

Tesis de Posgrado

Termodinámica e hidrodinámica de la materia hipercomprimida

Mancini, Roberto Claudio

1983

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Mancini, Roberto Claudio. (1983). Termodinámica e hidrodinámica de la materia hipercomprimida. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1769_Mancini.pdf

Cita tipo Chicago:

Mancini, Roberto Claudio. "Termodinámica e hidrodinámica de la materia hipercomprimida". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1983. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1769_Mancini.pdf

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE FISICA
LABORATORIO DE FISICA DEL PLASMA

"TERMODINAMICA E HIDRODINAMICA DE LA
MATERIA HIPERCOMPRESIDA"

ROBERTO CLAUDIO MANCINI

Trabajo de Tesis presentado para optar
al Título de Doctor en Ciencias Físicas

Director de Tesis: Prof. Dr. Constantino Ferro Fontán

J769
Ej.2

*A mi padre, quien me enseñó
tres virtudes esenciales para la
investigación científica:
continuidad, profundidad y tenacidad.*

AGRADECIMIENTOS

A mi familia, por la invaluable cuota de apoyo y comprensión que me brindó durante la realización de este trabajo.

A mi Director de Tesis, Prof.Dr. Constantino Ferro Fontán, por sus enseñanzas, su guía y su orientación.

A mi Consejero de Estudios para la Carrera del Doctorado, Prof.Dr. Roberto Gratton, por su aliento y sus consejos.

A mis amigos y compañeros del Departamento de Física (FCEN,UBA) Ricardo A.Depine, Julio C.Facelli y Alicia Bañuelos, por las valiosas charlas y discusiones que hemos tenido sobre métodos numéricos y temas de computación.

A la Srta. Marta Pedernera, por su valiosa colaboración en diversas tareas computacionales.

Al Laboratorio de Física del Plasma (Dpto. de Física, FCEN, UBA), que me ofreció la posibilidad, su infraestructura y el apoyo material para poder realizar este trabajo.

Al Centro de Cómputos en Salud (UBA, sistema IBM 360/50), Centro de Tecnología y Ciencia de Sistemas (CTCS, UBA, sistema IBM 370/158) y al Servicio Naval de Investigación y Desarrollo de la Armada Argentina (SENID, ARA, sistema IBM 370/3032), por el apoyo y los servicios de computación gentilmente concedidos.

INDICE

	Pág.
CAPITULO I	
I. INTRODUCCION	1
I.1 Algunas consideraciones preliminares	1
I.2 La Física de la fusión por confinamiento inercial	5
CAPITULO II	
II. IONIZACION Y ECUACION DE ESTADO EN EL REGIMEN DE ALTA TEMPERATURA Y PRESION	12
II.1 Generalidades	12
II.2 Compresiones dinámicas por onda de choque	16
II.2.1 Ajuste semiempírico de la curva fría	17
II.2.2 La contribución térmica	19
II.3 El régimen de alta temperatura y densidad	24
II.3.1 Gas de electrones de Fermi-Dirac	24
II.3.2 Modelos sin estructura de capas	29
A El modelo de Thomas-Fermi (TF)	29
B Correcciones al modelo TF	41
II.3.3 Modelos con estructura de capas	43
A Modelo autoconsistente para calcular las poblaciones de los niveles ligados y el estado de ionización	44
B Determinación de magnitudes termodinámicas	65
CAPITULO III	
III. MODELO PARA SIMULAR BLANCOS IRRADIADOS CON LUZ LASER Y SU SOLUCION NUMERICA	85
III.1 El modelo	85
III.1.1 La aproximación hidrodinámica	86

	Pág.
III.1.2 Absorción y deposición de la luz láser	107
III.1.3 Condiciones de contorno	126
III.1.4 Reacciones termonucleares	128
III.1.5 Teoremas de conservación	135
III.2 El método numérico	142
III.2.1 Discretización espacial y temporal	142
III.2.2 Esquema numérico para el movimiento de la grilla y la ecuación de Euler	146
III.2.3 Esquema numérico para integrar las temperaturas Te y Ti	147
III.2.4 Control del paso temporal	151
III.3 El programa	154
 CAPITULO IV	
IV. SIMULACION DE EXPERIENCIAS DE IRRADIACION SOBRE BLANCOS PLANOS	158
IV.1 Compresión dinámica inducida con pulsos láser de alta potencia	158
IV.2 Optimización del método numérico en la simulación de blancos planos	160
IV.3 Simulación numérica de experiencias	162
 CAPITULO V	
V. SIMULACION DE IMPLOSION DE BLANCOS ESFERICOS	178
V.1 Características de las implosiones explosivas	178
V.2 Simulación de implosiones explosivas	181
V.3 Simulación de implosiones ablativas	203
 CAPITULO VI	
VI. CONCLUSIONES Y POSIBLES LINEAS DE INVESTIGACION FUTURAS	207

	Pág.
APENDICE	212
REFERENCIAS	216

CAPITULO I

INTRODUCCION

1. INTRODUCCION

1.1 Algunas consideraciones preliminares

Las reacciones exotérmicas que constituyen la mayor fuente de energía de nuestra civilización son reacciones de oxidación. Ellas dan cuenta del 90% del consumo primario de energía (datos de Argentina para el año 1980). El resto es de origen hidroeléctrico (que, a su vez, constituye un aprovechamiento solar) y, en magnitud creciente, de fuente nuclear (fisión del uranio). En la Tabla 1.1 presentamos las reacciones de oxidación más simples, con sus respectivos calores de combustión en Kcal/mol.

Como cualquier otra reacción, la oxidación requiere una energía de activación, o energía molecular necesaria para que se produzca la combinación del oxígeno en el compuesto oxidado. Esta energía es típicamente un orden de magnitud inferior al calor de combustión. En la práctica, la energía de activación es provista por un mecanismo de ignición (chispa eléctrica, percutor, etc.), que provee localmente una temperatura suficientemente elevada. La combustión procede ulteriormente por acción del propio calor liberado.

A medida que los combustibles oxidables no renovables son consumidos, aumenta la urgencia por fuentes alternativas de energía. Algunas estrategias postulan intensificar el uso del carbón en sustitución de los hidrocarburos, ya que sus reservas son mayores. Otras derivan hacia los alcoholes obtenidos por fermentación (catálisis enzimática) de azúcares o almidones naturales. Finalmente, se propone quemar hidrógeno obtenido por pirólisis o electrólisis del agua. Cualquiera sea el futuro de estas alternativas, que ponen énfasis en algún renglón de la tabla 1.1, siempre resulta interesante ahondar otros enfoques no basados en reacciones de oxidación. Dos ya fueron mencionados: el

Combustibles Oxidables	Calor de Combustión
C ----- CO ₂ (gas)	94.1
H ₂ ----- H ₂ O (líquido)	68.3
CH ₄ (metano)	212.8
C ₂ H ₆ (etano)	372.8
CH ₃ OH (alcohol metílico)	173.7
C ₂ H ₅ OH (alcohol etílico)	326.7

(equivalencia : 23.Kcal/mol=1.eV/molécula)

Tabla 1.1

aprovechamiento de la radiación solar, en forma directa (conversión fotovoltaica o térmica) o indirecta (hidroelectricidad, vientos), y la energía nuclear de fisión. Para esta última se requiere un isótopo pesado fisiónable como el U-235 o el Pu-239. Los activadores de las reacciones de fisión son los neutrones moderados (de baja energía). Como cada núcleo fisiónado produce 2-3 neutrones, es posible lograr la reacción en cadena autosostenida, a condición de que el sistema sea suficientemente compacto para mantener un flujo neutrónico adecuado.

Pero los núcleos livianos ofrecen otra alternativa, la fusión, que es una auténtica "combustión" a nivel nuclear. Estas reacciones son exotérmicas y consisten en la formación de un núcleo más pesado a partir de núcleos livianos como protones, deuterio, tritio (H-3), helio (He-3), litio (Li-6/7), boro (B-11), etc. En la Tabla 1.2 presentamos un conjunto de reacciones de fusión de posible interés termonuclear. El "calor de combustión" de estas reacciones es millones de veces mayor que en la oxidación (varios MeV), aunque la energía de activación es también cientos de miles de veces más elevada.

Atractiva por su alto rendimiento energético, así como por la relativa abundancia de los combustibles, la fusión se presenta limitada en sus posibilidades prácticas debido al difícil logro de las condiciones ambientales de su ignición, que requieren altísimas temperaturas (≥ 5 KeV, según la reacción), así como una adecuada compactación del combustible para compensar las pérdidas radiativas (característica compartida con los sistemas de fisión).

En las estrellas, gigantescos reactores de fusión, la compactación es mantenida por la poderosa atracción gravitatoria, que es capaz de vencer la resistencia a la opresión de los materiales. Para la producción de una "estrella de laboratorio" no se puede contar con aceleraciones de origen gravitativo, pero no está excluido que aceleraciones muy superiores, del orden de

Reacciones de Fusión	
$D + D \longrightarrow$	$T + p + 4.03 \text{ MeV}$ (50%)
$D + D \longrightarrow$	${}^3\text{He} + n + 3.27 \text{ MeV}$ (50%)
$D + T \longrightarrow$	${}^4\text{He} + n + 17.6 \text{ MeV}$
$D + {}^3\text{He} \longrightarrow$	${}^4\text{He} + p + 18.3 \text{ MeV}$
$T + T \longrightarrow$	${}^4\text{He} + 2n + 11.3 \text{ MeV}$
${}^3\text{He} + T \longrightarrow$	${}^4\text{He} + p + n + 12.1 \text{ MeV}$ (51%)
${}^3\text{He} + T \longrightarrow$	${}^4\text{He} + D + 14.3 \text{ MeV}$ (43%)
${}^3\text{He} + T \longrightarrow$	${}^5\text{He} + p + 14.3 \text{ MeV}$ (6%)
$p + \text{Li}^6 \longrightarrow$	${}^4\text{He} + {}^3\text{He} + 4. \text{ MeV}$
$p + \text{Li}^7 \longrightarrow$	$2{}^4\text{He} + 17.3 \text{ MeV}$ (20%)
$p + \text{Li}^7 \longrightarrow$	${}^7\text{Be} + n - 1.6 \text{ MeV}$ (80%)
$D + \text{Li}^6 \longrightarrow$	$2{}^4\text{He} + 22.4 \text{ MeV}$
$p + \text{B}^{11} \longrightarrow$	$3{}^4\text{He} + 8.7 \text{ MeV}$
$n + \text{Li}^6 \longrightarrow$	${}^4\text{He} + T + 4.8 \text{ MeV}$

Tabla 1.2

$10^{15} \text{ cm s}^{-2}$ se puedan obtener mediante la violenta ablación de la superficie de un blanco minúsculo, gracias al poder de concentrar energía en pequeños volúmenes que tienen los láseres y aceleradores de partículas actuales.

En efecto, una de las tendencias que más se destacan en el avance tecnológico es la posibilidad de concentrar energía en pequeños volúmenes durante brevísimos intervalos: el haz de un láser de potencia puede depositar más de 10^{14} Wcm^{-2} en un pulso de .1-1, nanosegundo de duración. Presiones inmensas, superiores al millón de atmósferas, pueden comprimir a esos pequeños blancos y, si el proceso se mantiene razonablemente isoentrópico, se producirá también un fuerte calentamiento en las etapas finales de la compresión que puede dar lugar a la ignición. Este modo de operación dentro del ámbito de la fusión nuclear controlada se denomina: Fusión por Confinamiento Inercial, pues es la propia inercia del combustible llevado a las condiciones de ignición, la que hace que estas perduren durante un breve intervalo de tiempo.

Estos experimentos de ignición son objeto de intensa investigación, teórica y experimental, porque es obvio que abrirían paso a un nuevo dominio del hombre sobre la naturaleza. Pero para llevarlos a cabo se necesita la conjunción de conocimientos teóricos con las más modernas técnicas experimentales, ya que poco es lo que se sabe acerca del comportamiento de la materia en condiciones tan extremas (estado hipercomprimido).

1.2 La física de la fusión por confinamiento inercial

La problemática que genera el estudio de la materia en condiciones de alta compresión y temperatura, es algo que habitualmente se asocia al tratamiento de problemas de astrofísica o bien de explosiones nucleares. Sin embargo,

desde la publicación en el año 1972 del trabajo de Nuckolls y colaboradores^[1] sobre la posibilidad de producir un quemado eficiente y controlado de combustible termonuclear mediante la implosión de esferas de material fusible irradiadas con pulsos de luz láser de alta potencia, el régimen de alta compresión y temperatura se ha trasladado también, desde escenarios tan espectaculares como pueden ser el interior de una estrella o bien el estallido de un artefacto nuclear, al recinto de un laboratorio de física. En efecto, las predicciones de este trabajo hicieron que se volcara un gran esfuerzo humano y económico en pos de la fusión nuclear controlada por confinamiento inercial, en particular la inducida por luz láser. Así, en el año 1974, aparecen publicados dos importantes trabajos: uno de revisión debido a Brueckner & Jorna^[2] y otro de estudio de ignición debido a Fraley y colaboradores utilizando un complejo código de simulación numérica^[3]. Simultáneamente, los experimentos de implosión de blancos esféricos de vidrio rellenos con una mezcla gaseosa de Deuterio-Tritio (DT) mediante pulsos láser de alta potencia (KMS Fusion Inc., Lawrence Livermore National Laboratory) logran producir los primeros neutrones ($10^6 - 10^7$) provenientes de reacciones de fusión nuclear en este tipo de experiencias^[4].

Casi diez años han pasado ya desde estos primeros logros teóricos y experimentales, y el interés por el tema, a pesar de sus dificultades y sus costos, lejos de haber decaído se ha fortificado y renovado^[5]. Pero aún permanece pendiente el desafío de lograr experimentalmente las ansiadas condiciones de ignición, que, para el caso del DT, exigen llevar el combustible a temperaturas del orden de 5. KeV ($\sim 58. \times 10^6$ °K) y a compresiones, expresadas en términos del producto densidad-radio (ρR), del orden de $.5 \text{ gcm}^{-2}$ (densidades típicas en el orden de los 10^3 gcm^{-3}). Cabe destacar que el producto densidad-radio del combustible es un parámetro que juega un papel muy importante en los estudios de ignición, análogo al producto densidad-tiempo de confina-

namiento ($n\bar{0}$, criterio de Lawson) en los experimentos de fusión por confinamiento magnético.

Todo este despliegue teórico, experimental y tecnológico no ha tenido como único resultado que en la actualidad nos encontremos mejor preparados y más cerca de lograr el objetivo tan deseado. En efecto, hoy podemos observar que la fusión por confinamiento inercial inducida con luz láser, ha traído aparejadas una serie de consecuencias sumamente positivas, quizás no previstas originalmente, en diversas áreas de la física y en el desarrollo tecnológico. Podemos citar algunas de ellas. Los láseres pulsados de alta potencia de vidrio-neodimio (Nd, longitud de onda = $1.06 \mu m$) cuentan hoy con exponentes tales como el sistema OMEGA de iluminación de 24 haces del Laboratory for Laser Energetics ^[128] (University of Rochester, USA) o el sistema SHIVA de 20 haces del Lawrence Livermore National Laboratory ^[5] (USA), capaces de producir pulsos de 10. - 100. TW de potencia, con energías de 1. - 10. KJ y duración de aproximadamente 100. ps.

De la idea inicial de realizar implosión de blancos esféricos se ha desprendido la de irradiar blancos planos. Estos experimentos se utilizan para estudiar la interacción láser-plasma y también para inducir compresión dinámica de blancos sólidos. Esto último ayuda al estudio de la ecuación de estado de materiales en condiciones de alta compresión y brinda una nueva técnica experimental que ha permitido superar los logros de anteriores métodos explosivos ^[17-21].

Los plasmas densos y calientes producidos mediante la irradiación de blancos sólidos con pulsos láser de alta potencia, constituyen un nuevo y particular ambiente de trabajo para la física atómica. Problemas tales como el estado de ionización (resultado del incremento de la temperatura o la compresión),

la determinación de las poblaciones y energías de niveles ligados, la emisión de líneas y el transporte radiativo despiertan la atracción de muchos grupos de investigación con intereses también en temas de astrofísica. En este aspecto resultan muy ilustrativos los trabajos de revisión de B.F. Rozsnyai^[61] y R.M. More^[62]. La simulación numérica, uno de los pilares de la física computacional, tiene un excelente campo de acción dentro de la física de la fusión por confinamiento inercial. La diversidad y complejidad de los procesos físicos inherentes a la misma, hacen de aquella una herramienta prácticamente indispensable en los estudios teóricos. Dentro de los métodos de diagnóstico existe un tremendo desarrollo en los referidos a la utilización de la radiación X de línea emitida por el plasma^[111,125-127,132,137-139]; la ubicación y la forma de la línea constituyen un fiel reflejo del entorno que rodea al átomo emisor. Este terreno ofrece un interesante campo de acción para los espectroscopistas. Finalmente, queremos mencionar que la emisión de radiación X de estos plasmas también puede utilizarse como fuente de rayos X de altísima resolución temporal para estudios estructurales de muestras químicas y biológicas.

El objeto de este trabajo de tesis es estudiar algunas propiedades termodinámicas básicas de la materia hipercomprimida, como la ecuación de estado y el calor específico, esenciales ambos para calcular la resistencia a la compresión (que podría conspirar contra el fin deseado) y la absorción de energía por la materia (su elevación de temperatura). Las propiedades de transporte y relajación no son menos importantes. Ellas determinan los tiempos característicos para el flujo de las distintas formas de energía en el sistema, y gobiernan el cálculo hidrodinámico. Este a su vez debe ser numéricamente simulado, a fin de poder comparar en un contexto realista las hipótesis físicas con los datos empíricos, que forzosamente integran todas las fases de un proceso de muy corta duración.

Termodinámica, transporte e hidrodinámica van necesariamente juntos en este estudio. Se ha elaborado un marco consistente y satisfactorio que cubre las necesidades principales en un primer esbozo de comportamiento. El estudio de la ecuación de estado es útil, entre otras cosas, para la física de los interiores planetarios, ya que los grandes planetas tienen carozos fuertemente comprimidos por la gravedad, aunque relativamente fríos por la ausencia de reacciones de fusión. Algunos detalles, excesivamente laboriosos y, "prima facie", de secundaria importancia fueron dejados para otra ocasión, a saber: la hidrodinámica de la radiación, aunque una extensión inmediata del cómputo de niveles y poblaciones autoconsistentes desarrollado en este trabajo serviría para calcular las opacidades para grupos de frecuencia, la difusión de los productos cargados de fusión, que tiene más que ver con el progreso de la ignición que con las condiciones que la posibilitan; finalmente, la inestabilidad de Rayleigh-Taylor en un campo de aceleraciones tan severo como el producido por la ablación, pero esto exigiría otro tipo de código hidrodinámico (bidimensional, a diferencia del unidimensional presentado en este trabajo) y facilidades de cómputo de mayor envergadura, sin que ello aporte nueva física al estudio.

Sí se tuvo en cuenta la anomalía de transporte que representan los electrones supratérmicos, producidos abundantemente en un régimen de alta irradiancia. Sin ellos no se pueden entender los datos experimentales. Desde el punto de vista hidrodinámico importa simular su actuación, sin complicar grandemente los términos de transporte. Este problema está vinculado a la limitación del flujo térmico de Fourier en presencia de electrones muy penetrantes. Se ha llegado a resolver satisfactoriamente ambos problemas.

A continuación hacemos una breve descripción del contenido de cada capítulo. El capítulo II está dedicado al estudio de la ionización y ecuación

de estado en el régimen de alta temperatura y presión. Luego de una breve revisión de los aspectos más significativos del comportamiento de la materia en un rango muy amplio de temperatura y densidad, fijamos nuestra atención en dos situaciones. En primer lugar seleccionamos una ecuación de estado apropiada para aplicarla en la simulación numérica de compresión dinámica de blancos planos inducida por luz láser. En segundo lugar exponemos los aspectos más fundamentales del gas de electrones de Fermi-Dirac y el modelo atómico estadístico de Thomas-Fermi, y presentamos un modelo autoconsistente para determinar estado de ionización, poblaciones y energías de niveles ligados, y propiedades termodinámicas de la materia a alta temperatura y compresión. Se presenta también, el algoritmo que hemos desarrollado para resolverlo y que nos ha permitido superar, eficientemente, los problemas de convergencia numérica citados en la literatura para modelos de características similares al nuestro.

En el capítulo III presentamos el modelo hidrodinámico para simular blancos irradiados con pulsos láser de alta potencia. Hemos puesto especial énfasis en desarrollar un esquema de cálculo para la deposición por pasaje de electrones supratérmicos que representa una simplificación sustancial respecto de los habituales esquemas multigrupales, teniendo en cuenta que el tiempo de cómputo de estas simulaciones es un factor crítico. Con el mismo interés hemos seleccionado los esquemas numéricos para su solución y hemos escrito el código de simulación numérica DELFIN-1D.

En el capítulo IV presentamos los resultados de la simulación de experiencias de compresión dinámica de blancos planos de aluminio, con luz láser de 1.06 (Nd) y 10.6 (CO₂) micrones de longitud de onda. Para estos casos se ha implementado una técnica de grilla de cálculo de longitud variable, que ha permitido reducir los tiempos de cómputo en un factor 2. En estas simulaciones

utilizamos la ecuación de estado seleccionada en el capítulo II. Se realizan comparaciones con resultados experimentales,

En el capítulo V presentamos los resultados de la simulación de implosión de blancos esféricos de vidrio rellenos con material fusible, irradiados con pulsos láser de neodimio (Nd). En estos casos se pone en funcionamiento toda la física presentada en el capítulo III e implementada en el código de simulación numérica DELFIN-1D. Hemos prestado especial atención a las experiencias de tipo explosivo, que constituyen la mayor parte de los experimentos realizados hasta el presente, simulando un conjunto de cinco experiencias que cubren un rango bastante generoso de parámetros. En todos estos casos el esquema de deposición por pasaje de electrones supratérmicos, desarrollado en esta tesis, juega un papel decisivo y, por lo tanto, los mismos constituyen una buena prueba de la calidad de su funcionamiento. También se simula un par de casos ablativos.

Finalmente en el capítulo VI se resumen las conclusiones de este trabajo y se analizan las perspectivas y posibles líneas de investigación futuras.

CAPITULO II

IONIZACIÓN Y ECUACION DE ESTADO EN EL REGIMEN DE ALTA TEMPERATURA Y PRESION

II. IONIZACION Y ECUACION DE ESTADO EN EL REGIMEN DE ALTA TEMPERATURA Y PRESION

II.1 Generalidades

Las primeras experiencias que se realizaron para determinar la ecuación de estado de un material consistieron en compresiones estáticas^[6-10]. Mediante estas experiencias se pueden determinar isothermas ($\sim 4. - 300.^{\circ}\text{K}$) y alcanzar presiones del orden de 10-100. Kbar (1. bar = .987 atm). Para superar estos valores se debe recurrir a compresiones de tipo dinámico; o sea experiencias en las cuales se trata de inducir en el material la propagación de ondas de choque fuertes (generadas habitualmente por técnicas de impacto o bien explosivas), las cuales comprimen y calientan el material alcanzándose de esta manera presiones del orden de 100. Kbar-1. Mbar. En algunos casos el calentamiento ($10^3 - 10^4$ °K) que acompaña a la compresión detrás del frente de choque es tal que el material se funde, pudiéndose estudiar de esta forma la curva de fusión a alta presión^[11-16,26,56,121]. Recientemente se ha comenzado a utilizar una nueva técnica para generar ondas de choque en experiencias de compresión dinámica. Esta consiste en la irradiación de blancos sólidos planos con pulsos de luz láser de alta potencia, del mismo tipo de los utilizados en la implosión de blancos esféricos de interés termonuclear. En estas condiciones ha sido posible alcanzar presiones entre 1. y 10. Mb y temperaturas del orden del electrón-voltio ($1.\text{eV} = 11605.^{\circ}\text{K}$)^[17-21].

Uno de los aspectos más interesantes de la compresión a valores de presión por encima del Mbar, a baja temperatura, es el estudio de la transición sólido-molecular a sólido-metálico. A muy alta densidad es bien sabido

que la red iónica cristaliza disminuyendo la energía Coulombiana. En particular este problema ha merecido especial atención en el caso del hidrógeno. En efecto, el hidrógeno es uno de los elementos más abundantes en el universo y el principal constituyente de los planetas más grandes de nuestro sistema solar (Júpiter, Saturno, Urano) debido a esto su estudio ha merecido particular interés entre los astrofísicos [15,22-24]. Sin embargo el comportamiento a alta densidad de los isótopos del hidrógeno constituye ahora también un tema de interés para los grupos que investigan la fusión termonuclear inducida con luz láser [25,31], quienes preveen comprimir en un futuro cercano, una mezcla equimolar de Deuterio-Tritio a 1000 veces su densidad normal en estado líquido ($\rho_{DT} \sim 2 \text{ gcm}^{-3}$).

En la actualidad, para el estudio experimental de esta transición se ha implementado una ingeniosa técnica de compresión isoentrópica por campo magnético que permite superar el Mbar evitando el incremento de entropía propio de una onda de choque [32,33]. De acuerdo a los últimos resultados teóricos y experimentales se estima que la transición a la fase metálica se produce entre los 2. y 4. Mbar a cero grado.

Para tener una idea global del comportamiento de la materia en un rango amplio de temperatura y densidad en la Fig. 2.1 se presenta un esquema cualitativo temperatura-densidad por zonas. Cada una de ellas puede ser representada por distintos modelos físicos, que pretenden reproducir sus características con el mayor grado de precisión posible. A valores moderados de temperatura y densidad se tiene una estructura de tipo molecular que se puede presentar en dos fases, líquida o sólida, de acuerdo a su ubicación respecto de la curva de fusión. En esta zona los mejores resultados se han obtenido con ajustes semiempíricos, tanto para la curva fría como para las contribuciones

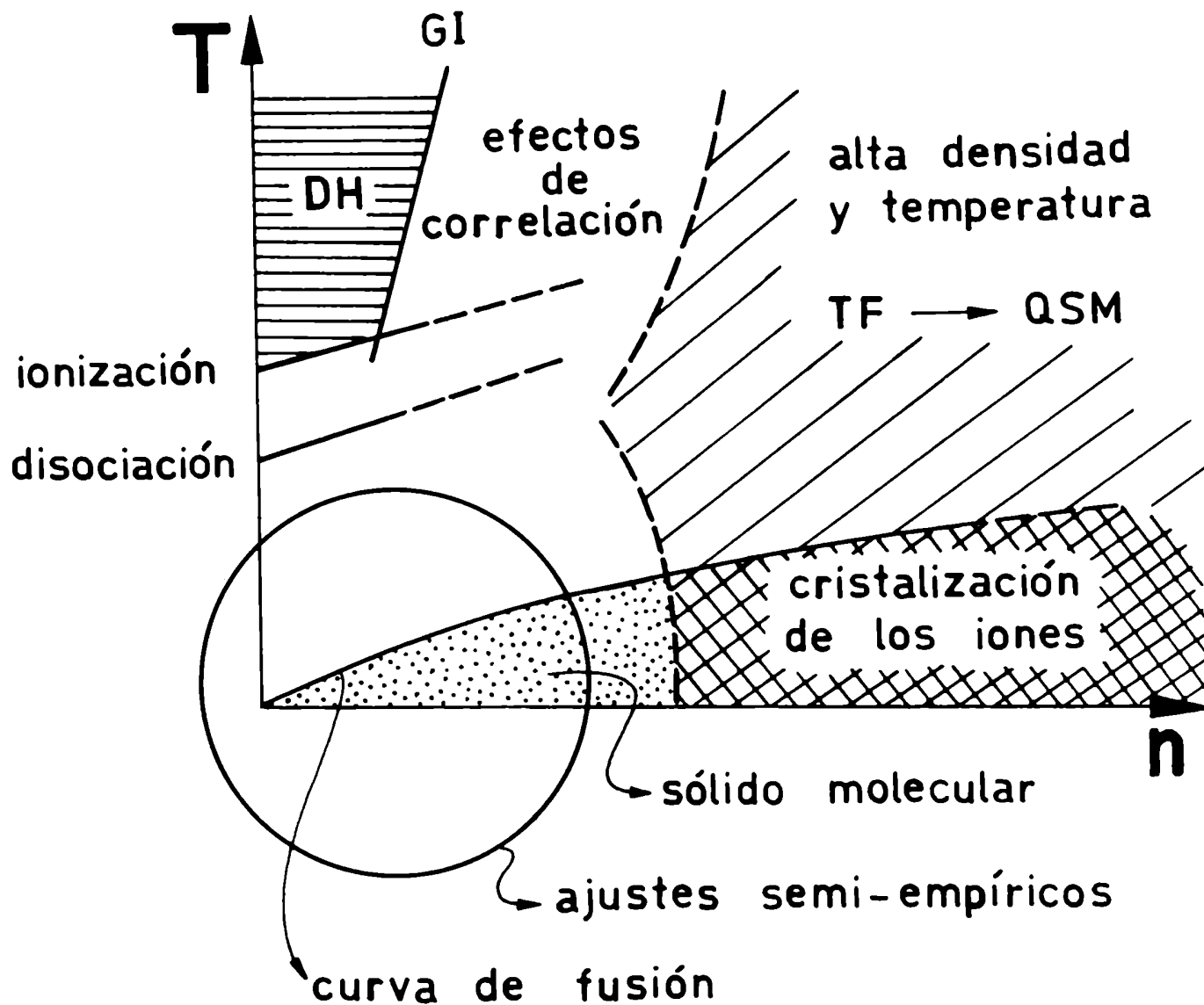


Fig. 2.1: esquema cualitativo que muestra los aspectos más significativos de comportamiento de la materia en el plano temperatura (T), densidad (ρ).

térmicas [9-14,28,30,34]. Si nos desplazamos hacia la zona de alta densidad se produce la transición al estado metálico, como se mencionó anteriormente. El sector de alta temperatura y densidad se trata habitualmente con modelos de tipo estadístico (Thomas-Fermi, TF) en la aproximación de átomo promedio [35-46], cálculos de tipo Thomas-Fermi-Shell (TFS)^[47], Hartree-Fock-Slater (HFS)^[48], o bien cálculos de campo autoconsistente [49,50]. Estos modelos computan la contribución electrónica a la ecuación de estado y se complementan con una contribución tipo gas ideal para los iones. Sin embargo si la temperatura no es suficientemente alta los iones pueden estar fuertemente correlacionados. El problema del acoplamiento iónico en plasmas densos ha sido tratado recientemente con un formalismo estadístico de "ensemble" gran canónico [51,52]. También existe un tratamiento de este aspecto dentro del contexto del modelo TF [66]. El aumento de temperatura a baja densidad provoca la transición del estado líquido al gaseoso simultáneamente con la disociación de moléculas y ionización de los átomos. Finalmente lo que se obtiene es un gas de partículas cargadas interactuantes entre sí que puede ser tratado con la teoría de Debye-Huckel, tendiéndose a alta temperatura al gas ideal.

Hemos hecho hasta aquí una breve revisión y descripción de los aspectos más notables del problema de la ecuación de estado en un rango muy amplio de temperatura y densidad. En este capítulo nos interesa profundizar en las siguientes dos situaciones: el régimen sólido-líquido que puede alcanzar presiones del orden del Mbar y temperaturas del eV, típico de las experiencias de compresión dinámica por onda de choque, y el régimen de alta densidad y temperatura, de interés en situaciones astrofísicas y en la física de blancos esféricos implotados con pulsos láser de alta potencia.

En lo que sigue, utilizaremos la habitual descomposición de la ecuación de estado en suma de tres contribuciones^[53]: la contribución fría, la electrónica y la iónica. Por ejemplo para la presión resulta

$$P(\rho, T) = P_c(\rho) + P_I(\rho, T) + P_E(\rho, T)$$

siendo ρ la densidad, T la temperatura, $P_c(\rho)$ la curva fría del material y $P_{I,E}(\rho, T)$ la contribución térmica de iones y electrones respectivamente.

11.2 Compresiones dinámicas por onda de choque

Existe una línea de investigación soviética muy activa en el tema de compresión dinámica de sólidos^[13], y en general en el estudio de la ecuación de estado en condiciones extremas de temperatura y densidad, como se desprende de buena parte de las referencias citadas anteriormente. En este apartado nos interesa en particular presentar un conjunto de expresiones desarrolladas por S.B. Kormer, A.I. Funtikov, V.D. Urlin y A.N. Kolesnikova^[12] especialmente apropiadas para el estudio de compresión por onda de choque, que nosotros aplicaremos más adelante en la simulación numérica de experiencias de este tipo iniciadas con pulsos láser de alta potencia. Debe mencionarse que las ideas básicas de este tipo de ecuación de estado se pueden encontrar también en las referencias 11, 13, 14 y 34 e incluso en los más recientes trabajos de F.V. Grigor'ev y colaboradores orientados al estudio de la transición metálica del hidrógeno^[28, 30].

11.2.1 Ajuste semiempírico de la curva fría

El estado de equilibrio mecánico de un sólido a cero grado está caracterizado por una compensación de las fuerzas de interacción entre los átomos o moléculas de la red cristalina que lo componen. A este estado le corresponde una cierta densidad ρ_0 o volumen específico $V_0 = 1/\rho_0$. Si suponemos un medio isótropo, para valores del volumen específico V por encima de V_0 se rompe el balance de fuerzas existente obteniéndose una situación atractiva entre los endos de la red, que tiende a desaparecer si el crecimiento de V es muy grande ($V/V_0 \gg 1$). En la situación opuesta ($V/V_0 < 1$) las fuerzas se vuelven fuertemente repulsivas, manifestando la impenetrabilidad de las nubes electrónicas entre sí. A modo de ejemplo se puede citar que la compresión de un sólido a dos veces el valor de su densidad en condiciones normales requiere presiones de varios millones de atmósferas [54, 55].

Este comportamiento de la materia a cero grado está descrito por lo que se conoce como curva fría del material o isoterma de cero grado $P_c(\rho)$. La energía potencial elástica E_c se vincula con la curva fría P_c a través del primer principio de la termodinámica, de acuerdo a la siguiente expresión

$$P_c = - \frac{dE_c}{dV} ;$$

por otro lado el estado de equilibrio mecánico a cero grado es

$$P_c(\rho = \rho_0) = P_c(V = V_0) = 0$$

o sea que corresponde a un mínimo de la energía potencial elástica del material.

No resulta fácil encontrar buenas expresiones analíticas para $P_c(\rho)$ sobretodo si se pretende barrer un rango amplio de presiones. Barnes^[41, 53] propone un ajuste del tipo:

$$P_c(\delta) = a \delta^{2/3} (\delta e^{b_r \delta} - e^{b_a \delta}) \quad , \quad (2.1)$$

donde $\delta = \frac{\rho}{\rho_0}$, $\nu = 1 - \delta^{-1/3}$ y a , b_r y b_a son constantes que dependen del material. Los errores de ajuste con esta expresión son del orden del 2% y empalma bien a alta compresión con el comportamiento proporcional a $\delta^{5/3}$ característico del modelo de Thomas-Fermi.

Kormer y colaboradores^[11-14, 34], Grigor'ev y colaboradores^[28, 30] y también Kalitkin y Govorukliena^[55] utilizan un ajuste más sencillo de tipo polinomial en potencias de $\delta^{1/3}$ de la forma

$$P_c(\delta) = \sum_{i=1}^N a_i \delta^{\frac{i}{3} + 1} \quad , \quad (2.2)$$

donde a_i es un conjunto de parámetros que dependen del material, que se determinan ajustando propiedades del mismo a baja y alta compresión^[34]. El número de sumandos N oscila entre 4 y 7.

Ambas expresiones, 2.1 y 2.2, se utilizan entre presión cero y 10^7 atmósferas aproximadamente; más allá de este valor se empalma con el comportamiento $\delta^{5/3}$. En términos de la compresión δ esto representa valores entre 1 y 2 a 3 dependiendo del material que se trate.

11.2.2 La contribución térmica

En las experiencias de compresión dinámica de sólidos, el incremento de entropía asociado al pasaje de ondas de choque fuertes puede proveer a la red iónica la suficiente cantidad de energía como para que el material quede en un estado líquido-gaseoso denso a alta presión. La ecuación de estado que se utilice para estudiar estas experiencias debe ser lo suficientemente versátil como para poder describir estados termodinámicos en los cuales coexisten las fases sólida y gaseosa. Por ejemplo se tiene que contemplar la reducción del calor específico a volumen constante C_V de $3R$ (ley de Dulong-Petit para un sólido) a $3/2R$ (característico de un estado gaseoso).

Kormer y colaboradores^[12] resuelven este problema de una manera práctica proponiendo una ecuación de estado que interpola entre las dos situaciones citadas anteriormente, utilizando como parámetro de la interpolación la siguiente cantidad

$$\mathcal{Z}(\rho, T) = \mathcal{L} \frac{RT}{C_c^2} \quad , \quad (2.3)$$

donde \mathcal{L} es una constante empírica que depende del material, R es la constante de los gases, T la temperatura y C_c^2 el cuadrado de la velocidad del sonido que se deriva de la curva fría $P_c(\rho)$, o sea

$$C_c^2 = \frac{dP_c}{d\rho} \quad (2.4)$$

Esta cantidad \mathcal{Z} , que, como veremos más adelante, mide la desviación de las

leyes que gobiernan el comportamiento de un sólido, puede interpretarse como un cociente entre la contribución térmica a la velocidad del sonido y la contribución fría. En función de Z se proponen las siguientes expresiones para las contribuciones térmicas a la presión P_T , la energía E_T y el calor específico C_V

$$P_T = \left(\frac{3\gamma + Z}{1 + Z} \right) \cdot \rho RT \quad , \quad (2.5)$$

$$E_T = \left(\frac{2 + Z}{1 + Z} \right) \cdot \frac{3}{2} \cdot RT \quad , \quad (2.6)$$

$$C_V = \frac{3}{2} \cdot R \cdot \left[1 + (1 + Z)^{-2} \right] \quad , \quad (2.7)$$

donde γ es el coeficiente de Mie-Grüneisen de la teoría de sólidos^[57,58], que se vincula con la curva fría a través de

$$\gamma = \frac{1}{3} + \frac{d \ln C_c}{d \ln \rho} \quad ; \quad (2.8)$$

habitualmente γ toma valores comprendidos entre 1. y 3.. Para valores pequeños de Z ($Z \ll 1$) las expresiones (2.5) a (2.7) tienden a

$$P_T = 3\gamma RT \quad , \quad (2.9)$$

$$E_T = 3RT \quad , \quad (2.10)$$

$$C_V = 3R \quad , \quad (2.11)$$

que son las expresiones para un sólido de Debye cuando $T \gg \Theta_D$, donde Θ_D es la temperatura de Debye que se vincula con la frecuencia máxima ν_M del espectro de fonones de la red iónica a través de

$$\Theta_D = \frac{h\nu_M}{k_B} \quad , \quad (2.12)$$

siendo h la constante de Planck y k_B la de Boltzmann. Por otro lado entre Θ_D y γ existe la relación

$$\gamma = \frac{d \ln \Theta_D}{d \ln \rho} \quad (2.13)$$

Si recordamos que la presión total P y la energía total E son

$$P = P_c + P_T \quad , \quad (2.14)$$

$$E = E_c + E_T \quad , \quad (2.15)$$

las ecuaciones 2.9 y 2.10 se pueden reducir a la siguiente forma

$$(P - P_c) = \gamma \rho (E - E_c) \quad , \quad (2.16)$$

que es justamente lo que se conoce como ecuación de estado de Mie-Grüneisen, usualmente utilizada para tratar materiales que soportan alta compresión^[59].

Para valores grandes de Z ($Z \gg 1$) las expresiones (2.5) a (2.7) tienden a

$$P_T = \rho R T \quad , \quad (2.17)$$

$$E_T = \frac{3}{2} R T \quad , \quad (2.18)$$

$$C_V = \frac{3}{2} R \quad , \quad (2.19)$$

que reconocemos como las expresiones para una gas ideal clásico.

La consistencia termodinámica de las expresiones (2.5) y (2.6) queda garantizada porque se pueden deducir de la siguiente expresión para la energía libre

$$F = 3RT \ln \left[\frac{\oplus}{T} (1 + Z)^{1/2} \right] \quad , \quad (2.20)$$

que es la fórmula del sólido de Debye complementada con el término $\ln (1 + Z)^{1/2}$.

El mismo incremento de la entropía mencionado anteriormente hace que en estas situaciones fácilmente se alcancen temperaturas del orden del electrón-voltio (eV) detrás del frente de choque. Debido a esto resulta necesario tener en cuenta también la contribución térmica electrónica, para lo

cual se propone^[12]

$$E_{Te} = \frac{b^2}{\beta} \ln \cosh \left(\frac{\beta T}{b} \right) \quad , \quad (2.21)$$

$$\beta = \beta_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^g \quad , \quad (2.22)$$

$$C_v = b \operatorname{tgh} \left(\frac{\beta T}{b} \right) \quad , \quad (2.23)$$

donde b y β_0 son constantes que dependen del material y g es el análogo electrónico del coeficiente de Mie-Gruneissen^[60]. Este conjunto de expresiones persigue, en algún sentido, el mismo objetivo que las expresiones (2.5) a (2.7): interpolar entre dos situaciones límites. En efecto, si $T \gg b/\beta$

$$E_{Te} \rightarrow bT \quad , \quad C_v \rightarrow b \quad ,$$

que corresponde a un gas de electrones clásico.

En el extremo opuesto, si $T \ll b/\beta$

$$E_{Te} \rightarrow \frac{1}{2} \beta T^2 \quad , \quad C_v \rightarrow \beta T \quad ,$$

que corresponde a un gas de electrones cuántico. Finalmente, por semejanza con la ecuación de Mie-Gruneissen, la presión se toma de la forma

$$P_{Te} = g\rho E_{Te} \quad (2.24)$$

11.3 El régimen de alta temperatura y densidad

El tratamiento de la materia en condiciones de alta temperatura y densidad de interés en astrofísica y en la fusión por confinamiento inercial, se realiza habitualmente con modelos aproximados de tipo estadístico. Varios son los problemas de interés en este ámbito como por ejemplo el cálculo de la ecuación de estado del material, las poblaciones de los niveles electrónicos ligados, el estado de ionización, el análisis de los espectros de líneas, los cálculos de opacidades y transporte radiativo, etc. Para una descripción detallada puede consultarse los recientes trabajos de revisión de B.F. Rozsnyai^[61] y R.M. More^[62].

En este apartado nos dedicaremos al estudio de la contribución electrónica a la ecuación de estado, el estado de ionización y la determinación de los niveles de energía electrónicos. Pondremos especial interés en las consecuencias termodinámicas que provengan de trabajar con una estructura discreta de niveles y en el modelado del fenómeno de ionización por presión.

11.3.1 Gas de electrones de Fermi-Dirac

Dado un conjunto de N electrones uniformemente distribuidos en un recinto de volumen V a una temperatura T , de acuerdo a los resultados de la teoría del gas de electrones libres de Fermi-Dirac, la presión P , energía interna E y calor específico a volumen constante C_V vienen dados por

$$P = \frac{Nk_B T}{V} \cdot \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)}, \quad (2.25)$$

$$E = \frac{3}{2} NK_B T \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} \quad , \quad (2.26)$$

$$C_V = \frac{3}{2} NK_B \left[\frac{5}{2} \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} - \frac{3}{2} \frac{F_{3/2}(\alpha)}{F_{1/2}(\alpha)} \right] \quad , \quad (2.27)$$

donde K_B es la constante de Boltzman, α es el potencial de Planck y $F_\sigma(\alpha)$ son las funciones de Fermi-Dirac, que están definidas por

$$F_\sigma(y) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty \frac{x^{\sigma-1} dx}{e^{x+y} + 1} \quad , \quad (2.28)$$

donde $\Gamma(\sigma)$ es la función Gamma. Para su evaluación disponemos de los desarrollos para $-10 \leq \alpha \leq 1$ y el programa de cálculo para todo valor de α expuesto en las referencias 63 y 64. El potencial de Planck α se despeja, mediante inversión de la función $F_{3/2}(\alpha)$ utilizando el método de los aproximantes de Padé^[65], a partir de la siguiente expresión

$$N = \frac{2V}{\lambda_{DB}^3} F_{3/2}(\alpha) \quad , \quad (2.29)$$

donde λ_{DB} es la longitud de onda de De Broglie de los electrones

$$\lambda_{DB} = \left(\frac{h^2}{2\pi m_e K_B T} \right) \quad , \quad (2.30)$$

h es la constante de Planck y m_e la masa del electrón.

Todas estas magnitudes termodinámicas pueden deducirse de manera

consistente entre sí, de la correspondiente expresión para la energía libre F del gas de Fermi-Dirac

$$F = E - TS = -NK_B T \left[\alpha + \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} \right] \quad (2.31)$$

Para tener idea de las principales características del comportamiento de este modelo, en la Fig. 2.2 presentamos los gráficos tridimensionales de P y C_V , normalizados a sus valores como gas ideal clásico ($P' = PV/NK_B T$ y $C_V' = C_V/1.5NK_B$), en función de la temperatura T y densidad numérica n ($n = N/V$).

Evidentemente distinguimos dos situaciones bien diferenciadas entre sí. En primer lugar si la temperatura es suficientemente alta (tanto más alta cuanto mayor es la densidad) los resultados coinciden con los de un gas ideal clásico. En segundo lugar, si la temperatura es suficientemente baja (tanto menos baja cuanto mayor es la densidad) los fenómenos de degeneración cuánticos se hacen presentes y el comportamiento se aparta notoriamente del gas ideal clásico. El parámetro de degeneración \mathcal{J} , que se define a partir de la expresión 2.29 de la siguiente forma

$$\mathcal{J} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\lambda_{DB}^3}{(V/N)^{1/3}} = F_{3/2}(\alpha) \quad , \quad (2.32)$$

nos permite diferenciar cuantitativamente estas dos situaciones e interpretarlas. En efecto, si la distancia media entre partículas $(V/N)^{1/3}$ es mucho mayor que la longitud de onda de De Broglie λ_{DB} , los paquetes de onda que representan a las mismas se diferencian bien entre sí y, por lo tanto, es de esperar un comportamiento clásico del sistema. En el caso opuesto

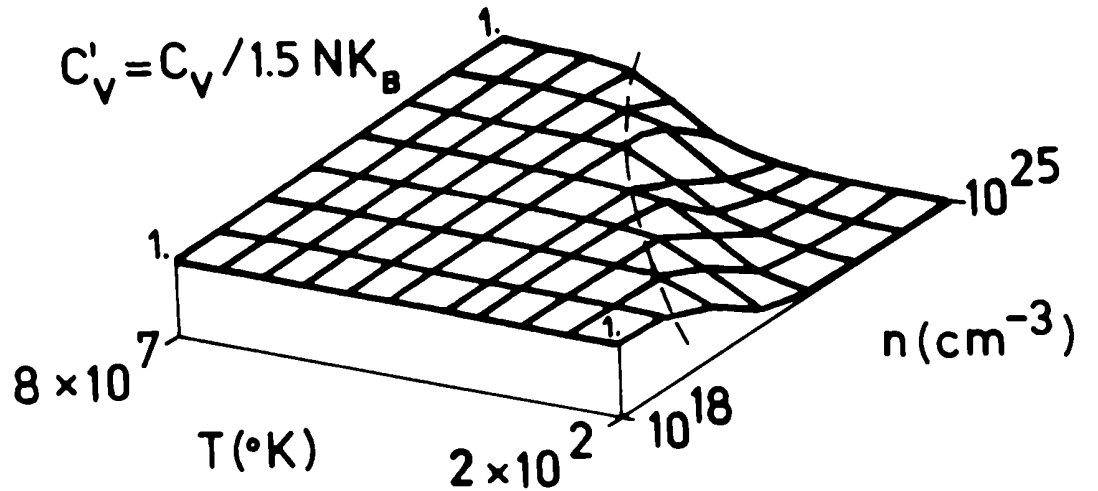
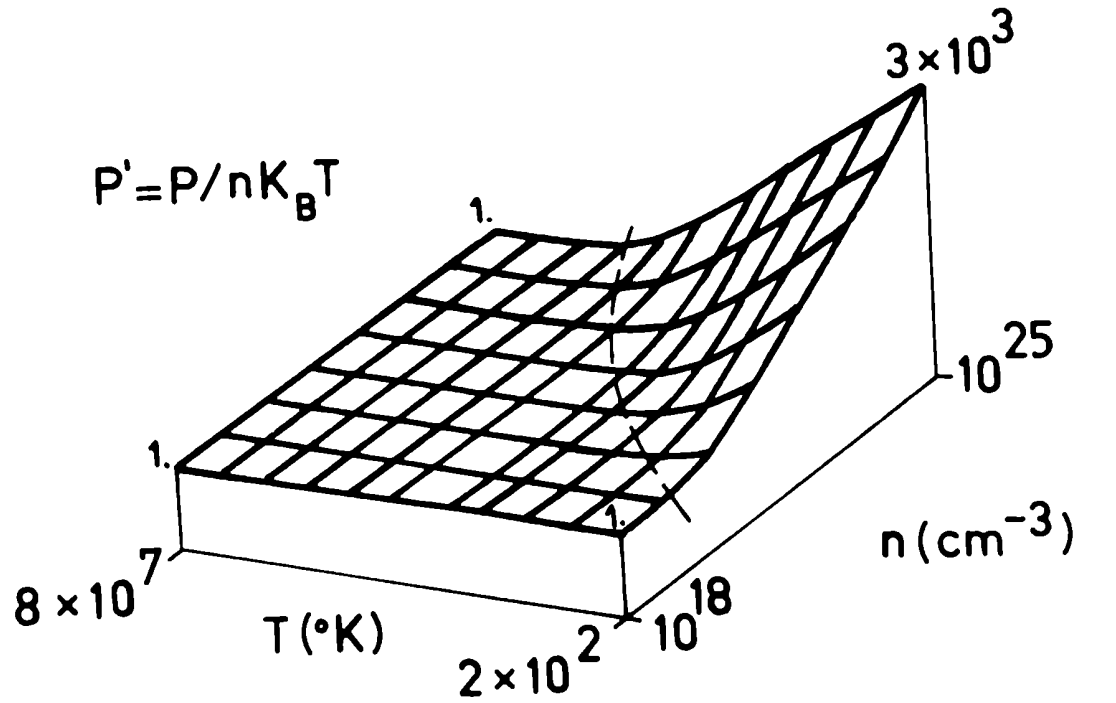


Fig. 2.2: gráficos tridimensionales de la presión (P) y calor específico a volumen constante (C_V), normalizados a sus valores como gas ideal clásico, para el gas de Fermi-Dirac en función de la temperatura (T) y la densidad (n). La línea punteada indica la separación de las zonas de valores positivos y negativos del potencial de Planc

$\lambda_{DB} \gg (V/N)^{1/3}$, o sea cuando hay solapamiento de los paquetes de onda (degeneración), el Principio de Exclusión de Pauli incrementa la repulsión entre los electrones, lo cual provoca un fuerte aumento en la presión del sistema. En el calor específico C_V la degeneración cuántica induce una disminución monótona desde el valor $1.5NK_B$ del gas clásico. Este efecto se interpreta de la siguiente forma: en el gas degenerado sólo los electrones de la superficie de la esfera de Fermi pueden absorber energía y contribuir al calor específico, el cual disminuye como $K_B T/E_F$, siendo E_F la energía de Fermi.

Por otro lado, de la inversión de $F_{3/2}(\alpha)$ en 2.32 se puede ver que

- Si $y > .7$ entonces $\alpha < 0$, gas degenerado.
- Si $y < .7$ entonces $\alpha > 0$, gas clásico.

En la Fig. 2.2 la línea punteada indica la separación entre valores de α positivos y negativos.

Resulta útil también deducir la expresión límite de la presión para un caso de degeneración extrema. Para ello debemos tener en cuenta el siguiente comportamiento asintótico de las $F_\sigma(\alpha)$

$$\begin{aligned} F_\sigma(y) &\longrightarrow \frac{|y|^\sigma}{\Gamma(\sigma+1)} \\ y &\longrightarrow -\infty \end{aligned} ,$$

utilizando esto en 2.25 se puede obtener

$$P = \frac{1}{5} \frac{\hbar^2}{m_e} (3\pi^2)^{5/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} , \quad (2.33)$$

o sea se recupera el conocido resultado proporcional a la potencia $5/3$ de la

densidad e independiente de la temperatura.

Finalmente queremos destacar que a pesar de la simplicidad de este modelo, las dos situaciones extremas anteriormente señaladas son también comportamientos asintóticos en los modelos más elaborados que se pueden utilizar para el estudio de la materia cuando se alcanzan condiciones extremas de temperatura y densidad. Por supuesto que para que esto ocurra primero se debe conseguir que los electrones estén libres, o sea se debe ionizar el material. Dos fenómenos, de naturaleza diferente entre sí, contribuyen a esto:

- Si se incrementa la temperatura, se produce la ionización por temperatura.
- Si se incrementa la densidad, se produce ionización por presión.

Los modelos que consideramos a continuación satisfacen las dos situaciones extremas anteriormente mencionadas y nos permitirán estudiar la zona intermedia, caracterizada por un estado de ionización parcial.

11.3.2 Modelos sin estructura de capas

Los modelos estadísticos sin estructura de capas son aquellos que describen la nube electrónica del átomo sin tener en cuenta la estructura discreta de niveles de la misma. El punto de partida de éstos es el modelo de Thomas - Fermi.

A) El modelo de Thomas-Fermi (TF)

El modelo atómico estadístico de Thomas-Fermi fue introducido originalmente por L.H.Thomas y E.Fermi, entre los años 1926 y 1927, para describir la nube electrónica de átomos pesados la cual se caracteriza por su relativa uniformidad^[40,44].

Luego fue generalizado por Feynman, Metropolis y Teller^[36] en el año 1949 para el caso de temperatura finita, con el objeto de utilizarlo en el cálculo de la ecuación de estado en condiciones extremas de temperatura y presión. Posteriormente en el año 1955 R. Latter^[38] publicó los resultados del primer estudio sistemático de propiedades termodinámicas con el modelo TF extendido para temperaturas finitas, resuelto sin aproximaciones mediante métodos de integración numérica.

En el modelo TF se supone que cada átomo de carga nuclear Z ocupa una celda atómica promedio esférica, de radio R_0 ; vinculado con la densidad numérica de iones \bar{n} de acuerdo a

$$\frac{4\pi}{3} R_0^3 = \frac{1}{\bar{n}}, \quad (2.34)$$

esta hipótesis es común dentro de los modelos de materia comprimida. Dentro de esta celda esférica, en cuyo centro se ubica la carga nuclear, los Z electrones atómicos interactúan electrostáticamente con la carga nuclear y entre sí, de manera que la densidad $\hat{\rho}(\underline{x})$ que los representa y el potencial electrostático $V(\underline{x})$ en el que están inmersos satisfacen la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 V(\underline{x}) = 4\pi e \hat{\rho}(\underline{x}), \quad (2.35)$$

donde e es el módulo de la carga del electrón. Se asume también simetría

esférica, por lo tanto

$$V(\underline{x}) = V(r) \quad ,$$

$$\hat{\rho}(\underline{x}) = \hat{\rho}(r) \quad ,$$

donde r es la coordenada radial en el sistema esférico.

En el modelo TF se provee una estimación sencilla para la densidad electrónica $\hat{\rho}(r)$, aplicando al gas de electrones la estadística de Fermi-Dirac en forma local. En base a esto se puede deducir que $\hat{\rho}(r)$ viene dado por:

$$\hat{\rho}(r) = \frac{2\pi}{h^3} \cdot \int_0^{\infty} \left\{ 1 + \exp \left[\beta \left(\frac{p^2}{2m_e} - eV(r) - \mu \right) \right] \right\}^{-1} p^2 dp \quad ,$$

donde \mathbf{p} es el impulso del electrón, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ y μ es el nivel de Fermi ($\mu = E_F$) que se vincula con el potencial de Planck α a través de:

$$\alpha = -\beta\mu \tag{2.36}$$

Si recordamos la fórmula 2.28, que define las funciones de Fermi-Dirac $F_{\sigma}(y)$, podemos poner

$$\hat{\rho}(r) = \frac{2}{h^3} \cdot \left(\frac{2\pi m_e}{\beta} \right)^{3/2} \cdot F_{3/2}(\alpha - e\beta V(r)) \quad , \tag{2.37}$$

de neutralidad del sistema.

La deducción que hemos presentado del modelo TF es la más clásica

esférica, por lo tanto

$$V(\underline{x}) = V(r) \quad ,$$

$$\hat{\rho}(\underline{x}) = \hat{\rho}(r) \quad ,$$

donde r es la coordenada radial en el sistema esférico.

En el modelo TF se provee una estimación sencilla para la densidad electrónica $\hat{\rho}(r)$, aplicando al gas de electrones la estadística de Fermi-Dirac en forma local. En base a esto se puede deducir que $\hat{\rho}(r)$ viene dado por:

$$\hat{\rho}(r) = \frac{2\pi}{h^3} \cdot \int_0^{\infty} \left\{ 1 + \exp \left[\beta \left(\frac{p^2}{2m_e} - eV(r) - \mu \right) \right] \right\}^{-1} p^2 dp \quad ,$$

donde \mathbf{p} es el impulso del electrón, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ y μ es el nivel de Fermi ($\mu = E_F$) que se vincula con el potencial de Planck α a través de:

$$\alpha = -\beta\mu \tag{2.36}$$

Si recordamos la fórmula 2.28, que define las funciones de Fermi-Dirac $F_G(\gamma)$, podemos poner

$$\hat{\rho}(r) = \frac{2}{h^3} \cdot \left(\frac{2\pi m_e}{\beta} \right)^{3/2} \cdot F_{3/2}(\alpha - e\beta V(r)) \quad , \tag{2.37}$$

y transformar la ecuación de Poisson 2.35 en la siguiente ecuación integrodiferencial

$$\nabla^2 V(r) = \frac{8\pi e}{h^3} \left(\frac{2\pi m_e}{\beta} \right)^{3/2} F_{3/2}(\alpha - e\beta V(r)) \quad , \quad (2.38)$$

que se conoce como ecuación de Thomas-Fermi generalizada. Puede notarse la similitud entre la expresión 2.37 y la 2.29, si a esta última se la interpreta localmente y se reemplaza el argumento de la función de Fermi-Dirac por $\alpha - e\beta V(r)$.

Las expresiones 2.37 y 2.38 se complementan con la condición de neutralidad

$$4\pi \int_0^{R_0} \hat{\rho}(r) r^2 dr = Z \quad , \quad (2.39)$$

y las siguientes condiciones de contorno

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{Ze}{r} \quad \text{y} \quad \left. \frac{dV}{dr} \right|_{r=R_0} = 0$$

La primera pone de manifiesto la presencia de la carga nuclear en el centro de la celda atómica y la segunda es consistente con la condición de neutralidad del sistema.

La deducción que hemos presentado del modelo TF es la más clásica, y, quizás, la más intuitiva [36,38,39,42]. Sin embargo es posible deducir la expresión 2.37 (y por ende la 2.38) a través del formalismo de la Funcional

Densidad [40,44,62,67], que consiste en la implementación del siguiente principio variacional; se postula una cierta funcional para la energía libre F del sistema en términos de la densidad incógnita $\hat{\rho}$ y se minimiza F con respecto a $\hat{\rho}$ teniendo en cuenta las ligaduras que correspondan en cada caso concreto. En el caso particular del modelo TF la energía libre F se construye asumiendo la validez local de la fórmula 2.31 del gas de Fermi-Dirac más los correspondientes términos de energía de interacción electrostática entre los electrones y con la carga nuclear entre sí. Por lo tanto podemos escribir para F

$$F = - \int \hat{\rho} k_B T \left[\alpha' + \frac{F_{3/2}(\alpha')}{F_{3/2}(\alpha')} \right] d^3x - \frac{1}{2} e \int \hat{\rho} V_e d^3x - e \int \hat{\rho} V_N d^3x, \quad (2.40)$$

donde V_e es el potencial electrostático debido solo a los electrones y $V_N = Ze/\epsilon_0$ debido a la carga nuclear, de manera que el potencial electrostático total es $V = V_e + V_N$. Esta funcional se debe minimizar con respecto a variaciones en $\hat{\rho}$ teniendo en cuenta que la cantidad total de electrones debe permanecer constante e igual a Z , o sea la ecuación 2.39. Para hacer el cálculo del mínimo conviene tener presente la expresión 2.29 del gas de Fermi-Dirac interpretada localmente,

$$\frac{N}{V} = \frac{2}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{3/2}(\alpha) \longrightarrow \hat{\rho} = \frac{2}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{3/2}(\alpha'), \quad (2.41)$$

esta expresión nos da una relación biunívoca entre la densidad $\hat{\rho}(x)$ y la función $\alpha'(x)$ que, evidentemente, ya no representa el potencial de Planck del gas de electrones atómicos, pero que permite hacer el cálculo de forma más fácil. Escribamos entonces la variación de la funcional F , recordando que

$$\frac{dF_G(\gamma)}{d\gamma} = -F_{G-1}(\gamma),$$

$$\delta F = - \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} \cdot \frac{1}{\beta} \cdot \left(\alpha' + \frac{F_{5/2}}{F_{3/2}} \right) \delta \alpha' d^3 x - \int \frac{\hat{\rho}}{\beta} \left(1 + \frac{-\bar{F}_{3/2}^2 + F_{5/2} F_{1/2}}{F_{3/2}^2} \right) \delta \alpha' d^3 x - e \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} V \delta \alpha' d^3 x ,$$

de la condición de ligadura se deduce

$$\int \hat{\rho} d^3 x = Z \quad \longrightarrow \quad \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} \delta \alpha' d^3 x = 0 ,$$

si sumamos esto a δF introduciendo el multiplicador de Lagrange α , convenientemente dimensionado a través del factor β , podemos escribir

$$- \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} \cdot \frac{1}{\beta} \cdot \left(\alpha' + \frac{F_{5/2}}{F_{3/2}} \right) \delta \alpha' d^3 x - \int \frac{\hat{\rho}}{\beta} \cdot \frac{F_{3/2} F_{1/2}}{F_{3/2}^2} \cdot \delta \alpha' d^3 x - e \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} V \delta \alpha' d^3 x + \frac{\alpha}{\beta} \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} \cdot \delta \alpha' d^3 x = 0 ,$$

de 2.41 se puede deducir

$$- \frac{1}{\beta} \cdot \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} = \frac{F_{1/2}}{F_{3/2}} ,$$

reemplazando en el cálculo de la variación y eliminando términos podemos obtener

$$- \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} \cdot \frac{\alpha'}{\beta} \delta \alpha' d^3 x - e \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} V \delta \alpha' d^3 x + \frac{\alpha}{\beta} \int \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \alpha'} \delta \alpha' d^3 x = 0 ,$$

de donde surge inmediatamente la condición de mínimo

$$\alpha'(z) = \alpha - \beta e V(z)$$

y finalmente reemplazando en 2.41

$$\hat{\rho} = \frac{2}{\lambda_{dB}^3} \cdot F_{3/2}(\alpha - \beta e V(z)) ,$$

obtenemos la misma expresión para $\hat{\rho}$ que con el método anterior (ver ecuación 2.37) e identificamos al potencial de Planck con el multiplicador de Lagrange α .

Obviamente el éxito del método de la Funcional Densidad depende de las hipótesis empleadas para la elección de la expresión para la funcional F en términos de la densidad $\hat{\rho}$. En ese sentido los dos métodos presentados aquí para deducir el modelo TF son equivalentes, pues ambos se respaldan en la misma hipótesis fundamental: la validez local de las expresiones del gas de Fermi-Dirac. Sin embargo el método de la Funcional Densidad describe el modelo TF dentro de un contexto más apropiado para la introducción de posteriores correcciones o modificaciones. Además deja planteada desde un principio la expresión de la energía libre F del modelo, la cual a su vez abre el camino para un cálculo directo de propiedades termodinámicas. En este último aspecto la expresión deducida para la energía libre F del modelo TF por M.K.Brachman^[37] integrando la ecuación de Gibbs-Helmholtz, es totalmente equivalente a la presentada en la fórmula 2.40.

Según puede verse en los trabajos de R.Latter^[38] y Geiger y colaboradores^[42], la solución del problema integrodiferencial autoconsistente que plantea el modelo TF a través de las expresiones 2.37, 2.38 y 2.39, más las condiciones de contorno anteriormente citadas, permite calcular todas las

propiedades termodinámicas de este modelo atómico estadístico sin estructura de capas, ya sea a través de la derivación directa de la energía libre F o con razonamientos más laboriosos como, por ejemplo, el que permite demostrar el Teorema de Virial para el modelo TF.

Nosotros hemos elaborado numéricamente los resultados del modelo TF, tabulados para cualquier Z por Geiger y colaboradores^[42]. A tal efecto utilizamos una subrutina de interpolación en dos dimensiones desarrolladas en base a la fórmula cuadrática bivariada de interpolación de Lagrange^[68], complementada, en los casos de variaciones rápidas, con una subrutina de interpolación basada en un algoritmo de función racional^[69].

En las Figs. 2.3 y 2.4 se muestra el gráfico tridimensional de la ionización en función de la densidad ρ (10^{-3} - 10^3 g cm^{-3}) y la temperatura T (10 - 10^4 eV) para Aluminio ($Z = 13.$, $\rho_0 \approx 2.3$ g cm^{-3}). Se entiende por ionización el número promedio de electrones libres por átomo. Teniendo en cuenta que en el modelo TF los electrones se comportan localmente como libres en el borde de la celda atómica (pues allí el campo eléctrico vale cero) se determina la ionización de la siguiente forma

$$N_F = \frac{4\pi}{3} R_0^3 \hat{\rho}(R_0) \quad \cdot \quad (2.42)$$

No podemos establecer una comparación entre los resultados que se muestran en las Figs. 2.3 y 2.4, y los correspondientes para el gas de Fermi-Dirac porque este es un modelo de ionización total, o sea $N_F = Z$ para todo ρ y T . Por lo tanto el modelo TF constituye nuestra primera solución al problema del cálculo de la ionización en función de la temperatura y densidad.

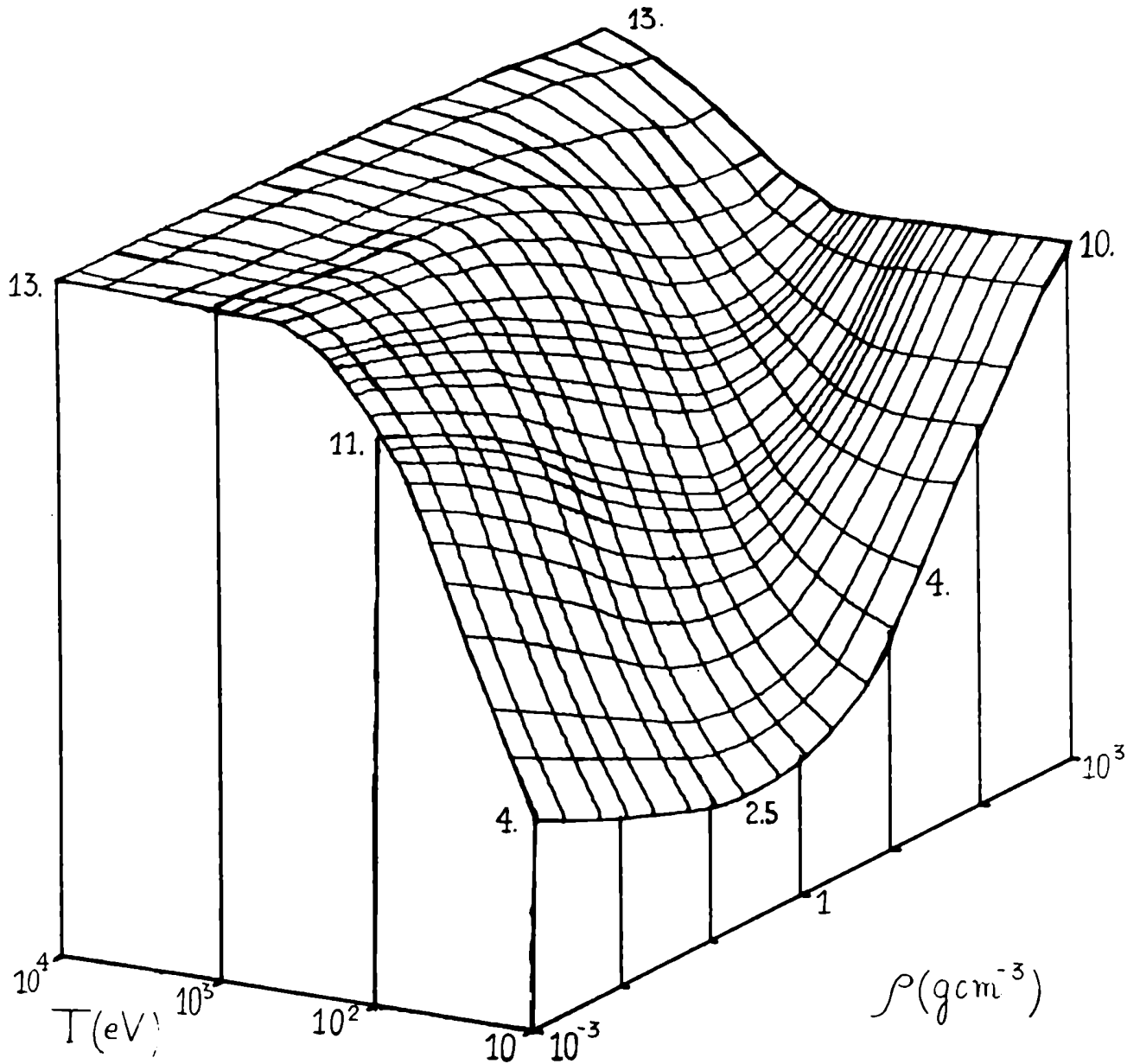
$$Al, N_F$$


Fig. 2.3: gráfico tridimensional de la ionización (N_F) en función de la temperatura (T) y la densidad (ρ), para el modelo de Thomas-Fermi .

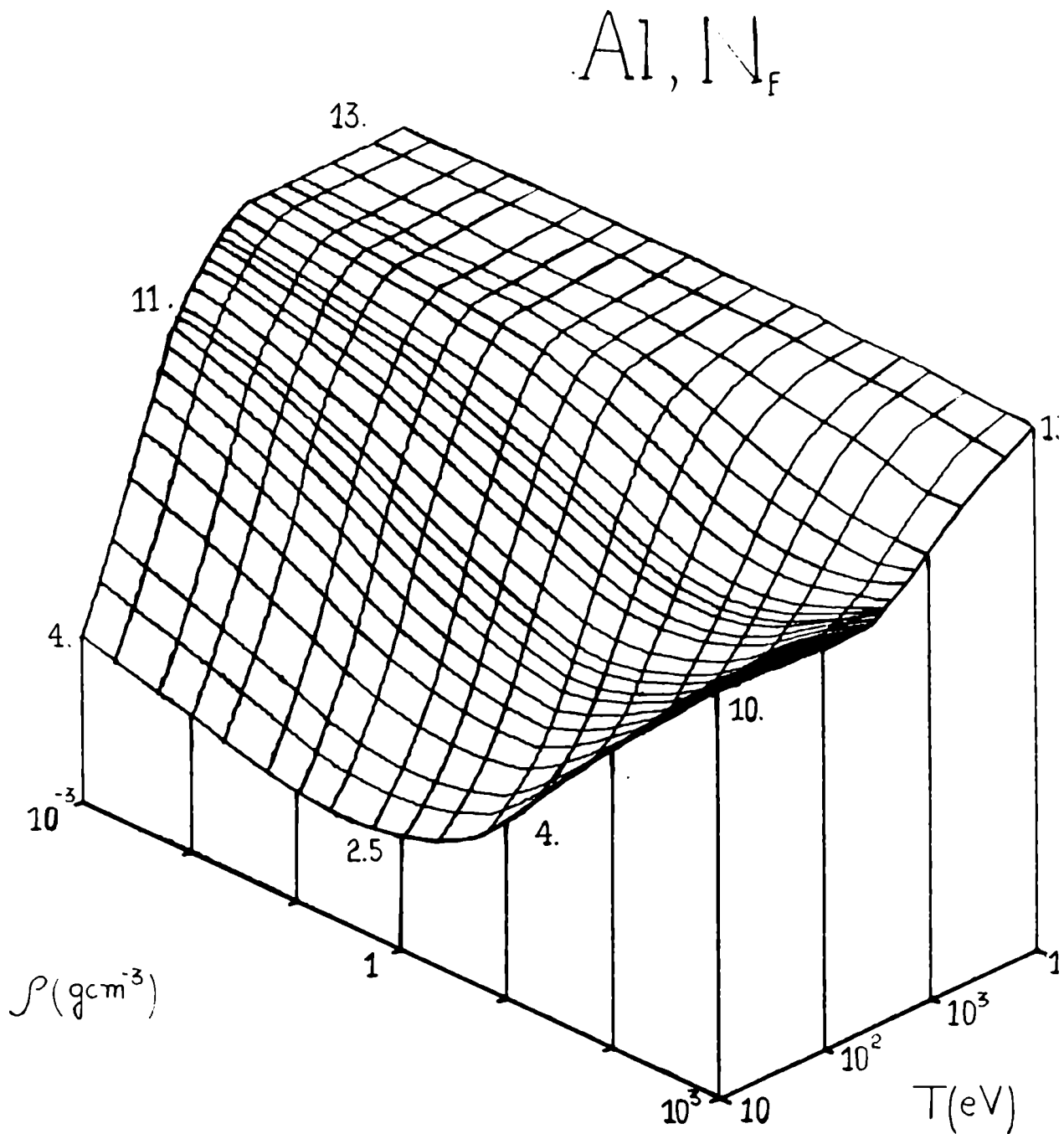


Fig. 2.4: idem Fig. 2.3 , pero vista desde otra visual .

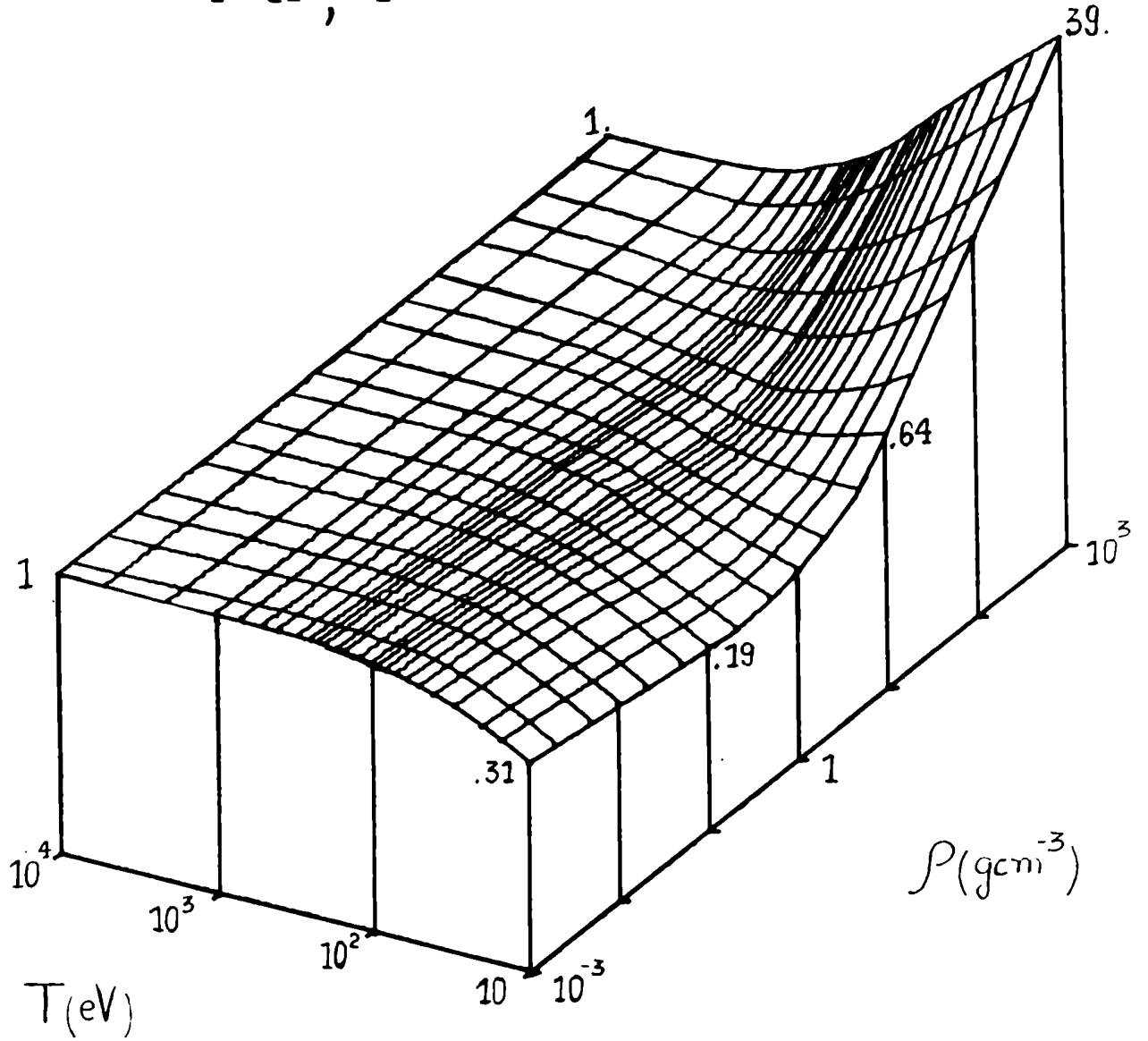
Al, P' 

Fig. 2.5: gráfico tridimensional de la presión (P'), normalizada a su valor como gas ideal clásico, en función de la temperatura (T) y la densidad (ρ) para el modelo de Thomas-Fermi.

Al, P'

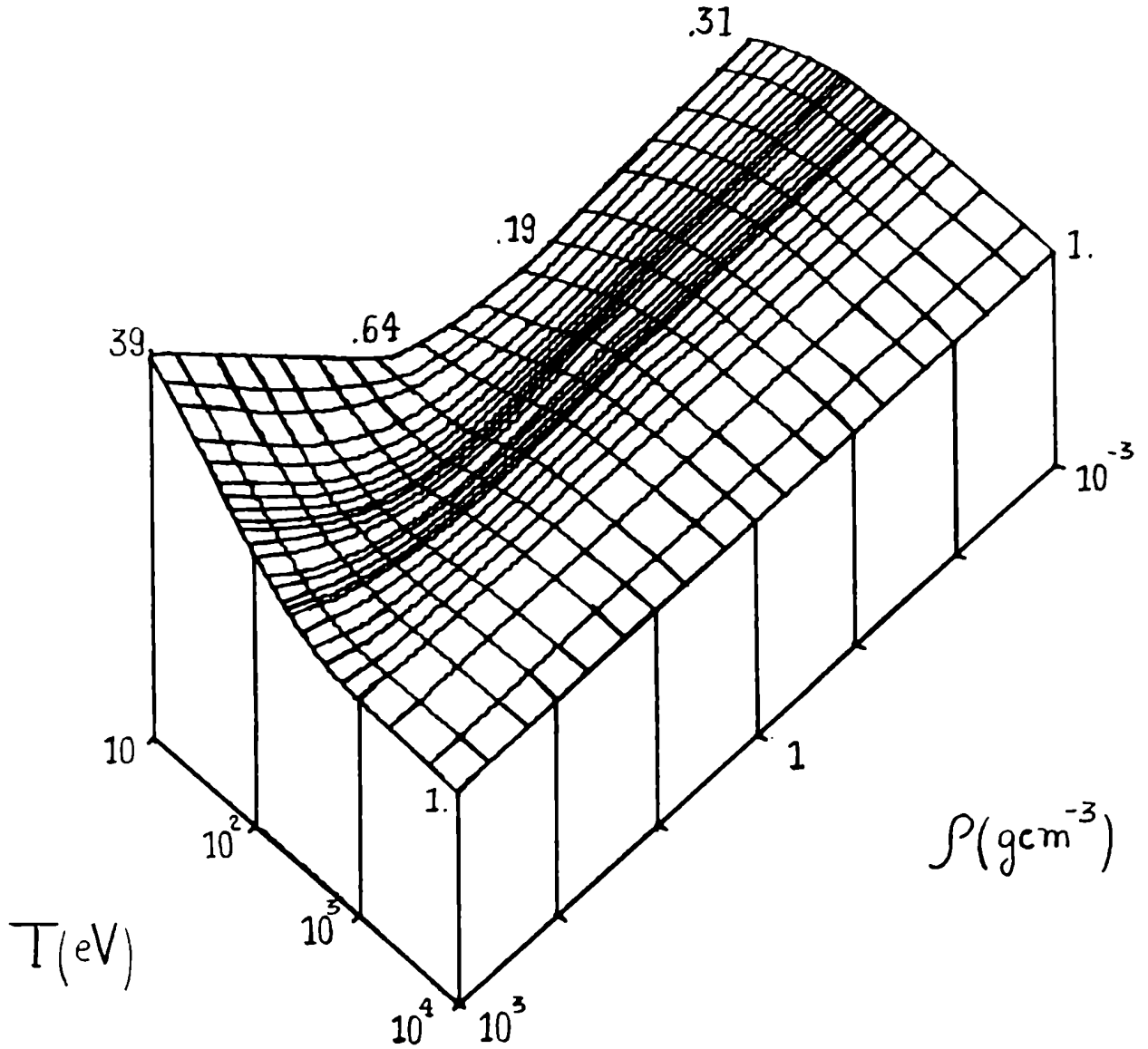


Fig. 2.6: idem Fig. 2.5 , pero vista desde otra visual .

En las Figs. 2.3 y 2.4 se distinguen claramente los dos tipos de ionización mencionados anteriormente; por temperatura y por presión. Entre estas dos situaciones la carga nuclear hace prevalecer su efecto atractivo sobre los electrones y el átomo recombina disminuyendo así su estado de ionización. Los cambios son suaves y, como era de esperar, no se refleja la presencia de la estructura de capas de los niveles atómicos.

En las Figs. 2.5 y 2.6 se muestran los resultados para el cálculo de la presión P , adimensionalizada de la misma manera que en el gas de Fermi-Dirac. El gráfico de la presión P está correlacionado con el de la ionización N_F . En la zona de ionización por temperatura los resultados convergen al gas ideal clásico, en la zona de ionización por presión los resultados tienden al gas de electrones degenerados de Fermi-Dirac. En la zona intermedia la carga nuclear impone su efecto atractivo y resta eficiencia al mecanismo de presión que los electrones ejercen sobre el contorno de la celda atómica.

B) Correcciones al modelo TF

Las primeras correcciones al modelo TF consistieron en la inclusión de los efectos de la interacción de intercambio entre electrones dando origen de esta forma al modelo de Thomas-Fermi-Dirac (TFD) [39,44]. Las consecuencias de estas correcciones resultan ser tanto más importantes cuanto más baja es la temperatura. Así, por ejemplo, las presiones, energías y entropías son del orden de un 40% más bajas que las del modelo TF a $T = 10$. eV, un 10% a $T = 100$. eV y los resultados tienen diferencias prácticamente despreciables a $T = 1000$. eV [39]. Los valores de la curva fría del Modelo TFD son mejores

que las del modelo TF^[41], Estos resultados pueden interpretarse desde el siguiente punto de vista; la inclusión del efecto de intercambio entre los electrones introduce un potencial atractivo adicional entre los mismos^[44],

Un inconveniente importante del modelo TF es que produce densidades $\hat{\rho}(r)$ divergentes en el origen como $(z/\pi)^{3/2}$ [62], aún a temperatura finita. Esta dificultad es una consecuencia directa de aceptar la validez local de las expresiones para un gas de electrones uniforme. Los primeros esfuerzos orientados hacia la solución del problema, especialmente en lo que se refiere a sus consecuencias en la determinación de la presión, fueron publicados en el año 1957 por D.A.Kirshnitz^[44] y se las conoce como correcciones por gradientes de densidad, dando origen posteriormente a lo que se denominó modelo de Thomas-Fermi-Kirshnitz (TFK).

Recientemente R.M.More^[45,62] y F.Perrot^[70] han reelaborado el modelo TF con las correcciones por intercambio, correlación y gradiente dentro del formalismo de la funcional densidad, introduciendo lo que hoy en día se conoce como la versión más moderna y precisa del modelo TF: el modelo QSM ("Quantum-Statistical-Model"). Entre otras cosas el modelo QSM mejora notablemente el cálculo de la curva fría y la energía total del átomo, produce perfiles finitos de $\hat{\rho}(r)$ en el origen y representa un buen esquema para su extensión relativista.

Más adelante realizaremos comparaciones con los resultados del modelo TF presentados en las Figs. 2.3 a 2.6, Pues a pesar de que las ecuaciones de estado de los modelos TFD y QSM son más concordantes entre sí que con respecto al modelo TF, en particular, en el rango de temperaturas considerado ($10 - 10^4$ eV), los resultados del modelo TF son de buena calidad,

Finalmente queremos destacar que los efectos de estructura de capas

para los niveles electrónicos fueron calculados por primera vez, dentro de los modelos de materia comprimida, en el año 1968 por J. W. Zink^[47]. La idea consistió esencialmente en resolver en forma consistente el modelo TF y la ecuación de Schrödinger con el potencial del modelo TF (modelo Thomas-Fermi-Shell, TFS). Si bien sus resultados constituyeron la primera aproximación al problema, confirmaron las expectativas en cuanto al comportamiento oscilante que en algunas magnitudes puede producir la presencia de la estructura discreta de niveles electrónicos.

La inclusión de la estructura de capas, dentro de un modelo de materia comprimida, puede inducir un comportamiento escalonado en la superficie de ionización. También es razonable esperar que en el calor específico C_V se produzcan máximos locales, asociados a la ionización de una determinada capa electrónica. Sin embargo no debe perderse de vista el efecto atenuante que el incremento de la compresión del material puede tener sobre esto, debido al ensanchamiento de niveles que el mismo lleva aparejado.

11.3.3 Modelos con estructura de capas

Hasta ahora nos hemos referido a modelos que no tienen en cuenta la estructura discreta de los niveles electrónicos dentro de un átomo, pero hemos llamado la atención sobre las posibles consecuencias que los mismos pueden tener en las propiedades termodinámicas, particularmente el calor específico C_V . Sin embargo la determinación de las poblaciones de los niveles ligados juntamente con sus energías de ligadura abre también las puertas al estudio de los espectros emitidos desde la materia densa y caliente, y al cálculo de la correspondiente contribución a la opacidad por transiciones entre y hacia los niveles ligados.

Estos temas forman parte de un conjunto más amplio que hoy en día se conoce como Propiedades Radiativas de la materia densa y caliente [61].

A) Modelo Autoconsistente para calcular las Poblaciones de los Niveles Ligados y el Estado de Ionización

Nos interesa desarrollar un modelo que permita calcular las poblaciones de los niveles electrónicos y el estado de ionización, teniendo en cuenta los dos mecanismos de ionización: por temperatura y por presión. También nos va a interesar inferir propiedades termodinámicas, para poder estimar cuantitativamente el efecto de la estructura de capas. La idea es que el modelo sea sencillo, pero que retenga las características físicas fundamentales del problema.

Consideramos que el átomo ocupa una cavidad esférica de volumen V y radio R_0 , función de la densidad del material tal cual lo expresa la fórmula 2.34,

$$V = \frac{4\pi}{3} R_0^3 = \frac{1}{\bar{n}} \quad , \quad \bar{n} = \frac{\rho}{Am_p} \quad ,$$

donde ρ es la densidad de masa del material, A su número másico y m_p , la masa del protón. Dentro de esta cavidad esférica, en cuyo centro ubicamos la carga nuclear Ze , coexisten en equilibrio termodinámico dos conjuntos de electrones: los libres y los ligados, en suficiente cantidad como para neutralizar la carga nuclear, o sea

$$N_B + N_F = Z \quad , \quad 2.43$$

donde N_B es el número total de electrones ligados y N_F es el de libres. Esto también significa que no hay flujo de partículas a través del volumen iónico V , lo que si puede haber es flujo de energía. Los electrones libres, que se suponen repartidos uniformemente en el volumen V , satisfacen las relaciones de un gas de Fermi-Dirac. La ecuación 2.43 representa una forma unívoca de determinar el estado de ionización

$$N_F = Z - N_B \quad ,$$

a diferencia de las distintas prescripciones que se pueden utilizar en los modelos sin estructura de capas [46].

Los electrones ligados se reparten en un número finito N de niveles discretos. Cada nivel discreto tiene asociado un índice entero i y se representa por los tres números cuánticos habituales $n_i l_i j_i$, un número de ocupación N_i , un nivel de energía E_i y una degeneración

$g_i = 2j_i + 1$. La cantidad de electrones ligados N_B se calcula en función del conjunto de poblaciones $\{N_i, i=1, \dots, N\}$, mediante

$$N_B = \sum_{i=1}^N N_i \quad (2.44)$$

La energía de cada nivel E_i depende de Z y, a través de la interacción con los demás niveles, de todo el conjunto de poblaciones $\{N_i\}$.

Es habitual en la determinación de niveles de energía autocoherentes representar esto a través de un conjunto de constantes de apantallamiento (σ_{ij}) o bien de energías de interacción (τ_{ij}) entre electrones del nivel i con el j [71-73]. Dada la naturaleza aproximada de este tratamiento no existe una única fórmula para el cálculo de E_i . Nosotros en particular hemos elegido la prescripción de W.F.Huebner [74-75], porque permite calcular directamente E_i en función de los tres números cuánticos n_i, l_i, j_i ("subshell splitting") y su relativa precisión. De acuerdo con Huebner la energía de ligadura de los electrones en iones, incluyendo el átomo neutro, en sus estados fundamental o excitado, se puede obtener perturbando las energías $E_i^{(n)}$ del átomo neutro en su estado fundamental. Estas se calculan con el método de Hartree-Fock y se perturban con las siguientes expresiones

$$E_i = E_i^{(n)} + \sum_{j=1}^N (N_j^{(n)} - N_j) \tau_{ij}, \quad i \leq l, \quad (2.45)$$

$$E_i = (E_l + \tau_{ll}) \left(\frac{n_l}{n_i} \right)^2 - \tau_{il}, \quad i > l, \quad (2.46)$$

donde $\{N_i\}$ es el conjunto de poblaciones de interés, $\{N_i^{(n)}\}$ las poblaciones del átomo en su estado neutro y fundamental, l es el máximo nivel poblado en el estado fundamental y τ_{ij} son las energías de interacción interpoladas de acuerdo al valor de Z y al conjunto $\{N_i\}$. La fórmula 2.46 representa una aproximación hidrogenoide corregida por interacción con la última capa llena del estado fundamental. Los datos necesarios de los cálculos de Hartree-

Fock pueden ser consultados en las referencias 74 y 75 para Z desde 1 hasta 30 y en las referencias 76 a 78 para el resto. En la Tabla 2.1 damos los datos correspondientes al aluminio ($Al, Z=13$) y al hierro ($Fe, Z=26$), elementos que presentaremos más adelante a modo de ejemplo.

Los niveles de energía E_i son poblados de acuerdo a la estadística de Fermi-Dirac

$$N_i = g_i / \{1 + \exp[\beta(-E_i + \Delta E) + \alpha]\}, \quad 1 \leq i \leq N. \quad (2.47)$$

La utilización de esta fórmula para calcular las poblaciones en este modelo y en todos los otros que, independientemente de su complejidad, no realizan un promedio estadístico canónico es lo que se conoce como Aproximación de Atomo Promedio y su razonable precisión en este tipo de modelos está respaldada por una gran cantidad de cálculos en diferentes elementos [62].

En la expresión 2.47 se ha incluido una corrección ΔE al nivel de energía E_i por depresión del continuo, o sea una disminución del cero de la escala de la energía debido a la interacción con los electrones libres del medio y los iones vecinos [79]. No existe en la literatura una única expresión para tener en cuenta esto, que podríamos catalogar como un efecto de densidad [62,73,79,80]. Nosotros la hemos tomado de la forma más simple que consiste en computarla como la energía electrostática por electrón, debido a una distribución uniforme de N_F electrones en un volumen esférico V de radio R_0 ,

$$\Delta E = \frac{3}{5} \cdot \frac{e^2 N_F}{R_0} \quad (2.48)$$

	i	$n l_j$	$E_i^{(n)}$	$N_i^{(n)}$	$G_{ii}^{(n)}$	$R_i^{(n)}$
ALUMINIO	1	$1s_{1/2}$	117.0	2	15.65	.1203
	2	$2s_{1/2}$	9.821	2	2.927	.6200
	3	$2p_{1/2}$	6.437	2	3.067	.6005
	4	$2p_{3/2}$	6.437	4	2.973	.6005
	5	$3s_{1/2}$.7868	2	.6968	2.5993
	6	$3p_{1/2}$.4199	1	.5289	3.4339
HIERRO	1	$1s_{1/2}$	522.8	2	31.79	.0591
	2	$2s_{1/2}$	63.93	2	6.739	.2685
	3	$2p_{1/2}$	54.89	2	7.734	.2361
	4	$2p_{3/2}$	54.89	4	7.491	.2361
	5	$3s_{1/2}$	8.378	2	2.202	.8184
	6	$3p_{1/2}$	5.521	2	2.092	.8647
	7	$3p_{3/2}$	5.521	4	2.022	.8647
	8	$3d_{3/2}$	1.216	4	1.666	1.0848
	9	$3d_{5/2}$	1.216	2	1.673	1.0848
	10	$4s_{1/2}$.5203	2	.5592	3.2416

Tabla 2.1: $E_i^{(n)}$, $N_i^{(n)}$ y $G_{ii}^{(n)}$ para Al y Fe . $E_i^{(n)}$ y $G_{ii}^{(n)}$ están en Rydbergs . Las $G_{ii}^{(n)}$ son las energías de autointeracción del átomo neutro . Los radios de los orbitales están en unidades de radios de Bohr .

Intimamente ligado con la depresión del continuo está el problema de la ionización por presión. A medida que se incrementa la densidad ρ los niveles de radios orbitales R_i más alejados del núcleo se ven fuertemente alterados, y a medida que se acercan al contorno de la celda atómica van transformándose gradualmente en bandas de energía. De la misma manera sus funciones de onda dejan de estar bien localizadas en un átomo y el electrón comienza a incursionar por los átomos vecinos terminando finalmente en los niveles del continuo y su función de onda degenera en un frente de onda plano. Una forma sencilla de reflejar este efecto es considerar una degeneración variable del nivel, función de la densidad, que lo vaya despoblando a medida que su radio orbital R_i se acerca al radio de la celda atómica R_0 [72,80]. Una manera natural de implementar esta idea consiste en calcular el factor de penetración de la barrera de potencial entre átomos en la aproximación WKB. En la Fig. 2.7 se muestra una aproximación parabólica a la barrera de potencial Coulombiano entre átomos, y el esquema sobre el cual se realiza el cálculo. De acuerdo a la aproximación WKB el factor de penetración P de barrera vale

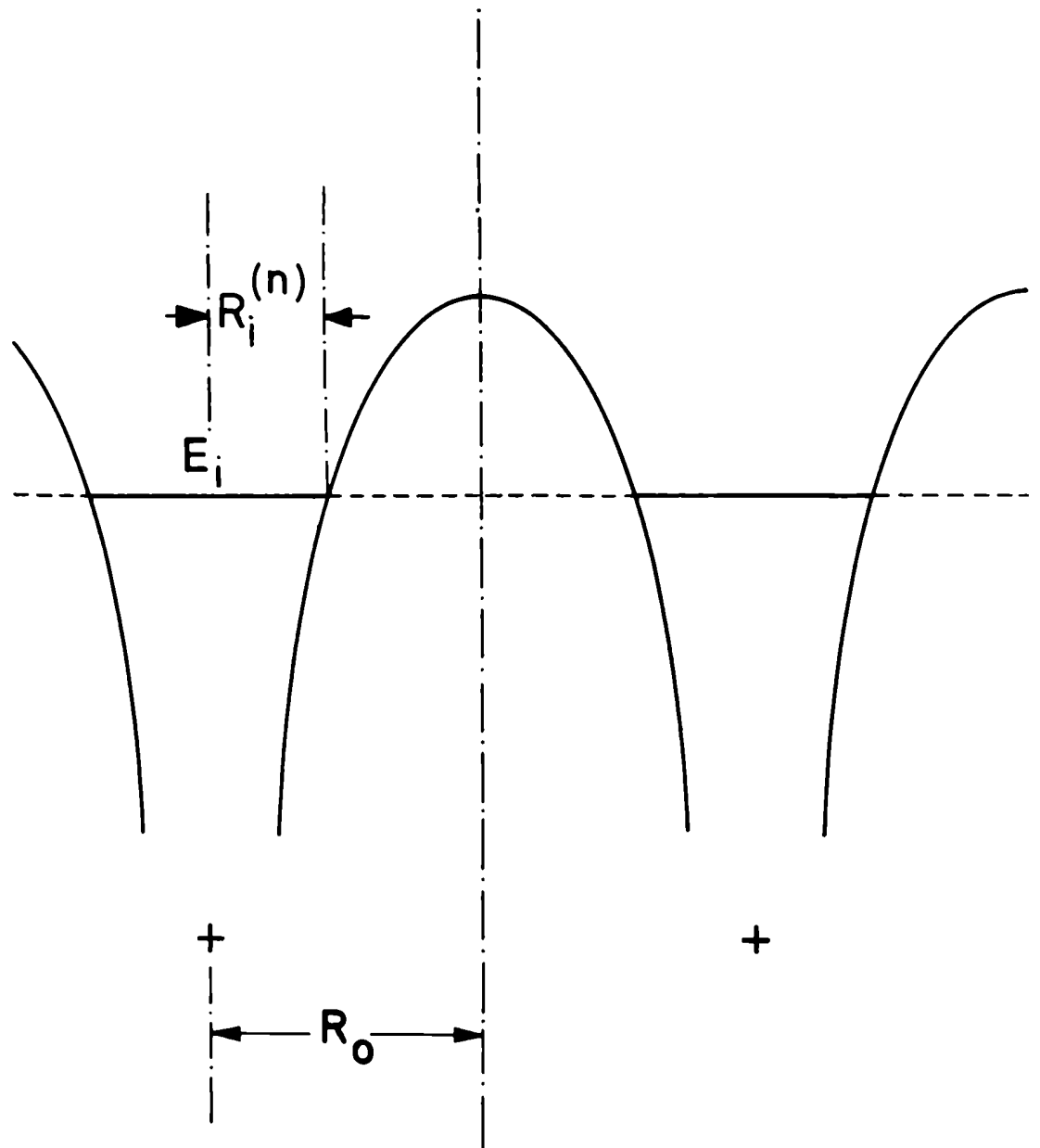
$$P = \int_{-F}^F K dx' ,$$

donde

$$K = \sqrt{U - E} = \sqrt{E_i^{(m)}} \cdot \sqrt{\left(\frac{F}{R_0}\right)^2 - \left(\frac{x'}{R_0}\right)^2} ,$$

realizando la integración se obtiene

$$P = \exp \left[-\pi \sqrt{E_i^{(m)}} R_0 (1-x)^2 \right] = P_i ,$$



Aproximación parabólica : $E_i = E_i^{(n)} (\xi / R_0)^2$,
 $\xi = R_0 - R_i^{(n)}$

Fig. 2.7: esquema ilustrativo de la aproximación parabólica a la barrera de potencial Coulombiano entre átomos , utilizada para hacer el cálculo del factor de penetración P .

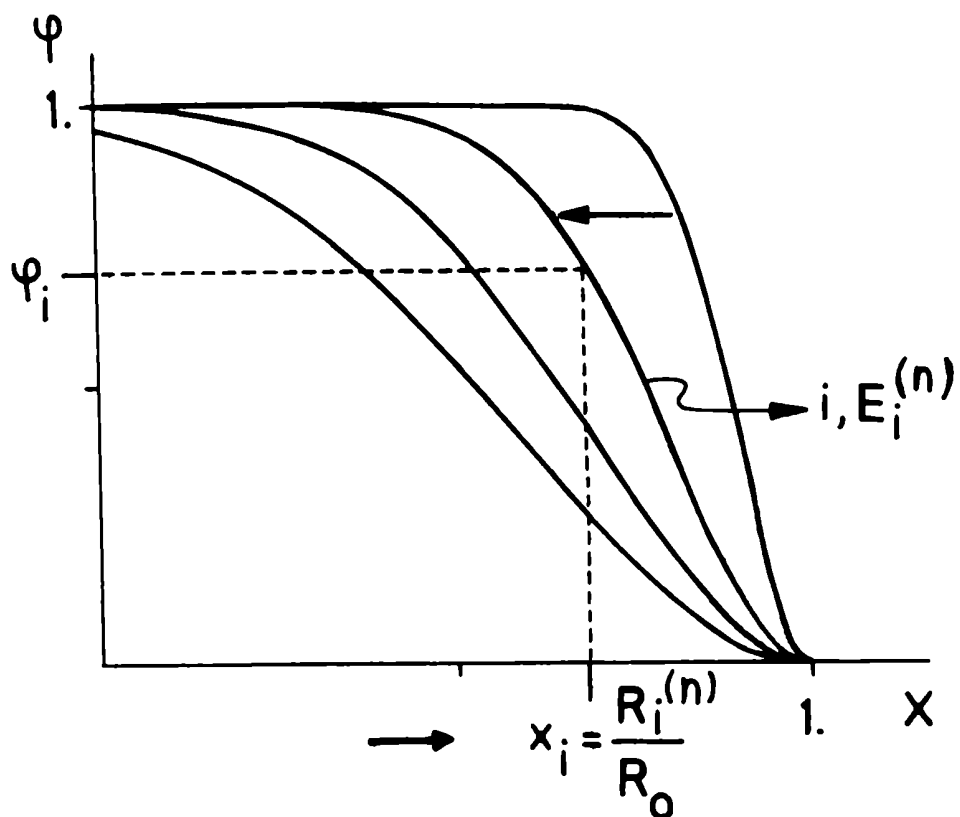


Fig. 2.8: gráficos del factor de depoblación ψ en función de X . A cada nivel i de energía $E_i^{(n)}$ le corresponde una curva determinada, sobre la cual, dado el valor de x_i , se calcula ψ_i . La flecha sobre las curvas indica el sentido decreciente en $E_i^{(n)}$ (niveles menos ligados), que se corresponde con el sentido creciente en x_i (niveles localizados más cerca del contorno de la celda atómica).

$$X = \frac{R_i^{(n)}}{R_0} = X_i(\rho) \quad ,$$

con $E_i^{(n)}$ en Rydbergs y R_0 en unidades de radios de Bohr. En base a P definimos el factor de despoblación φ del nivel i -ésimo de acuerdo a

$$\begin{aligned} \varphi = \varphi_i &= 1 - P_i \quad , \quad X_i \leq 1 \quad , \\ \varphi = \varphi_i &= 0 \quad , \quad X_i > 1 \end{aligned} \quad (2.49)$$

Este factor de despoblación $\varphi = \varphi(x)$ tiene un perfil de tipo Gaussiano, que en $X = 1$ (o sea en el borde del átomo) empalma con cero en valor y en derivada. En la Fig. 2.8 mostramos algunas curvas que ejemplifican el comportamiento de $\varphi(x)$. Debe notarse que para cada nivel corresponde una curva de φ distinta ya que la dispersión de la Gaussiana es proporcional a $[E_i^{(n)}]^{-1/2}$. Esto indica que la despoblación del nivel se produce en forma gradual por dos motivos, que son consistentes entre sí: cuanto más cerca está X del valor 1 (o sea cuanto más alejado está el orbital del núcleo), tanto más se acerca el argumento de la exponencial a cero y por lo tanto φ también. Pero simultáneamente a medida que el orbital se aleja del núcleo disminuye su energía de ligadura aumentando la dispersión de la Gaussiana, con lo cual el φ decae más rápido.

R.M. More [62,80,83] ha propuesto para un modelo de características similares basándose en un argumento de despoblación gradual del nivel, la siguiente expresión para el factor de despoblación

$$\varphi = 1 / [1 + (ax)^b] \quad , \quad (2.50)$$

donde a y b son dos parámetros que se ajustan de manera que los resultados concuerden lo mejor posible con los resultados para el estado de ionización del modelo TF. Evidentemente nuestro resultado responde a las características generales de la fórmula 2.50, tiene en cuenta, aparte de la ubicación del nivel, su energía y se puede deducir con argumentos físicos razonables sin dejar librado ningún parámetro a un ajuste posterior. En base a lo expuesto podemos reescribir la expresión 2.47 de la siguiente manera

$$N_i = \varphi_i g_i / \{ 1 + \exp[\beta(-E_i + \Delta E) + \alpha] \}, \quad 1 \leq i \leq N. \quad (2.51)$$

Finalmente para completar las ecuaciones del modelo reescribimos la expresión 2.29 del gas de Fermi-Dirac para el conjunto de electrones libres N_F

$$N_F = \text{cte } R_0^3 T^{3/2} F_{3/2}(\alpha) \quad (2.52)$$

Las ecuaciones 2.43, 2.44, 2.45, 2.46, 2.48, 2.49, 2.51 y 2.52 son las ecuaciones del modelo presentado y constituyen un problema autoconsistente que implica la resolución de un sistema de ecuaciones algebraico altamente no lineal. En la literatura se pueden encontrar referencias a los serios problemas de convergencia numérica que representa determinar los niveles de energía en forma consistente con los números de ocupación en sistemas como los descritos por las ecuaciones 2.51, 2.45 y 2.46, especialmente cuando la cantidad de electrones ligados N_B es grande. Son frecuentes las oscilaciones numéricas en los niveles cercanos al umbral de ionización^[71,72,80]. Estos problemas

pueden ser particularmente importantes en nuestro caso donde los niveles están discretizados en función de los tres números cuánticos $n l j$, a diferencia de otros modelos [62,80] en los que sólo se tiene en cuenta el número cuántico principal n e incluso se pueden seleccionar los valores de los parámetros a y b en la fórmula 2.50 para favorecer la convergencia numérica.

Teniendo en cuenta estos antecedentes hemos desarrollado un eficiente algoritmo de cálculo, que nos ha permitido resolver numéricamente nuestro modelo aún en situaciones de átomo casi neutro. La idea del algoritmo pasa por observar que dado el aspecto del sistema de ecuaciones 2.51, el mismo induce a resolverlo mediante un método de sobre-relajación sucesiva utilizando un vector de parámetros de relajación de componentes $\{\omega_i, 1 \leq i \leq N\}$. En la Fig. 2.9 se muestra un esquema del algoritmo. Se comienza con un conjunto $\{N_i\}$ de prueba y se itera sobre el sistema calculando de a una ecuación por vez. Una vez obtenido N_i^1 para seguir adelante se construye un promedio pesado N_i'' en función de N_i, N_i^1 , y el parámetro ω_i . Con este nuevo valor del nivel i -ésimo se calcula N_B y se controla la condición $N_B < Z$. Si se verifica, se determina N_F , luego α por inversión de $F_{3/2}(\alpha)$ en 2.52 y se pasa al nivel $i+1$ con el conjunto $\{N_i\}$ actualizado en el último nivel i -ésimo calculado. Si la condición no se verifica esto indica que ese nivel tiende a poblarse demasiado, por lo tanto despejamos α a través de su población N_i y energía E_i y calculamos N_F en 2.52 con este α . Calculamos N_B por diferencia y el nuevo N_i en función del resto de los niveles. Finalmente reducimos ω_i a $\omega_i/2$ para retener la información de que ese nivel es sensible a poblarse excesivamente.

Para garantizar la convergencia se pide que todas las variaciones

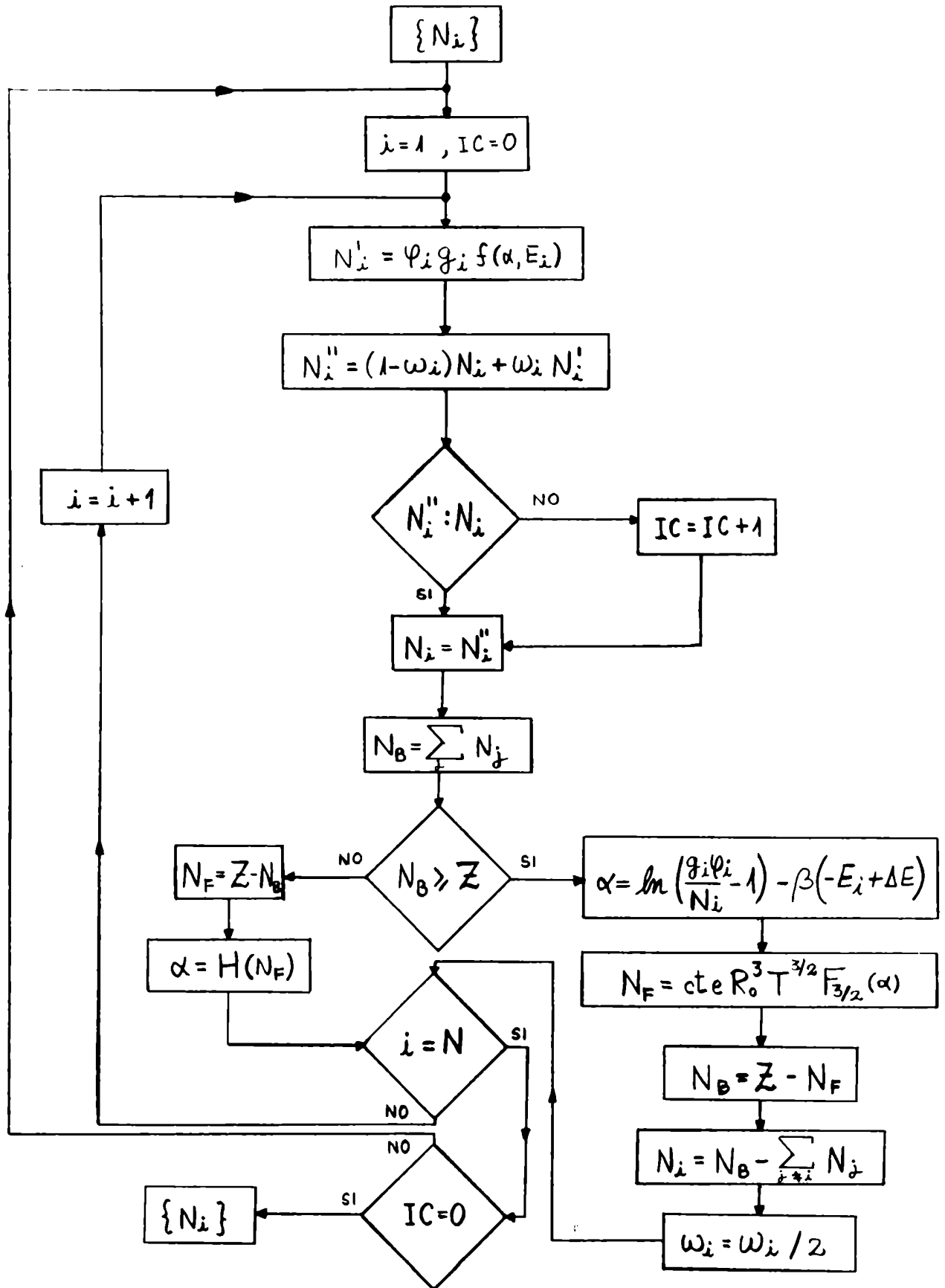


Fig. 2.9: esquema del algoritmo desarrollado para determinar los niveles y las poblaciones del modelo autoconsistente. Con IC se indica el índice de control de convergencia.

relativas de los números de ocupación N_i , al cabo de una iteración completa sobre todo el sistema de ecuaciones 2.51, estén por debajo de cierta cota (típicamente 10^{-3}) y que esto suceda por lo menos dos veces seguidas. La cantidad de iteraciones globales sobre todo el sistema para alcanzar la convergencia depende de los valores de densidad ρ y temperatura T del caso, pero puede decirse que en los casos de convergencia más lenta (habitualmente a baja T y más aun si hay ionización por presión) están entre 10 y 15. En otros casos el algoritmo converge en pocas iteraciones.

En las Tablas 2.2, 2.3 y 2.4 presentamos las poblaciones (N_i), niveles de energía (E_i), cantidad de electrones libres y ligados (N_F y N_B) y el potencial de Planck (α) para el Fe a $T = 100$. eV y a $\rho = .785, 7.85$ y 157 . g cm^{-3} . La densidad normal del Fe es $\rho_0 = 7.85 \text{ g cm}^{-3}$. En las mismas tablas también se han ubicado los correspondientes valores publicados por B.F.Rozsnyai^[48] calculados con un modelo de tipo Hartree-Fock-Slater relativista (HFS). Este modelo considera en forma simultánea y consistente los electrones libres con un formalismo TFD y los ligados a través de la ecuación de Schrödinger en la aproximación de campo autoconsistente con el potencial TFD. El ensanchamiento de niveles, debido al efecto de la densidad finita del material, es tenido en cuenta, en forma aproximada, a través de las condiciones de contorno que se imponen en el borde de la celda atómica, para la solución de la parte radial de la función de onda del nivel. Los supraíndices L y U se refieren a los extremos inferior y superior de la banda de energía asociada al nivel. También se hace uso de la hipótesis de Aproximación de Atomo Promedio.

Si comparamos los resultados obtenidos con los de Rozsnyai, vemos que hay muy buena concordancia en N_F , N_B y α . En el detalle de la estruc-

Fe^{26} , $k_B T = 100. \text{ eV}$, $\rho = .1 \rho_0 = .785 \text{ g cm}^{-3}$						
i	$n l_j$	φ_i	N_i		$-E_i \text{ (Ry)}$	
			Aquf	Ref. 48	Aquf (*)	Ref. 48
1	$1s_{1/2}$	1.	2.	2.	-552.9	-546.9
2	$2s_{1/2}$	1.	1.999	1.999	-89.4	-84.2
3	$2p_{1/2}$	1.	1.998	1.996	-81.2	-76.4
4	$2p_{3/2}$	1.	3.996	3.99	-81.4	-75.6
5	$3s_{1/2}$	1.	.634	.481	-24.7	-22.7
6	$3p_{1/2}$	1.	.512	.371	-22.5	-20.3
7	$3p_{3/2}$	1.	1.034	.726	-22.6	-20.1
8	$3d_{3/2}$	1.	.561	.48	-17.0	-16.5
9	$3d_{5/2}$	1.	.78	.717	-16.4	-16.4
10	$4s_{1/2}$.92	.074	.075	-7.03	-7.26
11	$4p_{1/2}$.76	.060	.066	-6.82	-6.34
12	$4p_{3/2}$.76	.120	.132	-6.82	-6.28
13	$4d_{3/2}$.76	.119	.110	-6.80	-4.92
14	$4d_{5/2}$.76	.179	.165	-6.80	-4.90
15	$4f_{5/2}$.76	.179	.140	-6.78	-3.68
16	$4f_{7/2}$.76	.238	.187	-6.78	-3.68
17	$5s_{1/2}$	0.	-	.040	-	-1.95
18	$5p_{1/2}$	0.	-	.040	-	-1.55
19	$5p_{3/2}$	0.	-	.070	-	-1.53

20	$5d_{3/2}$	0.	-	.065	-	-.95
21	$5d_{5/2}$	0.	-	.100	-	-.94
22	$5f_{5/2}$	0.	-	.090	-	-.42
23	$5f_{7/2}$	0.	-	.121	-	-.42

N_B	14.5	14.2
N_F	11.5	11.8
α	4.13	4.23

ΔE (Ry)	2.4
-----------------	-----

(* , estos valores incluyen la depresión del continuo ΔE)

Tabla 2.2

Fe^{26} , $k_B T = 100. \text{ eV}$, $\rho = \rho_0 = 7.85 \text{ g cm}^{-3}$						
i	$n l_j$	φ_i	N_i		$-E_i$ (Ry)	
			Aquí	Ref. 48	Aquí (*)	Ref. 48
1	$1s_{1/2}$	1.	2.	2.	-539.6	-532.0
2	$2s_{1/2}$	1.	2.	1.999	-77.7	-71.5
3	$2p_{1/2}$	1.	1.999	1.997	-69.1	-63.7
4	$2p_{3/2}$	1.	3.998	3.994	-69.3	-62.7
5	$3s_{1/2}$	1.	1.1	.851	-16.1	-13.0
6	$3p_{1/2}$.99	.926	.691	-13.5	-10.6
7	$3p_{3/2}$.99	1.87	1.361	-13.7	-10.4
8	$3d_{3/2}$.96	1.119	.929	-8.06	-6.47
9	$3d_{5/2}$.96	1.595	1.389	-7.53	-6.44
10	$4s_{1/2}^L$	0.	-	.971	-	-1.07
11	$4p_{1/2}^L$	0.	-	.044	-	-.37
12	$4p_{3/2}^L$	0.	-	.088	-	-.35
-	$4s_{1/2}^U$	0.	-	.141	-	-.22

N_B	16.6	16.5
N_F	9.4	9.5
α	1.99	2.08

ΔE (Ry)	4.2
-----------------	-----

(* , estos valores incluyen la depresión del continuo ΔE)

Tabla 2.3

$Fe^{26}, k_B T = 100. \text{ eV}, \rho = 20 \rho_0 = 157. \text{ g cm}^{-3}$						
i	nlj	φ_i	N_i		$-E_i$ (Ry)	
			Aquí	Ref. 48	Aquí (*)	Ref. 48
1	1s _{1/2}	1.	2.	2.	-528.4	-508.4
2	2s _{1/2}	1.	2.	2.	-65.5	-50.5
3	2p _{1/2}	1.	2.	1.999	-57.2	-42.3
4	2p _{3/2}	1.	4.	3.998	-57.1	-41.4
5	3s _{1/2} ^L	.23	.442	.261	-4.43	-3.07
6	3p _{1/2} ^L	.10	.200	.002	-2.32	-0.19
7	3p _{3/2} ^L	.10	.400	.004	-2.16	-0.07

N_B	11.	10.3
N_F	15.	15.7
α	-2.82	-2.05

ΔE (Ry)	18.2
-----------------	------

(* , estos valores incluyen la depresión del continuo ΔE)

Tabla 2.4

tura discreta, los valores de E_i y N_i son buenos y las principales diferencias surgen en los niveles más excitados, que es justamente donde se espera que eso ocurra debido a la diferencia en el tratamiento de la transferencia gradual de estos niveles al continuo. De todas formas las tendencias generales son las mismas.

Hay algunos trabajos que han tratado de evitar la hipótesis de Aproximación de Atomo Promedio para resolver la Mecánica Estadística de los electrones en átomos inmersos en plasmas densos y calientes, mediante la realización de algún tipo de promedio estadístico canónico o bien algo equivalente. En este sentido podemos citar el trabajo pionero de J.M.Green en el año 1964 ^[81] que desarrolló un formalismo de operadores para obtener expresiones simbólicas exactas de los números de ocupación. También podemos mencionar el reciente trabajo de Grimaldi & Grimaldi-Lecourt ^[82] basado en el estudio de la distribución de probabilidad de las fluctuaciones en la población de un determinado nivel a partir de un valor inicial (obtenido de la solución de la ecuación de Schrödinger con un potencial autoconsistente en la Aproximación de Atomo Promedio), teniendo en cuenta las fluctuaciones correlacionadas del resto de los niveles.

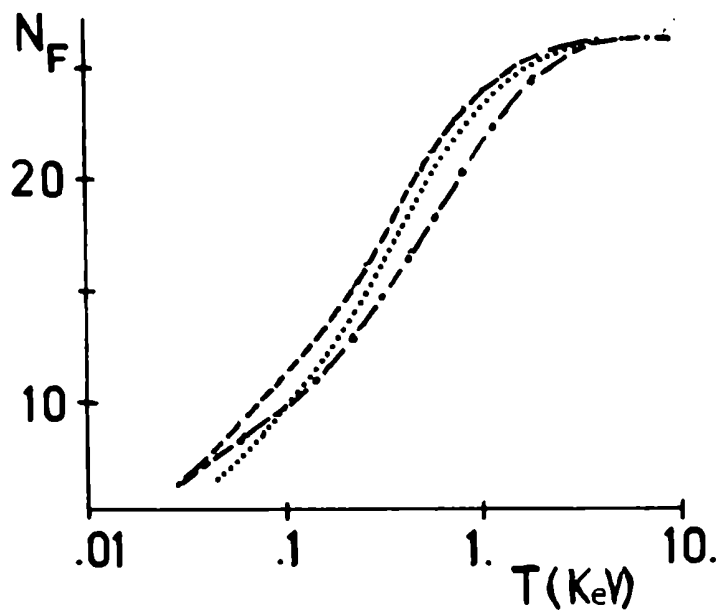
Resulta interesante entonces, realizar alguna comparación de nuestros resultados contra los de este tipo de trabajos. En la Fig. 2.10, por ejemplo, hemos reproducido los gráficos de Grimaldi & Grimaldi-Lecourt ^[82] para el estado de ionización y la población de algunos de los niveles ligados del F_e a densidad normal en función de la temperatura, que muestran los resultados con la hipótesis de Modelo Atómico Promedio y los obtenidos teniendo en cuenta las fluctuaciones correlacionadas de niveles. En los mismos gráficos hemos ubicado los resultados de nuestro cálculo, que, como se puede

apreciar, se ubican entre los otros dos, acercándose a medida que baja la temperatura a los de fluctuaciones correlacionadas. Podemos concluir que nuestros resultados son satisfactorios y que el detallado esquema de energías de interacción utilizado para calcular los niveles de energía (en función de los tres números cuánticos $n l j$) pone de manifiesto, en alguna medida, la correlación entre poblaciones provocada por la interacción entre electrones.

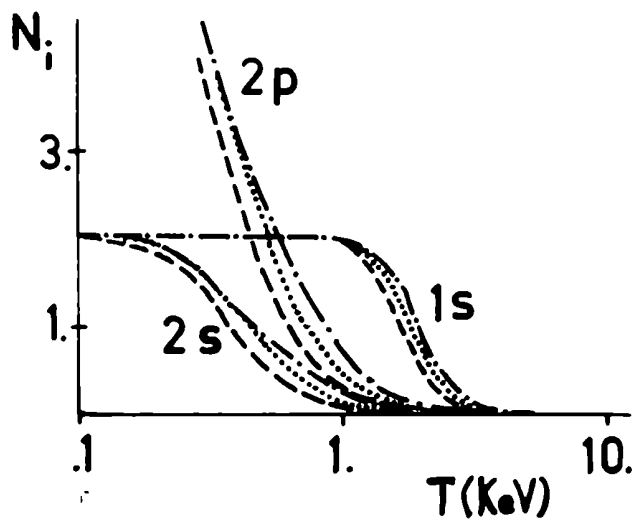
En las Fig. 2.11 y 2.12 mostramos la superficie de ionización para Al en un rango amplio de temperatura y densidad ($\rho : 10^{-3} - 10^3 \text{ g cm}^{-3}$, $T : 10 - 10^4 \text{ eV}$). Esta visión global de la misma permite visualizar claramente los efectos de la estructura de capas, si se la compara con su homóloga del modelo TF (Fig. 2.3 y 2.4). Se puede observar que la estructura de niveles discretos introduce un comportamiento escalonado en la ionización por temperatura, que se atenúa con el incremento de la densidad. La ionización por presión presenta un comportamiento de características semejantes, pero más moderadas, que, en este caso, se atenúan con el incremento de la temperatura. En las Fig. 2.15, 2.16 y 2.17 se puede ver en detalle la evolución del comportamiento de la ionización por temperatura para tres valores de la densidad (10^{-3} , 1, 10^3 g cm^{-3}). La estructura de capas induce un comportamiento relativo oscilante respecto del modelo TF en el sector de baja a moderada densidad. Los valores concuerdan en general bien (dentro del 10%), salvo en el sector de baja temperatura y alta recombinación, donde la estructura discreta de niveles provoca diferencias más importantes.

Finalmente queremos mencionar que el modelo de ionización presentado aquí tiene características similares al propuesto por R.M. More [62, 80, 83], del cual nos separan principalmente los siguientes aspectos

- 1- Se considera el conjunto completo de números cuánticos $n l j$ para



(a)



(b)

Fig. 2.10: ionización (N_F ,a) y población de niveles ligados (N_i ,b) en función de la temperatura T para el hierro (Fe) a densidad normal $\rho = \rho_0$. Resultados de Grimaldi y Grimaldi-Lecourt (ref. 82) con (---) y sin (-.-.-) Aproximación de Atomo Promedio, y nuestros resultados (.....).

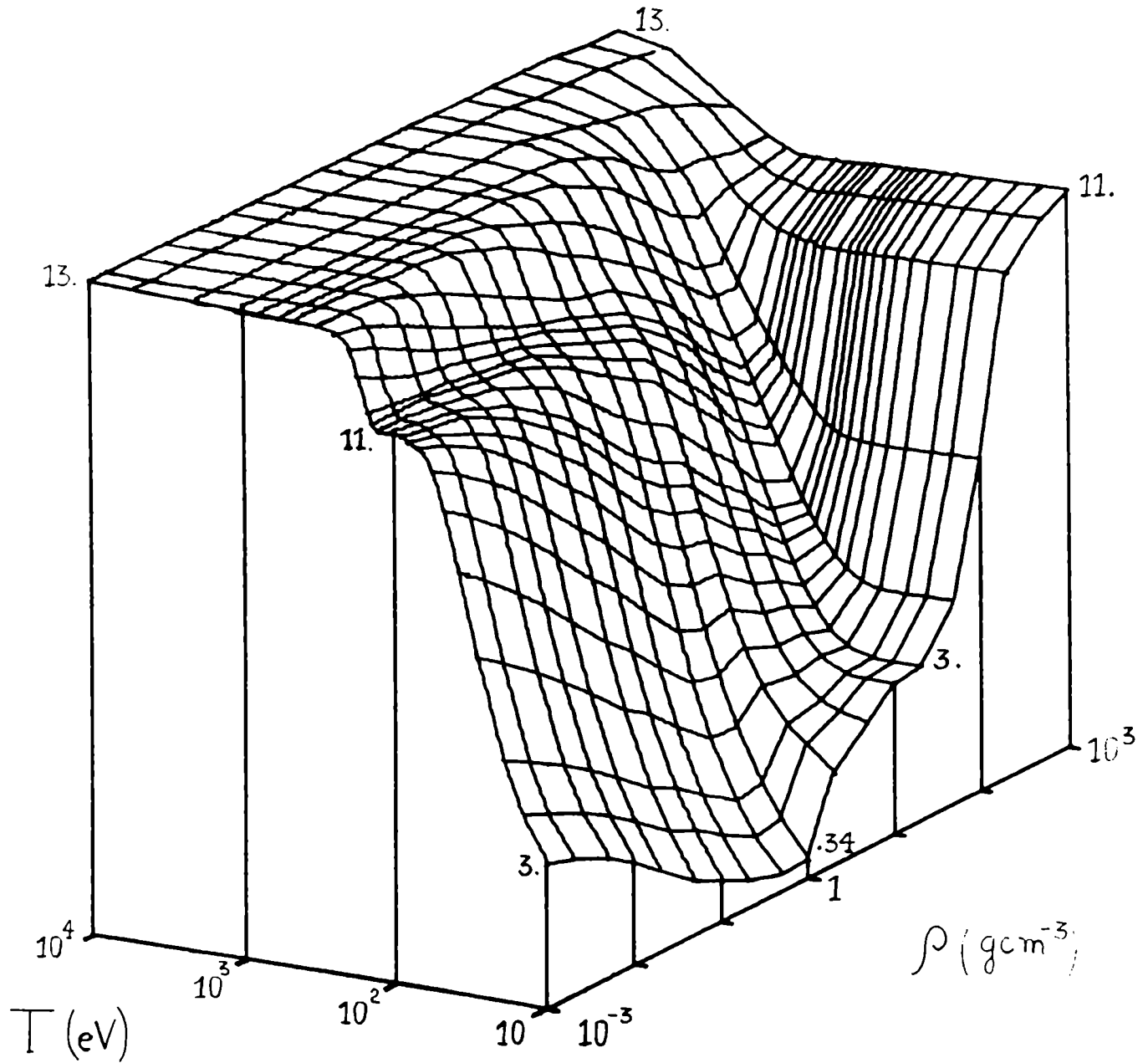
$$Al, N_F$$


Fig. 2.11: gráfico tridimensional de la ionización (N_F) en función de la temperatura (T) y la densidad (ρ), para el modelo autoconsistente desarrollado en este trabajo.

Al, N_F

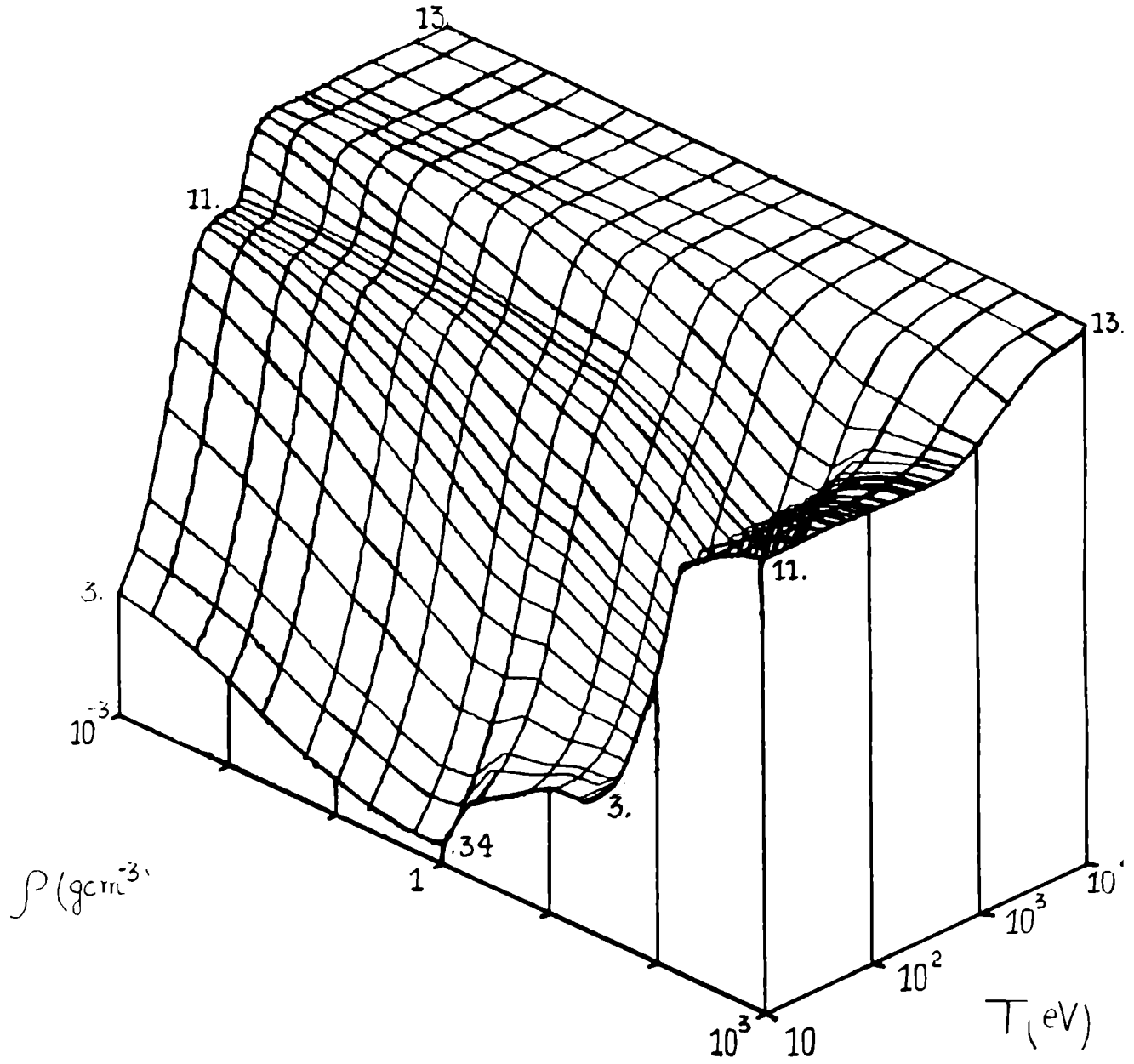


Fig. 2.12: idem Fig. 2.11 , pero vista desde otra visual .

para representar cada nivel discreto ("subshell-splitting").

- 2- Se usa un esquema más elaborado de energías de interacción \mathcal{C}_{ij} para calcular las energías de ligadura E_i .
- 3- Proponemos una interpretación razonable para el factor de despo- blación Ψ que nos permite calcularlo sin dejar parámetros li- brados a una determinación posterior.
- 4- Obtenemos una función $\Psi(x)$ de aspecto apropiado.
- 5- Hemos desarrollado un eficiente algoritmo de cálculo, que permi- te extender el modelo hasta situaciones de alto grado de recom- binación.

B- Determinación de Magnitudes Termodinámicas

La deducción de las magnitudes termodinámicas de interés en el mo- delo de ionización que hemos presentado se puede realizar a través de una ex- presión para la energía libre total del sistema F_T , que resulte consisten- te con las hipótesis del modelo. Para ello proponemos

$$F_T = F_I + F_F + \Delta F_{DC} \quad (2.53)$$

siendo F_I la contribución de los N_B electrones ligados en los N niveles discretos del ión, F_F la de los N_F electrones libres (fórmula 2.31) y ΔF_{DC} la debida a la corrección por depresión del continuo. Las expresiones que utilizamos son

$$F_I = E_I - T S_I \quad , \quad (2.54)$$

$$N_i = D_i f_i \quad , \quad i=1, \dots, N \quad , \quad (2.55)$$

$$S_I = -K_B \sum_{i=1}^N D_i \left[f_i \ln f_i + (1-f_i) \ln(1-f_i) \right] , \quad (2.56)$$

$$E_I = E_I(\{N_i, i=1, \dots, N\}, \text{parámetros}) ,$$

$$\Delta F_{DC} = -\frac{3}{10} \cdot \frac{N_F^2 e^2}{R_0} \quad (2.57)$$

Hemos introducido la fracción de ocupación f_i del nivel i -ésimo de manera que su población N_i se escribe como el producto de f_i con D_i , que es la degeneración ($D_i = \varphi_i g_i$). S_I y E_I representan la entropía y energía del ión respectivamente. Con el tipo de esquema utilizado para calcular las energías de ligadura E_i , la energía E_I debe ser una función del conjunto de números de ocupación $\{N_i, i=1, \dots, N\}$ y de un conjunto de parámetros, entre los que podemos citar las energías de interacción σ_{ij} , la carga nuclear Z , etc. No debe pensarse que E_I es simplemente la suma sobre todos los niveles de la energía de ligadura por electrón E_i por la población N_i del nivel ($\sum_{i=1}^N E_i f_i D_i$), pues esto conduce a contar dos veces la contribución a E_I proveniente de la energía de interacción entre electrones^[62,83]. Sin embargo es importante que entre E_I y la energía del nivel i -ésimo E_i se verifique la siguiente relación de consistencia

$$-\frac{\partial E_I}{\partial N_i} = E_i , \quad (2.58)$$

que se puede interpretar como el equivalente del teorema de Koopman, de uso habitual en el cálculo de estructura atómica^[84]. Por otro lado la condición 2.58 es también importante para poder justificar las deducciones termodinámicas que haremos más adelante. Queremos destacar también que no resulta fácil,

con el esquema de cálculo elegido en nuestro caso para las energías de ligadura E_i (ecuaciones 2.45 y 2.46 [74,75]), la deducción de la correspondiente expresión para E_I . No obstante esto no representará un obstáculo para el cálculo de las funciones termodinámicas que nos interesan: la presión P y el calor específico C_V .

Para especificar las fracciones de ocupación f_i procedemos en forma análoga al Método de la Funcional Densidad, o sea pedimos que en el estado de equilibrio termodinámico las fracciones f_i minimicen la energía libre F_T a temperatura y volumen constantes,

$$\frac{\partial F_T}{\partial f_i} = \frac{\partial E_I}{\partial f_i} + \frac{\partial F_F}{\partial f_i} + \frac{\partial \Delta F_{bc}}{\partial f_i} = 0 \quad (2.59)$$

Vamos a analizar cada uno de los tres términos por separado. Para el primero

$$\frac{\partial F_I}{\partial f_i} = \frac{\partial E_I}{\partial f_i} - T \frac{\partial S_I}{\partial f_i} ,$$

$\frac{\partial S_I}{\partial f_i}$ se calcula en forma directa a partir de 2.56

$$\frac{\partial S_I}{\partial f_i} = k_B D_i \ln \left(\frac{1-f_i}{f_i} \right) ,$$

la derivada $\frac{\partial E_I}{\partial f_i}$ se reescribe usando la condición de consistencia para E_I 2.58

$$\frac{\partial E_I}{\partial f_i} = -D_i E_i$$

Para el segundo término derivamos por partes

$$\frac{\partial F_F}{\partial f_i} = \frac{\partial F_F}{\partial N_F} \cdot \frac{\partial N_F}{\partial f_i}$$

pero el nivel de Fermi μ es por definición $\mu = \frac{\partial F_F}{\partial N_F}$, luego

$$\frac{\partial F_F}{\partial f_i} = \mu \frac{\partial N_F}{\partial f_i},$$

si ahora recordamos las relaciones 2.43 y 2.44 podemos poner

$$\frac{\partial F_F}{\partial f_i} = -\mu D_i$$

Finalmente para el tercer término tenemos

$$\frac{\partial \Delta F_{dc}}{\partial f_i} = \frac{\partial \Delta F_{dc}}{\partial N_F} \cdot \frac{\partial N_F}{\partial f_i} = \Delta E D_i,$$

donde hemos introducido la definición de la corrección ΔE en la energía por depresión del continuo

$$\Delta E = -\frac{\partial \Delta F_{dc}}{\partial N_F} = \frac{3}{5} \cdot \frac{N_F e^2}{R_0},$$

resultado que, por supuesto, coincide con el de la ecuación 2.48. Si sumamos las tres contribuciones obtenemos

$$-D_i \ln f_i - K_B T D_i \ln \left(\frac{1-f_i}{f_i} \right) - \mu D_i + \Delta E D_i = 0, \quad (2.60)$$

de donde se deduce inmediatamente

$$f_i = \left\{ 1 + \exp[\beta(-E_i + \Delta E) + \alpha] \right\}^{-1}$$

Concluimos entonces, que la expresión 2.53 propuesta para la energía libre total F_T es consistente con las hipótesis del modelo, teniendo en cuenta que las fracciones f_i que la minimizan representan la estadística de Fermi-Dirac.

A modo de ejemplo nos interesa calcular la presión P , que es el resultado básico que presentan los modelos de ecuación de estado, y el calor específico C_V , que en nuestro caso adquiere especial interés pues pensamos que es una de las funciones termodinámicas más sensible a la presencia de la estructura de capas.

Para calcular la presión P derivamos la energía libre F_T con respecto al volumen atómico V a temperatura constante

$$P_T = - \left(\frac{\partial F_T}{\partial V} \right)_T = - \left(\frac{\partial F_I}{\partial V} \right)_T - \left(\frac{\partial F_F}{\partial V} \right)_T - \left(\frac{\partial \Delta F_{bc}}{\partial V} \right)_T$$

Al hacer este cálculo se debe tener cuidado de no derivar a través de las f_i pues ello conduciría a construir una contribución del tipo

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F_T}{\partial f_i} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial V} \right)_T ,$$

la cual vale cero, pues las f_i satisfacen la condición 2.59. Nuevamente analizamos cada una de las tres contribuciones por separado. Para la primera

$$\left. \frac{\partial F_I}{\partial V} \right)_T = \left. \frac{\partial E_I}{\partial V} \right)_T - T \left. \frac{\partial S_I}{\partial V} \right)_T ,$$

usando la condición de consistencia 2.58 y la definición 2.55

$$\left. \frac{\partial E_I}{\partial V} \right)_T = \sum_{i=1}^N \left. \frac{\partial E_I}{\partial N_i} \cdot \frac{\partial N_i}{\partial V} \right)_T = - \sum_{i=1}^N E_i f_i \frac{\partial D_i}{\partial V} ,$$

donde recordemos que D_i es función de V a través del factor de desdoblamiento ψ_i que es función de ρ . La entropía S_I se deriva directamente a través de 2.56

$$\left. \frac{\partial S_I}{\partial V} \right)_T = -K_B \sum_{i=1}^N \left[f_i \ln \left(\frac{f_i}{1-f_i} \right) \right] \frac{\partial D_i}{\partial V} - K_B \sum_{i=1}^N \left[\ln(1-f_i) \right] \frac{\partial D_i}{\partial V} ,$$

reuniendo las dos contribuciones, el primer término resulta

$$\left. \frac{\partial F_I}{\partial V} \right)_T = \sum_{i=1}^N \left[-E_i + \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{f_i}{1-f_i} \right) \right] f_i \frac{\partial D_i}{\partial V} + \frac{1}{\beta} \sum_{i=1}^N \left[\ln(1-f_i) \right] \frac{\partial D_i}{\partial V} .$$

Para el segundo término tenemos

$$\left. \frac{\partial F_F}{\partial V} \right)_T = -P_F + \left. \frac{\partial F_F}{\partial N_F} \cdot \frac{\partial N_F}{\partial V} \right)_T = -P_F + \mu \left. \frac{\partial N_F}{\partial V} \right)_T ,$$

siendo P_F el resultado del gas de Fermi-Dirac (fórmula 2.25). Para $\left. \frac{\partial N_F}{\partial V} \right)_T$ usamos 2.43 y 2.44, luego

$$\left(\frac{\partial N_F}{\partial V}\right)_T = - \sum_{i=1}^N f_i \cdot \frac{\partial D_i}{\partial V} ,$$

con lo cual el segundo término resulta

$$\left(\frac{\partial F_F}{\partial V}\right)_T = -P_F - \mu \cdot \sum_{i=1}^N f_i \frac{\partial D_i}{\partial V}$$

Finalmente elaboramos el tercer término

$$\left(\frac{\partial \Delta F_{DC}}{\partial V}\right)_T = -\Delta P_{DC} + \frac{\partial \Delta F_{DC}}{\partial N_F} \left(\frac{\partial N_F}{\partial V}\right)_T = -\Delta P_{DC} + \Delta E \cdot \sum_{i=1}^N f_i \frac{\partial D_i}{\partial V} ,$$

siendo

$$\Delta P_{DC} = -\frac{3}{40\pi} \cdot \frac{N_F^2 e^2}{R_0^4} \quad (2.61)$$

Reuniendo los tres términos obtenemos

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial F_T}{\partial V}\right)_T &= \frac{1}{\beta} \cdot \sum_{i=1}^N \frac{\partial D_i}{\partial V} \ln(1-f_i) - P_F - \Delta P_{DC} + \\ &\quad \sum_{i=1}^N \left[-E_i + \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{f_i}{1-f_i}\right) - \mu + \Delta E \right] f_i \frac{\partial D_i}{\partial V} , \end{aligned}$$

pero de acuerdo a la condición 2.60 el corchete vale cero, luego podemos ob-

torno atómico. No obstante los electrones de los niveles más bajos, o sea los más cercanos a la carga nuclear, deben permanecer prácticamente inalterados

$$\left(\frac{\partial N_F}{\partial V}\right)_T = - \sum_{i=1}^N f_i \cdot \frac{\partial D_i}{\partial V} ,$$

con lo cual el segundo término resulta

$$\left(\frac{\partial F_F}{\partial V}\right)_T = -P_F - \mu \cdot \sum_{i=1}^N f_i \frac{\partial D_i}{\partial V}$$

Finalmente elaboramos el tercer término

$$\left(\frac{\partial \Delta F_{dc}}{\partial V}\right)_T = -\Delta P_{dc} + \frac{\partial \Delta F_{dc}}{\partial N_F} \left(\frac{\partial N_F}{\partial V}\right)_T = -\Delta P_{dc} + \Delta E \cdot \sum_{i=1}^N f_i \frac{\partial D_i}{\partial V} ,$$

siendo

$$\Delta P_{dc} = -\frac{3}{40\pi} \cdot \frac{N_F^2 e^2}{R_0^4} \tag{2.61}$$

Reuniendo los tres términos obtenemos

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial F_T}{\partial V}\right)_T &= \frac{1}{\beta} \cdot \sum_{i=1}^N \frac{\partial D_i}{\partial V} \ln(1-f_i) - P_F - \Delta P_{dc} + \\ &\quad \sum_{i=1}^N \left[-E_i + \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{f_i}{1-f_i}\right) - \mu + \Delta E \right] f_i \frac{\partial D_i}{\partial V} , \end{aligned}$$

pero de acuerdo a la condición 2.60 el corchete vale cero, luego podemos ob-

tener la siguiente expresión para la presión P_T , desglosada en tres contribuciones

$$P_T = -\frac{1}{\beta} \sum_{i=1}^N \frac{\partial D_i}{\partial V} \ln(1-f_i) + P_F + \Delta P_{DC} \quad (2.62)$$

Analicemos cada una de ellas. La segunda es, claramente, la contribución de los N_F electrones libres distribuidos uniformemente en el volumen atómico V . La tercera la podemos interpretar como una consecuencia de la corrección por depresión del continuo. A la primera la asociamos con los electrones ligados. Sin embargo, en principio, resulta sorprendente que los electrones ligados contribuyan a la presión. Veamos primero su signo. El logaritmo, por ser de argumento menor que uno, es negativo; es claro que la derivada $\frac{\partial D_i}{\partial V}$ debe ser positiva, pues frente a un incremento del volumen V los orbitales se alejan del contorno atómico y por lo tanto su degeneración D_i se incrementa (lo mismo se puede corroborar haciendo un cálculo directo y analizando el resultado). Luego, teniendo en cuenta el signo menos delante de la sumatoria, resulta que la contribución es positiva. La clave para entender el origen de esta contribución, está en la derivada $\frac{\partial D_i}{\partial V}$. En efecto, si se recuerda la idea de introducir una degeneración D_i variable, a través del factor de despoblación $\psi_i(\rho)$ fue para simular la gradual transición al continuo de los electrones ubicados en los orbitales más próximos al contorno atómico. No obstante los electrones de los niveles más bajos, o sea los más cercanos a la carga nuclear, deben permanecer prácticamente inalterados frente a este efecto. En consecuencia, la derivada $\frac{\partial D_i}{\partial V}$ solo contribuye para los niveles más próximos al continuo y tiende a cero rápidamente para los más

bajos (como $E_i^{1/2} \exp(-\pi R_0 E_i^{1/2})$ para valores de E_i crecientes), mientras que la correspondiente contribución a la presión del nivel decrece como $E_i^{3/2} \exp(-\pi R_0 E_i^{1/2})$ para valores de E_i crecientes. Resulta entonces que no todos los electrones ligados contribuyen a la presión sino solo aquellos que, en alguna medida, están afectados por la ionización por presión; o sea aquellos que a pesar de estar asimilados en el conjunto de N_B electrones ligados, tienen alguna probabilidad de estar incursionando en los niveles del continuo. Pero si el orbital se aproxima demasiado al contorno atómico el factor de despoblación ψ_i empalma con cero en valor y en derivada en el borde de la celda atómica, lo cual significa que como los electrones de ese orbital ya han sido transferidos prácticamente al continuo, su contribución a la presión como electrones ligados tiende a cero y la misma comienza a computarse a través de los libres.

Resumiendo vemos que el primer término de la expresión 2.62 para la presión P_T , representa la contribución a la presión de aquellos electrones que, a pesar de estar ligados, pertenecen a niveles fuertemente perturbados por el estado de compresión del material, lo cual conduce a que en su dinámica comiencen a manifestarse efectos ajenos a su estado.

Veamos ahora el cálculo del calor específico C_V a través de su definición

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V ,$$

para lo cual necesitamos conocer la expresión de la energía interna total del sistema E_T . Utilizando la relación termodinámica

$$E = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V ,$$

fácilmente puede deducirse que la energía E_T del sistema es

$$E_T = E_I + E_F + \Delta F_{DC} ,$$

siendo \bar{E}_F el resultado del gas de Fermi-Dirac (fórmula 2.26). Luego podemos escribir para C_V

$$C_V = \left(\frac{\partial E_I}{\partial T} \right)_V + \left(\frac{\partial E_F}{\partial T} \right)_V + \left(\frac{\partial \Delta F_{DC}}{\partial T} \right)_V \quad (2.63)$$

Derivando por partes y utilizando la condición de consistencia 2.58, podemos expresar la primera contribución de la siguiente forma

$$\left(\frac{\partial E_I}{\partial T} \right)_V = - \sum_{i=1}^N E_i D_i \left(\frac{\partial f_i}{\partial T} \right)_V , \quad (2.64)$$

cuyo signo es positivo pues debido a la ionización por temperatura la derivada de la fracción de ocupación f_i del nivel i -ésimo debe ser negativa. Recordando la expresión 2.27 para el calor específico C_{VF} del gas de Fermi-Dirac, la segunda contribución se puede poner

$$\left(\frac{\partial E_F}{\partial T} \right)_V = C_{VF} + \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{\beta} \cdot \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} \cdot \left(\frac{\partial N_F}{\partial T} \right)_V \quad (2.65)$$

La tercera contribución se calcula directamente a través de la expresión 2.57 para ΔF_{DC}

$$\left. \frac{\partial \Delta F_{bc}}{\partial T} \right)_V = -\frac{3}{5} \cdot \frac{N_F e^2}{R_0} \cdot \left. \frac{\partial N_F}{\partial T} \right)_V \quad (2.66)$$

Para calcular $\left. \frac{\partial N_F}{\partial T} \right)_V$ disponemos de la expresión 2.29 (o su equivalente 2.52)

$$\left. \frac{\partial N_F}{\partial T} \right)_V = \frac{2V}{\lambda_{DB}^3} \cdot \left[\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{T} \cdot F_{3/2}^{(\alpha)} - F_{1/2}^{(\alpha)} \cdot \left. \frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_V \right] \quad (2.67)$$

Utilizando la definición de las fracciones f_i y el resultado 2.67, podemos expresar la derivada $\left. \frac{\partial f_i}{\partial T} \right)_V$ correspondiente al nivel i -ésimo de la siguiente manera

$$\left. \frac{\partial f_i}{\partial T} \right)_V = f_i (f_i - 1) \left\{ \frac{1}{k_B T^2} \left[E_i - \Delta E + \frac{q}{5} \cdot \frac{e^2}{R_0} \cdot \frac{V}{\lambda_{DB}^3} F_{3/2}^{(\alpha)} \right] + \right. \quad (2.68)$$

$$\left. \left[1 - \frac{6}{5} \cdot \frac{e^2}{k_B T R_0} \cdot \frac{V}{\lambda_{DB}^3} F_{1/2}^{(\alpha)} \right] \frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_V \left. \right\} ,$$

en la deducción de esta expresión no hemos considerado el término $\left. \frac{\partial E_i}{\partial T} \right)_V$. Como el nivel de energía se determina en forma autoconsistente con todo el conjunto de números de ocupación $\{N_i, i=1, \dots, N\}$, tener en cuenta este término en el cálculo de la derivada $\left. \frac{\partial f_i}{\partial T} \right)_V$ implica generar un nuevo cálculo autoconsistente para estas derivadas, dentro del preexistente para la deter-

minación de las fracciones f_i , con todo el incremento de complejidad numérica que esto trae aparejado. Por otro lado el tipo de esquema perturbativo usado para \bar{E}_i justifica en alguna medida tomar esta aproximación. No obstante, como se verá más adelante, podremos estimar cuantitativamente la calidad de nuestros resultados a través de un control de consistencia termodinámico que involucra una aproximación similar a la mencionada aquí.

Las expresiones 2.67 y 2.68 presentan las derivadas $\left(\frac{\partial N_F}{\partial T}\right)_V$ y $\left(\frac{\partial f_i}{\partial T}\right)_V$, necesarias para el cálculo de las contribuciones 2.64, 2.65 y 2.66 de C_V , en términos de la derivada del potencial de Planck $\left(\frac{\partial \alpha}{\partial T}\right)_V$. Para determinarla usamos las expresiones 2.43, 2.44 de la siguiente forma

$$N_B + N_F = Z \quad \longrightarrow \quad \left(\frac{\partial N_F}{\partial T}\right)_V + \left(\frac{\partial N_B}{\partial T}\right)_V = 0 \quad ,$$

$$N_B = \sum_{i=1}^N D_i f_i \quad \longrightarrow \quad \left(\frac{\partial N_B}{\partial T}\right)_V = \sum_{i=1}^N D_i \left(\frac{\partial f_i}{\partial T}\right)_V \quad ,$$

y si ahora utilizamos 2.67 y 2.68 podemos deducir la siguiente igualdad

$$\frac{1}{T} \cdot \frac{3V}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{3/2}(\alpha) - \frac{2V}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{1/2}(\alpha) \cdot \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T}\right)_V + \sum_{i=1}^N D_i f_i (f_i - 1) \left\{ \frac{1}{K_B T^2} \left[E_i - \Delta E + \frac{q}{5} \cdot \frac{e^2}{R_0} \cdot \frac{V}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{3/2}(\alpha) \right] + \left[1 - \frac{6}{5} \cdot \frac{e^2}{K_B T R_0} \cdot \frac{V}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{1/2}(\alpha) \right] \cdot \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T}\right)_V \right\} = 0 \quad ,$$

de donde podemos despejar la siguiente expresión para la derivada $\left. \frac{\partial \alpha}{\partial T} \right|_V$

$$\left. \frac{\partial \alpha}{\partial T} \right|_V = \frac{N}{D} \quad , \quad (2.69)$$

siendo

$$N = \frac{1}{k_B T^2} \left\{ \sum_{i=1}^N D_i f_i (f_i - 1) E_i - \left(\frac{q}{5} \cdot \frac{e^2}{R_0} \cdot \frac{V}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{3/2}(\alpha) - \Delta E \right) \cdot \right.$$

$$\left. \sum_{i=1}^N D_i f_i (f_i - 1) - \frac{3 V k_B T}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{3/2}(\alpha) \right\} \quad ,$$

$$D = \left(1 - \frac{6}{5} \cdot \frac{e^2}{k_B T R_0} \cdot \frac{V}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{1/2}(\alpha) \right) \cdot \sum_{i=1}^N D_i f_i (f_i - 1) - \frac{2V}{\lambda_{DB}^3} \cdot F_{1/2}(\alpha) \quad .$$

Vemos pues que las expresiones 2.63, 2.64, 2.65, 2.66, 2.67, 2.68 y 2.69 definen nuestro esquema de cálculo para el calor específico C_V , que resulta ser suficientemente complicado como para intentar un análisis "a priori". Por lo tanto nos remitiremos directamente a los resultados de su evaluación numérica.

Como se mencionó anteriormente queremos realizar, en forma simultánea con la evaluación de la presión P y el calor específico C_V , un control de consistencia termodinámica de nuestro método de cálculo que nos permita estimar la precisión del mismo en lo que se refiere a los resultados para C_V . Para ello evaluaremos por separado ambos lados de la siguiente igualdad termodinámica

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P \quad (2.70)$$

No vamos a presentar la laboriosa deducción de las expresiones correspondientes a ambos lados de la igualdad, pues esto implica una metodología de cálculo y aproximaciones similares a las ya expuestas en la deducción de C_V

En las Figs. 2.13 y 2.14 se muestra la superficie de presión para Al en el mismo rango de densidad y temperatura que la de ionización de las Figs. 2.11 y 2.12. Nuevamente la estructura de capas se pone de manifiesto en la zona de ionización por temperatura a través de un comportamiento escalonado (más atenuado que en la ionización), y en la zona de ionización por presión a través de un comportamiento oscilante que se atenúa con el incremento de la densidad debido a la degeneración electrónica. En este último sentido resulta particularmente notable el efecto asociado a la ionización por presión de los tres electrones más externos de la estructura del aluminio, o sea los de la capa M. Se puede observar una estrecha correlación con la superficie de ionización. Al igual que, el modelo TF en las situaciones de alta y baja degeneración se reproducen los valores del gas de Fermi-Dirac. Por otro lado si se compara con los resultados del modelo TF de las Figs. 2.5 y 2.6 se observan las mismas tendencias globales, a menos de los efectos de los niveles discretos.

En las Figs. 2.15, 2.16 y 2.17 presentamos los resultados para el calor específico C_V y la ionización N_F simultáneamente en función de la temperatura para tres valores de densidad: 10^{-3} , 1 , y 10^3 gcm^{-3} . Los resultados para C_V , como era de esperar, son muy significativos. En los mismos gráficos se muestran los resultados del modelo TF. Como se ve el incremento en

C_V , respecto del gas ideal clásico, debido a la ionización por temperatura inducido por la presencia de la estructura de capas es mucho más importante que el del modelo TF, el cual, sugestivamente, promedia y atenúa el efecto ubicando su máximo entre los dos picos correspondientes a la ionización de las capas K y L,M. La correlación con la curva de ionización es evidente. La altura y ancho de los picos depende del número de electrones involucrados en el proceso de ionización y del rango de energía barrido por los distintos niveles dentro de una misma capa. En este sentido el modelo TF puede interpretarse como un límite en el cual si bien se mantiene el número total de electrones constante, los mismos se han repartido en un espectro continuo de niveles. Luego los primitivos picos de la estructura de capas se han relajado y confundido en una única gran "loma". También en este sentido puede interpretarse el efecto del aumento de la densidad. Debido a esto los niveles discretos se van ensanchando y solapando tendiendo a producir un continuo de energías. Como se puede ver en la Fig. 2.17, a los $1000. \text{ g cm}^{-3}$ prácticamente no queda señal alguna de la estructura de capas, y los dos electrones de la capa K, que aún quedan por ionizar, parecen moverse en un continuo de energías muy similar al del modelo TF.

Finalmente queremos mencionar que en todos los cálculos se verificó el cumplimiento de la condición de consistencia termodinámica 2.70 con una precisión mejor que el 10%.

A_1, P'

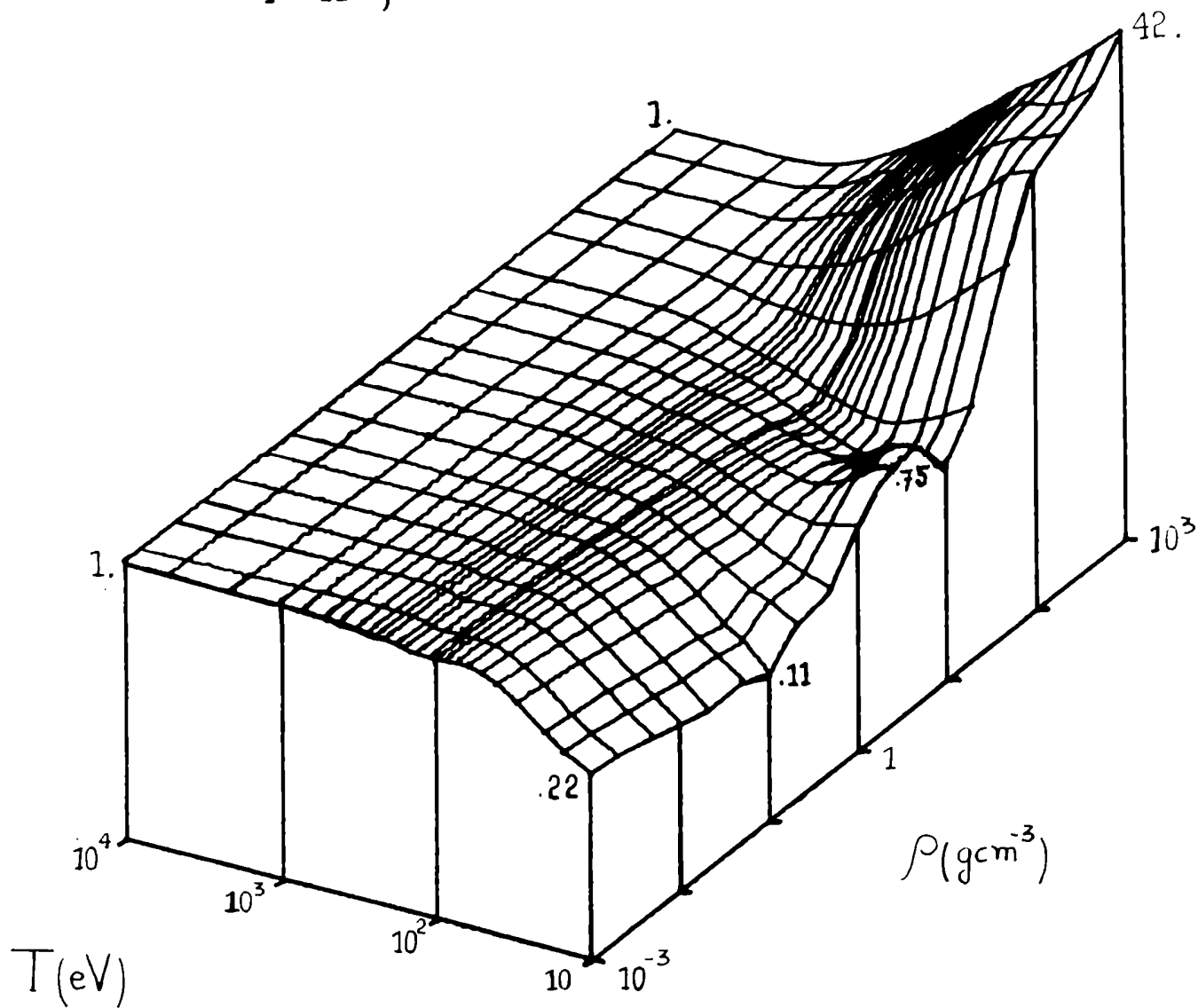


Fig. 2.13: gráfico tridimensional de la presión (P'), normalizada a su valor como gas ideal clásico, en función de la temperatura (T) y la densidad (ρ) para el modelo autoconsistente desarrollado en este trabajo.

Al, P'

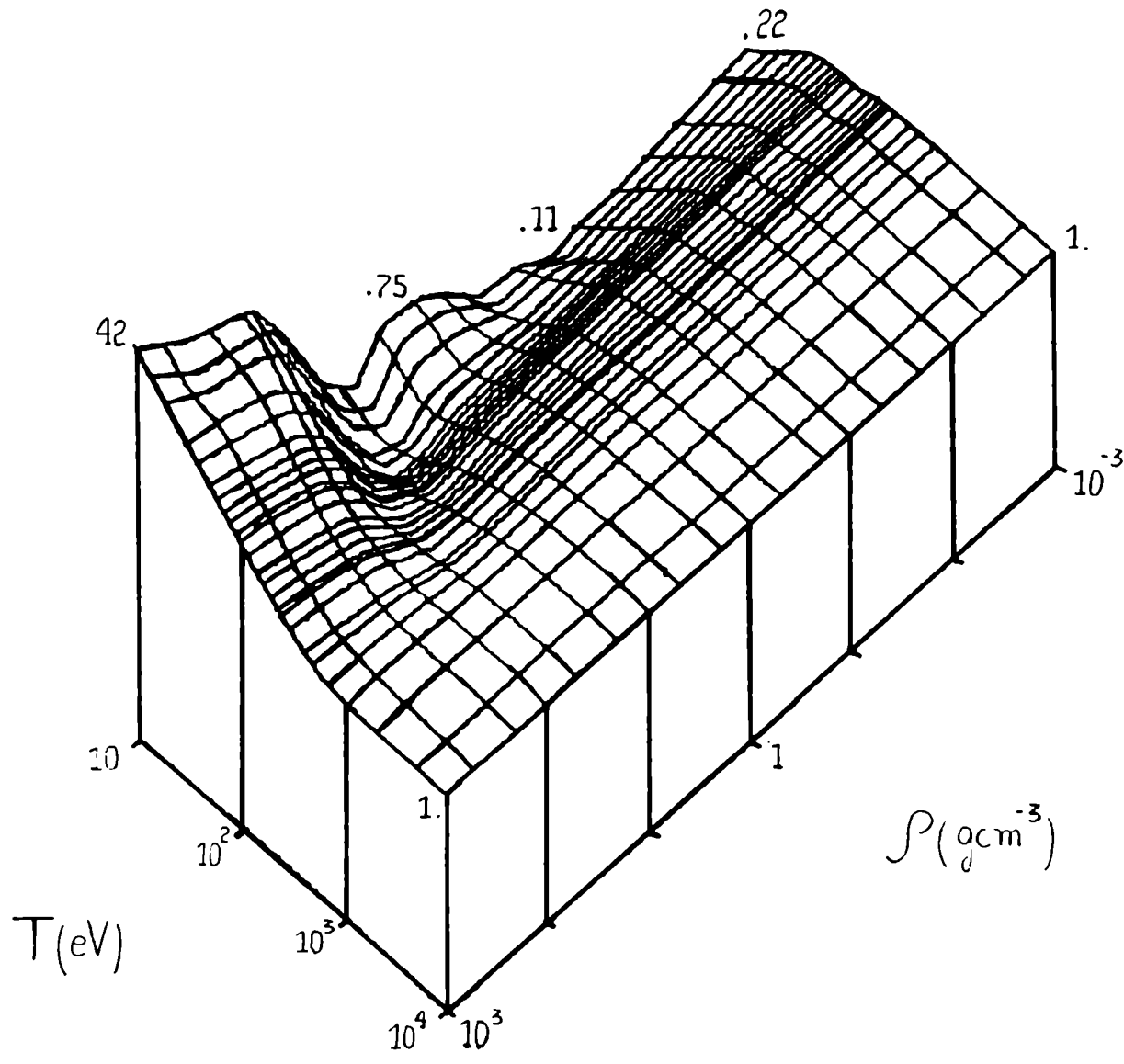


Fig. 2.14: idem Fig. 2.13 , pero vista desde otra visual .

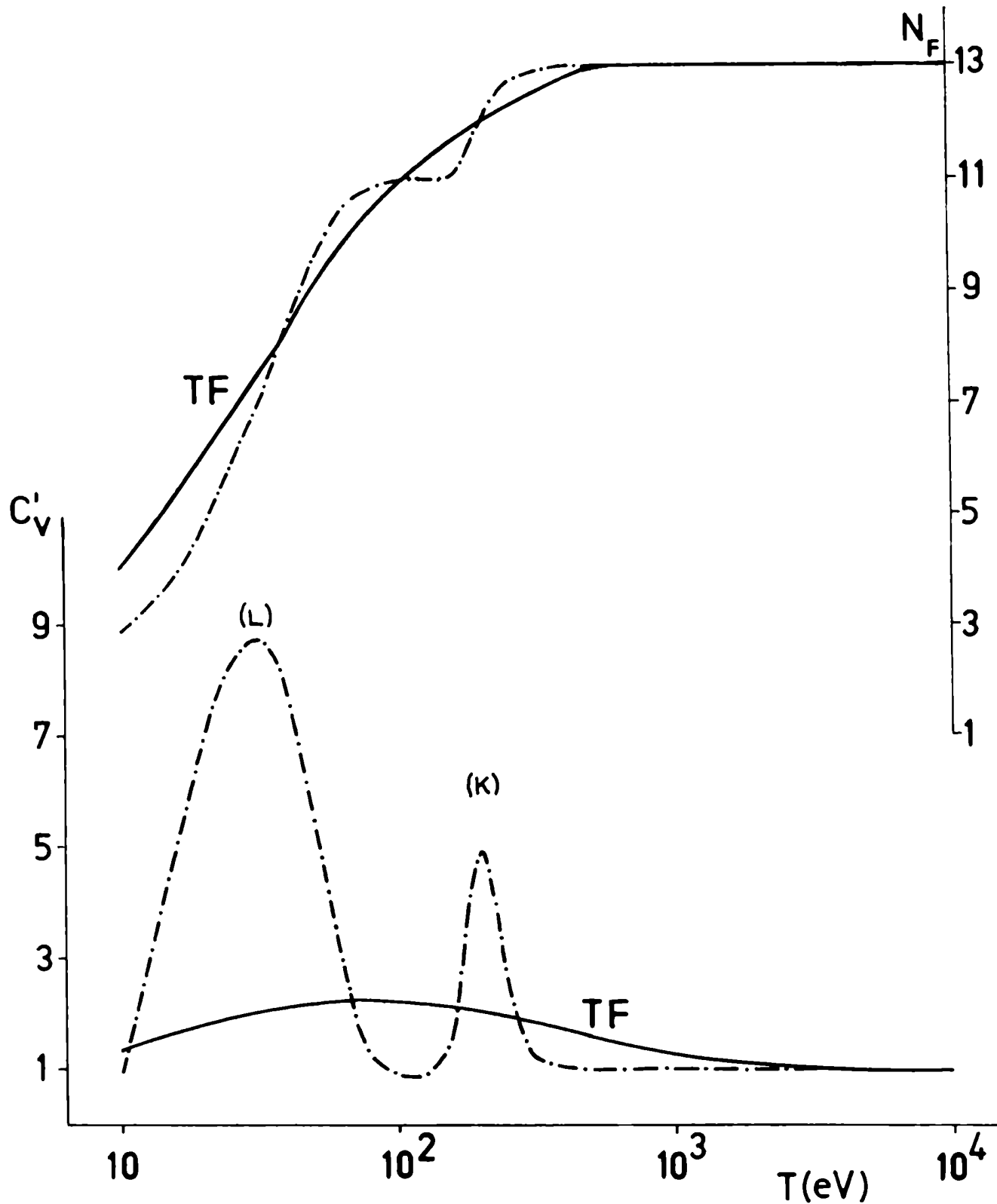


Fig. 2.15: gráficos comparativos (entre los resultados obtenidos en este trabajo (— · —) y los del modelo de Thomas-Fermi (TF)) para la ionización (N_F) y el calor específico a volumen constante (C_V), normalizado a su valor como gas ideal clásico, en función de la temperatura (T) a densidad $\rho = .001 \text{ g cm}^{-3}$ para aluminio ($Z=13.$).

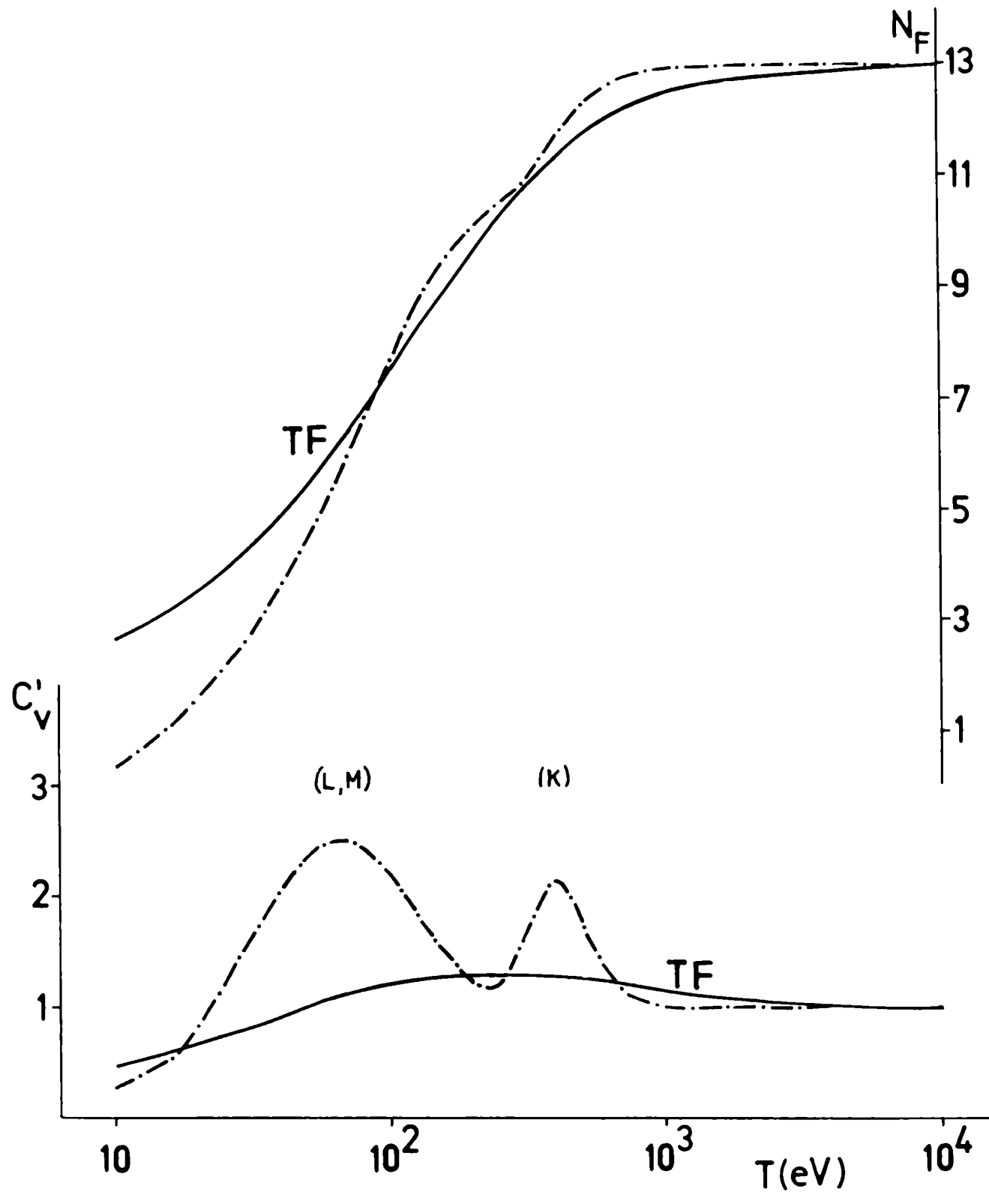


Fig. 2.16: idem Fig. 2.15 , pero a densidad $\rho = 1.0 \text{ g cm}^{-3}$.

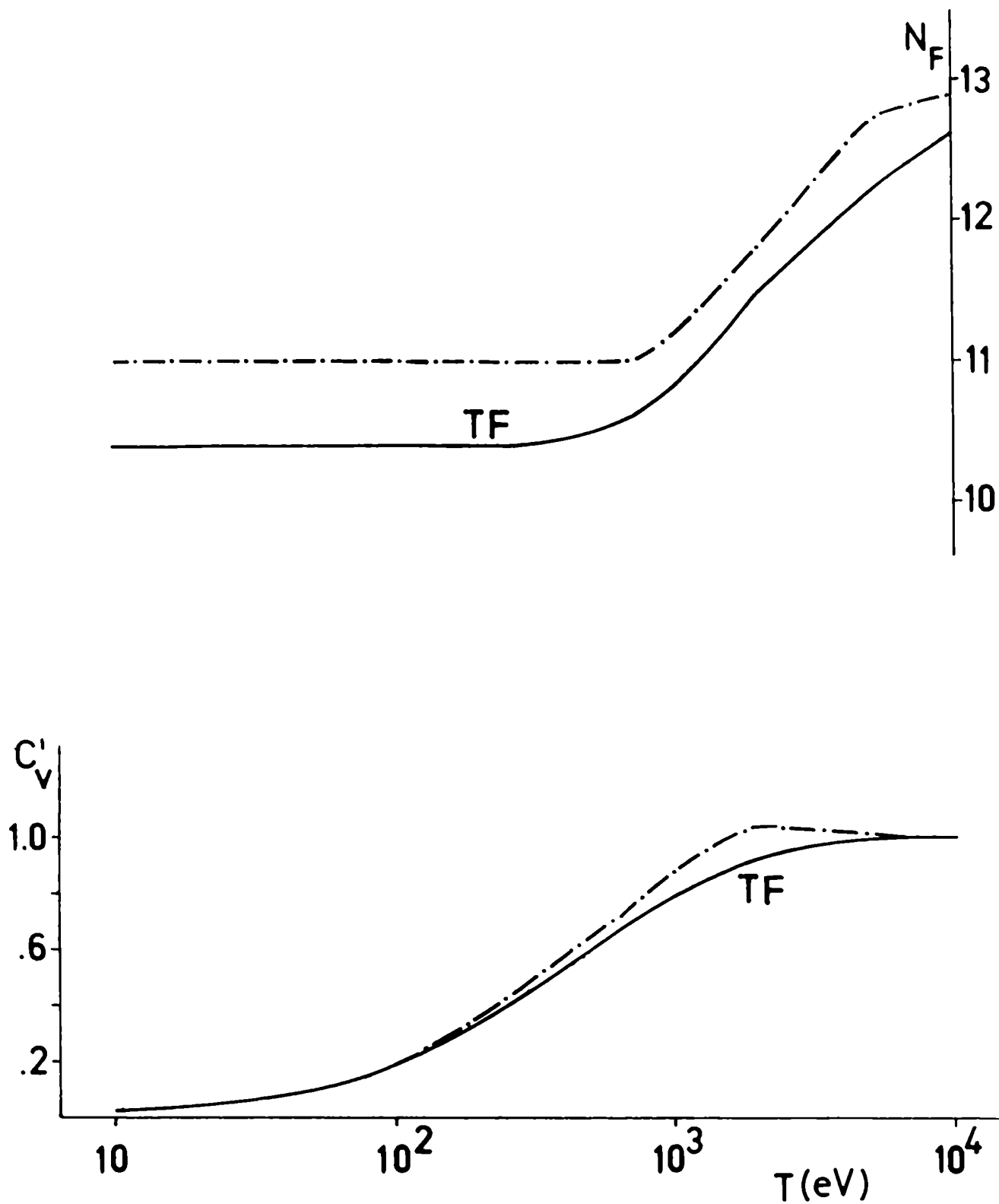


Fig. 2.17: idem Fig. 2.15 , pero a densidad $\rho = 1000. \text{ g cm}^{-3}$.

CAPITULO III

MODELO PARA SIMULAR BLANCOS IRRADIADOS CON
LUZ LASER Y SU SOLUCION NUMERICA

III. MODELO PARA SIMULAR BLANCOS IRRADIADOS CON LUZ LASER Y SU SOLUCION NUMERICA

III.1 El modelo

La física de la fusión nuclear por confinamiento inercial y, en general, la de los plasmas densos y calientes producidos por luz láser, tiene características altamente polifacéticas. El estudio de las mismas se alimenta de teorías y resultados que provienen de áreas tan diversas, como por ejemplo: física de plasmas, física estadística, hidrodinámica, física nuclear, termodinámica, análisis numérico, física atómica, etc. Esto no hace más que resaltar la complejidad y la cantidad de procesos físicos que pueden verse involucrados en una de tales experiencias.

La idea de desarrollar extensos códigos de simulación numérica para calcular los efectos de un gran número de procesos físicos interactuantes entre sí, fue postulada hacia principios de siglo por Courant, Friedrichs y Lewy^[85]. Pero sin embargo, no fue sino hasta el advenimiento de las modernas computadoras digitales, de lo cual no hace tanto tiempo, que esta idea pudo plasmarse en una realidad y comenzar a dar resultados concretos. El desarrollo ha sido tal, que hoy en día podemos afirmar que la simulación numérica ha sido uno de los principales promotores del surgimiento de una moderna y promisoriosa rama de la Física Teórica que se ha llamado Física Computacional.

La física de la fusión por confinamiento inercial ofrece un excelente campo de acción para la simulación numérica, y durante los últimos diez años la misma ha tenido importancia vital en la predicción e interpretación de experimentos de interés termonuclear. En la actualidad la poderosa infraestruc-

tura experimental que se ha ido generando en los principales laboratorios del mundo y los resultados que esta ha producido, han contribuido a modificar y perfeccionar los modelos físicos con los que se construyen los códigos de simulación y ha llevado a los mismos a un permanente estado de actualización y modernización, en el que también cooperan los avances en los métodos y técnicas numéricas. Es con este objetivo que hemos construido e implementado en un código de simulación numérica, el modelo físico que presentaremos a continuación. El mismo está orientado hacia el estudio de la termodinámica e hidrodinámica de la compresión en blancos planos e implosión de blancos esféricos irradiados con pulsos de luz láser de alta potencia.

III.1.1 La aproximación hidrodinámica

El modelo es de tipo fluidístico con dos subsistemas constituidos uno por los electrones y el otro por los iones. Despreciamos la masa de los electrones frente a la de los iones, luego la inercia de cada elemento de fluido viene dada por la cantidad de iones presentes en el mismo. De esta forma si A es el número másico promedio del material, m_p la masa del protón, n_i la densidad numérica de iones, ρ la densidad de masa y V el volumen específico, podemos escribir

$$\rho = A m_p n_i = \frac{1}{V} \quad (3.1)$$

Consideraremos que el sistema es neutro, con lo cual si Z es el número atómico promedio del material y n_e la densidad numérica de electrones, la relación con n_i es

$$n_e = Z n_i \quad , \quad (3.2)$$

esto también implica que ambos subsistemas están acoplados a través de un único campo de velocidades \underline{v} que será el campo de velocidades del fluido,

$$\underline{v} = \underline{v}_e = \underline{v}_i \quad (3.3)$$

La ecuación 3.2 también lleva asociada implícitamente la hipótesis de ionización total. En caso de utilizar un modelo de ionización parcial, el número atómico promedio del material Z debe ser reemplazado por el estado de ionización local.

Por razones de simplicidad consideraremos la dependencia espacial como unidimensional (1D), pero accesible a tres tipos de geometría diferente:

- i-esférica: la coordenada espacial representa la coordenada radial del sistema de coordenadas esférico (simetría esférica),
- ii-cilíndrica: la coordenada espacial representa la coordenada radial del sistema de coordenadas cilíndrico (simetría axial),
- iii-plana: la coordenada espacial representa alguna de las tres coordenadas del sistema de coordenadas cartesiano (simetría plana).

Notaremos la coordenada espacial con la letra \mathcal{R} , independientemente de la geometría que se trate. De la misma manera, sólo tendremos en cuenta la correspondiente componente según este eje coordinado de magnitudes vectoriales tales como el campo de velocidades \underline{v} y los vectores flujo de calor electrónico F_e e iónico F_i , siendo

$$\underline{v} = v \hat{e}_r \quad , \quad \underline{F}_i = F_i \hat{e}_r \quad \text{y} \quad \underline{F}_e = F_e \hat{e}_r \quad .$$

No podemos considerar campos eléctricos pues la condición 3.3 anula los efectos provenientes de una separación neta de carga, ni tampoco campos magnéticos debido a la hipótesis de unidimensionalidad.

Nuestra formulación hidrodinámica será de tipo Lagrangiano, es decir la coordenada espacial \mathcal{R} no significará la ubicación de un punto fijo del espacio sino la ubicación de un elemento de fluido que en un instante inicial t_0 estaba localizado en la posición inicial $\mathcal{R}_0 = \mathcal{R}(t_0)$. La conveniencia del uso de este formalismo es debido a razones de tratamiento numérico que se expondrán más adelante. Por lo tanto la coordenada espacial \mathcal{R} debe satisfacer la siguiente ecuación de movimiento

$$\frac{d\mathcal{R}}{dt} = v \quad (3.4)$$

El campo de velocidades v queda determinado por la ecuación de Euler

$$\rho \frac{dv}{dt} = -\nabla P \quad , \quad (3.5)$$

siendo P la presión total del sistema, o sea la suma de la contribución iónica P_i , electrónica P_e y un término de origen viscoso numérico P_q ($P = P_i + P_e + P_q$). Nótese que en la ecuación 3.5 se ha despreciado el término viscoso proporcional al laplaciano del campo de velocidades. Esto es así debido a que se ha corroborado que su inclusión en estos casos no es significativa, acarrea complejidad en el tratamiento matemático y provee un ensanchamiento insuficiente para la adecuada simulación numérica del frente de

choque [2,86].

La localizada e intensa deposición de energía en los blancos sólidos irradiados con pulsos láser de alta potencia, induce en los estratos más externos del material la generación de ondas de choque que luego se propagan al resto del material sin perturbar. Resulta delicado tratar numéricamente estos frentes de discontinuidad que surgen en la solución de ecuaciones hidrodinámicas cuando los efectos de la compresibilidad del medio no son despreciables. Es necesario introducir algún mecanismo artificial de ensanchamiento que transforme la superficie de discontinuidad en un delgado sector de variación rápida para las magnitudes en cuestión, que empalme sus valores delante y detrás del frente de choque respetando la magnitud del salto y la velocidad de propagación de la onda de choque. Este problema fue tratado y resuelto eficazmente por primera vez en el año 1950 por Von Neumann y Richtmyer [87,88], quienes propusieron incorporar en la ecuación de Euler un término extra P_q que llamaron presión viscosa numérica artificial, de la forma

$$P_q = b^2 (\Delta r)^2 \rho \left| \frac{\partial v}{\partial r} \right|^2, \text{ si hay compresión,}$$

$$P_q = 0, \text{ si no hay compresión,}$$

siendo b una constante y Δr la longitud del intervalo de discretización en el eje coordenado espacial r . La idea de P_q es introducir un efecto disipativo viscoso artificial, localizado en el frente de choque, que lo expanda en un ancho de longitud constante de 3 a 4 intervalos Δr (lo cual se puede graduar a través del parámetro b , pues $b\Delta r$ da idea de esa longitud) y que esto sea independiente de la intensidad del salto que provoca la onda de choque. No debe prestarse a confusión el sugestivo nombre dado a este método, en el sentido de que se está introduciendo un proceso físico artificial.

Sólo se trata de una útil técnica numérica, motivada sí por principios físicos, que permite tratar numéricamente las ondas de choque provocadas por los procesos físicos presentes en el modelo sin ningún sondeo previo de su ubicación.

Este método fue utilizado con mucho éxito por von Neumann y Richtmyer en la simulación numérica de ondas de choque planas, demostrando que la omisión del mismo provoca serias oscilaciones en el fluido detrás del frente de choque (oscilaciones de Von Neumann) y alteraciones en la velocidad de propagación del mismo. También ha sido utilizado ampliamente para modelar las ondas de choque en los códigos numéricos de fusión por confinamiento inercial, pero con un factor correctivo que lo atenúa en aquellos elementos de fluido que sufren fuertes pero adiabáticas compresiones en geometría esférica y cilíndrica [2,86,89]. Para superar este inconveniente y lograr un mejor tratamiento de frentes de choque, sobre todo en interfases y reflexiones, White [90,91] ha modificado la expresión original de Von Neumann y Richtmyer haciendo uso de la segunda relación de Rankine-Hugoniot que vincula los saltos en velocidad, presión y densidad a través de una onda de choque [54]

$$(\Delta v)^2 = -\Delta P \Delta(1/\rho) \quad ,$$

de este modo propone para P_q la siguiente expresión

$$P_q = b^2 (\Delta v)^2 \rho \frac{|\Delta v|}{\Delta x} \cdot \sqrt{-\frac{\Delta P}{\Delta x} \cdot \frac{\Delta(1/\rho)}{\Delta x}} \quad , \text{ si hay compresión} \quad ,$$

$$P_q = 0 \quad , \text{ si no hay compresión} \quad . \quad (3.6)$$

White señala que su expresión está más unívocamente asociada a la presencia de ondas de choque, pues saltos simultáneos en velocidad, presión y densidad

reflejan la presencia de frentes de choque y viceversa. Por otro lado en los experimentos numéricos durante el desarrollo de nuestro código de simulación hemos corroborado en buena medida las observaciones de White usando la expresión 3.6 para P_q , razón por la cual la hemos seguido utilizando habitualmente.

Varios procesos físicos, que afectan solo a electrones o iones por separado, justifican la división en los dos subsistemas mencionados anteriormente. Entre ellos podemos mencionar los siguientes:

- i. La luz láser entrega su energía y calienta a los electrones mediante bremsstrahlung inverso y también por absorción resonante.
- ii. Los electrones pierden energía por emisión de radiación de bremsstrahlung y recombinación.
- iii. Las ondas de choque calientan a los iones, que son los responsables de la inercia.
- iv. Para temperaturas por debajo de 30. keV, las partículas alfa producidas en la reacción de fusión Deuterio-Tritio(DT), depositan fundamentalmente su energía en los electrones.

A su vez ambos subsistemas se acoplan a través de la condición 3.3 y por intercambio colisional Coulombiano electrón-ión. Este último puede tener lugar en un amplio espectro de condiciones desde una corona de plasma tenue y caliente, donde predomina el desacople electrón-ión, hasta zonas de plasma denso, relativamente frío y con electrones cuánticamente degenerados, donde los tiempos de termalización electrón-ión son extremadamente cortos.

Para deducir las ecuaciones de las temperaturas electrónica T_e e

iónica T_i evaluaremos el primer Principio de la Termodinámica localmente para cada elemento de fluido y para cada uno de los dos subsistemas que lo conforman. Esto significa que supondremos que nuestro sistema evoluciona a través de una sucesión de estados de equilibrio termodinámico local vinculados entre sí a través del Primer Principio. De acuerdo a esto podemos poner

$$d\epsilon_{e,i} = \delta Q_{e,i} - P_{e,i} dV \quad , \quad (3.7)$$

siendo $\epsilon_{e,i}$ la energía interna específica electrónica o iónica y $Q_{e,i}$ el calor específico absorbido por electrones o iones. Si tenemos en cuenta que dos estados de equilibrio termodinámico sucesivos entre sí están distanciados temporalmente por un intervalo dt , dividiendo 3.7 por dt obtenemos

$$\frac{d\epsilon_{e,i}}{dt} + P_{e,i} \frac{dV}{dt} = \delta \dot{Q}_{e,i} \quad , \quad (3.8)$$

siendo ahora $\delta \dot{Q}_{e,i}$ el respectivo calor específico absorbido por unidad de tiempo. El aspecto que tome $\delta \dot{Q}_{e,i}$ en cada caso depende de los procesos físicos que se desee tener en cuenta. En nuestro caso hemos elegido la siguiente expresión para cada uno de ellos

$$\begin{aligned} \delta \dot{Q}_e &= H_e + K + Y_e - J + X \quad , \quad X = X_{BI} + X_H \quad , \\ \delta \dot{Q}_i &= H_i - K + Y_i + Q_v \quad , \end{aligned}$$

donde cada una de las contribuciones consideradas tiene el siguiente significado

H_e, H_i : transporte térmico electrónico, iónico,

- K : intercambio colisional electrón-ión,
 J : emisión de bremsstrahlung,
 X_{BI} : deposición de luz láser por bremsstrahlung inverso,
 X_H : deposición por pasaje de electrones supratérmicos,
 Y_e, Y_i : deposición de productos de fusión,
 Q_v : calentamiento viscoso de la onda de choque

Antes de analizar en detalle cada una de estas contribuciones vamos a elaborar un poco la expresión 3.8. Para esto recordemos que la ecuación de estado de cada subsistema nos proveerá un par de expresiones del tipo

$$\epsilon_{e,i} = \epsilon_{e,i}(\rho, T_{e,i}) \quad ,$$

diferenciando podemos obtener

$$d\epsilon_{e,i} = C_{v,e,i} dT_{e,i} + B_{T_{e,i}} d\rho \quad ,$$

siendo

$$B_{T_{e,i}} = \left. \frac{\partial \epsilon_{e,i}}{\partial \rho} \right)_{T_{e,i}} \quad ,$$

y $C_{v,e,i}$ el respectivo calor específico a volumen constante. Reemplazando en 3.8 escribimos

$$C_{V_e,i} \frac{dT_{e,i}}{dt} + B_{T_{e,i}} \frac{d\rho}{dt} + P_{e,i} \frac{dV}{dt} = \dot{S}Q_{e,i} \quad , \quad (3.9)$$

con lo cual hemos obtenido las expresiones formales de las ecuaciones para las temperaturas T_e y T_i . En lo que resta de este apartado presentaremos los tipos de ecuación de estado utilizados y la contribución de los términos H_e , H_i , K , J y Q_V .

Para determinar las presiones $P_{e,i}$, calores específicos a volumen constante $C_{V_e,i}$, energías internas específicas $E_{e,i}$ y las derivadas $B_{T_{e,i}}$ hemos utilizado dos tipos de ecuación de estado de acuerdo al caso que se pretende simular.

En el capítulo siguiente presentaremos los resultados de la simulación de experiencias de compresión en blancos planos de aluminio por onda de choque, inducida con pulsos láser de alta potencia. En esta situación hemos utilizado la ecuación de estado expuesta en el capítulo dos, sección 11.2, que, como ya mencionamos, resulta particularmente apropiada para este tipo de aplicaciones.

En el capítulo cinco presentaremos los resultados de la simulación de experiencias de implosión de blancos esféricos que contienen material fusible, de interés termonuclear. En este caso para los iones usamos un modelo de gas ideal clásico, cuyas expresiones son

$$P_i = \frac{K_B T_i}{Amp} \rho = 8.255 \times 10^7 \frac{1}{A} \rho T_i \quad , \quad (3.10)$$

$$\mathcal{E}_i = \frac{3}{2} \cdot \frac{P_i}{\rho} = 1.238 \times 10^8 \cdot \frac{1}{A} \cdot T_i \quad , \quad (3.11)$$

$$C_{Vi} = \frac{3}{2} \cdot \frac{K_B}{A m_p} = 1.238 \times 10^8 \cdot \frac{1}{A} \quad , \quad (3.12)$$

$$B_{Ti} = 0 \quad (3.13)$$

El sistema de unidades que utilizamos es el cgs y grados Kelvin para la temperatura.

La contribución electrónica se ha dividido en dos partes: la fría y la térmica. Para la parte fría, siguiendo la línea de lo expuesto en el capítulo dos, sección 11.2.1, hemos utilizado un ajuste semiempírico para la presión fría P_c en potencias de $\delta^{1/3}$ (recordar que $\delta = \rho / \rho_0$) del tipo

$$P_c = \sum_{i=1}^5 a_i \delta^{i/3} \quad , \quad (3.14)$$

de esta expresión es posible deducir la de la energía fría específica \mathcal{E}_c usando la relación

$$\frac{d\mathcal{E}_c}{dV} = -P_c$$

Integrando obtenemos

$$\mathcal{E}_c = \frac{3}{\rho} \cdot \sum_{i \neq 3} \frac{a_i}{(i-3)} (\delta^{i/3} - \delta) + \frac{a_3}{\rho_0} \ln \delta \quad (3.15)$$

El conjunto de coeficientes $\{a_i, i=1, \dots, 5\}$ se ha obtenido mediante un ajuste, con un programa de minimización desarrollado sobre la base del algoritmo DUD [92], con datos experimentales a baja compresión, y el comportamiento proporcional a $\rho^{5/3}$ característico de la zona de alta compresión. La Tabla 3.1 muestra los coeficientes obtenidos para distintas sustancias.

La parte térmica la derivamos de la energía libre del gas de Fermi-Dirac descontando su contribución a temperatura cero, que ya se tiene en cuenta en forma más precisa a través de las expresiones 3.14 y 3.15. Los resultados son

$$P_e = 8.255 \times 10^7 \left(\frac{Z\rho}{A} \right) T_e \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} - 9.916 \times 10^{12} \left(\frac{Z\rho}{A} \right)^{5/3}, \quad (3.16)$$

$$\mathcal{E}_e = 1.238 \times 10^8 \left(\frac{Z}{A} \right) T_e \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} - 1.487 \times 10^{15} \left(\frac{Z\rho}{A} \right)^{5/3} \left(\frac{Z}{A} \right), \quad (3.17)$$

$$C_{Ve} = 1.238 \times 10^8 \left(\frac{Z}{A} \right) \left[\frac{5}{2} \frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} - \frac{3}{2} \frac{F_{3/2}(\alpha)}{F_{1/2}(\alpha)} \right], \quad (3.18)$$

	Deuterio-Tritio	Vidrio	Polietileno	Carbono
α_1	-67.742	-12.31	7.6871	-35.061
α_2	180.48	33.183	-38.727	92.317
α_3	-139.71	-27.086	68.837	-72.062
α_4	7.742	3.746	-53.041	5.8493
α_5	19.23	2.467	15.244	8.9567

(todos estos valores están en unidades de 10^{10} dy cm^{-2})

Tabla 3.1

$a_{0.5/2}$.3009011112
$a_{2.5/2}$	1.856109332
$a_{4.5/2}$	-.5343060577
$a_{6.5/2}$	-2.085141224
$a_{0.3/2}$.7522527781
$a_{2.3/2}$.9280546661
$a_{4.3/2}$.8014590865
$a_{6.3/2}$	7.297994284
$a_{0.1/2}$	1.128379167
$a_{2.1/2}$	-.464027333
$a_{4.1/2}$	-2.003647716
$a_{6.1/2}$	-32.84097428
$b_{1.5/2}$.1767766953
$b_{2.5/2}$.0641500299
$b_{1.3/2}$.3535533906
$b_{2.3/2}$.1924500897
$b_{1.1/2}$.7071067812
$b_{2.1/2}$.5773502692

Tabla 3.2

$$\frac{\partial \xi_e}{\partial V_T} = 1.238 \times 10^8 \left(\frac{Z\rho}{A} \right) \left[\frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} - \frac{F_{3/2}(\alpha)}{F_{1/2}(\alpha)} \right] + 9.916 \times 10^{12} \left(\frac{Z\rho}{A} \right)^{5/3} \quad (3.19)$$

No es conveniente, ni resulta necesario, realizar un cálculo demasiado preciso de las funciones de Fermi-Dirac $F_g(\alpha)$, pues ello acarrearía un incremento injustificado del tiempo de cómputo. Para evitar esto hemos utilizado expresiones rápidas para el cálculo de los cocientes de funciones de Fermi-Dirac, derivadas de los desarrollos asintóticos para valores de α superiores a 1 e inferiores a -10 .^[64] Las expresiones son las siguientes (ver tabla 3.2 para los valores de los respectivos coeficientes).

* Si $\alpha < -10$,

$$\frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} = |\alpha| \cdot \frac{(|\alpha|^6 a_{0^{5/2}} + |\alpha|^4 a_{2^{5/2}} + |\alpha|^2 a_{4^{5/2}} + a_{6^{5/2}})}{(|\alpha|^6 a_{0^{3/2}} + |\alpha|^4 a_{2^{3/2}} + |\alpha|^2 a_{4^{3/2}} + a_{6^{3/2}})}$$

$$\frac{F_{3/2}(\alpha)}{F_{1/2}(\alpha)} = |\alpha| \cdot \frac{(|\alpha|^6 a_{0^{3/2}} + |\alpha|^4 a_{2^{3/2}} + |\alpha|^2 a_{4^{3/2}} + a_{6^{3/2}})}{(|\alpha|^6 a_{0^{1/2}} + |\alpha|^4 a_{2^{1/2}} + |\alpha|^2 a_{4^{1/2}} + a_{6^{1/2}})}$$

* Si $\alpha > 1$,

$$\frac{F_{5/2}(\alpha)}{F_{3/2}(\alpha)} = \frac{(1 - b_{1^{5/2}} e^{-\alpha} + b_{2^{5/2}} e^{-2\alpha})}{(1 - b_{1^{3/2}} e^{-\alpha} + b_{2^{3/2}} e^{-2\alpha})}$$

$$\frac{\bar{F}_{3/2}(\alpha)}{\bar{F}_{1/2}(\alpha)} = \frac{(1 - b_{1^{3/2}} e^{-\alpha} + b_{2^{3/2}} e^{-2\alpha})}{(1 - b_{1^{1/2}} e^{-\alpha} + b_{2^{1/2}} e^{-2\alpha})}$$

Para valores de α comprendidos entre -10. y 1. hemos generado una tabla de paso fijo e igual a .1^[63,64] en la cual realizamos interpolación lineal para el valor de α requerido. La ubicación de la posición **I** en la tabla donde se debe realizar el cálculo, se obtiene a través de la siguiente expresión FORTRAN

$$I = \text{IDINT} (\text{ALFA} * 10 + 101.00) \quad ,$$

evitándose de esta forma el habitual proceso de búsqueda por comparación. En todos los casos hemos trabajado las funciones de Fermi-Dirac con una precisión mejor que el 1%.

Este modelo de ecuación de estado, que no tiene en cuenta efectos de ionización parcial, es similar al utilizado en el código numérico de la referencia [86], pero se ha puesto especial énfasis en una parametrización del mismo que lo hace computacionalmente más eficiente.

La expresión del calor absorbido debido al transporte térmico electrónico e iónico $H_{e,i}$ viene dada por

$$H_{e,i} = -\frac{1}{\rho} \underline{\nabla} \cdot \underline{F}_{e,i} \quad , \quad (3.20)$$

siendo las expresiones para los respectivos flujos de calor

$$\underline{F}_{e,i} = -\chi_{e,i} \underline{\nabla} T_{e,i} \quad (3.21)$$

Las fórmulas para las conductividades térmicas $\chi_{e,i}$ son^[93]

$$\chi_e^c = 20 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \cdot \frac{K_B (K_B T_e)^{5/2}}{m_e^{1/2} e^4 Z \ln \Delta_{ei}} \cdot \epsilon \delta_e \quad , \quad (3.22)$$

$$\chi_i = 20 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \cdot \frac{K_B (K_B T_i)^{5/2}}{m_i^{1/2} e^4 Z^4 \ln \Delta_i} \cdot (0.164) \quad , \quad (3.23)$$

donde $m_{e,i}$ son las masas del electrón e ión respectivamente, e el valor absoluto de la carga del electrón, $\ln \Delta_{ei}$ y $\ln \Delta_i$ los logaritmos Coulombianos electrón-ión e ión-ión, y ϵ y δ_e factores correctivos debido a campos eléctricos inducidos y scattering electrón-electrón respectivamente.

Si los efectos de degeneración cuántica de los electrones son importantes, la expresión para χ_e es^[93]

$$\chi_e^q = \frac{\sqrt{2} \pi}{3} \cdot \frac{K_B (K_B T_e) \epsilon_F^{3/2}}{m_e^{1/2} e^4 Z} \cdot G_\Gamma \quad , \quad (3.24)$$

siendo ϵ_F la energía de Fermi a temperaturas cero y G_Γ una función del parámetro de acoplamiento iónico y el número de onda de Fermi. Como las expresiones 3.22 y 3.24 representan los límites clásicos y cuántico de la conductividad térmica electrónica, Brysk y colaboradores^[93] sugieren tomar el siguiente promedio para χ_e

$$\chi_e = \sqrt{\chi_e^{c^2} + \chi_e^{a^2}} \quad (3.25)$$

La expresión vectorial de 3.20 para $H_{e,i}$ se puede expresar de manera muy versátil en una única fórmula, para cada una de las tres geometrías unidimensionales consideradas previamente

$$\underline{\nabla} \cdot (\chi \underline{\nabla} T) \left[\begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \chi \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) \\ \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \chi \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) \end{array} \right] = \frac{1}{\rho^{g-1}} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^{g-1} \chi \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) \quad , \quad (3.26)$$

donde $g = 1, 2$ y 3 corresponde a las geometrías plana, cilíndrica y esférica respectivamente.

La descripción que hemos hecho para el transporte térmico electrónico e iónico es de tipo hidrodinámico, lo cual presupone que los libres caminos medios de los electrones e iones deben ser mucho menores que las respectivas escalas de variación espacial de los perfiles de temperatura T_e y T_i . Sin embargo, en las experiencias de interacción láser-plasma, esta condición no es necesariamente satisfecha por los electrones. Por ejemplo, la imposibilidad de la luz láser de penetrar dentro del plasma más allá de la zona donde la den-

sidad alcanza su valor crítico (que es el valor para el cual la frecuencia de plasma iguala a la de la radiación electromagnética) hace que en la misma se produzca una intensa absorción de luz láser (absorción anómala). Esto puede dar lugar a abruptos perfiles de temperatura, con longitudes características de variación espacial comparables al libre camino medio electrónico, lo cual viola la hipótesis de aproximación hidrodinámica y la validez de la ley de Fourier 3.21 para el cálculo de flujos de calor.

Para evitar tal inconsistencia se ha utilizado la idea de poner un límite al máximo valor que puede tomar el flujo térmico electrónico. Esta cota superior se estima proporcional al máximo flujo de energía que puede transportar un flujo de electrones, con distribución Maxwelliana y velocidad promedio $(K_B T_e / m_e)^{1/2}$, que es ("free-streaming-limit") [94]

$$F_{e, \text{lim}} = f n_e \left(\frac{K_B T_e}{m_e} \right)^{1/2} K_B T_e \quad , \quad (3.27)$$

siendo f un parámetro cuyo valor, inferido mediante razonamientos clásicos, es del orden de 0.6. Resulta útil reunir las expresiones 3.21 y 3.27 a través del siguiente promedio armónico

$$\frac{1}{F_e'} = \frac{1}{F_e} + \frac{1}{F_{e, \text{lim}}} \quad , \quad (3.28)$$

de esta forma F_e' se identifica con el menor de los dos y una transición gradual entre ambos cuando tienen valores comparables. Recordando la expresión 3.21 de F_e , es posible elaborar 3.28 y obtener lo siguiente

$$\underline{F}_e' = -\chi_e' \underline{\nabla} T_e \quad , \quad (3.29)$$

siendo χ_e' una conductividad térmica modificada que automáticamente reproduce en la expresión 3.29 el límite 3.27

$$\chi_e' = \chi_e \left(1 + \frac{\chi_e |\nabla T_e|}{F_{e\text{lim}}} \right)^{-1}$$

No obstante, el análisis conjunto de resultados experimentales y teóricos ha llevado a reducir el valor del parámetro f en un orden de magnitud aproximadamente, para obtener buena concordancia teórico-experimental. También puede observarse en la literatura que no hay acuerdo en el valor preciso que se le suele asignar a f y a los posibles procesos físicos (efectos de campo magnético, inestabilidades iónico acústicas, campos eléctricos generados por electrones supratérmicos, etc.) responsables de valores tan severos del limitador de flujo térmico [94,95,99]. Recientemente se ha dado a conocer un estudio en el cual se señala precisamente este ambiente confuso en el que se desenvuelve la problemática del limitador de flujo térmico, y ha logrado explicar estos valores tan restrictivos del mismo a través de los métodos de la teoría cinética aplicados a situaciones con perfiles abruptos de la temperatura. Se concluye que valores $f = 0.04 \pm 0.01$ son consistentes con la teoría y resultados experimentales [96,97]. Nosotros en nuestros cálculos hemos adoptado el valor $f = 0.05$.

El término de intercambio colisional electrón-ión está dado por

$$K = C_{Vi} \frac{(T_i - T_e)}{\tau_{ei}} \quad , \quad (3.30)$$

siendo τ_{ei} el tiempo de termalización electrón-ión, cuya expresión para un grado arbitrario de degeneración electrónica es ^[93]

$$\tau_{ei} = \frac{3\pi m_i \hbar^3 (1 + e^\alpha)}{8 m_e^2 Z^2 e^4 \ln \Delta_{ei}} \quad , \quad (3.31)$$

siendo \hbar y α la constante y potencial de Planck respectivamente. Los logaritmos Coulombianos necesarios en las fórmulas 3.22, 3.23 y 3.31 se calculan de acuerdo al trabajo de Brysk y colaboradores ^[93].

En los plasmas densos de la fusión por confinamiento inercial el cálculo de la potencia específica emitida por radiación de Bremsstrahlung J , se debe realizar usando la distribución de Fermi-Dirac para los estados inicial y final del electrón participante. En estas condiciones Ferro Fontán y Sicardi Schifino han obtenido el siguiente resultado ^[98]

$$J = 5.0916 \times 10^{20} \rho \frac{Z^3}{A^2} T_e^{1/2} H(\alpha) \quad , \quad (3.32)$$

siendo $H(\alpha)$ una función del Potencial de Planck α , que representa la atenuación de la emisión con el incremento de la degeneración electrónica y se puede aproximar de la siguiente forma

$$H(\alpha) = 1.1 \quad , \quad \alpha \gg 2.5 \quad ,$$

$$H(\alpha) = (0.119)\alpha + 0.8 \quad , -6. < \alpha < 2.5 \quad ,$$

$$H(\alpha) = 0.08 \quad , \quad \alpha < -6. \quad .$$

En las simulaciones de implosión de blancos esféricos esta pérdida de energía es computada sólo si la temperatura electrónica del elemento de fluido en cuestión satisface

$$T_e > T_{op} \quad , \quad (3.33)$$

siendo

$$T_{op} = 10^7 \left(\frac{Z^3 \rho^2}{A^2} R \right)^{2/7} \quad ,$$

donde R es la distancia al centro del elemento de fluido. Esta condición representa una forma aproximada de tener en cuenta la opacidad del medio^[86].

Finalmente en la expresión de $\dot{S}Q_i$ hemos incluido el término de calentamiento viscoso por compresión por onda de choque Q_v , para ser consistentes con la inclusión de la presión viscosa numérica P_q en la ecuación de Euler. Su expresión es

$$Q_v = -P_q \frac{dV}{dt} \quad (3.34)$$

o sea el trabajo específico viscoso de compresión por unidad de tiempo.

III.1.2 Absorción y deposición de la luz láser

El modelo considera la energía total E_T absorbida por el blanco irradiado con luz láser y simula el pulso de potencia $P_L(t)$ incidente con un perfil Gaussiano recortado (este perfil puede ser cambiado a voluntad por otro cualquiera),

$$P_L(t) = P_0 \exp\left[-(t-t_0)^2/2\sigma^2\right] \quad \text{si } |t-t_0| \leq 3\sigma ,$$

$$P_L(t) = 0 \quad \text{si } |t-t_0| > 3\sigma ,$$

siendo t la coordenada temporal, t_0 el instante en que se alcanza la máxima potencia P_0 y σ la dispersión. La energía total del pulso es

$$E_T = \int_{t_0-3\sigma}^{t_0+3\sigma} P_L(t) dt$$

Utilizando los valores tabulados de la distribución normal para calcular la integral, se obtiene

$$E_T = (2.5) \sigma P_0 \quad , \quad (3.35)$$

que vincula la energía total absorbida E_T , la dispersión σ y la potencia de pico P_0 . Para una Gaussiana la relación entre su dispersión σ y el ancho total a la mitad de su altura máxima τ (FWHM) es

$$\sigma = \frac{\tau}{\sqrt{8 \ln 2}} \quad (3.36)$$

Las fórmulas (3.35) y (3.36) permiten calcular los parámetros P_0 y G en función de los valores E_T y \mathcal{G} , que habitualmente figuran dentro del conjunto de datos de una experiencia.

El pulso láser que incide sobre el blanco genera una corona de plasma tenue-enrarecido que incrementa su densidad hacia el interior del mismo. La radiación electromagnética que penetra desde el exterior va depositando gradualmente su energía en los electrones del plasma principalmente por bremsstrahlung inverso. Esto produce una atenuación exponencial de la energía incidente de manera que la potencia $P(r,t)$ dentro del plasma es

$$P(r,t) = P_L(t) \exp[-K_\lambda (R_0 - r)] \quad , \quad r \leq R_0 \quad , \quad (3.37)$$

donde K_λ es el coeficiente de atenuación por bremsstrahlung inverso y R_0 es la coordenada que denota la ubicación de la interfase plasma-vacío, o sea el máximo valor permitido de la coordenada espacial r (ver Fig. 3.9).

La expresión del coeficiente de atenuación K_λ es^[2]

$$K_\lambda = 2.45 \times 10^3 g_F \frac{Z^2}{\lambda_L^2 T_e^{3/2}} \frac{x^2}{\sqrt{1-x}} \quad , \quad (3.38)$$

donde,

λ_L = longitud de onda del láser,

$$x = \frac{\rho}{\rho_c} \quad ,$$

$$\rho_c = \pi A m_p m_e c^2 / Z e^2 \lambda_L^2 = \text{densidad crítica,}$$

c = velocidad de la luz,

g_F = factor de Gaunt.

El factor de gaunt g_F puede ser aproximado por

$$g_F = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \cdot K_0 \left(\frac{h\nu}{2K_B T_e} \right) \cdot \exp \left(\frac{h\nu}{2K_B T_e} \right) ,$$

siendo K_0 la función de Bessel modificada de orden cero y $h\nu$ la energía del fotón absorbido.

El plasma absorbe energía por bremsstrahlung inverso hasta que la radiación llega al lugar donde la frecuencia local de plasma ($\omega_p^2 = 4\pi n_e e^2 / m_e$) iguala a la de la radiación, o sea donde la densidad ρ alcanza su valor crítico ρ_c . Nótese que esta es inversamente proporcional al cuadrado de la longitud de onda λ_L del láser, luego cuanto menor sea la longitud de onda tanto más profunda será la penetración y por ende mejor el acoplamiento láser-plasma a través de este mecanismo.

La superficie donde la densidad ρ toma su valor crítico ρ_c se denomina habitualmente superficie crítica. De la luz láser que alcanza a llegar a la superficie crítica sin ser absorbida por bremsstrahlung inverso, depositamos localmente una fracción G ($G \leq 1$) de la misma y el resto $1-G$ se utiliza para simular la absorción resonante. Los electrones excitados a través de la absorción resonante en la zona de la superficie crítica poseen una energía cinética promedio, o equivalente una temperatura representativa T_H , superior a la de los electrones calentados por bremsstrahlung inverso, razón por la cual se los denomina electrones supratérmicos y dan origen, en los tratamientos cinéticos, a funciones de distribución bimodales. Sus propiedades han sido ampliamente estudiadas teórica y experimentalmente durante los últimos cinco años [101-111], pues se ha comprobado que bajo condiciones de alta irradiancia

(por ejemplo, $I > 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ para $\lambda_L = 1. \mu\text{m}$) juegan un papel muy importante en la dinámica de la evolución del blanco, sobre todo en los experimentos de implosión explosiva de blancos esféricos los cuales han dominado el espectro de experiencias de la década pasada.

Los electrones supratérmicos son emitidos desde la superficie crítica predominantemente hacia la corona de plasma tenue ($\rho < \rho_c$) que se forma con el material ablado. Pero los campos eléctricos instantáneos que se generan debido al efecto de separación de carga, los reflejan hacia la zona de plasma denso ubicada a continuación de la superficie crítica, donde depositan la mayor parte de su energía (Fig. 3.1). De esta forma podemos considerar que desde la superficie crítica, se propaga hacia el interior del blanco una corriente de electrones supratérmicos, que no rompe el balance de carga pues en este sentido es compensada por una corriente de electrones fríos o térmicos de retorno, y que deposita su energía en los electrones del medio a través de colisiones elásticas e inelásticas. Debemos notar que este mecanismo de transporte de energía escapa a la aproximación hidrodinámica en la medida que no puede ser tenido en cuenta mediante el esquema difusivo utilizado para el conjunto de electrones fríos o térmicos. Desde este punto de vista lo que hagamos para asimilarlo dentro de nuestro modelo constituirá una especie de "remiendo" a la aproximación hidrodinámica, análogo a la inclusión del limitador de flujo térmico.

La deposición de energía mediante electrones supratérmicos es un mecanismo no local de transporte y su inclusión en los códigos de simulación se realiza usualmente a través de laboriosos esquemas de cálculo multigrupal similares a los aplicados en los cálculos de flujo neutrónico en reactores [112]. No obstante el grado de precisión que se puede lograr de esta manera es deseable, teniendo presente que el tiempo de cómputo de estas simulaciones

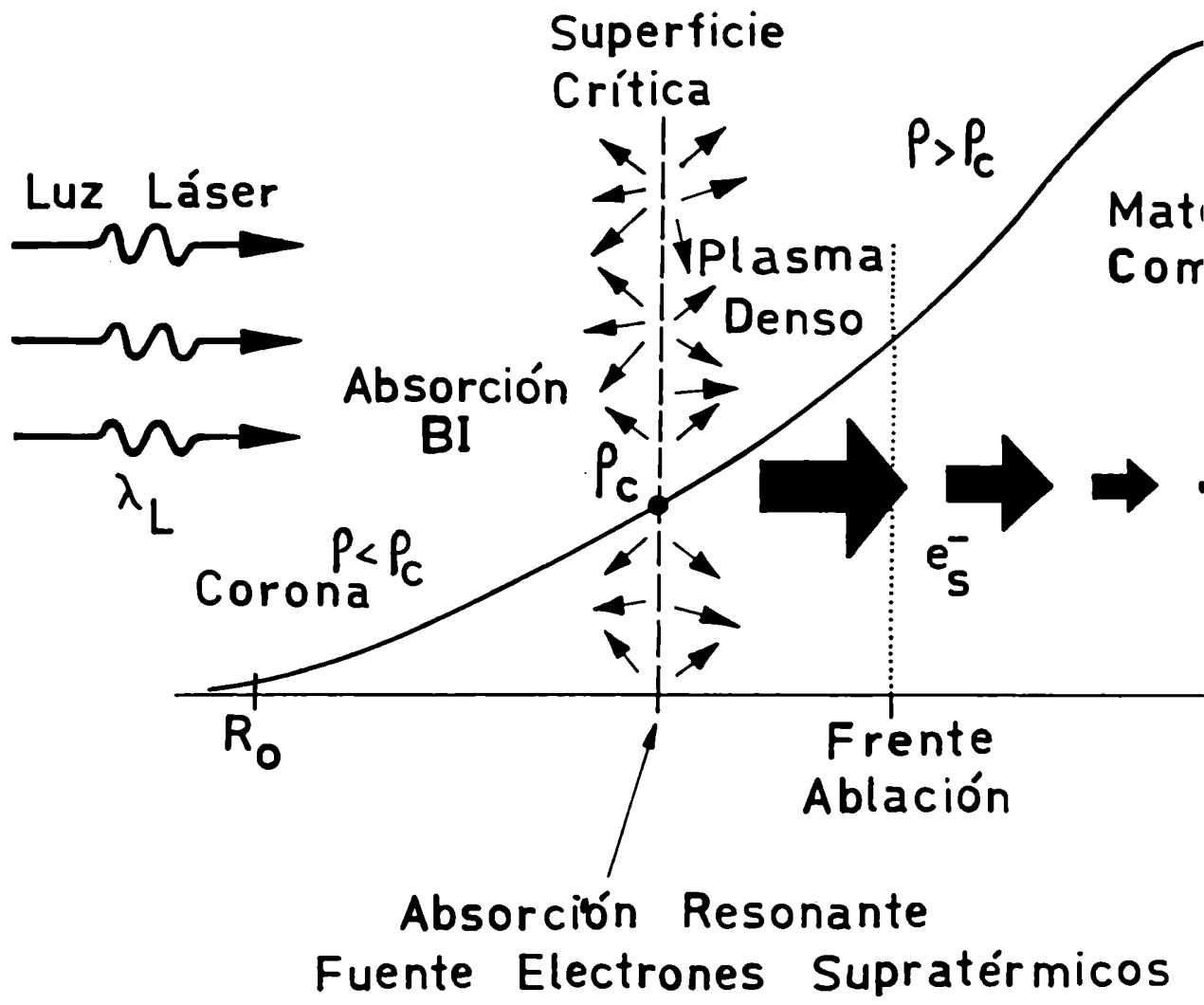
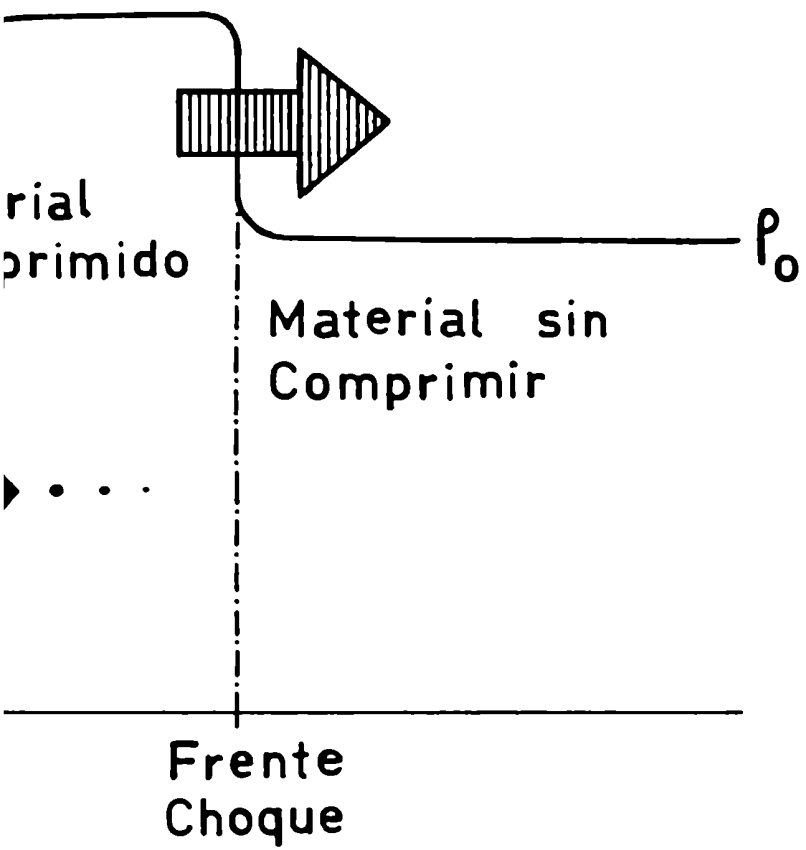


Fig. 3.1: esquema ilustrativo de los mecanismos de absorción y deposición de la... También se ha incluido la ubicación del frente de ablación y de choqu...



luz láser considerados en el modelo .

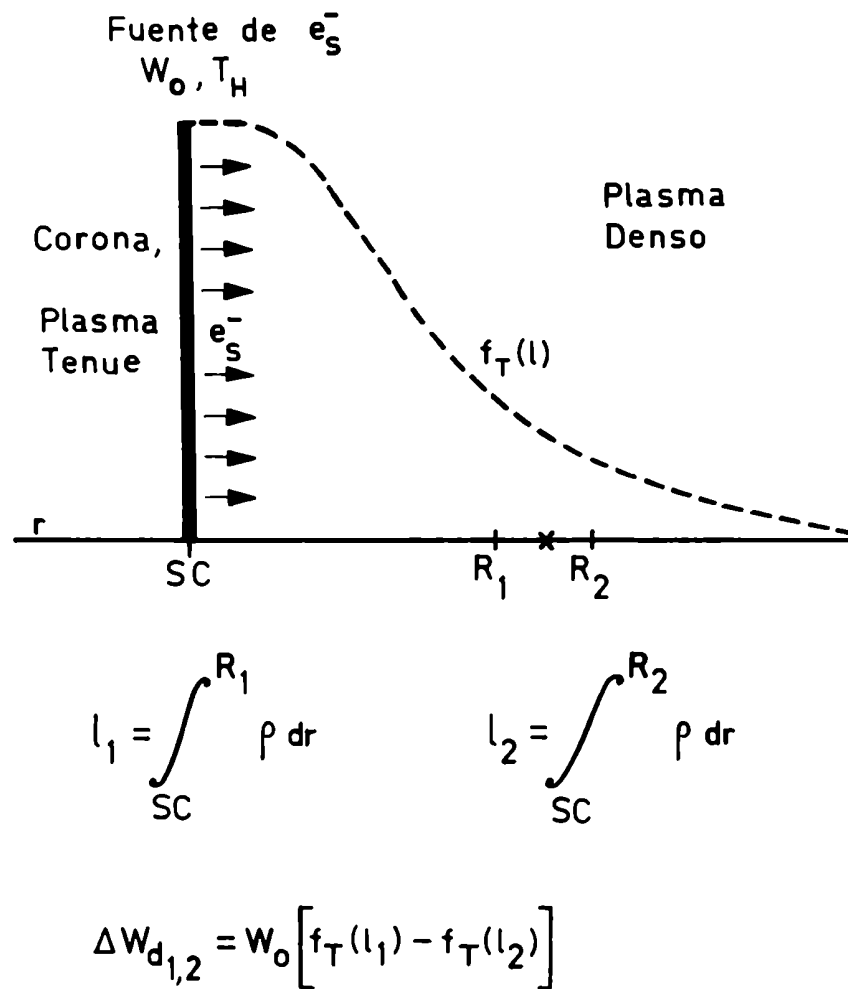


Fig. 3.2: esquema ilustrativo para el cálculo de la deposición de energía por pasaje de electrones supratérmicos, de acuerdo al modelo de Marracq, Kidder (ref. 107).

numéricas es un factor crítico, modelar el fenómeno de otra forma que siga siendo razonablemente precisa pero más económica.

Es con este objetivo que Harrach y Kidder^[107] han logrado desarrollar expresiones simples para la deposición de energía por pasaje de electrones supratérmicos, basándose en la teoría clásica de penetración electrónica de Spencer^[100]. Su principal resultado puede resumirse de la siguiente manera: si W_0 es la cantidad total de energía a depositar por los electrones supratérmicos y $W_d(l)$ la energía depositada al cabo de una penetración l en el material (en gr/cm²), entonces la fracción de energía transmitida $f_T(l)$ de l hacia adelante es (ver Fig. 3.2)

$$f_T(l) = (1 + \gamma) e^{-\gamma} = 1 - \frac{W_d(l)}{W_0} \quad , \quad (3.39)$$

siendo

$$\gamma = (0.59) \ln\left(\frac{Z}{0.3}\right) \sqrt{\frac{l}{b T_H^{(1+\mu)}}} \quad ,$$

$$l = \int_{\text{Sup. Crit. (SC)}}^R \rho dx$$

Z es el número atómico del material absorbente, b y μ constantes que dependen del material^[107] y T_H la temperatura de la fuente de electrones supratérmicos. Dado un intervalo en el eje espacial x de extremos R_1 y R_2 puede calcularse fácilmente la cantidad de energía depositada en el mismo de la siguiente manera: sea $W_d(l)$ la cantidad de energía depositada al cabo de un recorrido de rango l , si calculamos en ambos extremos del intervalo podemos escribir:

$$W_d(l_1) = W_0 - W_0 f_T(l_1) = W_0 [1 - f_T(l_1)] \quad ,$$

$$W_d(l_2) = W_0 - W_0 f_T(l_2) = W_0 [1 - f_T(l_2)] \quad ,$$

la energía depositada en este intervalo $\Delta W_{d_{12}}$ es:

$$\Delta W_{d_{12}} = W_d(l_2) - W_d(l_1) = W_0 [f_T(l_1) - f_T(l_2)] \quad , \quad (3.40)$$

lo cual también puede interpretarse como diferencia de energías transmitidas.

La temperatura T_H de la fuente de electrones supratérmicos puede estimarse mediante el valor local de la intensidad I del haz láser a través de la expresión empírica

$$T_H = \alpha_1 (I \lambda_L^2)^{\alpha_2} \quad , \quad (3.41)$$

que representa el escalado de la misma con la intensidad I y la longitud de onda λ_L del láser^[101-102]. Los valores del exponente α_2 están comprendidos entre .3 y .43. Con este modelo de deposición continua de energía Hurrachi y Kidder han obtenido buenos resultados en la simulación de experiencias de irradiación de discos planos de aluminio y oro^[107].

El carácter altamente energético de los electrones supratérmicos producidos en la zona de la superficie crítica hace que los mismos transporten y depositen energía por delante del frente de ablación, calentando y degradando el material y aumentando el trabajo necesario para comprimirlo. Este precalentamiento tiene consecuencias muy significativas en los experimentos de implosión

de blancos esféricos de vidrio de paredes delgadas rellenos con una mezcla equimolar de Deuterio-Tritio. En efecto, al irradiar estos blancos con pulsos de alta potencia (típicamente $I \sim 10^{14} - 10^{16} \text{ Wcm}^{-2}$, $\lambda_L = 1 \mu\text{m}$) se producen electrones de temperaturas $T_H \sim 5 - 15 \text{ KeV}$. A esta temperatura el libre camino medio de los electrones supratérmicos resulta comparable y aún mayor que el espesor de la pared del blanco; a causa de esto el vidrio se calienta intensa y uniformemente hasta explotar antes de que se haga sentir algún efecto hidrodinámico, y como consecuencia de ello provoca la compresión del combustible termonuclear. Este modo de operación en blancos esféricos se conoce bajo el nombre de implosiones explosivas ("exploding pusher").

Nos interesa extender el modelo de deposición continua de Harrach y Kidder para aplicarlo en la simulación numérica de tales experimentos. La idea consiste en considerar al espesor de vidrio comprendido entre la superficie crítica y la interfase vidrio-combustible como una especie de "caja resonante" donde el electrón supratérmico deposita su energía gradualmente a través de varios pasajes por el mismo lugar (ver Fig. 3.4). En cada pasaje calculamos la deposición con la fracción de transmisión $f_T(l)$ de la expresión 3.39 correspondiente al modelo de Harrach y Kidder. Para justificar esta idea tenemos que tener en cuenta lo siguiente: en primer lugar que los electrones supratérmicos que ingresan a la corona ($\rho < \rho_c$) no pueden acelerar y arrastrar en forma conjunta a los iones debido a la diferencia de masa entre ellos. Esta separación de carga induce campos eléctricos instantáneos que los reflejan e inyectan nuevamente al sector de plasma denso ($\rho > \rho_c$), donde depositan su energía en forma eficiente. En segundo lugar aquellos electrones que logran atravesar todo el vidrio sin ser totalmente atenuados ingresan a la

masa gaseosa de combustible termonuclear ($\rho_{DT} \sim .001 \text{ g cm}^{-3}$). Si tenemos en cuenta las diferencias en densidad ρ ($\rho_v \sim 1. \text{ g cm}^{-3}$) y en número atómico Z ($\langle Z_{DT} \rangle = 1., \langle Z_v \rangle = 10.$) entre el vidrio y la mezcla fusible Deuterio-Tritio, podemos pensar que esta transición es casi como un "salto al vacío" para el electrón supratérmico que atraviesa rápidamente esta cavidad esférica prácticamente sin perder energía en la misma y penetra nuevamente en el vidrio por el extremo opuesto del blanco, reemplazando al electrón que sale por allí y manteniendo en consecuencia el balance de carga (ver Fig. 3.3).

Esta idealización de la dinámica de los electrones supratérmicos nos permitirá calcular su atenuación en el vidrio despreciando la energía depositada en el combustible gaseoso, la cual es a su vez una hipótesis común en los métodos analíticos sencillos que pretenden escalar las condiciones finales del combustible con los parámetros iniciales de la experiencia^[131].

Supongamos que en un instante determinado el espesor de vidrio comprendido entre la superficie crítica y la interfase vidrio-DT tiene asociado un espesor generalizado γ_T que de acuerdo al detalle de la expresión 3.39 podemos escribir de la siguiente manera

$$\gamma_T = (0.59) \ln\left(\frac{Z}{0.3}\right) \sqrt{\frac{l}{b T_H^{(1+\mu)}}}, \quad (3.42)$$

siendo

$$l_T = \int_{SC}^{v-DT} \rho da$$

Como se ve esta cantidad depende no solo del estado hidrodinámico a través del valor de l_T , sino también del valor de la temperatura de la fuente T_H . Consideremos ahora la cantidad de energía depositada en un intervalo de extremos γ_1 e γ_2 dentro del vidrio debido a dos pasajes consecutivos del electrón supratérmico, teniendo en cuenta que en cada pasaje deposita de acuerdo

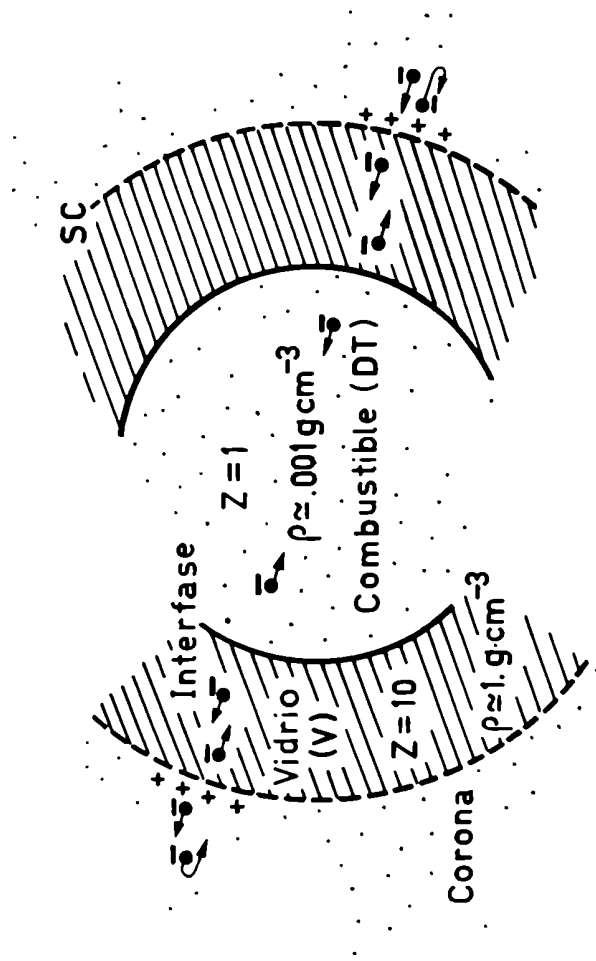


Fig. 3.3: este esquema muestra la idealización asumida para la dinámica de los electrones supratérmicos, que nos permite calcular la deposición de su energía en el vidrio suponiendo múltiples pasajes a través del mismo.

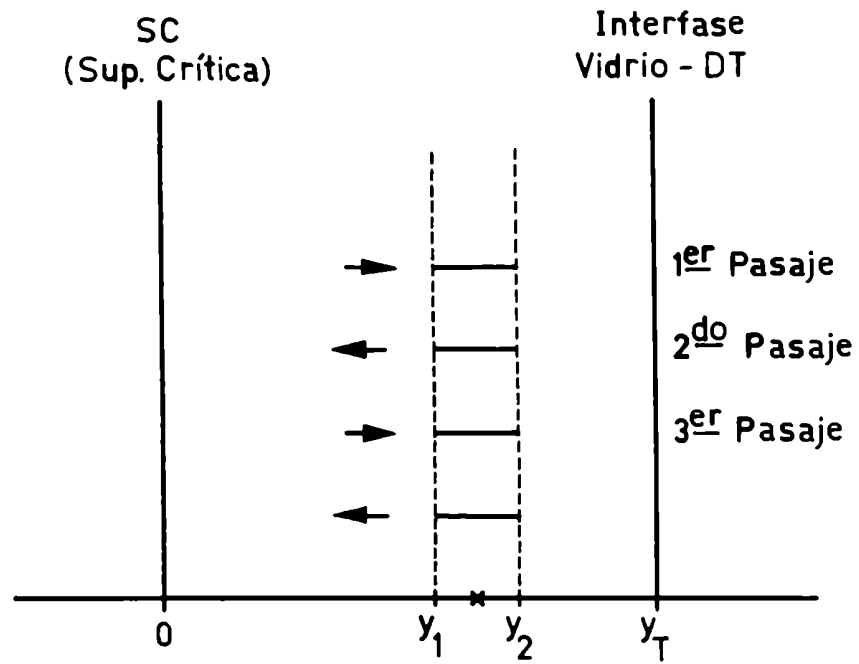


Fig. 3.4: esquema ilustrativo para el cálculo de la deposición de energía por múltiples pasajes de electrones supratérmicos .

a la ley 3.40 (ver Fig. 3.4)

$$\Delta W_{d_{12}} = W_0 \left\{ [f_T(\gamma_1) - f_T(\gamma_2)] + [f_T(2\gamma_T - \gamma_2) - f_T(2\gamma_T - \gamma_1)] \right\} ,$$

si aplicamos este razonamiento sucesivamente a múltiples pasajes podemos obtener

$$\begin{aligned} \Delta W_{d_{12}} = W_0 \left\{ [f_T(\gamma_1) - f_T(\gamma_2)] \right. \\ \left. - [f_T(2\gamma_T - \gamma_1) - f_T(2\gamma_T - \gamma_2)] \right. \\ \left. + [f_T(2\gamma_T + \gamma_1) - f_T(2\gamma_T + \gamma_2)] \right. \\ \left. - [f_T(4\gamma_T - \gamma_1) - f_T(4\gamma_T - \gamma_2)] + \dots \right\} , \end{aligned}$$

de donde podemos deducir fácilmente una ley análoga a la expresión 3.40 pero debida a múltiples pasajes, o sea

$$\Delta W_{d_{12}} = W_0 \left\{ G(\gamma_1, \gamma_T) - G(\gamma_2, \gamma_T) \right\} , \quad (3.43)$$

donde definimos a $G(\gamma, \gamma_T)$ como el factor de transmisión teniendo en cuenta múltiples pasajes en un recorrido periódico de período $2\gamma_T$ y cuya expresión viene dada por

$$G(\gamma, \gamma_T) = \sum_{k \geq 0} \left\{ f_T(2k\gamma_T + \gamma) - f_T[2(k+1)\gamma_T - \gamma] \right\} , \quad (3.44)$$

definida para $0 \leq \gamma \leq \gamma_T$

Podemos verificar que este factor de transmisión satisface dos propiedades básicas: $G(0, \gamma_T) = 1$ y $G(\gamma_T, \gamma_T) = 1$, que significan que al principio tenemos todo para transmitir y al final tenemos todo depositado, respectivamente. Para la primera de ellas podemos escribir

$$G(0, \gamma_T) = \sum_{k \geq 0} \left\{ f_T(2k\gamma_T) - f_T[2(k+1)\gamma_T] \right\} = f_T(0) = 1 \quad ,$$

para lo cual hay que tener en cuenta que $f_T(x) \rightarrow 0$ si $x \rightarrow \infty$ (lo cual también garantiza la convergencia de la serie). Para la segunda ponemos

$$G(\gamma_T, \gamma_T) = \sum_{k \geq 0} \left\{ f_T[(2k+1)\gamma_T] - f_T[(2k+1)\gamma_T] \right\} = 0 \quad .$$

En las Figuras 3.5 a 3.7 presentamos los gráficos de $G(\gamma, \gamma_T)$ en función de la variable γ para distintos valores del parámetro γ_T en el intervalo $.5 \leq \gamma_T \leq 7.5$. Para hacer el análisis de las mismas debemos tener presente que la función $f_T(x)$ cae del valor 1. a .1 entre $x=0$. y $x=4$. por lo tanto podemos considerar que a partir de este valor la energía que transportan los electrones supratérmicos ha sido prácticamente depositada de acuerdo al modelo de Harrach y Kidder. De los gráficos vemos que para valores pequeños de γ_T el factor de transmisión $G(\gamma, \gamma_T)$ tiende a una línea recta, lo cual representa un mecanismo de deposición uniforme que a su vez es consistente con lo que significa γ_T pequeño: valores altos de T_H (electrones muy energéticos) y valores bajos de l_T (poco espesor de vidrio o baja densidad). O sea que en esta situación los electrones supratérmicos realizan tantos pasajes que finalmente reparten su energía en forma uniforme. En cambio para valores grandes de γ_T las cruvas de $G(\gamma, \gamma_T)$ tienden a parecerse más

entre sí y aun a superponerse. Este efecto es particularmente notorio en la figura 3.7 donde resulta difícil diferenciar entre sí las curvas correspondientes a los valores $\gamma_T = 6, 6.5, 7, \text{ y } 7.5$. Se lo puede entender si se piensa que a medida que γ_T crece y supera el valor ~ 4 , la energía queda prácticamente depositada al cabo de un solo pasaje independientemente del valor de γ_T . Por lo tanto podemos establecer otra propiedad del factor de transmisión $G(\gamma, \gamma_T)$

$$G(\gamma, \gamma_T) \xrightarrow{\gamma_T \rightarrow \infty} f_T(\gamma)$$

Para que todo este tratamiento resulte computacionalmente eficiente no es posible pensar en calcular la función $G(\gamma, \gamma_T)$ a través de la serie 3.44 dentro del código numérico de simulación. Es preferible tabular la función $G(\gamma, \gamma_T)$ en una tabla de doble entrada y luego realizar interpolación numérica en la misma durante la simulación. Desde este punto de vista resulta conveniente redefinir la función $G(\gamma, \gamma_T)$ en función de la variable normalizada $\hat{\gamma} = \gamma/\gamma_T$.

$$\hat{G}(\hat{\gamma}, \gamma_T) = \sum_{k \geq 0} \left\{ f_T[\gamma_T(2k + \hat{\gamma})] - f_T[\gamma_T(2(k+1) - \hat{\gamma})] \right\}, \quad (3.45)$$

para $0 \leq \hat{\gamma} \leq 1$, siendo $\hat{\gamma} = \frac{\gamma}{\gamma_T} = \sqrt{\frac{l}{l_T}}$.

Con esta definición $\hat{G}(\hat{\gamma}, \gamma_T)$ verifica

$$\hat{G}(0, \gamma_T) = 1 \quad \text{y} \quad \hat{G}(1, \gamma_T) = 0$$

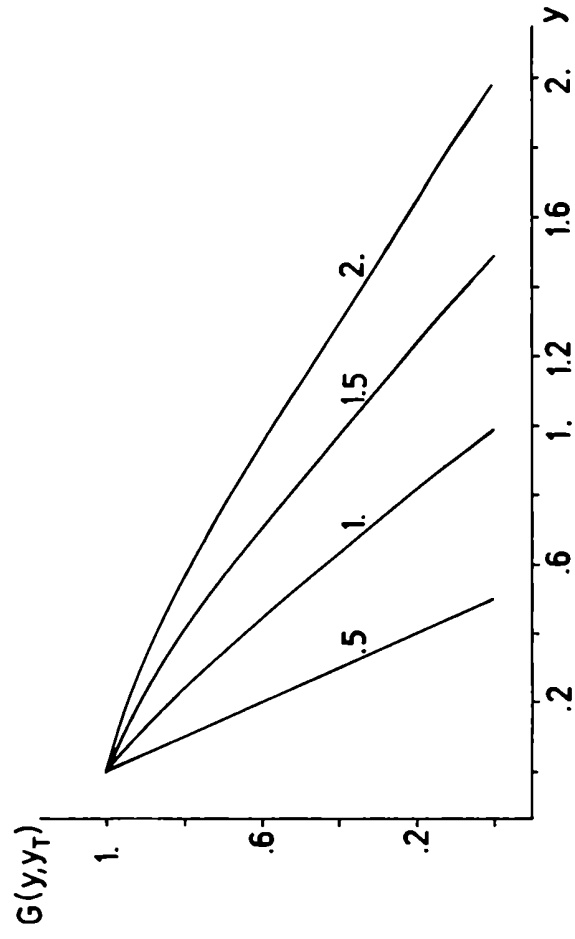


Fig. 3.2: gráficos del factor de transmisión $G(y, y_T)$ en función de y para $y_T = .5, 1, 1.5$ y 2 .

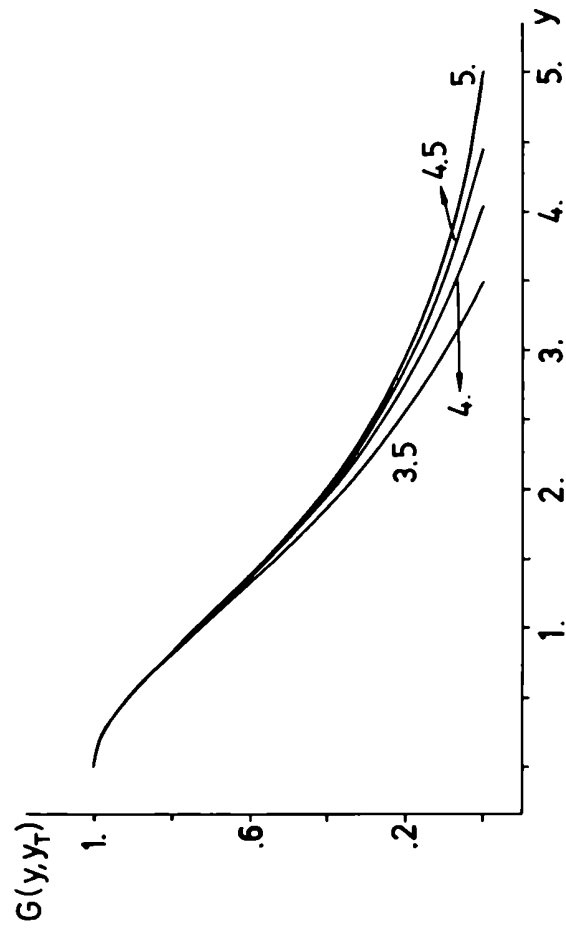


Fig. 3.5: gráficos del factor de transmisión $G(y, Y_T)$ en función de y para $Y_T = 3.5, 4., 4.5$ y $5.$

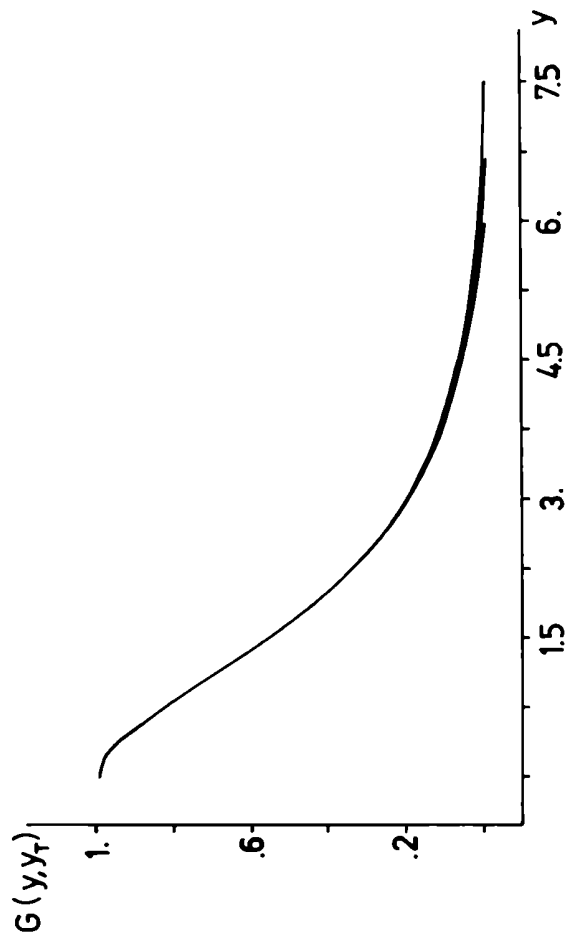


Fig. 3.2: gráficos del factor de transmisión $G(y, y_T)$ en función de y para $y_T = 6.$, 6.5 , $7.$ y 7.5 .

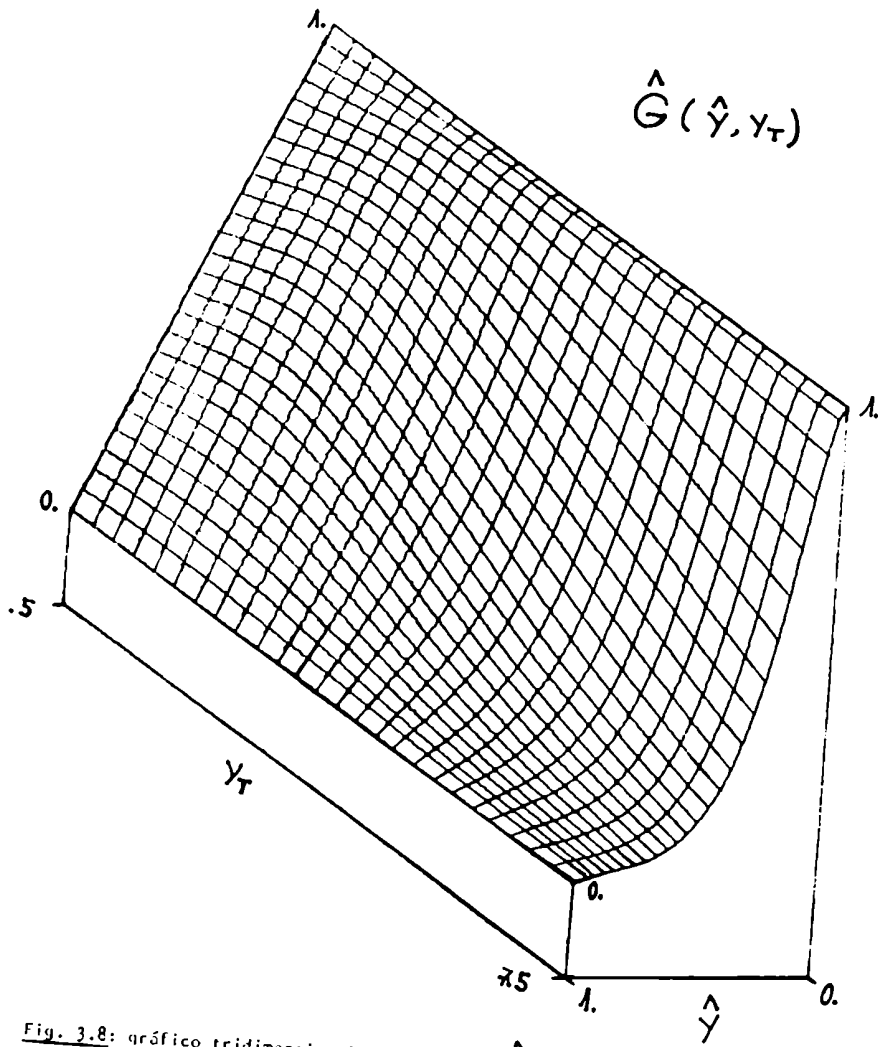


Fig. 3.8: gráfico tridimensional de la función $\hat{G}(\hat{y}, y_T)$ en función de \hat{y} y y_T .

En la Fig. 3.8 presentamos el gráfico tridimensional de $\hat{G}(\hat{\gamma}, \gamma_T)$ en función de $\hat{\gamma}$ e γ_T calculada a través de la serie 3.45 con una precisión relativa menor que 10^{-12} . Como se ve el comportamiento es suave y resulta apropiado para realizar interpolación cuadrática en dos dimensiones^[68]. En la construcción de la tabla se ha tenido la precaución de tomar pasos constantes en $\hat{\gamma}$ e γ_T , para evitar el proceso habitual de búsqueda previo al cálculo de la interpolación. De esta manera dado un par de valores $\hat{\gamma}$ (YSS) e γ_T (YTT) para el cual interesa evaluar $\hat{G}(\hat{\gamma}, \gamma_T)$, la ubicación I, J en la tabla se obtiene directamente mediante expresiones FORTRAN del tipo

$$I = \text{IDINT}(50 * \text{YSS} + 1.00) \quad \text{y} \quad J = \text{IDINT}(2 * \text{YTT})$$

Este modelo para computar la deposición de energía por electrones supratérmicos en implosiones explosivas de blancos de paredes delgadas representa una simplificación sustancial respecto de un cálculo de tipo multigrupal y en consecuencia una importante economía de tiempo de cómputo. Para tener una idea basta mencionar que el mismo caso corrido con electrones supratérmicos sólo incrementa en un 25% el tiempo de cómputo respecto de la corrida sin este efecto.

III.1.3 Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno necesarias para resolver el modelo dependen de la situación que se pretende simular en particular de la geometría y condiciones de la experiencia. Como ya hemos mencionado, en este trabajo nos interesa simular experiencias de compresión por onda de choque en blancos planos (geometría plana) e implosiones de blancos esféricos (geometría esféri-

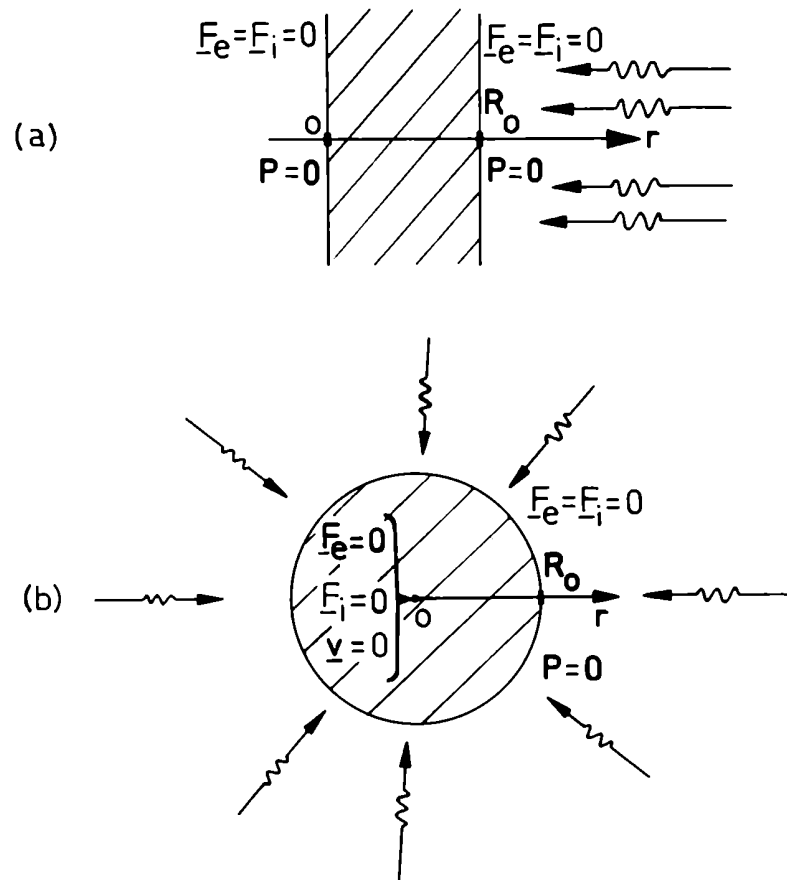


Fig. 3.2: esquema ilustrativo del blanco y las condiciones de contorno para las geometrías plana (a) y esférica (b) .

ca). En ambos casos las condiciones de contorno se refieren a la ecuación de Euler (3.5) y a las ecuaciones para las temperaturas T_e y T_i (3.9). En la fig. 3.9 se presentan los esquemas de blancos y condiciones de contorno para cada geometría

a) Geometría plana.

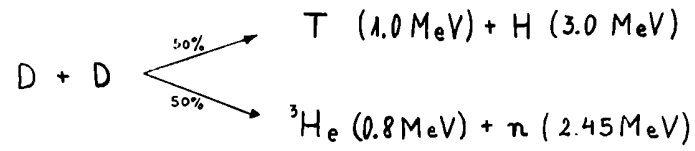
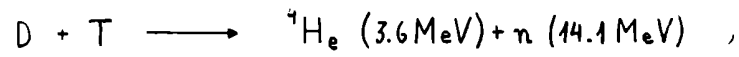
- 1) Presión externa nula ($P = 0.$) sobre ambas caras del blanco ($\pi = 0.$ y $\pi = R_0.$).
- 2) Flujos de calor F_e y F_i nulos a través de ambas caras del blanco ($\pi = 0.$ y $\pi = R_0.$).

b) Geometría esférica

- 1) Presión externa nula ($P = 0.$) en la superficie externa del blanco ($\pi = R_0.$).
- 2) Flujos de calor F_e y F_i nulos a través de la superficie externa del blanco ($\pi = R_0.$) y en el centro ($\pi = 0.$).
- 3) Velocidad nula ($v = 0.$) en el centro del blanco ($\pi = 0.$).

III.1.4 Las reacciones termonucleares

Cuando los núcleos de Deuterio (D) y Tritio (T) del combustible termonuclear adquieren suficiente energía cinética como para vencer la repulsión coulombiana entre ellos, comienzan a producirse reacciones de fusión nuclear. En este trabajo vamos a considerar las siguientes tipos de reacciones termonucleares



Cada especie nuclear (D, T, ${}^4\text{He}$, ${}^3\text{He}$, H, n) está caracterizada por un número atómico Z_K , un número másico A_K y una fracción de población f_K . De manera que el número atómico promedio \bar{Z} y másico promedio \bar{A} del combustible vienen dados por

$$\bar{Z} = \sum_K f_K Z_K , \quad (3.46)$$

$$\bar{A} = \sum_K f_K A_K \quad (3.47)$$

Por otro lado los f_K cumplen

$$f_K = \frac{n_K}{n_L} , \quad (3.48)$$

y satisfacen la condición de normalización

$$\sum_K f_K = 1 \quad (3.49)$$

siendo n_k la densidad numérica de la especie nuclear k-ésima y n_i la densidad numérica de iones promedio.

En el instante inicial ($t = 0$) la composición del combustible es una mezcla equimolar de DT, o sea que las fracciones f_k iniciales son

$$f_D = \frac{1}{2}, \quad f_T = \frac{1}{2}, \quad f_{He} = \frac{1}{2}, \quad f_{He} = \frac{1}{2}, \quad f_H = \frac{1}{2}, \quad f_n = \frac{1}{2}.$$

Para instantes posteriores ($t > 0$) las reacciones termonucleares alteran la constitución inicial del combustible. Si con R_{DT} y R_{DD} denotamos la cantidad de reacciones por unidad de tiempo y volumen ("reaction rates" $|R_{DT}| = |R_{DD}| = \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$) de tipo DT y DD, cuyas expresiones son

$$R_{DT} = n_i^2 f_D f_T (\overline{\sigma v})_{DT} = n_D n_T (\overline{\sigma v})_{DT}, \quad (3.50)$$

$$R_{DD} = \frac{1}{2} n_i^2 f_D f_D (\overline{\sigma v})_{DD} = \frac{1}{2} n_D^2 (\overline{\sigma v})_{DD}, \quad (3.51)$$

siendo $(\overline{\sigma v})_{DT}$ y $(\overline{\sigma v})_{DD}$ los respectivos valores medios sobre la distribución de velocidad relativa de los reactantes del producto sección eficaz (σ) por el módulo de la velocidad (v), podemos escribir las ecuaciones cinéticas para la evolución temporal de cada una de las densidades n_k de la siguiente manera [115]

$$\frac{dn_D}{dt} = -2R_{DD} - R_{DT},$$

$$\frac{dn_T}{dt} = -R_{DT} + \frac{1}{2} R_{DD},$$

$$\frac{dn_n}{dt} = R_{DT} + \frac{1}{2} R_{DD}$$

$$\frac{dn_{He}}{dt} = R_{DT} \quad ,$$

$$\frac{dn_{He}}{dt} = \frac{1}{2} R_{DD} \quad (3.52)$$

$$\frac{dn_H}{dt} = \frac{1}{2} R_{DD}$$

Si sumamos todas las ecuaciones del sistema 3.52 y teniendo en cuenta que

$$\sum_k n_k = n_i \quad , \text{ obtenemos}$$

$$\frac{dn_i}{dt} = 0 \quad (3.53)$$

En el tratamiento de las reacciones termonucleares vamos a realizar dos aproximaciones:

1) Supondremos que los neutrones producidos en las reacciones de fusión escapan del sistema libremente, con la correspondiente pérdida de masa, momento y energía que esto significa .

2) Supondremos que las partículas cargadas producidas en las reacciones de fusión depositan su energía localmente contribuyendo al calentamiento "in situ" del combustible.

La primera de estas aproximaciones se debe a que en los casos que vamos a simular los neutrones poseen libres caminos medios suficientemente grandes como para escapar del blanco fácilmente. La segunda de ellas es más restrictiva, ya que particularmente para el caso de las partículas alfa (${}^4\text{He}$) los libres caminos medios no son tan pequeños como para suponer deposición

local en todos los casos. Precisamente el transporte de energía y su deposición en el combustible fusionable a través de ellas es lo que origina el frente termonuclear de quemado ("Thermonuclear burn front"). Sin embargo no es objetivo del presente trabajo estudiar la ignición y el quemado de blancos de interés termonuclear, y en las implosiones esféricas que presentaremos en el capítulo V la energía depositada por los productos de fusión no es significativa.

Como consecuencia de la pérdida de neutrones del sistema, en nuestro caso no se satisface la condición 3.53. Por el contrario, la disminución de n_i en el tiempo viene dada por

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{dn_m}{dt} = -R_{DT} - \frac{1}{2} R_{DD} \quad (3.54)$$

Si definimos las cantidades S_{DT} y S_{DD} como

$$S_{DD} = R_{DD}/n_i \quad \text{y} \quad S_{DT} = R_{DT}/n_i \quad , \quad (3.55)$$

podemos escribir un sistema de ecuaciones como el 3.52 pero para las fracciones f_x

$$\frac{df_D}{dt} = -2 S_{DD} - S_{DT} \quad ,$$

$$\frac{df_T}{dt} = -S_{DT} + \frac{1}{2} S_{DD} \quad , \quad (3.56)$$

$$\frac{df_{^4\text{He}}}{dt} = S_{DT} \quad , \quad \frac{df_{^3\text{He}}}{dt} = \frac{1}{2} S_{DD} \quad , \quad \frac{df_H}{dt} = \frac{1}{2} S_{DD} \quad ,$$

donde debemos tener presente que debido a 3.54 las fracciones están sujetas a un proceso de renormalización al cabo de cada paso temporal de integración,

$$f_k' = \frac{f_k}{\sum_j f_j} \quad (3.57)$$

La expresión de la energía específica depositada localmente por los productos cargados de fusión por unidad de tiempo en iones Y_i y electrones Y_e es

$$Y_i = P_{DT} R_{DT} E_{DT} + P_{DD} R_{DD} E_{DD} \quad , \quad (3.58)$$

$$Y_e = (1 - P_{DT}) R_{DT} E_{DT} + (1 - P_{DD}) R_{DD} E_{DD} \quad , \quad (3.59)$$

siendo P_{DT} y P_{DD} la fracción volcada en los iones ¹⁸⁹

$$P_{DT} = \frac{T_e}{T_e + 3.71 \times 10^8} \quad ,$$

$$P_{DD} = \frac{T_e}{T_e + 1.2 \times 10^9} \quad ,$$

y E_{DT} y E_{DD} las energías totales de cada caso

$$E_{DT} = E_{4He} = 3.6 \text{ MeV} \quad ,$$

$$E_{DD} = E_T + E_H + E_{3He} = 4.8 \text{ MeV}$$

Para las expresiones de los promedios $(\overline{\sigma v})_{DT}$ y $(\overline{\sigma v})_{DD}$ no hemos utilizado los ajustes semiempíricos convencionales ^[2,89,113], sino los resultados

	$T(D,n) \text{ } ^4\text{He}$	$D(D,n) \text{ } ^3\text{He}$	$D(D,H)T$
A	8.9531×10^{-13}	5.57578×10^{-15}	6.18595×10^{-15}
B	6.661	6.26962	6.26962
P_2	2.818421×10^{-2}	3.328985×10^{-3}	2.543079×10^{-3}
P_3	6.116184×10^{-2}	2.948735×10^{-3}	2.216964×10^{-3}
P_4	2.834474×10^{-3}	0.	0.
P_5	8.955113×10^{-3}	0.	0.
P_6	-5.734052×10^{-5}	0.	0.

Tabla 3.3

de Peres^[114] que representan un ajuste más realista a temperaturas por debajo de los 10 KeV. Podemos resumir sus expresiones de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma v \rangle &= A \theta \left(\frac{\xi}{T^3} \right)^{1/2} \exp(-3\xi) , \\
 \theta &= T/F(T) \quad , \quad \xi = B/\theta^{1/3} \quad , \quad (3.60)
 \end{aligned}$$

$$F(T) = 1 - T \cdot \frac{[P_2 + T(P_4 + TP_6)]}{[1 + T(P_3 + TP_5)]}$$

los valores de las constantes A , B , P_2 , P_3 , P_4 , P_5 y P_6 dependen de la reacción y se dan en la Tabla 3.3. Las unidades de la temperatura T son KeV y las del promedio $\langle \sigma v \rangle$ son $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$.

III.1.5 Teoremas de Conservación

Vamos a demostrar a continuación los teoremas de conservación del impulso y la energía dentro del contexto de nuestro modelo. El interés en dar forma explícita a estos resultados bien conocidos más allá de lo que ellos mismos significan, reside en el hecho de que representan potenciales elementos de diagnóstico para la calidad del método de integración numérica empleado. En efecto, un modelo que sea resoluble analíticamente mide sus aciertos y desaciertos fundamentalmente en función de las hipótesis y aproximaciones del mismo. En cambio, como es nuestro caso, en un modelo cuya solución no es analítica, el grado de calidad del método numérico utilizado puede imponer restricciones adicionales. Es importante entonces realizar controles al método numérico que

permitan estimar, independientemente de las cualidades del modelo, la confiabilidad de la solución.

Nuestra idea es la siguiente, por un lado disponemos de un conjunto de ecuaciones diferenciales con sus condiciones de contorno que definen matemáticamente al modelo y de cuya integración numérica obtendremos resultados. Por otro lado, es posible demostrar, como veremos a continuación al menos formalmente, que las ecuaciones del modelo satisfacen teoremas de conservación en forma exacta.

Entonces si con los resultados de las cantidades integradas numéricamente reconstruimos las expresiones de los teoremas de conservación y verificamos con qué grado de precisión se satisfacen, esto mismo nos provee una estimación de la calidad de la solución obtenida y en que medida la misma representa las predicciones del modelo.

Para demostrar el teorema de conservación del impulso partimos de la ecuación de Euler 3.5,

$$\rho \frac{d\mathcal{U}}{dt} = -\nabla P$$

si multiplicamos ambos miembros por el diferencial de volumen geométrico $d\tilde{V}$ e integramos sobre todo el volumen \tilde{V} que ocupa el sistema obtenemos

$$\int \rho \frac{d\mathcal{U}}{dt} d\tilde{V} = -\int \nabla P d\tilde{V} = -\oint_S P \hat{n} da,$$

siendo S la superficie que rodea al volumen \tilde{V} . Si ahora recordamos la condición de contorno de la presión: $P|_c = 0$, la integral de superficie sobre el contorno da cero, y utilizando el teorema del transporte de la Mecánica de Fluidos podemos escribir

$$\frac{d}{dt} \int \rho \underline{v} d\tilde{V} = \frac{d}{dt} \underline{P} \quad ,$$

siendo \underline{P} la cantidad de movimiento total del fluido

$$\underline{P} = \int \rho \underline{v} d\tilde{V} \quad ,$$

por lo tanto en ausencia de presiones externas aplicadas a través del contorno S (o a lo sumo si la distribución de presión es uniforme en él), la cantidad de movimiento total se conserva

$$\underline{P}(t) = \underline{P}(t=0) = \text{cte} \quad (3.61)$$

Este teorema vectorial solo nos será útil, con los fines expuestos anteriormente, en los casos de geometría plana. Pues para geometrías esféricas y cilíndrica se satisface automáticamente debido a la simetría implícita en ellos.

Para tratar la conservación de la energía consideramos la expresión 3.8 escrita explícitamente para cada uno de los dos subsistemas (electrones e iones)

$$\frac{dE_e}{dt} + P_e \frac{dV}{dt} = \dot{\delta Q}_e \quad ,$$

$$\frac{dE_i}{dt} + P_i \frac{dV}{dt} = \dot{\delta Q}_i \quad ,$$

siendo

$$\dot{\delta Q}_e = H_e + K + Y_e - J + X \quad ,$$

$$\dot{\delta Q}_i = H_i - K + Y_i + Q_v \quad ,$$

si multiplicamos cada una de ellas por el diferencial de masa dM y las integramos sobre toda la masa del sistema obtenemos.

$$\int \frac{d\xi_e}{dt} dM + \int P_e \frac{dV}{dt} dM = \int (H_e + K + Y_e - J + X) dM ,$$

$$\int \frac{d\xi_i}{dt} dM + \int P_i \frac{dV}{dt} dM = \int (H_i - K + Y_i + Q_v) dM . \quad (3.62)$$

Veamos en detalle la integral del término de transporte térmico $H_{e,i}$ electrónico o iónico. Recordando la expresión 3.20 para $H_{e,i}$ podemos poner

$$H_{e,i} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \underline{F}_{e,i} ,$$

siendo $\underline{F}_{e,i}$ el vector de flujo de calor electrónico o iónico, luego

$$\int H_{e,i} dM = -\int \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \underline{F}_{e,i} dM = -\int \nabla \cdot \underline{F}_{e,i} d\tilde{V} ,$$

para lo cual hay que tener presente que $\rho d\tilde{V} = dM$ y que la integral se hace ahora sobre todo el volumen \tilde{V} del sistema. Usando el teorema de Gauss podemos llevar la integral de volumen a una de superficie y con la condición de contorno $(\underline{F}_{e,i})_c = 0$, igualarla a cero

$$\int \nabla \cdot \underline{F}_{e,i} d\tilde{V} = \oint_S \underline{F}_{e,i} \cdot \hat{n} da = 0 ,$$

en consecuencia

$$\int H_{e,i} dM = 0 .$$

Sumemos ahora las dos ecuaciones en 3.62 recordando la expresión 3.34 para Q_v

$$Q_v = -P_q \frac{dV}{dt} ,$$

el resultado es

$$\int \frac{dE}{dt} dM + \int P \frac{dV}{dt} dM = \int (\gamma + X - J) dM \quad , \quad (3.63)$$

siendo

$$\begin{aligned} E &= E_e + E_i \quad , \\ P &= P_e + P_i + P_q \quad , \\ \gamma &= \gamma_e + \gamma_i \quad . \end{aligned}$$

De la ecuación de continuidad

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad ,$$

podemos deducir

$$\nabla \cdot \underline{v} = -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \quad .$$

Consideremos en detalle la integral con P en 3.63

$$\int P \frac{dV}{dt} dM = \int P \nabla \cdot \underline{v} V dM = \int P \nabla \cdot \underline{v} \frac{1}{\rho} dM = \int P \nabla \cdot \underline{v} d\tilde{V} \quad ,$$

si utilizamos que

$$\nabla \cdot (P \underline{v}) = P \nabla \cdot \underline{v} + \underline{v} \cdot \nabla P \quad ,$$

obtenemos

$$\int P \frac{dV}{dt} dM = \int \nabla \cdot (P \underline{v}) d\tilde{V} - \int \underline{v} \cdot \nabla P d\tilde{V} \quad ,$$

y usando el teorema de Gauss, la condición de contorno de la presión $P|_c = 0$ y la ecuación de Euler 3.5 ,

$$\int \rho \frac{dV}{dt} dM = \oint_S P \underline{n} \cdot \hat{n} da + \int \rho \underline{v} \cdot \frac{d\underline{v}}{dt} d\tilde{V} = \int \frac{1}{2} \rho \frac{dv^2}{dt} d\tilde{V} .$$

Reemplazando en 3.63 obtenemos

$$\int \rho \frac{dE}{dt} d\tilde{V} + \int \frac{1}{2} \rho \frac{dv^2}{dt} d\tilde{V} = \int (\gamma + \chi - J) dM ,$$

finalmente utilizando el teorema del transporte

$$\frac{d}{dt} \int \rho E d\tilde{V} + \frac{d}{dt} \int \frac{1}{2} \rho \frac{dv^2}{dt} d\tilde{V} = \int (\gamma + \chi - J) dM \quad . \quad (3.64)$$

Identificamos cada uno de los términos de la siguiente manera

$$E = \int \rho E d\tilde{V} \quad : \text{energía interna total del sistema .}$$

$$E_c = \int \frac{1}{2} \rho v^2 d\tilde{V} \quad : \text{energía cinética total del sistema .}$$

$$\frac{dE_b}{dt} = \int J dM \quad : \text{energía total emitida en forma de radiación de bremsstrahlung por unidad de tiempo .}$$

$$\frac{dE_s}{dt} = \int \gamma dM \quad : \text{energía total depositada por los productos de fusión por unidad de tiempo .}$$

$$\frac{d\bar{E}_I}{dt} = \int X dM \quad : \text{energía total absorbida proveniente de la irradiación con luz láser por unidad de tiempo.}$$

Con estas definiciones podemos reescribir 3.64

$$\frac{d}{dt} (E + E_c + E_B - E_f - \bar{E}_I) = 0 \quad ,$$

o sea que

$$E + E_c + E_B - E_f - \bar{E}_I = cte = E(t=0) \quad , \quad (3.65)$$

pues

$$E_c = E_B = E_f = \bar{E}_I = 0 \quad a \quad t = 0$$

La expresión 3.65 representa el teorema de conservación de la energía que es una identidad escalar y podrá ser utilizada en los tres casos de geometría (plana, cilíndrica y esférica) sin que se satisfaga automáticamente por razones de simetría. Nótese que a diferencia del teorema de conservación del impulso, que representa las consecuencias de una parte del modelo solamente, la evaluación de la expresión 3.65 se alimenta con todos los procesos físicos considerados cuyos efectos se calculan de diversa forma con las variables que se integran directamente (T_e, T_i, N). Consideramos entonces que la conservación de la energía puede significar un severo control para la calidad del método numérico y la confiabilidad de los resultados obtenidos.

III.2 El Método Numérico

En este apartado vamos a presentar el método numérico empleado para integrar y calcular la evolución temporal de un blanco irradiado con pulsos láser de alta potencia de acuerdo al modelo expuesto en III.1. Matemáticamente el modelo define un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas a derivadas parciales no lineal con condiciones de contorno en el instante inicial ($t = 0$) y para todo instante en los extremos $x = 0$, y R_0 del eje espacial. Para resolver este problema resulta particularmente útil y apropiado el método de diferencias finitas. No vamos a exponer los detalles del método en general, ya que los mismos pueden ser consultados en la literatura [86,116,117], sino que solo indicaremos los esquemas seleccionados y los aspectos más significativos del tratamiento numérico.

III.2.1 Discretización Espacial y Temporal

La idea básica de la solución numérica comienza por la discretización de las coordenadas espacial x y temporal t . Esto significa que no vamos a calcular los valores de las magnitudes de interés (ρ, T_e, T_x, N , etc.) en todo punto sino solo en algunos lugares o zonas, dependiendo del caso, y que tampoco calcularemos la solución para todo instante de tiempo sino solo en algunos instantes discretos.

En la fig. 3.10 se muestran los esquemas de discretización espacial y temporal. El segmento de coordenada espacial comprendido entre $x = 0$, y $x = R_0$ 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

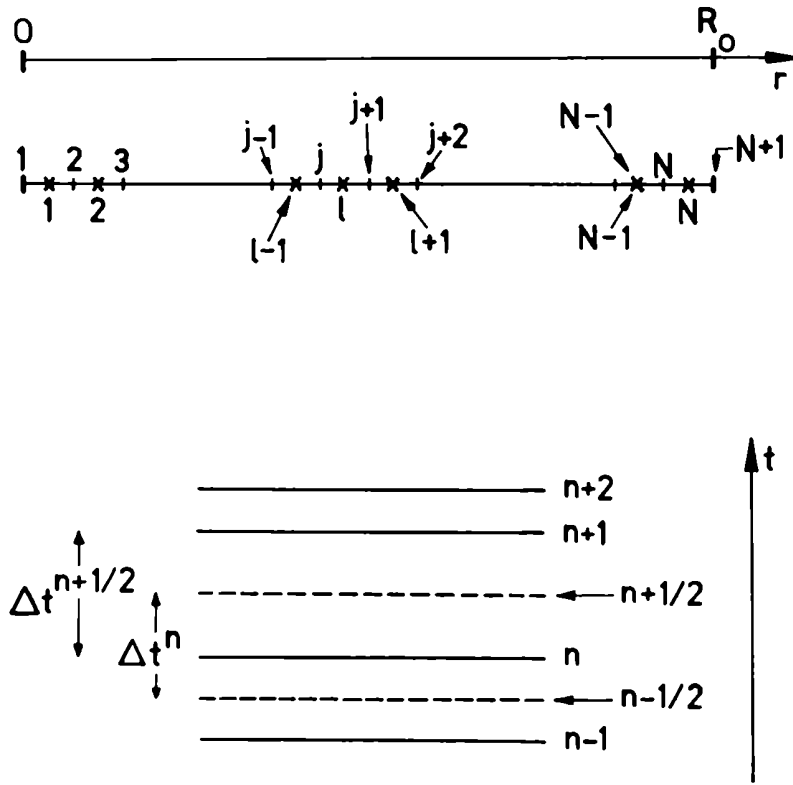


Fig. 3.10: esquema de la discretización espacial para la coordenada x y temporal para la coordenada t .

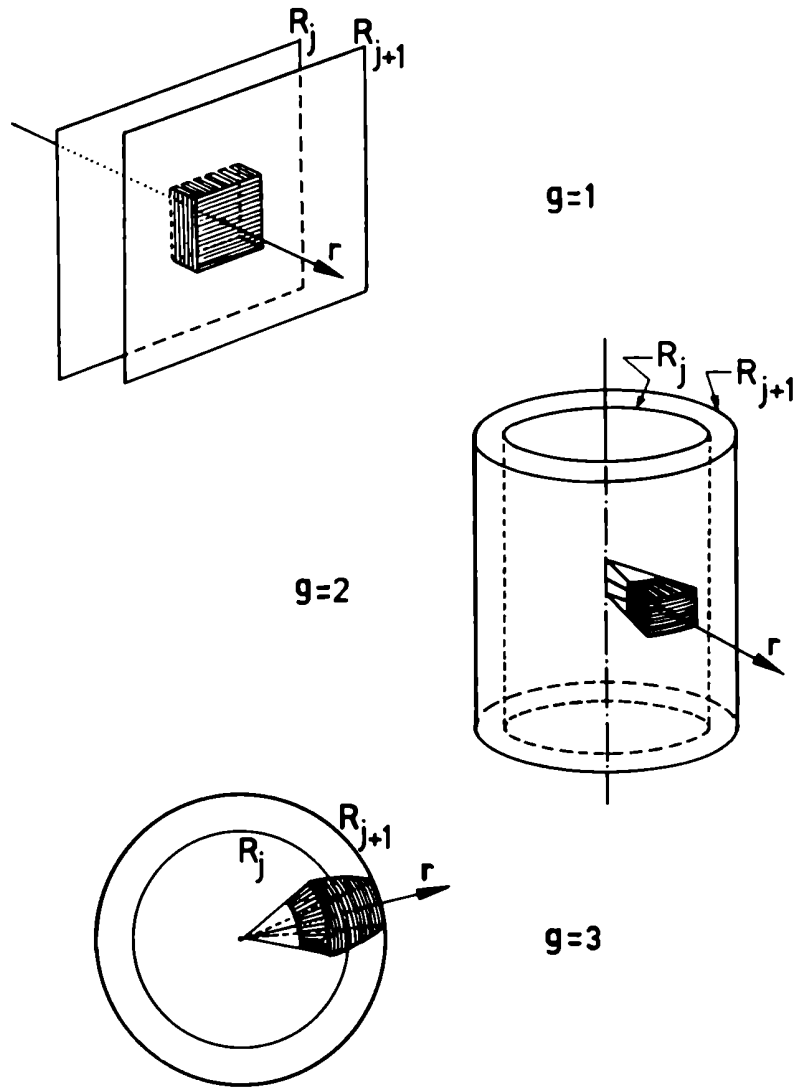


Fig. 3.11: elementos de volumen asociados a la celda l -ésima para las geometrías plana ($g=1$), cilíndrica ($g=2$) y esférica ($g=3$).

R_j ($j = 1, \dots, N+1$) y cada celda un ancho de celda $\Delta R_l = R_{j+1} - R_j$ ($l = 1, \dots, N$). Como se ve denotamos las cantidades asociadas a la celda con el subíndice l y al borde de celda con j , teniendo en cuenta que en valor numérico $j = l$. Si recordamos los tres tipos de geometría a considerar y el significado de la coordenada espacial \mathcal{R} en cada caso, el elemento de volumen geométrico asociado a la celda l -ésima se puede escribir de la siguiente forma (convenientemente normalizado),

$$d\tilde{V}_l = \frac{1}{g} [R_{j+1}^g - R_j^g] \quad , \quad (3.66)$$

donde $g = 1, 2, 3$ corresponde a las geometrías plana, cilíndrica y esférica (ver Fig. 3.11). En función de $d\tilde{V}_l$ 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 $R_l = \frac{1}{2}(R_j + R_{j+1})$ de centro de celda

$$V_l = d\tilde{V}_l \frac{1}{dM_l} = \frac{1}{\rho_l} \quad (3.67)$$

Obsérvese que teniendo en cuenta la descripción Lagrangiana empleada, 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.

La coordenada temporal también toma valores discretos que denotaremos con el supraíndice n (t^n) y la diferencia entre dos valores consecutivos define el intervalo temporal entre ambos, así por ejemplo (ver Fig. 3.10)

$$\Delta t^{n+1/2} = t^{m+1} - t^m$$

en general el supraíndice semientero indica que la magnitud en cuestión está asociada al intervalo de tiempo entre los dos instantes enteros adyacentes o bien a un nivel intermedio de tiempo.

Como se verá de acuerdo a necesidades de centrado espacial de las variables estas pueden evaluarse en coordenadas de borde R_j o centro R_{ℓ} de celda. Igual criterio se emplea con respecto a los niveles temporales enteros o semienteros. El pasaje de unas a otras se hace mediante promedios aritméticos.

III.2.2 Esquema numérico para el movimiento de la grilla y la ecuación de Euler

La expresión en diferencias finitas para la ecuación de movimiento de la grilla 3.4 es

$$R_j^m = R_j^{m-1} + v_j^{m-1/2} \Delta t^{m-1/2} \quad (3.68)$$

Para la ecuación de Euler 3.5 usamos un esquema explícito, del tipo de los usados en cálculos hidrodinámicos Lagrangianos unidimensionales^[88]

$$v_j^{m+1/2} - v_j^{m-1/2} = - (R_j^m)^{q-1} \cdot \frac{(P_{\ell}^m - P_{\ell-1}^m)}{dM_j} \cdot \Delta t^m \quad , \quad (3.69)$$

siendo

$$P_{\ell}^m = P_{e\ell}^m + P_{i\ell}^m + P_{q\ell}^m$$

Esta ecuación lleva asociadas también dos condiciones de contorno: una sobre la velocidad y otra sobre la presión. Si se trata de un caso de

geometría esférica tenemos

$$v(r=0) = 0 \implies v_1^m = 0 \quad \forall m,$$

$$P_{ext} = 0 \implies v_{N+1}^{m+1/2} - v_{N+1}^{m-1/2} = (R_{N+1}^m)^{g-1} \cdot \frac{P_N^m}{dM_{N+1}} \cdot \Delta t^n$$

En geometría plana se obtienen condiciones semejantes aplicando $P_{ext} = 0$ en ambas caras del blanco ($j=1$ y $j=N+1$).

En la representación en diferencias finitas 3.69 de la ecuación 3.5 hemos hecho uso explícito del formalismo Lagrangiano al no considerar términos convectivos en la derivada respecto del tiempo. Esto facilita mucho el tratamiento numérico no solo por el aspecto de la expresión resultante en diferencias finitas, sino también por el conocido problema de difusión numérica asociado al tratamiento del término convectivo en formulaciones Eulerianas.

III.2.3 Esquema numérico para integrar las temperaturas T_e y T_i

La principal dificultad en el tratamiento numérico del modelo surge en las ecuaciones para las temperaturas T_e y T_i (ver expresión 3.9). Estas dos ecuaciones, que deben ser resueltas simultáneamente con las de movimiento de la grilla 3.4 y de Euler 3.5, son de tipo parabólico no lineal debido al aspecto de los términos de transporte térmico H_e y H_i . La no linealidad también se refleja en los otros términos en ambos lados de la expresión 3.9. En particular la contribución de intercambio colisional K entre iones y electrones puede presentar regímenes totalmente diferentes a lo largo del eje espacial. Así por ejemplo podemos tener simultáneamente un sector de plasma denso

y relativamente frío en el cual los electrones e iones están fuertemente acoplados (tiempos de equilibrio electrón-ión cortos) y un sector de plasma tenue- enrarecido en la corona con electrones calientes e iones fríos donde predomi- na el desacople entre ambos subsistemas (tiempos de equilibrio electrón-ión largos). En caso de utilizar un esquema explícito para estas ecuaciones debe- ríamos avanzar con pasos temporales muy cortos que prolongarían el cálculo innecesariamente. Incluso la diversa falta de linealidad de cada uno de los términos de la expresión 3.9 y el distinto peso relativo que pueden tener de- pendiendo del caso que se tratan, deben ser considerados en la elección del método numérico.

Evidentemente la elección debe orientarse hacia los esquemas de tipo implícito, debido a su propiedad de ser numéricamente estables independien- temente de la magnitud del peso temporal empleado [88,116,117]. Dentro de este conjunto hemos elegido el esquema totalmente implícito, cuyo uso se recomienda especialmente para los casos altamente no lineales. Con esta elección podemos escribir la ecuación para la temperatura iónica T_i de la siguiente forma (un tratamiento similar se puede hacer para la ecuación de la temperatura electrón- ica T_e)

$$C_{V_i}^i \frac{(T_i^i - T_i^{i-1})}{\Delta t^{m-1/2}} + B_{T_i}^i \frac{(P_i^i - P_i^{i-1})}{\Delta t^{m-1/2}} + P_{V_i}^i \frac{(V_i^i - V_i^{i-1})}{\Delta t^{m-1/2}} = H_i^i - K_i^i + Y_i^i + Q_{V_i}^i, (3.70)$$

donde se ha omitido el subíndice i relativo a los iones por razones de simpli- cidad en la notación. Veamos en detalle el desarrollo del término H_i^i (H_i^i) que da el carácter parabólico a la ecuación. Usando 3.20, 3.26 y 3.66 podemos escribir

$$H_l^n = -\frac{1}{dM_l} (F_{j+1}^n - F_j^n) \quad , \quad (3.71)$$

de acuerdo a 3.26 F_j^n viene dado por

$$F_j^n = -(R_j^n)^{\beta-1} \cdot \chi_j^n \cdot \frac{(T_l^n - T_{l-1}^n)}{(R_l^n - R_{l-1}^n)} \quad ,$$

siendo

$$R_l^n = \frac{1}{2} (R_j^n + R_{j+1}^n) \quad ,$$

luego

$$F_j^n = -(R_j^n)^{\beta-1} \chi_j^n \frac{2(T_l^n - T_{l-1}^n)}{(R_{j+1}^n - R_{j-1}^n)} \quad , \quad (3.72)$$

reemplazando 3.72 en 3.71 obtenemos

$$H_l^n = \frac{2}{dM_l} \left[(R_{j+1}^n)^{\beta-1} \chi_{j+1}^n \cdot \frac{(T_{l+1}^n - T_l^n)}{(R_{j+2}^n - R_j^n)} - (R_j^n)^{\beta-1} \chi_j^n \cdot \frac{(T_l^n - T_{l-1}^n)}{(R_{j+1}^n - R_{j-1}^n)} \right] \quad (3.73)$$

De 3.73 y 3.70 se deduce un sistema de ecuaciones triagonal para T_l^n

$$-A_l^n T_{l-1}^n + B_l^n T_l^n - C_l^n T_{l+1}^n = D_l^n \quad , \quad 2 \leq l \leq N-1 \quad , \quad (3.74)$$

siendo

$$A_l^n = \frac{2}{dM_l} \frac{(R_j^n)^{\beta-1} \chi_j^n}{(R_{j+1}^n - R_{j-1}^n)} \cdot \Delta t^{n-1/2} \quad ,$$

$$C_l^n = \frac{2}{\Delta M_l} \cdot \frac{(R_{j+1}^n)^{3-1} X_{j+1}^n}{(R_{j+2}^n - R_j^n)} \cdot \Delta t^{n-1/2},$$

$$B_l^n = A_l^n + C_l^n + C_{v_l}^n + C_{v_l}^n \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\epsilon_{e,l}^n},$$

$$D_l^n = C_{v_l}^n T_l^{n-1} - B_{T_l}^n (\rho_l^n - \rho_l^{n-1}) - P_l^n (V_l^n - V_l^{n-1}) + \\ C_{v_l}^n T_{e,l}^n \frac{\Delta t^{n-1/2}}{\epsilon_{e,l}^n} + (Q_{v_l}^n + \gamma_l^n) \Delta t^{n-1/2},$$

donde se ha usado la expresión 3.30 para K . Vemos entonces que el avance temporal de la temperatura implica resolver un sistema tridiagonal de ecuaciones que en realidad es aparentemente lineal pues tanto los coeficientes A_j^n , B_j^n y C_j^n de la matriz del sistema tridiagonal como los coeficientes D_l^n del vector de inhomogeneidades son funciones de alta temperatura incógnita T_l^n . Por lo tanto el sistema 3.74 se resuelve en forma iterativa utilizando sucesivas soluciones para construir sus coeficientes hasta que la variación relativa de dos soluciones consecutivas cae por debajo de cierta cota (~ 0.1).

Las condiciones de contorno: flujo térmico nulo en $\mathcal{R} = 0$, y $\mathcal{R} = R_0$ se traducen en

$$F_1^n = 0 \quad \forall n,$$

$$y \quad F_{N+1}^n = 0 \quad \forall n \quad ,$$

lo cual puede agregarse fácilmente al sistema 3.74 extendiéndolo de la siguiente forma

$$-A_l^n T_{l-1}^n + B_l^m T_l^m - C_l^n T_{l+1}^n = D \quad , \quad 1 \leq l \leq N \quad , \quad (3.75)$$

con

$$A_1^n = C_N^n = 0 \quad \forall n.$$

Finalmente podemos destacar que este esquema tiene un error local de truncación de orden Δt en el tiempo y $(\Delta x)^2$ en el espacio y que la matriz del sistema 3.75 satisface la condición de dominancia diagonal, o sea

$$B_l^m \geq A_l^n + C_l^n \quad \forall n, l \quad , \quad (3.76)$$

siendo A_l^n , C_l^m y B_l^m positivos, la cual es necesaria para poder aplicar el eficiente algoritmo de resolución de sistemas tri diagonales que se presenta en el Apéndice.

III.2.4 Control del paso temporal

El paso temporal que se usa para la integración no debe ser constante sino variable. De manera que se pueda ajustar el ritmo de avance del cálculo a las características de lo que se está calculando, tratando de optimizar la cantidad de pasos temporales empleados para arribar a un determinado instante. El control del paso temporal se decide en base a una serie de criterios que responden a necesidades de estabilidad numérica y precisión.

El esquema numérico 3.69 utilizado para integrar la ecuación de Euler 3.5 requiere que el paso temporal Δt se someta a la siguiente cota para ser numéricamente estable

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{C_s} \quad (3.77)$$

siendo C_s la velocidad local del sonido. Esta restricción al valor de Δt se conoce bajo el nombre de condición de Courant-Friedrichs y Lewy (CFL)^[88].

Los esquemas implícitos utilizados para las temperaturas T_e y T_i no imponen restricciones a la magnitud del paso temporal por motivos de estabilidad numérica, sin embargo por razones de precisión es conveniente acotar las máximas variaciones relativas permitidas a las mismas al cabo de un paso temporal^[118]

$$\left| \frac{dT_{e,i}}{T_{e,i}} \right| < \epsilon_{e,i} \quad ,$$

luego de algunos pasos algebraicos esta expresión puede ponerse de la siguiente forma

$$\Delta t^{n+3/2} \leq \epsilon_{e,i} \text{ mín} \left| \frac{T_{e,i,l}^n}{T_{e,i,l}^{n+1} - T_{e,i,l}^n} \right| \Delta t^{n+1/2} \quad (3.78)$$

donde los valores para $\epsilon_{e,i}$ típicamente fluctúan entre .01 y .05, y el mínimo se debe tomar respecto de todos los valores de l posibles.

Idéntico criterio se ha adoptado con las variaciones relativas del volumen específico V y de la potencia del pulso láser $P_L(t)$, o sea

$$\left| \frac{dV}{V} \right| < \epsilon_v, \quad \left| \frac{dP_L}{P_L} \right| < \epsilon_{P_L} \quad . \quad (3.79)$$

También se controla que el cálculo no se frene bruscamente. Para ello se pide que

$$\Delta t^{n+3/2} \gg \frac{1}{a} \Delta t^{n+1/2}, \quad (3.80)$$

con valores de a del orden de 2.. En caso de que esta condición no se cumpla se supone que el paso temporal anterior fue demasiado largo, se reduce $\Delta t^{n+1/2}$ a $\Delta t^{n+1/2}' = \frac{1}{a} \Delta t^{n+1/2}$ y se repite el paso temporal anterior.

Finalmente la lentitud en la convergencia del cálculo iterativo para los esquemas implícitos de T_e y T_L , o sea la cantidad de iteraciones empleadas en su solución, determina un máximo factor de amplificación del paso temporal (FMADT),

$$\Delta t^{m+3/2} < (\text{FMADT}) \cdot \Delta t^{m+1/2} \quad . \quad (3.81)$$

Si el cálculo implícito no converge al cabo de un número máximo de iteraciones prefijado (6 en nuestro caso) se retrocede y se avanza más lentamente. Algunos autores han señalado la falta de garantías con respecto a la convergencia de esta parte del cálculo^[119,120]. Sin embargo la condición 3.81 nos ha ayudado mucho a evitar este problema con prescripciones para FMADT derivadas de experimentos numéricos.

111.3 El programa

El modelo y el método numérico desarrollados se han implementado en un macroprograma de computación escrito en lenguaje FORTRAN IV que hemos llamado DELFIN-1D.

La arquitectura del mismo ha sido concebida en base a los lineamientos de la programación estructurada. Es decir: no se ha escrito un único gran segmento de programa, sino varios no tan largos y con fines específicos cada uno de ellos. El programa así desarrollado consta de un programa principal (MAIN PROGRAM), un bloque de datos (BLOCK DATA), 16 subrutinas (SUB-ROUTINES) y un total de 1721 líneas de programación. Consideramos que este tipo de arquitectura de programas, que fundamentalmente pretende versatilidad y claridad, es el más apropiado para el tratamiento de problemas de computación complejos como el nuestro.

La Fig. 3.12 muestra un diagrama de bloques del código DELFIN-1D, que también puede interpretarse como un diagrama del flujo de programa principal. Vemos entonces que el programa principal trabaja como un "tomador de decisiones" a nivel global sin intervenir directamente en las distintas etapas del cálculo, sino en cambio reclamando la intervención de cada una de las distintas subrutinas cada vez que es necesario. Para que este tipo de procedimiento sea eficiente es necesario transferir los argumentos de las subrutinas mediante estructuras tipo COMMON. El programa consta de 36 bloques de COMMON que agrupan las diversas variables de trabajo del programa de acuerdo a características comunes o fines específicos.

Hagamos un análisis del esquema de la Fig. 3.12. Luego de la lectura de datos, la subrutina INIC elabora las condiciones iniciales de la simulación para la cual necesita interactuar con las subrutinas CONTER, COLD, GIL y GELQ.

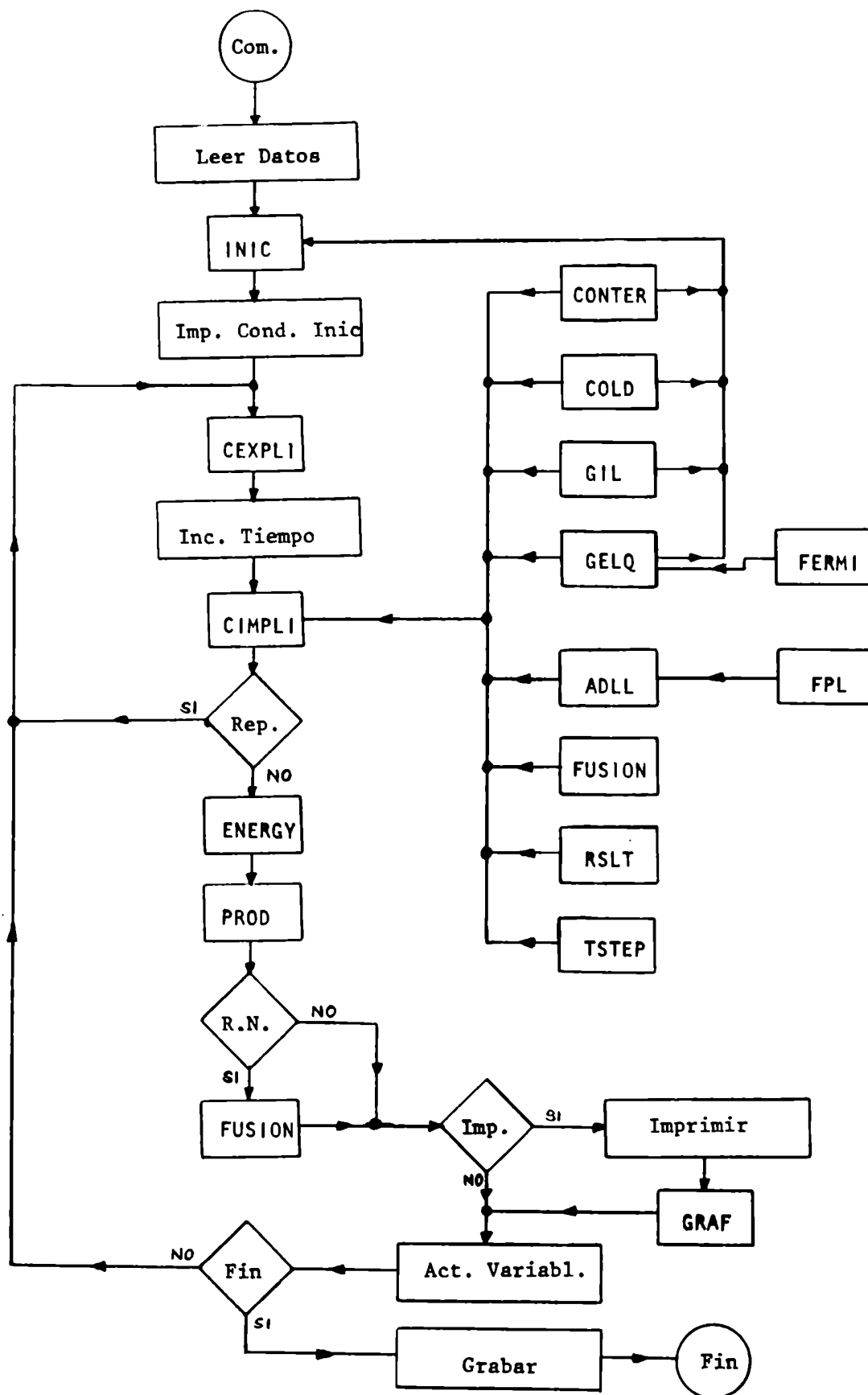


Fig. 3.12: esquema de funcionamiento del código DELFIN-1D .

Sus funciones son las siguientes:

CONTER: calcula conductividades térmicas y potencial de Planck.

COLD: calcula la curva fría del material.

GIL: calcula la ecuación de estado de los iones.

GELQ: calcula la contribución térmica a la ecuación de estado de los electrones.

GELQ a su vez utiliza la subrutina función FERMI para el cálculo de las funciones de Fermi-Dirac.

Una vez que el estado del cálculo está listo para comenzar la simulación, se imprimen las condiciones iniciales y se comienza el ciclo de avance temporal. CEXPLI resuelve el esquema 3.68 para la evolución de la grilla y calcula volúmenes específicos y densidades. CIMPLI resuelve el esquema implícito de las temperaturas en forma iterativa. El cálculo de los coeficientes del sistema 3.75 requiere la intervención de las subrutinas CONTER, COLD, GIL, GELQ, ADLL, FUSION, RSLT, TSTEP, cuyas funciones son:

ADLL: calcula la absorción de la luz láser. En FPL se programa el pulso láser externo

FUSION: esta subrutina tiene dos modos de operación en este caso calcula reacciones de fusión y la deposición de sus productos.

RSLT: resuelve sistemas tridiagonales.

TSTEP: determina pasos temporales.

A la salida de CIMPLI se controla si hay que repetir el paso temporal o no. La repetición puede venir indicada desde TSTEP o bien desde la misma CIMPLI debido a la no convergencia del cálculo implícito. Si hay que repetir se retoma al comienzo de CEXPLI con paso temporal reducido. Si no hay repetición CIMPLI

también calcula el esquema de las velocidades 3.69; ENERGY evalúa la conservación de la energía y PROD el valor medio del producto densidad-radio (ρR) del combustible. Si hubo reacciones termonucleares, FUSION en su segundo modo de operación, calcula la cinética de la composición del combustible.

Finalmente se imprime, si corresponde hacerlo, en parte desde el programa principal, y los gráficos desde GRAF. La finalización de la simulación se decide en base a dos criterios alternativos: número máximo de pasos temporales de integración o tiempo máximo permitido. En ambos casos antes de cortar la ejecución se graba el estado de las variables necesarias para continuar el cálculo, si se lo desea, después de analizar los resultados de una corrida.

La ejecución de este programa representa un problema de volumen de cálculo y no de memoria. Cabe mencionar en este sentido que el módulo ejecutable ocupa aproximadamente 227 Kbytes de memoria de acceso rápido y que los tiempos de CPU empleados han oscilado entre 30 y 120 minutos por corrida dependiendo del caso, compilador y computadora utilizados. Las especificaciones de casos concretos se harán en los capítulos IV y V que están dedicados a la presentación de los experimentos simulados en este trabajo.

CAPITULO IV

SIMULACION DE EXPERIENCIAS DE IRRADIACION SOBRE BLANCOS PLANOS

IV SIMULACION DE EXPERIENCIAS DE IRRADIACION SOBRE BLANCOS PLANOS

IV.1 Compresión dinámica inducida con pulsos láser de alta potencia

La tecnología de producción de pulsos láser de alta potencia ha encontrado, desde hace unos pocos años, un nuevo campo de aplicación en el estudio de la ecuación de estado para materia hipercomprimida. En efecto, la irradiación de blancos planos con pulsos láser de alta potencia induce en el mismo la propagación de ondas de choque fuertes, que han demostrado tener^[17,21] intensidad comparable y aun mayor a las generadas por técnicas explosivas^[11-16, 28,30,56,121].

En estas experiencias se apunta el haz del láser sobre una de las caras del blanco plano tratando de producir una mancha focal cuyas dimensiones características sean mucho mayores que el espesor de la tableta. Por lo tanto la mayor parte del material se comprime debido al pasaje de un frente de choque que, en buena aproximación, puede ser considerado como plano. Esta configuración responde al caso de geometría plana esquematizado en la Fig. 3.9. Simultáneamente, si los efectos debidos a los electrones supratérmicos son importantes el espesor debe ser suficiente como para dar lugar a la formación del frente de choque por deposición de la energía de los mismos, pero no demasiado grande para evitar una atenuación significativa de la onda de choque o la violación de la hipótesis de simetría plana.

Una de las magnitudes más importantes que se determina en estos experimentos es la velocidad de propagación de la onda de choque, pues a través de ella puede inferirse el estado de compresión alcanzado^[17,19,21]. Con este fin

Aluminio	
a_1	$-16.21 \times 10^{10} \text{ dy cm}^{-2}$
a_2	$197.95 \times 10^{10} \text{ dy cm}^{-2}$
a_3	$-435.2 \times 10^{10} \text{ dy cm}^{-2}$
a_4	$-197.95 \times 10^{10} \text{ dy cm}^{-2}$
a_5	$829.18 \times 10^{10} \text{ dy cm}^{-2}$
a_6	$-450.69 \times 10^{10} \text{ dy cm}^{-2}$
a_7	$72.92 \times 10^{10} \text{ dy cm}^{-2}$
l	6.
b	$33. \times 10^6 \text{ erg g}^{-1} \text{ }^\circ\text{K}^{-1}$
β_0	$518. \text{ erg g}^{-1} \text{ }^\circ\text{K}^{-2}$
g	.5
ρ_0	2.71 g cm^{-3}

Tabla 4.1

la superficie libre de los blancos se moldea en forma escalonada y su evolución temporal se sigue a través de fotografía ultra-rápida con cámaras de barrido continuo (tipo "streak"). De esta forma utilizando la luminosidad propia del material, producida por el calentamiento detrás de la onda de choque, se puede determinar el tiempo empleado para recorrer una distancia conocida y estimar de esta forma la velocidad de propagación con una precisión del orden del 15%. Cabe destacar que este tipo de mediciones se realiza con cámaras de barrido continuo que poseen una resolución temporal del orden de los 10. ps.

En este capítulo presentamos los resultados obtenidos con el código de simulación numérica DELFIN-1D para algunos casos que son representativos de los experimentos presentados en las referencias 17 a 21 con blancos planos de aluminio. Para estos casos hemos utilizado la ecuación de estado expuesta en el capítulo II, expresiones 2.2 a 2.8 y 2.21 a 2.24, cuya parametrización para el aluminio se da en la Tabla 4.1.

IV.2 Optimización del método numérico en la simulación de blancos planos

Los resultados obtenidos con las primeras corridas del código de simulación sobre casos de blancos planos, sugirieron una sencilla idea con miras a optimizar la implementación del método numérico. La idea parte de observar que mientras el frente de choque avanza hacia el interior del blanco existe un sector del mismo comprendido entre la superficie libre y el frente de choque donde el material permanece sin perturbar. Dicho en otras palabras, hay un conjunto de celdas de la grilla de cálculo comprendidas entre $x = A$ y $x = LINT$ donde las variables son permanentemente calculadas a pesar de conocerse su valor de antemano, pues son representativas de una zona aun no alcanzada

por el efecto perturbador de la onda de choque. Por este mismo motivo la condición de contorno para el flujo de calor expresada en el apartado 3.1.3 que se debe aplicar sobre la celda l se satisface también automáticamente para las celdas ubicadas a la derecha de esta, hasta la que se encuentra en $l = LINT$.

Esta característica permite, mediante cambios menores dentro del programa, realizar el cálculo solamente dentro de un sector de la grilla comprendido entre la celda con $l = LINT$, por el extremo izquierdo, y $l = N$, por el derecho. De esta forma se puede optimizar el uso de la grilla, el número de operaciones realizadas para avanzar un paso temporal y el tiempo de cómputo. Sin embargo, cabe formularse dos importantes preguntas. En primer lugar, ¿qué prescripción podemos dar para que el programa estime el valor de $LINT$?, y en segundo lugar, ¿en qué medida esta forma de realizar el cálculo puede alterar la estabilidad del mismo?

Para estimar el valor de $LINT$ se computan las variaciones relativas de las temperaturas electrónica (T_e), iónica (T_i) y de la densidad (ρ) al cabo de un paso de integración, comenzando desde la celda con $l = N$ en dirección al interior del blanco hasta detectar la primera de ellas en la cual se satisface que el módulo de la mayor de las tres diferencias relativas cae por debajo de cierto nivel de tolerancia (TOL). Desde esta se tiene en cuenta un margen de precaución contando a su vez un cierto número más de celdas ($LMAR$) hacia la izquierda. El número de orden de esta celda es el valor que se asigna a $LINT$.

Con respecto a la segunda pregunta resulta un poco arriesgado contestarla "a priori", debido a la complejidad y no linealidad del cálculo que se tiene entre manos. No obstante parecería natural que si se elijen TOL y $LMAR$

de manera que $LINT$ tenga un corrimiento suave y gradual desde algún valor inicial hasta $LINT=1$, a lo largo de toda la corrida, la estabilidad del cálculo no tendría que verse seriamente afectada.

Las primeras corridas de prueba con este agregado demostraron la factibilidad de la idea expuesta y despejaron las dudas planteadas sobre la misma. Se han efectuado corridas con grilla completa y con grilla efectiva de cálculo de longitud variable sin detectarse diferencias significativas en los resultados obtenidos para las variables integradas por el programa. Los valores típicos de TOL y $LMAR$ usados son: $TOL \sim 10^{-7}$ y $LMAR \sim 4$. De esta forma hemos logrado reducir el tiempo de cómputo por corrida en un 50%, de manera que cada uno de los casos que se presentan a continuación demandó típicamente unos 30 minutos de CPU, siendo el programa compilado con el compilador FORTRAN G de IBM, corriendo en un sistema IBM 370/3032 y con una grilla de 60 a 70 celdas en total.

IV.3 Simulación numérica de experiencias

En la Tabla 4.2 se detallan las características de las experiencias cuya simulación numérica se presenta en este apartado.

Las Figs. 4.1 y 4.2 muestran los gráficos correspondientes a la posición de la onda de choque en función del tiempo $R_S(t)$ obtenidos para los casos 1 y 2 de la Tabla 4.2. En el caso 1 (Fig. 4.1) no se observa atenuación de la onda de choque y los puntos pueden ser muy bien aproximados por una línea recta. El ajuste por cuadrados mínimos indica una diferencia porcentual menor que el 1% por punto y un valor de pendiente, y por lo tanto de velocidad de propagación de la onda de choque \dot{R}_S , de $14.6 \mu\text{m/ms}$. El cálculo completo rea-

	Energía del Pulso Láser (J)	FWHM (ps)	Aspecto y Dim. Caract. Mancha Focal (μm)	Intensidad (W cm^{-2})	Longitud de Onda (μm)	Espesor del Blanco (μm)	Porcentaje Absorción Total
1	30.	300.	Elipsooidal 200.x500.	3.2×10^{13}	N ₂ , 1.06	17.4	40.8
2	66.	300.	Circular 600.	$8. \times 10^{13}$	N ₂ , 1.06	35.	40.8
3	150.	1100.	Circular 600.	4.8×10^{13}	CO ₂ , 10.6	50.	35.8
4	211.	1100.	Circular 600.	6.8×10^{13}	CO ₂ , 10.6	50.	35.8
5	50.	800.	Circular 150.	3.5×10^{14}	CO ₂ , 10.6	37.5	30.8

Tabla 4.2

lizado con dos valores distintos de limitador de flujo térmico \mathcal{F} (.05 y .1), no repercute en la propagación del frente de choque, indicando que el límite superior impuesto al flujo térmico no tiene consecuencias significativas para este valor de intensidad ($3.2 \times 10^{13} \text{ W cm}^{-2}$).

En el caso 2 (Fig. 4.2) la intensidad se ha incrementado a $8 \times 10^{13} \text{ W cm}^{-2}$ y el espesor a $35 \mu\text{m}$. El aumento del espesor nos permite observar claramente un efecto de atenuación en la onda de choque después del nanosegundo, que no solo se manifiesta en la Fig. 4.2 sino también en los perfiles de presión graficados en las Figs. 4.3 a 4.5. En este caso un ajuste de buena calidad se logra mediante una expresión cuadrática para $R_g(t)$. Los dos valores utilizados para \mathcal{F} repercuten visiblemente en el gráfico de la Fig. 4.2. Si bien el aspecto de ambas curvas es el mismo, la obtenida con $\mathcal{F} = .05$ está desplazada hacia la derecha respecto de la correspondiente a $\mathcal{F} = .1$. Esto puede interpretarse de la siguiente forma: durante la etapa de formación de la onda de choque los perfiles de temperatura producto de la deposición localizada de energía en las adyacencias de la superficie crítica, alcanzan a ser lo suficientemente abruptos como para que el limitador de flujo térmico haga sentir su efecto. La difusión de calor por conducción térmica hacia el interior del blanco es más lenta con $\mathcal{F} = .05$ que con $\mathcal{F} = .1$ y en consecuencia también lo es la compresión debida al desplazamiento inicial del frente de ablación. En consecuencia la onda de choque tarda un poco más en desprenderse en un caso que en el otro. Sin embargo una vez que se ha formado y viaja por el interior del blanco, su efecto de compresión no refleja diferencias significativas.

Este mismo caso también se ha corrido con el efecto de los electrones supratérmicos incluidos. El valor utilizado para \mathcal{U} es .85, que es el mismo

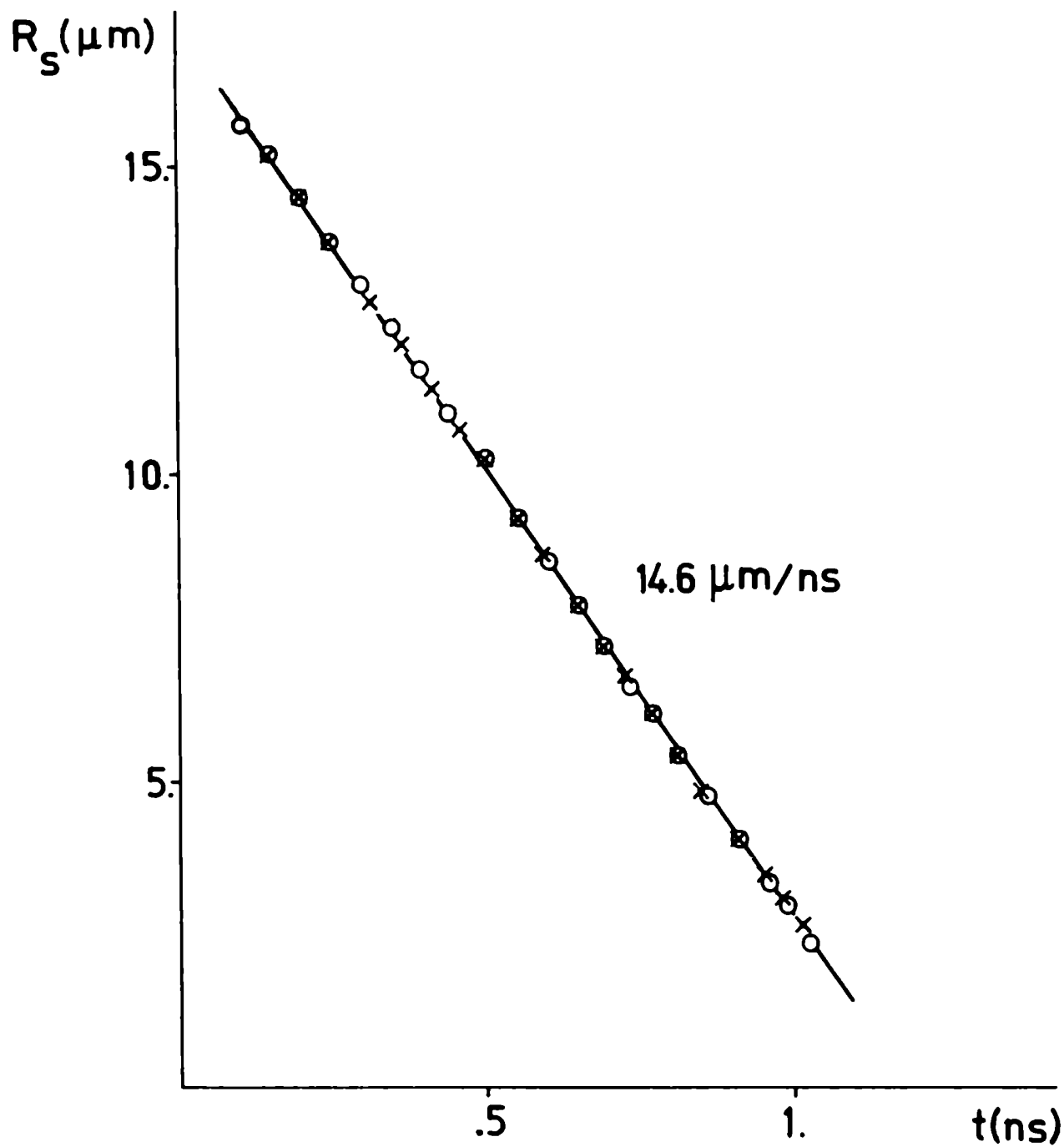


Fig. 4.1: posición de la onda de choque (R_s) en función del tiempo para el caso 1 con $G = .25$ (\circ) y $G = .1$ (\times) .

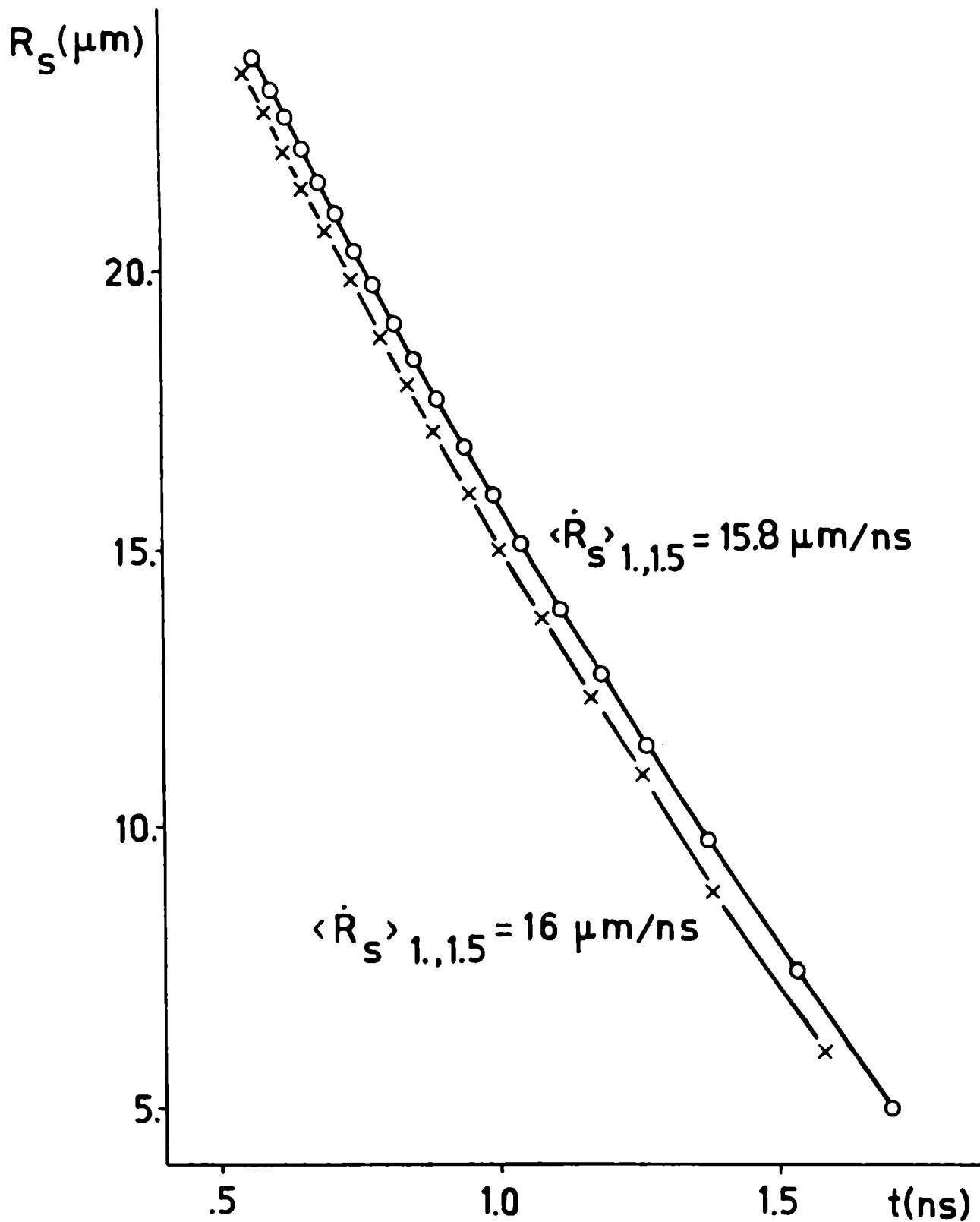


Fig. 1.2: posición de la onda de choque (R_s) en función del tiempo para el caso 2, con $\sigma = 0.05$ (\circ) y $\sigma = 0.1$ (\times).

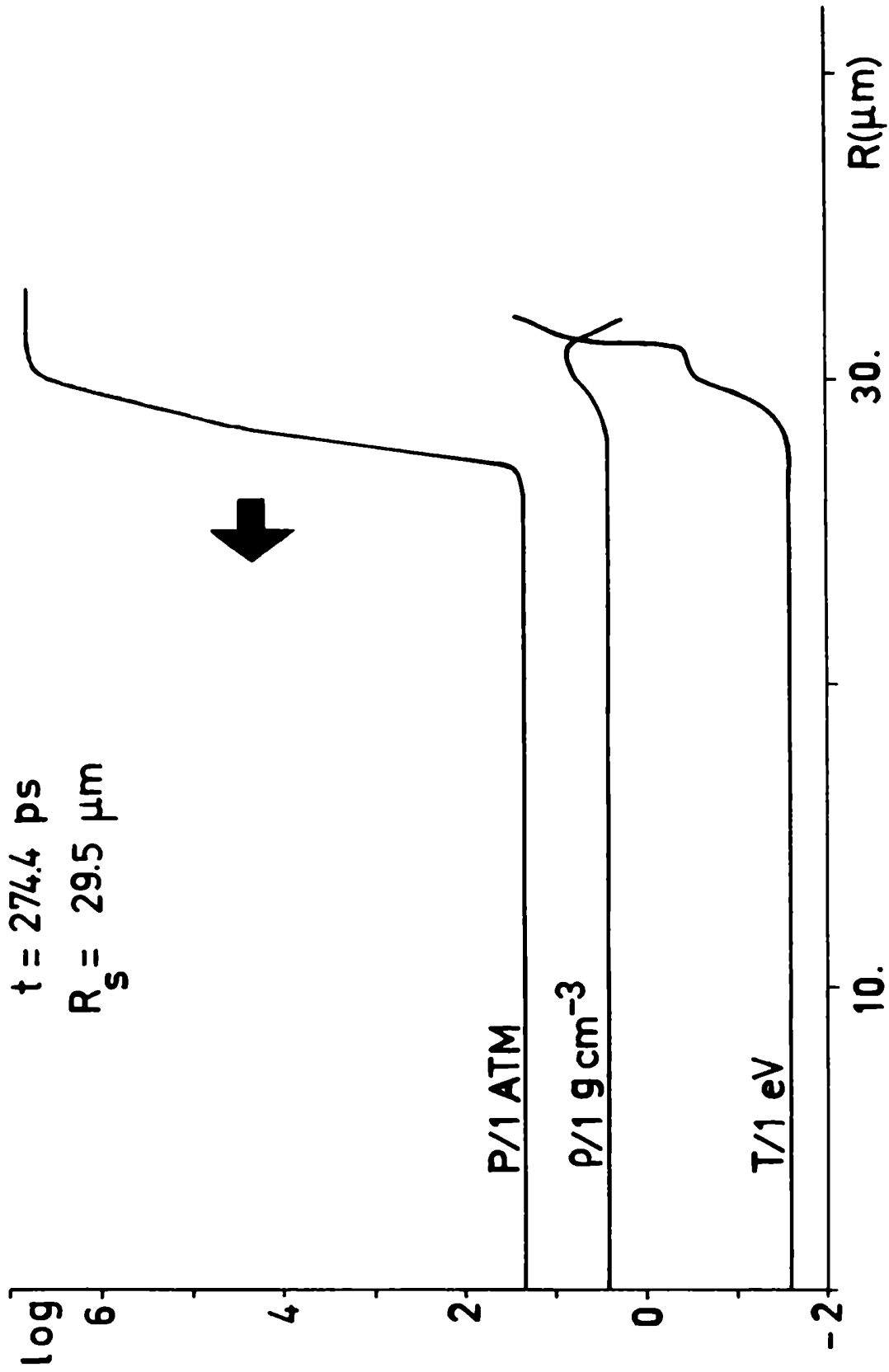


Fig. 4.3: perfiles de presión (P), temperatura (T) y densidad (ρ) para el caso 2. La flecha indica la dirección de avance de la onda de choque.



Fig. 4.4: idem Fig. 4.3 .

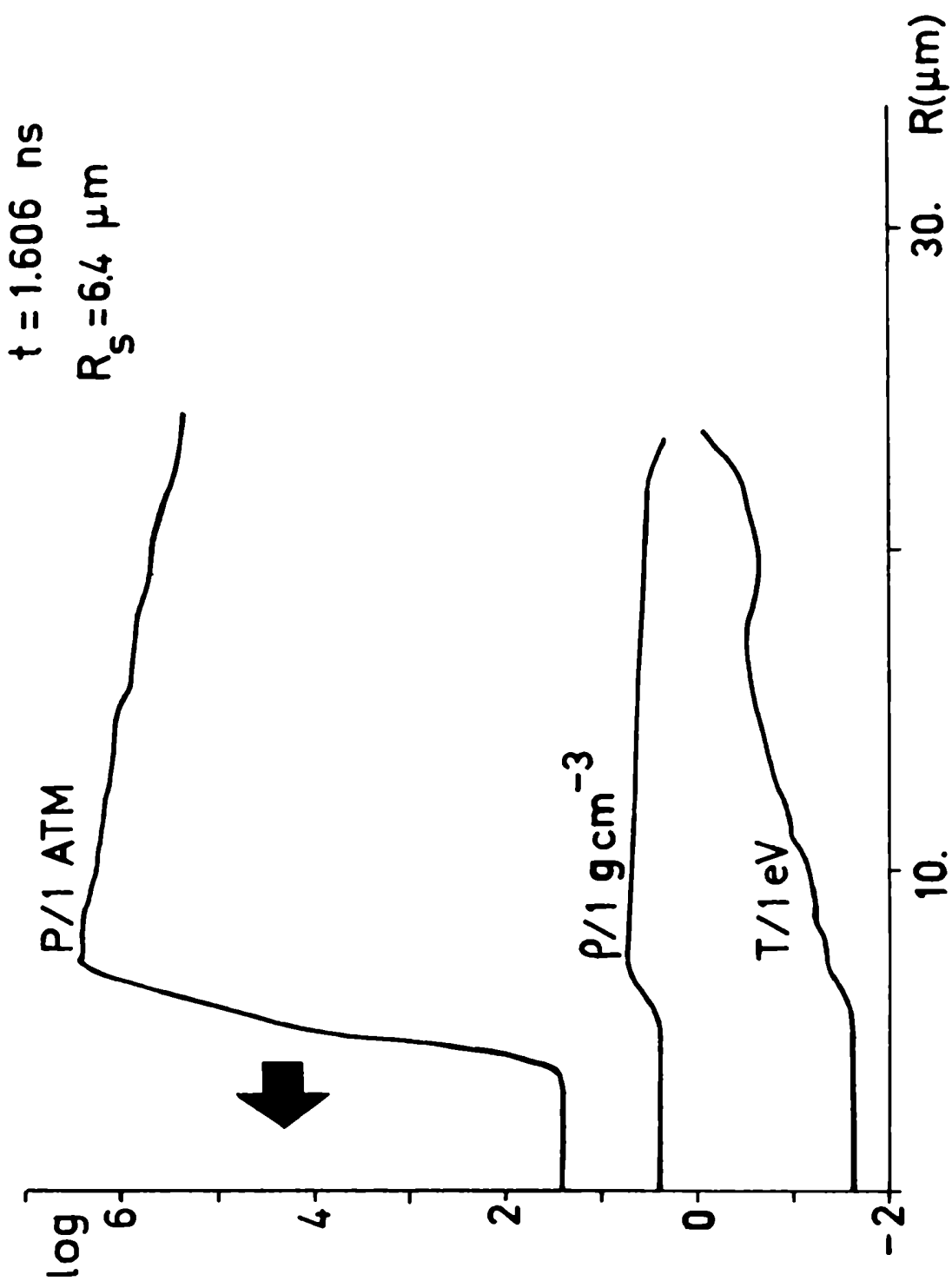


Fig. 4.5: idem Fig. 4.3 .

que se utiliza en el capítulo V para la simulación de implosiones explosivas. Los resultados obtenidos no se diferencian de la situación en que no se los tiene en cuenta ($\sigma = 1.$), pues su baja temperatura de fuente ($T_H \approx 2.5$ KeV), para esta irradiancia y longitud de onda, hace que su efecto sea despreciable.

Para obtener un valor representativo de la velocidad de propagación del frente de choque en este caso, hemos tomado el valor medio temporal de $\dot{R}_s(t)$, usando el ajuste cuadrático mencionado anteriormente, calculado entre los instantes $t = 1.0$ ns y $t = 1.5$ ns, que corresponden a la etapa final del trayecto de la onda de choque, dentro del cual se realizan habitualmente las determinaciones experimentales. Los valores obtenidos son $15.8 \mu\text{m}/\text{ns}$ si $f = .1$ y $16. \mu\text{m}/\text{ns}$ si $f = .05$. La diferencia relativa porcentual entre ellos es del 1.3%.

Las Figs. 4.3, 4.4 y 4.5 muestran los perfiles de presión P , temperatura T y densidad ρ para tres instantes de tiempo: $t = 274.4$ ps, posterior al momento en que el pulso alcanza su máxima potencia (en $t = 254.8$ ps), $t = 830.6$ ps, posterior a la finalización del pulso láser (en $t = 509.6$ ps) y $t = 1.606$ ns, cuando el frente de choque está próximo a llegar a la superficie libre del blanco. En todos los casos con T se indica la temperatura electrónica T_e o la iónica T_i , pues para todos los puntos graficados sus valores son prácticamente coincidentes.

En $t = 830.6$ ps se pueden observar valores de hasta 5. Mb en presión y 6.8 g cm^{-3} en densidad, o sea un factor de compresión de 2.5. En $t = 1.606$ ns hay valores de hasta 3. Mb en presión y 5.76 g cm^{-3} en densidad. Los perfiles correspondientes al caso 1 no muestran efectos significativos de atenuación

y tienen valores representativos en presión de 2. a 2.3 Mb y en densidad de 5. a 5.3 g cm⁻³.

En todos los casos se verifica que la principal contribución a la presión es debido al efecto de la compresión del material, es decir la que proviene de la curva fría $P_c(\rho)$.

Los casos 1 y 2 son representativos de las experiencias presentadas en las referencias 17, 18 y 19. En particular Trainor y colaboradores^[18] indican valores para \dot{R}_s de (20. ± 2.) μm/ms y para P de (6. ± 2.) Mb, en una situación como la del caso 2. En condiciones similares Veeseer y colaboradores^[17,19] dan valores para \dot{R}_s de 16.0 y 17.6 y 15.3 μm/ms, obtenidos en tres disparos distintos del láser y adjudicando un error porcentual a cada uno de ellos del orden del 15%, los cuales a su vez representan valores de 3. a 4. Mb para P. Nuestros valores de 15.8 y 16. μm/ms para \dot{R}_s y de 3 Mb para P (tomado como valor representativo de lo que se mediría experimentalmente) concuerdan muy bien con los resultados de Veeseer y colaboradores. Sin embargo los valores de Trainor y colaboradores nos resultan un poco elevados. En sus experimentos con un láser de Nd Burnett y colaboradores^[21] publican conclusiones análogas. Sus resultados experimentales sugieren un valor para \dot{R}_s de 16 μm/ms en muy buena concordancia con los de Veeseer y colaboradores.

La Fig. 4.6 presenta los gráficos para $R_s(t)$ correspondientes a los casos 3,4 y 5 de la Tabla 4.2. En estos casos los espesores de los blancos son un poco mayores que en los anteriores, las intensidades de irradiación son comparables pero se utiliza un láser de CO₂, o sea se ha incrementado la longitud de onda en un factor 10. Esto hace que la dinámica que provoca la compresión del blanco tenga una naturaleza diferente con respecto a la de los casos anteriores.

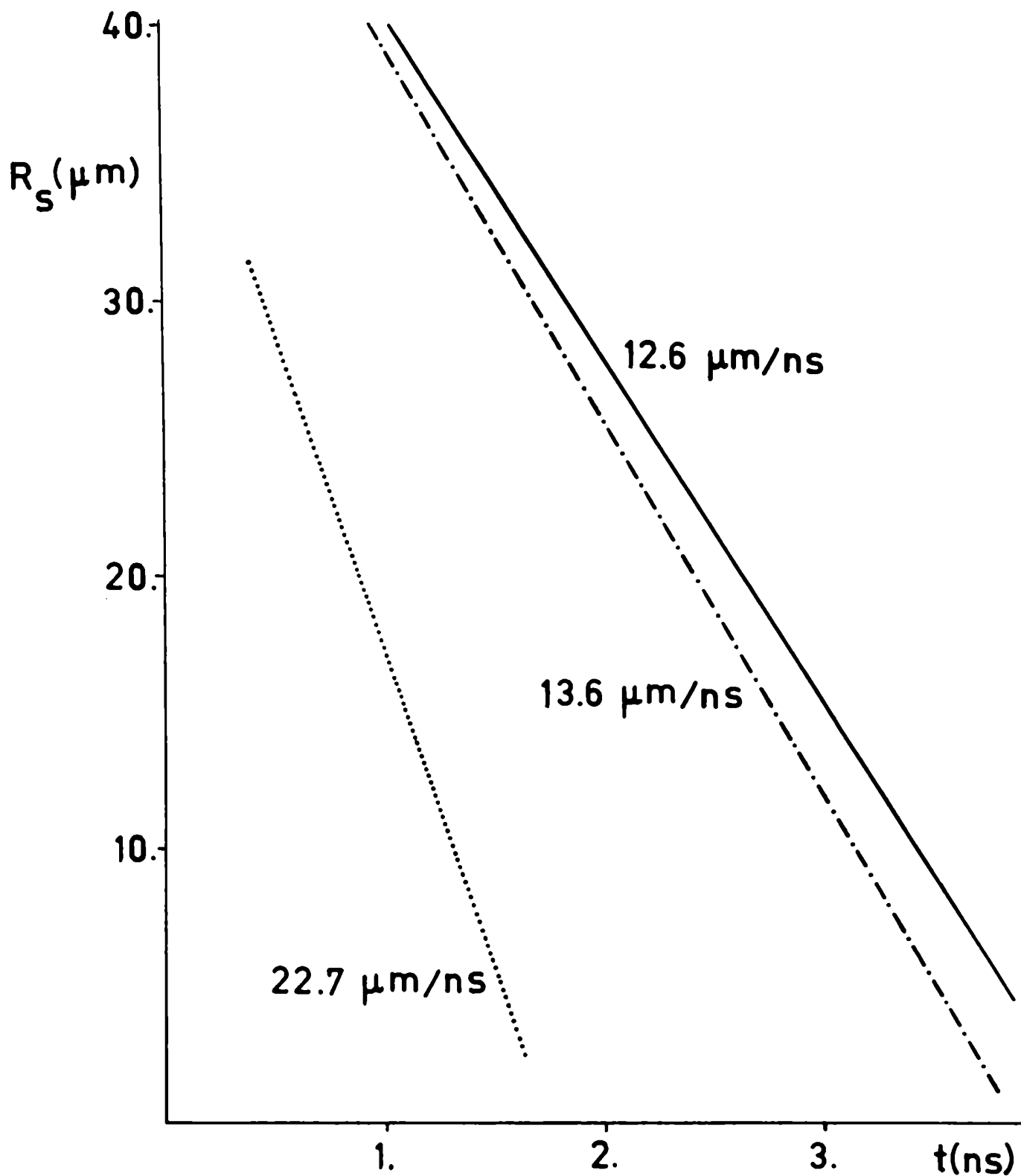


Fig. 4.5: posición de la onda de choque (R_s) en función del tiempo para los casos 3 (—), 4 (-.-) y 5 (.....).

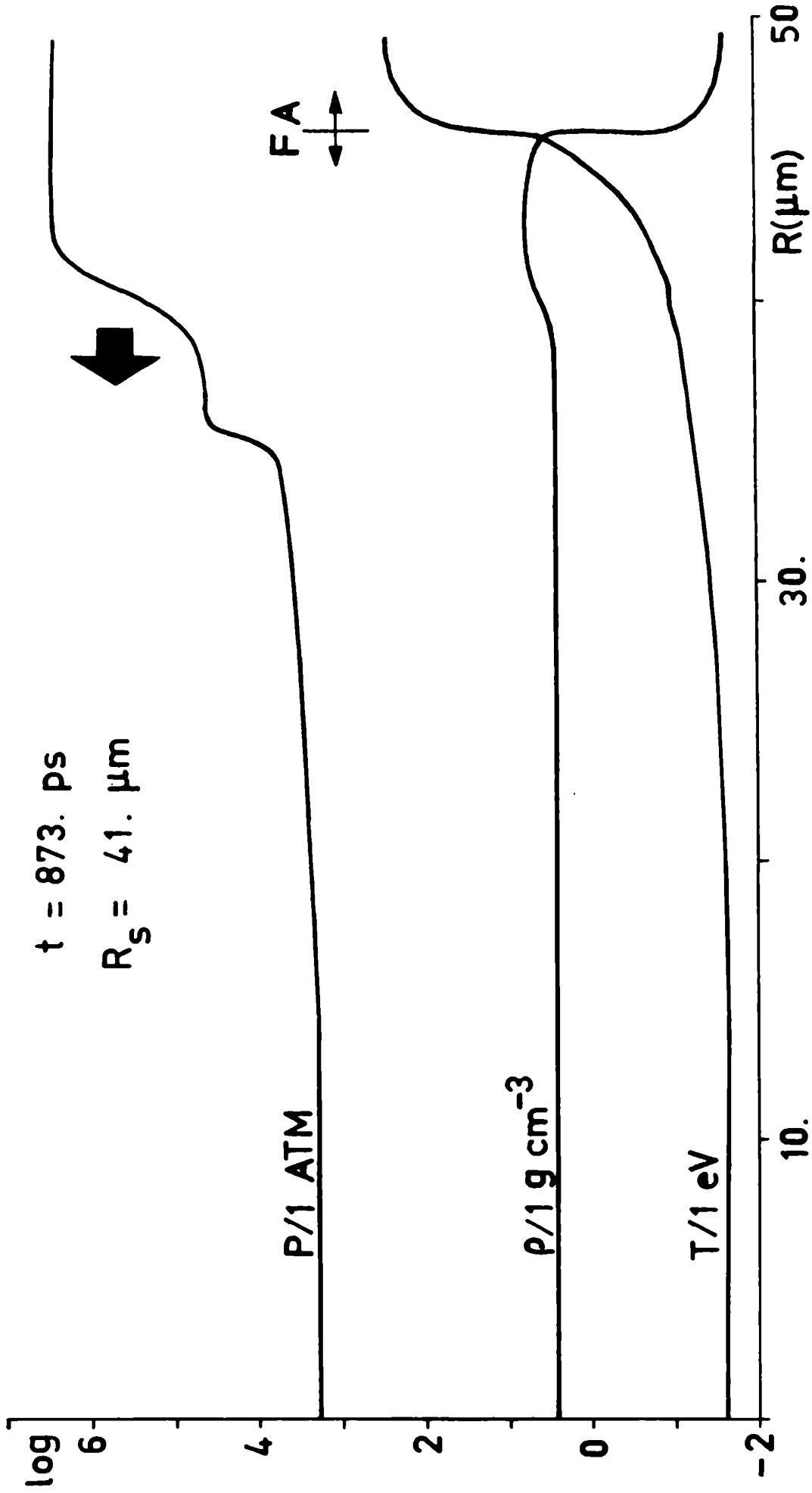


Fig. 4.7: perfiles de presión (P), temperatura (T) y densidad (ρ) para el caso h . La flecha indica la dirección de avance de la onda de choque . También se indica la posición del frente de ablación (FA) .

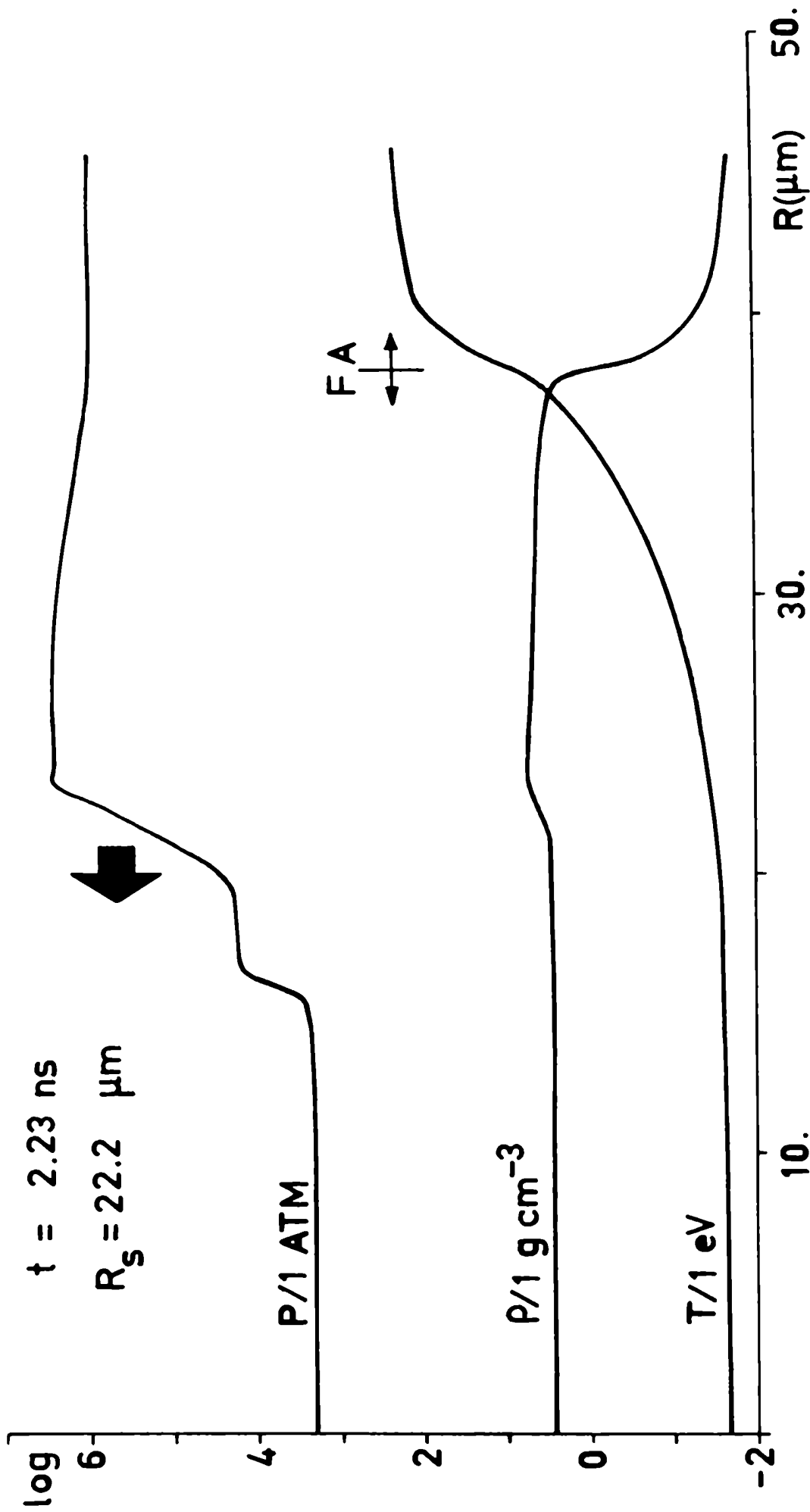


Fig. 4.8: idem Fig. 4.7 .

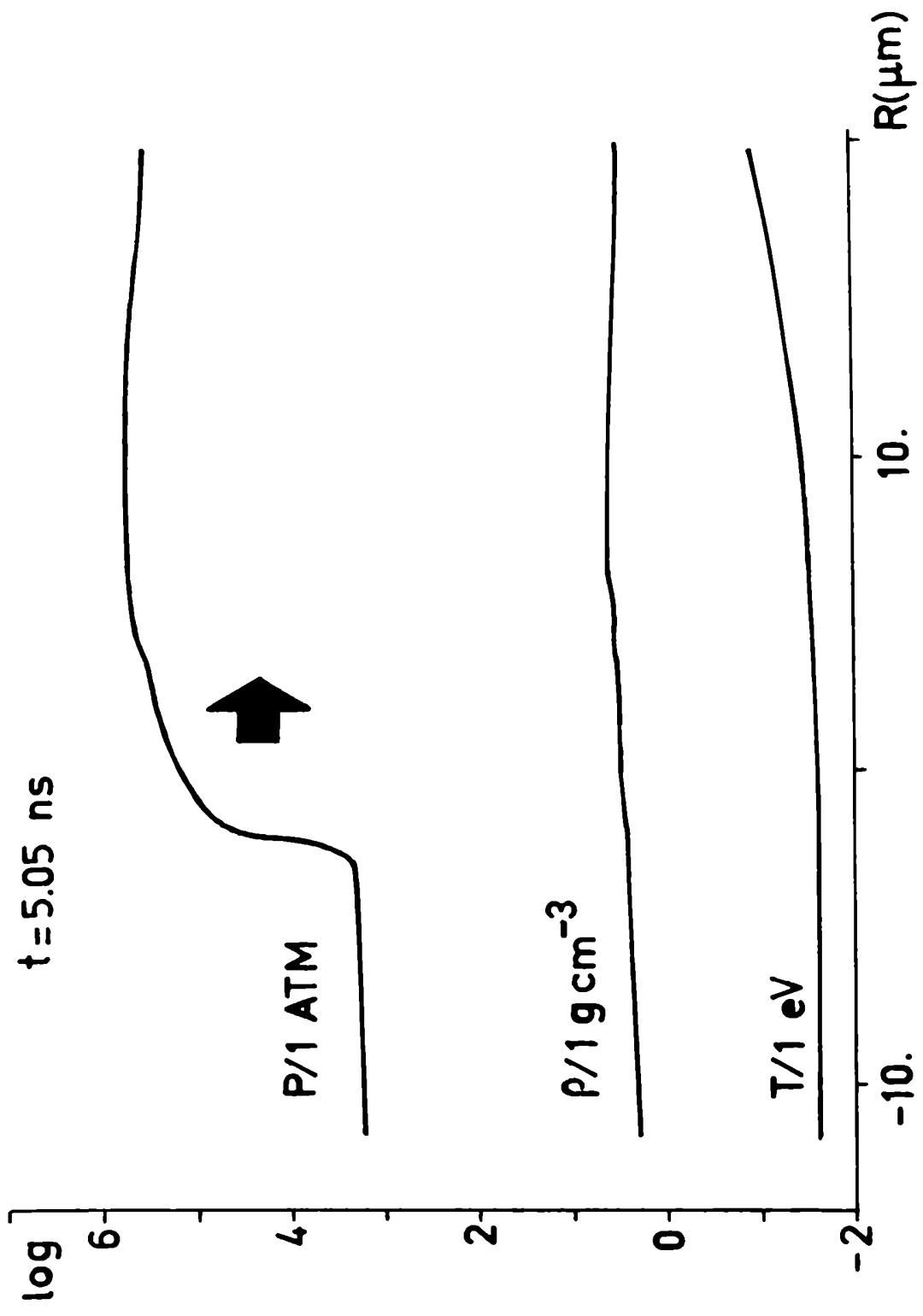


Fig. 4.2: perfiles de presión (P), temperatura (T) y densidad (ρ) para el caso h , luego de que la onda de choque alcanza la superficie libre del blanco. En esta figura la flecha indica la propagación de una onda de rarefacción.

En efecto la densidad crítica toma un valor muy bajo para una longitud de onda de $10.6 \mu\text{m}$ ($\approx 3.9 \times 10^{-5} \text{ g cm}^{-3}$) y rápidamente se aleja del blanco con la ablación de los estratos de material más externos, impidiendo de esta forma un acoplamiento láser-plasma por bremsstrahlung inverso eficiente. Sin embargo en esta longitud de onda la generación de electrones supratérmicos por absorción resonante en la zona de la superficie crítica es importante y su elevada temperatura de fuente les permite penetrar en la zona densa depositando su energía en forma gradual. De esta manera se genera un perfil de temperatura decreciente hacia el interior del blanco que a su vez induce un gradiente de presiones que provoca la compresión del material. El rápido e intenso desarrollo de este proceso desemboca en el desprendimiento de un frente de choque que avanza hacia la superficie libre del blanco.

Los casos 3 y 4 representan configuraciones experimentales del tipo de las utilizadas por Goldstone y colaboradores^[20]. Las Figs. 4.7, 4.8 y 4.9 muestran los perfiles de P , ρ y T correspondientes al caso 4. El instante $t = 873.3 \text{ ps}$ es un poco anterior al pico de potencia del pulso láser que ocurre en $t = 934.2 \text{ ps}$. La temperatura de fuente de los electrones supratérmicos T_H es aquí de 14.9 KeV. En este instante el frente de choque ha casi completado su etapa de formación. Se observa un escalón en la presión delante del salto principal asociado al frente de choque, lo cual refleja una estructura más expandida del mismo, producto a su vez de una compresión no tan abrupta. Nótese también el perfil de temperatura suavemente decreciente hacia el interior del blanco. La presión P alcanza a tomar valores de 2.7 Mb y la densidad ρ de 5.48 g cm^{-3} . En estos casos el frente de choque se forma más hacia el interior del blanco y el frente de ablación penetra más adentro también. En la

Fig. 4.7 por ejemplo, ya se ha ablado $0.5\mu\text{m}$ del espesor original de $50\mu\text{m}$ de aluminio, el frente de ablación se ubica a $46\mu\text{m}$ de la superficie libre del blanco y la superficie crítica se encuentra a más de $430\mu\text{m}$ de la misma.

El instante $t = 2.23\text{ns}$ es posterior a la finalización del pulso, que ocurre en $t = 1.868\text{ns}$. Ya se han ablado $0.9\mu\text{m}$, el frente de ablación se corrió a $38\mu\text{m}$ y la superficie crítica se ubica más allá de los 0.2cm . Se observan presiones de hasta 2.8 Mb y densidades de 5.7 g cm^{-3} . Este valor resulta un poco bajo frente al valor experimental de 5 Mb , pero es comparable al resultado del código de simulación LASNEX del Laboratorio de Los Alamos, que predice un valor de 3.8 Mb .

La Fig. 4.9 muestra la onda de rarefacción que se comienza a propagar hacia el interior del blanco, una vez que el frente de choque alcanza la superficie libre del mismo.

El caso 5 corresponde al experimento de Burnett y colaboradores^[21] realizado con un láser de CO_2 . En este caso se ablan $2\mu\text{m}$ del material, se alcanzan presiones de hasta 10 Mb y densidades de 8.8 g cm^{-3} . El frente de choque se propaga con una velocidad de $22.7\mu\text{m/ns}$. Estos valores concuerdan dentro de 15% en la velocidad y el 30% en la presión (que son las precisiones usuales en estas medidas experimentales) con los valores de 13 Mb y $25\mu\text{m/ns}$ publicadas por Burnett y colaboradores^[21].

Finalmente, queremos mencionar que en todos los casos la conservación de la cantidad de movimiento se satisface por debajo del 0.1% y la de la energía al orden del 5% , lo cual nos permite estimar cuantitativamente la calidad y confiabilidad de nuestra integración numérica.

CAPITULO V

SIMULACION DE IMPLOSION DE BLANCOS ESFERICOS

V. SIMULACION DE IMPLOSION DE BLANCOS ESFERICOS

En este capítulo presentaremos los resultados correspondientes a la simulación numérica de implosiones de blancos esféricos irradiados con pulsos láser de alta potencia. El interés principal en este tipo de experimentos reside en su aplicación al problema de la fusión nuclear controlada por confinamiento inercial.

De acuerdo a las características del blanco y pulso láser utilizados, las experiencias pueden agruparse dentro de dos conjuntos: las que operan en el modo explosivo y las que operan en el modo ablativo. Hemos puesto particular énfasis en la simulación de casos explosivos. Estos constituyen la mayor parte de los experimentos realizados hasta el presente y para ellos ha sido diseñado el modelo de cálculo para deposición de energía por pasaje de electrones supratérmicos presentado en el capítulo III.

V.1 Características de las implosiones explosivas

La realización de experimentos de implosión que operan en el modo explosivo ha sido el primer paso experimental hacia la fusión nuclear inducida con luz láser. Una gran cantidad de trabajo teórico y experimental se ha desarrollado para analizar e interpretar tales experiencias^[122-131]. Varias razones justifican este hecho. Los blancos utilizados son cáscaras esféricas de vidrio de poco espesor ($R/\Delta R \sim 50$ a 100 , siendo R el radio de la cáscara y ΔR su espesor) rellenas con una mezcla gaseosa de Deuterio-Tritio (D-T) a baja presión ($\rho_{DT} \sim .001 \text{ g cm}^{-3}$), que son fáciles de fabricar y diagnosticar.

Los pulsos de luz láser de alta potencia son de corta duración ($\text{FWHM} \sim 50\text{-}100$ ps, siendo FWHM el ancho total del pulso a la mitad del pico de potencia), no requieren otra conformación temporal que la que usualmente se aproxima por una Gaussiana y tienen intensidades de irradiación sobre el blanco del orden de 10^{15} Wcm^{-2} . En estas condiciones se llega a depositar sobre el blanco hasta 10^8 Jg^{-1} (cantidad varios órdenes de magnitud superior a la energía interna específica inicial) y se provoca un brusco incremento de entropía, lo cual resulta en un fuerte calentamiento del combustible pero, también, en un bajo estado de compresión final.

El desarrollo y las principales características de las implosiones explosivas pueden resumirse en los siguientes puntos:

a) El alto valor de la intensidad de irradiación sobre el blanco, provoca que parte de la energía se absorba mediante mecanismos de absorción resonante en la zona de la superficie crítica, con la correspondiente producción de abundantes electrones supratérmicos. Estos juegan un papel fundamental en la dinámica posterior del blanco.

b) Los electrones supratérmicos producidos tienen libres caminos medios comparables y aún superiores al espesor de vidrio. Por lo tanto pueden recorrer todo este espesor calentando a los electrones fríos o térmicos del mismo, los cuales, debido a la alta densidad del material, rápidamente calientan a los iones a través del intercambio colisional. También se produce cierto grado de calentamiento en el D-T.

c) Este intenso, y prácticamente instantáneo, calentamiento de la masa de vidrio, provoca que la misma explote arrojando aproximadamente la mitad de su masa hacia afuera y la otra mitad hacia adentro. De esta forma el

impulsor de vidrio se descomprime significativamente durante el proceso de compresión del D-T.

d) La masa de vidrio que implota, por efecto de la explosión de la cáscara esférica, comprime violentamente la masa gaseosa de D-T. Esto provoca la generación de una onda de choque que converge hacia el centro, comprimiendo el combustible y produciendo un fuerte incremento en la entropía del mismo. Por detrás de la onda de choque continua su movimiento convergente la superficie de separación entre el vidrio y el D-T.

e) Al llegar al centro la onda de choque, se produce una serie de sucesivas reflexiones entre este punto y la interfase vidrio-D-T, que rápidamente se atenuan. La compresión debida a este proceso y al movimiento convergente de la superficie de separación vidrio-D-T, puede considerarse como aproximadamente adiabática.

f) Los dos mecanismos hidrodinámicos mencionados en los puntos d) y e) calientan principalmente a los iones de combustible fusible hasta llevarlos a temperaturas termonucleares. Debido a que las densidades alcanzadas no son demasiado altas, el intercambio colisional resulta ineficiente y, por lo tanto, los electrones se desacoplan de los iones manteniendo su temperatura por debajo de la de aquellos, aún en la situación de máxima compresión.

g) Finalmente el incremento de presión en el D-T, comprimido y calentado, termina por frenar al impulsor de vidrio implotado alcanzándose de esta forma la situación de máxima compresión ("stagnation point"). Las reacciones termonucleares ocurren hasta que el D-T es enfriado por el efecto de la expansión y la conducción térmica.

En estas experiencias se suelen alcanzar temperaturas en el rango de 1. a 8. KeV en el combustible. Pero, sistemáticamente, la densidad del mismo

sólo alcanza un valor del orden de unas pocas veces la densidad del D-T líquido normal ($\rho_{DT} \sim 0.2 \text{ g cm}^{-3}$), o sea un factor 100 de compresión con respecto a las densidades iniciales habituales. Con estas condiciones se alcanzan a producir hasta 10^{10} neutrones provenientes de reacciones de fusión nuclear.

V.2 Simulación de implosiones explosivas

El modelo de cálculo para la deposición de energía por múltiples pasajes de electrones supratérmicos presentado en el capítulo III, apartado III.1.2, no especifica el valor del parámetro σ . Recordemos que el modelo que utilizamos para realizar la simulación numérica trabaja en función de la energía total absorbida, y que de la energía que alcanza a llegar a la superficie crítica sin ser absorbida por bremsstrahlung inverso en la corona, depositamos localmente una fracción σ ($\sigma < 1$) de la misma y el resto $1-\sigma$ se utiliza para simular la absorción resonante, responsable de la producción de los electrones supratérmicos.

La idea para seleccionar el valor del parámetro σ en nuestro modelo, consiste en lograr la mejor reproducibilidad del comportamiento explosivo del blanco, de los valores de compresión, temperatura y producto densidad-radio del combustible y también de la producción de neutrones, determinados experimentalmente.

En la Tabla 5.1 se presentan cinco experimentos típicos de tipo explosivo realizados con un láser de longitud de onda de $1.06 \mu\text{m}$ en diversos laboratorios, con distintos sistemas de iluminación y que barren un rango bastante amplio en energías de pulso, potencia promedio e intensidad de irradiación. Los anchos de pulso FWHM quedan comprendidos entre los 60. y 100. ps, y los

	Sistema de Iluminación y Laboratorio	Energía del Pulso Láser (J)	FWM (ps)	Potencia Promedio (TW)	Intensidad (W cm^{-2})	Porcentaje de Absorción	Radio de la Esfera de Vidrio (μm)	Espesor de Vidrio (μm)
1	2 haces Rutherfordford (122)	15.3	100.	.15	$6. \times 10^{14}$	13.-20.%	44.	.88
2	Janus - 2 haces Livermore (LNL) (123,124)	28.3	70.	.4	1.7×10^{15}	23.%	43.3	.7
3	Zeta - 6 haces Rochester (LIE) (125-127)	112.	62.	1.8	4.4×10^{15}	30.%	56.5	.75
4	Omega - 24 haces Rochester (LIE) (128)	710.	89.	8.	6.2×10^{15}	21.%	100.	1.2
5	Shiva - 20 haces Livermore (LNL) (5,124)	2138.	95.	23.	7.7×10^{15}	20.%	151.	1.5

Tabla 5.1

	Densidad ($g\ cm^{-3}$)		Temperatura (KeV)		Densidad x Radio ($g\ cm^{-2}$)		Neutrones	
	Exp.	Sim. (*)	Exp.	Sim. (*)	Exp.	Sim. (*)	Exp.	Sim.
1	.15	.52	.7	.44	$\sim 10^{-4}$	2.1×10^{-4}	$2. \times 10^4$	1.03×10^4
2	.25	.27	1.- 2.	1.3	$\sim 10^{-4}$	1.9×10^{-4}	$5. \times 10^6$	5.9×10^6
3	$\sim .2$.31	4.- 6.	4.4	$\sim 10^{-4}$	$3. \times 10^{-4}$	1.5×10^9	3.3×10^9
4	$\sim .2$.28	$\sim 5.$	3.5	$2. \times 10^{-4}$	$5. \times 10^{-4}$	$4. \times 10^9$	1.4×10^{10}
5	$\sim .2$.23	4,- 8.	4.6	$\sim 10^{-4}$	$5. \times 10^{-4}$	$2. \times 10^{10}$	$7. \times 10^{10}$

(*, valores promediados sobre toda la masa de combustible)

Tabla 5.2

radios de las cáscaras esféricas de vidrio entre 43. y 151. μm . El porcentaje de energía absorbida fluctúa entre un 15. y un 30.%. Nótese que en los casos 4 y 5 los radios (100. y 151. μm) han sido significativamente aumentados respecto de los casos 1, 2 y 3 (44., 43.3 y 56.5 μm), para evitar que la intensidad supere el valor de 10^{16} Wcm^{-2} . A partir de este valor de intensidad aproximadamente, para esta longitud de onda, comienzan a ser importantes otros efectos no tenidos en cuenta en este modelo, como el de la fuerza ponderomotriz en la zona de la superficie crítica y el de los iones rápidos en la corona.

De acuerdo al criterio expresado anteriormente y trabajando sobre la base de los cinco casos de la tabla 5.1, hemos determinado como valor más apropiado para el parámetro σ en nuestro modelo el de .85. Esto significa que solo un 15. % de la energía que alcanza la superficie crítica será depositada por los electrones supratérmicos en la zona densa comprendida entre ese lugar y la interfase vidrio-D-T.

Los resultados obtenidos para los valores máximos de la densidad, temperatura iónica y producto densidad-radio del combustible, como así también la cantidad de neutrones producidos en estos cinco casos, se presentan en la tabla 5.2 junto con los resultados experimentales.

La concordancia de los resultados de la simulación con los experimentales es en general buena para los cinco casos. En la densidad resulta notable cómo, a pesar de cambiar el pulso y el blanco, el resultado de la compresión final es aproximadamente siempre el mismo. Esta similitud en el comportamiento hidrodinámico del combustible es una característica bien definida de las implosiones explosivas. En la temperatura se observa una tendencia creciente de acuerdo a los valores de potencia e intensidad del pulso, siempre y cuando la masa del blanco permanezca aproximadamente constante. A este incremento en

la temperatura está asociado el incremento en la producción de neutrones.

Los casos 4 y 5 son los más desfavorables en cuanto a la comparación del número de neutrones. Nuestros resultados están incrementados un factor 3.5 respecto de los experimentales. Sin embargo puede citarse a modo de referencia que el código LILAC del Laboratory for Laser Energetics (LLE, Rochester), en el cual se ha volcado un gran esfuerzo para desarrollar métodos de cálculo multigrupal para el transporte por electrones supratérmicos, da un valor incrementado en un factor 2 para el número de neutrones, teniendo en cuenta incluso que descuenta de la energía absorbida la fracción que los iones rápidos se llevan hacia la corona. Luego, aun en estos dos casos, nuestros resultados para el número de neutrones no resultan desacertados.

En la Fig. 5.1 se presentan los distintos gráficos que se obtienen para la compresión del combustible fusible del caso 1, obtenidos con diversos valores del parámetro σ . Con $\sigma = 1$, se quitan los electrones supratérmicos de la simulación, con lo que se pretende eliminar el comportamiento explosivo del blanco. En estas condiciones el D-T se comprime hasta los 6.3 g cm^{-3} y se producen 5.1×10^5 neutrones. Las curvas de $\sigma = .85$, $.8$ y $.7$ son muy similares entre sí, pero a su vez se diferencian muy bien de la curva de $\sigma = 1$. Cualquiera de ellas representa un comportamiento explosivo que se manifiesta a través del fuerte incremento de presión en las etapas iniciales de la compresión, seguida de una compresión aproximadamente isoentrópica. Cuanto menor es el valor de σ tanto más explosivo es el comportamiento y por ende tanto menor es la compresión final y tanto mayor es la temperatura final (y en consecuencia la producción de neutrones).

Resulta interesante hacer un análisis más detallado de alguno de estos casos. Para ello hemos elegido el caso 3. Cualquiera de los otros tiene un

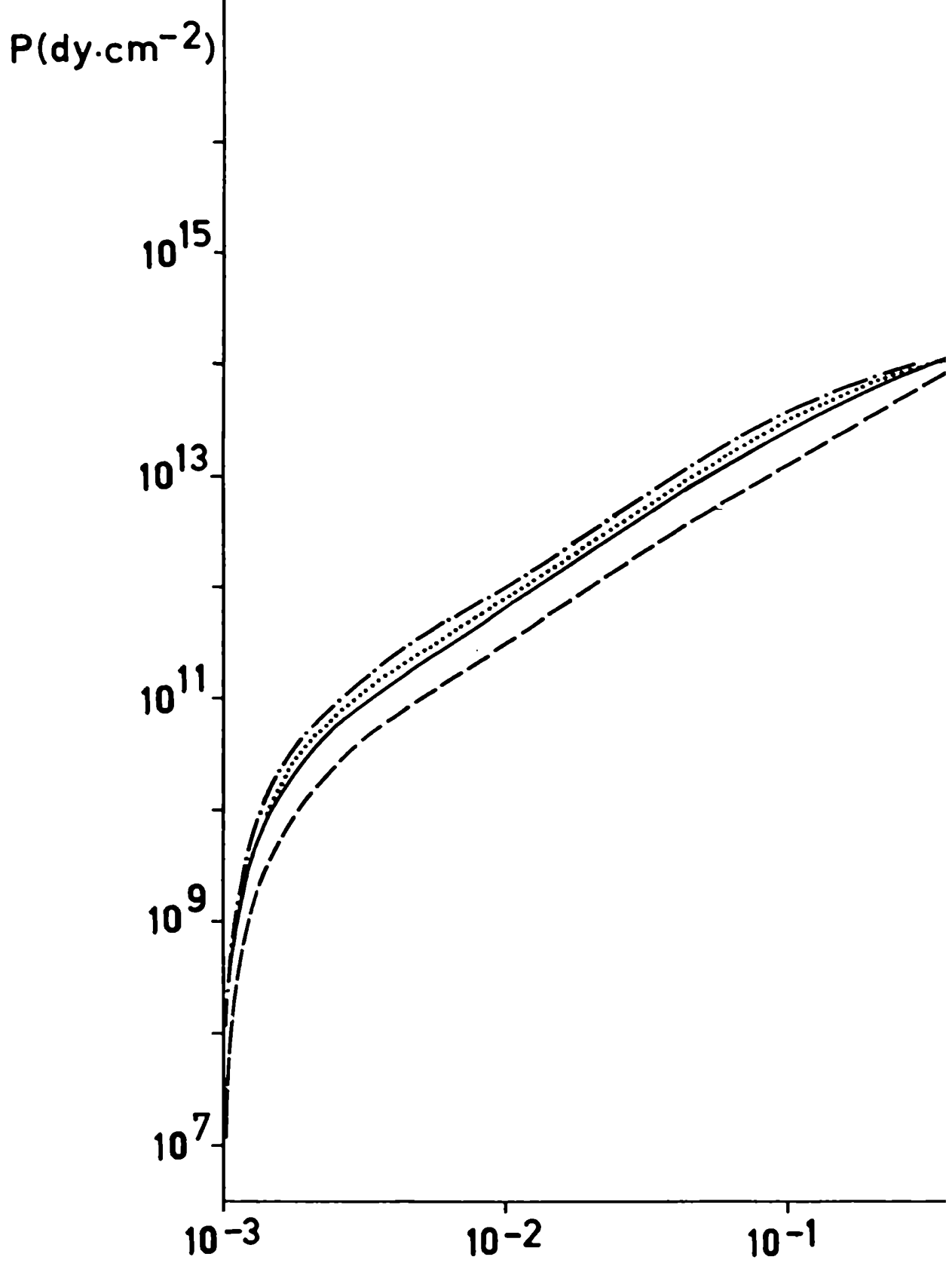
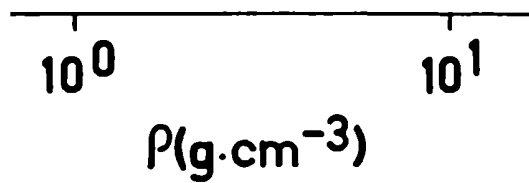
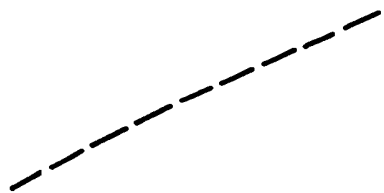


Fig. 5.1: gráficos de la presión (P) vs. densidad (ρ) para el combustible simulaciones con $\sigma = .7$ (-·-·-), $.8$ (·····), $.85$ (—) y $1.$ (- - -)



caso 1 , correspondientes a

comportamiento cualitativamente similar. Este análisis se realiza a través de los siguientes pasos.

1- Compresión del combustible, análisis comparativo con $\sigma = 1.$ y $.85$ (Fig. 5.2 y Tabla 5.3).

2- Evolución hidrodinámica del blanco, análisis comparativo con $\sigma = 1.$ y $.85$ (Fig. 5.3 y 5.4).

3- Precalentamiento y explosión del impulsor de vidrio en la etapa inicial de la evolución del blanco. Comportamiento sin electrones supratérmicos (Fig. 5.5 a 5.7).

4- Perfiles completos de temperaturas electrónica e iónica, presión y densidad, en algunos instantes significativos (Fig. 5.8 a 5.11).

1- En la Fig. 5.2 se muestran los gráficos de presión (P) vs. densidad (ρ) del combustible obtenidos con $\sigma = .85$ y $1.$. Estas curvas tienen entre sí las mismas diferencias cualitativas que las del caso 1 en la Fig. 5.1. La de $\sigma = .85$ tiene un calentamiento inicial más intenso que la de $\sigma = 1.$, esto se refleja en un mayor valor de presión para el mismo valor de densidad. Con $\sigma = 1.$, cuando la onda de choque ya ha llegado al centro, las temperaturas electrónica e iónica en el D-T son $.57$ y 1.12 KeV respectivamente y se ha logrado un factor 33 de compresión ($\rho = .16 \text{ g cm}^{-3}$). Mientras que con $\sigma = .85$ son de 1.12 y 2.2 KeV respectivamente y el factor de compresión es 24 ($\rho = .1 \text{ g cm}^{-3}$).

Luego de este calentamiento inicial debido al pasaje de la onda de choque principal, el combustible entra en una etapa de compresión aproximadamente adiabática. Sin embargo el mayor incremento de entropía del caso explosivo ($\sigma = .85$) hace que solo se logre un factor de compresión final de 74

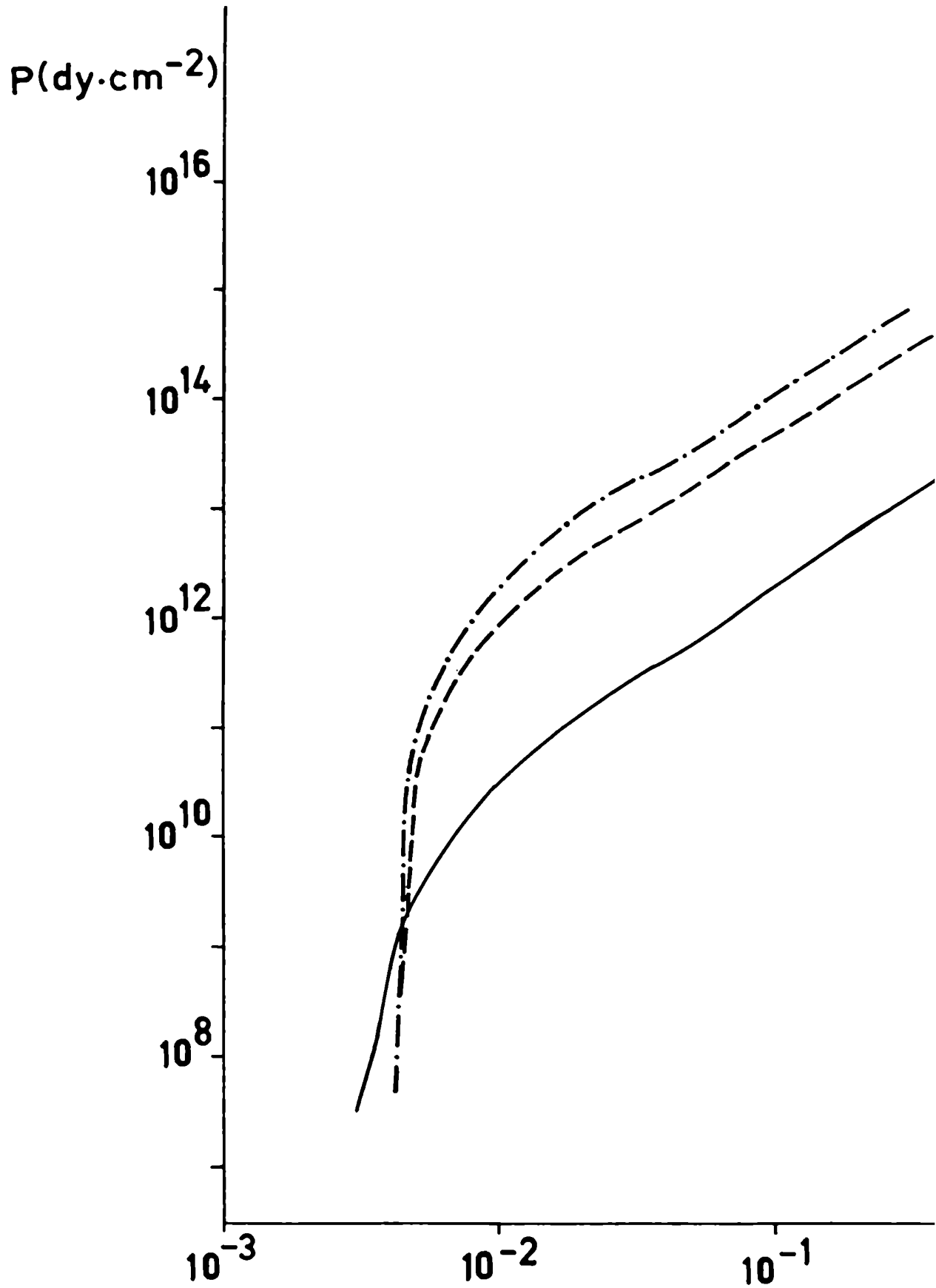
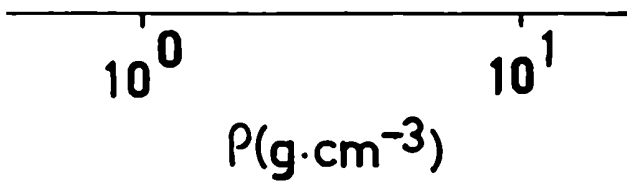
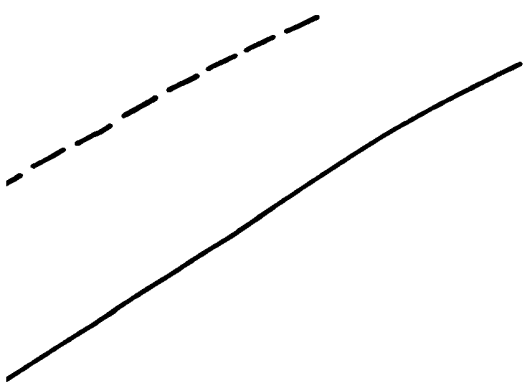


Fig. 5.2: gráficos de la presión (P) vs. densidad (ρ) para el combustible simulaciones con $\sigma = .85$ ($- \cdot - \cdot -$) y 1. ($- - -$). También se muestr



e en el caso 3 , correspondientes a
a el gráfico del caso ablativo (—) .

t (ps)	ρ ($g\ cm^{-3}$) (*)	T_e (KeV) (*)	T_i (KeV) (*)	P (Matm) (*)	T_H (KeV)	γ_T	Porcentaje de masa ablada
93.5	.009	.076	.13	1.59	9.3	1.67	31.3%
132.	.034	.54	1.1	21.8	4.1	3.95	43.3%
153.	.11	1.1	2.1	146.	-	-	46.3%
180.	.31	1.9	4.1	706.	-	-	55.3%

(*, valores promediados sobre toda la masa de combustible)

Tabla 5.3

($\rho = .31 \text{ g cm}^{-3}$) con temperaturas electrónica e iónica de 1.9 y 4.1 KeV respectivamente. Mientras que con $\sigma = 1$, se logra un estado final de un factor 714 en compresión ($\rho = 3. \text{ g cm}^{-3}$), temperaturas electrónica e iónica de 2.1 y 3.5 KeV respectivamente y una producción de neutrones de 7.3×10^9 .

2- En las Figs. 5.3 y 5.4 se muestran los gráficos de las posiciones de algunos elementos de fluido en función del tiempo (1,2,3), de la onda de choque (R_S), frente de ablación (**FA**) y superficie crítica (**SC**). El elemento de fluido cuya curva se indica con el número 1 pertenece a la superficie de separación entre el vidrio y el D-T. Entre el elemento de fluido asociado a la curva 3 y el de la 1 está comprendida en todo instante el 90% de la masa total del impulsor de vidrio y entre el de la curva 2 y el de la 1 la mitad de la misma.

Los gráficos de la Fig. 5.3, correspondiente a $\sigma = .85$, y 5.4, correspondiente a $\sigma = 1.$, presentan diferencias muy significativas entre sí. En efecto, podemos observar que las escalas de tiempo son distintas y que la que transcurre más rápido corresponde al caso explosivo ($\sigma = .85$). En general se observa un apartamiento más simétrico de las curvas 1 y 3 respecto de la 2 en esta situación, lo cual está asociado con la violenta expansión de la masa de vidrio. En cambio, con $\sigma = 1.$, el transporte de calor por conducción no alcanza a provocar ese calentamiento prácticamente uniforme en el vidrio y una porción de masa del impulsor que es implotada se mantiene relativamente fría y alcanza a comprimirse significativamente. Por otro lado la Fig. 5.3 muestra claramente que aproximadamente la mitad de la masa de vidrio es impulsada hacia afuera.

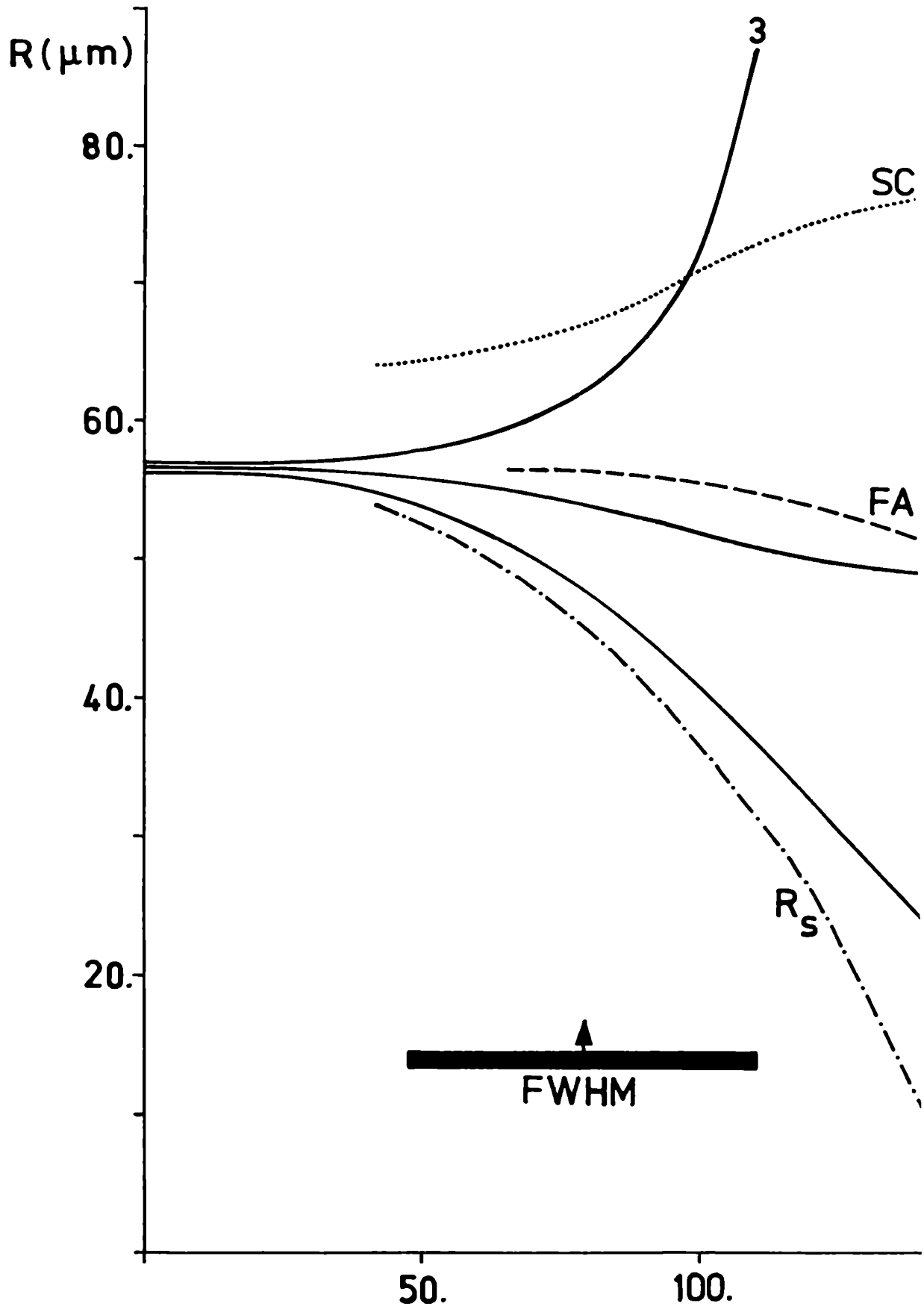
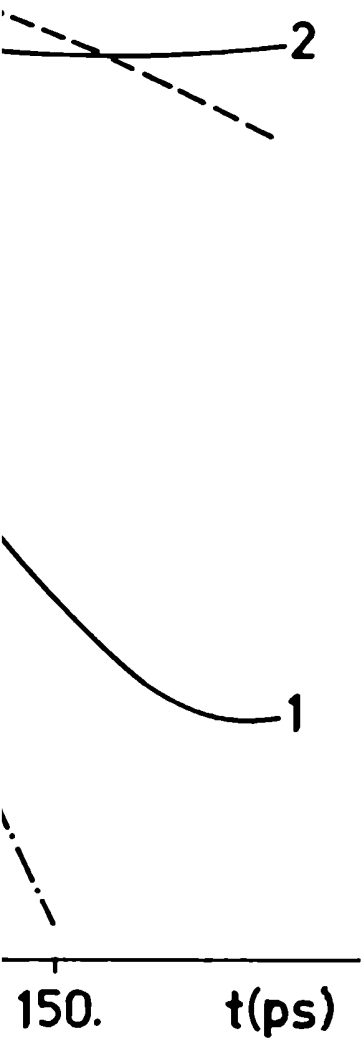


Fig. 5.3: gráficos de la posición de algunos elementos de fluido (1,2,3) , fr superficie crítica (SC) y onda de choque (R_s) en función del tiempo con $\sigma = .85$. También se indica la posición del pico de potencia



nte de ablación (FA) ,
para el caso 3 , simulado
l pulso láser .

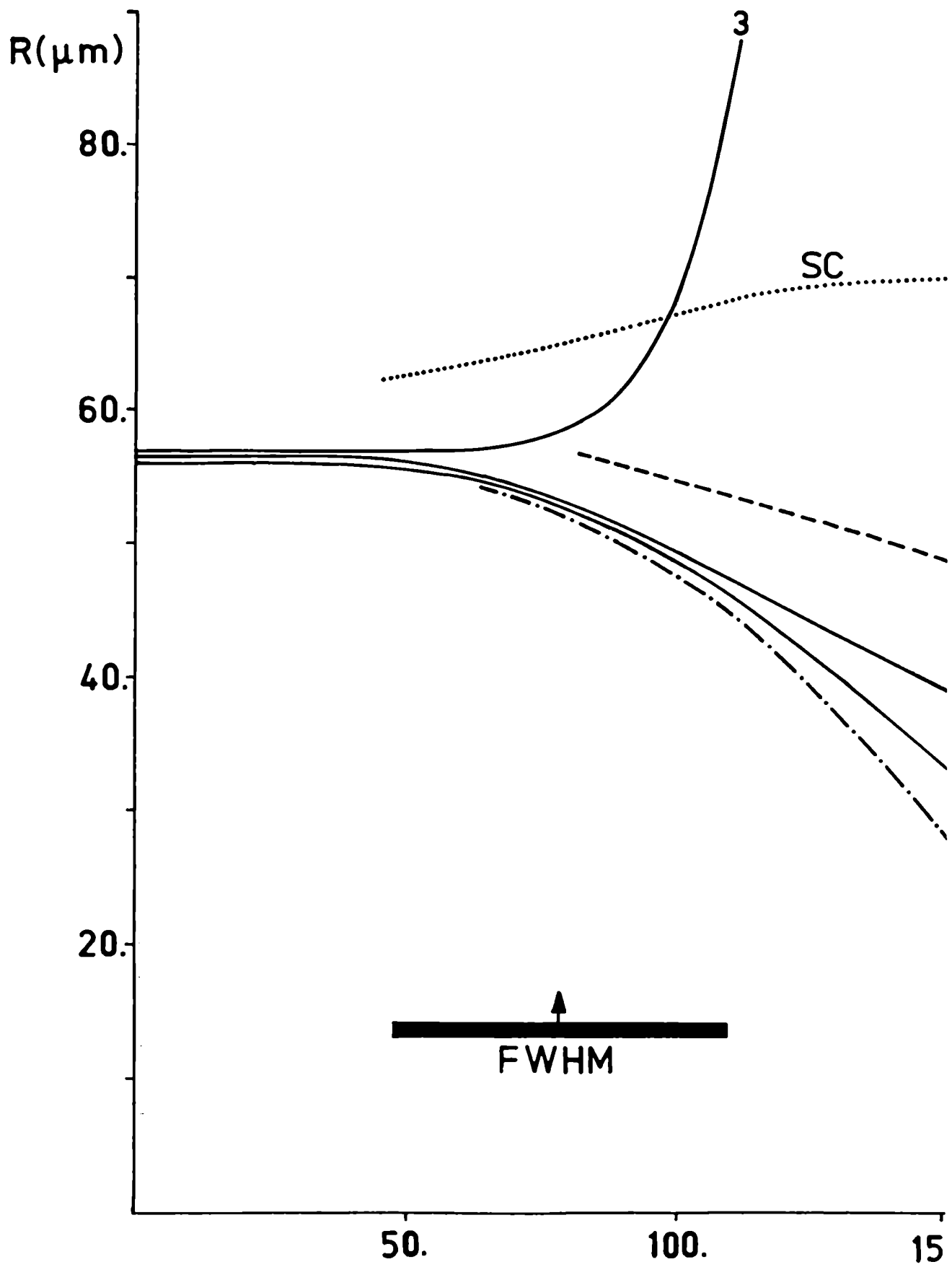
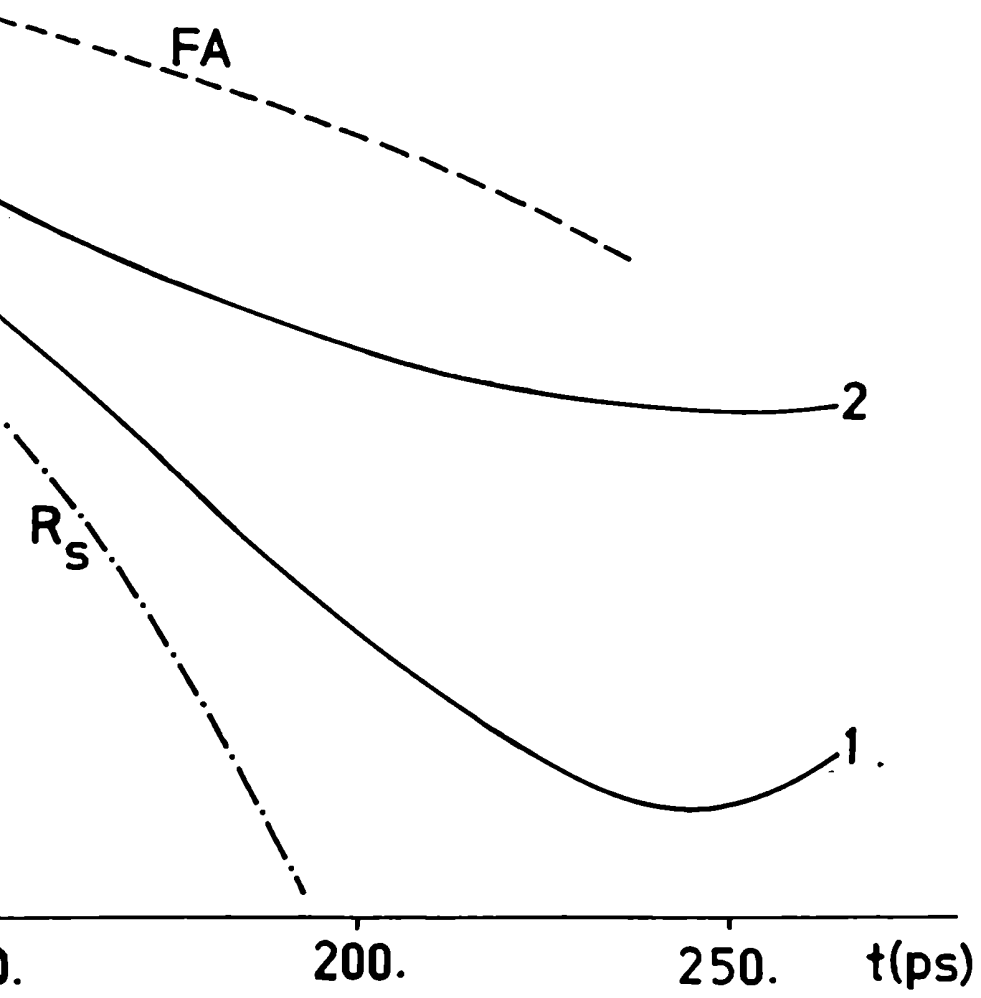


Fig. 5.4: idem Fig. 5.3 , pero realizando la simulación con $\sigma = 1$. .



3- Las Figs. 5.5, 5.6 y 5.7 muestran los perfiles espaciales de la presión (P), densidad (ρ) y temperaturas electrónica (T_e) e iónica (T_i) para el vidrio en tres instantes de tiempo correspondientes a la etapa inicial en la evolución del blanco. Para poder visualizar el efecto de la deposición de energía por electrones supratérmicos logrado con nuestro modelo, presentamos simultáneamente los gráficos correspondientes a $\sigma = .85$ y $1.$. En los mismos se indica la ubicación de las coordenadas de posición correspondientes a los elementos de fluido asociados a las curvas 1 y 3 en las Figs. 5.3 y 5.4.

El efecto del calentamiento por electrones supratérmicos se ve claramente en los sucesivos perfiles de temperatura. Inicialmente (Fig. 5.5) el comportamiento en ambos casos es relativamente parecido. Como consecuencia de la ablación de los estratos más externos, se forma un pico de compresión que alcanza densidades del orden de $5. \text{ g cm}^{-3}$.

Sin embargo el efecto de los supratérmicos se hace notar a través de un precalentamiento del vidrio aun sin comprimir que alcanza temperaturas del orden de $.5$ a $1. \text{ eV}$. En ambas situaciones la masa ablada alcanza al 3.38% de la masa total. En este instante la temperatura de fuente de los supratérmicos es $T_H = 2.4 \text{ KeV}$ y la función de deposición $G(\gamma, \gamma_T)$ está trabajando con un $\gamma_T = 5.16$.

En la Fig. 5.6 el pico de compresión ($\sim 6. \text{ g cm}^{-3}$) comienza a desarmarse por efecto del calentamiento de los supratérmicos, que levantan la temperatura del vidrio hasta unos $10. \text{ eV}$. La masa ablada alcanza al 10% , la temperatura T_H es de 4.4 KeV y el parámetro γ_T es 3.08 . Mientras tanto en el blanco que evoluciona con $\sigma=1.$ el pico de compresión continua incrementándose ($\sim 9. \text{ g cm}^{-3}$) y la masa ablada alcanza al 6.75% .

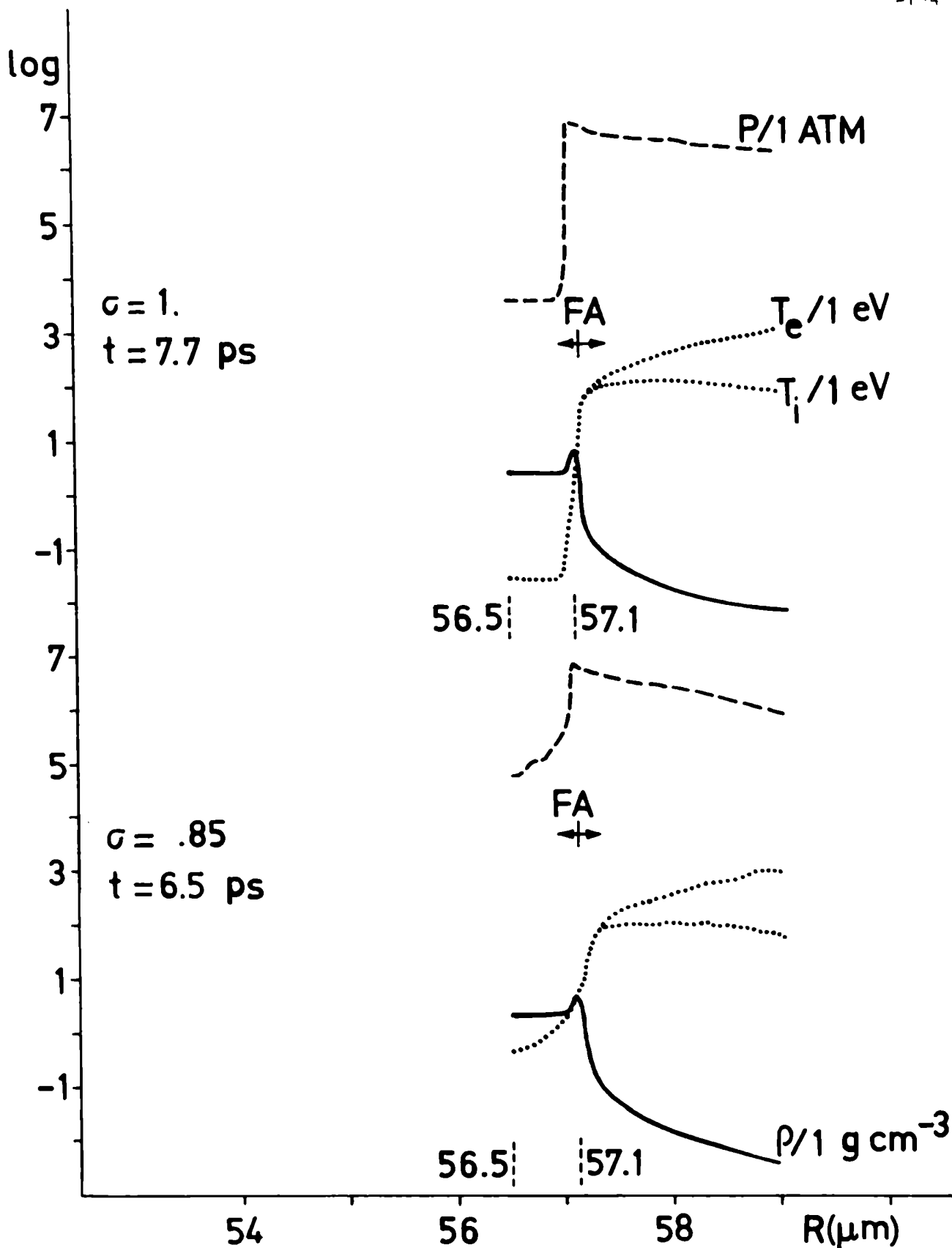


Fig. 5.5: perfiles de presión (P), densidad (ρ) y temperaturas electrónica (T_e) e iónica (T_i) para el impulsor de vidrio del caso 3, con $\sigma = .85$ y $\sigma = 1.$. También se indica la posición del frente de ablación (FA) y de las coordenadas Lagrangianas entre las que queda contenida el 20% de la masa de vidrio.

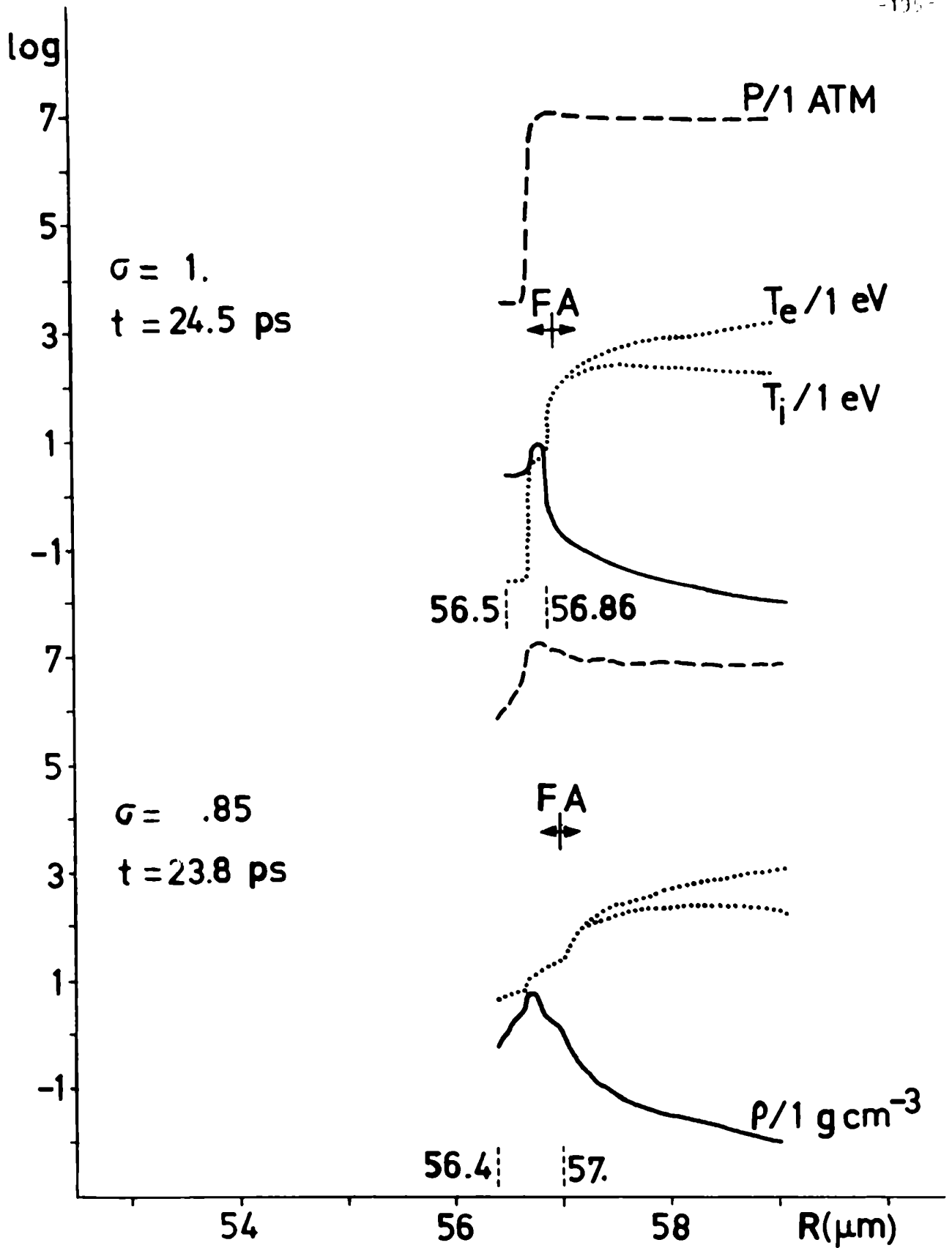


Fig. 5.6: idem Fig. 5.5 .

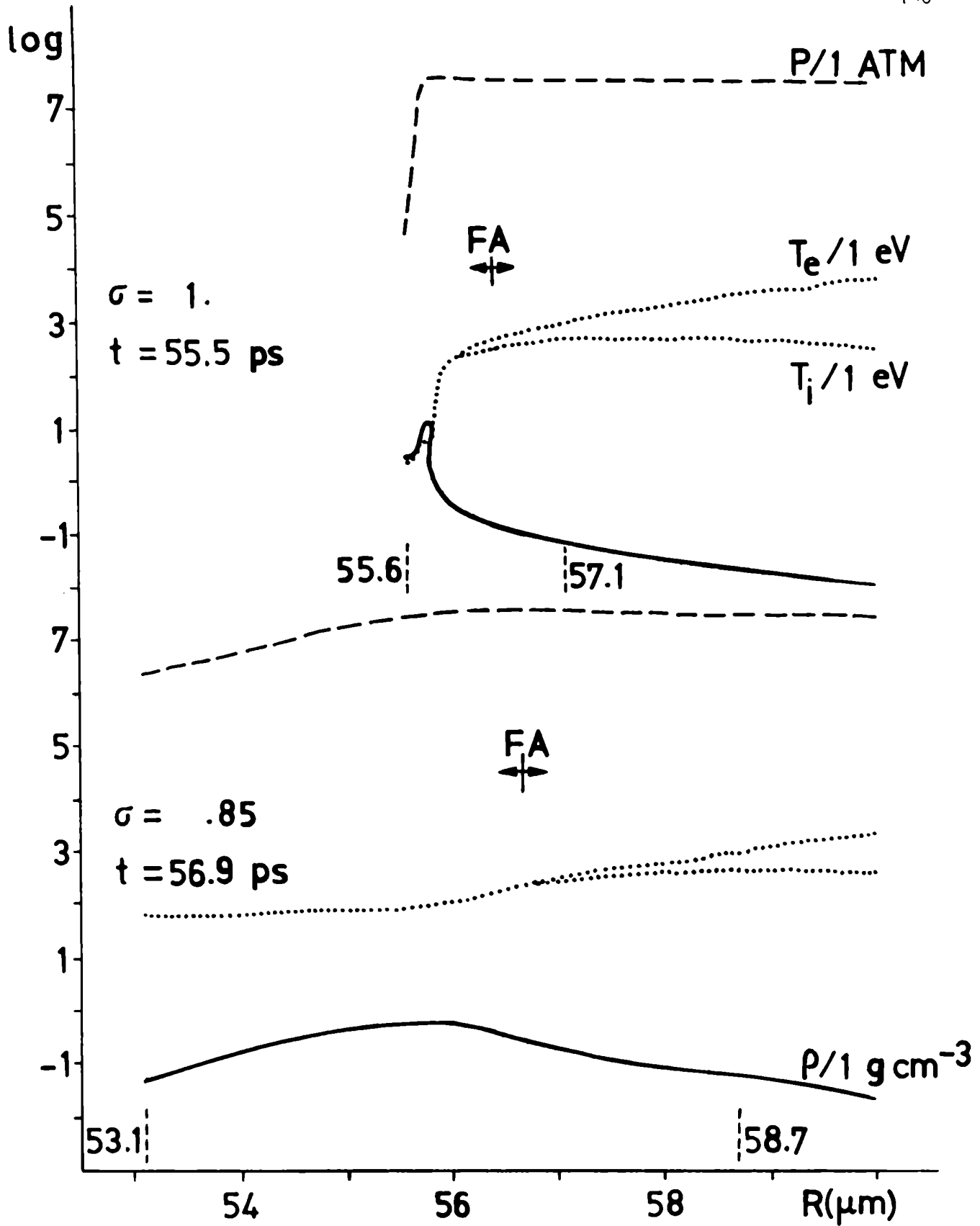


Fig. 5.7: idem Fig. 5.5 .

En la Fig. 5.7 la temperatura del vidrio se ubica en el orden de los 100. eV pero simultáneamente, por efecto de la expansión, la densidad es del orden de $.6 \text{ g cm}^{-3}$. En este instante la temperatura de fuente T_H vale 9.1 KeV, el parámetro $\gamma_T = 1.64$ y el porcentaje de masa ablada es del 28.3%. En esta figura el efecto explosivo del impulsor de vidrio debido al calentamiento por supratérmicos se hace evidente. En el caso que evoluciona con $G = 1$, el pico de compresión alcanza los 13.5 g cm^{-3} y está próximo a llegar a la interfase vidrio-D-T. El porcentaje de masa ablada es del 13%.

En cualquiera de las tres figuras se nota que en la zona de plasma menos denso las temperaturas electrónica e iónica se desacoplan entre sí.

4- Para completar el análisis del caso 3, en las figuras 5.8 a 5.11 se presentan los perfiles completos de presión (P), densidad (ρ), temperaturas electrónica e iónica (T_e, T_i), ubicación de la interfase D-T-vidrio, frente de ablación (FA) y superficie crítica (SC). Los instantes elegidos son: 93.5 ps, representativo de la etapa inicial de compresión del combustible, 132. ps, instante previo al colapso del frente térmico, 153. ps, colapso de la onda de choque, y 180 ps estado de máxima compresión del combustible ("stagnation point"). En la tabla 5.3 se muestran los valores de las magnitudes inherentes al estado termodinámico del combustible, deposición por supratérmicos en el vidrio y porcentaje de masa ablada en estos instantes.

En las Figs. 5.8 y 5.9 se puede observar claramente el avance del frente térmico y la onda de choque hacia el centro del blanco. Se nota que el primero viaja por delante del segundo, y colapsa unos 20. ps antes. En la Fig. 5.10 el colapso de la onda de choque provoca un pico en la densidad de

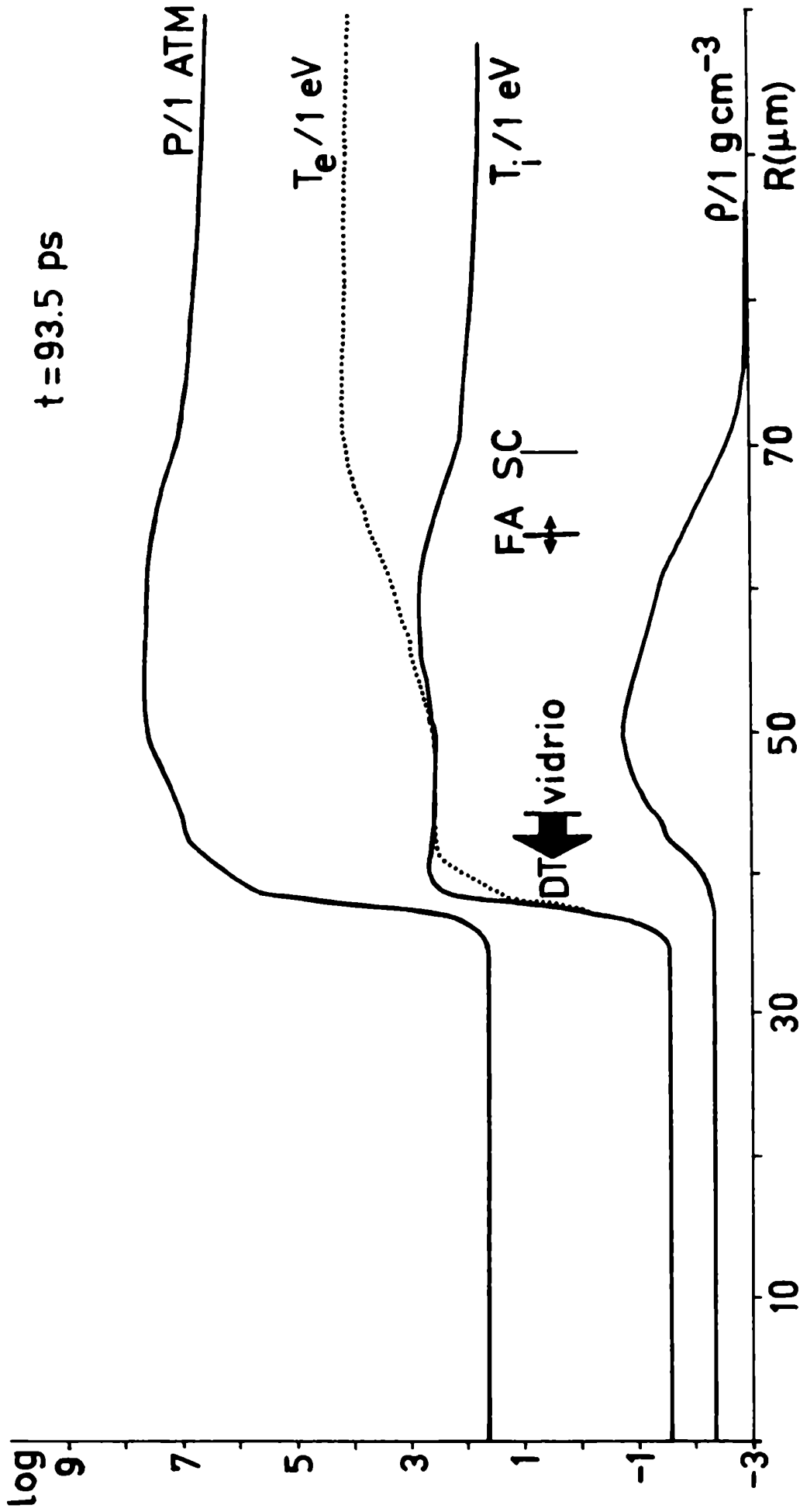


Fig. 5.3: perfiles completos de presión (P), densidad (ρ) y temperaturas electrónica (T_e) e iónica (T_i) para el caso 3. La flecha indica la dirección de avance de la interfase vidrio-DT. También se indica la posición del frente de ablación (FA) y de la superficie crítica (SC).

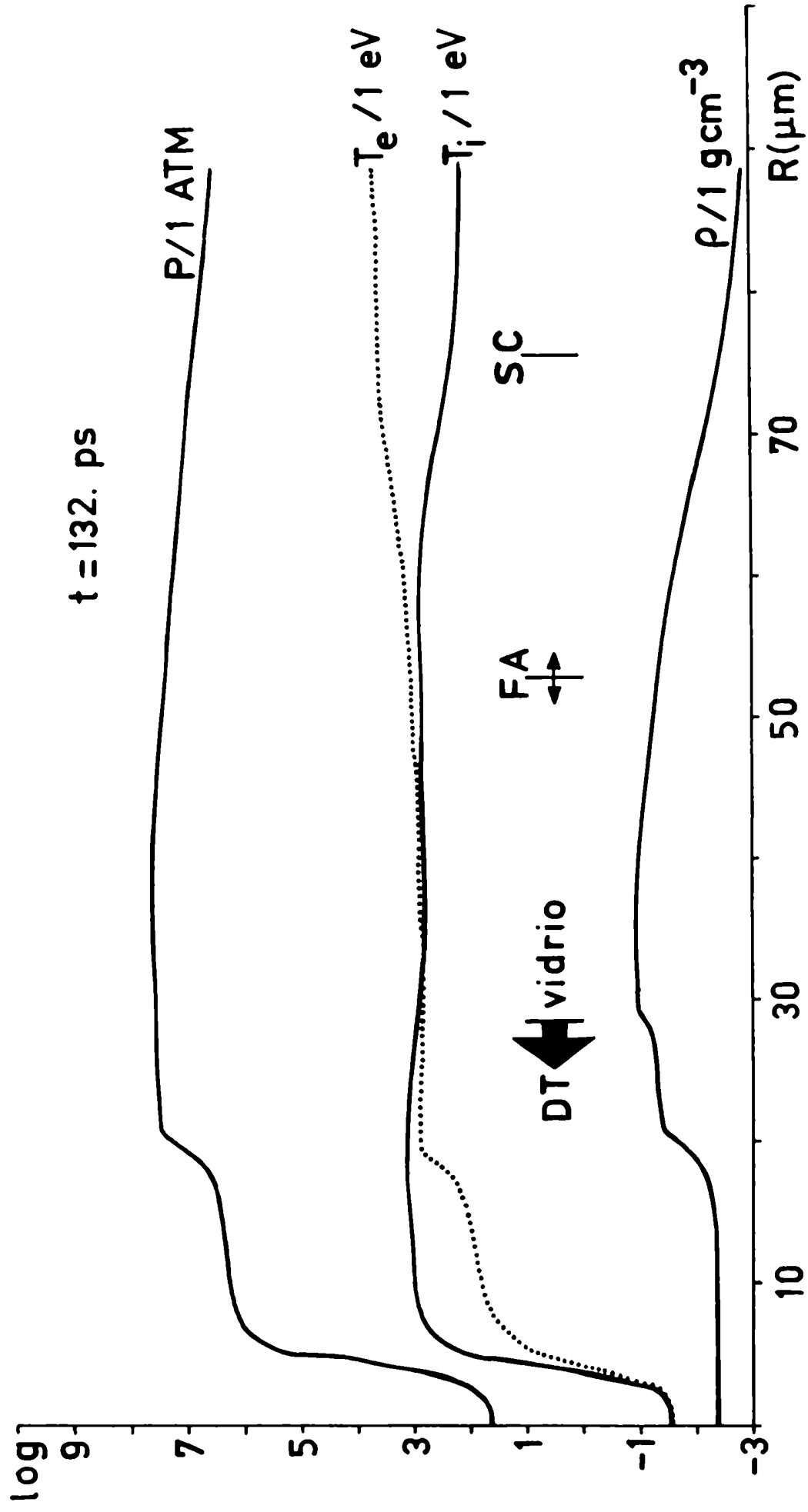


Fig. 5.2: idem Fig. 5.8 .

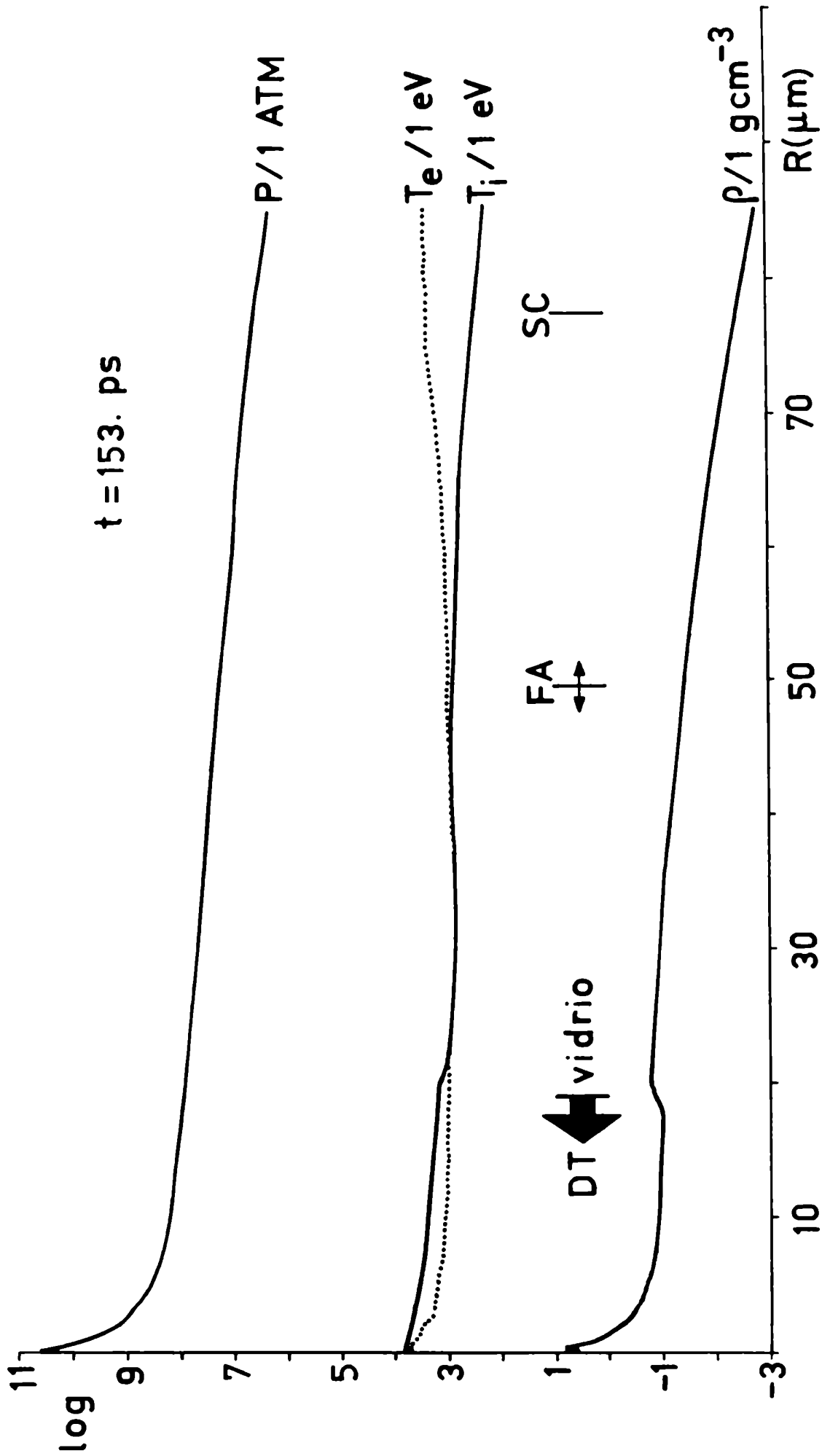


Fig. 5.10: idem Fig. 5.9 .

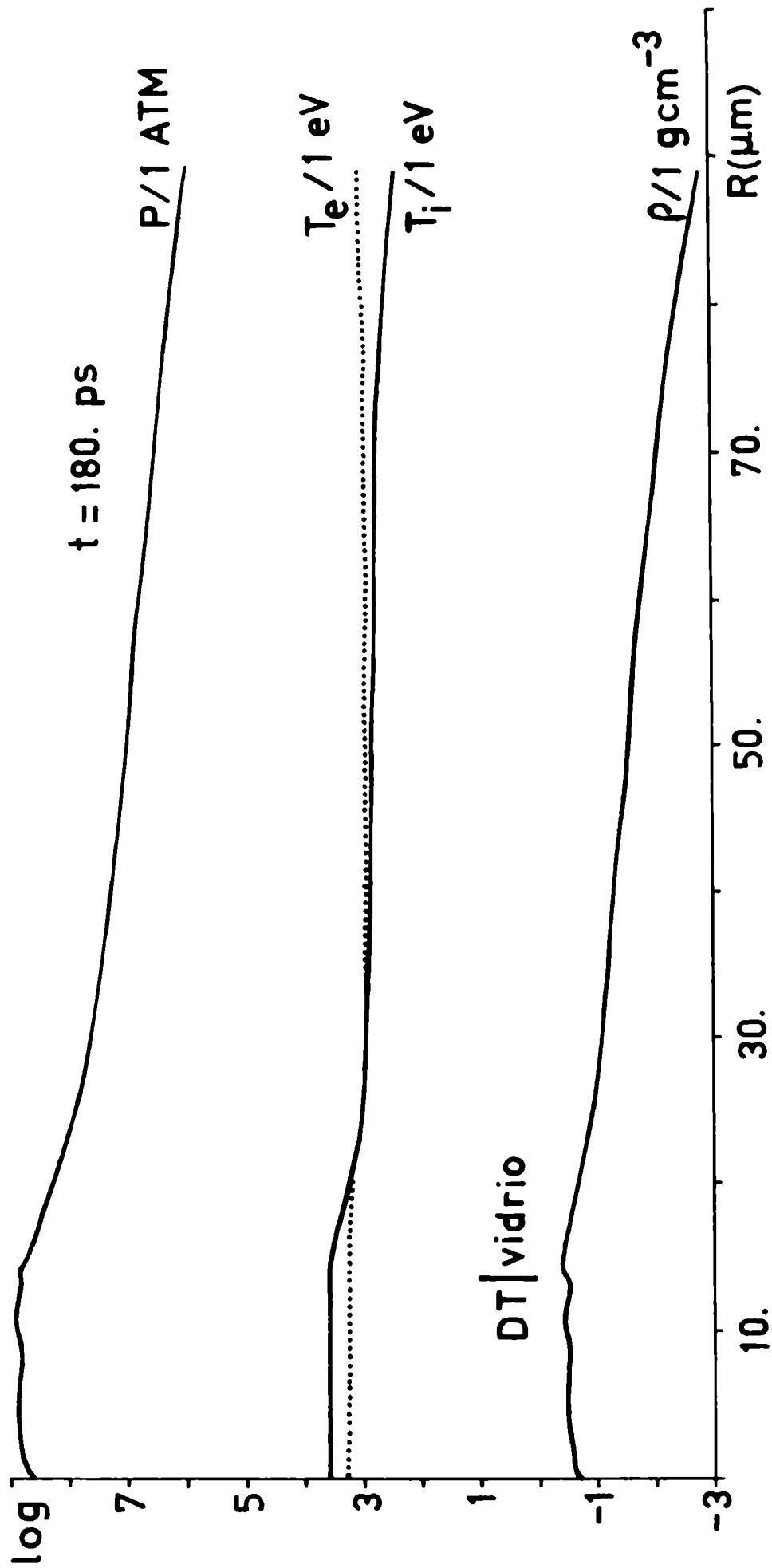


Fig. 5.11: idem Fig. 5.9 .

$15. \text{ g cm}^{-3}$, unos instantes después de los $153. \text{ ps}$. En la Fig. 5.11 el incremento de presión del D-T termina por frenar al vidrio implotado, alcanzándose de esta manera la situación de máxima compresión. La coordenada de posición de la superficie de separación vidrio-D-T se desplazó desde su posición inicial en $56.5 \mu\text{m}$ a $13.4 \mu\text{m}$ respecto del centro.

Obsérvese también que durante toda esta evolución el desacople en temperatura entre los electrones e iones de la corona tiende a desaparecer, mediante la disminución de la temperatura electrónica y el incremento de la iónica.

En conclusión podemos afirmar que el método utilizado para computar la deposición de energía por pasaje de electrones supratérmicos nos permite simular satisfactoriamente la implosión de blancos esféricos que operan en el modo explosivo.

Finalmente queremos mencionar que a modo de control de la integración numérica obtenida de nuestro modelo con el código DELFIN-1D, en los casos 1 a 5 de la tabla 5.1, la conservación de la energía fue satisfecha con un error porcentual inferior al .1%. Por otro lado cada uno de estos casos demandó un tiempo de CPU típico de 120 minutos en una computadora IBM 370/158, corriendo bajo CMS y con el programa compilado con el compilador FORTRAN H OPT (2) de IBM. Cabe destacar que la disminución de tiempo de CPU logrado al pasar del compilador "standard" FORTRAN G al compilador "inteligente" FORTRAN H de IBM, usado en la opción de optimización de tiempo de CPU, fue de solo un 10% (se tiene referencia de programas en los que se logró hasta un 50%). Este dato permite valorar el esfuerzo volcado en el desarrollo de un código optimizado de simulación numérica, tanto en el aspecto de los métodos numéricos como en el de la programación.

V.3 Simulación de implosiones ablativas

El siguiente paso experimental en implosiones esféricas orientado hacia la fusión nuclear controlada, ha consistido en tratar de incrementar significativamente el estado de compresión final del combustible. Este es un requisito indispensable para lograr un quemado eficiente del combustible termónuclear. Es decir para lograr el encendido de un frente termónuclear autosostenido que consuma el combustible desde el centro hacia afuera^[1-3].

Para alcanzar los niveles de alta compresión ($\rho \sim 200.$ a $2000.$ g cm^{-3} , 1000 a 10000 veces la densidad del D-T líquido normal) que se estiman necesarios, es imprescindible lograr una compresión lo más isoentrópica posible del combustible, para evitar que un incremento adicional y prematuro de la presión frene este proceso antes de alcanzar los niveles de compresión deseados. Al presente estos requisitos aun no han sido satisfechos experimentalmente. Uno de los resultados más promisorios que se mencionan haber alcanzado en este sentido, son los de compresiones en el orden de 100 veces la densidad del D-T líquido normal ($\sim 20.$ g cm^{-3}) en el Lawrence Livermore National Laboratory, con el sistema SHIVA de iluminación de 20 haces y pulsos de 20. kJ de energía^[5]. Sin embargo la mayor parte de los resultados obtenidos y publicados están en una compresión del orden de 10 a 20 veces la densidad del D-T líquido normal ($\sim 2.$ - $10.$ g cm^{-3}).

La obtención de altos valores de compresión en la densidad final de combustible requiere que el blanco irradiado opere en el modo ablativo. Esto significa que la energía debe depositarse sobre los estratos más externos del mismo, provocando una gradual ablación del material y como reacción a este proceso la compresión de los estratos interiores. Las primeras aproximaciones

fico de la presión (P) vs. densidad (ρ) para el D-T. De entrada se observa una compresión inicial mucho menos violenta debido al pasaje de la onda de cho-

a este modo de implosión se han logrado de dos formas distintas. En un caso se incrementa ligeramente el espesor del impulsor de vidrio de los blancos utilizados en las experiencias explosivas y a su vez se lo recubre de una capa gruesa de plástico ($\sim 5\text{-}10\mu\text{m}$, "ablador"). De esta manera se pretende proteger el vidrio del efecto de los electrones supratérmicos, pues se utilizan los mismos tipos de pulso que en las experiencias explosivas [5,132-134,137]. Pueden llegar a usarse también capas de materiales de alto Z (por ejemplo oro) para aumentar el efecto de protección frente a los electrones supratérmicos. En el otro caso solo se incrementa el espesor de vidrio, pero se utilizan pulsos láser más largos ($\text{FWHM} \sim 1\text{.nS}$), de manera de trabajar con intensidades en el rango de 10^{12} a 10^{14}Wcm^{-2} . En esta situación, para el láser de longitud de onda $\lambda_L = 1.06\mu\text{m}$ (Nd), la temperatura de fuente T_H de los electrones supratérmicos cae por debajo del KeV aproximadamente y en consecuencia disminuye también la penetración.

A modo de ejemplo hemos seleccionado para simular un experimento propuesto y realizado en la referencia 135, que pertenece al segundo tipo de los mencionados anteriormente. Se trata de un blanco tipo cáscara esférica de vidrio de $70\mu\text{m}$ de radio, $2.2\mu\text{m}$ de espesor, irradiado con un pulso láser de $1.06\mu\text{m}$ de longitud de onda, 100J de energía y 1.nS de duración (potencia promedio, $.1\text{TW}$, intensidad, $1.5 \times 10^{14}\text{Wcm}^{-2}$). Su interior está lleno de una mezcla gaseosa de D-T a baja presión. En la Fig. 5.2 se muestra el correspondiente gráfico de la presión (P) vs. densidad (ρ) para el D-T. De entrada se observa una compresión inicial mucho menos violenta debido al pasaje de la onda de choque, lo que redunda en un menor calentamiento inicial. En general todo el proceso de compresión resulta mucho más isoentrópico con respecto a las otras dos curvas del mismo gráfico. En la Fig. 5.12 se muestran los gráficos de la posición de algunos elementos de fluido en función del tiempo. El indicado con el

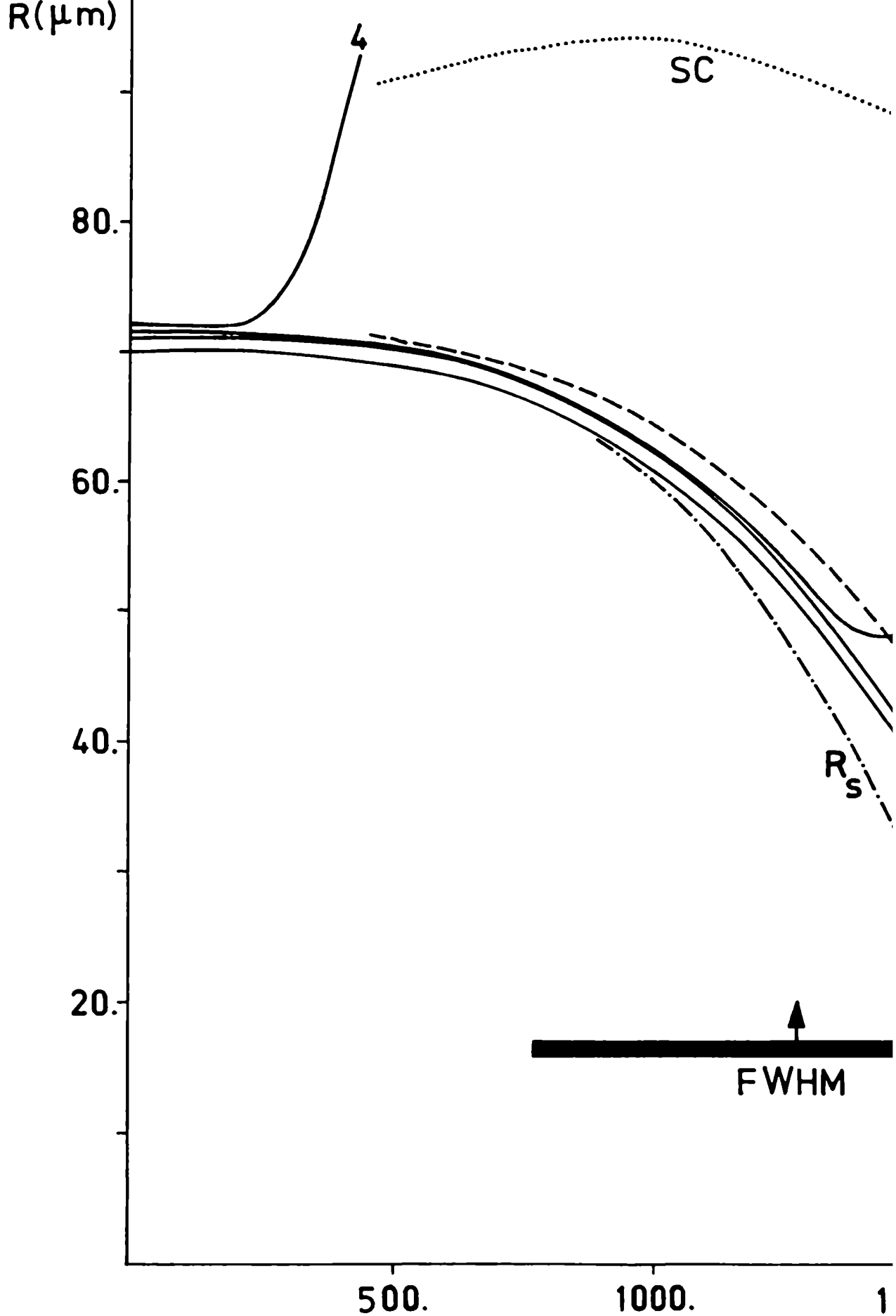
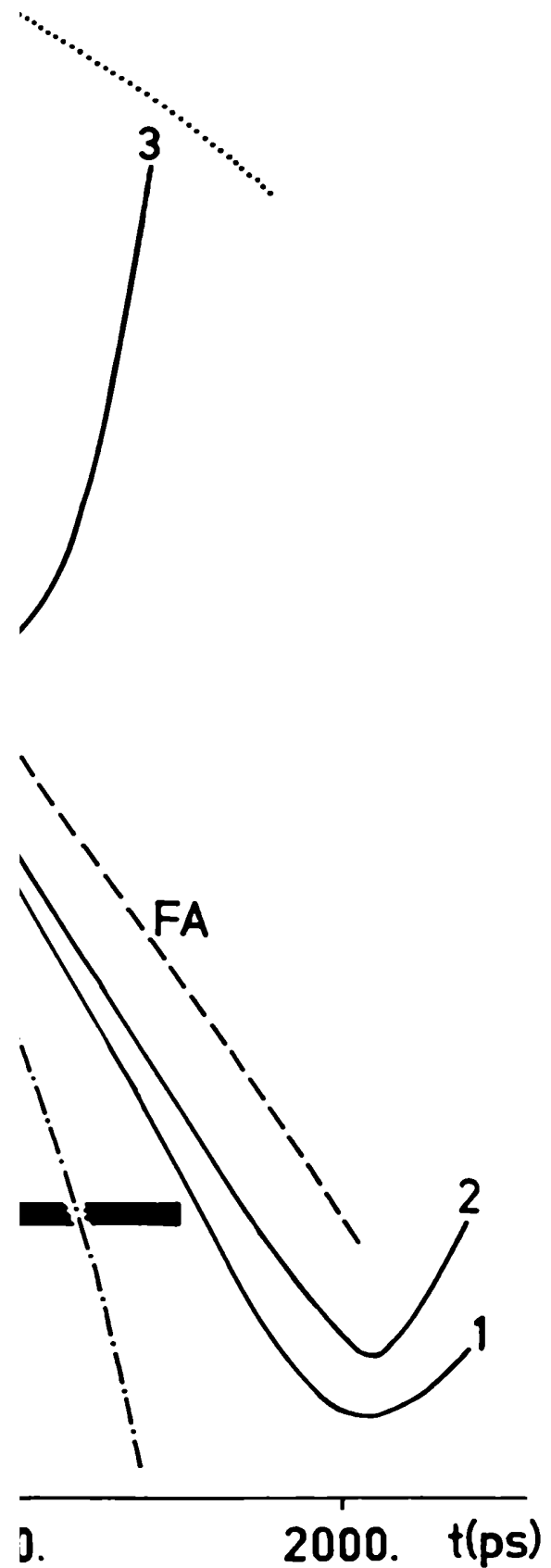


Fig. 5.12: gráficos de la posición de algunos elementos de fluido (1,2,3,4) , fr (SC) y onda de choque (R_s) en función del tiempo para el caso ablativo de potencia del pulso láser .



de ablación (FA), superficie crítica
También se indica la posición del pico

número 1 pertenece a la interfase vidrio-D-T. Entre el 4 y el 1 está contenida el 99% de la masa total de vidrio, entre el 4 y el 3 el 25% y entre el 4 y 2 el 50%. Como se ve este gráfico demuestra un comportamiento muy diferente con respecto al explosivo de la Fig. 5.3. A lo largo de toda la implosión el frente de ablación (**FA**) penetra gradualmente en el impulsor de vidrio que permanece relativamente frío (.1 -1. eV) mientras es implotado. El porcentaje de masa total ablada llega al 31%. En el combustible las temperaturas electrónica e iónica no se desacoplan y alcanzan un valor máximo de .45 KeV. La densidad llega hasta los 10. g cm⁻³, el producto densidad-radio ρR a 4.3×10^{-3} g cm⁻² y el número de neutrones es 1.6×10^6 . Los valores experimentales indican un calentamiento del D-T en el rango .1 -1. KeV, densidad máxima entre 6. y 8. g cm⁻³, $\rho R \sim 5. \times 10^{-3}$ g cm⁻² y número de neutrones $3. \times 10^6$. También hemos vuelto a simular el blanco ablativo de paredes gruesas recientemente propuesto por V.A.Pais^[136] obteniendo los mismos resultados (por ejemplo densidad máxima D-T $\sim 500.$ g cm⁻³) pero reduciendo el tiempo de CPU en un factor 4 (de 600 minutos a 150 minutos, en un sistema IBM 370/3032). Esta diferencia en el tiempo de cómputo se debe esencialmente a la técnica numérica implícita usada en nuestro código para las ecuaciones de las temperaturas T_e y T_i , en vez de la explícita utilizada en el código de V.A.Pais. En particular esta diferencia se hace más notable en la etapa final de la simulación, donde la degeneración cuántica del D-T (debido a su alta compresión) produce valores muy pequeños del tiempo de termalización electrón-ión. El esquema explícito somete el paso temporal a este tiempo. El implícito, en cambio, no. Por lo tanto puede avanzar con mayor rapidez, es decir utilizando menor cantidad de pasos temporales para unir los mismos instantes.

CAPITULO VI

CONCLUSIONES Y POSIBLES LINEAS DE INVESTIGACION FUTURAS

VI CONCLUSIONES Y POSIBLES LINEAS DE INVESTIGACION FUTURAS

Los resultados obtenidos en este trabajo de tesis constituyen una contribución a algunas áreas de la física de la fusión por confinamiento inercial y la astrofísica.

Nuestro modelo autoconsistente para calcular el estado de ionización y las poblaciones y energías de niveles ligados en plasmas densos y calientes, ha dado resultados satisfactorios al ser comparado con otros modelos más elaborados como el de B.F.Rosznay^[48], y ha puesto en evidencia los efectos de la estructura de capas electrónica al ser comparado con el modelo de Thomas-Fermi. Presentamos una interpretación y una deducción físicamente más razonables para el factor de despoblación (φ) que las brindadas por R.M.More^[62,80], el cual nos permite modelar adecuadamente el fenómeno de ionización por presión sin dejar parámetros librados a una determinación posterior. El algoritmo desarrollado y utilizado para la solución de este modelo ha dado muestras de su solvencia al encarar, sin inconvenientes, cálculos en situaciones de átomo casi neutro, superando de esta forma serios y conocidos problemas de convergencia numérica.

En el aspecto termodinámico resultan significativos los resultados obtenidos para el calor específico a volumen constante C_V , debido a la presencia de la estructura discreta de niveles. Los picos en los gráficos de C_V en función de la temperatura a densidad constante, figuras 2.15 y 2.16, son fiel reflejo de un abrupto aumento en los grados de libertad del sistema debido a la ionización. Este efecto se atenúa con el incremento de densidad. Sería muy interesante en el futuro, poder comparar estos resultados con cálculos de un modelo de campo autoconsistente para átomos inmersos en plasmas-densos^[49,50], pues,

en ausencia de datos experimentales, se cree que estos complejos modelos representan el mejor grado de aproximación a la realidad. Los resultados para la ecuación de estado pueden ser incluidos en el código DELFIN-1D, en forma tabulada (debido a razones de economía de tiempo de cómputo) asimilando de esta manera los efectos de ionización parcial en el código, que pueden tener consecuencias significativas en compresiones ablativas, en las cuales no se alcanza tanta temperatura en las etapas iniciales de la compresión (a diferencia de las explosivas) y por lo tanto la ionización total pasa a ser una hipótesis demasiado aproximada.

También han quedado las puertas abiertas para un mejor tratamiento de la radiación, sobretodo en lo que hace a la proveniente de las transiciones libre-ligado y ligado-ligado. Esta puede ser incluida, dentro de la aproximación hidrodinámica, a través de una tercera ecuación difusiva (similar a las de las temperaturas electrónica e iónica) para el gas de fotones. Para ello se requiere la determinación de la opacidad del medio o, equivalentemente, el libre camino medio fotónico. Una importante contribución a esta cantidad proviene de las transiciones libre-ligado y ligado-ligado. El tratamiento detallado de la radiación emitida, no solo tiene interés en cuanto a sus consecuencias en la evolución global del blanco, sino también en cuanto a la implementación de las técnicas de diagnóstico mediante espectroscopía de la radiación X de línea.

La hipótesis de equilibrio termodinámico local (LTE, asumida en todo este trabajo) no permite el estudio de algunos procesos fuera del equilibrio, que pueden tener especial importancia e interés en plasmas tenues (típicamente los de la corona), cuando estos son sometidos a cambios rápidos en algunos de sus parámetros (por ejemplo, el brusco incremento de la temperatura electrónica producto de la deposición de energía de un intenso pulso láser). Para

tratar el problema de la cinética de las distintas especies iónicas de un dado elemento disponemos de un algoritmo, desarrollado en otra oportunidad^[143], que es factible de ser acoplado al código DELFIN-1D. Con este agregado, el mismo podría ser utilizado para una simulación más detallada de los problemas de corona y, en general, para el estudio de la interacción láser-plasma.

El esfuerzo volcado en el desarrollo de un código de simulación numérica optimizado para la fusión por confinamiento inercial ha sido fructífero. El código DELFIN-1D ha dado pruebas de su realismo y rapidez a través de los resultados presentados en los capítulos IV y V. Tal cual está puede seguir siendo utilizado para estudiar la hidrodinámica y termodinámica de blancos irradiados con pulsos láser de alta potencia, que operan en el modo ablativo o explosivo, o bien con haces de partículas cargadas, haciendo las correspondientes modificaciones en las subrutinas que computan los mecanismos de absorción y deposición de la energía incidente^[141,142]. También es posible extender el código, mediante algunos cambios a su actual esquema de deposición por pasaje de electrones supratérmicos, para simular blancos con estructura de multicapas como los utilizados en los experimentos de las referencias 5, 132-134 y 137.

El buen acuerdo del número de neutrones calculados con respecto al valor experimental, es una característica valiosa para un código de simulación como el presentado aquí. Este resultado es, en buena medida, un fiel reflejo de toda la física implementada en el mismo. Consecuencia directa de las condiciones ambientales logradas en el combustible durante la producción de las reacciones de fusión, y resultado final de la absorción de la energía incidente y la posterior evolución termodinámica e hidrodinámica que ésta induce en el blanco. Podemos citar al respecto las diferencias obtenidas en los casos

1 y 3 presentados en el capítulo V, al realizar las simulaciones con electrones supratérmicos ($\bar{\sigma} = .85$) y sin ellos ($\bar{\sigma} = 1.$). Creemos que es útil expresar en forma cuantitativa el grado de acuerdo en el número de neutrones, obtenido por nuestro código, para los cinco casos explosivos simulados en el capítulo V. Con este fin proponemos la siguiente expresión para estimar el error relativo porcentual ϵ en la determinación del orden de magnitud del número de neutrones,

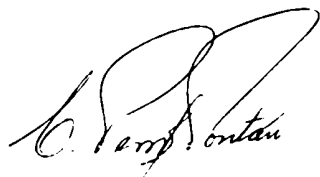
$$\epsilon = 100 \cdot \frac{1}{N^{\circ} \text{exp}} \cdot \sum_{\text{exp}} \frac{\left| \log_{10} \left(\frac{N_{\text{eu}}^{\text{SIM}}}{N_{\text{eu}}^{\text{EXP}}} \right) \right|}{\log_{10} (N_{\text{eu}}^{\text{EXP}})},$$

siendo $N_{\text{eu}}^{\text{SIM}}$ el número de neutrones de la simulación y el $N_{\text{eu}}^{\text{EXP}}$ el resultado experimental. Aplicando esta fórmula a los casos mencionados obtenemos $\epsilon = 5\%$ que es, evidentemente, un buen resultado.

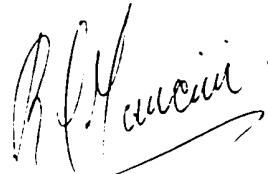
Resulta muy atractiva la idea de asimilar a nuestro código un tratamiento para la deposición no local (transporte) de la energía proveniente de los productos cargados de las reacciones de fusión. En particular para las partículas alfa, resultantes de la fusión de los núcleos de deuterio-tritio que, según se estima, será el combustible utilizado en la primera generación de reactores de fusión nuclear. Esto puede realizarse, aun dentro de la aproximación hidrodinámica, utilizando el esquema difusivo desarrollado por el grupo del Laboratorio de Frascati^[140]. Esta inclusión permitiría aplicar el código en estudios realistas de la ignición del deuterio-tritio, pues las partículas alfa son los agentes promotores de la propagación del frente de quemado termonuclear autosostenido.

Finalmente queremos señalar que buena parte de los resultados obtenidos durante la realización de este trabajo de tesis, han sido presentados en las reuniones científicas que se detallan en las referencias 144 a 146.

Resumiendo, podemos concluir que esta tesis aporta a nuestro medio una herramienta bastante segura para el estudio y ulteriores desarrollos de la fusión por confinamiento inercial, y abre diversas e interesantes líneas de investigación teóricas para el futuro. •



Dr. Constantino Ferro Fontán



Lic. Roberto Claudio Mancini

APENDICE

APENDICE

En este apéndice exponemos el algoritmo de resolución de sistemas tri-diagonales de ecuaciones, como el que se plantea en la expresión 3.75 del capítulo III, para calcular el avance temporal de las temperaturas electrónica e iónica.

Dado un sistema de ecuaciones del tipo,

$$-\alpha_i U_{i-1} + \beta_i U_i - \gamma_i U_{i+1} = \delta_i, \quad (a.1)$$

$$1 \leq i \leq N, \quad \alpha_1 = 0, \quad \gamma_N = 0,$$

con las condiciones

$$\alpha_i, \beta_i, \gamma_i > 0 \quad \text{y} \quad \beta_i > \alpha_i + \gamma_i \quad \forall i, \quad (a.2)$$

siendo $\{U_i, 1 \leq i \leq N\}$ las componentes del vector de incógnitas, $\{\alpha_i, \beta_i, \gamma_i, 1 \leq i \leq N\}$ las componentes de los tres vectores de coeficientes que definen la matriz del sistema y $\{\delta_i, 1 \leq i \leq N\}$ las componentes del vector de inhomogeneidades, decimos, que el sistema es tridiagonal pues si lo reescribimos en notación matricial

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & -\gamma_1 & & & & & \\ -\alpha_2 & \beta_2 & -\gamma_2 & & & & \\ & & & \textcircled{1} & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & -\alpha_{N-1} & \beta_{N-1} & -\gamma_{N-1} \\ & & & & -\alpha_N & \beta_N & \\ & & & & & & \textcircled{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{N-1} \\ U_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{N-1} \\ \delta_N \end{pmatrix},$$

la matriz asociada al sistema resulta tridiagonal. La condición a.2 significa que la matriz es dominante diagonal (matriz convergente), lo cual garantiza la estabilidad numérica del algoritmo que se desarrolla a continuación [88,117].

Sean U_i y U_{i+1} dos componentes consecutivas del vector de incógnitas \underline{U} , y ν , ω otros dos vectores tales que

$$U_i = \nu_i U_{i+1} + \omega_i \quad (\text{a.3})$$

Si utilizamos esta relación para U_{i-1} y U_i en una de las ecuaciones del sistema a.1 podemos poner,

$$-\alpha_i (\nu_{i-1} U_i + \omega_{i-1}) + \beta_i U_i - \gamma_i U_{i+1} = S_i \quad ,$$

de donde se puede deducir

$$U_i = \frac{\gamma_i}{(\beta_i - \alpha_i \nu_{i-1})} U_{i+1} + \frac{(S_i + \alpha_i \omega_{i-1})}{(\beta_i - \alpha_i \nu_{i-1})} \quad .$$

Comparando con a.3 podemos obtener las siguientes relaciones de recurrencia para determinar ν_i y ω_i

$$\nu_i = \frac{\gamma_i}{(\beta_i - \alpha_i \nu_{i-1})} \quad , \quad \omega_i = \frac{(S_i + \alpha_i \omega_{i-1})}{(\beta_i - \alpha_i \nu_{i-1})} \quad , \quad (\text{a.4})$$

que nos permiten calcular ν_i y ω_i de manera creciente en i .

Para calcular ν_1 y ω_1 podemos plantear la primera ecuación del sistema a.1 y despejar

$$U_1 = \frac{\gamma_1}{\beta_1} U_2 + \frac{S_1}{\beta_1} \quad ,$$

si comparamos con la relación a.3 planteada con $\dot{\lambda} = 1$, identificamos

$$v_1 = \frac{\delta_1}{\beta_1} \quad \text{y} \quad w_1 = \frac{\delta_1}{\beta_1} \quad (\text{a.5})$$

Las expresiones a.4, a.5 y el conjunto de componentes de los vectores $\underline{\alpha}$, $\underline{\beta}$, $\underline{\delta}$ y $\underline{\delta}$ nos permiten calcular todas las componentes de \underline{v} y \underline{w} de la siguiente forma

$$(v_1, w_1) \rightarrow (v_2, w_2) \rightarrow \dots \rightarrow (v_{N-1}, w_{N-1}) \rightarrow (v_N, w_N)$$

En particular cuando calculamos el par de componentes N-ésimas v_N y w_N se obtiene

$$v_N = 0 \quad \text{y} \quad w_N = \frac{(\delta_N + \alpha_N w_{N-1})}{(\beta_N - \alpha_N v_{N-1})}$$

pero si tenemos presente la relación a.3 evaluada en $\dot{\lambda} = N$, resulta que

$$U_N = w_N \quad ,$$

o sea que w_N coincide con el valor de la incógnita N-ésima U_N . Luego conocidos U_N y los vectores \underline{v} y \underline{w} se puede determinar el resto de las componentes de \underline{U} aplicando, en forma decreciente en $\dot{\lambda}$, la relación a.3 N-1 veces.

En conclusión la ejecución de este sencillo y eficiente algoritmo se puede resumir en los siguientes tres pasos:

1) calcular $\nu_1 = \frac{\gamma_1}{\beta_1}$ y $w_1 = \frac{\delta_1}{\beta_1}$,

2) calcular $\nu_i = \frac{\gamma_i}{(\beta_i - \alpha_i \nu_{i-1})}$ y $w_i = \frac{(\delta_i + \alpha_i w_{i-1})}{(\beta_i - \alpha_i \nu_{i-1})}$ con $i = 2, \dots, N$,

3) $U_N = w_N$ y calcular $U_i = \nu_i U_{i+1} + w_i$ con $i = N-1, \dots, 1$.

REFERENCIAS

.

REFERENCIAS

- [1] Laser Compression of Matter to Super High Densities: Thermonuclear (CTR) Applications, J.Nuckolls, L.Wood, A.Thiessen & G.Zimmerman, Nature, 239, 139 (1972).
- [2] Laser-Driven Fusion, K.A.Brueckner & S.Jorna, Rev.Modern Phys., 46 (2), 325 (1974).
- [3] Thermonuclear Burn Characteristic of Compressed Deuterium-Tritium microspheres, G.S.Fraley, E.J.Linnebur, R.J.Mason & R.L.Morse, The Physics of Fluids, 17(2), 474 (1974).
- [4] Outlook for Laser Fusion, J.H.Nuckolls, Lawrence Livermore Laboratory Report, UCRL-76395 (1975).
- [5] Laser Fusion Experiments, Facilities, and Diagnostics at Lawrence Livermore National Laboratory, H.G.Ahlstrom, Applied Optics, 20(11), 1902 (1981).
- [6] The Density and Compressibility of Solid Hydrogen and Deuterium at 4.2°K, H.D.Megaw, Phil.Mag., 28, 129 (1939).

- [7] Compression of Solidified Gases to 20,000 Kg/cm² at Low Temperature,
J. Stewart,
J. Phys. Chem. Solids, 1, 146 (1956).
- [8] Experimental Compressions for normal hydrogen and normal deuterium to
25 Kbar at 4.2°K,
M.S. Anderson & C.A. Swenson,
Phys. Rev., B10 (12), 5184 (1974).
- [9] Equation of State of Fluid n-D₂ from P-V-T and ultrasonic velocity
measurements to 20 Kbar,
R.L. Mills, D.H. Liebenberg & J.C. Bronson,
J. Chem. Phys., 68(6), 2663 (1978).
- [10] Equation of State of Fluid n-H₂ from P-V-T and sound velocity
measurements to 20 Kbar,
R.L. Mills, D.H. Liebenberg, J.C. Bronson & L.C. Schmidt,
J. Chem. Phys., 66(7), 3076 (1977).
- [11] Equation of State for Aluminium, Copper and Lead in the High Pressure
Region,
L.V. Al'tshuler, S.B. Kormer, A.A. Bakanova & R.F. Trumin,
JETP, 11(3), 573 (1960).
- [12] Dynamic Compression of Porous Metals and the Equation of State with
Variable Specific Heat at High Temperatures,
S.B. Kormer, A.I. Funtikov, V.D. Urlin & A.N. Kolesnikova,
JETP, 15(3), 477 (1962).

- [13] Use of Shock Waves in High-Pressure Physics,
L.V.Altshuler,
SOVIET PHYSICS USPEKHI, 8(1), 52 (1965).
- [14] Melting at Ultra High Pressures in a Shock Wave,
V.D. Urlin
JETP, 22(2), 341 (1966).
- [15] Shock-wave Compression of Liquid Deuterium to 0.9 Mbar,
M.Van Thiel, M.Ross, B.L.Hard, A.C.Mitchell, W.H.Gust, M.J.D'Addario
& R.N.Keeler,
Phys.Rev.Letters, 31(16) 979 (1973).
- [16] Shock Wave Measurements on Solid Hydrogen and Argon,
P.L.Lagus & T.J.Ahrens,
J.Chem.Phys., 59(7), 3517 (1973).
- [17] Studies of Laser-Driver Shock Waves in Aluminium,
L.R.Veeser & J.C.Solem,
Phys.Rev.Letters, 40(21), 1391 (1978).
- [18] Ultrahigh-Pressure Laser-Driven Shock -Wave Experiments in
Aluminium,
R.J.Trainor, J.W.Shaner, J.M.Auerbach & N.C.Holmes,
Phys.Rev.Letters, 42, 1154 (1979).
- [19] Impedance-match Experiments using Laser-Driven Shock Waves,
L.R.Veeser, J.C.Solem & A.J.Lieber,
Appl.Phys.Letters, 35(10), 761 (1979).

- [20] Shock-Wave Production and Plasma Motion in CO₂-Laser-Irradiated Targets,
P.D.Goldstone, R.F.Benjamin & R.B.Schultz,
Appl.Phys.Letters, 38(4), 223 (1981).
- [21] Generation of Shock Waves by Hot Electron Explosions Driven by a CO₂ Laser,
N.H.Burnett, G.Josin, B.Ahlborn & R.Evans,
Appl.Phys.Letters, 38(4), 226 (1981).
- [22] The Constitution of Jupiter and Saturn,
W.C. de Marcus,
The Astronomical Journal, 63, 2 (1958).
- [23] Equation of State of Solid Hydrogen,
V.P.Trubitsym,
SOVIET PHYSICS - Solid State, 7 (11), 2708 (1966).
- [24] Phase Diagrams of Hydrogen and Helium,
V.P.Trubitsym,
SOVIET ASTRONOMY, 15(2), 303 (1971).
- [25] Equation of State and Phase Diagram of Dense Hydrogen,
G.I.Kerley,
Phys.Earth Planet. Interiors, 6, 78 (1972).
- [26] A Thoretical Analysis of the Shock Compression Experiments of the Liquid Hydrogen Isotopes and a Prediction of their Metallic Transition,
M.Ross,
J.Chem.Phys., 60(9), 3634 (1974).

- [27] Comparison of Theoretical Models for Metallic Hydrogen,
M.Ross & A.K.McMahan,
Phys.Rev., B13(12), 5154 (1976).
- [28] Equation of State of the Molecular Phase of Hydrogen in the Solid
and Liquid States at High Pressure,
F.V.Grigor'ev, S.B.Kormer, O.L.Mikhculova, A.P.Tolochko & V.D.Urlin,
JETP, 42(2), 378 (1975).
- [29] Equation of State of the Metallic Phase of Hydrogen,
Yu Kagan, V.V.Pushkarev & A.Kholas,
JETP, 46(3), 511 (1977).
- [30] Equation of State of Molecular Hydrogen.
Phase Transition into the Metallic State,
F.V.Grigor'ev, S.B.Kormer, O.L.Mikhailova, A.P.Tolochko & V.D.Urlin,
JETP, 48(5), 847 (1978).
- [31] Theory of Dense Hydrogen,
S.Chakravarty, J.H.Rose, D.Wood & N.W.Ashcroft,
Phys.Rev., B24(4), 1624 (1981).
- [32] Isentropic Compression of Fused Quartz and Liquid Hydrogen to Several
MBAR,
R.S.Hawke, D.E.Duerre, J.G.Huebel, R.N.Keeler & H.Klapper,
Phys.Earth Planet. Interiors, 6, 44 (1972).
- [33] Observation of Electrical Conductivity of Isentropically Compressed
Hydrogen at Megabar Pressures,
R.S.Hawke, T.J.Burgess, D.E.Duerre, J.G.Huebel, R.N.Keeler, H.Klapper
& W.C.Wallace
Phys. Rev.Letters, 41(14), 994 (1978).

- [34] Interpolation Equation of State of Metals for the Region of Ultrahigh Pressures,
S.B.Korner & V.D.Urlin,
SOVIET PHYSICS DOKLADY, 5(2), 217 (1960).
- [35] Statistische Behandlung des Atoms,
P.Gombás,
Handbuch der Physik, XXXVI (1956),
- [36] Equations of State of Elements Based on the Generalized Fermi-Thomas Theory,
R.P.Feynman, N.Metropolis & E.Teller,
Phys.Rev., 75(10), 1561 (1949).
- [37] Thermodynamic Functions on the Generalized Fermi-Thomas Theory,
M.K.Brachman,
Phys.Rev. 84, 1263 (1951).
- [38] Temperature Behaviour of the Thomas-Fermi Statistical Model for Atoms,
R.Latter,
Phys.Rev., 99(6), 1854 (1955).
- [39] Extension of the Thomas-Fermi-Dirac Statistical Theory of the Atom to Finite Temperatures,
R.D.Cowan & J.Ashkin,
Phys.Rev., 105(1), 144 (1957).
- [40] The Thomas-Fermi Approximation in Quantum Mechanics,
N.H.March,
Advances in Physics, 6(21), 1 (1957).

- [41] Statistical Atom Theory and the Equation of State of Solids,
J.F.Barnes,
Phys.Rev., 153(1), 269, (1967).
- [42] Zustand der Materie unter sehr hohen Drücken und Temperaturen,
W.Geiger, H.Hornberg & K.H.Schramm,
Springer Tracts in Modern Physics, 46, (1968).
- [43] Thomas-Fermi Theory Revisited,
E.H.Lieb & B.Simon,
Phys.Rev.Letters, 31(11), 681 (1973).
- [44] Statistical Model of Matter,
D.A.Dirzhniz, Yu.E.Loikov & G.V.Shpatkovskaya,
SOVIET PHYSICS USPEKHI, 18(9), 649 (1976).
- [45] Quantum-Statistical Model for High-Density Matter,
R.M.More,
Phys.Rev., A19(3), 1234 (1979).
- [46] Problems in Estimating Average Degree of Ionization for High-
Temperature Dense Plasmas,
I.J.Feng, W.Zakowicz & R.H.Pratt
Phys.Rev., A23 (2), 883 (1981).
- [47] Shell Structure and the Thomas-Fermi Equation of State,
J.W.Zink,
Phys.Rev., 176(1), 279 (1968).
- [48] Relativistic Hartree-Fock-Slater Calculations for Arbitrary Temperature
and Matter Density,
B.F.Rozsnyai,
Phys.Rev.A5 (3), 1137 (1972).

- [49] Self-Consistent Field Model for Condensed Matter,
D.A.Liberman,
Phys.Rev., B20(12), 4981 (1979).
- [50] INFERNO: A better Model of Atoms in Dense Plasmas,
D.A.Liberman,
J.Quant.Spectrosc.Radiat.Transfer, 27(3), 335 (1982).
- [51] Equation of State of Dense, Partially Degenerate, Reacting Plasma,
F.J.Rogers,
Phys.Rev., A24 (3), 1531 (1981).
- [52] Comparison of Two Equation-of-State Models for Partially Ionized
Aluminium: Zel'dovich and Reizer's Model versus the Activity Expansion
Code,
R.J.Harrach & F.J.Rogers,
J.Appl.Phys., 52(9), 5592 (1981).
- [53] Recent Developments in the Sesame Equation-of-State Library,
B.I.Bennett, J.D.Johnson, G.I.Kerley & G.T.Rood,
Los Alamos Scientific Laboratory, LA-7130, (1978).
- [54] Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena,
Ya.B.Zel'dovich & Yu.P.Raizer,
Academic Press (1966).
- [55] Interpolation Formulas for the Cold Pressing of Materials,
N.N.Kalitkin & I.A.Govorukhina,
Soviet Physics Solid State, 7(2), 287 (1965).
- [56] Shock Compression of Solids,
L.Davison & R.A.Graham,
Physics Reports, 55 (4), October 1979.

- [57] Introduction to Chemical Physics,
J.C.Slater
McGraw-Hill, Cap. XIII y XIV (1939).
- [58] Note on Grieneisen's Constant for the Incompressible Metals,
J.C.Slater,
Phys.Rev., 57, 744 (1940).
- [59] On the Thermodynamic Description of Mie-Gruneisen Materials with
Debye Specific Heats,
R.O.Davis,
Physics of the Earth and Planetary Interiors, 9, 78 (1974).
- [60] Gruneisen's Law and the Fusion Curve at High Pressure,
J.J.Gilvarry,
Phys.Rev., 102(2), 317 (1956).
- [61] An Overview of the Problems Connected with Theoretical Calculations
for Hot Plasmas,
B.F.Rozsnyai,
J.Quant.Spectrosc.Radiat.Transfer, 27(3), 211.(1982).
- [62] Atomic Physics in Inertial Confinement Fusion,
R.M.More,
Preprint UCRL-84991, Part I and II,
Lawrence Livermore Laboratory, (1981).
- [63] Analytical Expansions for Fermi-Dirac Functions,
A.Bañuelos, R.A.Depine & R.C.Mancini,
J.Math.Physics, 22(3), 452 (1981).

- [64] A Program for Calculating the Fermi-Dirac Functions,
A. Bañuelos, R.A. Depine & R.C. Mancini,
Comp. Physics Comm. 21, 293, (1981).
- [65] C. Ferro Fontán, comunicación privada. Ver también el Apéndice
de la nota interna: Radiación de Bremsstrahlung en un Plasma
de Electrones Cuánticamente Degenerado,
C. Ferro Fontán & A. Sicardi Schifino,
LFP-DIGID, T-i:14/78
- [66] Nuclear-Motion Corrections to the Thomas-Fermi Equation of
State for High-Density Matter,
R.M. More & S. Skupky,
Phys. Rev. A, 14(1), 474, (1976).
- [67] Electron Density Theory of Atoms and Molecules,
N.H. March,
The Journal of Physical Chemistry, 86 (12), 2262, (1982)
- [68] COMPLEX: A Least Squares Method for Fitting Quadratically
Interpolated Tables to a Two-Dimensional Data Array,
R.H. White,
Lawrence Radiation Laboratory, UCRL-7687, (1964).
- [69] Rational Function Method of Interpolation,
G.I. Kerley,
Los Alamos Scientific Laboratory, LA-6903-MS, (1977).
- [70] Gradients Corrections to the Statistical Electronic Free Energy
at Nonzero Temperatures: Application to Equation of State
Calculations,
F. Perrot,
Phys. Rev. A, 20(2), 586, (1979).

- [71] Stellar Absorption Coefficients and Opacities,
A.N.Cox
in Stars and Stellar Systems, Vol. VIII,
Ed. L.H.Aller & D.B. Mc Laughlin,
The University of Chicago Press, (1965).
- [72] A Critique of the Hydrogenic Approximation in the
Calculation of Stellar Opacity,
T.R.Carson & H.M.Hollingsworth,
Mon.Not.Roy.Astr.Soc., 141, 77, (1968).
- [73] Group Mean Emissivities and Opacities of High Temperatures SiO_2
M.F.Argo & W.F.Huebner,
J.Quant.Spectrosc.Radiat.Transf., 16, 1091, (1976).
- [74] Electron-Electron Interaction in Energy Level Determination,
W.F.Huebner,
J.Quant.Spectrosc.Radiat.Transf., 10, 949, (1970).
- [75] Electron-Electron Interaction from Single-Electron Theory,
W.F.Huebner,
Los Alamos Scientific Lab. Report, LA-3899, (1968).
- [76] Atomic Structure Calculations, I.Hartree-Fock Energy Results
for the Elements Hydrogen to Lawrencium,
J.B.Mann
Los Alamos Scientific Lab. Report LA-3690, (1967).
- [77] Average-Energy-of-Configuration. Hartree-Fock Results for the
Atoms Helium to Radon,
C.Froese Fischer,
Atomic Data, 4, 301, (1972)
Ver también la errata, Atomic Data & Nuclear Tables, 12, 87, (1973).

- [76] Hartree-Fock Results, Two Open Shells & Fr to No,
J.B. Mann
Atomic Data & Nuclear Tables, 12, 2, (1973).
- [77] Ordering of Ionization Potentials in Plasmas,
J.C. Stewart & K.D. Pyatt Jr.,
Ap. J., 144, 1203, (1966).
- [80] Pressure Ionization in Laser-Fusion Target Simulation,
G.B. Zimmerman & R.M. More,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., 23, 517, (1980)
- [81] The Statistical Mechanics of the Interdependent Electrons
in the Screening Constant Model of the Many-Electron-Atom,
J.M. Green,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., 4, 639, (1964).
- [82] Quasi-Static Electron Density Fluctuations of Atoms
in Hot Compressed Matter,
F. Grimaldi & A. Grimaldi-Lecourt,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., 27, 373, (1982).
- [83] Electronic Energy-Levels in Dense Plasmas,
R.M. More,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., 27, (3), 345, (1982).
- [84] Quantum Theory of Atomic Structure,
J.C. Slater,
Cap. 17, Vol. II, Mc Graw-Hill Book Company, (1960).

- [85] Über die Partiellen Differenzgleichungen der
Mathematischen Physik,
R.Courant, K.Friedrichs & H.Lewy,
Math. Ann., 100, 32, (1928), según se cita en:
Numerical Simulation of the High Density Approach
to Laser-Fusion,
G.B.Zimmerman,
Lawrence Livermore Laboratory Report, URL-74811 (1973).
- [86] A 1-Dimensional Numerical Code for Laser-Driven Implosion
and Ignition,
S.Atzeni, A.Caruso, P.Giupponi & V.A.Pais,
CNEA Report 80.40, (1980), Centro di Frascati, Rome, Italy.
- [87] A Method for the Numerical Calculations of Hydrodynamical Shocks,
J. von Neumann & R.D. Richtmyer,
J.Appl.Phys., 21, 232, (1950).
- [88] Difference Methods for Initial-Value Problems, 2nd Ed.,
Cap. 12, R.D. Richtmyer & K.W.Morton,
Interscience Tracts in Pure and Applied Mathematics,
Number 4, Editors: L.Bers, R.Courant & J.J.Stoker,
Interscience Publishers, (1967).
- [89] MEDUSA, A One-Dimensional Laser Fusion Code,
J.P.Christiansen, D.E.T.F. Ashby & K.V.Roberts,
Culham Laboratory Report, CLM-R-130 y CLM-P374, (1973).
- [90] A New Form of Artificial Viscosity,
J.W.White,
J.Comp.Phys., 11, 573, (1973).

- [91] A New Form of Artificial Viscosity: Postscript,
J.W.White,
J.Comp. Phys., 12, 553, (1973).
- [92] DUE, A Derivative-Free Algorithm for Nonlinear Least Squares,
M.L.Ralston & R.I.Jennrich,
Technometrics, 20(1), 7, (1978).
- [93] Thermal Conduction in Laser Fusion,
H.Brysk, P.M.Campbell & P.Hammerling,
Plasma Physics, 17, 473, (1975).
- [94] Indications of Strongly Flux-Limited Electron Thermal
Conduction in Laser-Target Experiments,
R.C.Malone, R.L.Mc Crory & R.L.Morse,
Phys.Rev. Letters, 34(12), 721, (1975).
- [95] A Model for Laser Driven Ablative Implosions,
C.E.Max, C.F.McKee & W.C.Mead,
Phys.Fluids, 23(8), 1620, (1980).
- [96] Self-Consistent Reduction of the Spitzer-Härm Electron
Thermal Heat Flux in Steep Temperature Gradients in
Laser-Produced Plasmas,
D.Shwartz, J.Delettrz, R.L.Mc Crory & C.P.Verdon,
Phys.Rev.Letters, 47(4), 247, (1981).
- [97] Electron Energy Transport in Steep Temperature Gradients
in Laser-Produced Plasmas,
A.R.Bell, R.G.Evans & D.J.Nicholas,
Phys.Rev.Letters, 46(4), 243, (1981).

- [98] Radiación de Bremsstrahlung en un Plasma de Electrones
Cuánticamente Degenerado,
C.Ferro Fontán & A.Sicardi Schifino,
LFP-DIGID, T-i:14/78, (1978).
- [99] Fast-Ion Generation by Ion-Acoustic Turbulence in Spherical
Laser Plasmas,
P.M.Campbell, R.R.Johnson, F.J.Mayer,
L.V.Powers & D.C.Slater,
Phys.Rev.Letters, 39(5), 274, (1977).
- [100] Theory of Electron Penetration,
L.V.Spencer,
Phys.Rev., 98(6), 1597, (1955).
- [101] Theory of Hot-Electron Spectra at High Laser Intensity,
D.W.Forslund, J.M.Kindel & K.Lee,
Phys.Rev.Letters, 39(5), 284, (1977).
- [102] Properties of Resonantly Heated Electron Distributions,
K.Estabrook & W.L.Kruer,
Phys.Rev.Letters, 40(1), 42, (1978).
- [103] Fast-Electron Production in Laser-Heated Plasmas,
K.A.Brueckner,
Nuclear Fusion, 17(6), 1257, (1977).
- [104] Ion Emission from Laser-Produced Plasmas with
Two Electron Temperatures,
L.M.Wickens, J.E.Allen & P.T.Rumsky,
Phys.Rev.Letters, 41(4), 243, (1978).

- [105] The electron density structure of the plasma produced on glass microballoms by 10.6 μm radiation,
R.Fedosejevs, M.D.J.Burgess, G.D.Enright & M.C.Richardson,
Phys.Fluids, 24(3),537, (1981).
- [106] Propagation of the Superthermal Corona from CO₂-Laser-Irradiated Microtargets,
R.S.Marjoribanks, M.D.J.Burgess, G.D.Enright & M.C.Richardson,
Phys.Rev. Letters, 45(22), 1798, (1980).
- [107] Simple Model of Energy Deposition by Suprathermal Electrons in Laser-Irradiated Targets,
R.J.Harrach & R.E.Kidder,
Phys.Rev., 23(2), 887, (1981).
- [108] Anomalous Effects on Hot-Electron Transport and Ablation Structure,
T.Yabe, K.Mima, K.Yoshikawa, H.Takabe & M.Hamano,
Nuclear Fusion, 21(7), 803, (1981).
- [109] Conversion of Laser Radiation into Fast Electrons in the LTF Problem,
P.P.Volosevich & V.B.Rozanov,
JETP Letters, 33(1), 18, (1981).
- [110] Experimental Study of wavelength dependences of laser-plasma coupling, transport, and ablation processes,
H.Nishimura, H.Azechi, K.Yamada, A.Tamura, Y.Inada, F.Matsuoka, M.Hamada, Y.Suzuki,S.Nakai, & C.Yamanaka,
Phys.Rev.A, 23(4), 2011, (1981).

- [111] Preheat Measurements in UV-Laser Target Interaction,
B.Yaakobi, J.Delettrez, L.M.Goldman, R.L.Mc Crory,
W.Seka & J.M.Soures.
Laboratory for Laser Energetics Preprint, (1981).
- [112] Nuclear Reactor Theory
G.I.Bell & S.Glasstone,
Cap. 1 y 5, Van Nostrand Reinhold Company, (1970).
- [113] An Empirical Formula for the (D,T) Reaction Rate Parameter
B.Brunelli,
Il Nuovo Cimento , 55B(2), 264 (1980)
- [114] Fusion Cross Sections and Thermonuclear Reaction Rates,
A.Peres,
J.Appl.Phys., 50(9), 5569 (1979)
- [115] Plasmas and Controlled Fusion,
D.J.Rose & M.Clarck, Jr.,
Cap.4, The M.I.T. Press (1961)
- [116] Numerical Solution of Partial Differential Equations,
G. D.Smith,
Oxford University Press, (1965)
- [117] Computational Methods in Partial Differential Equations,
A.R.Mitchell,
John Wiley & Sons (1969).
- [118] ATHENE 1: A One-Dimensional Equilibrium-Diffusion Code,
Christiansen & K.V.Roberts,
Comp.Phys.Comm., 14, 423 (1978).

- [119] ICARUS, A One Dimensional Plasma Diffusion Code,
M.L.Watkins, M.H.Hughes, K.V.Roberts, P.M.Keeping & J.Killen,
Methods in Computational Physics, Vol, 16, Ac.Press (1976)
- [120] Numerical Treatment of Rapid Equipartition Rates,
J.P.Christiansen & K.V.Roberts,
J.Comp.Phys., 17, 332 (1975)
- [121] Shock-Wave Compressions of Twenty-Seven Metals.
Equation of State of Metals.
J.M.Walsh, M.H.Rice, R.G.McQueen & F.L.Yarger,
Phys.Rev., 108(2), 196 (1957)
- [122] Laser Division, Report No. LD/78/04,
Rutherford Laboratory, RL-78-039, (1978)
- [123] Laser Fusion Experiments at 4TW,
E.K.Storm, H.G.Ahlstrom, M.J.Boyle, D.E.Campbell, L.W.Coleman,
S.S.Glaros, H.N.Kornblum, R.A.Lerche, D.R.MacQuigg, D.W.Phillion,
F.Rainer, R.Rienecker, V.C.Rupert, V.W.Slivinsky, D.R.Speck,
C.D.Swift & K.G.Tirsell,
Phys.Rev.Letter , 40(24), 1570 (1978).
- [124] Exploding Pusher Perfomance -A Theoretical Model,
M.D.Rosen & J.H.Nuckolls,
Phys.Fluids, 22(7), 1393 (1979)
- [125] Explosive-Pusher-Type Laser Compression Experiments with Neon-filled
Microballoons,
B.Yaakobi, D.Steel, E.Thorsos, A.Haner, B.Perry, S.Skupsky, K.Geiger,
C.M.Lee, S.Letzring, J.Rizzo, T.Muckaiyama, E.Lazarus, G.Halpern,
H.Deckman, J.Delettrez, J.Soures & R.McCrory,
Phys.Rev., A19(3), 1247 (1979).

- [126] Symmetrically Illuminated Laser Fusion Implosion Experiments at the Laboratory for Laser Energetics,
T.C.Bristow, R.S.Craxton, J.Delettrez, A.Entenberg, J.Forsyth, W.Friedman, L.Goldman, F.Kalk, S.Letzring, M.Lubin, R.L.McCrory, J.Rizzo, W.Seka, S.Skupsky, J.M.Soures, E.Thorsos, C.P.Verdon, B.Yaakobi, H.Deckman, C.Halpern & D.Peiffer,
8th International Conference on Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research, Brussels, 1-10 July 1980.
- [127] A Review of High Density, Laser Driven, Implosion Experiments at the Laboratory for Laser Energetics,
J.M.Soures, T.C.Bristow, H.Deckman, J.Delettrez, A.Entenber, W.Friedman, J.Forsyth, Y.Gazit, G.Halpern, F.Kalk, L.Letzring, R.McCrory, D.Peiffer, J.Rizzo, W.Seka, S.Skupsky, E.Thorsos, B.Yaakobi & T.Yamanaka,
LLE Report N°98 (1980)
- [128] Exploding Pusher Experiments on OMEGA,
LLE Review Quarterly Report, July-Sept. 1981,
Ed. E.Williams, (1981)
- [129] A Theoretical Interpretation of Exploding Pusher Laser Fusion Experiments,
E.B.Goldman, J.A.Delettrez & E.J.Thorzos,
Nuclear Fusion, 19(5) 555 (1979).
- [130] A Study of Exploding-Pusher Laser-Induced Implosions Using X-Ray Back lighting,
J.Launspach, C.Bayer, D.Billon, J.L.Rocchiccioli & M.Decroisette,
Nuclear Fusion, 21 (1), 100 (1981).

- [131] Scaling Laws for Laser Driven Exploding Pusher Targets,
 B.Ahlborn & M.H.Key
 Plasma Physics, 23(5), 435 (1981).
- [132] Symmetric Laser Compression of Argon-Filled Glass Shells to
 Densities of 4-6 g cm⁻³,
 B.Yaakobi, S.Skuspy, R.L.McCrory, C.F.Hooper, H.Deckman, P.Bourke,
 & J.M.Soures,
 Phys.Rev.Letters, 44(16) 1072 (1980).
- [133] Study of Ablatively Imploded Spherical Shells,
 M.H.Key, P.T.Rumsky, R.G.Evans, C.L.S.Lewis, J.M.Ward & R.L.Cooke,
 Phys.Rev.Letters, 45(22) 1801 (1980).
- [134] Compression of Polymer-Coated Laser-Fusion Targets to Ten Times
 Liquid DT Density,
 J.M.Auerbach, W.C.Mead, E.M.Campbell, C.L.Matthews, D.S.Bailey,
 C.W.Hatcher, L.N.Koppel, S.M.Lane, P.H.Y.Lee, K.R.Manes, G.McClellan,
 D.W.Phillion, R.H.Price, V C Rupert, V.W.Slivinsky & C.D.Swift,
 Phys.Rev. Letters, 44(25) 1672 (1980).
- [135] Compression of shell targets heated by nanosecond pulses,
 N.G.Basov, P.P.Volosevich, E.G.Gamalli, S.Yu.Gusk'ov, A.A.Erokin,
 Yu.A.Zakharenkov, N.N.Zorev, A.A.Kologrivov, V.B.Rozanov, A.A.Rupasov,
 A.A.Samarskii, G.V.Sklizkov & A.S.Shikanov,
 Sov.Phys. JETP, 51(1), 212 (1980).
- [136] Tesis Doctoral,
 V.A.Pais,
 Dpto. de Física FCEN,UBA, (1982).

- [137] X-Ray Absorption Lines: Signature for Preheat level in Non-Explosive Laser Implosions,
B.Yaakobi, R.L.McCrory, S.Skupsky, J.A.Delettrez, P.Bourke, H.Deckman,
C.F.Hooper & J.M.Soures,
Optics Communications, 34 (2), 213 (1980).
- [138] X-Ray Spectroscopy of Laser Imploded Targets,
B.Yaakobi, S.Skupsky, R.L.McCrory, C.F.Hooper, H.Deckman, P.Bourke
& J.M.Soures,
Phil.Trans.R.Soc.Lond., A300,623 (1981).
- [139] X-Ray Line Intensities as Signatures of Target Compression in Laser Irradiation-Symmetry Studies,
B.Yaakobi, T.Bristow, S.Litzring & J.Soures,
LLE Report N°130, (1982).
- [140] A Diffusive Model for α -Particle Energy Transport in a Laser Plasma,
S.Atzeni & A.Caruso,
CNEN Report 80.54 (1980), Centro di Frascati, Rome, Italy.
- [141] Intense Pulsed Ion Beams for Fusion Applications,
S.Humphries, Jr.,
Nuclear Fusion, 20(12), 1549 (1980).
- [142] Proton Beam-Target Interaction at Pellet Fusion Power Densities,
Phys.Fluids, 24(8), 1537 (1981).
- [143] Comments on a Time-Dependent Ionization Algorithm,
R.C.Mancini, C.Ferro Fontán,
Comp.Phys.Comm., 21, 293 (1981).

- [144] A Programm for Inertial Confinement Fusion Simulation,
C.Ferro Fontán & R.Mancini,
First Latin-American Workshop on Plasma Physics and Controlled
Nuclear Fusion Research, Cambuquira, Brazil (1982). Revista
Brasileira de Física, Volumen Especial II, 444 (1982).
- [145] Ionización y Ecuación de Estado en el Régimen de Alta Temperatura y
Presión,
R.C.Mancini & C.Ferro Fontán,
Comunicación Oral P₄₃, Reunión Nacional de Física 1982,
La Plata, Argentina (Diciembre 1982).
- [146] Implosión de Blancos Esféricos Irradiados con Pulsos Láser en el
Modo Explosivo,
R.Mancini & C.Ferro Fontán,
Comunicación Oral P₄₅, Reunión Nacional de Física, 1982,
La Plata, Argentina (Diciembre 1982).