UNIVERSIDAD POLITECNICA DE MADRID

DEPARTAMENTO DE INGENIERIA ENERGETICA
ESCUELA TECNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES

PROGRAMA DE DOCTORADO
ENERGIA SOSTENIBLE, NUCLEAR Y RENOVABLE

**Modelo Colisional Radiativo de Atomo Medio Basado en un Modelo Atómico
Apantallado Relativista.**

*Tesis doctoral presentada por Ana Josefa Benita Cerdan, Ingeniera Superior Industrial,
Máster Ciencia y Tecnología Nuclear.*

Dirigida por el Dr. Emilio Minguez Torres.

El director,

Fdo.: Dr. E. Minguez Torres

El doctorando,

Fdo.: Ana Josefa Benita Cerdan

Madrid, Julio de 2017

A ONU Mujeres y al Sistema Bancario,

la gestión del dinero es la clave de la historia de la humanidad.

Agradecimientos

En primer lugar, agradecer a todos los integrantes del departamento de Física Atómica de la ETSII UPM y de la ULPGC, la confianza depositada en mi persona para utilizar su modelo atómico hidrogenoide apantallado relativista NRSHM, que tanto esfuerzo humano, temporal y computacional ha requerido para su construcción.

Creo sinceramente que devuelvo con creces el gran favor de haberme dejado utilizarlo, ya que finalmente el código colisional radiativo desarrollado ATMED CR de átomo medio es de tercera generación en cuanto al desdoblamiento relativista (nlj) de la estructura de la materia, y ha multiplicado exponencialmente el valor científico del modelo atómico puesto que ya se pueden calcular propiedades fundamentales de millones de plasmas con resultados de extraordinaria precisión.

Gracias a todos los coautores del código ATMED CR, E. Mínguez, M.A. Mendoza, J.G. Rubiano, J.M. Gil, R. Rodríguez y P. Martel, por su revisión del programa informático y por la aportación y sus correcciones a la tesis escrita.

Aún con el paso del tiempo y de los años, tengo recuerdos académicos maravillosos de la ETSII UPM de la que recibí el título de Ingeniera Superior Industrial en el año 2000, porque obtener una nota de 5, 7 u 8 durante el primer ciclo de la carrera en las asignaturas en exámenes de más de 800 o 1000 personas es una sensación única y excepcional.

Finalmente, gracias a mi familia directa por su apoyo emocional y económico durante todos estos años de elaboración de la presente tesis doctoral.

Resumen

El propósito general de esta tesis doctoral será describir en detalle los cálculos de propiedades de plasmas realizados con el código desarrollado **ATMED CR** (**AT**omo **MED**io **Col**isional **R**adiativo), y contrastarlos con las medidas experimentales disponibles y con trabajo teórico desarrollado previamente por otros modelos colisionales radiativos. El objetivo principal de esta Tesis Doctoral es realizar el desarrollo del código **ATMED CR**, partiendo de otro código denominado **ATMED LTE** elaborado previamente con un modelo atómico hidrogenoide apantallado relativista propio de ULPGC-UPM, que permitía calcular las propiedades ópticas y termodinámicas de plasmas en equilibrio termodinámico local.

Se ha desarrollado un código **ATMED CR** de última generación en modelos de átomo medio y tercera generación en cuanto a desdoblamiento (nlj) de la estructura de la materia. El valor del modelo NRSHM se ha multiplicado exponencialmente porque ahora se pueden calcular millones de plasmas con resultados muy precisos.

ATMED CR lanzado en 2017 es el código colisional radiativo de átomo medio más avanzado de Física Atómica, válido para amplios rangos de condiciones termodinámicas y para todos los elementos químicos desde el hidrógeno hasta el mercurio. Representa también una evolución tecnológica y científica de cuatro décadas desde el código **XSN** de 1977 con desdoblamiento (n) y los códigos de los autores Faussurier y Blancard de 2009 y Rozsnyai de 2010 con desdoblamiento (nl).

Summary

The general purpose of this doctoral thesis will be to describe in detail the computation of plasma properties with the developed code **ATMED CR** (**AT**om **MED**ium **Col**lisional **R**adiative), and to check and verify them with the available experimental measurements and also with theoretical work previously done by other collisional radiative models. The main objective of this doctoral thesis is to perform the development of code **ATMED CR**, using another one called **ATMED LTE** previously programmed considering a relativistic screened hydrogenic atomic model developed in ULPGC-UPM, which allowed the computation of atomic, optical and thermodynamic properties of plasmas in the regime of Local Thermodynamic Equilibrium.

It has been developed a code **ATMED CR** of the last generation in average atom models and third generation with respect to splitting (nlj) of the matter structure. The value of the model NRSHM has been exponentially multiplied because now millions of plasmas can be computed with very precise results.

ATMED CR launched in 2017 is the most advanced collisional radiative average atom code in atomic physics, valid for wide ranges of thermodynamic conditions and for all the elements from hydrogen to mercury. It also means a scientific and technological evolution of four decades since the code **XSN** of 1977 with n-splitting and the codes of authors G. Faussurier, C. Blancard of 2009 and Balazs F. Rozsnyai of 2010 with nl-splitting.

INDICE

1. INTRODUCCION	7
1.1 Física de Plasmas y Aplicaciones en las que se Desarrolla la Tesis	7
1.2 Estado del Arte en Simulación de Plasmas	10
1.3 Objetivo y Estructura de la Tesis Doctoral	12
2. ATOMOS MULTIELECTRONICOS	17
2.1 Determinación de la Estructura Atómica	17
3. MODELOS DE ATOMO MEDIO EN REGIMEN LTE	21
3.1 Modelo Hidrogenoide Apantallado Relativista	21
3.2 Átomo Multielectrónico en ATMED LTE	28
3.3 Resolución de las Ecuaciones del Átomo Medio	28
3.4 Plasmas de Varios Componentes	30
4. MODELO COLISIONAL RADIATIVO DE ATOMO MEDIO EN REGIMEN NLTE	32
4.1 Resolución de las Ecuaciones del Átomo Medio en Estado Estacionario	32
4.2 Resolución Temporal de las Ecuaciones del Átomo Medio	52
5. DETERMINACION DE PROPIEDADES RADIATIVAS Y TERMODINAMICAS	56
5.1 Modelo de Opacidad	56
5.2 Modelo de Emisividad	60
5.3 Plasmas Opticamente Gruesos	62
5.4 Cálculo de la Ecuación de Estado	74
5.5 Mezclas Calculadas con el Balance CR	77
5.6 Opciones de Cálculo Implementadas en ATMED CR	79
6. VALIDACION DEL MODELO ATMED CR	82
6.1 Metales de Transición	82
6.2 Lantánidos	139
6.3 Metales no Ferromagnéticos	142
6.4 Gases Nobles	146
6.5 Carbonoideos: Semimetales ó Metaloides	169
6.6 Carbonoideos: No Metales	172
6.7 Reuniones Científicas NLTE-3 y NLTE-4	174
6.8 Mallas Finas de Cálculo Colisional Radiativo	180

6.9 Mezclas	185
7. CONEXION DE ATMED CR CON UN CODIGO HIDRODINAMICO	234
7.1 Código Hidrodinámico HYAT	234
7.2 Diagrama de Flujo del Programa HYAT + ATMED CR	235
7.3 Simulación de Experiencias de Irradiación sobre Blancos Planos	238
7.4 Simulación de Experiencias de Irradiación sobre Blancos Cilíndricos	250
8. CONCLUSIONES Y LINEAS FUTURAS	256
8.1 Conclusiones sobre la Funcionalidad Colisional Radiativa	259
8.2 Conclusiones sobre la Herramienta HYAT + ATMED CR	264
8.3 Líneas Futuras	265
9. ANEXO I: SIGLAS	266
9.1 Abreviaturas Globales	266
9.2 Constantes Numéricas	269
9.3 Procesos Atómicos	270
9.4 Notación de Códigos Atómicos y del Código Hidrodinámico	271
9.5 Organizaciones y Grandes Instalaciones	273
10. ANEXO II: MALLAS FINAS DE CALCULO COLISIONAL RADIATIVO	274
11. REFERENCIAS	278

1. INTRODUCCION

1.1 Física de Plasmas y Aplicaciones en las que se Desarrolla la Tesis

Durante las últimas décadas, se han producido significativos y sorprendentes avances en la ciencia de la física de alta densidad de energía utilizando haces láser, máquinas de confinamiento por pinzamiento de plasma (Z-Pinch), etc., con logros técnicos impresionantes en áreas específicas tales como la ignición central o rápida en fusión por confinamiento inercial (FCI), propiedades de la materia en condiciones extremas, materia densa templada y caliente e interacciones haces láser-plasma.

Por primera vez en laboratorio, los experimentos de ignición indirecta mediante Rayos-X de cápsulas posicionadas en el cilindro denominado hohlraum, realizados en la instalación NIF (National Ignition Facility) en Estados Unidos, están empezando a producir auto calentamiento. Experimentos similares están planificados para llevarse pronto a cabo en el Laser Mégajoule (LMJ) en Francia, y otros proyectos de ignición están en curso en China y Rusia. Otras instalaciones como las de compresión magnética en la máquina Z-Pinch (Sandia National Laboratories, EEUU) y experimentos de ignición directa en la Universidad de Rochester están proporcionando nuevos y excitantes resultados.

Sistemas de pulso corto de láser petavatio de segunda generación como LFEX (FIREX) en Japón, OMEGA-EP en Estados Unidos, PETAL en Francia, y Vulcan PW en Reino Unido, permiten probar y analizar materia de alta densidad de energía así como explorar nuevos esquemas alternativos para la ignición por confinamiento inercial. Este análisis científico contribuye al estudio y comprensión de la física teórica y experimental necesaria para desarrollar la energía de fusión por confinamiento inercial como fuente comercial de energía. La tercera generación de láser petavatio de alta energía con tasa de repetición ya es una realidad, para el estudio de la física de plasmas relativistas relevantes para aplicaciones de Rayos-X y astrofísica de laboratorio [1].

Los plasmas fotoionizados mediante campos externos de radiación constituyen también una novedosa oportunidad en la ciencia en las áreas de FCI, física de alta densidad de energía y sus aplicaciones [2-3]. Estos plasmas están caracterizados por el parámetro de ionización ξ que es proporcional al ratio flujo de Rayos-X / densidad electrónica N_e , siendo I la intensidad del campo de radiación:

$$\xi = 4\pi I / N_e \quad (1.1)$$

Este parámetro puede alcanzar valores de hasta pocos miles de erg.cm/s en un gran número de objetos astrofísicos como agujeros negros, conjuntos binarios de cuerpos celestes que emiten Rayos-X y núcleos galácticos activos. En laboratorio, cada vez se alcanzan mayores valores de ξ en experimentos con plasmas fotoionizados, relevantes para aplicaciones astrofísicas y de fusión nuclear. Existen plataformas experimentales en las máquinas Z-Pinch actualmente trabajando con plasmas fotoionizados en diferentes configuraciones, modificando el flujo de Rayos-X sobre blancos como celdas de gas o láminas móviles.

Dependiendo de la configuración experimental, la presión del gas de relleno, tipo de gas, posición de la celda de gas o lámina, se obtienen parámetros de ionización en los rangos 5-10 erg.cm/s para celdas de gas laterales, 20-25 erg.cm/s para láminas en expansión y 100-600 erg.cm/s para celdas de gas situadas en la parte superior de la máquina Z-Pinch (Figura 1.1a).

Figura 1.1a. Celdas de gas de neón laterales o sobre la plataforma experimental Z-Pinch.

En la instalación NIF, están siendo alcanzadas temperaturas de radiación de 330÷350 eV pero mayores valores han sido previstos de hasta 700 eV o más. Experimentos de muestras fotoionizadas externas pero próximas a un hohlraum, pueden también alcanzar condiciones como las halladas en los agujeros negros $\xi \geq 1200$. Si se supone una lámina compuesta por carbono e hidrógeno CH de dimensión característica $D = 1.8$ cm, con densidad electrónica $1E+18$ cm⁻³ expuesta a un campo externo de radiación de temperatura $T_R = 300$ eV procedente de un hohlraum de radio $R = 0.2$ cm, se puede calcular el flujo de Rayos-X sobre la lámina según la formulación:

$$Flux = \sigma T_R^4 * R_{hohlraum}^2 / D_{sample}^2 \quad (1.2)$$

$$\xi = 4\pi Flux / N_e \approx 12.6 \times 10^{20} / 10^{18} \approx 1200 \quad (1.3)$$

En los cilindros hohlraum de escala milimétrica irradiados por haces láser que calientan sus paredes hasta temperaturas de 100÷350 eV, las muestras experimentales pueden localizarse dentro del hohlraum o fuera tal que estén sometidas a un ambiente uniforme de Rayos-X. La instalación Z-Pinch Saturn en los laboratorios SNL, utiliza dos hohlraums concéntricos, uno primario y otro secundario para que la muestra de material experimente un campo de radiación Planckiano de temperatura de radiación controlada. Esta configuración ha servido para validar los modelos de opacidad del hierro bajo condiciones equivalentes a las envolventes estelares. También tienen su máxima importancia los plasmas de tungsteno en fusión por confinamiento magnético (FCM) caracterizados por bajas densidades, $1E+14$ cm⁻³ en régimen corona, y altas temperaturas en el entorno de los 2000 eV. Las pérdidas radiativas de este material son de máxima importancia para diseñar componentes del Tokamak como el divertor o las paredes de la cámara del Reactor Termonuclear Experimental Internacional (proyecto ITER, International Thermonuclear Experimental Reactor).

Con la existencia de estas instalaciones de alta densidad de energía, como los láser de alta potencia y las máquinas de potencia pulsada (Figura 1.1b), cantidades milimétricas de materia pueden ser llevadas a condiciones extremas de densidad, temperatura y/o velocidad. Prolongar este avance espectacular producido en la física de plasmas [4÷8] sólo es posible mediante el desarrollo y actualización de modelos computacionales de simulación de plasmas, entre los que se incluyen los códigos colisionales radiativos para el análisis de la cinética de poblaciones de plasmas así como los códigos hidrodinámicos para estudiar materia irradiada.

**Omega laser facility,
University of Rochester**

(a)

Z (magnetic pinch) facility, SNLA

(b)

Figura 1.1b. Ejemplos de instalaciones experimentales de física de alta densidad de energía: (a) Laser Omega con un haz de 60 rayos láser y hohlraum así como localización de la instrumentación DANTE. (b) Z-Pinch en SNL cuya corriente de operación está siendo aumentada desde 20 a 30 MA [1].

El propósito general de esta tesis doctoral será describir en detalle los cálculos de propiedades de plasmas realizados con el código desarrollado **ATMED CR** (**AT**omo **MED**io **Col**isional **R**adiativo – **AT**om **MED**ium **Col**lisional **R**adiative), y contrastarlos con las medidas experimentales disponibles y con trabajo teórico desarrollado previamente por otros modelos colisionales radiativos. Puesto que en la bibliografía científica consultada así como en los ficheros de salida del código desarrollado en esta tesis ATMED CR, las cifras vienen representadas en notación anglosajona, punto “.” para el símbolo decimal y coma “,” para el separador de miles, se ha empleado dicho criterio en todo el documento para una mayor simplicidad comparativa tanto gráfica como tabular.

1.2 Estado del Arte en Simulación de Plasmas

En este apartado, se analiza el estado actual de la tecnología y sus últimos avances en cuanto a simulación de plasmas se refiere, repasando los modelos computacionales existentes colisionales radiativos y de cinética de poblaciones de plasmas. De esta forma se clarifican las aportaciones que esta tesis realiza:

- Primero a la aplicación ATMED LTE [9÷14] desarrollada previamente para plasmas en condiciones de equilibrio local termodinámico, extendiendo enormemente su rango de validez para caracterizar plasmas por propiedades fundamentales mediante diferentes opciones de cálculo también en regímenes corona y no equilibrio local termodinámico. Además en el caso particular de calcular con ATMED CR plasmas en régimen LTE, se obtienen los valores de las tasas para todos los procesos atómicos involucrados que determinan las poblaciones.
- Y segundo a los modelos colisionales radiativos de átomo medio, posibilitando ATMED CR el cálculo de poblaciones fraccionarias en orbitales relativistas por el desdoblamiento n_{lj} del modelo atómico hidrogenoide apantallado, y mejorando en consecuencia la resolución de las propiedades atómicas y radiativas en la malla de energías fotónicas. Los modelos CR más importantes ya existentes construidos en el formalismo de átomo medio son:
 - El modelo CR XSN de los autores W.A. Lokke y W.H. Grasberger de 1977, desarrollado en el LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory, California, USA). Este código considera desdoblamiento n de los orbitales energéticos del átomo medio para resolver el balance y está basado en un modelo atómico hidrogenoide apantallado.
 - El modelo CR del autor Balazs F. Rozsnyai de 2010, desarrollado en el departamento “Computational Physics Research Company” del LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory, California, USA). Este código considera desdoblamiento nl de los orbitales energéticos del átomo medio para resolver el balance colisional radiativo y posteriormente construye varias configuraciones a partir del ión medio convirtiéndolo en un modelo detallado para el cálculo de propiedades radiativas, logrando así la auto convergencia [15-16].
 - El modelo CR de los autores G. Faussurier, C. Blancard de 2009, desarrollado en la institución “Commissariat à l’Energie Atomique”, Francia. Este código considera desdoblamiento nl de los orbitales energéticos del átomo medio para resolver el balance y está basado en un modelo atómico hidrogenoide apantallado [17-18].

La precisa computación de opacidades frecuenciales $K(h\nu)$ es básica en varios campos de investigación como la astrofísica o la fusión por confinamiento inercial, ya que la opacidad es una propiedad clave de los materiales que cuantifica cómo de transparente u opaco es un plasma a la radiación.

En los experimentos no se mide directamente la opacidad sino la transmisión $F(h\nu)$. La relación entre ambas viene dada por esta ecuación donde μ es la densidad superficial de la muestra de material:

$$F(h\nu) = e^{-\mu K(h\nu)} \quad (1.4)$$

El desarrollo de modelos de cálculo de opacidades es imprescindible, dada la gran amplitud de condiciones de plasma y constituyentes presentes en las diferentes aplicaciones y la imposibilidad de medir todas las opacidades necesarias. Además, algunas condiciones de interés quedan fuera del alcance de los experimentos en laboratorio. Por tanto, el principal objetivo de los experimentos de opacidad es validar los fundamentos físicos de los códigos, de tal forma que puedan ser utilizados por extrapolación en otras condiciones inaccesibles en los laboratorios.

Los códigos hidrodinámicos para la simulación de blancos irradiados por haces láser, necesitan como datos de entrada del material la ionización media, el potencial químico, la opacidad total resuelta espectralmente, las opacidades medias, presión, energía interna, etc., para cada densidad y temperatura en cada intervalo temporal y para cada coordenada espacial. Estos cálculos requieren un tiempo de computación muy largo no sólo para plasmas de alto número atómico Z sino también en el caso de plasmas de mezclas. Por esta razón, son necesarios modelos precisos como ATMED desarrollado en Fortran [19], para ser utilizados simultáneamente con los códigos hidrodinámicos, normalmente mediante la tabulación de parámetros calculados con códigos colisionales radiativos.

1.2.1 Comparación de Códigos en el Régimen de No Equilibrio NLTE

Los modelos colisionales radiativos (CR) son ampliamente usados en la espectroscopia de plasmas para analizar la cinética de poblaciones así como espectros de opacidad, emisividad y transmisión producidos en condiciones distantes del régimen de equilibrio termodinámico local. Además, los modelos para régimen de no equilibrio son imprescindibles en las simulaciones hidrodinámicas, utilizadas para el diseño de experimentos con plasmas de alto interés para la comunidad científica.

Por todo ello se hacen necesarias la verificación y validación (V&V) de estos códigos complejos. Puesto que el contraste experimental en laboratorio puede resultar un reto tanto tecnológico como económico y en algunas circunstancias inviable, los experimentos computacionales y las comparaciones teóricas de resultados se transforman en las principales herramientas para la verificación y validación de los códigos CR.

En la bibliografía científica [20÷27], se detallan las características principales y elementos diferenciadores en cuanto a tasas de procesos y modelos atómicos, de los códigos colisionales radiativos que participan o han participado en las reuniones mencionadas en la [Tabla 1.1](#). Las reuniones científicas denominadas “NLTE Code Comparison Workshops” organizadas por la Agencia Internacional de la Energía Atómica (IAEA) convocadas cada dos años, tienen como objetivo principal el desarrollo y actualización continua de estos modelos [28÷35].

ATMED CR [36] ha sido participante en las ediciones NLTE-8 y NLTE-9, contribuyendo con resultados de plasmas de fusión por confinamiento magnético de tungsteno, así como de plasmas de neón y de hierro delgados, gruesos y fotoionizados.

Tabla 1.1: Ediciones de Comparación de Códigos Colisionales Radiativos (NLTE Code Comparison Workshops).

Reunión	Año	Lugar	Resultados
NLTE-1	1996	Gaithersburg, USA	Lee et al, JQSRT 58 , 737 (1997)
NLTE-2	2001	Virtual Workshop	Bowen et al, JQSRT 81 , 71 (2003)
NLTE-3	2003	Gaithersburg, USA	Bowen et al, JQSRT 99 , 102 (2005)
NLTE-4	2005	Las Palmas de Gran Canaria, Spain	Rubiano et al, HEDP 3 , 225 (2007)
NLTE-5	2007	Santa Fe, USA	Fontes et al, HEDP 5 , 15 (2009)
NLTE-6	2009	Athens, Greece	
NLTE-7	2011	Vienna, Austria	Chung et al, HEDP, 9 , 645 (2013)
NLTE-8	2013	Santa Fe, USA	
NLTE-9	2015	Paris, France	Piron et al, HEDP 23 , 38-47 (2017)

1.3 Objetivo y Estructura de la Tesis Doctoral

El objetivo principal de esta Tesis Doctoral es realizar el desarrollo del código **ATMED CR** (**AT**omo **MED**io **C**olisional **R**adiativo – **AT**om **MED**ium **C**ollisional **R**adiative), partiendo de otro código denominado ATMED LTE elaborado previamente con un modelo atómico hidrogenoide apantallado relativista [10-11], que permitía calcular las propiedades ópticas y termodinámicas de plasmas en equilibrio termodinámico local.

Este proyecto de investigación ha consistido por tanto en la ampliación de un modelo de átomo medio desarrollado para el régimen de equilibrio LTE, dado que en los experimentos de laboratorio y computacionales es necesario el estudio de plasmas en un régimen en el que sus propiedades están en situación de no equilibrio termodinámico y además varían en el tiempo, con lo que el modelo anterior solo cubría una parte del régimen temporal en la evolución termodinámica, pero no todo el proceso.

Se ha extendido por tanto el modelo al régimen conocido como NLTE (Non-Local Thermodynamic Equilibrium), y además ha sido necesario resolver las ecuaciones colisionales radiativas con dependencia temporal, ya que la historia temporal del plasma es muy determinante para los resultados finales. Como se puede comprobar en el apartado 1.1, existe un amplísimo rango de condiciones experimentales para plasmas de laboratorio, tanto probadas actualmente como previstas, caracterizadas por diferentes parámetros de entrada en los códigos de simulación: densidades electrónica o de materia, temperaturas electrónica y de radiación, factor de dilución, fracciones de volumen en mezclas, dimensión característica del plasma, etc. La presente tesis ilustrará la capacidad de simulación de ATMED CR, lo que lo convierte en un código más de referencia para el cálculo de resultados de propiedades de plasmas y para contrastarlos con el resto de modelos colisionales radiativos y experimentos de laboratorio y computacionales. El programa ha sido escrito en lenguaje Fortran 95 y ha sido desarrollado utilizando subrutinas incluidas en manuales de este lenguaje de programación [19].

El modelo colisional radiativo ATMED CR construido con el formalismo del átomo medio, ha sido concebido para computar la distribución de poblaciones electrónicas en orbitales con desdoblamiento relativista (*nlj-splitting*), el grado medio de ionización del plasma así como otras propiedades atómicas, radiativas y termodinámicas fundamentales. El código puede realizar cálculos de plasmas de elementos puros o mezclas, en estado estacionario o temporal, para un amplio rango de condiciones teóricas y de laboratorio: regímenes corona, equilibrio termodinámico local y no equilibrio, ópticamente delgados o gruesos y fotoionizados con un campo de radiación externo o coexistente con el plasma. Los plasmas en régimen LTE se obtienen como una solución específica de ATMED CR resolviendo el balance colisional radiativo, por contraste con la minimización de la energía libre del plasma que realiza ATMED LTE para obtener la distribución de poblaciones acorde a la estadística de Fermi-Dirac. El objetivo mencionado de esta Tesis Doctoral se desglosa en los siguientes hitos principales del proyecto de investigación, ya logrados e indicados a continuación:

- El desarrollo de un modelo de átomo medio para condiciones de equilibrio termodinámico no local (NLTE), resolviendo las ecuaciones del balance colisional radiativo basado en coeficientes de tasas para los procesos atómicos, con el fin de obtener un valor más realista del grado de ionización medio del plasma, así como las opacidades y emisividades consistentes con dicho modelo. Las tasas colisionales y radiativas son un conjunto de aproximaciones analíticas de otras tasas más sofisticadas basadas en cálculos de mecánica cuántica.
- La extensión de este modelo para la simulación temporal de los plasmas, y por tanto para poder seguir la evolución de las propiedades ópticas obtenidas en los experimentos. De esta forma se pueden obtener las opacidades, emisividades y ecuaciones de estado de forma consistente, para su uso posterior en las ecuaciones incluidas en los códigos hidrodinámicos de conservación de la energía y de la cantidad de movimiento y en la ecuación del transporte de radiación.

- Acoplamiento del modelo final a un programa de cálculo hidrodinámico en una dimensión, con el objetivo de simular blancos planos o cilíndricos de elementos puros y mezclas, similares a los empleados en los experimentos por irradiación con haces láser.
- El desarrollo de un modelo de opacidades de mezclas mediante la resolución de las ecuaciones de balance con dependencia temporal en el modelo de átomo medio.
- Análisis de la viabilidad del modelo mediante comparaciones con otros códigos a través de la participación en las reuniones Internacionales sobre Modelos Atómicos Cinéticos y Propiedades Radiativas de Materia Densa Caliente, que tienen lugar cada dos años.
- Finalmente y tomando como referencia datos experimentales y calculados mediante otros códigos colisionales radiativos de la literatura científica, la aplicación del modelo ATMED CR para la simulación de experiencias concretas de plasmas de fusión por confinamiento inercial o magnético, de laboratorio irradiados por haces láser, fotoionizados e interpretación de datos astrofísicos. De esta forma se comprueba su precisa computación de propiedades fundamentales de plasmas mediante las diferentes opciones de cálculo implementadas.

En el Capítulo 2, se han incluido las ecuaciones más concluyentes en relación a la física de átomos multielectrónicos aislados e inmersos en plasmas y formalismos propios de la mecánica cuántica, haciendo alusión también a varias teorías convenientemente referenciadas cuya demostración detallada excede el alcance de la tesis.

En el Capítulo 3, se describe el modelo atómico hidrogenoide apantallado relativista publicado en el año 2011 [10-11]. Se detallan también funcionalidad, esquema de funcionamiento, formalismos y formulación del código ATMED LTE para régimen de equilibrio local termodinámico.

Análogamente, en el Capítulo 4 se describen funcionalidad, esquemas de funcionamiento de los modelos estacionario y temporal, formalismos y formulación del código colisional radiativo ATMED CR, construido como extensión de ATMED LTE implementando un balance basado en fórmulas analíticas para los coeficientes de tasas de los procesos atómicos. El verdadero elemento diferenciador de ATMED CR es el modelo atómico hidrogenoide apantallado relativista utilizado para el cómputo de las propiedades atómicas, autovalores de energía, fuerzas de oscilador, probabilidades de transición electrónica, etc., ya que las fórmulas de tasas son comunes a muchos modelos CR construidos en los diversos formalismos DLA/DTA, DCA/SCA y AA.

En el Capítulo 5 se detalla la formulación utilizada para cálculo de propiedades radiativas, termodinámicas, ecuación de estado y mezclas, basada fundamentalmente en la ya incluida en la aplicación para régimen LTE, con las particularidades de otros regímenes (corona, NLTE) y habiendo resuelto la distribución de poblaciones electrónicas según el balance colisional radiativo. Destacar que se utiliza la misma sección eficaz que ATMED LTE para las transiciones ligado-ligado, que proporciona un perfil promediado de opacidad y emisividad siendo equivalente al formalismo de matrices de transiciones no resueltas (UTA, Unresolved Transition Array) de los códigos detallados.

Dicha sección eficaz utiliza una fuerza de oscilador de absorción de un fotón para la transición electrónica del orbital relativista k a otro k' , desarrollada en base a polinomios de Laguerre y basada en funciones de onda construidas con cargas apantalladas relativistas [10-11].

Pero además, existe la opción de utilizar otra sección eficaz ligado-ligado propia de códigos DCA/SCA y que conectada al balance de ATMED CR da lugar a una estructura de líneas individuales. De esta forma son retenidas en el espectro las líneas de transición de mayor intensidad entre los orbitales relativistas del átomo medio que representa todo el plasma, pudiendo ser equivalente al formalismo mixto (MUTA, Mixed Unresolved Transition Array) de los códigos detallados. Depende del plasma pero para gran cantidad de casos, el grado de acuerdo en las opacidades medias de Rosseland y Planck es muy alto cuando se comparan los órdenes de magnitud proporcionados por ambas secciones eficaces de absorción. Además en la superposición de espectros resueltos en frecuencia, se comprueba que el espectro obtenido con una sección eficaz es en numerosos casos un promedio perfecto del espectro de un conjunto denso de líneas individuales o bien una estructura UTA desplazada en casos de líneas individuales separadas en un código DLA.

Se realiza también una síntesis de las diferentes opciones de cálculo de plasmas contempladas en ATMED CR y analizadas en los capítulos previos, según las condiciones concretas establecidas a través de los parámetros de entrada que los caracterizan. Sirve para ilustrar esquemáticamente la capacidad computacional de este modelo colisional radiativo relativista de átomo medio, que puede utilizarse en cualquier ordenador con capacidad de memoria RAM estándar, sin necesidad de computación paralela.

En el Capítulo 6, se realizará la validación del modelo ATMED CR mediante un análisis paramétrico de plasmas de varios elementos químicos y mezclas, realizando un muestreo representativo de casos concretos y condiciones. Han sido necesarias diversas y variadas comparaciones entre sus resultados y los de otros códigos publicados en la literatura científica, en algunos casos contrastados a su vez por datos experimentales.

Por esta razón es necesario conocer previamente las características generales y los elementos diferenciadores tanto de los códigos detallados como de los de átomo medio [14]. El esquema descriptivo será básicamente el mismo en los plasmas analizados y consiste en realizar:

- Un análisis de propiedades atómicas y radiativas de elementos puros en un amplio rango de densidades y temperaturas.
- Un análisis de mezclas binarias y multicomponente de los elementos químicos en las que puede utilizarse el código ATMED CR como herramienta de simulación y cálculo, típicamente utilizadas en fusión por confinamiento inercial o magnético, plasmas astrofísicos, irradiados por haces láser o fotoionizados en máquinas de confinamiento de plasma por pinzamiento (Zeta Pinch).

En el Capítulo 7, se realiza primero una descripción breve del código hidrodinámico HYAT para simulación de blancos irradiados por haces láser, basado en ionización total de la materia. Posteriormente, se realiza una conexión de dicho código con el modelo colisional radiativo ATMED CR, tal que utilizando los parámetros calculados por este último que corresponden a considerar ionización parcial de la materia irradiada, se pueden observar las diferentes evoluciones temporales y espaciales de las variables termodinámicas, temperaturas electrónica e iónica, densidades, etc. Se llega a la conclusión de que cuando se utiliza ionización total versus ionización parcial, las ondas de choque resultantes en las simulaciones están sobredimensionadas, tanto en la magnitud del pico de densidad (g/cm^3) como en la penetración hacia el interior del blanco (μm) ya que la velocidad a la que viaja la onda de choque resulta mayor ($\mu\text{m/ns}$).

Finalmente, en el Capítulo 8 se extraerán las principales conclusiones acerca de las bondades y limitaciones del código ATMED CR así como de la herramienta de cálculo resultante de conectarlo con el código hidrodinámico HYAT:

- Tanto el modelo colisional radiativo ATMED CR como el código hidrodinámico con ionización parcial HYAT + ATMED CR, son programas de cálculo que utilizan formalismos matemáticos y físicos válidos, basados en aproximaciones justificadas dentro de sus rangos de densidad y temperatura correspondientes.
- ATMED CR proporciona resultados cualitativos y cuantitativos correctos, dentro de unos márgenes preestablecidos por las medidas experimentales y los experimentos computacionales realizados con otros códigos del mismo tipo o más sofisticados.
- HYAT + ATMED CR puede utilizarse con elementos de bajo o medio número atómico para el cálculo de simulaciones hidrodinámicas y ondas de choque creadas en materia irradiada con resultados cualitativos aceptables.

Como ya se mencionó en el apartado 1.2, las aportaciones más importantes que esta tesis realiza son las siguientes:

- Extiende enormemente el rango válido para este código de átomo medio basado en el modelo atómico hidrogenoide apantallado relativista, que ahora consta de dos módulos: ATMED LTE [9], lanzado en 2011 e inicialmente desarrollado para plasmas en condiciones de equilibrio local termodinámico, y ATMED CR para cualquier régimen.
- Aumenta la precisión del cálculo de las propiedades de plasmas por el desdoblamiento $n_l j$ respecto a otros modelos colisionales radiativos existentes construidos en el formalismo de átomo medio, sin necesidad de extenderlo a un código detallado mediante un cálculo posterior de configuraciones a partir del ión de referencia que es el átomo medio.

Los Capítulos 9, 10 y 11 corresponden a Anexos y Referencias bibliográficas.

2. ATOMOS MULTIELECTRONICOS

2.1 Determinación de la Estructura Atómica

La ecuación de Schrödinger $H\psi = E\psi$ de un átomo o ion con un núcleo de número atómico Z y N electrones, es una ecuación fundamental de la mecánica cuántica para la determinación de la estructura atómica. E es la energía total del átomo, ψ es la función de onda del sistema átomo y H es el operador hamiltoniano que incluye todas las interacciones dentro del sistema:

1. La energía cinética de los electrones y su energía potencial en el campo electrostático coulombiano generado por el núcleo supuesto puntual y con masa infinita: $\sum_{i=1}^N h_i$

Siendo h_i el hamiltoniano de un átomo monoeléctrico:
$$h_i = \left(\frac{p_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right)$$

2. La repulsión electrostática entre los electrones: $\sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$
3. Las interacciones magnéticas de los espines de los electrones con sus movimientos orbitales (interacciones espín-órbita). Otros efectos como las interacciones espín-espín entre electrones, diferentes efectos relativistas, correcciones radiativas y correcciones nucleares.

Las diferentes elecciones para el operador hamiltoniano van a definir los distintos modelos atómicos aproximados para determinar las propiedades del sistema. El problema fundamental del átomo multieletrónico reside en que el término de repulsión electrostática no permite resolver analíticamente la ecuación de Schrödinger y resulta necesario recurrir a modelos aproximados que eviten este obstáculo. Como punto de partida se consideran los dos primeros términos extendiendo las sumas sobre todos los electrones ligados y siendo p_i el momento lineal del electrón i -ésimo, r_i la posición respecto al núcleo y r_{ij} la distancia entre los electrones con posiciones r_i y r_j , con lo que el hamiltoniano del átomo con N electrones, donde q_i denota el conjunto de coordenadas espaciales r_i y coordenadas de espín del electrón i , viene dado en unidades atómicas por:

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = E \psi(q_1, q_2, \dots, q_N) \quad (2.1)$$

El siguiente esquema representa las principales opciones para la resolución de la [Ecuación \(2.1\)](#). En la referencia [14] se detallan los fundamentos físico-matemáticos de cada una de las opciones del esquema, así como los efectos de plasmas, el modelo de átomo medio y sus limitaciones.

Para considerar la estructura relativista de la materia se resuelve la ecuación de Dirac en vez de la ecuación de Schrödinger.

A continuación se indica el procedimiento iterativo para el modelo de campo autoconsistente (átomo medio [14-37-38]) resolviendo la ecuación para orbitales monoeléctronicos ligados y libres:

3. MODELOS DE ATOMO MEDIO EN REGIMEN LTE

Una vez analizadas las diferentes opciones para la resolución de los átomos multielectrónicos inmersos en un plasma, se detallan en este apartado en cuáles de ellas está basado el código ATMED LTE para plasmas en régimen de equilibrio local termodinámico [9÷14].

3.1 Modelo Hidrogenoide Apantallado Relativista

El modelo atómico hidrogenoide apantallado (SHM) lleva siendo utilizado con éxito desde hace décadas en la física de plasmas.

El esquema anterior representa cronológicamente la evolución de este tipo de modelos atómicos que definen la estructura cuántica de la materia. El código ATMED LTE utiliza el nuevo modelo hidrogenoide apantallado relativista (“New Relativistic Screened Hydrogenic Model”, NRSHM) para la resolución del átomo multielectrónico combinado con el formalismo de átomo medio para caracterizar un plasma por propiedades atómicas, radiativas y termodinámicas.

En 1982, Mayer desarrolló un modelo hidrogenoide apantallado utilizando un código propio de More basado en un método auto-consistente de Hartree-Fock-Slater, e introdujo un conjunto de constantes de apantallamiento obtenidas por ajuste a una base de datos con 800 potenciales de ionización de 30 elementos. Los estados de energía monolectrónicos se obtienen a partir de este conjunto de constantes de apantallamiento y están degenerados respecto al momento orbital, siendo caracterizado cada estado únicamente por el número cuántico principal [39].

En 1997, Faussurier et al., publicaron un modelo hidrogenoide apantallado basado en un conjunto de constantes de apantallamiento con desdoblamiento respecto al número cuántico orbital l [40], obtenidas por ajuste a una base de datos con 15,600 potenciales de ionización y energías de excitación calculadas según el modelo Hartree-Fock.

En 2011, Mendoza, Rubiano et al. [10], publicaron su modelo hidrogenoide apantallado basado en un nuevo conjunto de constantes de apantallamiento con desdoblamiento respecto al número cuántico relativista j , obtenidas por ajuste a una extensa base de datos compuesta por 61,350 datos atómicos de alta calidad (Tabla 3.1). Esta base de datos ha sido editada con energías de la base de datos experimental de niveles de energía atómicos ("National Institute of Standards and Technology", NIST), y con las energías calculadas con el código flexible atómico ("Flexible Atomic Code", FAC).

Tabla 3.1: Coeficientes de apantallamiento de Mendoza y Rubiano.

	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3s_{1/2}$	$3p_{1/2}$	$3p_{3/2}$	$3d_{3/2}$	$3d_{5/2}$
$1s_{1/2}$	0.310000	0.026843	0.004874	0.004639	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
$2s_{1/2}$	0.687354	0.276083	0.273158	0.266339	0.059838	0.013608	0.013521	0.001290	0.001125
$2p_{1/2}$	0.922154	0.326326	0.346548	0.325740	0.071461	0.023271	0.022907	0.006089	0.002486
$2p_{3/2}$	0.931159	0.326403	0.366836	0.346801	0.090301	0.047865	0.040885	0.008301	0.007629
$3s_{1/2}$	0.931163	0.577444	0.565396	0.565113	0.274537	0.274040	0.253588	0.175193	0.174976
$3p_{1/2}$	0.944595	0.802643	0.744282	0.732800	0.286027	0.313099	0.266505	0.313889	0.313641
$3p_{3/2}$	0.946205	0.857747	0.746627	0.739522	0.291605	0.358014	0.311961	0.329175	0.321752
$3d_{3/2}$	0.991804	0.986343	0.943187	0.935563	0.482186	0.316150	0.314371	0.374963	0.371989
$3d_{5/2}$	0.995148	0.991469	0.945305	0.937540	0.487336	0.330501	0.317032	0.385433	0.376506
$4s_{1/2}$	0.946211	0.809161	0.776381	0.728220	0.573596	0.573582	0.501607	0.625283	0.600557
$4p_{1/2}$	0.960713	0.909645	0.898199	0.821485	0.677496	0.660517	0.632320	0.651146	0.636113
$4p_{3/2}$	0.961982	0.923262	0.903373	0.823412	0.704188	0.721692	0.661577	0.695897	0.679703
$4d_{3/2}$	0.983307	0.970650	0.966158	0.960033	0.948710	0.922373	0.898505	0.725244	0.701234
$4d_{5/2}$	0.987484	0.979269	0.975108	0.974309	0.959582	0.927196	0.906760	0.727377	0.702986
$4f_{5/2}$	0.995662	0.995787	0.996189	0.992692	0.945862	0.938952	0.931108	0.932405	0.937586
$4f_{7/2}$	0.998476	0.999104	0.998971	0.999341	0.964455	0.956705	0.948302	0.934684	0.960703
$5s_{1/2}$	0.965527	0.953852	0.892634	0.845963	0.836598	0.712495	0.662736	0.688440	0.635962
$5p_{1/2}$	0.992639	0.987705	0.881411	0.872450	0.853008	0.752635	0.818444	0.764568	0.725378
$5p_{3/2}$	0.996253	0.989251	0.964836	0.880491	0.862306	0.838666	0.852089	0.797661	0.728924

	$4s_{1/2}$	$4p_{1/2}$	$4p_{3/2}$	$4d_{3/2}$	$4d_{5/2}$	$4f_{5/2}$	$4f_{7/2}$	$5s_{1/2}$	$5p_{1/2}$	$5p_{3/2}$
$1s_{1/2}$	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
$2s_{1/2}$	0.006777	0.000433	0.000226	0.000701	0.000612	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
$2p_{1/2}$	0.021477	0.009807	0.009548	0.001396	0.001239	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
$2p_{3/2}$	0.023537	0.015806	0.012559	0.002596	0.002225	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
$3s_{1/2}$	0.071835	0.032258	0.028466	0.003119	0.002735	0.000384	0.000198	0.010507	0.003836	0.002354
$3p_{1/2}$	0.079570	0.035987	0.023966	0.020664	0.016675	0.001529	0.001021	0.019019	0.011431	0.010722
$3p_{3/2}$	0.091570	0.039760	0.028123	0.022551	0.021412	0.003176	0.002736	0.025215	0.032829	0.016105
$3d_{3/2}$	0.092568	0.085482	0.061081	0.041642	0.032507	0.024368	0.022975	0.045098	0.020546	0.013162
$3d_{5/2}$	0.096647	0.093655	0.085402	0.044772	0.043081	0.024540	0.018844	0.080244	0.047496	0.043044
$4s_{1/2}$	0.301893	0.217471	0.198109	0.193773	0.182372	0.120176	0.116722	0.053658	0.035404	0.018621
$4p_{1/2}$	0.302749	0.332135	0.279383	0.270004	0.264208	0.246791	0.246045	0.063882	0.059108	0.044883
$4p_{3/2}$	0.311613	0.346999	0.317451	0.273121	0.266488	0.300605	0.288689	0.081908	0.076144	0.070394
$4d_{3/2}$	0.447955	0.338928	0.317198	0.340266	0.332231	0.279393	0.273146	0.111448	0.080698	0.053868
$4d_{5/2}$	0.463023	0.348033	0.334389	0.354915	0.341973	0.286698	0.227972	0.192517	0.125445	0.103158
$4f_{5/2}$	0.568698	0.425590	0.401580	0.401854	0.394334	0.387441	0.374142	0.113721	0.086975	0.055952
$4f_{7/2}$	0.571245	0.456563	0.427646	0.402381	0.433531	0.409086	0.386863	0.235591	0.102287	0.071251
$5s_{1/2}$	0.490626	0.598787	0.567349	0.553822	0.435666	0.719524	0.637089	0.298852	0.336598	0.318967
$5p_{1/2}$	0.507460	0.582875	0.603455	0.621961	0.565777	0.728266	0.661506	0.206857	0.325067	0.235274
$5p_{3/2}$	0.514170	0.658522	0.639552	0.673511	0.607985	0.734385	0.635252	0.243956	0.401179	0.318171

Este modelo ha sido especialmente formulado para tratar con configuraciones en estado fundamental (mínima energía) y excitadas de átomos media y altamente ionizados. El modelo NRSHM ha sido validado mediante la comparación de sus resultados con energías de ionización, energías de transición y funciones de onda previamente computadas con códigos auto consistentes basados en sofisticados cálculos mecano cuánticos y datos experimentales.

Se han obtenido distribuciones de errores relativos en los valores de energías muy competitivos respecto a los modelos hidrogenoides apantallados de More y Faussurier (Figuras 3.1-3.2).

Figura 3.1. Distribuciones de errores relativos en los valores de energías para los modelos hidrogenoides apantallados.

Figura 3.2. Energías de ionización de NRSIM/NIST/FAC para secuencias isoelectrónicas de Ca, Fe, Mo, Sn, Sm, Gd.

En las [Tablas 3.2÷3.5](#) de las siguientes secciones se observa el amplio contraste y el alto grado de acuerdo con otros modelos de datos atómicos y de diversas propiedades de los átomos e iones inmersos en un plasma [\[10-11\]](#), necesarias para el desarrollo del código ATMED LTE y del modelo colisional radiativo ATMED CR.

3.1.1 Energías de Ligadura Electrónicas

Tabla 3.2: Energías de ligadura electrónicas para iones tipo hierro.

Fe^{+2}	nlj	$-\epsilon_{\text{DP}}$	$-\epsilon_{\text{Cowan}}$	$-\epsilon_{\text{OPAL}}$	$-\epsilon_{\text{Lotz}}$	$-\epsilon_{\text{NRSIM}}^{\text{X}}$	$-\epsilon_{\text{NRSIM}}^{\text{HF}}$
$3d^6$	$1s_{1/2}$	7238	7156	7145	7210	6989.28	7209.17
	$2s_{1/2}$	860	884	896	913	850.70	893.45
	$2p_{1/2}$	745	748	771	788	737.21	788.47
	$2p_{3/2}$	736	—	—	775	704.61	754.83
	$3s_{1/2}$	112	130	125	141	127.51	141.43
	$3p_{1/2}$	76	91	88	105	86.48	100.01
	$3p_{3/2}$	75	—	—	103	83.62	96.59
Fe^{+6}	$3d^2$	7343	7261	7272	7394	7092.70	7312.59
	$1s_{1/2}$	974	992	1002	1033	959.02	1001.78
	$2s_{1/2}$	857	856	867	905	843.66	894.96
	$2p_{1/2}$	847	—	—	902	812.33	862.62
	$3s_{1/2}$	213	223	216	227	219.63	234.15
	$3p_{1/2}$	176	180	178	192	176.59	191.32
	$3p_{3/2}$	175	—	—	190	173.83	188.04
Fe^{+9}	$3p^5$	7444	7351	7362	7535	7195.87	7415.76
	$1s_{1/2}$	1075	1100	1092	1129	1064.47	1107.25
	$2s_{1/2}$	960	964	959	1013	944.59	995.98
	$2p_{1/2}$	950	—	—	1000	915.62	966.05
	$3s_{1/2}$	299	297	299	297	298.66	313.68
Fe^{+12}	$3p^2$	7564	7506	7506	7686	7320.14	7540.03
	$1s_{1/2}$	1183	1221	1230	1234	1187.43	1230.29
	$2s_{1/2}$	1070	1086	1093	1123	1055.50	1107.06
	$2p_{1/2}$	1060	—	—	1110	1033.26	1083.98
	$3s_{1/2}$	387	393	393	388	380.68	396.34

3.1.2 Elementos de Matriz

Tabla 3.3: Elementos de matriz de iones tipo litio y berilio para transiciones desde $2s_{1/2}$ a otros estados excitados k' .

Ion	k'	$Q_{k'}$	$E_{k'}$	$r_{kk'}$	$\Delta r_{kk'}$
Ne $Q_k=5.7108$ $E_k=-128.6640$	$3s_{1/2}$	4.1567	-128.2287	-1.200×10^{-1}	4.163×10^{-17}
	$3d_{3/2}$	1.3506	-128.1450	6.853×10^{-2}	0.0000
	$3d_{5/2}$	1.3235	-128.1557	6.508×10^{-2}	1.388×10^{-17}
	$4s_{1/2}$	2.7518	-128.1445	-1.270×10^{-1}	5.274×10^{-16}
	$4d_{3/2}$	1.2797	-128.1372	4.457×10^{-2}	5.064×10^{-13}
	$4d_{5/2}$	1.1933	-128.1331	3.730×10^{-2}	1.388×10^{-17}
	$5s_{1/2}$	1.8381	-128.1722	-4.775×10^{-2}	1.943×10^{-16}
Fe ⁺¹⁶ $Q_k=21.7108$ $E_k=-1148.3810$	$3s_{1/2}$	20.1567	-1121.7607	2.371×10^{-2}	2.012×10^{-16}
	$3d_{3/2}$	17.3506	-1118.5910	1.787×10^{-1}	2.776×10^{-17}
	$3d_{5/2}$	17.3235	-1118.5774	1.785×10^{-1}	1.110×10^{-16}
	$4s_{1/2}$	18.7518	-1112.3841	3.703×10^{-3}	4.124×10^{-16}
	$4d_{3/2}$	17.2797	-1111.3408	8.727×10^{-2}	1.249×10^{-16}
	$4d_{5/2}$	17.1933	-1111.2504	8.741×10^{-2}	8.327×10^{-17}
	$5s_{1/2}$	17.8381	-1108.4477	-6.506×10^{-4}	5.332×10^{-16}
Au ⁺⁶⁹ $Q_k=74.7108$ $E_k=-12793.5433$	$3s_{1/2}$	73.1567	-12441.9224	1.678×10^{-2}	4.857×10^{-17}
	$3d_{3/2}$	70.3506	-12411.7960	5.823×10^{-2}	3.469×10^{-17}
	$3d_{5/2}$	70.3235	-12407.5781	5.872×10^{-2}	6.939×10^{-18}
	$4s_{1/2}$	71.7518	-12299.8235	6.019×10^{-3}	1.258×10^{-16}
	$4d_{3/2}$	70.2797	-12288.7969	2.272×10^{-2}	3.469×10^{-18}
	$4d_{5/2}$	70.1933	-12286.6614	2.383×10^{-2}	0.0000
	$5s_{1/2}$	70.8381	-12236.9149	3.396×10^{-3}	7.156×10^{-17}

3.1.3 Fuerzas de Oscilador

Las secciones eficaces de absorción de las transiciones electrónicas se calculan utilizando una nueva expresión analítica para las fuerzas de oscilador basada en funciones de onda hidrogenoides apantalladas relativistas (Figura 3.3), energías de transición y elementos de matriz.

Tabla 3.4: Fuerzas de oscilador de las transiciones desde $2s_{1/2}$ a $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$, $3p_{1/2}$ y $3p_{3/2}$ para iones tipo litio.

Z	Ion	WKB	KG-1 ^a	KG-0 ^b	KG-NK ^c	CAHS ^d	DSQDT ^e	Ab initio	NRSHM	NRSHM*
18	Ar ¹⁵⁺	0.0260	0.0261	0.0260	0.0261	0.0260	0.0260	0.0260 ^f	0.0260	0.0260
		0.0576	0.0578	0.0575	0.0577	0.0575	0.0575	0.0580	0.0606	0.0606
		0.1225	0.1214	0.1226	0.1217	0.1200	0.1205	0.1200 ^f	0.1209	0.1204
		0.2450	0.2427	0.2451	0.2433	0.2360	0.2365	0.2360	0.2376	0.2368
20	Ca ¹⁷⁺	0.0233	0.0234	0.0232	0.0233	0.0232	0.0232	0.0234 ^g	0.0233	0.0233
		0.0535	0.0538	0.0534	0.0537	0.0534	0.0534	0.0538	0.0562	0.0562
		0.1288	0.1274	0.1289	0.1277	0.1223	0.1229		0.1234	0.1227
		0.2516	0.2486	0.2517	0.2494	0.2386	0.2401		0.2415	0.2405
22	Ti ¹⁹⁺	0.0210	0.0211	0.0209	0.0211	0.0210	0.0210	0.0212 ^g	0.0210	0.0210
		0.0507	0.0509	0.0505	0.0508	0.0506	0.0506	0.0509	0.0530	0.0530
		0.1311	0.1292	0.1311	0.1297	0.1244	0.1248		0.1254	0.1246
		0.2545	0.2508	0.2546	0.2518	0.2413	0.2426		0.2442	0.2431
24	Cr ²¹⁺	0.0192	0.0193	0.0191	0.0193	0.0192	0.0192	0.0193 ^g	0.0192	0.0192
		0.0488	0.0491	0.0486	0.0490	0.0487	0.0487	0.0490	0.0509	0.0509
		0.1331	0.1308	0.1331	0.1314	0.1261	0.1265		0.1271	0.1260
		0.2565	0.2520	0.2566	0.2532	0.2430	0.2444		0.2462	0.2448
26	Fe ²³⁺	0.0177	0.0178	0.0176	0.0177	0.0177	0.0177	0.0180 ^f	0.0176	0.0176
		0.0477	0.0481	0.0474	0.0479	0.0476	0.0476	0.0480	0.0495	0.0495
		0.1353	0.1326	0.1354	0.1333	0.1280	0.1277	0.1280 ^f	0.1285	0.1272
		0.2706	0.2651	0.2707	0.2666	0.2430	0.2453	0.2450	0.2474	0.2457
36	Kr ³³⁺	0.0127	0.0129	0.0126	0.0128	0.0127	0.0127	0.0127 ^f	0.0125	0.0125
		0.0502	0.0510	0.0496	0.0506	0.0500	0.0498	0.0499	0.0508	0.0509
		0.1398	0.1341	0.1400	0.1357	0.1320	0.1322	0.1350 ^h	0.1328	0.1302
		0.2575	0.2466	0.2578	0.2497	0.2430	0.2438	0.2490	0.2464	0.2431
42	Mo ³⁹⁺	0.0109	0.0112	0.0107	0.0111	0.0109	0.0109	0.0110	0.0107	0.0106
		0.0563	0.0575	0.0554	0.0569	0.0561	0.0556	0.0560	0.0563	0.0563
		0.1424	0.1343	0.1425	0.1366	0.1330	0.1336	0.1330	0.1342	0.1307
		0.2529	0.2376	0.2534	0.2421	0.2380	0.2384	0.2380	0.2419	0.2374

3.1.4 Energías de Configuraciones Promedio e Integrales Radiales Dipolares

Las energías de las configuraciones promedio del modelo NRSHM son excelentes para iones media o altamente ionizados. Para átomos neutros o iones muy poco ionizados son buenas para algunos elementos como los tipo argón (*Ar-like*) pero no muy exactas para otros como los tipo nitrógeno (*N-like*) (Tabla 3.5a/b).

Tabla 3.5a: Energía de los niveles de la secuencia isoelectrónica del Ar, Z es el número atómico, I es el potencial de ionización en eV, $E_{th}(nl)$ y $E_{ex}(nl)$ son las energías de las configuraciones promedio, teórica y experimental (NIST) [13].

Z	$I(th)$	$I(ex)$	$E_{th}(4s)$	$E_{ex}(4s)$	$E_{th}(4p)$	$E_{ex}(4p)$
18	17.30	15.76	13.20	11.68	13.00	13.30
19	34.40	31.63	21.70	20.39	23.00	23.43
20	54.70	50.91	31.60	30.39	34.50	34.91
21	77.90	73.67	42.80	41.55	47.20	47.68
22	104.10	99.30	55.20	54.45	61.20	61.78

Tabla 3.5b: Energía de los niveles de la secuencia isoelectrónica del N, Z es el número atómico, I es el potencial de ionización en eV, $E_{th}(nl)$ y $E_{ex}(nl)$ son las energías de las configuraciones promedio, teórica y experimental (NIST) [13].

Z	$I(th)$	$I(ex)$	$E_{th}(3s)$	$E_{ex}(3s)$	$E_{th}(3p)$	$E_{ex}(3p)$
7	11.55	14.53	7.15	10.50	7.61	12.00
8	35.11	35.11	19.39	23.20	21.08	28.67
9	59.53	62.70	35.42	39.77	38.34	45.19
10	93.71	97.12	55.21	60.00	59.37	70.78

Las integrales radiales dipolares de productos de funciones de onda son necesarias para calcular las probabilidades de transición y las fuerzas de oscilador (Tabla 3.5c).

Tabla 3.5c: Integrales radiales dipolares $\int \mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r} d\mathbf{r}$ evaluadas con el método Hartree-Fock, con funciones de onda hidrogenoides (*Hyd*) y el método de los defectos cuánticos y funciones de onda Kostecky y Nieto (*KN*). También se tabulan sus ratios [13].

Ion	$Int(HF)$	$Int(Hyd)$	$Int(KN)$	$\frac{Int(Hyd)}{Int(HF)}$	$\frac{Int(KN)}{Int(HF)}$
Mg II	-2.99	-2.54	-3.14	0.85	1.05
Ar I	0.55	-0.20	1.09	-0.37	2.00
K II	0.65	-0.14	0.65	-0.22	1.00
Kr I (4p-5s)	0.93	0.53	1.01	0.57	1.09
Kr I (5s-5p)	-5.90	-2.57	-5.47	0.44	0.93
N I (2p-3s)	0.73	-0.14	1.84	-0.19	2.51
N I (3s-3p)	5.65	1.56	4.18	0.28	0.74
Ne IV (3s-3p)	-2.30	-2.36	-2.00	1.03	0.87

3.1.5 Funciones de Onda

Las componentes radiales mayor y menor de las funciones de onda para cualquier configuración isoelectrónica de iones media o altamente ionizados se calculan a partir de una expresión analítica basada en las cargas apantalladas y en polinomios generalizados de Laguerre [10], comparables con excelentes resultados respecto a las obtenidas con otros modelos atómicos (DAVID, Hartree-Fock):

$$F_{nlj}(r, Q_{nlj}) = \frac{B_{nlj}}{4av(k-v)} x^v e^{-x/2} \left[f_1 x L_{n-j-\frac{3}{2}}^{2v+1}(x) + f_2 L_{n-j-\frac{1}{2}}^{2v-1}(x) \right]$$

$$G_{nlj}(r, Q_{nlj}) = \frac{B_{nlj}}{4av(k-v)} x^v e^{-x/2} \left[g_1 x L_{n-j-\frac{3}{2}}^{2v+1}(x) + g_2 L_{n-j-\frac{1}{2}}^{2v-1}(x) \right] \quad (3.1a)$$

Figura 3.3a. Componente radial mayor de la función de onda para orbitales relativistas del ion Al tipo Na [10].

Para configuraciones isoelectrónicas de iones muy poco ionizados o neutros, las funciones de onda de electrones de valencia calculadas con las Ecuaciones 3.1a, son muy diferentes a las que proporciona por ejemplo el código de Cowan según Hartree-Fock (HF) [13].

Pero en general, las funciones de onda obtenidas combinando el modelo NRSHM con el método de los defectos cuánticos son mucho mejores y comparables a las numéricas de Hartree-Fock tanto en valores absolutos como en signo (+ ó -), ver Figura 3.3b y ratios de integrales radiales dipolares en la Tabla 3.5c. El modelo atómico NRSHM se utiliza para calcular las energías de ligadura de los orbitales relativistas, las energías de las configuraciones promedio y los potenciales de ionización como diferencia entre las energías de las configuraciones de iones consecutivos en carga, para después calcular los números cuánticos principales efectivos y otras expresiones de las funciones de onda debidas a Bates y Damgaard (BD) y Kostelecky y Nieto (KN), Ecuaciones 3.1b:

$$P_{nl}^{BD}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Z_c r}{n^*} \right)^{n^*} \exp \left(-\frac{Z_c r}{n^*} \right) \sum_{k=0}^{\text{int}(n^*)} \frac{a_k}{r^k}$$

$$P_{nl}^{KN}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Z_c r}{n^*} \right)^{\lambda+1} \exp \left(-\frac{Z_c r}{n^*} \right) M \left(-n^* + \lambda + 1, 2(\lambda + 1); \frac{2Z_c r}{n^*} \right) \quad (3.1b)$$

- δ_l : Defecto cuántico.
- $n^* = n - \delta_l = Z_c \sqrt{\frac{13.6058}{I - E_{nlj}}}$: Número cuántico principal efectivo.
- E_{nlj} : Energía del nivel relativista calculada con el modelo NRSHM.
- $Z_c = Z - N + 1$: Carga neta.
- $I = E_{tot}(A^{n+}) - E_{tot}(A^{(n+1)+})$: Potencial de ionización como diferencia entre las energías de las configuraciones promedio entre iones de carga consecutiva.
- $M(a, b; x) = 1 + \frac{a}{b} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots$: Función Kummer.
- $a_k; N_{nl}$: Coeficientes.

Figura 3.3b. Producto $P(4p^5 5s; r)rP(4p^5 5p; r)$ para transiciones entre estados excitados del **Kr I** (átomos con capa llena para la configuración fundamental) según Hartree-Fock, NRSHM (hydrogenic) y método de los defectos cuánticos (our approach) [13].

3.2 Átomo Multielectrónico en ATMED LTE

En ATMED el modelo NRSHM se combina con el formalismo de átomo medio para describir coherentemente los niveles de energía electrónica en plasmas densos en condiciones de equilibrio local termodinámico (LTE).

A pesar de ser hidrogenoide apantallado, el modelo NRSHM presenta un muy buen acuerdo en cuanto a niveles energéticos y energías de transición e ionización con modelos que resuelven numéricamente la ecuación de Dirac, para átomos mediana y altamente ionizados, que son los más abundantes en física de plasmas densos. Esto es debido a que conforme crece la ionización, la interacción entre los electrones ligados se hace menor y es de esperar un comportamiento más hidrogenoide de los iones. En efecto, los iones neutros o casi neutros no están presentes en las simulaciones de interacción láser-materia excepto durante los primeros momentos de la irradiación del blanco.

3.3 Resolución de las Ecuaciones del Átomo Medio

Se indica en esta sección el proceso numérico para la resolución autoconsistente de las ecuaciones del átomo medio con el objeto de hallar las poblaciones según Faussurier. Dicho proceso conlleva obtener conjuntamente las poblaciones fraccionarias del átomo medio, el valor del potencial químico μ_e y el valor del grado de ionización del plasma Z_{bar} . Para ello debe garantizarse que se verifican simultáneamente las ecuaciones del modelo [9,14]. Un método consiste en minimizar directamente la energía libre F_e para un valor dado de temperatura T_e , densidad ρ , y carga nuclear Z , respecto del exponente de la función exponencial, variable que se denomina punto singular:

$$\phi_k = \beta_e \epsilon_k + \beta_e \Delta I - \eta_e \quad (3.2)$$

La derivada de la energía libre respecto de esta variable es:

$$\frac{\partial F_e}{\partial \phi_k} = -D_k f_k g_k \frac{\partial F_e}{\partial P_k} \quad (3.3)$$

$$g_k = 1 - f_k \quad (3.4)$$

El problema de este método es que cuando las capas están casi llenas, $f_k \approx 1$, o prácticamente vacías, $f_k \approx 0$, hay gradientes cercanos a cero, con lo que el método de minimización puede fallar.

Otro método corresponde al siguiente diagrama de Flujo para la Resolución de las Ecuaciones del Átomo Medio utilizando el algoritmo de Newton-Raphson. En las referencias [9,14] se explican detalladamente los pasos involucrados en el diagrama de flujo utilizado dentro del código ATMED LTE.

3.4 Plasmas de Varios Componentes

En un plasma formado por k componentes los radios de los iones-esfera de cada uno R_{ik} , deben ser ajustados con el fin de que los potenciales químicos individuales μ_k sean iguales: $\mu = \mu_1 = \dots = \mu_k$. Cada componente dentro de la mezcla posee una fracción numérica de volumen f_k , que representa su porcentaje dentro de la misma, debiendo por tanto cumplirse que:

$$\sum_k f_k = 1 \quad (3.5)$$

Si además se define una densidad parcial ρ_k como la densidad de un plasma formado íntegramente por el componente k , y que posee un volumen V_k , dicha densidad es:

$$\rho_k = \frac{m_k}{V_k} = \frac{A_k}{V_k N_A} = \frac{3A_k}{4\pi R_{ik}^3 N_A} \quad (3.6)$$

donde A_k es la masa molar del componente k expresada en g/mol y N_A es el número de Avogadro. Suponiendo que los volúmenes son aditivos, el volumen total de la mezcla V_T puede escribirse como suma de los volúmenes parciales V_k , calculados a partir de la ecuación anterior. En función de las densidades total del plasma y parciales de cada componente, se obtiene entonces la ecuación:

$$\frac{m}{\rho} = \sum_k \frac{m_k}{\rho_k} = \frac{\sum_k f_k A_k}{\rho} = \sum_k \frac{f_k A_k}{\rho_k} \quad (3.7)$$

Bajo condiciones de equilibrio termodinámico para sistemas en contacto con difusión, los potenciales químicos deben ser iguales. Esta condición es la utilizada para obtener las densidades parciales de cada componente. El proceso para obtener el valor de las densidades parciales ρ_k comienza con una estimación inicial de cada una de ellas ρ_k^0 , con las que se obtienen unos valores iniciales de los potenciales químicos de cada componente μ_k^0 . Con ellos se determina un valor medio del potencial químico y a continuación se escalan las densidades parciales ρ_k^0 , para intentar conseguir que todos los componentes posean este valor inicial del potencial químico. Con este fin, se define un factor de escala para cada componente como el cociente entre el potencial químico inicial y el promedio:

$$\frac{\mu_k^0}{\bar{\mu}} \quad (3.8)$$

En función del valor del factor de escala, que podrá ser mayor o menor que 1, se define un intervalo centrado en el valor de la densidad inicial $[\rho_k^i, \dots, \rho_k^0, \dots, \rho_k^f]$, y utilizando un algoritmo de búsqueda de raíces basado en la división a mitad de intervalo, se busca el nuevo valor ρ_k^1 que verifica que el potencial químico inicial del componente k es igual al potencial promedio $\mu_k^0 = \bar{\mu}$.

Halladas de esta manera todas las densidades parciales de los componentes de la mezcla se utiliza la [Ecuación \(3.7\)](#) para determinar la densidad total del plasma ρ_t y se compara con la verdadera ρ . Si ambas coinciden o su diferencia es menor que una cota determinada, por ejemplo, $|\rho_t - \rho| < 10^{-6}$, el proceso habrá terminado. En caso contrario, es necesario escalar cada una de las densidades parciales, sumándole la diferencia entre ρ_t y ρ y se comienza de nuevo el proceso iterativo calculando de nuevo los potenciales químicos individuales y hallando un nuevo valor para la densidad total del plasma ρ_t . Finalmente, con los valores de las densidades parciales de cada componente así determinadas, se resuelven las ecuaciones del átomo medio para cada uno de ellos, y se obtienen los correspondientes valores de Z_{bark} , las poblaciones medias de cada uno y las energías de nivel correspondientes.

3.4.1 Plasmas de Sustancias Moleculares

Una aplicación interesante de la resolución del átomo medio para mezclas es la de poder trabajar con plasmas formados por sustancias moleculares, como el agua H_2O , el dióxido de carbono CO_2 , o cualquier otro compuesto que forme parte de los materiales presentes en la fusión nuclear o en los cuerpos astrofísicos. En estos casos, no se utiliza la fracción numérica de volumen f_k que ocupa cada componente del plasma, sino su fracción numérica de masa X_k , que indica el tanto por uno en masa de cada elemento presente en la molécula. Para poder utilizar el algoritmo anterior, es necesario determinar el valor de las fracciones numéricas de volumen f_k a partir de las fracciones de masa X_k , lo cual implica la resolución de un sistema de k ecuaciones con k incógnitas.

A continuación se detalla el caso particular de una mezcla de dos componentes, es decir $k = 2$. Sea m_T la masa molar de un compuesto químico binario, y m_1 y m_2 las masas molares de cada componente dentro de la molécula. Las fracciones numéricas de masa se obtienen mediante:

$$X_1 = \frac{m_1}{m_T} \quad X_2 = \frac{m_2}{m_T} \quad (3.9)$$

Por otra parte, estas fracciones de masa pueden escribirse en función de las fracciones numéricas de volumen de la siguiente forma:

$$X_1 = \frac{f_1 A_1}{f_1 A_1 + f_2 A_2} \quad X_2 = \frac{f_2 A_2}{f_1 A_1 + f_2 A_2} \quad (3.10)$$

Finalmente se obtienen estas soluciones:

$$f_1 = \frac{X_1 A_2}{X_1 A_2 + X_2 A_1} \quad f_2 = 1 - f_1 = \frac{X_2 A_1}{X_1 A_2 + X_2 A_1} \quad (3.11)$$

Para plasmas formados por más de dos componentes será necesario la resolución de sistemas de ecuaciones más complejos para obtener los diferentes valores de las fracciones numéricas f_k .

4. MODELO COLISIONAL RADIATIVO DE ATOMO MEDIO EN REGIMEN NLTE

La versión anterior del código ATMED LTE, está programada para realizar cálculos de plasmas en equilibrio termodinámico local (LTE). En esta sección se describe la implementación de un modelo colisional radiativo. La teoría de no equilibrio local termodinámico (NLTE) consiste en un conjunto lineal de ecuaciones para las poblaciones de iones temporalmente dependientes en un modelo detallado o para las poblaciones electrónicas en orbitales de un ión promedio en un modelo de átomo medio:

$$\frac{d\overline{P}_k}{dt} = \sum_j \overline{P}_j (D_k - \overline{P}_k) \mathfrak{R}_{j \rightarrow k}^+ - \overline{P}_k \sum_j (D_j - \overline{P}_j) \mathfrak{R}_{k \rightarrow j}^- \quad (4.1)$$

4.1 Resolución de las Ecuaciones del Átomo Medio en Estado Estacionario

Un código colisional radiativo en estado estacionario (CRSS, Collisional Radiative Steady State), es un modelo intermedio entre los regímenes LTE y corona. No obstante, no es una simple interpolación entre ellos sino más bien una generalización de los modelos de equilibrio local termodinámico y de equilibrio corona. De hecho, si está bien construido, el modelo CRSS tiende al equilibrio corona en el límite de baja densidad ($10^{10} \div 10^{14} \text{ cm}^{-3}$), y tiende al régimen LTE para plasmas de alta densidad ($10^{22} \div 10^{24} \text{ cm}^{-3}$), tal que es un modelo en el que los regímenes corona y LTE son casos específicos del balance colisional radiativo a bajas y altas densidades respectivamente. Al contrario que en los casos corona y LTE, en el balance CR la distribución de poblaciones iónicas en los modelos detallados o electrónicas en orbitales en los modelos de átomo medio, no puede ser derivada de principios básicos y sencillas formulaciones estadísticas, sino que debe resolverse el sistema completo de ecuaciones que considera todos los posibles procesos atómicos que pueblan o despueblan la población de un ión u orbital.

En estado estacionario, las tasas que pueblan y despueblan los orbitales relativistas del átomo medio son iguales, por lo que el sistema de ecuaciones puede escribirse simbólicamente de esta forma:

$$\frac{d\overline{P}_k}{dt} = 0 \Rightarrow \sum_j \overline{P}_j (D_k - \overline{P}_k) \mathfrak{R}_{j \rightarrow k}^+ = \overline{P}_k \sum_j (D_j - \overline{P}_j) \mathfrak{R}_{k \rightarrow j}^- \quad (4.2)$$

Se describe en esta sección el proceso numérico iterativo para la resolución autoconsistente de las ecuaciones anteriores con el objeto de hallar las poblaciones del átomo medio. Dicho proceso conlleva obtener conjuntamente las poblaciones fraccionarias del átomo medio, el valor del potencial químico electrónico y el valor del grado de ionización del plasma.

Se repite este proceso hasta que se alcanza la convergencia para los valores de las poblaciones, es decir, hasta que la variación de sus valores de una iteración a la siguiente sea menor que una determinada cantidad.

En los siguientes apartados se explican detalladamente los pasos involucrados en el diagrama de flujo utilizado dentro del código ATMED CR para la resolución del balance colisional radiativo en estado estacionario. Se observan claramente las diferencias en el proceso de cálculo respecto al esquema de funcionamiento del código AMTED LTE en el apartado 3.3.

4.1.1 Datos de Entrada

Según las opciones implementadas, los datos a introducir por pantalla son la densidad de materia o electrónica, la temperatura electrónica, la temperatura de la radiación y el factor de dilución en plasmas fotoionizados, la longitud característica del plasma en plasmas gruesos y el elemento químico a través de su número atómico. El peso molecular se encuentra tabulado dentro del código.

4.1.2 Condiciones Iniciales

La resolución autoconsistente de las ecuaciones colisionales radiativas del átomo medio exige partir de valores iniciales aproximados de ciertas magnitudes que sirven de arranque a todo el proceso. Dado que se trata de resolver un sistema de ecuaciones no lineales, la inicialización de esas magnitudes es importante para la convergencia del método y para la obtención de un resultado final correcto.

En esta sección se detallará la obtención de los valores iniciales del grado de ionización medio del plasma, de las poblaciones iniciales y del potencial químico reducido, cuyos valores son clave para dar comienzo a todo el proceso iterativo.

4.1.2.1 Grado de Ionización Medio del Plasma: Z_{bar}^0

El valor inicial del grado de ionización medio del plasma se obtiene a partir de la resolución del código ATMED LTE para un plasma del elemento químico a la densidad y temperatura electrónica especificadas en los datos de entrada, es decir, se considera la ionización media del plasma en régimen LTE.

4.1.2.2 Potencial Químico Reducido: η_e^0

El valor inicial del potencial químico reducido se obtiene igualmente a partir de la resolución del código ATMED LTE. Conocido el valor inicial del grado de ionización, se puede hallar una estimación del potencial químico reducido, despejando de la ecuación al considerar los electrones libres degenerados:

$$f_{1/2}(\eta_e^0) = Z_{bar}^0 \left[\frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{A}{\rho N_A} \left(\frac{m_e k_B T_e}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right]^{-1} \quad (4.3)$$

El valor del potencial inicial se obtiene a partir de la resolución de la integral inversa de Fermi, que se calcula con un método numérico realizado por Antia que utiliza aproximaciones a funciones racionales y que proporciona un error relativo máximo de 10^{-8} .

$$\eta_e^0 = X_{1/2}(f) \quad (4.4)$$

4.1.2.3 Poblaciones Iniciales: P_k^0

El valor inicial de las poblaciones se obtiene a partir de la resolución del código ATMED LTE. Se cumple la neutralidad de la carga:

$$\sum_{k=1}^{k_{\max}} P_k^0 + Z_{bar}^0 = Z \quad (4.5)$$

Siendo Z_{bar}^0 el grado de ionización media del plasma considerado como inicial.

En todos los casos en los que se consideran los efectos de plasma mediante el modelo de ionización por presión, el valor de las poblaciones obtenidas debe estar comprendido en el intervalo:

$$0 \leq P_k^0 \leq D_k \quad (4.6)$$

donde D_k es la degeneración de los niveles afectados por la ionización por presión, que se obtiene a partir de la ecuación:

$$D_k = \frac{2j_k + 1}{1 + \left(a_{zm} \frac{r_k^0}{R_i} \right)^{b_{zm}}} \quad (4.7)$$

En todos los casos en los que se consideran los efectos de plasma mediante el modelo de depresión del continuo: $0 \leq P_k^0 \leq D_k$ tal que $D_k = D_k^0 = 2j_k + 1$.

4.1.3 Propiedades Atómicas Iniciales

Para una configuración electrónica dada por las poblaciones iniciales de los niveles electrónicos:

$$Pob^0 = \{P_1^0, P_2^0, \dots, P_k^0, \dots, P_{nst}^0\}$$

- $nst = n_{\max}^2$: Número máximo de orbitales cuánticos relativistas de la configuración, cuadrado del máximo número cuántico principal considerado.

Se calculan las siguientes propiedades atómicas en el marco del átomo medio con el modelo hidrogenoide apantallado relativista NRSHM (*AtomicTools.f90: SUBROUTINE Autovalor_rel(Pob)*):

- Cargas apantalladas para cada nivel relativista k del átomo medio:

$$Q_k = Z - \sum_{k'=1}^{k_{\max}} \sigma_{kk'} \left(1 - \frac{\delta_{kk'}}{D_k} \right) P_{k'} \quad (4.8)$$

- Autovalores de energía relativistas correspondientes a los estados ligados:

$$\varepsilon_k = m_e c^2 \left[\left(1 + \left[\frac{\alpha Q_k}{n - j - 1/2 + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (\alpha Q_k)^2}} \right]^2 \right)^{-1/2} - 1 \right] \quad (4.9)$$

- Apantallamiento externo de los electrones en orbitales más externos al considerado, todavía sin incluir los efectos de plasma, A_k :

$$A_k = \sum_{k'}^{k_{\max}} P_{k'} \frac{\partial \varepsilon_{k'}}{\partial Q_{k'}} \frac{\partial Q_{k'}}{\partial P_k}$$

$$A_k = \frac{1}{\alpha^2} \sum_{k'} P_{k'} \sigma_{k'k} \left(1 - \frac{\delta_{k'k}}{D_{k'}} \right) \left[1 + \left(\frac{\alpha Q_{k'}}{a + \sqrt{b - (\alpha Q_{k'})^2}} \right)^2 \right]^{-3/2} \frac{\alpha Q_{k'}}{a + \sqrt{b - (\alpha Q_{k'})^2}} \cdot \frac{\alpha (a \sqrt{b - (\alpha Q_{k'})^2} + b)}{(a + \sqrt{b - (\alpha Q_{k'})^2})^2 \sqrt{b - (\alpha Q_{k'})^2}} \quad (4.10)$$

$$a = n_{k'} - j_{k'} - \frac{1}{2} \quad y \quad b = \left(j_{k'} + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (4.11)$$

- Las energías de nivel monoelectrónicas ϵ_k se hallan a partir de la energía total del ion E_T :

$$\epsilon_k = \left. \frac{\partial E_T}{\partial P_k} \right|_{(P_i)} = \varepsilon_k + A_k \quad (4.12)$$

- Las energías de interacción electrónica $V_{kk'}$:

$$\begin{aligned} \alpha^2 V_{kk'} = & \sigma_{kk'} \left(1 - \frac{\delta_{kk'}}{D_k} \right) f_1(Q_k) f_2(Q_k) f_3(Q_k) + \sigma_{k'k} \left(1 - \frac{\delta_{k'k}}{D_{k'}} \right) f_1(Q_{k'}) f_2(Q_{k'}) f_3(Q_{k'}) + \\ & + \sum_j P_j \sigma_{jk} \sigma_{jk'} \left(1 - \frac{\delta_{jk}}{D_j} \right) \left(1 - \frac{\delta_{jk'}}{D_j} \right) \left[3 f_1^{5/3} f_2^2 f_3^2 - f_1 f_3^2 - f_1 f_2 \frac{\alpha^2 Q_j (2ax + ab + 3b\sqrt{x})}{(a + \sqrt{x})^3 x^{3/2}} \right] \end{aligned} \quad (4.13)$$

Donde $D_k^0 = 2j_k + 1$ es la degeneración máxima de la subcapa relativista k y D_k es la degeneración de la subcapa relativista k afectada por la ionización por presión.

4.1.4 Grado de Ionización y Potencial Químico Reducido

El valor del grado de ionización medio del plasma necesario para el cálculo de las expresiones analíticas de algunos coeficientes de tasas, se va actualizando en el proceso con las iteraciones en el número entero p , tal que cumpla la condición de neutralidad de carga:

$$Z_{bar}^{p+1} = Z - \sum_{k=1}^{k_{max}} P_k^{p+1} \quad (4.14)$$

Siendo Z_{bar}^{p+1} el grado de ionización media del plasma recalculado utilizando las poblaciones convergentes tras la resolución de las ecuaciones de tasas en la última iteración $p+1$. Conocido el valor recalculado del grado de ionización, se puede hallar una nueva estimación del potencial químico reducido, despejando de la ecuación:

$$f_{1/2}(\eta_e^{p+1}) = Z_{bar}^{p+1} \left[\frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{A}{\rho N_A} \left(\frac{m_e k_B T_e}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right]^{-1} \quad (4.15)$$

Por tanto, el valor del potencial actualizado necesario para el cálculo de las expresiones analíticas de algunos coeficientes de tasas se obtiene a partir de la resolución de la integral inversa de Fermi:

$$\eta_e^{p+1} = X_{1/2}(f) \quad (4.16)$$

4.1.5 Efectos de Plasma

Se pueden considerar tres opciones según el parámetro *model*:

- Ionización por presión D_k [41-42] (parámetros *model=1*, *czm=0*):

$$D_k = \frac{2j_k + 1}{1 + \left(a_{zm} \frac{r_k^0}{R_i} \right)^{b_{zm}}} \quad (4.17)$$

- Depresión del continuo según la fórmula de Stewart & Pyatt [43] (parámetros *model=1*, *czm=1*):

$$D_e = \sqrt{\frac{T(ua)}{4\pi Z_{bar} N_i}} \quad (4.18)$$

$$D_i = \sqrt{\frac{T(ua)}{4\pi Z_{bar}^2 N_i}} \quad (4.19)$$

$$R_D = \frac{D_i * D_e}{\sqrt{D_i^2 + D_e^2}} \quad (4.20)$$

$$\Delta I = \frac{1}{2} \frac{Z_{bar}}{R_i} \left[\left(1 + \left(\frac{R_D}{R_i} \right)^3 \right)^{\frac{2}{3}} - \left(\frac{R_D}{R_i} \right)^2 \right] \quad (4.21)$$

Se consideran en las ecuaciones de tasas los valores de $D_k^0 = 2j_k + 1$, es decir la degeneración máxima de la subcapa relativista k .

- Ionización por presión D_k + Depresión del continuo según Stewart & Pyatt (parámetro *model=2*): Con muy altas temperaturas (D_k y ΔI simultáneamente).

4.1.6 Modelo Colisional Radiativo Estacionario

Las ecuaciones de evolución de las poblaciones en un plasma en no equilibrio NLTE vienen dadas por la siguiente expresión para cada nivel relativista i del átomo medio, en la que intervienen también el resto de niveles $(1, 2, \dots, j, \dots, m, \dots, k_{max}=nst)$ y que representa el balance de electrones con respecto a los niveles energéticos:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\overline{P}_i}{dt} = & (D_i - \overline{P}_i) \sum_j \overline{P}_j \tau_{ji} - \overline{P}_i \sum_j (D_j - \overline{P}_j) \tau_{ij} - \overline{P}_i I^{ic} + (D_i - \overline{P}_i) R^{ci} + \\
 & - \overline{P}_i \sum_{j,m} \overline{P}_m (D_j - \overline{P}_j) A_{ij}^{mc} + (D_i - \overline{P}_i) \sum_{j,m} \overline{P}_m \overline{P}_j A_{ji}^{mc} - \overline{P}_i \sum_{j,m} \overline{P}_m (D_j - \overline{P}_j) A_{mj}^{ic} + \\
 & + (D_i - \overline{P}_i) \sum_{j,m} \overline{P}_j (D_m - \overline{P}_m) R_{ji}^{cm} - \overline{P}_i \sum_{j,m} (D_m - \overline{P}_m) (D_j - \overline{P}_j) R_{ij}^{cm} + (D_i - \overline{P}_i) \sum_{j,m} \overline{P}_j (D_m - \overline{P}_m) R_{jm}^{ci}
 \end{aligned} \quad (4.22)$$

En la aproximación estacionaria dicho sistema de ecuaciones se puede reescribir de forma conveniente para aplicar métodos iterativos [25]:

$$\frac{d\overline{P}_i}{dt} = (D_i - \overline{P}_i) S_i - \overline{P}_i L_i = 0 \Rightarrow (D_i - \overline{P}_i) S_i = \overline{P}_i L_i \Rightarrow \overline{P}_i^{p+1} = \frac{D_i}{1 + \frac{L_i}{S_i}} \bigg|_{\overline{P}_i^p} \quad (4.23)$$

Tal que los coeficientes que corresponden al poblamiento S_i y despoblamiento L_i del nivel i son:

$$\begin{aligned}
 \overline{P}_i \left[\sum_j (D_j - \overline{P}_j) \tau_{ij} + I^{ic} + \sum_{j,m} \overline{P}_m (D_j - \overline{P}_j) A_{ij}^{mc} + \sum_{j,m} \overline{P}_m (D_j - \overline{P}_j) A_{mj}^{ic} + \sum_{j,m} (D_m - \overline{P}_m) (D_j - \overline{P}_j) R_{ij}^{cm} \right] = \\
 = (D_i - \overline{P}_i) \left[\sum_j \overline{P}_j \tau_{ji} + R^{ci} + \sum_{j,m} \overline{P}_m \overline{P}_j A_{ji}^{mc} + \sum_{j,m} \overline{P}_j (D_m - \overline{P}_m) R_{ji}^{cm} + \sum_{j,m} \overline{P}_j (D_m - \overline{P}_m) R_{jm}^{ci} \right] \\
 L_i = \sum_j (D_j - \overline{P}_j) \tau_{ij} + I^{ic} + \sum_{j,m} \overline{P}_m (D_j - \overline{P}_j) A_{ij}^{mc} + \sum_{j,m} \overline{P}_m (D_j - \overline{P}_j) A_{mj}^{ic} + \sum_{j,m} (D_m - \overline{P}_m) (D_j - \overline{P}_j) R_{ij}^{cm}
 \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$S_i = \sum_j \overline{P}_j \tau_{ji} + R^{ci} + \sum_{j,m} \overline{P}_m \overline{P}_j A_{ji}^{mc} + \sum_{j,m} \overline{P}_j (D_m - \overline{P}_m) R_{ji}^{cm} + \sum_{j,m} \overline{P}_j (D_m - \overline{P}_m) R_{jm}^{ci} \quad (4.25)$$

Dichos coeficientes dependen a su vez de todas las poblaciones y vacantes, de las fuerzas de oscilador, energías monoeléctricas y otras propiedades atómicas, a su vez determinadas por el estado del átomo medio, es decir, por los valores fraccionarios de ocupación de los niveles energéticos relativistas. Algunas tasas también dependen del grado medio de ionización y del potencial químico electrónico por el balance detallado. Para resolver el sistema se utiliza un proceso iterativo con iteraciones $p = 1, 2, 3 \dots$ en las poblaciones fraccionarias del átomo medio.

Con los parámetros de entrada temperaturas electrónica y de radiación así como densidad de materia, se calculan con el módulo ATMED LTE las propiedades atómicas correspondientes a la configuración de átomo medio.

Si en lugar de la densidad de materia el dato inicial del plasma es la densidad electrónica, se tantea en el código una densidad de materia con la que resolver las poblaciones del átomo medio para dicha densidad electrónica y después se chequea durante la ejecución si la densidad electrónica calculada es la del dato inicial. Se realizan las iteraciones necesarias correlacionando densidad electrónica inicial con densidad de materia hasta que dicha N_e es igual a la N_e calculada en la última iteración válida. Se ha comprobado que ésta es la mejor solución para computar bien la configuración final de átomo medio mediante iteraciones sucesivas que van proporcionando átomos medios en los cuales todos los parámetros atómicos del plasma y poblaciones están correlacionados. Si inicialmente se fuerza en el programa una ionización media, por ejemplo, la mitad del número atómico ($Z_{bar} = Z/2$), los cálculos resultan distorsionados desviándose de resultados correctos.

Partiendo de dichos valores iniciales de las propiedades atómicas correspondientes a la configuración de átomo medio en régimen LTE que inicializa todo el proceso iterativo (Apartado 4.1.2), debe alcanzarse convergencia en las poblaciones tal que las poblaciones de la iteración $p+1$ dependen de los coeficientes de tasas calculados con las propiedades atómicas y las poblaciones de la iteración anterior p :

$$\overline{P_i^{p+1}} = \left(D_i / 1 + \frac{L_i}{S_i} \right) \bigg|_{\overline{P_i} = \overline{P_i^p}} \quad (4.26)$$

Por último se impone la neutralidad de la carga en el plasma considerando las últimas poblaciones:

$$Z_{bar}^{p+1} = Z - \sum_{k=1}^{k \max} P_i^{p+1} \quad (4.27)$$

Se recalcula el valor del potencial químico reducido que formará parte de las tasas en la siguiente iteración ($p+2$). Con estas poblaciones resultantes del paso anterior se recalculan las nuevas cargas apantalladas dependientes de las poblaciones, y con ellas a su vez el resto de propiedades atómicas en el marco del átomo medio con el modelo hidrogenoide apantallado relativista NRSHM.

En el caso particular de calcular un plasma en régimen LTE con ATMED CR, los valores iniciales de las propiedades atómicas así como de las poblaciones correspondientes a la configuración de átomo medio calculadas con ATMED LTE y que inicializan todo el proceso iterativo, satisfacen todas las ecuaciones de tasas del balance colisional radiativo tal que se alcanza directamente la convergencia con muy pocas iteraciones o en algunos casos incluso cuando el contador es $p = 1$ y no son necesarias más iteraciones.

Los procesos más importantes que tienen lugar en un plasma se detallan de forma descriptiva como interacciones entre partículas en la publicación de D. Salzmann, relativa a la física atómica en plasmas calientes [44] y se realiza un amplio tratamiento mecano-cuántico de dichos procesos atómicos. Los constituyentes del plasma, electrones, iones y fotones, interactúan a través de sus campos electromagnéticos, transfiriendo energía de una a otra partícula. Las interacciones de mayor interés en la física de plasmas son aquellas en las que un ión interactúa con un electrón o un fotón, dando lugar a cambios tanto en el estado de ionización o en la excitación del ión que interactúa.

El comportamiento de estos procesos atómicos depende de las condiciones de densidad y temperatura. Las tasas colisionales (C) y radiativas (R) de los procesos atómicos incluidos en el balance CR (Tabla 4.1), se calculan mediante las subrutinas correspondientes que están en el fichero (RATES_Formulas.f95) llamadas dentro del fichero de cálculo general (TASAS_Sumatorios.f95) en función del tipo de plasma (ópticamente delgado/grueso, fotoionizado...).

Las fórmulas analíticas utilizadas para cada proceso atómico y que forman parte de los coeficientes denominados L_i y S_i se detallan en los siguientes apartados.

Tabla 4. 1: Lista de Procesos Atómicos incluidos en ATMED CR

NOTACION	PROCESO ATOMICO	REFERENCIA	SUBROUTINA
I_C^{ic}	Ionización Colisional	Fórmula Lotz [45]	IONUP
R_C^{ci}	Recombinación 3-Cuerpos	Balance Detallado	IONDN
τ_{ij}^C	Excitación Colisional	Van Regemorter [46]	COLLUP
τ_{ji}^C	Desexcitación Colisional	Balance Detallado	COLLDN
A_{ji}	Emisión Espontánea	Coeficiente Einstein	SPONEM
τ_{ij}^R	Fotoexcitación	Faussurier [17-47]	STIMABS
τ_{ji}^R	Fotodesexcitación	Balance Detallado	STIMEM
I_R^{ic}	Fotoionización	Faussurier [17-47]	PHOTOIONUP
R_R^{ci}	Fotorecombinación	Balance Detallado	PHOTOIONDN
A_{ji}^{kc}	Autoionización	Albritton [17-48]	AUTOIZ
R_{ij}^{ck}	Recombinación Dielectrónica	Balance Detallado	ELCAPT

4.1.6.1 Ionización Colisional

La tasa de ionización colisional desde el nivel i se calcula:

$$I_C^{ic} = 4\pi a_0^2 Ryd^2 \zeta_{Lotz} c \left(\frac{8}{\pi m_e c^2} \right)^{1/2} \frac{N_e}{(K_B T_e)^{3/2}} \frac{E_1(\beta_e I_i)}{\beta_e I_i} \quad (s^{-1}) \quad (4.28)$$

Donde:

- $a_0 = 0.5291772083 \times 10^{-8} \text{ cm}$: Radio de Bohr.
- $Ryd = -13.605698 \text{ eV}$: Energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno.
- $\zeta_{Lotz} = 0.691$: Parámetro aproximación de Lotz.
- $c = 299792458 \times 10^2 \text{ cm/s}$: Velocidad de la luz.
- $m_e = 9.109382 \times 10^{-31} \text{ kg}$: Masa del electrón.
- $(1\text{kg}) c^2 = 5.609589 \times 10^{35} \text{ eV}$: Equivalente energético de la masa.
- $m_e c^2 = mc = 0.510998902 \times 10^6 \text{ eV}$: Masa en reposo del electrón.
- $K_B T_e \text{ eV}$: Temperatura electrónica.
- $E_1(u) = \int_1^\infty dx \frac{e^{-ux}}{x}$: Primera integral exponencial.
- $I_i = -\epsilon_i \text{ eV}$: Potencial de ionización del nivel i .

La fórmula se puede reescribir para implementarla en el código FORTRAN como:

$$I_C^{ic} = 4 \sqrt{\frac{8\pi}{m_e}} a_0^2 Ryd^2 \zeta_{Lotz} \frac{N_e}{(K_B T_e)^{1/2} I_i} E_1(\beta_e I_i) \quad (s^{-1}) \quad (4.29)$$

$$4\pi a_0^2 Ryd^2 c \left(\frac{8}{\pi m_e c^2} \right)^{1/2} = 4 \sqrt{\frac{8\pi}{m_e}} a_0^2 Ryd^2 = 4.36 \times 10^{-6} \quad (cm^3 s^{-1} eV^{3/2}) \quad (4.30)$$

$$I_C^{ic} = 4.36 \times 10^{-6} \zeta_{Lotz} \frac{N_e}{(K_B T_e)^{1/2} I_i} E_1(\beta_e I_i) \quad (s^{-1}) \quad (4.31)$$

$$I_C^{ic} = 4.36 \times 10^{-6} \zeta_{Lotz} \frac{1}{(K_B T_e)^{1/2} I_i} E_1(\beta_e I_i) \quad (cm^3 s^{-1}) \quad (4.32)$$

4.1.6.2 Recombinación a Tres Cuerpos

La tasa de recombinación a tres cuerpos al nivel i se calcula asumiendo LTE mediante balance detallado con la ionización colisional:

$$R_C^{ci} = I_C^{ic} \exp[-\beta_e (\epsilon_i - \mu_e)] \quad (s^{-1}) \quad (4.33)$$

Aunque la relación haya sido deducida partiendo de una hipótesis de equilibrio, ésta sólo depende de magnitudes atómicas y de la temperatura. Por tanto, la ecuación será válida en cualquier situación siempre y cuando la distribución de electrones libres sea maxwelliana.

4.1.6.3 Excitación Colisional

La tasa de excitación colisional desde el nivel i al nivel j se calcula:

$$\tau_{ij}^C = 16 Ry d^2 a_0^2 c \left(\frac{2\pi^3}{3m_e c^2} \right)^{1/2} \frac{f_{ij}}{D_j^0} \frac{N_e}{(K_B T_e)^{3/2}} \frac{\exp(-\beta_e \epsilon_{ij})}{\beta_e \epsilon_{ij}} G(\beta_e \epsilon_{ij}) \quad (s^{-1}) \quad (4.34)$$

- $\epsilon_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$ eV : Energía de excitación.
- f_{ij} : Fuerza de oscilador ligado-ligado.
- $G(u) = A + (Bu - Cu^2 + D)e^u E_1(u) + Cu$: Factor de Gaunt.
 - $\left\{ \begin{array}{ll} A = 0.15 & \text{si } n_j \neq n_i \\ A = 0.60 & \text{si } n_j = n_i \end{array} \right\}$: Parámetro A.
 - $B = C = 0$: Parámetros B y C.
 - $D = 0.28$: Parámetro D.

La fórmula se puede reescribir para implementarla en el código FORTRAN como:

$$\tau_{ij}^C = \frac{16\sqrt{2}\pi^2 a_0^2}{\sqrt{3\pi n_e}} \frac{Ryd^2 f_{ij}}{\epsilon_{ij} (K_B T_e)^{1/2}} \frac{N_e}{D_j^0} G(\beta_e \epsilon_{ij}) \exp(-\beta_e \epsilon_{ij}) \quad (s^{-1}) \quad (4.35)$$

$$16Ryd^2 a_0^2 c \left(\frac{2\pi^3}{3m_e c^2} \right)^{1/2} = \frac{16\sqrt{2}\pi^2 a_0^2}{\sqrt{3\pi n_e}} Ryd^2 = 1.58 \times 10^{-5} \quad (cm^3 s^{-1} eV^{3/2}) \quad (4.36)$$

$$\tau_{ij}^C = 1.58 \times 10^{-5} \frac{f_{ij}}{\epsilon_{ij} (K_B T_e)^{1/2}} \frac{N_e}{D_j^0} [A \exp(-\beta_e \epsilon_{ij}) + 0.28 E_1(\beta_e \epsilon_{ij})] \quad (s^{-1}) \quad (4.37)$$

$$\tau_{ij}^C = 1.58 \times 10^{-5} \frac{f_{ij}}{\epsilon_{ij} (K_B T_e)^{1/2}} \frac{1}{D_j^0} [A \exp(-\beta_e \epsilon_{ij}) + 0.28 E_1(\beta_e \epsilon_{ij})] \quad (cm^3 s^{-1}) \quad (4.38)$$

4.1.6.4 Desexcitación Colisional

La tasa de desexcitación colisional desde el nivel j al nivel i se calcula asumiendo LTE mediante balance detallado con la excitación colisional:

$$\tau_{ji}^C = \tau_{ij}^C \exp[\beta_e (\epsilon_j - \epsilon_i)] \quad (s^{-1}) \quad (4.39)$$

4.1.6.5 Emisión Espontánea

Si el plasma es ópticamente delgado sólo se considera la emisión espontánea. Particularizando la tasa de emisión espontánea desde el nivel j al nivel i para el átomo medio resulta:

$$A_{ji} = \frac{4\pi\alpha}{hm_e c^2} \epsilon_{ij}^2 \frac{g_i}{g_j} f_{ij} = 4.34 \times 10^7 \epsilon_{ij}^2 \frac{g_i}{g_j} f_{ij} \Rightarrow \tau_{ji}^R = A_{ji} = \frac{2\epsilon_{ij}^2 e^2}{m_e c^3 \hbar^2} \frac{f_{ij}}{D_j^0} \quad (s^{-1}) \quad (4.40)$$

Donde:

- $\alpha = 7.297353 \times 10^{-3}$: Constante de estructura fina.
- $h = 6.626069 \times 10^{-34} \text{ Js}$: Constante de Planck.
- $\hbar = 4.13566727 \times 10^{-15} \text{ eVs}$: Constante de Planck.
- $\epsilon_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i = h\nu \text{ eV}$: Energía de excitación.

- f_{ij} : Fuerza de oscilador de absorción del nivel i al j.
- $g_j = D_j^0 = 2j_j + 1$: Peso estadístico del nivel j (degeneración en subniveles).

4.1.6.6 Absorción Estimulada / Fotoexcitación (Plasmas Fotoionizados)

Se puede resolver el modelo colisional radiativo estacionario, suponiendo que el campo de radiación es conocido, siendo la función de distribución de fotones Planckiana con la temperatura de radiación dada.

$$F_p(\hbar\omega) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\hbar\omega}{K_B T_{rad}}\right] - 1} \quad (4.41)$$

Sólo se considera esta tasa en plasmas fotoionizados, es decir, en presencia de un campo externo de radiación o coexistente. La tasa de absorción estimulada desde el nivel i al nivel j tal que $\epsilon_j > \epsilon_i$ es:

$$\tau_{ij}^R = \frac{c}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty (\hbar\omega)^2 \sigma_{ij}^{abs}(\hbar\omega) F_p(\hbar\omega) d(\hbar\omega) = \frac{2\alpha (\hbar\omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} F_p(\hbar\omega_{ij}) \quad (s^{-1}) \quad (4.42)$$

Se considera en la sección eficaz de absorción como perfil de línea una función delta de Dirac $\delta = \hbar(\omega - \omega_{ij})$, implementando finalmente la siguiente fórmula en el código:

$$\tau_{ij}^R = A_{ji} \frac{1}{\exp[\beta_{v0}(\epsilon_j - \epsilon_i)] - 1} = A_{ji} \frac{1}{\exp\left[\frac{(\epsilon_j - \epsilon_i)}{K_B T_{rad}}\right] - 1} \quad (s^{-1}) \quad (4.43)$$

Donde:

- $\epsilon_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i = h\nu_0$: Energía de excitación.
- $\hbar = 6.58211889 \times 10^{-16} \text{ eVs}$: Constante de Planck reducida.
- $A_{ji} = \frac{2\epsilon_{ij}^2 e^2 f_{ij}}{m_e c^3 \hbar^2 D_j^0} \frac{eV^2 eVcm}{eV \frac{cm}{s} (eVs)^2} = s^{-1}$: Coeficiente de Einstein para emisión espontánea.
- $e^2 = 1.4399652 \times 10^{-7} \text{ eVcm}$: Carga del electrón al cuadrado.

- $D_j^0 = (2j_j + 1)$: Degeneración del nivel j sin efectos de ionización por presión.
- $\beta_v = 1/K_B T_v$: Inverso de la temperatura denominada “brightness temperature”:
 - $\beta_v = \beta_{v0} = \beta_{rad} = 1/K_B T_{rad}$: Cuando dicha T^a es igual a la de radiación $T_v = T_{rad}$.
 - $\beta_{v0} = \frac{1}{h\nu_0} \ln \left(\frac{\exp(\beta_{rad} h\nu_0) + x_{dilu} - 1}{x_{dilu}} \right)$: Temperatura radiación, factor dilución.

Se ha considerado como perfil de línea una función delta de Dirac con el objeto de obtener una fórmula sencilla que implementar en las ecuaciones de tasas y así agilizar la resolución del balance colisional radiativo. Una vez resuelto el balance y obtenidas las poblaciones se refinan los perfiles de línea con otros ensanchamientos para calcular las propiedades radiativas. Se podría reproducir un campo de radiación incidente mediante una combinación de k distribuciones Planckianas (cuerpo negro), cada una multiplicada por su factor de dilución:

$$\Rightarrow \tau_{ij}^R = A_{ji} \sum_k x_{dilu}^k \frac{1}{\exp \left[\frac{(\epsilon_j - \epsilon_i)}{K_B T_{rad}^k} \right] - 1} \quad (4.44)$$

Se considera un plasma fotoionizado con T_e no igual a T_{rad} , pero con un factor de dilución comprendido entre 0.01 y 1. El factor de dilución es un método simple para incluir el campo de radiación y a su vez tener en cuenta que dicho campo puede tener una intensidad menor que la de un cuerpo negro. Así para una temperatura de radiación determinada T_{rad} y un factor de dilución x_{dilu} , la intensidad del campo de radiación es simplemente la de un cuerpo negro multiplicada por dicho factor.

Dicho factor en la práctica puede considerarse como el efecto de la distancia entre el plasma y la fuente del campo de radiación.

4.1.6.7 Emisión / Fotodesexcitación (Plasmas Fotoionizados)

Sólo se considera esta tasa en plasmas fotoionizados. En este caso la tasa de emisión agrupa la espontánea y la estimulada desde el nivel j al nivel i y se calcula asumiendo LTE ($T_{rad} = T_e$) mediante balance detallado con la absorción estimulada:

$$\exp[-\beta_e \epsilon_i] \tau_{ij}^R = \exp[-\beta_e \epsilon_j] \tau_{ji}^R \quad (4.45)$$

$$\tau_{ji}^R = A_{ji} \left(\frac{1}{\exp[\beta_{v0}(\epsilon_j - \epsilon_i)] - 1} + 1 \right) = A_{ji} \left(\frac{1}{\exp\left[\frac{(\epsilon_j - \epsilon_i)}{K_B T_{rad}}\right] - 1} + 1 \right) \quad (s^{-1}) \quad (4.46)$$

Esta tasa se puede obtener también por la formulación con un perfil de línea delta de Dirac $\delta = \hbar(\omega - \omega_{ij})$:

$$\tau_{ji}^R = \frac{c}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty (\hbar \omega)^2 \sigma_{ji}^{em}(\hbar \omega) [1 + F_p(\hbar \omega)] d(\hbar \omega) = \frac{2\alpha (\hbar \omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} \frac{D_i}{D_j} [F_p(\hbar \omega_{ij}) + 1] (s^{-1}) \quad (4.47)$$

4.1.6.8 Fotoionización (Plasmas Fotoionizados)

Si el plasma es fotoionizado mediante un campo de radiación externo, la tasa de fotoionización desde el nivel i se calcula:

$$I_R^{ic} = \frac{4\pi}{h} \int_{I_i}^\infty \frac{d\nu}{\nu} \sigma_R^{ic}(\nu) \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(\beta_\nu h\nu) - 1} \quad (s^{-1}) \quad (4.48)$$

Donde:

- $\sigma_R^{ic}(\nu) = \frac{2\pi^2 e^2 \hbar}{m_e c} \frac{df_{nlj}}{d\mathcal{E}}$: Sección eficaz de fotoionización.
- $\frac{df_i}{d\mathcal{E}} = \frac{f_{i \in c l'}}{h\nu(eV)}$: Fuerza de oscilador ligado-libre de la transición del nivel i al continuo entre la energía del fotón incidente $h\nu(eV)$ a la temperatura de radiación T_{rad} .
- $I_i = -\epsilon_i \text{ eV}$: Potencial de ionización del nivel i .
- $\beta_\nu = 1 / K_B T_\nu$: Inverso de la temperatura denominada “brightness temperature”:
 - $\beta_\nu = \beta_{rad} = 1 / K_B T_{rad}$: Cuando dicha T^a es igual a la de radiación $T_\nu = T_{rad}$.
 - $\beta_\nu = \frac{1}{h\nu} \ln \left(\frac{\exp(\beta_{rad} h\nu) + x_{dilu} - 1}{x_{dilu}} \right)$: Temperatura radiación, factor dilución.

La fórmula se puede reescribir para implementarla en el código FORTRAN como:

$$I_R^{ic} = \frac{4\pi}{h} \int_{I_i}^{\infty} \frac{d(\beta_v h\nu)}{\beta_v h\nu} \sigma_R^{ic}(\nu) \frac{2h(\beta_v h\nu)^3}{(\beta_v h)^2 c^2} \frac{1}{\exp(\beta_v h\nu) - 1} (s^{-1}) \quad (4.49)$$

4.1.6.9 Fotorecombinación (Plasmas Fotoionizados)

La tasa de fotorecombinación (recombinación radiativa) al nivel i se calcula asumiendo LTE mediante balance detallado con la fotoionización:

$$R_R^{ci} = \frac{4\pi}{h} \exp[-\beta_e (\epsilon_i - \mu_e)] \int_{I_i}^{\infty} \frac{d\nu}{\nu} \sigma_R^{ic}(\nu) \frac{2h\nu^3}{c^2} \left(\frac{1}{\exp(\beta_e h\nu) - 1} + 1 \right) \exp(-\beta_e h\nu) (s^{-1}) \quad (4.50)$$

$$R_R^{ci} = I_R^{ic} \exp[-\beta_e (\epsilon_i - \mu_e)] (s^{-1}) \quad (4.51)$$

Aunque la relación haya sido deducida partiendo de una hipótesis de equilibrio, ésta sólo depende de magnitudes atómicas y de la temperatura.

4.1.6.10 Autoionización

La tasa de autoionización tal que un electrón del nivel j realizando una transición al nivel i tal que $\epsilon_j > \epsilon_i$, mientras que otro electrón del nivel k ($\epsilon_k > \epsilon_i - \epsilon_j$) va al continuo se calcula mediante la expresión aproximada:

$$A_{ji}^{kc} = C_{auto} \tanh \left[\frac{3\pi}{2\hbar} \left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{Z_{bar}} \right)^2 \frac{f_{ij}}{D_j^0} \frac{df_k}{d\epsilon} \right]_{\epsilon = -\epsilon_k} \frac{g_A}{C_{auto}} \quad (4.52)$$

Donde:

- $\epsilon_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$ eV : Energía de excitación.
- $C_{auto} = 10^{14} s^{-1}$: Límite superior que hasta 1500÷2000 eV y medias, altas densidades ha sido ajustado a $10^{14} s^{-1}$.
- f_{ij} : Fuerza de oscilador ligado-ligado de absorción de la transición del nivel i al j.
- $D_j^0 = (2j_j + 1)$: Degeneración del nivel j sin efectos de ionización por presión.

- $\left. \frac{df_k}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=-\epsilon_k} = \frac{f_{k,\epsilon_c l'}}{-\epsilon_k (eV)}$: Densidad de fuerza de oscilador a la energía de ligadura del orbital

$k \rightarrow$ Fuerza de oscilador ligado-libre de la transición del orbital k al continuo.

- $g_A = 0.2$: Factor de Gaunt.

Otra formulación para la autoionización basada en los números cuánticos principales según la referencia de un modelo DCA y extrapolada a niveles relativistas y átomo medio es:

$$A_{ji}^{kc} = \frac{32}{\sqrt{3}} \frac{Q_i^2}{\hbar n(k)^3} \frac{D_i^0}{D_k^0} \frac{I_H^2}{\epsilon_{ij}} f_{ij} g(\epsilon_{ij}) = \frac{64\pi}{\sqrt{3}} \frac{Q_i^2}{n(k)^3} \frac{D_i^0}{D_k^0} \frac{Ryd^2}{h \epsilon_{ij}} f_{ij} g(\epsilon_{ij}) = 5.835 \times 10^{17} \frac{Q_i^2}{n(k)^3} \frac{D_i^0}{D_k^0} \frac{f_{ij}}{\epsilon_{ij}} \quad (4.53)$$

Donde:

- $\epsilon_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$ eV : Energía de excitación.
- $I_H = Ryd = -13.605698$ eV : Energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno.
- f_{ij} : Fuerza de oscilador ligado-ligado de absorción de la transición del nivel i al j .
- $D_j^0 = (2j_j + 1)$: Degeneración del nivel j sin efectos de ionización por presión.
- $g = 0.12 \div 0.15$: Factor de Gaunt.

4.1.6.11 Captura Dielectrónica

La tasa de captura dielectrónica se calcula asumiendo LTE mediante balance detallado con la autoionización:

$$R_{ij}^{ck} = A_{ji}^{kc} \exp[-\beta_e (\epsilon_k + \epsilon_j - \epsilon_i - \mu_e)] \quad (4.54)$$

Diffiere de la recombinación radiativa en que la energía cinética del electrón incidente se utiliza para excitar otro electrón del ión que experimenta recombinación en vez de perderse en la emisión de un fotón.

4.1.6.12 Fuerzas de Oscilador Ligado-Ligado según NRSHM

En todas las fórmulas anteriores se utilizan las expresiones de las fuerzas de oscilador ligado-ligado del modelo NRSHM. Estas son cantidades adimensionales que representan la mayor o menor probabilidad de que tenga lugar la transición de un electrón entre dos niveles k y k' . Son positivas en el caso de procesos de absorción, $k \rightarrow k'$, y negativas en el caso de procesos de emisión $k' \rightarrow k$. En este modelo se utiliza la expresión relativista [25]:

$$f_{kk'} = \frac{1}{3} (\epsilon_{k'} - \epsilon_k) (2j'+1)(l+l'+1) W^2 \left(l' j' l j; \frac{1}{2} 1 \right) r_{kk'}^2 \quad (4.55)$$

$r_{kk'}^2$ es el elemento de matriz dipolar eléctrico relativista. El coeficiente de Racah W se obtiene mediante los símbolos $6j$ de Wigner:

$$W \left(l' j' l j; \frac{1}{2} 1 \right) = (-1)^{(-l'-j'-l-j)} \begin{Bmatrix} l' & j' & 1/2 \\ j & l & 1 \end{Bmatrix} \quad (4.56)$$

4.1.6.13 Fuerzas de Oscilador Ligado-Libre

- Expresiones de las fuerzas de oscilador ligado-libre del modelo NRSHM [9]:

$$\left. \frac{df_k}{d\epsilon} \right|_{\epsilon = -\epsilon_k} = f_{nl, \epsilon_c l'} = \frac{l+l'+1}{3(2l+1)} r_{nl, \epsilon_c l'}^2 \quad (4.57)$$

- $\epsilon_c = \mathcal{E}$: Energía con la que el e- queda en el continuo siendo la diferencia entre la energía del fotón $h\nu$ (fotoionización) o del e- incidente (ionización colisional) y la energía de ligadura de dicho electrón en el orbital relativista (notación simplificada nl).
- $f_{nl, \mathcal{E} l'}$: Fuerzas de oscilador de fotoionización / ionización colisional siendo las únicas transiciones permitidas aquellas en las que el salto en el número cuántico orbital satisface la relación $l' = l \pm 1$.
- $\mathcal{E} = h\nu - \epsilon_k$ Es la energía necesaria para producir el salto del electrón al continuo tal que $\mathcal{E} > 0$. La fuerza de oscilador se calcula para el valor del potencial de ionización del orbital tal que $\mathcal{E} = 0$.

- La energía del fotón/electrón (partícula que produce la ionización) $h\nu$ se expresa en unidades atómicas.
- Las probabilidades de transición (elementos de matriz relativistas) $r_{nl,\ell'}^2$ se obtienen a partir de las funciones de onda hidrogenoides para espectros discretos y continuos tal que se pueden desarrollar analíticamente las fuerzas de oscilador $f_{nl,\ell'}$.

$$\begin{aligned} \left. \frac{df_k}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=-\epsilon_k} &= f_{nl,\epsilon_c,l'} = f_{nl,\ell' \mp 1} = \frac{2^{4l'+5}}{3(n-l-1)!(n+l)!} \left(\frac{n}{Q_{nl}} \right)^4 \frac{l_{>}}{2l+1} f_n(\lambda) \lambda^{l'+4} \\ &\times \left[(n \pm l_{>})(n-1 \pm l_{>}) \varphi_{n-l'-2,l'}(\lambda) - \varphi_{n-l',l'}(\lambda) \right]^2 \\ &\times \prod_{s=1}^{l'} [(n^2 - s^2) \lambda + s^2] \end{aligned} \quad (4.58)$$

$$\lambda \equiv \lambda_{nl} = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_n} \frac{Q_{nl}^2}{2n^2}; \quad (4.59)$$

$$l_{>} = \max(l, l') \quad (4.60)$$

- Expresión de la fuerza de oscilador ligado-libre según el número cuántico principal y las cargas apantalladas [49]:

$$\left. \frac{df_k}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=-\epsilon_k} \Rightarrow \frac{f_{nl,\epsilon_c,l'}}{-\epsilon_k (eV)} = 12 \frac{Q_k^4}{A} \frac{1}{n^5(k)} / -\epsilon_k (eV) \quad (4.61)$$

4.1.7 Convergencia

El proceso se repite hasta alcanzar la convergencia en poblaciones y propiedades atómicas:

$$\max_i \left| \overline{P_i^{p+1}}(Z_{bar}^{(p+1)}, \eta_e^{(p+1)}, \epsilon_i^{(p+1)}, f_{ij}^{(p+1)}) - \overline{P_i^p}(Z_{bar}^{(p)}, \eta_e^{(p)}, \epsilon_i^{(p)}, f_{ij}^{(p)}) \right| < 10^{-05} \quad (4.62)$$

El valor de las poblaciones obtenidas en el cálculo iterativo debe estar comprendido en el intervalo $0 \leq P_k \leq D_k$ donde D_k es la degeneración de los niveles afectados por la ionización por presión. O si se utiliza el modelo de depresión del continuo, en el intervalo: $0 \leq P_k \leq D_k^0$

4.1.8 Valores Finales

Alcanzada la convergencia se dan por válidos los resultados correspondientes a las poblaciones fraccionarias del átomo medio P_k , el potencial químico μ_e y el grado de ionización del plasma Z_{bar} .

4.2 Resolución Temporal de las Ecuaciones del Átomo Medio

Este método supone que en cada intervalo de tiempo no tiene por qué llegar a alcanzarse el equilibrio de ionización, tal que los cambios en los parámetros termodinámicos del plasma, temperatura, densidad, etc., tienen lugar más rápidamente que los tiempos característicos de los distintos procesos atómicos [50].

La discretización temporal se realiza mediante la aplicación del método Crank Nicholson en el que la derivada temporal de una variable a se puede expresar como:

$$\frac{da}{dt} = -\omega a \Rightarrow \frac{a^{t+\Delta t} - a^t}{\Delta t} = -\omega(\theta a^{t+\Delta t} + (1-\theta)a^t) \quad (4.63)$$

Donde a^t y $a^{t+\Delta t}$ representan los valores de la variable en dos instantes caracterizados por los tiempos t y $t + \Delta t$, respectivamente, siendo Δt el paso de tiempo del cálculo cinético.

El parámetro $0 \leq \theta \leq 1$ caracteriza con su valor el tipo de solución, tal que $\theta = 0$ si la solución es totalmente explícita y $\theta = 1$ si la solución es totalmente implícita. Para cualquier otro valor intermedio la solución será explícita-implícita.

Particularizando para las ecuaciones cinéticas de las poblaciones relativistas del átomo medio y considerando la solución totalmente explícita $\theta = 0$ se obtiene:

$$\frac{\overline{P_i^{t+\Delta t}} - \overline{P_i^t}}{\Delta t} = -\omega \overline{P_i^t} = (D_i^t - \overline{P_i^t})S_i^t - \overline{P_i^t}L_i^t = \left(\frac{\overline{D_i^t}}{\overline{P_i^t}} \overline{P_i^t} - \overline{P_i^t} \right) S_i^t - \overline{P_i^t}L_i^t = \quad (4.64)$$

$$= \left(\frac{\overline{D_i^t}}{\overline{P_i^t}} - 1 \right) \overline{P_i^t} S_i^t - \overline{P_i^t} L_i^t = \left[\left(\frac{\overline{D_i^t}}{\overline{P_i^t}} - 1 \right) S_i^t - L_i^t \right] \overline{P_i^t} \Rightarrow$$

$$\omega = \left(1 - \frac{\overline{D_i^t}}{\overline{P_i^t}} \right) S_i^t + L_i^t$$

$$\overline{P_i^{t+\Delta t}} = \overline{P_i^t} - \omega \overline{P_i^t} \Delta t \Rightarrow \overline{P_i^{t+\Delta t}} = \overline{P_i^t} (1 - \omega \Delta t)$$

$$\overline{P_i^{t+\Delta t}} = \overline{P_i^t} \left[1 - \left(\left(1 - \frac{\overline{D_i^t}}{\overline{P_i^t}} \right) S_i^t + L_i^t \right) \Delta t \right] \quad (4.65)$$

$$\overline{P_i^{t+\Delta t}} = \overline{P_i^t} - \overline{P_i^t} \left(\left(1 - \frac{\overline{D_i^t}}{\overline{P_i^t}} \right) S_i^t + L_i^t \right) \Delta t \quad (4.66)$$

Particularizando para las ecuaciones cinéticas de las poblaciones relativistas del átomo medio y considerando la solución totalmente implícita $\theta = 1$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{P_i^{t+\Delta t}} - \overline{P_i^t}}{\Delta t} &= -\omega \overline{P_i^{t+\Delta t}} = (D_i^{t+\Delta t} - \overline{P_i^{t+\Delta t}}) S_i^{t+\Delta t} - \overline{P_i^{t+\Delta t}} L_i^{t+\Delta t} \\ \overline{P_i^{t+\Delta t}} &= \overline{P_i^t} + \Delta t * \left[(D_i^{t+\Delta t} S_i^{t+\Delta t} - \overline{P_i^{t+\Delta t}} S_i^{t+\Delta t}) - \overline{P_i^{t+\Delta t}} L_i^{t+\Delta t} \right] \\ \overline{P_i^{t+\Delta t}} + \Delta t * \overline{P_i^{t+\Delta t}} S_i^{t+\Delta t} + \Delta t * \overline{P_i^{t+\Delta t}} L_i^{t+\Delta t} &= \overline{P_i^t} + \Delta t D_i^{t+\Delta t} S_i^{t+\Delta t} \\ \overline{P_i^{t+\Delta t}} (1 + \Delta t * S_i^{t+\Delta t} + \Delta t * L_i^{t+\Delta t}) &= \overline{P_i^t} + \Delta t D_i^{t+\Delta t} S_i^{t+\Delta t} \\ \overline{P_i^{t+\Delta t}} \Big|_{p+1} &= \frac{\overline{P_i^t} + \Delta t * D_i^{t+\Delta t} S_i^{t+\Delta t}}{(1 + \Delta t * S_i^{t+\Delta t} + \Delta t * L_i^{t+\Delta t})} \Big|_p \end{aligned} \quad (4.67)$$

En la situación previa a $t = 0$ s (intervalo temporal $m = 1$), es decir, en la situación previa a la inicial se supone que es un plasma en unas condiciones de densidad y temperatura tal que a partir de $t = 0$ s se producen variaciones de densidad y temperatura más rápidas que los tiempos característicos de los procesos atómicos. En el primer intervalo temporal se resuelve el balance estacionario para partir de valores correctos de las propiedades del plasma:

$$\overline{P_i^{p+1}} = \frac{D_i}{1 + \frac{L_i}{S_i}} \Big|_{\overline{P_i} = \overline{P_i^p}} \Rightarrow \text{FORTRAN: } \text{Pob}(k) = D(k) / (1 + LAA(k)/SAA(k)) \quad (4.68)$$

Considerando una duración $\tau = N\Delta t : 0 \rightarrow N\Delta t$, a cada intervalo se le asocian unas condiciones de temperatura, densidad, etc.:

$$\begin{aligned} \text{Intervalo } \Delta t : 0 \rightarrow \Delta t = \Delta t - 0 &\Rightarrow T^{\Delta t}, \rho^{\Delta t} \\ \text{Intervalo } 2\Delta t : \Delta t \rightarrow 2\Delta t = 2\Delta t - \Delta t &\Rightarrow T^{2\Delta t}, \rho^{2\Delta t} \dots \\ \text{Intervalo } N\Delta t : (N-1)\Delta t \rightarrow N\Delta t = N\Delta t - (N-1)\Delta t &\Rightarrow T^{N\Delta t}, \rho^{N\Delta t} \end{aligned}$$

Tal que se recalculan los parámetros del plasma cuando se avanza un paso de tiempo con las nuevas condiciones de densidad, temperatura, etc. El paso de tiempo Δt para el cálculo cinético de las poblaciones condiciona totalmente la evolución de los parámetros del plasma.

En el código FORTRAN se considera la solución totalmente implícita $\theta=1$ para la resolución temporal de las ecuaciones. En cualquier otro intervalo temporal que no sea el primer punto de la malla la solución para las poblaciones es la siguiente:

$$\overline{P_i^{t+\Delta t}} \Big|_{p+1} = \frac{\overline{P_i^t} + \Delta t * D_i^{t+\Delta t} S_i^{t+\Delta t}}{\left(1 + \Delta t * S_i^{t+\Delta t} + \Delta t * L_i^{t+\Delta t}\right)} \Big|_p \Rightarrow \quad (4.69)$$

FORTRAN:

$$\text{Pob}(k) = (\text{Pob_Matrix}(k, m-1) + \text{Time_Step} * Dk(k) * \text{SAA}(k)) / (1 + \text{Time_Step} * \text{SAA}(k) + \text{Time_Step} * \text{LAA}(k))$$

Aunque es menos complejo que otros códigos temporales como el descrito en el apartado “III. ATOMIC PHYSICS AND NUMERICAL METHOD” de la Referencia [18], al estar basado en el método numérico implícito de Crank Nicholson, el modelo temporal ATMED CR resulta ser muy ágil en la resolución rápida del balance colisional radiativo en cada intervalo temporal, caracterizado por unas condiciones termodinámicas concretas, e hilando convenientemente las poblaciones de cada orbital relativista en cada intervalo de tiempo respecto al anterior.

Para resolver el problema se utiliza el siguiente bucle iterativo dentro del código ATMED CR para la resolución temporal del balance colisional radiativo. Se observan claramente las diferencias en el proceso de cálculo respecto al esquema de funcionamiento del código AMTED CR en estado estacionario descrito en el apartado 4.1.

5. DETERMINACION DE PROPIEDADES RADIATIVAS Y TERMODINAMICAS

5.1 Modelo de Opacidad

La interacción de la radiación con la materia está determinada por el comportamiento de los electrones en el campo electromagnético de radiación. Dependiendo de los estados inicial y final del electrón, el código divide los procesos de absorción de fotones en tres grupos: transiciones ligado-ligado, ligado-libre y libre-libre. El código ATMED CR realiza un cálculo de opacidades basado en el modelo de átomo medio, donde los datos atómicos, energías de ligadura, fuerzas de oscilador, probabilidades de transición etc., se obtienen a partir del modelo hidrogenoide apantallado relativista. En las fórmulas para los procesos atómicos, el que las transiciones estén prohibidas o permitidas se implementa a través de las fuerzas de oscilador. Se ha testado el uso de varias secciones eficaces, cuánticas o reducidas, tomando como referencia la opacidad calculada por la aplicación ATMED LTE donde el grado medio de ionización y las poblaciones son prácticamente iguales que al resolver el balance CR para un plasma en régimen LTE. A continuación se indican las secciones utilizadas de forma esquemática, detallando su significado en las referencias [9-14]. Se pueden usar dos secciones eficaces de absorción del campo de radiación en líneas espectrales para transiciones ligado-ligado entre los orbitales relativistas:

- Sección Eficaz de Absorción Ligado-Ligado (Rozsnyai-Nikiforov [16-25]) ~ UTA Mixto:

$$\sigma_{bb}(h\nu) = 2\pi^2 \alpha a_0 e^2 f_{kk'} S_{kk'}(h\nu) \quad (5.1)$$

- Sección Eficaz de Absorción Ligado-Ligado (M.A. Mendoza [9]) ~ UTA/STA:

$$\sigma_{kk'}^{bb}(h\nu) = \frac{\pi h e^2}{m_e c} \sum_{kk'} P_k f_{kk'} S_{kk'}(h\nu) \quad (5.2)$$

donde:

$f_{kk'}$: Fuerza de oscilador de absorción de un fotón para la transición del orbital k a otro k' desarrollada en polinomios de Laguerre y basada en funciones de onda construidas con cargas apantalladas relativistas [11].

$S_{kk'}(h\nu)$: Perfil Voigt que incluye los ensanchamientos Doppler, Natural, Stark y Dielectrónico [9].

La primera, Ecuación (5.1), proporciona una estructura discreta de líneas que retiene en el espectro las líneas de alta intensidad entre los orbitales relativistas del átomo medio que representa el plasma, lo que es equivalente a aplicar el formalismo MUTA (Mixed Unresolved Transition Array) en el espectro calculado por un código detallado.

La segunda, [Ecuación \(5.2\)](#), es un promedio de la primera que proporciona características generales del espectro de absorción y es equivalente a aplicar el formalismo UTA (Unresolved Transition Array). Se considera también el ensanchamiento dielectrónico e implica el agrupamiento estadístico de líneas que da lugar a mayores valores de la opacidad media de Rosseland (K_R), que es muy sensitiva a las regiones de baja opacidad del espectro resuelto frecuencialmente. Dependiendo del plasma calculado, se obtiene mayor o menor grado de acuerdo entre secciones en el orden de magnitud de las opacidades medias de Rosseland (K_R) y Planck (K_P).

Las secciones eficaces de absorción del campo de radiación para transiciones ligado-libre y libre-libre entre los orbitales relativistas son:

- Sección Eficaz de Absorción Ligado-Libre (M.A. Mendoza [\[9\]](#)):

$$\sigma_{bf}(h\nu) = \frac{3\pi}{4} c^3 \sigma_0 \sum_k P_k \frac{h\nu}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon}{\theta} - \eta\right)} \sum_{l'=l\pm1} f_{nl,el'} \quad (5.3)$$

- Siendo la distribución de electrones libres en el continuo según su energía:

$$n_\epsilon = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right]} \quad \epsilon > 0 \quad (5.4)$$

- Sección Eficaz de Absorción Libre-Libre (M.A. Mendoza [\[9\]](#)):

$$\sigma_{ff}(h\nu) = \frac{32\pi^3}{3\sqrt{3}} \frac{e^6 (\hbar c)^2}{m_e c^2 \sqrt{2\pi m_e c^2 k_B T}} \frac{Z_{bar}^2 n_e}{(h\nu)^3} g_{ff}(h\nu) \quad (5.5)$$

$$g_{ff}(h\nu) = 1 + 0.1728 \left(\frac{h\nu}{I_H Z_{bar}^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(1 + \frac{2k_B T}{h\nu} \right) \quad (5.6)$$

Aunque las anteriores secciones eficaces han sido las implementadas finalmente en el programa de cálculo, también se han testado las aproximaciones de Kramers para las transiciones ligado-libre y libre-libre, que dan lugar a espectros no muy diferenciados:

- Sección Eficaz de Absorción Ligado-Libre (Nikiforov [\[25\]](#)):

$$\sigma_j^{bf}(h\nu) = \frac{64\pi\alpha}{3\sqrt{6}} a_0 e^2 \frac{Q_j |\epsilon_j|^{3/2}}{D_j} \frac{1}{(h\nu)^3} \quad (5.7)$$

- Sección Eficaz de Absorción Libre-Libre (Nikiforov [25]):

$$\sigma_j^{ff}(h\nu) = \frac{16\pi\alpha}{3\sqrt{3}} a_0 e^2 Z_{bar}^2 \theta \exp(\zeta/\theta) \frac{1}{(h\nu)^3} \quad (5.8)$$

El coeficiente de absorción MUTA del plasma con dependencia explícita de los números de ocupación se calcula de esta forma considerando las Ecuaciones (5.1/5.7/5.8) o Ecuaciones (5.1/5.3/5.5):

$$k(h\nu) = \frac{N_A}{A} \left[\sum_{j<i} N_j \left(1 - \frac{N_i}{g_i} \right) \sigma_{ji}^{bb}(h\nu) + \sum_j N_j (1 - n_e) \sigma_j^{bf}(h\nu) + \sigma_j^{ff}(h\nu) \right] \quad (5.9)$$

El coeficiente de absorción UTA del plasma se calcula de esta forma considerando las Ecuaciones (5.2/5.3/5.5) más la sección eficaz de dispersión:

$$k(h\nu) = N_i [(\sigma_{bb}(h\nu) + \sigma_{bf}(h\nu) + \sigma_{ff}(h\nu))(1 - e^{-h\nu/k_B T}) + \sigma_{scatt}(h\nu)] \quad (5.10)$$

Los cuatro tipos de ensanchamiento de línea del modelo de opacidades de ATMED LTE y ATMED CR y que se incluyen para ambas secciones eficaces de absorción ligado-ligado se detallan en la referencia [14]. También se encuentra información detallada sobre todas las secciones eficaces de absorción y las opacidades medias de Rosseland (Figura 5.1) y Planck.

Figura 5.1. Espectro de opacidad del hierro a $T=2.11E+6$ K y $N_e=3.1E+22$ cm⁻³ experimental (Data) y con el modelo OP. Las líneas punteadas son las opacidades medias de Rosseland como promedio armónico sobre el rango energético [51].

5.1.1 Opacidad de una Mezcla

Para la resolución del átomo medio de una mezcla es necesario el cálculo de las densidades parciales ρ_k de los componentes a partir de la densidad total ρ del plasma y de sus fracciones numéricas de masa o volumen.

La opacidad de la mezcla se calcula resolviendo el modelo colisional radiativo de átomo medio para cada uno de los constituyentes k y así hallar las secciones eficaces de cada uno de los constituyentes por separado, que luego serán ponderadas mediante su fracción numérica para obtener las secciones eficaces promedio por ion:

$$\sigma_{bb}^{mezcla}(h\nu) = \sum_k f_k \sigma_{bb}^k(h\nu) \quad (5.11)$$

$$\sigma_{bf}^{mezcla}(h\nu) = \sum_k f_k \sigma_{bf}^k(h\nu) \quad (5.12)$$

$$\sigma_{ff}^{mezcla}(h\nu) = \sum_k f_k \sigma_{ff}^k(h\nu) \quad (5.13)$$

$$\sigma_{scatt}^{mezcla}(h\nu) = \sum_k f_k \sigma_{scatt}^k(h\nu) \quad (5.14)$$

En plasmas típicos de fusión por confinamiento inercial que poseen abiertas las capas $L = (2s2p)$ y $M = (3s3p3d)$, las contribuciones a la opacidad de las absorciones ligado-ligado y ligado-libre son dominantes.

Por ello la contribución de la absorción libre-libre se puede calcular también mediante una aproximación sencilla, consistente en utilizar el valor promedio del grado de ionización en la expresión de la sección eficaz de absorción libre-libre:

$$\langle Z_{bar} \rangle = \sum_k f_k Z_{bar}^k \Rightarrow \sigma_{ff}^{mezcla}(h\nu) = \frac{32\pi^3}{3\sqrt{3}} \frac{e^6 (\hbar c)^2}{m_e c^2 \sqrt{2\pi n_e c^2 k_B T}} \frac{\langle Z_{bar} \rangle^3 N_i}{(h\nu)^3} g_{ff}(h\nu) \quad (5.15)$$

El coeficiente de absorción (cm^{-1}) de la mezcla se escribe entonces como:

$$K^{mezcla}(h\nu) = \langle N_i \rangle [(\sigma_{bb}^{mezcla}(h\nu) + \sigma_{bf}^{mezcla}(h\nu) + \sigma_{ff}^{mezcla}(h\nu))(1 - e^{-h\nu/k_B T}) + \sigma_{scatt}^{mezcla}(h\nu)] \quad (5.16)$$

Donde la densidad numérica promedio de iones presentes en la mezcla es:

$$\langle N_i \rangle = \sum_k f_k N_{ik} \quad (5.17)$$

Y la opacidad de la mezcla, expresada en cm^2/g , se obtiene dividiendo el coeficiente de absorción entre la densidad del plasma ρ en g/cm^3 .

5.2 Modelo de Emisividad

5.2.1 Emisión

El coeficiente de absorción del plasma con dependencia explícita de los números de ocupación se calculaba de esta forma considerando las Ecuaciones (5.1/5.7/5.8) o Ecuaciones (5.1/5.3/5.5):

$$k(h\nu) = \frac{N_A}{A} \left[\sum_{j < i} N_j \left(1 - \frac{N_i}{g_i} \right) \sigma_{ji}^{bb}(h\nu) + \sum_j N_j (1 - n_e) \sigma_j^{bf}(h\nu) + \sigma^{ff}(h\nu) \right] \quad (5.18)$$

Las secciones eficaces globales de emisión obtenidas en función de las de absorción de las Ecuaciones (5.1/5.7/5.8) o Ecuaciones (5.1/5.3/5.5) son las siguientes:

$$\sigma_{bb}^{em}(h\nu) = \sum_{j < i} N_i \left(1 - \frac{N_j}{g_j} \right) \frac{g_j}{g_i} \sigma_{ji}^{bb}(h\nu) \psi^{em}(i, j) \quad (5.19)$$

$$\sigma_{bf}^{em}(h\nu) = \sum_j n_e \left(1 - \frac{N_j}{g_j} \right) g_j \sigma_j^{bf}(h\nu) \quad (5.20)$$

$$\sigma_{ff}^{em}(h\nu) = \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \sigma^{ff}(h\nu) \quad (5.21)$$

El coeficiente de emisión del plasma se puede escribir considerando dichas secciones eficaces de emisión como:

$$j(h\nu) = \rho \frac{N_A}{A} \left[\sum_{j < i} N_i \left(1 - \frac{N_j}{g_j} \right) \frac{g_j}{g_i} \sigma_{ji}^{bb}(h\nu) \psi_{hv}(j, i) + \sum_j n_e \left(1 - \frac{N_j}{g_j} \right) g_j \sigma_j^{bf}(h\nu) + \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) \sigma^{ff}(h\nu) \right] \left[\frac{(h\nu)^3}{4\pi^3 c^2} + I_{hv} \right] \quad (5.22)$$

El campo de radiación puede venir especificado por la función:

$$I_{hv} = B_{hv}(T_{rad}) = \frac{(h\nu)^3}{4\pi^3 c^2} \left(\frac{1}{\exp\left[\frac{h\nu}{T_{rad}}\right]} - 1 \right) \quad (5.23)$$

Si la temperatura de radiación es igual a la electrónica $T_{rad} = T$ entonces el plasma está en LTE y se cumple la ley de Kirchoff que relaciona emisión y absorción de radiación mediante la ecuación:

$$j(h\nu) = \rho k(h\nu) B_{hv}(T) \quad (5.24)$$

En la Ec. (5.24) el coeficiente de absorción del plasma se calcula considerando las Ec. (5.2/5.3/5.5):

$$k(h\nu) = N_i [(\sigma_{bb}(h\nu) + \sigma_{bf}(h\nu) + \sigma_{ff}(h\nu))(1 - e^{-h\nu/k_B T})] \quad (5.25)$$

La Ecuación (5.24) puede ser utilizada como un promedio de la emisión con la Ecuación (5.22) para plasmas calculados con ATMED CR en régimen LTE o en regiones frontera LTE-NLTE. El espectro de emisión tiene dos partes: el espectro continuo y el de líneas discretas. El espectro continuo es importante en el diagnóstico de plasmas de bajo número atómico o totalmente ionizados. El espectro de líneas discretas es más importante y concluyente en el análisis de plasmas de medio o alto número atómico. La intensidad de radiación emitida y su distribución espectral vienen determinadas por la densidad y temperatura del plasma y de los iones emisores. La región espectral en la cual la mayor parte de la emisión tiene lugar, está determinada fundamentalmente por la temperatura del plasma, y se centra aproximadamente alrededor de la misma región espectral donde la emisión procedente de un cuerpo negro a la misma temperatura alcanza su máximo. Aunque la estructura espectral de emisión de un plasma real es muy distinta a la de un campo de radiación con forma Planckiana, la máxima emisión desde tal plasma tiene lugar a energías en el entorno de $2.8 \div 3 \cdot T_{rad}$, de forma similar a la radiación emitida por un cuerpo negro.

5.2.2 Pérdidas Radiativas

Se calculan en ATMED CR integrando la emisión total del plasma según la Ecuación (5.22):

$$RPL = \int j(h\nu) d\nu \quad (5.26)$$

5.2.3 Función Fuente del Plasma NLTE

Se calcula en ATMED CR relacionando emisión y absorción: $S_{h\nu} = j(h\nu)/\rho k(h\nu)$ (5.27)

Si $T_{rad} = T$ entonces el plasma está en LTE y $j(h\nu) = \rho k(h\nu) B_{h\nu}(T)$ y la función fuente es la Planckiana a la temperatura del plasma.

$$S_{h\nu} = B_{h\nu}(T) = \frac{(h\nu)^3}{4\pi^2} \left(\frac{1}{\exp\left[\frac{h\nu}{T}\right]} - 1 \right) \quad (5.28)$$

5.2.4 Transmisividad espectral

Es la fracción de radiación transmitida siendo L la longitud característica del plasma en cm atravesado por los fotones:

$$F_{h\nu} = \exp[-\rho k(h\nu)L] \quad (5.29)$$

5.2.5 Intensidad emitida

$$I_{h\nu} = S_{h\nu} (1 - \exp(-\rho k(h\nu)L)) \quad (5.30)$$

5.3 Plasmas Opticamente Gruesos

5.3.1 Plasmas No Fotoionizados

Para calcular plasmas gruesos no fotoionizados, se aplica un formalismo que consiste en computar el factor de escape que multiplica la tasa de emisión espontánea para todas las transiciones ligado-ligado, introduciendo así los efectos de atrapamiento de la radiación en el plasma [44]. De esta forma se evita tener que resolver la ecuación de transferencia de radiación y sólo se resuelve el balance colisional radiativo que incluye la emisión espontánea por dicho factor de escape. Las referencias utilizadas para implementar este formalismo en el código Fortran han sido las detalladas en los siguientes apartados.

5.3.1.1 Sin Emisión Estimulada

Este es un modelo sin resolución de la ecuación de transferencia mediante uso de factores de escape particularizado para el átomo medio que realiza las siguientes hipótesis:

- Es un modelo de plasma colisional radiativo en el que la radiación no escapa libremente.
- No se consideran los procesos de emisión estimulada, fotoionización y fotorecombinación, pero se incluye la fotoexcitación. Haciendo uso de las relaciones entre los coeficientes de Einstein, en las ecuaciones de tasas queda:

$$\frac{d\overline{P}_i}{dt} = (\overline{D}_i - \overline{P}_i) \sum_j \overline{P}_j \Lambda_{ji}(\tau_0) A_{ji} - \overline{P}_i \sum_j (\overline{D}_j - \overline{P}_j) \Lambda_{ij}(\tau_0) A_{ij} + \text{otros...} \quad (5.31)$$

El factor de escape $\Lambda_{ij}(\tau_0)$ es función del espesor óptico del medio a la frecuencia central de la línea de transición ligado-ligado y se define en términos de la intensidad de radiación J_ν , que relaciona emisión η_ν y fotoabsorción $\chi_\nu = K(h\nu)$ del plasma:

$$\Lambda_{ij}(\tau_0) = 1 - \frac{\overline{P}_j}{\overline{P}_i} \frac{\overline{D}_i}{\overline{D}_j} \frac{c^2}{2h\nu^3} \int J_\nu \Phi_\nu d\nu \quad (5.32)$$

- Se consideran densidades de partículas uniformes en el plasma, así la función fuente es independiente de la posición en el volumen del plasma, es decir, no existe radiación incidente desde el exterior. Siendo L una dimensión característica del plasma que depende de la frecuencia, volumen y forma del plasma, el valor medio de la intensidad de radiación es:

$$J_v = \frac{\eta_v}{\chi_v} (1 - \exp[-\tau(v)]), \text{ tal que } \tau(v) = \chi_v L \quad (5.33)$$

Para evaluar el coeficiente de opacidad se utiliza la formulación descrita en el módulo de opacidad, donde se escribe el coeficiente de absorción del plasma con una dependencia explícita de los números de ocupación de los niveles del átomo medio:

$$\chi_v = k'_{\omega_0} = \frac{N_A}{A} \left[\sum_{j < i} N_j \left(1 - \frac{N_i}{g_i} \right) \bar{\sigma}_{ji}^{bb}(\omega_0) \psi_{\omega_0}(j, i) + \sum_j N_j (1 - n_e) \bar{\sigma}_j^{bf}(\omega_0) + \bar{\sigma}^{ff}(\omega_0) \right] \quad (5.34)$$

En el código sólo se considera la opacidad ligado-ligado:

$$k'_{\omega_0} = \frac{N_A}{A} \left[\sum_{j < i} N_j \left(1 - \frac{N_i}{g_i} \right) \bar{\sigma}_{ji}^{bb}(\omega_0) \psi_{\omega_0}(j, i) \right] \quad (5.35)$$

Considerando una función fuente independiente de la frecuencia y que el perfil de la línea es una gaussiana que incluye el ensanchamiento Doppler [49]:

$$\psi_v(i, j) = \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(\epsilon_{ij} - h\nu)^2}{w_{ij}^2} \right]; \quad w_{ij} = 0.001036 \epsilon_{ij} \sqrt{k_B T / A} \quad (5.36)$$

$\epsilon_{ij}, h\nu, k_B T$: Magnitudes en KeV.

Con dicho perfil el factor de escape que se introduce en la ecuación de tasas quedaría:

$$\chi_v, k'_{\omega} \Rightarrow \tau_0 = \chi_{v0} L, \quad \tau_0 = k'_{\omega 0} L \Rightarrow \quad (5.37)$$

$$\Lambda_{ij}(\tau_0) = \frac{1}{\tau_0 (\pi \ln \tau_0)^{1/2}} \quad (5.38)$$

5.3.1.2 Con Emisión Estimulada

Este es un modelo sin resolución de la ecuación de transferencia mediante uso de factores de escape particularizado para el átomo medio que realiza las siguientes hipótesis:

- Es un modelo de plasma colisional radiativo en el que la radiación no escapa libremente.
- No se desprecia la emisión estimulada, se desprecian fotoionización y fotorecombinación, pero se incluye la fotoexcitación.

La dependencia con la densidad de los coeficientes de tasas en el balance colisional radiativo se debe a que los efectos de considerar un espesor óptico del plasma en las poblaciones son aproximados por factores de escape. Para calcular dichos efectos se reescriben las ecuaciones de tasas con todas las tasas radiativas incluidas. Haciendo uso de las relaciones entre los coeficientes de Einstein (emisión espontánea, fotoexcitación y fotodesexcitación), se realiza en las ecuaciones de tasas la aproximación para los efectos del espesor óptico del medio [24]. Por ello, para una transición desde el nivel i al nivel j , la tasa radiativa total sería:

$$R_{ij} = \overline{P_i} (A_{ij} + B_{ij} \overline{J_{ij}}) - \overline{P_j} B_{ji} \overline{J_{ij}} \equiv \overline{P_i} A_{ij} \Lambda \quad (5.39)$$

Haciendo uso de las relaciones entre los coeficientes de Einstein para emisión espontánea, fotoexcitación y fotodesexcitación:

$$\frac{\pi e^2}{mc} f_{ij} = B_{ij} \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} \quad (5.40)$$

Y considerando un campo de radiación en el entorno de la frecuencia central de la línea:

$$\overline{J_{ij}} = \int J(\nu) \phi(\nu) d\nu \quad (5.41)$$

En esta ecuación se define el factor de escape, que puede tomar valores que van desde cero, cuando el espesor óptico del medio es alto y se satura la transición en la línea localmente, hasta uno cuando no hay campo de radiación $\overline{J_{ij}} = 0$.

El factor de escape depende del perfil de línea $\phi(\nu)$ y de la longitud óptica del plasma determinada por el usuario como una dimensión característica L . Por ello, para una transición desde un estado energético inferior i a otro superior j , el espesor óptico vendrá dado por:

$$\tau_\nu = \overline{P_i} \frac{\pi e^2}{mc} f_{ij} L \phi(\nu) \quad (5.42)$$

El perfil de línea con ensanchamiento Doppler viene dado por:

$$\phi(\nu) = \frac{\exp\left[-(\Delta\nu/\nu_D)^2\right]}{\sqrt{\pi}\nu_D} \quad (1/Hz); \quad \nu_D = 4.63 \times 10^{-5} \nu_{ij} \sqrt{\frac{T_i}{m_a}} \quad Hz \quad (5.43)$$

Donde T_i son la temperatura iónica y m_a la masa atómica y $\Delta\nu$ es la separación desde la frecuencia central de la línea. La formulación final para el factor de escape es:

$$\Lambda = \frac{1}{\tau_0 \sqrt{\pi \ln(\tau_0)}} \quad \tau_0 \geq 2.5 \quad (5.44)$$

$$\Lambda = \exp(-\tau_0/1.73) \quad \tau_0 \leq 2.5 \quad (5.45)$$

τ_0 representa el espesor óptico a la frecuencia central de la línea en el caso de perfiles de línea. Se computa un factor de escape para todas las transiciones ligado ligado.

5.3.1.3 Otros Perfiles de Línea

Como también se indica en la referencia [44], un método de aproximación interesante para tratar la transferencia de radiación de líneas espectrales de alta intensidad fue introducido por Holstein (1947) para modelos detallados y extrapolable a modelos de átomo medio. Asumiendo una línea espectral de energía media $\hbar\omega_{u,l}$ emitida por transiciones en un ion con un determinado estado de carga desde un nivel superior, denotado por u hasta un nivel energético inferior l , la emisión de fotones por unidad de volumen dentro de la región espectral de esta línea se escribe en función de la emisión espontánea $A_{u \rightarrow l}$:

$$P(\hbar\omega_{u,l}, \vec{r}) = N_u \hbar\omega_{u,l} \Lambda_{u,l}(\vec{r}) A_{u \rightarrow l} \quad (5.46)$$

El factor de escape $\Lambda_{u,l}(\vec{r})$ se aproxima según la siguiente formulación:

- Considerando un perfil de línea Gaussiano de anchura $\Delta\hbar\omega_{u,l}$ y fuerza de oscilador de absorción $f_{u,l}$, el factor de escape se puede escribir para espesores ópticos del medio $\tau \geq 3$:

$$\Lambda_{u,l}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\tau(\pi \log \tau)^{1/2}} \quad (5.47)$$

Independientemente de la forma geométrica del plasma. Si el perfil de línea es Lorentziano y $\tau \geq 5$, el factor de escape sería:

$$\Lambda_{u,l}(\vec{r}) \approx \frac{1}{(\pi\tau)^{1/2}} \quad (5.48)$$

Para un perfil Voigt la fórmula del factor de escape es una expresión que está entre las ecuaciones para los perfiles Gaussiano y Lorentziano.

En plasmas ópticamente gruesos, la aproximación del factor de escape es una herramienta muy conveniente, ya que multiplicando simplemente el coeficiente de emisión espontánea por dicho factor se obtiene una solución que es prácticamente independiente de la forma exacta del plasma. Para geometrías complicadas, sin embargo, ésta aproximación no es suficientemente precisa. Para considerar procesos de absorción de fotones en el campo de radiación a temperatura electrónica $T=T_e$ y seleccionar las energías o frecuencias a las que se producen dichos fotoprocesos, se incluye en ATMED CR el siguiente algoritmo que equivale a buscar la energía de una transición electrónica por fotoexcitación entre los orbitales $a \rightarrow f$ en la malla de energías fotónicas:

IF (f.gt.a) THEN

 i = 1

 Photon1: DO

 IF ((DABS(Ek(f)-Ek(a))) >= (hnu(i)*T).and.(DABS(Ek(f)-Ek(a))) < (hnu(i+1)*T)) EXIT Photon1

 IF (i > nhnu) EXIT Photon1

 i = i+1

 END DO Photon1

Quizás fuera más exacto contemplar sólo símbolo igual = en vez de mayor o igual $\geq$, pero como la malla es tan fina (14,900 puntos o nodos) en energías del fotón, tampoco va a existir gran diferencia en energías entre los nodos i e i+1, y así además se permite algo de fotoabsorción en las alas a frecuencias en el entorno de la frecuencia central de una línea correspondiente a una transición electrónica (Figuras 5.2-5.3). Así se introduce un proceso de fotoexcitación del electrón para esa energía del fotón en el punto i de la malla, para ser más exactos a una energía comprendida entre los nodos i e i+1. El mismo algoritmo de programación se utiliza para el formalismo del confinamiento de fotones del siguiente apartado pero con campo de radiación a temperatura T_R .

Figura 5.2. Perfil de línea Lyman α normalizado típico.

Figura 5.3. Subdivisión de malla de energías fotónicas.

A las energías seleccionadas se actualizan en cada iteración los factores de escape y se utiliza el siguiente bucle iterativo considerando la dimensión característica del plasma L (cm).

5.3.2 Plasmas Fotoionizados

Se considera una lámina semiinfinita de espesor L (Figura 5.4) y se supone que el ión medio representativo del plasma está situado a la mitad de la lámina ($d = L/2$) [15-16].

Figura 5.4. Ilustración esquemática del escape y penetración de fotones en una lámina de espesor L .

La probabilidad de que un fotón escape desde la mitad de la lámina en cualquier dirección es:

$$P(\hbar\omega) = \exp(-\tau(\hbar\omega)) - \tau(\hbar\omega)E_1[\tau(\hbar\omega)] \quad (5.49)$$

Siendo el espesor óptico de la lámina:

$$\tau(\hbar\omega) = \sigma(\hbar\omega)\rho L / 2 \quad (5.50)$$

$$\sigma \text{ (cm}^2 / \text{g)}, \quad \rho \text{ (g / cm}^3\text{)}, \quad L \text{ (cm)}$$

Se utiliza la probabilidad de confinamiento de fotones definida como:

$$P_C(\hbar\omega) = 1 - P(\hbar\omega) \quad (5.51)$$

Para simplificar los cálculos al igual que hacen otros modelos de simulación [52], se supone que las emisiones de radiación propias del plasma son transparentes, es decir, la radiación emitida por el plasma escapa considerándose despreciable la reabsorción de la misma en las líneas para transiciones ligado-ligado o ligado-libre. Por tanto, sólo la radiación procedente de la fuente Planckiana considerada como un campo externo de radiación o coexistente en el plasma, puede ser reabsorbida y generar procesos de fotoexcitación, fotoionización y sus inversos por balance detallado. Esta suposición es válida cuando la intensidad de la fuente Planckiana es varios órdenes de magnitud mayor que la fuente de radiación emitida por el propio plasma.

$P_C(\hbar\omega)$ depende de los coeficientes de absorción del plasma que a su vez dependen de las poblaciones del átomo medio en cuyo cálculo intervienen tasas radiativas que son función de la distribución de fotones F_p . Para resolver el problema se utiliza el siguiente bucle iterativo.

De esta forma, la densidad de fotones en el emplazamiento del ión medio, es decir, a la mitad de la lámina viene dada por una función Planckiana a temperatura $T_{\text{rad}}=T_R$:

$$N_p(\hbar\omega) = \frac{(\hbar\omega)^2}{\pi^2(\hbar c)^3} F_p(\hbar\omega) = \frac{\omega^2}{\hbar\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/KT_{\text{rad}}) - 1} \quad (5.52)$$

Se simula el espesor óptico del medio mediante una distribución de fotones que corresponde a la función Planckiana por la probabilidad de confinamiento de fotones:

$$N(\hbar\omega) = N_p(\hbar\omega) P_c(\hbar\omega) = \frac{\omega^2}{\hbar\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/KT_{\text{rad}}) - 1} P_c(\hbar\omega) \quad (5.53)$$

Las variaciones en el bucle de cálculo respecto a los plasmas delgados se detallan en cada apartado.

5.3.2.1 Datos de Entrada

Se introduce además el espesor del plasma L.

5.3.2.2 Condiciones Iniciales

Se introduce además como valor inicial de la probabilidad de confinamiento de fotones:

$$P_c^0(\hbar\omega) = 1 \quad (5.54)$$

Este valor forma parte de las tasas de fotoexcitación, fotodesexcitación, fotoionización y fotorecombinación considerando un campo de fotones a T_{rad} con energía $\hbar\omega = h\nu$.

5.3.2.3 Propiedades Atómicas Iniciales

Los cálculos son análogos a los de plasmas delgados.

5.3.2.4 Grado de Ionización y Potencial Químico Reducido

Los cálculos son análogos a los de plasmas delgados.

5.3.2.5 Efectos de Plasma

Los cálculos son análogos a los de plasmas delgados.

5.3.2.6 Modelo Colisional Radiativo

En el balance CR además se utilizan las fórmulas de las tasas de fotoexcitación, fotodesexcitación, fotoionización y fotorecombinación como consecuencia del transporte radiativo dentro del plasma.

Las probabilidades de los procesos colisionales se determinan por la densidad de electrones libres y su distribución de energías. Las probabilidades de los procesos radiativos dependen esencialmente de la probabilidad de confinamiento de fotones, más exactamente, de cuanta radiación permanece, es reabsorbida en el plasma. En particular, la absorción de fotones en las líneas espectrales es proporcional a la distribución de fotones $F_p \approx I_\omega/\omega^3$, mientras que la emisión lo es a $1 + F_p$.

Cuando una parte considerable de la radiación es reabsorbida, entonces las ecuaciones del modelo colisional radiativo y la ecuación del transporte de radiación deben resolverse simultáneamente. Así se obtienen los números de ocupación de los niveles del átomo medio, los niveles energéticos y las funciones de onda de los electrones consistentes con el campo de radiación. Estos valores se utilizan para calcular los coeficientes de absorción del plasma. Dichos coeficientes sirven para obtener un valor más preciso del campo de radiación y de la probabilidad de confinamiento de fotones equivalente a resolver la ecuación de transporte de radiación. Este ciclo iterativo se resuelve hasta que se alcanza la convergencia entre el campo de radiación y las poblaciones.

Fotoionización

Se utiliza la probabilidad de confinamiento de fotones definida como:

$$P_C(\hbar\omega) = 1 - P(\hbar\omega) \quad (5.55)$$

La tasa de fotoionización desde el nivel i se calcula:

$$I_R^{ic} = \frac{4\pi}{h} \int_{I_i}^{\infty} \frac{dv}{v} \sigma_R^{ic}(v) P_C(v) \frac{2hv^3}{c^2} \frac{1}{\exp(\beta_v hv) - 1} \quad (s^{-1}) \quad (5.56)$$

Fotorecombinación

La tasa de fotorecombinación (recombinación radiativa) al nivel i se calcula asumiendo equilibrio termodinámico local LTE mediante balance detallado con la fotoionización:

$$R_R^{ci} = \frac{4\pi}{h} \exp[-\beta_e (\epsilon_i - \mu_e)] * \int_{I_i}^{\infty} \frac{dv}{v} \sigma_R^{ic}(v) \frac{2hv^3}{c^2} \left(\frac{1}{\exp(\beta_v hv) - 1} + 1 \right) \exp(-\beta_e hv) \quad (s^{-1}) \quad (5.57)$$

$$R_R^{ci} = I_R^{ic} \exp[-\beta_e (\epsilon_i - \mu_e)] \quad (s^{-1}) \quad (5.58)$$

Aunque la relación haya sido deducida partiendo de una hipótesis de equilibrio, ésta sólo depende de magnitudes atómicas y de la temperatura.

Fotoabsorción / Fotoexcitación

La sección eficaz de fotoabsorción asociada a la promoción de un electrón desde un nivel i a un nivel superior j viene dada por:

$$\sigma_{ij}^{abs}(\hbar\omega) = 2\pi^2 \alpha a_0 e^2 f_{ij} b_{ij}(\hbar\omega) \quad (cm^2) \quad (5.59)$$

Donde $b_{ij}(\hbar\omega) = b_{ij}(h\nu)$ es la función de línea espectral.

Cuando la función de línea se aproxima por una Delta de Dirac: $\hbar\omega \approx \hbar\omega_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$

La tasa de fotoabsorción asociada a la promoción de un electrón desde un nivel i a un nivel superior j viene dada por:

$$\tau_{ij}^{RG} = \frac{c}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty (\hbar\omega)^2 \sigma_{ij}^{abs}(\hbar\omega) F_p(\hbar\omega) d(\hbar\omega) = \frac{2\alpha (\hbar\omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} F_p(\hbar\omega_{ij}) \quad (s^{-1}) \quad (5.60)$$

Considerando que la densidad de fotones en el emplazamiento del ión medio, es decir, a la mitad de la lámina viene dada por una función Planckiana, se simula el espesor óptico del medio mediante una distribución de fotones:

$$N(\hbar\omega) = N_p(\hbar\omega) P_C(\hbar\omega) = \frac{\omega^2}{\hbar \pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/KT_{rad}) - 1} P_C(\hbar\omega) \quad (5.61)$$

La tasa de fotoabsorción asociada a la promoción de un electrón desde un nivel i a un nivel superior j viene dada por:

$$\tau_{ij}^{RG} = \frac{c}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty (\hbar\omega)^2 \sigma_{ij}^{abs}(\hbar\omega) F_p(\hbar\omega) d(\hbar\omega) = \frac{2\alpha (\hbar\omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{ij}/KT_{rad}) - 1} P_C(\hbar\omega_{ij}) \Rightarrow$$

$$\tau_{ij}^{RG} = \frac{2\alpha (\hbar\omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{ij}/KT_{rad}) - 1} P_C(\hbar\omega_{ij}) \quad (s^{-1}) \quad (5.62)$$

Fotodesexcitación + Emisión Espontánea

La tasa de de fotoemisión (inducida + espontánea) desde un nivel j a un nivel inferior i viene dada por:

$$\tau_{ji}^{RG} = \frac{c}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty (\hbar \omega)^2 \sigma_{ji}^{em}(\hbar \omega) [1 + F_p(\hbar \omega)] d(\hbar \omega) = \frac{2\alpha (\hbar \omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} \frac{D_i}{D_j} [1 + F_p(\hbar \omega_{ij})] \quad (5.63)$$

Cuando la función de línea se aproxima por una Delta de Dirac: $\hbar \omega \approx \hbar \omega_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$ y considerando la probabilidad de confinamiento de fotones quedaría

$$\tau_{ji}^{RG} = \frac{c}{\pi^2 (\hbar c)^3} \int_0^\infty (\hbar \omega)^2 \sigma_{ji}^{em}(\hbar \omega) [1 + F_p(\hbar \omega)] d(\hbar \omega) = \frac{2\alpha (\hbar \omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} \frac{D_i}{D_j} [1 + F_p^{New}(\hbar \omega_{ij})] \Rightarrow$$

$$\tau_{ji}^{RG} = \frac{2\alpha (\hbar \omega_{ij})^2}{\hbar m_e c^2} f_{ij} \left[1 + \frac{1}{\exp(\hbar \omega_{ij} / KT_{rad}) - 1} P_C(\hbar \omega_{ij}) \right] (s^{-1}) \quad (5.64)$$

5.3.2.7 Convergencia

El proceso se repite hasta alcanzar la convergencia en poblaciones, propiedades atómicas, probabilidad de confinamiento de fotones y por tanto en la ecuación de transporte radiativo en el plasma, cumpliéndose:

$$\max_i \left| \overline{P_i^{p+2}}(Z_{bar}^{(p+1)}, \eta_e^{(p+1)}, \epsilon_i^{(p+1)}, f_{ij}^{(p+1)}, P_C^{(p+1)}) - \overline{P_i^{p+1}}(Z_{bar}^{(p)}, \eta_e^{(p)}, \epsilon_i^{(p)}, f_{ij}^{(p)}, P_C^{(p)}) \right| < 10^{-05} \quad (5.65)$$

5.3.2.8 Valores Finales

Alcanzada la convergencia se dan por válidos los resultados correspondientes a las poblaciones fraccionarias del átomo medio P_k , el valor del potencial químico μ_e y el valor del grado de ionización del plasma Z_{bar} .

5.4 Cálculo de la Ecuación de Estado

El estudio de la materia bajo condiciones de alta densidad, presión y temperatura es un área clave para la fusión por confinamiento inercial, fenómenos astrofísicos, la interacción de láseres de alta potencia con la materia, etc. En todos estos casos, la materia es calentada y comprimida por ondas de choque hasta altas presiones y temperaturas, se ioniza parcial o completamente térmicamente o mediante ionización por presión y está en forma de plasma denso. La termodinámica y la hidrodinámica de los plasmas densos y calientes no puede ser predicha sin el conocimiento de la ecuación de estado (EOS) que describe cómo reacciona un material a la presión aplicada y cuánta energía se ve involucrada. Por tanto, la ecuación de estado viene dada en forma de las variables presión y energía como funciones de la densidad y la temperatura:

$$P = P(\rho, T) \quad E = E(\rho, T) \quad (5.66)$$

Además, dicha ecuación debe ser obtenida en un tiempo de cálculo razonable para que sea de utilidad como dato de entrada en los códigos hidrodinámicos, aunque también se puede tabular. Por esta razón, el uso de modelos rápidos, robustos y razonablemente precisos es necesario para calcular la ecuación de estado de un material. En el cálculo de la EOS de plasmas densos y calientes, ATMED LTE adopta la suposición de que las cantidades iónicas y electrónicas son aditivas de tal forma que la energía libre de Helmholtz por unidad de masa se puede escribir como:

$$F(\rho, T) = F_i(\rho, T_i) + F_e(\rho, T_e) - F_e(\rho, T_c) + F_c(\rho) \quad (5.67)$$

- ρ : Densidad del plasma.
- $T = T_i = T_e$: Temperatura del plasma supuesta igual a las temperaturas electrónica e iónica.
- $F_i(\rho, T_i)$: Energía libre iónica.
- $F_e(\rho, T_e)$: Energía libre electrónica calculada con el modelo del ión esfera y la teoría de Thomas-Fermi.
- $F_c(\rho)$: Energía del material a temperatura cero T_c .

En el cálculo de la EOS de plasmas en ATMED CR se adopta la suposición de que las cantidades iónicas y electrónicas son aditivas de tal forma que la energía libre de Helmholtz por unidad de masa se puede escribir como:

$$F(\rho, T) = F_i(\rho, T_i) + F_e(\rho, T_e) \quad (5.68)$$

La contribución iónica a la energía libre se obtiene a partir de la ecuación de estado iónica de Cowan, que es un modelo simple analítico que combina leyes generales en varios casos límite, como la ley de los gases ideales, ley de escalado de los fluidos, ley de fusión de Lindemann, ley de Dulong-Petit, ley de la presión de Grüneisen, teoría de red de Debye y teorema de Nernst [9].

Este modelo está dividido en dos partes:

- Una parte estructural que da las funciones termodinámicas: presión p_i , energía interna E_i , entropía S_i y la energía libre de Helmholtz F_i .
- Una parte empírica que predice la temperatura de fusión del material $T_m(\rho)$ y la temperatura de Debye $\theta_D(\rho)$.

La energía libre electrónica de Helmholtz por unidad de masa del plasma es:

$$F_e(\rho, T) = F_{shm}(\rho, T_e) + F_{libres}(\rho, T_e) + F_{ion-esfera}(\rho, T_e) \quad (5.69)$$

- $F_{shm}(\rho, T_e) = E_{shm} - T_e S_{shm}$: Energía libre de los e^- ligados en el modelo de átomo medio.
- F_{libres} : Energía de un gas de electrones libres.
- $F_{ion-esfera}$: Introduce los efectos de plasma en los niveles energéticos ligados.

La energía interna de la configuración electrónica $\{P_k\}$ es:

$$E_{shm} = \sum_k P_k \cdot \epsilon_k \quad (5.70)$$

La entropía asociada con la configuración electrónica $\{P_k\}$ del modelo de átomo medio es:

$$S_{shm} = -k_B \sum_k \left[P_k \log\left(\frac{P_k}{D_k}\right) + (D_k - P_k) \log\left(\frac{D_k - P_k}{D_k}\right) \right] \quad (5.71)$$

La energía libre electrónica viene dada por la siguiente ecuación:

$$F_{libres}(\rho, T_e) = -Z_{bar} k_B T \left[\eta_e - \frac{2}{3} \frac{f_{3/2}(\eta_e)}{f_{1/2}(\eta_e)} \right]; \quad Z_{bar} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{A}{\rho N_A} \left(\frac{m_e k_B T_e}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} f_{1/2}(\eta_e) \quad (5.72)$$

La energía del ión esfera es:

$$F_{ion-esfera} = -\frac{9}{10} \frac{Z_{bar}^2 e^2}{R_i} = -\frac{1}{2} Z_{bar} \Delta I \quad (5.73)$$

La corrección por depresión del continuo y el radio del ión esfera son respectivamente:

$$\Delta I = \frac{9}{5} \frac{Z_{bar} e^2}{R_i} \quad R_i = \left(\frac{4\pi}{3} \frac{\rho N_A}{A} \right)^{-1/3} \quad (5.74)$$

La presión total, entropía y energía interna se derivan de la energía libre de Helmholtz según estas ecuaciones:

$$p = \rho^2 \frac{\partial F}{\partial \rho}; \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}; \quad E = F + T \cdot S \quad (5.75)$$

La aplicación ATMED LTE se utiliza para calcular las curvas de Rankine-Hugoniot mediante el cálculo de numerosos puntos de temperatura y densidades propias del régimen LTE. Dichas curvas se obtienen de la ecuación:

$$E - E_0 = \frac{1}{2} (p - p_0) \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) \quad (5.76)$$

Que representa la ley de conservación de la energía para una onda de choque y donde el subíndice 0 caracteriza el estado inicial. Las curvas principales de Hugoniot tienen $p_0 = 0$, $\rho_0 = \rho_s$ y $T = 300$ K, siendo ρ_s la densidad normal del estado sólido. La [Figura 5.5](#) muestra las curvas de Hugoniot computadas con el código ATMED LTE para hierro y cobre.

Figura 5.5. Curva Hugoniot para Fe y Cu obtenida con ATMED LTE y contrastada con datos experimentales.

5.5 Mezclas Calculadas con el Balance CR

Para cualesquiera condiciones (régimen corona, LTE, NLTE) en un plasma formado por k componentes, los radios de los iones-esfera de cada uno R_{ik} deben ser ajustados análogamente a cómo se hace en régimen LTE (apartado 3.4 [9]) con el fin de que los potenciales químicos individuales μ_k sean iguales: $\mu = \mu_1 = \dots = \mu_k$.

Cada componente dentro de la mezcla posee una fracción numérica de volumen f_k , que representa su porcentaje dentro de la misma, debiendo por tanto cumplirse que:

$$\sum_k f_k = 100 \quad (5.77)$$

Se define una densidad parcial ρ_k como la densidad de un plasma formado íntegramente por el componente k , y que posee un volumen V_k , dicha densidad es:

$$\rho_k = \frac{m_k}{V_k} = \frac{A_k}{V_k N_A} = \frac{3A_k}{4\pi R_{ik}^3 N_A} \quad (5.78)$$

A_k es la masa molar del componente k expresada en g/mol y N_A es el número de Avogadro. Suponiendo que los volúmenes son aditivos, el volumen total de la mezcla V_T puede escribirse como suma de los volúmenes parciales V_k , calculados a partir de la ecuación anterior. En función de las densidades total del plasma y parciales de cada componente, se obtiene entonces la ecuación:

$$\frac{m}{\rho} = \sum_k \frac{m_k}{\rho_k} \quad (5.79)$$

Escrita en función de las masas molares queda:

$$\frac{\sum_k f_k A_k}{\rho} = \sum_k \frac{f_k A_k}{\rho_k} \quad (5.80)$$

Bajo cualesquiera condiciones para sistemas en contacto con difusión, los potenciales químicos deben ser iguales. Esta condición es la utilizada para obtener las densidades parciales de cada componente.

El proceso para obtener el valor de las densidades parciales ρ_k es análogo al del apartado 3.4.

Finalmente, con los valores de las densidades parciales de cada componente así determinadas, se resuelven las ecuaciones del balance colisional radiativo del átomo medio para cada uno de ellos en estado estacionario o en cada intervalo temporal:

$$\frac{d\overline{P}_i^k}{dt} = \sum_j \overline{P}_j^k (D_i^k - \overline{P}_i^k) \mathfrak{R}_{j \rightarrow i}^{+k} - \overline{P}_i^k \sum_j (D_j^k - \overline{P}_j^k) \mathfrak{R}_{i \rightarrow j}^{-k} \quad (5.81)$$

Donde:

- $\overline{P}_i^k$: Población del orbital relativista i del átomo medio del componente k en la mezcla.
- $\overline{P}_j^k$: Población del orbital relativista j del átomo medio del componente k en la mezcla.
- $D_i^k; D_j^k$: Degeneración del orbital relativista $i; j$ del átomo medio del componente k en la mezcla.
- $\mathfrak{R}_{j \rightarrow i}^{+k}$ & $\mathfrak{R}_{i \rightarrow j}^{-k}$: Tasas que pueblan y despueblan respectivamente el orbital relativista i del átomo medio del componente k en la mezcla.

Se obtienen los correspondientes valores de la ionización media Z_{bar}^k , las poblaciones medias $\overline{P}_i^k$ y las energías de nivel E_i^k correspondientes de cada componente.

El tiempo de cálculo aumenta proporcionalmente con cada elemento añadido a la mezcla para plasmas en estado estacionario y además con cada intervalo de tiempo añadido para plasmas temporales, calculando dentro de cada intervalo temporal los balances colisionales radiativos de cada elemento a su densidad parcial correspondiente. Son requeridas numerosas iteraciones hasta que los potenciales químicos de todos los componentes son iguales y las densidades electrónicas parciales son del mismo orden de magnitud. El tiempo de cálculo aumenta también si el número atómico de los componentes es alto (lantánidos, oro, etc.).

En mezclas con evolución temporal de las condiciones termodinámicas, con el método numérico implícito de Crank Nicholson, se van hilando convenientemente las poblaciones de cada orbital relativista de cada componente y en cada intervalo de tiempo respecto al anterior.

En el Capítulo 6, son modelados con la herramienta ATMED CR numerosos plasmas binarios y multicomponente de alto interés en las áreas de fusión por confinamiento inercial o astrofísica, ilustrando su capacidad de simulación para analizar plasmas de mezclas bien caracterizados por fracciones de volumen y componentes, en estado estacionario o considerando cualesquiera perfiles para las parámetros principales variables con el tiempo (temperaturas, densidad, etc.).

5.6 Opciones de Cálculo Implementadas en ATMED CR

En este apartado se realiza un resumen de las opciones de cálculo según las condiciones de temperatura, densidad, campo de radiación externo o coexistente, etc. que caracterizan el plasma, detallándose las tasas de los procesos atómicos incluidas en el cálculo del balance colisional radiativo, comunes para plasmas monocomponentes o multicomponentes, estacionarios o temporales. Los plasmas de más de tres o cuatro elementos es preferible calcularlos sin fotoionización ni fotorecombinación para reducir el tiempo de cálculo, siempre y cuando el orden de magnitud de estos procesos sea muy inferior al de la fotoexcitación y la excitación colisional. Para agilizar la resolución del balance colisional radiativo se utilizan fórmulas:

- Para los factores de escape en plasmas no fotoionizados basadas en un perfil de línea con ensanchamiento Doppler o Gaussiano:

$$\Lambda_{u,l}(r) \approx \frac{1}{\tau(\pi \log \tau)^{1/2}} \quad (5.82)$$

- Para la probabilidad de confinamiento de fotones aplicada a las tasas radiativas basadas en un perfil de línea delta de Dirac, es decir, con absorción de radiación a la frecuencia central de la línea.

Para atrapamiento de radiación en la resolución del balance en ambos casos se utiliza la sección eficaz de absorción ligado ligado:

$$\sigma_{ji}^{bb}(h\nu) = 2\pi^2 \alpha a_0 e^2 f_{ji} \quad (5.83)$$

Considerando las tasas que pueblan y despueblan los orbitales relativistas del átomo medio, el sistema de ecuaciones puede escribirse de esta forma:

$$\frac{d\overline{P}_k}{dt} = \sum_j \overline{P}_j (D_k - \overline{P}_k) \mathfrak{R}_{j \rightarrow k}^+ - \overline{P}_k \sum_j (D_j - \overline{P}_j) \mathfrak{R}_{k \rightarrow j}^- \quad (5.84)$$

Dicho sistema de ecuaciones de tasas está matemáticamente acoplado a la ecuación de transporte de radiación espacial y temporal (r, t) :

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I(r, t, \nu, e)}{\partial t} + e \cdot \nabla I(r, t, \nu, e) = -\kappa(r, t, \nu) I(r, t, \nu, e) + j(r, t, \nu) \quad (5.85)$$

- $I(r, t, \nu, e)$: Intensidad específica de la radiación a la frecuencia fotónica ν y con dirección de propagación según el vector e .
- $\kappa(r, t, \nu)$ & $j(r, t, \nu)$: Coeficientes de absorción y emisión de la radiación.

Pero también con el objetivo de agilizar los cálculos, se consideran las ecuaciones desacopladas en muchos modelos colisionales radiativos, ya que los campos de radiación se representan por distribuciones planckianas diluidas o con plena intensidad. Una vez resuelto el balance CR y halladas las poblaciones de los orbitales relativistas [53], se calculan las propiedades radiativas también con un perfil de línea UTA o MUTA completo y refinado que incluye los ensanchamientos Doppler, Natural, Stark y Dielectrónico.

Los códigos colisionales radiativos de átomo medio llevan siendo utilizados con éxito desde hace décadas en la física de plasmas. El esquema siguiente representa cronológicamente su evolución para la resolución del átomo multielectrónico combinado con el formalismo de átomo medio, y así caracterizar un plasma por propiedades atómicas, radiativas y termodinámicas. Por ello ATMED CR representa una evolución tecnológica de casi cuatro décadas.

5.6.1 Plasmas no Fotoionizados Ópticamente Delgados

- EXCITACIÓN / DESEXITACION COLISIONAL
- IONIZACION COLISIONAL / RECOMBINACION COLISIONAL A TRES CUERPOS
- EMISION ESPONTANEA
- AUTOIONIZACION / CAPTURA ELECTRONICA

5.6.2 Plasmas no Fotoionizados Ópticamente Gruesos

- EXCITACIÓN / DESEXCITACION COLISIONAL
- IONIZACION COLISIONAL / RECOMBINACION COLISIONAL A TRES CUERPOS
- EMISION ESPONTANEA * FACTOR DE ESCAPE
 - Cálculo de factores de escape para cada línea ligado-ligado, considerando sólo absorción de fotones con energía a la frecuencia central de la línea y con muy poca absorción en las alas de fotones a otras frecuencias adyacentes.
 - Hipótesis: Se supone que la radiación del continuo es delgada y escapa del plasma.
- AUTOIONIZACION / CAPTURA ELECTRONICA

5.6.3 Plasmas Fotoionizados Delgados / Gruesos

- EXCITACIÓN / DESEXCITACION COLISIONAL
- IONIZACION COLISIONAL / RECOMBINACION COLISIONAL A TRES CUERPOS
- ABSORCION ESTIMULADA (FOTOEXCITACION)
 - Sin / Con Probabilidad de Confinamiento de Fotones
- EMISION ESTIMULADA (FOTODESEXCITACION) + EMISION ESPONTANEA
 - Sin / Con Probabilidad de Confinamiento de Fotones
- AUTOIONIZACION / CAPTURA ELECTRONICA
- FOTOIONIZACION / FOTORECOMBINACION
 - Sin / Con Probabilidad de Confinamiento de Fotones

6. VALIDACION DEL MODELO ATMED CR

6.1 Metales de Transición

6.1.1 Oro

El oro es un elemento químico de símbolo Au, número atómico $Z = 79$ y peso 196.967 g/mol. En los siguientes subapartados se revisan los resultados de ATMED CR respecto a los de otros códigos en lo referente a grado medio de ionización para experimentos llevados a cabo en las típicas instalaciones operativas actualmente. Se visualiza también la diferencia en las propiedades dependiendo de si se utiliza número cuántico principal máximo $n_{\max}=6$ o $n_{\max}=10$, del modelo de ionización por presión (IP) o de depresión del continuo (CL) para efectos de plasma o de la fórmula para la autoionización que incluye o no la constante $C_{\text{auto}}=10^{14} \div 10^{17} \text{ s}^{-1}$.

6.1.1.1 Ionización Media en NOVA LLNL

Los resultados obtenidos con ATMED CR para el experimento de plasmas de oro con $N_e=1.4\text{E}+21 \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2600 \text{ eV}$, realizados en la instalación NOVA LLNL [21] se ilustran en la [Tabla 6.1](#):

Tabla 6.1: Propiedades de plasmas de oro con densidad electrónica $N_e=1.4 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$

T_e (eV)	T_R (eV)	IP / CL	C_{auto} (s^{-1})	n máximo	Fza osc. Lig-lib	ρ (g/cm^3)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ABAKO	Z_{bar} FLYCHK	Z_{bar} EXPERIMENTO
2600	190	IP	10^{14}	6	nl	9.559E-03	47.90	50.5	50.4	51 ± 1
2600	190	IP	10^{15}	6	n	9.100E-03	50.47	50.5	50.4	51 ± 1
2600	-	IP	10^{15}	6	n	9.100E-03	50.43	-	-	-
2600	190	CL	10^{14}	6	nl	9.720E-03	47.16	50.5	50.4	51 ± 1
2600	190	CL	10^{15}	6	n	9.000E-03	51.20	50.5	50.4	51 ± 1
2600	190	IP	10^{14}	10	nl	9.560E-03	47.93	50.5	50.4	51 ± 1
2600	-	IP	10^{14}	10	nl	9.620E-03	47.61	-	-	-
2600	190	CL	10^{14}	10	nl	9.700E-03	49.09	50.5	50.4	51 ± 1
2600	-	CL	10^{14}	10	nl	9.400E-03	48.80	-	-	-

Se visualiza también la diferencia en la ionización media según el desdoblamiento cuántico en la fuerza de oscilador ligado-libre de la autoionización. Los resultados obtenidos con ATMED CR para el experimento de plasmas de oro con $N_e=6E+20 \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2200 \text{ eV}$, realizados en la instalación NOVA LLNL [21] se ilustran en la [Tabla 6.2](#). Se observa también en las [Figuras 6.1-6.2](#) cómo se alcanza mayor grado de acuerdo entre los códigos colisionales radiativos participantes en el workshop del NLTE-4 respecto a los del NLTE-1, disminuyendo la horquilla de valores para la ionización media ([Figuras 6.2a-6.2b](#)).

Tabla 6.2: Propiedades de plasmas de oro con densidad electrónica $N_e=6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ [21]

T_e (eV)	T_R (eV)	IP / CL	C_{auto} (s^{-1})	n máximo	Fza osc. Lig-lib	ρ (g/cm^3)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ABAKO	Z_{bar} FLYCHK	Z_{bar} EXPERIMENTO
2200	-	IP	10^{14}	6	nl	4.250E-03	46.17	49.2	49.6	49.3 ± 0.5
2200	-	IP	10^{15}	6	n	3.918E-03	50.10	49.2	49.6	49.3 ± 0.5
2200	-	CL	10^{14}	6	nl	4.404E-03	44.56	49.2	49.6	49.3 ± 0.5
2200	-	CL	10^{15}	6	n	3.880E-03	50.62	49.2	49.6	49.3 ± 0.5
2200	-	IP	10^{14}	10	nl	4.260E-03	46.14	49.2	49.6	49.3 ± 0.5
2200	-	CL	10^{14}	10	nl	4.140E-03	47.42	49.2	49.6	49.3 ± 0.5

Figura 6.1a. Distribución de grados de carga para el oro a $N_e=6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2200 \text{ eV}$ según varios códigos CR y valor experimental en la instalación NOVA LLNL.

TABLE VI. Average ionization for the Au experiment performed on NOVA at LLNL [94] and calculations obtained by different models assuming $n_e=6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and $T_e=2200 \text{ eV}$.

Source	$\bar{Z}$
Experiment [94]	49.3 ± 0.5
ABAKO	49.2
VERROES [95]	49.6
FLYCHK [25]	49.6
RIGEL [94]	49.1

Figura 6.1b. Resultados de la ionización media para el oro a $N_e=6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2200 \text{ eV}$ según varios códigos CR y valor experimental en la instalación NOVA LLNL.

Figura 6.2a. Ionización media para el oro a $N_e=1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2200 \text{ eV}$ según los códigos CR del NLTE-1. Valor experimental a $N_e=6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2200 \text{ eV}$ (naranja).

Figura 6.2b. Ionización media para el oro a $N_e=3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2200 \text{ eV}$ según los códigos CR del NLTE-4. Valor experimental a $N_e=6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2200 \text{ eV}$ (naranja).

6.1.1.2 Ionización Media en LLNL EBIT-II

Los resultados obtenidos con ATMED CR para el experimento de plasmas de oro con $N_e=10^{12} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2500 \text{ eV}$, realizados en la instalación LLNL EBIT-II [21] se ilustran en la [Tabla 6.3](#), [Figura 6.3](#):

Tabla 6.3: Propiedades de plasmas de oro con densidad electrónica $N_e=10^{12} \text{ cm}^{-3}$

T_e (eV)	T_R (eV)	IP / CL	C_{auto} (s ⁻¹)	n máximo	Fza osc. Lig-lib	ρ (g/cm ³)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ABAKO	Z_{bar} MIST	Z_{bar} EXPERIMENTO
2500	-	IP	10^{14}	6	nl	7.800E-12	42.18	-	-	46.8 ± 0.75
2500	-	IP	10^{14}	6	n	7.650E-12	43.00	-	-	46.8 ± 0.75
2500	-	CL	10^{14}	6	nl	7.800E-12	42.18	47.2	42.7	46.8 ± 0.75

Figura 6.3a. Distribución de grados de carga para el oro a $N_e=1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2500 \text{ eV}$ según varios códigos CR y valor experimental en la instalación NOVA LLNL.

TABLE IV. Average ionization for the Au experiment performed on the LLNL EBIT-II [92] and calculations obtained by different models assuming $n_e=10^{12} \text{ cm}^{-3}$ and $T_e=2500 \text{ eV}$.

Source	$\bar{Z}$
Experiment [92]	46.8 ± 0.75
ABAKO	47.2
AVERROES [93]	46.4
FLYCHK [25]	48.5
MIST [92]	42.7
RIGEL/MCXS [92]	49.5

Figura 6.3b. Resultados de la ionización media para el oro a $N_e=1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=2500 \text{ eV}$ según varios códigos CR y valor experimental en la instalación NOVA LLNL.

6.1.1.3 Ionización Media y Distribución de Iones en Plasmas Fotoionizados

Los resultados obtenidos con ATMED CR para el oro a 1 KeV y altas temperaturas de radiación se ilustran en la [Tabla 6.4](#), en perfecto acuerdo con los visualizados en la [Figura 6.4](#) de la Ref. [54].

Tabla 6.4: Propiedades de plasmas de oro con ATMED CR y densidad iónica $N_{\text{ion}}=4.748 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	N_{ion} (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR
1000	1000	1.553E-02	3.248E+21	4.748E+19	6.841E+01
1000	800	1.553E-02	3.138E+21	4.748E+19	6.608E+01
1000	600	1.553E-02	2.822E+21	4.748E+19	5.943E+01
1000	400	1.553E-02	2.440E+21	4.748E+19	5.139E+01
1000	300	1.553E-02	2.287E+21	4.748E+19	4.817E+01

Figura 6.4. Grado medio de ionización del oro en función de la carga de los iones del plasma para una densidad iónica total $N_i=4.748 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, temperatura electrónica 1 keV y diferentes temperaturas de radiación $1 \div 0.3 \text{ keV}$ [54].

6.1.1.4 Procesos de Autoionización y Captura Dielectrónica

En esta sección se observa cómo los valores de ionización media obtenidos con ATMED CR son siempre más próximos a modelos detallados con una selección muy completa de configuraciones que con otras selecciones con un número más reducido [27]. Para estos procesos atómicos ATMED CR considera todas las posibles combinaciones entre tres orbitales energéticos que cumplan las restricciones en sus energías de ligadura ya enunciadas anteriormente.

El modelo detallado de referencia [27] ha considerado diferentes tipos de estados doblemente excitados, también llamados autoionizantes que pueden decaer por el canal de autoionización, obteniendo las variantes denominadas A, B, C y D. Así el modelo A tiene el mayor número de configuraciones, típicamente, unos pocos miles. El número de configuraciones en el modelo C es alrededor del 90% de las del modelo A, mientras que en el modelo D, el número es la mitad que en el modelo A.

Figura 6.5a. Grado medio de ionización del oro en función de la temperatura para las variantes del código detallado de la referencia [27] a las densidades $N_e=10^{20} \text{ cm}^{-3}$ y $N_e=10^{21} \text{ cm}^{-3}$.

Se comprueba por tanto en los rangos de densidad ($1\text{E}+20 \div 1\text{E}+21 \text{ cm}^{-3}$) y temperatura ($1000 \div 1500 \text{ eV}$) en los que hay mayor discrepancia entre modelos, que los cálculos de ionización media de ATMED CR (Tabla 6.5), son más similares a los modelos A y C más completos en número de configuraciones y de estados autoionizantes seleccionados (Figura 6.5a).

El orden de magnitud de las tasas de autoionización es tres veces superior al de los modelos detallados mientras que el de las tasas de captura dielectrónica es similar, y en consecuencia el de las tasas totales de ionización y recombinación respectivamente (Figura 6.5b).

Tabla 6.5: Propiedades de plasmas de oro con ATMED CR

T_e (eV)	N_e (cm^{-3})	ρ (g/cm^3)	Z_{bar} ATMED CR	Captura 2e- Total (s^{-1})	Recombinación Total (s^{-1})	Autoionización Total (s^{-1})	Ionización Total (s^{-1})
800	1E+20	1.060E-03	3.084E+01	5.123092E+11	5.123095E+11	4.980303E+14	4.982773E+14
1000	1E+20	9.808E-04	3.335E+01	3.576496E+11	3.576498E+11	3.673941E+14	3.676020E+14
1200	1E+20	8.979E-04	3.643E+01	2.763654E+11	2.763655E+11	2.709610E+14	2.711249E+14
1500	1E+20	8.409E-04	3.889E+01	2.040799E+11	2.040800E+11	1.515461E+14	1.516905E+14
1000	1E+21	8.345E-03	3.919E+01	2.148770E+12	2.148782E+12	8.447766E+14	8.458408E+14
1200	1E+21	7.960E-03	4.109E+01	1.778446E+12	1.778454E+12	5.907428E+14	5.917441E+14
1500	1E+21	7.527E-03	4.345E+01	1.447683E+12	1.447688E+12	3.558069E+14	3.567367E+14

Figura 6.5b. Tasas de ionización y de recombinación del oro para diferentes estados de carga en los modelos A y C [27] a 1500 eV y a la densidad $N_e=10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

6.1.1.5 Opacidad Frecuencial

En esta sección se observa en las Figuras 6.6÷6.7 cómo la opacidad frecuencial UTA de ATMED CR es prácticamente un promedio perfecto con máximo grado de acuerdo respecto a otros modelos cuánticos estadísticos para materia densa y caliente [25].

Figura 6.6. Opacidad espectral del oro a temperatura $T_e=1$ KeV y densidad 0.1 g/cm^3 : (a) Ref. [25], (b) ATMED CR UTA y Ref. [25] y (c) ATMED CR UTA y MUTA, con opacidades medias K_R / K_P del mismo orden de magnitud para ambos formalismos.

Figura 6.7. Opacidad espectral del oro a temperatura $T_e=1$ KeV y densidad 1 g/cm^3 : (a) Ref. [25], (b) ATMED CR UTA y Ref. [25] y (c) ATMED CR UTA y MUTA, con opacidades medias K_R / K_P del mismo orden de magnitud para ambos formalismos.

6.1.2 Tungsteno

El tungsteno (wolframio) es un elemento químico de símbolo W, número atómico $Z = 74$ y peso 183.84 g/mol.

6.1.2.1 Régimen Corona / Régimen Colisional Radiativo / Régimen LTE

Es de gran interés para la comunidad científica el estudio de los plasmas en fusión por confinamiento magnético caracterizados por bajas densidades, $1E+14 \text{ cm}^{-3}$ en régimen corona, y altas temperaturas en el entorno de los 2000 eV. La ionización media y las pérdidas radiativas de este material son de máxima importancia para diseñar componentes del Tokamak como el divertor o las paredes de la cámara del Reactor Termonuclear Experimental Internacional (proyecto ITER, International Thermonuclear Experimental Reactor). Se han modelado con ATMED CR estos plasmas de tungsteno ópticamente delgados sin campo externo de radiación y considerando la fórmula de Albritton sin límite superior para los procesos atómicos de autoionización y captura dielectrónica.

La tasa de autoionización se calcula mediante la expresión aproximada:

$$A_{ji}^{kc} = \frac{3\pi}{2\hbar} \left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{Z_{bar}} \right)^2 \frac{f_{ij}}{D_j^0} \frac{df_k}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=-\epsilon_k} g_A \quad (6.1)$$

Como puede observarse, sin límite superior es máxima la importancia del desdoblamiento de la fuerza de oscilador del proceso ligado-libre para el electrón que estando ligado al núcleo experimenta una transición al continuo. Se obtienen diferentes propiedades y grados de ionización media si dicha fuerza de oscilador corresponde a una u otra de las siguientes fórmulas:

- Fórmula propia de la fuerza de oscilador ligado-libre del modelo NRSHM según los números cuánticos principal y orbital [9]:

$$\frac{df_k}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=-\epsilon_k} = f_{nl,\epsilon_c,l'} = \frac{l+l'+1}{3(2l+1)} r_{nl,\epsilon,l'}^2 \quad (6.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_k}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=-\epsilon_k} &= f_{nl,\epsilon_c,l'} = f_{nl,\epsilon,l'+1} = \frac{2^{4l'+5}}{3(n-l-1)!(n+l)!} \left(\frac{n}{Q_{nl}} \right)^4 \frac{l_{>}}{2l+1} f_n(\lambda) \lambda^{l'+4} \\ &\times \left[(n \pm l_{>})(n-1 \pm l_{>}) \varphi_{n-l'-2,l'}(\lambda) - \varphi_{n-l',l'}(\lambda) \right]^2 \\ &\times \prod_{s=1}^{l'} [(n^2 - s^2) \lambda + s^2] \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\lambda \equiv \lambda_{nl} = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_n} \frac{Q_{nl}^2}{2n^2}; \quad (6.4)$$

$$l_{>} = \max(l, l') \quad (6.5)$$

- Fórmula de la fuerza de oscilador ligado-libre según el número cuántico principal [49]:

$$\left. \frac{df_k}{d\epsilon} \right|_{\epsilon = -\epsilon_k} \Rightarrow \frac{f_{n, \epsilon_c}}{-\epsilon_k (eV)} = 12 \frac{Q_k^4}{A} \frac{1}{n^5(k)} / -\epsilon_k (eV) \quad (6.6)$$

Para una densidad alta $1E+24 \text{ cm}^{-3}$ y además a altas temperaturas se utilizaría la tasa de autoionización con un límite superior. Se ha comprobado que utilizar 10^{14} s^{-1} penaliza el incremento de la ionización, pero utilizando otro límite como pueda ser $5 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$, se obtiene una evolución más acorde con el resto de los códigos colisionales radiativos:

$$A_{ji}^{kc} = C_{auto} \tanh \left[\frac{3\pi}{2\hbar} \left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{Z_{bar}} \right)^2 \frac{f_{ij}}{D_j^0} \left. \frac{df_k}{d\epsilon} \right|_{\epsilon = -\epsilon_k} \frac{g_A}{C_{auto}} \right] \quad (6.7)$$

Para el régimen corona de bajas densidades electrónicas ($N_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$), la fórmula de Albritton no se utiliza con límite superior, tal que cobra mucha importancia la fuerza de oscilador para una transición ligado-libre presente en los procesos atómicos de autoionización y recombinación dielectrónica, tal que se obtienen diferentes propiedades del plasma según si dicha fuerza depende sólo del número cuántico principal n o también del orbital l , es decir, según se utilice la fórmula de la [Ecuación \(6.6\)](#) o de la [Ecuación \(6.3\)](#) respectivamente.

Los resultados obtenidos con ATMED CR se ilustran en la [Tabla 6.6](#). En varias ediciones de los Workshops internacionales de no equilibrio se han analizado estos plasmas, ver [Figura 6.8](#) y referencia [55].

Figura 6.8. Grado medio de ionización del tungsteno con $N_e=10^{14} \text{ cm}^{-3}$, según diferentes códigos CR (AIP Proceedings 1161, 242 – 2009 Ralchenko et al.) y según ATMED CR con fuerza de oscilador ligado libre dependiente únicamente del número cuántico principal n (superior). Grado medio de ionización del tungsteno con $N_e=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ según el código ATOMIC (inferior) con sus diferentes versiones (SCA cálculos semi-relativistas, RCA cálculos relativistas) [55].

Tabla 6.6: Propiedades de plasmas de tungsteno con ATMED CR en régimen corona con $N_e=10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Fza. Oscilador Ligado-Libre	Z_{bar} ATMED CR	Tiempo CPU (s)
1200	8.970E-10	1.0E+14	nl	3.403E+01	1.194E+02
1800	8.900E-10	1.0E+14	nl	3.439E+01	1.025E+02
2200	8.610E-10	1.0E+14	nl	3.550E+01	1.146E+02
2400	8.490E-10	1.0E+14	nl	3.597E+01	1.059E+02
1200	6.960E-10	1.0E+14	n	4.388E+01	1.653E+02
1800	6.930E-10	1.0E+14	n	4.406E+01	5.851E+01
2200	6.910E-10	1.0E+14	n	4.419E+01	5.909E+01
2400	6.900E-10	1.0E+14	n	4.428E+01	6.196E+01
3000	6.880E-10	1.0E+14	n	4.477E+01	7.198E+01
4000	6.780E-10	1.0E+14	n	4.541E+01	9.614E+01
7000	6.500E-10	1.0E+14	n	4.825E+01	1.241E+02
8000	6.300E-10	1.0E+14	n	5.133E+01	1.087E+02
9000	6.300E-10	1E+14	n	5.434E+01	9.682E+01
10000	6.200E-10	1E+14	n	5.492E+01	7.809E+01

Para muy altas densidades y altas temperaturas disminuye la influencia de la magnitud del límite superior por la mayor importancia de los procesos colisionales, aunque la constante 10^{14} s^{-1} puede penalizar en exceso la evolución del grado de ionización con temperaturas superiores a los 2000 eV (ver [Figura 6.9](#)).

Los resultados obtenidos con ATMED CR para el tungsteno a alta densidad se ilustran en la [Tabla 6.7](#).

Figura 6.9. Grado medio de ionización del tungsteno en función de la temperatura. Superior: régimen corona $N_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Inferior: régimen colisional radiativo $N_e = 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ (Review of the NLTE-5 kinetics workshop [31]).

Tabla 6.7: Propiedades de plasmas de tungsteno con densidad electrónica $N_e=10^{24} \text{ cm}^{-3}$.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Fza. Oscilador Ligado-Libre	C_{auto} (s ⁻¹)	Z_{bar} ATMED CR
2000	5.976E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	5.109E+01
2000	5.958E+00	1.0E+24	nl	10^{17}	5.124E+01
2000	5.825E+00	1.0E+24	n	10^{15}	5.241E+01
3000	5.606E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	5.446E+01
3000	5.624E+00	1.0E+24	nl	10^{17}	5.428E+01
3000	5.591E+00	1.0E+24	n	10^{14}	5.460E+01
3000	5.424E+00	1.0E+24	n	10^{15}	5.628E+01
4000	5.425E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	5.627E+01
4000	4.899E+00	1.0E+24	n	10^{15}	6.231E+01
5000	5.327E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	5.731E+01
5000	5.159E+00	1.0E+24	n	10^{15}	5.917E+01
10000	5.110E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	5.974E+01
10000	5.000E+00	1.0E+24	n	10^{15}	6.105E+01
20000	4.953E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	6.163E+01
20000	4.908E+00	1.0E+24	n	10^{15}	6.220E+01
30000	4.876E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	6.260E+01
30000	4.876E+00	1.0E+24	nl	10^{14}	6.260E+01
30000	4.865E+00	1.0E+24	n	10^{15}	6.274E+01

6.1.3 Niobio

El niobio es un elemento químico de símbolo Nb, número atómico $Z = 41$ y peso 92.906 g/mol. Se han llevado a cabo en diferentes instalaciones (láser Nova en LLNL, LULI, etc.), experimentos para medir el espectro de absorción en condiciones de régimen LTE de plasmas de niobio, mantenido en las muestras durante un periodo aproximado de tiempo de 1 ns. Concretamente experimentos utilizando el láser HELEN para crear el plasma y posteriormente usarlo como fuente de Rayos-X [56].

El haz láser principal con una energía entre 80 y 200 J, fue focalizado sobre una lámina de oro (Figura 6.10). Los Rayos-X emitidos por el oro irradiado pasan a través de un sustrato de plástico calentando una lámina de niobio situada entre dos finas capas de plástico que evitan la expansión excesiva del metal niobio creando condiciones de equilibrio termodinámico local. Para medir la absorción del plasma de niobio creado se utiliza un segundo haz láser focalizado sobre oro o tungsteno.

Fig. 6.10. Esquema del experimento con láser HELEN.

Fig. 6.11. Condiciones previstas en el plasma de niobio.

Fig. 6.12a. Evolución temporal de la ionización media de un plasma de Nb para tres valores de la energía láser.

Fig. 6.12b. Evolución temporal de la ionización media del Nb para tres pasos de tiempo 0.1 ns, 0.1 ps y 0.1 fs.

Las condiciones en el plasma de niobio han sido deducidas de cálculos teóricos y medidas experimentales (Figura 6.11) tal que varían lentamente entre 0.4 y 1.1 ns. Se puede observar en la Figura 6.12a, la evolución de la ionización media calculada con ATMED CR según dichas condiciones considerando un paso de tiempo de 0.1 ns y tres energías típicas diferentes en el experimento 160, 115 y 80 J. En la Figura 6.12b, se observa la gran sensibilidad del modelo temporal a las unidades del paso de tiempo para el disparo láser de 80 J, siendo hipotéticos los perfiles de densidad y temperatura para 0.1 fs y 0.1 ps, y análogos a los de 0.1 ns.

6.1.4 Hierro / Nickel / Cobre

En este apartado, se analizan cuidadosamente las poblaciones electrónicas fraccionarias de los orbitales y la cinética de poblaciones de plasmas de número atómico intermedio previamente calculadas por otros códigos. También se aprecia la buena calidad de las opacidades frecuenciales y medias así como la gran sensibilidad a cambios ligeros en las condiciones del plasma. Además de la temperatura electrónica T_e eV y la densidad electrónica N_e cm⁻³ o la de materia ρ g/cm³, los plasmas fotoionizados están caracterizados por dos parámetros: temperatura de radiación T_R y factor de dilución X_{dil} . Cuando en un caso de cálculo se indica $T_R=0$ eV, las poblaciones se calculan dentro del balance CR sin campo planckiano externo de radiación, y posteriormente la opacidad (absorción de la radiación por el plasma) se computa suponiendo un campo de radiación incidente a la temperatura electrónica. En cualquier otro caso $T_R \neq 0$ eV, la opacidad del plasma se calcula considerando un campo de radiación a la temperatura de radiación T_R , incidente o coexistente con el plasma.

El factor de dilución es un método simple para incluir el campo de radiación, considerando también que puede tener menor intensidad que uno planckiano emitido por un cuerpo negro. Para unas condiciones concretas de temperatura de radiación y factor de dilución, la intensidad será la de un campo de radiación planckiano multiplicado por dicho factor X_{dil} . En plataformas experimentales reales y configuraciones con blancos movibles como los mencionados en el capítulo 1, el factor de dilución puede ser considerado como la distancia entre el plasma y la fuente del campo de radiación, que puede ser incidente sobre un plasma desde diferentes fracciones angulares (4π estereorradianes) dependiendo de la geometría, resultando en parámetros de fotoionización correlacionados ξ erg.cm/s.

6.1.4.1 Plasmas Fotoionizados de Hierro

El hierro es un elemento químico de símbolo Fe, número atómico $Z = 26$ y peso 55.845 g/mol. En las Tablas 6.8÷6.10 y Figuras 6.13-6.24, se ilustran resultados de ATMED CR para plasmas de hierro fotoionizados caracterizados por varias temperaturas de radiación y factores de dilución, previamente calculados con el modelo hidrogenoide apantallado de Faussurier et al. [17]. Su modelo publicado en 1997 [40], constaba de un conjunto de constantes de apantallamiento con desdoblamiento nl obtenido por ajuste a 15,600 datos de energías de excitación y potenciales de ionización según Hartree-Fock.

Tabla 6.8: Poblaciones fraccionarias relativistas de plasmas de hierro con densidad electrónica $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$, temperatura electrónica $T=150 \text{ eV}$, y varios ratios de temperatura de radiación vs. T (T_R/T) o $T_R=165\text{eV}$ y varios factores de dilución X_{dil} .

P_k	$T_R/T = 0.5$ $T_R=75\text{eV}$	$T_R/T = 0.75$ $T_R=112.5\text{eV}$	$T_R/T = 1$ $T_R=150\text{eV}$	$T_R/T = 2$ $T_R=300\text{eV}$	$T_R = 165$ $X_{dil} = 0.025$	$T_R = 165$ $X_{dil} = 0.1$	$T_R = 165$ $X_{dil} = 0.5$	$T_R = 165$ $X_{dil} = 1$
1s $_{1/2}$	1.997833	1.997923	1.998050	1.998100	1.997838	1.997957	1.998045	1.998076
2s $_{1/2}$	1.987005	1.724464	0.677215	0.036367	1.963353	1.752437	0.764589	0.350704
2p $_{1/2}$	1.978826	1.399415	0.468417	0.029806	1.748533	1.045778	0.458509	0.249984
2p $_{3/2}$	3.947244	2.665381	0.850244	0.057763	3.409587	1.790503	0.804902	0.453274
3s $_{1/2}$	0.014343	0.001867	0.000648	0.000693	0.005075	0.001444	0.000655	0.000446
3p $_{1/2}$	0.010717	0.001540	0.000590	0.000748	0.004866	0.001954	0.000697	0.000427
3p $_{3/2}$	0.020065	0.002921	0.001136	0.001476	0.008897	0.003609	0.001339	0.000825
3d $_{3/2}$	0.009443	0.001962	0.000974	0.001409	0.003032	0.001072	0.000905	0.000740
3d $_{5/2}$	0.011828	0.002901	0.001445	0.002156	0.004224	0.001392	0.001291	0.001099
4s $_{1/2}$	0.000794	0.000173	0.000061	0.000180	0.000291	0.000114	0.000065	0.000046
4p $_{1/2}$	0.000733	0.000156	0.000058	0.000188	0.000296	0.000117	0.000067	0.000045
4p $_{3/2}$	0.001438	0.000308	0.000114	0.000373	0.000572	0.000227	0.000131	0.000088
4d $_{3/2}$	0.001516	0.000291	0.000104	0.000361	0.000605	0.000158	0.000107	0.000082
4d $_{5/2}$	0.002211	0.000419	0.000154	0.000549	0.000837	0.000214	0.000154	0.000121
4f $_{5/2}$	0.000641	0.000292	0.000141	0.000489	0.000000	0.000071	0.000091	0.000110
4f $_{7/2}$	0.000338	0.000346	0.000181	0.000648	0.000000	0.000084	0.000113	0.000143
5s $_{1/2}$	0.000133	0.000055	0.000020	0.000089	0.000089	0.000038	0.000022	0.000016
5p $_{1/2}$	0.000128	0.000052	0.000019	0.000090	0.000085	0.000038	0.000022	0.000015
5p $_{3/2}$	0.000241	0.000100	0.000037	0.000177	0.000163	0.000071	0.000041	0.000029

En las [Tablas 6.9-6.10](#) se tabulan para algunos casos las tasas de procesos atómicos entre orbitales relativistas del átomo medio que representa el plasma. La tasa de ionización total consta de tres contribuciones, ionización colisional, autoionización y fotoionización, mientras que la tasa de recombinación total incluye la recombinación a tres cuerpos, la captura dielectrónica y la fotorecombinación o recombinación radiativa.

Las tasas de excitación colisional y fotoexcitación o desexcitación que despueblan los orbitales, también se tabulan para observar la importancia relativa de la excitación o desexcitación de electrones ligados debido al impacto de electrones libres con distribución Maxwelliana de velocidades o bien como consecuencia del efecto de los fotones en una distribución planckiana de energías. Cuanto mayor es la temperatura de radiación o el factor de dilución, mayor es la importancia de las tasas de fotoionización, fotorecombinación, fotoexcitación y fotodesexcitación en comparación con otros procesos atómicos ([Figuras 6.13-6.20](#)).

Tabla 6.9: Tasas de procesos atómicos de plasmas de hierro con densidad electrónica $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$, temperatura electrónica $T=150 \text{ eV}$, y varios ratios de temperatura de radiación versus temperatura electrónica (T_R/T).

T_R/T	K_R (cm^2/g)	K_P (cm^2/g)	Foton. Tasa (s^{-1})	Ioniz. Total Tasa (s^{-1})	FotoRec. Tasa (s^{-1})	Rec. Tot. Tasa (s^{-1})	Col. De/Exc. Tasa (s^{-1})	FotoDe/Ex. Tasa (s^{-1})
0.25	1.537E+02	3.104E+03	1.857E+11	2.219E+14	1.404E+06	4.127E+10	6.824E+14	1.923E+14
0.75	9.623E+00	9.022E+02	2.676E+12	9.698E+14	1.836E+07	1.756E+10	5.154E+14	8.280E+14
1	2.810E+00	4.243E+02	3.181E+12	1.010E+14	6.064E+07	5.779E+09	4.405E+14	2.587E+15
1.25	9.165E-01	1.340E+02	4.503E+12	6.649E+13	9.781E+11	9.796E+11	4.237E+14	3.788E+15
2	2.092E+00	7.276E+01	1.233E+13	2.534E+14	7.367E+19	7.367E+19	4.245E+14	4.562E+15

Col. De/Excit.: Excitación / desexcitación colisional que despuebla los niveles relativistas (1/s).

Foto-De/Ex.: Fotoexcitación / desexcitación que despuebla los niveles relativistas (1/s).

Tabla 6.10: Tasas de procesos atómicos de plasmas de hierro con densidad electrónica $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$, temperatura electrónica $T=150 \text{ eV}$, temperatura de radiación $T_R=165 \text{ eV}$ y varios factores de dilución X_{dil} del campo Planckiano de radiación.

X_{dil}	K_R (cm^2/g)	K_P (cm^2/g)	Foton. Tasa (s^{-1})	Ioniz. Total Tasa (s^{-1})	FotoRec. Tasa (s^{-1})	Rec. Tot. Tasa (s^{-1})	Col. De/Exc. Tasa (s^{-1})	FotoDe/Ex. Tasa (s^{-1})
0.025	2.715E+01	2.670E+03	2.266E+11	2.859E+14	8.506E+08	2.113E+10	6.055E+14	3.706E+14
0.1	9.045E+00	1.428E+03	5.106E+11	6.103E+14	1.013E+09	1.957E+10	5.414E+14	1.152E+15
0.5	3.013E+00	5.423E+02	1.759E+12	9.708E+13	1.376E+09	7.006E+09	4.448E+14	2.478E+15
1	1.714E+00	2.774E+02	3.573E+12	8.599E+13	1.464E+09	4.976E+09	4.243E+14	3.231E+15

ATMED CR desglosa las tasas por orbital relativista lo que permite analizar los procesos atómicos orbital por orbital. Por ejemplo, pueden observarse tendencias en las Figuras 6.13-6.20 y elaborar conclusiones como las expresadas a continuación. El desdoblamiento del nivel $5d_{5/2}$ por procesos de fotoionización es unas $10^4 \div 10^5$ veces superior a su poblamiento por procesos de fotorecombinación. Sin embargo, para orbitales más internos como los niveles $2s_{1/2} - 2p_{1/2} - 2p_{3/2}$ el desdoblamiento por fotoionización tiene tendencias similares al poblamiento por procesos de fotorecombinación.

Figura 6.13. Evolución de la tasa de fotoionización (s^{-1}) con el ratio T_R/T que desdoblea varios orbitales relativistas.

Figura 6.14. Evolución de la tasa de fotorecombinación (s^{-1}) con el ratio T_R/T que puebla varios orbitales relativistas.

El desdoblamiento del nivel $5d_{5/2}$ por fotoexcitación y fotodesexcitación es unas $10^4 \div 10^5$ veces superior a su poblamiento por dichos procesos. Para orbitales internos, $2s_{1/2} \div 2p_{3/2}$, el desdoblamiento por fotoexcitación y fotodesexcitación se hace más importante con T^a 's de radiación crecientes.

Figura 6.15. Evolución de la tasa de fotoexcitación/fotodesexcitación (s^{-1}) con el ratio T_R/T que desdoblea varios orbitales relativistas.

Figura 6.16. Evolución de la tasa de fotoexcitación/fotodesexcitación (s^{-1}) con el ratio T_R/T que puebla varios orbitales relativistas.

El poblamiento total del nivel $4p_{1/2}$ es siempre inferior al despoblamiento total para todos los ratios analizados de temperaturas de radiación y electrónica. El despoblamiento viene determinado fundamentalmente por los procesos de fotoexcitación y excitación colisional o desexcitación. Los procesos de fotoionización y fotorecombinación se hacen más importantes con temperaturas de radiación crecientes respecto a la ionización colisional y a la recombinación a tres cuerpos.

Figura 6.17. Evolución de tasas de procesos atómicos (s^{-1}) con el ratio T_R/T que despueblan el orbital $2s_{1/2}$.

Fig. 6.18. Evolución de tasas de procesos atómicos (s^{-1}) con el ratio T_R/T que pueblan el orbital $2s_{1/2}$.

El despoblamiento total del nivel $2s_{1/2}$ es inferior al poblamiento total únicamente para ratios de temperaturas de radiación y electrónica inferiores a 0.8. El despoblamiento viene determinado fundamentalmente por los procesos de fotoexcitación y excitación colisional o desexcitación. Los procesos de fotoionización y fotorecombinación se hacen más importantes con temperaturas de radiación crecientes respecto a la ionización colisional y a la recombinación a tres cuerpos.

El despoblamiento del nivel $5d_{5/2}$ por procesos de fotoionización es unas $10^5 \div 10^6$ veces superior a su poblamiento por procesos de fotorecombinación considerando factores de dilución crecientes. Sin embargo, para orbitales más internos como los niveles $2s_{1/2} - 2p_{1/2} - 2p_{3/2}$ el despoblamiento por procesos de fotoionización tiene tendencias similares al poblamiento por procesos de fotorecombinación.

El despoblamiento total del nivel $2s_{1/2}$ es inferior al poblamiento total únicamente para factores de dilución menores que 0.5. El despoblamiento viene determinado fundamentalmente por los procesos de fotoexcitación y excitación colisional o desexcitación. Los procesos de fotoionización y fotorecombinación se mantienen aproximadamente constantes con factores de dilución crecientes respecto a la ionización colisional y a la recombinación a tres cuerpos.

Figura 6.19a. Evolución de tasa de fotoionización (s^{-1}) con el factor de dilución X_{Dil} que despuebla varios orbitales relativistas.

Figura 6.19b. Evolución de las tasas de procesos atómicos (s^{-1}) con el factor de dilución X_{Dil} que pueblan el orbital $2s_{1/2}$.

El flujo total de población que despuebla los orbitales es mayor que el que los puebla a excepción de para el orbital $1s_{1/2}$ cuando $T_R/T=2$ ($Z_{bar}=23.86$) y para los orbitales $1\div4$ cuando $T_R/T=0.25$ ($Z_{bar}=15.64$) (Figura 6.20a). La tasa de fotoexcitación que despuebla es menor que la de excitación colisional excepto para los orbitales relativistas $2\div9$, $15\div16$ y $24\div25$. La tasa de fotoexcitación que puebla es siempre mayor que la de excitación colisional que puebla para todos los orbitales relativistas.

Figura 6.20a. Evolución de los flujos de población que pueblan o despueblan según el orbital relativista.

Figura 6.20b. Evolución de ionización, recombinación colisional, fotoionización, fotorecombinación (s^{-1}) según el orbital relativista con $T_R=150$ eV.

Las tasas de fotoexcitación y fotoionización que despueblan los orbitales relativistas son mayores que las de fotoionización e ionización colisional respectivamente. Se pone de manifiesto la estructura de capas al visualizar la magnitud de estos procesos y cuál de ellos es el más predominante según el orbital relativista (Figura 6.20b).

ATMED CR, basado en el nuevo modelo hidrogenoide apantallado relativista publicado en 2011 [10], con un conjunto de constantes de apantallamiento con desdoblamiento $n_l j$ ajustadas a 61,350 datos atómicos, calcula las poblaciones electrónicas en orbitales relativistas del átomo medio. Sumando las poblaciones de los orbitales $2p_{1/2}$ y $2p_{3/2}$, se obtiene la población total de la capa 2p en consonancia con la previamente computada con el modelo hidrogenoide de Faussurier [17]. El grado de acuerdo empeora para ratios de temperatura de radiación y electrónica (T_R/T) mayores que 1.5, pero como se observa en las Figuras 6.21-6.22, para estas condiciones del plasma con mayor ionización media por la alta temperatura de radiación, las poblaciones de electrones ligados en la banda 2p son muy pequeñas del orden de la primera o segunda cifra decimal ($10^{-1} \div 10^{-2}$), por lo que una coincidencia numérica exacta es casi imposible.

La tasa de autoionización para un electrón en la capa j que experimenta desexcitación a la capa i ($\epsilon_j > \epsilon_i$), mientras que otro electrón desde la capa k ($\epsilon_k > \epsilon_i - \epsilon_j$) es ionizado y va al continuo, está basada en la fórmula de Albritton:

$$A_{ji}^{kc} = C_{auto} \tanh \left[\frac{3\pi}{2\hbar} \left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{Z_{bar}} \right)^2 \frac{f_{ij}}{D_j^0} \frac{df_k}{d\epsilon} \right]_{\epsilon = -\epsilon_k} \frac{g_A}{C_{auto}} s^{-1} \quad (6.8)$$

- $\epsilon_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$ eV : Energía de excitación.
- $C_{auto} = 10^{14} s^{-1}$
- f_{ij} : Fuerza de oscilador de absorción ligado-ligado para un electrón desde la capa i a la j .
- $\frac{df_k}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon = -\epsilon_k}$: Fuerza de oscilador ligado-libre diferencial.
- $g_A = 0.2$: Factor de Gaunt.

Pero también se han realizado cálculos utilizando otra fórmula para autoionización en el balance de ATMED CR propia de modelos detallados [24], basada en números cuánticos principales y considerando orbitales relativistas:

$$A_{ji}^{kc} = \frac{32}{\sqrt{3}} \frac{Q_i^2}{\hbar n(k)^3} \frac{D_i^0}{D_k^0} \frac{I_H^2}{\epsilon_{ij}} f_{ij} g(\epsilon_{ij}) \quad (6.9)$$

$$A_{ji}^{kc} = \frac{64\pi}{\sqrt{3}} \frac{Q_i^2}{n(k)^3} \frac{D_i^0}{D_k^0} \frac{Ryd^2}{h \epsilon_{ij}} f_{ij} g(\epsilon_{ij}) \quad (6.10)$$

$$A_{ji}^{kc} = 5.835 \times 10^{17} \frac{Q_i^2}{n(k)^3} \frac{D_i^0}{D_k^0} \frac{f_{ij}}{\epsilon_{ij}} \quad (6.11)$$

- $I_H = Ryd = -13.605698 \text{ eV}$: Estado fundamental de energía del átomo de hidrógeno.
- $g = 0.12 \div 0.15$: Factor de Gaunt.
- $n(k)$: Número cuántico principal del orbital k del electrón que va al continuo.

Fig. 6.21a. Grado medio de ionización versus ratio T_R/T calculado utilizando las ecuaciones 6.8 & 6.9 de autoionización en el balance de ATMED CR para plasmas en NLTE de hierro a $T=150 \text{ eV}$, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.21b. Poblaciones 2s & 2p versus ratio T_R/T , calculadas utilizando la ecuación 6.8 de autoionización en el balance de ATMED CR para plasmas en NLTE de hierro a $T=150 \text{ eV}$, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.22a. Grado medio de ionización versus ratio T_R/T calculado utilizando las ecuaciones 6.8 & 6.9 de autoionización en el balance de ATMED CR y [17] para plasmas de hierro a $T=150 \text{ eV}$, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.22b. Poblaciones 2s & 2p versus ratio T_R/T , calculadas utilizando la ecuación 6.8 de autoionización en el balance de ATMED CR y [17] para plasmas en NLTE de hierro a $T=150 \text{ eV}$, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.23a. Grado medio de ionización versus factor de dilución X_{dil} , calculado utilizando las ecuaciones 6.8 y 6.9 de autoionización en ATMED CR para plasmas en NLTE de hierro a $T=150$ eV, $N_e=2E+19$ cm⁻³ y $T_R=165$ eV.

Fig. 6.23b. Poblaciones 2s & 2p versus factor de dilución X_{dil} , calculado utilizando la ecuación 6.8 de autoionización en ATMED CR para plasmas en NLTE de hierro a $T=150$ eV, $N_e=2E+19$ cm⁻³ y $T_R=165$ eV.

Fig. 6.24a. Grado medio de ionización versus factor de dilución X_{dil} , calculado utilizando las ecuaciones 6.8 y 6.9 de autoionización en ATMED CR y Ref.[17] para plasmas de hierro a $T=150$ eV, $N_e=2E+19$ cm⁻³ y $T_R=165$ eV.

Fig. 6.24b. Poblaciones 2s & 2p versus factor de dilución X_{dil} , calculado utilizando la ecuación 6.8 de autoionización en ATMED CR y Ref. [17] para plasmas de hierro a $T=150$ eV, $N_e=2E+19$ cm⁻³ y $T_R=165$ eV.

La tasa de captura dielectrónica se calcula por balance detallado con la autoionización considerando el potencial químico del plasma:

$$R_{ij}^{ck} = A_{ji}^{kc} \exp[-\beta_e (\epsilon_k + \epsilon_j - \epsilon_i - \mu_e)] \quad (6.12)$$

Se obtienen valores similares de ionización media para los plasmas de hierro en las condiciones analizadas considerando ambas fórmulas según las Ecuaciones 6.8-6.9, excepto para valores bajos del ratio T_R/T o factor de dilución. Para elementos de mayor número atómico, oro o tungsteno, y altas temperaturas, no es conveniente el uso de la Ecuación (6.9) en el balance de ATMED CR, ya que sobreestima la ionización media alcanzando valores en algunos casos próximos a los obtenidos en régimen LTE.

Se obtienen mayores valores debido al diferente orden de magnitud de la constante en las fórmulas, $1E+17$ o $1E+14$, ya que las tasas de autoionización son más altas con la Ecuación (6.9) que con la Ecuación (6.8) en caso de plasmas de alto número atómico. Tal y como se detalló en el apartado 5.1, el código puede utilizar dos opciones para la sección eficaz de absorción de fotones en líneas correspondientes a transiciones electrónicas ligado-ligado entre orbitales con desdoblamiento nlj :

$$\sigma^{bb}(h\nu) = 2\pi^2 \alpha a_0 e^2 f_{kk'} S_{kk'}(h\nu) \quad (6.13)$$

$$\sigma_{bb}(h\nu) = \frac{\pi h e^2}{m_e c} \sum_{kk'} P_k f_{kk'} S_{kk'}(h\nu) \quad (6.14)$$

Donde $f_{kk'}$ es la fuerza de oscilador relativista en términos de polinomios Laguerre [11]. El perfil de línea $S_{kk'}$ incluye los ensanchamientos natural, Doppler, colisional (Stark) y dielectrónico.

La Ecuación (6.13), proporciona una estructura de líneas más discreta y retiene en el espectro líneas de alta intensidad entre orbitales relativistas del átomo medio, lo que podría ser equivalente a aplicar el formalismo MUTA (Mixed Unresolved Transition Array) en los códigos detallados basados en configuraciones iónicas. La Ecuación (6.14) es un perfil promedio de la Ecuación (6.13) y proporciona características generales del espectro de absorción, siendo equivalente al formalismo UTA (Unresolved Transition Array). Implica un agrupamiento estadístico de líneas en matrices de transiciones no resueltas dando lugar a mayores valores de opacidad media de Rosseland (K_R), que es muy sensible a los valles de la opacidad frecuencial. En general, existe mayor grado de acuerdo para la opacidad media de Planck (K_P) entre secciones eficaces. En la Figuras 6.25÷6.27, se ilustran espectros de opacidad para plasmas de hierro a la temperatura electrónica $T_e=150$ eV y densidad electrónica $N_e=2.0E+19 \text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.25. Opacidad frecuencial (cm^2/g) versus energía fotónica (eV) para plasmas de hierro a $T=150$ eV, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$, $T_R=165$ eV y $X_{\text{dil}}=1$, con secciones de absorción ligado-ligado MUTA & UTA.

Figura 6.26. Opacidad frecuencial (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para plasmas de hierro a $T=150$ eV, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$, $T_R=165$ eV y $X_{\text{dil}}=1\div 0.05$, con sección de absorción ligado-ligado UTA.

Figura 6.27. Opacidad frecuencial (cm^2/g) versus energía fotónica (eV) para plasmas de hierro a $T_e=150$ eV, $N_e=2\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$, $T_R=120\div 210$ eV, con sección de absorción ligado-ligado UTA (superior) o MTA (inferior).

La Ecuación (6.14) es el perfil promedio de la Ecuación (6.13) y también pueden observarse las diferencias entre las opacidades frecuenciales del plasma con diferentes temperaturas de radiación y factores de dilución con ambas secciones eficaces de absorción ligado-ligado. En las Figuras 6.28-6.29, se pueden observar cálculos y tendencias de opacidades medias de Rosseland y Planck con T_R y X_{dil} para los plasmas de hierro con ambas secciones eficaces ligado-ligado.

Figura 6.28. Opacidades medias K_R y K_P (cm^2/g) versus ratio T_R/T para plasmas de hierro a $T=150$ eV, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$ calculadas con secciones de absorción ligado-ligado MUTA & UTA.

Figura 6.29. Opacidades medias K_R y K_P (cm^2/g) versus factor de dilución X_{dil} , para plasmas de hierro a $T=150$ eV, $T_R=165$ eV, $N_e=2E+19 \text{ cm}^{-3}$ calculadas con secciones de absorción ligado-ligado MUTA & UTA.

6.1.4.2 Plasmas de Hierro NLTE-9

Se ilustran en este apartado los resultados de ATMED CR para plasmas de hierro ($T_e=30\div 4000$ eV, $N_e=10^{14}\div 10^{24}$ cm⁻³) propuestos en la reunión científica de modelos colisionales radiativos del año 2015 [35]. Las propiedades fundamentales calculadas con ATMED CR para algunos plasmas de hierro del Workshop NLTE-9 se indican en la [Tabla 6.11](#):

Tabla 6.11a: Propiedades de plasmas de hierro del Workshop NLTE-9 a $N_e=10^{14}$ cm⁻³.

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	L (cm)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Fza. Osc. Ligado-Libre	n Máximo	C_{auto} (s ⁻¹)	Z_{bar} ATMED CR	RPL (erg/cm ³ .s)
30	-	-	-	1.234E-09	1.0E+14	nl	6	WO	7.5150E+00	2.453895E+09
60	-	-	-	1.050E-09	1.0E+14	nl	6	WO	8.8424E+00	4.284366E+09
120	-	-	-	8.500E-10	1.0E+14	nl	6	WO	1.0924E+01	4.098812E+09
200	-	-	-	5.900E-10	1.0E+14	nl	6	WO	1.5718E+01	5.620914E+09
400	-	-	-	5.830E-10	1.0E+14	nl	6	WO	1.5911E+01	2.447807E+10
700	-	-	-	5.830E-10	1.0E+14	nl	6	WO	1.5923E+01	4.170754E+10
1000	-	-	-	5.824E-10	1.0E+14	nl	6	WO	1.5928E+01	5.012127E+10
2000	-	-	-	5.810E-10	1.0E+14	nl	6	WO	1.5981E+01	5.497349E+10
2000	-	-	-	3.865E-10	1.0E+14	n	6	WO	2.400E+01	1.656458E+10
4000	-	-	-	7.300E-10	1.2E+14	nl	6	10 ¹⁴	1.600E+01	2.599862E+09

Para temperaturas electrónicas superiores a 1000 eV en régimen corona $N_e=10^{14}$ cm⁻³, se observa la gran influencia en los cálculos de la fuerza de oscilador ligado libre en los procesos de autoionización y recombinación dielectrónica, obteniendo una diferencia a $T_e=2000$ eV en el grado de ionización media de 8 (15.981 $\rightarrow$ 24), según la dependencia de este parámetro sólo del número cuántico principal n ($Z_{bar}=24$) o también del orbital l ($Z_{bar}=15.981$).

Tabla 11.11b: Propiedades de plasmas de hierro del Workshop NLTE-9.

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	L (cm)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Fza. Osc. Ligado-Libre	n Máximo	C_{auto} (s ⁻¹)	Z_{bar} ATMED CR	RPL (erg/cm ³ .s)
2000	-	-	-	5.544E-05	1.0E+19	nl	6	10 ¹⁴	1.6726E+01	7.540099E+17
2000	-	-	-	4.750E-05	1.0E+19	nl	6	10 ¹⁷	1.9539E+01	2.473884E+18
4000	-	-	-	5.058E-05	1.0E+19	nl	6	10 ¹⁴	1.8334E+01	2.299135E+18
4000	-	-	-	4.046E-05	1.0E+19	nl	6	10 ¹⁷	2.2921E+01	3.990993E+18
2000	250	0.02	-	4.200E-05	1.0E+19	nl	6	10 ¹⁴	2.2212E+01	4.866478E+17
2000	250	0.02	-	4.120E-05	1.0E+19	nl	10	10 ¹⁷	2.2511E+01	1.128626E+23
4000	250	0.02	-	4.080E-05	1.0E+19	nl	6	10 ¹⁴	2.2945E+01	3.495627E+17
4000	250	0.02	-	4.000E-05	1.0E+19	nl	10	10 ¹⁷	2.3381E+01	3.139872E+23
2000	-	-	-	3.896E-02	1.0E+22	nl	6	10 ¹⁷	2.3801E+01	4.038936E+22
2000	-	-	-	3.900E-02	1.0E+22	nl	10	10 ¹⁷	2.3804E+01	4.787195E+23
4000	-	-	-	3.880E-02	1.0E+22	nl	6	10 ¹⁷	2.3901E+01	7.372447E+22
4000	-	-	-	3.880E-02	1.0E+22	nl	10	10 ¹⁷	2.3906E+01	3.596672E+23
2000	-	-	-	3.875E+00	1.0E+24	nl	6	10 ¹⁴	2.3933E+01	5.698020E+26
2000	-	-	-	3.876E+00	1.0E+24	nl	6	10 ¹⁷	2.3926E+01	1.332884E+27
2000	-	-	-	3.876E+00	1.0E+24	nl	10	10 ¹⁷	2.3929E+01	2.713013E+27
4000	-	-	-	3.831E+00	1.0E+24	nl	6	10 ¹⁴	2.4208E+01	6.645094E+26
4000	-	-	-	3.821E+00	1.0E+24	nl	6	10 ¹⁷	2.4268E+01	1.910314E+27
4000	-	-	-	3.821E+00	1.0E+24	nl	10	10 ¹⁷	2.4274E+01	5.097153E+27

Para temperaturas electrónicas bajas 30, 60 eV en régimen colisional radiativo $N_e=10^{19} \text{ cm}^{-3}$, se observa la gran influencia en los cálculos de la inclusión o no de los procesos de fotoionización y fotorecombinación en orbitales internos. Los valores de Z_{bar} correctos serán los experimentales por lo que habría que modificar y ajustar en todos los códigos el cálculo de la fotoionización y de la fotorecombinación [35].

Tabla 6.11c: Propiedades de plasmas de hierro del Workshop NLTE-9 a $N_e=10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	L (cm)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Fza. Osc. Ligado-Libre	Con/Sin (W/WO) Fotoioniz./rec.	C_{auto} (s ⁻¹)	Z_{bar} ATMED CR	RPL (erg/cm ³ .s)
30	250	0.02	-	1.030E-04	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁴	9.0470E+00	3.418828E+18
30	250	0.02	-	3.908E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁴	2.3764E+01	5.710659E+16
60	250	0.02	-	6.020E-05	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁴	1.5426E+01	9.637892E+17
60	250	0.02	-	4.050E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁴	2.2897E+01	2.678729E+17
120	250	0.02	-	4.420E-05	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁴	2.0989E+01	4.847182E+17
120	250	0.02	-	4.230E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁴	2.1928E+01	4.638626E+17
200	250	0.02	-	4.300E-05	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁴	2.1615E+01	5.377552E+17
200	250	0.02	-	4.350E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁴	2.1317E+01	5.446618E+17
400	250	0.02	-	4.400E-05	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁴	2.1124E+01	5.881499E+17
400	250	0.02	-	4.445E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁴	2.0863E+01	5.794220E+17
1000	250	0.02	-	4.350E-05	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁴	2.1462E+01	5.709245E+17
1000	250	0.02	-	4.376E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁴	2.1193E+01	5.667802E+17
2000	250	0.02	-	4.160E-05	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁷	2.2430E+01	5.082390E+17
2000	250	0.02	-	4.138E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁷	2.2410E+01	5.068635E+17
4000	250	0.02	-	4.000E-05	1.0E+19	nl	W	10 ¹⁷	2.3323E+01	2.575388E+17
4000	250	0.02	-	3.977E-05	1.0E+19	nl	WO	10 ¹⁷	2.3318E+01	2.544067E+17

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	L (cm)	N_e (cm⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ATOMIC_SCAL	Z_{bar} CRETIN	Z_{bar} FLYCHK	Z_{bar} SCRAM
30	250	0.02	-	1.0E+19	2.3764E+01*	2.394e+01	2.116e+01	2.152e+01	2.179e+01
60	250	0.02	-	1.0E+19	2.2897E+01*	2.397e+01	2.186e+01	2.202e+01	2.216e+01
120	250	0.02	-	1.0E+19	2.1928E+01*	2.398e+01	2.216e+01	2.221e+01	2.240e+01
200	250	0.02	-	1.0E+19	2.1615E+01	2.399e+01	2.231e+01	2.223e+01	2.253e+01
400	250	0.02	-	1.0E+19	2.1124E+01	2.399e+01	2.245e+01	2.234e+01	2.274e+01
700	250	0.02	-	1.0E+19	2.1220E+01	2.400e+01	2.293e+01	2.290e+01	2.319e+01
1000	250	0.02	-	1.0E+19	2.1462E+01	2.400e+01	2.333e+01	2.335e+01	2.352e+01
2000	250	0.02	-	1.0E+19	2.2430E+01	2.401e+01	2.377e+01	2.383e+01	2.385e+01
4000	250	0.02	-	1.0E+19	2.3323E+01	2.418e+01	2.406e+01	2.410e+01	2.412e+01
T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	L (cm)	N_e (cm⁻³)	Z_{bar} ATLANTIS	Z_{bar} DEDALE	Z_{bar} DLAYZ	Z_{bar} CRAC	Z_{bar} THERMOS
30	250	0.02	-	1.0E+19	2.167e+01	2.204e+01	2.217e+01	2.250e+01	2.196e+01
60	250	0.02	-	1.0E+19	2.223e+01	2.236e+01	2.247e+01	2.271e+01	2.244e+01
120	250	0.02	-	1.0E+19	2.303e+01	2.242e+01	2.257e+01	2.271e+01	2.236e+01
200	250	0.02	-	1.0E+19	2.339e+01	2.236e+01	2.258e+01	2.269e+01	2.219e+01
400	250	0.02	-	1.0E+19	2.365e+01	2.247e+01	2.275e+01	2.295e+01	2.232e+01
700	250	0.02	-	1.0E+19	2.380e+01	2.301e+01	2.322e+01	2.338e+01	2.293e+01
1000	250	0.02	-	1.0E+19	2.387e+01	2.341e+01	2.354e+01	2.362e+01	2.332e+01
2000	250	0.02	-	1.0E+19	2.396e+01	2.379e+01	2.385e+01	2.386e+01	2.367e+01
4000	250	0.02	-	1.0E+19	2.413e+01	2.403e+01	2.420e+01	2.414e+01	2.392e+01

* Sin incluir en los cálculos los procesos de fotoionización y fotorecombinación.

En las Figuras 6.30-6.33, se ilustran espectros de opacidad para plasmas de hierro a la temperatura electrónica $T_e=T_e=1000$ eV, temperatura de radiación $T_R=250$ eV, factor de dilución $X_{Dil}=0.02$ y densidad electrónica $N_e=1.0E+19$ cm⁻³. La Ecuación (6.14) (formalismo UTA) es el perfil promedio de la Ecuación (6.13) (formalismo MUTA) y también pueden observarse las diferencias entre las opacidades frecuenciales del plasma con diferentes temperaturas electrónicas.

Figura 6.30. Opacidad frecuencial (cm²/g) versus energía fotónica (eV) para plasmas de hierro a $T_e=T=1000$ eV, $N_e=1E+19$ cm⁻³, $T_R=250$ eV y $X_{dil}=0.02$, con secciones de absorción ligado-ligado MUTA & UTA.

Figura 6.31. Opacidad frecuencial (cm²/g) versus energía fotónica (eV) para plasmas de hierro a $N_e=1E+19$ cm⁻³, $T_R=250$ eV, $X_{dil}=0.02$ y $T_e=T=200/400/1000/4000$ eV, con secciones de absorción ligado-ligado UTA.

Figura 6.32. Opacidad frecuencial (cm²/g) versus energía fotónica (eV) para plasmas de hierro a $N_e=1E+19$ cm⁻³, $T_R=250$ eV, $X_{dil}=0.02$ y $T_e=T=200/1000$ eV, con secciones de absorción ligado-ligado MUTA.

Figura 6.33. Opacidad frecuencial (cm²/g) versus energía fotónica (eV) para plasmas de hierro a $N_e=1E+19$ cm⁻³, $T_R=250$ eV, $X_{dil}=0.02$ y $T_e=T=120/2000$ eV, con secciones de absorción ligado-ligado MUTA.

En las Figuras 6.34-6.35, se pueden observar cálculos de opacidades medias de Rosseland y Planck para los plasmas de hierro con ambas secciones eficaces ligado-ligado.

Figura 6.34. Opacidades medias K_R y K_P (cm^2/g) versus temperatura electrónica para plasmas de hierro a $T_R=250$ eV, $X_{\text{dil}}=0.02$ y $N_e=1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$ calculadas con secciones de absorción ligado-ligado MUTA & UTA.

Figura 6.35. Opacidades medias K_R y K_P (cm^2/g) versus temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1\text{E}+24 \text{ cm}^{-3}$ calculadas con secciones de absorción ligado-ligado MUTA & UTA.

La magnitud de la constante en la fórmula de Albritton para el proceso de autoionización $C_{\text{auto}}=10^{14} \div 10^{17}$, ver [Tabla 6.11b](#), se hace menos significativa en estas condiciones:

- Conforme aumenta la densidad, puesto que los procesos de excitación y desexcitación colisional ganan en importancia respecto a los de autoionización y recombinación dielectrónica. Así por ejemplo, a la densidad electrónica $1\text{E}+24 \text{ cm}^{-3}$, el poblamiento de orbitales está determinado fundamentalmente por procesos de excitación y desexcitación colisional, mientras que a $1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$ por procesos de autoionización y recombinación dielectrónica así como de emisión espontánea, ver [Figuras 6.36-6.37](#).

Figura 6.36. Evolución de tasas de poblamiento (s^{-1}) de orbitales relativistas con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.37. Evolución de tasas de poblamiento (s^{-1}) de orbitales relativistas con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1\text{E}+24 \text{ cm}^{-3}$.

- En plasmas fotoionizados ya que los procesos de fotoexcitación y fotodesexcitación entran en el balance colisional radiativo y pueden resultar de mayor orden de magnitud que los de autoionización y recombinación dielectrónica. Así por ejemplo, a la densidad electrónica $1\text{E}+19\text{ cm}^{-3}$ y a la temperatura de radiación 250 eV, el desdoblamiento de orbitales está determinado fundamentalmente a altas temperaturas por procesos de fotoexcitación y fotodesexcitación, mientras que a la temperatura de radiación 0 eV por procesos de autoionización y recombinación dielectrónica, de excitación y desexcitación colisional así como de emisión espontánea, ver Figuras 6.38-6.39.

Fig. 6.38. Evolución de tasas de desdoblamiento (s^{-1}) de orbitales relativistas con la T^a electrónica para plasmas de hierro a $T_R=250\text{ eV}$, $X_{\text{dil}}=0.02$ y $N_e=1\text{E}+19\text{ cm}^{-3}$

Fig. 6.39. Evolución de tasas de desdoblamiento (s^{-1}) de orbitales relativistas con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $T_R=0\text{ eV}$, $X_{\text{dil}}=0$ y $N_e=1\text{E}+19\text{ cm}^{-3}$

Fig. 6.40. Evolución de tasas de desdoblamiento (s^{-1}) de orbitales relativistas con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1\text{E}+14\text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.41. Evolución de tasas de desdoblamiento (s^{-1}) de orbitales relativistas con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1\text{E}+24\text{ cm}^{-3}$.

Se comprueba también que las tendencias de las tasas de los procesos atómicos versus temperatura electrónica y densidad electrónica, son cómo deben en un modelo colisional radiativo. Así por ejemplo, a la densidad electrónica $1\text{E}+24\text{ cm}^{-3}$, el despoblamiento de orbitales está determinado fundamentalmente por procesos de excitación y desexcitación colisional, mientras que en el régimen corona a $1\text{E}+14\text{ cm}^{-3}$ por procesos de autoionización y recombinación dielectrónica así como de emisión espontánea, ver Figuras 6.40-6.41. En el régimen corona, la ionización colisional es 10^8 veces inferior a la emisión espontánea y es despreciable el orden de magnitud de la recombinación colisional.

Se obtiene en los cálculos un alto orden de magnitud de las tasas de recombinación a bajas temperaturas (30, 60 & 120 eV) en orbitales internos (1÷4), ya que en ellos se crean vacantes por procesos de fotoexcitación hacia orbitales más externos y fotoionización, de tal forma que el campo de radiación actúa de forma semejante a un láser de electrones libres que arranca electrones ligados en capas profundas del átomo. Para orbitales más externos al número 4 ($2p_{3/2}$), las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación son más importantes que la fotorecombinación. A temperaturas electrónicas superiores a 120 eV, las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación son ya más importantes que la fotorecombinación para todos los orbitales (1÷36). Las tasas de fotoionización y fotorecombinación son más importantes que las de ionización colisional y recombinación a tres cuerpos respectivamente prácticamente para todos los orbitales a $T_e=120\text{ eV}$ (Figuras 6.42-6.43).

Fig. 6.42. Evolución de las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación, excitación y desexcitación colisional (s^{-1}) según el orbital relativista a $T=120\text{ eV}$, $T_R= 250\text{ eV}$.

Fig. 6.43. Evolución de ionización, recombinación colisional, fotoionización y fotorecombinación (s^{-1}) según el orbital relativista a $T=120\text{ eV}$, $T_R= 250\text{ eV}$.

Se obtiene en los cálculos un mayor porcentaje de las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación que pueblan los orbitales relativistas que de fotorecombinación a la baja temperatura electrónica $T=30\text{ eV}$ para los orbitales externos ($3s_{1/2} - 5d_{5/2} - 6h_{11/2}$), pero menor para los orbitales internos ($2s_{1/2} - 2p_{1/2} - 2p_{3/2}$). Pero por ejemplo, para la alta temperatura electrónica $T_e=1000\text{ eV}$, las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación que pueblan los orbitales relativistas son más importantes que las de fotorecombinación para todos estos orbitales ($2s_{1/2} - 2p_{1/2} - 2p_{3/2} - 3s_{1/2} - 5d_{5/2} - 6h_{11/2}$), ver Figuras 6.44-6.45.

Se obtiene en los cálculos un mayor porcentaje de las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación que despueblan los orbitales relativistas que de excitación y desexcitación colisional a la baja temperatura electrónica $T_e=30$ eV para los orbitales internos ($2s_{1/2} - 2p_{1/2} - 2p_{3/2}$), pero menor para los orbitales externos ($3s_{1/2} - 5d_{5/2} - 6h_{11/2}$). Dichas tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación generan vacantes en orbitales internos posibilitando la fotorecombinación. Pero por ejemplo, para la alta temperatura electrónica $T_e=1000$ eV, las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación que despueblan los orbitales relativistas son más importantes que las de excitación y desexcitación colisional para todos estos orbitales ($2s_{1/2} - 2p_{1/2} - 2p_{3/2} - 3s_{1/2} - 5d_{5/2} - 6h_{11/2}$), ver Figuras 6.46-6.47.

Figura 6.44. Evolución de tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación de poblamiento de orbitales relativistas (s^{-1}) con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $T_R=250$ eV, $X_{dil}=0.02$ y $N_e=1E+19$ cm^{-3} .

Figura 6.45. Evolución de tasas de fotorecombinación (s^{-1}) de poblamiento de orbitales relativistas con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $T_R=250$ eV, $X_{dil}=0.02$ y $N_e=1E+19$ cm^{-3} .

Figura 6.46. Evolución de tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación de despoblamiento (s^{-1}) de orbitales relativistas con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $T_R=250$ eV, $X_{dil}=0.02$ y $N_e=1E+19$ cm^{-3} .

Figura 6.47. Evolución de tasas de excitación y desexcitación colisional de despoblamiento (s^{-1}) de orbitales con la temperatura electrónica para plasmas de hierro a $T_R=250$ eV, $X_{dil}=0.02$ y $N_e=1E+19$ cm^{-3} .

El coeficiente de emisión del plasma con estructura de líneas discretas (formalismo MUTA) para orbitales del átomo medio, se puede calcular considerando secciones eficaces de emisión como en la Ecuación (5.22). La Ecuación (5.24) puede ser utilizada como un promedio de la emisión con la Ecuación (5.22) para plasmas calculados con ATMED CR en régimen LTE o NLTE, lo que equivale a utilizar el formalismo UTA y la ley de Kirchhoff. Se comprueba por ejemplo como varía el espectro de emisividad con la temperatura a la densidad electrónica $1\text{E}+22\text{ cm}^{-3}$, ver Figuras 6.48÷6.51.

Figura 6.48. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda $10\div18\text{ Å}$ para plasmas de hierro a $T_e=T=400\text{ eV}$ y $N_e=1\text{E}+22\text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.49. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda $10\div18\text{ Å}$ para plasmas de hierro a $T_e=T=700\text{ eV}$ y $N_e=1\text{E}+22\text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.50. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda $10\div18\text{ Å}$ para plasmas de hierro a $T_e=T=1000\text{ eV}$ y $N_e=1\text{E}+22\text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.51. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda $10\div18\text{ Å}$ para plasmas de hierro a $T_e=T=4000\text{ eV}$ y $N_e=1\text{E}+22\text{ cm}^{-3}$.

Se comprueba también como varía el espectro de emisividad con la densidad a $T_e=T=1000$ eV, ver [Figura 6.52](#). Al aumentar la densidad el perfil de emisión obtenido con formalismo UTA y la ley de Kirchhoff, promedia mejor el espectro de líneas discretas con formalismo MUTA, si bien el valor de las pérdidas radiativas guarda mayor acuerdo entre ambos formalismos para densidades medias $1E+19 \div 1E+22 \text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.52a. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda 10÷18 Å para plasmas de hierro a $T_e=T=1000$ eV y $N_e=1E+14 \text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.52b. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda 10÷18 Å para plasmas de hierro a $T_e=T=1000$ eV y $N_e=1E+19 \text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.52c. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda 10÷18 Å para plasmas de hierro a $T_e=T=1000$ eV y $N_e=1E+22 \text{ cm}^{-3}$.

Figura 6.52d. Espectro de emisividad en el rango de longitud de onda 10÷18 Å para plasmas de hierro a $T_e=T=1000$ eV y $N_e=1E+24 \text{ cm}^{-3}$.

A continuación, se resumen finalmente las principales conclusiones sobre los resultados de ATMED CR para los plasmas de hierro ($T_e=30 \div 4000$ eV, $N_e=10^{14} \div 10^{24} \text{ cm}^{-3}$) propuestos, ilustrándolos con algunas gráficas representativas incluidas en la base de datos del Workshop NLTE-9.

Grado Medio de Ionización

Para un alto porcentaje de casos, el parámetro Z_{bar} está dentro del rango de los códigos CR detallados, sin estar en ningún caso totalmente fuera de rango, aunque en los plasmas gruesos se obtienen a veces valores sobredimensionados, algo que no ocurría en los plasmas de neón del Workshop NLTE-8, elemento para el cuál los espesores ópticos eran correctos. Para temperaturas electrónicas superiores a 1000 eV en régimen corona $N_e=10^{14} \text{ cm}^{-3}$, según la fuerza de oscilador ligado libre dependa de n o $n\&l$ en los procesos de autoionización y recombinación dielectrónica, se obtiene una diferencia a $T_e=2000 \text{ eV}$ en el grado de ionización media de 8 ($24 \rightarrow 16$), ver [Figura 6.53](#).

Figura 6.53a. Ionización media vs. temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1\text{E}+22 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Figura 6.53b. Ionización media vs. temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1\text{E}+24 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Figura 6.53c. Ionización media vs. temperatura electrónica para plasmas de hierro a $T_R=0 \text{ eV}$, $L_P=0 \text{ cm}$, $N_e=1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Fig. 6.53d. Ionización media vs. temperatura electrónica de plasmas de hierro a $T_R=250 \text{ eV}$, $X_{\text{DIL}}=0.02$, $L_P=0.1 \text{ cm}$, $N_e=1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Tasas Totales de Ionización y Recombinación

Para un alto porcentaje de casos, estas tasas para el átomo medio tienen un orden de magnitud similar respecto a las tasas de iones de los códigos CR detallados, ver [Figura 6.54](#). A veces, los valores de autoionización o recombinación dielectrónica resultan algo mayores porque ATMED CR considera para su cálculo todas las posibles combinaciones de tres orbitales relativistas según sus respectivas energías de ligadura.

Fig. 6.54a. Tasa total de recombinación (s^{-1}) vs. carga del ión para plasmas de hierro a $T_e=200$ eV y $N_e=1E+22$ cm⁻³ (valor único de ATMED CR: círculo negro).

Fig. 6.54b. Tasa total de recombinación (s^{-1}) vs. carga del ión para plasmas de hierro a $T_e=1000$ eV y $N_e=1E+22$ cm⁻³ (valor único de ATMED CR: círculo negro).

Fig. 6.54c. Tasa total de ionización (s^{-1}) vs. carga del ión para plasmas de hierro a $T_e=400$ eV y $N_e=1E+22$ cm⁻³ (valor único de ATMED CR: círculo negro).

Fig. 6.54d. Tasa total de ionización (s^{-1}) vs. carga del ión para plasmas de hierro a $T_e=1000$ eV y $N_e=1E+22$ cm⁻³ (valor único de ATMED CR: círculo negro).

Pérdidas Radiativas

Para un alto porcentaje de casos, el parámetro RPL está aproximadamente dentro del rango de los códigos CR detallados, sin estar en ningún caso totalmente fuera de rango, ver Figuras 6.55-6.56.

Figura 6.55. Pérdidas radiativas vs. temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1E+19 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Figura 6.56. Pérdidas radiativas vs. temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1E+22 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Tiempo de Computación (s)

Para un alto porcentaje de casos, el tiempo de computación es siempre de los más bajos, por lo que puede definirse ATMED CR como un código relativamente rápido teniendo en cuenta que no se utiliza computación paralela, ver Figura 6.57.

Figura 6.57a. Tiempo de computación (s) vs. temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1E+22 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Figura 6.57b. Tiempo de computación (s) vs. temperatura electrónica para plasmas de hierro a $N_e=1E+24 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: cuadrados rojos).

Emisividad

Se representan en las gráficas de la [Figura 6.58](#) espectros de emisividad UTA y MUTA para varios plasmas respecto a la energía fotónica.

Figura 6.58. Espectros de emisividad con ATMED CR UTA y MUTA: (a) plasma de hierro a $T_e=400$ eV y $N_e=1\text{E}+22$ cm^{-3} , (b) plasma de hierro a $T_e=700$ eV y $N_e=1\text{E}+22$ cm^{-3} y (c) plasma de hierro a $T_e=700$ eV y $N_e=1\text{E}+24$ cm^{-3} .

6.1.4.3 Plasmas de Laboratorio Fotoionizados en Hohlraum

Blancos de hierro, níquel y cobre calentados radiativamente en régimen próximo a equilibrio local termodinámico, han sido previamente estudiados utilizando el código de opacidad SCO basado en superconfiguraciones y con medidas experimentales en la instalación LULI2000 (Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses, 2000 J facility) [57].

Los plasmas fueron producidos con muestras compuestas por una capa de metal puro con masas superficiales en el rango $20\div 40\text{ }\mu\text{g}/\text{cm}^2$ dependiendo del elemento. Un haz láser de intensidad $2\times 10^{14}\text{ W}/\text{cm}^2$ y duración 1 ns, fue focalizado por el orificio superior de una cavidad esférica “hohlraum” de oro de 1.2 mm de diámetro durante 500 ps. Las muestras posicionadas sobre la cavidad fueron calentándose por la reemisión cuasi-Planckiana de Rayos-X de la cavidad, ver Figura 6.59.

Fig. 6.59a. Esquema del experimento en LULI2000 [57].

TABLE I. Laser energy and maximum radiation temperature $T_R^{\max}$ from the temporal dependence measured by μDMX for several shots. “mid” is from the measured μDMX curve while “min” and “max” are from the lower and upper bound curves by 1 standard deviation, respectively.

Shot	Element	Laser energy (J)	$T_R^{\min}$ (eV)	T_R^{mid} (eV)	$T_R^{\max}$ (eV)
28	Fe	75	32	38	44
49	Fe	123	40	47.5	55
38	Ni	78	32	38.5	45
31	Cu	64	17.5	22.5	27.5

Fig. 6.59b. Temperaturas de radiación experimentadas por las muestras en diferentes disparos [57].

Los resultados de los códigos SCO y ATMED CR de grado medio de ionización y poblaciones fraccionarias de los orbitales para plasmas de hierro a diferentes temperaturas y densidades se muestran en las Tablas 6.12÷6.16. Se comprueba que sumando sobre el número cuántico relativista j las poblaciones en orbitales nlj calculadas con ATMED CR de la Tabla 6.12, se obtienen las poblaciones totales en las capas nl de las Tablas 6.13-6.14 observándose muy buen grado de acuerdo entre ambos códigos.

Para níquel y cobre existe también gran concordancia de poblaciones en bandas nl (Tablas 6.15÷6.16). El cobre es un elemento químico de símbolo Cu, número atómico $Z = 29$ y peso 63.546 g/mol y el níquel es un elemento químico de símbolo Ni, número atómico $Z = 28$ y peso 58.693 g/mol.

Las cifras numéricas son menos parecidas conforme crece el número cuántico principal de los orbitales, siendo cada vez menores que para capas internas y corresponden a la segunda o tercera cifra decimal ($10^{-2}\div 10^{-3}$), por lo que la exacta coincidencia de valores es prácticamente imposible.

En la [Figura 6.60](#), se representa la transmisión espectral de blancos calculados con ATMED CR, para su comparación con medidas experimentales de transmisión de hierro, níquel y cobre y calculadas con el código SCO [57]. Estos son plasmas ópticamente gruesos, utilizándose la sección eficaz de absorción ligado-ligado de la [Ecuación \(6.13\)](#) (MUTA) dentro del balance colisional radiativo para atrapamiento de la radiación.

Tabla 6.12: Poblaciones fraccionarias relativistas calculadas con ATMED CR de plasmas de hierro ópticamente delgados considerando densidad de materia ρ (mg/cm³), temperatura electrónica T (eV) y temperatura de radiación T_R (eV).

P_k	$T/\rho = 18/4$ $T_R=0$	$T/\rho = 18/4$ $T_R=38$	$T/\rho = 22/4$ $T_R=0$	$T/\rho = 25/4$ $T_R=0$	$T/\rho = 25/4$ $T_R=38$	$T/\rho = 18/10$ $T_R=0$	$T/\rho = 22/10$ $T_R=0$	$T/\rho = 25/10$ $T_R=0$
1s $_{1/2}$	1.992960	1.992960	1.992960	1.992960	1.992960	1.990457	1.990457	1.990457
2s $_{1/2}$	1.968131	1.968131	1.968131	1.968131	1.968131	1.956992	1.956992	1.956992
2p $_{1/2}$	1.966621	1.966621	1.966621	1.966621	1.966621	1.954967	1.954967	1.954967
2p $_{3/2}$	3.931814	3.931814	3.931814	3.931814	3.931814	3.908017	3.908017	3.908017
3s $_{1/2}$	1.899837	1.895360	1.880882	1.849371	1.839829	1.869127	1.854604	1.830526
3p $_{1/2}$	1.832796	1.795376	1.722616	1.596739	1.557123	1.808829	1.725928	1.628886
3p $_{3/2}$	3.640525	3.557707	3.396270	3.123743	3.038112	3.593926	3.410835	3.200673
3d $_{3/2}$	0.995652	0.883945	0.787878	0.693500	0.671461	1.194838	0.972557	0.860279
3d $_{5/2}$	1.454394	1.282899	1.155226	1.019644	0.983944	1.742395	1.424714	1.263155
4s $_{1/2}$	0.059523	0.061144	0.046280	0.039964	0.040653	0.087863	0.070039	0.060878
4p $_{1/2}$	0.036083	0.036293	0.029110	0.025651	0.025952	0.053785	0.044467	0.039446
4p $_{3/2}$	0.067482	0.067538	0.054544	0.048188	0.048715	0.100619	0.083258	0.073976
4d $_{3/2}$	0.014774	0.014215	0.014095	0.014019	0.014281	0.023617	0.022485	0.022075
4d $_{5/2}$	0.020800	0.019889	0.019775	0.019655	0.019989	0.033400	0.031662	0.031040
4f $_{5/2}$	0.013589	0.013217	0.013650	0.013842	0.014122	0.019905	0.020046	0.020178
4f $_{7/2}$	0.015627	0.015134	0.015752	0.016034	0.016360	0.022808	0.023014	0.023222

Tabla 6.14: Poblaciones fraccionarias de las subcapas nl con n=3 y n=4 calculadas con ATMED CR de plasmas de hierro ópticamente delgados considerando densidad de materia ρ (mg/cm³), temperatura electrónica T (eV) y temperatura de radiación T_R (eV) con factor de dilución 1.

T (eV)	T _R (eV)	ρ (mg/cm ³)	Z _{bar} ATMED	3s ATMED	3p ATMED	3d ATMED	4s ATMED	4p ATMED	4d ATMED	4f ATMED
18	38	4	6.469	1.895	5.353	2.166	0.061	0.104	0.034	0.028
22	38	4	7.239	1.873	4.981	1.824	0.047	0.084	0.034	0.029
25	38	4	7.844	1.839	4.595	1.655	0.040	0.074	0.034	0.030
18	38	10	5.794	1.867	5.362	2.774	0.089	0.155	0.055	0.042
22	38	10	6.579	1.852	5.089	2.328	0.070	0.128	0.054	0.043
25	38	10	7.186	1.827	4.781	2.082	0.061	0.114	0.053	0.043

Tabla 6.15: Poblaciones fraccionarias de las subcapas nl con n=3 calculadas con SCO [Ref. \[57\]](#) y con ATMED CR (ópticamente delgados) de plasmas de níquel considerando densidad de materia ρ (mg/cm³) y temperatura electrónica T (eV).

T (eV)	ρ (mg/cm ³)	Z _{bar} SCO	Z _{bar} ATMED	3s SCO	3s ATMED	3p SCO	3p ATMED	3d SCO	3d ATMED
22	4	7.190	7.051	1.969	1.915	5.431	5.560	2.930	3.312
25	4	7.858	7.706	1.936	1.907	5.087	5.403	2.625	2.849
22	10	6.643	6.538	1.974	1.889	5.499	5.496	3.233	3.814
25	10	7.269	7.165	1.946	1.883	5.203	5.373	2.918	3.351

Tabla 6.16: Poblaciones fraccionarias de las subcapas nl con n=4 calculadas con SCO [Ref. \[57\]](#) y con ATMED CR (ópticamente delgados) de plasmas de cobre considerando densidad de materia ρ (mg/cm³) y temperatura electrónica T (eV).

T (eV)	ρ (mg/cm ³)	Z _{bar} SCO	Z _{bar} ATMED	4s SCO	4s ATMED	4p SCO	4p ATMED	4d SCO	4d ATMED
16	5	5.737	5.568	0.090	0.103	0.130	0.163	0.071	0.055
16	50	4.686	4.308	0.190	0.247	0.297	0.402	0.186	0.171
20	10	6.296	6.164	0.087	0.111	0.142	0.187	0.092	0.074
20	15	6.073	5.936	0.100	0.130	0.164	0.221	0.109	0.091

Se considera una dimensión (cm) característica del plasma y dos formalismos, un factor de escape aplicado a la emisión espontánea o una probabilidad de confinamiento de fotones aplicada a las tasas radiativas en caso de un campo de radiación a temperatura T_R eV, de acuerdo a dicho valor para los disparos registrados en la [Figura 6.59](#) de la referencia [57].

En la [Figura 6.60](#), se pueden observar las características promedio, forma y profundidad, de la transmisión espectral calculada con la sección eficaz de absorción ligado-ligado de la [Ecuación \(6.14\)](#), que guarda un alto grado de acuerdo con el espectro medido experimentalmente y con las estimaciones del código SCO, tal que las estructuras de transiciones 2p-3d se sitúan aproximadamente en la misma posición: alrededor de $10\div 10.2$ Å para el germanio, 13 Å para el cobre, 14 Å para el níquel y 16.5 Å para el hierro. Si el espectro de transmisión es calculado con un código de átomo medio considerando desdoblamiento únicamente según los números cuánticos principal n y orbital l , las estructuras no saldrían en una posición tan exacta, ni en frecuencia ni en anchura, por lo que sería necesario extender el modelo a un código detallado.

Figura 6.60b. Transmisión espectral versus longitud de onda (Å) de una muestra de níquel con masa superficial $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, dimensión 0.002 cm, $T=22/25$ eV, $T_R=38.5$ eV y $\rho=10 \text{ mg}/\text{cm}^3$ con ATMED CR.

Figura 6.60c. Transmisión espectral versus longitud de onda (Å) de plasmas de hierro, níquel y cobre con masa superficial $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, dimensión 0.005 cm, $T=20$ eV y $\rho=4 \text{ mg}/\text{cm}^3$ con ATMED CR.

Figura 6.60d. Transmisión espectral experimental y calculada con SCO versus longitud de onda (Å) de una muestra de níquel con masa superficial $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T=22$ eV, $T_R=38.5$ eV y $\rho=10 \text{ mg}/\text{cm}^3$ [57].

Figura 6.60e. Transmisión espectral medida en el láser LULI2000 vs longitud de onda (Å) de plasmas gruesos de hierro, níquel y cobre con masa superficial $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$. Estructuras 2p-3d indicadas en trazo grueso [57].

En la Figura 6.60f se superponen las Figuras 6.60b y 6.60d y en la Figura 6.60g se superponen las Figuras 6.60c y 6.60e. Se observa un alto grado de acuerdo en el promedio UTA de las estructuras espectrales calculado con ATMED CR.

Figura 6.60f. Transmisión espectral experimental y calculada con SCO y ATMED CR versus longitud de onda (Å) de una muestra de níquel con masa superficial $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T=22/25 \text{ eV}$, $T_R=38.5 \text{ eV}$ y $\rho=10 \text{ mg}/\text{cm}^3$ [57].

Figura 6.60g. Transmisión espectral medida en el láser LULI2000 y calculada con ATMED CR vs longitud de onda (Å) de plasmas gruesos de hierro, níquel y cobre con masa superficial $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ [57].

Figura 6.60h. Transmisión experimental y calculada con SCO/FAC/HULLAC y ATMED CR (azul) versus longitud de onda (Å) de hierro con masa superficial $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T=22 \text{ eV}$, $T_R=38 \text{ eV}$, $D=5\text{E}-3 \text{ cm}$ y $\rho=4 \text{ mg}/\text{cm}^3$ [57].

Figura 6.60i. Transmisión experimental y calculada con SCO/HULLAC y ATMED CR (naranja) versus longitud de onda (Å) de cobre con masa superficial $40 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T=20 \text{ eV}$, $T_R=22.5 \text{ eV}$, $D=8\text{E}-3 \text{ cm}$ y $\rho=5 \text{ mg}/\text{cm}^3$ [57].

Como ATMED CR es un código de átomo medio no se observa la progresiva separación de la estructura de absorción dentro de la transición $2p-3d$ debida a la interacción espín-orbita conforme aumenta el número atómico. Sin embargo se reproduce muy bien en la transmisión el decalaje de dicha estructura con la longitud de onda Å según el número atómico de metales vecinos, [Figura 6.60j](#).

Figura 6.60j. Dependencia de las estructuras $2p-3d$ con el número atómico (Ge-Zn-Cu-Ni-Fe) según experimentos en LULI 2000 y ATMED CR con masa superficial $20\mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T_e=20\text{ eV}$ y $\rho=4\text{ mg}/\text{cm}^3$ (izquierda). Transmisión experimental y calculada con SCO y ATMED CR vs. longitud de onda (Å) de hierro con masa superficial $20\mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T_e=19\text{ eV}$ y $\rho=10\text{ mg}/\text{cm}^3$ (derecha).

Figura 6.60k. Transmisión experimental y calculada con ATMED CR versus longitud de onda (Å) de hierro, nickel, cobre y germanio con $T_e=20\text{ eV}$, T_R según el elemento y $\rho=4\text{ mg}/\text{cm}^3$, $D=0.005\text{ cm}$ para Fe, Ni y Cu y $D=0.02\text{ cm}$ para Ge.

Figura 6.60l. Transmisión experimental de LULI 2000 y calculada con SCO / HULLAC y ATMED CR (rosa) versus longitud de onda (Å) de cobre con masa superficial 40 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T_e=15$ eV y $\rho=5$ mg/cm^3 .

Figura 6.60m. Transmisión experimental de LULI 2000 y calculada con SCO-RCG y ATMED CR (verde) versus longitud de onda (Å) de cobre con masa superficial 40 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$, $T_e=16$ eV, $T_R=22.5$ eV y $\rho=5$ mg/cm^3 .

6.1.4.4 Opacidad Media de Rosseland

En la [Tabla 6.17](#) se observa el gran acuerdo de resultados para plasmas de hierro respecto a K_R con otros códigos y con valores experimentales en régimen LTE. Para cualquier plasma calculado, también puede añadirse la sección eficaz de dispersión Compton a la opacidad total denominada MUTA, tal que se aproximan incluso más los valores de la opacidad media de Rosseland a los del formalismo UTA, manteniéndose la opacidad media de Planck aproximadamente igual ([Figuras 6.61÷6.62](#)).

Tabla 6.17: Propiedades de plasmas de hierro ópticamente delgados con ATMED CR a densidad de materia $\rho=1$ g/cm^3 .

T_e (eV)	T_R (eV)	Z_{bar}	ATMED CR	K_R / K_P (cm^2/g)	UTA K_R / K_P (cm^2/g)	MUTA K_R / K_P (cm^2/g)	LED COP K_R (cm^2/g)	THERMOS K_R (cm^2/g)	Experimental K_R (cm^2/g)
500	500	2.272E+01		8.328E+01/ 4.582E+02	5.110E+01/ 4.582E+02	5.152E+01/ 4.582E+02	74.8	79.60	82 ± 12
750	750	2.372E+01		8.569E+00/ 7.467E+01	4.876E+00/ 5.833E+01	5.308E+00/ 5.833E+01		8.37	7.8 ± 1.0
1000	1000	2.409E+01		2.775E+00/ 6.631E+01	1.208E+00/ 1.468E+01	1.563E+00/ 1.468E+01	2.79	3.14	2.3 ± 0.4
1250	1250	2.479E+01		1.781E+00/ 6.291E+01	6.115E-01/ 6.678E+00	9.469E-01/ 6.678E+00	2.14	2.29	1.3 ± 0.2

Figura 6.61. Opacidad frecuencial (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para plasmas de Fe a $T_e = T_R = 1250$ eV, $\rho = 1$ gcm^{-3} , con formalismo MUTA +/- sección dispersión.

Figura 6.62. Opacidad frecuencial (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para plasmas de Fe a $T_e = T_R = 1250$ eV, $\rho = 1$ gcm^{-3} , con formalismos MUTA + dispersión & UTA.

6.1.4.5 Envoltente Estelar

Se han realizado cálculos comparativos tomando como referencia datos experimentales publicados en el año 2011 cubriendo el rango de bajas densidades y temperaturas [58]. También se han medido los espectros de opacidad de plasmas de hierro durante la campaña 2010 en la instalación LULI para temperaturas comprendidas entre 15 y 40 eV y densidades de $2\div 3$ mg/cm^3 , rango que puede aportar datos acerca de las condiciones en la envoltente de las estrellas.

Tabla 6.18: Propiedades de plasmas de hierro y nickel ópticamente delgados con ATMED CR.

Z	T_e (eV)	ρ (mg/cm^3)	Z_{bar} ATMED OP	Z_{bar} ATMED CR	K_R (cm^2/g) ATMED CR	K_P (cm^2/g) ATMED CR
26	15.3	5.48	5.35	5.27	2.800E+04	7.545E+04
26	27.3	3.39	8.65	8.34	1.913E+04	4.478E+04
26	38.5	2.63	11.2	11.0	6.591E+03	1.751E+04
28	15.3	5.65	5.46	5.31	1.888E+04	6.049E+04
28	27.3	3.67	8.39	8.32	1.866E+04	4.721E+04
28	38.5	2.73	11.3	10.9	1.037E+04	2.364E+04

Estos casos dan lugar a una densidad electrónica $N_e = 3.16 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Los resultados de ATMED CR y del denominado Proyecto de Opacidades ("Opacity Project", OP) para estos experimentos se muestran en la [Tabla 6.18](#). Las diferencias en el grado medio de ionización implican diferencias en las distribuciones de las especies iónicas y sugieren diferencias en la opacidad dependiente de la frecuencia para cada condición termodinámica. Por ejemplo, la densidad de electrones libres del código AA_Z_p se expresa mediante una descripción cuántica y la definición para el código AA_Z_M involucra solamente la densidad electrónica en la frontera del ión esfera, aún siendo ambos códigos de átomo medio. Se puede observar que los valores de opacidades medias de Rosseland y Planck obtenidos con ATMED CR son similares a los de otros códigos. Es conveniente fijarse en la comparación con el código CASSANDRA de átomo medio. Aunque los grados de ionización se calculen con gran exactitud, no ocurre lo mismo con los valores de opacidades medias si bien los órdenes de magnitud son correctos y comparables a otros códigos [58].

Tabla 6.19: Opacidad media de Rosseland de plasmas de hierro y níquel a densidad $3.4\text{E-}3 \text{ g/cm}^3$.

Z	T _e (eV)	K _R (cm ² /g) ATMED CR	K _R (cm ² /g) STA	K _R (cm ² /g) OP	K _R (cm ² /g) CASSANDRA	K _R (cm ² /g) OPAS
26	15.3	25400	19330	8160	27650	18906
26	27.3	19130	20500	14642	20250	23323
28	15.3	17100	11910	5910	19370	-
28	27.3	18380	20180	5990	19110	-

Tabla 6.20: Opacidad media de Rosseland de plasmas de hierro y níquel a densidad $3.4\text{E-}3 \text{ g/cm}^3$.

Z	T _e (eV)	K _R (cm ² /g) SCO-RCG	K _R (cm ² /g) LEDCOP	K _R (cm ² /g) ATOMIC Full CI	K _R (cm ² /g) ATOMIC Int. Coupling	K _R (cm ² /g) HULLAC Full CI
26	15.3	18209	18578	-	-	-
26	27.3	19335	18790	13759	17777	13500
28	15.3	11695	-	-	-	-
28	27.3	19737	-	9360	16938	-

Full CI : Interacción total entre configuraciones (Full Configuration Interaction).

Int. Coupling: Acoplamiento intermedio entre configuraciones (Intermediate Coupling).

En los plasmas de hierro, níquel y otros números atómicos con Z en el rango $6 \div 29$, calculados en las típicas condiciones de las envolventes estelares, se pone de manifiesto que aún teniendo el mismo orden de magnitud ($K_R \sim 10^3 \div 10^4$), existe un gran margen de resultados relativos a la opacidad media de Rosseland [58], por comparación con los códigos que constituyen el consorcio del denominado Proyecto de Opacidad (“Opacity Project” OP, OPAL, OPAS, LEDCOP, STA, etc.). Esta magnitud es muy significativa en cálculos astrofísicos. Para entender las diferencias en la opacidad de Rosseland habría que comparar el modelo de opacidad total, el conjunto de configuraciones incluidas, el esquema estadístico de la estructura atómica, los perfiles de línea y las aproximaciones de cada código (Tablas 6.19-6.20). Su convergencia es mayor cuánto mayor es la temperatura. También el margen es grande dentro del mismo orden de magnitud para la opacidad media de Planck.

Análogamente, las características espectrales de la opacidad difieren entre códigos cuando se analizan en un rango muy pequeño de energías fotónicas $0 \div 200 \text{ eV}$ (Figura 6.63), como consecuencia de las distintas aproximaciones contenidas en cada uno de ellos. Un código STA interpola suavemente entre los resultados del modelo de átomo medio y el de configuración detallada o nivel detallado.

Los códigos CASSANDRA, STA, ATMED CR, AA_Z_p, AA_Z_M muestran estructuras espectrales UTA más sencillas y desplazadas en energía respecto a los códigos detallados debido a su más simplificado nivel de descripción de la estructura atómica y a la gran cantidad de líneas separadas en el espectro. No obstante, ATMED CR presenta unas características espectrales que promedian los perfiles de los diferentes códigos tal que las discrepancias entre todos son similares gráficamente. Se observa que entre los modelos pueden existir variaciones de hasta el 50% en la intensidad de algunas transiciones.

Figura 6.63a. Opacidad espectral (cm^2/g) según varios códigos incluyendo ATMED CR (línea naranja) [58].

Figura 6.63b. Opacidad espectral (cm^2/g) según varios códigos incluyendo ATMED CR (línea verde) [58].

6.1.4.6 Experimento Temporal con Dos Hohltraums

Se han realizado numerosos experimentos para la medida de datos de opacidad relevantes en astrofísica. La región de interés más importante para el estudio de las pulsaciones en las estrellas que dan lugar a las envolventes variables de las denominadas cefeidas “Cepheids”, corresponde a temperaturas de 20 eV y densidades equivalentes en el hierro del orden de $1\text{E-}4\text{ g/cm}^3$ [1-59].

Fig. 6.64a. Esquema de un blanco de hierro en un hohlraum de potencia pulsada Z-pinch en la instalación Saturn [1-59].

Figura 6.64b. Temperatura de radiación medida en el hohlraum secundario experimentalmente [59].

El esquema del experimento se ilustra en la [Figura 6.64a](#). Consiste en un hohlraum primario que calienta otro hohlraum secundario proporcionando éste último una fuente de radiación para la muestra de hierro. La instalación Saturn de potencia pulsada de 9 MA se utiliza para que un array de 24 cables de tungsteno en configuración Z-Pinch produzcan una implosión de 30 TW de potencia liberada equivalente a 400 kJ de energía a través de Rayos X, contenida en un hohlraum primario de paredes de oro. Se genera un temperatura de radiación pico de 70 eV, y mediante un dispositivo se controla y ajusta el flujo de energía para conseguir la deseada temperatura de radiación de 20 eV en el hohlraum secundario. Las muestras blanco están compuestas por $\text{FeO}_{0.41}$ con $6.5\text{ }\mu\text{g/cm}^2$ de $\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_{1.68}$ como “tamper” o envoltorio para conseguir un régimen de equilibrio local termodinámico.

La duración aproximada de 20 ns de la temperatura de radiación de 20 eV del hohlraum secundario, es lo suficientemente grande como para producir equilibrio termodinámico en la muestra con una distribución planckiana a dicha T_R , realizándose a los 40 ns la medida experimental de la opacidad (ver flecha en [Figura 6.64b](#)). La evolución temporal de la ionización media del plasma de hierro según ATMED CR, a diferentes densidades y según el perfil temporal de temperatura de radiación que experimenta la muestra de hierro ([Figura 6.64b](#)), se indica en la [Tablas 6.21÷6.24](#) con valores muy acordes respecto a los de la [Figura 6.64c](#).

Figura 6.64c. Ionización media temporal del hierro a varias densidades según condiciones de Ref. [59].

Tabla 6.21: Evolución temporal con ATMED CR de las propiedades del hierro a $T_e=20$ eV y $\rho=1e-5$ g/cm³.

Tiempo (s)	T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z_{bar}	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)
0.0E+00	20	6	1e-5	8.424220	3.320E+02	4.897E+03
1.0E-08	20	13	1e-5	8.580858	1.164E+03	4.022E+04
2.0E-08	20	18.5	1e-5	9.296062	2.111E+03	4.704E+04
3.0E-08	20	20	1e-5	9.601605	2.412E+03	4.439E+04
4.0E-08	20	20	1e-5	9.601666	2.412E+03	4.439E+04
5.0E-08	20	18.5	1e-5	9.297117	2.111E+03	4.703E+04
6.0E-08	20	17.5	1e-5	9.141176	1.910E+03	4.774E+04
7.0E-08	20	16.5	1e-5	8.979468	1.730E+03	4.779E+04
8.0E-08	20	15.5	1e-5	8.836509	1.563E+03	4.689E+04
9.0E-08	20	15	1e-5	8.773356	1.482E+03	4.606E+04
1.0E-07	20	14.5	1e-5	8.716450	1.402E+03	4.497E+04

Tabla 6.22: Evolución temporal con ATMED CR de las propiedades del hierro a $T_e=20$ eV y $\rho=1e-4$ g/cm³.

Tiempo (s)	T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z_{bar}	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)
0.0E+00	20	6	1e-4	8.257455	1.567E+03	6.417E+03
1.0E-08	20	13	1e-4	8.279163	4.936E+03	4.167E+04
2.0E-08	20	18.5	1e-4	8.390976	7.688E+03	5.287E+04
3.0E-08	20	20	1e-4	8.442459	8.186E+03	5.265E+04
4.0E-08	20	20	1e-4	8.442506	8.186E+03	5.265E+04
5.0E-08	20	18.5	1e-4	8.392199	7.687E+03	5.286E+04
6.0E-08	20	17.5	1e-4	8.363087	7.290E+03	5.237E+04
7.0E-08	20	16.5	1e-4	8.338072	6.841E+03	5.127E+04
8.0E-08	20	15.5	1e-4	8.317027	6.342E+03	4.949E+04
9.0E-08	20	15	1e-4	8.307970	6.076E+03	4.831E+04
1.0E-07	20	14.5	1e-4	8.299840	5.800E+03	4.695E+04

Tabla 6.23: Evolución temporal con ATMED CR de las propiedades del hierro a $T_e=20$ eV y $\rho=1e-3$ g/cm³.

Tiempo (s)	T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z_{bar}	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)
0.0E+00	20	6	1e-3	7.278995	7.475E+03	1.410E+04
1.0E-08	20	13	1e-3	7.279021	1.418E+04	4.732E+04
2.0E-08	20	18.5	1e-3	7.286133	1.722E+04	6.083E+04
3.0E-08	20	20	1e-3	7.289779	1.774E+04	6.154E+04
4.0E-08	20	20	1e-3	7.289830	1.774E+04	6.154E+04

Tabla 6.23: Evolución temporal con ATMED CR de las propiedades del hierro a $T_e=20$ eV y $\rho=1e-3$ g/cm³.

Tiempo (s)	T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z_{bar}	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)
5.0E-08	20	18.5	1e-3	7.288360	1.722E+04	6.081E+04
6.0E-08	20	17.5	1e-3	7.286296	1.682E+04	5.976E+04
7.0E-08	20	16.5	1e-3	7.284561	1.637E+04	5.816E+04
8.0E-08	20	15.5	1e-3	7.283091	1.585E+04	5.593E+04
9.0E-08	20	15	1e-3	7.282456	1.556E+04	5.457E+04
1.0E-07	20	14.5	1e-3	7.281898	1.525E+04	5.302E+04

Tabla 6.24: Evolución temporal con ATMED CR de las propiedades del hierro a $T_e=20$ eV y $\rho=1e-2$ g/cm³.

Tiempo (s)	T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z_{bar}	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)
0.0E+00	20	6	1e-2	6.045510	2.379E+04	4.429E+04
1.0E-08	20	13	1e-2	6.045484	2.897E+04	5.796E+04
2.0E-08	20	18.5	1e-2	6.045479	3.377E+04	7.222E+04
3.0E-08	20	20	1e-2	6.045481	3.477E+04	7.353E+04
4.0E-08	20	20	1e-2	6.045485	3.477E+04	7.353E+04
5.0E-08	20	18.5	1e-2	6.045484	3.377E+04	7.222E+04
6.0E-08	20	17.5	1e-2	6.045480	3.302E+04	7.082E+04
7.0E-08	20	16.5	1e-2	6.045475	3.219E+04	6.891E+04
8.0E-08	20	15.5	1e-2	6.045460	3.132E+04	6.648E+04
9.0E-08	20	15	1e-2	6.045443	3.087E+04	6.505E+04
1.0E-07	20	14.5	1e-2	6.045426	3.041E+04	6.348E+04

6.2 Lantánidos

6.2.1 Gadolinio / Neodimio / Otros

El desdoblamiento relativista de los orbitales electrónicos del átomo medio que representa el plasma, mejora el cómputo de fuerzas de oscilador y probabilidades de transiciones electrónicas. La resolución en la malla de energías fotónicas de las propiedades radiativas espectrales como las opacidades, puede ser considerada relativamente precisa en comparación con los modelos detallados DCA/SCA, en términos de posiciones de frecuencia de los picos de absorción de radiación. En la [Tabla 6.25](#) se ilustran los valores de energía (eV) y de opacidad (cm^2/g) para el máximo pico de absorción del espectro de opacidad alrededor de 4^*T_R , para diferentes elementos atómicos susceptibles de ser mezclados con oro [\[60\]](#).

Tabla 6.25a: Energía del máximo pico de absorción alrededor de 1keV para $T_e=250\text{eV}$ y $1\text{g}/\text{cm}^3$.

Energía (eV)	47	27	29	64	60	28	50
Pico ~ 1KeV	Ag	Co	Cu	Gd	Nd	Ni	Sn
ATMED $T_R=0\text{eV}$	713.7	974.6	1125.6	1439.6	1231.8	1047.8	805
ATMED $T_R=100\text{eV}$	713.8	974.8	1125.5	1440	1232	1048	805.1
ATMED $T_R=250\text{eV}$	745	1000	1145.3	1454	1250.6	1069.6	845
ATMED $T_R=300\text{eV}$	763.1	1025.2	1171.5	1478.6	1280.2	1095	871.1
Colombant LTE [60]	767	983	1117	1400	1200	1083	850

Tabla 6.25b: Opacidad espectral a la energía del máximo pico de absorción alrededor de 1keV para $T_e=250\text{eV}$ y $1\text{g}/\text{cm}^3$ calculada con la sección eficaz de absorción ligado-ligado del formalismo UTA.

K (cm^2/g)	47	27	29	64	60	28	50
Pico~1KeV	Ag	Co	Cu	Gd	Nd	Ni	Sn
ATMED $T_R=0\text{eV}$	1.855E+04	2.323E+04	2.509E+04	2.054E+04	2.394E+04	2.541E+04	2.027E+04
ATMED $T_R=100\text{eV}$	1.962E+04	2.366E+04	2.533E+04	2.060E+04	2.408E+04	2.575E+04	2.105E+04
ATMED $T_R=250\text{eV}$	1.703E+04	1.975E+04	2.198E+04	2.111E+04	2.331E+04	2.186E+04	1.768E+04
ATMED $T_R=300\text{eV}$	1.566E+04	1.703E+04	1.847E+04	2.105E+04	2.082E+04	1.859E+04	1.585E+04

Los valores tabulados son muy significativos considerando las típicas condiciones del cilindro hohlraum, temperaturas electrónica y de radiación $T_e=T_R=250$ eV y densidad 1 g/cm^3 , dada la contribución de ese pico a la opacidad media de Rosseland K_R . Cuando las poblaciones en orbitales son calculadas en el balance CR sin un campo externo planckiano de radiación en NLTE, la opacidad (absorción de radiación) del plasma se calcula posteriormente suponiendo un campo de radiación incidente en el plasma a la temperatura electrónica T_e , y el máximo pico de absorción del espectro se desplaza hacia menores valores en la malla de energías fotónicas. Se puede observar la convergencia al equilibrio del modelo ATMED CR para 1 g/cm^3 al cambiar la temperatura de radiación respecto a la temperatura electrónica. Al variar una respecto a la otra, difieren igualmente las poblaciones y el resto de propiedades del plasma, separándose del régimen LTE en cuanto $T_e \neq T_R$.

Fig. 6.65a. Opacidad frecuencial (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para Ag, Gd y Cu a $T_e=150$ eV, $T_R=0$ eV y $\rho=1 \text{ g/cm}^3$, con sección de absorción ligado-ligado UTA.

Fig. 6.65b. Opacidad frecuencial (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para Gd a $T_e=250$ eV, $T_R=250$ o 0 eV y $\rho=1 \text{ g/cm}^3$, con sección de absorción ligado-ligado UTA.

Fig. 6.65c. Opacidad frecuencial (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para Gd a $T_e=500$ eV, $T_R=500$ o 0 eV y $\rho=1 \text{ g/cm}^3$, con sección de absorción ligado-ligado UTA.

Fig. 6.65d. Opacidad frecuencial (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para plasmas Gd a $T_e=1000$ eV, $T_R=1000$ o 0 eV y $\rho=1 \text{ g/cm}^3$, con sección ligado-ligado UTA.

Figura 6.66. Opacidad frecuencial (cm^2/g) para plasmas de Gd a $T_e=250$ eV, $T_R=250$ o 0 eV y $\rho=1$ g/cm^3 , con sección de absorción ligado-ligado MUTA.

Figura 6.67. Opacidad frecuencial (cm^2/g) para plasmas de Gd a $T_e=1000$ eV, $T_R=1000$ o 0 eV y $\rho=1$ g/cm^3 , con sección de absorción ligado-ligado MUTA.

Tabla 6.26: Propiedades de plasmas de gadolinio en régimen LTE y NLTE a $1 \text{ g}/\text{cm}^3$ y factor de dilución 1.

T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm^3)	Z_{bar} Gd	K_{R1} (cm^2/g) ATMED CR	K_R (cm^2/g) ATMED CR	K_{P1} (cm^2/g) ATMED CR	K_P (cm^2/g) ATMED CR	RPL ($\text{J}/\text{cm}^3\text{s}$) ATMED CR
250	250	1	29.82	5.299E+02	7.793E+02	2.040E+03	2.572E+03	2.689962E+21
250	-	1	28.69	6.130E+02	9.502E+02	2.153E+03	2.709E+03	7.057161E+19
500	500	1	40.98	1.126E+02	2.056E+02	1.262E+03	1.343E+03	3.398308E+21
500	-	1	33.73	2.649E+02	4.321E+02	1.670E+03	1.867E+03	5.958307E+19
1000	1000	1	52.34	1.738E+01	2.230E+01	1.986E+02	2.090E+02	2.917227E+20
1000	-	1	39.58	1.056E+02	2.277E+02	6.985E+02	8.003E+02	6.284834E+19

K_{R1} , K_{P1} / K_R , K_P : Opacidades medias de Rosseland y Planck MUTA / UTA

Utilizando ambas secciones eficaces de procesos de fotoabsorción ligado-ligado, también se visualizan efectos de no equilibrio en las opacidades resueltas en frecuencia para altas densidades, levántandose el espectro cada vez más conforme aumenta la temperatura electrónica y considerando $T_R = 0$ eV o $T_e \neq T_R$ para el cálculo de las poblaciones (Figuras 6.65-6.67). Para una alta densidad ($1 \text{ g}/\text{cm}^3$), se observan efectos NLTE (Tabla 6.26) ya que mayor es la diferencia en ionización media y opacidades medias conforme aumenta la temperatura electrónica considerando $T_R = 0$ eV o $T_e = T_R$.

6.3 Metales no Ferromagnéticos

6.3.1 Aluminio

El aluminio es un elemento químico de símbolo Al, número atómico $Z = 13$ y peso 26.982 g/mol.

6.3.1.1 Sensitividad de ATMED CR

En este apartado se pone de manifiesto la sensibilidad del programa ATMED CR respecto a ATMED LTE para un elemento de bajo número atómico como el aluminio, así como respecto a otros modelos de la referencia [61] denominados “Saha”, “Average atom”, “non-LTE” de acuerdo a la Figura 6.68a.

Figura 6.68a. Grado medio de ionización del aluminio para varias densidades según Saha, AA y NLTE [61] + ATMED.

Por ser de bajo número atómico y medias o altas densidades las diferencias entre calcular un balance colisional radiativo o minimizar la energía libre de Helmholtz son muy pequeñas, lo que demuestra la idoneidad de las fórmulas empleadas para las tasas de los procesos atómicos. Se contrastan en la [Tabla 6.27](#) opacidades medias de Rosseland en régimen LTE entre códigos y valores experimentales. En régimen NLTE aumenta consecuentemente K_R , ya que a menor grado de ionización, mayor número de electrones ligados y a su vez mayor cantidad de transiciones ligado-ligado y ligado-libre, es decir, más líneas en el espectro de opacidad. Para estos casos los caminos libres medios L_R y L_P (cm) son correctos en su orden de magnitud respecto a la Referencia [16].

Tabla 6.27a: Propiedades de plasmas de aluminio ópticamente delgados y gruesos.

T_e (eV)	T_R (eV) / Xdil	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	μ_e	L Plasma (cm)	Z_{bar} ATMED CR	L_R Rosseland (cm)	L_P Planck (cm)
200	200 / 0.25	1.000E-02	2.467E+21	-6.4990E+01	-	1.105E+01	1.858E+01	3.810E-01
200	200 / 0.25	1.000E-02	2.456E+21	-6.5024E+01	3.000E-03	1.100E+01	1.744E+01	3.668E-01

Tabla 6.27b: Propiedades de plasmas de aluminio con densidad 1g/cm³ ópticamente delgados con ATMED CR.

T_e (eV)	T_R (eV)	Z_{bar} ATMED CR	K_R / K_P UTA (cm ² /g)	K_R / K_P MUTA (cm ² /g)	OPAL K_R (cm ² /g)	THERMOS K_R (cm ² /g)	Experimental K_R (cm ² /g)
500	500	1.239E+01	4.419E+01/ 3.640E+02	1.383E+01/ 6.040E+01	59.3	46.10	51 ± 8
750	750	1.286E+01	1.045E+01/ 5.479E+01	2.681E+00/ 1.358E+01		10.30	13 ± 2
1000	1000	1.294E+01	2.265E+00/ 1.324E+01	4.626E-01/ 4.374E+00	2.13	2.14	2.9 ± 0.4
1250	1250	1.297E+01	8.583E-01/ 4.598E+00	1.279E-01/ 1.852E+00		0.83	1.1 ± 0.2

En la [Figura 6.68b](#) se aprecia la progresiva convergencia al régimen LTE del modelo colisional radiativo ATMED CR conforme aumenta la densidad, respecto a los valores de ionización media proporcionados por ATMED LTE, así como los efectos de no equilibrio que aparecen a altas densidades y con temperaturas crecientes a partir de 200 eV. Se aprecia el buen grado de acuerdo de la ionización media obtenida con ATMED CR respecto al código colisional radiativo detallado ABAKO [21] para el régimen NLTE / CR y respecto a ATMED LTE para densidad $10^{21} \div 10^{22}$ cm⁻³ y $T_e < 200$ eV, sin embargo hay discrepancias en el régimen corona $10^{12} \div 10^{14}$ cm⁻³.

Figura 6.68b. Grado medio de ionización del aluminio para varias densidades según ATMED CR y ATMED LTE.

6.3.1.2 Modelo Temporal

Se consideran ahora experimentos de irradiación de aluminio de acuerdo a la evolución temporal de la [Figura 6.69 \[62\]](#) para las variables temperatura electrónica y densidad electrónica. Los resultados obtenidos con ATMED CR para la evolución de las propiedades del plasma creado se ilustran en la [Tabla 6.28](#) considerando una malla relativamente fina con un paso de tiempo de 0.5 ns.

Fig. 6.69. Evolución temporal de temperatura, densidad electrónica y Z_{bar} en varias zonas en aluminio irradiado [62].

Tabla 6.28: Evolución temporal del aluminio en la coordenada 0.78 μm con $\Delta t=0.5\text{e-}9$ s.

Tiempo (s)	T_e (eV)	N_e (cm^{-3})	ρ (gcm^{-3})	Z_{bar} ATMED CR	K_R (cm^2/g)	K_p (cm^2/g)	RPL ($\text{J}/\text{cm}^3\text{s}$)
0.000000E+00	20	6.000E+23	8.414818	3.194661	4.746E+04	2.151E+05	1.537518E+13
5.000000E-10	525	1.500E+22	0.051875	12.955283	2.294E+00	2.514E+01	2.018853E+11
1.000000E-09	350	3.000E+21	0.010423	12.895297	1.250E+00	5.372E+01	2.557874E+10
1.500000E-09	250	1.750E+21	0.006372	12.305087	1.832E+00	1.803E+02	1.907483E+10
2.000000E-09	210	1.250E+21	0.004794	11.682773	2.029E+00	1.922E+02	9.068536E+09
2.500000E-09	200	8.000E+20	0.003083	11.625300	1.667E+00	1.624E+02	4.258768E+09
3.000000E-09	180	7.000E+20	0.002777	11.292135	1.900E+00	1.277E+02	2.199889E+09
3.500000E-09	160	5.500E+20	0.002221	11.096919	2.362E+00	8.035E+01	7.775147E+08
4.000000E-09	150	4.900E+20	0.001987	11.046872	2.884E+00	6.155E+01	4.394917E+08

6.4 Gases Nobles

6.4.1 Neón

El neón es un elemento químico de símbolo Ne, número atómico $Z = 10$ y peso 20.180 g/mol.

6.4.1.1 Grado Medio de Ionización de Plasmas de Neón NLTE-8

Para un alto porcentaje de casos, el parámetro de ionización media Z_{bar} está dentro del rango de los códigos CR detallados, sin estar en ningún caso totalmente fuera de rango, tanto para plasmas delgados como gruesos [34]. Se observa una gran sensibilidad del código a pequeñas variaciones de temperatura electrónica $40 \rightarrow 80$ eV y densidad electrónica $1\text{E}+18 \rightarrow 1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$, sin detectarse defectos ópticos en el atrapamiento de radiación en los plasmas gruesos de longitud característica 1 cm (Figuras 6.70-6.73).

Fig. 6.70. Ionización media vs. temperatura electrónica de plasmas de neón a $T_R=0$ eV, $X_{\text{DIL}}=0$, $L_P=0$ cm, $N_e=1\text{E}+18 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: círculos negros).

Fig. 6.71. Ionización media vs. temperatura electrónica de plasmas de neón a $T_R=0$ eV, $X_{\text{DIL}}=0$, $L_P=1$ cm, $N_e=1\text{E}+18 \text{ cm}^{-3}$ (valores ATMED CR: círculos negros).

Fig. 6.72. Ionización media vs. T_e de plasmas de neón a $T_R=103$ eV, $X_{\text{DIL}}=0.017$, $L_P=0$ cm, $N_e=1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.73. Ionización media vs. T_e de plasmas de neón a $T_R=103$ eV, $X_{\text{DIL}}=0.017$, $L_P=1$ cm, $N_e=1\text{E}+19 \text{ cm}^{-3}$.

6.4.1.2 Tasas de Procesos Atómicos de Plasmas de Neón NLTE-8

Se ilustran en este apartado las tasas de procesos atómicos de ATMED CR para los plasmas de neón ($T_e=40\div 80$ eV, $N_e=10^{18}\div 10^{19}$ cm⁻³) propuestos en la reunión científica para modelos colisionales radiativos del año 2013. Existe actualmente gran interés por la caracterización de las propiedades radiativas y atómicas de experimentos con plasmas fotoionizados de neón para astrofísica y FCI [34-63-64-65], tal que las características del neón en la región central de la celda de longitud 1 cm permanecen sin perturbar (Figuras 6.74-6.75).

Fig. 6.74. Temperatura electrónica en la celda de gas.

Fig. 6.75. Densidad de materia en la celda de gas.

Tabla 6.29a: Propiedades de plasmas de neón del NLTE-8 y tasas del ión medio calculadas con ATMED CR.

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	N_e (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	Fotoioniz. Tasa (s ⁻¹)	Ioniz. Col. Tasa (s ⁻¹)	Autoloniz. Tasa (s ⁻¹)	Ioniz. Total Tasa (s ⁻¹)
80	-	-	1.0E+19	7.941	-	2.1962E+12	2.1374E+14	2.1594E+14
80	103	0.017	1.0E+19	7.977	8.7501E+10	2.1596E+12	1.3575E+14	1.3800E+14

Tabla 6.29b: Propiedades de plasmas de neón del NLTE-8 y tasas del ión medio calculadas con ATMED CR.

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	N_e (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	FotoRec. Tasa (s ⁻¹)	Rec. Col. 3 Tasa (s ⁻¹)	Captura Diel. Tasa (s ⁻¹)	Rec. Total Tasa (s ⁻¹)
80	-	-	1.0E+19	7.941	-	7.5393E+06	8.3521E+09	8.3596E+09
80	103	0.017	1.0E+19	7.977	7.2471E+07	7.4354E+06	3.4289E+09	3.5088E+09

Como se puede comprobar, las tasas totales de la [Tabla 6.29](#) tienen un orden de magnitud correcto respecto a las de otros códigos detallados que las desglosan por ión en las [Tablas 6.30÷6.31](#). Ha de considerarse que dichas tasas totales del átomo medio corresponden a sumatorios de tasas para todos sus niveles relativistas, mientras que en un código detallado corresponden a tasas entre niveles de los iones con grados de carga consecutivos y de mayor población en el plasma.

Tabla 6.30: Tasas totales de ionización por ión calculadas con códigos del NLTE-8 a $1.0E+19 \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=80 \text{ eV}$.

Ion	ATOMIC _SR	AVERROES	CANPS13	CRAC	CRETIN	DEDALE	FLYCHK	NRSHM _ABAKO	SCRAM
4	0.000e+00	3.165e+13	1.574e+13	3.009e+10	0.000e+00	6.467e+12	4.346e+12	1.103e+14	0.000e+00
5	8.009e+12	1.620e+13	9.200e+12	4.864e+10	4.926e+12	4.558e+12	3.902e+12	4.018e+14	7.661e+12
6	3.016e+12	3.948e+12	3.337e+12	4.664e+10	2.221e+12	1.571e+12	1.699e+12	1.177e+13	2.343e+12
7	1.556e+11	2.142e+10	2.269e+10	1.888e+10	5.083e+10	1.462e+10	6.290e+10	1.689e+10	8.801e+12
8	1.277e+05	1.721e+03	1.807e+03	7.590e+06	4.935e+03	2.863e+02	5.167e+06	3.658e+02	6.798e+04
9	3.118e+03	3.454e+01	3.263e+01	4.364e+04	9.384e+01	2.145e+01	3.077e+04	8.731e+06	4.970e+05

Tabla 6.31: Tasas totales de recombinación por ión calculadas con códigos del NLTE-8 a $1.0E+19 \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=80 \text{ eV}$.

Ion	ATOMIC _SR	AVERROES	CANPS13	CRAC	CRETIN	DEDALE	FLYCHK	NRSHM _ABAKO	SCRAM
4	0.000e+00	1.171e+10	4.662e+10	1.467e+06	0.000e+00	0.000e+00	5.345e+08	2.290e+12	0.000e+00
5	0.000e+00	1.885e+10	7.616e+09	6.813e+05	5.323e+09	6.712e+09	2.123e+09	1.891e+11	1.146e+10
6	1.049e+10	2.348e+10	1.363e+10	3.413e+06	9.069e+09	1.109e+10	7.487e+09	6.233e+11	1.474e+10
7	1.351e+10	1.391e+10	1.374e+10	6.778e+06	1.156e+10	9.136e+09	9.630e+09	5.422e+10	1.113e+10
8	1.915e+09	2.354e+08	2.754e+08	4.019e+07	9.584e+08	2.370e+08	8.260e+08	2.623e+08	1.187e+11
9	1.412e+09	1.577e+08	2.556e+08	1.138e+08	7.477e+08	1.858e+08	9.203e+10	2.548e+08	1.187e+09

Analizando las tasas en algunos orbitales relativistas (Tablas 6.32÷6.33), se puede comprobar que las correspondientes a procesos atómicos que los pueblan son menores que las tasas que los despueblan en las condiciones de plasma analizadas, excepto para el orbital $1s_{1/2}$.

Tabla 6.32: Tasas totales y de procesos atómicos que despueblan varios niveles relativistas calculadas con ATMED CR en las condiciones $N_e=1.0E+19 \text{ cm}^{-3}$, $T_e=80 \text{ eV}$, $T_R=103 \text{ eV}$, $X_{dil}=0.017$.

Tasas Despoblamiento Orbitales (1/s)	Σ Niveles Energía	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$4p_{3/2}$	$4f_{7/2}$	$6h_{11/2}$
Flujo Población Total	1.728919E+16	5.261338E+08	4.203269E+12	2.183885E+12	1.686380E+14	6.433258E+13	3.154958E+14
Excitacion/Desexcit. Colisional e-	1.709625E+16	1.414971E+05	3.951769E+12	1.757585E+12	1.625457E+14	5.978880E+13	3.126097E+14
FotoExcitacion/ FotoDesexcit.	4.944710E+13	5.114125E+08	6.354533E+10	2.031373E+11	1.559377E+12	1.643272E+12	2.103330E+11
Ionización Colisional e-	2.159638E+12	5.710850E+01	1.892598E+08	2.584975E+08	2.334785E+10	2.431390E+10	1.272064E+11
Fotolonizacion	8.750169E+10	9.820189E+06	9.795701E+09	6.646235E+09	3.852533E+09	6.375064E+08	4.102726E+07
Auto-Ion./Diel. Recombinacion	1.412518E+14	4.759484E+06	1.779700E+11	2.162580E+11	4.505723E+12	2.875554E+12	2.548500E+12

Tabla 6.33: Tasas totales y de procesos atómicos que pueblan varios niveles relativistas calculadas con ATMED CR en las condiciones $N_e=1.0E+19 \text{ cm}^{-3}$, $T_e=80 \text{ eV}$, $T_R=103 \text{ eV}$, $X_{dil}=0.017$.

Tasas Poblamiento Orbitales (1/s)	Σ Niveles Energía	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$4p_{3/2}$	$4f_{7/2}$	$6h_{11/2}$
Flujo Población Total	1.182183E+12	8.750432E+11	1.267908E+10	5.503044E+09	4.297416E+09	1.604155E+09	4.625266E+09
Excitacion/Desexcit. Colisional e-	2.977159E+11	6.335759E+07	1.162181E+10	4.023412E+09	4.148176E+09	1.505792E+09	4.588149E+09
FotoExcitacion/ FotoDesexcit.	8.412728E+11	8.372072E+11	7.486475E+08	1.180092E+09	2.458698E+07	1.800333E+07	4.918302E+05
Recombinación Colisional 3 Cuerpos	7.435404E+06	4.138272E+02	8.685118E+03	9.794649E+03	1.082517E+05	1.113852E+05	3.995508E+05
FotoRecombin.	7.247139E+07	7.116036E+07	4.495239E+05	2.518304E+05	1.786217E+04	2.920501E+03	1.288652E+02
Auto-Ion./Diel. Recombinacion	4.311489E+10	3.770156E+10	3.081655E+08	2.992792E+08	1.245265E+08	8.024530E+07	3.622543E+07

6.4.1.3 Probabilidad de los Iones en Plasmas de Neón NLTE-8

Utilizando las subrutinas del código ABAKO se puede generar un conjunto de configuraciones detalladas incluyendo estados doblemente excitados (ver ejemplo en [Tabla 6.34](#)):

$$C = \left\{ \left(n_1 l_1 j_1 \right)^{P_1}, \dots, \left(n_k l_k j_k \right)^{P_k}, \dots, \left(n_{k_{\max}} l_{k_{\max}} j_{k_{\max}} \right)^{P_{k_{\max}}} \right\}$$

La probabilidad de cada configuración $f(C)$ se computa a partir de la configuración de átomo medio

$$C_{AA} = \left\{ \left(n_1 l_1 j_1 \right)^{\overline{P_1}}, \dots, \left(n_k l_k j_k \right)^{\overline{P_k}}, \dots, \left(n_{k_{\max}} l_{k_{\max}} j_{k_{\max}} \right)^{\overline{P_{k_{\max}}}} \right\}$$

A través de la siguiente formulación basada en las poblaciones relativistas del átomo medio:

$$f(C) = \prod_{k=1}^{k_{\max}} \left[\frac{\overline{P_k}}{(2j_k + 1)} \right]^{\overline{P_k}} \frac{(2j_k + 1)!}{(2j_k + 1 - \overline{P_k})! \overline{P_k}!} \left(1 - \frac{\overline{P_k}}{(2j_k + 1)} \right)^{2j_k + 1 - \overline{P_k}} \quad (6.15)$$

Tabla 6.34a: Configuraciones que entran en el cómputo para los iones de Neón

Ion Nº	Ion Tipo	Número de Configuraciones
1	H-like Ne	36
2	He-like Ne	288
3	Li-like Ne	455
4	Be-like Ne	447
5	B-like Ne	941
6	C-like Ne	1165
7	N-like Ne	1496
8	O-like Ne	1612
9	F-like Ne	1393
10	Neutral Ne	997

En la [Figura 6.76](#) y [Tabla 6.35](#) se ve la probabilidad de cada ión para un caso de plasma.

Tabla 6.35: Probabilidad para los iones de Neón a $T=80$ eV, $T_R=103$ eV, $X_{dil}=0.017$ y $N_e=1E+19$ cm⁻³

Ion N°	Ion Tipo	Probabilidad de las Configuraciones del Ion N°
1	H-like Ne	9.726362E-04
2	He-like Ne	9.709470E-01
3	Li-like Ne	2.771767E-02
4	Be-like Ne	3.537962E-04
5	B-like Ne	9.277536E-04
6	C-like Ne	1.341920E-08
7	N-like Ne	4.572079E-11
8	O-like Ne	1.080881E-13
9	F-like Ne	1.749091E-16
10	Neutral Ne	1.861509E-19

Figura 6.76. Probabilidad de los iones de neón a $T_e=80$ eV, $T_R=103$ eV, $X_{dil}=0.017$ y $N_e=10^{19}$ cm⁻³ (NLTE-8 workshop [34]).

6.4.2 Argón

El argón es un elemento químico de símbolo Ar, número atómico $Z = 18$ y peso 39.948 g/mol.

6.4.2.1 Régimen Colisional Radiativo

Los resultados de ATMED CR para plasmas de argón a bajas temperaturas se indican en la [Figura 6.77](#) y guardan gran concordancia con otros modelos participantes en la reunión científica NLTE-5.

Figura 6.77. Grado medio de ionización (superior) y pérdidas radiativas totales (inferior) del argón en régimen colisional radiativo $N_e=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (Review of NLTE-5 workshop [31]).

6.4.2.2 Opacidad Media de Rosseland

Los resultados de opacidad media de Rosseland de ATMED CR considerando ambas secciones eficaces de absorción ligado ligado poseen el mismo orden de magnitud que los del código LEDCOP.

Tabla 6.36: Propiedades de plasmas de argón ópticamente delgados con densidad de materia 1 g/cm³.

T_e (eV)	T_R (eV)	Z_{bar} ATMED CR	ATMED K_R (cm ² /g)	ATMED K_P (cm ² /g)	ATMED $K_{R\ MUTA}$ (cm ² /g)	ATMED $K_{P\ MUTA}$ (cm ² /g)	LEDCOP K_R (cm ² /g)	LEDCOP K_P (cm ² /g)
200	200	1.112E+01	7.553E+02	3.279E+03	3.659E+02	2.925E+03	707.50	2429.00
500	500	1.519E+01	1.738E+01	2.739E+02	6.238E+00	7.562E+01	18.39	139.50
1000	1000	1.748E+01	5.819E+00	5.121E+01	1.754E+00	7.710E+00	6.24	54.06

6.4.2.3 Modelo Temporal

Para diagnóstico de cápsulas de fusión por confinamiento inercial se utilizan normalmente los modelos temporales colisionales radiativos [66]. Dados unos perfiles temporales de condiciones de temperatura y densidad en las cápsulas, obtenidos mediante la instrumentación en experimentos reales, puede calcularse la evolución temporal de las propiedades fundamentales de los plasmas creados. Así por ejemplo se ilustran en la [Tabla 6.37](#), los resultados obtenidos con ATMED CR para plasmas de argón utilizado como dopante en cápsulas reales y correspondientes a perfiles temporales de temperatura electrónica y densidad de materia promediados en el núcleo, [Figura 6.78](#).

Figura 6.78. Evolución de la temperatura electrónica y densidad de materia durante la implosión de una cápsula [66].

Tabla 6.37: Evolución temporal de propiedades de plasmas de argón ópticamente delgados con ATMED CR en NLTE.

Tiempo (s)	T _e (eV)	N _e (cm ⁻³)	ρ (gcm ⁻³)	Z _{bar} ATMED CR	K _R (cm ² /g)	K _P (cm ² /g)
20.00000E-09	100	1.011509E+22	0.06	11.183105	1.905E+03	6.715E+03
20.25000E-09	200	2.026061E+22	0.09	14.933241	1.998E+02	9.688E+02
20.50000E-09	260	1.879226E+22	0.08	15.582354	3.328E+01	2.206E+02
20.75000E-09	575	2.590943E+22	0.10	17.187070	2.048E+00	1.076E+02
21.00000E-09	1200	5.407204E+22	0.20	17.934398	8.893E-01	4.216E+00
21.25000E-09	1400	9.455631E+22	0.35	17.921177	8.285E-01	3.182E+00
21.50000E-09	1200	1.024056E+23	0.38	17.876573	1.448E+00	7.873E+00
21.75000E-09	800	9.519062E+22	0.36	17.540247	3.338E+00	6.656E+01
22.00000E-09	650	7.713725E+22	0.30	17.056384	4.066E+00	1.389E+02
22.25000E-09	480	6.738405E+22	0.28	15.964052	6.372E+00	1.889E+02
22.50000E-09	400	5.896685E+22	0.25	15.646311	9.937E+00	1.561E+02
22.75000E-09	325	4.890392E+22	0.21	15.447863	2.198E+01	1.856E+02
23.00000E-09	300	4.181747E+22	0.18	15.410945	2.962E+01	2.219E+02
23.25000E-09	270	3.689670E+22	0.16	15.297186	4.944E+01	3.276E+02
23.50000E-09	260	2.784912E+22	0.12	15.394805	4.832E+01	3.122E+02
23.75000E-09	255	2.554947E+22	0.11	15.407540	5.043E+01	3.206E+02
24.00000E-09	250	2.325001E+22	0.10	15.422941	5.238E+01	3.281E+02

6.4.3 Kriptón

El kriptón es un elemento químico de símbolo Kr, número atómico $Z = 36$ y peso 83.80 g/mol.

Los resultados obtenidos con ATMED CR en régimen colisional radiativo y en régimen corona (cuando la fuerza de oscilador ligado libre depende sólo del número cuántico principal), presentan alto grado de acuerdo en la ionización media con otros modelos CR (Figura 6.79).

Fig. 6.79. Ionización media del kriptón en función de la temperatura. Superior: régimen corona $N_e=10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Inferior: régimen colisional radiativo $N_e=10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Líneas punteadas para capas cerradas (Review of the NLTE-5 kinetics workshop) [31].

6.4.4 Xenon

El xenón es un elemento químico de símbolo Xe, número atómico $Z = 54$ y peso 131.29 g/mol.

6.4.4.1 Plasmas Fotoionizados

Las ondas de choque están presentes en todo el universo y juegan un papel crucial en el transporte de energía dentro de las estrellas, ya que su dinámica puede ser significativamente modificada por procesos radiativos debido a la emisión. Si la onda de choque posee gran velocidad, el medio estelar comprimido es calentado e ionizado emitiendo radiación, dando lugar a un enfriamiento radiativo. La radiación emitida a su vez calienta e ioniza el medio estelar todavía no comprimido generando lo que se denomina una onda radiativa. El flujo de energía radiativa, es decir transportada por los fotones en estas condiciones (régimen radiativo), es mayor que el flujo de energía (calor, electricidad) en la materia transportada por las partículas, pero aún bastante inferior al flujo de energía del régimen en el que la materia está dominada completamente por la radiación tal que la presión ejercida por la radiación excede la presión de la materia.

Las ondas radiativas son observadas alrededor de numerosos objetos astronómicos: estrellas pulsantes, supernovas durante su fase de enfriamiento radiativo, ondas de choque en corrientes estelares en medios galácticos, colisiones de nubes interestelares y en la entrada de cohetes o cometas en las atmósferas planetarias. Para una velocidad de la onda de choque y una presión inicial del medio en el que se propaga, los materiales con alto número atómico y baja densidad pueden alcanzar el régimen denominado radiativo. Por esta razón, el gas xenon de baja densidad y $Z = 54$ es comunmente empleado como medio en el que estudiar la propagación de una onda radiativa. El código ATMED CR puede ser utilizado para caracterizar dichas ondas calculando las propiedades básicas de un plasma de xenon, ya que la onda se propaga en régimen radiativo en plasmas en unas condiciones de temperatura inferior a 300 eV y densidad $5\text{E-}04 \text{ g/cm}^3$.

Figura 6.80. Ondas radiativas en estrellas.

Figura 6.81. Xe como gas protector en cámaras FCI.

Las ondas radiativas también son observadas en experimentos de fusión por confinamiento inercial. Además para proteger las paredes de la cámara donde se producirá la reacción de fusión, debe emplearse un gas con el espectro de opacidad adecuado para la radiación que existirá en la zona donde se situará el gas protector (Figura 6.81). Se estima que las condiciones en dicha zona estarán en el entorno de 100÷200 eV de temperatura y densidades de $10^{-3} \div 10^{-4}$ g/cm³, claramente en regímenes de NLTE. El xenón puede ser utilizado como gas de relleno y protector de las cámaras de combustión en FCI, así como nitrógeno, neón y argón [67]. Es muy importante para el diseño del reactor de FCI analizar el comportamiento radiativo de este gas para moderar la onda de calor hacia la primera pared debido a los Rayos-X y los iones altamente energéticos liberados durante la detonación de la cápsula. Para una temperatura de radiación bajísima o nula existe una horquilla entre códigos CR de 14÷21 para el grado medio de ionización a $T_e=100$ eV con densidades en el rango $1.0E+18 \div 1.0E+22$ cm⁻³ (Tabla 6.38). Los resultados obtenidos con ATMED CR para plasmas de xenón dentro de ese rango, en concreto a $T_e=100$ eV y $N_e=1.0E+20$ cm⁻³ se ilustran en la Tabla 6.39 y en las Figuras 6.82-6.83. Existe gran concordancia con otras referencias [29-68].

Tabla 6.38: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR de la base de datos NLTE-4 no fotoionizados.

T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	IP / CL	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} NLTE-4
100	-	1.180E-01	1.0E+22	IP	1.853E+01	18÷21
100	-	1.100E-01	1.0E+22	CL	1.993E+01	18÷21
100	-	1.420E-05	1.0E+18	IP	1.538E+01	14÷21

Figura 6.82. Grado medio de ionización del plasma de xenón no fotoionizado en NLTE-4. Cálculos obtenidos con modelos colisionales radiativos para $N_e=1 \times 10^{18}$ cm⁻³ y $T_e=100$ eV [29].

Tabla 6.39: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR a $T_e=100$ eV y $N_e=1.0E+20$ cm⁻³.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	T_R (eV) / Xdil	Z_{bar} ATMED CR	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)
100	1.050E-03	1.0E+20	30 / NO	2.113E+01	2.517E+03	1.365E+04
100	1.020E-03	1.0E+20	40 / NO	2.138E+01	1.800E+03	1.111E+04
100	1.000E-03	1.0E+20	50 / NO	2.194E+01	1.079E+03	8.538E+03
100	9.690E-04	1.0E+20	60 / NO	2.269E+01	6.089E+02	6.662E+03
100	9.400E-04	1.0E+20	70 / NO	2.343E+01	3.838E+02	5.417E+03
100	8.750E-04	1.0E+20	90 / NO	2.495E+01	1.023E+02	3.817E+03
100	8.522E-04	1.0E+20	100 / NO	2.558E+01	6.558E+01	3.381E+03
100	7.900E-04	1.0E+20	125 / NO	2.760E+01	4.215E+01	2.764E+03
100	7.300E-04	1.0E+20	150 / NO	3.010E+01	2.735E+01	2.227E+03
100	7.250E-04	1.0E+20	*150 / NO	3.030E+01	2.725E+01	2.183E+03
100	7.040E-04	1.0E+20	175 / NO	3.118E+01	3.455E+01	2.056E+03
100	6.650E-04	1.0E+20	*175 / NO	3.301E+01	3.417E+01	1.648E+03
100	7.030E-04	1.0E+20	200 / NO	3.104E+01	4.483E+01	2.202E+03
100	6.250E-04	1.0E+20	*200 / NO	3.512E+01	4.111E+01	1.319E+03
100	8.200E-04	1.0E+20	100 / 3	2.680E+01	4.574E+01	3.075E+03
100	8.200E-04	1.0E+20	*100 / 3	2.680E+01	4.572E+01	3.075E+03
100	8.300E-04	1.0E+20	100 / 2	2.627E+01	5.249E+01	3.189E+03
100	8.522E-04	1.0E+20	100 / 1	2.558E+01	6.558E+01	3.381E+03
100	8.560E-04	1.0E+20	100 / 0.9	2.548E+01	6.905E+01	3.416E+03

* Cálculos sin incluir fotoionización y fotorecombinación.

Tabla 6.39: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR a $T_e=100$ eV y $N_e=1.0E+20$ cm⁻³.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	T_R (eV) / Xdil	Z_{bar} ATMED CR	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)
100	8.600E-04	1.0E+20	100 / 0.8	2.536E+01	7.399E+01	3.459E+03
100	8.650E-04	1.0E+20	100 / 0.7	2.522E+01	8.143E+01	3.513E+03
100	8.710E-04	1.0E+20	100 / 0.6	2.504E+01	9.344E+01	3.586E+03
100	8.800E-04	1.0E+20	100 / 0.5	2.480E+01	1.150E+02	3.688E+03
100	8.920E-04	1.0E+20	100 / 0.4	2.444E+01	1.590E+02	3.841E+03
100	9.130E-04	1.0E+20	100 / 0.3	2.389E+01	2.617E+02	4.084E+03
100	9.480E-04	1.0E+20	100 / 0.2	2.313E+01	4.522E+02	4.442E+03
100	9.480E-04	1.0E+20	*100 / 0.2	2.311E+01	4.563E+02	4.449E+03
100	9.900E-04	1.0E+20	100 / 0.1	2.222E+01	7.604E+02	4.899E+03
100	9.900E-04	1.0E+20	*100 / 0.1	2.220E+01	7.673E+02	4.908E+03

Fig. 6.83. Plasmas de xenón para $N_e=1 \times 10^{20}$ cm⁻³ y $T_e=100$ eV con campos de radiación Planckianos caracterizados por ratios T_R/T_e o factor de dilución propios de medios estelares o para cámaras de FCI [68].

6.4.4.2 Mapa de Colores de Ionización Media, K_R , K_P y RPL

En el detallado mapa de color de la [Figura 6.84a](#) para plasmas de xenón se aprecia el buen grado de acuerdo de la ionización media obtenida con ATMED CR ([Tabla 6.40](#)) respecto al código detallado ABAKO [69] para el régimen CR, la progresiva convergencia al régimen LTE del modelo colisional radiativo conforme aumenta la densidad, así como los efectos de no equilibrio que aparecen a altas densidades y con temperaturas crecientes a partir de 400 eV.

Fig. 6.84a. Grado medio de ionización de xenón [69].

Fig. 6.84b. Regímenes termodinámicos de xenón [69].

Tabla 6.40: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ATMED LTE	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (erg/cm ³ .s)
25	1e-5	4.181E+17	9.114E+00	1.412E+01	1.204E+03	6.789E+04	1.856249E+15
50	1e-5	5.285E+17	1.152E+01	2.250E+01	4.265E+03	3.988E+04	7.705238E+15
100	1e-5	6.784E+17	1.479E+01	2.819E+01	2.139E+03	1.261E+04	5.014190E+16
200	1e-5	8.078E+17	1.761E+01	4.115E+01	1.612E+03	6.069E+03	1.729875E+17
400	1e-5	1.012E+18	2.206E+01	4.445E+01	6.742E+02	3.032E+03	4.069504E+17
500	1e-5	1.061E+18	2.314E+01	4.783E+01	4.457E+02	2.329E+03	4.878055E+17
600	1e-5	1.125E+18	2.452E+01	5.094E+01	2.911E+02	1.826E+03	4.840159E+17

Tabla 6.40: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ATMED LTE	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (erg/cm ³ .s)
700	1e-5	1.150E+18	2.507E+01	5.186E+01	2.736E+02	1.512E+03	4.602101E+17
800	1e-5	1.165E+18	2.539E+01	5.198E+01	2.714E+02	1.294E+03	4.478316E+17
900	1e-5	1.175E+18	2.563E+01	5.200E+01	2.692E+02	1.134E+03	4.276778E+17
1000	1e-5	1.184E+18	2.582E+01	5.200E+01	2.630E+02	1.011E+03	4.167771E+17
50	1e-4	6.469E+18	1.410E+01	2.022E+01	2.570E+03	2.804E+04	9.494296E+17
100	1e-4	8.071E+18	1.760E+01	2.669E+01	1.833E+03	8.976E+03	4.941274E+18
200	1e-4	1.005E+19	2.192E+01	3.817E+01	9.474E+02	4.317E+03	1.324795E+19
400	1e-4	1.143E+19	2.492E+01	4.404E+01	3.140E+02	2.796E+03	1.355723E+19
500	1e-4	1.159E+19	2.527E+01	4.562E+01	3.178E+02	2.206E+03	1.314131E+19
600	1e-4	1.170E+19	2.550E+01	4.879E+01	3.220E+02	1.783E+03	1.328416E+19
700	1e-4	1.178E+19	2.569E+01	5.105E+01	3.248E+02	1.488E+03	1.248352E+19
800	1e-4	1.186E+19	2.586E+01	5.180E+01	3.244E+02	1.279E+03	1.233433E+19
900	1e-4	1.193E+19	2.601E+01	5.195E+01	3.187E+02	1.123E+03	1.217363E+19
1000	1e-4	1.200E+19	2.616E+01	5.199E+01	3.057E+02	1.002E+03	1.243754E+19
50	1e-3	7.359E+19	1.604E+01	1.770E+01	3.143E+03	2.144E+04	5.354127E+19
100	1e-3	9.582E+19	2.089E+01	2.548E+01	1.412E+03	5.673E+03	1.657197E+20
200	1e-3	1.121E+20	2.445E+01	3.480E+01	2.607E+02	3.817E+03	1.684353E+20
400	1e-3	1.178E+20	2.568E+01	4.383E+01	2.814E+02	2.727E+03	1.421697E+20
500	1e-3	1.192E+20	2.599E+01	4.431E+01	3.280E+02	2.143E+03	1.526260E+20

Tabla 6.40: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ATMED LTE	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (erg/cm ³ .s)
600	1e-3	1.203E+20	2.623E+01	4.625E+01	3.512E+02	1.728E+03	1.648454E+20
700	1e-3	1.214E+20	2.647E+01	4.884E+01	3.568E+02	1.440E+03	2.037257E+20
800	1e-3	1.225E+20	2.671E+01	5.073E+01	3.530E+02	1.237E+03	2.129440E+20
900	1e-3	1.236E+20	2.694E+01	5.159E+01	3.399E+02	1.087E+03	2.150210E+20
1000	1e-3	1.248E+20	2.720E+01	5.186E+01	3.202E+02	9.703E+02	2.667912E+20
50	1e-2	6.707E+20	1.462E+01	1.487E+01	5.776E+03	2.453E+04	4.124289E+21
100	1e-2	9.876E+20	2.153E+01	2.317E+01	1.111E+03	5.315E+03	4.606210E+21
200	1e-2	1.159E+21	2.526E+01	3.127E+01	2.529E+02	3.632E+03	2.979623E+21
400	1e-2	1.252E+21	2.730E+01	4.270E+01	3.461E+02	2.475E+03	5.600600E+21
500	1e-2	1.273E+21	2.775E+01	4.375E+01	3.778E+02	1.939E+03	6.880985E+21
600	1e-2	1.302E+21	2.838E+01	4.446E+01	3.664E+02	1.546E+03	1.043998E+22
700	1e-2	1.324E+21	2.886E+01	4.612E+01	3.547E+02	1.288E+03	1.144406E+22
800	1e-2	1.327E+21	2.893E+01	4.817E+01	3.537E+02	1.129E+03	1.462062E+22
900	1e-2	1.344E+21	2.929E+01	4.990E+01	3.356E+02	9.985E+02	1.750461E+22
1000	1e-2	1.358E+21	2.961E+01	5.100E+01	3.138E+02	8.992E+02	2.138744E+22
50	1e-1	5.242E+21	1.143E+01	1.146E+01	1.179E+04	3.276E+04	2.549808E+24
100	1e-1	8.644E+21	1.885E+01	1.912E+01	2.495E+03	6.768E+03	6.818007E+23
200	1e-1	1.158E+22	2.525E+01	2.736E+01	4.810E+02	3.520E+03	3.372824E+23
400	1e-1	1.334E+22	2.909E+01	3.907E+01	4.261E+02	2.217E+03	5.362824E+23

Tabla 6.40: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ATMED LTE	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (erg/cm ³ .s)
500	1e-1	1.392E+22	3.034E+01	4.198E+01	3.954E+02	1.702E+03	5.239050E+23
600	1e-1	1.439E+22	3.138E+01	4.325E+01	3.703E+02	1.349E+03	6.207271E+23
700	1e-1	1.478E+22	3.223E+01	4.409E+01	3.489E+02	1.117E+03	6.664364E+23
800	1e-1	1.513E+22	3.299E+01	4.531E+01	3.258E+02	9.608E+02	7.147210E+23
900	1e-1	1.546E+22	3.372E+01	4.685E+01	3.002E+02	8.493E+02	7.548994E+23
1000	1e-1	1.576E+22	3.436E+01	4.837E+01	2.738E+02	7.663E+02	7.946551E+23
50	1	3.209E+22	6.997E+00	7.000E+00	2.136E+04	4.417E+04	2.880758E+26
100	1	6.140E+22	1.339E+01	1.340E+01	4.444E+03	1.026E+04	2.515181E+26
200	1	9.880E+22	2.154E+01	2.180E+01	1.483E+03	4.073E+03	2.501109E+26
300	1	1.216E+23	2.650E+01	2.782E+01	8.391E+02	2.826E+03	5.416784E+26
400	1	1.352E+23	2.947E+01	3.282E+01	5.670E+02	2.032E+03	1.357311E+26
500	1	1.457E+23	3.178E+01	3.672E+01	4.225E+02	1.476E+03	9.150826E+26
600	1	1.544E+23	3.365E+01	3.947E+01	3.317E+02	1.108E+03	3.844783E+26
700	1	1.612E+23	3.515E+01	4.126E+01	2.673E+02	8.792E+02	6.459080E+25
800	1	1.660E+23	3.620E+01	4.248E+01	2.266E+02	7.466E+02	7.659471E+25
900	1	1.702E+23	3.711E+01	4.356E+01	1.953E+02	6.608E+02	7.667101E+25
1000	1	1.740E+23	3.794E+01	4.472E+01	1.692E+02	6.007E+02	7.947839E+25
50	10	1.022E+23	2.229E+00	2.229E+00	2.962E+04	4.601E+04	1.115145E+29
100	10	2.813E+23	6.133E+00	6.137E+00	8.483E+03	1.595E+04	1.073443E+29

Tabla 6.40: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR.

T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	Z_{bar} ATMED LTE	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (erg/cm ³ .s)
200	10	5.984E+23	1.305E+01	1.306E+01	3.408E+03	5.575E+03	6.079900E+28
300	10	8.460E+23	1.844E+01	1.853E+01	1.781E+03	3.553E+03	1.095157E+29
400	10	1.049E+24	2.288E+01	2.316E+01	9.641E+02	2.399E+03	2.755144E+28
500	10	1.214E+24	2.647E+01	2.710E+01	6.016E+02	1.676E+03	2.300046E+28
600	10	1.350E+24	2.944E+01	3.041E+01	4.181E+02	1.217E+03	7.039993E+28
700	10	1.462E+24	3.186E+01	3.313E+01	3.141E+02	9.313E+02	4.355293E+29
800	10	1.551E+24	3.382E+01	3.535E+01	2.479E+02	7.564E+02	3.277713E+29
900	10	1.621E+24	3.533E+01	3.715E+01	2.045E+02	6.516E+02	4.985149E+29
1000	10	1.673E+24	3.647E+01	3.865E+01	1.756E+02	5.869E+02	2.731640E+29

Figura 6.84c. Grado medio de ionización del xenón para varias densidades según ATMED CR.

Figura 6.84d. Grado medio de ionización del xenón para varias densidades según ATMED CR y ATMED LTE.

En la [Figura 6.84d](#) para plasmas de xenón se aprecia la progresiva convergencia al régimen LTE del modelo colisional radiativo ATMED CR conforme aumenta la densidad, respecto a los valores de ionización media proporcionados por ATMED LTE, así como los efectos de no equilibrio que aparecen a altas densidades y con temperaturas crecientes a partir de 300÷400 eV.

En la [Figura 6.84e](#) para plasmas de xenón se aprecia el buen grado de acuerdo de la ionización media obtenida con ATMED CR respecto al código colisional radiativo detallado ABAKO [69] para el régimen NLTE / CR y respecto a ATMED LTE para densidad 1 g/cm^3 y $T_e < 300 \text{ eV}$. Los valores de Z_{bar} de ATMED CR aparecen sobreimpresos sobre el mapa de color de la [Figura 6.84a](#), al lado del punto que indica las coordenadas de densidad de materia y temperatura electrónica.

Figura 6.84e. Grado medio de ionización del xenón para varias densidades y temperaturas según ATMED CR, sobreimpreso al lado del punto de coordenadas $\rho \text{ g/cc} - T_e \text{ eV}$ en el mapa de color de ABAKO [69] de la [Figura 6.84a](#).

También los cálculos de ATMED CR tanto de pérdidas radiativas como de opacidades medias para la temperatura electrónica de 200 eV, tienen un buen orden de magnitud respecto a los de ABAKO de la [Figura 4](#) de la Referencia [69].

En la [Figura 6.85](#) para plasmas de xenón se aprecia el buen grado de acuerdo de los espectros de opacidad UTA/MUTA y emisividad UTA frecuenciales respecto a los del código detallado ABAKO [69]. También se observa como el espectro de opacidad MUTA de ATMED CR proporciona líneas discretas de transiciones entre orbitales del átomo medio que a su vez son un promedio estadístico de las líneas de transición entre orbitales de diferentes iones en el modelo detallado ABAKO.

Figura 6.85. Opacidad UTA / MUTA y emisividad UTA del xenón para $\rho=0.5 \text{ g/cm}^3$ considerando $T_e=150 \text{ eV}$ según ATMED CR y la Referencia [69].

6.4.4.3 Plasmas de Laboratorio

Se puede observar para plasmas de xenón creados en la instalación LULI [21], la apreciable diferencia en las propiedades para este elemento, especialmente en el grado de ionización media, dependiendo de si se utiliza número cuántico principal máximo $n_{\text{max}}=6$ o $n_{\text{max}}=10$ ([Tabla 6.41](#)).

Tabla 6.41: Propiedades de plasmas de xenón con ATMED CR.

$n_{\max}$	T_e (eV)	ρ (g/cm ³)	N_e (cm ⁻³)	N_i (cm ⁻³)	Z_{bar} ATMED CR	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (J/cm ³ .s)
6	200	1.0356E-03	1.162E+20	4.750E+18	2.447E+01	2.570E+02	3.814E+03	1.583445E+13
10	200	1.0356E-03	1.246E+20	4.750E+18	2.624E+01	2.289E+02	3.673E+03	2.991353E+15
6	375	1.0356E-03	1.217E+20	4.750E+18	2.561E+01	2.679E+02	2.896E+03	1.568357E+13
10	375	1.0356E-03	1.406E+20	4.750E+18	2.959E+01	3.197E+02	2.372E+03	1.081961E+15
6	415	1.0356E-03	1.223E+20	4.750E+18	2.575E+01	2.909E+02	2.627E+03	1.510424E+13
10	415	1.0356E-03	1.438E+20	4.750E+18	3.028E+01	3.392E+02	2.053E+03	7.868060E+15
6	455	1.0356E-03	1.229E+20	4.750E+18	2.587E+01	3.110E+02	2.382E+03	1.557981E+13
10	455	1.0356E-03	1.464E+20	4.750E+18	3.082E+01	3.560E+02	1.802E+03	4.913842E+15
6	600	1.0356E-03	1.247E+20	4.750E+18	2.625E+01	3.519E+02	1.725E+03	1.830720E+13
10	600	1.0356E-03	1.525E+20	4.750E+18	3.210E+01	3.737E+02	1.248E+03	8.147788E+15
6	750	1.0356E-03	1.264E+20	4.750E+18	2.661E+01	3.567E+02	1.328E+03	1.944406E+13
10	750	1.0356E-03	1.578E+20	4.750E+18	3.322E+01	3.474E+02	9.597E+02	9.224302E+14

TABLE VII. Average ionization for the Xe plasma created at LULI [96] and calculations obtained by different models. For ABAKO and AVERROES the ion density $n_{\text{ion}}=4.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ and $T_e=450 \text{ eV}$ are input parameters. For the SOSA fit a value of $T_e=400 \text{ eV}$ was assumed.

Source	$\bar{Z}$
Experiment [96]	27.4 ± 1.5
ABAKO-a	26.6
ABAKO-b	27.1
AVERROES [96]	26.8
SOSA fit [96]	26.5

Figura 6.86. Distribuciones de carga simuladas por modelos CR detallados para el experimento del xenón realizado en LULI [21].

Figura 6.87. Grado medio de ionización del xenon [21] creado en LULI. Cálculos obtenidos para $N_i=4.75 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y $T_e=450 \text{ eV}$.

6.5 Carbonoideos: Semimetales ó Metaloides

6.5.1 Silicio

El silicio es un elemento químico de símbolo Si, número atómico $Z = 14$ y peso 28.086 g/mol.

6.5.1.1 Plasmas de Silicio Fotoionizados

Los resultados obtenidos con ATMED CR para el silicio en condiciones de FCI se ilustran en la [Figura 6.88](#), presentando alto grado de acuerdo en la ionización media con la Ref. [70].

Figura 6.88. Ionización media del silicio para $N_e=6.0E+21 \text{ cm}^{-3}$ (superior) y $N_e=6.0E+23 \text{ cm}^{-3}$ (inferior) considerando campos de radiación Planckianos (a) $T_R=0$, (b) $T_R=300 \text{ eV}$ y (c) $T_R=T_e$ (LTE) [70].

6.5.2 Germanio

El germanio es un elemento químico de símbolo Ge, número atómico $Z = 32$ y peso 72.61 g/mol.

6.5.2.1 Plasmas de Germanio Fotoionizados

En la [Figura 6.89](#), se ilustran resultados de ATMED CR para plasmas de germanio fotoionizados caracterizados por varias temperaturas de radiación, previamente calculados con el modelo hidrogenoide apantallado de Faussurier et. al. [\[18\]](#).

Figura 6.89. Grado medio de ionización del germanio para densidad de materia 0.0537 g/cm³ considerando campos de radiación Planckianos (a) $T_r=0$, (b) $T_r=T_e/2$ eV y (c) $T_r=T_e$ (LTE) según ATMED CR, ATMED LTE y Referencia [\[18\]](#).

6.5.2.2 Plasmas Ópticamente Gruesos

Los cálculos relativos a plasmas ópticamente gruesos ilustran el buen acoplamiento entre el balance de ATMED CR con los formalismos utilizados para plasmas no fotoionizados mediante un factor de escape aplicado a la emisión espontánea, o para los fotoionizados mediante la probabilidad de confinamiento de fotones aplicada a las tasas radiativas. En la [Tabla 6.42](#) y [Figura 6.90](#) se ilustran resultados de ATMED CR para plasmas de germanio previamente calculados con el modelo CR con desdoblamiento nl de Balazs Rozsnyai [16]. Para estos casos los caminos libres medios L_R y L_P (cm) son correctos en su orden de magnitud respecto a la Referencia [16].

Tabla 6.42: Propiedades de plasmas de germanio ópticamente delgados y gruesos.

T_e (eV)	T_R (eV) / Xdil	ρ (g/cm ³)	IP / CL	μ_e	L Plasma (cm)	Z_{bar} ATMED CR	L_R Rosseland (cm)	L_P Planck (cm)
76	76 / 0.25	5.000E-02	IP	-1.8294E+01	-	1.379E+01	4.218E-03	1.936E-03
76	76 / 0.25	5.000E-02	IP	-1.8295E+01	3.192E-03	1.379E+01	4.217E-03	1.936E-03
76	76 / 0.25	5.000E-02	CL	-1.8228E+01	-	1.412E+01	4.357E-03	2.079E-03
76	76 / 0.25	5.000E-02	CL	-1.8228E+01	3.192E-03	1.412E+01	4.357E-03	2.079E-03
300	300 / 0.25	5.000E-02	IP	-8.9468E+01	-	2.262E+01	1.571E-01	1.230E-02
300	300 / 0.25	5.000E-02	IP	-8.9471E+01	3.192E-03	2.262E+01	1.564E-01	1.229E-02
300	300 / 0.25	5.000E-02	CL	-8.9307E+01	-	2.296E+01	1.594E-01	1.316E-02
300	300 / 0.25	5.000E-02	CL	-8.9308E+01	3.192E-03	2.295E+01	1.592E-01	1.316E-02
300	150 / NO	5.000E-02	IP	-9.0007E+01	-	2.154E+01	1.145E-01	1.770E-02
300	150 / NO	5.000E-02	IP	-9.0007E+01	3.192E-03	2.154E+01	1.145E-01	1.769E-02
300	150 / NO	5.000E-02	CL	-8.9780E+01	-	2.199E+01	1.480E-01	2.519E-02
300	150 / NO	5.000E-02	CL	-8.9781E+01	3.192E-03	2.199E+01	1.477E-01	2.516E-02

Figura 6.90. Opacidad y transmisión del Ge a $T_e=T_R=76$ eV, $X_{dil}=0.25$ y 0.01 g/cm³, $L=3.192E-03$ cm con ATMED y Ref. [16].

6.6 Carbonoideos: No Metales

6.6.1 Carbono

El carbono es un elemento químico de símbolo C, número atómico $Z = 6$ y peso 12.011 g/mol.

6.6.1.1 Cálculos versus ABAKO & Otros Códigos

Para plasmas de carbono se han obtenido buenos resultados respecto a otros códigos [71÷75]. En la Figura 6.91 se aprecia el buen grado de acuerdo de la ionización media obtenida con ATMED CR respecto al código detallado ABAKO [74] para altas, medias densidades, sin embargo existen diferencias notables a bajas densidades. Se observa también la progresiva convergencia al régimen LTE del modelo colisional radiativo conforme aumenta la densidad, así como los efectos de no equilibrio que aparecen a altas densidades y con temperaturas crecientes a partir de 50÷100 eV. También se aprecia la sensibilidad al modelo de efectos de plasma. Existe mayor grado de acuerdo con el código detallado ABAKO si los cálculos se realizan con el formalismo de depresión del continuo CL que con ionización por presión IP, puesto que este modelo DCA usa el primero de ellos.

Figura 6.91. Grado medio de ionización del carbono según ATMED CR IP/CL, ATMED LTE y ABAKO [74].

6.7 Reuniones Científicas NLTE-3 y NLTE-4

6.7.1.1 Workshop NLTE-3 (<http://nlte.nist.gov/SAHA/>)

Se ha comprobado que los resultados obtenidos con ATMED CR de ionización media para todos los plasmas de varios elementos químicos de esta base de datos [28], están dentro del rango delimitado por el resto de participantes para un alto porcentaje de casos. Algunos de ellos se ilustran en la [Tabla 6.43](#).

Tabla 6.43: Plasmas de la base de datos NLTE-3.

Número Atómico Z	T _e (eV)	N _e (cm ⁻³)	ρ (gcm ⁻³)	Z _{bar} ATMED CR	Z _{bar} NLTE-3	K _R (cm ² /g)	K _P (cm ² /g)
6	10	1.0E+22	1.138E-01	1.753E+00	0.6÷2	8.483E+04	2.270E+05
6	20	1.0E+22	6.239E-02	3.197E+00	1.8÷3.4	7.464E+03	3.656E+04
6	30	1.0E+22	5.276E-02	3.780E+00	2.5÷3.8	1.472E+03	9.493E+03
6	60	1.0E+22	4.528E-02	4.404E+00	3.5÷4.5	3.760E+02	7.678E+03
6	80	1.0E+22	3.935E-02	5.068E+00	4.4÷5.1	3.248E+02	5.924E+03
13	50	1.0E+20	5.650E-04	7.931E+00	7.75÷9.5	2.526E+03	1.421E+04
13	100	1.0E+20	4.513E-04	9.928E+00	9.5÷10.5	5.766E+02	4.101E+03
13	200	1.0E+22	4.081E-02	1.098E+01	10.6÷11	1.431E+01	3.233E+02
13	400	1.0E+20	4.094E-04	1.094E+01	10.75÷11.25	1.492E+01	1.268E+03
13	800	1.0E+22	3.894E-02	1.151E+01	11.5÷12.5	2.718E+01	7.150E+02
18	100	1.0E+18	7.000E-06	9.548E+00	8.5÷10	1.396E+02	1.005E+04
18	1000	1.0E+23	4.000E-01	1.660E+01	16÷17	5.445E+00	2.819E+02
18	100	1.0E+18	7.000E-06	9.548E+00	8.5÷10	1.396E+02	1.005E+04
18	600	1.0E+23	4.210E-01	1.577E+01	15÷16	6.171E+00	3.185E+02
18	1000	1.0E+23	4.000E-01	1.660E+01	16÷17	5.445E+00	2.819E+02

Tabla 6.43: Plasmas de la base de datos NLTE-3.

Número Atómico Z	T _e (eV)	N _e (cm ⁻³)	ρ (gcm ⁻³)	Z _{bar} ATMED CR	Z _{bar} NLTE-3	K _R (cm ² /g)	K _P (cm ² /g)
32	150	1.0E+17	1.050E-06	1.152E+01	11÷17	2.276E+03	7.286E+03
32	250	1.0E+17	9.130E-07	1.324E+01	15÷19	1.449E+03	3.813E+03
32	400	1.0E+17	8.441E-07	1.453E+01	17÷20	8.424E+02	2.952E+03
32	400	1.0E+20	5.950E-04	2.037E+01	20÷22	5.838E+02	2.321E+03
32	600	3.0E+22	1.610E-01	2.247E+01	24÷26	3.071E+02	1.580E+03
54	200	1.1E+20	1.036E-03	2.447E+01	22÷26	2.570E+02	3.814E+03
54	455	1.2E+20	1.036E-03	2.587E+01	25÷28	3.110E+02	2.382E+03
79	750	1.0E+19	1.230E-04	2.664E+01	26÷43	7.289E+02	1.656E+03
79	750	1.0E+20	1.075E-03	3.070E+01	30÷44	6.513E+02	1.487E+03
79	750	1.0E+21	9.026E-03	3.624E+01	34÷45	5.231E+02	1.308E+03
79	750	1.0E+22	7.884E-02	4.148E+01	38÷56	3.437E+02	1.213E+03
79	750	1.0E+23	7.549E-01	4.333E+01	43÷48	2.758E+02	1.176E+03
79	1500	1.0E+19	7.550E-05	4.355E+01	39÷46	9.338E+01	6.045E+02
79	2500	1.0E+20	6.700E-04	4.914E+01	45÷50	6.496E+01	3.140E+02
79	2500	1.0E+22	6.410E-02	5.105E+01	48÷53	7.734E+01	3.026E+02
79	2500	1.0E+23	6.200E-01	5.296E+01	49.5÷58	8.294E+01	2.849E+02

Se muestran algunas de las gráficas de la base de datos para contrastar los datos tabulados calculados con ATMED CR. El resto de gráficas pueden consultarse en <http://nlte.nist.gov/SAHA/>.

Fig. 6.92a. Ionización media del C para $1\text{E}+22 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.92b. Ionización media del Al para $1\text{E}+20 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.92c. Ionización media del Ar para $1\text{E}+18 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.92d. Ionización media del Ge para $1\text{E}+17 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.92e. Ionización media Xe con $N_i=4.75\text{E}+18 \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.92f. Ionización media del Au para $1\text{E}+22 \text{ cm}^{-3}$.

6.7.1.2 Workshop NLTE-4 (<http://nlte.nist.gov/NLTE-4/>)

Se ha comprobado que los resultados obtenidos con ATMED CR de ionización media y pérdidas radiativas para todos los plasmas de varios elementos químicos de esta base de datos [29], están dentro del rango delimitado por el resto de participantes para un alto porcentaje de casos. Algunos de ellos se ilustran en la [Tabla 6.44](#).

Tabla 6.44: Plasmas de la base de datos NLTE-4.

Número Atómico Z	T _e (eV)	T _R (eV)	N _e (cm ⁻³)	ρ (gcm ⁻³)	Z _{bar} ATMED CR	Z _{bar} NLTE-4	RPL (erg/cm ³ .s)
6	5	-	1.0E+17	6.200E-07	3.222E+00	2.4÷3.2	2.162105E+12
6	5	-	1.0E+19	8.600E-05	2.340E+00	2÷2.3	9.722862E+16
6	7	-	1.0E+19	6.100E-05	3.278E+00	2.8÷3.25	4.895450E+16
6	10	-	1.0E+17	5.250E-07	3.829E+00	3.9÷4	1.616040E+12
6	10	-	1.0E+19	5.200E-05	3.854E+00	3.7÷4	2.139039E+16
18	50	-	1.0E+18	8.350E-06	8.000E+00	8÷8.4	5.463650E+14
18	300	-	1.0E+23	4.550E-01	1.459E+01	14.4÷16	9.416809E+25
18	600	-	1.0E+23	4.400E-01	1.576E+01	15.5÷16	3.767923E+25
50	20	-	1.0E+19	2.200E-04	8.990E+00	8.6÷9.8	3.570959E+17
50	25	-	1.0E+18	2.200E-05	9.034E+00	8.5÷10.5	8.119586E+15
50	25	-	5.0E+18	9.610E-05	1.027E+01	9.5÷11.25	1.588859E+17
50	35	-	1.0E+19	1.570E-04	1.260E+01	11.25÷13.5	1.332740E+18
50	40	-	1.0E+18	1.750E-05	1.133E+01	10.2÷13	2.951697E+16
50	40	-	5.0E+18	7.780E-05	1.268E+01	11.4÷14	5.570747E+17
54	20	-	1.0E+18	2.500E-05	8.775E+00	7.8÷11	5.298428E+15
54	50	-	1.0E+18	1.800E-05	1.216E+01	10÷14	2.659534E+16

Tabla 6.44: Plasmas de la base de datos NLTE-4.

Número Atómico Z	T _e (eV)	T _R (eV)	N _e (cm ⁻³)	ρ (gcm ⁻³)	Z _{bar} ATMED CR	Z _{bar} NLTE-4	RPL (erg/cm ³ .s)
54	50	-	1.0E+22	2.170E-01	1.008E+01	9÷13	7.130113E+24
54	100	-	1.0E+18	1.420E-05	1.538E+01	14÷22	1.051442E+17
54	100	-	1.0E+22	1.180E-01	1.853E+01	18÷21	1.144317E+24
54	200	-	1.0E+22	8.680E-02	2.532E+01	23÷26.6	1.537502E+24
54	1000	-	1.0E+18	8.500E-06	2.580E+01	25÷37	3.159152E+17
54	2000	-	1.0E+22	5.133E-02	4.248E+01	40÷43	6.923427E+23
54	5000	-	1.0E+22	5.029E-02	4.335E+01	43÷47	2.393517E+23
79	400	-	1.0E+22	9.013E-02	3.629E+01	34÷41	8.820492E+23
79	870	-	1.0E+21	8.692E-03	3.763E+01	37÷46	6.850959E+22
79	1400	-	1.0E+21	6.850E-03	4.974E+01	44÷50	3.830649E+22
79	2000	-	1.0E+21	6.519E-03	5.017E+01	48÷53	6.541206E+22
79	5000	-	1.0E+22	6.240E-02	5.241E+01	52÷64	1.361356E+24
79	400	175	1.0E+21	8.253E-03	3.964E+01	38÷43	4.979533E+22
79	400	175	1.0E+22	8.484E-02	3.856E+01	36÷43	1.249909E+24
79	870	175	3.0E+20	2.297E-03	4.273E+01	42÷47	1.148855E+22
79	870	175	1.0E+21	7.771E-03	4.209E+01	41.5÷47	8.993180E+22
79	870	175	1.0E+22	7.554E-02	4.330E+01	43÷48	1.464772E+24
79	1400	175	1.0E+22	6.550E-02	5.023E+01	47÷50.5	4.571608E+24

Se muestran algunas de las gráficas de la base de datos para contrastar los datos tabulados calculados con ATMED CR. El resto de gráficas pueden consultarse en <http://nlte.nist.gov/NLTE-4/>.

Fig. 6.93a. RPL del C para $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.93b. RPL del Ar para $1 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.93c. Ionización media del Xe para $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.93d. RPL del Xe para $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.93e. Ionización media del Au para $3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 6.93f. RPL del Au para $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$.

6.8 Mallas Finas de Cálculo Colisional Radiativo

6.8.1 Muestras Irradiadas

En experimentos reales para investigar los gradientes de densidad y temperatura creados en plasmas, se mide la transmisión de muestras de varios materiales irradiadas en máquinas Z-Pinch, resultando necesario el cálculo de opacidades y espectros sintéticos para una gran cantidad de puntos dentro de un rango no demasiado amplio, y son necesarias tablas muy detalladas de opacidades frecuenciales y medias.

Por ejemplo, en medidas de transmisión de muestras de Fe+Mg o Al+Fe+Mg con valores medios de $T_e = 195$ eV y $N_e = 8.0E+22$ cm⁻³ (Figura 6.94), se utiliza para la inferencia de temperatura y densidad electrónica, una base de datos que contiene 61 puntos de T_e en el rango 140÷250 eV, y 81 puntos de N_e en el rango $5.0E+21$ ÷ $2.0E+23$ cm⁻³ [76].

Figura 6.94. Muestras de Fe+Mg y Al+Fe+Mg y espectros de transmisión en condiciones medias de 195 eV y $8E+22$ cm⁻³ con gradientes del 10%. El número de capa es el subíndice i [76].

Tanto en la fórmula de la intensidad como en la de transmisión medida en las muestras, es necesario el valor del parámetro:

- $k_{\nu,i}^J$: Opacidad a la frecuencia ν para el elemento J en la capa i de un total de N capas.

La intensidad del espectro emergente medida en las muestras se aproxima por la siguiente fórmula:

$$I_{\nu,i} = I_{\nu,i-1} \exp\left(-\sum_J k_{\nu,i}^J (\rho L)_i^J\right) \quad (6.16)$$

Y la transmisión:

$$T_{\nu} = \frac{I_{\nu,N}}{I_{\nu,0}} = \prod_{i=1}^N \exp\left(-\sum_J k_{\nu,i}^J (\rho L)_i^J\right) \quad (6.17)$$

Donde:

- $I_{\nu,i}$ erg / (cm²s.str.eV): Intensidad a la frecuencia ν en la capa i de un total de N capas.
- $I_{\nu,0}$: Flujo de radiación a la frecuencia ν en la primera capa procedente de la fuente.
- $(\rho L)_i^J$ g / cm²: Densidad superficial del elemento químico J en la capa i .

Con los modelos CR se construyen bases de datos para estimar dicha opacidad para una temperatura electrónica T_e y densidad electrónica N_e dadas, tal que corresponda al valor más ajustado a las medidas experimentales de intensidad y transmisión. Con ATMED CR pueden realizarse también mallas muy finas de puntos densidad temperatura equiespaciados entre sí tal y como lo demandado en el experimento citado, es decir, 2 eV en temperatura electrónica y 0.25 cm⁻³ en densidad electrónica, siendo el código sensitivo a saltos tan pequeños en las variables termodinámicas por el desdoblamiento relativista de la estructura atómica.

Este grado de resolución es apreciable en la evolución de los parámetros de los plasmas calculados a esas condiciones, tal y como se muestra en las tablas del Anexo II, donde se han realizado mallas para la ionización media y la opacidad media de Rosseland de **12 x 31** puntos temperatura densidad con saltos de 10 eV en temperatura electrónica y 0.5 cm⁻³ en densidad electrónica. Para el hierro, el tiempo medio de cálculo para cada punto densidad de materia - temperatura es entorno a 125÷130 s y para cada punto densidad electrónica - temperatura entorno a 370÷375 s. También se incluyen extractos de valores de opacidad frecuencial en una malla muy fina de energías fotónicas para un punto densidad temperatura. Para el magnesio, el tiempo medio de cálculo para cada punto densidad de materia - temperatura es entorno a 50÷75 s y para cada punto densidad electrónica - temperatura entorno a 250÷325 s.

Así se pone de manifiesto el rápido y buen funcionamiento de los bucles iterativos con las fórmulas implementados en el programa informático incluso considerando como parámetro de entrada la densidad electrónica en lugar de la densidad de materia, ya que permiten el cómputo de un gran número de plasmas en rangos de densidad temperatura no demasiado amplios sin los típicos problemas que aparecen a veces en la ejecución de un código en FORTRAN (NaN, +Infinity, etc.). Todo ello redundo en que ATMED CR pueda ser considerado un programa muy robusto, especialmente para medias, altas densidades y temperaturas. No obstante, se ha comprobado que con saltos de 2 eV en temperatura electrónica y 0.25 cm⁻³ en densidad electrónica e incluso más pequeños, ATMED CR tampoco produce fallos de ejecución de FORTRAN.

6.8.2 Resistividad en Máquinas Z-Pinch

La ionización media se utiliza para el cálculo de las siguientes magnitudes de las máquinas Z-Pinch constituídas por una matriz o “array” de cables que implosionan en el eje liberando potencia radiativa:

- Frecuencia colisional electrónica ν_e :
$$\nu_e = \frac{1}{6\pi\sqrt{2\pi}} \frac{Z_{bar} e^4 N_e}{\epsilon_0^2 m_e^{1/2} T_e^{3/2}} \Lambda_e \quad (6.18)$$

- Logaritmo coulombiano electrónico: $\Lambda_e = \frac{1}{2} \ln \frac{(12\pi)^2 \epsilon_0^3 T_e^3}{e^6 N_e \left(1 + Z_{bar} T_e / T_i \right) \left(Z_{bar}^2 + \frac{3}{8} T_e / I_H \right)} \quad (6.19)$

- Resistencia eléctrica η :
$$\eta \propto \frac{Z_{bar}^2}{T_e} \Lambda_e \quad (6.20)$$

- Resistencia de la máquina Z-Pinch R :
$$R = \eta \frac{l_z}{\pi r_p^2} \quad (6.21)$$

- Tasa óhmica de calentamiento P :
$$P = RI^2 \quad (6.22)$$

Ya en el apartado 6.4.1.1, se calculó una malla muy fina para el elemento aluminio. En las siguientes secciones se realizarán también mallas para el cobre y el molibdeno, típicos elementos utilizados para el análisis de las propiedades radiativas de las máquinas Z-Pinch (Figura 6.95).

Figura 6.95. Implosión en el eje de un Z-pinch y emisión K- α de un plasma de cobre (izquierda). Símbolos de los cables de aluminio y molibdeno antes y después de la implosión (centro). Posición de los cables de los diferentes materiales y mezcla Mo/Al en un instante concreto de la implosión (derecha).

6.8.2.1 Cobre

Se pone de manifiesto la sensibilidad del programa ATMED CR respecto a ATMED LTE para un elemento de número atómico intermedio como el cobre, así como respecto a otros modelos de la referencia [61] denominados "Saha", "Average atom", "non-LTE" de acuerdo a la Figura 6.96. Los cálculos se han realizado considerando plasmas de cobre ópticamente delgados sin problemas en la ejecución (NaN, +Infinity, etc.). El tiempo medio para cada punto densidad de materia - temperatura es entorno a 75÷130 s y para cada punto densidad electrónica - temperatura entorno a 120÷450 s.

Figura 6.96. Grado medio de ionización del cobre para varias densidades según Saha, AA y NLTE [61] + ATMED.

6.8.2.2 Molibdeno

Se pone de manifiesto la sensibilidad del programa ATMED CR respecto a ATMED LTE para un elemento de número atómico intermedio como el molibdeno, así como respecto a otros modelos de la referencia [61] denominados "Saha", "Average atom", "non-LTE" de acuerdo a la Figura 6.97. Los cálculos se han realizado considerando plasmas de molibdeno ópticamente delgados sin problemas en la ejecución (NaN, +Infinity, etc.). El tiempo medio para cada punto densidad de materia - temperatura es entorno a 65÷85 s y para cada punto densidad electrónica - temperatura entorno a 120÷230 s.

Al igual que en el aluminio y en el cobre, se observa un acuerdo casi perfecto de ATMED LTE a aproximadamente la misma densidad electrónica respecto al denominado modelo "Saha", y de ATMED CR respecto al denominado "non-LTE" de la Referencia [61] a idéntica densidad electrónica. Se puede decir que como consecuencia del desdoblamiento relativista del modelo atómico NRSHM, se obtienen unos valores tan exactos de la ionización media en los regímenes LTE respecto a las ecuaciones del modelo Saha y NLTE con las ecuaciones del modelo colisional radiativo.

Figura 6.97. Grado medio de ionización del molibdeno para varias densidades según Saha, AA y NLTE [61] + ATMED.

6.9 Mezclas

6.9.1 Generalidades

En este apartado, se analizan mezclas binarias y multicomponente típicamente utilizadas en fusión por confinamiento inercial o magnético, plasmas astrofísicos, plasmas irradiados por haces láser o fotoionizados en máquinas de confinamiento de plasma por pinzamiento (Z-Pinch), etc. Han sido modeladas con el código ATMED CR calculando sus propiedades fundamentales, a su vez contrastadas con datos experimentales o cálculos teóricos realizados por otros modelos colisionales radiativos. Gran parte de los elementos químicos que constituyen las mezclas simuladas han sido analizados individualmente en los apartados anteriores.

6.9.2 Fusión por Confinamiento Inercial Indirecta

En la fusión por confinamiento inercial indirecta, la radiación que da lugar a la implosión de la cápsula de combustible es generada por la interacción de intensos haces de luz láser o de partículas, con el interior de las paredes de una cavidad denominada hohlraum. Esta radiación fuente en la ecuación de transporte de radiación, es descrita típicamente por el espectro de un cuerpo negro con una temperatura de radiación característica en el entorno de 250 eV, es decir, por la distribución Planckiana a dicha temperatura y la opacidad frecuencial se evalúa a dicha temperatura [77÷80].

Esta radiación a tan alta temperatura no sólo comprime la cápsula sino que también calienta las paredes del hohlraum formando un plasma ópticamente grueso que reradia dentro de la cavidad (Figura 6.98a). Debido al confinamiento espacial, la interacción de la radiación con las paredes del hohlraum está caracterizada por la múltiple absorción y reemisión de Rayos X.

Figura 6.98a. Cilindro "Hohlraum" y Cápsula Típica para FCI (izquierda). Pulso láser y temperatura de radiación (derecha).

El ratio entre el flujo reemitido y el flujo incidente se denomina albedo α . La eficiencia con la que los Rayos X se acoplan con la cápsula depende del albedo tal que a mayor albedo, mayor eficiencia. El flujo incidente se define como la suma del flujo reemitido más el flujo de Rayos X perdido en las paredes. Dicho flujo perdido se propaga a través de las paredes en forma de una onda de calor ablativa (difusiva).

La tasa de difusión de la onda de calor es aproximadamente inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la opacidad media de Rosseland. Incrementando dicho valor K_R se reduce la energía de la radiación perdida en las paredes y aumenta el albedo α . Por tanto, para una potencia láser y una eficiencia en la conversión a Rayos X determinadas, incrementa también la temperatura así como la eficiencia en el acoplamiento entre radiación y pastilla de combustible. El transporte de la radiación a través de materiales de alta opacidad puede ser descrito utilizando la opacidad media de Rosseland del medio. Al depender del inverso de la opacidad total en función de la frecuencia, el inverso de K_R está dominado por las regiones de baja opacidad:

$$\frac{1}{K_R} = \frac{\int_0^\infty K_v^{-1} (\partial B_v / \partial T) dv}{\int_0^\infty (\partial B_v / \partial T) dv} \quad (6.23)$$

- B_v : Espectro de un cuerpo negro.
- K_v : Opacidad total dependiente de la frecuencia.
- $(\partial B_v / \partial T)$: Función de pesado dependiente de la distribución Planckiana, es decir, radiación emitida por un cuerpo negro siendo T la temperatura de la radiación.

Según la fórmula (6.23), la opacidad media K_R para una temperatura específica, o para un rango de temperaturas no demasiado amplio, será máxima cuando el numerador sea el mínimo posible, ya que el denominador es constante al ser la integral el área encerrada por la curva (dB_v/dT) . Minimizar el numerador equivale a que los elementos químicos tengan sus picos de absorción localizados cerca del máximo de la función de pesado alrededor de $3.8 \div 4$ veces la temperatura de radiación. Dicha opacidad K_R describe por tanto el transporte de radiación en los materiales definiéndose mediante una función de pesado, como un valor medio de la opacidad total dependiente de la energía.

En FCI indirecta, se requiere un elemento que al ser sometido a la radiación del láser, tenga una gran eficiencia de absorción y sea capaz de generar y emitir una alta radiación de Rayos X que incidan sobre el combustible, produciendo la ablación del mismo y la posterior implosión. Se manejan varios elementos para conformar las paredes del hohlraum; entre los que destacan el oro, los lantánidos y el cobre. En la actualidad, existe un consenso casi absoluto respecto a que el oro es el material más adecuado para construir las paredes del hohlraum porque tiene una gran opacidad sobre un amplio rango del espectro de Rayos X.

En la [Figura 6.98](#) se ilustran espectros de opacidad frecuencial total (cm^2/g) de diferentes referencias de elementos puros y mezclas para FCI apreciándose la alta calidad espectral de ATMED CR respecto a otros códigos CR y modelos atómicos [60-77-78-79-80].

Figura 6.98b. Opacidad frecuencial (cm^2/g) versus energía fotónica (eV) para plasmas de oro a $T_e=400/500$ eV en LTE y NLTE ($T_R=0$ eV) y $\rho=1$ g/cm^3 , con sección de absorción ligado-ligado UTA/MUTA según ATMED CR o el código CR de la Ref. [79].

Figura 6.98c. Opacidad frecuencial (cm^2/g) versus energía fotónica (eV) para plasma de 70%Au+30%Gd a $T_e=500$ eV, $T_R=500$ eV y $\rho=20$ g/cm^3 (izquierda) y radio del ion esfera, según ATMED CR y el código de átomo medio de Yuan Jian-Min (Applied Physics, National University of Defense Technology, Changsha) para plasma 70%Au+30%Gd, $T_e=T_R$ eV, $\rho=20$ g/cm^3 (derecha).

Figura 6.98d. Opacidad (cm^2/g) vs. energía fotónica (eV) para plasmas en LTE a 1 g/cm^3 a 250 eV con ATMED CR y Ref. [80].

Figura 6.98e. Opacidad de plasmas Ho/Sn a 1 g/cm^3 : (a-b) $T_e=T_R=200 \text{ eV}$, (c-d) $T_e=T_R=250 \text{ eV}$ con ATMED CR y Ref. [80].

Figura 6.98f. Opacidad (cm^2/g) para plasmas Cu/Gd en LTE a 1 g/cm^3 a $T_e=T_R=150 \text{ eV}$ con ATMED CR y Ref. [60].

Figura 6.98g. Mezclas binarias con oro y tungsteno a densidades 0.1, 1 y 10 g/cm³ y $T_e=T_R$ según ATMED CR y el código DCA de la Referencia [80] para paredes de hohlraum: (1) Co, (2) Ni, (3) Cu, (4) Ag, (5) Sn, (6) CsI, (7) Nd, (8) Sm, (9) Gd, (10) Ho.

Figura 6.98h. Mezcla Au+Nd con densidad de materia 1 g/cm³ a $T_e=T_R=500$ eV según ATMED CR y la Ref. [79].

En la fusión inercial indirecta por confinamiento inercial, la mezcla de oro con otros elementos (lantánidos, metales, etc.) se ha analizado detalladamente como típico material de las paredes de hohlraum en condiciones de equilibrio local termodinámico, para incrementar la absorción de radiación caracterizada por K_R . Pero en los experimentos reales, el hohlraum estará sometido a unas condiciones variables dentro de un rango de densidades y temperaturas electrónicas y de radiación ($10^{-1} \div 10 \text{ g/cm}^3$, $100 \div 300 \text{ eV}$), teniendo en cuenta los típicos pulsos láser utilizados en FCI ([Figura 6.98a](#)). Es muy importante chequear que valores óptimos de K_R así como que la forma de los perfiles de espectros de opacidad, se conservan en dicho rango tal que las dependencias de K_R con la temperatura (dK_R/dT) y la densidad ($dK_R/d\rho$) son similares. De esta forma, el comportamiento de una mezcla o elemento puro estudiado para un punto concreto T_e - T_R - ρ puede ser extrapolado a un rango razonablemente amplio de temperaturas y densidades alrededor de dicho punto.

6.9.2.1 Mezclas Multicomponente como Paredes de Hohlraum en Estado Estacionario

Investigaciones teóricas relativas a encontrar un valor máximo de K_R han sido llevadas a cabo con modelos detallados DCA/STA y de átomo medio AA, considerando condiciones de régimen LTE en estado estacionario para mezclas densas y calientes de las paredes de hohlraum [\[60-80\]](#). ATMED CR modela mezclas en régimen NLTE estacionarias y además en un intervalo temporal de magnitudes termodinámicas variables, en tiempos de cálculo muy competitivos al combinar el uso de un modelo hidrogenoide apantallado relativista y el formalismo de átomo medio, ver [Tablas 6.45-6.46](#).

Tabla 6.45: Componentes de varias mezclas candidatas para las paredes de hohlraum y sus fracciones de volumen %.

Mezcla	79 %Au	74 %W	64 %Gd	60 %Nd	55 %Cs	53 %I	50 %Sn	47 %Ag
1	24	-	-	20	28	28	-	-
2	24	-	-	-	28	28	-	20
3	24	-	-	-	28	28	20	-
4	24	-	56	-	-	-	-	20
5	24	-	20	-	28	28	-	-
6	15	-	25	-	17.5	17.5	-	25
7	22.5	-	22.5	-	27.5	27.5	-	-
8	11.25	11.25	22.5	-	27.5	27.5	-	-
9	11.25	11.25	11.25	11.25	27.5	27.5	-	-

Tabla 6.46: Propiedades de las mezclas en LTE y NLTE con densidad de materia 1 g/cm³.

Mezcla	Tiempo CPU (s)	T _e (eV)	T _R (eV)	X _{dilu}	μ _e	Z _{bar}	K _R (cm ² /g) ATMED CR	K _R (cm ² /g) STA [60]	K _P (cm ² /g) ATMED CR
1	7.76E+00	250	250	1	-5.364	27.558	1.965E+03	2.670E+03	3.187E+03
1	7.88E+02	250	100	1	-5.376	27.235	2.929E+03	-	7.293E+03
2	3.04E+01	250	250	1	-5.340	26.861	1.936E+03	2.605E+03	3.287E+03
2	1.20E+03	250	250	0.25	-5.349	26.614	2.021E+03	-	3.401E+03
3	2.94E+01	250	250	1	-5.349	27.015	1.902E+03	2.592E+03	3.284E+03
3	1.53E+03	250	300	1	-5.338	27.306	1.599E+03	-	2.861E+03
4	2.60E+01	250	250	1	-5.388	28.351	1.523E+03	2.382E+03	2.922E+03
4	9.77E+02	250	300	0.75	-5.384	28.479	1.385E+03	-	2.605E+03
Mezcla	Tiempo CPU (s)	T _e (eV)	T _R (eV)	X _{dilu}	μ _e	Z _{bar}	K _R (cm ² /g) ATMED CR	K _R (cm ² /g) DCA [80]	K _P (cm ² /g) ATMED CR
5	2.21E+01	250	250	1	-5.373	27.790	1.964E+03	2.715E+03	3.127E+03
5	1.30E+03	250	50	1	-5.386	27.441	8.038E+03	-	2.471E+04
6	2.79E+01	250	250	1	-5.335	26.933	2.078E+03	2.844E+03	3.107E+03
6	1.03E+03	250	250	0.25	-5.343	26.713	2.162E+03	-	3.204E+03
7	2.31E+01	250	250	1	-5.371	27.775	1.955E+03	2.804E+03	3.109E+03
7	1.31E+03	250	100	0.5	-5.384	27.438	3.274E+03	-	7.321E+03
8	5.10E+01	250	250	1	-5.365	27.688	1.968E+03	2.902E+03	3.049E+03
8	2.68E+03	250	300	1	-5.354	27.980	1.719E+03	-	2.724E+03
9	5.15E+01	250	250	1	-5.360	27.558	2.067E+03	2.944E+03	3.083E+03
9	2.05E+03	250	300	0.75	-5.356	27.671	1.826E+03	-	2.785E+03

Figura 6.99. Mezcla 9 a $T_e=T_R=250$ eV con densidad de materia 1 g/cm³ según ATMED CR y el código DCA de la Ref. [80].

Figura 6.100. Mezcla 6 pero normalizada sin oro (29.5% Gd, 41% CsI y 29.5% Ag) en LTE a $T_e=T_R=250$ eV con densidad 1 g/cm³ según ATMED CR y el código DCA de la Ref. [60]. El pico central de absorción cae a 1015 eV con ATMED y 967 eV con la Ref. [60] (superior). Mezcla 6 pero normalizada sin oro (29.5% Gd, 41% CsI y 29.5% Ag) con densidad 1 g/cm³ y $T_e=50\div350$ eV, $T_R=250$ eV con ATMED CR (inferior).

Figura 6.101a. Opacidad (cm²/g) vs. energía fotónica (eV) para las mezclas a $T_e = 250$ eV y 1 g/cm^3 con ATMED CR.

Las Figuras 6.100-6.101 representan las opacidades frecuenciales (cm^2/g) de algunas mezclas en no equilibrio local termodinámico calculadas con ATMED CR. Se forma un pico de absorción ancho alrededor de $4 \cdot T_R$ eV y se observa la gran sensibilidad de los calculos a la composición química. Por ejemplo en la Figura 6.101b, los picos de absorción de los diferentes componentes de las mezclas 1 y 7, es decir del neodimio (20%) y del gadolinio (22.5%) respectivamente, se distinguen claramente. En la Figura 6.101c, se ve la sensibilidad al porcentaje de gadolinio en las mezclas 4 (56%), 8 (22.5%) y 9 (11.25%) respectivamente a las energías fotónicas 1451.25, 6096, 6819 y 7383 eV, siendo la opacidad de las mezclas a esas energías fotónicas proporcional a la fracción de gadolinio.

Figura 6.101b. Opacidad frecuencial (cm^2/g) de las mezclas 1 y 7 a $T_e=250$ eV, $\rho=1$ g/cm³ y $T_R=100$ eV.

Figura 6.101c. Opacidad frecuencial (cm^2/g) de las mezclas 3, 4, 8 y 9 a $T_e=250$ eV, $\rho=1$ g/cm³ y $T_R=300$ eV.

Con el objetivo de encontrar empíricamente una cota superior alcanzable para la opacidad media de Rosseland, se analizan mezclas multicomponente para el hohlraum. Los picos y valles de absorción del oro y del tungsteno se complementan en el rango para la energía del fotón desde 500 a 1000 eV, especialmente alrededor de 585 y 660 eV, [Figura 6.98d](#). Esto impulsa la idea de utilizar mezclas de Au/W en lugar de Au puro. Análogamente usando Gd + Nd en lugar de sólo Gd se obtiene una ligera mejora en la opacidad.

Las mezclas analizadas con ATMED CR se han ido conformando partiendo de las fracciones de los dos elementos de una mezcla binaria que daba lugar a un alto valor de opacidad, añadiéndole después un tercer elemento. Empezando con la mezcla 1 (24%Au-76%CsI) para la que el pico de absorción está cerca de 1000 eV respecto al oro puro ($K_R = 1228 \rightarrow 1818 \text{ cm}^2/\text{g}$), se han ido añadiendo progresivamente Gd (mezcla 2), W (mezcla 3) y Nd (mezcla 4), puesto que estos elementos tienen picos a energías mayores o menores que 1000 eV.

A la vista de los resultados de la [Figura 6.101d](#), añadir un tercer elemento como el (Gd) respecto a la mezcla 1 de partida, incrementa la opacidad media sólo ligeramente ($K_R = 1818 \rightarrow 1964 \text{ cm}^2/\text{g}$). Físicamente, el segundo elemento (CsI) rellena la mayoría de los valles de absorción del espectro del oro, mientras que un tercer elemento (Gd) sólo puede rellenar los valles restantes que son menos importantes. Esta tendencia es confirmada por la adición de un cuarto elemento (W) en la mezcla 3 ($K_R = 1964 \rightarrow 1968 \text{ cm}^2/\text{g}$) o un quinto elemento (Nd) en la mezcla 4 ($K_R = 1968 \rightarrow 2067 \text{ cm}^2/\text{g}$).

Figura 6.101d. Opacidad frecuencial (cm^2/g) de oro puro y varias mezclas 1-2-3-4 con ATMED CR a $T_e=T_R=250 \text{ eV}$, $\rho=1 \text{ g/cm}^3$.

Estas investigaciones son importantes en la búsqueda de aleaciones de varios materiales por la cada vez más acuciante escasez de oro y por el gran importe económico que supone la campaña experimental destinada a lograr la ignición. También han de ser considerados los procesos de fabricación existentes y si es técnicamente posible obtenerlas.

6.9.2.2 Mezclas Temporales Multicomponente como Paredes de Hohlraum

A continuación se calcula con ATMED CR, una mezcla para paredes de hohlraum de fracciones de volumen 24%Au+20%Gd+56%CsI, suponiendo los perfiles de temperatura electrónica y de radiación según la [Figura 6.102 \[81\]](#), variables con el tiempo tras la iluminación de haces láser, tal que la densidad del plasma permanece constante. En la [Figura 6.103](#) se ilustra la opacidad frecuencial total de la mezcla en diferentes intervalos de tiempo, como magnitud representativa de los cambios en el plasma, así como la evolución temporal de algunas tasas. El código también calcula otras magnitudes versus tiempo ([Tabla 6.47](#)), resultando un tiempo total de computación de 2.284E+03 s.

Considerando la misma mezcla 24%Au+20%Gd+56%CsI, suponiendo que sólo cambia en el tiempo la temperatura electrónica, pueden observarse dentro de la misma gráfica ([Figura 6.104](#)) los cambios en la opacidad frecuencial total de la mezcla. El código también calcula otras magnitudes versus tiempo ([Tabla 6.48](#)), resultando un tiempo total de computación de 1.789E+03 s.

El código desglosa las tasas en todos los orbitales relativistas de cada componente para cada intervalo temporal para poder ser analizadas en profundidad. Por ejemplo, en las [Tablas 6.49÷6.50](#), se tabulan para la mezcla 25%Au+25%Gd+25%Nd+15%Ag+10%CsI, parámetros del plasma, las evoluciones temporales respectivamente de las tasas de fotoexcitación y fotodesexcitación que despueblan algunos de los orbitales del oro en la mezcla y de los flujos totales que pueblan todos los orbitales de todos los componentes de la mezcla.

Fig. 6.102. Temperaturas de pared y de radiación en un Hohlraum Nova: (A) T_R , (B) T^a electrónica (izquierda). Temperatura de radiación sobre una cápsula de FCI, calentamiento central logrado por la radiación (derecha) [Ref. \[81\]](#).

Figura 6.103a. Evolución temporal de la opacidad para la mezcla 24%Au-20%Gd-56%CsI (0 / 0.5 / 1 / 1.75 ns)

Figura 6.103b. Evolución temporal de tasas o flujos de población de los componentes de la mezcla 24%Au-20%Gd-56%CsI.

Figura 6.103c. Evolución temporal de la opacidad para la mezcla 24%Au-20%Gd-56%CsI y el Au (0.25 / 0.75 / 1.25 / 1.75 ns).

Tabla 6.47: Evolución temporal de variables para la mezcla 24%Au-20%Gd-56%CsI con factor de dilución 1.

Tiempo (s)	T _e (eV)	T _R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z _{bar}	K _R (cm ² /g)	K _P (cm ² /g)	K _{P MUTA}	RPL (J/cm ³ s)
0.0E+00	50	15	1	8.343	4.146E+04	6.566E+04	2.459E+05	1.238E+19
2.5E-10	180	220	1	22.878	2.911E+03	4.246E+03	3.401E+03	1.114E+19
5.0E-10	208	240	1	25.033	2.432E+03	3.641E+03	2.950E+03	9.300E+18
7.5E-10	216	242	1	25.586	2.339E+03	3.530E+03	2.925E+03	8.804E+18
1.0E-09	219	240	1	25.776	2.324E+03	3.516E+03	2.987E+03	8.584E+18
1.25E-09	195	200	1	23.982	2.884E+03	4.279E+03	4.173E+03	9.407E+18
1.5E-09	171	175	1	22.089	3.493E+03	5.149E+03	5.240E+03	1.075E+19
1.75E-09	158	162	1	20.981	3.905E+03	5.773E+03	5.968E+03	1.162E+19
2.0E-09	148	148	1	20.082	4.371E+03	6.510E+03	6.971E+03	1.220E+19

Tabla 6.48: Evolución temporal de variables para la mezcla 24%Au-20%Gd-56%CsI con factor de dilución 1 y T_R=180 eV.

Tiempo (s)	T _e (eV)	T _R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z _{bar}	K _R (cm ² /g)	K _P (cm ² /g)	K _{P MUTA}	RPL (J/cm ³ s)
0.0E+00	50	180	1	8.344	6.834E+03	1.249E+04	4.275E+03	4.264E+19
2.5E-10	180	180	1	22.820	3.281E+03	4.867E+03	5.007E+03	1.009E+19
5.0E-10	208	180	1	24.891	2.858E+03	4.403E+03	5.169E+03	8.081E+18
7.5E-10	216	180	1	25.433	2.757E+03	4.288E+03	5.207E+03	7.618E+18
1.0E-09	219	180	1	25.631	2.721E+03	4.247E+03	5.227E+03	7.458E+18
1.25E-09	195	180	1	23.971	3.039E+03	4.605E+03	5.103E+03	8.931E+18
1.5E-09	171	180	1	22.090	3.442E+03	5.044E+03	4.968E+03	1.090E+19
1.75E-09	158	180	1	20.989	3.685E+03	5.333E+03	4.893E+03	1.225E+19
2.0E-09	148	180	1	20.097	3.910E+03	5.589E+03	4.843E+03	1.344E+19

Figura 6.104a. Opacidad frecuencial en varios instantes para el plasma 24%Au-20%Gd-56%CsI, Au, Gd, Cs a $T_R=180$ eV.

Figura 6.104b. Opacidad frecuencial para el plasma 24%Au-20%Gd-56%CsI a $T_R=180$ eV en 0 ns y 1 ns.

Considerando ahora la mezcla 25%Au+25%Gd+25%Nd+15%Ag+10%CsI, se chequea la sensibilidad del código a cambios en un solo parámetro de entrada, que es en este caso la temperatura de radiación T_R (Tabla 6.49). Se supone que el perfil de T_R (Figura 6.105) corresponde al calculado en base al flujo de radiación incidente sobre una superficie posicionada donde se localiza el instrumento Dante dentro del hohlraum [82]. El tiempo total de computación es 2.13E+04 s.

Tabla 6.49: Evolución temporal de variables para la mezcla 25%Au-25%Gd-25%Nd-15%Ag-10%CsI

Tiempo (s)	T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	X_{dilu}	Z_{bar}	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (J/cm ³ s)
1E-10	250	144	1	1	27.742	2.867E+03	4.817E+03	4.258856E+18
2E-10	250	173	1	1	27.795	2.549E+03	4.008E+03	5.108941E+18
3E-10	250	182	1	1	27.817	2.473E+03	3.830E+03	5.371649E+18
4E-10	250	186	1	1	27.828	2.442E+03	3.759E+03	5.487535E+18
5E-10	250	188	1	1	27.834	2.427E+03	3.725E+03	5.546084E+18
6E-10	250	190	1	1	27.840	2.412E+03	3.692E+03	5.604622E+18
7E-10	250	194	1	1	27.851	2.384E+03	3.629E+03	5.720155E+18
8E-10	250	196	1	1	27.858	2.370E+03	3.599E+03	5.778634E+18
9E-10	250	198	1	1	27.864	2.357E+03	3.570E+03	5.83710E+18

Figura 6.105. Perfil de la Temperatura de radiación (eV) en un Hohlraum basado en el flujo incidente (GW/sr) en una superficie localizada en la posición de Dante [82], ver Figura 1.1b en Láser Omega.

Tabla 6.50a: Evoluciones temporales de las tasas de fotoexcitación/desexc. que despueblan orbitales del oro en la mezcla

Tiempo (s)	Σ Niveles Energía Au	2s _{1/2}	2p _{1/2}	2p _{3/2}	3s _{1/2}	5d _{5/2}	6h _{11/2}
3E-10	1.7058E+15	0	0	4.4914E+00	8.5100E+07	5.4231E+13	8.1793E+13
4E-10	1.7288E+15	0	0	2.2216E+00	9.2976E+07	5.5250E+13	8.2934E+13
5E-10	1.7405E+15	0	0	1.1108E+00	9.7257E+07	5.5759E+13	8.3510E+13
6E-10	1.7523E+15	0	0	1.1108E+00	1.0180E+08	5.6267E+13	8.4088E+13
7E-10	1.7759E+15	0	0	2.1733E+00	1.1176E+08	5.7285E+13	8.5245E+13
8E-10	1.7881E+15	0	0	1.3523E+00	1.1733E+08	5.7789E+13	8.5841E+13
9E-10	1.8003E+15	0	0	1.2074E+00	1.2326E+08	5.8296E+13	8.6431E+13

Tabla 6.50b: Evoluciones temporales de flujos totales que pueblan todos los orbitales de todos los componentes de la mezcla

Tiempo (s)	Au	Gd	Nd	Ag	I	Cs
1E-10	5.480432E+20	1.931303E+20	1.526214E+20	6.675823E+19	9.982272E+19	3.292023E+18
2E-10	5.332054E+20	1.915612E+20	1.518322E+20	6.584321E+19	9.920585E+19	1.041280E+20
3E-10	5.274328E+20	1.909386E+20	1.514543E+20	6.546242E+19	9.884212E+19	1.037786E+20
4E-10	5.246165E+20	1.906569E+20	1.512807E+20	6.526723E+19	9.867581E+19	1.036162E+20
5E-10	5.231804E+20	1.904927E+20	1.511749E+20	6.516780E+19	9.857498E+19	1.035186E+20
6E-10	5.217237E+20	1.903251E+20	1.510662E+20	6.506679E+19	9.850146E+19	1.034183E+20
7E-10	5.189037E+20	1.899781E+20	1.508699E+20	6.485935E+19	9.828698E+19	1.032086E+20
8E-10	5.172389E+20	1.898029E+20	1.507544E+20	6.475541E+19	9.817854E+19	1.031022E+20
9E-10	5.157091E+20	1.896229E+20	1.506346E+20	6.464927E+19	9.806681E+19	1.029920E+20

6.9.2.3 Mezclas Binarias como Ablator en Cápsulas

Con el código ATMED LTE han sido analizadas numerosas mezclas susceptibles de ser materiales candidatos para el ablator de cápsulas en FCI indirecta en NIF (National Ignition Facility). Las fracciones ideales de los componentes que proporcionan la óptima opacidad media de Rosseland han sido calculadas con códigos hidrodinámicos, para maximizar la eficiencia del acoplamiento de la cápsula con la radiación procedente del hohlraum por la iluminación de haces láser. El valor óptimo de K_R no es siempre el máximo alcanzable con el mayor porcentaje de dopante de acuerdo a las especificaciones de rugosidad de la cápsula, sino aquel que proporciona el máximo rendimiento con las menores inestabilidades hidrodinámicas posibles para alcanzar finalmente la ignición.

En los siguientes apartados, se estudian varias mezclas de interés en FCI para su utilización como ablator o como capa de muestreo ("signature layer") en la cápsula. Estas mezclas pueden ser utilizadas en estado sólido o bajo la forma de espumas o aerogeles, para las típicas condiciones de FCI indirecta dentro del rango de densidades $10^{-3} \div 10 \text{ g/cm}^3$ y temperaturas $10 \div 360 \text{ eV}$.

En las [Tablas 6.51-6.52](#) y [Figuras 6.106-6.107](#) se ilustran las propiedades de mezclas de SiO_2 y SiC (5%C) en regímenes LTE o NLTE en estado estacionario, y considerando un campo de radiación Planckiano incidente sobre la cápsula de 300 eV, típico valor inferido del espectro registrado por la instrumentación denominada Dante instalada en el cilindro hohlraum. Otras referencias para el silicio y SiO_2 en condiciones propias de FCI se encuentran en los artículos [\[70-79\]](#).

En el caso del componente SiO_2 las fracciones numéricas de masa son:

$$X_{Si} = \frac{m_{Si}}{m_{Total}} = \frac{A_{Si}}{A_{Si} + 2 * A_O} = \frac{28.086}{28.086 + 2 * 16} = 0.467430017$$

$$X_{O_2} = \frac{2 * m_O}{m_{Total}} = \frac{2 * A_O}{A_{Si} + 2 * A_O} = \frac{2 * 16}{28.086 + 2 * 16} = 0.532569983 \quad (6.24)$$

Y las fracciones numéricas de volumen según la formulación de la tesis ATMED son:

$$f_{Si} = \frac{X_{Si} A_{O_2}}{X_{Si} A_{O_2} + X_{O_2} A_{Si}} = 50\%$$

$$f_{O_2} = 1 - f_{Si} = \frac{X_{O_2} A_{Si}}{X_{Si} A_{O_2} + X_{O_2} A_{Si}} = 50\% \quad (6.25)$$

Tabla 6.51: Propiedades de la mezcla SiO₂ en regímenes LTE o NLTE con factor de dilución 1.

T _e (eV)	T _R (eV)	ρ (g/cm ³)	μ _e	Z _{bar} SiO ₂	Z _{bar} Si	Z _{bar} O	K _R (cm ² /g) SiO ₂	K _P (cm ² /g) SiO ₂	RPL SiO ₂ (J/cm ³ s)
200	300	2.6E-02	-7.793	9.917	11.991	7.843	2.002E+01	2.876E+02	1.367E+16
300	300	2.6E-02	-8.352	10.418	12.895	7.941	6.995E+00	1.866E+02	7.661E+15
400	300	2.6E-02	-8.747	10.808	13.650	7.964	3.650E+00	1.291E+02	5.195E+15
200	300	2.6	-3.729	5.722	9.086	2.356	1.319E+03	3.147E+03	2.993E+22
300	300	2.6	-4.084	7.390	10.444	4.335	4.543E+02	1.395E+03	6.957E+21
400	300	2.6	-4.394	8.358	11.281	5.433	2.384E+02	9.532E+02	3.775E+21
500	300	2.6	-4.649	9.061	12.057	6.064	1.577E+02	7.642E+02	2.719E+21

Tabla 6.52: Propiedades de la mezcla SiC en regímenes LTE o NLTE con factor de dilución 1.

T _e (eV)	T _R (eV)	ρ (g/cm ³)	μ _e	Z _{bar} SiC	Z _{bar} Si	Z _{bar} C	K _R (cm ² /g) SiC	K _P (cm ² /g) SiC	RPL SiC (J/cm ³ s)
100	300	2.6E-02	-6.728	5.908	10.96	5.641	4.421E+01	2.073E+02	6.874E+16
300	300	2.6E-02	-8.308	6.322	12.87	5.976	2.073E+00	3.740E+01	1.315E+16
500	300	2.6E-02	-9.065	6.384	13.87	5.990	7.100E-01	1.748E+01	6.108E+15
1000	300	2.6E-02	-10.10	6.396	13.98	5.996	2.952E-01	8.311E+00	2.188E+15
150	300	2.6	-3.089	4.067	6.844	3.921	4.168E+02	1.842E+03	7.103E+21
200	300	2.6	-3.366	4.766	8.388	4.575	2.929E+02	1.201E+03	5.514E+21
300	300	2.6	-3.841	5.470	10.12	5.225	1.545E+02	6.566E+02	3.552E+21
400	300	2.6	-4.219	5.785	11.09	5.505	9.709E+01	4.736E+02	2.481E+21
500	300	2.6	-4.524	5.964	11.93	5.650	6.907E+01	3.917E+02	1.851E+21

Fig. 6.106. Opacidad frecuencial (cm^2/g) a $T_R=300\text{eV}$ para SiO_2 a varias temperaturas electrónicas y 2.6 g/cm^3 .

Figura 6.107. Opacidad frecuencial (cm^2/g) a $T_e=300 \text{ eV}$ para SiC , $T_R=0 \text{ eV}$ y $N_e=6.0\text{E}+23 \text{ cm}^{-3}$ con el código ALICE II de Ref. [70] y ATMED CR. La línea gris gruesa corresponde al espectro de la instrumentación DANTE.

6.9.2.4 Mezclas Multicomponente como Ablator en Cápsulas

En la [Tabla 6.53](#) se ilustra la evolución temporal de las propiedades del plasma CHO+Ge formado por la iluminación mediante Rayos-X del ablator de una cápsula a las típicas condiciones de FCI. Se consideran constantes en el tiempo la densidad de la cápsula y la temperatura electrónica, y un perfil de temperatura de radiación variable ([Figura 6.108](#)) visto desde la cápsula y resultante de modular la potencia del haz láser incidente sobre las paredes del hohlraum versus tiempo [83].

Figura 6.108. Típicas cápsulas para fusión por confinamiento inercial con el ablator dopado según la región con varias fracciones de volumen. Las capas internas son dopadas con elementos de número atómico bajo o medio (Be, Ge, Cu, Ti, Si).

La cápsula simulada tiene una composición en fracciones de volumen de 41.7%C+57.2%H+0.5%O, dopada con germanio (0.6%Ge) [83-84]. La ionización media no varía prácticamente con el tiempo debido a la pequeña fracción de germanio parcialmente ionizado y el bajo número atómico de los componentes mayoritarios, carbono e hidrógeno, que en estas condiciones están altamente ionizados. Se producen sin embargo variaciones significativas en las opacidades medias de Rosseland y Planck y en las pérdidas radiativas. El tiempo total de cálculo es 1.375E+03 s.

Tabla 6.53: Evolución temporal de las propiedades del plasma 41.7%C-57.2%H-0.5%O-0.6%Ge con factor de dilución 1, $\rho=1$ g/cm³, $N_e=2.90E+23$ cm⁻³ y $N_i=1.95E+23$ ion/cm³.

Tiempo (s)	T _e (eV)	T _R (eV)	Z _{bar}	Z _{bar} Ge	K _R (cm ² /g)	K _P (cm ² /g)	RPL (J/cm ³ s)
2.0E-09	250	10	2.938	17.740	4.033E+05	1.267E+07	2.123E+20
3.0E-09	250	50	2.938	17.740	5.971E+03	5.862E+04	4.748E+20
4.0E-09	250	75	2.938	17.740	3.132E+03	1.763E+04	5.815E+20
5.0E-09	250	68	2.938	17.740	3.684E+03	2.320E+04	5.537E+20
6.0E-09	250	68	2.938	17.740	3.684E+03	2.320E+04	5.537E+20
7.0E-09	250	68	2.938	17.740	3.684E+03	2.320E+04	5.537E+20
8.0E-09	250	68	2.938	17.740	3.684E+03	2.320E+04	5.537E+20
9.0E-09	250	69	2.938	17.740	3.597E+03	2.225E+04	5.577E+20
1.0E-08	250	70	2.938	17.740	3.514E+03	2.136E+04	5.617E+20
1.1E-08	250	72	2.938	17.740	3.354E+03	1.974E+04	5.697E+20
1.2E-08	250	110	2.938	17.742	1.541E+03	6.796E+03	7.042E+20
1.3E-08	250	105	2.938	17.741	1.684E+03	7.556E+03	6.880E+20
1.4E-08	250	120	2.938	17.742	1.308E+03	5.608E+03	7.355E+20
1.5E-08	250	150	2.938	17.743	8.930E+02	3.527E+03	8.223E+20
1.6E-08	250	200	2.938	17.744	6.084E+02	2.038E+03	9.495E+20
1.7E-08	250	260	2.938	17.745	4.498E+02	1.304E+03	1.082E+21
1.8E-08	250	290	2.938	17.746	3.907E+02	1.101E+03	1.143E+21
1.9E-08	250	304	2.938	17.748	3.654E+02	1.026E+03	1.170E+21
2.0E-08	250	280	2.938	17.746	4.096E+02	1.161E+03	1.123E+21

En la [Figura 6.109](#) se ilustra ahora la evolución temporal de la opacidad frecuencial del plasma CH+Br formado por la iluminación mediante Rayos-X del ablador de una cápsula a las típicas condiciones de FCI. Se consideran constantes en el tiempo la densidad de la cápsula $\rho = 1 \text{ g/cm}^3$ y la temperatura electrónica $T_e = 100 \text{ eV}$, y un perfil de temperatura de radiación ([Figura 6.102](#)) acorde a simulaciones hidrodinámicas [81]. La cápsula simulada tiene una composición en fracciones de volumen de 42%C+57.2%H, dopada con bromo (0.8%Br) [81]. La ionización media no varía prácticamente con el tiempo debido a la pequeña fracción de bromo y el bajo número atómico de los componentes mayoritarios, carbono e hidrógeno altamente ionizados. Se producen sin embargo variaciones significativas en las opacidades medias de Rosseland y Planck, en la opacidad frecuencial y en las pérdidas radiativas. El tiempo total de cálculo es $1.238\text{E}+02 \text{ s}$.

Figura 6.109. Evolución temporal de la opacidad para la cápsula 42%C-57.2%H-0.8%Br (0 / 1 / 2 / 3 ns).

A continuación en la [Tabla 6.54](#) se ilustra la evolución temporal de las propiedades del plasma 99.3%Be+0.7%Cu del ablador de una cápsula a las típicas condiciones de FCI. Se consideran constantes en el tiempo la densidad de la cápsula y la temperatura electrónica, y un perfil de temperatura de radiación de la [Figura 6.105](#) que corresponde al calculado en base al flujo de radiación incidente sobre una superficie posicionada donde se localizan el instrumento Dante y el hohlraum. La temperatura inferida es $11 \div 13 \text{ eV}$ mayor que la temperatura de radiación sobre la superficie de la cápsula, correspondiendo a una temperatura $6 \div 7\%$ mayor y a un flujo de radiación $25 \div 30\%$ mayor en las paredes del hohlraum [82]. El tiempo total de computación es $8.1558\text{E}+03 \text{ s}$.

Tabla 6.54: Evolución temporal de las propiedades del plasma 99.3%Be+0.7%Cu

Tiempo (s)	T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	X_{dilu}	Z_{bar}	K_R (cm ² /g)	K_P (cm ² /g)	RPL (J/cm ³ s)
1E-10	300	144	0.1	1	4.089	1.603E+01	1.233E+02	4.859538E+17
2E-10	300	173	0.1	1	4.090	1.501E+01	9.860E+01	5.320087E+17
3E-10	300	182	0.1	1	4.090	1.501E+01	9.576E+01	5.459856E+17
4E-10	300	186	0.1	1	4.090	1.500E+01	9.474E+01	5.512251E+17
5E-10	300	188	0.1	1	4.090	1.502E+01	9.439E+01	5.542371E+17
6E-10	300	190	0.1	1	4.090	1.504E+01	9.407E+01	5.552141E+17
7E-10	300	194	0.1	1	4.090	1.509E+01	9.354E+01	5.608773E+17
8E-10	300	196	0.1	1	4.090	1.512E+01	9.334E+01	5.647795E+17
9E-10	300	198	0.1	1	4.090	1.512E+01	9.298E+01	5.666204E+17

Figura 6.110. Cápsula de FCI de Be(99.1%) + Cu(0.9%) a 0.1 g/cm³ y $T_e=25\div 200$ eV, $T_R=100$ eV con ATMED CR y Ref. [85].

6.9.3 Fusión por Confinamiento Magnético

Debido a la super conductividad del compuesto estaño-niobio, su principal aplicación es el área de los imanes de alto campo electromagnético de laboratorio. Por su capacidad de operación con grandes intensidades de corriente y fuertes campos magnéticos, la demanda de estaño-niobio se ha incrementado considerablemente ya que los sistemas de campo toroidal y solenoide central del reactor experimental ITER demandarán más de 600 toneladas de cables de estaño-niobio.

Un estudio propuesto por Los Alamos National Laboratory (LANL), ver “*TABLE 1*” de la Referencia [54], ha consistido en analizar la sensibilidad de la opacidad de plasmas de estaño-niobio a la temperatura de radiación, considerando alta o moderada ionización de la mezcla SnNb. En el caso del componente SnNb las fracciones numéricas de masa son:

$$X_{Sn} = \frac{m_{Sn}}{m_{Total}} = \frac{A_{Sn}}{A_{Sn} + A_{Nb}} = \frac{118.710}{118.710 + 92.906} = 0.560968925$$

$$X_{Nb} = \frac{m_{Nb}}{m_{Total}} = \frac{A_{Nb}}{A_{Sn} + A_{Nb}} = \frac{92.906}{118.710 + 92.906} = 0.439031075 \quad (6.26)$$

Y las fracciones numéricas de volumen según la formulación de la tesis ATMED son:

$$f_{Sn} = \frac{X_{Sn} A_{Nb}}{X_{Nb} A_{Sn} + X_{Sn} A_{Nb}} = 50\%$$

$$f_{Nb} = 1 - f_{Sn} = \frac{X_{Nb} A_{Sn}}{X_{Nb} A_{Sn} + X_{Sn} A_{Nb}} = 50\% \quad (6.27)$$

Aunque el cambio en el grado medio de ionización de las especies atómicas es pequeño, el aumento de K_R es consecuencia del desplazamiento de la función de pesado hacia menores energías del campo de radiación de fotones con la disminución de la temperatura de radiación, alcanzando un máximo alrededor de $4 \cdot T_R$ y modificando a su vez la contribución de los picos de absorción de radiación del plasma que se desplazan ligeramente con variaciones en la temperatura de radiación. En las [Tablas 6.55-6.56](#), se puede observar la sensibilidad de la opacidad media de Rosseland a cambios en la temperatura de radiación respecto a la temperatura electrónica y las principales tasas de los procesos atómicos por componente.

El estudio de LANL indica un 159% de incremento en K_R , mientras que ATMED CR estima un porcentaje similar de valor 183.9%. La inclusión de las tasas de los procesos fotoionización y fotorecombinación dentro de la resolución del balance CR incrementa el tiempo de cálculo. En las mezclas analizadas se comprueba en la [Tabla 6.56](#) que sin incluirlas, se reduce significativamente el tiempo de computación sin grandes cambios en las propiedades de los plasmas.

TABLE 1. The results presented in this table illustrate SnNb EOS and opacity sensitivity to the radiation temperature. The electron temperature and atom number density were held constant at 800 eV and $2.0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, respectively, while the radiation temperature was systematically reduced. The three percentage increases for the Rosseland mean opacity displayed are: (1) the total for the cocktail, ΔK_R^{Tot} , (2) the Nb contribution, $(\Delta K_R)_{\text{Nb}}$, and (3) the Sn contribution, $(\Delta K_R)_{\text{Sn}}$.

	$T_r(\text{eV})$	%Red.	$\Delta K_R^{\text{Tot}}(\%)$	$(\Delta K_R)_{\text{Sn}}(\%)$	$\bar{Z}_{\text{Sn}}$	$(\Delta K_R)_{\text{Nb}}(\%)$	$\bar{Z}_{\text{Nb}}$
1	800	0.0	0.0	0.0	44.6	0.0	38.6
2	750	6.25	27.0	22.9	43.7	27.9	38.4
3	725	9.4	42.3	35.5	43.2	46.1	38.3
4	650	18	98.9	69.4	41.7	131.4	37.7
5	600	25	159	98.3	40.8	233.0	37.0

Tabla 6.55: Propiedades de la mezcla SnNb a temperatura electrónica $T_e=800\text{eV}$ y densidad iónica $N_i=2.0\text{E}+20 \text{ ion/cm}^3$.

T_e (eV)	T_R (eV)	ρ (g/cm ³)	Z_{bar} SnNb	Z_{bar} Sn Ref. [54]	Z_{bar} Sn ATMED CR	Z_{bar} Nb Ref. [54]	Z_{bar} Nb ATMED CR	K_R (cm ² /g) SnNb	ΔK_R % Ref. [54]	ΔK_R % ATMED CR
800	800	0.0352	41.654	44.6	44.671	38.6	38.635	5.079	0.0	0.0
800	750	0.0352	41.006	43.7	43.596	38.4	38.416	5.695	27.0	12.13%
800	725	0.0352	40.642	43.2	43.029	38.3	38.255	6.504	42.3	28.05%
800	650	0.0352	39.435	41.7	41.361	37.7	37.507	9.920	98.9	95.31%
800	600	0.0352	38.599	40.8	40.531	37.0	36.665	14.42	159	183.9%

Cálculos con inclusion en el balance de fotoionización/ fotorecombinación, fotoexcitación / fotodesexcitación

Tabla 6.56: Propiedades de la mezcla SnNb a temperatura electrónica $T_e=800\text{eV}$ y densidad iónica $N_i=2.0\text{E}+20 \text{ ion/cm}^3$.

Cálculos sin fotoionización ni fotorecombinación (WO) o incluyendo dichos procesos (W).

T_R (eV)	Tiempo CPU W (s)	Tiempo CPU WO (s)	N_e Sn cm ⁻³	N_e Nb cm ⁻³	ρ Sn (g/cm ³)	ρ Nb (g/cm ³)	K_R Sn cm ² /g	K_R Nb cm ² /g	K_P SnNb cm ² /g	RPL (J/ cm ³ .s)
800	3.88E+02	2.07E+01	8.37E+21	8.30E+21	0.0369	0.0331	3.387	2.019	1.063E+02	1.783E+14
750	8.95E+03	4.68E+02	8.24E+21	8.17E+21	0.0372	0.0328	3.804	2.214	1.251E+02	1.791E+14
725	8.36E+03	4.34E+02	8.18E+21	8.09E+21	0.0374	0.0326	4.281	2.611	1.410E+02	1.972E+14
650	3.16E+02	1.73E+01	8.28E+21	7.51E+21	0.0392	0.0310	6.126	4.523	1.923E+02	2.678E+14
600	3.07E+02	1.84E+01	8.12E+21	7.34E+21	0.0392	0.0310	7.395	7.014	2.292E+02	3.294E+14

6.9.4 Astrofísica

Como ya se detalló en el apartado 6.2.4.5, el denominado “Proyecto de Opacidades” ha calculado los datos atómicos para la mayor parte de los elementos más abundantes en los cuerpos astrofísicos estableciendo una base de datos de opacidades. La fracción numérica de hierro en las estrellas es pequeña comparada con la alta abundancia de hidrógeno y helio. Sin embargo, su opacidad juega un papel muy importante en la transferencia de energía radiativa en plasmas astrofísicos como el plasma solar, controlando el flujo de energía de fusión desde el núcleo hacia el exterior afectando a la estructura estelar y su evolución. Elementos como hierro y oxígeno (Figura 6.111), contribuyen de manera desproporcionada a la opacidad total del plasma solar porque no están completamente ionizados [86-90]. La opacidad frecuencial total así como las opacidades medias de Rosseland y Planck en plasmas de hierro en un rango de temperaturas desde los pocos eV hasta los centenares de eV, son importantes en el estudio tanto de la envoltura como del interior de las estrellas, ya que cuantifican cómo de transparente u opaco es un plasma estelar a la radiación [86]. Por ello, en las últimas décadas se han realizado experimentos para medir la opacidad de los plasmas de hierro.

Figura 6.111a: Opacidad del oxígeno a $T_e=192.91$ eV y $N_e=1.0E+23$ cm⁻³ [86] + Promedio UTA de ATMED CR (naranja).

Figura 6.111b: Opacidad del hierro a $T_e=192$ eV y $N_e=1.0E+23$ cm⁻³ [86] + Promedio UTA de ATMED CR (naranja).

La temperatura en la envoltura de las estrellas es en general del orden de las decenas de eV. Dichas temperaturas son más fáciles de implementar en un experimento que temperaturas por encima de los 100 eV.

Actualmente, pocos experimentos han sido realizados a temperaturas superiores a 100 eV, no obstante son muy importantes en astrofísica especialmente para el transporte de radiación en el interior del sol. Conocer la opacidad dependiente de la frecuencia se requiere por ejemplo para explicar el fenómeno de levitación de los componentes de plasmas estelares distintos al hidrógeno o helio. Estos elementos se difunden hacia el centro de las estrellas bajo la influencia gravitatoria pero existe una fuerza de levitación opuesta a la gravedad, debida a la presión de los fotones y proporcional a la opacidad frecuencial.

6.9.4.1 Plasma Solar: Zona de Convección

Para el cálculo de la opacidad del sol, se considera muchas veces la hipótesis de que el sol está constituido por cuatro [87] o seis componentes [88], basándose en la importancia de sus fracciones numéricas en la composición del plasma solar y en su contribución a la opacidad total y a la opacidad media de Rosseland, muy importante para los elementos oxígeno y hierro. Se han considerado las siguientes fracciones numéricas de volumen de cuatro componentes de la Tabla 6.57 para los cálculos con ATMED CR, ver Tablas 6.58÷6.60.

Tabla 6.57: Plasma solar considerando una mezcla de cuatro componentes

Mezcla Solar	1 %H	2 %He	8 %O	26 %Fe
1	92.1353	7.8	0.061	0.0037

La energía generada por las reacciones de fusión en el centro del sol es transportada por radiación y después por convección a partir del radio respecto al total $R/R_{\text{sol}}=0.713 \pm 0.001$. La opacidad solar generalmente aumenta con el radio pero cuando es demasiado alta el transporte de energía por radiación es ineficiente ya que ésta es absorbida y domina entonces el transporte de energía por convección. En la base de la zona de convección, $R/R_{\text{sol}}=0.713 \pm 0.001$, las condiciones del plasma solar son 193 eV de temperatura y una densidad electrónica de $N_e=1E+23 \text{ cm}^{-3}$ y la densidad de materia $\rho = 0.195 \text{ g/cm}^3$.

6.9.4.2 Grado Medio de Ionización

Medidas experimentales del grado medio de ionización han sido realizadas en la instalación Z-pinch del Laboratorio Nacional de Sandia a $T_e=156 \pm 6 \text{ eV}$ y $N_e=6.9 \pm 1.7 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, registrando la transmisión de un plasma de hierro [89]. Estas condiciones proporcionan una distribución de estados de carga similar a la de la base convectiva del sol, puesto que aunque en esta zona la temperatura sea 37 eV mayor ($193 - 156 = 37 \text{ eV}$) y la densidad en torno a 10 veces superior, el cambio en Z_{bar} por el incremento de temperatura se ve contrarrestado por el aumento de densidad. Recientemente se han alcanzado condiciones experimentales con mayores temperaturas hasta $T_e=196 \pm 6 \text{ eV}$ y $N_e=3.8 \pm 0.8 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ [87-89].

Average degree of ionization for iron and oxygen for different density and temperature and mixture conditions obtained by three calculations: FLYCHK (F), OP (OP) and a mixture model using Thomas Fermi (TF). We consider different cases: pure iron or oxygen, the same element in a mixture of H + Fe (or O) and the same element in a mixture of 4 elements.

T (eV)	N_e (cm ⁻³)	$\langle Z \rangle F$	$\langle Z \rangle F$	$\langle Z \rangle OP$	$\langle Z \rangle TF$
		Fe	H + Fe	Fe	H, He, O, Fe
172	10 ²³	15.28	15.33	15.86	16.06
193	10 ²³	16.32	16.38	16.73	16.88
217	10 ²³	17.37	17.42	17.64	17.72
380	1.2 × 10 ²⁴	19.	19.03	19.92 (385 eV)	18.86
400	1.2 × 10 ²⁴	19.38	19.42	–	19.18
420	1.2 × 10 ²⁴	19.74	19.77	20.67 (432 eV)	19.48
T (eV)	N_e (cm ⁻³)	$\langle Z \rangle F$	$\langle Z \rangle F$	$\langle Z \rangle OP$	$\langle Z \rangle TF$
		O	H + O	O	H, He, O, Fe
172	10 ²³	7.	7.03	7.03	7.11
193	10 ²³	7.28	7.30	7.29	7.24
212	10 ²³	7.42	7.48	7.5	7.34

Figura 6.112: Propiedades de Fe, O y en una mezcla de 4 componentes que representa el plasma solar H+He+O+Fe [87].

Tabla 6.58: Propiedades del plasma solar según ATMED CR considerando una mezcla de cuatro componentes

R/R _{Sol}	T _e =T _R (eV)	N _e e/cm ³	ρ g/cm ³	N _i ion/cm ³	μ _e	Z _{bar}	Z _{bar}	Z _{bar}	Z _{bar}	Z _{bar}	Z _{bar}
		Mezcla	Mezcla	Mezcla	Mezcla	Sol	H	He	O	Fe	Fe Puro
-	172	1.0E+23	0.198	9.865E+22	-4.9183	1.043	0.967	1.893	5.562	14.371	15.65
0.713	193	1.0E+23	0.195	9.722E+22	-5.1005	1.050	0.973	1.911	6.089	15.330	16.39
0.7	200	1.0E+23	0.194	9.674E+22	-5.1575	1.052	0.974	1.916	6.234	15.644	16.65
-	217	1.0E+23	0.190	9.478E+22	-5.2972	1.056	0.977	1.927	6.541	16.414	17.27
0.6	270	2.5E+23	0.480	2.392E+23	-4.7059	1.046	0.970	1.900	5.833	16.649	17.89
0.5	340	8.0E+23	1.580	7.855E+23	-3.8765	1.025	0.953	1.842	3.707	15.982	18.11
-	380	1.2E+24	2.380	1.182E+24	-3.6381	1.019	0.948	1.825	2.769	15.965	18.37

Los cálculos de ATMED CR se han realizado de acuerdo también a las condiciones experimentales de la instalación Z [51], donde las muestras de hierro deben contener una distribución de poblaciones electrónicas que pueda ser descrita por el régimen LTE, ya que en el sol dicha distribución es reforzada por el campo de radiación a la misma temperatura que la electrónica.

Además para modelar las transiciones ligado-ligado y ligado-libre del hierro en la capa L en la región de transición radiación-convección, es necesario considerar la fotoionización existente. Por ello los cálculos de ATMED CR consideran $T_e=T_R$ y se representan en la [Tabla 6.59](#).

6.9.4.3 Tasas de Procesos Atómicos

Los cálculos de tasas de ATMED CR corresponden a las condiciones experimentales descritas por el régimen LTE, considerando el campo de radiación a la temperatura electrónica [\[51\]](#).

Tabla 6.59: Tasas de los procesos atómicos por componente

$T_e=T_R$ (eV)	ρ g/cm ³	Ioniz. Col. H Tasa (s ⁻¹)	Fotoloniz. H Tasa (s ⁻¹)	Autoloniz. H Tasa (s ⁻¹)	3-B Rec. H Tasa (s ⁻¹)	FotoRec. H Tasa (s ⁻¹)	Rec. Diel. H Tasa (s ⁻¹)	Col. De/Exc. H Tasa (s ⁻¹)	FotoDe/Ex. H Tasa (s ⁻¹)
200	0.194	6.8643E+18	2.6755E+13	1.6412E+19	3.9618E+16	1.5592E+11	9.4943E+16	1.4158E+20	5.3880E+11
270	0.480	1.5488E+19	3.3702E+13	1.5697E+19	1.4032E+17	3.0769E+11	1.4245E+17	2.2645E+20	5.5913E+11
340	1.580	4.7932E+19	4.9805E+13	1.9114E+19	9.9481E+17	1.0391E+12	3.9721E+17	4.4108E+20	4.8567E+11
$T_e=T_R$ (eV)	ρ g/cm ³	Ioniz. Col. He Tasa (s ⁻¹)	Fotoloniz. He Tasa (s ⁻¹)	Autoloniz. He Tasa (s ⁻¹)	3-B Rec. He Tasa (s ⁻¹)	FotoRec. He Tasa (s ⁻¹)	Rec. Diel. He Tasa (s ⁻¹)	Col. De/Exc. He Tasa (s ⁻¹)	FotoDe/Ex. He Tasa (s ⁻¹)
200	0.194	1.3244E+18	3.2226E+13	3.0706E+19	7.7037E+15	1.9335E+11	1.8046E+17	1.0838E+20	5.6564E+12
270	0.480	3.0649E+18	4.3553E+13	3.3464E+19	2.7924E+16	4.0633E+11	3.0715E+17	1.7602E+20	6.1481E+12
340	1.580	9.8830E+18	5.1513E+13	4.9746E+19	2.0599E+17	1.0955E+12	1.0426E+18	3.5028E+20	5.6105E+12
$T_e=T_R$ (eV)	ρ g/cm ³	Ioniz. Col. O Tasa (s ⁻¹)	Fotoloniz. O Tasa (s ⁻¹)	Autoloniz. O Tasa (s ⁻¹)	3-B Rec. O Tasa (s ⁻¹)	FotoRec. O Tasa (s ⁻¹)	Rec. Diel. O Tasa (s ⁻¹)	Col. De/Exc. O Tasa (s ⁻¹)	FotoDe/Ex. O Tasa (s ⁻¹)
200	0.194	5.0242E+16	2.9526E+13	1.0889E+20	3.2240E+14	2.4126E+11	9.5040E+17	1.2335E+20	3.7888E+14
270	0.480	1.3911E+17	4.6476E+13	2.6301E+20	1.3549E+15	5.4880E+11	3.2604E+18	2.7168E+20	4.9912E+14
340	1.580	1.0569E+18	9.0323E+13	6.8660E+21	2.2583E+16	2.1985E+12	1.7794E+20	1.1524E+21	5.0510E+14

$T_e=T_R$ (eV)	ρ g/cm ³	Ioniz. Col. Fe Tasa (s ⁻¹)	Fotoloniz. Fe Tasa (s ⁻¹)	Autoloniz. Fe Tasa (s ⁻¹)	3-B Rec. Fe Tasa (s ⁻¹)	FotoRec. Fe Tasa (s ⁻¹)	Rec. Diel. Fe Tasa (s ⁻¹)	Col. De/Exc. Fe Tasa (s ⁻¹)	FotoDe/Ex. Fe Tasa (s ⁻¹)
200	0.194	2.0311E+15	1.2000E+13	1.6269E+18	2.1289E+13	2.7539E+11	2.5553E+16	1.0255E+19	7.3318E+14
270	0.480	4.5881E+15	1.8643E+13	2.6475E+18	6.9129E+13	5.6492E+11	5.6625E+16	1.7211E+19	1.2351E+15
340	1.580	1.8523E+16	2.9298E+13	5.7878E+18	5.6541E+14	1.6827E+12	2.3239E+17	4.0878E+19	1.3726E+15

6.9.4.4 Opacidades Medias

Tabla 6.60: Propiedades del plasma solar con ATMED CR considerando una mezcla de cuatro componentes.

R/R_{Sol}	$T_e=T_R$ (eV)	ρ g/cm ³	K_p (cm ² /g) Sol	K_R (cm ² /g) Sol	K_R (cm ² /g) H	K_R (cm ² /g) He	K_R (cm ² /g) O	K_R (cm ² /g) Fe
0.7184	182.68	0.1803	1.959E+02	4.877E+01	3.159E+01	1.978E+01	5.375E+02	1.032E+03
0.7	193	0.195	1.781E+02	4.293E+01	2.901E+01	1.811E+01	4.981E+02	1.035E+03
0.5545	293.24	0.7656	1.971E+02	4.819E+01	4.691E+01	3.012E+01	2.440E+02	1.073E+03
0.5	340	1.580	2.562E+02	7.416E+01	7.444E+01	5.006E+01	3.295E+02	8.674E+02

Summary of solar structure, where the solar radius, $R_0 = 6.96 \times 10^{10}$ cm, solar mass, $M_0 = 1.99 \times 10^{33}$ g, and luminosity $= 3.86 \times 10^{33}$ erg s⁻¹

r/R_0	ρ (g/cc)	M/M_0	kT (eV)	X (H)	P (Mb)	K_R (cm ² /g)	K_R (BE)	C_V /part	C_S
0	157.02	0	1362.1	0.3545	2.44E+05	1.2088	1.3045	1.0715	5.09E+07
0.0462	130.02	0.0099	1276.2	0.4171	2.08E+05	1.2237	1.4153	1.0798	5.10E+07
0.1131	78.16	0.1038	1069.4	0.5922	1.20E+05	1.4733	1.7061	1.0982	5.04E+07
0.1469	59.7	0.186	956.49	0.6559	8.33E+04	1.659	1.917	1.1036	4.89E+07
0.2038	33.96	0.35	790.53	0.7104	4.15E+04	1.98	2.2671	1.1087	4.53E+07
0.2449	22.33	0.47	688.93	0.7239	2.39E+04	2.338	2.6423	1.1107	4.24E+07
0.3364	8.035	0.69	519.43	0.73	6.56E+03	3.6301	3.96	1.1133	3.68E+07
0.5545	0.7656	0.9264	293.24	0.73	3.55E+02	10.008	10.529	1.1744	2.76E+07
0.7184	0.1803	0.9784	182.68	0.73	4.82E+01	20.321	22.248	1.5103	2.18E+07
0.8492	0.0558	0.9954	81.95	0.73	6.29E+00	69.781	76.235	1.5178	1.45E+07
0.9	0.0246	0.9985	54.3	0.73	2.07E+00	133.22	143.67	1.5183	1.18E+07
0.9715	0.002685	1	12.716	0.73	5.05E-02	8.52E+03	8.82E+03	1.82E+00	5.53E+06
0.9901	2.74E-04	1.00E+00	3.9026	0.73	1.40E-03	1.20E+05	1.25E+05	2.52E+00	2.85E+06
1.00E+00	9.62E-07	1.00E+00	1.07E+00	7.30E-01	8.10E-07	1.34E+03	1.34E+03	1.44E+00	1.38E+06

Figura 6.113. Datos de estructura solar. Las columnas 2, 4 y 5 proceden del modelo estándar solar (MS) [91].

Para plasmas como el del sol, que son mucho más grandes que el camino libre medio de los fotones, el transporte de radiación es normalmente descrito por la aproximación de difusión de la ecuación de transporte radiativo utilizando la opacidad media de Rosseland K_R (Ecuación (6.28a)). ATMED CR obtiene para la mezcla solar los valores de K_R indicados en la Tabla 6.60. Análogamente al histograma y diagramas de las referencias [87÷89], se han calculado las contribuciones de cada componente (H, Fe, O y He) a la opacidad media de Rosseland para comprobar la importancia del hierro a pesar de que su fracción numérica sea pequeña en comparación con la del hidrógeno o el helio. Para causar un cambio en la opacidad media de un 10% sería necesario multiplicar la opacidad del hierro en la zona convectiva por un factor 1.5.

Dentro de las estrellas, las especies que no están totalmente ionizadas y tienen mayor número atómico Z , son las que contribuyen más a la opacidad por el número de transiciones, ya que, exceptuando justo debajo de la superficie, los elementos ligeros (H, He) están totalmente ionizados.

Con K_R se puede calcular la transferencia de energía por radiación:

$$\frac{dT}{dr} = \frac{-3}{4ac} \frac{K_R \rho}{T^3} \frac{L(r)}{4\pi r^2} \quad (6.28a)$$

Con K_R también se puede calcular una cantidad muy importante como la luminosidad radiativa [91]:

$$L(r) = -4\pi r^2 \frac{4c}{3K_R \rho} \frac{\pi^2}{15(\hbar c)^3} (kT)^3 \frac{\partial(kT)}{\partial r} \quad (6.28b)$$

Con la ionización media Z_{bar} y el potencial químico reducido η se calcula la velocidad del sonido [91]:

$$C_s = c \left[\gamma \left(1 + 2Z_{bar} \frac{F_{1/2}(\eta)}{F_{-1/2}(\eta)} \right) \frac{kT}{Mc^2} \right]^{1/2} \quad (6.29)$$

Además la velocidad del sonido es un observable medido experimentalmente con una precisión de 10^{-5} , particularmente sensible a la composición solar a través de los coeficientes de absorción, tal que una variación del 1% en los mismos produce un cambio en C_s del 0.1%. Esto hecho ayuda a refinar la composición del plasma solar de los diferentes modelos (helioseismología, MS estándar (Figura 6.113), etc.).

Los componentes de plasmas estelares distintos al hidrógeno o helio se difunden hacia el centro de las estrellas bajo la influencia gravitatoria, pero existe también una fuerza de levitación opuesta a la gravedad debida a la presión de los fotones proporcional a la opacidad frecuencial.

Para estimar el rol respectivo de gravedad y presión fotónica es necesario calcular la aceleración radiativa de cada especie atómica k :

$$g_{rad}(k) = \frac{F_R}{c} \frac{M}{M(k)} \gamma(k) K_R \quad (6.30)$$

Donde:

- F_R : Flujo radiativo.
- f_v : Función que depende de la opacidad total $K_v(total)$ y de cada componente $K_v(k)$.
- $\gamma(k) = \int \frac{K_v(k)}{K_v(total)} f_v dv$

Para una mezcla solar de H, He y metales ($Z \geq 3$), la opacidad media de Rosseland es función de la temperatura para un valor constante de ρ/T^3 , siendo ρ la densidad. Conforme la temperatura aumenta se observan anchos picos en la opacidad media correspondiendo a energías térmicas suficientes para excitar o ionizar H, He y otros metales como el hierro. El periodo de oscilación P de una estrella está relacionado con la opacidad según la siguiente formulación [1]:

$$P = \frac{Q}{\left(\bar{\rho}/\bar{\rho}_{Sun}\right)^{1/2}} \quad (6.31)$$

- Q : Constante.
- $\bar{\rho}$ & $\bar{\rho}_{Sun}$: Densidad media de la estrella pulsante y del sol en torno a 1.4 g/cm^3 .

Las oscilaciones globales corresponden a ondas de sonido (compresión) dentro de la estrella, por lo que el periodo de oscilación debe ser también proporcional al ratio entre su diámetro y la velocidad del sonido que varía a su vez con la temperatura según $T^{1/2}$ [1]:

$$P \propto \frac{D_{Star}}{C_s} \propto \frac{D_{Star}}{T^{1/2}} \propto \frac{D_{Star}}{\kappa^{n/2}} \quad (6.32)$$

En un pequeño intervalo donde la opacidad frecuencial es creciente, ésta es proporcional a la temperatura tal que $\kappa \approx T^m = T^{1/n}$

6.9.4.5 Opacidad Total Frecuencial con 4 Componentes

En el interior la opacidad solar está dominada por los procesos libre-libre mientras que en las regiones más externas los elementos más pesados están parcialmente ionizados y los procesos ligado-ligado, ligado-libre de absorción de fotones son los dominantes. Cerca de la base de la zona de convección la temperatura es $T \sim 190$ eV y la función de peso dB_ν/dT para la opacidad media de Rosseland alcanza un máximo a $\sim 3.8 \div 4$ KT, es decir, a ~ 750 eV. Comparando la opacidad de la mezcla solar con dicha función, se observa que el rango más importante para analizar el transporte de radiación es $300 \div 1300$ eV, ya que los fotones son transportados más eficientemente donde la opacidad total es mínima y en el entorno del máximo de la función de peso. A continuación se analiza la contribución de los elementos significativos a la opacidad total, habiendo ponderado en cada caso la opacidad del elemento en la mezcla con su fracción numérica. La contribución del hierro a la opacidad total es prácticamente despreciable a 500 eV de energía fotónica.

Los otros componentes de la mezcla, como el oxígeno, han rellenado los valles del hierro. A su vez, las transiciones ligado-ligado del hierro en el rango $750 \div 1300$ eV son la contribución más significativa a la opacidad de la mezcla solar en la base de la zona convectiva. Existen algunas diferencias en las opacidades de cada elemento entre la referencia [91] y el código ATMED CR y se deben a las fracciones consideradas en la hipótesis de que el sol está formado por cuatro componentes y a las propias entre un modelo detallado y de átomo medio (Figura 6.114).

Figura 6.114. Opacidad frecuencial (cm^2/g) con ATMED CR y Ref. [91] del plasma solar a $T_e = 293.24$ eV y 0.7656 g/cm^3 .

No obstante, éste código permite obtener conclusiones cualitativas correctas acerca de la contribución de cada elemento a la opacidad total en un plasma estelar según el rango energético, puesto que ATMED CR realiza un promedio UTA muy logrado para el hierro puro (Figura 6.115).

Figura 6.115. Opacidad frecuencial (cm^2/g) con ATMED CR del hierro puro y según Ref. [87].

En el caso del oxígeno puro ATMED CR obtiene la estructura UTA desplazada representando las líneas separadas de un modelo DLA (Figura 6.116).

Figura 6.116. Opacidad frecuencial (cm^2/g) con ATMED CR del oxígeno puro y según Ref. [87].

Para otro elemento de interés como el magnesio, en las condiciones de la base de la zona convectiva del sol, ATMED CR realiza un promedio UTA también muy logrado (Figura 6.117), respecto a los resultados del proyecto OP y del código ATOMIC [92]. La ionización media calculada con ATMED CR resulta ser $Z_{\text{bar}}=9.80837$, en consonancia con lo representado en las distribuciones de iones obtenidas con OP, OPAS y ATOMIC.

Figura 6.117. Opacidad magnesio [92], $u = h\nu / KT$, $T_e=192.91 \text{ eV}$ y $N_e=1.0\text{E}+23 \text{ cm}^{-3}$ + Promedio UTA de ATMED CR.

6.9.4.6 Opacidad Total Frecuencial con 10 Componentes

Para el cálculo de la opacidad del sol, se considera ahora la hipótesis de que está constituido por diez componentes, basándose en las siguientes fracciones numéricas de volumen de la [Tabla 6.61](#) y en su contribución a la opacidad media de Rosseland.

Tabla 6.61: Plasma solar considerando una mezcla de diez componentes ([Figura 6.119](#))

1	2	6	7	8	10	12	14	16	26
%H	%He	%C	%N	%O	%Ne	%Mg	%Si	%S	%Fe
92.0823	7.8	0.03	0.0084	0.061	0.0076	0.0024	0.0031	0.0015	0.0037

Figura 6.118. % Contribución a K_R según la temperatura de los componentes del plasma solar [\[93\]](#).

Los resultados de ATMED CR se ilustran en la [Tabla 6.62](#) y las [Figuras 6.119-6.120](#).

Tabla 6.62a: Plasma solar según ATMED CR de una mezcla de diez componentes con 0.195 g/cm^3 y $T_e=T_R=193 \text{ eV}$.

Z_{bar} Sol	Z_{bar} H	Z_{bar} He	Z_{bar} C	Z_{bar} N	Z_{bar} O	Z_{bar} Ne	Z_{bar} Mg	Z_{bar} Si	Z_{bar} S	Z_{bar} Fe	μ_e Sol
1.053	0.973	1.911	5.562	6.359	6.095	7.051	9.291	10.850	12.195	15.336	-5.103
K_R Sol cm^2/g	K_R H cm^2/g	K_R He cm^2/g	K_R C cm^2/g	K_R N cm^2/g	K_R O cm^2/g	K_R Ne cm^2/g	K_R Mg cm^2/g	K_R Si cm^2/g	K_R S cm^2/g	K_R Fe cm^2/g	K_p Sol cm^2/g
51.28	28.86	18.02	112.3	282.6	496.3	218.6	103.0	151.6	333.1	1033	184.7

Tabla 6.62b: Plasma solar según ATMED CR de una mezcla de diez componentes con 0.7656 g/cm^3 y $T_e=T_R=293.24 \text{ eV}$.

Z_{bar} Sol	Z_{bar} H	Z_{bar} He	Z_{bar} C	Z_{bar} N	Z_{bar} O	Z_{bar} Ne	Z_{bar} Mg	Z_{bar} Si	Z_{bar} S	Z_{bar} Fe	μ_e Sol
1.041	0.963	1.879	5.461	6.305	5.156	6.419	9.330	10.735	12.219	16.387	-4.372
K_R Sol cm^2/g	K_R H cm^2/g	K_R He cm^2/g	K_R C cm^2/g	K_R N cm^2/g	K_R O cm^2/g	K_R Ne cm^2/g	K_R Mg cm^2/g	K_R Si cm^2/g	K_R S cm^2/g	K_R Fe cm^2/g	K_P Sol cm^2/g
52.55	46.68	29.97	41.23	82.95	243.0	511.4	187.3	117.4	127.8	1071	201.2

Tabla 6.62c: Plasma solar según ATMED CR de una mezcla de diez componentes.

Z_{bar} Sol	Z_{bar} H	Z_{bar} He	Z_{bar} C	Z_{bar} N	Z_{bar} O	Z_{bar} Ne	Z_{bar} Mg	Z_{bar} Si	Z_{bar} S	Z_{bar} Fe	$T_e=T_R$ eV
1.046	0.967	1.894	5.433	6.138	5.568	6.528	9.035	10.464	11.591	14.377	172
1.059	0.977	1.927	5.663	6.528	6.546	7.626	9.545	11.161	12.693	16.420	217
1.049	0.970	1.900	5.555	6.416	5.839	7.079	9.475	10.948	12.477	16.657	270

Componentes químicos	Símbolo	%
Hidrógeno	H	92,1
Helio	He	7,8
Oxígeno	O	0,061
Carbono	C	0,03
Nitrógeno	N	0,0084
Neón	Ne	0,0076
Hierro	Fe	0,0037
Silicio	Si	0,0031
Magnesio	Mg	0,0024
Azufre	S	0,0015
Otros		0,0015

Figura 6.119. Opacidad frecuencial (cm^2/g) con ATMED CR del plasma solar a $T_e=193 \text{ eV}$ y 0.195 g/cm^3 .

Figura 6.120. Opacidad frecuencial (cm^2/g) según Ref. [II-91] del plasma solar a $T_e = 293.24$ eV y con ATMED CR a $T_e = T_R$.

6.9.5 Mezclas Fotoionizadas en Máquinas Z-Pinch

En el apartado 6.1.4.1 fueron analizados plasmas fotoionizados de hierro. En esta sección se modelan ahora con ATMED CR mezclas en las mismas condiciones de densidad electrónica $2.0E+19 \text{ cm}^{-3}$ y temperatura electrónica 150 eV. En experimentos reales llevados a cabo en la instalación Z de alta potencia en Sandia National Laboratory, Albuquerque, NM [1-94], las muestras son finas láminas rectangulares suspendidas y posicionadas paralelas al eje z de la máquina Z-Pinch a una distancia $1.5\div 1.6 \text{ cm}$.

Las láminas están compuestas por mezclas de Fe/NaF de baja densidad que experimentan un parámetro de ionización ξ en el rango 20-25 erg.cm/s bajo condiciones cuasi-estacionarias. El espectro de Rayos-X emitido por la máquina Z-Pinch y medido durante el pico de potencia máxima, se considera para los cálculos equivalente a una distribución Planckiana de energías fotónicas de temperatura $T_R = 165 \text{ eV}$ (Figura 6.121).

En la Tabla 6.63 se ilustran los resultados obtenidos con ATMED CR para propiedades fundamentales de plasmas de composición 80.2%Fe+19.8%NaF, tanto de la mezcla como de los elementos dentro de la misma. Otros ratios molares están siendo actualmente probados experimentalmente. La inclusión de las tasas de los procesos fotoionización y fotorecombinación dentro de la resolución del balance CR incrementa el tiempo de cálculo. En las mezclas analizadas se comprueba en la Tabla 6.63b que sin incluirlas, se reduce significativamente el tiempo de computación sin grandes cambios en las propiedades de los plasmas. La Figura 6.122a muestra la opacidad frecuencial de la mezcla con varios factores de dilución.

Figura 6.121. Emisión de rayos-X procedente del Z-Pinch medida en el pico de potencia (histograma) y planckiana normalizada de 165 eV (izquierda). Distribución de estados de carga del Fe experimental (derecha) y comparada a modelos CR a $N_e=2.0E+19 \text{ cm}^{-3}$, $T=150\text{eV}$ y $T_R=165\text{eV}$ para radiación incidente en el plasma desde una fracción 0.01 de 4π estereorradianes.

Tabla 6.63a: Propiedades de la mezcla 80.2%Fe+19.8%NaF en NLTE a la densidad electrónica 2.0E+19 cm⁻³.

T _e (eV)	T _R (eV)	X _{dilu}	ρ g/cm ³ Mezcla	μ _e Mezcla	Z _{bar} Mezcla	Z _{bar} Fe	Z _{bar} Na	Z _{bar} F
150	165	1	7.64E-05	-1.343E+01	20.411	22.985	10.967	8.998
150	165	0.75	7.85E-05	-1.342E+01	20.080	22.577	10.940	8.996
150	165	0.5	8.1E-05	-1.341E+01	19.549	21.923	10.868	8.994
150	165	0.25	8.6E-05	-1.341E+01	18.540	20.695	10.635	8.985

Cálculos con inclusion en el balance de fotoionización/ fotorecombinación, fotoexcitación / fotodesexcitación

Tabla 6.63b: Propiedades de la mezcla 80.2%Fe+19.8%NaF en NLTE a la densidad electrónica 2.0E+19 cm⁻³. Cálculos sin fotoionización ni fotorecombinación (WO) o incluyendo dichos procesos (W).

X _{dilu}	N _i ion/cm ³	N _e cm ⁻³ Fe	N _e cm ⁻³ Na	N _e cm ⁻³ F	K _R (cm ² /g) Mezcla	K _P (cm ² /g) Mezcla	Tiempo CPU WO (s)	Tiempo CPU W (s)
1	9.838E+17	1.986E+19	1.510E+19	1.403E+19	1.289E+00	2.869E+02	4.518E+02	8.816E+03
0.75	1.009E+18	2.007E+19	1.536E+19	1.428E+19	1.770E+00	3.879E+02	4.035E+02	8.116E+03
0.5	1.039E+18	2.014E+19	1.557E+19	1.452E+19	2.561E+00	5.366E+02	2.957E+02	6.741E+03
0.25	1.093E+18	2.034E+19	1.552E+19	1.454E+19	4.418E+00	8.348E+02	4.868E+02	1.004E+04

Tabla 6.63c: Tasas de procesos atómicos de la mezcla 80.2%Fe+19.8%NaF en NLTE a la densidad electrónica 2.0E+19 cm⁻³.

T _e (eV)	T _R (eV)	X _{dilu}	Fotoloniz. Fe Tasa (s ⁻¹)	Ioniz. Col. Fe Tasa (s ⁻¹)	Autoloniz. Fe Tasa (s ⁻¹)	Ioniz. Total Fe Tasa (s ⁻¹)	Ioniz. Total Na Tasa (s ⁻¹)	Ioniz. Total F Tasa (s ⁻¹)
150	165	1	3.554E+12	4.378E+10	4.856E+15	4.860E+15	6.264E+15	6.756E+15
150	165	0.75	2.610E+12	4.954E+10	5.762E+15	5.765E+15	8.776E+15	8.885E+15
150	165	0.5	1.766E+12	5.964E+10	6.861E+15	6.863E+15	1.355E+16	1.265E+16
150	165	0.25	9.901E+11	8.503E+10	8.437E+15	8.438E+15	2.429E+16	2.101E+16

Tabla 6.63d: Tasas de procesos atómicos de la mezcla 80.2%Fe+19.8%NaF en NLTE a la densidad electrónica $2.0\text{E}+19\text{ cm}^{-3}$.

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	FotoRec. Fe Tasa (s^{-1})	3-B Rec. Fe Tasa (s^{-1})	Capt. Diel. Fe Tasa (s^{-1})	Rec. Tot. Fe Tasa (s^{-1})	Rec. Tot. Na Tasa (s^{-1})	Rec. Tot. F Tasa (s^{-1})
150	165	1	1.508E+09	3.806E+05	9.721E+10	9.872E+10	1.338E+10	1.316E+10
150	165	0.75	1.368E+09	4.132E+05	1.384E+11	1.398E+11	2.506E+10	2.224E+10
150	165	0.5	1.322E+09	4.603E+05	2.067E+11	2.081E+11	5.688E+10	4.363E+10
150	165	0.25	1.138E+09	5.725E+05	3.645E+11	3.657E+11	1.813E+11	1.150E+11

T_e (eV)	T_R (eV)	X_{dilu}	Col. De/Exc. Fe Tasa (s^{-1})	FotoDe/Ex. Fe Tasa (s^{-1})	Col. De/Exc. Na Tasa (s^{-1})	FotoDe/Ex. Na Tasa (s^{-1})	Col. De/Exc. F Tasa (s^{-1})	FotoDe/Ex. F Tasa (s^{-1})
150	165	1	2.155E+15	3.643E+15	9.860E+15	1.191E+15	1.446E+16	6.414E+14
150	165	0.75	2.255E+15	3.218E+15	9.998E+15	1.096E+15	1.466E+16	5.798E+14
150	165	0.5	2.404E+15	2.662E+15	1.014E+16	9.794E+14	1.482E+16	5.179E+14
150	165	0.25	2.746E+15	1.859E+15	1.068E+16	7.820E+14	1.524E+16	4.545E+14

Figura 6.122a. Opacidad frecuencial logarítmica (cm^2/g) a $N_e=2.0\text{E}+19\text{ cm}^{-3}$, $T_e=150\text{eV}$ y $T_R=165\text{eV}$ para la mezcla Fe/NaF y varios factores de dilución X_{Dil} .

Figura 6.122b. Opacidad frecuencial logarítmica (cm^2/g) a $N_e=2.0\text{E}+19\text{ cm}^{-3}$, $T_e=150\text{eV}$ y $T_R=165\text{eV}$ para la mezcla Fe/NaF y factor de dilución $X_{\text{Dil}}=1$.

6.9.6 Transmisión de Mezclas en Instalación LULI

En la [Figura 6.123](#) se representa la transmisión calculada con ATMED CR respecto a la experimental medida en la instalación LULI o calculada con el código SCO [95-96].

Figura 6.123a. Instalación LULI-2000 (Francia). La muestra se localiza lateralmente en la cavidad hohlraum [95].

Figura 6.123b. Transmisión calculada con SCO (izquierda), experimental (derecha) [95] y calculada con ATMED CR de una muestra de BaF_2 a $T_e=T_R=20$ eV, $\rho=4\text{E-}3$ g/cm³, y dimensión característica del plasma $L=0.02$ cm.

Figura 6.123c. Transmisión calculada (Mél. P cst.), experimental (spectre expérimental) [96] y calculada con ATMED CR de una muestra de AlNi a $T_e=T_R=18 / 19.5 / 21$ eV, $\rho=0.0125$ g/cm³, $L=0.005$ cm (izquierda) y $L=0.0016$ cm (derecha).

6.9.7 Simulación de Aerogeles Irradiados por Láser de 4 ns

En la [Tabla 6.64](#) se ilustran los resultados obtenidos con ATMED CR para propiedades fundamentales de plasmas de SiO_2 para las condiciones resultantes en la materia irradiada acordes con las simulaciones del código hidrodinámico HELIOS [97] ([Figura 6.124](#)).

Tabla 6.64: Propiedades de mezclas de SiO_2 con ATMED CR.

T_e (eV)	ρ g/cm^3	Z_{bar} CR SiO_2	Potencial Químico SiO_2	K_R Mezcla (cm^2/g)	K_P Mezcla (cm^2/g)	Energía Interna (erg/g)	Presión (eV/cm^3)
25	2E-03	5.472	-7.833E+00	5.642E+03	1.362E+04	1.661E+14	1.183E+22
50	2E-03	7.628	-8.545E+00	1.064E+03	6.065E+03	1.268E+14	2.387E+22
75	2E-03	8.884	-9.001E+00	3.073E+02	2.036E+03	8.161E+13	4.087E+22
100	2E-03	9.646	-9.350E+00	7.416E+01	5.779E+02	3.083E+13	5.837E+22
200	2E-03	10.055	-1.036E+01	2.937E+00	6.067E+01	6.669E+13	1.209E+23
300	2E-03	10.544	-1.091E+01	5.157E-01	3.685E+01	1.906E+14	1.891E+23
400	2E-03	10.816	-1.131E+01	1.427E-01	6.054E+00	2.974E+14	2.582E+23

Figure 29. Rosseland mean opacity for SiO_2 , Ti and a mixture of SiO_2 -6%Ti

Figure 30. Internal energy EOS for SiO_2 , Ti and a mixture of SiO_2 -6%Ti

Figura 6.124. Opacidad media de Rosseland y energía interna para mezclas de SiO_2 [97].

6.9.8 Mezcla Multicomponente de Numerosos Elementos

Se tabula a continuación un ejemplo ilustrativo de cómo el código ATMED CR calcula mezclas con numerosos componentes en regímenes LTE y NLTE, en este caso de 28 elementos químicos.

Tabla 6.65a: Componentes de la mezcla y sus fracciones de volumen en porcentaje.

79 %Au	78 %Pt	74 %W	67 %Ho	64 %Gd	62 %Sm	60 %Nd
5	3	3	2	5	5	5
59 %Pr	55 %Cs	53 %I	50 %Sn	47 %Ag	42 %Mo	41 %Nb
5	5	5	4	2	5	5
40 %Zr	35 %Br	32 %Ge	29 %Cu	28 %Ni	27 %Co	26 %Fe
3	5	5	5	5	2.5	2.5
25 %Mn	24 %Cr	23 %V	22 %Ti	13 %Al	12 %Mg	11 %Na
2.5	3	2	1	2.5	0.5	0.5

Tabla 6.65b: Propiedades de la mezcla de 28 componentes en régimen LTE y NLTE.

T_e / T_R (eV)	X_{Dil}	ρ (g/cm ³)	N_i Mezcla (cm ⁻³)	Z_{bar} Mezcla ATMED CR	μ_e Mezcla ATMED CR	Tiempo CPU (s)
250 / 250	-	1	5.891E+21	23.055	-5.228237	1.8582E+02
250 / 100	-	1	5.879E+21	22.883	-5.235746	7.6276E+03
250 / 100	0.5	1	5.878E+21	22.880	-5.235876	7.9495E+03
T_e / T_R (eV)	X_{Dil}	ρ (g/cm ³)	K_R Mezcla (cm ² /g)	K_P Mezcla (cm ² /g)	L_R Mezcla (cm)	L_P Mezcla (cm)
250 / 250	-	1	2.526E+03	3.099E+03	3.958E-04	3.227E-04
250 / 100	-	1	4.043E+03	7.377E+03	2.474E-04	1.356E-04
250 / 100	0.5	1	4.044E+03	7.378E+03	2.473E-04	1.355E-04

Tabla 6.65c: Propiedades de la mezcla en régimen NLTE con $T_e=250$ eV, $T_R=100$ eV, $X_{\text{dil}}=0.5$, densidad de materia 1 g/cm^3 .

Z	N_e (cm^{-3})	ρ (g/cm^3)	Z_{bar} ATMED CR		Z	N_e (cm^{-3})	ρ (g/cm^3)	Z_{bar} ATMED CR
79	1.267701E+23	1.402345	29.566713		40	1.267703E+23	0.849288	22.610998
78	1.267702E+23	1.393733	29.465061		35	1.267700E+23	0.794476	21.171554
74	1.267705E+23	1.328124	29.138525		32	1.267690E+23	0.776391	19.695070
67	1.267707E+23	1.225034	28.341283		29	1.267682E+23	0.735249	18.193390
64	1.267707E+23	1.188305	27.856678		28	1.267688E+23	0.692376	17.844695
62	1.267705E+23	1.153707	27.434888		27	1.267680E+23	0.708115	17.519249
60	1.267704E+23	1.126423	26.956057		26	1.267683E+23	0.682132	17.233596
59	1.267703E+23	1.110909	26.700646		25	1.267679E+23	0.681600	16.966908
55	1.267700E+23	1.075503	26.013333		24	1.267682E+23	0.656384	16.675270
53	1.267697E+23	1.058711	25.232690		23	1.267682E+23	0.652408	16.436604
50	1.267694E+23	1.022001	24.451147		22	1.267688E+23	0.623985	16.148174
47	1.267697E+23	0.953892	23.804460		13	1.267665E+23	0.543772	10.444913
42	1.267701E+23	0.880210	22.949273		12	1.267657E+23	0.526134	9.724170
41	1.267703E+23	0.859161	22.763361		11	1.267638E+23	0.528758	9.152198

7. CONEXION DE ATMED CR CON UN CODIGO HIDRODINAMICO

7.1 Código Hidrodinámico HYAT

El código HYAT es un modelo para simular blancos irradiados con luz láser mediante la solución numérica de las ecuaciones de fluidos [98]. Su aproximación hidrodinámica consiste en un modelo con dos subsistemas: electrones e iones. Se considera un elemento de fluido tal que resulta muy grande comparado con el mundo atómico ya que contiene un número de partículas como el número de Avogadro, pero muy pequeño comparado con el mundo macroscópico. La inercia de cada elemento de fluido viene dada por la cantidad de iones presentes en el mismo, ya que se desprecia la masa de los electrones frente a la de los iones.

$$\rho = Am_p n_i = \frac{1}{V} \quad (7.1)$$

V : Volumen específico (cm³/g) y V' : Volumen geométrico (cm³).

Considerando el sistema como neutro, la siguiente ecuación lleva asociada la hipótesis de ionización total (iones desnudos, es decir, sólo núcleos y todos los electrones libres):

$$n_e = Zn_i \quad (7.2)$$

Para utilizar un modelo de ionización parcial como ATMED CR, el número atómico promedio del material Z debe ser reemplazado por el estado de ionización local Z_{bar} en todas las fórmulas:

$$n_e = Z_{bar} n_i \quad (7.3)$$

Por la anterior condición no se pueden considerar campos eléctricos ya que no hay una separación neta de carga ni tampoco campos magnéticos por la unidimensionalidad. Los subsistemas están acoplados a través de un campo de velocidades del fluido:

$$\underline{v} = \underline{v}_e = \underline{v}_i \quad (7.4)$$

Con la formulación de Lagrange las coordenadas siguen al elemento de fluido y las derivadas totales no tienen términos no lineales. La formulación hidrodinámica es de tipo Lagrangiano, tal que la coordenada espacial r no es la ubicación de un punto fijo del espacio sino la ubicación de un elemento de fluido que estaba localizado en el instante inicial t_0 en la posición inicial r_0 :

$$r_0 = r(t_0) \quad (7.5)$$

7.1.1 El Método Numérico: Discretización espacial y temporal

El segmento de coordenada espacial comprendido entre $r = 0$ y $r = R_0$ se divide en N zonas o celdas que a su vez definen $N + 1$ bordes de celdas. Cada borde de celda tiene asociado un valor de coordenada espacial R_j ($j = 1, \dots, N + 1$) y cada celda un ancho de celda $\Delta R_l = R_{j+1} - R_j$. Las cantidades asociadas a la celda con el subíndice l y al borde de celda con el subíndice j son:

Coordenada de centro de celda:

$$R_l = \frac{1}{2}(R_j + R_{j+1}) \quad (7.6)$$

El volumen geométrico asociado a la celda l -ésima es:

$$d\bar{V}_l = \frac{1}{g}(R_{j+1}^g - R_j^g) \quad (7.7)$$

En función de $d\bar{V}_l$ y el elemento de masa dM_l de la celda l -ésima se calculan el volumen específico V_l y la densidad ρ_l asociadas a la coordenada de centro de celda $R_l = \frac{1}{2}(R_j + R_{j+1})$

$$V_l = d\bar{V}_l \frac{1}{dM_l} = \frac{1}{\rho_l} \quad (7.8)$$

Según la descripción Lagrangiana el elemento de masa dM_l de la celda l -ésima permanece constante luego V_l y ρ_l varían debido al movimiento de los bordes solamente. Las variables pueden evaluarse en coordenadas de borde R_j o centro R_l de celda. El paso de una a otra se hace mediante promedios aritméticos.

7.2 Diagrama de Flujo del Programa HYAT + ATMED CR

Básicamente se sustituye en las fórmulas la ionización total por la parcial, es decir, el número atómico Z por el grado de ionización del plasma Z_{bar} , y el potencial de Planck del modelo matemático original por el potencial químico que calcula ATMED CR. En las conductividades térmicas hay factores correctivos debido a campos eléctricos inducidos y dispersión ("scattering") electrón-electrón. Las fórmulas utilizadas corresponden a la referencia [99]. Se realiza la llamada dentro de HYAT en cada paso de tiempo hidrodinámico a la subrutina CONTER_NLTE en vez de a la subrutina CONTER del programa original. El esquema de funcionamiento del código hidrodinámico HYAT conectado con el modelo colisional radiativo ATMED CR se representa a continuación:

Fórmulas similares o idénticas pueden encontrarse en otros códigos hidrodinámicos unidimensionales como HELIOS-CR, BUCKY-1 o MEDUSA [100÷102]. En cada paso de tiempo hidrodinámico se llama dentro del código HYAT a la subrutina CONTER_NLTE que busca e interpola en las tablas calculadas con ATMED CR, los siguientes datos en función de la temperatura electrónica y la densidad de materia:

- η : Potencial químico del plasma para utilizarlo en la resolución de las ecuaciones correspondientes.

- Grado medio de ionización del plasma Z_{bar} para utilizarlo en la resolución de las ecuaciones correspondientes, concretamente en la subrutina CONTER_NLTE para cálculo de conductividades térmicas y tiempo de relajación ión-electrón:

- Conductividad Electrónica Régimen Clásico:

$$K_e = 20 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \frac{k(kT_e)^{5/2}}{m_e^{1/2} e^4 Z_{bar} \ln \Lambda_{ei}} \epsilon \delta_e \quad (7.9)$$

- Conductividad Iónica:

$$K_i = 20 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \frac{k(kT_i)^{5/2}}{m_i^{1/2} e^4 Z_{bar}^4 \ln \Lambda_i} \delta_i \quad (7.10)$$

- Intercambio Colisional electrón-ión:

$$K = C_{vi} \left(\frac{T_i - T_e}{\tau_{ei}} \right) \quad (7.11)$$

Insertar la resolución del balance colisional radiativo para un punto de temperatura electrónica, densidad y número atómico (T_e - ρ - Z) elevaría muchísimo el tiempo de cálculo y el código hidrodinámico no sería competitivo, por ello se ha recurrido a la tabulación e interpolación de parámetros. Se ha comprobado también que sustituir en la presión electrónica, energía interna y calor específico de la subrutina GELQ el número atómico Z por la ionización media, genera un fichero de salida de dimensión excesiva y además eleva exponencialmente el tiempo de cálculo por la gran cantidad de llamadas en el programa principal a dicha subrutina.

El funcionamiento de la herramienta obtenida se caracteriza por:

- Secuenciación entre subrutina CEXPLI, que resuelve las ecuaciones de la malla y de Euler, y la subrutina CIMPLI que resuelve las ecuaciones de las temperaturas electrónica e iónica.
- Dentro de cada intervalo temporal Δt^n se obtiene autoconsistencia de las ecuaciones y fórmulas del sistema tridiagonal para las temperaturas tras un máximo de 5÷6 iteraciones antes de saltar al siguiente Δt^{n+1} .
- Elige el usuario el paso espacial Δr y el paso temporal Δt se calcula según la condición ligada a la velocidad del sonido: $\Delta t < \frac{\Delta r}{C_s}$

HYAT + ATMED CR se puede utilizar para elementos de bajo o intermedio número atómico, pero aunque no contemple el transporte de energía por radiación, es mucho más importante la conductividad del plasma. En el caso de materiales de bajo número atómico, las zonas de conversión y re-emisión de radiación tras la irradiación láser del blanco, son reemplazadas por una única zona de conducción donde el transporte de energía está dominado por la conducción electrónica (Ecuación 7.9) y la conversión de Rayos-X es muy reducida. Gran parte de los formalismos teóricos utilizados en el código HYAT se describen en las referencias [103÷109]. Se han realizado en las últimas décadas numerosos experimentos de blancos irradiados por haces láser [110÷137]. En los siguientes apartados se realizan varias simulaciones ejemplo de blancos planos y cilíndricos. Además de la diferencia en los órdenes de magnitud de las variables presión, densidad, temperatura, velocidad y distancia de penetración de la onda de choque, etc., se observa en algunas gráficas una evolución más estable con menos oscilaciones en las simulaciones con el programa con ionización parcial HYAT 1D + ATMED CR. Para algunos elementos como los analizados el código con ionización total HYAT 1D da lugar a evoluciones temporales y espaciales de las variables termodinámicas muy oscilantes.

7.3 Simulación de Experiencias de Irradiación sobre Blancos Planos

El frente de choque avanza hacia el interior del blanco existiendo un sector del mismo comprendido entre la superficie libre y el frente de choque donde el material permanece sin perturbar.

Se realiza una optimización del método numérico. Hay un conjunto de celdas de la malla de cálculo comprendidas entre $l = 1$ y $l = LINT$ donde las variables son permanentemente calculadas aunque se conoce el valor de las variables de antemano, pues representan una zona aun no alcanzada por el efecto perturbador de la onda de choque. La condición de contorno para el flujo de calor aplicada a la celda 1 se satisface automáticamente para las celdas ubicadas a la derecha de la celda 1, hasta que se encuentra la onda de choque en la celda $l = LINT$. Así se realiza el cálculo solamente dentro de un sector de malla comprendido entre la celda con $l = LINT$ y $l = N$, siendo la celda $l = N$ la correspondiente a la superficie donde incide el haz láser.

Figura 7.1. Blancos utilizados irradiados por láser.

Se han utilizado blancos en la medida de velocidades de ondas de choque [110]. La energía del pulso láser es depositada cerca de la superficie del blanco (círculo sólido Figura 7.1) y genera electrones rápidos que re-depositan su energía en el volumen que lo rodea.

El calentamiento repentino del blanco da lugar a una onda de choque que atraviesa la lámina y emerge primero desde el substrato y después de la capa delgada que cubre la mitad del blanco. El espesor de la capa delgada dividido por la diferencia entre los tiempos de emergencia es la velocidad de la onda de choque. Para que la onda de choque permanezca razonablemente plana el espesor del blanco debe ser mucho menor que el diámetro de focalización. Gran parte de la energía de los láseres de alta potencia es depositada en una distribución de electrones muy energéticos tal que la cola de electrones supratérmicos puede precalentar la lámina antes de que llegue la onda de choque. Cuánto más gruesa sea la lámina menor precalentamiento se producirá, pero aumentar el espesor incrementa la probabilidad de que una onda de rarefacción atrape a la onda de choque antes de que alcance la superficie libre. Se definen:

$R_s(t)$: Posición de la onda de choque en función del tiempo.

$\dot{R}_s$: Velocidad de propagación de la onda de choque en función del tiempo.

Para inferir un punto de una ecuación de estado (EOS) con una onda de choque en un material inicialmente frío es necesario medir al menos dos parámetros, velocidad de la onda de choque y el otro que no se puede medir directamente: la velocidad de la partícula, presión, densidad o energía interna. En lugar de medir un segundo parámetro se mide la velocidad de la onda de choque simultáneamente en dos materiales en contacto. Si se conoce la ecuación de estado de un material, un punto de la EOS del otro material se puede determinar porque la velocidad de las partículas y la presión son continuas a través de la interfase.

7.3.1 Blanco Plano de un Elemento Puro

Se han realizado experimentos con láminas de berilio de 250 μm irradiadas alcanzándose 18 eV de temperatura electrónica y grados de ionización en el entorno de $Z_{\text{bar}} = 2.3$, logrando un calentamiento isocórico, acorde con simulaciones realizadas por el código hidrodinámico en una dimensión HELIOS, con los parámetros del láser correspondientes al experimento real [138]. Con el código original HYAT basado en ionización total, y con la herramienta HYAT+ATMED CR basada en ionización parcial, se analiza la irradiación de una lámina de berilio de 250 μm ajustando el pulso láser tal que se alcanzan temperaturas electrónicas del orden de 18 eV. Se obtienen con HYAT+ATMED CR grados medios de ionización de $Z_{\text{bar}} = 2.39$. Se han considerado en ambas simulaciones los siguientes parámetros de entrada (Tabla 7.1):

Tabla 7.1: Parámetros de entrada para las simulaciones de HYAT e HYAT+ATMED CR

P0	T inicial (K)	ρ inicial (g/cm ³)	FLFT	Espesor Blanco (μm)	NGEO	NELET
2300	300	1.848	0.1	250	1	1

Se definen:

- **P0:** Parámetro del pulso láser (pico máximo).
- **FLFT:** Factor limitador del flujo térmico.
- **NGEO:** Índice para geometría (1: plana, 2: cilíndrica)
- **NELET:** Número de elementos materiales del blanco.

Se obtiene la siguiente evolución de variables en el tiempo para ambas opciones (Tabla 7.2), ionización total Z o ionización parcial Z_{bar} , considerando instantes representativos:

Tabla 7.2: Evolución de variables en la lámina de berilio

Tiempo (ns)	Coord. Z (μm)	Coord. Z _{bar} (μm)	T _e Z (eV)	T _e Z _{bar} (eV)	ρ Z (g/cm ³)	ρ Z _{bar} (g/cm ³)
0.5	285.941	262.401	173.004	16.666	8.3E-04	2.4E-03
0.5	249.042	249.439	0.149	2.59E-02	1.842	2.536
0.5	248.350	248.734	2.71E-02	2.58E-02	2.804	1.913
0.5	247.779	247.915	2.63E-02	2.58E-02	2.602	1.851
0.5	247.074	247.083	2.60E-02	2.58E-02	1.883	1.848
1.4	427.199	303.894	459.204	30.261	1.7E-04	5.7E-04
1.4	251.042	249.604	1.020	2.76E-02	0.169	1.112
1.4	246.369	248.554	2.98E-02	2.61E-02	6.234	2.154
1.4	246.088	247.829	2.89E-02	2.59E-02	4.899	2.099
2.8	739.727	392.221	911.953	248.43	6.6E-05	2.1E-04
2.8	262.191	251.103	92.621	0.186	4.0E-02	0.500
2.8	243.128	248.884	0.106	3.55E-02	25.049	1.132
2.8	243.076	247.732	7.10E-2	3.12E-02	36.488	1.629

Coord. Z/Z_{bar}: Coordenada de las variables según ionización total o parcial respectivamente.

Figura 7.2a. Densidad del material (superior) versus tiempo y posición con el código hidrodinámico HELIOS 1D [138] y con el código HYAT 1D + ATMED CR (inferior) en los instantes 0.5 ns (rojo), 1.4 ns (verde) y 2.8 ns (azul).

Se observa una gran diferencia en la distancia de penetración de la onda de choque entre HELIOS e HYAT 1D + ATMED CR (Figura 7.2a). Con HELIOS la velocidad de la onda de choque es 70 $\mu\text{m}/\text{ns}$ [138]. Con HYAT 1D e ionización total Z se obtienen picos de densidad excesivos (Figura 7.2b).

Figura 7.2b. Densidad del material versus tiempo y posición con el código hidrodinámico HYAT 1D (superior). Densidad del material (g/cm^3) y temperatura electrónica (eV) versus tiempo y posición con el código HYAT 1D + ATMED CR (inferior) en los instantes 0.5 ns (líneas roja p-verde T), 1.4 ns (líneas azul p-rosa T) y 2.8 ns (línea azul oscuro p-granate T).

Figura 7.3. Esquema del experimento de irradiación de Berilio y onda de choque calculada con el código HELIOS 1D [138].

Otros estudios comparativos realizados con blancos esféricos con el código HELIOS [139], obtienen conclusiones similares acerca de considerar los efectos de la ionización parcial, calculando mayores valores de presión máxima y densidad con las mismas condiciones iniciales si la ecuación de estado utilizada es politrópica sin considerar los efectos de ionización versus otra ecuación que si los contemple. Al considerar efectos de ionización y excitación, la energía térmica final alcanzada en el material es menor puesto que parte de la energía inicial se emplea en ionizar y excitar electrones, quedando almacenada en los electrones libres y excitados. En consecuencia son menores la temperatura, la presión y la densidad calculadas. En las experiencias de blancos planos y cilíndricos de esta tesis doctoral se ha utilizado para los iones y electrones un modelo de gas ideal clásico, aproximación válida por alcanzarse temperaturas superiores a 10 eV en la superficie irradiada [140].

7.3.2 Blanco Plano de una Mezcla

Se considera ahora una lámina compuesta por 50%Carbono + 50%Hidrógeno. Con el código original HYAT basado en ionización total, y con la herramienta HYAT + ATMED CR basada en ionización parcial, se analiza la irradiación de una lámina de CH de 25 μm. Se han considerado en ambas simulaciones los siguientes parámetros de entrada (Tabla 7.3):

Tabla 7.3: Parámetros de entrada para las simulaciones de HYAT e HYAT + ATMED CR

P0	T inicial (K)	ρ inicial (g/cm ³)	FLFT	Espesor Blanco (μm)	NGEO	NELET
2000	300	1.044	0.001	25	1	1

Se observa una gran diferencia en la distancia de penetración de la onda de choque y en el pico de densidad entre los códigos HYAT 1D con ionización total e HYAT 1D + ATMED CR (Figura 7.4).

Se obtiene la siguiente evolución de variables en el tiempo para ambas opciones (Tabla 7.4), ionización total Z o ionización parcial Z_{bar} , considerando instantes representativos.

Tabla 7.4: Evolución de variables en láminas de CH

Tiempo (ns)	Coord. Z (μm)	Coord. Z _{bar} (μm)	T _e Z (eV)	T _e Z _{bar} (eV)	ρ Z (g/cm ³)	ρ Z _{bar} (g/cm ³)
0.1	28.160	27.104	45.941	13.677	5.49E-03	8.30E-03
0.1	24.667	24.875	4.00E-02	2.72E-02	4.215	2.201
0.1	24.374	24.541	2.58E-02	2.58E-02	1.044	1.044
0.26	39.057	31.688	101.241	24.306	1.28E-03	2.59E-03
0.26	24.046	24.467	3.04E-02	2.77E-02	6.706	3.277
0.26	23.458	24.041	2.58E-02	2.58E-02	1.044	1.044
0.5	67.575	44.649	230.427	31.861	4.31E-04	9.09E-04
0.5	23.220	23.882	2.76E-02	2.63E-02	4.806	2.903
0.5	22.374	23.458	2.58E-02	2.58E-02	1.044	1.044
0.7	101.249	58.829	357.669	39.663	2.44E-04	5.36E-04
0.7	22.580	23.399	2.70E-02	2.62E-02	4.420	2.618
0.7	21.708	22.874	2.58E-02	2.58E-02	1.044	1.044
1	170.605	83.075	308.312	59.199	1.52E-04	3.19E-04
1	21.705	22.747	3.24E-02	2.62E-02	15.834	2.256
1	20.958	22.041	2.58E-02	2.58E-02	1.044	1.044
1.2	232.064	101.618	269.084	99.012	1.27E-04	2.48E-04
1.2	20.584	23.925	3.51E-02	5.18E-02	10.107	2.925
1.2	20.208	21.541	2.58E-02	2.58E-02	1.044	1.044

Figura 7.4a. Densidad del material (g/cm^3), temperaturas electrónica e iónica (eV) versus tiempo y posición con los códigos HYAT 1D (izquierda) e HYAT 1D + ATMED CR (derecha) en sucesivos instantes: 0.1 ns, 0.5 ns y 1 ns.

Mediante las líneas intermitentes auxiliares, se observa la diferencia en el pico de densidad entre los códigos HYAT 1D con ionización total e HYAT 1D + ATMED CR (Figura 7.4a). Suponiendo geometría plana se pueden obtener simulaciones de capas del ablador de una cápsula compuesta por la mezcla CH (Figura 7.4b).

Figura 7.4b. Blanco prototipo de la instalación NIF. Esquema de una cápsula de ignición de ablador de CH dopado con tres materiales o puro (izquierda). Densidad del material (g/cm³) versus tiempo y posición con HYAT 1D + ATMED CR en sucesivos instantes para la lámina de CH de 25 μm simulada, de derecha a izquierda: 0.1, 0.5, 0.7 y 1 ns (derecha).

7.3.3 Blanco Plano de Tres Capas de Elementos

Se considera ahora una lámina de 10 μm compuesta por tres capas de elementos Cu-Ge-C de espesores respectivos 4+2+4 μm (Tabla 7.5), considerando los siguientes parámetros de entrada:

Tabla 7.5: Parámetros de entrada para las simulaciones de HYAT e HYAT + ATMED CR

P0	Z	T _{inic} (K)	ρ _{inic} (g/cm³)	FLFT	Espesor Blanco (μm)	NGEO	NELET
4000	29	300	8.96	0.1	4	1	3
4000	32	300	5.323	0.1	2	1	3
4000	6	300	1.044	0.1	4	1	3

Se observa una gran diferencia en la distancia de penetración de la onda de choque y en el pico de densidad entre los códigos HYAT 1D con ionización total e HYAT 1D + ATMED CR (Figura 7.5).

Tabla 7.6: Evolución de variables en blancos planos de tres capas de cobre, germanio y carbono

Tiempo (ns)	Coord. Z (μm)	Coord. Z _{bar} (μm)	T _e Z (eV)	T _e Z _{bar} (eV)	ρ Z (g/cm ³)	ρ Z _{bar} (g/cm ³)
0.03	11.464	11.206	61.090	31.700	8.08E-03	9.48E-03
0.03	9.831	9.915	3.87E-02	7.47E-02	2.368	37.254
0.03	9.559	9.719	2.59E-02	2.58E-02	1.044	1.044
0.13	19.351	16.015	113.647	74.214	1.52E-03	1.91E-03
0.13	9.240	9.532	4.66E-02	4.11E-02	8.775	5.877
0.13	8.519	8.679	2.63E-02	2.61E-02	1.044	1.044
0.39	61.332	41.230	82.392	115.665	4.10E-04	3.85E-04
0.39	8.305	9.380	2.086	0.222	0.218	0.275
0.39	7.972	8.732	3.95E-02	2.85E-02	12.972	4.717
0.39	7.559	8.039	2.61E-02	2.61E-02	1.044	1.045
0.68	132.357	79.752	119.162	182.099	2.57E-04	1.78E-04
0.68	11.457	9.994	102.391	5.882	9.02E-03	3.92E-02
0.68	6.446	7.987	4.75E-02	2.75E-02	51.211	3.628
0.68	5.059	7.558	2.58E-02	2.62E-02	5.322	1.046

Figura 7.5a. Densidad del material (g/cm^3) versus tiempo y posición con los códigos HYAT 1D (verde) e HYAT 1D + ATMED CR (roja) en sucesivos instantes: 0.39 ns (superior) y 0.68 ns (inferior).

Figura 7.5b. Densidad del material (g/cm^3) y temperaturas electrónica e iónica (eV) versus tiempo y posición con los códigos HYAT 1D (Z) e HYAT 1D + ATMED CR (Z_{bar}) en los instantes 0.39 ns, 0.68 ns.

7.4 Simulación de Experiencias de Irradiación sobre Blancos Cilíndricos

Se considera ahora un blanco de cobre con geometría cilíndrica. Con el código original HYAT basado en ionización total, y con la herramienta HYAT + ATMED CR basada en ionización parcial, se analiza la irradiación de dicho blanco de radio 50 μm . Se han considerado en ambas simulaciones los siguientes parámetros de entrada:

Tabla 7.7a: Parámetros de entrada para las simulaciones de HYAT e HYAT + ATMED CR

P0	T inicial (K)	ρ inicial (g/cm^3)	FLFT	Espesor Blanco (μm)	NGEO	NELET
2000	300	8.96	0.001	50	2	1

Tabla 7.7b: Evolución de variables en blanco cilíndrico de cobre

Tiempo (ns)	Coord. Z (μm)	Coord. Z_{bar} (μm)	T_e Z (eV)	T_e Z_{bar} (eV)	ρ Z (g/cm^3)	ρ Z_{bar} (g/cm^3)	Coord. OC Z (μm)	Coord. OC Z_{bar} (μm)
0.17	200.812	205.737	14947.85	9684.75	1.20E-05	9.68E-06	47.775	49.094
0.17	48.100	49.426	1.715	0.149	7.915	6.946	47.775	49.094
0.17	47.834	49.210	9.36E-02	7.03E-02	183.255	22.702	47.775	49.094
0.17	45.083	45.083	2.62E-02	2.60E-02	8.96	8.96	47.775	49.094
0.33	46.313	48.717	6.37E-02	5.29E-02	190.520	30.468	46.255	48.560
0.53	141.128	52.871	1355.998	1.763	2.84E-03	0.245	44.734	47.951
0.53	45.174	48.204	0.405	4.28E-02	18.524	20.252	44.734	47.951
0.53	44.792	48.089	4.96E-02	3.65E-02	203.333	31.855	44.734	47.951
0.53	40.083	40.083	2.58E-02	2.58E-02	8.96	8.96	44.734	47.951

Se observa una gran diferencia en la distancia de penetración de la onda de choque (OC) y en el pico de densidad entre los códigos HYAT 1D con ionización total e HYAT 1D + ATMED CR (Figura 7.6). La velocidad de la onda de choque también es mayor, 9 $\mu\text{m}/\text{ns}$ frente a 3 $\mu\text{m}/\text{ns}$ (Figura 7.7).

Figura 7.6. Densidad del material (g/cm^3) y temperatura electrónica (eV) versus tiempo y posición con los códigos HYAT 1D (roja ρ -verde T) e HYAT 1D + ATMED CR (azul ρ -rosa T) en sucesivos instantes: 0.17 ns y 0.33 ns.

Figura 7.7. Onda de choque con HYAT 1D + ATMED CR (verde) con velocidad $2/0.55=3.63 \mu\text{m/ns}$ y con HYAT 1D (roja) con velocidad $5/0.55=9.09 \mu\text{m/ns}$.

Se observa una gran diferencia en el tiempo de duración de la simulación, resultando en este ejemplo concreto de 537.462 ps y 1477.8048 ps, respectivamente con los códigos HYAT 1D con ionización total e HYAT 1D + ATMED CR.

Se considera ahora el mismo blanco pero con un factor limitador de flujo térmico más estricto (FLFT=0.1). Se observa una gran diferencia en la distancia de penetración de la onda de choque y en el pico de densidad entre los códigos HYAT 1D con ionización total e HYAT 1D + ATMED CR (Figura 7.8). La velocidad de la onda de choque también es mayor, 14 $\mu\text{m}/\text{ns}$ frente a 3.42 $\mu\text{m}/\text{ns}$.

Tabla 7.8a: Parámetros de entrada para las simulaciones de HYAT e HYAT + ATMED CR

P0	T inicial (K)	ρ inicial (g/cm^3)	FLFT	Espesor Blanco (μm)	NGEO	NELET
2000	300	8.96	0.1	50	2	1

Tabla 7.8b: Evolución de variables en blanco cilíndrico de cobre

Tiempo (ns)	Coord. Z (μm)	Coord. Z _{bar} (μm)	T _e Z (eV)	T _e Z _{bar} (eV)	ρ Z (g/cm^3)	ρ Z _{bar} (g/cm^3)	Coord. OC Z (μm)	Coord. OC Z _{bar} (μm)
0.01	51.201	52.244	443.953	2188.099	5.6E-03	2.6E-03	49.582	49.748
0.01	49.712	49.903	6.4E-02	0.118	16.103	10.601	49.582	49.748
0.01	49.416	49.416	3.7E-02	3.7E-02	8.960	8.960	49.582	49.748
0.05	62.634	75.216	936.821	5222.866	5.5E-04	1.6E-04	49.060	49.653
0.05	49.085	49.813	0.395	0.237	35.135	16.432	49.060	49.653
0.05	47.749	47.749	2.9E-02	2.7E-02	8.960	8.960	49.060	49.653
0.12	97.392	144.701	1391.182	8266.133	1.06E-04	2.2E-05	48.052	49.292
0.12	48.108	49.416	0.186	8.9E-02	140.859	21.010	48.052	49.292
0.12	46.916	46.916	2.8E-02	2.6E-02	8.960	8.960	48.052	49.292
0.37	108.122	51.349	861.310	0.988	5.8E-03	0.448	45.509	48.442
0.37	45.562	48.586	6.9E-02	4.6E-02	193.189	31.800	45.509	48.442
0.37	44.249	44.583	2.6E-02	2.5E-02	8.960	8.960	45.509	48.442

Figura 7.8a. Densidad del material (g/cm³) y temperatura electrónica (eV) versus tiempo y posición con los códigos HYAT 1D (azul p-rosa T) e HYAT 1D + ATMED CR (roja p-verde T) en sucesivos instantes: 0.12 ns y 0.37 ns.

Figura 7.8b. Densidad del material (g/cm^3) versus tiempo y posición con los códigos HYAT 1D (superior) e HYAT 1D + ATMED CR (inferior) en sucesivos instantes, de derecha a izquierda: 0.01 ns, 0.05 ns, 0.12 ns, 0.37 ns y 0.53 ns.

8. CONCLUSIONES Y LINEAS FUTURAS

En esta tesis doctoral se ha presentado el modelo colisional radiativo de átomo medio ATMED CR para el cálculo de propiedades atómicas, radiativas y termodinámicas de plasmas. Ha sido desarrollado a través de la implementación de un balance colisional radiativo basado en coeficientes de tasas analíticas para los procesos atómicos. El modelo atómico utilizado corresponde al nuevo modelo hidrogenoide apantallado relativista (NRSHM). Para inicializar la resolución del balance CR se utilizan las propiedades atómicas y las poblaciones de los orbitales electrónicos relativistas obtenidas mediante el cálculo del plasma con el programa ATMED LTE, en las condiciones especificadas de temperatura electrónica (eV) y densidad de materia (g/cm^3). La implementación del balance CR ha ampliado considerablemente el rango de validez de este código de átomo medio, tal que ahora se pueden modelar también numerosos plasmas teóricos y de laboratorio mediante su caracterización por propiedades fundamentales que están en régimen de no equilibrio local termodinámico, en régimen corona o en régimen LTE, calculando las tasas de los procesos atómicos involucrados.

Vista la funcionalidad de ATMED CR, el cálculo de las **poblaciones electrónicas fraccionarias relativistas** con desdoblamiento n_{lj} es la verdadera aportación de esta tesis a los modelos colisionales radiativos existentes actualmente, contruidos en el formalismo de átomo medio:

- El modelo CR XSN de los autores W.A. Lokke y W.H. Grasberger de 1977 [49], desarrollado en el LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory, California, USA). Este código considera desdoblamiento n de los orbitales energéticos del átomo medio para resolver el balance y está basado en un modelo atómico hidrogenoide apantallado.
- El modelo CR de los autores G. Faussurier, C. Blancard de 2009 [17-18], desarrollado en la institución “Commissariat à l’Energie Atomique”, Francia. Este código considera desdoblamiento nl de los orbitales energéticos del átomo medio para resolver el balance y está basado en un modelo atómico hidrogenoide apantallado.
- El modelo CR del autor Balazs F. Rozsnyai de 2010 [15-16], desarrollado en el departamento “Computational Physics Research Company” del LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory, California, USA). Este código considera desdoblamiento nl de los orbitales energéticos del átomo medio para resolver el balance colisional radiativo y posteriormente construye varias configuraciones a partir del ión medio convirtiéndolo en un modelo detallado para el cálculo de propiedades radiativas, logrando así la auto convergencia.

Se ha comprobado que sumando sobre el número cuántico j para las capas nl , el grado de acuerdo es muy alto con códigos detallados y de átomo medio para poblaciones previamente calculadas en orbitales caracterizados por el número cuántico principal n y el número cuántico orbital l . A su vez, el desdoblamiento n_{lj} permite detallar el cómputo de las energías electrónicas de ligadura así como de los elementos de matriz para transiciones dipolares, proporcionando fuerzas de oscilador y probabilidades de transición electrónica entre orbitales relativistas muy precisas.

En las Figuras 8.1÷8.3 se observa, primero el aumento de la precisión en el cálculo de propiedades atómicas y radiativas por el desdoblamiento relativista de ATMED CR respecto al código de átomo medio XSN, que calcula la estructura atómica únicamente según el número cuántico principal; y segundo, la disminución del tiempo de computación respecto a modelos detallados DCA / RDCA.

Figura 8.1a. Grado medio de ionización versus T_e según códigos D, R10, XSN de Ref. [141] y ATMED CR para plasma de hierro a $T_R=200$ eV y $N_i=1E+18$ cm⁻³.

Figura 8.1b. Grado medio de ionización versus T_e según códigos D, R10, XSN de Ref. [141] y ATMED CR para plasma de hierro a $T_R=500$ eV y $N_i=1E+18$ cm⁻³.

Figura 8.2a. Opacidad según códigos DCA, RDCA, XSN de Ref. [22] y ATMED CR UTA o MUTA para plasma en NLTE de hierro a $T_e=30$ eV, $T_R=100$ eV y $\rho=0.091$ g/cm³.

Figura 8.2b. Opacidad según códigos DCA, RDCA, XSN de Ref. [22] y ATMED CR UTA o MUTA para plasma en NLTE de hierro a $T_e=3000$ eV, $T_R=100$ eV y $\rho=0.091$ g/cm³.

Figura 8.2c. Emisividad del oro a densidad de materia 0.0155 g/cm^3 y temperaturas $T_e = 1000 \text{ eV}$ y $T_R = 400 \text{ eV}$ según ATMED CR y varios códigos de la Ref. [22]. Se indica lateralmente el tiempo de computación de cada código.

Figura 8.3. Opacidad normalizada de Rosseland de mezclas de oro y gadolinio a densidad de materia $0.1, 1$ y 10 g/cm^3 y temperaturas $T_e = T_R = 250 \text{ eV}$ según ATMED CR, el experimento del año 2001 y los códigos XSN, STA y de la Ref. [78].

Por ser relativista, es mejor la resolución de propiedades espectrales y radiativas (opacidad frecuencial, opacidades medias, transmisión, etc.), que calculadas con modelos de átomo medio y desdoblamiento únicamente n o nl , pierden precisión en la malla de energías fotónicas en comparación con códigos detallados DCA/STA, en lo que se refiere a frecuencias de líneas, ancho y alto de picos de absorción y líneas de emisión. No es necesario por ello extender ATMED CR a un código detallado mediante un cálculo posterior de configuraciones a partir del ión de referencia que es el átomo medio. ATMED CR representa por tanto una evolución tecnológica de casi cuatro décadas.

Tanto el modelo colisional radiativo ATMED CR como el código hidrodinámico con ionización parcial resultante de conectarlo con el modelo unidimensional HYAT, son programas de cálculo que utilizan formalismos matemáticos y físicos válidos, basados en diversas aproximaciones justificadas dentro de sus rangos de densidad y temperatura correspondientes. ATMED CR proporciona resultados cualitativos y cuantitativos correctos, dentro de unos márgenes preestablecidos por las medidas experimentales y los experimentos computacionales realizados con otros códigos del mismo tipo o más sofisticados. Se puede apreciar que los cálculos de parámetros son cualitativamente correctos en los espectros de opacidad y transmisión superpuestos a los obtenidos con otros modelos CR, en las rampas de ionización media respecto a la temperatura, etc. HYAT 1D + ATMED CR puede utilizarse con elementos de bajo o medio número atómico para el cálculo de simulaciones hidrodinámicas y ondas de choque creadas en materia irradiada. Se obtienen resultados cualitativos aceptables de las evoluciones temporal y espacial de las variables termodinámicas respecto a los proporcionados por otros códigos hidrodinámicos.

8.1 Conclusiones sobre la Funcionalidad Colisional Radiativa

ATMED CR proporciona mejores resultados para plasmas mediana o altamente ionizados y para densidades electrónicas intermedias o altas, ya que el modelo atómico es hidrogenoide apantallado relativista. Es un código rápido que calcula la estructura atómica basándose en la formulación del NRSHM sin recurrir a una base de datos con potenciales de ionización y energías de orbitales tabuladas para las configuraciones isoelectrónicas de los iones. A la vista de lo contrastado con datos de cálculo o experimentales incluidos en artículos científicos y bases de datos, se puede considerar correcta la validación teórica y experimental del modelo estadístico de física atómica de ATMED CR. Este último y otros códigos similares producen resultados que son del mismo orden de magnitud. Hay que subrayar la importancia de utilizar este código basado en el modelo de átomo medio dentro de su rango de validez, que es dónde realmente puede aprovecharse su rapidez en la ejecución de los cálculos. Por ello puede ser considerado un código útil para el cálculo rápido, con número cuántico principal máximo $n_{\max}=6$, y relativamente preciso de propiedades fundamentales de plasmas. Los cálculos con número cuántico principal $n_{\max}=10$ conllevan mayor tiempo de cómputo y se obtienen valores similares respecto a $n_{\max}=6$. El rango $5/10 \div 2000$ eV y medias-altas densidades está logrado para todos los elementos de la tabla periódica desde el hidrógeno hasta el mercurio. Cabe destacar que en el rango mencionado, se utiliza para los procesos atómicos de autoionización y captura electrónica la fórmula de Albritton modificada con un límite superior constante de $C_{\text{auto}}=10^{14} \text{ s}^{-1}$ [17].

Para plasmas en régimen corona puede ser más recomendable utilizar la fórmula de Albritton sin límite superior y para plasmas de altas densidades a temperaturas mayores que 1500÷2000 eV, hay que utilizar un valor moderado ($10^{15} \div 10^{17} \text{ s}^{-1}$) para no penalizar demasiado la creciente ionización. Además en régimen corona de bajas densidades electrónicas ($N_e = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$), cobran mucha importancia los procesos de autoionización/captura dielectrónica, y por lo tanto la fuerza de oscilador para una transición ligado-libre presente en su formulación tiene gran influencia en los cálculos sin C_{auto} , tal que se obtienen diferentes propiedades del plasma en función de si depende sólo del número cuántico principal n o también del orbital l . No obstante, en función del número atómico y para altas temperaturas $> 1500 \div 2000 \text{ eV}$, puede ajustarse el límite superior basándose en realimentación experimental y teórica a través de cálculos realizados con otros modelos colisionales radiativos. Es conveniente recordar que en plasmas de fusión por confinamiento magnético en Tokamaks, las condiciones de densidad son bastante inferiores ($N_e = 10^{12} \div 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 2000 \text{ eV}$) a las de la fusión inercial por haces láser ($N_e = 10^{21} \div 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 250 \text{ eV}$), aunque las temperaturas de operación son superiores. La magnitud de la constante en la fórmula de Albritton para el proceso de autoionización, $C_{\text{auto}} = 10^{14} \div 10^{17}$, se hace menos significativa primero, conforme aumenta la densidad, puesto que los procesos de excitación y desexcitación colisional ganan en importancia respecto a los de autoionización y recombinación dielectrónica; y segundo en plasmas fotoionizados ya que los procesos de fotoexcitación y fotodesexcitación entran en el balance colisional radiativo y pueden resultar de mayor orden de magnitud que los de autoionización y recombinación dielectrónica.

ATMED CR puede calcular plasmas monocomponentes y multicomponentes, estacionarios ó temporales. Se agiliza la resolución del balance colisional radiativo a través de fórmulas analíticas para tasas y de fórmulas para atrapamiento de radiación en plasmas gruesos basadas en un perfil de línea delta de Dirac, Gaussiano o con ensanchamiento Doppler. Una vez resuelto el balance y halladas las poblaciones electrónicas fraccionarias de los orbitales relativistas, se calculan las propiedades radiativas con un perfil de línea mucho más completo y refinado que incluye los ensanchamientos Doppler, Natural, Stark y Dielectrónico, así como con el uso de una sección eficaz de absorción ligado-ligado que agrupa líneas, lo que es equivalente a aplicar el formalismo de matrices de transiciones no resueltas (UTA), u otra sección que proporciona un espectro discreto de líneas individuales (MUTA).

El **modelo temporal** está basado en el método numérico implícito de Crank Nicholson, comunmente utilizado en matemáticas. Pero dada su ágil implementación mediante un proceso iterativo con un modelo hidrogenoide apantallado de átomo medio, se obtiene una resolución rápida del balance colisional radiativo en cada intervalo temporal caracterizado por unas condiciones termodinámicas concretas, e hilando convenientemente las poblaciones relativistas entre intervalos. Es muy sensitivo a cambios suaves o pronunciados en perfiles simultáneamente variables de dichas condiciones y a las unidades del paso de tiempo, que determinan totalmente la cinética de las poblaciones del plasma y la evolución temporal de propiedades tales como la ionización media. A su vez, se pueden elegir pasos de tiempo de mayor o menor longitud para unos instantes inicial y final dados, lo que se traduce en considerar mallas de cálculo menos o más finas, es decir, con una representación gráfica de la evolución de las variables más o menos quebrada respectivamente.

Se ha demostrado que el código ATMED CR resulta ser una herramienta muy útil para realizar cálculos precisos y rápidos, abarcando materiales de número atómico Z alto, intermedio y bajo de gran interés para la ciencia astrofísica y la fusión nuclear por confinamiento inercial o magnético. No se pueden sacar conclusiones generalizadas para todos los elementos de la tabla periódica, sino que para cada uno de ellos el rango de validez del código ATMED CR debe ser analizado en detalle. En la tesis se han simulado plasmas representativos, aunque se pueden modelar millones teniendo en cuenta todas las posibles combinaciones, primero de parámetros de entrada, temperaturas electrónica y de radiación, densidades electrónica o de materia, factor de dilución, longitud característica del plasma; y segundo, de fracciones de volumen de varios elementos en mezclas desde el hidrógeno hasta el mercurio. El programa desarrollado en esta tesis y escrito en FORTRAN 95 está bien construido desde dos puntos de vista, físico e informático. En general, las opciones por defecto utilizadas en los cálculos corresponden al modelo de ionización por presión para considerar efectos de plasma, número cuántico principal máximo $n_{\max}=6$ y el criterio de convergencia para poblaciones relativistas en elementos puros " $< 1E-005$ " y en mezclas " $< 1E-004$ " para una mayor rapidez en la resolución del balance CR sin perder precisión en los resultados. No obstante, se pueden realizar simulaciones considerando la formulación de Stewart y Pyatt para efectos de plasma, número cuántico principal máximo $n_{\max}=10$ y otros criterios de convergencia mucho más estrictos como " $< 1E-008$ ". Estas dos últimas opciones ralentizan considerablemente el tiempo de cálculo.

ATMED CR calcula **tasas de procesos atómicos** que corresponden a transiciones entre electrones ligados en orbitales relativistas del átomo medio, desde un orbital hacia el continuo o desde el continuo hacia un orbital. Son promedios estadísticos que reemplazan los procesos entre niveles energéticos (fundamental, excitados, etc.) de diferentes configuraciones iónicas. Se ha comprobado que su orden de magnitud es correcto y permiten establecer tendencias de la evolución de los procesos atómicos según los cambios en densidad y temperaturas, así como evaluar su impacto en el tiempo de computación del balance colisional radiativo.

Para el cálculo de tasas de todos los procesos atómicos ATMED CR puede considerar todas las posibles combinaciones entre orbitales sin ralentizar demasiado el tiempo de cálculo. Esto puede constituir una ventaja para analizar la importancia de determinados procesos para sólo orbitales relativistas específicos, que pudieran ser ignorados en un principio por un modelo detallado por realizar una selección no óptima de orbitales y procesos con el propósito de disminuir el tiempo de computación. Por ejemplo, es frecuente seleccionar que los procesos de fotorecombinación tengan lugar para orbitales de alto número cuántico principal, pero en algunos plasmas fotoionizados a bajas temperaturas la fotoexcitación y la fotoionización son muy importantes en orbitales internos creando vacantes y como consecuencia la fotorecombinación también, alcanzando ésta última un gran orden de magnitud. No obstante, también se puede realizar en ATMED CR una selección concreta de orbitales para todos los procesos atómicos al igual que en un modelo detallado. En las [Figuras 8.4÷8.8](#) se ve la influencia en el ratio de poblaciones N_{LTE} / LTE y en la ionización media, de incluir o no la fotoionización y la fotorecombinación para todos los orbitales de varios elementos químicos.

Figura 8.4. Ratio $b_i=N_{i,NLTE}/N_{i,LTE}$ para el manganeso en el plasma solar: la fotoionización ($S_p=1$) da lugar al desdoblamiento de niveles de Mn I, mientras que no incluir dicho proceso ($S_p=0$) en los cálculos termaliza las poblaciones atómicas [142].

Figura 8.5. Grado medio de ionización versus T_e según ATMED (CR sin T_R , CR con / sin fotoprocesos, LTE) para plasma de silicio a $T_R=500$ eV y $N_e=1E+18$ cm⁻³ [143].

Figura 8.6. Grado medio de ionización versus T_R/T_e , X_{dilu} según ATMED CR con/sin fotoionización/fotorec. para plasma de xenón a $T_e=100$ eV y $N_e=1E+20$ cm⁻³ [68].

Figura 8.7. Grado medio de ionización versus T_e según códigos Workshop NLTE-9 [35] y ATMED CR para plasma de hierro: $T_R=250$ eV, $X_{dilu}=0.02$, $N_e=1E+19$ cm⁻³.

Figura 8.8. Grado medio de ionización versus N_e según [1] y ATMED (CR con/sin fotoionización/fotorec., LTE) para plasma de hierro a $T_e / T_R=100 / 200$ eV, $X_{dilu}=0.02$.

Cómo se ha observado en los plasmas fotoionizados de hierro del workshop NLTE-9, cuando la temperatura de radiación es muy superior a la electrónica, la planckiana actúa de forma semejante a un láser de electrones libres, véase la referencia [144], donde los fotones emitidos en sus transiciones libre-libre y que corresponden a un espectro de rayos X con distribución gaussiana, arrancan electrones de los orbitales internos de la capa K de los diversos iones de neón por fotoionización y por fotoexcitación. En el caso del plasma de hierro (NLTE-9), Figura 8.7, la distribución planckiana arranca por fotoexcitación y fotoionización electrones de los orbitales internos 1÷4, creando vacantes y aumenta el orden de magnitud de la fotorecombinación a 30, 60 y 120 eV [145-146].

Los comportamientos asintóticos de la ionización media calculada con ATMED CR son correctos para plasmas con emisión espontánea y fotoionizados, así como para plasmas en régimen LTE. Sin campos externos de radiación para bajas o moderadas temperaturas, la convergencia al régimen LTE del modelo colisional radiativo aumenta con densidades crecientes. También aparecen efectos de no equilibrio a altas densidades y con temperaturas altas crecientes según el número atómico del elemento. En plasmas con un campo de radiación o fotoionizados con una densidad típica de LTE en cuanto $T_e \neq T_R$, difieren las poblaciones y por tanto el resto de propiedades, separándose del régimen LTE caracterizado por coincidentes temperaturas electrónica y de radiación ($T_e = T_R$).

También es un código eficaz para el cálculo de **opacidades medias de Rosseland y Planck** en lo que a su orden de magnitud se refiere. Es lógico que sus valores resulten a veces inferiores cuando se comparan con los de códigos detallados, que incluyen en sus cálculos un gran número de niveles y/o términos energéticos, configuraciones, etc. para gran cantidad de especies iónicas con distintos grados de carga de todos los componentes del plasma. Un código de átomo medio considera el plasma caracterizado por un ión promedio entre cuyos niveles energéticos tienen lugar las transiciones electrónicas, y evidentemente éstas serán menos en número que en un código detallado, resultando por tanto en menores valores de opacidad. No obstante, se pone de manifiesto que aún teniendo el mismo orden de magnitud, existe un gran margen entre códigos de resultados relativos a K_R y K_P , veánse por ejemplo los resultados para astrofísica del denominado Proyecto de Opacidad.

Los cálculos espectroscópicos de la **opacidad frecuencial** deben realizarse con modelos detallados DLA, DTA, DCA/SCA debido al gran número de líneas de transición involucradas para obtener una correcta reproducción cuantitativa de las observaciones experimentales. Para una densidad de materia relativamente alta los modelos detallados son los únicos capaces de predecir las correctas posiciones de los picos de absorción y su magnitud. Espectros de ATMED CR con formalismo UTA han sido superpuestos sobre los espectros detallados o de átomo medio de otros códigos, simplemente para comprobar que el grado de acuerdo es muy alto en lo que a sus características promedio se refiere.

No obstante, como se ha podido chequear en los espectros de opacidad, las características generales proporcionadas por ATMED CR coinciden en gran medida en todo el rango de las energías fotónicas y es reseñable que los picos se solapan, lo que significa que el modelo NRSHM proporciona energías de transición que concuerdan mejor con modelos detallados más precisos que otros códigos de átomo medio.

Por otro lado, las características espectrales de la opacidad difieren entre códigos cuando se analizan en un rango muy pequeño de energías fotónicas, como consecuencia de las distintas aproximaciones contenidas en cada uno de ellos. Conforme la temperatura aumenta, los valores de opacidad obtenidos con ATMED CR se aproximan más a los de los códigos detallados puesto que los átomos están más ionizados y el modelo hidrogenoide apantallado tiene un mejor comportamiento.

Dada su rapidez de cálculo, resulta una potente herramienta para realizar un primer análisis de la idoneidad de numerosos materiales y mezclas para una aplicación concreta en rangos amplios de condiciones bien definidas de densidad y temperatura en LTE o NLTE (plasmas de fusión nuclear, astrofísicos, generados por láser, etc.).

Una vez acotado el número de materiales adecuados con ATMED CR, se procedería a la utilización de un código de configuración detallada para afinar el análisis del espectro de opacidad, líneas y transiciones de los materiales seleccionados y especialmente para el cálculo de las fracciones numéricas de los componentes de las mezclas que dan lugar a los óptimos o máximos valores de opacidad media de Rosseland.

Para plasmas de más de seis elementos se obtienen tiempos de cálculo muy competitivos con ATMED CR para condiciones de NLTE. Pocas mezclas con gran número de componentes han sido publicadas en régimen NLTE, de hecho con ATMED CR aumenta mucho el tiempo de cálculo respecto a la misma mezcla computada en régimen LTE, veánse por ejemplo los plasmas multicomponente para paredes de hohlraum y la mezcla de 28 elementos.

8.2 Conclusiones sobre la Herramienta HYAT + ATMED CR

Además, acoplando ATMED CR mediante tabulación de parámetros de plasmas con un código hidrodinámico que originalmente consideraba ionización total del plasma a través del número atómico Z , se obtiene un modelo rápido para simulaciones de blancos irradiados por haces láser, pero relativista y avanzado que contiene la estructura atómica de la materia según el formalismo de átomo medio. La hipótesis de ecuación de estado del gas ideal se puede considerar aceptable para iones y electrones, ya que del lado del blanco irradiado se superan los 10 eV de temperatura con elementos de bajo o medio número atómico.

Sea régimen LTE o NLTE, al considerar parámetros tales como el potencial químico y la ionización media sustituyendo el número atómico en la formulación para conductividades electrónica e iónica y tiempos de relajación electrón e ión, las simulaciones de blancos irradiados son más realistas.

Considerando ionización total se obtienen ondas de choque sobredimensionadas tanto en magnitud de la densidad de materia alcanzada (g/cm^3), como en la longitud de blanco (μm) que penetra la onda viajando hacia el interior del material ya que su velocidad ($\mu\text{m/ns}$) es mayor. El cálculo preciso de las ondas de choque es imprescindible para el diseño y caracterización de materiales que puedan constituir instalaciones en FCI, FCM, o que trabajen con haces láser de alta potencia.

No obstante se obtienen evoluciones similares de temperaturas electrónica e iónica, densidad de materia, etc. utilizando el código HYAT 1D original versus HYAT 1D + ATMED CR. Pueden simularse blancos planos y cilíndricos considerando una dimensión característica de uno o varios componentes. Cuando el espesor del elemento externo es pequeño ($55+2$, $25+1$ μm), la onda de choque alcanza el material interno. En blancos de capas de diferentes elementos deben especificarse espesores adecuados para absorber la energía depositada tal que el reparto de la misma sea correcto.

HYAT 1D + ATMED CR debe utilizarse sólo con elementos de bajo o medio número atómico, ya que con elementos de alto Z como el oro no se alcanzan temperaturas superiores a los $10\div 25$ eV, así que no se entra en tablas de ATMED CR para encontrar los datos de ionización parcial y potencial químico.

Además de la diferencia en los órdenes de magnitud de las variables presión, densidad, temperatura, velocidad de la onda de choque, etc., se ha observado en las simulaciones gráficas una evolución más estable con menos oscilaciones con el programa HYAT 1D + ATMED CR. Para algunos elementos como los analizados, el código con ionización total HYAT 1D da lugar a evoluciones temporales y espaciales de las variables termodinámicas muy oscilantes y de menor duración (ps).

8.3 Líneas Futuras

Las principales líneas de trabajo para ampliar los modelos informáticos ya realizados y aumentar aún más las posibles simulaciones de plasmas de ATMED CR son las siguientes:

1. Implementar en el balance colisional radiativo más opciones de cálculo, incluyendo fórmulas nuevas o alternativas para las tasas que contemplen procesos adicionales (fluorescencia, decaimiento Auger, doble fotoionización, etc.).
2. Implementar en el balance colisional radiativo más opciones de cálculo, incluyendo nuevas fórmulas para las tasas colisionales con otras distribuciones de electrones libres no Maxwellianas (Fermi-Dirac, etc.).
3. Implementar en el balance colisional radiativo más opciones de cálculo, incluyendo nuevas fórmulas para las tasas radiativas con otras distribuciones de fotones no Planckianas, como por ejemplo una fuente de radiación Gaussiana para un pulso de Rayos-X de un láser de electrones libres [144].
4. Conexión con otros códigos hidrodinámicos en 1, 2, 3 dimensiones para cálculo de blancos planos, cilíndricos o esféricos también de materiales de alto número atómico, pudiéndose obtener valores de ionización media y potencial químico de ATMED CR en función no sólo de la temperatura electrónica sino también de la temperatura de radiación [147].