el tiempo típico de los campos y que el tiempo típico de la evolución del dipolo fuera mucho mayor que el tiempo típico del efecto Stark. Por el momento desconocemos el tiempo típico del dipolo, así que nos centraremos primero en la primera hipótesis.

Efectivamente, como era previsible se observa que a medida que el

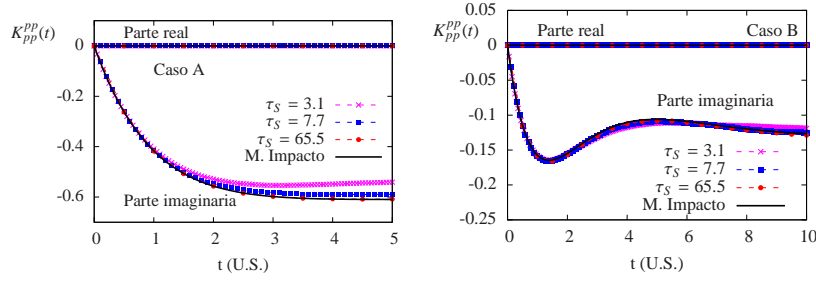


FIGURA 3.5 - Evolución temporal del elemento K_{pp}^{pp} con $\omega = 0.32$ para campos del Caso A (izquierda) y Caso B (derecha)

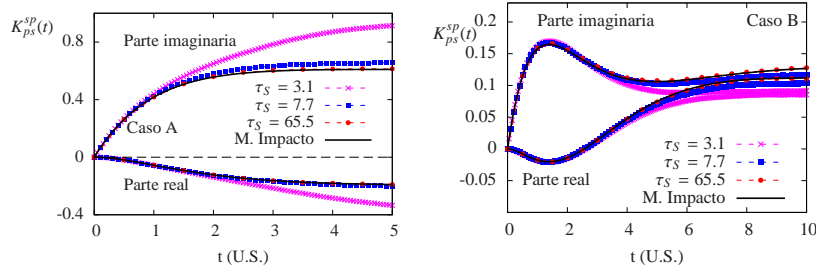


FIGURA 3.6 - Evolución temporal del elemento K_{ps}^{sp} con $\omega = 0.32$ para campos del Caso A (izquierda) y Caso B (derecha)

tiempo Stark aumenta el resultado del cálculo completo se parece más a lo que da el modelo. De hecho, cuando el tiempo Stark es por lo menos un orden de magnitud mayor que tiempo típico del campo (en el caso A $\tau_c = 1$, y en el caso B $\tau_c = 2$) el cálculo completo y el modelo dan el mismo resultado. A la vista de esto, todo parece indicar que la segunda suposición, que el tiempo de evolución del dipolo es mayor que el tiempo Stark, también es cierta ya que el resultado coincide con el modelo de impacto. Si calculamos la función de autocorrelación del dipolo directamente a partir de las expresiones (2.2) y (2.3) (recordemos que en estos cálculos tenemos almacenadas las matrices U completas en cada instante) podremos estimar el tiempo típico del dipolo. En la figura 3.7 se han dibujado las funciones de correlación para cada uno de los casos anteriores. Cada una de ellas se ha dibujado en la escala de su tiempo Stark

3.4. Cálculos numéricos: comparación con el modelo de impacto 49

característico. Se puede comprobar que el tiempo de pérdida de correlación del dipolo es mayor que el tiempo Stark en cualquiera de los casos, lo que efectivamente cumple con la hipótesis inicial de la aproximación de impacto.

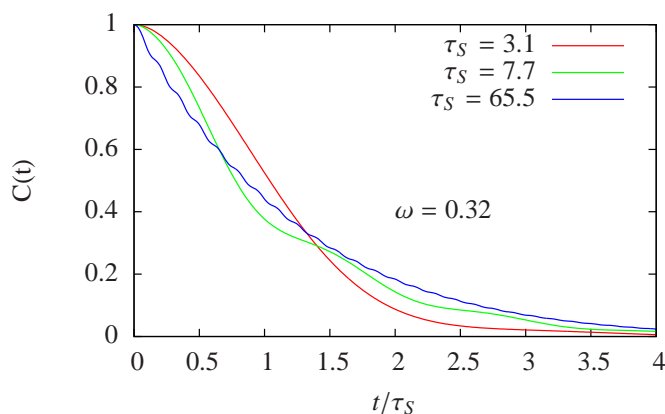


FIGURA 3.7 - Funciones de correlación dipolar para $\omega = 0.32$ y diferentes tiempos Stark. Cálculo con campos del caso A.

Hasta ahora únicamente hemos analizado lo que sucede al variar uno de los dos parámetros involucrados (el parámetro χ), sin embargo el efecto Stark también depende de la separación entre niveles ω , por lo que sería razonable analizar los resultados en función de ambos parámetros. Para ello vamos a proceder igual que antes y vamos a analizar los elementos de la matriz $K(t)$.

En la comparación anterior hemos observado cómo el modelo y el cálculo completo coinciden cuando las hipótesis de la aproximación de impacto se cumplen. En concreto, cuando el modelo es válido, ambos cálculos conducen al mismo valor constante para tiempos suficientemente largos. Por lo tanto, para comprobar si el modelo reproduce el cálculo completo bastaría con comparar el valor a tiempos grandes. Eso es precisamente lo que vamos a hacer para analizar los resultados en función de los dos parámetros libres χ y ω . Para comprobar si el modelo reproduce los resultados del cálculo completo no es necesario comparar todos los elementos de la matriz $K(t)$, ya que todos tienen un comportamiento similar. A modo de ejemplo hemos tomado el elemento K_{sp}^{sp} para representar las diferencias entre el cálculo completo y el modelo de colisiones débiles. Para cada cálculo completo hemos tomado el valor al

que tiende este elemento de matriz cuando el tiempo es suficientemente largo(ver las figuras 3.3 a 3.6) y para el modelo se han tomado directamente las expresiones (3.31), para la parte real, y (3.32), para la parte imaginaria.

En la figura 3.8 se muestra la comparación del modelo con el cálculo completo para los campos del caso A, y en la 3.9 para los del B. En ambas figuras se ha representado el valor del elemento K_{sp}^{sp} a tiempos largos en función de los parámetros χ y ω , ambos en escala logarítmica.

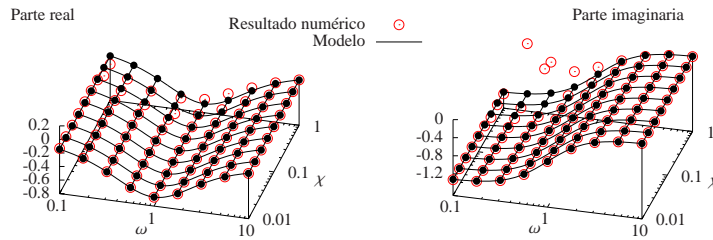


FIGURA 3.8 - Caso A: Valor límite para tiempos largo del elemento K_{sp}^{sp} e la matriz $K(t)$. $\tau_o = 3.12$ para los cálculos completos y el modelo de impacto.

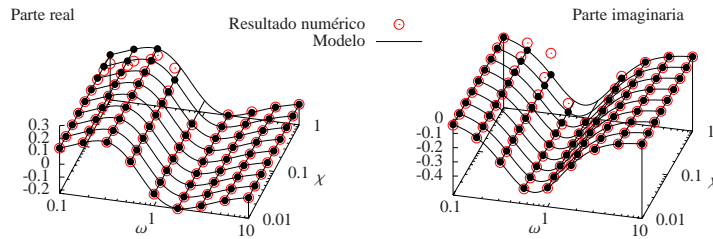


FIGURA 3.9 - Caso B: Valor límite para tiempos largo del elemento K_{sp}^{sp} e la matriz $K(t)$. $\tau_o = 3.12$ para los cálculos completos y el modelo de impacto.

En estas figuras se puede comprobar como el valor asintótico (para tiempos largos) que da el modelo y el que se obtiene en la simulación coinciden en unos intervalos muy amplios del parámetro χ y de la separación entre niveles ω . En ambos casos se observa que la zona en la que

3.4. Cálculos numéricos: comparación con el modelo de impacto 51

la separación entre niveles es muy pequeña y el parámetro χ muy grande comienza a haber discrepancias.

El motivo de esto radica en la relación entre el tiempo Stark y el tiempo típico de los campos. En la zona en la que existen discrepancias el efecto Stark es lineal. Dado que el tiempo Stark es inversamente proporcional a χ , el tiempo Stark comienza a ser del orden del tiempo típico del campo, lo que invalida la aproximación de impacto. Además en esta zona, el tiempo de evolución del dipolo empieza a ser también más pequeño, lo que acentúa las discrepancias entre el modelo y el cálculo completo.

Es importante darse cuenta de que habitualmente cuando se hace uso de la aproximación de impacto se asume que la matriz $K(t)$ es constante durante todo el intervalo de interés, es decir, el transitorio es despreciable frente al tiempo de evolución del dipolo. Sin embargo, lo que hemos representado en las figuras 3.3 - 3.6 es justamente eso, al transitorio desde el inicio de la evolución hasta que alcanza el valor límite. Esto significa que el modelo, a pesar de suponer que la evolución del campo es despreciable frente a la del dipolo ($\tau_c \ll \tau_d$), es capaz de dar un resultado satisfactorio incluso para tiempos del orden del de la evolución del campo. Por supuesto esto no afecta al cálculo de la línea espectral, ya que efectivamente el tiempo que dura el transitorio es despreciable frente al tiempo de caída de la correlación del dipolo.

Con esto hemos comprobado la validez de la aproximación de impacto en una situación ideal: Ausencia de colisiones fuertes y campos con una función de correlación conocida y cuya integral converge. Hemos visto que el modelo reproduce muy bien el resultado cuando las condiciones que impone el modelo se cumplen. Sin embargo, en la realidad no se dan estas condiciones ideales, sino que la integral de la correlación del campo diverge a no ser que se considere el campo medio (lo que no es realista) y se omitan las colisiones fuertes (utilizando un radio mínimo, radio de Weisskopf).

4

Simulaciones por computador

Una de las herramientas más potentes de las que se disponen en la actualidad a la hora de hacer cálculos realistas de perfiles espectrales es la simulación por computador. La idea es bien sencilla, se trata de reproducir numéricamente el comportamiento de un plasma, obtener así el campo eléctrico local que produce el efecto Stark y calcular el espectro de emisión de un átomo del plasma sometido a esa perturbación. Este planteamiento tan simple, que, en principio, no necesita hacer uso de ninguna aproximación de carácter matemático, ha permitido que en muchos aspectos las simulaciones por computador sean consideradas como el marco de referencia en el que verificar los modelos teóricos. En el caso que nos ocupan, serán de gran ayuda para analizar las transiciones SP y poder comparar la validez de los diferentes modelos teóricos bajo diferentes condiciones.

Podemos diferenciar claramente dos etapas en este tipo de cálculos. Por un lado la generación de las secuencias de campo que ve el emisor, y por otro el cálculo del espectro propiamente dicho a partir de estas secuencias de campo. A su vez, la primera etapa se puede llevar a cabo siguiendo varios tipos de técnicas, entre los que podemos destacar principalmente dos: La primera y más sencilla se basa en la idea de suponer que las partículas no interaccionan entre si, y de ahora en adelante llamaremos Partículas Independientes. Y la segunda, más precisa pero mucho más costosa, tiene en cuenta todas las interacciones eléctricas entre las partículas, y que llamaremos Dinámica Molecular ¹

¹Habitualmente se entiende como simulaciones de Dinámica Molecular ambas dos. Sin embargo, en este trabajo, cuando nos refiramos a la técnica de Dinámica Molecular estaremos siempre haciendo referencia a la técnica que tiene en cuenta las

Tanto el cálculo del espectro como la simulaciones de Partículas Independientes son de sobra conocidas, por ello en este capítulo únicamente las resumiremos brevemente y destacaremos sus aspectos más importantes. Por el contrario, la técnica de Dinámica Molecular es bastante nueva y todavía hay ciertos aspectos que no están claros. Además para adecuar estas simulaciones a las necesidades de este trabajo se han realizado bastantes cambios en la técnica original (Lara, 2013). Por ello dedicaremos la mayor parte de este capítulo a explicar los detalles de este modelo de simulación y a estudiar algunos fenómenos que se han observado a raíz de los cálculos realizados.

Sin bien la técnica de simulación de Dinámica Molecular es una *herramienta* para el estudio de los espectros –en este caso las transiciones SP– los resultados de este capítulo acerca de las simulaciones tiene entidad por si mismos, ya que este tipo de simulaciones tienen muchas aplicaciones mas allá del cálculo de líneas espectrales. Es por esto que aunque algunos aspectos de este capítulo pudieran no estar relacionados con el cálculo de espectros, o no tener mucha importancia en el calculo de las transiciones SP, se ha decidido incluirlos en este trabajo.

4.1. Evolución del emisor

Aunque la primera fase de las simulaciones por computador es la generación del campo, vamos a comenzar a explicar cómo calcular el espectro una vez conocido el campo. Esto se debe a que esta parte es de sobra conocida y únicamente vamos a dar algunos detalles de cómo se ha realizado exactamente en los casos de este trabajo.

El proceso comienza “simulando” numéricamente el movimiento de las partículas de un plasma en un recinto limitado. Estas partículas cargadas producen campos eléctricos locales, dinámicos, sobre los átomos o iones que vamos a considerar “los emisores”. De este modo reproducimos situaciones físicas concretas de secuencias de campo que van a producir el efecto Stark. Una vez conocida la secuencia de campo eléctrico, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger para obtener así el operador de evolución temporal. A continuación se obtiene la evolución del momento dipolar, su correlación y finalmente el espectro mediante una transformada de Fourier.

A la hora de abordar la resolución numérica de la ecuación (2.4) hay varias alternativas. Una de ellas consiste en emplear técnicas Runge-Kutta-Fehlberg para obtener la solución de la ecuación, sin embargo,

interacciones entre las partículas.

estas técnicas no garantizan la unitariedad del operador U a lo largo del tiempo. La técnica que se ha empleado en este trabajo (y que se ha venido empleando por el grupo de Valladolid en los últimos años) (Gigosos and Cardeñoso, 1996) es algo más cara computacionalmente hablando pero presenta dos ventajas fundamentales: La garantía de que el operador U es unitario por construcción en cada paso temporal y que las colisiones fuertes no presentan problemas numéricos.

Para explicar el procedimiento que hemos seguido supongamos que tenemos una secuencia de campo eléctrico $E(t)$, que es la que ha visto el emisor durante el proceso de emisión. Como decíamos, la secuencia de campo utilizada ha podido obtenerse mediante simulación de partículas independientes, dinámica molecular o incluso el proceso ARMA descrito en el capítulo anterior. Esta secuencia de campo será una sucesión de valores del campo eléctrico en unos instantes $t_k = k\Delta t$, donde Δt es el *paso temporal* de la secuencia de campo. Si este paso temporal es mucho menor que el tiempo típico de variación del campo τ_c , entonces podemos asumir que en un intervalo de tiempo (t_k, t_{k+1}) el valor del campo eléctrico se puede considerar constante, y por lo tanto en ese intervalo la solución de la ecuación (2.4) es inmediata.

$$U(t_{k+1}, t_k) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_k \Delta t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (H_0 + q\mathbf{E}_k \cdot \mathbf{R}) \Delta t\right) \quad (4.1)$$

Y el operador evolución en cualquier instante se puede expresar como

$$U(t_{k+1}) = U(t_{k+1}, t_k)U(t_k) \quad (4.2)$$

Teniendo en cuenta que $U(0) = \mathbb{1}$. Por lo tanto, en cada paso temporal hay que calcular el operador evolución local utilizando la expresión (4.1) y calcular el operador evolución en ese instante teniendo en cuenta la ley de recurrencia dada en (4.2). Esto implica que en cada paso temporal es necesario calcular la exponencial de una matriz (el Hamiltoniano H), y la manera más eficiente de hacerlo pasa por diagonalizar la matriz. Para ello se recurre al método de Jacobi. Este método consiste en realizar giros sucesivos de subcajas 2x2 hasta que los elementos de fuera de la diagonal son cero. La idea de diagonalizar la matriz en cada paso con este sistema puede parecer descabellada. Sin embargo, teniendo en cuenta que el paso temporal es lo suficientemente pequeño, cabe esperar que la matriz H no cambie demasiado de un paso temporal al siguiente, por lo que el cambio de base que diagonaliza la matriz en el instante t es una buena aproximación inicial para diagonalizar la matriz H en $t + \Delta t$. Esto hace que por lo general sólo sean necesarias unas pocas iteraciones para

diagonalizar la matriz totalmente. Esta parte del proceso puede llegar a ser muy costosa cuando el número de niveles involucrados es muy grande (hay que diagonalizar unas matrices de dimensión muy grande) pudiendo llegar a ser la parte mas cara de todo el proceso de simulación.

Una vez obtenido el operador evolución para cada instante, se calcula la función de correlación del momento dipolar del emisor utilizando las expresiones (2.2) y (2.3). En lugar de hacer el producto de cuatro matrices en cada instante temporal, suele ser conveniente hacer esa operación de manera simbólica (teniendo en cuenta la estructura de los operadores \mathbf{D}) y expresar la autocorrelación del dipolo en función de los elementos de matriz del operador U . Esta operación en algunos casos es sencilla, sin embargo, cuando el número de niveles involucrados es grande es necesario recurrir a programas de cálculo simbólico para poder llevarla a cabo.

Este proceso se repite para diferentes secuencias de campo y se promedia el resultado. Finalmente el espectro de potencia se calcula como la transformada de Fourier de esta función ya promediada.

4.2. Generación de las secuencias de campo

En este trabajo vamos a utilizar dos variantes de las simulaciones, que ya hemos mencionado para obtener las secuencias de campo que ve el emisor: Partículas Independientes y Dinámica Molecular. La principal ventaja de la técnica de partículas independientes es que es mucho más barata computacionalmente que la de Dinámica Molecular, pero por el contrario es menos realista, sobre todo cuando se trata de plasmas fuertemente acoplados y de emisores cargados.

4.2.1. Partículas independientes

La generación de las secuencias de microcampo mediante simulaciones con partículas independientes permite obtener muy buenos resultados para plasmas débilmente acoplados y el coste computacional que tiene es mucho más bajo que otras técnicas más complejas.

Esta técnica se basa en suponer que las partículas no interaccionan unas con otras y, por lo tanto se mueven siguiendo trayectorias rectilíneas con velocidad constante. Esta aproximación, aunque pueda parecer un tanto radical, funciona bastante bien cuando el grado de acoplamiento del plasma no es muy alto ($\rho \leq 0.8$). Esta técnica se ha venido utilizando desde hace más de veinte años y existe abundante bibliografía al respecto (Gigosos and Cardeñoso, 1996; Gigosos and González, 2009;

Gigosos *et al*, 2014) por lo en esta sección únicamente se enunciarán sus características más importantes.

El recinto de simulación es una esfera en la que un único emisor está colocado en el centro. Este emisor permanece en reposo durante toda la simulación, y el resto de partículas cargadas (iones y electrones) se mueven respecto de él como si tuvieran una masa igual a la masa reducida del par emisor-perturbador (esto se conoce como modelo *mu-ión* (Seidel and Stamm, 1982). Los iones y electrones no interactúan entre ellos ni con el emisor y por lo tanto se mueven siguiendo trayectorias rectilíneas con velocidad constante. Aquellas partículas que durante la simulación alcanzan el borde del recinto esférico de simulación se reinyectan de nuevo mediante un mecanismo que garantiza que las estadísticas del sistema se conserven.

A la hora de calcular el campo sobre el emisor, en este tipo de simulaciones se suele asumir que el campo que crea cada partícula individualmente es de tipo Debye. Con esto lo que se pretende es, de alguna manera, *emular* el debilitamiento que surgiría de modo natural por las correlaciones entre cargas. Es importante darse cuenta que se emplea campo de Debye tanto para los electrones como para los iones, ya que aquí el hecho de sustituir el campo de Coulomb por el de Debye está relacionado con el debilitamiento del campo que surgiría debido a la *colocación* que tendrían las partículas si interactuaran entre ellas. En estos casos toda la simulación depende de un único parámetro, el parámetro de acoplamiento del plasma ρ . Este valor da cuenta de la relación entre la energía cinética media del plasma y la energía potencial, y es una forma de medir lo cohesionado que está el plasma. El parámetro ρ es, de hecho, la relación que existe entre la distancia media entre partículas y el radio de Debye². Este parámetro ρ además, fija una relación entre la densidad electrónica y la temperatura, de modo que la misma simulación (un ρ dado) representa diferentes casos de densidad y temperatura siempre que estos conduzcan al mismo valor de ρ . Por el contrario, si se utiliza campo de Coulomb en lugar del de Debye, sólo existe una única simulación, ya que esta es reescalable para cualquier densidad y temperatura

Como ya se ha mencionado, la principal ventaja de esta técnica de

²El significado del parámetro ρ y su relación con el radio de Debye y con otras magnitudes físicas se puede consultar en Lara (2013). En cualquier caso es un parámetro que se utiliza habitualmente en la bibliografía. En los artículos de Hooper (Hooper, 1966) las distribuciones de campo se dan en función de este parámetro. Aunque algunos autores llaman parámetro de acoplamiento a $\Gamma = \rho^2/6$ en lugar de a ρ . En este trabajo cuando se hable de parámetro de acoplamiento nos referiremos siempre a ρ .

generación de campos es que siendo computacionalmente muy barata aporta resultados bastante realistas, sobre todo para plasmas débilmente acoplados. Sin embargo, cuando el emisor es un punto cargado o el parámetro de acoplamiento es grande, las correlaciones entre partículas empiezan a ganar importancia y esta técnica no reproduce correctamente las estadísticas que se dan en la realidad. En esos casos hay que recurrir a otros métodos más complejos, como por ejemplo las simulaciones de dinámica molecular.

4.2.2. Dinámica Molecular

Como ya hemos dicho, cuando el plasma está muy cohesionado y las cargas de las partículas son grandes, las interacciones entre las partículas comienzan a tener importancia y es necesario considerarlas en el cálculo. Eso es precisamente lo que hace la técnica de dinámica molecular: incluir las fuerzas que ejercen todas las partículas sobre cada una de ellas en el movimiento de las mismas. La idea no es nueva, sin embargo el coste computacional que supone calcular todas las interacciones en cada paso temporal ha hecho que sólo en los últimos años, gracias al aumento de la velocidad de cómputo, sea posible plantearse este tipo de cálculos. Este tipo de simulaciones además tiene mucho interés, ya que no son sólo útiles en el cálculos de espectros atómicos, sino que son de gran utilidad en otros campos completamente diferentes.

En el grupo de Valladolid esta técnica se empezó a desarrollar hace aproximadamente 5 años y los primeros resultados fueron plasmados en el trabajo Lara (2013). En ese trabajo se pueden consultar todos los detalles del cálculo así como varios ejemplos y aplicaciones al cálculo de líneas espectrales. Desde ese estudio se ha seguido perfeccionando el método de cálculo y se han analizado diferentes fenómenos que pueden jugar un papel importante en el cálculo de espectros así como en otras áreas de interés. Durante todos estos años hemos descubierto lo delicado que resulta este tipo de simulaciones y la cantidad de matices que tienen, que en muchas ocasiones se pueden pasar por alto. En esta sección se va a dar un resumen general de la técnica de simulación y se prestará especial atención a los avances nuevos que se han hecho.

En esta técnica de cálculos el recinto de simulación es una caja cúbica con condiciones periódicas. Las partículas simuladas están todas contenidas en un cubo de lado L que se repite en todas las direcciones para cubrir todo el espacio. En cada paso temporal, cada partícula se ve afectada por todas aquellas cargas que están en su ámbito de interacción. Este ámbito se define como una esfera de diámetro ($2R_I$) ligeramente me-

nor al lado de la caja y centrada en la propia partícula. Esta limitación *ad hoc* del alcance de las interacciones no supone ninguna aproximación forzada ya que dicho alcance queda de hecho limitado de modo natural por las correlaciones entre partículas cuando se alcanza el equilibrio en el plasma. El uso de un recinto esférico de interacción en lugar de uno cúbico, además, elimina las posibles anisotropías que introduciría la forma cúbica de la celda si se consideran las interacciones con todas la partículas. Un ejemplo de este esquema en el caso de dos dimensiones se puede observar en la figura 4.1. Cuando una de las partículas sale del recinto cúbico de simulación, se re inyecta por el lado opuesto de la caja con la misma velocidad, consiguiendo de esta manera que la energía total de la caja se mantenga constante (suponiendo que el error numérico es despreciable).

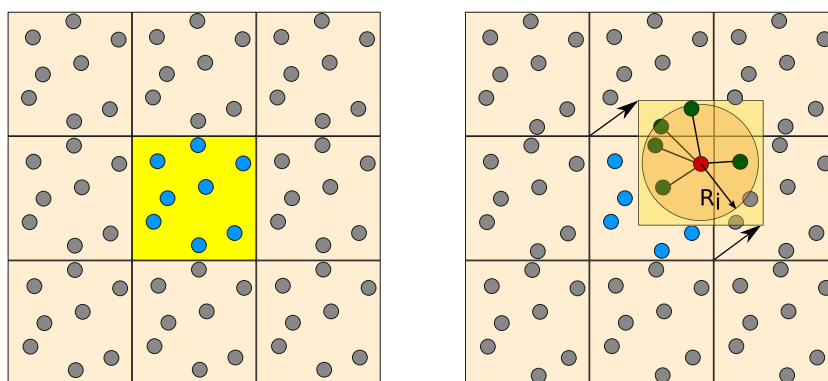


FIGURA 4.1 - Condiciones de contorno periódicas en dos dimensiones.

A diferencia de lo que sucedía en la técnica de Partículas Independientes, ahora la velocidad de las partículas no es constante, sino que cambiará en cada instante de acuerdo a la fuerza que ejerce el resto del plasma sobre cada partícula. Esto implica que ahora es necesario resolver la ecuación de Newton del movimiento para cada partícula en cada instante:

$$\mathbf{F}_i(t) = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} \quad (4.3)$$

donde m_i es la masa de la partícula considerada, \mathbf{r}_i su posición y \mathbf{F}_i la fuerza que actúa sobre ella debido al resto del plasma. Para ello se hace uso del algoritmo de Verlet con velocidades (Verlet, 1967, 1968). En

cada paso temporal se calcula la fuerza que actúa sobre cada partícula, se actualizan las velocidades de acuerdo a esa fuerza y finalmente se mueven las partículas. Formalmente:

$$\mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t) = \mathbf{v}_i(t - \frac{1}{2}\Delta t) + \frac{1}{m_i}\mathbf{F}_i(t)\Delta t \quad (4.4)$$

$$\mathbf{r}_i(\tau + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t)\Delta t \quad (4.5)$$

Con este esquema de cálculo, las velocidades de las partículas se registran desfasadas en el tiempo medio paso temporal con respecto de las posiciones. En estas expresiones Δt es el paso temporal de las simulaciones.³

A la hora de calcular la fuerza que experimenta una partícula se asume que la interacción entre ambas es de tipo Coulomb⁴. Esto hace que aparezcan divergencias cuando dos partículas se encuentran muy cerca. En el caso de partículas del mismo signo, a pesar de que la fuerza también diverge, esta siempre intenta “alejar” a las partículas involucradas. Por lo que si se ha elegido un paso temporal suficientemente pequeños, estos casos no presentan problemas numéricos. Por el contrario, cuando se trata de partículas de signo opuesto, no sólo la fuerza diverge, sino que esta tiende a acercar más las partículas, propiciando la aparición de problemas numéricos. Habitualmente se suele sustituir el potencial de Coulomb por un potencial regularizado. La necesidad de este potencial regularizado, más allá de los problemas numéricos, viene de la necesidad de establecer un mínimo de energía. El potencial de Coulomb no está acotado en el sentido de las energías negativas, lo que hace que no de lugar a configuraciones estables. Este potencial sólo es necesario para las interacciones atractivas, ya que las repulsivas si que están acotadas (tienen un mínimo de energía: cero). La forma funcional de estos potenciales

³Cuando este paso no es suficientemente fino, las ecuaciones (4.4) y (4.5) no son una buena aproximación de la solución de la ecuación (4.3). En esos casos se puede comprobar que el error que se comete siempre hace que el valor cuadrático medio de las velocidades aumenta, produciéndose un calentamiento del sistema. Este calentamiento numérico, además de hacer que el sistema adquiera energía, puede distorsionar las estadísticas, ya que aquellas partículas con velocidades mayores tenderán a calentarse más, dando lugar a partículas con unas velocidades que en un plasma real sería imposibles. Si nos fijamos con un poco de detalle, el calentamiento numérico no se debe a que el paso temporal sea grande, sino a que lo sea el producto de la fuerza por el paso temporal. Por lo tanto, el paso temporal habrá que adecuarlo a la magnitud típica de las fuerzas en el plasma (que como veremos está relacionado con el parámetro de acoplamiento).

⁴Ahora no tiene sentido utilizar un potencial de tipo Debye, ya que al existir correlación entre las partículas el apantallamiento del campo surge de modo natural.

debe reproducir el potencial de Coulomb excepto para distancias cortas, donde debe tomar una forma funcional que esté acotada, asegurando así un valor mínimo de la energía entre dos cargas de signo opuesto. En el caso de nuestras simulaciones se ha tomado un potencial regularizado que es de tipo Coulombiano hasta una cierta distancia r_{min} y de tipo parabólico para distancias más pequeñas. La expresión de este potencial viene dada por la expresión:

$$V(r) = \begin{cases} -V_i \left(1 - \frac{1}{3} \left(\frac{r}{r_{min}} \right)^2 \right) & \text{si } r \leq r_{min} \\ -\frac{\Phi}{r} & \text{si } r > r_{min} \end{cases} \quad (4.6)$$

donde V_i es la profundidad máxima del pozo y $\Phi = Zq_e/(4\pi\epsilon_0)$, siendo Z la carga de la partícula considerada, q_e la carga del electrón y ϵ_0 la permitividad dieléctrica del vacío.

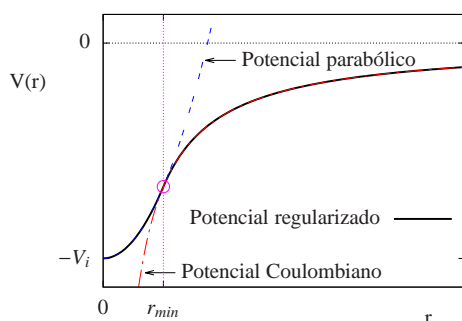


FIGURA 4.2 - Potencial regularizado de tipo parabólico

En la figura 4.2 se puede observar el aspecto que presenta este tipo de potencial regularizado. El punto de “unión” entre el potencial de tipo Coulomb y el parabólico se escoge de modo que tanto la función como su derivada (la fuerza) sean continuas:

$$r_{min} = \frac{3}{2} \frac{\Phi}{V_i} \quad (4.7)$$

La forma del potencial regularizado en principio no tiene demasiada importancia en el resultado de las simulaciones. En general la distancia r_{min} es del orden 10^{-2} veces la distancia típica entre partículas, por lo que la mayor parte del tiempo las partículas “ven” un potencial de Coulomb. En la bibliografía es habitual encontrar otro tipo de potenciales

regularizados que como el de Deutsch (Talin *et al*, 2008). Este tipo de potenciales, si bien son igualmente válidos, son funcionalmente mucho más complejos que el que nosotros proponemos. El hecho de escoger un potencial regularizado de tipo parabólico ha hecho posible desarrollar un modelo analítico de nuestro sistema, lo que hubiera sido mucho más complicado de escoger por ejemplo un potencial de Deutsch.

El hecho de limitar el valor mínimo de la energía entre un electrón y un ión responde a una realidad física. En un plasma real, la energía de una pareja electrón-ión tiene un valor máximo, que es justamente la energía necesaria para separarlos, es decir el potencial de ionización. De esta manera cuando definimos la profundidad del potencial regularizado lo que estamos fijando es el potencial de ionización de la especie atómica que estamos considerando.

La interacción entre las partículas hace que a medida que el plasma evoluciona, algunos electrones con poca energía cinética se vean atraídos fuertemente por algún ión y comiencen a orbitar en torno a él. Cuando esto sucede, el electrón y el ión se encuentran a una distancia tan pequeña (el electrón en general órbita a distancias menores que r_{min}) que a efectos de cualquier otra partícula del plasma el conjunto se comporta como una partícula neutra. Bajo estas circunstancias decimos que el electrón es una *partícula atrapada* o que el ión ha *atrapado* un electrón. Esto tiene una consecuencia inmediata, y es que el campo que ve el ión con el electrón atrapado ya no es válido. Por un lado debido a que principalmente verá un campo oscilante muy intenso –creado por el electrón que tiene orbitando en torno a él–. Y por otro, aunque consideráramos el campo creado por el resto del plasma omitiendo el electrón atrapado, este se correspondería con el campo que vería un neutro, no un ión, ya que la pareja electrón atrapado-ión se comporta como un neutro en cuanto a la correlación con el resto de cargas se refiere. Esto hace que sea necesario detectar estas partículas atrapadas para descartar como sonda los iones con algún electrón atrapado.

Esta tarea que a priori pudiera parecer sencilla, detectar los iones con al menos un electrón orbitando en torno a ellos ⁵, resulta bastante delicada. En un principio, si nos basamos en el fenómeno físico del atrapamiento –que el electrón no tiene energía suficiente como para vencer la energía potencial que crea el ión sobre él– podríamos pensar que aquellos electrones atrapados tendrán una energía total negativa respecto del centro de masas de la pareja ión-electrón. Sin embargo, podría darse la

⁵El número máximo de electrones que puede orbitar en torno a un ión es igual a su carga.

casualidad de que un electrón muy lejano a un ión, tuviera una energía negativa respecto de él, sin que ello significara que está orbitando en trono a él. Para evitar estos “falsos positivos” sólo se puede considerar que un electrón está atrapado si además de tener energía total negativa está a una distancia menor que una dada. Esta distancia de *partícula atrapada* se fija igual al punto de unión del potencial regularizado r_{min} , de modo que los electrones atrapados ven siempre un potencial parabólico. Esta distancia además de fijar el criterio de atrapamiento, nos fija el tamaño del átomo de nuestro sistema, lo cuál nos será de utilidad a la hora de elaborar el modelo teórico.

Este criterio de partícula atrapada funciona relativamente bien, como se ha podido comprobar por diferentes vías (más adelante se ven algunos ejemplos), sin embargo presenta algunos inconvenientes que se han intentado resolver con un nuevo criterio que se describirá en este mismo capítulo. Uno de estos problemas es que ciertas colisiones fuertes cumplen las condiciones de partícula atrapada (energía total negativa y distancia al ión más cercano menor que r_{min}) y sin embargo no se comportan como tal, no orbitan en torno al ión.

Unidades de trabajo

A la hora de hacer los cálculos en el ordenador es imprescindible establecer las unidades de trabajo, las escalas de las magnitudes que vamos a manejar. Para optimizar la precisión numérica de los procesadores de cálculo conviene que los números que maneja el ordenador estén en torno a la unidad. Por esto conviene definir unas unidades propias, que llamaremos unidades de simulación, que hacen que las magnitudes de nuestro problema medidas en esas unidades sean del orden de la unidad. La elección de estas unidades es arbitraria. Sin embargo, si se hace adecuadamente, no sólo mejora la precisión numérica, sino que nos permite extraer de un modo claro los parámetros que realmente rigen la simulación (como veremos más adelante, todo el cálculo depende únicamente de unos pocos parámetros que relacionan densidad, temperatura y el potencial de ionización).

Nuestro plasma estará formado por electrones y por iones, por lo que tomaremos como unidades de carga y de masa la carga (cambiada de signo) y la masa del electrón ($-q_e$ y m_e). Como unidad de longitud vamos a tomar la distancia típica entre partículas (núcleos), que se define

como:⁶

$$r_p = \left(\frac{3}{4\pi N_p} \right)^{1/3} \quad (4.8)$$

Siendo N_p la densidad de electrones (libres o no) del plasma. En estas unidades, el tamaño del lado de la caja de simulación se calcula como:

$$L = \left(\frac{4\pi}{3} n_p \right)^{1/3} \quad (4.9)$$

donde n_p es el número de electrones (libres o no) de la simulación. Por otro lado la unidad de tiempo se define en función de la velocidad típica de los electrones y la unidad de longitud definida en (4.8):

$$\tau_0 = \frac{r_p}{v_0} = \sqrt{\frac{m_e}{2kT}} \left(\frac{3}{4\pi N_p} \right)^{1/3} \quad (4.10)$$

donde T es la temperatura del plasma, m_e es la masa del electrón y k la constante de Boltzman. En esta expresión aparecen al mismo tiempo la densidad y la temperatura, por lo que de alguna manera, esta elección de unidades define nuestro problema de manera unívoca. La unidad de energía la definimos en función de la temperatura del plasma como

$$\mathcal{E}_0 = 2kT \quad (4.11)$$

y la unidad de campo como el campo que crea un electrón a una distancia r_p

$$E_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e}{r_p^2} \quad (4.12)$$

Ya hemos mencionado el parámetro ρ , el grado de acoplamiento del plasma, que da cuenta de lo cohesionado que está. Una forma de calcularlo es como el cociente entre la distancia media entre partículas y el radio de Debye.

$$\rho = r_p/r_D = \frac{q_e}{\sqrt{\epsilon_0}} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{N_p^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{kT}} \quad (4.13)$$

Una vez que hemos definido nuestras unidades de simulación expresemos la ecuación del movimiento de las partículas (4.3) en estas unidades (denotamos con $\tilde{\cdot}$ las magnitudes medidas en unidades de simulación):

$$\frac{d^2\tilde{\mathbf{r}}_i(\tilde{t})}{d\tilde{t}^2} = \frac{\tilde{q}_i}{\tilde{m}_i} \frac{1}{6} \frac{q_e^2 N_p}{\epsilon_0 kT} r_p^2 \tilde{\mathbf{F}}_i(\tilde{t}) \quad (4.14)$$

⁶Como veremos más adelante es más conveniente tomar la distancia entre electrones, aunque en el caso de iones con carga uno es indiferente ya que el número de electrones y de iones es el mismo.

Podemos agrupar todas las constantes que aparecen en un único parámetro Γ_i , que teniendo en cuenta la definición del parámetro de acoplamiento ρ resulta ser

$$\Gamma_i \equiv \frac{\tilde{q}_i}{\tilde{m}_i} \frac{1}{6} \frac{q_e^2 N_p}{\epsilon_0 k T} r_p^2 = \frac{\tilde{q}_i}{\tilde{m}_i} \frac{1}{6} \rho^2 \quad (4.15)$$

Es decir, la dinámica de las partículas del plasma está controlada por el parámetro de acoplamiento ρ y por las masas y las cargas de las mismas. El parámetro adimensional ρ (o el Γ) concentra toda la información relevante a la física del plasma. Toda la simulación viene dada por el valor de este parámetro (al igual que sucedía con las simulaciones de partículas independientes).

Sin embargo, esto no es del todo cierto. A diferencia de las simulaciones de Partículas independientes, en Dinámica Molecular hay un parámetro adicional, la profundidad del pozo de potencial. Ya hemos dicho que la forma del potencial regularizado no influye en el resultado de la simulación, sin embargo su profundidad juega un papel muy importante. Cuanto mayor sea la profundidad del potencial, parece lógico que exista un mayor número de partículas atrapadas. Por lo tanto, para un mismo ρ la profundidad del pozo del potencial V_i regula el grado de ionización que tendrá el plasma.

Estas unidades que hemos escogido las podemos determinar perfectamente al inicio de la simulación, ya que la densidad de partículas (el número de partículas que metemos en la caja) y su temperatura (la velocidad media que las damos) son perfectamente conocidas.

Cuando se lleva a cabo una simulación, lo que se busca es conseguir un plasma con una densidad de electrones libres (que no de partículas) y una temperatura dada. O lo que es lo mismo, con un parámetro de acoplamiento dado. El problema está en que el estado del que partimos en cada simulación (con partículas situadas al azar) no es un estado de equilibrio, y, en general, los plasmas evolucionan hasta equilibrarse. En ese proceso, la temperatura del plasma puede cambiar, así como la densidad de electrones libres (que no la de partículas).

Hasta ahora hemos supuesto que todos los electrones eran libres ($n_e = n_p$), sin embargo, a medida que un plasma evoluciona, algunos iones atraparán electrones (los electrones empiezan a orbitar en torno a los iones), de modo que el conjunto se comporta como una partícula neutra. Una vez equilibrado el plasma, el número de electrones libres será menor que el número de electrones inicial, por lo que el plasma que hemos conseguido no tiene la densidad que queríamos (tiene una menor).

Si conociéramos la proporción entre el número de electrones inicial y el número de electrones libres cuando el plasma se ha equilibrado, bastaría con escoger adecuadamente el número de partículas inicial para obtener en el equilibrio la densidad deseada. Sin embargo, aún conociendo este dato, nuestras simulaciones están limitadas. Puede darse el caso que el número de partículas necesario al inicio de la simulación para obtener en el equilibrio (una vez se hayan “atrapado” algunos electrones) la densidad buscada sea muy grande, y en consecuencia no se pueda llevar a cabo la simulación.

Aún suponiendo que podemos llevar a cabo ese “truco”, si cambiamos la densidad de partículas (el número de bolas de la simulación), también estaremos modificando el parámetro ρ , del cual depende toda la simulación, por lo que ya no llegaremos al mismo resultado. Por si esto no fuera suficiente, la temperatura del plasma en el equilibrio tampoco será, en general, igual a la de partida. En este caso, arrancar la simulación con una temperatura diferente también modificará el resultado de la simulación, por lo que tampoco llegaríamos al resultado deseado.

Es muy importante darse cuenta de que la densidad y temperatura finales de la simulación depende del parámetro ρ que introducimos en la simulación (que depende de la densidad y temperatura de partida). Como ya hemos visto, la clave es poder predecir las condiciones finales para cada ρ , y así saber de que densidad y temperatura debemos partir para llegar al equilibrio en las condiciones que queremos reproducir.

Denotemos por r_0 a la distancia media entre electrones libres una vez equilibrado el plasma. Si llamamos α a la proporción de electrones libres (que en el caso de iones de carga uno coincide con el grado de ionización) podemos escribir

$$r_0 = \alpha^{1/3} r_p \quad (4.16)$$

Si ahora tomamos esta unidad como unidad de longitud, para que las expresiones sean coherentes y den lugar al mismo valor de Γ (que es adimensional y es el que marca la simulación), debemos modificar también la unidad de tiempo, que llamaremos ahora t_0

$$t_0 = \alpha^{1/2} \tau_0 \quad (4.17)$$

Si hubiéramos trabajado en estas unidades, ahora nuestro plasma equilibrado sí que tendría la densidad que buscábamos, aunque no la temperatura. Como hemos dicho, la temperatura del equilibrio no será la misma que la de partida, y ya no tenemos más grados de libertad para poder “reescalar” el sistema. Esta nueva temperatura, junto con la densidad

del equilibrio, dará lugar a un parámetro de acoplamiento experimental ρ_{exp} , que en general no será el mismo que el que se introdujo inicialmente en las ecuaciones. El hecho de “reescalar” las unidades para obtener la densidad deseada (en lugar de la temperatura) se debe a que los casos para los que utilizaremos las simulaciones son mucho más sensibles a la densidad que a la temperatura.

A la vista de todo esto, se pone de manifiesto la necesidad de un modelo que nos permita predecir el grado de ionización del plasma una vez alcanzado el equilibrio, para así poder escalar el sistema adecuadamente y llegar a las condiciones que buscábamos.

El desarrollo de este modelo se puede consultar con todo detalle en Lara (2013). Aquí únicamente daremos los resultados finales.

Para construir el modelo, simplemente se aplica la ecuación de acción de masas al proceso de ionización. En ese desarrollo aparece una magnitud con unidades de volumen, que podemos identificar con el volumen atómico y que resulta ser del orden de r_{min}^3 . La expresión final se puede ver como un equivalente clásico de la ecuación de Saha. Con ese modelo, el grado de ionización en función de $K(T)$ (la constante de equilibrio del proceso de ionización que surge de aplicar la *ley de acción de masas* que se usa en teoría cinética) puede obtenerse a partir de las expresiones (Lara, 2013):

$$\alpha = \frac{K(T)}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4}{K(T)}} - 1 \right) \quad (4.18)$$

$$K(T) = \frac{4}{9\sqrt{3}\pi} \left(\frac{r_p}{r_{min}} \right)^3 \left(\frac{V_i}{kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{V_i}{kT} \right] \quad (4.19)$$

Para poner a prueba el modelo se han llevado a cabo varios cálculos. Partiendo de diferentes condiciones iniciales se deja evolucionar a los plasmas hasta que sus estadísticas permanecen estables. Cuando esto sucede consideramos que el plasma está equilibrado.⁷ En todos los casos se fijó un paso temporal lo suficientemente pequeño como para que la energía total se conservase. Las dos magnitudes que empleamos para controlar el equilibrio son la temperatura y el grado de ionización (ya que es el responsable de la variación de la densidad electrónica).

En la figura 4.3 se puede ver la curva de equilibrio que da este modelo junto con los últimos valores de temperatura y grado de ionización obtenidos en las simulaciones. A la vista de todo esto es importante tener

⁷Los detalles del proceso de equilibrado se pueden encontrar en la subsección correspondiente de este mismo capítulo.

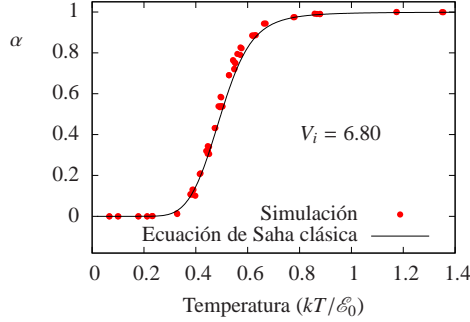


FIGURA 4.3 - Curva de equilibrio del modelo analítico (ecuación (3.18)) comparado con los resultados de la simulación.

en cuenta que las condiciones del plasma equilibrado no van a coincidir con las condiciones iniciales de la simulación. Esto significa que si no disponemos de un modelo, la única manera de lograr plasmas equilibrados en unas condiciones dadas es por ensayo y error. Y si se tiene en cuenta que el proceso de equilibrado puede ser muy largo, el proceso puede ser muy costoso.

El valor del parámetro de acoplamiento del plasma experimental (ρ_{exp}) se puede calcular de acuerdo a la expresión siguiente:

$$\rho_{exp} = \frac{\alpha^{1/6}}{\sqrt{\beta}} \rho \quad (4.20)$$

donde β es la relación entre la temperatura inicial y la experimental en el equilibrio $\beta = T_{exp}/T$. La nueva temperatura también fijará una nueva unidad de Energía, por lo que el valor físico del potencial de ionización también variará. Sin embargo, esto no es demasiado importante, ya que hemos comprobado que el valor de V_i no influye en las estadísticas del sistema una vez se ha reescalado el sistema. De la misma manera, la nueva unidad de campo será:

$$E_0 = \alpha^{-2/3} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e}{r_0^2} \quad (4.21)$$

Una vez que tenemos el modelo para predecir las condiciones de equilibrio y sabemos los problemas a los que nos enfrentamos, el modo de proceder es el siguiente: para un Γ y un V_i dado, buscamos los valores de T (temperatura en el equilibrio) y α que cumpliendo la ecuación (4.18) hacen que el valor del ρ_{exp} dado por (4.20) sea el que estamos buscando. Una vez conocido el punto de equilibrio (T y α), calculamos la energía total del sistema en ese punto, y puesto que nuestra simulación conserva

la energía total, hacemos el sorteo inicial de tal manera que la energía total inicial sea la misma que la del equilibrio. Para calcular la energía total del punto de equilibrio suponemos que la energía potencial de las partículas libres es despreciable frente a la de las atrapadas⁸, que viene dada por

$$\mathcal{E}_p = \frac{1 - \alpha}{2} \left(-V_i + \frac{3}{2} kT \right) \quad (4.22)$$

Por otro lado la energía cinética se calcula directamente con la temperatura del equilibrio. Una vez conocida la energía total del punto de equilibrio, cualquier simulación con esa energía total acabará alcanzado las mismas condiciones de equilibrio, aquellas que hacen que el ρ_{exp} sea el deseado. Es importante que una vez hecho esto, cualquier magnitud que se obtenga de la simulación debe ser reescalada de acuerdo con el grado de ionización y la temperatura experimental, en concreto el campo eléctrico vendrá dado por las unidades dadas por (4.21).

Proceso de equilibrado

El proceso de equilibrado del plasma es uno de los puntos más críticos de la simulación. En el trabajo inicial sobre la técnica de dinámica molecular ya se dejó claro que el tiempo de equilibrado es en general extremadamente largo, y para que sea factible llevarlo a cabo en un tiempo razonable hay que recurrir a la técnica del equilibrado con positrones⁹. Sin embargo, es difícil encontrar en la bibliografía alguna referencia a este proceso, en la mayoría de las publicaciones solamente se indica que son necesarios “unos miles de pasos”, sin entrar en más detalles. Por nuestra experiencia, si se trabaja con plasmas en los que existen partículas pesadas (comparadas con los electrones), se pueden producir situaciones en las que aparentemente el plasma ya está estabilizado, y que esperando el tiempo suficiente se comprueba que no era así. Por esta razón el modelo teórico que se desarrolló en Lara (2013) y que se ha resumido en la sección anterior supone una herramienta excepcional, ya que nos permite asegurarnos de que el plasma está efectivamente en una situación de equilibrio.

En primer lugar me gustaría poner de manifiesto lo difícil que puede ser determinar si un plasma está o no equilibrado cuando en la simulación

⁸Estas partículas se mueven libremente por el plasma y, en promedio, su energía potencial sera muy pequeña, prácticamente nula. Esta suposición es válida siempre que el parámetro Γ del plasma no sea muy grande.

⁹Básicamente consiste en utilizar positrones en lugar de iones, lo que hace que la dinámica del plasma se acelere y los tiempos de relajación sean mucho menores.

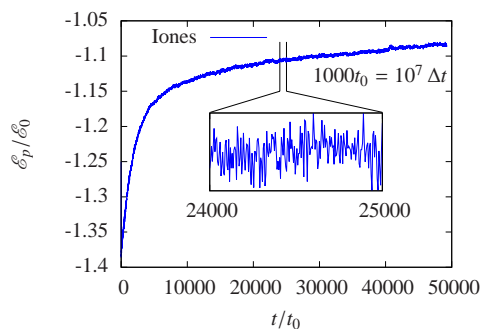


FIGURA 4.4 - Evolución de la energía potencial de los iones en un plasma de Hidrógeno durante el proceso de equilibrio.

intervienen iones (no positrones). En la figura 4.4 se puede ver la evolución temporal de la energía potencial de los iones en un plasma formado por electrones e iones de Hidrógeno. El eje x muestra el tiempo en unidades de simulación (que es el tiempo típico de los electrones). Como ya adelantábamos, cuando en la dinámica del plasma intervienen partículas pesadas (como los iones), el tiempo de equilibrado es extremadamente largo. En esta figura se puede ver que después de 50000 unidades de simulación el plasma todavía sigue evolucionando ¹⁰. En esa simulación el paso temporal utilizado fue de $\Delta t = 10^{-4} t_0$, lo que supone un total de $5.0 \cdot 10^8$ pasos temporales, y aún así todavía no se ha alcanzado el equilibrio. Pero el problema no termina ahí, como el plasma evoluciona tan despacio, si sólo observamos una pequeña ventana de tiempo, puede parecer que el sistema está ya estable. Si nos fijamos en la ventana que va desde $24000t_0$ hasta $25000t_0$ (recuadro interior de la figura 4.4), podemos comprobar que aparentemente la energía potencial de los iones ya se ha estabilizado, cuando claramente se puede comprobar si se observa un tiempo mayor que esto no es así. Es importante remarcar que estamos hablando de una ventana de $1000t_0$, un tiempo nada despreciable. De hecho es un tiempo bastante grande incluso para el tiempo iónico ($\sim 40t_0$) y que aún así no es suficiente para que verifiquemos si el plasma sigue evolucionando o por el contrario ya se ha estabilizado. La solución a esto pasa, como ya se ha dicho, por sustituir los iones por positrones, lo que reduce considerablemente el tiempo de equilibrado.

Por otro lado, si se trabaja con iones y con electrones, es posible comprobar si el sistema se encuentra en equilibrio comparando las energías

¹⁰Se ha comprobado que ese aumento de energía potencial no se debe a efectos de calentamiento numérico. Durante toda la simulación la energía total del sistema se conserva perfectamente.

cinéticas media de los electrones y de los iones. Al arrancar la simulación desde una posición de no equilibrio ¹¹ y debido a la diferencia de masas los electrones reaccionan mucho más rápidamente a esa situación “forzada”, adquiriendo enseguida una gran energía cinética. Esto hace que en los primeros instantes los electrones adquieran una temperatura mucho mayor que la de los iones (al igual que sucede en la naturaleza cuando se genera un plasma). A medida que el tiempo avanza las dos especies intercambiarán energía y en el equilibrio tendrán la misma energía cinética media. De esta manera, en este caso sería posible detectar si el plasma está equilibrado comparando la energías cinéticas de electrones e iones.

Sin embargo, es muy habitual utilizar algún mecanismo de termalizado para mantener la temperatura del sistema constante (para evitar, como se mencionó en la primera parte de esta sección, que la temperatura del equilibrio sea diferente a la inicial). Esto hace que de manera artificial ambas especies tengan siempre la misma temperatura, a pesar de no estar equilibradas. Este fenómeno, unido a la lentitud con la que evoluciona el plasma, hace que en una simulación con iones y electrones en la que se controla la temperatura artificialmente sea prácticamente imposible detectar cuando se ha estabilizado el plasma (a no ser claro que se disponga de un modelo que nos diga cuales son las condiciones del estado de equilibrio).

El hecho de utilizar un mecanismo para fijar la temperatura pudiera resultar útil para aquellos casos en los que no existan partículas atrapadas (plasmas de muy alta temperatura), ya que de ser así, no sería necesario reescalar el sistema de ninguna manera (tendríamos que $\alpha = 1$ y $\beta = 1$, por lo que según (4.20) $\rho_{exp} = \rho$). Sin embargo, si se estabiliza el plasma correctamente la aparición de partículas atrapadas es prácticamente inevitable en las condiciones que son de interés, lo que obliga a reescalar el sistema de todas formas, aunque la temperatura no haya cambiado. En cualquier caso, lo que sí es cierto es que ambos procesos, con y sin termalización, conducen a los mismos resultados, como se puede ver en la figura 4.5.

En esta figura se muestra la energía potencial media frente a la energía cinética media en todo el proceso de equilibrado en dos cálculos con los mismos parámetros de simulación (ρ y V_i). Ambos cálculos se han hecho con positrones, que como ya hemos dicho es mucho más rápido. La diferencia entre los dos procesos es que en uno se ha dejado que el plasma

¹¹Las simulaciones parten de una situación inicial en el que la distribución de las partículas es aleatoria. Además la relación entre energía cinética y potencial viene dada desde fuera, por lo que en general no coincidirá con la del equilibrio.

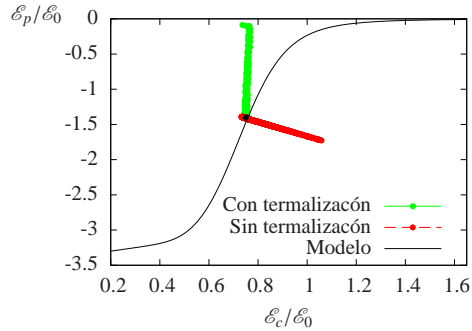


FIGURA 4.5 - Energía potencial media frente a la energía cinética media a lo largo del proceso de equilibrado. La línea roja corresponde a un proceso en el que se conserva la energía total (sin termalización) y la línea verde a una en el que se mantiene constante la temperatura (con termalización).

evolucione libremente, conservando su energía total, mientras que el otro ha evolucionado manteniendo su temperatura constante. Se ha tomado un punto de la curva de equilibrio y se han generado gases con energía total igual a la del equilibrio (y Temperatura al azar) y gases con la temperatura del equilibrio (y energía total al azar). Tomando estos gases como semilla se han arrancado dos procesos, uno que conserva la energía total (partiendo de los gases con la energía total del equilibrio) y otro que conserva la temperatura (partiendo de los gases con la temperatura del equilibrio), es decir con termalización. Se les ha dejado evolucionar y se ha comprobado que efectivamente ambos procesos convergen al mismo resultado, lo que quiere decir que el proceso de termalización, si bien puede dificultar la detección del equilibrio, no distorsiona el proceso de equilibrado.

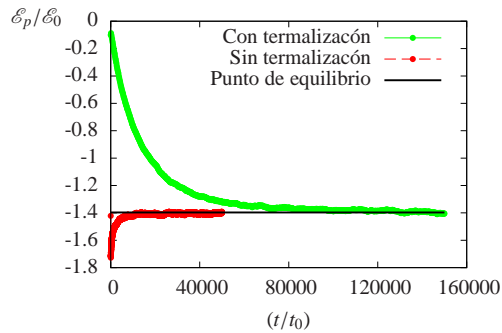


FIGURA 4.6 - Evolución de la energía potencial media en un proceso sin termalización (línea roja) y en uno con termalización (línea verde).

Analicemos ahora el tiempo que ha tardado cada uno de estos procesos en alcanzar el equilibrio. En la figura 4.6 se muestra cómo va evolucionando la energía potencial media por partícula a lo largo del tiempo.

Es evidente a la vista de esta figura que dadas las mismas condiciones, la termalización ralentiza mucho el proceso de equilibrado. El proceso que conserva la energía total del sistema y deja que el sistema evolucione libremente alcanza el equilibrio mucho antes que el que lo hace sin modificar su temperatura. El plasma llega mucho más rápido al equilibrio siguiendo su evolución natural que cuando evoluciona con una temperatura constante. Hay que tener en cuenta que todo esto se ha hecho con positrones. Si en su lugar se hubieran utilizado iones de la masa correspondiente, el tiempo necesario para equilibrar el plasma manteniendo la temperatura constante es inabordable. Además, como ya se ha dicho, el evitar que el plasma cambie su temperatura no nos va a evitar el reescalado del sistema, ya que en general existirán partículas atrapadas.

Por otro lado, dado que podemos conocer las condiciones de equilibrio, energía cinética y potencial media, podríamos hacer el sorteo inicial de tal manera que el plasma ya estuviera en el punto de equilibrio (tuviera los valores de energía cinética y potencial media correspondientes al equilibrio). Bien, es cierto que podemos sortear las partículas para que el sistema tenga las energías características del punto de equilibrio, pero eso no quiere decir que la “colocación” de las partículas sea la adecuada. De hecho, si hacemos esto lo que observamos es que cuando dejamos evolucionar al plasma, este “explota”, para al cabo del tiempo volver al punto del que partió. En estos casos el tiempo de equilibrado es prácticamente el mismo que cuando el proceso se arranca desde un punto que está fuera de la curva de equilibrio, incluso algo mayor.

Existen otras alternativas para equilibrar los plasmas en las simulaciones, uno de estos métodos es el algoritmo de Metrópolis (Metropolis *et al*, 1953). Este método supone que las velocidades de las partículas y sus posiciones son estadísticamente independientes y por lo tanto se pueden establecer de manera independiente. Las velocidades de las partículas se fijan directamente según la ley de distribución de Maxwell-Boltzman para la temperatura deseada. El sondeo siguiendo el algoritmo de Metrópolis se hace sólo para encontrar la configuración de posiciones de las partículas correspondiente a un plasma equilibrado a esa temperatura.

Para ello, se parte de un sorteo aleatorio de las posiciones de las partículas. En cada iteración, se modifica la posición de una de ellas siguiendo una dirección al azar y se evalúa la diferencia de energía potencial entre la situación antes de desplazar la partícula y después. Si este desplazamiento ha minimizado la energía del sistema, entonces se toma como buena la nueva configuración. En caso contrario (el sistema tiene más energía ahora que antes), la probabilidad de considerar la nueva configuración como buena es inversamente proporcional a la

exponencial de la energía dividida por la temperatura. Este proceso se repite hasta que la energía potencial del sistema se estabiliza. Este método presenta una ventaja frente al equilibrado clásico de evolución del plasma, y es que no hay calentamiento numérico, ya que no hay que resolver ninguna ecuación por métodos numéricos para que el sistema evolucione. En la figura 4.7 se muestra la energía potencial durante el

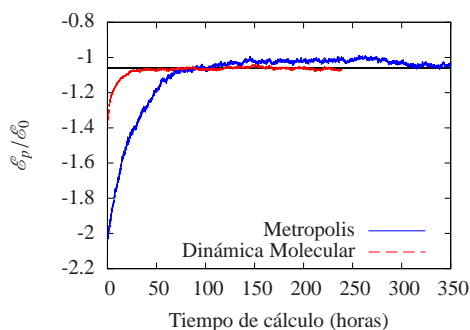


FIGURA 4.7 - Comparación de la energía potencial durante el proceso de equilibrado mediante dinámica molecular y mediante el algoritmo de Metrópolis. En el eje x se muestra el tiempo real de cálculo.

proceso de equilibrado utilizando un algoritmo de tipo metrópolis junto con la evolución del plasma utilizando dinámica molecular. Para poder comparar los dos cálculos, hemos sorteado unos gases al azar para la simulación de Dinámica Molecular. Con ayuda del modelo teórico hemos averiguado la temperatura de equilibrio para esos gases, y hemos asignado esa temperatura como temperatura de equilibrio en el proceso Metrópolis. De esta manera, si ambos procesos son equivalente, la energía potencial por partícula una vez equilibrado el plasma debería ser la misma. Efectivamente, en la figura 4.7 se puede comprobar que ambos métodos convergen al mismo valor de equilibrio. Dado que un paso temporal del proceso de dinámica no es comparable computacionalmente a una iteración del algoritmo de Metrópolis (es mucho más caro un paso de dinámica molecular que una iteración del algoritmo de Metrópolis), para comparar los tiempos de equilibrado hemos utilizado el tiempo real de cómputo que se ha necesitado para equilibrar los gases. Ambos cálculos se han realizado en tarjetas de procesamiento gráfico (GPU) modelo *Ge-Force GTX 560 Ti*. Comparando el tiempo empleado en los dos cálculos se comprueba que el sistema de dinámica molecular es mucho más rápido que el método de Metrópolis, como se puede ver en la figura 4.7.

Distribución de campo

Una de las estadísticas más importantes que se pueden extraer de las simulaciones de dinámica molecular es la distribución de campo. Entre otras cosas porque juega un papel muy importante en el cálculo de líneas espectrales –sobre todo en aquellas en las que el ensanchamiento cuasies-tático es dominante–. Para calcular este tipo de distribuciones se suele recurrir a desarrollos matemáticos que en el mejor de los casos, consideran las correlaciones de primer orden entre las partículas. Sin embargo, las simulaciones por computador, y en concreto las de dinámica molecular, son el escenario ideal para calcular este tipo de distribuciones, ya que para obtenerlas basta con “medir” el campo en un punto y promediar. Además, en el caso de dinámica molecular, debido a que todas las interacciones están incluidas en la dinámica del sistema, las distribuciones de campo que se obtengan serán exactas, ya que no se utiliza ninguna aproximación de ningún tipo.

Históricamente se ha separado el campo que sufre un emisor en dos tipos: los campos de alta frecuencia –campos de variación muy rápida– y los campos de baja frecuencia –campos lentos–. Originalmente se asociaba los campos de baja frecuencia a los campos creados por los iones y los campos de alta frecuencia a los generados por los electrones (Mozer and Baranger, 1960). Hoy en día esta separación no tiene sentido, ya que la idea de separar el campo en alta y baja frecuencia radica en los efectos que tienen esos campos sobre las líneas espectrales –ensanchamiento por impacto o cuasi estático–. Aunque en muchos casos coincide que el campo de alta frecuencia se debe prácticamente sólo a los electrones y el de baja sólo a los iones, esto no es necesariamente así. Existen casos en los que por ejemplo el campo iónico se comporta como un campo de alta frecuencia (en las líneas de radio recombinación, por ejemplo). Hay que recordar que la noción de campo “rápido” o “lento” sólo tiene sentido cuando se compara con el tiempo típico de evolución del dipolo (el inverso de la anchura de la línea), y por lo tanto dependerá de las condiciones del plasma y de la anchura de la línea.

En los cálculos de líneas espectrales que necesitan de las distribuciones de campo se suelen tomar como referencia los cálculos de Hooper (Hooper, 1966, 1968a,b) o algunos algo más recientes como el método APEX (Iglesias, 1983). En el trabajo de Lara (2013) ya se compararon los resultados referentes a los campos de alta frecuencia, y se encontró que las distribuciones de campo que se obtenían de las simulaciones reflejaban campos ligeramente más intensos que los estimados por Hooper. Las distribuciones calculadas a través de las simulaciones estaban

ligeramente desplazadas hacia campos más intensos.

El campo de baja frecuencia es algo más complicado. En el artículo original de Baranger y Mozer (Baranger and Mozer, 1959) se entiende como campo de baja frecuencia el campo apantallado de los iones por efecto de los electrones. En ese trabajo se dice que la forma correcta de calcular este campo es considerar que los iones están fijos en el espacio y promediar el campo total en el punto deseado. Además se recalca que el campo de baja frecuencia es el campo de los iones apantallado por dos fenómenos diferentes: por un lado el campo de los electrones que los rodean y por otro el efecto del promedio temporal. Este promedio temporal debe hacerse con un tiempo suficientemente largo respecto al tiempo de relajación de los electrones pero corto comparado con el iónico (para poder asumir que los iones están fijos). Con todas estas consideraciones, al igual que considera Hooper en (Hooper, 1968a,b) se asume que el campo efectivo que crean los iones es de tipo Debye.

Si volvemos ahora a las simulaciones, cabría preguntarse cuánto tiempo es necesario promediar el campo que ve un emisor para obtener la curva de distribución de campo de baja frecuencia. Como ya hemos dicho este tiempo de promediado tiene que ser siempre mucho menor que el tiempo típico de los iones, ya que de lo contrario no estaríamos promediando sólo el campo electrónico, sino también el iónico, lo que no tiene sentido.

Una primera comprobación consiste en suponer que en la simulación, el campo efectivo que crean los iones ya se ha apantallado y promediado como es debido y por lo tanto es de tipo Debye. Esto se traduce en una simulación en la que sólo hay iones (OCP, *One Component Plasma*) pero que el campo que crean es de tipo Debye (para tener en cuenta el efecto del campo electrónico promediado)¹². La función de distribución del campo obtenida de esta manera debe dar aproximadamente la misma que los cálculos de Hooper. Análogamente, si en la simulación OCP, consideramos campo de Coulomb (eliminamos el apantallamiento electrónico) en lugar del de Debye, el resultado deberá ser el equivalente a la curva de Hooper de alta frecuencia. En la figura 4.8 se pueden observar estas comparaciones. En el caso de alta frecuencia los dos cálculos están en muy buen acuerdo y las dos distribuciones son prácticamente indistinguibles. Por el contrario, en la curva de baja frecuencia se observan

¹²En este caso el radio de Debye del campo apantallado lleva densidad doble, de acuerdo con el criterio de Lanadau. Esto se debe a que este apantallamiento debe dar cuenta de dos fenómenos de debilitamiento del campo, por un lado el apantallamiento electrónico y por otro el promedio temporal. La discusión de si el radio de Debye se debe calcular con densidad sencilla o doble se puede encontrar en Lara (2013).

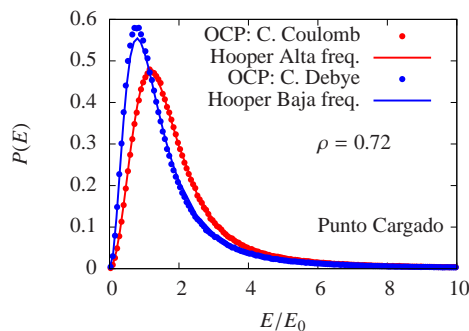


FIGURA 4.8 - Comparación de las distribuciones de campo obtenidas en simulaciones OCP con campo de Debye y de Coulomb con las curvas de Hooper de alta y baja frecuencia.

algunas discrepancias que pueden deberse a que el desarrollo analítico no es exacto y no se han incluido todas las correlaciones entre la partículas. Sin embargo estas diferencias entran dentro de lo razonable.

Veamos ahora que sucede en las simulaciones de dinámica molecular con dos componentes. En estas simulaciones el apantallamiento de los electrones se producirá de modo natural, y únicamente deberemos promediar el campo total el tiempo suficiente para reproducir la curva de Hooper. Sin embargo, la pregunta que debemos hacernos es durante cuanto tiempo debemos hacer ese promedio. Este promedio debe afectar únicamente a los electrones, por lo que para evitar problemas con tiempo de promediado muy largos vamos a trabajar con plasmas en los que los iones permanecen fijos mientras se promedia el campo. Cuando el tiempo de promediado realmente es mucho menor que el tiempo iónico, el hecho de que los iones estén realmente fijos no se aleja mucho de la realidad. Y cuando estos tiempos empiezan a ser mayores, el resultado es el mismo que si consideráramos iones muy pesados. Para garantizar que los iones están “colocados” adecuadamente partiremos de gases formados por electrones y positrones, y una vez equilibrados (como se comentó al comienzo de este capítulo) fijaremos la posición de los iones y comenzaremos a medir el campo. Como ya hemos razonado, fijar los iones equivale a suponer que su masa es muy grande, y ya se ha comprobado que cambiar la masa de los iones no afecta al estado de equilibrio del sistema. Dado que los iones (y por supuesto los puntos sobre los que se calcula la distribución) permanecen fijos durante las medidas, para cada secuencia de campo obtenida el campo iónico será siempre el mismo. Para tener una muestra representativa del campo iónico se han hecho varias simulaciones con diferentes configuraciones del plasma (todas ellas correspondientes a la misma situación física). En concreto se han realizado 96 simulaciones

diferentes, cada una de ellas con 425 electrones, 425 iones y 425 neutros y de una duración de $1000 t_0$. En cada simulación se calcula el campo visto por cada ión y por cada neutro, lo que nos aporta un total de 40800 secuencias de campo independientes.

Utilizando estas secuencias de campo se han obtenido las distribuciones de campo de baja frecuencia para diferentes tiempos de promediado, teniendo en cuenta que este campo se calcula como

$$E_{\Delta t}(t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} E(t') dt' \quad (4.23)$$

donde Δt es la ventana de promediado.

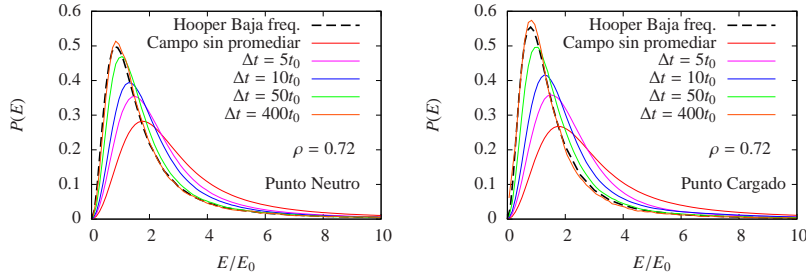


FIGURA 4.9 - Distribución de campo para diferentes tiempos de promediado del campo. En la gráfica de la izquierda sobre punto neutro y en la derecha sobre punto cargado.

En la figura 4.9 se muestran las distribuciones de campo obtenidas de la simulación para diferentes tiempos de promediado, tanto para emisor neutro como cargado. Se observa, como es lógico, que a medida que el tiempo de promedio aumenta, los campos se "debilitan" y la distribución se desplaza hacia campos menos intensos. Se comprueba que tanto para emisor cargado como para emisor neutro se necesitan tiempos de promediado del orden de $\Delta t \sim 400t_0$ para que la distribución de campo obtenida de la simulación de el mismo resultado que la distribución de Hooper. Además, en la figura 4.10 se puede comprobar como para tiempos de promediado mayores la distribución de campo apenas se ve modificada. Una vez que el campo electrónico se ha promediado lo suficiente, el apantallamiento se ha hecho efectivo, tiempos de promediado mayores no tienen ningún efecto.

En la figura 4.10 se puede ver que la diferencia entre un promedio de $\Delta t = 100t_0$ y $\Delta t = 400t_0$ es ya muy pequeño, y la distribución para

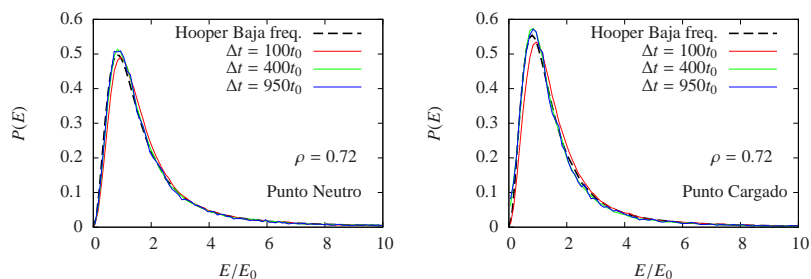


FIGURA 4.10 - Distribuciones de campo para diferentes tiempos de promediado del campo, en la gráfica de la izquierda sobre punto neutro y en la derecha sobre punto cargado.

$\Delta t = 400t_0$ es ya prácticamente indistinguible de la de tiempos mayores. Podemos decir entonces que el tiempo que se necesita promediar el campo total para obtener la distribución de Hooper de baja frecuencia es del orden de 100 unidades de tiempo electrónico.

En este ejemplo, el promedio se ha podido llevar a cabo sin ningún problema porque hemos fijado las posiciones de los iones y los neutros. Sin embargo, en un plasma real, de Hidrógeno por ejemplo, durante el tiempo de promedio ($100t_0$) el movimiento de los iones no es despreciable (el tiempo típico de los iones de H es aproximadamente 40 veces el tiempo típico electrónico), lo que nos hace llegar a una contradicción: El tiempo de promedio necesario para obtener la distribución de Hooper de baja frecuencia es mayor que el tiempo iónico, contrariamente a lo supuesto por Hooper (1968a).

El parámetro de acoplamiento: Potencial medio

Ya hemos hablado del parámetro de acoplamiento ρ , de hecho ya dijimos que en las simulaciones de Dinámica Molecular, junto con el potencial de ionización, es el único parámetro del que depende el cálculo. Este parámetro daba cuenta del grado de cohesión del plasma y está definido como la relación entre el radio de Debye y la distancia típica entre electrones libres. Para hallar el valor de este parámetro hasta ahora hemos utilizado la definición de radio de Debye. Sin embargo, existen otras alternativas “experimentales” para “medir” este valor en las simulaciones. El obtener el parámetro de acoplamiento por diferentes caminos permite comprobar que el cálculo es congruente y que, por ejemplo, el ρ_{exp} (pa-

rámetro de acoplamiento experimental) que se obtiene con las fórmulas analíticas es coherente con el que se obtiene midiendo el potencial medio o de la función de distribución radial.

El radio de Debye o el parámetro de acoplamiento obtenidos de manera experimental (al igual que los teóricos cuando se calculan adecuadamente) dan cuenta de lo que se ha “debilitado” el campo individual de cada partícula por la acción del resto del plasma. Este efecto de debilitamiento del campo es contribución de dos fenómenos. En el caso del campo creado por los iones, por un lado tenemos el efecto de pantalla que crean los electrones, que al tener carga opuesta de alguna forma “compensan” el campo iónico, y por otro el efecto de acoplamiento entre cargas. El hecho de que las cargas interactúen unas con otras hacen que se coloquen de una determinada manera, que se “esponjen”, lo que conduce a que el campo medio sea ligeramente más débil. Este segundo fenómeno —que muchas veces cuando se habla del campo medio pasa desapercibido y erróneamente se atribuye todo el efecto al apantallamiento— juega el mismo papel que el apantallamiento. Este fenómeno del debilitamiento del campo medio por la colocación de las cargas se puede observar de manera aislada haciendo una simulación de dinámica molecular sólo con iones con campo de Coulomb. Si una vez alcanzado el equilibrio se calcula el campo medio se comprobará que este es de tipo Debye a pesar de que únicamente existen cargas positivas en el sistema.

En el modelo de Debye-Huckel se define el radio de Debye como:

$$r_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 kT}{q_e^2 \sum_{\alpha} z_{\alpha}^2 N_{\alpha}}} \quad (4.24)$$

donde $z_{\alpha} q_e$ y N_{α} son la carga y la densidad de cada especie α . Como es habitual dentro del ámbito de la espectroscopía de plasmas, a la hora de calcular el parámetro de acoplamiento lo hemos hecho teniendo en cuenta únicamente la densidad electrónica en la expresión (4.24). De alguna manera esto quiere decir que el ρ así definido da cuenta del apantallamiento que sufren los iones por efecto de los electrones (fenómeno de apantallamiento), pero omite el efecto de los propios iones (efecto de acoplamiento). Esto significa que cuando obtengamos el parámetro ρ experimental a través de la medida del campo medio, que tiene en cuenta todos los efectos, el resultado deberá ser el que se obtendría al calcular el radio de Debye con densidad doble (que es equivalente a tener en cuenta también el efecto de los iones en la expresión (4.24).

La forma más inmediata de obtener el radio de Debye experimentalmente de la simulación es calcular directamente el potencial medio que

ve un ión o un electrón. Si la teoría de Debye-Huckel es válida la curva del potencial medio obtenida se podrá ajustar a una curva de la forma dada por:

$$V_{medio}(r) = \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right) \quad (4.25)$$

La bondad del ajuste nos permitirá por un lado evaluar el grado de precisión de la teoría y por otro, en el caso de que la curva se ajuste al modelo, obtener el valor del radio de Debye.

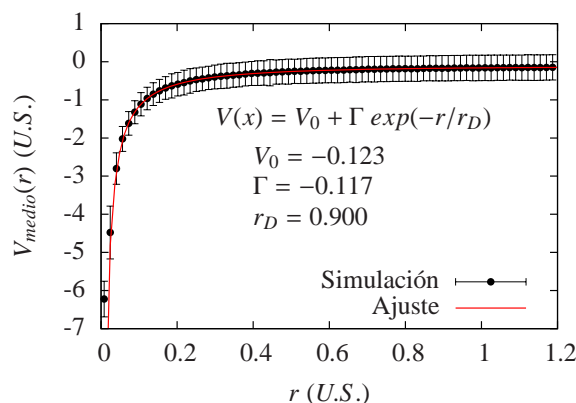


FIGURA 4.11 - Potencial medio entre cargas de signo opuesto obtenido “experimentalmente” de la simulación junto con la curva de ajuste a un potencial apantallado de tipo Debye. En el ajuste no se han tenido en cuenta los primeros puntos, ya que corresponden a la zona del potencial parabólico. Datos de la simulación: $V_i = 6.8$, $\rho = 0.8345$

El potencial medio a una distancia r lo podemos entender como la media de los potenciales que tienen las partículas que están a una distancia r del punto que se ha tomado como referencia. En la práctica para hacer esto lo que hacemos es tomar una partícula como referencia, calcular las distancias al resto de partículas y asociar el potencial total que sufren esas partículas a su distancia respecto de la de referencia. Este procedimiento se puede hacer para el potencial repulsivo (tomando sólo los iones o los electrones) o para el atractivo (tomando como sonda un electrón y calculando las distancias y los potenciales de los iones y al contrario, tomando como referencia un ión y calculando las distancias y potenciales de los iones). De esta manera lo que obtenemos es la distribución de energía potencial de las partículas que están a una cierta

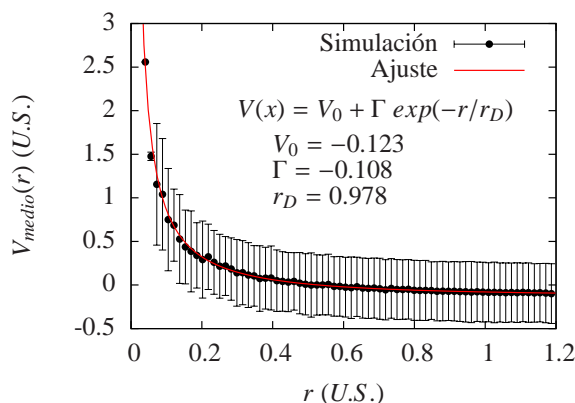


FIGURA 4.12 - Potencial medio entre cargas del mismo signo obtenido “experimentalmente” de la simulación junto con la curva de ajuste a un potencial apantallado de tipo Debye. Datos de la simulación: $V_i = 6.8$, $\rho = 0.8345$

distancia de la de referencia. Tomando los valores medios de estas distribuciones obtenemos el potencial medio que ven las partículas que se encuentra a una distancia r de la de referencia. Si el resto del plasma no influyera, este potencial coincidiría con el potencial directo que crea una carga a una distancia r sobre la otra. Sin embargo la presencia del resto de cargas y su colocación hace que esto no sea así y el potencial resultante sea de tipo Debye.

En las figuras 4.11 y 4.12 se muestra un ejemplo de la curva de potencial obtenida con este procedimiento junto con el ajuste a un potencial de tipo Debye. La primera corresponde al potencial medio entre un ión y un electrón mientras que la segunda al potencial medio entre iones. En primer lugar comprobamos que efectivamente el potencial medio que se obtiene se ajusta perfectamente a la teoría de Debye-Huckel. En el interior de las figuras pueden observarse los valores del mejor ajuste. Podemos observar que existen diferencias en cuanto al valor del radio de Debye obtenido, a pesar de que las dos curvas pertenecen al mismo plasma. Esta diferencia pueden deberse a que, como hemos dicho, el potencial atractivo directo tiene una parte de tipo parabólico, lo que puede influir en el potencial medio (incluso aunque el ajuste se haga a partir de un cierto valor). Además la dependencia de la forma del potencial con el valor de r_D no es muy fuerte, por lo que el ajuste se puede ver

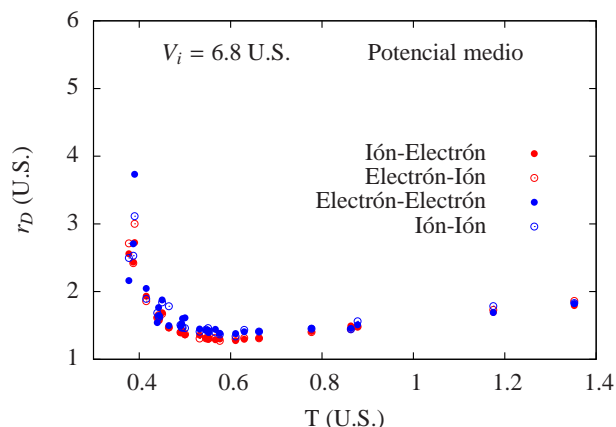


FIGURA 4.13 - Valor del radio de Debye obtenido a partir del potencial medio entre cargas. Datos de la simulación: $V_i = 6.8$, $\rho = 0.8345$

influido por el ruido de la simulación. En la figura 4.13 se muestran los valores obtenidos del radio de Debye ajustando el potencial medio para diferentes plasmas a diferentes temperaturas.

Se han dibujado los valores obtenidos cuando se ha considerado el potencial entre iones, entre electrones y entre un ión y un electrón (tomando como referencia uno y otro). En general todos los cálculos conducen a valores de r_D similares, aunque hay pequeñas diferencias, sobre todo cuando la temperatura de equilibrio es baja¹³. Además observamos que los valores obtenidos del ajuste de los potenciales atractivos dan valores ligeramente inferiores que los que se obtienen con potenciales repulsivos. Esta diferencia puede tener su origen en que como se ha dicho antes, los potenciales atractivos individualizados no son exactamente de tipo Coulomb (potencial regularizado), por lo que el potencial medio tampoco será exactamente de tipo Debye.

Otra de las vías para obtener el potencial medio (y por lo tanto el parámetro de acoplamiento o el radio de Debye) es a través del campo medio. Este procedimiento está descrito con detalle en Lara (2013) y a grandes rasgos consiste en medir la carga en torno a un ión y aplicar

¹³Los casos de baja temperatura se corresponden con plasmas en los que el grado de ionización es muy bajo, lo que hace que el número de partícula útiles sea pequeño y que cualquier error a la hora de seleccionar las partículas libres influya significativamente en las estadísticas.

el teorema de Gauss al campo medio (que se supone de tipo Debye). El radio de Debye se obtiene del ajuste de la densidad de carga en torno a un ión que se deriva del campo de Debye a los valores de la simulación. Este método, al igual que la medida del potencial medio, nos da un valor del radio de Debye en el que están incluidos todos los efectos de “debilitamiento” del campo. En consecuencia, tanto con este sistema como con el anterior, para poder comparar los valores “experimentales” con el valor que se obtiene de la expresión (4.24) es necesario multiplicarlos por $\sqrt{2}$ (o si se trata del parámetro ρ dividirlos por $\sqrt{2}$).

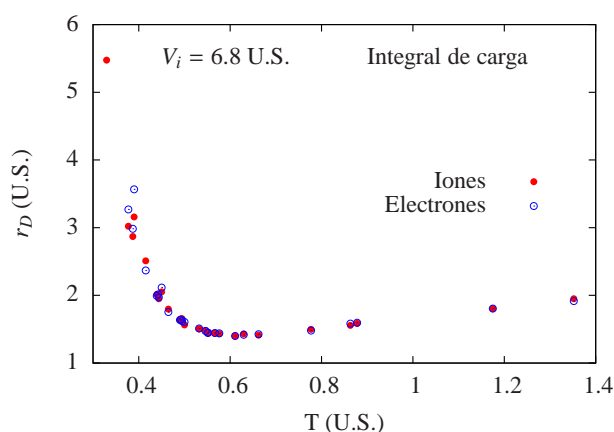


FIGURA 4.14 - Valor del radio de Debye obtenido a partir de la integral de carga en torno a un ión y en torno a un electrón. Datos de la simulación: $V_i = 6.8$, $\rho = 0.8345$

Los valores del radio de Debye obtenidos ajustando la integral de carga se muestran en la figura 4.14. En este caso los resultados obtenidos cuando la integral se calcula en torno a un ión o a un electrón son prácticamente idénticos, incluso para bajas temperaturas. A diferencia de lo que sucedía en el caso anterior –donde la selección correcta de las partículas libres era crítica– ahora se consideran todas las partículas, ya que al hacer la integral, las partículas ligadas –parejas ión-electrón– se compensan automáticamente y no juegan ningún papel.

Otra vía alternativa para calcular el parámetro de acoplamiento es utilizar la información de cómo están colocadas las partículas. Esto lo podemos extraer de la función de distribución radial. Esta función es básicamente la probabilidad de encontrar una partícula a una determi-

nada distancia, y en el caso de las simulaciones se puede obtener muy fácilmente haciendo una estadística de las distancias entre partículas. Como modelo al que ajustar los datos experimentales se ha recurrido a las ecuaciones de Ornstein-Zernike con la relación de cierre que se conoce como HNC (hypernetted-chain) (van Leeuwen *et al*, 1959). Estas ecuaciones permiten obtener la función de distribución radial a partir del potencial de interacción directo entre dos partículas. Para poder extraer el parámetro de acoplamiento de este ajuste, lo que vamos a hacer es suponer que el potencial entre dos iones es ya de tipo Debye. Ajustaremos entonces el valor del radio de Debye que hay que introducir para que el resultado coincida con el que se obtiene en las simulaciones. En este caso, el radio de Debye que vamos a obtener sólo tiene que dar cuenta del efecto del apantallamiento electrónico, ya que el efecto de “colocación de las partículas es precisamente lo que se calcula con HNC. Por lo tanto el resultado debería ser el mismo que el obtenido mediante la expresión (4.24). El cálculo detallado para la obtención de la función de distribución Radial se puede consultar en el anexo C.

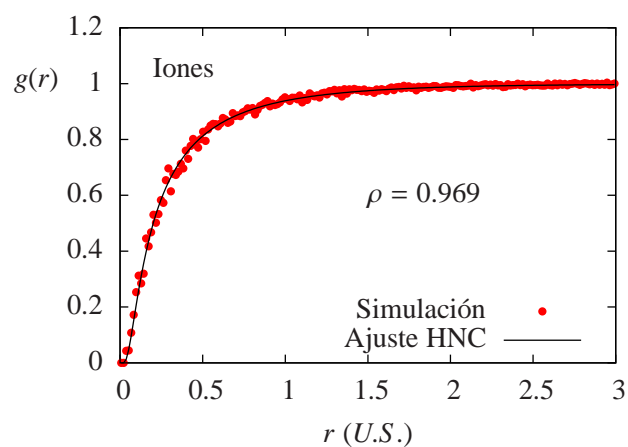


FIGURA 4.15 - Función de distribución radial obtenida de la simulación y mediante HNC ajustando el radio de Debye del potencial entre iones.

En la figura 4.15 podemos ver un ejemplo de uno de estos ajustes. Se ha dibujado sólo la curva correspondiente a los iones, ya que en este caso como los iones tienen la misma carga que los electrones la curva para los electrones es idéntica. Se puede comprobar que la curva que se obtiene

de la simulación se ajusta perfectamente al resultado del modelo HNC. Siguiendo este procedimiento hemos obtenido los valores del radio de Debye considerando las funciones de distribución radial entre electrones y entre iones. Los resultados se muestran en la figura 4.16. En este caso los valores que se obtienen con la función radial de los electrones y con la de los iones son idénticos.

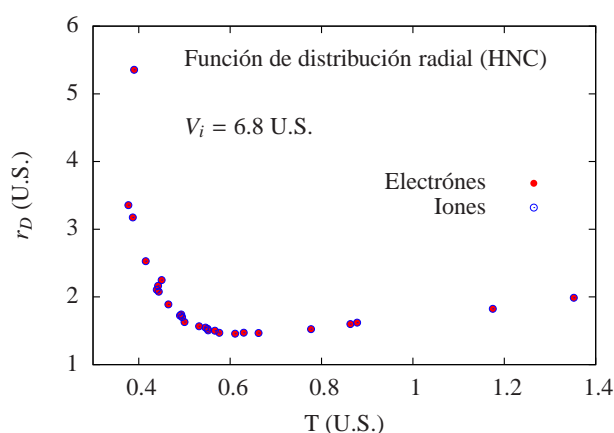


FIGURA 4.16 - Valor del radio de Debye obtenido a partir de la función de distribución radial. Datos de la simulación: $V_i = 6.8$, $\rho = 0.8345$

Tenemos entonces cuatro formas diferentes de obtener el radio de Debye a partir de los datos de las simulaciones: con la expresión teórica, a través del potencial medio, calculando la integral de la carga y mediante la función de distribución radial (HNC). En la figura 4.17 se muestran los valores del radio de Debye obtenidos con cada uno de los procedimientos junto con el valor calculado con (4.24). En el caso de los cálculos con HNC y con la integral de campo sólo se muestran los resultados para los iones (ya hemos visto que con los electrones el resultado es muy similar). El valor teórico se ha calculado con la expresión (4.24) expresada en unidades de simulación.

En esta figura, para que los resultados sean comparables se ha incluido un factor $\sqrt{2}$ en los resultados procedentes del cálculo del potencial medio y de la integral de carga. En general podemos ver que los valores obtenidos para el radio de Debye por los diferentes procedimientos son coherentes, independientemente de cómo “midamos” el grado de acopla-

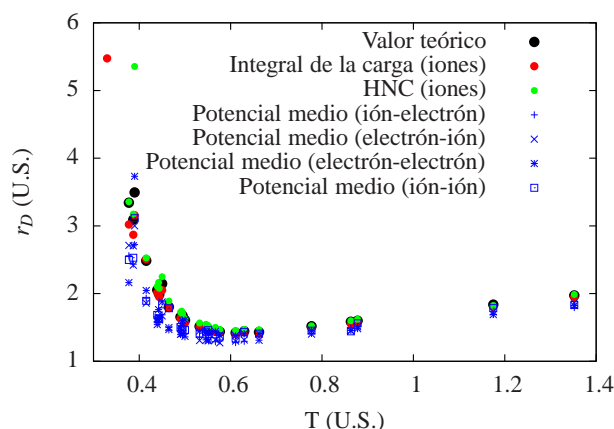


FIGURA 4.17 - Valor del radio de Debye obtenido experimentalmente por diferentes procedimientos junto con el valor teórico. Datos de la simulación: $V_i = 6.8$, $\rho = 0.8345$

miento del plasma el resultado es el mismo. El radio de Debye obtenido a partir del cálculo HNC, y la integral de carga están en muy buen acuerdo con los valores teóricos, y sólo los resultados obtenidos con el potencial medio son ligeramente diferentes.

Estos resultados son una justificación más de que nuestro sistema está bien descrito por las expresiones teóricas, y además, que la información que se extrae de manera experimental es congruente entre sí. Especial importancia tiene que las estadísticas obtenidas de los iones y los electrones den el mismo resultado, lo que demuestra que las dos especies están en equilibrio entre ellas.

Ampliación para iones con carga $Z > 1$

El código que se ha venido empleando hasta ahora era específico para plasmas con iones de carga uno. Partiendo del código de simulación utilizado en Lara (2013) se han modificado las rutinas de cálculo para poder incluir en las simulaciones iones de carga mayor que uno. En particular, la versión actual del programa permite la simulaciones de plasmas eléctricamente neutros de dos componentes, dos especies atómicas diferentes con distinta carga y masa.

Al igual que la versión anterior del programa, todo el cálculo se lleva a cabo en tarjetas de procesamiento gráfico (GPU), que ofrecen una gran

potencia de cálculo cuando los algoritmos son paralelizables, como es el caso. El uso de estos dispositivos limita el número de partículas de las simulaciones a 850, esto se debe a que la memoria de acceso rápido (lo que realmente hace que las GPU sean eficientes) es muy limitada. Esta nueva versión del programa de simulación de dinámica molecular ha permitido realizar algunos cálculos sobre emisores de carga mayor que uno (ver las secciones siguientes) además de entender un poco mejor como se comporta la dinámica de estos sistemas.

En primer lugar, el modelo analítico que se desarrolló para el caso con iones de carga uno deja de ser válido ya que ahora cada ión puede tener más de un electrón atrapado. En cuanto al reescalado nada ha cambiado, ya que todo se hacía teniendo en cuenta el número de electrones libres.

Lo que sí que ha cambiado es que ahora el parámetro α , que da cuenta de la proporción de electrones libres, ya no coincide con el grado de ionización. De hecho ahora es más correcto hablar de las poblaciones de cada especie: átomos neutros, una vez ionizados, etc. En cuanto a las diferencias en la forma de hacer los cálculos la única novedad radica en la organización interna de los cálculos. Ahora el número de electrones ya no es igual al de iones, lo que afecta a la paralelización y a la organización de las memorias. El resto de características de la simulación: potencial regularizado, resolución de las ecuaciones del movimiento, etcétera es igual que en la versión original.

Ya hemos comentado que uno de los puntos delicados de estas simulaciones es la detección de las partículas atrapadas. No tanto para obtener el grado de ionización (el criterio que se venía usando hasta ahora ya había demostrado ser suficientemente preciso) sino para seleccionar secuencias de campo válidas a la hora de calcular los perfiles de las líneas espectrales.

Cuando un ión tiene un electrón atrapado el campo eléctrico que ve es un campo oscilante muy intenso que no refleja ninguna situación real en un plasma, por lo que este tipo de situaciones no tiene sentido considerarlas. Además de que este tipo de campos no tienen sentido físico, si estamos “midiendo” una línea de un ión de carga Z , el ión con el electrón atrapado se comporta como un ión de carga $Z-1$, por lo que no es una “sonda” válida para medir el campo que estamos buscando.

Según el criterio original, un electrón estaba atrapado cuando se encontraba a una distancia menor que el radio mínimo del potencial (r_{min}) y la energía total de la pareja era negativa (entendiéndose como tal la energía potencial del par aislado y la energía cinética respecto del centro de masas). Este criterio presenta dos puntos débiles.

Por un lado si un electrón orbitaba a una distancia mayor que r_{min} ,

el criterio dictaminaba que el electrón estaba libre, a pesar de dar lugar a un campo sin sentido físico (campo oscilante) sobre el ión. Este tipo de situaciones son poco comunes y duran muy poco tiempo, por lo que no afecta al grado de ionización instantáneo.

Por otro lado, se ha observado que en bastantes colisiones fuertes (un electrón se acerca a un ión a una distancia menor que r_{min} e inmediatamente se aleja) el par electrón-ión puede llegar a tener en algún instante energía negativa (cuando se encuentran muy próximos), lo que provoca que según el criterio que habíamos definido estas situaciones se consideren como partículas atrapadas. Este tipo de situaciones suceden con cierta frecuencia, pero si lo que se hace es una “foto” instantánea del plasma, la probabilidad que una de estas situaciones suceda es muy baja por lo que tampoco afecta al grado de ionización instantáneo.

Si lo que se busca es que una partícula este libre durante un cierto intervalo, es inevitable que cada cierto tiempo aparezca una de estas “colisiones” y nos estropee la secuencia. Además, si se desechan todas las secuencias que tiene este tipo de “colisiones”, el muestreo está sesgado, ya que de alguna manera se están eliminando colisiones fuertes. En general podemos decir que el criterio original daba buenos resultados para el cálculo instantáneo del grado de ionización (para el caso $Z=1$) pero distorsionaba ligeramente el muestreo cuando se trataba de seleccionar secuencias de campo útiles. Este sesgo en las estadísticas de las secuencias seleccionadas se ve incrementado a medida que aumentamos la carga del emisor y el grado de acoplamiento del plasma.

Para mejorar la selección de las secuencias útiles, se ha refinado el criterio de selección. El nuevo sistema tiene en cuenta no sólo las energías de las partículas sino el tiempo que pasa un electrón en las vecindades de un ión. Los detalles de esta técnica de selección de las secuencias útiles se puede consultar en el anexo E

En las nuevas simulaciones con iones multicargados el criterio que se ha venido utilizando hasta ahora sólo nos sirve para averiguar cuantos iones están libres, o lo que es lo mismo, nos permite saber si un ión tiene algún electrón atrapado, no cuantos tiene. Para poder analizar las poblaciones de las distintas especies en el plasma necesitamos un mecanismo para obtener cuantos electrones tiene atrapados cada ión. Para ello vamos a recurrir a las estadísticas de energía de las partículas.

En los casos en los que la temperatura del plasma (en unidades de simulación) no es muy grande –la distribución de energías cinéticas es estrecha–, se observa que la distribución de energía potencial presenta varios lóbulos claramente diferenciados, cada uno de ellos centrado en un valor de la energía potencial. Para los iones y en el caso más sencillo con

$Z = 1$, en general encontraremos un lóbulo centrado en cero (distribución de energías potenciales de las partículas libres) y otro muy cerca a la profundidad del pozo de potencial V_i (iones con un electrón atrapado). En el caso con $Z=2$, puede haber hasta tres lóbulos, el correspondiente a los iones libres, en torno a cero, el que da cuenta de los iones con un solo electrón atrapado, muy cerca del valor V_i y el correspondiente a iones con dos electrones atrapados que estará en energías ligeramente superiores a $2V_i$. Si estos tres lóbulos están lo suficientemente separados, podemos integrar esta distribución de energías y atribuir el área de cada uno de ellos a la población de las diferentes especies.

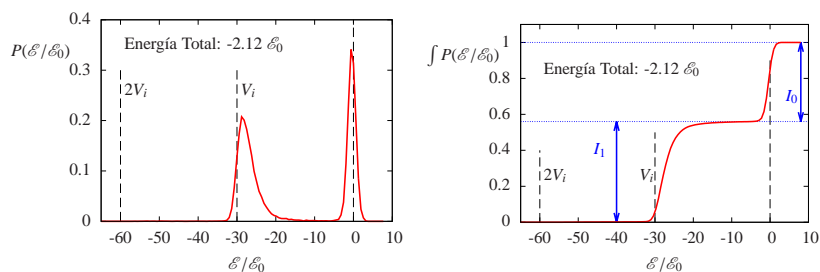


FIGURA 4.18 - Distribución de la energía potencial de los iones (figura de la izquierda) y su integral (derecha). Los datos corresponden a un plasma de He ($Z=2$) con un potencial de ionización $V_i = 30\varepsilon_0$ y un parámetro de acoplamiento nominal $\rho_N = 1.0$. La energía total del sistema es $\varepsilon_t = -2.12\varepsilon_0$.

En la figura 4.18 se muestra la distribución de energías potenciales de los iones y su integral para un plasma equilibrado con $Z = 2$ y una profundidad del pozo de potencial de $V_i = 30 U.S.$. En este caso, la energía total del plasma es de $2.12 U.S.$, lo que conduce a que únicamente estén presente dos de las tres especies posibles: sólo hay iones libres y con un electrón atrapado. En la gráfica de la derecha se observa que sólo aparecen dos lóbulos y estos están centrados respectivamente en las proximidades de cero (iones libres) y en torno a la profundidad del pozo (iones con un electrón atrapado). El tercer lóbulo debería estar a energías más bajas ($2V_i$) y sin embargo no aparece. En la figura de la derecha se puede ver la integral de esta distribución, de la que se puede deducir fácilmente (a partir de la altura de la meseta) el porcentaje de iones libres y con un electrón atrapado. En la figura 4.19 podemos observar otro caso en el que las únicas dos especies que existen son iones con uno y con dos electrones atrapados (no hay ningún ion libre). Los parámetros

del plasma son los mismos que en la figura 4.18, únicamente cambia la energía total del sistema.

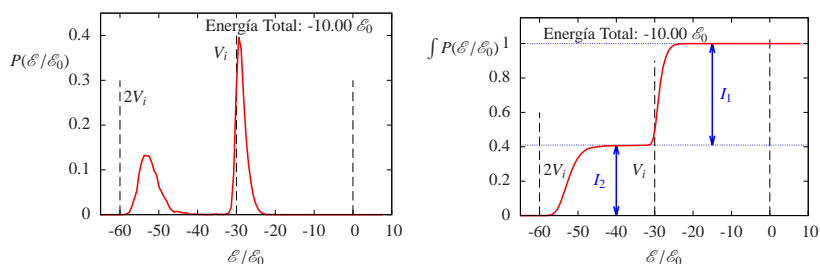


FIGURA 4.19 - Lo mismo que en la figura 4.12 pero con una energía total de $\varepsilon_t = -10.00\varepsilon_0$.

Conociendo el número de electrones ligados que tiene cada ión podemos averiguar el número de electrones libres, es decir el parámetro α . El valor de este parámetro obtenido mediante los histogramas de energías resulta ser el mismo que el que se obtiene cuando se aplica el criterio original, lo que nos vuelve a ratificar que el criterio que se ha venido usando funciona correctamente incluso para casos de iones con carga mayor que uno. Análogamente a lo que se hizo para iones de carga uno, hemos intentado reproducir la curva de equilibrio que resulta para un plasma compuesto por electrones e iones de carga dos.

Para analizar el comportamiento del sistema hemos procedido de igual manera, hemos sorteado varios gases con diferentes condiciones iniciales y hemos dejado que evolucionen hasta que se estabilizan. Todo el proceso se ha llevado a cabo con positrones. En la figura 4.20 se han dibujado los valores de energía potencial y cinética en los últimos instantes del proceso de equilibrado.

A diferencia de lo que sucedía en el caso con iones de carga uno, ahora las curvas de equilibrio de los iones y de los electrones son diferentes. En la figura 4.19 se puede ver como la energía potencial de los iones en el equilibrio puede llegar a tomar valores muy negativos –hasta dos veces el potencial de ionización–. Esto se debe a que cada ión puede llegar a tener hasta dos electrones atrapados. Si se comparan las curvas de la figura 4.20, se ve que la que corresponde a los electrones tiene menos ruido que la de los iones, esto se debe simplemente a que una tiene el doble de muestras que la otra (en el plasma hay dos electrones por cada ión). La curva de equilibrio en función de la temperatura y el grado de ionización

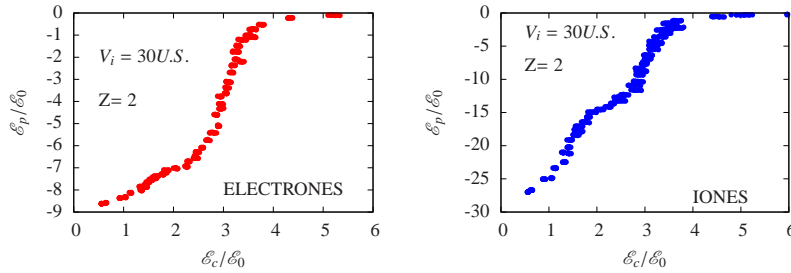


FIGURA 4.20 - Curva de equilibrio de energías cinéticas frente a las energías potenciales para un plasma de iones con carga $Z=2$, con un potencial de ionización $V_i = 30U.S.$ y un parámetro de acoplamiento nominal de $\rho_{Nominal} = 1.000$

ahora no es tan sencilla como en el caso con $Z = 1$. Como ya hemos dicho, ahora no tiene sentido hablar del grado de ionización, sino del número de iones de cada especie (iones libres, con un electrón atrapado y con dos). Ayudándonos de las estadísticas de energía potencial de los iones y siguiendo el procedimiento que se ha descrito unos párrafos antes se ha calculado la población de las especies iónicas en cada uno de los gases equilibrados. El resultado se muestra en la figura 4.21, donde aparecen las poblaciones de cada una de las especies en función de la temperatura de equilibrio.

Observamos como a temperaturas bajas todos los iones tienen dos electrones atrapados, y a medida que la temperatura de equilibrio aumenta, comienzan a aparecer iones con un solo electrón —empieza a haber electrones libres—. La población de iones con un solo electrón continúa aumentando hasta que ya no existe ningún ión con dos electrones ligados. En ese instante empiezan a aparecer iones libres, sin ningún electrón atrapado, hasta que a partir de una cierta temperatura sólo existen iones libres (con carga neta igual a dos) y electrones libres. Es importante destacar que prácticamente no se da ninguna situación en la que coexistan las tres especies. Cuando empiezan a aparecer iones libres ya no queda ninguno con dos electrones atrapado. Por otro lado si nos fijamos en la curva de los iones con carga 2 (iones libres, sin ningún electrón atrapado), y la comparamos con la que se obtuvo en la figura 4.3 vemos que son muy parecidas. Es decir, cuando todos los iones están libres o sólo tienen un electrón ligado, el sistema se comporta igual que si los iones tuvieran carga 1, la única diferencia está en que con carga 2 las temperaturas

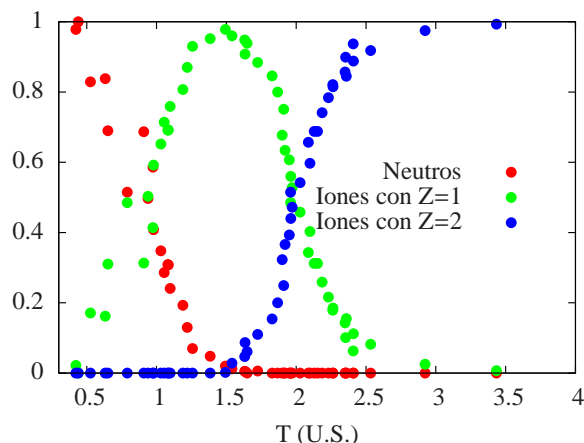


FIGURA 4.21 - Poblaciones de las diferentes especies en función de la temperatura para un plasma de iones de carga 2, con un potencial de ionización de $V_i = 30U.S.$

de equilibrio son mayores (lo que equivaldría a una simulación con $Z=1$ pero con un potencial de ionización mayor).

A pesar de que en este caso también se ha utilizado un potencial regularizado de tipo parabólico, hacer un modelo analítico para obtener la curva de equilibrio es ahora mucho más complicado. Como hemos notado, la curva de “ionización” del paso de iones con un electrón a iones libres es muy similar a la del caso en el que los iones tienen carga uno, y de hecho el modelado de esta parte no presenta ningún problema, bastaría considerar el potencial correspondiente con carga dos. Sin embargo el problema surge en las zonas en las que existen iones con un electrón atrapado. Cuando esto sucede, la pareja ión-electrón crea un potencial efectivo que ya no es parabólico (será parecido a un potencial de Lennard-Jones) y que además no es fijo, ya que depende de la posición relativa del electrón con respecto al ión. Este potencial efectivo no tiene una expresión analítica sencilla y resulta muy difícil obtener una expresión similar a la que se dio en el caso con $Z=1$ para la curva del equilibrio. Además, en casos con iones de carga mayor, los potenciales efectivos que crea un ión con varios electrones atrapados son cada vez más complejos, lo que hace imposible obtener una expresión general para las condiciones de equilibrio.

Plasmas con dos especies atómicas

De cara al cálculo de líneas espectrales no tiene mucho sentido simular plasmas con iones sólo de carga Z y electrones. En general, cuando se hacen medidas experimentales de líneas procedentes de iones de elementos pesados, se suelen hacer en plasmas de Hidrógeno o de Helio con impurezas de ese elemento. Es decir que los perturbadores son en su mayor parte iones de carga uno o dos y electrones, aunque la sonda tenga una carga mucho mayor.

Para emular estas situaciones y aprovechando todo lo que se ha averiguado sobre el comportamiento de los plasmas con iones multicargados se ha modificado ligeramente el código del programa de Dinámica Molecular para incluir una segunda especie atómica. La idea es simular plasmas en el que la mayoría de los iones sean de carga uno, por ejemplo, y sólo unos pocos de carga Z (la carga del emisor).

El planteamiento es idéntico al que se ha descrito para plasmas con una sola especie atómica para iones multicargados. La única diferencia es que ahora de cada plasma, sólo las secuencias de campo que ven las impurezas son útiles (al contrario que antes, donde la secuencia que veía cada ión era una muestra válida). Esto hace que se encarezca notablemente la simulación, pero sin embargo permite simular secuencias de campo sobre iones de carga mucho mayor.

Las simulaciones que se ha llevado a cabo para calcular los espectros de las transiciones SP en la serie isoelectrónica del Berilio se han realizado con esta versión del programa.

5

La serie isoelectrónica del Berilio $3s - 3p$

Las dos técnicas de simulación que hemos descrito en el capítulo anterior las vamos a utilizar para calcular las líneas de la transición $1s^2 2s 3s \ ^3S \rightarrow 1s^2 2s 3p \ ^3P^o$ de los primeros elementos cargados de la serie isoelectrónica del Berilio.

En primer lugar explicaremos los pormenores de los cálculos hechos con cada una de estas técnicas por separado para finalmente pasar a comparar los datos de las simulaciones con los datos experimentales disponibles y analizar el escalado con Z .

5.1. Estructura de estados

Hasta ahora, para estudiar las diferentes aproximaciones, hemos trabajado con un modelo simplificado de esta transición que sólo incluía los estados s y p . Lo que se pretende ahora es hacer un cálculo realista para poderlo comparar con los datos experimentales, por lo que este esquema tan sencillo de estados ya nos nos sirve.

En primer lugar vamos a describir la transición que vamos a estudiar y la estructura atómica de los emisores que vamos a considerar. En concreto se trata de una transición entre los estados tripletes S y P con número cuántico principal igual a 3:

$$1s^2 2s 3s \ ^3P \rightarrow 1s^2 2s 3p \ ^3P^o \quad (5.1)$$

Y la vamos a estudiar en los primeros cuatro elementos cargados de la serie isoelectrónica del Berilio. Esta serie la forman aquellos elementos que teniendo diferente carga nuclear tienen la misma configuración electrónica que el Berilio neutro. En este trabajo estudiaremos los cuatro primeros elementos cargados de esta serie: Boro II, Carbono III, Nitrógeno IV y Oxígeno V. Aunque la estructura de niveles es la misma en todos ellos, resulta conveniente visualizar los diagramas de Gortiam de cada uno de ellos para tener una idea de qué niveles pueden afectar a la transición bajo estudio, y por lo tanto qué estados deben ser incluidos en el cálculo.

En la figura 5.1 se muestra el diagrama de Gortiam del C III correspondiente a los niveles $1s^2 2s 3s$, $1s^2 2s 3p$ y $1s^2 2s 3d$. El resto de niveles están lo suficientemente alejados como para que se pueda prescindir de ellos.

Como hemos dicho la transición que estudiaremos será la que involucra a los estados triplete, ya que es de los que más datos experimentales hay. Se puede comprobar que las transiciones entre estados singlete, si bien son tan intensas como las de los estados triplete, no se encuentran en el visible y no se van a observar en el intervalo espectral que vamos a estudiar. Además, dado que los estados singlete y triplete son independientes ¹ en nuestro cálculo sólo será necesario tener en cuenta los estados triplete.

Esta situación se acentúa a medida que la carga del emisor aumenta: El resto de estados que no aparecen en la figura 5.1 están todavía más lejos y por lo tanto influyen menos en la transición. Aunque, si nos vamos

¹Los estados singlete y triplete están desacoplados en nuestro caso (el hamiltoniano sólo incluye el operador R , que no es capaz de conectar estados con diferente spin).

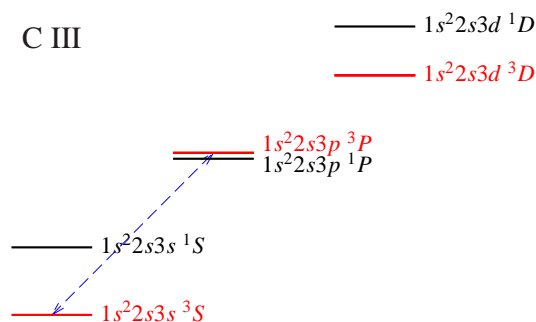


FIGURA 5.1 - Diagrama de Niveles del C III (sin estructura fina). En rojo se muestran los estados triplete, en negro los singlete y en azul la transición estudiada.

a emisores con menor carga (como el B II o el Be I) los estados vecinos se acercan, en el caso que nos ocupa no llegan a estar lo suficientemente cerca como para tenerlos que incluir.

Así, los cálculos de la transición $1s^2 2s 3s \ ^3P - 1s^2 2s 3p \ ^3P^o$ de la serie isoelectrónica del Berilio se harán teniendo en cuenta los estados $1s^2 2s 3s \ ^3P$, $1s^2 2s 3p \ ^3P$ y $1s^2 2s 3d \ ^3D$, incluyendo su estructura fina, lo que supone un total de 27 estados (ver la tabla 5.1).

De acuerdo con lo expuesto en el capítulo 4, en cada paso es necesario, una vez obtenida la matriz del operador U , hacer el producto de cuatro matrices para obtener la función de autocorrelación dipolar (ver

Estado	Degeneración
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0$	1
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 0$	1
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 1$	3
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2$	5
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 1$	3
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 2$	5
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 3$	7

Tabla 5.1: Estados incluidos en el cálculo

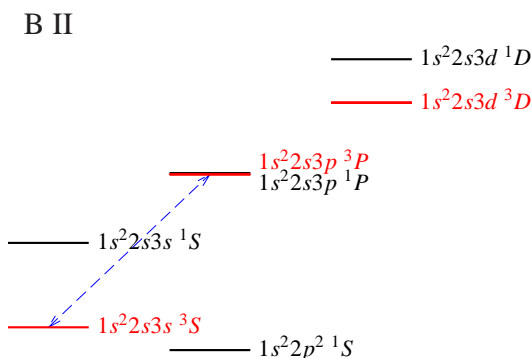


FIGURA 5.2 - Diagrama de Niveles del B II (sin estructura fina). En rojo se muestran los estados triplete, en negro los singlete y en azul la transición estudiada.

las expresiones 2.2 y 2.3). Como ya se comentó, resulta más práctico obtener una expresión para la función de correlación dipolar en función de los elementos de matriz del operador U y así evitar el producto matricial en cada paso. Teniendo en cuenta la estructura de las matrices \mathbf{D} en la base de estados elegida y con la ayuda de un programa de cálculo simbólico se calcula la expresión de la función de correlación dipolar, que dependerá de los elementos de matriz del operador evolución U .² Los datos correspondientes a las energías de cada uno de estos estados así como a las probabilidades de transición entre ellos para cada una de las especies atómicas se pueden consultar en el anexo D.

Si observamos la estructura de los estados involucrados, podemos comprobar que la estructura fina hace que aparezcan tres transiciones entre los estados $3s$ y $3p$, todas ellas comparten el nivel inferior de la transición ($1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0$) y parten de los tres estados del nivel $1s^2 2s 3p$, correspondientes a $J = 0$, $J = 1$ y $J = 2$. La estructura fina está incluida en el cálculo, y como consecuencia el perfil espectral será la superposición de estas tres líneas de estructura fina, que en principio

²Los elementos de las matrices \mathbf{D} se calculan como el producto del elemento reducido de matriz por el coeficiente de Clebsch Gordan correspondiente. Para obtener la función de correlación simplemente se hace el producto matricial de forma simbólica. El cálculo es sencillo y la función que se obtiene es demasiado larga como para incluirla aquí y no aporta ninguna información adicional.

no tienen por qué ser iguales.

5.2. Cálculos con Partículas Independientes

En primer lugar vamos a calcular el perfil espectral procedente de cada uno de los elementos de la serie utilizando la técnica de partículas independientes. A priori esta técnica no es muy adecuada para este tipo de cálculos, ya que la carga del emisor no influye para nada en la física de los campos que experimenta, por lo que si hubiera en la realidad algún efecto de este tipo, este no se puede reproducir mediante esta técnica. Sin embargo, este tipo de cálculos nos permitirán observar de manera aislada cómo afecta la estructura atómica (probabilidades de transición, diferencias de energía entre los niveles) al perfil de la línea, y analizar de esta manera que fenómenos de ensanchamiento son los dominantes. Para cada uno de los elementos de la serie vamos a calcular el perfil bajo un rango bastante amplio de densidades y temperaturas, desde $10^{22}m^{-3}$ hasta $10^{25}m^{-3}$ y desde $40000K$ hasta $100000K$.

Todas las simulaciones se han llevado a cabo utilizando 1000 electrones y 1000 iones. Esto conduce a un tamaño de la caja de simulación de $10 r_0$. Para algunos de los casos estudiados este tamaño pudiera parecer algo pequeño (ya que es comparable al radio de Debye, por lo que los campos de las partículas lejanas están truncados), sin embargo hemos realizado simulaciones con 10000 partículas y el resultado que se ha obtenido es el mismo. Este idea se verá reforzada más adelante cuando analicemos el ensanchamiento de las líneas estudiadas.

Las secuencias de campo se han generado con un paso temporal de $dt = 0.01t_0$, donde t_0 es la unidad de tiempo en la escala de la simulación. Los perfiles finales se han obtenido de las funciones de correlación promediadas sobre al menos 10000 secuencias de campo independientes. Se ha comprobado que con este número de muestras las funciones de correlación ya están suficientemente limpias, y sólo en algunos casos de altas densidades se han empleado hasta 30000 muestras.

Vamos a comenzar por el primer elemento cargado de la serie, el Boro II. Como ya comentábamos en el capítulo 2, trabajaremos con la “función de correlación compleja” definida en las expresiones (2.87) y (2.88).

En las figuras 5.3 y 5.4 se muestra la función de autocorrelación compleja (ver eq. (2.88)) para dos casos de densidad y temperatura. En concreto se han escogido los dos casos más extremos, el de mayor densidad y menor temperatura –donde cabe esperar que tenga mayor

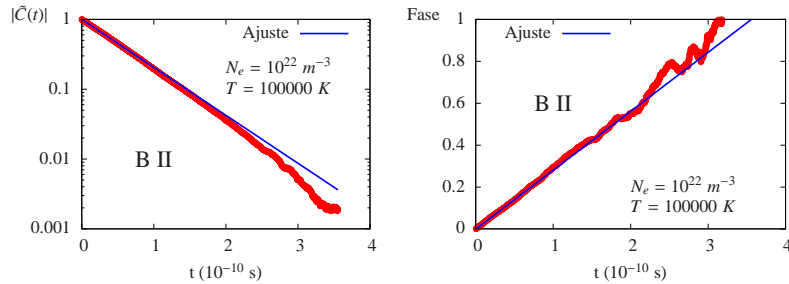


FIGURA 5.3 - Módulo y fase de la función de autocorrelación compleja ($\tilde{C}(t)$) de la transición $1s^2 2s 3s \ ^3P - 1s 2^2 2s 3p \ ^3P^o$ del Berilio II para una densidad electrónica de 10^{22} m^{-3} y una temperatura de 100000 K . Junto con los datos experimentales se muestra el mejor ajuste a una función exponencial compleja.

importancia la estadística de campos— y el de menor densidad y mayor temperatura —donde cabe esperar que la anchura esté dominada por las “colisiones”—. Junto a los datos de la simulación se muestra el ajuste a un función de tipo exponencial. En ambos casos se puede comprobar que la función de autocorrelación dipolar cae prácticamente como una exponencial.

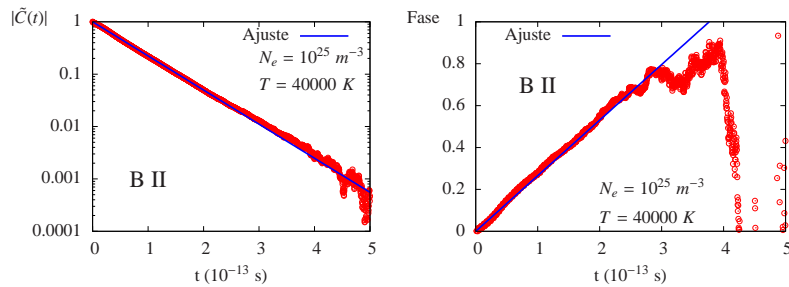


FIGURA 5.4 - Lo mismo que en la figura 5.2 pero para $N_e = 10^{25} \text{ m}^{-3}$ y $T = 40000 \text{ K}$

Esto tiene dos consecuencias inmediatas. En primer lugar podemos deducir que la anchura de la línea está dominada por fenómenos de impacto, ya sean colisiones débiles o fuertes ³ Y en segundo lugar, dado que

³Tanto el ensanchamiento por colisiones débiles como el de fuertes son mecanismos

la función de correlación tiene una expresión analítica conocida, podemos limitarnos a simular sólo el comienzo de esta y ajustar el resultado a una función de tipo exponencial.

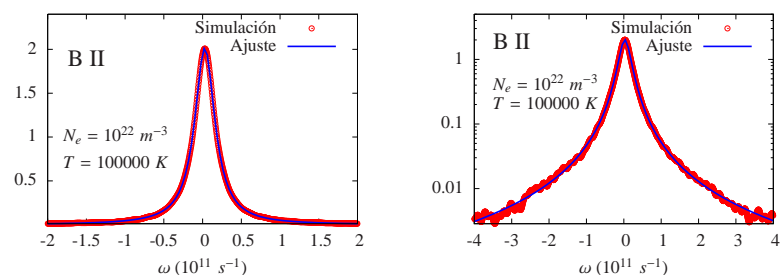


FIGURA 5.5 - Boro II, $N_e = 10^{22} m^{-3}$ y $T = 100000 K$. Perfil espectral obtenido de la función de correlación completa (simulación) y la lorentziana resultante de ajustar la función de correlación a una exponencial.

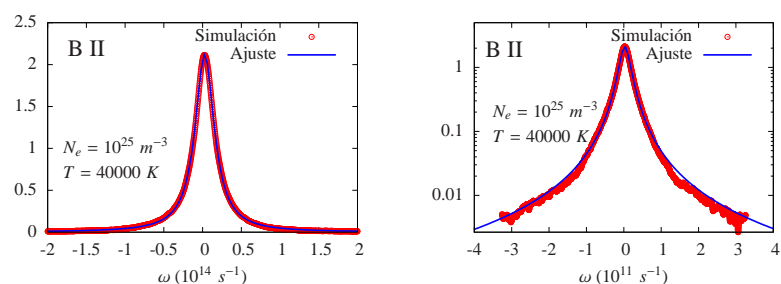


FIGURA 5.6 - Boro II, $N_e = 10^{25} m^{-3}$ y $T = 40000 K$. Perfil espectral obtenido de la función de correlación completa (simulación) y la lorentziana resultante de ajustar la función de correlación a una exponencial.

En el caso de más baja densidad y más alta temperatura (figura 5.5) se observa que el perfil obtenido directamente de la simulación coincide perfectamente con un perfil lorentziano, por lo que está justificado suponer que la función de correlación del dipolo cae como una exponencial, simular solamente el primer tramo y hacer un ajuste.

de ensanchamiento homogéneos. Los fenómenos que los producen, colisiones fuertes o débiles, son independientes de la historia temporal, lo que inevitablemente conduce a una función de correlación de tipo exponencial.

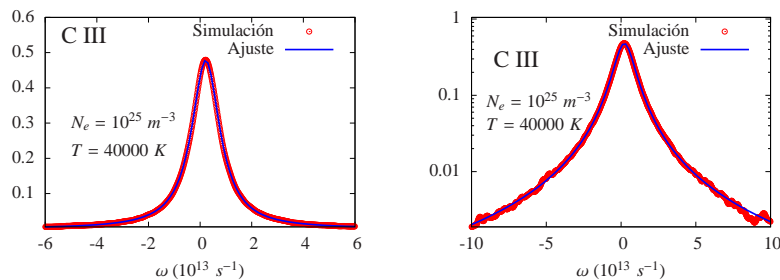


FIGURA 5.7 - Carbono III, $N_e = 10^{25} \text{ m}^{-3}$ y $T = 40000 \text{ K}$. Perfil espectral obtenido de la función de correlación completa (simulación) y la lorentziana resultante de ajustar la función de correlación a una exponencial.

Una función de autocorrelación es de tipo exponencial cuando es el resultado de una serie de fenómenos sin correlación, como es el caso de las colisiones, por lo que para que esto sea así, el tiempo de caída de la correlación del dipolo debe ser mucho mayor que el tiempo de correlación de los campos. Por este motivo en nuestras simulaciones, cuando el tiempo de pérdida de correlación de la línea es muy grande, únicamente hemos simulado los primeros instantes y luego hemos ajustado el resultado a una exponencial.

Cuando la función de correlación es exactamente una exponencial, entonces el perfil de la línea espectral es una lorentziana. Para ver el error que estamos cometiendo al ajustar la función de correlación a una exponencial hemos dibujado (figuras 5.5 y 5.7) el perfil obtenido mediante la transformada de fourier de la función de correlación y una función lorentziana cuya anchura y shift se han obtenido mediante el ajuste de la función de correlación a una exponencial.

En el caso de más alta densidad y más baja temperatura (figura 5.6), en general la curva de Lorentz reproduce bastante bien el perfil obtenido de la simulación, sin embargo hay pequeñas discrepancias en las alas de la línea, como se puede observar en la gráfica de la derecha de la figura 5.6. Ya habíamos anticipado que este caso es en el que más se podría notar el efecto de los campos estáticos, lo que provocaría que el perfil resultante dejara de ser una función de Lorentz. A medida que aumenta la carga del emisor, la línea es más “dura”, se necesitan colisiones más fuertes para perturbar la emisión. Esto hace que el efecto de las colisiones se incremente en detrimento de la estadística de campos. Incluso para densidades altas y temperaturas bajas los perfiles que se obtienen

del C III, N IV y O V son completamente de impacto, el perfil es una lorentziana, como se puede ver en la figura 5.7 en el caso del CIII.

Como ya adelantábamos la transición que hemos estudiado tiene tres componentes de estructura fina, donde cada una de ellas se puede aproximar por una lorentziana y cuyas anchuras y desplazamientos Stark son prácticamente iguales. El perfil completo será el resultado de “sumar” estas tres líneas. En algunos casos, la anchura de las líneas será tan pequeña comparada con su distancia espectral que se puedan observar cada una de ellas por separado, mientras que en otras se solaparán tanto que el perfil completo se verá como una sola línea de anchura prácticamente la misma que la de cada una de las componentes. Este fenómeno se puede observar en las figuras 5.8 - 5.10, donde se muestran los perfiles espectrales completos (las tres líneas de la transición) del Carbono III para tres densidades diferentes.

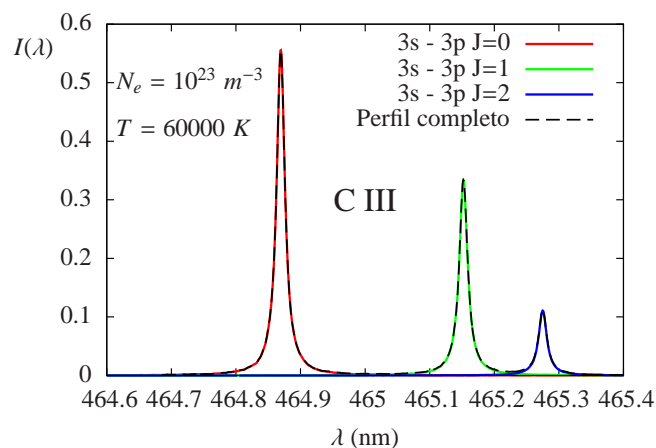


FIGURA 5.8 - Perfil espectral de la transición $3s-3p$ del Carbono III para $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$ y $T = 60000 \text{ K}$. Se muestran cada una de las transiciones existentes por separado y el perfil completo

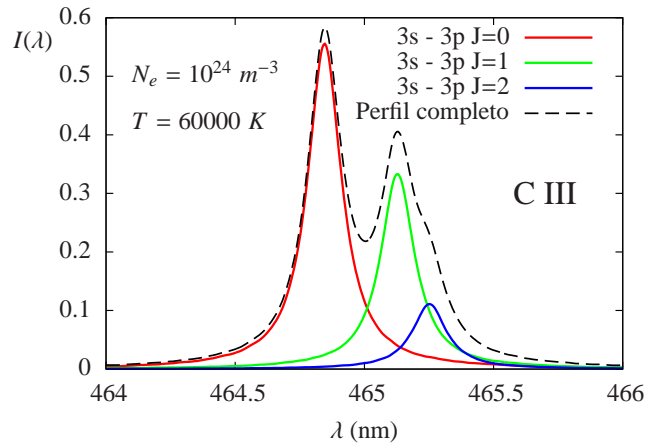


FIGURA 5.9 - Perfil espectral de la transición $3s-3p$ del Carbono III para $N_e = 10^{24} \text{ m}^{-3}$ y $T = 60000 \text{ K}$. Se muestran cada una de las transiciones existentes por separado y el perfil completo

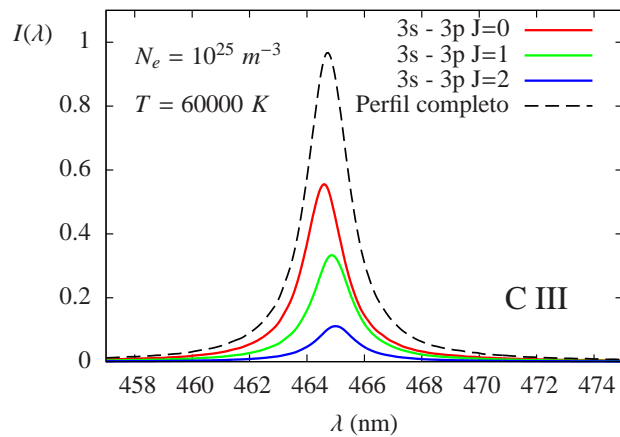


FIGURA 5.10 - Perfil espectral de la transición $3s-3p$ del Carbono III para $N_e = 10^{25} \text{ m}^{-3}$ y $T = 60000 \text{ K}$. Se muestran cada una de las transiciones existentes por separado y el perfil completo

En la figura 5.11 se han dibujado los perfiles completos correspondientes a las tres densidades de las figuras 5.8 - 5.10 para mostrar en la misma escala cómo evoluciona el perfil a medida que aumenta la densidad.

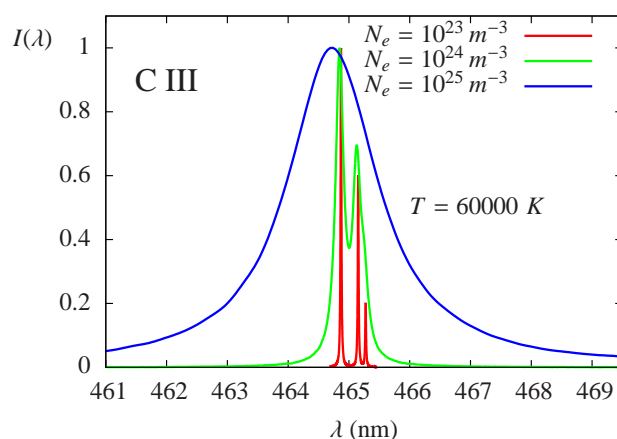


FIGURA 5.11 - Perfiles espectrales de la transición $3s-3p$ del Carbono III para $T = 60000K$ y diferentes densidades. Los espectros están normalizados en altura.

En el intervalo de temperatura en el que se han estudiado estas líneas, la influencia de la temperatura es prácticamente despreciable. Si se hubieran hecho cálculos a temperaturas más bajas si que sería interesante observar esta dependencia, sin embargo, estas condiciones no son realistas ya que para observar estas líneas en los experimentos se necesitan temperaturas del orden de las decenas de miles de kelvin, ya que de otro modo no se pueden generar en los plasmas las especies de interés.

Teniendo en cuenta que los campos que ven los emisores son la suma de la contribución iónica más la electrónica, cabe preguntarse cómo influyen cada una de ellas. Para ello se han repetido algunos cálculos utilizando únicamente el campo generado por los electrones.

Las figuras 5.12 y 5.13 muestran el cociente entre las anchuras y desplazamientos obtenidos con el campo total y sólo con el campo electrónico. Si la contribución de los iones fuese nula, el resultado debería ser siempre 1. En estas figuras observamos que el ensanchamiento se debe predominantemente al efecto electrónico. Además, dado que ya hemos com-

probado que los espectro se ajustan a la perfección a una lorentziana, en el caso en el que la influencia del campo iónico no sea despreciable, cabe esperar que el efecto de estos sea también de tipo impacto.

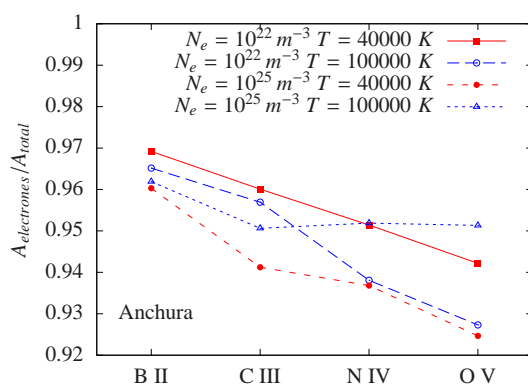


FIGURA 5.12 - Cociente entre la anchura producida por los electrones y por todas las partículas para una de las líneas de la transición $3s - 3p$. Se muestran cuatro casos de densidad y temperatura para cada uno de los cuatro elementos estudiados

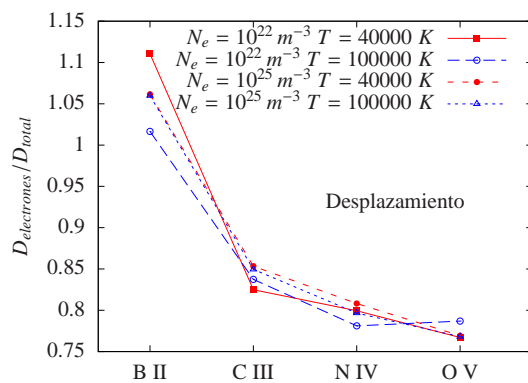


FIGURA 5.13 - Cociente entre el desplazamiento producido por los electrones y por todas las partículas para una de las líneas de la transición $3s - 3p$. Se muestran cuatro casos de densidad y temperatura para cada uno de los cuatro elementos estudiados

Si bien se observa que el cociente es muy próximo a la unidad, presenta una tendencia sistemática: A medida que la carga del emisor aumenta, lo hace la contribución iónica (la contribución electrónica deja de tener tanta importancia). Esto es especialmente notable en el caso de los desplazamientos, donde para el Oxígeno V la contribución de los iones llega a ser casi del 25 %. Sin embargo, a medida que el número atómico aumenta, también lo hacen los tiempos de correlación, por lo que a medida que la carga del ión aumenta, la anchura de las líneas se debe cada vez más a las colisiones y menos a la estadística de campo. Por lo tanto, cuando los iones empiezan a contribuir a la anchura de la línea, deben hacerlo como un fenómeno de impacto. Hay que tener en cuenta que en estos cálculos (partículas independientes) el hecho de que el emisor esté cargado no tiene ninguna influencia en el comportamiento de los campos que sufre. La única diferencia es la estructura atómica del emisor: la distancia entre niveles y las probabilidades de transición. Esto quiere decir que el hecho de que al aumentar la carga iónica los iones empiezan a contribuir a la anchura (aportando una anchura de “impacto”) tiene que ver con la estructura del ión y no con la estadística de colisiones.

Para estudiar si el ensanchamiento se debe a las colisiones fuertes o a las débiles basta con repetir alguna de las simulaciones eliminando aquellas colisiones cuyo parámetro de impacto es menor que el radio de Weisskopf calculado según el procedimiento descrito en el anexo A.

Llegados a este punto nos volvemos a topar con el problema de la elección del radio de Weisskopf, ¿Qué valor del cambio de fase debemos tomar? Ya hemos comprobado que el valor del radio de Weisskopf varía mucho con el cambio de fase, por lo que la pregunta no es baladí.

Inicialmente habíamos tomado un criterio bastante vago para definir las colisiones fuertes: aquellas que provocan un cambio de fase en la emisión del orden de la unidad. Sin embargo, podemos afinar un poco más esta definición en base a lo que hemos visto en la aproximación de colisiones débiles. En este modelo, sólo se pueden considerar las colisiones que provocan cambios de fase pequeños (en la expresión (2.49)), por lo tanto podemos considerar como colisión fuerte aquella que no satisface esa condición. Es decir, las colisiones que hacen que truncar el desarrollo en serie de la expresión (2.49) no sea una buena aproximación. Con esta idea, una colisión puede provocar un cambio de fase mucho menor que la unidad, por ejemplo 0.2, y aún así sigue comportándose como una colisión fuerte.

Para ver la influencia de estas colisiones hemos repetido algunos cálculos eliminando aquellas colisiones cuyo parámetro de impacto sea menor que el radio de Weisskopf. Para calcular el radio de Weisskopf

hemos tomado como criterio que la colisión completa provoque un cambio de fase igual a 0.1 ⁴. Para una temperatura de $T = 60000$ K, el radio de Weisskopf que se obtiene es de $7.3 \cdot 10^{-10}$ m. Con ese valor, si eliminamos las colisiones cuyo parámetro de impacto es menor que ese valor, obtenemos unas líneas cuya anchura es casi la mitad de las que se obtiene con el cálculo completo. Esto nos dice que la anchura de las líneas es en estos casos una combinación, casi a partes iguales del efecto de las colisiones fuertes y de las débiles.

Antes de comparar estos resultados con los datos experimentales o con los obtenidos mediante Dinámica Molecular (lo que haremos en las últimas secciones del capítulo) ya podemos sacar algunas conclusiones. A la vista de que la función de correlación del dipolo es en todos los casos una exponencial, podemos afirmar que la anchura de las líneas se debe a fenómenos de impacto, ya sean de colisiones fuertes o débiles. Además, la anchura se debe predominantemente a los electrones, y el efecto de los iones, que es mínimo, es también de tipo impacto (en el intervalo de densidad y temperatura estudiados).

Los resultados (anchuras y desplazamiento) calculados con esta técnica se pueden consultar en el anexo F-

5.3. Cálculos con Dinámica Molecular

La novedad más importante de este trabajo es el cálculo de los espectros de las transiciones S-P en iones multicargados utilizando la técnica de Dinámica Molecular. A diferencia de los cálculos llevados a cabo con la técnica de partículas independientes, en esta técnica se tienen en cuenta las correlaciones entre todas las partículas debido a su interacción eléctrica. Esto, como ya adelantábamos tiene importantes consecuencias.

Además de modificar la estadística de los campos que ve el emisor (lo cual no afecta a este cálculo, dominado por los fenómenos de impacto), influye en la frecuencia de colisiones, tanto débiles como fuertes, que ahora depende de la carga del emisor.

El segundo punto a destacar es la aparición del fenómeno de recombinación. La interacción entre partículas hace que eventualmente los emisores tengan electrones orbitando en torno a ellos. Cuando esto sucede, el campo que ve el emisor deja de tener sentido físico, y a efectos de cálculo es como si la coherencia de la emisión se perdiera bruscamente. Si suponemos que nuestro emisor es C III, al atrapar un electrón

⁴Esto es más que suficiente para que una colisión se pueda considerar fuerte.

pasamos a tener C II, y la línea que estábamos observando (que era del C III), deja de emitirse.

Ya hemos discutido la mejor manera de detectar estas situaciones y cómo evitarlas, sin embargo conviene pensar cómo puede afectar esto al espectro. Si sólo tomamos aquellas secuencias de campo en las que el emisor siempre está libre, sin darnos cuenta lo que estamos haciendo es sesgar la estadística, pues estamos desechando las secuencias que aún siendo válidas no “duran” todo lo que nos gustaría. Pensemos que es lo que sucede en la realidad: un átomo está emitiendo y de repente captura un electrón, por lo tanto su estructura atómica cambia y por lo tanto su “modo” de emitir ya no tiene nada que ver. Desde el punto de vista de la correlación de la emisión, cuando un emisor captura un electrón, la correlación de su emisión se pierde completamente.

Para reproducir esto en las simulaciones, lo que haremos será empezar a calcular la función de autocorrelación en aquellos emisores que estén libres, y si antes de que esta caiga de modo natural –por el efecto de los perturbadores– se atrapa un electrón, el cálculo se detiene y se lleva la función de correlación a cero. Para un emisor aislado esto no es lo que sucede en la realidad, sin embargo una vez hecho el promedio estadístico sobre todos los emisores, la pérdida de correlación equivale a que la función de autocorrelación valga cero. Si el tiempo típico que tarda un ión en atrapar un electrón es mucho mayor que el tiempo de caída de correlación, esto no tiene ninguna importancia, pues la pérdida de correlación de la emisión (y por tanto la anchura de la línea) se debe al efecto de los perturbadores. Sin embargo, si el tiempo de recombinación de los emisores es menor que el tiempo de caída de correlación, eso significa que la anchura real de la línea será mayor que la esperada, la correlación se pierda antes, pero no por el efecto de los perturbadores, sino porque el emisor se recombina. Esta anchura, que de ahora en adelante llamaremos anchura de recombinación, no se tiene en cuenta habitualmente en los cálculos y como hemos explicado puede tener influencia en la anchura de la línea. Formalmente puede tratarse de manera idéntica a anchura por colisiones fuertes, y en lugar de trabajar con la frecuencia de dichas colisiones se utiliza el tiempo medio de recombinación.

En general los cálculos llevados a cabo mediante dinámica molecular serán más realistas, ya que a diferencia de los cálculos de partículas independientes tienen en cuenta la influencia de la carga del emisor en el campo que ve y el fenómeno de la anchura por recombinación.

5.3.1. Equilibrado de los plasmas y generación de campos

Para hacer el cálculo correctamente es necesario partir de plasmas que estén previamente equilibrados. Para ello se ha seguido el procedimiento descrito en la sección 4.2.2. Como ya dijimos, una simulación se caracteriza por el parámetro de acoplamiento ρ , lo que nos permite utilizar una misma simulación para diferentes valores de la densidad, siempre y cuando se escoja la temperatura adecuada. En total se han generado plasmas con 3 valores de ρ para cada especie (en total tenemos 12 tipos de gases) Estos tres valores de ρ corresponden a un valor parecido al que se desprende de las condiciones experimentales (en torno $\rho = 0.3$), otro al de un plasma con un parámetro de acoplamiento medio ($\rho \approx 0.6$) y el otro a un plasma fuertemente acoplado ($\rho \approx 1.0$).⁵ En el anexo G se pueden consultar los datos de las simulaciones así como las condiciones de los gases una vez equilibrados.

En los plasmas con $\rho \sim 1$ y $\rho \sim 0.6$ la temperatura del plasma y el grado de ionización son perfectamente estables a lo largo de toda la secuencia de campo. Sin embargo, en los casos con $\rho \sim 0.3$, el acoplamiento tan débil entre partículas hace que el tiempo de equilibrado sea prohibitivo, y a pesar de que antes de generar las secuencias de campo se ha sometido a los gases a un proceso de equilibrado, durante la generación de los campos la temperatura todavía sigue evolucionando, aunque lo hace a un ritmo tan lento que no afecta al grado de ionización. La diferencia entre la temperatura al comienzo de la secuencia de campo y el final es aproximadamente del 5%. Para hacer el cálculo de la línea se ha tomado el valor medio de toda la secuencia de campo.

El cálculo de las secuencias de campo⁶ es incluso más costoso computacionalmente que el equilibrado de los plasmas. Para que el cálculo sea realista se necesitan secuencias suficientemente largas como para que la correlación del dipolo de pérdida. El proceso del cálculo del campo es similar al proceso de equilibrado de los plasmas (se siguen monitorizando las mismas magnitudes para observar si existe alguna variación en las estadísticas), con la salvedad de que cada cierto número de pasos temporales se almacena en un fichero el campo que ven los emisores, además de toda la información necesaria para calcular las secuencias válidas.

Partiendo de los gases ya equilibrados hemos generado las secuencias de campo que ven los emisores en cada uno de estos gases. Una vez

⁵Debido al proceso de equilibrado los valores de los parámetros ρ obtenidos en el equilibrio para cada especie pueden variar ligeramente.

⁶llamamos "secuencia de campo" a la función $\mathbf{E}(t)$ que actúa sobre un emisor (un ión en estos casos) concreto. Esta secuencia temporal se interrumpe, naturalmente, si el ión que sirve de "sonda" captura un electrón.

generadas esas secuencias, siguiendo el criterio que hemos establecido de partícula atrapada (ver anexo E) se obtienen los tramos de esas secuencias en las que el emisor está libre, es decir, seleccionamos aquellas secuencias de campo en las que tiene sentido calcular la línea espectral. A la hora de calcular la línea espectral, tomamos cada una de estas secuencias válidas y nos colocamos al comienzo de su historia, comenzamos a calcular la línea espectral hasta que alcanzamos el tiempo estipulado (este tiempo se da desde fuera y se estima de modo que en promedio la función de autocorrelación haya caído a cero en ese instante), o bien hasta que la secuencia termina. Si esto sucede, debemos entender que el emisor que hemos considerado ha capturado un electrón, por lo que la correlación de la emisión se ha perdido completamente. Esto se ve reflejado en el cálculo llevando a cero la función de correlación.

5.3.2. Tiempo de recombinación y colisiones fuertes

Para estudiar la anchura de recombinación resulta interesante estudiar los tiempos de recombinación en función del grado de acoplamiento del plasma y de la carga del emisor. Como ya hemos comentado disponemos de tres grados de acoplamiento muy diferentes y de cuatro cargas del emisor. Siguiendo el criterio descrito anteriormente para el cálculo de las secuencias de campo útil hemos analizado la longitud de los intervalos de tiempo en los que los emisores se encuentran libres.

Los procesos de recombinación son homogéneos en el tiempo, no dependen de la historia del emisor, por lo que deberán seguir una estadística del tipo

$$f(t) = \frac{\exp(-t/\tau_r)}{\tau_r} \quad (5.2)$$

donde τ_r es el tiempo medio que tarda en producirse una recombinación.

Efectivamente, en las figuras 5.14 y 5.15 podemos observar que los valores de los tiempos de recombinación obtenidos de las simulaciones se pueden ajustar muy bien a una expresión del tipo (5.2).⁷

Es importante destacar que a medida que el tiempo de recombinación aumenta los histogramas tienen menos muestras, ya que la historia total de campo que se ha calculado es similar en todos los casos.

⁷Se observan ciertas discrepancias para tiempos cortos, lo cual puede deberse a que el criterio de selección de las secuencias válidas, funciona razonablemente bien, pero no es perfecto y en cierto modo distorsiona un poco la estadística de las secuencias más cortas.

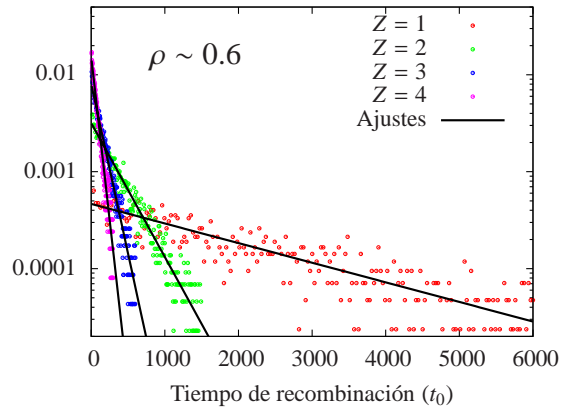


FIGURA 5.14 - Función de distribución de los tiempos de recombinación en plasmas con un parámetro de acoplamiento experimental $\rho_{exp} \sim 0.6$ para emisores de diferente carga. En línea continua se muestra el mejor ajuste a una función del tipo (5.2). La figura esta en escala semilogarítmica.

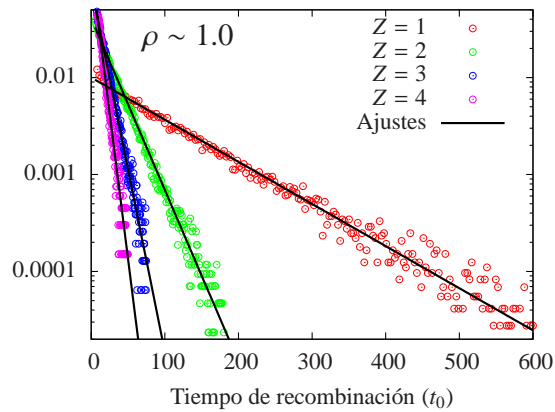


FIGURA 5.15 - Función de distribución de los tiempos de recombinación en plasmas con un parámetro de acoplamiento experimental $\rho_{exp} \sim 1.0$ para emisores de diferente carga. En línea continua se muestra el mejor ajuste a una función del tipo (5.2). La figura esta en escala semilogarítmica.

Para los plasmas con el parámetro de acoplamiento más bajo ($\rho \sim 0.3$) los tiempos de recombinación son mucho más largos, llegando incluso a ser mayores que el tiempo de pérdida de correlación del dipolo. Con este grado de acoplamiento tan bajo y cuando la carga del emisor es menor que 3, en toda la historia de simulación sólo se observan unas pocas recombinaciones, siendo estas insuficientes para poder hacer una estadística fiable. En los otros dos casos, emisores con carga 3 y 4, los histogramas que se obtienen son muy ruidosos ya que el número de recombinaciones en ese intervalo temporal sigue siendo pequeño. En estos casos cabe esperar que la anchura por recombinación no tenga mucha influencia en el resultado final de la línea espectral.

La anchura que se deriva de estos tiempos de recombinación dependerá de la temperatura del plasma, ya que la unidad de tiempo utilizada (t_0) depende de esa magnitud. No hay que olvidar que fijado el parámetro de acoplamiento del plasma, una vez fijada la densidad electrónica la temperatura del sistema está unívocamente determinada.

Es importante destacar entonces que el tiempo de recombinación depende únicamente del parámetro de acoplamiento del plasma y de la carga del emisor. En la tabla 5.2 se muestran los valores de ajuste mostrados en las figuras 5.14 y 5.15 correspondientes al tiempo de recombinación τ_r de la fórmula (5.2).

Carga del emisor	Parámetro ρ	τ_r
1	0.64	2145.83
2	0.63	314.26
3	0.62	124.21
4	0.61	6.45
1	1.11	99.90
2	1.09	24.55
3	1.07	11.53
4	1.06	7.21

Tabla 5.2: Estados incluidos en el cálculo

Como ya anunciábamos, el parámetro τ_r da cuenta del tiempo medio de recombinación. Si representamos este valor en función de la carga del emisor observamos que el tiempo de recombinación es proporcional a una potencia de la carga. Y en general, dependerá del grado de acoplamiento del plasma.

En las figuras 5.17 y 5.16 se pueden ver en escala logarítmica la dependencia del tiempo de recombinación con la carga del emisor. En

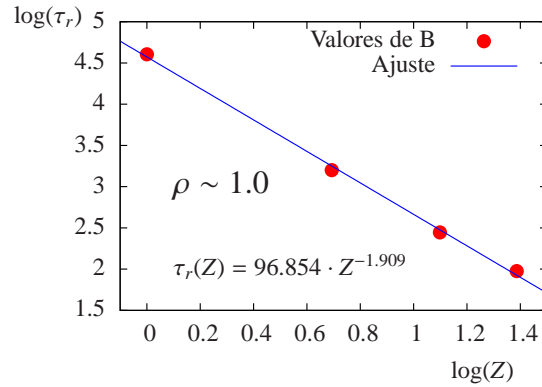


FIGURA 5.16 - Tiempos de recombinación en función de la carga del emisor.

general observamos, como era de esperar, que el tiempo de recombinación es mucho mayor para plasmas más débilmente acoplados. Esto hace que para plasmas fuertemente acoplados el ensanchamiento por recombinación sea el dominante frente al resto, sobre todo cuando la carga del emisor empieza a crecer.

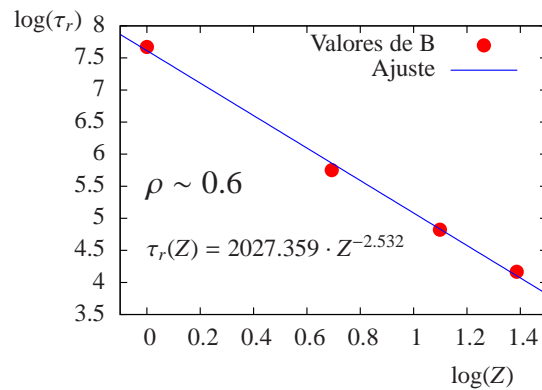


FIGURA 5.17 - Tiempos de recombinación en función de la carga del emisor.

La dependencia con la carga del emisor parece estar en torno a Z^{-2} , aunque debido a escasez de casos esta información no es suficiente para

establecer una relación clara entre el parámetro ρ , la carga del emisor Z y el tiempo de recombinación. Sería necesario disponer de más casos con diferente parámetro de acoplamiento para poder sacar más información. El motivo de que no se hayan realizado tales cálculos estriba principalmente en la cantidad de tiempo que requieren este tipo de simulaciones.

El efecto que tiene una recombinación en el ensanchamiento de la línea se puede comparar al que tiene una colisión fuerte: ambos sucesos producen una pérdida total de la coherencia. Además ambos procesos siguen la misma ley estadística (5.2), lo que hace que ambos den lugar a líneas con forma lorentziana.

Por lo tanto la anchura que se deriva del tiempo de recombinación (que hemos llamado anchura de recombinación) tiene la misma expresión formal que la correspondiente a las colisiones fuertes. La única diferencia es que donde aparecía la frecuencia de colisiones ahora debe aparecer la frecuencia asociada al tiempo de recombinación, o lo que es lo mismo el inverso del parámetro τ_r de la tabla 5.2.

En el modelo de colisiones fuertes, se suponía que la frecuencia de estas sólo dependía de la carga del emisor a través de la sección eficaz del mismo. Sin embargo ahora, el cálculo de la frecuencia de colisiones recombinantes se ha obtenido directamente de las simulaciones, lo que de manera natural tiene en cuenta las interacciones entre partículas, y que conduce a un resultado totalmente diferente: la anchura de la línea debida a las recombinaciones aumenta al hacerlo la carga del emisor.

Analicemos ahora la estadística de colisiones fuertes en las simulaciones. Para ello hemos calculado el radio de Weisskopf⁸ como se indica en el anexo A, y con ese valor hemos extraído de las simulaciones el tiempo entre colisiones fuertes, o lo que es lo mismo, la frecuencia de colisiones fuertes.

El primer resultado interesante que hemos encontrado es que en el momento en el que empieza a haber recombinaciones (en cualquiera de los casos estudiados con $\rho = 0.6$ o $\rho = 1.0$), no detectamos ninguna colisión fuerte. Es importante resaltar que el análisis de las colisiones fuertes se hace ya sobre las secuencias filtradas, donde se han eliminado las partículas atrapadas. Esto significa que a partir de un cierto grado de acoplamiento del plasma, toda colisión fuerte (cuyo parámetro de impacto es mejor que el radio de Weisskopf) es una colisión recombinante.

Analicemos que sucede con un grado de acoplamiento más bajo ($\rho \approx 0.3$). Para carga 1 y 2, en todo el tiempo de simulación no se

⁸Es importante tener en cuenta que la dependencia de Z^{-2} que introduce la sección eficaz del emisor ya está incluida en el cálculo del radio de Weisskopf

detectan prácticamente ninguna recombinación, y además, el tiempo entre colisiones fuertes (que se dan con mucha más frecuencia que las recombinaciones) es tan grande que todo el tiempo de la simulación no es suficiente para hacer poder hacer una estadística adecuada. Con ese mismo ρ , cuando el emisor tiene carga 3 y 4, las recombinaciones empiezan a ser importantes, y al igual que sucedía con los plasmas más acoplados, la tasa de colisiones fuertes cae a cero, de nuevo toda colisión fuerte es recombinante.

Aunque estos dos fenómenos no tiene por que tener la misma dependencia con ρ y con Z , ambos dan lugar al mismo tipo de ensanchamiento, que viene dado por la estadística del fenómeno que produce la pérdida total de coherencia (bien sean las colisiones fuertes o las recombinaciones). Tanto la frecuencia de colisiones fuertes como la de recombinaciones dependen fuertemente de la carga del emisor, más allá de la dependencia que introduce la matriz R .

Podemos decir entonces que la frecuencia a la que se rompe la correlación del emisor (bien sea por colisiones fuertes o por recombinación) tiene una dependencia con Z mucho más complicada que la que introduce la matriz R del emisor. Lo que hace que en general, la anchura de la línea no escale sencillamente como lo hace la sección eficaz, incluso en el caso en el que la anchura de recombinación fuera despreciable.

5.3.3. Resultados

Una vez seleccionados los campos válidos se ha procedido al cálculo de las líneas espectrales correspondientes a la transición $3s - 3p$ descrita en esta misma sección. Por un lado, para los plasmas con un grado de acoplamiento más alto ($\rho \sim 0.6$ y $\rho \sim 1.0$) se han calculado las líneas de cada una de las especies para densidades de $10^{22}m^{-3}$, $10^{23}m^{-3}$, $10^{24}m^{-3}$ y $10^{25}m^{-3}$. Una vez fijadas las densidades las temperaturas vienen fijadas por el parámetro ρ del plasma. Como los plasmas tienen aproximadamente el mismo ρ , esto nos permitirá estudiar el escalado con Z en esta serie isoelectrónica, ya que las condiciones físicas son las mismas para cada una de las líneas.⁹ Por otro lado, con los plasmas con un grado de acoplamiento bajo ($\rho \sim 0.3$) se intentarán reproducir las condiciones experimentales de los datos disponibles en la bibliografía, para posteriormente comparar los resultados.

A diferencia de lo que sucede con los cálculos de partículas independientes, aunque el perfil obtenido fuera lorentziano, y la función de

⁹Las pequeñas diferencias en ρ se verán reflejadas en la temperatura, la cual no influye demasiado en el resultado.

correlación una exponencial decreciente, no es posible simular sólo el primer tramo de la función de autocorrelación y después hacer un ajuste. Esto se debe a la anchura de recombinación, ya que para ver que influencia tiene sobre la línea es necesario hacer el cálculo completo y comprobar si antes de que la función de correlación haya caído a cero ha habido alguna recombinación. Esto, unido al alto coste computacional de la dinámica molecular impide hacer un muestreo tan grande como se hacía entonces. El resultado son unas funciones de correlación algo más ruidosas, y por consiguiente un error mayor en el resultado. A pesar de esto, y debido a que los perfiles que se obtienen son en la mayoría de los casos funciones prácticamente lorentzianas, el valor de la anchura a altura mitad que se obtiene es bastante fiable.

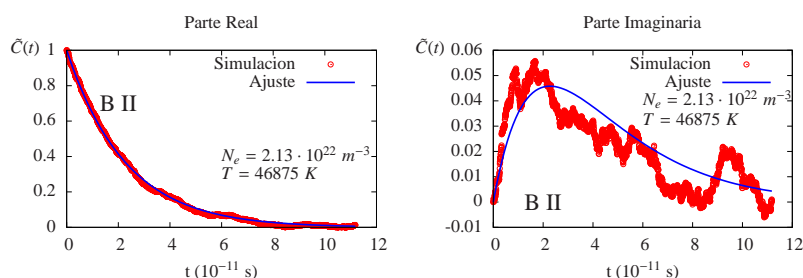


FIGURA 5.18 - Boro II. Función de correlación compleja obtenida en las simulaciones y el ajuste a una exponencial compleja.

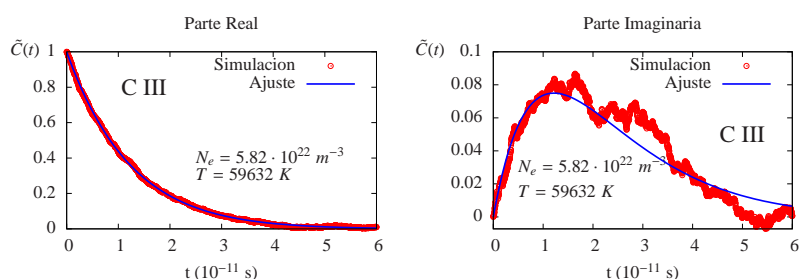


FIGURA 5.19 - Carbono III. Función de correlación compleja obtenida en las simulaciones y el ajuste a una exponencial compleja.

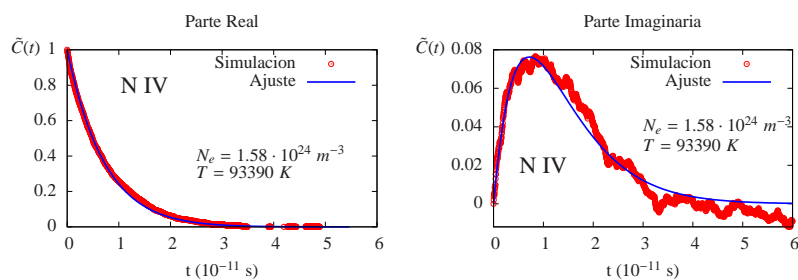


FIGURA 5.20 - Nitrógeno IV. Función de correlación compleja obtenida en las simulaciones y el ajuste a una exponencial compleja.

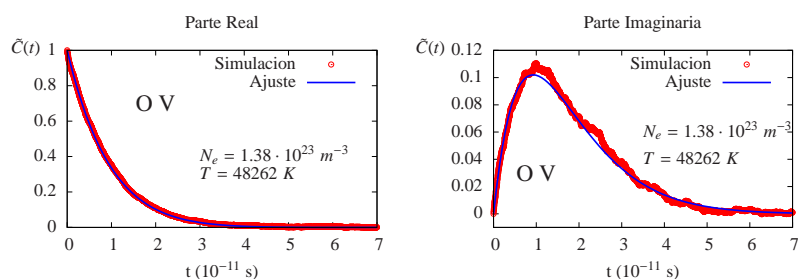


FIGURA 5.21 - Oxígeno V. Función de correlación compleja obtenida en las simulaciones y el ajuste a una exponencial compleja.

En las figuras 5.18 a 5.21 se han dibujado las funciones de correlación complejas (ver eq. (2.88)) obtenidas en las simulaciones para algunos de los casos correspondientes a un grado de acoplamiento más bajo. Se ha fijado la densidad para intentar reproducir las condiciones experimentales. Junto los datos de las simulaciones se ha dibujado el mejor ajuste a una exponencial compleja (forma funcional de la función de correlación si el perfil sólo se ha visto afectado por fenómenos de impacto o de recombinación). En primer lugar se puede observar que las curvas de la simulación tienen bastante más ruido que las obtenidas mediante la técnica de partículas independientes, sobre todo en la parte imaginaria. Más allá de eso, se comprueba que para estas condiciones el perfil espectral se ajusta perfectamente a una lorentziana (su función de correlación es una exponencial), lo que significa que los fenómenos de ensanchamien-

to debidos a la estadística de campo son despreciables; sólo intervienen fenómenos de impacto y de recombinación.

En los casos con un parámetro de acoplamiento más alto la anchura de recombinación empieza a ser ya notable, lo que hace que para la misma longitud de campo simulado, el número de muestras de la función de correlación sea mayor. Además la situación cambia radicalmente, ya que ahora el ensanchamiento de la línea no se debe únicamente a fenómenos de impacto, sino que el campo cuasi estático empieza a tener importancia, sobre todo en los casos de más alta densidad.

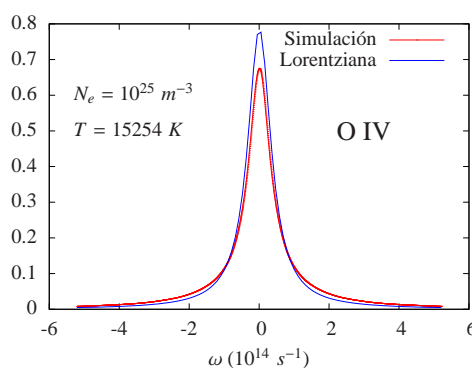


FIGURA 5.22 - Perfil espectral de la transición $1s^2 2s 3s J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p; J = 0$ del O V. En rojo el resultado de la simulación y en azul un perfil lorentziano de la misma anchura que el experimental. Ambas curvas están normalizadas en área.

En consecuencia no es posible ajustar la función de correlación a una sola exponencial compleja (si bien el ajuste no es demasiado malo para los casos de más baja densidad), sino que su forma es algo más compleja. El perfil resultante ya no es una lorentziana perfecta, sino que está “deformado” por el efecto de la estadística de campos. Por este motivo en estos casos vamos a utilizar la función de correlación tal y como se obtiene de la simulación, sin hacer ningún ajuste, y una vez obtenido el perfil de la línea espectral calcularemos su anchura a altura mitad para poder evaluar luego el escalado con Z . En las figuras 5.22 y 5.23 se muestran como ejemplo dos líneas espectrales del B II y del O V, para cada una de ellas se ha dibujado el resultado de la simulación, junto con un perfil lorentziano de la misma anchura que el perfil simulado. Como se puede observar, el perfil obtenido en las simulaciones no es

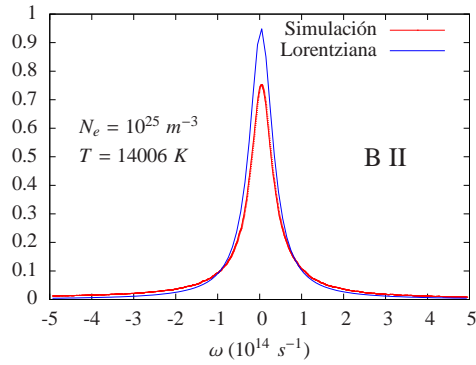


FIGURA 5.23 - Perfil espectral de la transición $1s^2 2s 3s J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p; J = 0$ del O V. En rojo el resultado de la simulación y en azul un perfil lorentziano de la misma anchura que el experimental. Ambas curvas están normalizadas en área.

ciertamente una lorentziana, aunque su forma no tiene nada de particular y se asemeja bastante a una lorentziana. Es por ello que a la hora de dar los resultados obtenidos nos limitaremos únicamente a dar la anchura a altura mitad y el desplazamiento de la línea. Estos se pueden consultar en el anexo H.

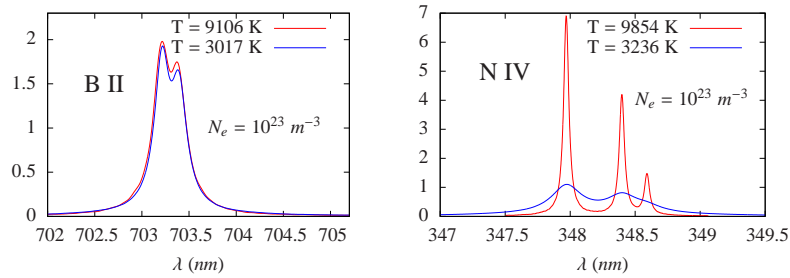


FIGURA 5.24 - Perfil completo de la transición $1s^2 2s 3s \rightarrow 1s^2 2s 3p$ del Boro II y del Nitrógeno IV para una densidad de $N_e = 10^{23} m^{-3}$ y dos temperaturas diferentes.

A modo de ejemplo se ha dibujado (figuras 5.24 y 5.25) el espectro completo de la transición $1s^2 2s 3s \rightarrow 1s^2 2s 3p$ para el Nitrógeno IV y el Boro II para dos valores de densidad diferentes y dos valores del pará-

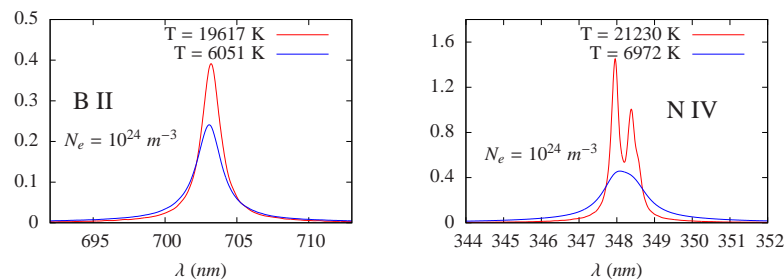


FIGURA 5.25 - Perfil completo de la transición $1s^2 2s 3s \rightarrow 1s^2 2s 3p$ del Boro II y del Nitrógeno IV para una densidad de $N_e = 10^{24} \text{ m}^{-3}$ y dos temperaturas diferentes.

metro de acoplamiento (o lo que es lo mismo, diferente temperatura).

En la figura 5.24 se puede ver como la temperatura apenas afecta al espectro del B II, mientras que la misma variación de temperatura supone un cambio radical en el espectro del N IV. Esto se debe principalmente a que las líneas del Nitrógeno son mucho más estrechas, y en esos casos el tiempo de correlación del dipolo es mayor que el tiempo de recombinación, lo que hace que la anchura de recombinación, que depende fuertemente del grado de acoplamiento, juegue un papel dominante. Por el contrario, en el caso del Boro el tiempo de recombinación es mucho mayor que el tiempo de pérdida de coherencia del dipolo, por lo que la anchura de recombinación es despreciable frente al resto de fenómenos. La diferencia que se observa entre los dos espectros del Boro para diferentes temperaturas se debe principalmente al cambio de la frecuencia de colisiones fuertes, mientras que en el Nitrógeno es causada principalmente por las variaciones de la anchura de recombinación con el grado de acoplamiento del plasma.

5.4. Comparación con los datos experimentales

Con el fin de comparar los resultados de las simulaciones con los datos experimentales disponibles se han llevado a cabo una serie de cálculos que intentan reproducir las mismas condiciones que los experimentos. Para el caso de las simulaciones llevados a cabo mediante la técnica de partículas independientes se han calculado todas las líneas de las que se han encontrado datos experimentales, mientras que para los cálculos realizados mediante Dinámica Molecular, únicamente se han calculado

algunos de los casos. Esto se debe principalmente al alto coste computacional que tiene la técnica de dinámica molecular, lo que ha limitado el número de casos abordados. Se ha simulado un solo parámetro de acoplamiento por especie atómica, y luego se ha utilizado esa simulación para reproducir los resultados para diferentes densidades, que se han fijado de acuerdo a los datos experimentales. Con esas densidades, dado que el parámetro de acoplamiento viene dado por la simulación, se desprende una temperatura, que en general es similar a la de los experimentos aunque no es exactamente la misma. Esto no tiene demasiada importancia ya que en general la temperatura no influye demasiado en la anchura de la línea. Una posibilidad sería corregir los valores de la anchura y el desplazamiento de acuerdo a la temperatura experimental suponiendo una cierta dependencia con la temperatura ¹⁰. Sin embargo para hacer esto es necesario adoptar un modelo (por ejemplo el de colisiones fuertes), y precisamente eso es lo que queremos evitar, hacer suposiciones a priori. Por lo tanto, obviaremos esas pequeñas discrepancias en la temperatura, las cuales además provocan cambios en la anchura que entran dentro del ruido de las simulaciones. En cualquier caso los valores exactos temperatura y densidad de las simulaciones de dinámica molecular se pueden consultar en el anexo H.

Por otro lado los cálculos de dinámica molecular tiene muchas menos muestras que los de partículas independientes, por lo que cabe esperar que la dispersión en los resultados sea mayor en los en estos resultados que en los obtenidos mediante la técnica de partículas independientes.

En general, los plasmas en los que se han medido estas líneas experimentalmente son débilmente acoplados. El parámetro de acoplamiento varía entre 0.2 y 0.3. Esto hace que el tiempo de recombinación, en general, sea mayor que el tiempo de pérdida de correlación del dipolo. Esto implica que en estos casos la anchura de recombinación no tiene una gran influencia. Sin embargo, los resultados de partículas independientes y los de los cálculos de dinámica molecular son claramente diferentes. Esto se debe, naturalmente, a la dinámica de las partículas inducida por la interacción entre ellas. En concreto al aumento de las colisiones fuertes de los electrones que sufre el emisor por culpa de la atracción entre ellos. La estadística de campo también cambia, pero en estas líneas, como ya vimos en los primeros capítulos, el efecto dominante es el de las colisiones y la estadística de campo apenas tiene ningún efecto.

En la figura 5.26 podemos observar los resultados de las simulacio-

¹⁰Esto se hace habitualmente cuando se quiere ver la variación de la anchura en una serie isoelectrónica a partir de las medidas experimentales, ya que las condiciones son las mismas para todas las especies

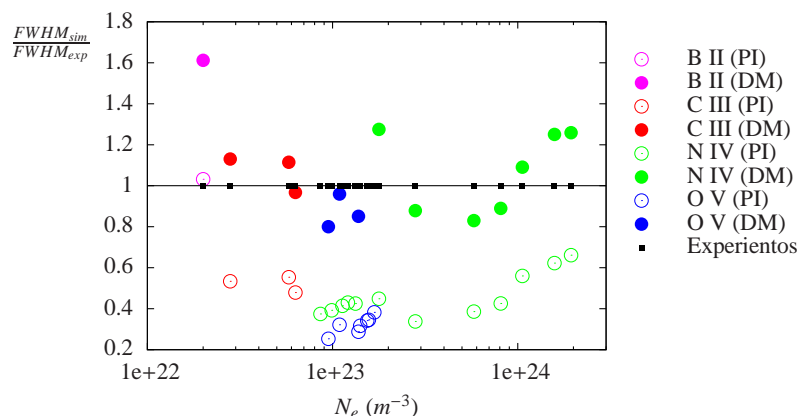


FIGURA 5.26 - Comparación de la anchura a altura mitad obtenida en las simulaciones ($FWHM_{sim}$) con la obtenida en las medidas experimentales ($FWHM_{exp}$) para diferentes elementos de la serie isoelectrónica del Berilio. Se representa el cociente entre el resultado de las simulaciones y el dato experimental. Con círculos huecos los resultados del cálculo de Partículas Independientes (PI) y con círculos rellenos los de Dinámica Molecular (DM). Las medidas experimentales se han obtenido de Purić *et al* (1996), Milosavljević and Djenize (1998), Wrubel *et al* (1998) y Blagojevic *et al* (1999).

nes comparados con algunas de las medidas experimentales encontradas en la bibliografía. Lo que se ha hecho ha sido representar el cociente entre valor de la anchura a altura mitad obtenido en las simulaciones y el obtenido experimentalmente. De esta manera podemos observar directamente el porcentaje de dispersión entre las medidas experimentales y las simulaciones. En lo que respecta a los cálculos de partículas independientes, observamos que sistemáticamente se obtienen valores de la anchura a altura mitad menores que los medidos experimentalmente, exceptuando el caso del Boro, cuyo valor experimental coincide con el obtenido mediante las simulaciones de partículas independientes. Teniendo en cuenta que todos los emisores son cargados, es comprensible que la anchura de las líneas obtenidas mediante las simulaciones de partículas independientes sea menor que la experimental, ya que al no tener en cuenta las interacciones entre partículas –especialmente entre el emisor y los perturbadores– estamos infravalorando el campo que ve el emisor, lo que se traduce en líneas más estrechas. En particular, en estas líneas lo que sucede es que la frecuencia de colisiones entre el emisor cargado y

los electrones es mucho mayor en la realidad (cuando existe una interacción entre el emisor y los electrones) que cuando se hace la suposición de que las partículas se mueven como si fueran independientes –simulación de partículas independientes–. Esto no es nada nuevo, los resultados del cálculo de partículas independientes pierden fiabilidad a medida que el plasma se vuelve más fuertemente acoplado o a medida que la carga del emisor aumenta.

En cuanto a los resultados obtenidos mediante la técnica de dinámica molecular, que es lo realmente novedoso en este trabajo, observamos como los valores de las anchuras se aproximan mucho más a los valores experimentales. En general podemos decir que los resultados de la dinámica molecular reproducen bastante bien los datos experimentales. Las diferencias entre las simulaciones y los experimentos son como máximo del 20 %, discrepancias que se pueden explicar si se tiene en cuenta el ruido de las simulaciones –debido a la imposibilidad de hacer un mayor número de muestras– y el error propio de las densidades y temperaturas experimentales (así como las diferencias entre las temperaturas experimentales y las de las simulaciones). Es importante tener en cuenta que en los cálculos de dinámica molecular hay dos fenómenos que no aparecen en la técnica de partículas independientes (ni tampoco en los modelos teóricos), y que son los responsables del mejor acuerdo con los datos experimentales: por un lado la inclusión de la anchura de recombinación y por otro el hecho de que la frecuencia de colisiones depende no sólo del parámetro de acoplamiento del plasma sino también de la carga del emisor. Este hecho, como veremos a continuación podría ser el causante de las discrepancias entre los modelos teóricos y las medidas experimentales a la hora de analizar el reescalado con Z .

5.5. Escalado con Z

El principal motivo de todo el estudio que hemos realizado es precisamente este, ver cómo depende la anchura de una determinada transición de la carga del emisor. Como ya adelantábamos vamos a estudiar este fenómeno en la transición $3s - 3p$ de la serie isoelectrónica del Berilio. Los datos experimentales que se han utilizado en la sección anterior forman parte de esta serie y habitualmente se utilizan para analizar este escalado con Z . Sin embargo, las condiciones de densidad y temperatura a la que se han medido los espectros de cada uno de los elementos no son las mismas, lo que hace que para observar únicamente la dependencia con Z sea necesario suponer una cierta dependencia de la anchura con la

densidad y la temperatura y reescalar los resultados.

En este tipo de transiciones, como ya adelantábamos y hemos comprobado en capítulos anteriores, la anchura se debe principalmente a las colisiones fuertes. En ese caso, el modelo predice una dependencia lineal con la sección eficaz del emisor, que aproximadamente depende como $1/Z^2$, lo que hace que según el modelo teórico la anchura de la línea sea proporcional a $1/Z^2$. Cuando se compara esta predicción con los datos experimentales se comprueba que esto no es así y que el exponente de la carga efectiva del emisor ¹¹ es menor que 2. Como se vio en el capítulo 2 en la sección 3, la anchura de la línea es básicamente el producto de la frecuencia de colisiones fuertes por la sección eficaz. Al surgir esta discrepancia la mayoría de los intentos de mejorar el modelo teórico se centraron en considerar cálculos más complejos, y en teoría más realistas, de la sección eficaz (Elabidi *et al*, 2004). Esta idea, si bien puede ser interesante en cuanto a la obtención de valores más exactos de la sección eficaz no tiene mucho sentido dentro de la aproximación de colisiones fuertes. Hay que darse cuenta que el refinamiento del cálculo de la sección eficaz se hace bajo la aproximación de impacto, la que supone que sólo aquellos electrones que colisionan "de lleno" con el emisor tienen algún efecto en el ensanchamiento de la línea. Cuando esto sucede, poco importa el detalle de la sección eficaz, ya que la correlación de la emisión se rompe por completo. Bien es verdad que un cálculo más detallado puede dar valores ligeramente diferentes de la sección eficaz, lo que puede influir en la anchura final, sin embargo hay otras consideraciones que no se tienen en cuenta en el modelo y que pueden dar lugar a discrepancias mucho mayores. Por ejemplo, la anchura de recombinación o la influencia de la carga del emisor en la tasa de colisiones.

Como veremos, estos dos fenómenos pueden tener un peso dominante en el ensanchamiento de la línea, y ninguno de ellos se considera en los llamados cálculos cuánticos (y por supuesto tampoco en los semi-clásicos). Por lo tanto, a nuestro parecer, no tiene mucho sentido intentar refinar el cálculo de la sección eficaz incluyendo efectos cuánticos sin antes tener en cuenta la tasa de recombinaciones o la influencia de la carga del emisor en la dinámica de los campos (que pueden tener un efecto mucho mayor en la anchura de la línea).

En las siguientes páginas analizaremos cómo influyen estos dos fenómenos en la anchura de las líneas analizando el escalado con Z. Para ello compararemos lo que sucede cuando los cálculos se hacen mediante la

¹¹Cuando se habla del escalado de la anchura con la carga del emisor se utiliza Z para denotar la carga neta del emisor más uno, de esta manera, un emisor de carga uno tendrá un $Z=2$, uno de carga dos $Z=3$ y así sucesivamente.

técnica de partículas independientes y cuando se llevan a cabo mediante dinámica molecular (es decir, cuando se tienen en cuenta la anchura de recombinación y la interacción entre las partículas). Veremos en primer lugar los cálculos hechos con partículas independientes y luego explicaremos el resultado de la dinámica molecular, que presenta resultados mucho más interesantes.

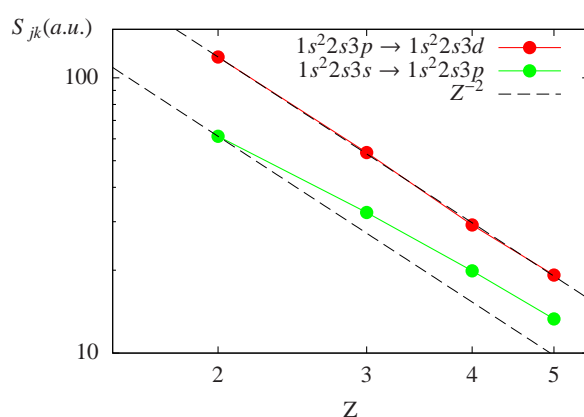


FIGURA 5.27 - Dependencia de la sección eficaz de las transiciones $1s^2 2s 3p \rightarrow 1s^2 2s 3d$ y $1s^2 2s 3s \rightarrow 1s^2 2s 3p$ con la carga efectiva del emisor.

Como ya hemos dicho, según el modelo de impacto la anchura de la línea es proporcional a la sección eficaz, y esta depende (en teoría) de Z como Z^{-2} . Por lo tanto, antes de analizar la dependencia de la anchura con Z vamos a ver cómo varía la sección eficaz. Además, en los cálculos que hemos realizado intervienen dos secciones eficaces, por un lado la de la transición $1s^2 2s 3d \rightarrow 1s^2 2s 3p$ y por otro la de $1s^2 2s 3p \rightarrow 1s^2 2s 3s$. En la figura 5.27 se han dibujado los valores de las secciones eficaces de estas dos transiciones para todos los valores de Z estudiados. En primer lugar observamos que en la transición $p-d$ se observa un acuerdo perfecto entre la predicción del modelo (Z^{-2}) y los valores aportados por el NIST (NIST database, 2015). Sin embargo en la transición $s-p$ los valores que se suministran no siguen exactamente la tendencia marcada por el modelo. Sin embargo, dado que la sección eficaz de la transición $p-d$ es aproximadamente el doble que la de la $s-p$, será la sección eficaz de la transición $p-d$ la que marque la tendencia de la anchura de la línea. En consecuencia, la suposición de que la sección eficaz depende de la carga

del emisor como Z^{-2} es acertada, y de ahora en adelante analizaremos todos los resultados suponiendo que esto es así.

Conviene resaltar que en todas las condiciones en las que se han hecho las simulaciones se ha comprobado que los tiempos característicos cumplen la hipótesis exigida por la aproximación de impacto ($\tau_d \gg \tau_c$). Como ya vimos en el capítulo 3, cuando esto sucede la influencia del campo cuasi estático es despreciable, por lo que asumiremos que el ensanchamiento de la línea se debe exclusivamente a fenómenos de impacto (o a procesos de recombinación).

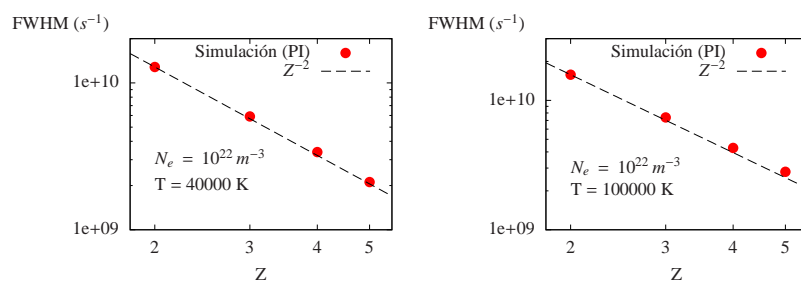


FIGURA 5.28 - Partículas independientes. Anchura a altura mitad de las componentes de la transición $1s^2 2s 3p \ J = 2 \rightarrow 1s^2 2s 3s \ J = 1$ para diferentes elementos de la serie isoelectrónica del Berilio con una densidad de electrones de 10^{22} m^{-3} y unas temperaturas de 40000 K y 100000 K.

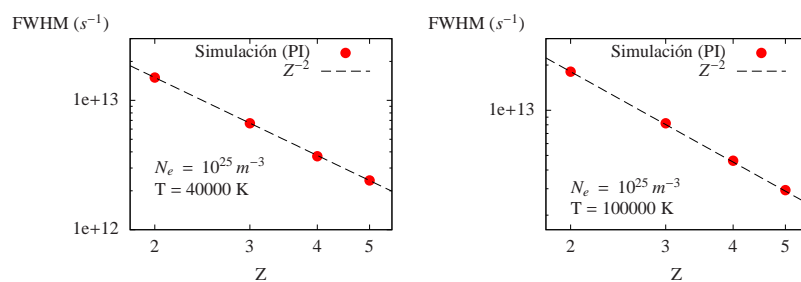


FIGURA 5.29 - Misma figura que la 5.28 pero para una densidad electrónica de 10^{25} m^{-3} .

Analicemos lo que sucede en el cálculo con partículas independientes. En estos casos no existe la anchura de recombinación (al no haber inter-

acciones entre iones y electrones, estos no se atrapan) y la dinámica del campo sólo depende del parámetro de acoplamiento del plasma y no de la carga del emisor. En las figuras 5.28 y 5.29 se puede observar la anchura de una de las componentes de la transición $1s^2 2s 3p \rightarrow 1s^2 2s 3s$ (las tres componentes tienen la misma anchura) a lo largo de los primeros cuatro elementos de la serie isoelectrónica del Berilio. Se han dibujado cuatro casos diferentes, dos densidades y dos temperaturas. En los cuatro casos se puede comprobar que la anchura de la línea escala con Z como predicen los modelos de impacto, como Z^{-2} . Esto nos confirma, como ya habíamos anticipado, que la anchura de la línea está dominada, por el ensanchamiento de impacto. También habíamos visto que la contribución de las colisiones fuertes y débiles era prácticamente la misma. El hecho de que la anchura escale perfectamente con Z^{-2} nos hace pensar que en el modelo de colisiones débiles, la transformada de Fourier no introduce grandes cambios en la dependencia con Z , y la anchura de este modelo también escala como Z^{-2} . Es importante darse de que el cálculo se ha hecho sin hacer ninguna aproximación, y de modo natural el resultado coincide con las predicciones de los modelos, lo que nos vuelve a ratificar que la aproximación de colisiones fuertes y débiles son bastante acertadas en estas líneas. Sin embargo, como ya dijimos estos resultados no coinciden con los datos experimentales, por lo que debe haber algo más que no estamos teniendo en cuenta. Los datos numéricos representados en las figuras 5.28 y 5.29 se pueden encontrar en el anexo F.

Pasemos a los cálculos llevados a cabo mediante dinámica molecular. Utilizando los plasmas equilibrados con parámetros de acoplamiento $\rho \sim 1.0$ y $\rho \sim 0.6$, hemos calculado la serie isoelectrónica del Berilio para cuatro densidades diferentes, lo que nos da dos casos de temperatura para cada densidad. Como ya hemos dicho, en todos los casos se puede considerar que el mecanismo de ensanchamiento dominante es el de impacto, incluso en los casos de más alta densidad. En general los casos que se han simulado son bastante extremos en cuanto a densidades y temperaturas se refiere. Hay que tener en cuenta que todavía a día de hoy los cálculos de dinámica molecular requiere mucho tiempo de cómputo, lo que hace muy difícil el cálculo de líneas en las que el tiempo de correlación del dipolo sea muy largo (líneas muy estrechas que requieren secuencias de campo muy largas). Además de esto, debido a la arquitectura de los dispositivos en los que se ejecuta nuestro software (GPU) la memoria de la que disponemos es bastante limitada, lo que limita el número de partículas a simular, y a la larga la carga de los iones simulados. En cualquier caso lo que se pretende poner de manifiesto es la influencia de la carga del emisor en la anchura de las líneas, más allá

de la variación de la sección eficaz.

Conviene recordar que el tiempo típico de recombinación, y por lo tanto la anchura de recombinación depende sólo del parámetro de acoplamiento y de la carga del emisor. Por otro lado, a medida que aumentamos la densidad electrónica, la anchura también lo hace, por lo que para densidades suficientemente altas la anchura de recombinación puede llegar a ser muy pequeña respecto a la producida por el resto de fenómenos, en el caso extremo tendríamos el ensanchamiento cuasi estático. Por otro lado, cuando las densidades electrónicas son bajas, la anchura debida a las colisiones con los electrones es muy pequeña comparada con la anchura de recombinación, por lo que se puede considerar que toda la anchura de la línea se debe a las recombinaciones. Si pensamos en la coherencia de la emisión, cuando el tiempo de recombinación es mayor que el tiempo de coherencia típico (considerando el efecto de los campos creados por los perturbadores) entonces la anchura de recombinación es despreciable. Y viceversa, cuando el tiempo de recombinación es menor que el tiempo de coherencia la anchura está dominada por las recombinaciones.

En las figuras 5.30 a 5.33 se muestra la evolución de la anchura a altura mitad para diferentes densidades y para los dos parámetros de acoplamiento simulados ¹². Junto con los datos de las simulaciones se ha dibujado la tendencia que predice el modelo de impacto (asumiendo que la frecuencia de colisiones fuertes no depende de la carga del emisor y que no existe anchura de recombinación).

Lo primero que llama la atención es que en la mayoría de las figuras, y de manera más acusada para $\rho = 1.0$, la anchura aumenta a medida que lo hace el la carga del emisor. El caso más extremo lo tenemos en la figura 5.30 para $T = 1500$ K. En este caso el tiempo de recombinación es siempre menor que el tiempo de pérdida de correlación por colisiones, por lo que la anchura se debe únicamente al efecto de las recombinaciones. Si recordamos la figura 5.16 en este mismo capítulo, veíamos que el tiempo de recombinación disminuía a medida que aumentaba la carga del emisor, lo que se traduce en que la anchura aumentará como el inverso de este tiempo cuando la carga aumenta.

¹²No se han estudiado el escalado con Z en los plasmas simulados para recrear las condiciones experimentales debido a que no tienen el mismo parámetro ρ .

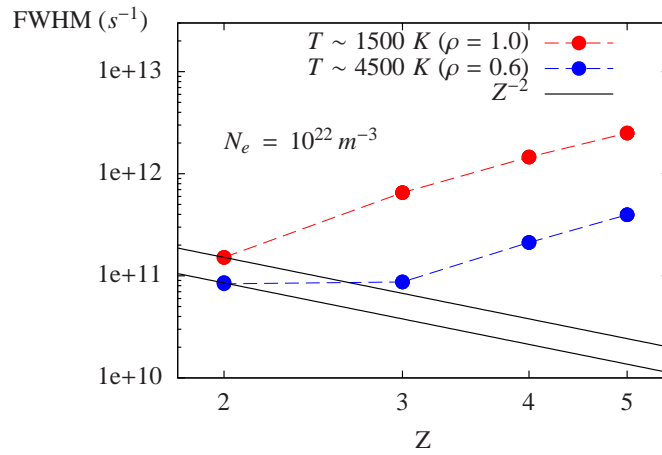


FIGURA 5.30 - Dinámica Molecular. Anchura a altura mitad de las componentes de la transición $1s^2 2s 3p \rightarrow 1s^2 2s 3s$ para diferentes elementos de la serie isoelectrónica del Berilio con una densidad de $10^{22} m^{-3}$ y dos temperaturas diferentes.

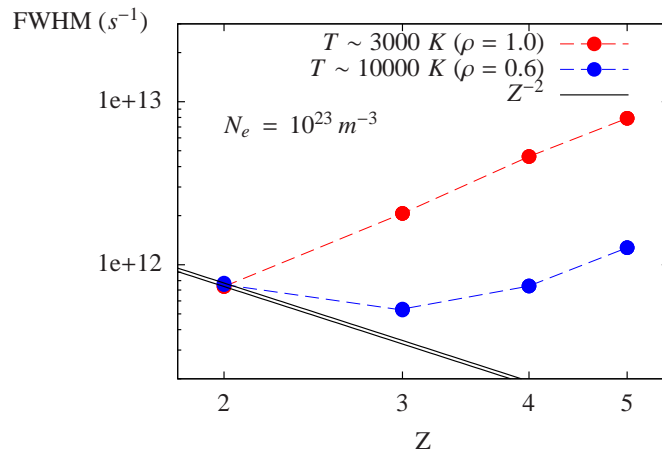


FIGURA 5.31 - Misma figura que la 5.30 para una densidad de $10^{23} m^{-3}$

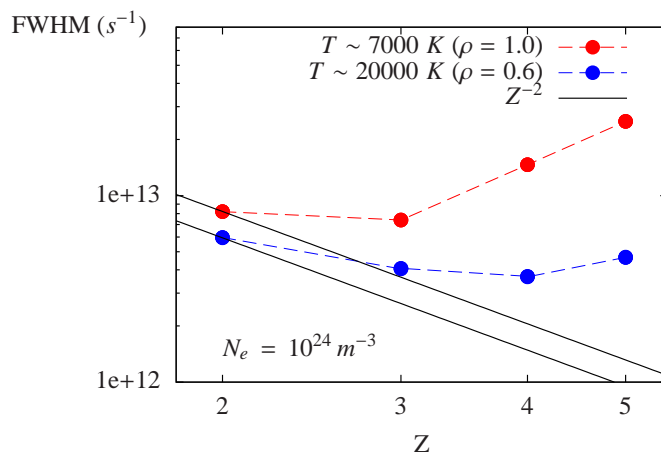


FIGURA 5.32 - Misma figura que la 5.31 para una densidad de 10^{24} m^{-3}

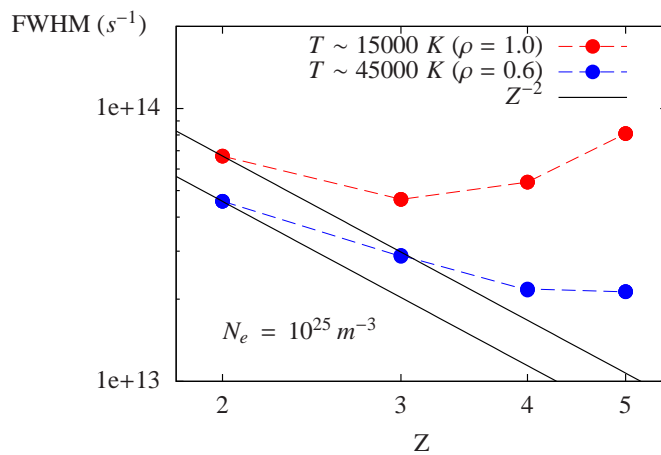


FIGURA 5.33 - Misma figura que la 5.31 para una densidad de 10^{25} m^{-3}

En la figura 5.31, la densidad es algo mayor, sin embargo en el caso con un parámetro de acoplamiento mayor la anchura por recombinación sigue siendo dominante en todos los casos. Por el contrario, con un grado de acoplamiento menor, se observa como la anchura presenta dos tendencias, primero disminuye (supuestamente debido a que para esa carga del emisor la anchura por colisiones juega un papel importante) para luego aumentar con la carga (cuando el emisor tiene una carga suficientemente grande, la anchura de recombinación domina a la anchura de colisiones. Para densidades mayores (figuras 5.32 y 5.33, podemos observar el cambio de tendencia incluso en los plasmas con un grado de acoplamiento de $\rho = 1.0$. En general en estos casos la anchura del espectro en los elementos calculados tiene contribución de los dos fenómenos, la anchura por colisiones y la anchura de recombinación.

Asumiendo que la anchura de la línea se debe únicamente a las colisiones fuertes y la anchura de recombinación, el modelo de impacto falla en dos aspectos cruciales. En primer lugar no tiene en cuenta la anchura de recombinación, lo que como hemos visto es dominante en muchos casos. Y en segundo lugar, supone que la frecuencia de colisiones fuertes no depende ni del grado de acoplamiento del plasma ni de la carga del emisor. Hay que considerar también el hecho de que la carga del emisor también modifica la frecuencia de colisiones. Es bastante lógico pensar que un ión de carga cuatro atraerá más a los electrones que uno de carga uno, y por lo tanto la tasa de colisiones con ellos será mayor. Este efecto, junto con la anchura de recombinación, explica perfectamente las discrepancias entre los resultados de dinámica molecular y los de partículas independientes.

6

Conclusiones

A la vista de todos los resultados que se han expuesto en este trabajo, podemos concluir lo siguiente:

En cuanto al modelo de colisiones débiles, hemos comprobado con la ayuda de un campo ficticio generado mediante un proceso ARMA que las predicciones del modelo coinciden con las del cálculo completo (siempre que la función de correlación del campo sea conocida y su integral no diverja y las hipótesis del modelo se cumplan). En estos casos la anchura de la línea será proporcional a la matriz R^2 (que es proporcional a Z^{-1}), aunque puede tener cierta influencia de la transformada de Fourier que aparece en la expresión de anchura, lo que podría complicar la dependencia con Z .

El modelo de colisiones fuertes no presenta ningún problema matemático. El único punto débil es la determinación del radio de Weisskopf, que presenta cierta ambigüedad, y del cuál depende el resultado. Sin embargo, esta aproximación si que nos da (independientemente del valor del radio de Weisskopf) la dependencia de la anchura con la carga del emisor, y es del tipo Z^{-2} . El principal problema es que este modelo supone que la frecuencia de colisiones fuertes sólo depende de la carga del emisor a través de la matriz R . Como hemos visto, esto no es cierto en los casos que nos ocupan. La frecuencia de colisiones fuertes depende del grado de acoplamiento del plasma y de la carga del emisor (más allá de la dependencia de la matriz R).

Los cálculos llevados a cabo mediante la técnica de simulación de partículas independientes (cálculo completo sin interacción entre las partículas) muestran que las funciones de correlación de todas las líneas estudiadas son de tipo exponencial. Lo que implica que la anchura ha sido producida por fenómenos de impacto. En todos los casos cada una de las componentes de estructura fina de la transición estudiada se aproxima muy bien a una lorentziana. Por lo tanto, en todos los casos podemos

considerar despreciable la anchura debida a la estadística de campo (cuasi estática). Además de esto, hemos comprobado que la anchura se debe prácticamente sólo al efecto de los electrones y además que las colisiones fuertes son las responsables de aproximadamente un 50 % de la anchura de la línea (teniendo en cuenta que la elección del radio de Weisskopf no es única).

Los cálculos de Dinámica Molecular (con interacción) también muestran funciones de correlación de tipo exponencial. Sin embargo aparece un fenómeno de ensanchamiento nuevo, que en muchos casos es el dominante: La anchura por recombinaciones. Cuando el emisor captura un electrón, su estructura cambia y por lo tanto la línea estudiada desaparece. Esto se ve reflejado en la función de correlación como una pérdida brusca de correlación. Este fenómeno contribuye a la anchura de la línea, que en los casos que hemos estudiado será la contribución de tres fenómenos, las colisiones fuertes, las débiles y las recombinaciones.

En estos cálculos de Dinámica Molecular, hemos estudiado la frecuencia de recombinación y de colisiones fuertes. Se ha comprobado que a medida que la carga del emisor aumenta y los plasmas están más acoplados, la frecuencia de recombinación aumenta y por lo tanto también la anchura asociada a este fenómeno. La frecuencia de recombinación parece tener una dependencia potencial con la carga del emisor, sin embargo no se disponen de suficientes datos para establecer una dependencia clara con el parámetro de acoplamiento del plasma. Desarrollar un modelo analítico de este fenómeno no es nada trivial, ya que el fenómeno de atrapamiento de partículas es un fenómeno colectivo muy difícil de modelar en el caso de plasmas con iones de diferente carga, como es el caso.

Las colisiones fuertes siguen la misma dinámica que las colisiones recombinantes. Sin embargo, en los casos estudiados, en la mayoría de las situaciones la sección eficaz de recombinación es mayor que la de colisión fuerte. Esto quiere decir que toda colisión fuerte es recombinante¹. Solamente para los plasma más débilmente acoplados y para los casos con emisores de carga 1 y 2, la frecuencia de colisiones fuertes es mayor que la de recombinación.

Cuando se comparan las anchuras obtenidas mediante las simulaciones con los resultados experimentales, los resultados de la técnica de Partículas Independientes dan sistemáticamente valores de la anchura menores que los experimentales. Esto es fácilmente explicable conside-

¹Hay que recordar que se considera colisión fuerte a aquellas colisiones que pasan a una distancia del emisor menor que el radio de Weisskopf, el cual depende de la densidad y la temperatura. Aún así para la mayoría de los casos estudiados de densidad y temperatura toda colisión fuerte es recombinante.

rando que esta técnica no tiene en cuenta la carga del emisor, lo que subestima las intensidades de los campos y las colisiones. Por otro lado los resultados obtenidos mediante Dinámica Molecular dan valores de la anchura bastante mayores que los de Partículas Independientes y están en buen acuerdo con los resultados experimentales. Las discrepancias entre los valores de las simulaciones y los experimentales están en torno al 20 %, lo que es razonable si se tiene en cuenta el ruido de las simulaciones (debido a que el número de muestras no es muy grande por el alto coste computacional).

Resumiendo, podemos concluir que los resultados experimentales son reproducibles utilizando la técnica de Dinámica Molecular, mientras que los cálculos de partículas independientes (o el modelo de colisiones fuertes) predicen anchuras mucho menores. Además las simulaciones de partículas independientes (que no tienen en cuenta la interacción entre partículas) dan una dependencia de la anchura de las líneas con Z que coincide con las predicciones del modelo de colisiones fuertes (Z^{-2}). Los cálculos de Dinámica Molecular (mucho más realistas) dan una dependencia con Z mucho más complicada que además depende también de las condiciones del plasma (densidad y temperatura). En cualquier caso, los cálculos de dinámica molecular dan siempre anchuras mayores que los modelos, haciendo que incluso en determinadas circunstancias la anchura llegue a aumentar al aumenta Z .

A la vista de todos estos resultados, todo parece indicar que las discrepancias ente los modelos teóricos y las medidas experimentales se podrían explicar incluyendo la anchura de recombinación y considerando una frecuencia de colisiones fuertes que dependa de la carga del emisor y del grado de acoplamiento del plasma. Lo que se puede lograr, por ejemplo mediante técnicas de simulación de Dinámica Molecular como la que se ha empleado en este trabajo.

6.1. Otros resultados obtenidos en este trabajo

Los resultados de este trabajo no sólo están relacionados con el ensanchamiento de líneas espectrales. Para poder estudiar el ensanchamiento Stark de los espectros de emisores cargados mediante simulaciones por computador ha sido necesario desarrollar una técnica de simulación de Dinámica Molecular capaz de reproducir estas situaciones. En el proceso, se han estudiado diferentes aspectos de estas simulaciones, que si bien algunos de ellos no tienen repercusión en el cálculo de los espectros de este trabajo, son de gran importancia para otro tipo de líneas espectrales

o incluso en otros campos de la física en los que se emplean simulaciones de Dinámica Molecular.

El primer resultado en este sentido es la generalización de la técnica de simulación ya existente (Lara, 2013) para aplicarla a plasmas de más de un componente y con iones de carga mayor que uno. Esta técnica de cálculo ha sido probada y sometida a numerosas pruebas para comprobar su correcto funcionamiento.

En concreto, al igual que ya se ha hecho en anteriores trabajos, me gustaría hacer especial hincapié en el proceso de equilibrado. Al igual que sucedía con los plasma formados sólo con iones de carga uno, el equilibrado es un proceso muy delicado, que requiere mucho tiempo de cálculo. Para optimizar el proceso y para lograr un correcto equilibrado es necesario tener en cuenta algunas ideas.

- Se debe hacer con positrones (misma masa que los electrones) en lugar de con iones. En caso contrario el tiempo de equilibrado es prohibitivo. Incluso así se necesitan del orden de varias decenas de miles de unidades de tiempo de la simulación (más de 10^8 - 10^9 pasos temporales).
- El proceso con termalizado (que mantiene constante la temperatura), ralentiza el proceso y dificulta encontrar cuándo el plasma ha alcanzado el equilibrio.
- La forma más rápida de alcanzar el equilibrio es dejar que el plasma evolucione libremente (más incluso que el método de Metrópolis).

Una vez alcanzado el equilibrio, es necesario escalar los resultados teniendo en cuenta la temperatura final y el número de partículas atrapadas.

Uno de los aspectos en los que las simulaciones de dinámica molecular pueden ser de gran ayuda son las distribuciones de campo. En cuanto a las de alta frecuencia, las obtenidas en la simulación dan un resultado similar al de las teorías de Hooper o APEX. Sin embargo, para reproducir las de baja frecuencia es necesario promediar el campo en el tiempo. El tiempo necesario de promediado para reproducir la distribución de Hooper de baja frecuencia es mucho mayor de lo que se esperaba. De hecho es mayor que el tiempo típico de los iones (para iones de H), lo que contradice la hipótesis de Hooper.

Otro punto importante en el que las simulaciones pueden ser de gran ayuda es el fenómeno de “debilitamiento” del campo (o del potencial). Este efecto se debe a dos fenómenos. Por una lado el apantallamiento del campo iónico debido a los electrones, y por otro al acoplamiento entre

cargas. Ambos fenómenos conducen a un potencial medio, cuyo radio de Debye tendrá contribución de los dos fenómenos. Hemos comprobado que el potencial medio obtenido mediante la fórmula analítica (para iones de carga uno), coincide con el que se obtienen midiéndolo directamente en las simulaciones, con el obtenido a través de la función de distribución radial obtenida mediante HNC y con el potencial medio obtenido a través de la integral de carga.

A

Cálculo numérico del radio de Weisskopf

Es posible calcular el radio de Weisskopf de forma numérica para cada caso particular. Por definición el radio de Weisskopf es el parámetro de impacto de una colisión que provoca un cambio de fase en la emisión de exactamente π . El procedimiento no podría ser más sencillo: Calculamos el cambio de fase que origina una colisión en función de su parámetro de impacto hasta que encontremos el valor adecuado.

Para ello es necesario resolver de manera numérica las ecuaciones (2.2)-(2.4). Los detalles de cómo se hace este cálculo se pueden encontrar en el capítulo 4, donde se describen los detalles del procedimiento, que por otro lado es de sobra conocido.

Calculemos el campo generado por una electrón que moviéndose con velocidad constante v y siguiendo una trayectoria rectilínea tiene un parámetro de impacto b con el emisor. La distancia al cuadrado entre el electrón y el emisor en función del tiempo viene dada por la expresión

$$r^2 = b^2 + (vt + x_0)^2 \quad (\text{A.1})$$

donde x_0 es la posición inicial del electrón respecto al punto de máximo acercamiento (ver figura A.1). El módulo del campo que ve el ión en función del tiempo vendrá dado por

$$|\mathbf{E}(t)| = \frac{1}{b^2 + (vt + x_0)^2} \quad (\text{A.2})$$

En el caso que nos ocupa, podemos prescindir de la componente z y trabajar sólo en el plano x,y .

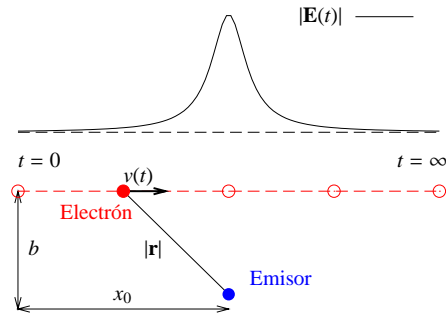


FIGURA A.1 - Esquema de la colisión ente un electrón y un ión y el campo que ve el segundo.

El programa debe encontrar cual es el parámetro de impacto mas grande que consigue provoca un cambio de fase igual a π en la emisión. Esto equivale a que la función de correlación $C(t)$ caiga de uno a cero. Partimos de un parámetro de impacto tal que el efecto de la colisión es despreciable, y vamos disminuyéndolo hasta que la función de correlación rebasa el valor límite (en este caso 0). Centramos el intervalo de búsqueda en ese punto y repetimos el proceso con un tamaño de paso (el incremento del parámetro de impacto) menor. En unas pocas iteraciones se consigue un valor lo suficientemente preciso del radio de Weisskopf.

El tamaño del paso temporal para resolver la ecuación diferencial (2.4) se fija de tal manera que el "pico" de la colisión quede bien resuelto, haciendo que en la zona central de la colisión haya 200 puntos.

$$\Delta t = \frac{b}{v \cdot 200} \quad (\text{A.3})$$

La posición inicial del electrón se toma lo suficientemente alejada para que a efectos prácticos es como si no interaccionara con el ión.

A modo de ejemplo vamos a calcular el radio de Weisskopf para la transición 3s-3p del B II. En primer lugar vamos a incluir sólo los niveles S y P (el esquema de estados es el que se analiza en la anexo B). Los datos de física atómica utilizados son los que se muestran en el anexo D. Se puede comprobar que todo el cálculo es escalable en densidad, por lo que el valor del radio de Weisskopf (en m) sólo depende de la temperatura y del elemento considerado.

En la figura A.2 se muestra el cálculo del Radio de Weisskopf para una temperatura de $T = 10000K$. Inicialmente el parámetro de impacto es tan grande que la colisión no perturba la emisión del átomo. A medida que el parámetro de impacto se hace más pequeño, el cambio de fase

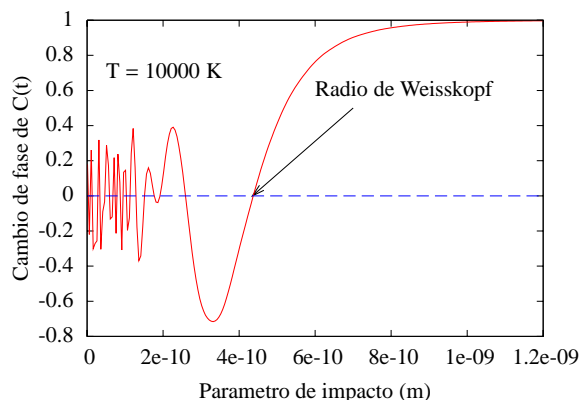


FIGURA A.2 - Cambio de fase de la función de correlación de la transición SP de B III para $T=10000$ K en función del parámetro de impacto de la colisión.

respecto de la emisión sin perturbar comienza a ser mayor, hasta que para un determinado parámetro de impacto la función de correlación toma el valor cero (el cambio de fase es de π). A partir de aquí, parámetros de impacto más pequeños provocarán un cambio de fase aleatorio, la función de correlación oscila entre -1 y 1. Esto se repite para todas las temperaturas y se obtiene así la variación del radio de Weisskopf en función de T .

Sin embargo, lo que en la figura A.2 parece tan sencillo no lo es tanto. El cálculo se lleva a cabo observando la función de correlación sin la frecuencia principal, es decir, lo que observamos es el cambio de fase de la emisión respecto de la frecuencia sin perturbar. Cuando aparecen componentes prohibidas (que por construcción no las podemos “aislar” en el cálculo) observaremos una oscilación periódica de una frecuencia que es la diferencia entre la permitida y la prohibida. Esto hace, que la función de correlación ya tenga el aspecto de A.2, sino que aparece superpuesta la oscilación de la componente prohibida (ver figura A.3).

En estos casos es difícil determinar cual es exactamente el radio de Weisskopf, ya que la oscilación de la componente prohibida “emborrona” el punto de paso de la función de correlación por cero. En estos casos escogemos el valor de manera aproximada, teniendo en cuenta la tendencia de la envolvente. En cualquier caso, este método “manual” no supone un gran problema ya que como dijimos, el criterio para definir el radio

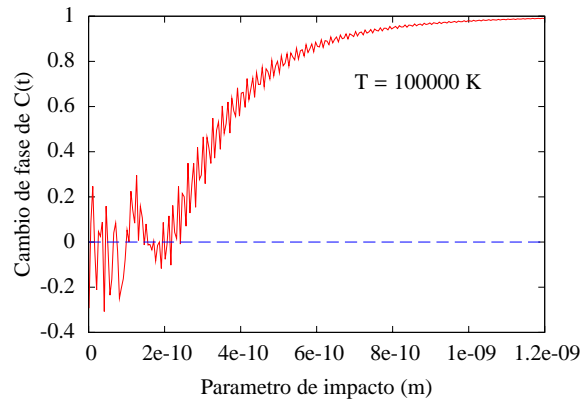


FIGURA A.3 - Caída de la función de correlación de la transición SP de B III para $T=100000$ K en función del parámetro de impacto de la colisión.

de Weisskopf es algo difuso. Este fenómeno es mucho más importante cuando se introduce en el cálculo el nivel d , dando lugar a una función de correlación con unas oscilaciones de mayor intensidad.

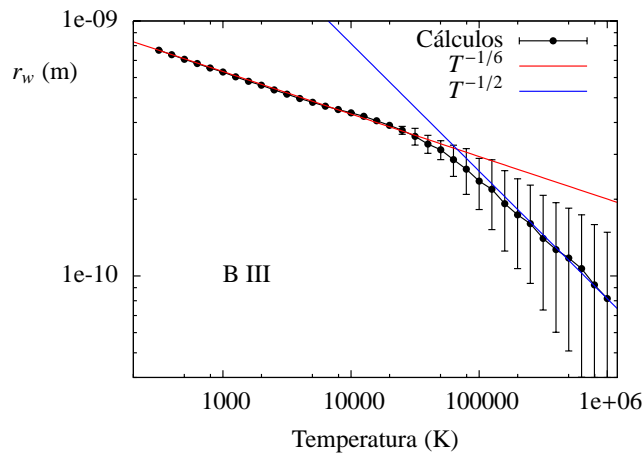


FIGURA A.4 - Radio de Weisskopf del B III, transición 3s-3p, para diferentes temperaturas. Sólo se han incluido los estados s y p en el cálculo. Junto a los resultados de la simulación se muestran las tendencias del modelo teórico.

En la figura A.4 se muestra el resultado del cálculo para diferentes Temperaturas en el caso de la transición $3s - 3p$. A pesar del ruido de los cálculos para altas temperaturas, se observan claramente dos tendencias con la temperatura. Para bajas temperaturas, el efecto Stark es cuadrático y el radio de Weisskopf depende de la temperatura como $T^{-1/6}$. Mientras que para temperaturas altas el efecto Stark es lineal y la dependencia es de la forma $T^{-1/2}$.

B

Operador de anchura en un sistema SP con quenching (Modelo de colisiones débiles)

Se va a particularizar aquí la expresión del operador de anchura en el modelo de colisiones débiles (obtenido en el capítulo 2) para dos casos sencillos: La línea Lyman- α y una transición $s - p$ con quenching.

B.1. Lyman- α

La Lyman- α se corresponde con la transición desde el nivel atómico con $n = 2$ hasta el nivel fundamental ($n = 1$). El grupo de estados con $n = 2$ está compuesto por los estados $2s$ y $2p$ mientras que el grupo inferior con $n = 1$ únicamente lo forma el estado $1s$. Además, para el caso del hidrógeno los estados con $n = 2$ están degenerados y tienen todos la misma energía, lo que simplifica notablemente el cálculo. Por si fuera poco, la separación en energía entre los estados $2s$ y $2p$ respecto al nivel fundamental es lo suficientemente grande –para la mayoría de las situaciones relevantes– como para suponer que la aproximación de *no-quenching* es válida. Dado que únicamente se consideran las transiciones dipolares, el caso de la Lyman alfa no es más que una transición $s-p$ en la que los estados involucrados tienen diferente número cuántico principal y además evolucionan independientemente. Por ser este un caso muy sencillo se ha usado históricamente para verificar los modelos teóricos y para poner a prueba las diferentes aproximaciones. Es por ello que aquí también vamos a empezar por este caso.

Resumiendo, el sistema lo componen dos grupos de estados que evolucionan independientemente (*no-quenching*), el superior formado por un estado s y un estado p que tienen la misma energía, y el inferior formado por un estado s cuya energía tomaremos como referencia. A su vez el estado p está compuesto, en la base cartesiana, por p_x , p_y y p_z . El hamiltoniano completo del sistema será una matriz de 5×5 diagonal por cajas donde la primera caja será de 4×4 y la segunda de 1×1 .

$$H(t) = \begin{pmatrix} H_s(t) & 0 \\ 0 & H_i(t) \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

trabajaremos en la base cartesiana, donde

$$H_s(t) = \hbar \begin{pmatrix} \omega & \chi E_x(t) & \chi E_y(t) & \chi E_z(t) \\ \chi E_x(t) & \omega & 0 & 0 \\ \chi E_y(t) & 0 & \omega & 0 \\ \chi E_z(t) & 0 & 0 & \omega \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

$$H_i = 0$$

donde hemos tomado como referencia la energía del nivel $1s$ y además hemos asumido que las energías de los estados $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$ son idénticas todas ellas en el átomo sin perturbar. En la expresión anterior

$$\omega = \frac{E_{n=2} - E_{n=1}}{\hbar} = \frac{E_{n=2}}{\hbar} \quad (\text{B.3})$$

donde \hbar es la constante de Plank, y $\chi = a_0/\hbar$, siendo a_0 el radio de Böhr.

El Hamiltoniano del grupo superior se puede expresar, como es habitual, como suma de la parte sin perturbar más la parte perturbativa, que puede variar en el tiempo.

$$H_s(t) = H_{0s} + V_s(t) \quad (\text{B.4})$$

con

$$H_{0s} = \hbar \begin{pmatrix} \omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

$$V_s(t) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \chi E_x(t) & \chi E_y(t) & \chi E_z(t) \\ \chi E_x(t) & 0 & 0 & 0 \\ \chi E_y(t) & 0 & 0 & 0 \\ \chi E_z(t) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

En este caso en concreto, el Liouvillano del sistema (ver la ecuación (2.37)) coincide con el Hamiltoniano del grupo superior, ya que el del grupo inferior es cero. Por lo tanto, de ahora en adelante omitiremos el estado del grupo inferior y trabajaremos con el Hamiltoniano del grupo superior, ya que en definitiva el es único que evoluciona a lo largo del tiempo. Por otro lado, teniendo en cuenta que nuestro sistema sólo posee un único estado en el grupo inferior, en la expresión (2.73) los subíndices en letras griegas, que corresponden a estados del grupo inferior, sólo pueden tomar el valor correspondiente al estado $1s$, de modo que podemos reescribir la ecuación (2.73) como

$$\Phi_i^j(t) = \sum_k \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_j - \omega_k)t''} \mathbf{R}_i^k \cdot \mathbf{R}_k^j \quad (\text{B.7})$$

Pero además, en este caso particular todos los estados del grupo superior ($n = 2$) tienen la misma energía, por lo que la exponencial que aparece en (B.7) es siempre igual a la unidad.

$$\Phi_i^j(t) = \sum_k \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \mathbf{R}_i^k \cdot \mathbf{R}_k^j \quad (\text{B.8})$$

Donde el sumatorio se extiende a todos los posibles niveles del grupo superior. El esquema del proceso de ensanchamiento en este caso es más sencillo: los elementos Φ_i^j dan cuenta de las posibles transiciones entre

estados del grupo superior por efecto del campo perturbativo, los cuales decaerán inevitablemente al único estado s presente en el grupo inferior que no evoluciona (figura B.1).

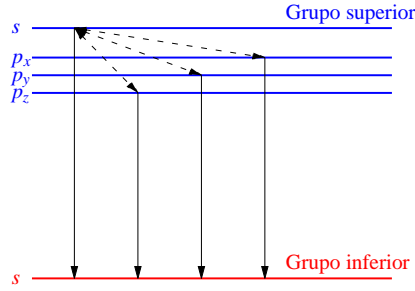


FIGURA B.1 - Esquema de las transiciones en la Lyman- α del Hidrógeno.

El operado posición R para este caso viene representado en la base cartesiana por las siguientes matrices:

$$R_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

A la vista de las matrices R , analicemos la estructura del operador Φ . Dado que de ahora en adelante únicamente manejaremos niveles del grupo superior omitiremos el superíndice s para simplificar la notación. Partiendo de la expresión (B.8) vamos a obtener los elementos del operador de anchura para este caso particular. Empecemos con el elemento Φ_s^s , donde el subíndice s hace referencia al estado s del grupo superior, ya que como hemos dicho el inferior no evoluciona.

$$\Phi_s^s(t) = \frac{q^2}{3\hbar^2} \sum_k \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \mathbf{R}_0^k \cdot \mathbf{R}_k^0 \quad (\text{B.10})$$

En esta expresión, el índice k puede tomar los valores s, p_x, p_y, p_z . Para $k = s$ el producto $\mathbf{R}_s^s \cdot \mathbf{R}_s^s$ es cero, y para el resto $\mathbf{R}_s^{p_i} \cdot \mathbf{R}_{p_i}^s = 1$, donde $i = x, y, z$, por lo que podemos escribir

$$\Phi_s^s(t) = \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' 3 \Gamma(t'') \quad (\text{B.11})$$

Para el elemento $\Phi_{p_i}^{p_i}$ con $p_i = p_x, p_y, p_z$ tenemos que en el producto escalar $\mathbf{R}_{p_i}^k \cdot \mathbf{R}_k^{p_i}$ sólo contribuye el elemento de la componente i , y además sólo es distinto de cero para $k = s$.

$$\Phi_{p_i}^{p_i}(t) = \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \quad (\text{B.12})$$

Los términos cruzados de la forma $\Phi_{p_j}^{p_i}$ con $i \neq j$ son siempre cero ya que el término $\mathbf{R}_{p_i}^k \cdot \mathbf{R}_k^{p_j}$ es siempre nulo para cualquier valor de k . En consecuencia

$$\Phi_{p_j}^{p_i}(t) = 0 \quad (\text{B.13})$$

Por el mismo motivo, los términos de la forma $\Phi_{p_i}^s$ y $\Phi_s^{p_i}$ son también cero.

$$\Phi_{p_i}^s(t) = \Phi_s^{p_i}(t) = 0 \quad (\text{B.14})$$

Resumiendo, el operador de anchura para la *lyman-alpha* del Hidrógeno bajo la aproximación de *no-quenching*, en la base cartesiana, tiene la forma

$$\Phi(t) = \begin{pmatrix} 3\phi(t) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \phi(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \phi(t) \end{pmatrix} \quad (\text{B.15})$$

donde hemos definido

$$\phi(t) = \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \quad (\text{B.16})$$

B.2. Sistema $s - p$

Otra caso que puede ser abordado de manera analítica bajo la aproximación de colisiones débiles son las transiciones que tienen lugar en un sistema $s - p$. Entendemos como tal las transiciones que tienen lugar entre un estado s y un estado p con el mismo número cuántico principal. En este caso ambos estados evolucionan conjuntamente – el campo perturbador mezcla todos los estados – y suponemos que los estados vecinos están lo suficientemente alejados como para que su efecto sea despreciable. Esto será especialmente válido en el caso con $n = 2$, ya que por lo general, los estados vecinos $1s$ y $3s$ está lo suficientemente alejados, pero por supuesto dependerá de la estructura atómica concreta del emisor que se esté considerando. El siguiente caso con $n = 3$ también podría ser abordado con esta aproximación, aunque aquí el nivel $3d$ puede empezar

a ser importante y quizás sería necesario incluirlo en el cálculo. De hecho este es el caso que se estudiará más adelante en la serie isoelectrónica del Berilio.

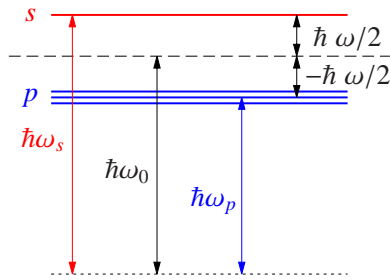


FIGURA B.2 - Diagrama de niveles de energía en un sistema SP

En cualquier caso, en este desarrollo nos limitaremos exclusivamente a los niveles s y p . Tomaremos como referencia la energía media de los niveles s y p (ver figura (B.2)) de manera que el hamiltoniano del átomo si perturbar es

$$H_0 = \begin{pmatrix} -\omega/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega/2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.17})$$

donde

$$\omega = \frac{\omega_s - \omega_p}{2} \quad (\text{B.18})$$

El hamiltoniano completo, como siempre, será la suma de la parte sin perturbar más la debida al campo eléctrico externo $H = H_0 + \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{R}$, donde \mathbf{R} viene dado por la expresión (B.9). En este caso el grupo de estados *inicial* y *final* de la transición son el mismo, todos los estados involucrados, por lo que el espacio de Liouville correspondiente tendrá dimensión $4 \times 4 = 16$. Los operadores de posición en este espacio se

$$\mathcal{R}_z = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (\text{B.21})$$

Utilizando ahora la ecuación (2.73) montemos el operador de anchura elemento a elemento. Se puede comprobar que debido a la estructura de las matrices \mathcal{R} sólo los siguientes elementos son distintos de cero Φ_{ss}^{ss} , Φ_{sp}^{sp} , Φ_{ps}^{ps} , Φ_{pp}^{pp} , Φ_{ss}^{ss} , Φ_{pp}^{pp} , Φ_{ps}^{sp} y Φ_{sp}^{ps} . Donde el índice p denota cualquier estado p_x , p_y y p_z , ya que por simetría un elemento de matriz que involucre un estado p no debe depender de la componente que sea.

Veamos uno por uno que forma tienen cada uno de los términos no nulos. Comencemos por los términos de la diagonal principal. El primer elemento es el que involucra a 4 estados tipos s, Φ_{ss}^{ss} .

$$\begin{aligned} \Phi_{ss}^{ss} &= \sum_{k,\gamma} \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_{ss}-\omega_{k\gamma})t''} \mathcal{R}_{ss}^{k\gamma} \cdot \mathcal{R}_{k\gamma}^{ss} \\ &= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') (e^{i(-\omega_{sp_x})t''} + e^{i(-\omega_{ps_x})t''} + \\ &\quad e^{i(-\omega_{sp_y})t''} + e^{i(-\omega_{ps_y})t''} + e^{i(-\omega_{sp_z})t''} + e^{i(-\omega_{ps_z})t''}) \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Y teniendo en cuenta que $\omega_{p_x s} = -\omega_{s p_x} = \omega$ y que además todos los niveles p tienen la misma energía, podemos escribir

$$\Phi_{ss}^{ss} = \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') (3e^{i\omega t''} + 3e^{-i\omega t''}) \quad (\text{B.23})$$

Los siguientes 3 elementos de la diagonal: $\Phi_{sp_i}^{sp_i}$, donde i puede valer x, y o z , son formalmente idénticos. Nótese que esto viene impuesto por el hecho de que nuestro sistema es isótropo y por lo tanto, un giro no debe afectar al resultado final (por supuesto una vez hecho el promedio). A modo de ejemplo vamos a hacer explícitamente el caso de p_x

$$\begin{aligned}
\Phi_{sp_x}^{sp_x} &= \sum_{k,\gamma} \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{k\gamma})t''} \mathcal{R}_{sp_x}^{k\gamma} \cdot \mathcal{R}_{k\gamma}^{sp_x} \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') (e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{ss})t''} + e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{p_x p_x})t''} + \\
&\quad + e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{p_y p_x})t''} + e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{p_z p_x})t''}) \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') (e^{-i\omega t''} + e^{-i\omega t''} + \\
&\quad + e^{-i\omega t''} + e^{-i\omega t''}) \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') 4e^{-i\omega t''} \tag{B.24}
\end{aligned}$$

Para los niveles p_y y p_z el resultado es el mismo. Los elementos $\Phi_{p_i s}^{p_i s}$ por simetría son idénticos a los anteriores

$$\Phi_{p_i s}^{p_i s} = \Phi_{sp_i}^{sp_i} \tag{B.25}$$

Los únicos elementos de la diagonal que faltan por desarrollar son los de la forma $\Phi_{p_i p_j}^{p_i p_j}$. Al igual que antes, los nueve elementos de este tipo son formalmente idénticos –incluso aquellos en los que $i=j$ – por lo que únicamente desarrollaremos uno a modo de ejemplo.

$$\begin{aligned}
\Phi_{p_x p_y}^{p_x p_y} &= \sum_{k,\gamma} \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_{p_x p_y} - \omega_{k\gamma})t''} \mathcal{R}_{p_x p_y}^{k\gamma} \cdot \mathcal{R}_{k\gamma}^{p_x p_y} \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \times \\
&\quad (e^{i(\omega_{p_x p_y} - \omega_{s p_x})t''} + e^{i(\omega_{p_x p_y} - \omega_{p_x s})t''}) \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') (e^{i\omega t''} + e^{-i\omega t''}) \tag{B.26}
\end{aligned}$$

Vamos ahora con los elementos de fuera de la diagonal principal. A modo de ejemplo haremos sólo los que involucran al estado p_x aunque el

resto son idénticos.

$$\begin{aligned}
\Phi_{sp_x}^{p_x s} &= \sum_{k,\gamma} \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{k\gamma})t''} \mathcal{R}_{sp_x}^{k\gamma} \cdot \mathcal{R}_{k\gamma}^{p_x s} \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \left(-e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{ss})t''} - e^{i(\omega_{sp_x} - \omega_{p_x p_x})t''} \right) \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') (-2) e^{-i\omega t''} \quad (B.27)
\end{aligned}$$

y análogamente $\Phi_{p_i s}^{s p_i}$ será

$$\begin{aligned}
\Phi_{p_x s}^{s p_x} &= \sum_{k,\gamma} \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_{p_x s} - \omega_{k\gamma})t''} \mathcal{R}_{p_x s}^{k\gamma} \cdot \mathcal{R}_{k\gamma}^{s p_x} \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \left(-e^{i(\omega_{p_x s} - \omega_{ss})t''} - e^{i(\omega_{p_x s} - \omega_{p_x p_x})t''} \right) \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') (-2) e^{i\omega t''} = (\Phi_{sp_x}^{p_x s})^* \quad (B.28)
\end{aligned}$$

y por último los elementos de la forma $\Phi_{ss}^{p_i p_i}$ y $\Phi_{p_i p_i}^{ss}$. Los primeros tendrán la expresión

$$\begin{aligned}
\Phi_{ss}^{p_x p_x} &= \sum_{k,\gamma} \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{i(\omega_{p_x s} - \omega_{k\gamma})t''} \mathcal{R}_{ss}^{k\gamma} \cdot \mathcal{R}_{k\gamma}^{p_x p_x} \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \left(-e^{i(\omega_{p_x s} - \omega_{sp_x})t''} - e^{i(\omega_{p_x s} - \omega_{p_x s})t''} \right) \\
&= \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \left(-e^{-i\omega t''} - e^{i\omega t''} \right) = -\Phi_{pp}^{pp} \quad (B.29)
\end{aligned}$$

y $\Phi_{p_i p_i}^{ss}$ por simetría se puede comprobar que es idéntico a $\Phi_{ss}^{p_i p_i}$. Por lo tanto únicamente tenemos cinco elementos diferentes:

$$\Phi_{ss}^{ss} = 3\mu(t, -\omega) + 3\mu(t, \omega) \quad (B.30)$$

$$\Phi_{sp}^{sp} = 4\mu(t, -\omega) \quad (B.31)$$

$$\Phi_{pp}^{pp} = \mu(t, -\omega) + \mu(t, \omega) \quad (B.32)$$

$$\Phi_{ps}^{sp} = -2\mu(t, -\omega) \quad (B.33)$$

donde

$$\mu(t, \Omega) = \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{-i\Omega t''} \quad (B.34)$$

El operador de anchura finalmente tendrá la forma dada por la ecuación (B.35)

$$\Phi(t) = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc} \Phi_{ss}^{ss} & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{ss}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{ss}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{ss}^{pp} \\ 0 & \Phi_{sp}^{sp} & 0 & 0 & \Phi_{ps}^{sp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Phi_{sp}^{sp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{ps}^{sp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Phi_{sp}^{sp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{ps}^{sp} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \Phi_{ps}^{sp*} & 0 & 0 & \Phi_{sp}^{sp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Phi_{ss}^{pp*} & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \Phi_{ps}^{sp*} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{sp}^{sp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Phi_{ss}^{pp*} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \Phi_{ps}^{sp*} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{sp}^{sp} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} & 0 \\ \Phi_{ss}^{pp*} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Phi_{pp}^{pp} \end{array} \right)$$

(B.35)

C

Cálculo de la función de distribución radial: HNC

En este anexo se explica de manera detallada cómo se ha hecho el cálculo numérico para obtener las funciones de distribución radial utilizando las ecuaciones de Ornstein-Zernike con la relación de cierre HNC (hypernetted-chain).

La función de distribución radial, como su nombre indica, es la distribución de probabilidades de presencia de una partícula a una determinada distancia. De ahora en adelante la llamaremos $g(r)$ y denotaremos por $g(r)dr$ a la probabilidad de encontrar una partícula en el elemento diferencial de volumen : el recinto comprendido entre la esfera de radio r y la esfera de radio $r + dr$.

Dado un potencial entre partículas, la ecuación de Ornstein-Zernike nos da una relación para calcular la función de distribución radial:

$$h(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r}) + \rho \int c(\mathbf{r}')h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (\text{C.1})$$

Donde $h(\mathbf{r})$ es la función de correlación total, $c(\mathbf{r})$ la función de correlación directa y ρ la densidad de partículas por unidad de volumen. La función de correlación total está relacionada con la función de distribución radial según la ecuación:

$$g(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}) + 1 \quad (\text{C.2})$$

En general la función $g(r)$ tenderá a 1 para distancias grandes, y a cero para distancias pequeñas, por lo que la función de correlación total $h(r)$ está acotada entre -1 y 0. Sin embargo para poder resolver la ecuación de

O-Z y obtener la función de distribución radial es necesaria una relación puente que relacione la correlación total con la directa. Existen varias ecuaciones de cierre, entre ellas la que se conoce como Hypernetted-Chain (HNC):

$$c(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}) - \ln(h(\mathbf{r}) + 1) - \frac{\phi(\mathbf{r})}{kT} \quad (\text{C.3})$$

Donde $\phi(\mathbf{r})$ es la energía de interacción entre dos partículas, k la constante de Boltzman y T la temperatura del sistema.

Suele resultar conveniente trabajar con la correlación indirecta en lugar de con la total. Si llamamos η a la correlación indirecta, tenemos:

$$\eta(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}) - c(\mathbf{r}) \quad (\text{C.4})$$

La correlación indirecta es la total menos la directa. Sustituyendo esto en la ecuación de OZ (C.1) y en la de HNC (C.3) tenemos que:

$$\eta(\mathbf{r}) = \rho \int c(\mathbf{r}') [\eta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + c(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] d\mathbf{r}' \quad (\text{C.5})$$

$$c(\mathbf{r}) = \exp\left(\eta(\mathbf{r}) - \frac{\phi(\mathbf{r})}{kT}\right) - \eta(\mathbf{r}) - 1 \quad (\text{C.6})$$

Además, para el caso de potenciales con simetría esférica, las funciones de correlación y de distribución radial dependerán únicamente del módulo del radio.

$$\eta(\mathbf{r}) = \eta(r)$$

$$h(\mathbf{r}) = h(r)$$

$$c(\mathbf{r}) = c(r)$$

$$g(\mathbf{r}) = g(r)$$

La manera de obtener la función de distribución radial a partir de la ecuación de OZ (C.1) y de la relación de cierre HNC (C.3) es hacerlo de manera iterativa partiendo de una aproximación inicial. El punto más crítico es cómo calcular la convolución en 3D en la ecuación (C.1) o en la (C.3). Si trabajamos en el espacio de Fourier, la convolución se reduce a un producto de funciones.

$$(g * h)(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{r}') h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{C.7})$$

Si hacemos la transformada de Fourier y hacemos el cambio $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = \mathbf{z}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(c * h)(\mathbf{r}) &= \\ \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int c(\mathbf{r}')h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')d\mathbf{r}'d\mathbf{r} &= \\ \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} c(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} h(\mathbf{z})d\mathbf{z} &= \mathcal{F}(c)\mathcal{F}(h)\end{aligned}\quad (\text{C.8})$$

Si ahora suponemos que el potencial de interacción tiene simetría esférica, como es nuestro caso, podemos reducir la transformada de Fourier de 3 dimensiones a una.

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(f(r)) &= F(k) = \\ \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r})d\mathbf{r} &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi e^{-ikr \cos\theta} f(r)r^2 \sin(\theta)\end{aligned}\quad (\text{C.9})$$

La integración sobre ϕ es inmediata, obteniéndose un factor 2π . La integral sobre θ se resuelve con el cambio de variable

$$\begin{aligned}y &= \cos(\theta) \\ dy &= -\sin(\theta)d\theta\end{aligned}$$

Los límites de integración son ahora 1 y -1, que invertimos para absorber el signo menos del cambio de variable.

$$\begin{aligned}F(k) &= 2\pi \int_0^\infty f(r)r^2 dr \int_{-1}^1 e^{-ikry} dy \\ &= 2\pi \int_0^\infty f(r)r^2 dr \left[\frac{e^{ikry}}{ikr} \right]_{-1}^1 \\ &= 2\pi \int_0^\infty f(r)r^2 dr \left[\frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr} \right]\end{aligned}\quad (\text{C.10})$$

Teniendo en cuenta que $\sin(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$ la expresión final queda

$$F(k) = 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 f(r) dr \quad (\text{C.11})$$

Haciendo el mismo desarrollo para la transformada inversa de Fourier y teniendo en cuenta que $\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(f)) = f$ se obtiene que

$$f(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sin(kr)}{kr} k^2 F(k) dk \quad (\text{C.12})$$

Teniendo en cuenta que las funciones que aparecen en la ecuación (C.5) dependen sólo del módulo de \mathbf{r} y aplicando la fórmula (C.8)

$$\mathcal{F}(\eta(r)) = E(k) = \rho \left(C(k) * E(k) + C^2(k) \right) \quad (\text{C.13})$$

$$E(r) = \frac{\rho C^2(r)}{1 + \rho C(r)} \quad (\text{C.14})$$

Finalmente, el proceso iterativo para calcular la función de distribución radial es el siguiente:

0. Aproximación inicial para $c(r)$

1. $C(k) = \mathcal{F}(c(r)) \rightarrow$ ecuación (C.11)
2. $E(k) = \frac{\rho C^2(r)}{1 + \rho C(r)}$ (O-Z)
3. $\eta(r) = \mathcal{F}^{-1}(E(k)) \rightarrow$ ecuación (C.12)
4. $c(r) = \exp\left(\eta(r) - \frac{\phi(r)}{kT}\right) - \eta(r) - 1$ (HNC)
5. $g(r) = \eta(r) + c(r) + 1$

Los pasos 1-5 se repiten hasta lograr la convergencia deseada. Para la aproximación inicial vamos a suponer que no existe correlación indirecta, es decir que la correlación total y la directa coinciden.

$$h_0(r) = c_0(r) \quad (\text{C.15})$$

Esto implica que de acuerdo con la expresión (C.3), la aproximación inicial es

$$c_0(r) = \exp\left(-\frac{\phi(r)}{kT}\right) - 1 \quad (\text{C.16})$$

D

Energías y probabilidades de transición

En las tablas siguientes se muestran los valores de física atómica que se han empleado en los cálculos. Todos los valores se han obtenido de la base de datos de *National Institute of Standards and Technology* (NIST database, 2015). En todas las tablas las energías se dan en cm^{-1} y los elementos reducidos de la matriz S en unidades atómicas.

Tabla D.1: Energía de los niveles atómicos empleados para el B II.

Estado	E (cm^{-1})
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0$	129773.83
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 0$	143989.95
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 1$	143990.56
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2$	143994.11
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 1$	150649.68
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 2$	150649.68
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 3$	150649.68

Tabla D.2: Probabilidades de transición entre los estados empleados del B II.

Transición	S (u.a.)
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2$	6.82e+00
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1$	2.05e+01
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=0$	3.41e+01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=0 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	1.33e+01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	9.95e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=2$	2.98e+01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	6.63e-01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=2$	9.95e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=3$	5.57e+01

Tabla D.3: Energía de los niveles atómicos empleados para el C III.

Estado	E (cm^{-1})
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0$	238213.00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=0$	259705.55
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1$	259711.22
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2$	259724.30
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	270010.83
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=2$	270011.93
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=3$	270014.74

Tabla D.4: Probabilidades de transición entre los estados empleados del C III.

Transición	S (u.a.)
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2$	3.60e+00
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1$	1.08e+01
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=0$	1.80e+01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=0 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	5.95e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	4.46e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=2$	1.34e+01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	2.98e-01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=2$	4.47e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=3$	2.50e+01

Tabla D.5: Energía de los niveles atómicos empleados para el N IV.

Estado	E (cm^{-1})
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0$	377284.8
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 0$	405971.6
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 1$	405987.5
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2$	406022.8
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 1$	420045.8
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 2$	420049.6
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 3$	420058.0

Tabla D.6: Probabilidades de transición entre los estados empleados del N IV.

Transición	S (u.a.)
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2$	2.22e+00
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 1$	6.64e+00
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 0$	1.10e+01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 0 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 1$	3.34e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 1$	2.50e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 2$	7.51e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 1$	1.67e-01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 2$	2.50e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 3$	1.40e+01

Tabla D.7: Energía de los niveles atómicos empleados para el O V.

Estado	E (cm^{-1})
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J = 0$	546972.7
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 0$	582806.4
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 1$	582843.1
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J = 2$	582920.3
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 1$	600748.9
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 2$	600758.9
$1s^2 2s 3d \ ^3D \ J = 3$	600779.2

Tabla D.8: Probabilidades de transición entre los estados empleados del O V.

Transición	S (u.a.)
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2$	1.48e+00
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1$	4.46e+00
$1s^2 2s 3s \ ^3S \ J=0 - 1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=0$	7.44e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=0 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	2.14e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	1.60e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=1 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=2$	4.76e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=1$	1.07e-01
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=2$	1.60e+00
$1s^2 2s 3p \ ^3P \ J=2 - 1s^2 2s 3d \ ^3D \ J=3$	8.89e+00

E

Selección de las secuencias de campo válidas

En el marco de las simulaciones de Dinámica Molecular, la selección de las secuencias de campo válidas, junto con el equilibrado, es uno de los puntos más delicados. Debido a la interacción entre partículas, eventualmente algún electrón orbitará alrededor de un ión. Cuando esto sucede el campo que ve ese ión es un campo periódico muy intenso que no se corresponde con el que vería en un plasma real. Visto de otra manera, cuando un ión “atrapa” un electrón, deja de ser un ión de carga Z para serlo de carga $Z-1$, por lo que deja de tener sentido seguir considerándolo como un emisor de la especie Z . Para considerar una secuencia de campo útil se debe cumplir que el emisor esté libre en cada instante de esa secuencia. El problema surge cuando se intente fijar un criterio de libertad.

Si se sigue un criterio basado únicamente en la energía (como se hace para calcular el número de electrones libres) resulta que se dan ciertas situaciones de colisiones muy cercanas en las que el par posee energía negativa pero no se comporta como un par ligado. Debido a que este tipo de colisiones se dan regularmente, si seguimos este criterio es imposible encontrar secuencias de campo suficientemente largas, ya que siempre aparece una colisión cercana que el criterio basado únicamente en la energía confunde con un par ligado. Además, este criterio de alguna manera hace que las secuencias útiles contengan menos colisiones fuertes de las que debieran. Como ya hemos dicho, este criterio resulta útil a la hora de calcular el número de electrones libres en un determinado instante, ya que las situaciones en las que el criterio falla (colisiones fuertes) son de duración muy corta y la probabilidad de que coincidan más de una de estas situaciones es muy baja.

En primer lugar, para poder seleccionar correctamente las secuencias de campo válidas se necesita más información que el campo eléctrico que ven. Por ello, en cada paso temporal es necesario almacenar, además del campo eléctrico, su energía potencial y los índices de las $N+1$ electrones más cercanos (siendo N la carga del emisor). El criterio que se ha diseñado es un criterio global, la libertad de un ión en un instante temporal depende de su historia, no sólo de las condiciones que tenga en ese instante, por ello es necesario almacenar toda esta información en disco. Una vez se tienen los fichero de campo con todos estos datos se procesan para extraer las secuencias de campo útiles que se emplearán en el cálculo de la línea.

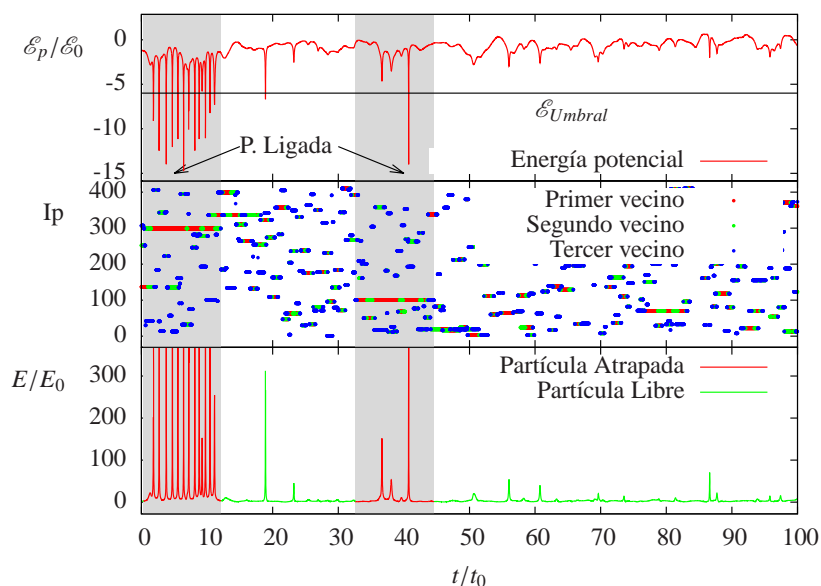


FIGURA E.1 - Plasma con $\rho_{exp} = 0.6$ y emisores con una carga de 2. De arriba hacia abajo, energía potencial de un emisor a lo largo del tiempo, índices de los 3 electrones más cercanos en cada instante y energía potencial del emisor. Las zonas sombreadas corresponden con las zonas en las que existe alguna partícula atrapada.

El primer paso del procesado consisten rastrear en que momento el emisor tiene una energía potencial menor que una energía dada. En

concreto se fija la energía umbral como:

$$E_{umbral} = \frac{3}{4}V_i \quad (\text{E.1})$$

Donde V_i es el potencial de ionización. Cuando ocurre que un ión tiene una energía potencial menor que E_{umbral} se identifica al electrón que en ese instante se encuentra más próximo a él (primer vecino). Una vez hecho esto se establece el intervalo de tiempo en torno al instante dado durante el cual ese electrón ha estado entre los $Z+1$ primeros vecinos, si este intervalo resulta ser mucho mayor que el tiempo típico entonces se considera que en todo ese intervalo (durante el tiempo que el electrón se encuentra entre los $Z+1$ primeros vecinos) el emisor está ligado. En caso contrario se considera que la energía potencial negativa que vio el emisor se debía a una colisión puntual, ya que el electrón culpable de que el emisor tuviera una energía tan negativa no ha permanecido en las vecindades del mismo durante mucho tiempo. El hecho de considerar los $Z+1$ primeros vecinos se debe a que puntualmente un electrón rápido puede acercarse más que el electrón atrapado sin que ello suponga la liberación del electrón.

Veamos un ejemplo para un caso en el que los emisores tienen carga 2, lo que supone la monitorización de los tres primeros vecinos. En la figura E.1 podemos ver la historia de la energía potencial del emisor (parte superior), el índice de los tres electrones más cercanos en cada instante (parte central) y el módulo del campo eléctrico que ve (parte inferior). En el instante en que la energía potencial es menor que el valor de la energía umbral, aproximadamente en $t = 2$, anotamos cual es el electrón más cercano en ese instante, en este caso es el número 298. A continuación comprobamos durante cuánto tiempo ha estado este electrón entre los tres más cercanos, y comprobamos que lo ha hecho desde $t \sim 0$ hasta $t \sim 10$, aproximadamente durante 10 unidades temporales. Este tiempo es mucho mayor que el tiempo típico de una colisión, por lo que debemos asumir que es un electrón atrapado. Efectivamente si observamos el módulo del campo eléctrico, este es una oscilación fija con un módulo muy intenso. Lo mismo sucede en torno al instante $t = 35$, aunque ahora es menos evidente, ya que el electrón atrapado sólo orbita unas pocas veces alrededor del ión. Se puede comprobar cómo este sistema no elimina las colisiones fuertes. Por ejemplo en el instante $t = 20$ hay un electrón que pasa muy cerca del ión (tanto como para sobrepasar la energía umbral), sin embargo no permanece en su entorno el tiempo suficiente como para que sea un electrón atrapado. Y efectivamente el aspecto del campo nos confirma que se trata de una colisión aislada.

F

Tablas de anchura y shift obtenidas mediante la técnica de partículas independientes

Los perfiles obtenidos en los cálculos de partículas independientes se ajustan perfectamente a una lorentziana, por lo que no tiene sentido reproducir el perfil completo, sino que basta con proporcionar la anchura y el desplazamiento de cada una de ellas. Las tres componentes de estructura fina de la transición $1s^22s3s - 1s2^22s3p$ tienen la misma anchura y shift (las diferencias están dentro del ruido de la simulación) por lo que únicamente se dan los valores de una de ellas. De hecho, Para reconstruir el perfil completo basta con sumar tres funciones de Lorentz:

$$I_j(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \frac{\text{HWHM}}{(\lambda - \delta_j)^2 + \text{HWHM}^2/4} \quad (\text{F.1})$$

$$I(\lambda) = \sum_{j=0,1,2} \alpha_j I_j(\lambda) \quad (\text{F.2})$$

Donde HWHM es la semianchura de las componentes (que son iguales todas ellas) y δ_j viene dado por la expresión:

$$\delta_j = \lambda_{0j} + s \quad (\text{F.3})$$

donde s es el shift y λ_{0j} y la longitud de onda central de cada componente (tabla F.1). α_j es la intensidad relativa de la componente j y cuyos valores viene dados en la tabla F.2.

Tabla F.1: Longitudes de onda en nanómetros de las transiciones entre los estados $1s^2 2s 3s$ y $1s^2 2s 3p$ para los diferentes elementos de la serie isoelectrónica del Berilio.

Estado Inicial	Estado Final	B II	C III	N IV	O V
$1s^2 2s 3s \ J = 0$	$1s^2 2s 3p \ J = 0$	703.427	465.278	348.592	279.067
$1s^2 2s 3s \ J = 0$	$1s^2 2s 3p \ J = 1$	703.397	465.155	348.399	278.781
$1s^2 2s 3s \ J = 0$	$1s^2 2s 3p \ J = 2$	703.221	464.872	347.971	278.183

Tabla F.2: Intensidades relativas de cada una de las componentes de la transición $3s - 3p$.

Estado Inicial	Estado Final	α
$1s^2 2s 3s \ J = 0$	$1s^2 2s 3p \ J = 0$	0.111
$1s^2 2s 3s \ J = 0$	$1s^2 2s 3p \ J = 1$	0.333
$1s^2 2s 3s \ J = 0$	$1s^2 2s 3p \ J = 2$	0.556

En las tablas siguiente se muestra la anchura a altura mitad (FWHM) y el desplazamiento (Shift). El formato de los datos es el siguiente:

FWHM	Shift
------	-------

Tabla F.3: Boro II. Transición $1s^2 2s 3s \ J = 0 - 1s 2^2 2s 3p \ J = 2$ (estados triplete). La densidad electrónica (N_e) viene dada en m^{-3} y la temperatura (T) en Kelvin.

$N_e \backslash T$	40000	60000	80000	100000	Unidades
$1.0 \cdot 10^{22}$	$\frac{6.74}{-0.497}$	$\frac{7.51}{-0.615}$	$\frac{8.07}{-0.702}$	$\frac{8.29}{-0.754}$	pm
$1.0 \cdot 10^{23}$	$\frac{68.8}{-4.64}$	$\frac{76.1}{-6.43}$	$\frac{81.4}{-6.96}$	$\frac{83.7}{-7.25}$	pm
$1.0 \cdot 10^{24}$	$\frac{0.714}{-0.0518}$	$\frac{0.800}{-0.0686}$	$\frac{0.840}{-0.0747}$	$\frac{0.862}{-0.0816}$	nm
$1.0 \cdot 10^{25}$	$\frac{7.88}{-0.696}$	$\frac{8.71}{-0.833}$	$\frac{9.21}{-0.886}$	$\frac{9.47}{-0.902}$	nm

Tabla F.4: Carbono III. Transición $1s^2 2s 3s \ J = 0 - 1s 2^2 2s 3p \ J = 2$ (estados triplete). La densidad electrónica (N_e) viene dada en m^{-3} y la temperatura (T) en Kelvin.

$N_e \backslash T$	40000	60000	80000	100000	Unidades
$1.0 \cdot 10^{22}$	$\frac{1.36}{-0.230}$	$\frac{1.53}{-0.257}$	$\frac{1.63}{-0.271}$	$\frac{1.69}{-0.277}$	pm
$1.0 \cdot 10^{23}$	$\frac{13.9}{-2.30}$	$\frac{15.6}{-2.55}$	$\frac{16.5}{-2.71}$	$\frac{17.2}{-2.79}$	pm
$1.0 \cdot 10^{24}$	$\frac{0.142}{-0.0238}$	$\frac{0.158}{-0.0261}$	$\frac{0.169}{-0.0273}$	$\frac{0.174}{-0.0278}$	nm
$1.0 \cdot 10^{25}$	$\frac{1.53}{-0.251}$	$\frac{1.70}{-0.278}$	$\frac{1.80}{-0.294}$	$\frac{1.88}{-0.302}$	nm

Tabla F.5: Nitrógeno IV. Transición $1s^2 2s 3s J = 0 - 1s 2^2 2s 3p J = 2$ (estados triplete). La densidad electrónica (N_e) viene dada en m^{-3} y la temperatura (T) en Kelvin.

$N_e \backslash T$	40000	60000	80000	100000	Unidades
$1.0 \cdot 10^{22}$	$\frac{0.434}{-0.0977}$	$\frac{0.494}{-0.107}$	$\frac{0.526}{-0.109}$	$\frac{0.552}{-0.114}$	pm
$1.0 \cdot 10^{23}$	$\frac{4.47}{-0.986}$	$\frac{5.12}{-0.106}$	$\frac{5.35}{-0.111}$	$\frac{5.62}{-0.110}$	pm
$1.0 \cdot 10^{24}$	$\frac{45.8}{-9.90}$	$\frac{51.4}{-10.7}$	$\frac{54.9}{-11.2}$	$\frac{57.1}{-11.3}$	pm
$1.0 \cdot 10^{25}$	$\frac{0.476}{-0.0999}$	$\frac{0.537}{-0.109}$	$\frac{0.573}{-0.115}$	$\frac{0.593}{-0.117}$	nm

Tabla F.6: Oxígeno V. Transición $1s^2 2s 3s J = 0 - 1s 2^2 2s 3p J = 2$ (estados triplete). La densidad electrónica (N_e) viene dada en m^{-3} y la temperatura (T) en Kelvin.

$N_e \backslash T$	40000	60000	80000	100000	Unidades
$1.0 \cdot 10^{22}$	$\frac{0.174}{-0.00452}$	$\frac{0.198}{-0.00478}$	$\frac{0.218}{-0.00490}$	$\frac{0.231}{-0.00500}$	pm
$1.0 \cdot 10^{23}$	$\frac{1.82}{-0.450}$	$\frac{2.17}{-0.484}$	$\frac{2.27}{-0.507}$	$\frac{2.32}{-0.509}$	pm
$1.0 \cdot 10^{24}$	$\frac{19.2}{-4.55}$	$\frac{21.3}{-4.86}$	$\frac{22.5}{-5.03}$	$\frac{23.9}{-5.12}$	pm
$1.0 \cdot 10^{25}$	$\frac{0.198}{-0.460}$	$\frac{0.218}{-0.481}$	$\frac{0.236}{-0.504}$	$\frac{0.241}{-0.520}$	nm

G

Gases equilibrados (Dinámica Molecular)

En este anexo se recopila toda la información de los plasmas utilizados para llevar a cabo las simulaciones de dinámica molecular. En la tabla G.1 se muestran los datos de entrada de cada una de las simulaciones. Para cada conjunto de condiciones se han simulado 8 gases diferentes. En la tabla G.2 se muestran las condiciones de cada uno de estos plasmas una vez alcanzado el equilibrio, así como el tiempo que se ha dejado evolucionar los gases hasta alcanzar el equilibrio.

Tabla G.1: Datos de entrada de las simulaciones. El paso temporal viene dado en unidades de t_0 . N_{ele} , N_{ion} y N_{emi} son el número de electrones, de iones y de emisores en la simulación. Z_{ion} y Z_{emi} la carga de los iones perturbadores y de los emisores y V_i^{ion} y V_i^{emi} su potencial de ionización expresados en unidades de simulación. El valor de ρ es el parámetro de acoplamiento nominal de la simulación.

Nombre	Paso temporal	N_{ele}	N_{ion}	N_{emi}	Z_{ion}	Z_{emi}	M_{ion}	M_{emi}	V_i^{ion}	V_i^{emi}	ρ
Rho021Zi01	0.00004	410	400	10	1	1	1	11	3.5	4	0.21
Rho022Zi02	0.00004	420	400	10	1	2	1	12	3.5	4	0.22
Rho028Zi03	0.00005	430	400	10	1	3	1	14	3.5	4	0.28
Rho030Zi04	0.00005	440	400	10	1	4	1	16	3.5	4	0.30
Rho10Zi01	0.0002	410	400	10	1	1	1	11	6	15	1.00
Rho10Zi02	0.0002	420	400	10	1	2	1	12	6	15	1.00
Rho10Zi03	0.0002	430	400	10	1	3	1	14	6	15	1.00
Rho10Zi04	0.0002	440	400	10	1	4	1	16	6	15	1.00
Rho20Zi01	0.0001	210	200	10	1	1	1	11	6	12	2.00
Rho20Zi02	0.0001	220	200	10	1	2	1	12	6	12	2.00
Rho20Zi03	0.0001	230	200	10	1	3	1	14	6	12	2.00
Rho20Zi04	0.0001	240	200	10	1	4	1	16	6	12	2.00

Tabla G.2: Datos de los plasmas ya equilibrados. \mathcal{E}_c^{media} y \mathcal{E}_p^{media} son la energía cinética y potencial media por partícula en unidades de simulación, α_{iones} y $\alpha_{emisores}$ el tanto por uno de iones y emisores libres (sin ningún electrón atrapado), $\alpha_{electrones}$ es el tanto por uno de electrones libres, $\rho_{experimental}$ el parámetro de acoplamiento experimental una vez estabilizado el plasma y el tiempo t es el transcurrido desde el comienzo de la simulación hasta el equilibrio, viene dado en unidades de t_0 . Por último n_{pt} es el número de pasos temporales de equilibrado.

Nombre	\mathcal{E}_c^{media}	\mathcal{E}_p^{media}	$\alpha_{electrones}$	α_{iones}	$\alpha_{emisores}$	$\rho_{experimental}$	$t (t_0)$	n_{pt}
Rho021Zi01	0.74	-0.11	0.94	0.94	0.93	0.21	1000	$2.0 \cdot 10^7$
Rho022Zi02	0.67	-0.05	0.95	0.95	0.98	0.23	1000	$2.0 \cdot 10^7$
Rho028Zi03	0.66	-0.04	0.98	0.98	0.96	0.31	1000	$2.5 \cdot 10^7$
Rho030Zi04	0.67	-0.04	0.98	0.98	0.97	0.29	1000	$2.5 \cdot 10^7$
Rho10Zi01	1.83	-0.08	0.99	0.99	0.99	0.64	1000	$5.0 \cdot 10^6$
Rho10Zi02	1.91	-0.15	0.98	0.99	0.98	0.63	9000	$4.5 \cdot 10^7$
Rho10Zi03	1.94	-0.17	0.98	0.98	0.98	0.62	9000	$4.5 \cdot 10^7$
Rho10Zi04	1.98	-0.20	0.98	0.97	0.98	0.61	9000	$4.5 \cdot 10^7$
Rho20Zi01	2.35	-0.58	0.88	0.88	0.88	1.11	3500	$3.5 \cdot 10^7$
Rho20Zi02	2.42	-0.62	0.88	0.88	0.88	1.09	5000	$5.0 \cdot 10^7$
Rho20Zi03	2.49	-0.64	0.86	0.86	0.86	1.07	5000	$5.0 \cdot 10^7$
Rho20Zi04	2.56	-0.65	0.85	0.85	0.85	1.06	5000	$5.0 \cdot 10^7$

H

Tablas de anchura y shift obtenidas mediante la técnica de dinámica molecular

A continuación se muestran los resultados (anchura y desplazamiento) de las líneas de la transición $1s^22s3s - 1s2^22s3p$ para diferentes emisores calculados mediante la técnica de dinámica molecular. Únicamente se aportan los datos de anchura y desplazamiento de cada una de las componentes (a diferencia de lo que sucedía en el caso de partículas independientes aquí los resultados son diferentes), ya que la forma del perfil es prácticamente una lorentziana en todos los casos. Para reconstruir el perfil completo basta con proceder de la misma manera que en el caso de partículas independientes (ver el anexo F). Las longitudes de onda de cada una de las transiciones también pueden ser consultadas en ese anexo.

En las tablas H.1 y H.2 se muestran los resultados que intentan reproducir las condiciones de algunas de las medidas experimentales disponibles en la bibliografía. Si bien la densidad electrónica es la misma, la temperatura puede ser ligeramente diferente debido a la dificultad de encontrar las condiciones idóneas para que una vez equilibrados los plasmas las condiciones físicas sean exactamente las mismas. Esto no debe afectar demasiado a los resultados, ya que en primer lugar las diferencias no son demasiado grandes y además la temperatura no juega un papel dominante en estos casos. En las tablas H.3 a H.6 se muestran los valores de anchura y desplazamiento para plasma más fuertemente acoplados.

Elemento	$N_e (m^{-3})$	T (K)	FWHM	Shift
B II	$2.13 \cdot 10^{22}$	46875	24.0 pm	-1.59 pm
			23.4 pm	-1.72 pm
			23.0 pm	-1.43 pm
C III	$2.80 \cdot 10^{22}$	46726	9.44 pm	-1.17 pm
			9.38 pm	-0.97 pm
			9.04 pm	-1.08 pm
	$5.82 \cdot 10^{22}$	59632	18.6 pm	-2.11 pm
			18.9 pm	-2.18 pm
			18.7 pm	-1.91 pm
	$6.30 \cdot 10^{22}$	61228	21.1 pm	-2.21 pm
			21.2 pm	-2.18 pm
			21.5 pm	-2.14 pm
N IV	$1.78 \cdot 10^{23}$	45104	24.5 pm	-3.38 pm
			24.5 pm	-3.22 pm
			25.0 pm	-3.30 pm
	$2.80 \cdot 10^{23}$	52456	36.0 pm	-5.00 pm
			36.2 pm	-5.43 pm
			36.2 pm	-5.28 pm
	$5.80 \cdot 10^{23}$	66869	69.7 pm	-9.52 pm
			71.0 pm	-8.86 pm
			70.4 pm	-8.63 pm
	$8.10 \cdot 10^{23}$	74744	97.8 pm	-11.8 pm
			97.7 pm	-12.1 pm
			99.9 pm	-12.5 pm
	$1.06 \cdot 10^{24}$	81755	0.121 nm	-14.0 pm
			0.122 nm	-14.6 pm
			0.123 nm	-14.5 pm
	$1.58 \cdot 10^{24}$	93390	0.183 nm	-20.2 pm
			0.180 nm	-17.7 pm
			0.178 nm	-18.6 pm
	$1.94 \cdot 10^{24}$	100003	0.217 nm	-2.52 pm
			0.216 nm	-2.54 pm
			0.222 nm	-2.57 pm

Tabla H.1: Anchura a altura mitad (FWHM) y desplazamiento (Shift) para cada una de las líneas calculadas utilizando los plasmas con un grado de acoplamiento bajo ($\rho \sim 0.3$). Para cada elemento se muestran por orden los datos de las transiciones $1s^2 2s 3s J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p; J = 2$; $1s^2 2s 3s J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p; J = 1$; $1s^2 2s 3s J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p; J = 0$.

Elemento	N_e (m^{-3})	T (K)	FWHM	Shift
O V	$9.50 \cdot 10^{22}$	42614	6.21 pm	-0.818 pm
			6.16 pm	-0.883 pm
			6.21 pm	-0.813 pm
	$1.09 \cdot 10^{23}$	44612	7.03 pm	-1.03 pm
			7.00 pm	-0.949 pm
			6.99 pm	-1.06 pm
	$1.38 \cdot 10^{23}$	48262	8.80 pm	-1.23 pm
			8.68 pm	-1.25 pm
			8.68 pm	-1.22 pm

Tabla H.2: Anchura a altura mitad (FWHM) y desplazamiento (Shift) de cada una de las líneas (por orden) $1s^2 2s 3s$ $J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p$; $J = 2$; $1s^2 2s 3s$ $J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p$; $J = 1$; $1s^2 2s 3s$ $J = 1 \rightarrow 1s^2 2s 3p$; $J = 0$.

Tabla H.3: Anchura (FWHM) y desplazamiento (Shift) de las líneas de la transición $3s - 3p$ del Boro II calculadas mediante Dinámica Molecular.

N_e (m^{-3})	T (K)	$J = 2 \rightarrow J = 1$	$J = 1 \rightarrow J = 1$	$J = 0 \rightarrow J = 1$
10^{22}	1401 K	<u>39.79 pm</u>	<u>39.8 pm</u>	<u>39.81 pm</u>
		0.286 pm	0.285 pm	0.283 pm
10^{22}	4226 K	<u>22.36 pm</u>	<u>22.6 pm</u>	<u>21.96 pm</u>
		-2.75 pm	-2.30 pm	-2.81 pm
10^{23}	3017 K	<u>0.193 nm</u>	<u>0.193 nm</u>	<u>0.193 nm</u>
		-8.95 pm	-8.96 pm	-8.78 pm
10^{23}	9106 K	<u>0.203 nm</u>	<u>0.199 nm</u>	<u>0.199 nm</u>
		-16.3 pm	-17.1 pm	-18.1 pm
10^{24}	6501 K	<u>2.16 nm</u>	<u>2.15 nm</u>	<u>2.15 nm</u>
		-0.223 nm	-0.232 nm	-0.233 nm
10^{24}	19617 K	<u>1.56 nm</u>	<u>1.56 nm</u>	<u>1.56 nm</u>
		-96.9 pm	-0.104 nm	-1.04 nm
10^{25}	14006 K	<u>17.6 nm</u>	<u>17.6 nm</u>	<u>17.6 nm</u>
		-1.04 nm	-1.12 nm	-1.13 nm
10^{25}	42264 K	<u>12.0 nm</u>	<u>12.0 nm</u>	<u>12.0 nm</u>
		-0.780 nm	-0.800 nm	-8.04 nm

Tabla H.4: Anchura (FWHM) y desplazamiento (Shift) de las líneas de la transición $3s - 3p$ del Carbono III calculadas mediante Dinámica Molecular.


$N_e (m^{-3})$	$T (K)$	$J = 2 \rightarrow J = 1$	$J = 1 \rightarrow J = 1$	$J = 0 \rightarrow J = 1$
10^{22}	1457 K	$\frac{74.9 \text{ pm}}{-0.020 \text{ pm}}$	$\frac{75.0 \text{ pm}}{-0.022 \text{ pm}}$	$\frac{75.0 \text{ pm}}{-0.023 \text{ pm}}$
10^{22}	4433 K	$\frac{9.98 \text{ pm}}{-0.183 \text{ pm}}$	$\frac{10.0 \text{ pm}}{-0.181 \text{ pm}}$	$\frac{10.0 \text{ pm}}{-0.176 \text{ pm}}$
10^{23}	3139 K	$\frac{0.193 \text{ nm}}{-0.235 \text{ pm}}$	$\frac{0.193 \text{ nm}}{-0.240 \text{ pm}}$	$\frac{0.193 \text{ nm}}{-0.242 \text{ pm}}$
10^{23}	9550 K	$\frac{60.5 \text{ pm}}{-7.01 \text{ pm}}$	$\frac{61.1 \text{ pm}}{-6.92 \text{ pm}}$	$\frac{61.5 \text{ pm}}{-7.30 \text{ pm}}$
10^{24}	6762 K	$\frac{0.849 \text{ nm}}{-27.1 \text{ pm}}$	$\frac{0.849 \text{ nm}}{-27.3 \text{ pm}}$	$\frac{0.850 \text{ nm}}{-27.5 \text{ pm}}$
10^{24}	20576 K	$\frac{0.464 \text{ nm}}{-39.6 \text{ pm}}$	$\frac{0.467 \text{ nm}}{-43.2 \text{ pm}}$	$\frac{0.468 \text{ nm}}{-42.2 \text{ pm}}$
10^{25}	14568 K	$\frac{5.32 \text{ nm}}{-0.501 \text{ nm}}$	$\frac{5.32 \text{ nm}}{-0.501 \text{ nm}}$	$\frac{5.33 \text{ nm}}{-5.01 \text{ nm}}$
10^{25}	44329 K	$\frac{3.29 \text{ nm}}{-0.248 \text{ nm}}$	$\frac{3.31 \text{ nm}}{-0.263 \text{ nm}}$	$\frac{3.32 \text{ nm}}{-2.623 \text{ nm}}$

Tabla H.5: Anchura (FWHM) y desplazamiento (Shift) de las líneas de la transición $3s - 3p$ del Nitrógeno IV calculadas mediante Dinámica Molecular.

$N_e (m^{-3})$	$T (K)$	$J = 2 \rightarrow J = 1$	$J = 1 \rightarrow J = 1$	$J = 0 \rightarrow J = 1$
10^{22}	1502 K	$\frac{93.7 \text{ pm}}{-0.012 \text{ pm}}$	$\frac{94.0 \text{ pm}}{-0.012 \text{ pm}}$	$\frac{94.1 \text{ pm}}{-0.012 \text{ pm}}$
10^{22}	4574 K	$\frac{13.6 \text{ pm}}{-0.014 \text{ pm}}$	$\frac{13.7 \text{ pm}}{-0.016 \text{ pm}}$	$\frac{13.7 \text{ pm}}{-0.015 \text{ pm}}$
10^{23}	3236 K	$\frac{0.296 \text{ nm}}{-0.170 \text{ pm}}$	$\frac{0.297 \text{ nm}}{-0.712 \text{ pm}}$	$\frac{0.297 \text{ nm}}{-0.173 \text{ pm}}$
10^{23}	9854 K	$\frac{47.6 \text{ pm}}{-1.67 \text{ pm}}$	$\frac{47.8 \text{ pm}}{-1.67 \text{ pm}}$	$\frac{47.8 \text{ pm}}{-1.61 \text{ pm}}$
10^{24}	6972 K	$\frac{0.942 \text{ nm}}{-2.09 \text{ pm}}$	$\frac{0.944 \text{ nm}}{-2.15 \text{ pm}}$	$\frac{0.945 \text{ nm}}{-2.15 \text{ pm}}$
10^{24}	21230 K	$\frac{0.237 \text{ nm}}{-18.7 \text{ pm}}$	$\frac{0.237 \text{ nm}}{-18.4 \text{ pm}}$	$\frac{0.237 \text{ nm}}{-18.8 \text{ pm}}$
10^{25}	15020 K	$\frac{3.45 \text{ nm}}{-0.140 \text{ nm}}$	$\frac{3.46 \text{ nm}}{-0.141 \text{ nm}}$	$\frac{3.46 \text{ nm}}{-0.141 \text{ nm}}$
10^{25}	45739 K	$\frac{1.39 \text{ nm}}{-0.102 \text{ nm}}$	$\frac{1.40 \text{ nm}}{-99.7 \text{ pm}}$	$\frac{1.41 \text{ nm}}{-98.0 \text{ pm}}$

Tabla H.6: Anchura (FWHM) y desplazamiento (Shift) de las líneas de la transición $3s - 3p$ del Oxígeno V calculadas mediante Dinámica Molecular.

$N_e (m^{-3})$	$T (K)$	$J = 2 \rightarrow J = 1$	$J = 1 \rightarrow J = 1$	$J = 0 \rightarrow J = 1$
10^{22}	1525 K	$\frac{0.103 \text{ nm}}{-0.0010 \text{ pm}}$	$\frac{0.103 \text{ nm}}{-0.0016 \text{ pm}}$	$\frac{0.103 \text{ nm}}{-0.002 \text{ pm}}$
10^{22}	4679 K	$\frac{16.3 \text{ pm}}{-0.0008 \text{ pm}}$	$\frac{16.4 \text{ pm}}{-0.0008 \text{ pm}}$	$\frac{16.4 \text{ pm}}{-0.0008 \text{ pm}}$
10^{23}	3286 K	$\frac{0.325 \text{ nm}}{-0.118 \text{ pm}}$	$\frac{0.326 \text{ nm}}{-0.119 \text{ pm}}$	$\frac{0.327 \text{ nm}}{-0.120 \text{ pm}}$
10^{23}	10080 K	$\frac{52.3 \text{ pm}}{-0.330 \text{ pm}}$	$\frac{52.5 \text{ pm}}{-0.333 \text{ pm}}$	$\frac{52.6 \text{ pm}}{-0.332 \text{ pm}}$
10^{24}	7080 K	$\frac{1.03 \text{ nm}}{-1.46 \text{ pm}}$	$\frac{1.03 \text{ nm}}{-1.48 \text{ pm}}$	$\frac{1.03 \text{ nm}}{-1.49 \text{ pm}}$
10^{24}	21717 K	$\frac{0.192 \text{ nm}}{-7.23 \text{ pm}}$	$\frac{0.193 \text{ nm}}{-7.04 \text{ pm}}$	$\frac{0.193 \text{ nm}}{-7.42 \text{ pm}}$
10^{25}	15254 K	$\frac{3.32 \text{ nm}}{-36.2 \text{ pm}}$	$\frac{3.34 \text{ nm}}{-36.4 \text{ nm}}$	$\frac{3.35 \text{ nm}}{-36.6 \text{ nm}}$
10^{25}	46789 K	$\frac{0.874 \text{ nm}}{-48.6 \text{ pm}}$	$\frac{0.879 \text{ nm}}{-48.7 \text{ pm}}$	$\frac{0.882 \text{ nm}}{-50.3 \text{ pm}}$



Índice, resumen y conclusiones en inglés

De acuerdo con el Artículo 15 del Real Decreto 99/2011, de 28 de Enero, para poder obtener el título de doctor con “mención internacional” se incluyen en este anexo el índice del trabajo en inglés, un completo resumen en inglés y la traducción de las conclusiones del trabajo.

I.1. Index

1. Introduction	1
1.1. The plasma spectroscopy	1
1.2. Some history: Stark broadening	2
1.3. The isoelectronic series and the Z-scaling	6
1.4. Purpose of this work	8
2. Spectral line broadening	11
2.1. Broadening mechanism of spectral line shapes	12
2.2. Stark broadening	14
2.3. Impact model: Strong collisions	18
2.4. Impact model: Weak collisions	22
3. Processes with controlled correlation	37
3.1. Autoregressive moving average processes	38
3.2. Field sequences with controlled correlation	41
3.3. Application to a SP system	43
3.4. Numerical calculations: comparison with the impact model	45
4. Computer simulations	53
4.1. Emitter evolution	54
4.2. Generation of the field sequences	56
4.2.1. Independent particles	56
4.2.2. Molecular Dynamic	58
5. The isoelectronic series of Beryllium $3s - 3p$	95
5.1. Structure of the emitter	96
5.2. Calculations with Independent Particles	99
5.3. Calculations with Molecular Dynamics	108
5.3.1. The equilibration of the plasmas and field generation	110
5.3.2. Recombination time and strong collisions	111
5.3.3. Results	116
5.4. Comparison with the experimental data	121
5.5. Z-scaling	124
6. Conclusions	133
6.1. Other results obtained in this work	135
A. Numerical calculation of the Weisskopf radius	139

I.2. Summary	185
B. Width operator in a SP system	145
B.1. Lyman- α	146
B.2. s-p system	149
C. Calculation of the radial distribution function: HNC	157
D. Energies and transition probabilities	161
E. Widths and shifts: Independent particles	165
F. Equilibrated gases (Molecular Dynamic)	169
G. Selection of the valid field sequences	173
H. Widths and shifts: Molecular Dynamic	177
I. Index, summary and conclusions in english	183
I.1. Index	184
I.2. Summary	185
I.3. Conclusions	208
J. Bibliography	213

I.2. Summary

The analysis of the spectra as a diagnostic tool plays a very important role in the modern science. Among other reasons because it is a non-invasive technique which allows us to identify compounds and determine some of their characteristics, as their temperature or their density. In the case of laboratory plasmas, which are accessible to the experimentalist, there are other alternative techniques. However, when it comes to stellar objects, which are completely inaccessible, the plasma spectroscopy becomes an essential tool.

The main key of a proper diagnostics through the analysis of the Stark spectra is to have a reliable model which the experimental results can be compared with. In the last decades a lot of improvements have been introduced in the spectra calculations. Nevertheless, despite the current sophisticated and reliable methods, nowadays there are some aspects which remain unsolved. One of those is the main topic of this work:

the Z-scaling of the widths of isolated lines, particularly the Z-scaling of the $3s - 3p$ transition along the isoelectronic sequence of Beryllium.

The argumentation of the theoretical model is very clear: the lines of these transitions are isolated lines whose widths are caused mainly by the fast collisions of the disturbers. With this assumption, the width of the line is proportional to cross section of the emitter, which happens to be proportional –approximately– to the inverse of the square of effective charge of the emitter (Z) (Griem, 1964). However this is not what is observed in the experimental measurements. The experimental data shows a dependence with Z similar to Z^{-1} (Bottcher *et al*, 1988; Hegazy *et al*, 2003).

In the last years many authors have tried to explain these discrepancies using different approaches. By including the quadrupole effects in the calculations (Alexiou, 1994), by taking into account the unbalanced population of the levels in a non-equilibrium state (Iglesias, 2005), by including the quantum effects of the collisions in the cross section (Elabidi *et al*, 2004, 2009; Griem and Ralachenko, 2000; Ralchenkoa *et al*, 2001) or even by including some relativistic effects in the calculations (Duan *et al*, 2014, 2012). However, as the last works confirm it, today there is not yet a satisfactory answer to these discrepancies with the experiments (Duan *et al*, 2014; Elabidi *et al*, 2009).

All the calculations mentioned before have one thing in common: all are based on some approximations to carry out the calculations. Specifically, all of them use the “strong collision approximation”. Since none of those models have succeeded in reproducing the experiments accurately enough, it would be interesting to perform the calculations without any approximations. And the the only possible way at this stage to do that is by using computer simulations to calculate the profiles. However, prior to applying the computer simulation technique we are going to analyze the different models to get an idea of how they works and what their weaknesses are.

With the help of the computer simulations we will try to single out the origin of the discrepancies between the experiments and the calculations. Moreover we will provide several results for the widths and shifts of the $3s - 3p$ line from the emitters B II, C III, N IV and O V. We will analyze the differences with the available experimental results as well as the dependence of the width with the charge of the emitter.

The Stark broadening

The spectral line broadening that is known as pressure broadening is caused by the interactions between the emitter and the surrounding particles. In the case of Stark broadening, this interaction is due to the local electric fields created by the free charges which surround the emitters. This field is capable of modifying the emission process, giving rise to shifts in the emission frequencies or changes in the phase of the radiation, which are observed, as a whole, as a phenomenon of broadening and shifting of the lines. This is an effect determined fundamentally by the intensity of the local electric fields and its dynamic.

Time scales

The relation between the different time scales involved in the Stark broadening determines which approximations can be used and which cannot, so let us explain very briefly what those time scales are.

We can speak about three different time scales. Firstly, we have the characteristic time of the fields undergone by the emitter. These fields are generated by the other particles in the plasma and its time scale is the quotient between the mean distance between particles and their mean velocity: $\tau_c = r_0/v_0$. Secondly, there is the typical time of the evolution of the dipole, which by definition is related to the half width of the line: $\tau_d \approx 1/\Delta\omega_{1/2}$. And thirdly we have the time scale associated to the Stark effect by itself. This time is related to the energy shift of the levels involved in the transition. This characteristic time is, somehow, a way to measure the magnitude of the typical Stark effect. The energy shift of a given level caused by a field E_0 is given approximately by

$$\Delta\mathcal{E} \sim \hbar\omega \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\chi}{\hbar\omega}\right)^2} - 1 \right) \quad (\text{I.1})$$

being $\chi \equiv q_e a_0 S E_0$, where $q_e a_0 S$ is the dipole moment of the emitter, with $a_0 S$ the element of the reduced matrix R , a_0 the Böhr radius, and $\hbar\omega$ the energy distance between the levels involved. If the separation between levels is much greater than the typical Stark effect ($\hbar\omega \gg \chi$) the Stark effect is quadratic: $\Delta\mathcal{E}^C \sim (q_e^2 a_0^2 S^2 E_0^2)/(2\hbar\omega)$. On the contrary, if $\hbar\omega \ll \chi$, we have a linear Stark effect: $\Delta\mathcal{E}^L \sim q_e a_0 S E_0$. With that we define the Stark time as proportional to the inverse of this energy shift:

$$\tau_S = \frac{\hbar}{\Delta\mathcal{E}} \quad (\text{I.2})$$

If the fields vary slowly compared with the evolution of the dipole and the typical time of the Stark effect is comparable to the typical time of the dipole ($\tau_c \gg \tau_d$ and $\tau_S \approx \tau_d$), then we can assume that the broadening of the line is caused mainly by the statistics of the fields (quasi static approximation). In the other extreme, when the fields evolves much faster than the dipole ($\tau_c \ll \tau_d$), the field sequence can be seen as a succession of “collisions”. If $\tau_S \ll \tau_d$, then the decrease in the coherence of the emission is due to the cumulative effect of many weak collisions, each one causes a small change in the phase (weak collision approximation). On the other hand, if one single collision can change completely the phase of the emission, then the width of the line is ruled by the frequency of such collisions (strong collision approximation).

Strong collision approximation

This approximation is based on the idea that only close collisions can perturb the emission, and when one of these collisions takes place, it completely breaks the coherence of the emission. Thus, the width of the line depends only on the frequency of such collisions. The line shape originated by this mechanism is a lorentzian whose width is precisely the frequency of strong collisions.

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} \quad (\text{I.3})$$

where ω_0 is the unperturbed frequency and γ is the strong collision frequency, which can be expressed in terms of the cross section of the emitter:

$$\gamma = Nv\sigma \quad (\text{I.4})$$

N being the electron density, v the mean velocity of the particles and σ the cross section.

The problem of this model is that the concept of strong collision is not well defined. The idea is that each collision completely breaks the coherence of the emission, this can be seen as the phase change caused by each collision being larger than π . However, the cutoff value of the phase is undefined, could be π , or $\pi/2$ for example. Independently of the cutoff phase value chosen, we can define the maximum impact parameter of a collision which would cause such a phase change. This parameter is called Weisskopf radius (Weisskopf, 1933), and thus the expression (I.4)

can be rewritten as

$$\gamma = Nv\pi r_w^2 \quad (\text{I.5})$$

The Weisskopf radius can be calculated by using the analytical expression of the Stark broadening (Gigosos, 2014), when it is possible, or it can be obtained by numerical simulation. The second procedure is more accurate and can be applied in any situation. The Schrödinger equation for the emitter evolution is solved numerically for a single collision. The impact parameter of the collision is reduced until the phase change in the emission reaches the cutoff value defined.

In spite of the fact that the result depends on the choice of the Weisskopf radius, this model yield the dependence of the width with temperature, the density or the charge of the emitter. Independently of the cutoff phase change chosen, the Weisskopf radius is proportional to the R^2 matrix of the emitter. And since the R matrix goes like Z^{-1} (approximatley), then the width of the line should scale with Z as Z^{-2} . It is important to keep in mind that this model does not take into account the effect of the emitter charge in the strong collision frequency (beyond its influence in the matrix R).

Weak collision approximation

Under this approximation, it is assumed that the evolution of the fields is much faster than the evolution of the dipole and the typical Stark effect is very weak (thus, the time τ_S is shorter than the typical time of the dipole, τ_d).

In this case, the mathematical development is much more complicated than before. The line shape is calculated following the standard procedure and taking advantage of the fact that during the time in which the correlation of the field is lost, the dipole has barely changed, and also that the collision does not cause big changes in the dipole.

In this approximation, the line width is proportional to the correlation integral

$$\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \{ \tilde{\mathcal{V}}(t') \tilde{\mathcal{V}}(t'') \tilde{\mathbf{D}}(t'') \} \quad (\text{I.6})$$

One of the key points in the development of this approach is the computation of the average $\{ \mathcal{V}(t') \mathcal{V}(t'') \mathbf{D}(t'') \}$ has to be computed. In this expression $\mathcal{V}(t)$ is the perturbation associated with the field and $\mathbf{D}(t)$ is the dipole operator of the emitter. Since $\mathcal{V}(t)$ evolves much faster

than $\mathbf{D}(t)$, the correlation between $\mathcal{V}(t')$ and $\mathbf{D}(t')$ is lost very fast, and then we can write that

$$\{\mathcal{V}(t')\mathcal{V}(t'')\mathbf{D}(t'')\} \approx \{\mathcal{V}(t')\mathcal{V}(t'')\}\{\mathbf{D}(t'')\} \quad (\text{I.7})$$

Moreover, if we take into account that the correlation between $\mathcal{V}(t')\mathcal{V}(t'')$ is lost for times about τ_c , and here $\tau_d \gg \tau_c$, we can assume that in the whole integration interval of t'' , the dipolar moment is constant, and then

$$\{\mathcal{V}(t')\mathcal{V}(t'')\}\{\mathbf{D}(t'')\} \approx \{\mathcal{V}(t')\mathcal{V}(t'')\}\{\mathbf{D}(t')\} \quad (\text{I.8})$$

This is basically where the approximation of weak collisions is applied, the rest of the development is exact and leads to the following expression for the width operator in the Liouville space (Gigosos, 2014):

$$\Phi(t) = \frac{q_e^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') \mathcal{R} e^{-i\mathcal{L}_0 t'' \hbar} \cdot \mathcal{R} e^{i\mathcal{L}_0 t' \hbar} \quad (\text{I.9})$$

where $\Gamma(t) \equiv \{\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{E}(0)\}$ is the field correlation, $q_e \mathcal{R}$ is the dipole operator matrix in the Liouville space and \mathcal{L}_0 is the Liouvillian of the unperturbed system.

From that expression, it seems like the width should be proportional to the \mathcal{R}^2 operator, and thus the width should go as Z^{-2} , as it happens in the strong collision approximation. However, the Fourier transform which appears in expression (I.9) could introduce a much more complicated dependence with Z .

In some simple cases, the structure of the matrix \mathcal{R} is not very complicated and it is illustrative to develop the expression (I.9) element by element. For instance, we are going to consider an $S - P$ transition, in which only the states S and P are included and all of them evolves together ($S - P$ transition with quenching). In this case, there are only four different elements in Φ ,

$$\Phi_{ss}^{ss} = 3\mu(t, -\omega_{ps}) + 3\mu(t, \omega_{ps}) \quad (\text{I.10})$$

$$\Phi_{sp}^{sp} = 4\mu(t, -\omega_{ps}) \quad (\text{I.11})$$

$$\Phi_{pp}^{pp} = \mu(t, -\omega_{ps}) + \mu(t, \omega_{ps}) \quad (\text{I.12})$$

$$\Phi_{ps}^{sp} = -2\mu(t, -\omega_{ps}) \quad (\text{I.13})$$

where $\omega_{ps} = (\omega_s - \omega_p)/2$, being $\hbar\omega_s$ and $\hbar\omega_p$ the energy of the levels s and p respectively, and

$$\mu(t, \Omega) = \frac{q^2}{3\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \Gamma(t'') e^{-i\Omega t''} \quad (\text{I.14})$$

Later on we will use this system as a test to check the validity of the model under some circumstances.

The main issue of this approximation is that we need to compute the field correlation prior to calculating the width of the line, and the field correlation in the case of a coulombian field diverges. The divergence at long distances can be avoided by considering the screen effect of the rest of the plasma, that is, by considering the Debye radius. On the other hand, at short distances, the divergence comes from the strong collisions. So to avoid that we need to use again the idea of Weisskopf radius. Again, by using the Weisskopf radius we can remove the divergence but we introduce a parameter which is not well determined and it will affect to the result.

Field with controlled correlation

In order to avoid the problems of the field correlation, we are going to use an artificial field sequence whose correlation is known (and it does not diverge). To do that we are going to generate the fields using an Auto Regressive Moving Average process (ARMA). Specifically, we are going to use an ARMA(2,1) process, which is the combination of an auto regressive model of order 2 and a moving average process of order 1 (George, 1976). By using this procedure we can generate field sequences whose correlation is given by the expression:

$$\gamma(t) = a_1 \exp(-t/\tau_1) + a_2 \exp(-t/\tau_2) \quad (\text{I.15})$$

where a_1 , a_2 , τ_1 and τ_2 are parameters. To compare the results obtained with the model and with the complete calculation we are going to use the matrix K

$$K(t) = -i\hbar \frac{d}{dt} \Phi(t) \quad (\text{I.16})$$

The structure of this matrix is the same as that of the matrix Φ , but instead of using the function $\mu(t, \Omega)$ we should use the function $\nu(t, \Omega)$, which takes into account the correlation function given in (I.15), and has the form

$$\begin{aligned} \nu(t, \Omega) &= i\hbar \frac{d}{dt} \mu(t, \Omega) \\ &= -i \frac{q_e^2}{3\hbar} \int_0^t dt' \left(A_1 e^{-t'/\tau_1} + A_2 e^{-t'/\tau_2} \right) e^{i\Omega t'} \\ &= \frac{q_e^2}{3\hbar} (I(A_1, \tau_1, \Omega, t) + I(A_2, \tau_2, \Omega, t)) \end{aligned} \quad (\text{I.17})$$

where

$$I(A, \tau, \Omega, t) = \frac{-iA}{i\Omega - 1/\tau} \left(e^{i\Omega t - t/\tau} - 1 \right) \quad (\text{I.18})$$

Note that the expression (I.15) allows us to generate a correlation function with negative values (with anti-correlation).

We have generated two sets of field sequences, with the values $A_1 = 1.0$ $\tau_1 = 1,0$ $A_2 = 0,001$ $\tau_2 = 0,001$ and $A_1 = 1,0$ $\tau_1 = 1,0$ $A_2 = -0,5$ $\tau_2 = 2,0$. The first one has only positive values (without anti-correlation) and the second one takes both positive and negative values (with anti-correlation). Besides these parameters, there are other two variables in our calculation, these are the optical time (τ_o), which is the inverse of the difference of energy between the states S and P , and the (τ_S) which set the intensity of the typical Stark effect. Depending on the values of these parameters, the impact approximations will be valid or not.

For each set of fields and for different values of τ_o and τ_S we have calculated the profile without any approximation (by solving numerically the Schrödinger equation for the emitter and calculating the correlation function of the dipole operator) and also we have applied the approximation of weak collisions. To compare the results we have taken the elements of the K matrix (I.16) as a function of time. The results for both sets of values are essentially the same. As an example the elements K_{pp}^{pp} and K_{ps}^{sp} are shown in figure I.1 for the values $A_1 = 1,0$ $\tau_1 = 1,0$ $A_2 = -0,5$ $\tau_2 = 2,0$ and for different values of τ_S . In this case the typical time of the field is $\tau_c = 1,0$ and for all the calculations here $\tau_d \gg \tau_S$.

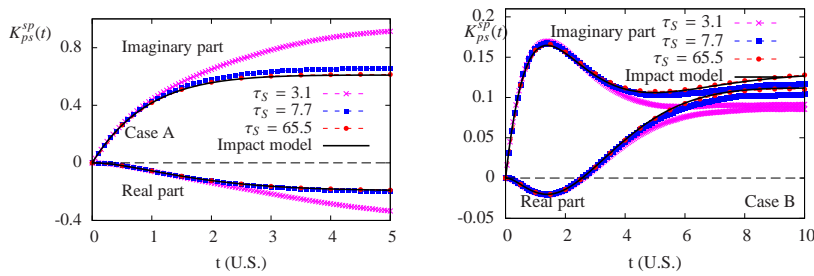


FIGURE I.1 - Time evolution of elements K_{pp}^{pp} (left) and K_{ps}^{sp} (right) for $\omega = 0.32$, $A_1 = 1.0$ $\tau_1 = 1,0$ $A_2 = 0.001$ $\tau_2 = 0.001$

These figures show how when the field evolves fast enough, the model

gives the same result as the complete calculation. On the other hand, when the typical time of the field is comparable with the time of the dipole, then the model cannot predict the result of the calculations.

The same results can be observed for the other elements of the matrix. As a conclusion we can say that the model of weak collisions works quite well only if the field correlation does not diverge and there are no strong collisions.

Computer simulations

Computer simulations is one of the most powerful tools available to perform realistic calculations of spectral line shapes. The idea is very simple: with the help of a computer the behavior of the plasma is reproduced by numerical calculations, and then the electric field which causes the Stark effect is obtained. With that field, the profile is obtained by solving numerically the Schrödinger equations which rules the evolution of the emitter.

Thus, we can speak about two different stages in the simulations. The first one, the calculation of the field undergone by the emitter. And the second one, the calculation of the line shape with the field obtained in the previous stage.

The first stage, can be done following different procedures. In this work we are going to use two of them, Independent Particles and Molecular Dynamics. The first one is the simplest one. As its name points out, the technique of Independent Particles assumes that the particles do not interact with each other and thus they move along a straight path with constant speed. This technique is very well known and the details of this kind of simulations can be found in Gigoso and Cardeñoso (1996); Gigoso and González (2009); Gigoso *et al* (2014).

The other technique, Molecular Dynamics, is much more sophisticated and includes the interactions between all particles in the plasma. In its simple way, for ions of charge equal 1, it has been developed in the last years (Calisti *et al*, 2005; Lara, 2013). However, as far as this work is concerned, it has been necessary to improve the technique and adapt it to plasmas with more than one kind of ions and for chargers larger than one. Together with these modifications we have carried out several studies about different issues of the simulation: equilibration process, mean fields, etc. These results are not the main topic of this work, and some of them may not affect to the calculation done here. However, because of the importance that results could have in other fields, it has

been decided to include it and devote some time to explain it.

In general, the Independent Particles technique is well suited for low coupled plasmas because it is faster than Molecular Dynamics and in those situations the interaction between particles are negligible. On the contrary, when the conditions of density and temperature lead to a high coupling parameter, the Independent Particles cannot reproduce the behavior of the plasmas and instead the Molecular Dynamics technique must be used. This situation is even more dramatic when the charge of the ions is higher than one.

Molecular Dynamics

An in-depth explanation of the basis of the Molecular Dynamic technique can be found in Lara (2013). Here we will only summarize the main characteristics of this technique and we will explain the novelties introduced in this work.

In this technique, the simulation enclosure is a cubic box with periodic conditions. Every particle in that box interacts with all of those whose distance is less than the interaction radius (which is used to be slightly smaller than the side of the box). For every time step, the forces over each of the particles are computed, and the movement equations are solved by using the Verlet algorithm with velocities. To set a zero level of energy (a system with attractive coulomb-type interactions has no lower bound for the total energy) we replace the Coulomb potential by a regularized potential, which behaves as $1/r$ for distances larger than r_{min} and as a parabolic potential for shorter distances. The distance r_{min} is chosen so that the potential and its derivative are continuous at that point. Of course this value depends of the depth of the potential, which is directly related to the ionization potential of the ions.

Equilibration process in Molecular Dynamics

One of the main problems of this technique is that once the plasma has been configured, it takes some time to reach the equilibrium, and in the process it changes its density of free charges (because some electrons are captured by the ions) and its temperature (due to the energy exchanges between potential and kinetic energy). This means that we need to know how the plasma evolves in order to set the right initial conditions to obtain the desired equilibrium conditions of electron density and temperature. This process is extremely slow, and it is necessary to use

some tricks in order to speed it up.

The first issue we find is how to know when we have reached the equilibrium. If we know what the equilibrium conditions are, the problem is solved. However we only have a model to predict these conditions for the case with ions of charge equals 1 (Lara, 2013). In all other cases, we can only wait until all the statistics of the plasma remains stable. The problem is, as mentioned before, that the evolution of the plasma is very slow, and sometimes it could seem that the plasma is equilibrated, but it in fact still evolving.

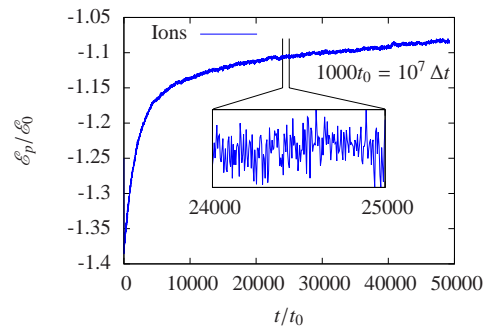


FIGURE I.2 - Evolution of the potential energy of the ions in a pure Hydrogen plasma

As an example of what we have said, in figure I.2 we can see the evolution of the potential energy of the ions in a Hydrogen plasma. Note that time in the X-axis goes up to 50000 time units t_0 (the time which a typical particle takes to cover the mean distance between particles), which is about $5 \cdot 10^8$ time steps, and, even then the plasma is not stable (there is no numerical heating in this example). However, if we look into a small time window of 1000 t_0 (which is not small at all), it seems like the plasma is indeed equilibrated.

To accelerate this process, we can change the mass of the ions (its mass does not affect to the equilibrium state, so the plasma will reach the same conditions in the equilibrium) and set it equal to the mass of the electrons. This way, all particles will move within the same scales of time, which will lead to a much faster equilibration process.

There are other mechanisms of getting the plasma equilibrated. One way could be to force the plasma to have the same equilibrium conditions from the beginning, for example by setting artificially the temperature, that is by using a thermalization process. Every n^{th} time steps, the velocity of the particles is change so that its temperature matches the temperature of the equilibrium. The plasma is assumed to be equilibra-

ted when this temperature indeed remains stable by itself. In that case the process is slower than the process without thermalization. There are other techniques like the Metropolis algorithm, which has the advantage that there is no numerical heating. However, our experience tells us that these methods are even slower (computationally speaking) than letting the plasma evolve by itself.

Once we have the plasma properly equilibrated, we can use the simulations to study some aspects of the plasma which can be relevant in the line shape broadening theory or even in other fields. For instance the field distribution, which is normally used to calculate the line profile under the quasi-static approximation.

In the original works about this topic (Baranger and Mozer, 1959; Hooper, 1968a,b; Mozer and Baranger, 1960) the electric field is divided into two components, one which varies very fast (High Frequency field) and is associated to the electrons, and other whose variation is much slower (Slow Frequency field) and it is caused by the ions and the screening effects of the electrons. The high frequency field can be computed directly in the simulations, and the results are in good agreement with the theoretical models. However, the slow frequency field is slightly different. According to the work of Baranger and Mozer (1959), the slow frequency field is the result of averaging the total field over the time. The “averaging time” Δt can be defined by (Calisti *et al.*, 2011):

$$\mathbf{E}_{\text{LF}}(t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t-\Delta t/2}^{t+\Delta t/2} \mathbf{E}(t') dt' \quad (\text{I.19})$$

Then, the averaging time has to be long compared to the movement of the electrons but very short compared to the movement of the ions. That way, during the averaging time the ions can be considered static. The question is, for how long should we average the field in the simulations to obtain the low frequency distributions predicted by Hooper (Hooper, 1968a)? The upper limit is given by the typical time of the ions, so if we fix the position of the ions once the plasma is equilibrated, we will be able to average as long as we want without averaging the ionic field.

With this idea in mind, we have performed several simulations (with static ions) and we have averaged the total field over different times. The results are shown in figure I.3 together with the theoretical curve given by Hooper. The first conclusion we can deduce is that we need to average the field during $400 t_0$ to reproduce the Hooper curve. This time is not short at all compared with the movement of ions. For instance,

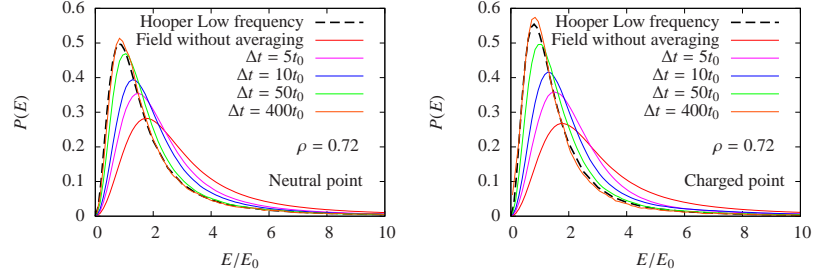


FIGURE I.3 - Field distributions for different averaging times. In the left figure the distribution over neutral point is shown and over charged point in the right.

for Hydrogen ions, its typical time is about $40 t_0$, which means that the averaging time is even longer than the typical time of the ions. The result is surprising, since the time required to obtain the Hooper curve is much longer than the typical time of ions, contrary of the assumption done in the model.

In the simulations, all the dynamics is ruled by a single parameter: the coupling parameter ρ . This value can be obtained directly from the relation between the typical distance between charges and the Debye radius. Which can be computed using the electron density and the temperature of the plasma.

$$r_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T}{q_e^2 \sum_{\alpha} z_{\alpha}^2 N_{\alpha}}} \quad (\text{I.20})$$

Moreover, the coupling parameter can be obtained from other information extracted from the plasma. For instance, we can “measure” the mean potential in the plasma, and taking into account that this potential should be Debye-like, we can fit the result and extract from this fitting the Debye radius and thus the coupling parameter.

$$V_{mean}(r) \propto \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right) \quad (\text{I.21})$$

Another alternative is to compute the mean field (instead of potential). To do so, we have to measure the charge around the point of interest and apply the Gauss theorem to the mean field. The Debye radius is

obtained from the fit of the charge density obtained from the simulation to the curve derived from the Debye theory (Lara, 2013).

The information of ρ can be obtained also from other statistics of the plasma, for example the radial distribution function. Once we have obtained that from the simulations, we compare it with the result of the HNC approximation (van Leeuwen *et al*, 1959) and we choose the ρ value which provides the best fit.

To compare the results, we have used the Debye radius instead the ρ parameter, since both give us the same informations.

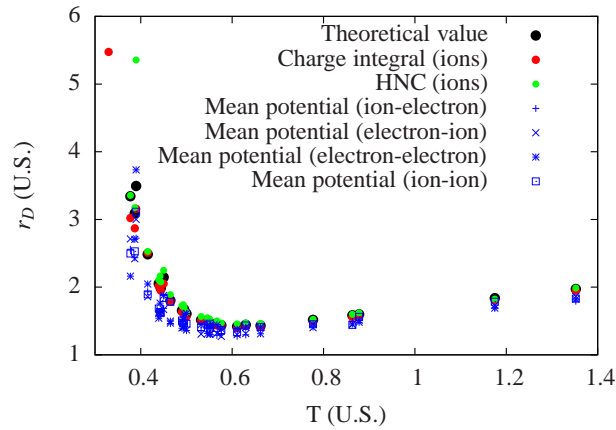


FIGURE I.4 - Debye radius experimentally obtained by different procedures. Simulations data $V_i = 6.8$, $\rho = 0.8345$. (S.U. : simulation units).

In figure I.4 we can see the r_D obtained by each procedure for different plasma conditions. The fact that the results obtained by each technique are the same (within the noise of the simulation) confirms that our system is well described by the theoretical expressions, and also, that the information “experimentally” extracted from the simulation is self-congruent. Especially, the fact that the statistics from ions and electrons lead to the same result points out that the system is properly equilibrated.

As mentioned before, to carry out the calculations concerning to this work we need to deal with multicharged ions, so we need to generalize the Molecular Dynamics technique. The core of the algorithm is basically the same as in the case for $Z=1$ (Lara, 2013). It runs on GPUs (Graphics Processor Unit) and to take advantage of the features of these devices

the simulations are limited to 850 particles. With the new version of the code it is possible to simulate plasmas with several species of ions, each one with different mass and charge.

To equilibrate the plasmas we follow the same procedure as before. The mass of the ions is set equal to the one of the electrons and we let the plasma evolve until all its statistics remain constant. Now we do not have a theoretical model to ensure that we have reached the equilibrium, so the only way is to wait long enough.

Now the ions could have a charge higher than one, so it possible that even after trapping some electrons, these would not be enough to completely counteract the original charge of the ion and the result could still possess a net positive charge. To model this kind of potential (the one created by an ion with some electrons around it) is not simple and greatly complicates the equations of the model.

Trapped particles

The original criterion to detect trapped electrons (Lara, 2013) works well in most of the cases, however it gives some wrong answers. Moreover this method only detects if an ion has some electron trapped, but not how many.

Also, when we analyze a field sequence (to calculate the profile), we seek those emitters which remained free throughout the whole sequence, and it is here where the old criterion fails. From time to time, the criterion missdetect a strong collision as a trapped electron, which invalidates the whole field sequence. To avoid this, we have designed a new method to detect the valid field sequences (those in which the emitter is always free). This new method takes into account not only the energy of the particles and their distance, but also the time they have remained close. The disadvantage of this technique is that we need to store much more information about the particles (energies, and the $Z+1$ particles which are closer) and also we need to have the complete sequence to analyze it (we need to have the past and the future to know if the emitter was free at a given time). On the contrary, this technique allows us to properly detect the useful field sequences to calculate the profile.

To check if the new criterion works properly, we have compared the statistics of potential energy with the results of both the old criterion and the new one. When we have several species, the potential energy distribution looks like the one in figure I.5, where we can see how different species have different mean potential energy. When the energy distribu-

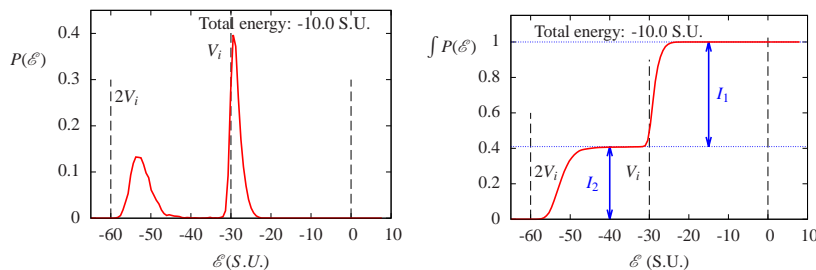


FIGURE I.5 - Potential energy distribution of the ions (left) and its integral (right) for a plasma of He with an ionization potential of $V_i = 30S.U$ and a coupling parameter of $\rho_N = 1.0$. On the left side, each peak represents the distribution of each ionic species. The first one, about $-53 S.U.$, accounts for the neutral (ion of charge 2 with two trapped electrons), the second one, about $-30 U.S.$, for the ions with charge one (ion of charge 2 with one trapped electron). In this case there are no free ions (their peak should be around zero).

tions are not overlapped, we can integrate that curve and then obtain the population of each species. The population given by this method is the same as the one obtained with the new one. Moreover, the population of free ions, which can be obtained also with the old technique is also the same.

Spectral line calculations

After providing a description of the pertinent simulation techniques, we can move on to present the simulation results. We have applied these methods to calculate the lines from the transition $1s^22s3s \ ^3P - 1s^22s3p \ ^3P^o$ for B II, C III, N IV and O V. We analyze the Z-scaling of the widths of the profiles and compare it with the prediction of the strong and weak collisions approximations. Furthermore, we compare our results with some experimental data of these lines.

The model of the emitter we are going to use includes the states $3s$, $3p$ and $3d$ and their fine structure. We only consider the dipole interaction between the electric field and the emitter and all the states evolve together (with *quenching*). With this structure, we have performed two sets of calculations, the first one with the technique of Independent Particles and the second one with Molecular Dynamics.

Regardless of the simulation technique used (Molecular Dynamic or

Independent Particles), once we have obtained the field sequence we numerically solve the Schrödinger equation and we obtain the time evolution operator of the emitter. With that the correlation function of the dipole moment can be computed.

We can define the “complex autocorrelation function” $\tilde{C}(t) \equiv C_R + iC_I$ so that the autocorrelation function can be expressed as:

$$C(t) = 2C_R \cos(\omega_0 t) + 2C_I \sin(\omega_0 t) \quad (\text{I.22})$$

where ω_0 is the unperturbed frequency of the transition. This way, we can work with $\tilde{C}(t)$ instead of $C(t)$ and omit the information of the unperturbed frequency. This format is very convenient, since if the width of the line is caused only by an homogenous broadening mechanism (impact broadening) the function $\tilde{C}(t)$ can be fit to an exponential function like $\exp [(-\gamma + i\sigma)t]$, where γ will be the width of the line and σ its shift.

Results

To check the Z-scaling of the width and to compare the results from the simulation with the experimental results we are going to calculate the lines from the transition $1s^2 2s 3s \ ^3P - 1s^2 2s 3p \ ^3P^o$ for B II, C III, N IV and O V. The model of the emitter included the states $3s$, $3p$ and $3d$ with fine structure. We only consider the dipole interaction and all the states evolves together (with *quenching*). With this structure, we have performed two sets of calculations, the first one with the technique of Independent Particles and the second one with Molecular Dynamics.

With the Independent Particles technique we have calculated the line under study for the range of density between $10^{22} m^{-3}$ and $10^{25} m^{-3}$, and for a temperature between $40000K$ and $100000K$.

In figure I.6 we have plotted separately the “modulus” and the “phase” of the complex autocorrelation function. As we can see, the results of the simulation can be perfectly fit to a exponential, which means that the broadening of the lines is caused only by impact phenomena and the influence of the field statistics is negligible. The same result is obtained for the rest of the conditions and for the rest of the emitters.

To see which kind of collisions produces the broadening of the lines, strong or weak ones, we have performed some simulations in which we have removed those collisions whose impact parameter was less than the Weisskopf radius. With that, we neglect the strong collisions and the broadening of the lines will be caused only by weak collisions (keep in mind that quasi-static broadening is negligible). To perform this calcu-

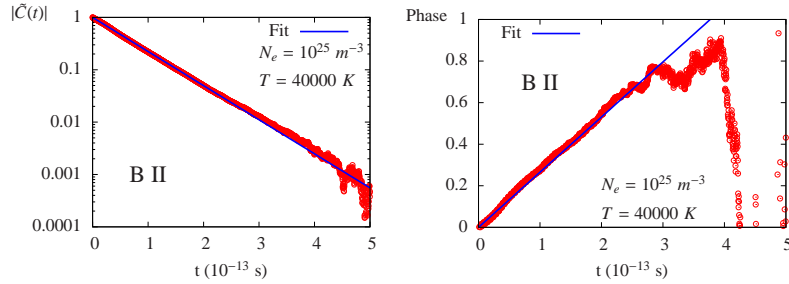


FIGURE I.6 - “Modulus, phase” representation of the complex autocorrelation function of the $1s^2 2s 3s \ ^3P - 1s 2^2 2s 3p \ ^3P^o$ from Beryllium II with an electron density of 10^{22} m^{-3} and a temperature of 40000 K . Together with the simulation results the best fit to a exponential has been plotted. The noise of the simulation for long times is shown very large in logarithmic scale.

lations we have computed the Weisskopf radius following the numerical procedure described above with a cutoff value for the phase equal 0.1. The lines obtained with this procedure shows a width about 50% lower than those obtained with all collisions. Which can be interpreted as an equal contribution from weak and strong collisions.

On the other hand we have analyzed the effect of the electrons and the ions. If we take into account only the fields created by electrons, the width of the lines is almost the same as when all the fields are included. That means that the broadening of the lines is mainly caused by the effect of the electrons, and the effects of the ions are negligible.

Now we are going to apply the Molecular Dynamics technique to the same transition. In this case, the simulations are much more expensive, thus it is not possible to perform as many calculations as with the Independent Particle case. We have simulated three different ρ values for each species (keep in mind that the simulations depend on ρ , not on density and temperature independently), $\rho \approx 0,3$, $\rho \approx 0,6$ and $\rho \approx 1,0$. The first one corresponds to most of the experimental cases, whereas the higher ones correspond to a moderately coupled plasmas. Because of the time required to perform this kind of simulations, the number of samples for each case is less than in Independent Particles case, so the results obtained here will be more noisy.

The novelty here is the appearance of a new broadening process: the recombination broadening. Due to the interaction between particles,

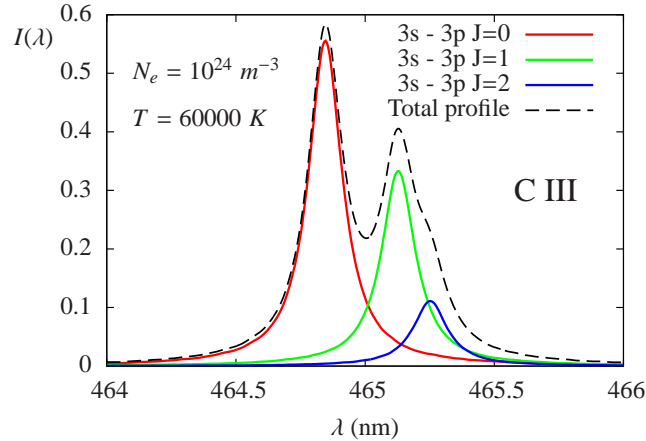


FIGURE I.7 - Spectral profile of $3s-3p$ transition from C III for $N_e = 10^{24} \text{ m}^{-3}$ y $T = 60000 \text{ K}$. Each component as well as the complete profile are shown.

eventually the electrons can be trapped by the ions. When that happens, the electrons move around the ions at very short distances and the pair electron-ion can be seen as an ion of charge $Z-1$. Thus, the line observed is no longer visible since the emitter has changed its atomic structure completely, now it is an ion of a different species, and this is equivalent to a complete loss of the coherence in the emission.

The broadening process due to the recombination can be treated following the same procedure than the strong collisions, but using the recombination frequency instead the strong collision frequency. We have measured the recombination time (the time that an ion is free before a recombination happens) in our simulations. This time should follow the statistical law given by

$$f(t) = \frac{\exp(-t/\tau_r)}{\tau_r} \quad (\text{I.23})$$

since a recombination event does not depends on when the last one has happened.

An example of the results together with the fit is shown in figure I.8. Here we can see that, effectively, the recombination time follows the statistical law given by expression I.23. And what is more important, that the recombination time decreases with the charge of the emitter. This means that the recombination frequency increases with Z , as opposed

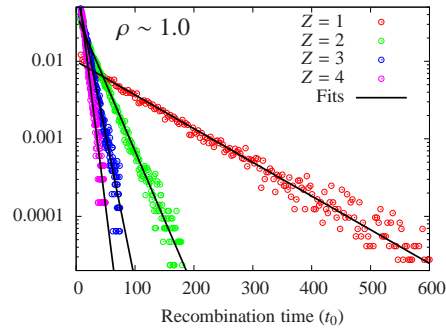


FIGURE I.8 - Distribution function of the time that an ion is free before a recombination happens. The coupling parameter of the plasma is $\rho \sim 1.0$. Several values of the emitter charge are plotted. In solid line the best fit to a function like the one of I.23.

to what happens with the strong collisions frequency. For the case of $\rho \approx 0,6$ we obtain a similar result and for $\rho \approx 0,3$ the recombination time is so long that we do not have long enough histories to make a good statistic.

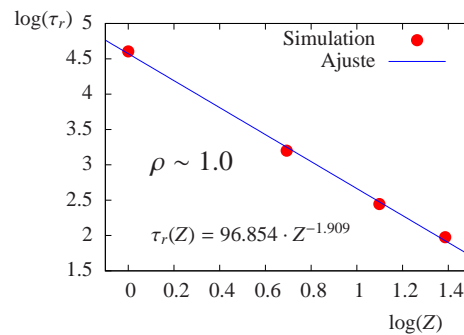


FIGURE I.9 - Recombination time (τ_r) as a function of the charge of the emitter (Z)

Our results shows that the width of the line due to the recombination goes approximately like Z^α , where $\alpha \approx 2$, as it can be seen in figure I.9 (we do not have enough data to give an accurate answer). This means that if the recombination is the dominant broadening mechanism the

width of the line would increase like Z^2 , and in a case in which the dominant mechanism was the impact broadening, the recombinations broadening would compensate the decreasing of the width, given rise to a tendency with less slope than Z^{-2} (in logarithmic scale).

Let us analyze now the strong frequency collisions in the simulations. To do this, we will calculate the Weisskopf radius following the numerical procedure described in the section of "Strong collision approximation". Once we know this value, we compute in the simulation the number of collisions with an impact parameter lower than the Weisskopf radius. We have observed that once the recombination collisions appear, any strong collision produces a recombination. Only in the weakly coupled cases in which the charge of the emitter is 1 or 2, there are strong collisions which are not recombinant, and in those cases there are barely recombinations. Furthermore, the dependence of the strong collisions frequency with the charge of the emitter is not as simple as in the Strong collisions approximation. The dependence is not only in the cross section (through the matrix R), but also in the dynamic of the particles, which depends on the charge of the emitter and on the coupling parameter of the plasma.

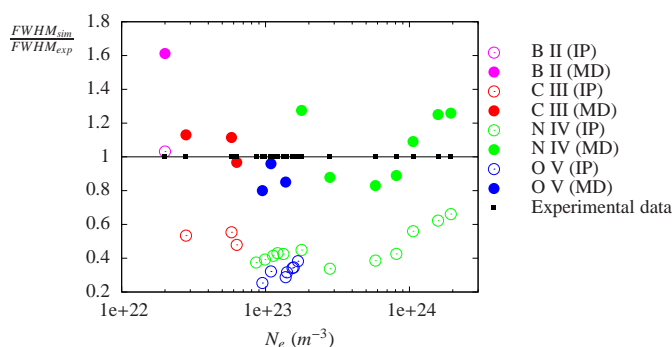


FIGURE I.10 - Comparison of the full width at half maximum obtained from simulations ($FWHM_{sim}$) with the experimental measurements ($FWHM_{exp}$). We have plotted the ratio between the simulation results and the experimental data for the first four elements of the Beryllium isoelectronic series, the results from Independent particles (IP) with hollow circles and the results from Molecular Dynamics (MD) with dots. The experimental results have been obtained from Purić *et al* (1996), Milosavljević and Djenize (1998), Wrubel *et al* (1998) y Blagojević *et al* (1999).

Taking into account these considerations, we can imagine that the Z-scaling would not be as simple as predicted by the Strong collisions

model. Even if the broadening were caused only by strong collisions. Not to mention that the weak collisions could also play a non-negligible role (as we have seen in the Independent particles results).

In figure I.10 we have plotted the ratio between the width obtained in the simulation and the experimental width.

As it can be expected, the calculations from Molecular Dynamics simulations give a result much closer to the experimental value than the ones from the Independent Particles technique. The results obtained with Independent Particles gives systematically a smaller value of the width than the Molecular Dynamics. This is completely understandable for two reason. First, there is no recombination broadening in the Independent Particles technique. And second, since the interaction between particles is not included in IP, the fields seen by the emitter are less intense than in the MD technique and the strong collision frequency is also slower.

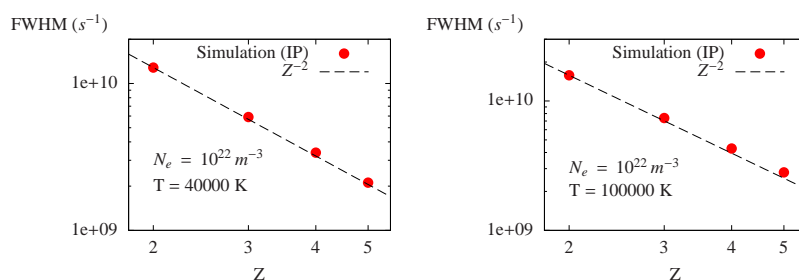


FIGURE I.11 - Independent Particles. Full width at half maximum of each components of the transition $1s^2 2s 3p J = 2 \rightarrow 1s^2 2s 3s J = 1$ for different elements of the Beryllium isoelectronic series, the electron density is $N_e = 10^{22} m^{-3}$ and the temperature $T = 40000 K$ (left) and $T = 100000 K$ (right).

Let us see the Z-scaling obtained with each technique. Firstly we are going to analyze the dependence with Z of the results from Independent Particles. In figure I.11 two examples of the Z-scaling are shown. In both cases we observe that the results match perfectly with the prediction of the models, the width of the line goes like Z^{-2} . This behavior can be observed in any other case with densities between $10^{22} m^{-3}$ and $10^{25} m^{-3}$ and temperatures between 40000 K and 100000 K.

On the other hand, the results from the Molecular Dynamics technique are completely different. Mainly because of the appearance of the recombination broadening. As said before, the width due to this mechanism increases with Z, and together with the rest of broadening mecha-

nism make the dependence with Z much more complicated than Z^{-2} . The results can be seen in figures I.12 and I.13.

In the most extreme cases of very low temperature, the recombination broadening is dominant and then the width of the line increases with Z (see eq. I.12). As the recombination time increases, the other effects have more influence in the result, and as a consequence the dependence with Z is the result of the combined effects of all broadening mechanisms.

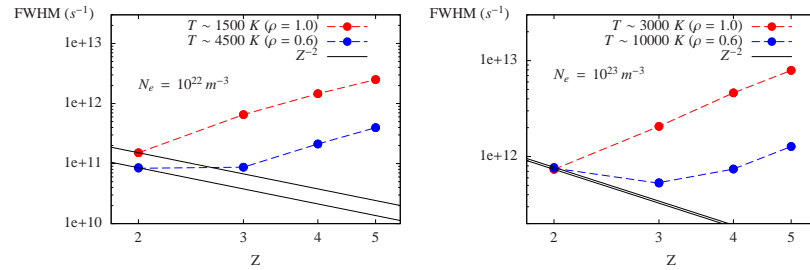


FIGURE I.12 - Molecular Dynamics. Full width at half maximum of each components of the transition $1s^2 2s 3p J = 2 \rightarrow 1s^2 2s 3s J = 1$ for different elements of the Beryllium isoelectronic series. Two cases of temperature for two values of electron density are shown ($10^{22} m^{-3}$ in the left figure and $10^{23} m^{-3}$ in the right one.).

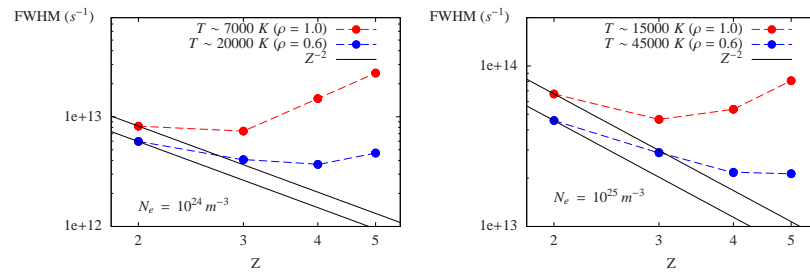


FIGURE I.13 - The same as in I.12 for an electron density of $10^{24} m^{-3}$ in the left figure and $10^{25} m^{-3}$ in the right one.

I.3. Conclusions

In view of the results of this work, we can conclude the following: as far as the weak collisions approximation is concerned, with the help of an artificial field sequences generated by an ARMA process, we have seen that the predictions of the model match with the results of the complete calculation (as long as the correlation function of the field does not diverge and the assumptions of the model are valid). In those cases, the width of the line is proportional to the matrix R^2 , however the Fourier transform appearing in the expression of the width operator could have some influence, which could complicate the Z -dependence.

The strong collision model does not present any mathematical problem. Its only weakness is the determination of the Weisskopf radius, which is not well defined and has a strong influence on the result. However, this approximation gives us (independently of the value of the Weisskopf radius) the dependence of the width with the charge of the emitter, which is Z^{-2} . The main issue of this model is that it is assumed that the strong collision frequency depends on Z only through the matrix R , which is not true in the cases studied here, where also the strong collision frequency depends on the coupling parameter of the plasma and on the charge of the emitter.

The calculation carried out with the Independent Particles technique shows that the correlation function of all of the studied lines has a lorentzian shape. This means that the width of the line has been caused by impact phenomena. In all cases, each fine structure component of the transition can be approximated very well by a lorentzian. Thus, in all cases the broadening caused by the statistics of the field (quasi-static broadening) can be neglected. Furthermore, we have checked that the width of the line is caused mainly by the electrons and also that the strong collisions are responsible for about the 50% of the width (keep in mind that the choice of the Weisskopf radius is not unique).

The Molecular Dynamics calculations (with interaction) show also exponential correlation functions. However, here a new broadening mechanism has appeared, which is the dominant one in many cases: the recombination broadening. When the emitter traps an electron, its atomic structure changes, and then the line under study disappears. This is seen in the correlation function as a total loss of coherence. This phenomenon affects to the total width of the line, and then the width will be the contribution of three different mechanism: the strong collisions, the weak collisions and the recombination.

In this calculations, we have studied the frequency of the recombina-

tion and of strong collisions. It has been shown that as the charge of the emitter increases and the plasma is more coupled, the frequency of recombination increases (and also the width related to this process). The time of recombination seems to have a potential dependence with the charge, however we do not have enough data to establish a clear dependence with the coupling parameter. The development of an analytical model for this phenomenon is not an easy task, since the trapping process is a collective process very difficult to idealize in the case of plasmas with multicharged ions.

The strong collisions follows the same statistics as the recombination collisions. However, in the cases we have studied, in most of the situations, the recombination frequency is higher than the strong collisions frequency. Any strong collision is a recombinant collision. Only for the weakly coupled plasmas and for emitters with charge equal 1 and 2 the strong collisions frequency is higher than the one of the recombinations.

When we compare the widths obtained through the simulations with the experimental data, the results from the Independent Particles technique give systematically smaller values than the experiments. This is easily explicable considering that this technique does not take into account the charge of the emitter, and hence it underestimates the field intensity and the collision frequency. On the other hand, the results which have been obtained from Molecular Dynamics give values of the width higher than the ones obtained from Independent Particles and are in good agreement with the experimental data. The discrepancies between the simulation values (MD) and the experimental data are about 20 %, which is reasonable if we take into account the noise of the simulations (due to the relatively low sampling consequence of the high time required for each simulation) and the uncertainties of the experimental conditions.

The Independent Particles technique (which does not take into account the interaction between particles) gives a Z -dependence which matches with the prediction of the model (Z^{-2}). However, the Molecular Dynamics calculations (much more realistic) give a dependence with Z much more complicated which also depends on the plasma conditions (electron density and temperature). In any case, the Molecular Dynamics calculations give always higher values of the widths than the models, which sometimes causes the width to increase with Z (contrary to predictions of the model).

In view of all these results, everything seems to hint that the discrepancies between the theoretical models and the experimental measurements can be explained by including the recombination width and

considering that the strong collision frequency depends on the charge of the emitter and on the coupling parameter of the plasma, which can be achieved by using a full Molecular Dynamic simulations like the one which has been used here.

Other results obtained in this work

The results of this work go beyond the Stark broadening of spectral lines. To study the Stark broadening of the spectra from charged emitters we have developed a full Molecular Dynamics technique to reproduce this kind of plasmas. During the process, several aspects of these simulations have been studied; most of them are not related to the broadening of the lines which are the subject of this work, but they are important enough in other fields to be included here.

The first result in this sense is the generalization of the Molecular Dynamics simulation technique (Lara, 2013) to be applied in plasmas with more than one component and for ions with charge higher than 1. The new technique has been tested following different procedures to ensure its proper working.

In particular, I would like to point out the equilibration process. As for the case of ions with charge equal one, the equilibration process is a very delicate process which requires a lot of computation time. To optimize the process and to achieve a proper equilibrium state, it is necessary to bear in mind some considerations:

- It has to be done with positrons (same mass as electrons) instead of ions. Otherwise the computational time required is prohibitive. Even in that case, several tens of thousands of time units are required to achieve the equilibrium (more than 10^8 – 10^9 time steps)
- The process with thermalization procedure (which artificially keeps the temperature constant), slows down the process and complicates the detection of the equilibrium.
- The fastest way to achieve equilibrium is to let the plasma evolves by itself (even faster than the Metropolis method).

One of the aspects which make the simulation of Molecular Dynamics very useful is the field distributions. The high frequency field distributions obtained from the simulations are almost the same as the ones obtained in the calculations by Hooper or with APEX. However, to reproduce the low frequency field distribution it is necessary to average

the field over the time. The averaging time required to reproduce the Hooper distribution of low frequency field is much longer than expected. In fact, it is longer than the typical time of the ions (for Hydrogen ions) which contradicts the Hooper hypothesis.

Another important point in which the simulation can provide useful information is the weakening of the fields (or of the potential). This effect is caused by two phenomena. On one hand, the screening of the ionic field by the electrons. And on the other the coupling between charges. These two phenomena lead to a mean potential whose Debye radius accounts for the effect of both. We have checked that the mean potential obtained from the analytic formula (for ions with charge equals one), match with the one measured directly from the simulations, with the one obtained through the radial distribution function (by HNC calculations) and with the mean potential calculated from the charge integral.

J

Bibliografía

Bibliografía

- Alexiou S,
Collision operator for isolated ion lines in the standard Stark-broadening theory with applications to the Z scaling in the Li isoelectronic series 3P-3S transition,
Phys. Rev. A **49**, 106 (119). 1994
- Alexiou S and Ralachenko Yu,
Z scaling of the 3P-3S Li isoelectronic series transition: Quadrupole Stark broadening and resonances,
Phys. Rev. A **49**, 3086 (3088). 1994
- Alexiou S , Dimitrijević M S, Sahal-Brechot S, Stambulchik E, Duan B, González-Herrero D, Gigosos M A,
The second workshop on lineshape code comparison: Isolated lines,
Atoms **2**, 157 (177). 2014
- Anderson P W,
Pressure Broadening in the Microwave and Infra-Red Regions,
Phys. Rev. **76**, 647 – 661 (1949).
- Baranger M and Mozer B,
Electric field distribution in an Ionized Gas,
Phys. Rev **115**, 521 (525). 1959
- Bethe H A and Salpeter B E,
Quantum Mechanics of One- and Two- Electrons Atoms,
Berlin, (1957).
- Blagojevic B, Popovic M V, Konjevic N and Dimitrijevic M S,
Stark broadening parameters of analogous spectral lines along the lithium and beryllium isoelectronic sequences,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **61**, 361 (375). 1999

- Bottcher F, Breger P, Hey J D and Kunze H-J,
Dependence of the Stark broadening on the emitter charge for the 3s-3p transitions of Li-like ions,
Phys. Rev. A **38**, 2690 (2693). 1988
- Brissaud A and Frisch U,
Theory of Stark broadening II. Exact line profile with model microfield,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **11**, 1767 (1783). 1971
- Calisti A, Stamm R, Talin B,
Simulation calculation of the ion-dynamic effect on overlapping neutral helium lines,
Phys. Rev. A **38**, 4883 (4886). 1988
- Calisti A, Ferri S, Talin B,
Classical molecular dynamics model for coupled two component plasmas,
HEDP **5**, 307 (311). 2009
- Calisti A, Ferri S, Mosse C, Talin B, Gigoso M A, González M A,
Microfield in hot dense hydrogen plasmas,
HEDP **7**, 197 (202). 2011
- Cooper J and Oertel G K,
Stark broadening of isolated ion lines in a plasma,
Phys. Rev. Lett. **18**, 985 (988). 1967
- Duan B, Abbas Bari M, Wu Z and Yan J,
Ion Motion in Plasma Line Broadening,
Phys. Rev. A **2**, 534 (541). 1970
- Duan B, Abbas Bari M, Wu Z and Yan J,
Electron-Impact Widths and Shifts of B III 2p-2s Lines,
Atoms **2**, 207 (214). 2014
- Duan B, Bari M A, Wu Z Q, Jun Y, Li Y M and Wang J G,
Relativistic quantum mechanical calculations of electron-impact broadening for spectral lines in Be-like ions,
Astron. & Astrophys. **547**, A4 1 (6). 2012
- Zeitschrift für Naturforschung Part A,
Das Mikrofild in Gesamtheiten mit Coulombscher Wechselwirkung,
Ecker G **Z. Naturforsch.**, 148 (593). 6061957

- Elabidi H, Ben Nessib N and Sahal-Bréchet S,
Quantum mechanical calculations of the electron-impact broadening of spectral lines for intermediate coupling,
J. Phys. B **37**, 63 (71). 2004
- Elabidi H, Ben Nessib N and Dimitrijevic M S,
Electron impact broadening of multicharged ion lines of astrophysical interest: Ne VII, Ne VIII and Si XI,
New Astronomy **12**, 64 (70). 2006
- Elabidi H, Sahal-Brechet S, and Ben Nessib N,
Quantum Stark broadening of 3s-3p spectral lines in Li-like ions; Z-scaling and comparison with semi-classical perturbation theory,
Eur. Phys. J. D **54**, 51 (64). 2009
- Frerichs M R,
Simulation of stochastic model processes in the theory of Stark-broadening,
Z. Phys. D **11**, 315 (321). 1989
- Frisch U and Brissaud A,
Theory of Stark broadening I. Soluble scalar model as a test,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **11**, 1753 (1766). 1971
- George E P Box and Jenkins F M,
Time Series Analysis: Forecasting and Control,
Holden-Day, Oakland, CA, (1976).
- Gigosos M A, Fraile J and Torres F,
Hydrogen Stark profiles: A simulation-oriented mathematical simplification,
Phys. Rev. A **31**, 3509 (3511). 1985
- Gigosos M A and Cardenoso V,
New plasma diagnosis tables of hydrogen Stark broadening including ion dynamics,
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **29**, 4795 (4838). 1996
- Gigosos M A and González M A,
Stark broadening tables for the helium I 447.1 line. Application to weakly coupled plasmas diagnostics,
Astron. & Astrophys. **503**, 293 (299). 2009

- Gigosos M A, González M A and Konjevic N,
On the Stark broadening of Sr+ and Ba+ resonance lines in ultracold neutral plasmas,
Eur. Phys. J. D **40**, 57 (63). 2006
- Gigosos M A, González M A, Talin B and Calisti A,
Exact expression of impact broadening operator for Hydrogen Stark broadening,
Astron. & Astrophys. **466**, 1189 (1196). 2007
- Gigosos M A and González M A,
Stark broadening tables for the helium I 447.1 line. Application to weakly coupled plasmas diagnostics,
Astron. & Astrophys. **503**, 293 (299). 2009
- Gigosos M A, Djurović S, Savić I, González-Herrero D, Mijatović and Kobilarov R,
Stark broadening of lines from transition between states $n=3$ to $n=2$ in neutral helium. An experimental and computer-simulation study,
Astron. & Astrophys. **561**, A135 (13). 2014
- Gigosos M A,
Stark broadening models for plasma diagnostics ,
J. Phys. D: Appl. Phys **47**, 343001 1 (33). 2014
- Glenzer S, Uzelac N I, and Kunze H J,
Stark broadening of spectral lines along the isoelectronic sequence of Li,
Phys. Rev. A **45**, 8795 (8802). 1992
- Glenzert S, Hey J D and Kunze K,
Stark broadening of spectral lines along the isoelectronic sequence of B,
J. Phys. B **27**, 413 (422). 1994
- González-Herero D, Lara N and Gigosos M A,
New developments in Line shapes calculations using computer simulations.,
II International Workshop on Spectral Line Shapes in Plasmas, Vienna (Austria) 2013.
- González-Herero D and Gigosos M A,
Stark broadening calculation by computer simulation using independent and interacting particles,

- III International Workshop on Spectral Line Shapes in Plasmas, Marsella (Francia) 2015.
- Griem H R, Kolb A C and Shen K Y,
Stark Broadening of Hydrogen Lines in a Plasma,
Phys. Rev. **116**, 4 (16). 1959
- Griem H R and Shen K Y,
Stark broadening of Hydrogenic ion lines in plasmas,
Phys. Rev. **122**, 1409 (1496). 1961
- Griem H R, Baranger M , Kolb A C and Oertel G,
Stark Broadening of Neutral Helium Lines in a Plasma,
Phys. Rev. **125**, 177 (195). 1962
- Griem H R,
Stark Broadening of Isolated Spectral Lines from Heavy Elements in a Plasma,
Phys. Rev. **128**, 515 (523). 1962
- Griem H R,
Plasma Spectroscopy,
McGraw-Hill, New York, (1964).
- Griem H R,
Electron-impact broadening of isolated lines,
Phys. Rev. Lett. **17**, 509 (513). 1966
- Griem H R and Ralachenko Yu V,
Electron collisional broadening of isolated lines from multiply-ionized atom,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **116**, 4 (16). 1959
- Halenka J, Olchawa W, Grabowski B and Gajda F,
Perturber's charge effect on Stark broadened hydrogen lines in helium plasmas,
JQSRT. **74**, 539 (544). 2002
- Hegazy H, Seidel S, Wrubel Th and Kunze H J,
Broadening of the 3s-3p transition in NeVIII,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **81**, 221 (226). 2003
- Hegerfeldt G C and Kesting V,
Collision-time simulation technique for pressure-broadened spectral lines with applications to Ly- α ,
Phys. Rev. A **37**, 1488 (1496). 1988

- Holstmark J,
Über die Verbreiterung von Spektrallinien,
Annalen der Physik **58**, 45 (55). 1919
- Hooper C F,
Electric microfield distributions in plasmas,
Phys. Rev **149**, 77 (91). 1966
- Hooper C F,
Low-Frequency component electric microfield distribution in plasmas,
Phys. Rev **165**, 215 (222). 1968
- Hooper C F,
Asymptotic electric microfield distributions in low-frequency components plasmas,
Phys. Rev **169**, 193 (195). 1968
- Iglesias C A,
Electric microfield distributions in strongly coupled plasmas,
Phys. Rev. A **28**, 1667 (1672). 1983
- Iglesias C A,
Electron broadening of isolated lines with stationary non-equilibrium level populations,
HEDP **1**, 42 (51). 2005
- Kelleher D E and Wiese W L,
Observation of Ion Motion in Hydrogen Stark Profiles,
Phys. Rev. Lett. **31**, 1431 (1434). 1973
- I. Langmuir,
Oscillations in ionized gases,
Proc. Nat. Acad. Sci. **14**, 627 (637). 1928
- Lara N, González-Herero D, González M A and Gigosos M A,
Line shape calculations using computer simulations,
I International Workshop on Spectral Line Shapes in Plasmas, Vienna (Austria) 2012.
- Lara N , González M A and Gigosos M A,
Stark broadening tables for the helium I 492.2 line. Application to weakly coupled plasmas diagnostics,
Astron. & Astrophys. **542**, A75 1 (7). 2012

- Lara N,
Cálculo de espectros Stark de plasmas fuertemente acoplados mediante simulación de dinámica molecular,
Universidad de Valladolid. Facultad de Ciencias, (2013).
- Lee R W,
A theoretical study of the effects of ion motion on spectral lines in plasmas I. Neutral helium lines,
J. Phys. B **6**, 1044 (1059). 1973
- Lewis M,
Stark broadening of spectral lines by high-velocity charged particles,
Phys. Rev. **121**, 501 (505). 1961
- Lorentz H,
The absorption and emission lines of gaseous bodies,
Proceedings of the Amsterdam Academy of Science **8**, 591 (611). 1906
- Metropolis N, Rosenbluth W R, Rosenbluth N M, Teller H A and Teller E,
Equation of State Calculations by Fast Computing Machines,
JChPh **21**, 1087 (1092). 1953
- Margenau H and Lewis M,
Structure of Spectral Lines from Plasmas,
Rev. Mod. Phys. **31**, 569 (613). 1959
- Milosavljević V and Djeniže S,
Measured Stark widths and shifts of NII, NIII and NIV spectral lines,
Astron. & Astrophys. Suppl. Ser. **128**, 197 (201). 1998
- Minoo H , Gombert M M and Deutsch C,
Temperature-dependent Coulomb interactions in hydrogen system,
Phys. Rev. A **23**, 924 (493). 1981
- Mozer B and Baranger M,
Electric field distribution in an Ionized Gas. II,
Phys. Rev **118**, 626 (631). 1960
- NIST (National Institute of Standards and Technology): Atomic Spectra Database
<http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>
Last update: October 2015

- Pardini L, Legnaioli S, Lorenzetti G, Palleschi V, Gaudiuso R, De Giacomo A, Diaz Pace D M, Anabitarte Garcia E, de Holanda Cavalcanti G, Parigger C,
On the determination of plasma electron number density from Stark broadened hydrogen Balmer series lines in Laser-Induced Breakdown Spectroscopy experiments,
Spec. Acta B **88**, 98 (103). 2013
- Pfennig H and Trefftz E,
Pressure broadening of the diffuse Helium lines; Comparison between measurement and theory in the quasistatic regime,
Z. Naturforsch. **21**, 697 (718). 1966
- Poquérusse A, Alexiou S and Klodzh E,
Hyperbolic trajectory parametrization for spectral line broadening calculations,
JQSRT. **56**, 153 (156). 1996
- Purić J, Srećković, Djeniže S, and Platisa,
Stark broadening and regularities of prominent multiply ionized nitrogen spectral lines,
Phys. Rev. A **36**, 3957 (3963). 1987
- Ralchenko Y V, Griem H R, Bray I and Fursa D V,
Electron collisional broadening of 2s3s-2s3p lines in Be-like ions,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **71**, 595 (607). 2001
- Sahal-Bréchet S,
Théorie de l'élargissement et du déplacement des raies spectrales sous l'effet des chocs avec les électrons et les ions dans l'approximation des impacts,
Astron. & Astrophys. **1**, 91 (123). 1969
- Sanchez A, Blahs M, and Jones W W,
Measurement and Calculation of the Stark-Broadening Parameters for the Resonance Lines of Singly Ionized Beryllium,
Phys. Rev. A **8**, 774 (780). 1973
- Seidel J and Stamm R,
Effects of radiator motion on plasma-broadened Hydrogen Lyman- β ,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **27**, 499 (503). 1982
- Smith W E and Hooper C F,
Relaxation theory of spectral line broadening in plasmas,
Phys. Rev. **157**, 126 (137). 1967

- Smith W E , Cooper J and Vidal C R,
Unified classical-path treatment of Stark broadening in plasmas,
Phys. Rev. **185**, 140 (151). 1969
- Smith W E ,Talin B and Cooper J,
An analysis of markovian model microfield methods for stark broadening,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Tansfer **26**, 229 (242). 1981
- Sobel'man I I,
Introduction to the theory of atomic spectra,
Pergamon Press, New York, (1972).
- Stambulchik E, Alexiou S,Griem H R and Kepple P C,
Stark broadening of high principal quantum number hydrogen Balmer lines in low-density laboratory plasmas,
Phys. Rev. E **75**, 016401.1 (9). 2007
- Stamm R and Voslamber D,
On the role of ion dynamics in the stark broadening of Hydrogen lines,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Tansfer **22**, 599 (609). 1979
- Talin B, Dufour E, Calisti A, Gigosos M A, González M A, del Río Gaztelurrutia T and Dufty J W,
Molecular dynamics simulation for modelling plasma spectroscopy,
J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 6049 (6056). 2003
- Talin B, Calisti A, Dufty J, Pogorelov I V,
Electron dynamics at a positive ion,
Phys. Rev. E **77**, 036410 (13). 2008
- van Leeuwen J M J, Groeneveld J de Boer J,
New method for the calculation of the pair correlation function. I,
Physica **25**, 792 (808). 1959
- Verlet L,
Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules,
Phys. Rev. **159**, 98 (103). 1967
- Verlet L,
Computer .^Experiments.°n Classical Fluids. II. Equilibrium Correlation Functions,
Phys. Rev. **165**, 201 (214). 1968

Weisskopf V,

Die Breite der Spektrallinien in Gasen,

Phys. Z. **34**, 1 (24). 1933

Wrubel Th, Ahmad I, Buscher S and Kunz H-J,

Stark broadening along the berylliumlike sequence,

Phys. Rev. E **57**, 5972 (5977). 1998

