J.E.N.398
Sp ISSN 0081-3397

ES 7700172

Forma de la línea H_α en procesos no resonantes de intercambio de carga en plasmas de hidrogeno.

por

A.M. Susino Bueno
B. Zurro Hernandez

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

MADRID 1977

J.E.N.398
Sp ISSN 0081-3397

Forma de la línea H_α en procesos no resonantes de intercambio de carga en plasmas de hidrogeno.

por

A.M. Susino Bueno
B. Zurro Hernandez

JUNTA DE ENERGIA NUCLEAR

MADRID, 1977

CLASIFICACION INIS Y DESCRIPTORES

A14
CHARGE-EXCHANGE INTERACTIONS
HYDROGEN
PLASMA
PLASMA DIAGNOSTIC
ION TEMPERATURE
ION COLLISION

Toda correspondencia en relación con este trabajo debe dirigirse al Servicio de Documentación Biblioteca y Publicaciones, Junta de Energía Nuclear, Ciudad Universitaria, Madrid-3, ESPAÑA.

Las solicitudes de ejemplares deben dirigirse a este mismo Servicio.

Los descriptores se han seleccionado del Thesauro del INIS para describir las materias que contiene este informe con vistas a su recuperación. Para más detalles consúltese el informe IAEA-INIS-12 (INIS: Manual de Indización) y IAEA-INIS-13 (INIS: Thesauro) publicado por el Organismo Internacional de Energía Atómica.

Se autoriza la reproducción de los resúmenes analíticos que aparecen en esta publicación.

Este trabajo se ha recibido para su impresión en Octubre de 1977.

Depósito legal nº M-41900-1977 I.S.B.N. 84-500-2394-7

INDICE

Pag.

INTRODUCCION.

CAPITULO I: FUNDAMENTOS TEORICOS.

1.1. CLASIFICACION DE LAS COLISIONES ATOMICAS CON EMISION DE RADIACION. 1

1.2. REACCIONES SIMPLES DE INTERCAMBIO DE CARGA. TIPOS. 2

1.3. SECCIONES EFICACES DE INTERCAMBIO DE CARGA. EXPRESIONES TEORICAS. 4

1.4. EL ESPECTRO OPTICO DEL ATOMO DE HIDROGENO. 8

1.5. INTERES DE LOS PROCESOS DE INTERCAMBIO DE - CARGA CON EMISION DE RADIACION EN LA DIAGNOSIS DE PLASMAS. 12

CAPITULO II: SECCIONES EFICACES DE EMISION H_α EN PROCESOS DE INTERCAMBIO DE CARGA.

2.1. CONSIDERACIONES GENERALES. 15

2.2. SECCIONES EFICACES TENIENDO COMO BLANCO HIDROGENO ATOMICO. 16

2.3. SECCIONES EFICACES TENIENDO COMO BLANCO HI

DROGENO MOLECULAR. 21

CAPITULO III: FORMA DE LA LINEA.

3.1. CALCULO DE LA FUNCION FORMA DE LA LINEA. 26

3.2. RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSION. 33

CONCLUSIONES. 50

BIBLIOGRAFIA. 52

APENDICE 54

INDICE DE FIGURAS.

FIG. 1. Forma típica de la sección eficaz en procesos resonantes y no resonantes.

FIG. 2. Diagrama de niveles del átomo de hidrógeno y transiciones electrónicas dipolares más importantes.

FIG. 3. Forma típica experimental de la línea de emisión H_α en un plasma caliente.

FIG. 4. Secciones eficaces de intercambio de carga no resonantes de protones sobre hidrógeno atómico.

FIG. 5. Secciones eficaces de intercambio de carga no resonantes de protones sobre hidrógeno molecular.

FIG. 6. Comportamiento teórico de la emisión H_α de intercambio de carga; (a) caso atómico (b) caso molecular.

FIG. 7. Ilustración del efecto de la forma de la sección eficaz sobre la forma de la línea de intercambio de carga (I) Sección eficaz constante, (II) Sección eficaz real (III) Forma gausiana.

FIG. 8. Variación de la forma de la línea en función de la temperatura iónica.

FIG. 9. Influencia de la energía del neutro en la forma teórica de la línea.

FIG. 10. Comparación entre la forma de la línea experimental y la deducida teóricamente con neutros en estado atómico.

FIG. 11. Comparación similar a la anterior en otras condiciones del plasma.

FIG. 12. Comparación entre la forma de la línea experimental y la deducida teóricamente con neutros en estado molecular.

FIG. 13. Comparación similar a la anterior para otra temperatura iónica del plasma.

FIG. 14. Comparación del efecto de sección eficaz sobre la forma de la línea, por inyección de neutros en estado atómico, (I) Sección eficaz real, (II) Forma gausiana, (III) Sección eficaz constante.

FIG. 15. Comparación similar a la anterior para otra temperatura iónica del plasma.

INTRODUCCION.

Un plasma real está formado por electrones, iones en distintos grados de ionización y neutros. Tanto los procesos atómicos que se producen en su interior, como los provocados al hacer interaccionar el plasma con un haz atómico de alta energía, son de gran interés para la diagnosis de plasmas.

La excitación de los iones y neutros por colisión con los propios electrones del plasma, da origen a la emisión de radiación discreta de cuyo análisis se pueden deducir varias magnitudes del plasma. En los dispositivos termonucleares de confinamiento magnético, donde existen protones o deuterones de elevada energía, los procesos de intercambio de carga (resonantes o no) entre estos y los neutros de hidrógeno, dan origen a un grupo importante de neutros de alta energía que escapan de los campos de confinamiento sin dificultad, y cuyo análisis en energía proporciona la base de un importante método para medir la Ti en dispositivos espejos y Tokamaks (PETROV, M.P., 1974). Estos mismos procesos, estimulados mediante la inyección de un haz de átomos de hidrógeno o deuterio de alta energía, se aprovechan también para medir Ti en los más modernos dispositivos, donde el mayor radio del plasma, impide la utilización del primer método. En ambos casos solo se detectan átomos independientemente de si están ó no en su estado fundamental. Ahora bien, de hecho, en los citados procesos de intercambio de carga se produce un número importante de átomos en niveles excitados, que por emisión espontanea dan lugar a radiación óptica discreta, que refleja en la forma de la linea el estado cinético de los propios iones del plasma, por -

lo que tiene gran interés para propósitos de diagnosis, y en particular para la medida de la temperatura iónica. Esta radiación producida por el método del haz, podría ser útil no solo para medir la Ti, sino también la n_i con buena resolución espacial, como se ha sugerido recientemente en (LORENZ, A. y OTROS, 1.976). Mientras que para la medida de Ti por este método solo es importante conocer la forma relativa de la sección eficaz en función de la energía, en el caso de n_i es imprescindible conocer con exactitud los valores absolutos de la sección eficaz, ya que de estos depende la intensidad absoluta de la radiación emitida, de la que se deduciría el valor de n_i en un determinado elemento de volumen.

En este trabajo estamos interesados en la radiación emitida en los procesos no resonantes que llevan a estados excitados entre protones y neutros de hidrógeno, y que pueden presentarse en plasmas de hidrógeno con los iones obedeciendo a una distribución de velocidades de tipo Maxwell. Los neutros excitados formados en estos procesos y que poseen las mismas propiedades cinéticas que los iones de los que proceden, al desexcitarse emiten radiación óptica discreta desplazada como consecuencia del movimiento del átomo emisor. La forma de las líneas de emisión originadas según este mecanismo, depende: de la sección eficaz del proceso de intercambio de carga no resonante, de la temperatura iónica del plasma y de la velocidad del neutro. Se ha desarrollado un programa de cálculo que permite determinar la forma de estas líneas en función de estos parámetros y se aplica al caso de la línea H_α del hidrógeno.

Radiación con este origen, se ha observado en algunos dispositivos espejos (ALEXEFF, I. y OTROS, 1969) y (PATCH, R.

W. y OTROS, 1974) y en tokamaks (RAND McNALLY, J. y NEIDIGH, R.V., 1973). También algunos modelos de plasmas astrofísicos se basan en estos procesos, para explicar la componente ensanchada de las lineas de emisión del hidrógeno observadas en algunas galaxias (PATK, R.L. y STONER, R.E., 1973).

Se ha dividido el trabajo en tres capítulos y un Apéndice. En el primero de ellos se sintetizan los fundamentos teóricos necesarios para abordar el problema de la emisión de radiación en procesos de intercambio de carga. En el segundo capítulo se explican los procedimientos seguidos para obtener la sección eficaz de los procesos de esta clase que intervienen en la emisión de radiación H_α en el caso de un blanco en estado atómico y molecular y se dan las expresiones analíticas que se usan en este trabajo.

El tercer capítulo se ha dedicado a deducir la expresión de la forma de la linea originada por estos procesos, en el caso de un plasma maxweliano caracterizado por una temperatura Ti, y un blanco de neutros monoenergéticos de energía E_o. Se explica el método numérico seguido para calcular por ordenador dicha forma; y se dan algunos resultados obtenidos en el caso de la emisión H_α , comparándose nuestros resultados teóricos con los escasos datos experimentales de la literatura. En el Apéndice se da el listado completo del programa de cálculo utilizado.

CAPITULO I

FUNDAMENTOS TEORICOS

1.1. CLASIFICACION DE LAS COLISIONES ATOMICAS CON EMISION DE RADIACION.

Los procesos atómicos que ocurren al hacer incidir un haz de iones, átomos o moléculas, sobre un blanco gaseoso o un haz de partículas, responden desde el punto de vista mecánico a dos tipos: inelásticas y elásticas, según lleven o no consigo una transferencia de energía cinética a energía interna.

Entre los distintos procesos atómicos que pueden existir (HASTED, J.B., 1972) estamos interesados en resaltar aquí, aquellos que dan lugar a estados excitados y como consecuencia a la emisión de radiación discreta. Los tipos de mayor interés son los siguientes:

A) Excitación directa del proyectil

$$A^{+} + B \rightarrow A^{+*} + B$$

donde el asterisco indica que el sistema queda excitado

B) Ionización y excitación simultanea del blanco

$$A^{+} + B \rightarrow A^{+} + B^{+*} + e^{-}$$

C) Intercambio de carga con excitación simultanea del proyectil

$$A^{+} + B \rightarrow A^{*} + B^{+}$$

D) Intercambio de carga con excitación simultanea del blanco

$$A^{+} + B \longrightarrow A + B^{+*}$$

Las reacciones que nos interesan en este trabajo, están dentro de las del tipo C.

1.2. REACCIONES SIMPLES DE INTERCAMBIO DE CARGA. TIPOS.

Estas reacciones no son mas que procesos atómicos - inelásticos, donde los estados electrónicos de las partículas involucradas se ven modificados por la captura o pérdida de un electrón. Responden a los dos tipos siguientes:

$$A^{+} + B \longrightarrow A + B^{+}$$
$$A^{+} + B^{\bullet} \longrightarrow A^{*} + B^{+}$$

donde A y B pueden ser sistemas atómicos o moleculares y los signos $\bullet$ y $*$ indican estados excitados. El sistema B^{+}, podría quedar excitado, siempre que tenga algún electrón en su configuración; como en los procesos que nos interesan en este trabajo, interviene el ión de hidrógeno, consideraremos solo las reacciones anteriores.

Según lleven ó no consigo intercambio de energía, - las reacciones se denominan no resonantes ó resonantes, respectivamente.

a) Procesos resonantes.-

Los casos más típicos de estos procesos son los que tienen lugar entre un átomo (ó molécula) y el mismo sistema - ionizado

$$A^{+} + \begin{Bmatrix} A \\ A^{*} \end{Bmatrix} \longrightarrow \begin{Bmatrix} A \\ A^{*} \end{Bmatrix} + A^{+}$$

en donde el electrón capturado por el ión queda en el mismo nivel atómico en que se encontraba en el blanco neutro.

Las reacciones de este tipo que ocurren en plasmas de hidrógeno se expresan así

$$H^{+} + H\,(n\,,l) \longrightarrow H\,(n\,,l) + H^{+}$$

donde n y l son los números cuánticos principal y orbital respectivamente.

b) Procesos no resonantes.-

Estos procesos pueden obedecer a cualquiera de las siguientes reacciones:

$$A^{+} + A \longrightarrow A^{*} + A^{+} + \Delta E$$
$$A^{+} + B \longrightarrow A + B^{+} + \Delta E$$
$$A^{+} + B \longrightarrow A^{*} + B^{+} + \Delta E$$

El balance de energía se llevará a cabo teniendo en cuenta la energía interna de las partículas antes y después de la reacción.

Casos particulares de este tipo de reacciones, que

se presentan en plasmas de hidrógeno, y en los que estamos interesados en este trabajo, son los siguientes:

$$H^+ + H \longrightarrow H^* + H^+$$
$$H^+ + H_2 \longrightarrow H^* + H_2^+$$

En el caso de la reacción atómica, la energía que interviene en el balance, es la energía de excitación del sistema H^*. - En el caso molecular, el balance energético se llevará a cabo teniendo en cuenta los potenciales de ionización del hidrógeno atómico y molecular, y la energía de ionización del sistema H^*.

1.3. SECCIONES EFICACES DE INTERCAMBIO DE CARGA.- EXPRESIONES TEORICAS.

Los procesos de intercambio de carga, han sido estudiados por numerosos autores, llegando a expresiones analíticas de sus secciones eficaces (HASTED, J.B., 1972), en función de la energía relativa de las partículas que interaccionan. El distinto comportamiento de la sección eficaz de intercambio de carga en función de la energía, para procesos resonantes y no resonantes, se ilustra en la fig. 1.

Para procesos resonantes la sección eficaz viene bien descrita por una relación del tipo

$$\sigma^{\frac{1}{2}} = a - b \ln v$$

donde v es la velocidad relativa de las partículas y a y b son constantes para cada reacción.

En el caso de procesos no resonantes, la sección eficaz presenta un máximo, cuando el tiempo de colisión, $t = \frac{a}{v}$, sea comparable con el tiempo de la transición electrónica $\tau = \frac{h}{|\Delta E|}$ (HESS, W., 1973); en estas expresiones, v es la velocidad relativa, h la constante de Planck, ΔE la energía de la reacción y a el parámetro de impacto.

Ateniéndonos al criterio de Massey (MASSEY, H.S.W., 1949), para estudiar el comportamiento de la sección eficaz de este último tipo de reacciones, dividiremos en dos regiones el dominio de energías: 1) Zona adiabática, aquella región en la que el tiempo de colisión es mucho mayor que el de la transición electrónica, o bien que $v \ll a \frac{|\Delta E|}{h}$. En esta región, la sección eficaz tiene un comportamiento exponencial del tipo

$$\sigma = A \ \mathrm{Exp} \left(- \frac{B\,|\Delta E|}{hv} \right)$$

donde A y B son dos constantes que dependen de cada reacción particular, y que se pueden determinar conociendo dos puntos en dicha zona. 2) Región de Born. En esta zona el tiempo que dura la interacción es mucho más pequeño que el tiempo asociado a la transición electrónica, o lo que es lo mismo $v \gg a \frac{|\Delta E|}{h}$. Para la sección eficaz en este rango de energías, se dispone de valores teóricos aceptables.

Para la región de más bajas energías se dispone de una expresión desarrollada por (RAPP, D. y FRANCIS, W.E., 1962), que puede ser muy útil para prolongar el comportamiento de va-

lores experimentales o bien corregir el comportamiento adiabático en la región por debajo de algunas centenas de eV. Esta expresión es

$$\sigma = \frac{10.8}{\pi a_o^2} \left(\frac{I}{E_R} \right) \left(\frac{v\hbar}{|\Delta E|} \right)^4$$

donde a_o es el radio de Bohr, I el potencial de ionización del neutro inicial; E_R el potencial de ionización del átomo de hidrógeno (13.6 eV); $\hbar$ la constante de Planck en unidades 2π y ΔE el balance energético de la reacción.

Los procesos no resonantes de interés, son aquellos en que la captura se efectua en un neutro en el nivel fundamental y el proceso da lugar a un neutro en un nivel excitado, por lo tanto, se trata de procesos endotérmicos (con una ΔE negativa). Una parte pequeña de la energía cinética del proyectil pasa a energía potencial y la sección eficaz se hace nula para energías inferiores a ΔE.

Estas consideraciones, son fundamentales para construir expresiones analíticas de las secciones eficaces, a lo que se procede en el capítulo siguiente, con el objeto de llevar a cabo el cálculo de la forma de las lineas de emisión originadas en procesos de intercambio de carga no resonante (capítulo III); ya que para estas secciones eficaces no se dispone de valores experimentales ni de teóricos fiables en la zona de energía inferior a varias centenas de eV., y es necesario recurrir a estas expresiones teóricas aproximadas para prolongar los valores experimentales obtenidos a energías superiores.

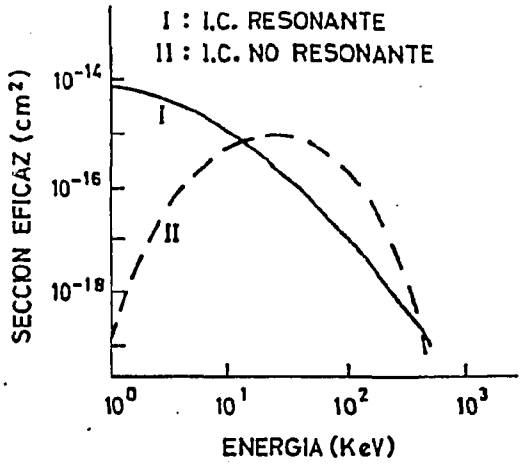


Fig. 1.- Forma típica de la sección eficaz en procesos resonantes y no resonantes.

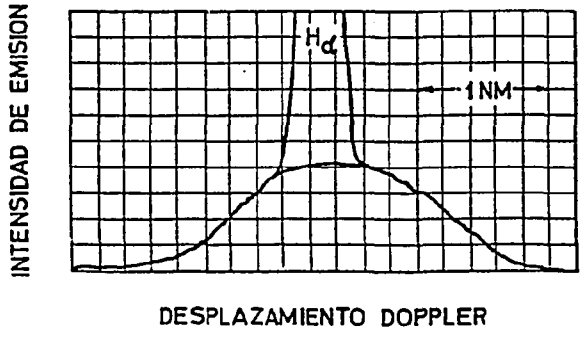


Fig. 3.- Forma típica experimental de la línea de emisión H_α en un plasma caliente.

1.4. EL ESPECTRO OPTICO DEL ATOMO DE HIDROGENO.

El átomo de hidrógeno, constituido por un protón y un electrón, tiene asociado un hamiltoniano

$$H = \frac{\bar{P}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\bar{P}_2^{\,2}}{2m_2} + V(|\bar{r}|)$$

donde $\bar{P}_1$, $\bar{P}_2$, son las cantidades de movimiento (operadores momento en mecánica cuántica) de las partículas protón y electrón; y $V(|\bar{r}|)$ es el potencial de interacción culombiano - $V(|\bar{r}|) = \frac{e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|}$, dependiente unicamente de la distancia entre ellos.

El estudio de dicho átomo, ó estudio del sistema - de dos partículas puede descomponerse en el de una partícula de masa, la masa total $m_1 + m_2$, cuyo movimiento es el del centro de masas de velocidad constante; y otra partícula de masa la masa reducida $\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$, que se mueve con velocidad - $\bar{v}_r = \bar{v}_1 - \bar{v}_2$.

De esta forma la solución de la ecuación de - Schroedinger $H\Psi = E\Psi$ nos lleva a funciones de onda (estados propios del operador hamiltoniano), cuya parte angular - son los bien conocidos armónicos esféricos dependientes de - l y m (números cuánticos orbital y proyección en una dirección determinada respectivamente), y la parte radial dependiente del número cuántico principal n, y de l:

$$\Psi_{nlm}(r) = R_{nl}(r)\; Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

La energía depende unicamente del número cuántico principal:

$$E_n = - \frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$$

Sin consideraciones de spin, por cada energía E_n tenemos $2n - 1$ estados distintos, es la conocida degeneración accidental, característica del átomo de Hidrógeno, debida al potencial culombiano.

Las correcciones relativistas, spin-órbita etc., nos llevarían a desplazamientos y desdoblamiento de niveles, estos últimos harían disminuir el grado de degeneración, introduciendo nuevos números cuánticos.

Con este modelo simplificado, hemos estudiado las secciones eficaces así como las emisiones discretas a niveles inferiores.

Las reglas de selección para la transición dipolar eléctrica nos dice que solo tendrán lugar aquellas transiciones en que la diferencia de números cuánticos orbitales entre los estados inicial y final sea $\Delta l = \pm 1$.

Las probabilidades de transición desde un nivel n_i a un nivel n_f, vienen dadas sin consideraciones de spin por la relación:

$$A_{n_i n_f} = \sum_{\substack{m_f < m_i \\ l_i, l_f = s, p, \ldots}} \frac{2l + 1}{n_i^2} A_{(n_i, l_i), (m_f, l_f)}$$

donde $A_{(n_i,\ell_i),(n_f,\ell_f)}$: son las probabilidades de transición entre los subniveles.

Un diagrama de niveles, con las transiciones permitidas; así como las probabilidades de transición llegando hasta el nivel con número cuántico principal n = 4, se dan a continuación

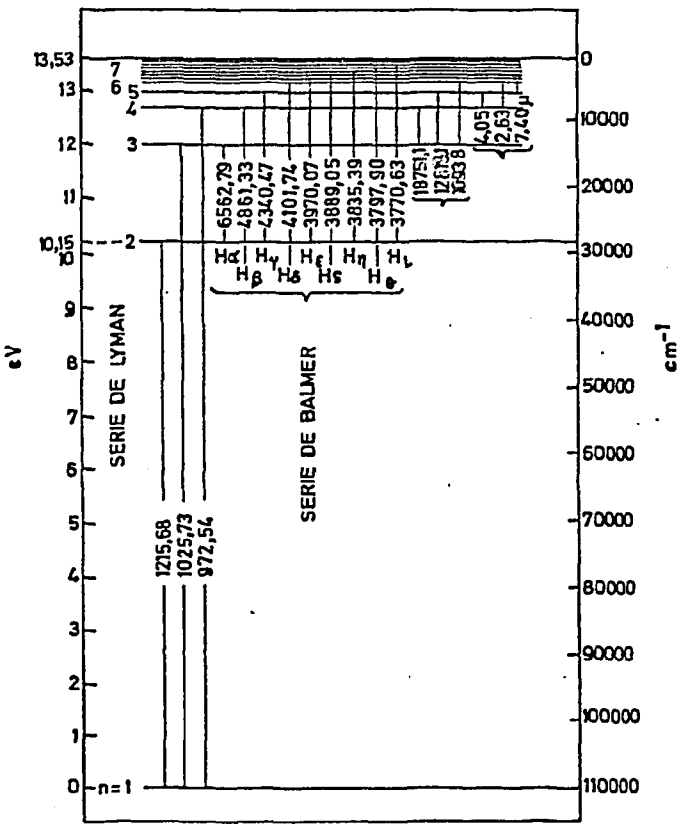


Fig. 2.- Diagrama de niveles del átomo de hidrógeno y transiciones electrónicas dipolares más importantes.

Probabilidades de transición y vida media del átomo de hidrógeno.

Configuración inicial	Probabilidad 10^8 sg^{-1}	Vida media 10^8 sg	Probabilidad de transición total a la configuración final indicada 10^8 sg^{-1}		
			2p	3p	
2s	0				
3s	0.0631	15.8	0.0631		
4s	0.0442	22.6	0.0258	0.0184	
			1s	2s	3s
					3d
2p	6.26	0.160	6.26		
3p	1.89	0.530	1.67	0.224	
4p	0.813	1.23	0.682	0.0967	0.0306
					0.0035
			2p	3p	
3d	0.646	1.55	0.646		
4d	0.276	3.62	0.206	0.0704	

1.5. INTERES DE LOS PROCESOS DE INTERCAMBIO DE CARGA CON EMISION DE RADIACION EN LA DIAGNOSIS DE PLASMAS.

Los plasmas que nos interesan especialmente, son los generados en dispositivos termonucleares tales como espejos y tokamaks, cuando el gas de la descarga es hidrógeno ó isótopos del mismo, aunque lo que vamos a decir tiene aplicación a plasmas más generales. Estos plasmas están formados por electrones, protones y neutros en estado atómico y molecular en el caso más general. Este fondo de neutros está asociado a procesos de difusión (PETROV, M.P., 1974) predominantemente de hidrógeno molecular, el cual sufre disociación en las capas periféricas del plasma a través de las reacciones siguientes (procesos Franck-Condon).

$$H_2 + e^- \rightarrow H + H + e^-$$
$$H_2 + e^- \rightarrow H_2^+ + 2e^-$$
$$H_2^+ + e^- \rightarrow H + H^+ + e^-$$

estos neutros con energías de unos pocos eV, ó los formados en procesos de intercambio de carga sucesivos, tienen suficiente energía para poder penetrar hasta el interior de plasmas calientes dando origen a una concentración no homogénea de neutros en toda la sección transversal del plasma. Otra posible razón para la existencia de neutros en los plasmas termonucleares se debe a que bien por razones de diagnosis (WHARTON, C., 1975) ó de calentamiento (THOMPSON, E., 1976) se inyectan haces neutros de elevada energía.

La presencia de neutros en el plasma hace posible que se produzcan reacciones de intercambio no resonantes o -

resonantes a estados excitados que dan origen a la emisión de radiación óptica discreta. La importancia de esta radiación - se comprende porque los protones, principales componentes de estos plasmas al no poseer electrones externos no dan lugar - directamente a la emisión de radiación y por tanto su movimiento térmico no se puede seguir por métodos espectroscópicos directos como los usados en otros plasmas (GRIEM, H.R., 1964).

Sin embargo, a través de los procesos de intercambio de carga citados, los protones del plasma se convierten en neutros excitados con la misma velocidad que tenían como iones y la radiación óptica emitida al desexcitarse afectada por efecto Doppler, refleja el estado cinético de los propios iones del plasma. Se dispone así de un posible método para medir la temperatura iónica y observar movimientos colectivos, como - por ejemplo derivas, sufridas por los iones del plasma.

Este método para medir la temperatura iónica de un plasma, fue sugerido por (DUSHIN, L.A. y OTROS, 1963) pero debido a que tan solo recientemente se ha comenzado a disponer de datos experimentales de secciones eficaces para procesos de intercambio de carga con emisión de radiación, no se ha - considerado seriamente dicha sugerencia.

En los plasmas reales esta radiación aparece mezclada con la emitida por los neutros excitados, procedentes de - los procesos Franck-Condon anteriormente mencionados, y la - forma de las lineas observadas experimentalmente, tiene una - apariencia como la que se muestra en la figura 2. La componente ensanchada es la que estudiaremos en este trabajo en el ca

so sencillo de plasmas maxwellianos.

Este tipo de radiación se ha aprovechado para detectar la rotación toroidal del plasma en el ORMAK (NEIDIGH, R.V. y OTROS, 1973 a) y para observar la influencia en la función de distribución $f(v_{11})$, de diferentes efectos que modifican esta función en los Tokamaks (NEIDIGH, R.V. y OTROS, 1973 b). Conviene señalar que las derivas que puedan sufrir las partículas cargadas debido a la existencia de campos eléctricos y de campos magnéticos no homogeneos, produce desplazamiento de la linea asociada a los procesos de intercambio de carga pero no en la componente estrecha asociada a la excitación de neutros por electrones. También se ha tratado de aprovechar para medir la temperatura iónica por un método independiente del análisis en energía de los neutros de intercambio de carga. (PATCH, R.W.y OTROS, 1974).

CAPITULO II

SECCIONES EFICACES DE EMISION H_α EN PROCESOS DE INTERCAMBIO DE CARGA.

2.1. CONSIDERACIONES GENERALES.

En este capítulo vamos a explicar como obtenemos los valores de secciones eficaces de intercambio de carga no resonante entre protones e hidrógeno atómico o molecular, que dan lugar a neutros excitados con posibilidad de emitir radiacion H_α (6562.8 Å). De ellas tratamos de obtener expresiones analíticas mediante un ajuste polinómico de la forma

$$\ln \sigma = \sum_{i=1,11} A_i (\ln E)^i$$

que necesitaremos en el siguiente capítulo para determinar la forma de esta línea de emisión H_α, en plasmas maxwelianos.

Las principales dificultades son, de un lado la falta de datos experimentales para alguno de los casos que nos interesan, por lo que se ha de proceder partiendo de datos de secciones eficaces de otros niveles, y aplicar relaciones teóricas. De otro lado, por debajo de unas centenas de eV, se carece totalmente de valores experimentales por lo que se han de extrapolar siguiendo algún modelo teórico.

Esta última dificultad se debe esencialmente a que el método usado experimentalmente para medir estas secciones eficaces, consiste en hacer pasar un haz de protones monoener

géticos a través de un blanco formado por átomos o moléculas de hidrógeno. Un determinado proceso de captura electrónica, quedando el protón inicial en un hidrógeno excitado H(nl), se detecta observando la radiación espontanea que emite este nivel excitado. Esta radiación se puede separar espectralmente, al menos por encima de un cierto umbral, de la generada en procesos de excitación directa del blanco porque está desplazada por efecto Doppler. La separación entre procesos de captura dando lugar a niveles con el mismo n y diferente l, se hace basándose en el distinto comportamiento temporal de los mismos, que se traduce en una contribución a la radiación total, diferente de cada nivel l, según nos desplazamos longitudinalmente a lo largo de la dirección del haz de protones. Cuando el desplazamiento Doppler es despreciable, la medida no se puede realizar por este método óptico.

2.2. SECCIONES EFICACES TENIENDO COMO BLANCO HIDROGENO ATOMICO.

Las secciones eficaces que nos interesan, son las de los procesos

$$H^+ + H(1s) \longrightarrow H(3l) + H^+$$

con l = 0, 1, 2.

Debido a que no existen valores experimentales para estas reacciones, se ha de partir de valores experimentales de secciones eficaces para procesos similares yendo a H(2s) ó H(2p), para los que sí existen datos y recurrir a ciertas re-

laciones teóricas.

En nuestro caso hemos partido de valores de H(2p), que han sido obtenidos experimentalmente por (STEBBINGS, R.F. y OTROS, 1965), que han sido revisados por Young y que hemos tomado de (THOMAS, E.W., 1972). Estos valores se dan en la columna primera de la tabla I.

Para obtener a partir de estos valores, las secciones eficaces que nos interesan, hemos tenido en cuenta que para este tipo de procesos se conoce (MAY, R., 1964) la dependencia de la sección eficaz en función de los números cuánticos principal y orbital, que es de la forma

$$\sigma(n,1) = \sigma(n) \; K_1(\beta) \; / \sum_{\ell} K_1(\beta)$$

donde $\sigma(n)$ es la parte dependiente unicamente del número cuántico principal, que viene dada por

$$\sigma(n) = \pi a_o^2 \frac{2^8}{5n^3} \frac{1}{p^2} \left(\frac{2p}{p^2+1}\right)^{10} \left[1 + 0 \left(\frac{1}{\beta n^2}\right) \right]$$

siendo a_o el radio de Bohr, n el número cuántico principal del estado final, y donde p y β vienen dados por las expresiones

$$p = 0.2 \; [E(KeV)]^{1/2} \qquad \beta = \left(\frac{p^2+1}{2p}\right)^2$$

siendo E la energía del protón incidente respecto al átomo de hidrógeno. $K_1(\beta)$ es la parte angular y viene dada por

$$K_1(\beta) = \frac{5}{5+1} \frac{2^{21}}{(21+1)!!(21-1)!!} \frac{1}{\beta^1} \left(1 + 0 \left(\frac{1}{\beta}\right)\right)$$

los ceros de las funciones que aparecen, $O(\frac{1}{\beta n^2})$ y $O(\frac{1}{\beta})$, pueden despreciarse por tratarse de correcciones de segundo orden.

De estas relaciones se desprende la ley de escala de la sección eficaz de intercambio de carga, en función del número cuántico principal, que va como $1/n^3$.

La sección eficaz para el estado final 3p, se ha obtenido como $\sigma(3p) = \frac{8}{27}\ \sigma(2p)$. Las secciones eficaces para los estados 3s y 3d vienen dadas por:

$$\sigma(3s) = \frac{K_0(\beta)}{K_1(\beta)}\ \sigma(3p) = \frac{9}{20}\ \beta\ \sigma(3p)$$

$$\sigma(3d) = \frac{K_2(\beta)}{K_1(\beta)}\ \sigma(3p) = \frac{8}{35}\ \frac{1}{\beta}\ \sigma(3p)$$

De esta forma en el rango de energías donde se dispone de valores experimentales discretos de $\sigma(2p)$, se han obtenido valores para $\sigma(3s)$, $\sigma(3p)$ y $\sigma(3d)$.

La sección eficaz para emisión H_α, viene dada por

$$\sigma(H_\alpha) = \sigma(3s) + 0.1184\ \sigma(3p) + \sigma(3d)$$

donde el factor 0.1184 se debe a que el nivel 3p se puede despoblar también a través de la transición 3p - 1s, y corresponde al cociente de probabilidades

$$\frac{A_{3p,2s}}{A_{3p,2s} + A_{3p,1s}}$$

Las expresiones adiabáticas para cada uno de los estados, de número cuántico principal n = 3, son:

$$\sigma(3s) = 1.118 \times 10^{-16} \text{ EXP} \left(- \frac{61.74}{(E(eV))^{\frac{1}{2}}}\right) \quad cm^2$$

$$\sigma(3p) = 2.095 \times 10^{-16} \text{ EXP} \left(- \frac{116.12}{(E(eV))^{\frac{1}{2}}}\right) \quad cm^2$$

$$\sigma(3d) = 4.039 \times 10^{-17} \text{ EXP} \left(- \frac{170.51}{(E(eV))^{\frac{1}{2}}}\right) \quad cm^2$$

Las expresiones de Rapp-Francis para dichos estados y para la línea H_α , son:

$$\sigma(3,1) = 3.955 \times 10^{-24} \; E^2(eV) \quad cm^2$$

$$\sigma(H_\alpha) = 8.378 \times 10^{-24} \; E^2(eV) \quad cm^2$$

Los valores experimentales de $\sigma(2p)$ de los que se ha partido y los obtenidos para $\sigma(3s)$, $\sigma(3p)$, $\sigma(3d)$ y $\sigma(H_\alpha)$ aplicando las últimas relaciones teóricas, pueden verse en la tabla I. Se dan también valores adiabáticos para la región de baja energía, y para $\sigma(H_\alpha)$ se han incluido los valores obtenidos con la expresión de Rapp y Francis. Los coeficientes del ajuste para $\sigma(H_\alpha)$ con comportamiento adiabático en la región de baja energía son

A_1 = .14624E2	A_6 = .14265E - 1
A_2 = .66909	A_7 = -.81306E - 1
A_3 = -.10784E1	A_8 = -.69134E - 4

Tabla I.- Valores de secciones eficaces de procesos $H^+ + H(1s) \rightarrow H(nl) + H^+$ y de emisión H_α. El signo (A) indica comportamiento adiabático y (R-F) de Rapp y Francis.

Energía (KeV)	σ (2p) Experimental (cm^2)	σ (3s) (cm^2)	σ (3p) (cm^2)	σ (3d) (cm^2)	σ (H_α) (cm^2)
0.02		1.13E - 22	1.11E - 27	1.11E - 33	1.13E - 22 (A) 3.35E - 21 (R-F)
0.05		1.80E - 20	1.55E - 23	1.36E - 27	1.80E - 20 (A) 2.10E - 20 (R-F)
0.1		2.33E - 19	1.90E - 21	1.59E - 24	2.33E - 19 (A)
0.2		1.42E - 18	5.69E - 20	3.34E - 22	1.43E - 18 (A)
0.3		3.16E - 18	2.57E - 19	2.14E - 21	3.19E - 18 (A)
0.4		5.10E - 18	6.30E - 19	8.01E - 21	5.18E - 18 (A)
0.5		7.07E - 18	1.16E - 18	1.97E - 20	7.23E - 18 (A)
0.6	6.17E - 18	8.99E - 18	1.83E - 18	3.83E - 20	9.24E - 18
1.25	2.65E - 17	1.95E - 17	7.85E - 18	3.25E - 19	2.07E - 17
2.5	3.48E - 17	1.40E - 17	1.03E - 17	7.78E - 19	1.60E - 17
5.	4.10E - 17	9.88E - 18	1.22E - 17	1.55E - 18	1.29E - 17
10.	3.90E - 17	6.34E - 18	1.15E - 17	2.14E - 18	9.84E - 18
20.	3.00E - 17	4.05E - 18	8.88E - 18	2.00E - 18	7.10E - 18
30.	1.30E - 17	1.75E - 18	3.85E - 18	8.73E - 19	3.08E - 18

$A_4 = -.35875E-1$	$A_9 = .75915E-2$
$A_5 = .37011$	$A_{10} = -.69157E-4$
	$A_{11} = -.24947E-3$

Si se toman los valores con comportamiento adiabático y de - Rapp y Francis, los coeficientes del ajuste son

$A_1 = .14624E2$	$A_6 = .13883E-1$
$A_2 = .669$	$A_7 = -.81409E-1$
$A_3 = -.10785E1$	$A_8 = .73392E-4$
$A_4 = -.35519E-1$	$A_9 = .75879E-2$
$A_5 = .37039$	$A_{10} = -.84742E-4$
	$A_{11} = -.24683E-3$

2.3. SECCIONES EFICACES TENIENDO COMO BLANCO HIDROGENO MOLECULAR.

En este caso, se ha obtenido la sección eficaz de emisión H_α, tomando directamente datos experimentales de la bibliografía.

El trabajo de (HUGHES, R.H. y OTROS, 1970) aporta valores experimentales en el rango de 10 a 105 KeV y el trabajo de (HESS, W.R., 1974) en la región de 0.3 a 3 KeV. En el rango de energía intermedia no se dispone de valores experimentales de $\sigma(H_\alpha)$, pero si de datos de $\sigma(3s)$ debidos a - (LOYD, D.H. y DAWSON, H.R. 1975) que cubren la región de energia entre 1.2 y 8.2 KeV.

Los valores a energías discretas de $\sigma(H_\alpha)$ tomados en este trabajo, y que se dan en la tabla II, se han formado así, Para la zona de alta energía se han tomado los valores de Hughes; para la zona intermedia se han obtenido los valores de $\sigma(H_\alpha)$ a partir de los de $\sigma(3s)$, mediante un procedimiento gráfico aproximado, que tiene en cuenta el hecho de que la contribución más importante a $\sigma(H_\alpha)$ proviene de $\sigma(3s)$. De esta manera los valores de Hess se han de multiplicar por un factor 11.8, para que todos los valores queden en la misma escala absoluta.

Esta sección eficaz se ha prolongado en la zona adiabática por la expresión

$$\sigma(H_\alpha) = 7.395 \times 10^{-18} \text{ EXP } \left(-\frac{76.117}{E(eV)^{\frac{1}{2}}}\right) \quad cm^2$$

La expresión de Rapp y Francis para este caso particular tiene la forma

$$\sigma(H_\alpha) = 5.43 \times 10^{-24} \, E^2(eV) \quad cm^2$$

En la primera columna de la tabla II se dan los valores experimentales obtenidos como se ha explicado anteriormente y en las columnas segunda y tercera los valores deducidos para la zona de baja energía aplicando la fórmula de Rapp y Francis y la expresión adiabática respectivamente. Según se utilice el comportamiento adiabático solo o se use este unido a valores de Rapp y Francis para obtener el ajuste analítico

Tabla II.- Valores de secciones eficaces (cm^2) de emisión H_α, a través de procesos del tipo $H^+ + H_2 \longrightarrow H(31) + H^+$

Energía (LeV)	Valores Experimentales	Comportamiento adiabático	Comportamiento adiabático y de Rapp - Francis
0.02		3.00E - 25	2.17E - 21
0.05		1.56E - 22	1.36E - 20
0.2		3.40E - 20	2.17E - 19
0.3		9.13E - 20	9.13E - 20
0.4		1.64E - 19	1.64E - 19
0.5	2.46E - 19	2.46E - 19	2.46E - 19
0.8	5.00E - 19		
1.	6.67E - 19		
1.5	8.40E - 19		
2.	9.30E - 19		
2.5	1.10E - 18		
3.	1.50E - 18		
4.	1.80E - 18		
5.	2.20E - 18		
6.	3.00E - 18		
8.	3.50E - 18		
10.	3.80E - 18		
15.	4.40E - 18		
20.	5.20E - 18		
25.	6.00E - 18		
33.3	6.50E - 18		
40.	6.00E - 18		
50.	5.00E - 18		
58.	4.00E - 18		
68.	3.00E - 18		
82.	2.00E - 18		
91.6	1.50E - 18		
105	1.00E - 18		

de la sección eficaz, se obtienen los siguientes coeficientes del ajuste:

Solamente con comportamiento adiabático

$A_1 = .11236E2$	$A_6 = -.65504E-1$
$A_2 = .82093$	$A_7 = .51879E-2$
$A_3 = -.33939$	$A_8 = .61564E-2$
$A_4 = .33349$	$A_9 = -.81868E-3$
$A_5 = -.29525E-2$	$A_{10} = -.19182E-3$
	$A_{11} = .30973E-4$

en el segundo caso, los coeficientes obtenidos son:

$A_1 = .11085E2$	$A_6 = .61628E-1$
$A_2 = .70323$	$A_7 = .11473E-1$
$A_3 = .49048$	$A_8 = -.68958E-2$
$A_4 = -.12923$	$A_9 = .10926E-3$
$A_5 = -.15783$	$A_{10} = .22867E-3$
	$A_{11} = -.22969E-4$

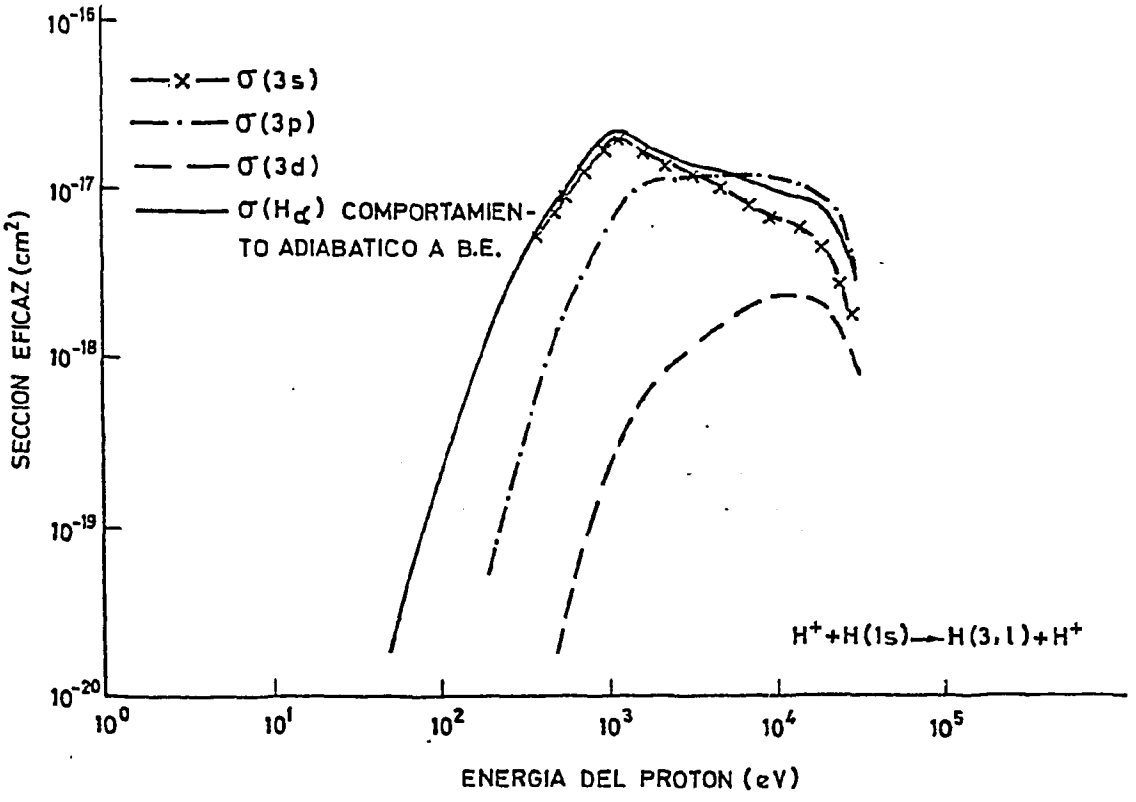


Fig. 4.- Secciones eficaces de intercambio de carga no resonantes de protones sobre hidrógeno atómico.

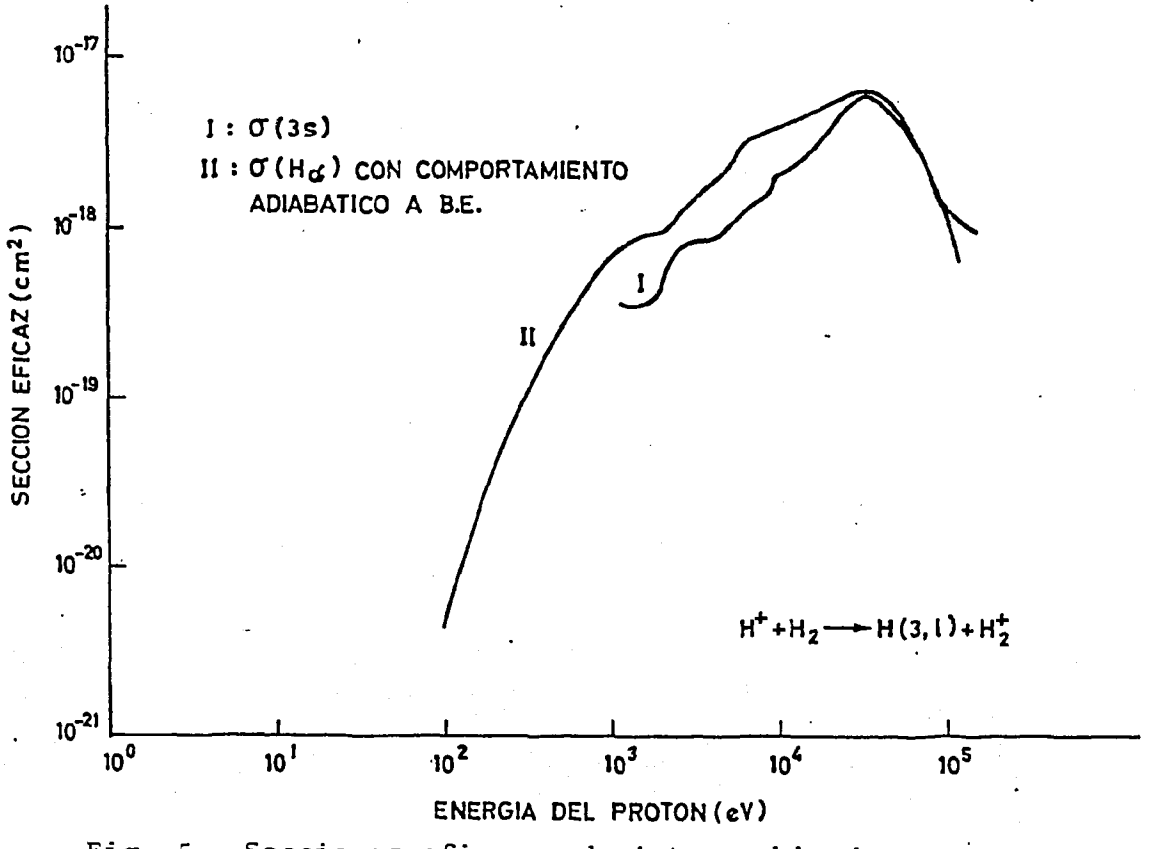


Fig. 5.- Secciones eficaces de intercambio de carga no resonantes de protones sobre hidrógeno molecular.

CAPITULO III

FORMA DE LA LINEA

3.1. CALCULO DE LA FUNCION FORMA DE LA LINEA.

La función forma de la linea $F(\Lambda)$, representa la probabilidad por unidad de tiempo de que un ión capture un electrón y quede excitado, con la posibilidad de emitir radiación en el intervalo Λ, $\Lambda + d\Lambda$, con $\Lambda = \lambda - \lambda_o$, siendo λ_o la longitud de onda de una posible transición óptica discreta a través de la cual se desexcita el nivel en cuestión.

El método de cálculo lo expondremos pensando en procesos del tipo

$$A^+ + B \longrightarrow A^* + B^+$$

aunque la filosofía del mismo es aplicable a procesos de mayor generalidad.

Se supone un plasma donde los iones A^+ del mismo exhiben una distribución de velocidades Maxwell-Boltzman, hipótesis aceptable para muchos plasmas básicos de laboratorio y otros de interés termonuclear p. ej. tokamaks. Dicha función de distribución tiene la forma

$$f_1(\bar{v}_1) = \left(\frac{m_1}{2\pi KT}\right)^{3/2} \text{EXP}\left(\frac{m_1 \quad v_1{}^2}{2KT}\right) \qquad (3.1)$$

donde K es la constante de Boltzman, m_1 es la masa del ión, v_1 su velocidad y T la temperatura iónica del plasma.

Los neutros que hacen de blanco en la reacción, se suponen monoenergéticos con una velocidad $\bar{v}_o$. La función de distribución de velocidades de los neutros se reduce así a la delta de Dirac. Tomando un sistema de coordenadas con la dirección de $\bar{v}_o$ como eje x, la función de distribución normalizada de los neutros en coordenadas esféricas, viene dada por

$$f_2(\bar{v}_2) = \frac{1}{v_2^2} \; \delta(\bar{v}_2 - \bar{v}_o) \; \delta(\phi_2) \; \delta(\mu_2 - 1) \qquad (3\text{-}2)$$

donde $\mu_2 = \cos \theta_2$.

La probabilidad por unidad de tiempo de que un ión con velocidad en el intervalo $(\bar{v}_1, \bar{v}_1 + d\bar{v}_1)$, interaccione con un neutro de velocidad en el rango $\bar{v}_2$ y $\bar{v}_2 + d\bar{v}_2$, viene dada por

$$P_1 = \frac{1}{C} \; \sigma_*(v_R) \; f_1(\bar{v}_1) \; f_2(\bar{v}_2) v_R d^3v_1 \; d^3v_2 \qquad (3\text{-}3)$$

siendo C la constante de normalización dada por la integral séxtuple

$$C = \iiint_{\bar{v}_1} \iiint_{\bar{v}_2} \sigma_*(v_R) \; f_1(\bar{v}_1) \; f_2(\bar{v}_2) \; v_R \; d^3v_1 d^3v_2 \; (3\text{-}4)$$

donde

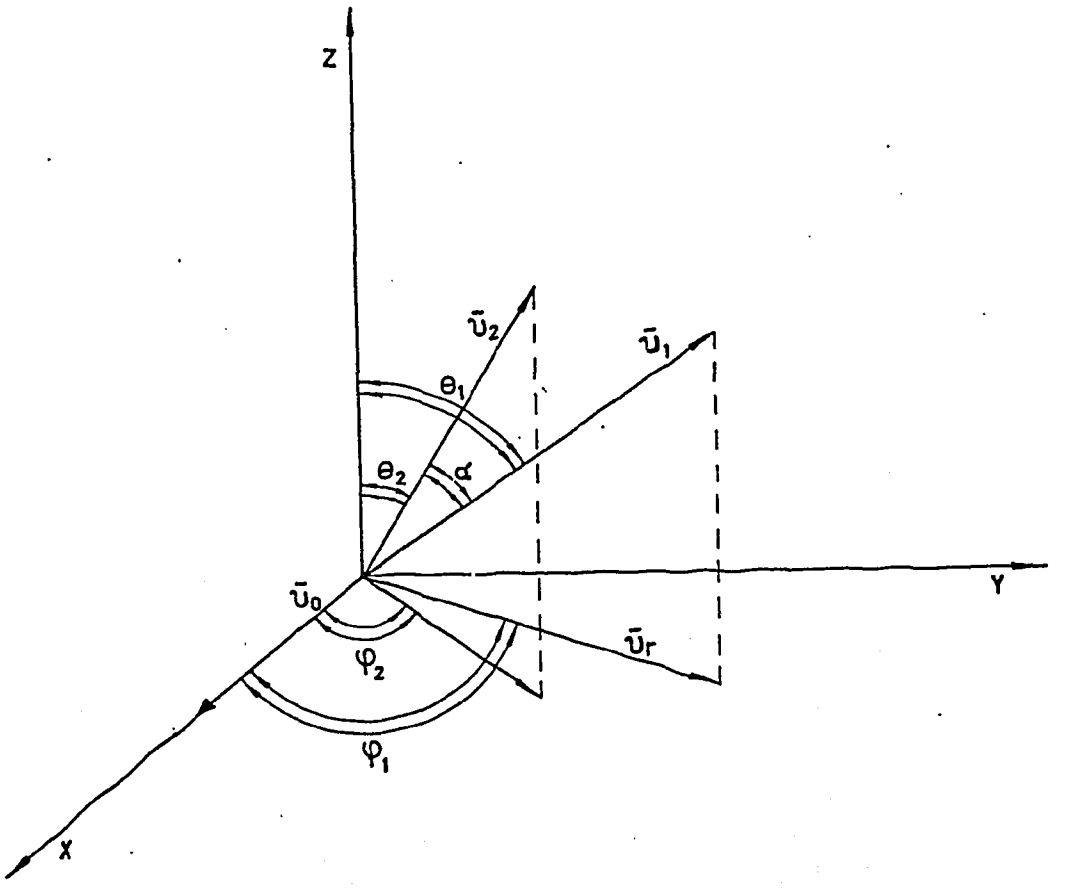
$\sigma_*(v_R)$ sección eficaz microscópica para el proceso

v_R módulo de la velocidad relativa del ión respecto al neutro

Ya que en los procesos de intercambio de carga los iones A^+ que capturan el electrón salen convertidos en neutros con la misma velocidad y dirección que llevaban como iones .

La probabilidad por unidad de tiempo de que el ión con velocidad entre $\bar{v}_1$ y $\bar{v}_1 + d\bar{v}_1$, capture un electrón quedando excitado en un determinado nivel, cualesquiera que sea la velocidad del neutro, nos dará la probabilidad por unidad de tiempo de que el neutro rápido resultante de la reacción salga con una velocidad comprendida entre $\bar{v}_1$ y $\bar{v}_1 + d\bar{v}_1$, lo que matemáticamente se obtiene integrando a todas las velocidades del neutro B en (3-3)

$$\frac{1}{C} \int\int\int_{\bar{v}_2} q_*(v_R)\ f_1(\bar{v}_1)\ f_2(\bar{v}_2)\ v_R\ d^3v_1\ d^3v_2 \qquad (3\text{-}5)$$



donde $v_R = |\bar{v}_1 - \bar{v}_2| = (v_1^2 + v_2^2 - 2v_1 v_2 \cos\alpha)^{1/2}$

y $E = \frac{1}{2} m_1 v_R^2$

pasando a coordenadas esféricas nos queda

$$\frac{1}{C} f_1(\bar{v}_1)\, d^3v_1 \int_0^{2\pi}\int_{-1}^{1}\int_0^{\infty} \sigma_*(v_R)\, f_2(\bar{v}_2)\, v_R\, v_2^2\, dv_2\, d\mu_2\, d\varphi_2 =$$
$$= \frac{1}{C} f_1(\bar{v}_1)\, \sigma_*(v_R)\, v_R\, d^3v_1$$

Sustituyendo en la expresión anterior la forma explícita de $f_1(\bar{v}_1)$, y poniendo el elemento de volumen en coordenadas cilíndricas, tenemos:

$$P_2 = \frac{1}{C}\left(\frac{m_1}{2\pi KT}\right)^{3/2} \sigma_*(v_R)\, e^{-\frac{m_1 v_1^2}{2KT}}\, v_R\, v_r\, dv_r\, d\varphi_1\, dv_z$$

donde ahora $v_R = |\bar{v}_1 - \bar{v}_o| = (v_1^2 + v_o^2 - 2v_1 v_o \operatorname{sen}\theta_1 \cos\varphi_1)^{1/2}$ y $v_r = v_1 \operatorname{sen}\theta_1$ es la proyección de la velocidad en el plano - XY.

Tomando como dirección de observación el eje Z; ya que nos interesa desde el punto de vista de la emisión de radiación, la probabilidad de que el neutro excitado resultante de la captura electrónica tenga una componente de velocidad a lo largo de dicho eje comprendida en el intervalo v_z, $v_z + dv_z$, viene dada por la expresión

$$\frac{1}{C}\left(\frac{m_1}{2\pi KT}\right)^{3/2} \int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} \sigma_*(v_R)\, e^{-m_1(v_z^2 + v_r^2)/2KT} v_R\, v_r d\varphi_1 dv_r\, dv_z$$

que haciendo el cambio $v_1^2 = v_r^2 + v_z^2$, pasamos de la integración en v_r a la v_1, siendo v_z constante en la integral.

El neutro al quedar excitado emite radiación discreta desplazada por efecto Doppler, este desplazamiento Λ está relacionado con la velocidad v_z por la conocida expresión $v_z = \frac{c}{\lambda_o}\Lambda$. Por tanto, la probabilidad por unidad de tiempo de emisión de radiación en el intervalo Λ, $\Lambda + d\Lambda$, viene dada por

$$\frac{1}{C}\left(\frac{m_1}{2\pi KT}\right)^{3/2}\frac{c}{\lambda_o}\int_0^{2\pi}\int_{v_z}^{\infty}\sigma_k(v_R)\ \mathrm{EXP}\left(-\frac{m_1 v_1^2}{2KT}\right)\left(v_1^2+v_o^2-2v_o\left(v_1^2-\frac{c^2\Lambda^2}{\lambda_o^2}\right)\right.$$

$$\left.\cos\varphi_1\right)^{\frac{1}{2}}\ v_1\ dv_1\ d\varphi_1\ d\Lambda$$

donde ahora $\sigma_k(v_R)$ es la sección eficaz de emisión de la línea λ_o.

Resolviendo la integral en función de la energía del ión $E_1 = \frac{1}{2} m_1 v_1^2$, obtenemos

$$\frac{1}{C}\frac{c}{\lambda_o}\left(\frac{m_1}{2\pi KT}\right)^{3/2}\frac{1}{m_1}\int_0^{2\pi}\int_{\chi}^{\infty}\sigma_k(E)\ \mathrm{EXP}\left(-\frac{E_1}{KT}\right)\left[\frac{2E_1}{m_1}+v_o^2-\right.$$

$$\left.-2v_o\left(\frac{2E_1}{m_1}-\frac{c^2\Lambda^2}{\lambda_o^2}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\varphi_1\right]^{\frac{1}{2}}dE_1\ d\varphi_1\ d\Lambda$$

siendo $\chi = \frac{m_1 c^2\Lambda^2}{2\lambda_o^2}$

La función forma de la linea que es proporcional a la probabilidad de emisión para un determinado valor de Λ , se normaliza para que $\int_{-\infty}^{\infty} F(\Lambda)\ d\Lambda = 1$. Con lo que resulta que $F(\Lambda)$ es el factor de la expresión anterior que precede a $d\Lambda$.

Expresando la integral en función del parámetro -

$s = \frac{E_1}{KT} - \frac{m_1 c^2 \Lambda^2}{2 \lambda_o^2 KT}$, llegamos a

$$F(\Lambda) = \frac{1}{C} \frac{c}{\lambda_o} \frac{KT}{m_1} \left(\frac{m_1}{2 \pi KT}\right) \quad EXP\left(- \frac{m_1 c^2 \Lambda^2}{2 \lambda_o^2 KT}\right)$$

$$\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} \sigma_*(E) \; e^{-s} \; v_R(s , \varphi_1) \, ds \, d \varphi_1$$

Haciendo el cambio de variable $t = - \cos \varphi_1$ y poniendo la integral

$$\int_0^{2\pi} f(\cos \varphi_1) \, d\varphi_1 = 2 \int_0^{2\pi} f(\cos \varphi_1) \, d\varphi_1$$

se llega finalmente a la expresión

$$F(\Lambda) = \frac{1}{C} \frac{c}{\lambda_o} \pi^{3/2} \left(\frac{m_1}{2KT}\right)^{\frac{1}{2}} EXP\left(-\frac{m_1 c^2 \Lambda^2}{2 \lambda_o^2 KT}\right) \int_{-1}^{1} \int_0^{\infty} \frac{\sigma_*(E)}{(1-t^2)^{1/2}}$$

$$e^{-s} \; v_R(s , t) \quad ds \, dt$$

donde la velocidad relativa, en función de las variables de integración, tiene la forma

$$v_R = \left(\frac{2KT}{m_1} s + \frac{c^2 \Lambda^2}{\lambda_o^2} + v_o^2 + 2 v_o \left(\frac{2KTs}{m_1}\right)^{\frac{1}{2}} t\right)^{\frac{1}{2}}$$

Con estas manipulaciones disponemos de una expresión de la forma de la linea, en la que las integrales que aparecen se pueden resolver por métodos numéricos conocidos. Basta para resolver la primera integral aplicar la fórmula de integración de Gauss-Legendre (SHEID, F., 1968)

$$\int_{-1}^{1} f(Y) \, dY \sim \sum_{i=1,n} A_1 \; f(Y_i)$$

donde Y_i son los ceros de los polinomios de Legendre de grado n y los coeficientes A_i están dados por

$$A_i = \frac{2(1-Y_i^2)}{n^2(P_{n-1}(Y_i))^2}$$

los ceros y los valores de A_i se encuentran tabulados en la referencia anterior para algunos valores de n. Y la de Gauss-Lagendre para la segunda integración

$$\int_0^\infty e^{-x}\, Y(x)\, dx \sim \sum_{i=1,n} A_i\, f(x_i)$$

donde x_i son los ceros de los polinomios de Laguerre

$$L_n(x) = e^{-x} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n)$$

y los coeficientes A_i son

$$A_i = \frac{(n!)^2}{x_i\, (L'_n(x_i))^2}$$

siendo $L'_n(x_i)$ la derivada del polinomio de Laguerre de orden n, en el punto $x = x_i$.

Las curvas encontradas en nuestros procesos y que se dan en el siguiente apartado han sido normalizadas al valor central (valor de no desplazamiento Doppler F(0)).

3.2. RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSION.

Los resultados, tanto experimentales como teóricos, que se presentan en este apartado, corresponden a formas de linea de emisión H_α del hidrógeno formadas en procesos de intercambio de carga. Vamos a exponer primeramente el comportamiento teórico de la forma de la linea en función de las magnitudes más importantes del plasma y de la sección eficaz del proceso. Posteriormente se compara la forma de linea teórica con algunos pocos resultados que se han encontrado en la literatura.

En la fig. 6 se ilustra las formas de linea teórica para una temperatura iónica del plasma fija y una determinada energía de los neutros que hacen de blanco. Puede verse la diferencia entre las formas que adopta la linea, según se trate de un blanco atómico o molecular, y en este último caso puede verse como influye el tipo de comportamiento que se adopte para la sección eficaz en el rango de baja energía.

En la fig. 7 se comparan tres formas teóricas de linea para la misma temperatura iónica y energía del neutro. La curva I corresponde a la forma asociada a la sección eficaz - real, la II suponiendo una sección eficaz constante para el - proceso de intercambio de carga y la III es la forma gausiana. Esta figura pone de manifiesto el notable error que se cometería en la medida de la temperatura iónica, si se supusiese que el proceso de emisión Doppler es de tipo gausiano. Podría dar lugar esta hipótesis a errores próximos al 100 % en Ti.

La fig. 8 muestra la evolución de la forma de la lí

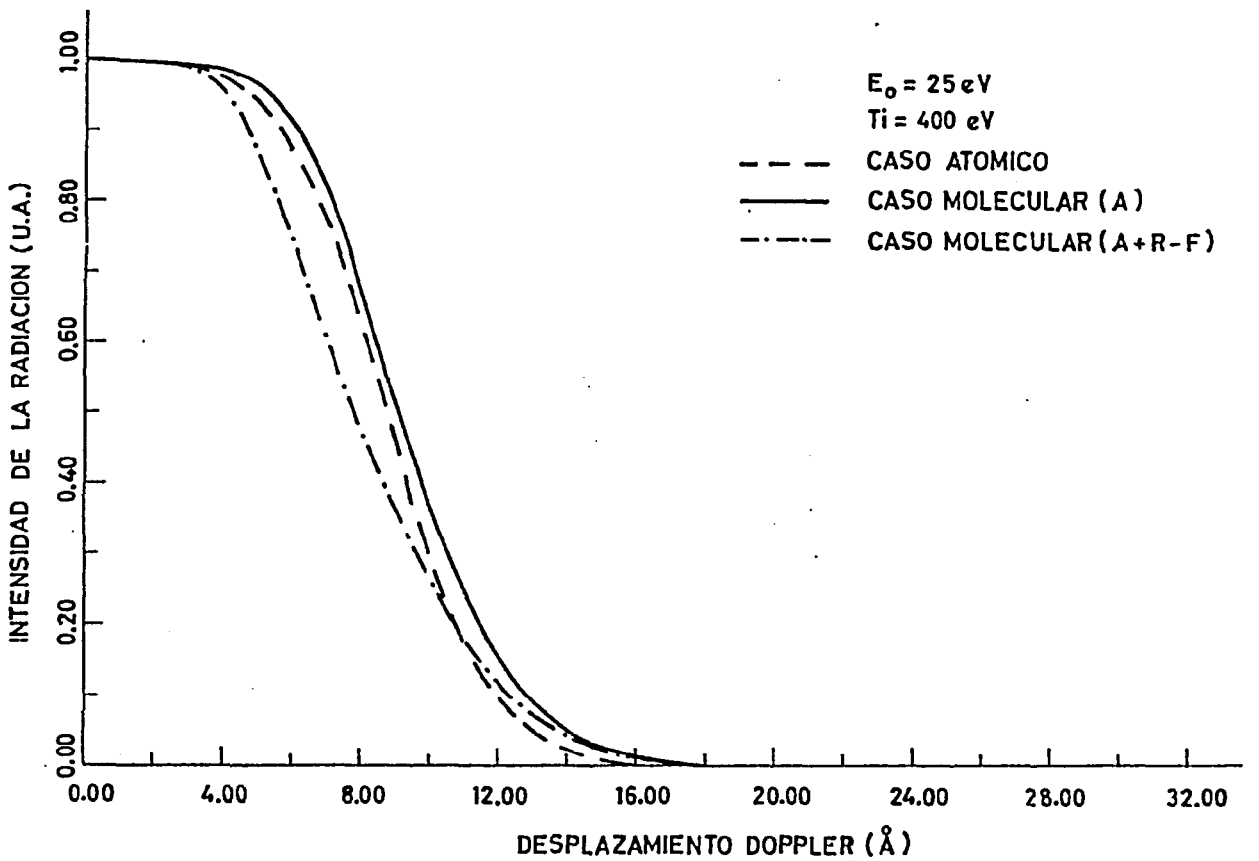


Fig. 6.- Comportamiento teórico de la emisión H_α de intercambio de carga; (a) caso atómico (b) caso molecular.

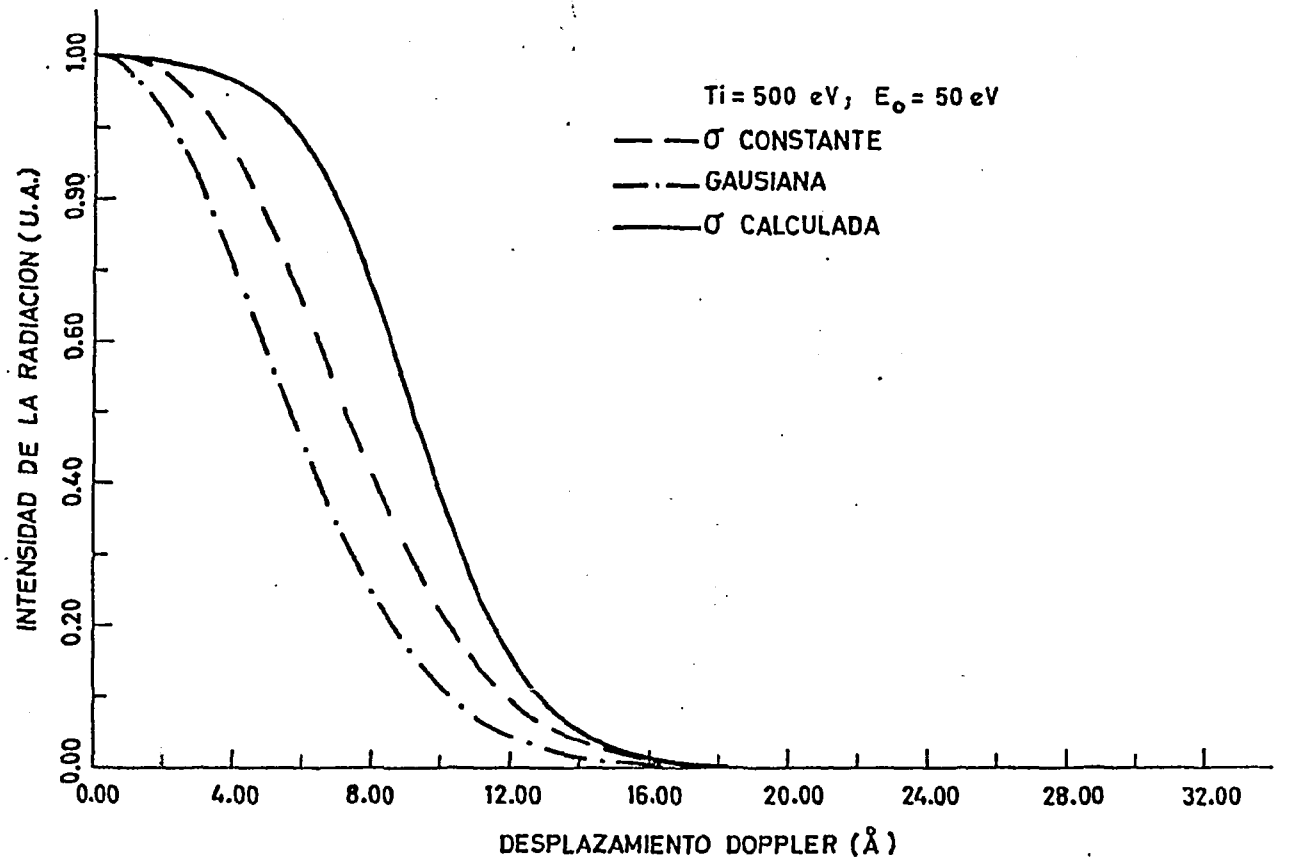


Fig. 7.- Ilustración del efecto de la forma de la sección eficaz sobre la forma de la línea de intercambio de carga (I) Sección eficaz constante, (II) Sección eficaz real (III) Forma gausiana.

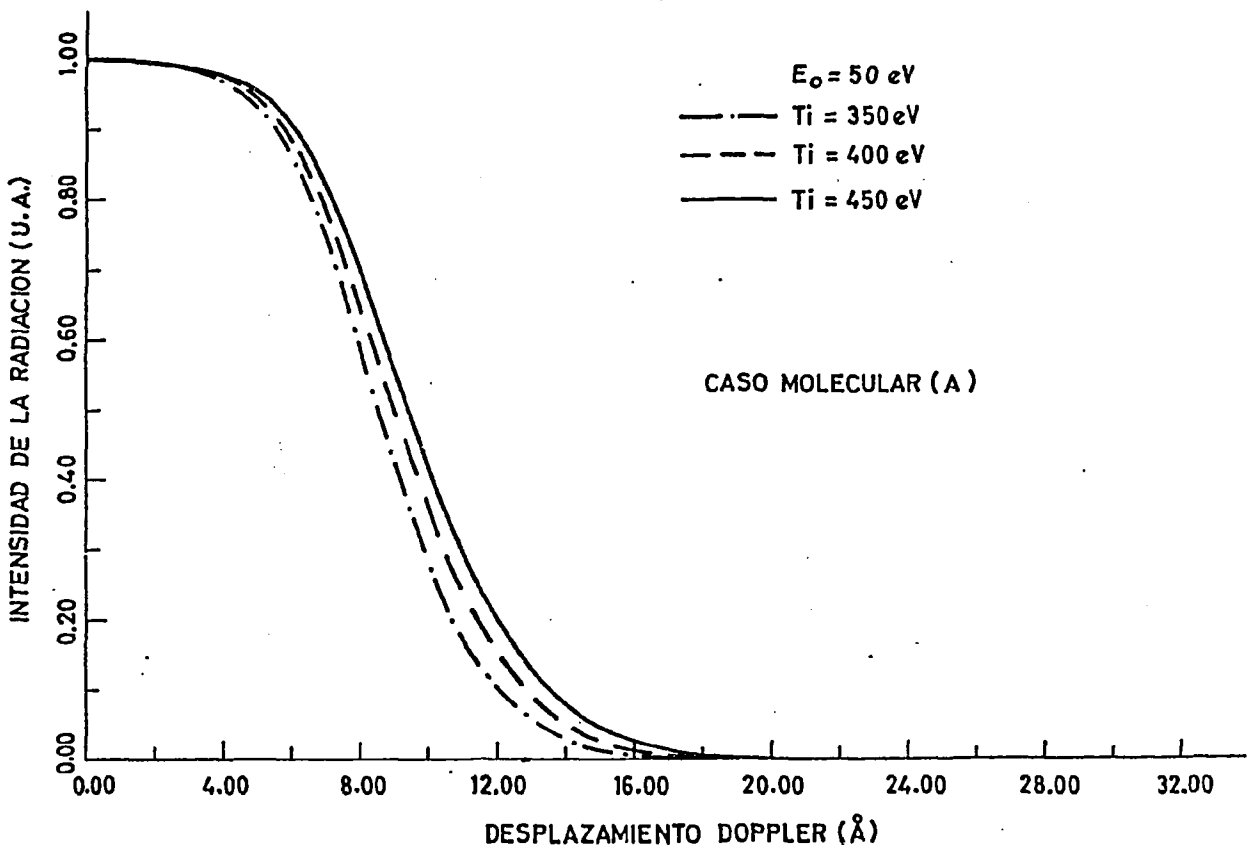


Fig. 8.- Variación de la forma de la línea en función de la temperatura iónica.

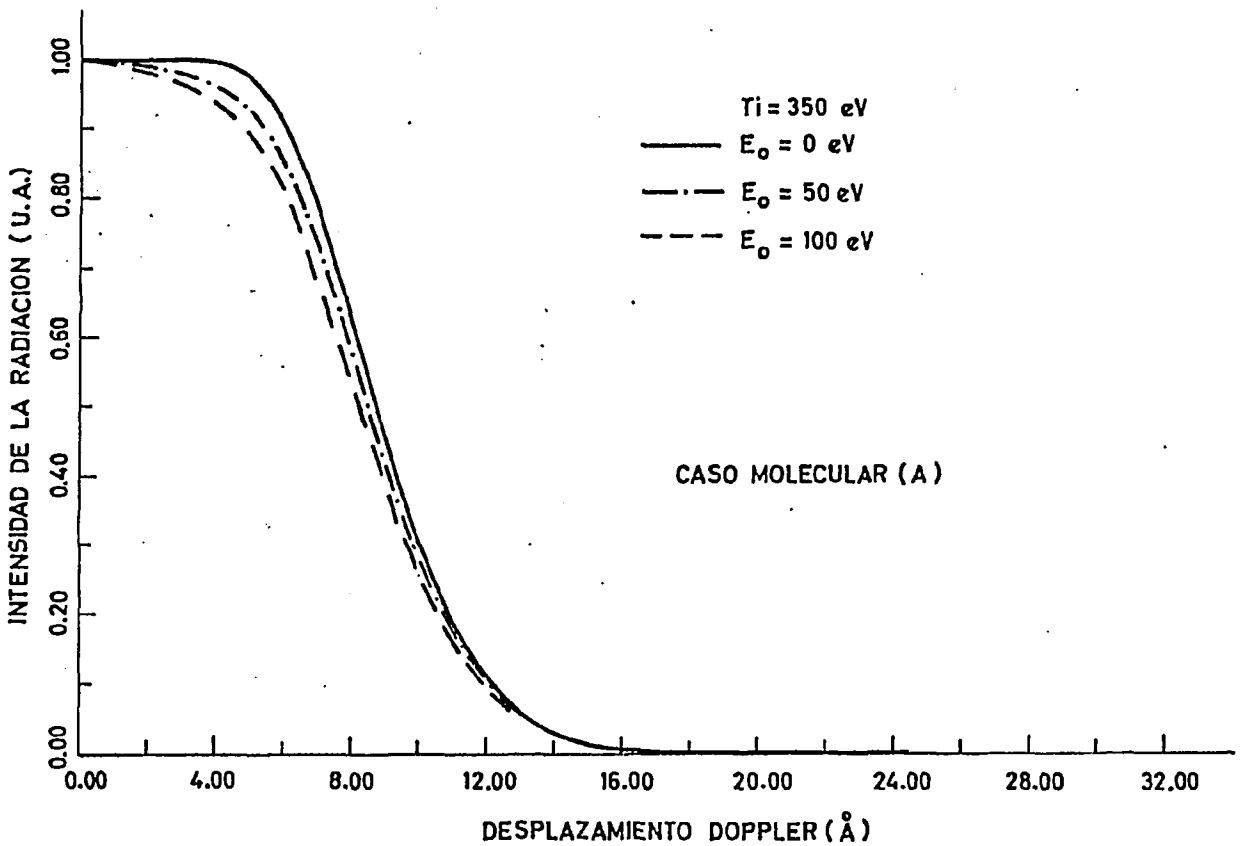


Fig. 9.- Influencia de la energía del neutro en la forma teórica de la línea.

nea en función de la temperatura iónica, para una energía fija del neutro. En la fig. 9 se ilustra la influencia de la energía de los neutros sobre la forma de la linea para una determinada temperatura iónica.

En las figs. 10, 11, 12 y 13 se comparan formas de línea experimentales con resultados teóricos de este trabajo. En todos los casos que se ilustran, y que se explican en la misma figura, se ha tratado de encontrar los valores de Ti y E_0 que daban un mejor acuerdo entre ambas formas. Se observa, como criterio general, que la curva teórica va siempre por encima de la experimental en la región de desplazamientos Doppler asociados a energías de neutros inferiores a unas centenas de eV.

La explicación más pausible de esta discrepancia, hay que buscarla, en nuestra opinión, en la competición de los procesos resonantes entre estados excitados, como los siguientes,

$$H^+ + H\ (31) \longrightarrow H\ (31) + H^+$$

con los que se han considerado en este trabajo. Para estimar la importancia de la contribución de estos procesos, hemos tenido en cuenta los valores teóricos de su sección eficaz (BATES, D.R. y OTROS, 1969) y hemos estimado la población del nivel excitado, teniendo en cuenta el modelo detallado desarrollado por (JOHNSON, L.C. y OTROS, 1972). A la vista de estas estimaciones se prevé que estos procesos puedan competir con los de captura electrónica desde el nivel fundamental, que son los que se han tratado en detalle a lo largo de este trabajo, en la zona de baja energía donde se presenta la discre-

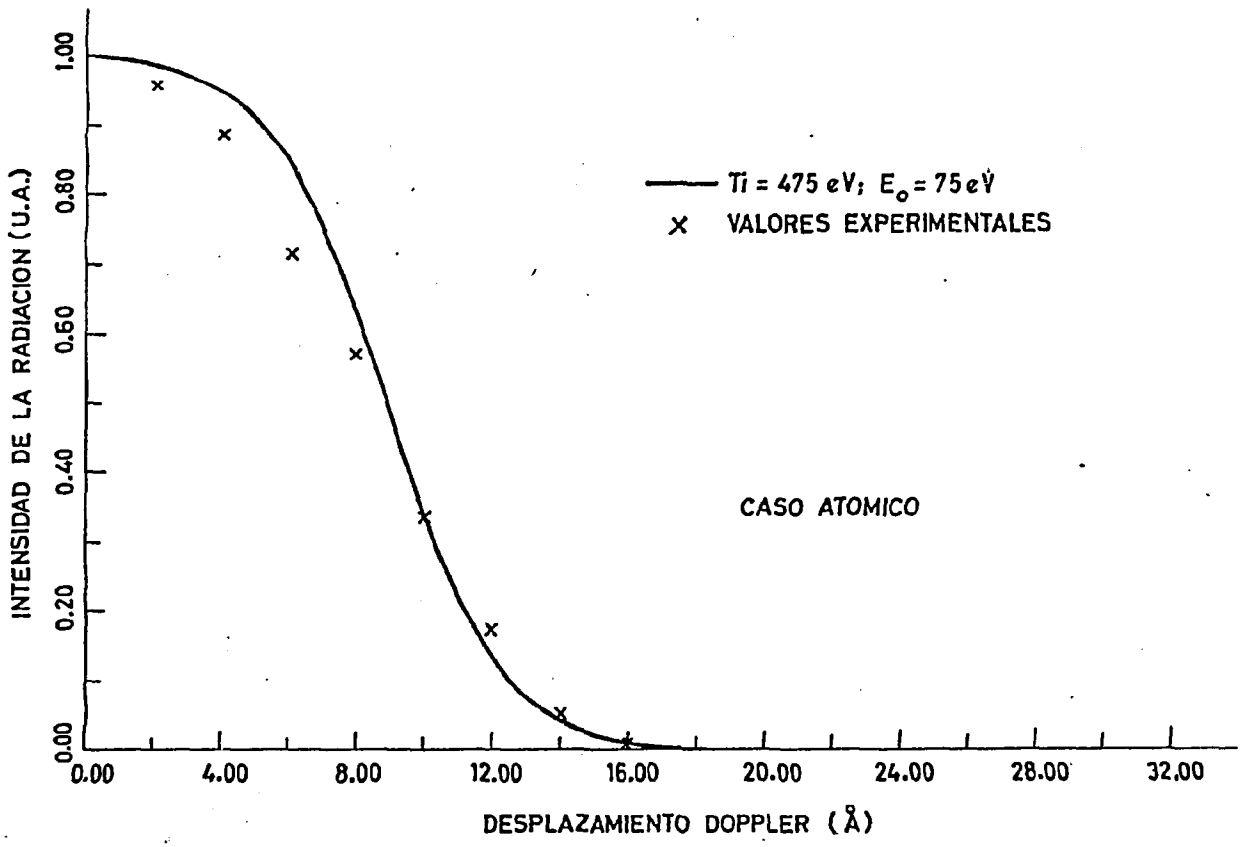


Fig. 10.- Comparación entre la forma de la línea experimental y la deducida teóricamente con neutros en estado atómico.

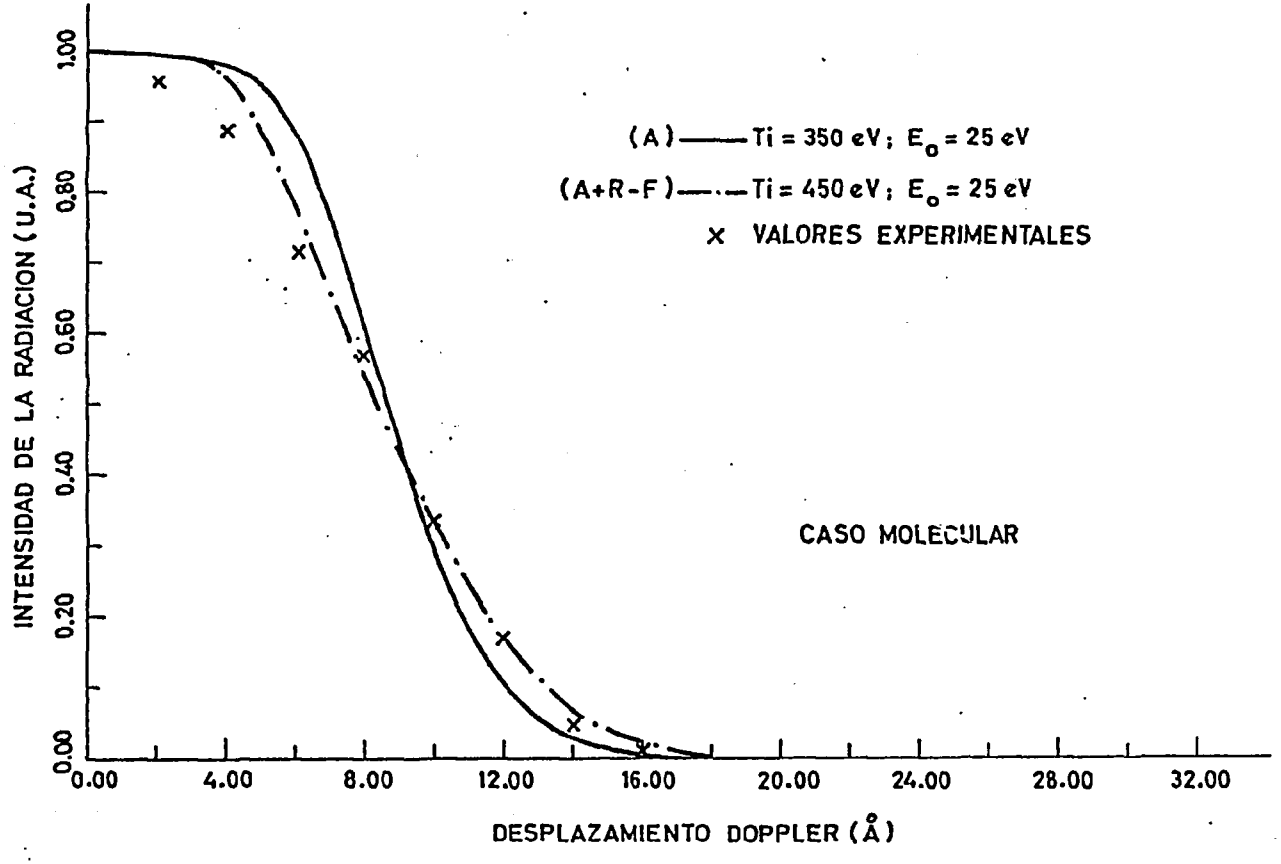


Fig. 11.- Comparación similar a la anterior en otras condiciones del plasma.

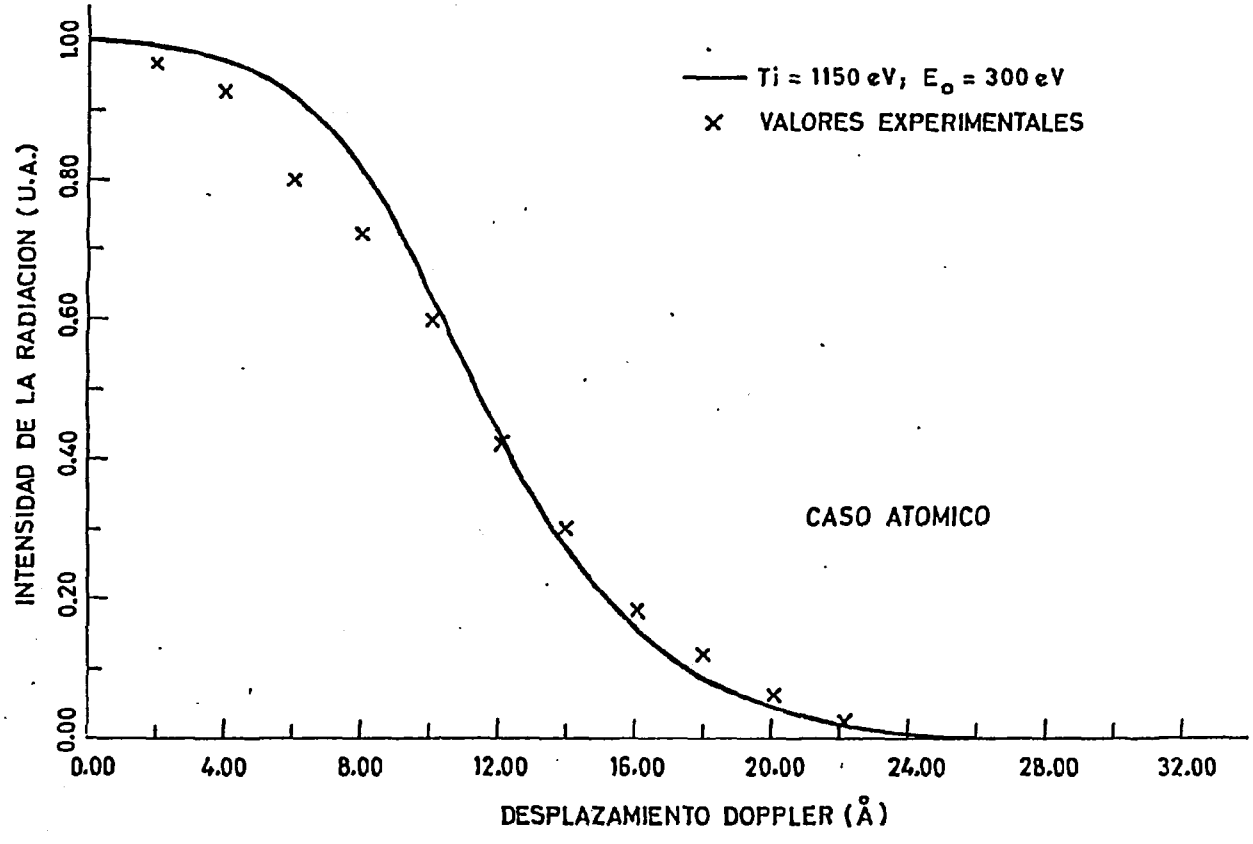


Fig. 12.- Comparación entre la forma de la línea experimental y la deducida teóricamente con neutros en estado molecular.

pancia teoría-experiencia en la forma de la línea.

De estas comparaciones, se observa también que la temperatura iónica que se obtiene es diferente según se suponga un blanco de hidrógeno atómico o molecular, siendo mayor la discrepancia en T_i entre estas dos hipótesis, en el caso de mayor temperatura iónica (figs. 11 y 12).

Los casos hasta aquí expuestos corresponden a energías de neutros inferiores a unas centenas de eV, como las que pueden adquirir los neutros, que por difusión penetran en el plasma, como consecuencia de intercambios de carga múltiples. Otro caso distinto, de enorme interés para la diagnosis del plasma en los más modernos dispositivos de confinamiento magnético, es aquel en que los neutros poseen energías de decenas de KeV. Estos haces neutros de alta energía al ser inyectados en el plasma sufren intercambio de carga, dando también lugar a estados excitados que emiten radiación H_α , reflejando en la forma de la línea la misma información que en los casos anteriores: T_i, derivas, etc. El programa de cálculo desarrollado permite determinar la forma de la línea también en este caso. Las figs. 14 y 15 muestran los resultados obtenidos en estas condiciones y en el caso de un haz atómico. A bajas temperaturas iónicas la forma de línea no se separa apreciablemente ni de la gaussiana Doppler ni de la curva de sección eficaz constante; pero a temperaturas iónicas próximas a los 10 KeV que son las de interés en los reactores termonucleares toroidales, es necesario tener en cuenta la forma calculada para deducir la T_i de una observación espectroscópica de esta naturaleza.

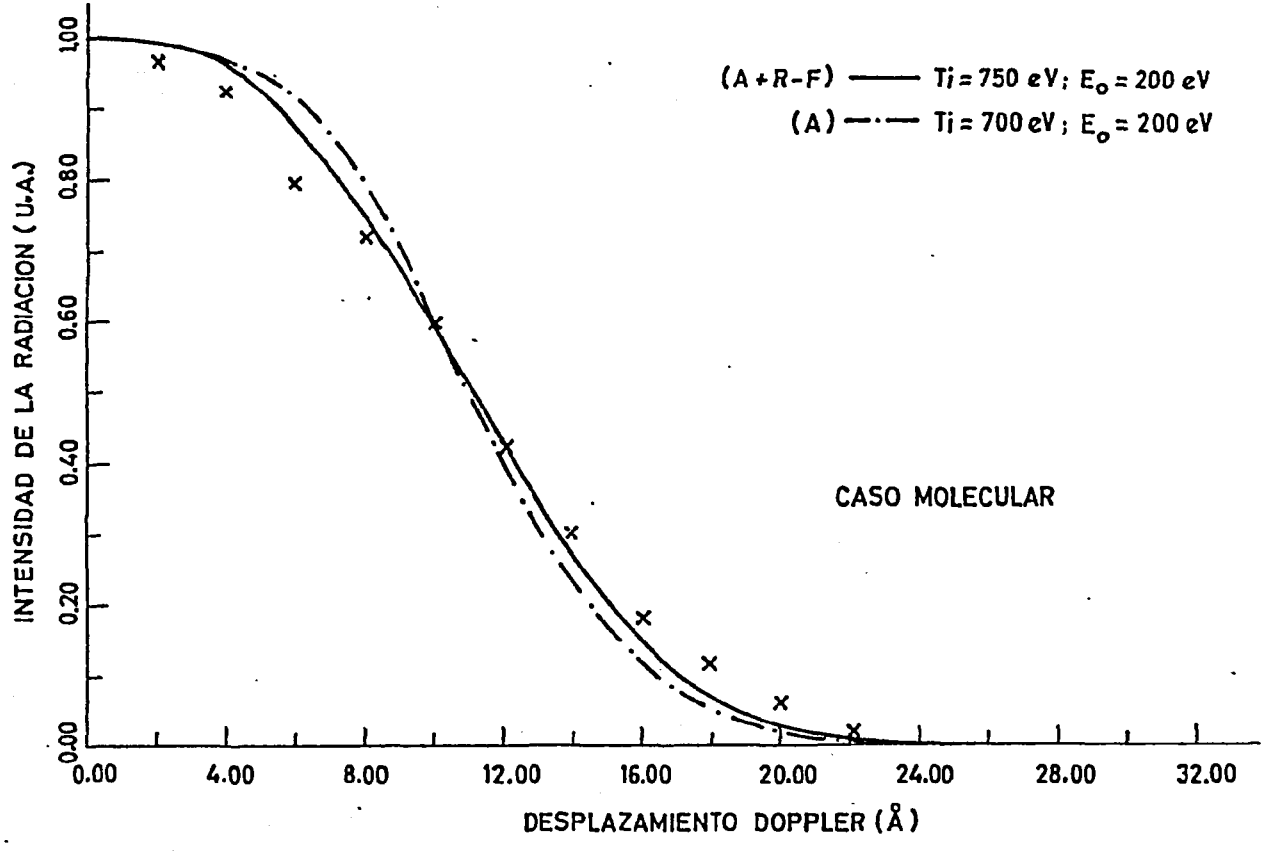


Fig. 13.- Comparación similar a la anterior para otra temperatura iónica del plasma.

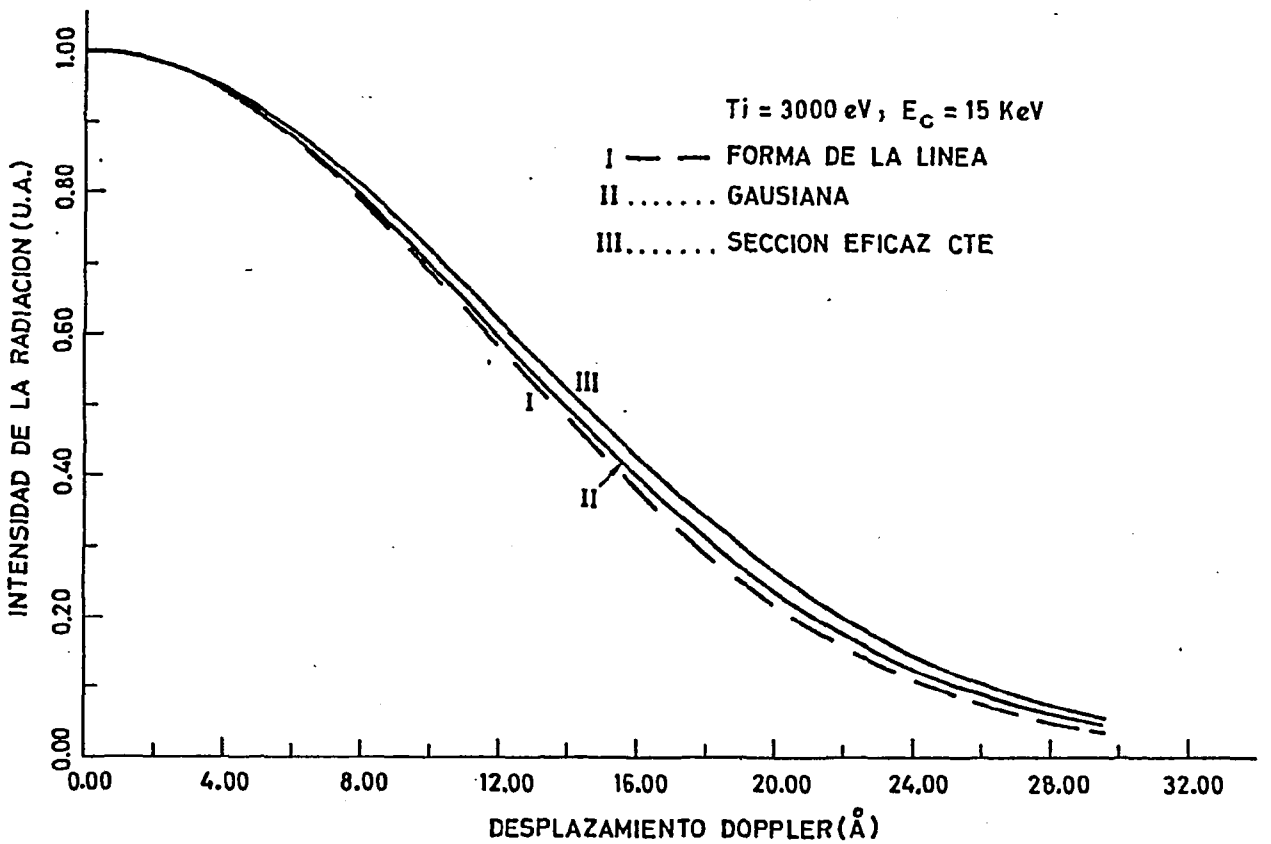


Fig. 14.- Comparación del efecto de sección eficaz sobre la forma de la línea, por inyección de neutros en estado átomico, (I) Sección eficaz real, (II) Forma gausiana, (III) Sección eficaz constante.

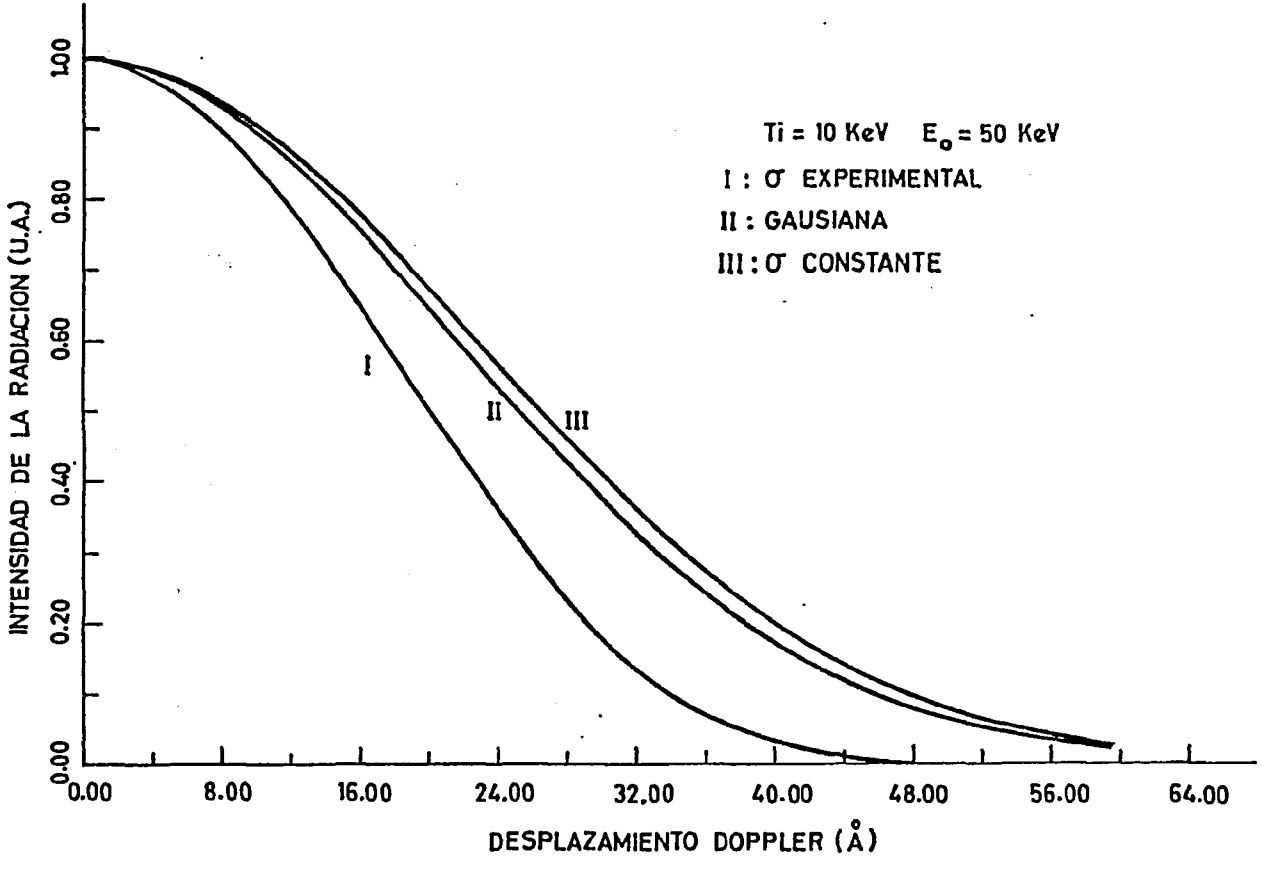


Fig. 15.- Comparación similar a la anterior para otra temperatura iónica del plasma.

Otro posible método para llevar a cabo la comparación entre formas de línea experimentales y teóricas, se basa en caracterizar la misma por su segundo momento, definido por

$$\langle \Lambda^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Lambda^2 F(\Lambda)\, d\Lambda$$

En la tabla III se dan valores del segundo momento de la línea H_α para ciertos valores discretos de la temperatura iónica y a energía nula del neutro, tanto en el caso atómico como en el molecular. Para este último caso se conocen los valores dados por (PATCH, R.W. y OTROS, 1974), que se incluyen en la tabla para comparación. Las discrepancias que se presentan entre ambas columnas de valores se deben a los diferentes valores de la sección eficaz tomados en este trabajo que pueden considerarse más completos por disponer actualmente de valores de secciones eficaces en la región de 1 a 10 KeV al menos para el nivel 3s, hecho que no se daba cuando Patch y colaboradores realizaron su trabajo, lo que habrá repercutido en un mayor error al seleccionar los valores de secciones eficaces.

Para comparar el método de los momentos tal como fue usado por Patch y colaboradores, con el empleado en este trabajo, basado en la comparación explícita de las formas de la línea teóricas y experimentales, se ha elaborado la tabla adjunta. En ella se trata con las dos curvas experimentales con las que hemos trabajado anteriormente, que llamaremos de baja temperatura caso a) y de alta temperatura caso b) para distinguirlas. En la tabla adjunta se dan los valores de la

temperatura iónica que se obtienen en los casos a y b según se use el método de los momentos o se recurra al método de la comparación explícita de las formas de línea.

Caso	Método de los momentos			Método explícito	
	Atomos	Moléculas		Atomos	Moléculas
	Este trabajo	Este trabajo	Patch et al.		
a	463	387	369	475 ± 50	400 ± 50
b	1077	760	812	1150 ± 50	725 ± 50

A la vista de esta última tabla, se puede afirmar que ambos métodos de deducir la temperatura son prácticamente equivalentes. El método explícito tiene sin embargo ventajas adicionales; puede ayudar a dilucidar si son átomos o moléculas los causantes de la interacción ya que la forma de la línea es sensiblemente distinta en ambos casos y por lo tanto se reduce el error que se comete cuando se utiliza solamente el método de los momentos. De otra parte, la comparación explícita de las formas de línea, permite un estudio más detallado sobre las hipótesis de trabajo.

Tabla III. Segundo momento de la línea H_α en función de la temperatura iónica, para un plasma maxweliano.

TEMPERATURA IONICA (eV)	BLANCO MOLECULAR		BLANCO ATOMICO
	Este trabajo	Patch y otros	Este trabajo
20	0.3310×10^1	0.4429×10^1	0.3222×10^1
30	.4807	.5990	.4461
40	.6062	.7437	.5522
50	.7250	.8807	.6562
60	.8445	0.1012×10^2	.7591
70	.9616	.1139	.8621
80	0.1068×10^2	.1262	.9654
90	.1168		0.1068×10^2
100	.1284	.1495	.1170
200	.2147	.2450	.2071
300	.2939	.3206	.2758
400	.3734	.3891	.3342
500	.4546	.4562	.3874
600	.5378	.5243	.4381
700	.6227	.5940	.4873
800	.7088	.6652	.5355
900	.7958		.5830
1000	.8832	.8106	.6301
2000	0.1741×10^3	0.1539×10^3	$.1120 \times 10^3$
300	.2522	.2260	.1610
4000	.3255	.2990	.2063
5000	.3953	.3718	.2464
6000	.4616	.4424	.2807

CONT...

TEMPERATURA IONICA (eV)	BLANCO MOLECULAR		BLANCO ATOMICO
	Este trabajo	Patch y otros	Este trabajo
7000	.5242	.5093	.3095
8000	.5830	.5719	.3348
9000	.6382		.3573
10000		.6837	.3754

CONCLUSIONES.

Las principales aportaciones de este trabajo, desarrollado dentro del proyecto Tokamak de la Junta de Energía Nuclear, pueden resumirse en los siguientes puntos.

1) Se ha desarrollado un método general para calcular la forma de las líneas de emisión en un plasma maxweliano, asociadas a procesos de intercambio de carga yendo a estados excitados.

2) Se ha elaborado un programa FORTRAN que permite calcular esta forma de línea en función de la sección eficaz del proceso de intercambio de carga, de la temperatura iónica del plasma y de la energía de los neutros.

3) Se ha aplicado al caso de la emisión H_α del hidrógeno y se ha puesto de manifiesto el interés que la observación de la forma de esta línea tiene para la medida de T_i en plasmas termonucleares.

4) De la comparación entre formas de líneas experimentales y teóricas, deducidas en este trabajo, se ha visto que este método espectroscópico permite medir la T_i con un error del 10 % aproximadamente, siempre que se pueda dilucidar si es un blanco atómico o molecular el que domina en el seno del plasma.

5) La forma explícita de estas líneas, deducida teóricamente, se presenta por vez primera en este trabajo. El suponer los neutros en movimiento hace posible una comparación realista entre formas de línea teóricas y experimentales de manera - explícita, en lugar de hacerlo a través del segundo momento, que es un valor integral, que enmascara la forma detallada - de la línea espectral.

BIBLIOGRAFIA.

ALEXEFF, I. y OTROS, Phy. Rev. Lett. 23, 281 (1969).

BETES, D.R., J. Phys. B, 2, 857 (1969).

DUSHIN, L.A. y OTROS, "Plasma Diagnostics". AEC-tr-6518 (1963).

GRIEM, H.R. Plasma Spectroscopy. Mc Graw-Hill Company (1964).

HASTED, J.B., Physics of Atomic Collisions. Butterworth L td. (1972).

HESS, W.R., Phys. Rev. 9A, 2036 (1974).

HUGHES, R.H. y OTORS, Phys. Rev. 5A, 1424 (1970).

JOHNSON, L.C. y HINNOV, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 13, 333 (1972).

LORENZ, A. y OTROS, "Survey of Atomic and Molecular Data Needs for Fusion". INDC(NDS)-72ILNA (1976).

LOYD, D.H. y DAWSON, H.R., Phys. Rev. 11A, 140 (1975).

MAY, R., Nuclear Fusion 4, 207 (1964).

MASSEY, H.S.W., Rept. Prog. Phys. 12, 248 (1949).

NEIDIGH, R.V. y OTROS, Bull. Am. Phys. Soc. 18, 556 (1973a).

NEIDIGH, R.V. y OTROS, Bull. Am. Phys. Soc. 18, 1308 (1973b).

PATCH, R.W. y OTROS. "Ion and Electron Temperatures in the - SUMMA Mirror Device by Emision Spectroscopy". NASA-TMX-71635 (1974).

PATK, R.L. y STONER, R.E. Ap. J., 179, L89 (1973).

PETROV, M.P., en Physics of Ionized Gases. Editado por V. - Vujnovie (IFIS) (1974).

RAND McNALLY, J. y NEIDIGH, R.V. Nuclear Fusion 13, 919 (1973).

RAPP, D. y FRANCIS, W.E., The Jour. Chem. Phys. 37, 2631 (1962).

STEBBINGS, R.F. y OTROS, Phys. Rev. 138, 1312 (1965).

THOMAS, E.W. Excitation in heavy particle collisions Wiley-Interscience (1972).

WHARTON, C. Course on Plasma Diagnostic and Data Acquisition Systems. Editrice Compositori. Bologna (1975).

A P E N D I C E

PROGRAMA PARA EL CALCULO DE LA FUNCION FORMA DE LA LINEA Y SEGUNDO MOMENTO.

```
      DIMENSION XGAUS(500)
      DIMENSION GA(500),XNFO(500)
      DIMENSION IG(4),NG(2),VNM(10),TAN(2),NTTT(10,5)
      DIMENSION NC(5),VI(2)
      COMMON/LA/XMION,XMNEU,XLACER,C,GAMMA
      DATA NCT/5*60/
      READ(5,97) ((NTTT(I,J),I=1,10),J=1,5)
97    FORMAT(10A6)
      READ(5,91) ACTE,BCTE
91    FORMAT(2F5.2)
      READ(5,98) LPT,TIN,RCTE
98    FORMAT(I5,2F5.2)
      READ(5,100) DION,DNEU
100   FORMAT(2E8.2)
      READ(5,200) N,DELLA,XLACER
200   FORMAT(I5,2F7.2)
      READ(5,300) ERO,DE,N1
300   FORMAT(F7.3,F7.3,I2)
      READ(5,400) TI,DT,N2
400   FORMAT(F7.2,F8.3,I2)
      XMION=1.6726E-24
      XMNEU=XMION
      PI=3.14159
      C=3.E10
      MC=0
      DO 350 IK=1,N2
      TIT=TI+DT*FLOAT(IK-1)
      DO 250 IL=1,N1
      EROT=ERO+DE*FLOAT(IL-1)
      TION=TIT*1.6022E-12
      ECERO=EROT*1.6022E-12
      DO 10 I=1,N
      GA(I)=DELLA*FLOAT(I-1)
      GAMMA=XMION*C**2*GA(I)**2/(2.*XLACER**2)
      CTE=SQRT(XMION/(2.*TION))*C/(XLACER*(PI**1.5))
      CP=EXP(-GAMMA/TION)
      CTE=CTE*CP
      XNFO(I)=CTE*SIGMV(ECERO,GA(I),TION)
      SCTE=40.9107E7
      XGAUS(I)=EXP(-SCTE*GA(I)**2/(TIT*XLACER**2))
10    CONTINUE
C
C     CALCULO DEL AREA DE LA LINEA
C
      S=0.
      LN=N-1
      DO 20 J=1,LN
      S=S+(XNFO(J)+XNFO(J+1))*DELLA
20    CONTINUE
```

```
C
C        CALCULO DEL SEGUNDO MOMENTO DE LA LINEA
C
      SP=0.
      DO 40 IJ=1,N
40    SP=SP+(DELLA*FLOAT(IJ))**2*(XNFO(IJ)+XNFO(IJ+1))*DELLA
      WT=XNFO(1)
      RT=XNFO(1)/(4.*PI)
C
C        NORMALIZACION DE LA LINEA AL VALOR CENTRAL
C
      DO 50 K=1,N
50    XNFO(K)=XNFO(K)/WT
      IG(1)=2
      IG(2)=2
      IG(3)=1
      NG(1)=N
      TAM(1)=19.0
      TAM(2)=14.0
      VI(1)=TIT
      VI(2)=EROT
      CALL GRAFIC(IG,NG,GA,XNFO,E,VMM,TAM,NTIT,NCT,VI)
C
C     DIBUJA LA GAUSIANA NORMALIZADA AL VALOR CENTRAL
C
      IG(1)=3
      CALL GRAFIC(IG,NG,GA,XGAUS,E,VMM,TAM,NTIT,NCT,VI)
C
C        SALIDA DE RESULTADOS
C
      WRITE(6,1000) XLACER,TIT,EROT
1000  FORMAT(10X,'   CONDICIONES DEL CALCULO'//5X,' LAMBDA= ',E12.5,' TE
     +MPERATURA IONICA= ',E12.5//10X,'ENERGIA DEL NEUTRO=',E12.5///)
      WRITE(6,500) RT,S,SP
500   FORMAT(5X,'   CENTRO DE LA LINEA ',E12.5,///5X,'   AREA=  ',E12.5
     +,///5X,'   MOMENTO=    ',E12.5)
      WRITE(6,580)
580   FORMAT(5X,'  FORMA DE LA LINEA NORMALIZADA AL VALOR CENTRAL ')
      WRITE(6,600) (XNFO(I),I=1,N)
600   FORMAT(10E12.5)
250   CONTINUE
350   CONTINUE
      IG(1)=3
      CALL GRAFIC(IG,NG,GA,XNFO,E,VMM,TAM,NTIT,NCT,VI)
      STOP
      END
```

```
      FUNCTION SIGMV(ENEU,GA,TION)
      DIMENSION WLAG(20),WLEG(20),ALAG(20),ALEG(20)
      COMMON/LA/XMION,XMNEU,XLACER,C,GAMMA
      WLEG(1)=9.015626E-1
      WLEG(2)=9.041172E-1
      WLEG(3)=7.699026E-1
      WLEG(4)=5.673170E-1
      WLEG(5)=3.070315E-1
      WLEG(6)=1.253341E-1
      ALEG(1)=4.717534E-2
      ALEG(2)=10.693734E-2
      ALEG(3)=16.807473E-2
      ALEG(4)=20.316703E-2
      ALEG(5)=23.349754E-2
      ALEG(6)=24.014705E-2
      WLAG(1)=13.779347E-2
      WLAG(2)=72.945455E-2
      WLAG(3)=18.063403E-1
      WLAG(4)=34.014337E-1
      WLAG(5)=55.524961E-1
      WLAG(6)=83.301527E-1
      WLAG(7)=11.843706
      WLAG(8)=16.279258
      WLAG(9)=21.996586
      WLAG(10)=29.920697
      ALAG(1)=30.844112E-2
      ALAG(2)=40.111903E-2
      ALAG(3)=21.906209E-2
      ALAG(4)=5.206746E-2
      ALAG(5)=9.50152E-3

      ALAG(6)=7.5301E-4
      ALAG(7)=2.626E-5
      ALAG(8)=.42E-6
      ALAG(9)=0.0
      ALAG(10)=0.0
      N=10
      VNEU=SQRT(2.*ENEU/XMNEU)
      M=6
      K1=M+1
      M=M*2
      J=1
      DO 1 I=K1,M
      WLEG(I)=-WLEG(J)
      ALEG(I)=ALEG(J)
1     J=J+1
      TINT=0.
      DO 2 J=1,N
      DO 2 I=1,M
      ER=TION*WLAG(J)+GAMMA+VNEU**2*XMION/2.+VNEU*SQRT(XMION*(2.*TION*WL
     +AG(J)+2.+GAMMA-XMION*(C**2)*(GA**2)/(XLACER**2)))*WLEG(I)
      VREL=SQRT(2.*ER/XMION)
      ER=ABS(ER)
      Y=SIGMA(ER)
      TP=SQRT(1.-WLEG(I)**2)
      FDE=Y*VREL/TP
      TINT=TINT+ALAG(J)*ALEG(I)*FDE
2     CONTINUE
      SIGMV=TINT
      RETURN
      END
```

```
      FUNCTION SIGMA(E)
      DIMENSION A(20)
      A(1)=.14024E2
      A(2)=.06909
      A(3)=-.10760E1
      A(4)=-.35875E-1
      A(5)=.57011
      A(6)=.14265E-1
      A(7)=-.91306E-1
      A(8)=-.69150E-4
      A(9)=.75915E-2
      A(10)=-.09157E-4
      A(11)=-.24947E-3
      E=E/1.60282E-9
      TS=0.
      IF(E-12.0485E-3) 20,20,40
      SIGMA=0.
      GOTO 50
      DO 10 I=1,11
      TS=TS+A(I)*ALOG(E)**(I-1)
      CONTINUE
      ST=EXP(TS)
      SIGMA=ST*5.E-24
      RETURN
      END
```