Física del Plasma: Diagnósticos de Plasmas en Astrofísica y Fusión

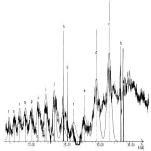
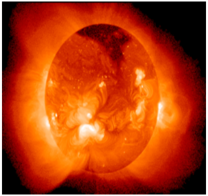


FIG. 2. Experimental spectrum of Pd in laser-produced plasma (this work), compared with theoretical UTA. The intensity of each array was adjusted to obtain the best fit. $3d^{N+1}$-$3d^N4p$ transitions: *a,b*—Pd XIX; *c,d,e,f,i,k,m,o*—Pd XX to Pd XXVII. $3d^{N+1}$-$3d^N4f$ transitions: *g,h*—Pd XIX; *j,l,n,p,q,r,s,t*—Pd XX to Pd XXVII.



Darío Mitnik

Instituto de Astronomía
y Física del Espacio

Departamento de Física
Universidad de
Buenos Aires

Argentina

Basado en el curso dictado por Prof. J.L. Schwob

The Hebrew University of Jerusalem, Israel.

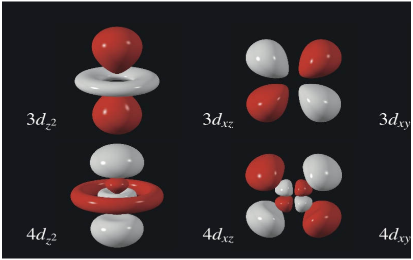
Programa del Curso

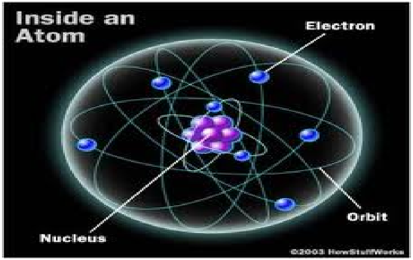
1. Física de Plasmas: Conceptos Generales
2. Fusión Termonuclear Controlada
3. Equilibrio Termodinámico
4. **Procesos fundamentales en Física Atómica**
5. Plasmas fuera del equilibrio termodinámico
6. Modelo Coronal
7. Modelo Colisional–Radiativo
8. Diagnóstico de Plasmas

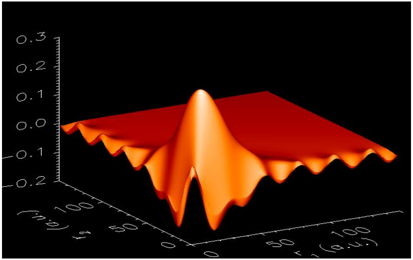
Programa del Curso

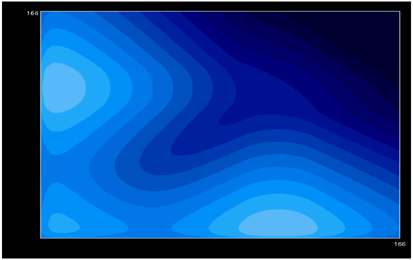
4. Procesos fundamentales en Física Atómica
   - El átomo de Hidrógeno, estructura, niveles y transiciones
   - Procesos radiativos
   - Procesos colisionales
   - Recombinación y Autoionización
   - Métodos de aproximación y bases de datos

4. Física Atómica: Procesos Fundamentales

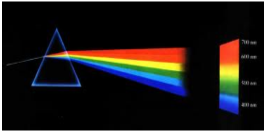


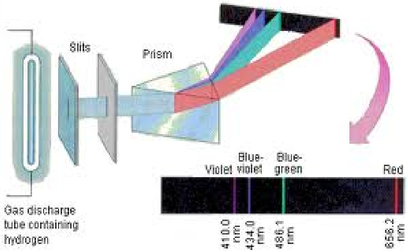


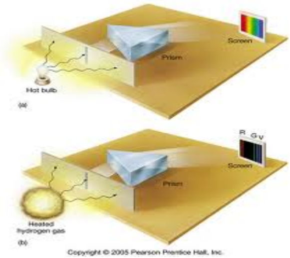


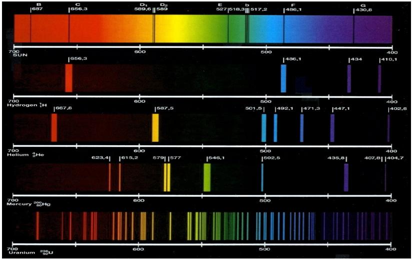


Líneas Espectrales

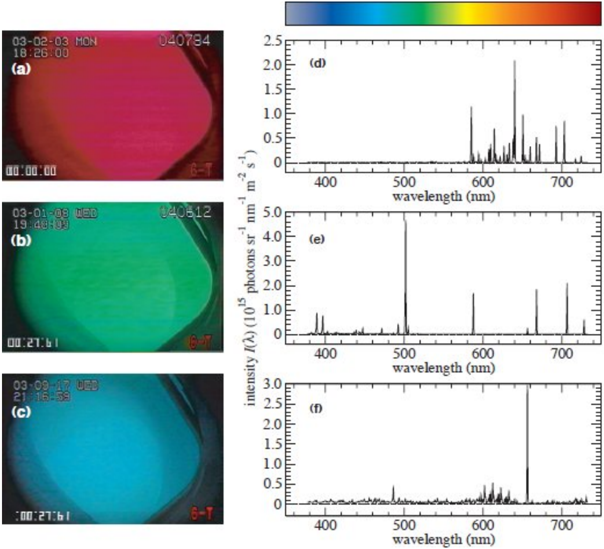








Líneas Espectrales

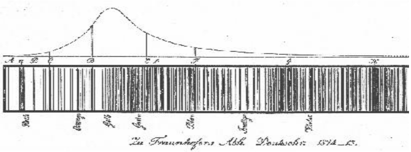


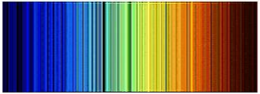
Ne

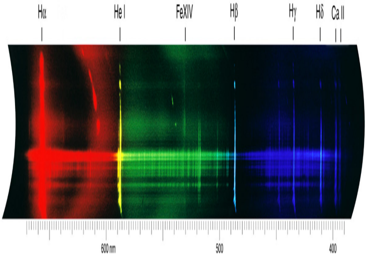
He

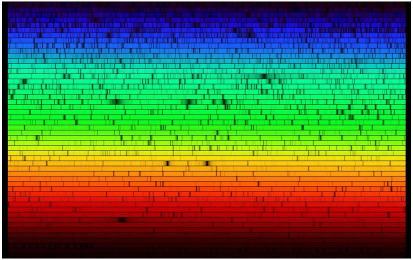
H_2

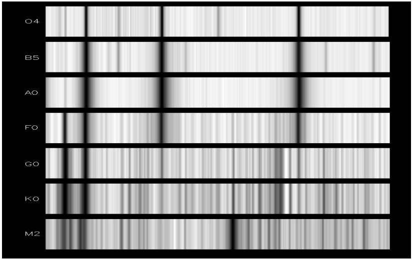
Líneas Espectrales



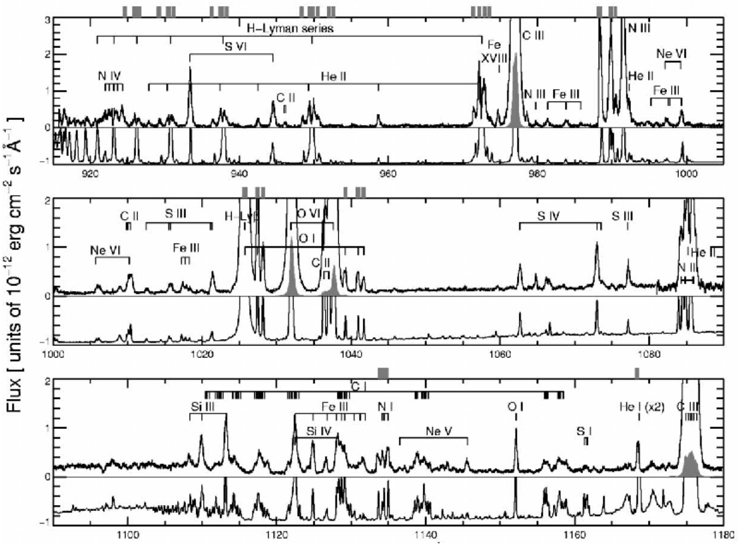




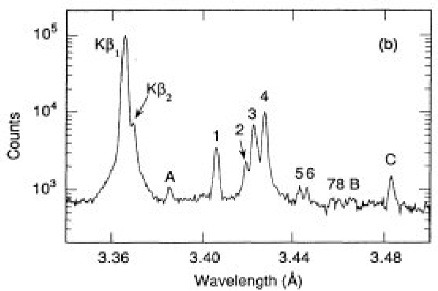




Capella


H–Lyman series
S VI
N IV
He II
C II
Fe XVIII
C III
N III
Fe III
Ne VI
O VI
O I
S III
S IV
Si III
Si IV
N I
Ne V
S I
He I (x2)
C I
Flux [units of 10^{-12} erg cm^{-2} s^{-1} Å^{-1}]

Líneas de Balmer



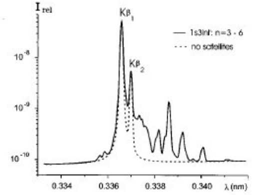
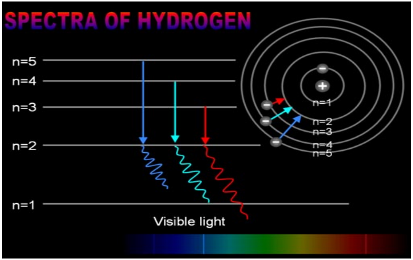
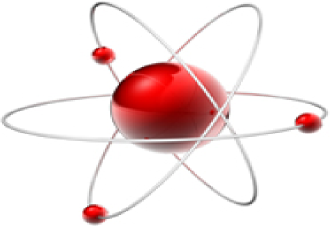
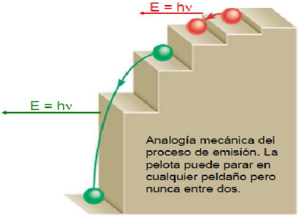


FIG. 3. Line overlapping of dielectronic Rydberg satellites $1s3lnl'$ with the $K\beta$ lines, $n_e=10^{19}$ cm^{-3}, $kT_e=500$ eV.

El Modelo de Bohr







El Atomo de Bohr

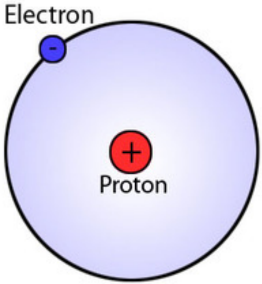
- Fuerza centrípeta: $\frac{m\, v_e^2}{r}$
- Fuerza Coulombiana: $\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0\, r^2}$

Hipótesis de Bohr:

$$L_n = m_e\, v\, r_n = n\, \frac{h}{2\pi} = n\, \hbar$$

$$r_n = \frac{n^2}{Z}\; \frac{h^2\, \epsilon_0\, 4\pi}{\pi\, m_e\, e^2\, 4\pi} \;=\; \frac{n^2}{Z}\; \frac{\hbar^2\, 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2}$$

$$r_n = \frac{n^2}{Z}\; a_0$$



$$a_0 = 5.2917 \times 10^{-11}\ \text{m} = 0.52917\ \text{Å}$$

El Atomo de Bohr

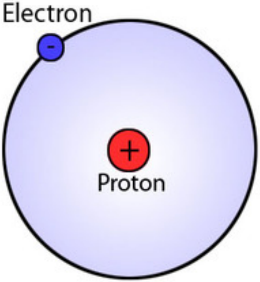
Hipótesis de Bohr:

$$L_n = m_e\, v\, r_n = n\, \frac{h}{2\pi} = n\, \hbar$$

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n} = \frac{Z}{n} \; \frac{e^2\, c}{4\pi\epsilon_0\, \hbar c}$$
$$= \frac{Z}{n} \; \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} c$$

$$v_n = \frac{Z}{n}\, \alpha c$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = \frac{1}{137}$$



El Atomo de Bohr

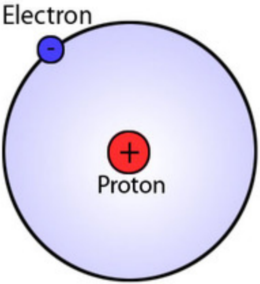
Energía:

$$E = E_k + E_p$$

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

$$\Rightarrow E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} = \frac{1}{2}E_p$$



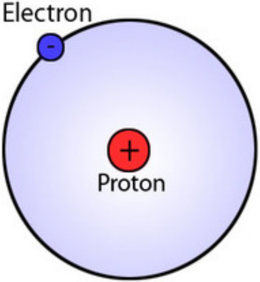
El Atomo de Bohr

Energía:

$$E = E_k + E_p$$

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}\,\frac{e^4\, m c^2}{(4\pi\epsilon_0)^2\,\hbar^2 c^2}$$

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}\,\alpha^2\, m_e c^2$$



$$\begin{aligned} m_e c^2 &= 0.511\ MeV \\ \frac{1}{2}\alpha^2\, m_e c^2 &= \frac{1}{2}\,E_H = \frac{1}{2}\,27.2113845\ eV = 13.60569\ eV \end{aligned}$$

Atomos hidrogenoides

- $r_n = \frac{n^2}{Z}\, a_0 \approx \frac{n^2}{Z}$ 0.5 Å
- $v_n = \frac{Z}{n}\, \alpha c$
- $E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}\, \alpha^2 m_e c^2 \approx -13.6\, \frac{Z^2}{n^2}$ eV

Unidades Atómicas

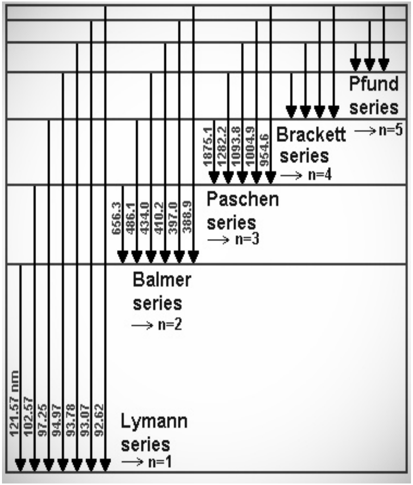
Una forma de simplificar las cuentas:

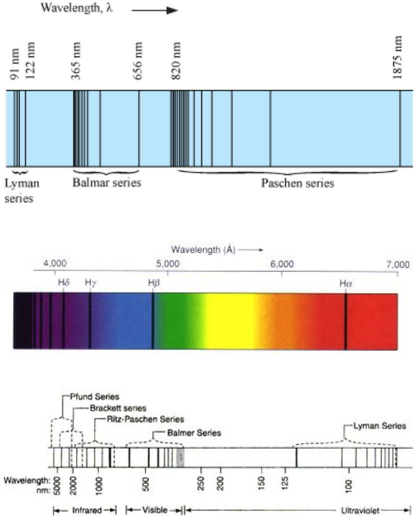
- $hc = 12398$ eV Å
- $\hbar c = 1974$ eV Å
- $m_e c^2 = 0.511$ MeV

Pero más fácil es aún trabajar en unidades atómicas $(m_e = \hbar = a_0 = 4\pi\epsilon_0 = 1)$:

- $r_n = \frac{n^2}{Z}$
- $v_n = \frac{Z}{n}$
- $E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}$

El Atomo de Bohr





La Ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{r},t)$$

Si el potencial V no depende del tiempo, se separa la solución

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \phi(\mathbf{r}) \times f(t)$$

La **Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo** queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = E_n\,\phi_n(\mathbf{r})$$

La Ecuación de Schrödinger en 1–d

si $\mathbf{r} = x$, entonces

La **Ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo** queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_n(x) + V(x)\varphi_n(x) = E_n\,\varphi_n(x)$$

La Ecuación de Schrödinger

Si el potencial es central $V(\mathbf{r}) = V(r)$ se separa la solución espacial

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \varphi_n(r)\, Y(\hat{r})$$

La **Ecuación de Schrödinger radial** queda:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right] P_{nl}(r) = E_n(r) P_{nl}(r)$$

Donde

$$P_{nl}(r) \equiv r\,\varphi_{nl}(r) \quad \text{y} \quad \hat{L}^2 Y_l(\hat{r}) = l(l+1)\hbar^2 Y_l(\hat{r})$$

Atomo de Hidrógeno: Soluciones Angulares

Los **Armónicos Esféricos** están dados por

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}\right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \qquad m \geq 0$$

$$Y_{l,-m}(\theta,\phi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta,\phi)$$

y satisfacen las condiciones de ortonormalidad

$$\begin{aligned} \int Y_{l',m'}^*(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi) &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \, Y_{l',m'}^*(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi) \\ &= \delta_{ll'}\delta_{mm'} \end{aligned}$$

Atomo de Hidrógeno: Soluciones Angulares

$$Y_0^0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$Y_1^1 = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\phi \sin\theta \qquad Y_1^1 = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} y$$

$$Y_1^0 = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta \qquad Y_1^0 = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} z$$

$$Y_1^{-1} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\phi \sin\theta \qquad Y_1^{-1} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} x$$

$$Y_2^{-2} = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \cos\phi \sin\phi \sin^2\theta \qquad Y_2^{-2} = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} xy$$

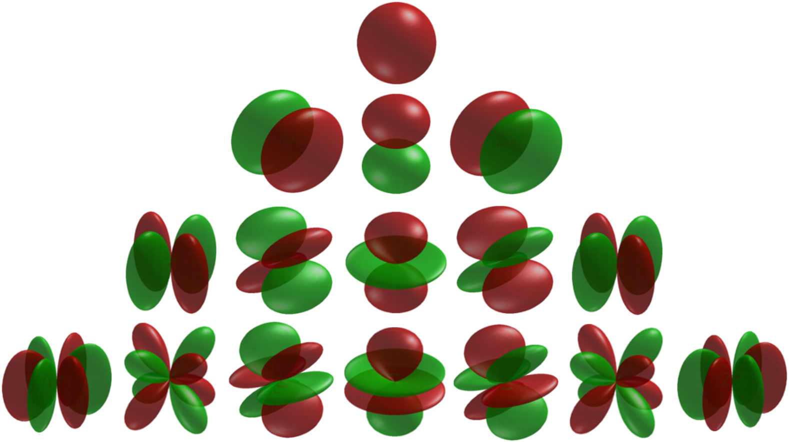
$$Y_2^{-1} = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \sin\phi \cos\theta \sin\theta \qquad Y_2^{-1} = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} yz$$

$$Y_2^0 = \frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3\cos^2\theta - 1) \qquad Y_2^0 = \frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3z^2 - 1)$$

$$Y_2^1 = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \cos\phi \cos\theta \sin\theta \qquad Y_2^1 = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} xz$$

$$Y_2^2 = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} (\cos^2\phi - \sin^2\phi) \sin^2\theta \qquad Y_2^2 = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} (x^2 - y^2)$$

Atomo de Hidrógeno: Soluciones Angulares

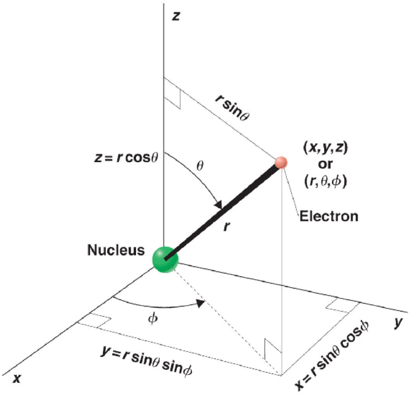


Soluciones Angulares: Paridad

La transformación de **Paridad** $(x \rightarrow -x; y \rightarrow -y; z \rightarrow -z)$, tiene la forma

$$
\begin{aligned}
r &\rightarrow r \\
\theta &\rightarrow \pi - \theta \\
\phi &\rightarrow \phi + \pi
\end{aligned}
$$

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$$



La Ecuación de Schrödinger radial

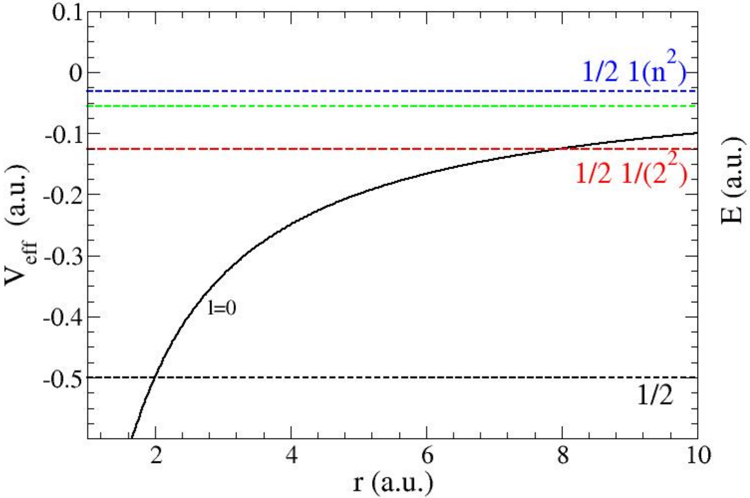
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\right]P_{nl}(r)=E_n(r)P_{nl}(r)$$

se puede escribir como

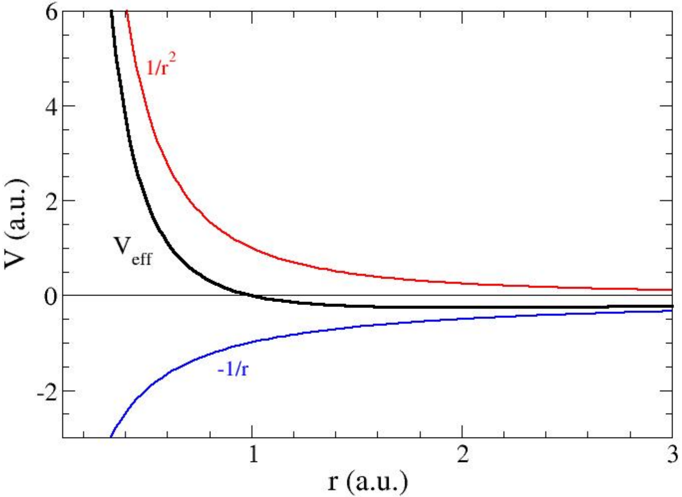
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+V_{\text{eff}}(r)\right]P_{nl}(r)=E_n(r)P_{nl}(r)$$

$$V_{\text{eff}}(r)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)$$

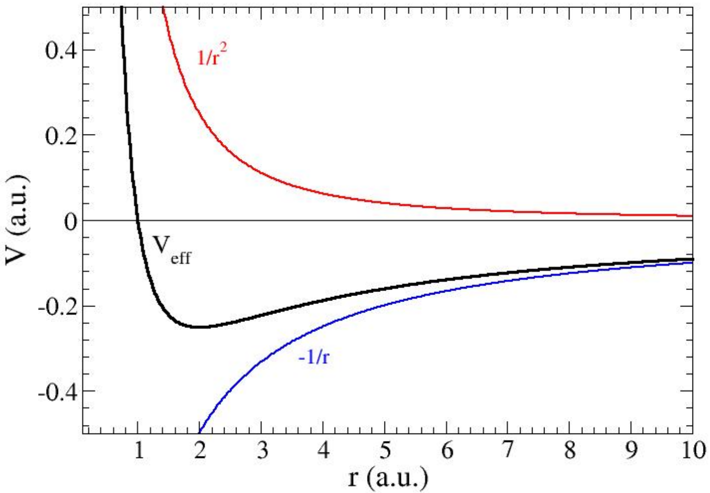
La Ecuación de Schrödinger radial



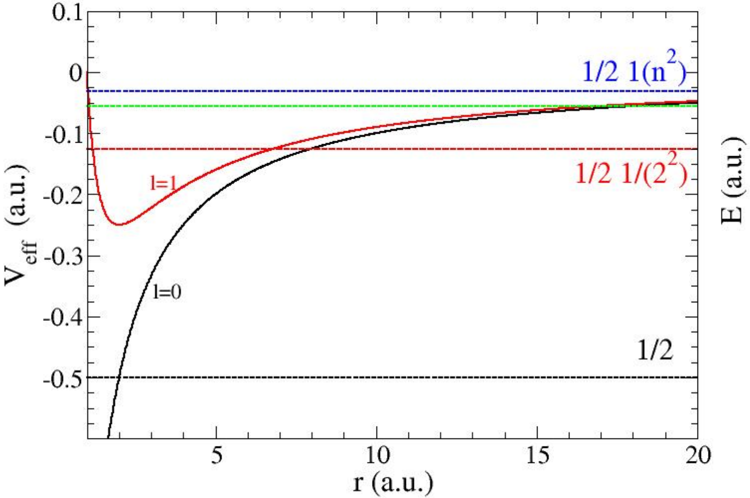
La Ecuación de Schrödinger radial



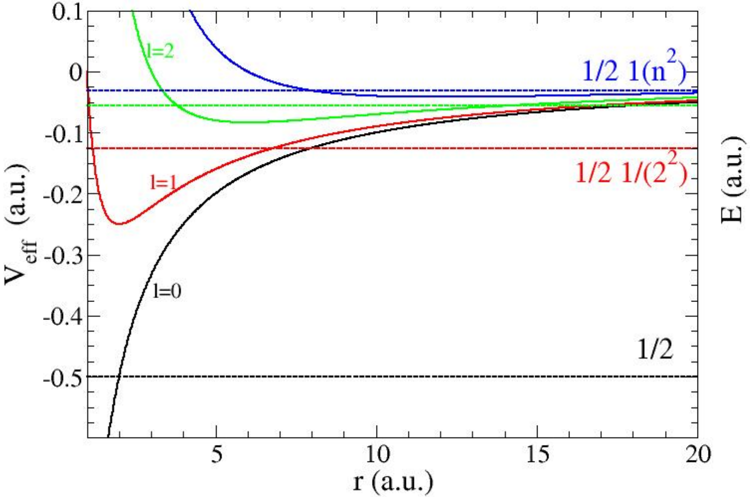
La Ecuación de Schrödinger radial



La Ecuación de Schrödinger radial



La Ecuación de Schrödinger radial



Atomo de Hidrógeno: Soluciones Radiales

Las **soluciones radiales reducidas** están dadas por

$$P_{nl}(r) = N_{nl}\, e^{-\rho/2}\, \rho^l\, L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

donde $\rho \equiv \frac{2Z}{na_\mu} r$, $a_\mu = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$, y los polinomios de Laguerre

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+1} \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!} \frac{\rho^k}{k!}$$

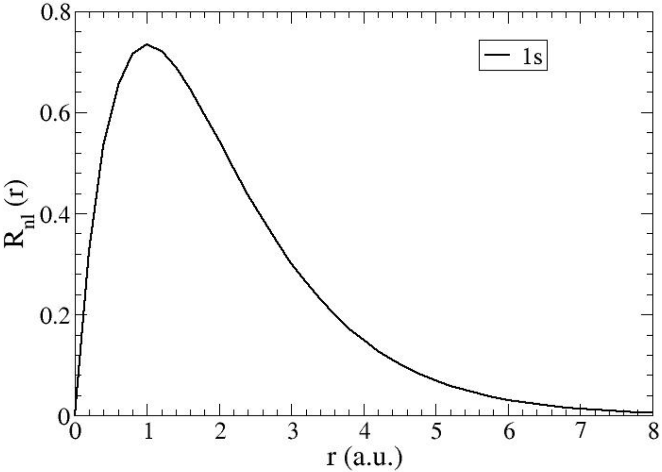
y el factor de normalización

$$N_{nl} = -\left\{ \left(\frac{2Z}{na_\mu}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2}$$

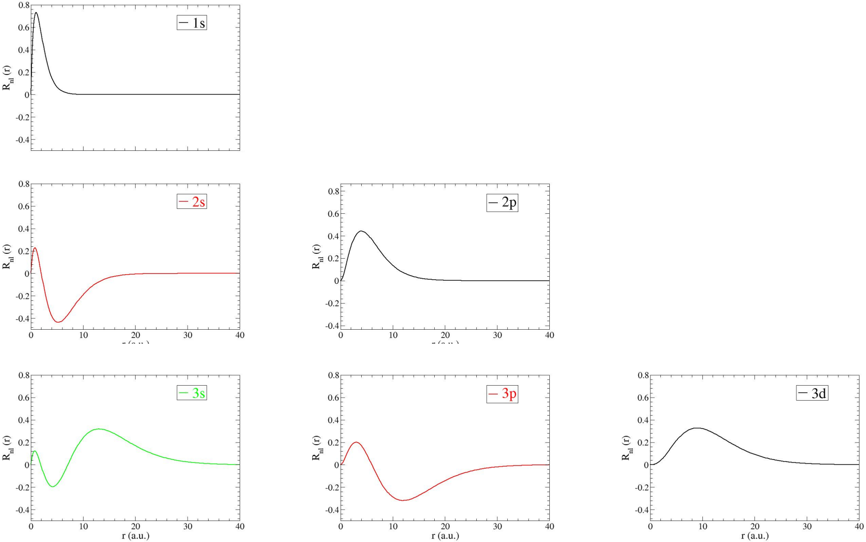
Atomo de Hidrógeno: Soluciones Radiales

$$
\begin{aligned}
R_{10} &= 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-Zr/a_0} \\
R_{21} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \\
R_{20} &= 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0} \\
R_{32} &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0} \\
R_{31} &= \frac{4\sqrt{2}}{3}\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)\left(1-\frac{Zr}{6a_0}\right) e^{-Zr/3a_0} \\
R_{30} &= 2\left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(1-\frac{2Zr}{3a_0}+\frac{2\,(Zr)^2}{27a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}
\end{aligned}
$$

Atomo de Hidrógeno: Soluciones Radiales

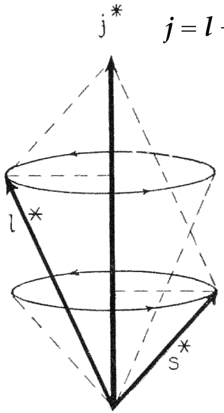


Atomo de Hidrógeno: Soluciones Radiales



Notación Espectroscópica

coupling of angular momentum



(H. E. White, *Introduction to Atomic Spectra*)

$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$ ($|\boldsymbol{s}|$ =1/2)

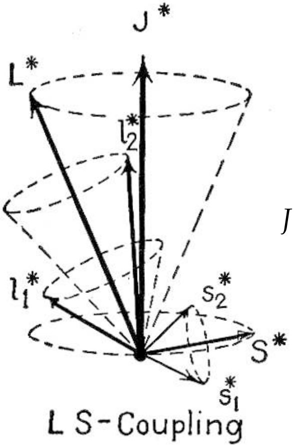
total angular momentum quantum number

$$j = \begin{cases} l \pm \frac{1}{2} & \text{for } l \geq 1 \\ \frac{1}{2} & \text{for } l = 0 \end{cases}$$

each j state has $2j+1$ magnetic substates m ($= -j, -j+1, \ldots, j$)

(notas tomadas de Motoshi Goto)

L-S coupling



(H. E. White, *Introduction to Atomic Spectra*)

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{l}_1 + \boldsymbol{l}_2$$
$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$$
$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$$

$$J = \begin{cases} L-S,\ \ldots,\ L+S \quad \text{for } L \geq S \\ \qquad\qquad (2S+1 \text{ states}) \\ S-L,\ \ldots,\ S+L \quad \text{for } L < S \\ \qquad\qquad (2L+1 \text{ states}) \end{cases}$$

each J state has $2J$+1 magnetic substates M (= -J, -J+1, ..., J)

(notas tomadas de Motoshi Goto)

quantum numbers

<table>
<tr><th>variables</th><th>meanings</th><th colspan="2">values</th></tr>
<tr><td>n</td><td>principal</td><td colspan="2">0, 1, 2, ...</td></tr>
<tr><td>s</td><td rowspan="2">spin</td><td colspan="2">1/2</td></tr>
<tr><td>S</td><td colspan="2">0, 1/2, 1, 3/2, 2, ...</td></tr>
<tr><td>l</td><td rowspan="2">orbital</td><td rowspan="2">0, 1, 2, ...</td><td>s, p, d, f, ...</td></tr>
<tr><td>L</td><td>S, P, D, F, ...</td></tr>
<tr><td>j</td><td rowspan="2">total</td><td colspan="2" rowspan="2">0, 1/2, 1, 3/2, 2, ...</td></tr>
<tr><td>J</td></tr>
<tr><td>m</td><td rowspan="2">magnetic</td><td colspan="2" rowspan="2">0, ±1/2, ±1, ±3/2, ±2, ...</td></tr>
<tr><td>M</td></tr>
</table>

(notas tomadas de Motoshi Goto)

electron states for hydrogen

orbital angular momentum quantum number

principal quantum number

n \ l	0 s (2)	1 p (6)	2 d (10)	3 f (14)	4 g (18)	5 h (22)
1 (2)	1s					
2 (8)	2s	2p				
3 (18)	3s	3p	3d			
4 (32)	4s	4p	4d	4f		
5 (50)	5s	5p	5d	5f	5g	
6 (72)	6s	6p	6d	6f	6g	6h

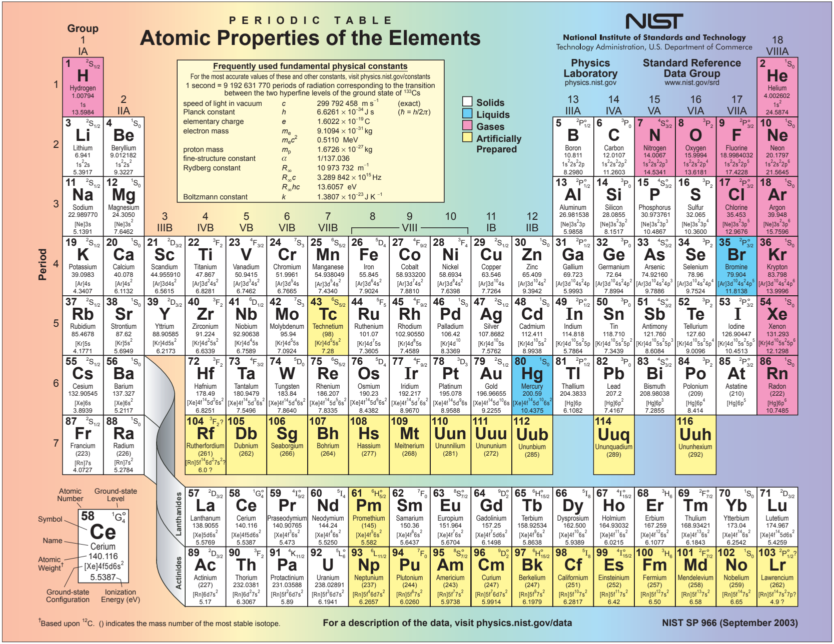
$m_l = -l, \ldots, l$

$m_s = \pm 1/2$

spin quantum number $s = 1/2$

( ) indicates statistical weight

(notas tomadas de Motoshi Goto)


PERIODIC TABLE
Atomic Properties of the Elements
NIST
National Institute of Standards and Technology
Technology Administration, U.S. Department of Commerce
Physics Laboratory
physics.nist.gov
Standard Reference Data Group
www.nist.gov/srd
Frequently used fundamental physical constants
For the most accurate values of these and other constants, visit physics.nist.gov/constants
1 second = 9 192 631 770 periods of radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of 133Cs
speed of light in vacuum c 299 792 458 m s−1 (exact)
Planck constant h 6.6261 × 10−34 J s (ħ = h/2π)
elementary charge e 1.6022 × 10−19 C
electron mass me 9.1094 × 10−31 kg
mec2 0.5110 MeV
proton mass mp 1.6726 × 10−27 kg
fine-structure constant α 1/137.036
Rydberg constant R∞ 10 973 732 m−1
R∞c 3.289 842 × 1015 Hz
R∞hc 13.6057 eV
Boltzmann constant k 1.3807 × 10−23 J K−1
Solids
Liquids
Gases
Artificially Prepared
Group
Period
1 IA
2 IIA
3 IIIB
4 IVB
5 VB
6 VIB
7 VIIB
8 9 10 VIII
11 IB
12 IIB
13 IIIA
14 IVA
15 VA
16 VIA
17 VIIA
18 VIIIA
1 H Hydrogen 1.00794
2 He Helium 4.002602
3 Li Lithium 6.941
4 Be Beryllium 9.012182
5 B Boron 10.811
6 C Carbon 12.0107
7 N Nitrogen 14.0067
8 O Oxygen 15.9994
9 F Fluorine 18.9984032
10 Ne Neon 20.1797
11 Na Sodium 22.989770
12 Mg Magnesium 24.3050
13 Al Aluminum 26.981538
14 Si Silicon 28.0855
15 P Phosphorus 30.973761
16 S Sulfur 32.065
17 Cl Chlorine 35.453
18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.0983
20 Ca Calcium 40.078
21 Sc Scandium 44.955910
22 Ti Titanium 47.867
23 V Vanadium 50.9415
24 Cr Chromium 51.9961
25 Mn Manganese 54.938049
26 Fe Iron 55.845
27 Co Cobalt 58.933200
28 Ni Nickel 58.6934
29 Cu Copper 63.546
30 Zn Zinc 65.409
31 Ga Gallium 69.723
32 Ge Germanium 72.64
33 As Arsenic 74.92160
34 Se Selenium 78.96
35 Br Bromine 79.904
36 Kr Krypton 83.798
37 Rb Rubidium 85.4678
38 Sr Strontium 87.62
39 Y Yttrium 88.90585
40 Zr Zirconium 91.224
41 Nb Niobium 92.90638
42 Mo Molybdenum 95.94
43 Tc Technetium (98)
44 Ru Ruthenium 101.07
45 Rh Rhodium 102.90550
46 Pd Palladium 106.42
47 Ag Silver 107.8682
48 Cd Cadmium 112.411
49 In Indium 114.818
50 Sn Tin 118.710
51 Sb Antimony 121.760
52 Te Tellurium 127.60
53 I Iodine 126.90447
54 Xe Xenon 131.293
55 Cs Cesium 132.90545
56 Ba Barium 137.327
72 Hf Hafnium 178.49
73 Ta Tantalum 180.9479
74 W Tungsten 183.84
75 Re Rhenium 186.207
76 Os Osmium 190.23
77 Ir Iridium 192.217
78 Pt Platinum 195.078
79 Au Gold 196.96655
80 Hg Mercury 200.59
81 Tl Thallium 204.3833
82 Pb Lead 207.2
83 Bi Bismuth 208.98038
84 Po Polonium (209)
85 At Astatine (210)
86 Rn Radon (222)
87 Fr Francium (223)
88 Ra Radium (226)
104 Rf Rutherfordium (261)
105 Db Dubnium (262)
106 Sg Seaborgium (266)
107 Bh Bohrium (264)
108 Hs Hassium (277)
109 Mt Meitnerium (268)
110 Uun Ununnilium (281)
111 Uuu Unununium (272)
112 Uub Ununbium (285)
114 Uuq Ununquadium (289)
116 Uuh Ununhexium (292)
Lanthanides
57 La Lanthanum 138.9055
58 Ce Cerium 140.116
59 Pr Praseodymium 140.90765
60 Nd Neodymium 144.24
61 Pm Promethium (145)
62 Sm Samarium 150.36
63 Eu Europium 151.964
64 Gd Gadolinium 157.25
65 Tb Terbium 158.92534
66 Dy Dysprosium 162.500
67 Ho Holmium 164.93032
68 Er Erbium 167.259
69 Tm Thulium 168.93421
70 Yb Ytterbium 173.04
71 Lu Lutetium 174.967
Actinides
89 Ac Actinium (227)
90 Th Thorium 232.0381
91 Pa Protactinium 231.03588
92 U Uranium 238.02891
93 Np Neptunium (237)
94 Pu Plutonium (244)
95 Am Americium (243)
96 Cm Curium (247)
97 Bk Berkelium (247)
98 Cf Californium (251)
99 Es Einsteinium (252)
100 Fm Fermium (257)
101 Md Mendelevium (258)
102 No Nobelium (259)
103 Lr Lawrencium (262)
Atomic Number
Ground-state Level
Symbol
Name
Atomic Weight†
Ground-state Configuration
Ionization Energy (eV)
58 Ce Cerium 140.116 [Xe]4f5d6s2 5.5387
†Based upon 12C. () indicates the mass number of the most stable isotope.
For a description of the data, visit physics.nist.gov/data
NIST SP 966 (September 2003)

Terminología

Denominación	Especificación	Peso Estadístico
Nivel Hidrogénico	n (degenerado en l)	$2n^2$
Configuración	n_i y l_i	
Término	n_i, l_i, L y S	$(2L+1)(2S+1)$
Nivel	n_i, l_i, L, S y J	$(2J+1)$
Estado	n_i, l_i, L, S, J y M	1

term designation

$$nl^k\, n'l'^{k'} \ldots\ {}^{2S+1}L_J$$

configuration	possible terms	isoelectronic sequence
3d	$^2D_{3/2,5/2}$	H-like
1s4f	$^1F_3\ \ ^3F_{2,3,4}$	He-like
$1s^22p$	$^2P_{1/2,3/2}$	Li-like
$1s^22s^2$	$^1S_0$	Be-like
$1s^22s2p(^3P^o)3p$	$^2S_{1/2}\ \ ^2P_{1/2,3/2}\ \ ^2D_{3/2,5/2}$ $^4S_{3/2}\ \ ^4P_{1/2,3/2,5/2}$ $^4D_{1/2,3/2,5/2,7/2}$	B-like

one electronic configuration could have several terms

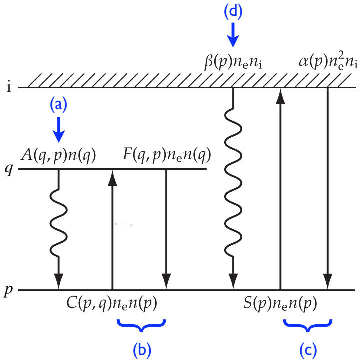
(notas tomadas de Motoshi Goto)

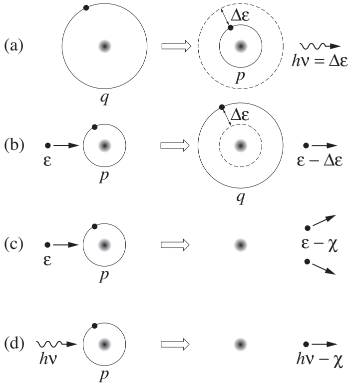
configuration			term(s)
1s2s2p	(Li-like)	$\Rightarrow$	1s2s(^{1}S)2p $^2P_{1/2,3/2}$ 1s2s(^{3}S)2p $^2P_{1/2,3/2}$ $^4P_{1/2,3/2,5/2}$
$1s^22p^2$	(Be-like)	$\Rightarrow$	^1S, ^1D, ^3P

(notas tomadas de Motoshi Goto)

atomic processes

various processes should
be taken into consideration

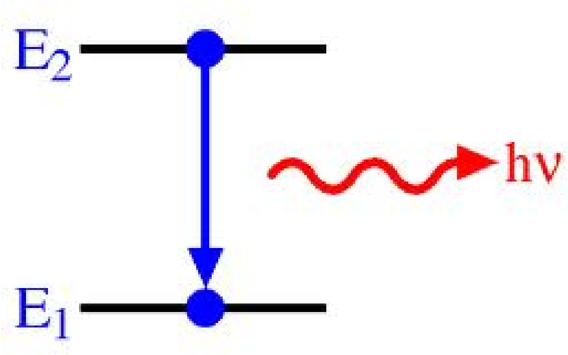




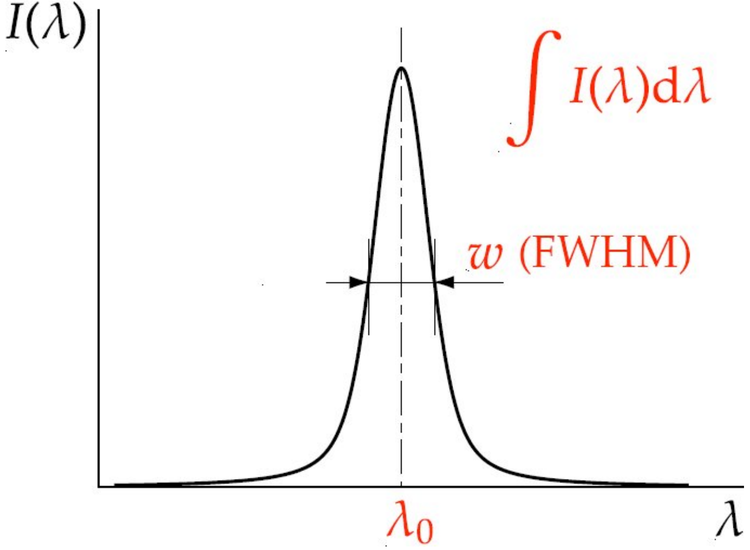
(notas tomadas de Motoshi Goto)

Procesos Radiativos

$$\hbar\,\omega_{21} = E_2 - E_1$$

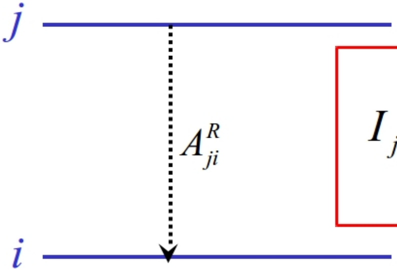


Propiedades de las líneas de emisión



Intensidad de línea

La Intensidad es el producto de la **densidad de población** por la probabilidad de transición **(coeficiente de Einstein)** A por la energía de la transición.

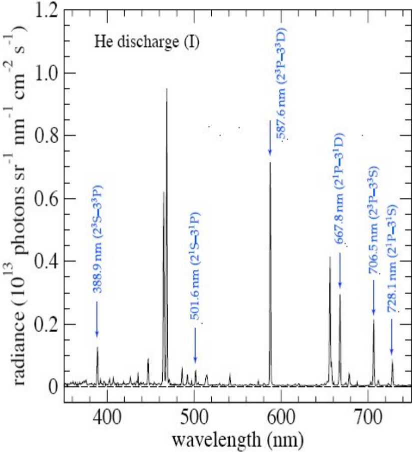


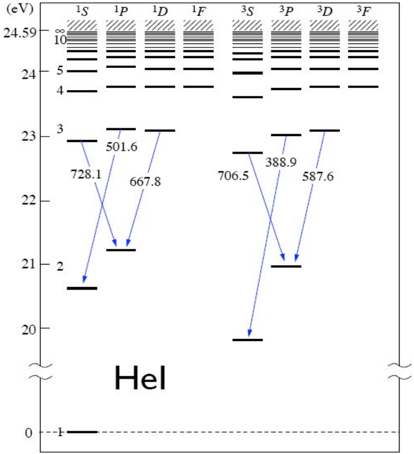
$$\boxed{I_{ji} = \frac{hc}{\lambda_{ji}} N_j A_{ji}^{R}}$$

$$[A^R] = \mathrm{m}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$$

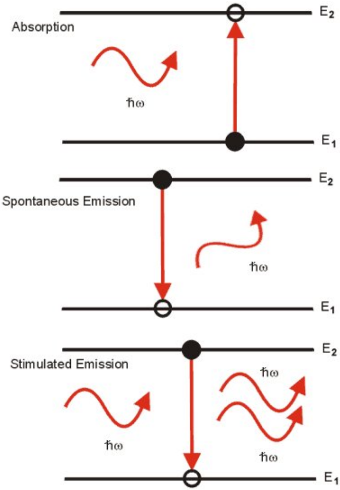
Coeficiente de Einstein

El coeficiente A es **constante** y propio de cada transición





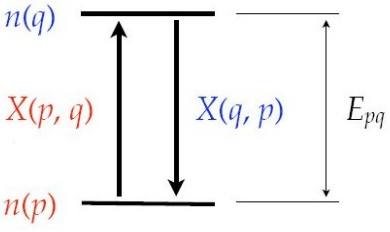
Procesos Radiativos



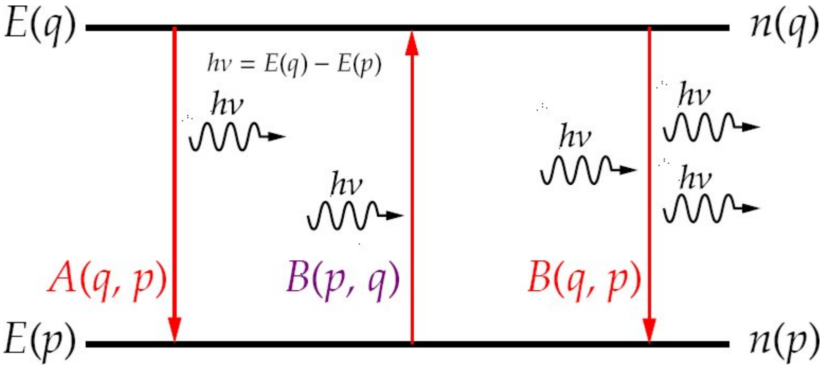
Balance Detallado

Es la situación de equilibrio en la que cada proceso elemental está balanceado completamente por su reacción inversa (el mismo número de reacciones por tiempo por volumen).

- En equilibrio termodinámico: $n(p)\,X(p,q) = n(q)\,X(q,p)$
- En E.T., se cumple Boltzmann $\frac{n_p}{n_q} = \frac{g_p}{g_q} e^{\frac{\Delta E_{pq}}{kT}}$
- $X(q,p) = X(p,q)\,\frac{g_p}{g_q} e^{\frac{\Delta E_{pq}}{kT}}$



Coeficientes de Einstein



Balance Detallado

- En equilibrio termodinámico:

$$A(q,p)\,n(q) + B(q,p)\,n(q)\,\rho(\nu) = B(p,q)\,n(p)\,\rho(\nu)$$

- Boltzmann:

$$\frac{n_p}{n_q} = \frac{g_p}{g_q} e^{\frac{\Delta E_{pq}}{kT}}$$

- $\rho(\nu) = \dfrac{\frac{A(q,p)}{B(q,p)}}{\frac{B(p,q)}{B(q,p)}\frac{g(p)}{g(q)}\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1}$
- La radiación en equilibrio es de **cuerpo negro**

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi\, h\, \nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$$

- En frecuencia angular: $\rho(\omega) = \dfrac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\dfrac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}$

Balance Detallado

Igualando :

$$\rho(\omega) = \frac{\frac{A(q,p)}{B(q,p)}}{\frac{B(p,q)}{B(q,p)}\frac{g(p)}{g(q)}\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}$$

Se debe cumplir:

- $\frac{B(p,q)}{B(q,p)}\frac{g(p)}{g(q)} = 1$
- $\frac{A(q,p)}{B(q,p)} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$

Coeficiente de Emisión Espontánea

- Consideramos el Hamiltoniano (no–relativista)
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{H}'$$
- con una perturbación
$$\hat{H}' = E_0 \cos(\omega t)$$
Teoría de Perturbaciones: la tasa de transiciones entre un estado inicial i a uno final f:
$$R_{if} = B(i,f)\rho(\omega) = \frac{\pi}{3\,\epsilon_0 \hbar^2} |M_{if}|^2 \rho(\omega)$$
- La matriz de transición dipolar es
$$M_{if} = \langle f | e\,\hat{r} | i \rangle \equiv e D_{if}$$

Detalles de aproximación dipolar

- El Hamiltoniano de una partícula en un campo
$$\hat{H} = \frac{(\hat{p} - q\hat{A}/c)^2}{2m} + q\phi$$
- En Coulomb gauge ($\vec{\nabla} \cdot \hat{A} = 0 \Rightarrow [\hat{A}, \hat{p}] = 0$):
$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - e\phi \qquad \hat{H}_1 = \frac{e\hat{p}\cdot\hat{A}}{m_e c} + \frac{e^2}{2m_e c^2}\hat{A}\cdot\hat{A}$$
- Aproximación dipolar: $\hat{A} = \vec{\epsilon}\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \approx \vec{\epsilon}$
- $M_{fi} = \frac{e}{m_e c}\langle f|\hat{p}\cdot\hat{A}|i\rangle \approx \frac{e}{m_e c}\vec{\epsilon}\langle f|\hat{p}|i\rangle$
- $\langle f|\hat{p}|i\rangle = m\langle f|\frac{d\hat{r}}{dt}|i\rangle = m\frac{i}{\hbar}\langle f|[\hat{H}, \hat{r}]|i\rangle$
- $\langle f|[\hat{H}, \hat{r}]|i\rangle = (E_f - E_i)\langle f|\hat{r}|i\rangle$

$$\boxed{M_{fi} = i\,\frac{e}{c}\,\omega_{if}\,\langle f|\vec{\epsilon}\cdot\hat{r}|i\rangle}$$

Coeficiente de Emisión Espontánea

- $A_{ji} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{ji}$
- $B_{ij} = \frac{\pi}{3\,\epsilon_0 \hbar^2} |e D_{ij}|^2$

Reemplazando

$$A_{ji} = \frac{32\pi^3}{3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left(\frac{1}{\lambda}\right)^3 |\langle\psi_i(\mathbf{r})|\mathbf{r}|\psi_j(\mathbf{r})\rangle|^2$$

- Con λ en nm:

$$A_{ji} = 2.026 \times 10^{15} \frac{1}{\lambda^3} |D_{ij}|^2$$

- (Práctica):
  Suponiendo $E = \frac{Z^2}{2}\alpha^2 m_e c^2$, y usando $\frac{mc}{\hbar} = \frac{1}{a_0\alpha}$ y
  τ (a.u.) $= 2.4189 \times 10^{-17}$ s:
  $\Rightarrow A \approx \frac{Z^4}{2}\alpha^3 \approx Z^4\, 10^{10}$ s^{-1}.

Reglas de Selección (dipolar)

1. $\sum_i \Delta l_i = \pm 1$ (cambio de paridad)
2. $\Delta L = \pm 1, 0$ ($0 \rightarrow 0$ excluída)
3. $\Delta J = \pm 1, 0$ ($0 \rightarrow 0$ excluída)
4. $\Delta S = 0$
5. $\Delta M = 0, \pm 1$

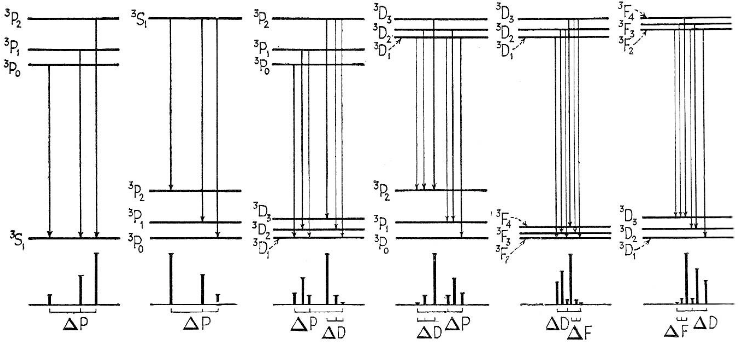
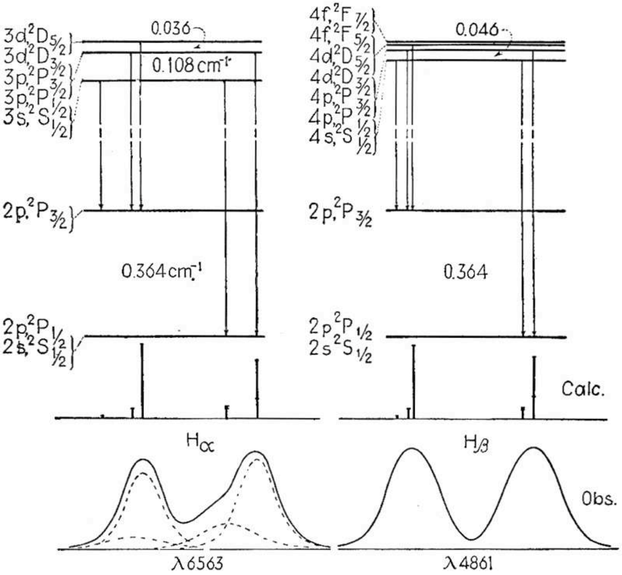


FIG. 11.4.—Triplet-triplet transitions showing selection rules and relative intensities.

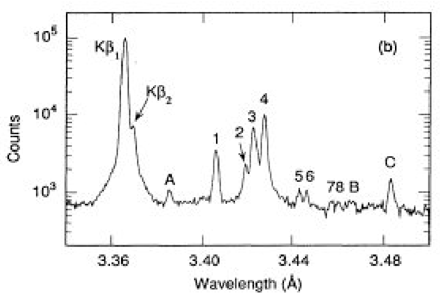
(H. E. White, *Introduction to Atomic Spectra*)

$$I \propto \langle J_i \| D \| J_k \rangle = (-1)^{S+1+L_i+J_k} \sqrt{g_i g_k} \begin{Bmatrix} L_i & J_i & S \\ J_k & L_k & 1 \end{Bmatrix} \langle L_i \| D \| L_k \rangle$$



(H. E. White, *Introduction to Atomic Spectra*)

Líneas de Balmer



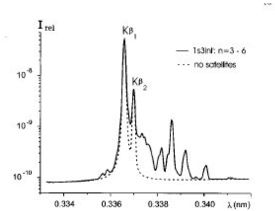


FIG. 3. Line overlapping of dielectronic Rydberg satellites $1s3lnl'$ with the $K\beta$ lines, $n_e = 10^{19}$ cm^{-3}, $kT_e = 500$ eV.

Oscillator Strengths

- Se define un elemento adimensional
$$f_{ka} = \frac{2m\omega_{ka}}{3\hbar} |\mathbf{r}_{ka}|^2$$
- $\omega_{ka} = (E_k - E_a)/\hbar$ puede ser positiva (absorción) o negativa (emisión).
- Se puede probar la regla de Thomas, Reiche y Kuhn
$$\sum_k f_{ka} = 1$$
- $\sum_{n'} f(n, l \to n', l-1) = -\frac{l(2l-1)}{3(2l+1)}$
$\sum_{n'} f(n, l \to n', l+1) = \frac{(l+1)(2l+3)}{3(2l+1)}$
- Con esta definición:

$$A_{ji} = \frac{8\pi^2 e^2}{mc} \frac{1}{\lambda^2} |f_{ji}|$$

Oscillator Strengths

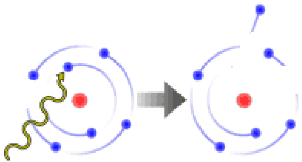
OSCILLATOR STRENGTH SUM RULES

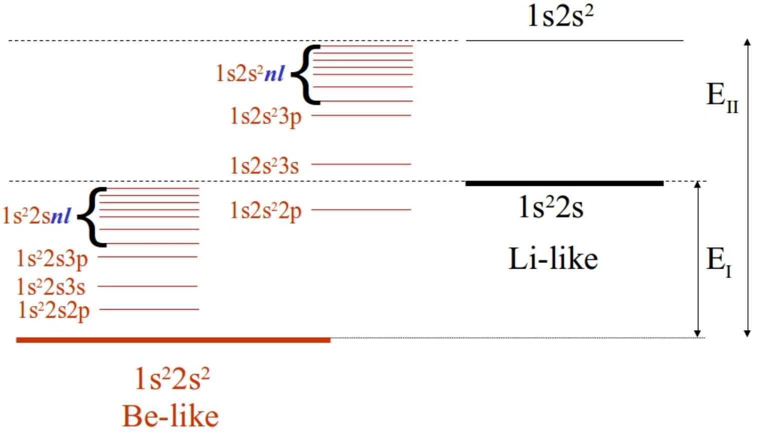
TABLE 14-4. NON-RELATIVISTIC ARRAY (=MULTIPLET) OSCILLATOR STRENGTHS FOR HYDROGENIC ATOMS[a]

Initial	1s	2s	2p		3s	3p		3d	
Final	np	np	ns	nd	np	ns	nd	np	nf
n=1	---	---	−0.139	---	---	−0.026	---	---	---
2	0.4162	---	---	---	−0.041	−0.145	---	−0.417	---
3	0.0791	0.4349	0.014	0.696	---	---	---	---	---
4	0.0290	0.1028	0.0031	0.122	0.484	0.032	0.619	0.011	1.016
5	0.0139	0.0419	0.0012	0.044	0.121	0.007	0.139	0.0022	0.156
6	0.0078	0.0216	0.0006	0.022	0.052	0.003	0.056	0.0009	0.053
7	0.0048	0.0127	0.0003	0.012	0.027	0.002	0.028	0.0004	0.025
8	0.0032	0.0081	0.0002	0.008	0.016	0.001	0.017	0.0002	0.015
n=9 to ∞	0.0109	0.0268	0.0007	0.023	0.048	0.004	0.045	0.0007	0.037
Sum: Discrete	0.5650	0.6489	−0.119	0.928	0.707	−0.121	0.904	−0.402	1.302
Sum: Continuum	0.4350	0.3511	0.008	0.183	0.293	0.010	0.207	0.002	0.098
Total	1.000	1.000	−0.111	1.111	1.000	−0.111	1.111	−0.400	1.400

[a]Values for larger l may be found in H. A. Bethe and E. E. Salpeter, ref. 4, Sec. 63. For $Z > 20$, oscillator strengths depart increasingly strongly from the above values

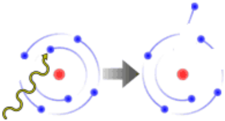
Fotoionización





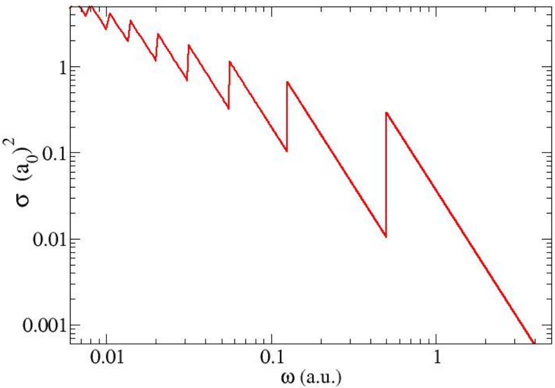
Fotoionización

- Vamos a considerar la transición de un electrón en el estado fundamental del hidrógeno a un estado del contínuo $\varphi_f \propto \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$
- Con ciertas aproximaciones, la sección eficaz de fotoionización es $\sigma_{1k} = \frac{256\,\pi}{3}\,\alpha\,Z^{-2}\,\left(\frac{|\chi_H|}{\hbar\omega}\right)^{7/2} a_0^2$
- Notar que decrece como $(\hbar\omega)^{-7/2}$ y crece como Z^5.



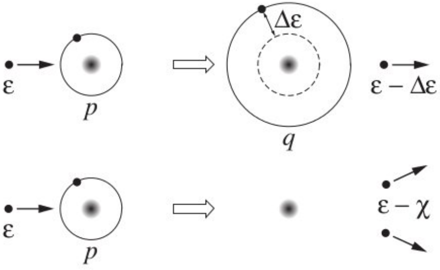
Fotoionización

- Para el caso general, la ionización desde el nivel n es $\sigma_{nk} = \frac{64\,\pi}{3\sqrt{3}}\,\alpha\,g_{nk}\left(\frac{1}{Z}\right)^2 n\left(\frac{\omega_n}{\omega}\right)^3 a_0^2$
- Notar que decrece como $(\omega)^{-3}$



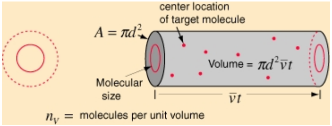
Procesos Colisionales

- Excitación por impacto de electrones
- De-excitación por impacto de electrones
- Ionización por impacto de electrones
- Recombinación por impacto de electrones



Sección Eficaz

- Supongamos que un proyectil incide sobre un área A.
- Hay n_b partículas (blanco) por m^3.
- La velocidad del proyectil (en $\hat{x}$) es v y la unidad de tiempo t.
- El número de partículas que pueden colisionar con el proyectil es $n_b\, V = n_b\,(A \times x) = n_b\, A\, v\, t$.
- El número de colisiones por unidad de tiempo es $n_b\, A\, v$.

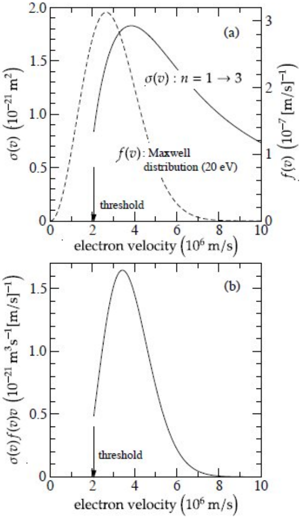


Sección Eficaz

- Se define como **sección eficaz (σ)** al área efectiva que produce un proceso determinado por unidad de tiempo.
- O sea, el número de procesos que se producen por unidad de tiempo (debido a un proyectil) es $n_b\,\sigma\,v$.
- Supongamos que la densidad de los proyectiles es de n_p
- El número total de procesos que se producen por unidad de volumen, por unidad de tiempo es
$$\int n_b\,\sigma\,v\,dn_p(v) = n_b n_p \int \sigma\,v\,\frac{dn_p(v)}{n_p} = n_b n_p \int \sigma\,v\,f(v)\,dv = \\ = n_b n_p \langle \sigma v \rangle$$
- A la cantidad $\langle \sigma v \rangle \equiv \int \sigma\,v\,f(v)\,dv$ se la llama **tasa** ($[m^3\mathrm{s}^{-1}]$).

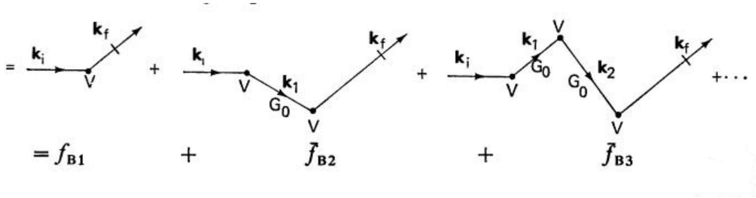
Tasa y Sección Eficaz

- $\sigma\, v\, f(v)\, dv$ es función de la velocidad
- Pero $\langle \sigma v \rangle \equiv \int \sigma\, v\, f(v)\, dv$ es función de la Temperatura unicamente !!



Aproximación de Born

Esta aproximación permite calcular secciones eficaces de excitación en forma simple.



$$\begin{aligned}
\psi_0(\mathbf{r}) &= \Phi_{k_i}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} \\
\psi_1(\mathbf{r}) &= \Phi_{k_i}(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\Phi_{k_i}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \\
\psi_2(\mathbf{r}) &= \Phi_{k_i}(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi_1(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'
\end{aligned} \tag{1}$$

Excitación

Para **neutrales**, la aproximación de Born para la sección eficaz de excitación por impacto de electrones resulta:

$$\sigma_{ij}(u) = 4\pi a_0^2 \, \frac{I_H}{\Delta E_{ij}} \, \frac{1}{u} \log 4u \, |s_{ij}|^2$$

donde $|s_{ij}|^2 = \frac{1}{3\,a_0^2}|r_{ij}|^2$ y $u = \frac{E}{E_{ij}}$.

En función del *absorption oscillator strenght* f_{ij} se expresa (práctica):

$$\sigma_{ij}(u) = 4\pi a_0^2 \, f_{ij} \left(\frac{I_H}{\Delta E_{ij}}\right)^2 \, \frac{1}{u} \log 4u$$

Excitación

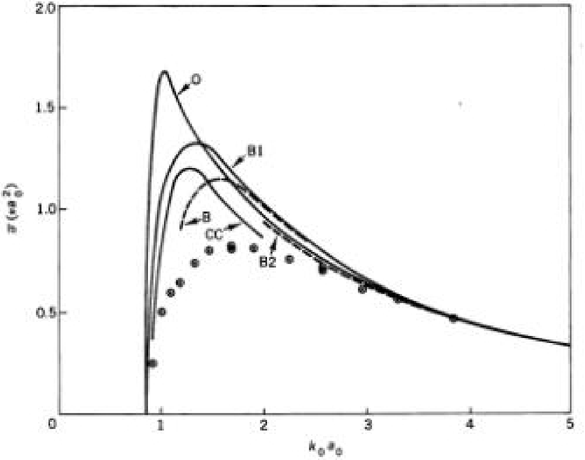


FIG. 11. Total cross section for the 1s → 2p excitation of hydrogen atoms by electron impact: B1, first Born approximation; B2, second Born approximation (to order U^3); O, Oppenheimer approximation; B, Bethe approximation; CC, close coupling approximation with 1s–2s–2p basis set (Section 16); circles, experimental results normalized to the Born approximation at 200 eV ($k_0 a_0 = 3.84$).

Excitación

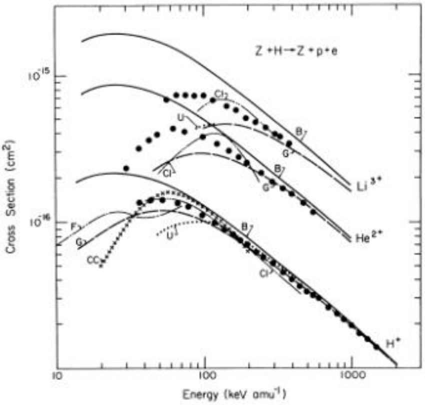
Experimentalmente se encuentra que en el umbral (*"threshold"*) la sección eficaz se anula $\sigma(1) = 0$.

Discrepancias Fundamentales

- $\sigma(1)^{Born} \neq 0.$
- $\sigma_{max}^{exp} < \sigma_{max}^{Born}$
- $u_{max}^{exp} > u_{max}^{Born}$

Schwob and Drawin:

$$\sigma_{ij}(u) = 4\pi a_0^2\, R f_{ij} \left(\frac{I_H}{\Delta E_{ij}}\right)^2 \frac{u-1}{u^2} \log \beta u$$

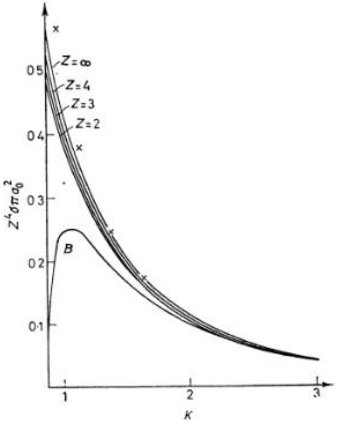


Excitación

Para **iones** (en estos casos $\sigma(1) \neq 0$), se puede utilizar la aproximación de Van Regemorter:

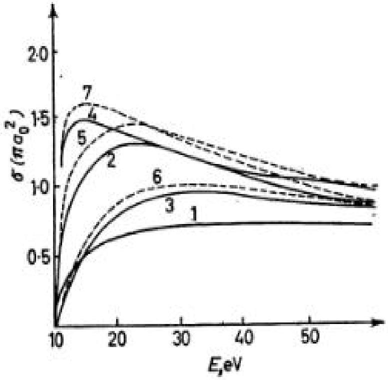
$$\sigma_{ij}(u) = 4\pi a_0^2 \, 2\pi\sqrt{3}\, f_{ij} \left(\frac{I_H}{\Delta E_{ij}}\right)^2$$

El *factor de Gaunt* $g(u)$ es aproximadamente 0.2 cerca del umbral, y se ajusta con el valor de neutrales para altas energías.

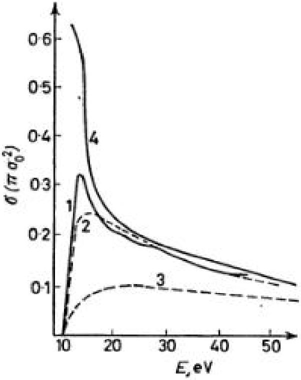


Transiciones Prohibidas

Transición Permitida:
$1s - 2p$

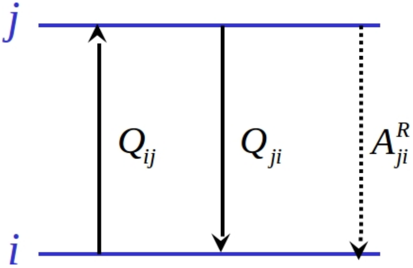


Transición "Prohibida":
$1s - 2s$



De–Excitación

En general, los coeficientes de de–excitación colisional son poco conocidos. Pero están profundamente relacionados con los de excitación.



- Consideremos un plasma LTE. La microreversibilidad dice que $n_e n_j Q_{ji}(T_e) = n_e n_i Q_{ij}(T_e)$
- En LTE se cumple Boltzmann $\Rightarrow$

$$Q_{ji} = \frac{n_i}{n_j} Q_{ij}(T_e) = \frac{g_i}{g_j} e^{\frac{\Delta E_{ij}}{kT_e}} Q_{ij}(T_e)$$

De–Excitación

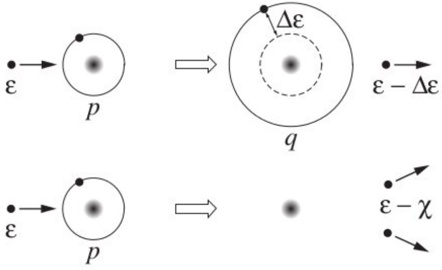
Si bien derivamos la expresión anterior asumiendo un plasma en LTE, existe una relación entre las secciones eficaces. Esta relación es una **propiedad atómica**.

- Consideremos un plasma LTE. La microreversibilidad dice que $n_e n_j \sigma_{ji}(v_j) v_j f(v_j) dv_j = n_e n_i \sigma_{ij}(v_i) v_i f(v_i) dv_i$
- $\frac{1}{2} m_e v_i^2 = \Delta E_{ij} + \frac{1}{2} m_e v_j^2$
- $v_i dv_i = v_j dv_j$ (diferenciando).
- $\frac{\sigma_{ji}(v_j)}{\sigma_{ij}(v_i)} = \frac{n_i f(v_i)}{n_j f(v_j)}$
- Se cumplen Maxwell y Boltzmann $\Rightarrow$

$$\sigma_{ji}(E_i) = \frac{g_i}{g_j} \frac{E_i}{E_j} \sigma_{ij}(E_i)$$

Procesos Colisionales

- Excitación por impacto de electrones
- De-excitación por impacto de electrones
- Ionización por impacto de electrones
- Recombinación por impacto de electrones

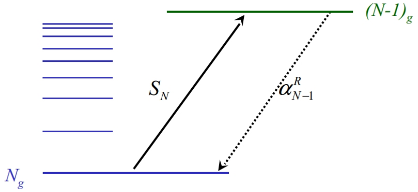


Ionización

En el cálculo de este proceso también se puede utilizar la aproximación de Born:

$$\sigma_{ij}(u) = 4\pi a_0^2 \, \frac{I_H}{\Delta E_{ij}} \, \frac{1}{u} \log 4u \, |s_{ij}|^2$$

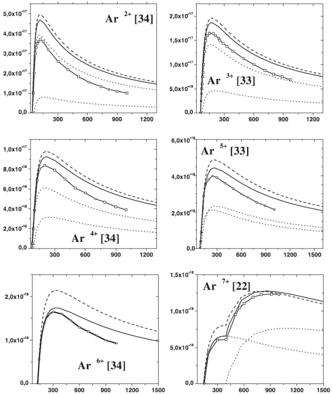
donde $|s_{ij}|^2 = \frac{1}{3\,a_0^2} |r_{ij}|^2$ y
$u = \frac{E}{E_I}$.



Ionización

Una fórmula semi–empíirica muy popular es la fórmula de **Lotz**, de ionización de un ión de carga r en el estado fundamental:

$$S_r = 3.03 \times 10^6 \sum_s \frac{\zeta_s}{kT_e^{3/2}} \frac{E_1(E_{r,s}/kT_e)}{(E_{r,s}/kT_e)}$$



donde S_r está en cm^{3}s^{-1}, kT_e es la temperatura electrónica en eV, ζ_s es el número de ocupación de la subcapa s, y $E_{r,s}$ es la energía de ligadura de los electrones en esta subcapa (en eV). E_1 es la función exponencial–integral.

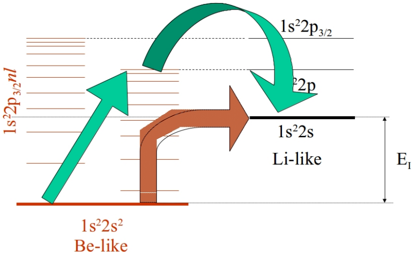
Recombinación por tres–cuerpos

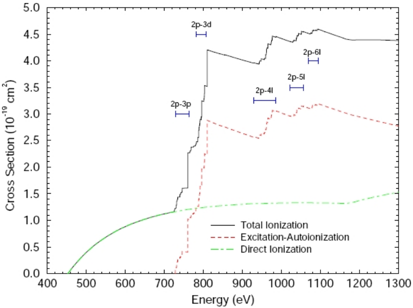
El proceso inverso al de ionización consiste inicialmente en dos electrones libres y un ión de carga $r+1$ (en el estado fundamental f), y la captura de uno de ellos, formando un ión de carga r, en un estado j, (más un electrón libre) en el estado final.

- Consideremos un plasma LTE. La microreversibilidad dice que $n_e^2 n_{r+1,f} \alpha^R_{r+1,f\to r,j}(T_e) = n_e n_{r,j} S_{r,j\to r+1,f}(T_e)$
- $\alpha^R_{r+1,f\to r,j}(T_e) = \frac{n_{r,j}}{n_e n_{r+1,f}} S_{r,j\to r+1,f}(T_e)$
- En LTE se cumple Saha $\Rightarrow$

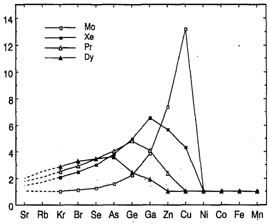
$$\alpha^R_{r+1,f\to r,j}(T_e) = \frac{g_{r,j}}{2g_{r+1,f}} \frac{h^3}{(2\pi m_e k T_e)^{3/2}} e^{\Delta E_{rj,f}/kT_e} S_{r,j\to r+1,f}(T_e)$$

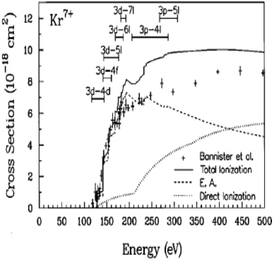
Excitación–Autoionización

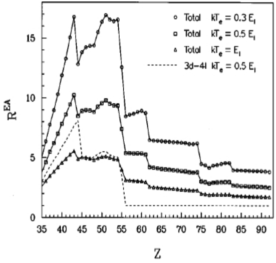




Excitación–Autoionización







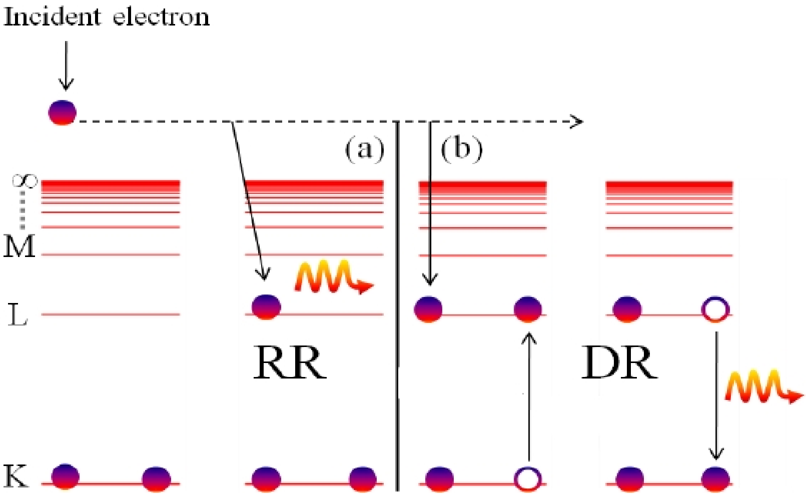
Recombinación Radiativa

Es el proceso inverso de Fotoionización.

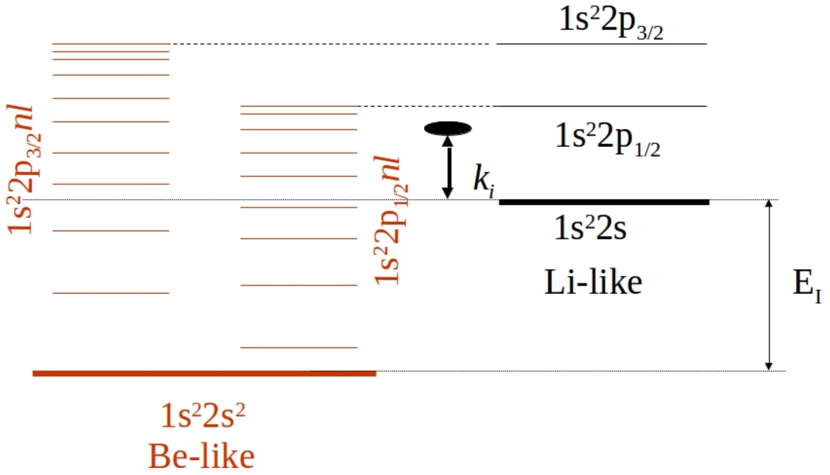
- Número de recombinaciones del ión $r+1$ en el nivel f, por s cm^3, debido a electrones con velocidades $(v, v+dv)$:
  $N_{k\to i} = n_{r+1,f} n_e \sigma_{ki}(v) f(v) dv$
- Número de fotoionizaciones producidas del ión r en el nivel i, debido a un campo de intensidad J_ν
  $N_{i\to k} = \frac{4\pi}{h\nu} n_{r,i} \sigma_{ik}(\nu) J_\nu(\nu) d\nu$
- Para incluir el efecto de emisión estimulada J_ν es reemplazada por $J_\nu(1 - e^{-\frac{hv}{kT_e}})$
- Usando Planck, Maxwell y Saha $\Rightarrow$

$$\sigma_{ki} = \frac{g_{r,i}}{g_{r+1,f}} \frac{h^2}{m_e^2 c^2} \frac{\nu}{v^2}$$

Recombinación Dielectrónica



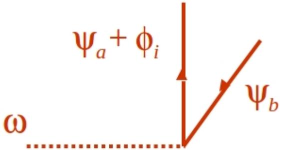
Recombinación Dielectrónica



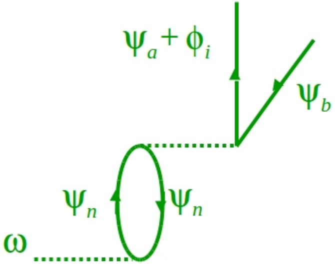
Recombinación Dielectrónica

Photoionization:

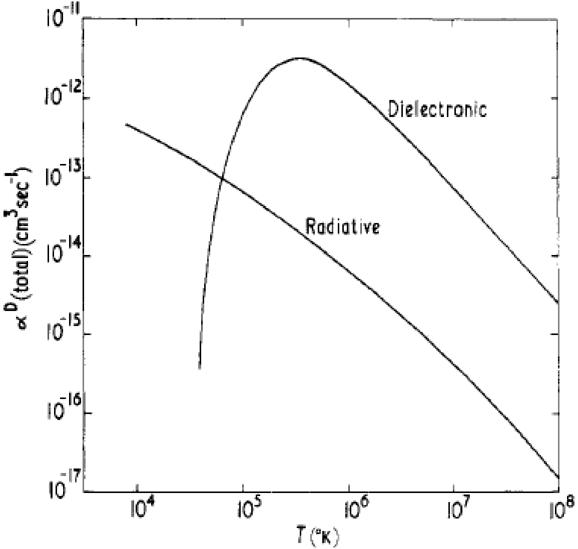
$$M_{ba} = \langle \psi_b | \mathbf{D} | \psi_a \phi_i \rangle + \frac{\langle \psi_b | \mathbf{V} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \mathbf{D} | \psi_a \phi_i \rangle}{\Delta_n + i\,\Gamma_n/2}$$



+



Recombinación Dielectrónica



Recombinación Dielectrónica

Recombinación Dielectrónica