

Influencia del Proceso de Recombinación
Dielectrónica del MgII en el Continuo
Infrarrojo de las Estrellas Be. ¹

Alicia Cruzado

La Plata, 1996

¹Tesis para obtener el Título de Doctora en Astronomía

A mis hijos: Paula, Facundo, Bárbara y Antonella; a quienes "robé" el tiempo para realizar este trabajo.

Indice

0.1	Introducción	7
1	Nociones Preliminares	9
1.1	Datos Observacionales	9
1.2	Teorías Desarrolladas Hasta El Presente	13
1.2.1	Emisión Libre-Libre y Libre-Ligado del H	13
1.2.2	Reemisión Térmica desde Partículas de Polvo	14
1.2.3	Existencia de una Compañera Fría	14
2	Descripción Física del Proceso y su Inserción en la Envoltura Estelar	15
2.1	Por Qué RD del MgII	15
2.2	Recombinación Dielectrónica	17
2.3	Estructura Atómica del Mg	18
2.4	Propiedades Físicas de la Zona Estudiada	19
2.5	Inserción en la Envoltura Estelar	22
2.6	Evaluación de la Influencia de la RD del MgII en el Continuo de la Estrella	26
2.6.1	Geometría del Problema	26
2.6.2	Comparación con las Observaciones	29
3	Metodología Empleada para el Cálculo	30
3.1	Teoría Básica de la Estructura y Espectros Atómicos	30
3.2	Cálculo de las Autofunciones Radiales	32
3.3	Cálculo de las Integrales Radiales	36
3.4	Esquemas de Acoplamiento	40
3.5	Reglas de Selección	42
3.6	Aplicaciones al Átomo de Mg	45

3.7	Programas Fortran Utilizados	45
4	Resultados	48
4.1	Primer Grupo de Configuraciones	49
4.1.1	Comportamiento del Flujo con las Condiciones Físicas de la Envoltura Estelar.	51
4.1.2	Comportamiento del Flujo con las Configuraciones A- tómicas	60
4.1.3	Comportamiento del Flujo con los Parámetros estelares (T_{eff} y R_*).	64
4.2	Segundo Grupo de Configuraciones.	65
4.2.1	Comportamiento del Flujo con las Condiciones Físicas de la Envoltura Estelar.	68
4.2.2	Comportamiento del Flujo con las Configuraciones A- tómicas	74
4.3	Estimación del Flujo Emitido por Todas las Configuraciones Atómicas.	78
4.3.1	Configuraciones Ligadas	78
4.3.2	Configuraciones Autoionizantes	81
4.4	Consideraciones sobre la opacidad.	83
5	Rango de Validez de las Aproximaciones. Incertezas.	85
5.1	Rango de Validez en la Temperatura.	85
5.2	Rango de Validez en la Densidad electrónica.	86
5.3	Error Cometido al considerar $P^A \gg P^R$ en todos los casos . .	89
5.4	Influencia de las Transiciones Radiativas Espontáneas e In- ducidas	93
5.5	Error en la Determinación del Número de Átomos de MgII . .	98
6	Conclusiones	101

Lista de Figuras

1.1	<i>Observaciones fotométricas de 4 estrellas Be. Figura extraída de Allen D.A, 1973, MNRAS 161, 145</i>	10
1.2	<i>Observaciones fotométricas de 4 estrellas Be. Figura extraída de Allen D.A, 1973, MNRAS 161, 145</i>	11
1.3	<i>Observaciones fotométricas de 3 estrellas Be. Figura extraída de Woolf et al, 1970, Astron. Astrophys., 9, 252-258</i>	12
2.1	<i>Densidad de átomos una y dos veces ionizados de los elementos con apreciable abundancia cósmica en función de su número atómico</i>	16
2.2	<i>Distribución de la temperatura con la distancia a la estrella . .</i>	20
2.3	<i>Distribución de la densidad de partículas con la distancia a la estrella</i>	21
2.4	<i>Representación esquemática de una estrella Be y su envoltura</i>	27
4.1	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la temperatura electrónica</i>	52
4.2	<i>Distribución del flujo con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados, para una densidad electrónica de $1E9 \text{ part./cm}^3$.</i>	53
4.3	<i>Distribución del flujo con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados, para una densidad electrónica de $1E10 \text{ part./cm}^3$.</i>	54
4.4	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la densidad electrónica</i>	55

4.5	<i>Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la densidad electrónica para las longitudes de onda de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), correspondiente a una temperatura electrónica de 5500K</i>	56
4.6	<i>Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la densidad electrónica para las longitudes de onda de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), correspondiente a una temperatura electrónica de 3500K</i>	57
4.7	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes del volumen del material emisor</i>	58
4.8	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda, para cuatro grupos de configuraciones que dan origen a niveles ligados.</i>	61
4.9	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes.</i>	62
4.10	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes.</i>	63
4.11	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda, para el primer grupo de configuraciones, utilizando las probabilidades calculadas por el programa de Cowan en un caso y la expresión hidrogenoide en el otro</i>	66
4.12	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la temperatura electrónica</i>	69
4.13	<i>Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), para densidades electrónicas de $1E9$ y $1E10$ part./cm³.</i>	70
4.14	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la densidad electrónica</i>	71
4.15	<i>Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la densidad electrónica para las longitudes de onda de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), para temperaturas electrónicas de 5500K y 3500K.</i>	72
4.16	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes del volumen del material emisor</i>	73

4.17	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda, para tres grupos de configuraciones que dan origen a niveles ligados.</i>	75
4.18	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes. . .</i>	76
4.19	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes. . .</i>	77
4.20	<i>Distribución del flujo originado en la RD del MgII solamente, con la longitud de onda. Curvas obtenidas con el primer grupo de configuraciones</i>	78
4.21	<i>Distribución del flujo originado en la RD del MgII solamente, con la longitud de onda. Curvas obtenidas con el segundo grupo de configuraciones</i>	79
4.22	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda sumando los efectos de los dos grupos de configuraciones, para una temperatura electrónica de 5500K y para dos posibles valores del volumen del material emisor</i>	80
4.23	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda sumando los efectos de los dos grupos de configuraciones, para una temperatura electrónica de 3500K y para dos posibles valores del volumen del material emisor</i>	82
4.24	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda correspondiente al primer grupo de configuraciones, para un medio ópticamente opaco. Se muestra también la curva correspondiente a un medio ópticamente delgado para comparación.</i>	84
5.1	<i>Máximo valor de N_e aceptable si despreciamos las colisiones en función de T_e para cuatro diferentes valores de n_t.</i>	88
5.2	<i>Fracción de átomos que abandonan un dado estado emitiendo radiación, en función del número atómico. La línea llena representa la curva teórica y los símbolos los datos experimentales. Figura extraída de Condon y Shortley, 1953</i>	92
5.3	<i>Distribución del flujo con la longitud de onda para valores fijos de T_e, N_e y V. Dos de las curvas fueron obtenidas teniendo en cuenta las transiciones inducidas desde los niveles ligados, suponiendo un factor de dilución de 1/25 en un caso y 1/100 en el otro; la restante curva fue obtenida despreciando dichas transiciones</i>	96

5.4	<i>Distribución del cociente $F/N(\text{MgII})$ con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados, para una densidad electrónica de $1E9 \text{ part./cm}^3$.</i>	100
6.1	<i>Observaciones fotométricos de la estrella k Dra. Datos extraídos de N. J. Woolf, W. A. Stein, y P. A. Strittmatter, 1970, Astron. and Astrophys., 9, 252-258.</i>	103
6.2	<i>Observaciones fotométricos de la estrella 48 Per. Datos extraídos de N. J. Woolf, W. A. Stein, y P. A. Strittmatter, 1970, Astron. and Astrophys., 9, 252-258.</i>	104

0.1 Introducción

Las estrellas de tipo espectral **B** son estrellas calientes, con temperaturas efectivas que oscilan entre 10000K y 21000K y radios entre $2.5R_s$ y $7R_s$.

Aproximadamente un 20% de estas estrellas exhiben líneas de emisión en la región espectral visible, llamándose por ello estrellas **Be**; las que, además, muestran líneas prohibidas en emisión, son conocidas como estrellas **B[e]**.

Las líneas en emisión no son la única manifestación del llamado "fenómeno *Be*"; es un hecho observacional que la mayoría de las estrellas **Be** y **B[e]** presentan en sus espectros un exceso de flujo, con respecto al de una estrella **B** normal del mismo tipo espectral, en la zona del infrarrojo (ver figuras 1.1 y 1.2).

Este exceso varía en magnitud y forma de estrella a estrella, obedeciendo, sin embargo, ciertas tendencias que pueden deducirse del análisis de las observaciones:

- La mayoría de las estrellas **Be** presentan un exceso en el índice de color (K-L) de unas décimas de magnitud; las estrellas **B[e]** (con líneas de emisión prohibidas en sus espectros), en cambio, muestran excesos mayores que una magnitud (Allen, 1977).
- Dentro del grupo de las estrellas **Be**, exhiben mayor exceso las de tipo espectral más temprano (Gehrz y otros, 1974).
- Las estrellas **Be** que tienen en emisión las últimas líneas de la serie de Paschen, muestran un flujo en los 10μ siete veces mayor que el flujo de una estrella **B** normal; mientras que, las estrellas que presentan el final de la serie de Paschen en absorción, tienen un flujo sólo 2.5 veces mayor (Briot, 1977).

Para explicar el origen de este exceso se han desarrollado varias teorías que permiten interpretar satisfactoriamente sólo parte de las observaciones:

- Emisión debida a procesos libre-libre(f-f) y libre-ligado(f-b) de átomos de H, que tienen lugar en ciertas zonas de la envoltura estelar.
- Reemisión térmica desde partículas de polvo presentes en la envoltura estelar.

- Emisión de un continuo adicional debido a la presencia de una compañera fría.

Este trabajo propone como una nueva alternativa para interpretar las observaciones, un proceso atómico no tenido en cuenta hasta ahora: recombinación dielectrónica del MgII, proceso que tendría lugar en la envoltura templada.

Capítulo 1

Nociones Preliminares

1.1 Datos Observacionales

Los datos observacionales con los que se cuenta de la zona espectral infrarroja de estrellas **Be**, son fundamentalmente datos fotométricos ¹ (fotometría de banda ancha o intermedia).

Los excesos de flujo que revelan estas observaciones muestran una gran variedad en magnitud y forma, como puede verse en las figuras 1.1, 1.2 y 1.3.

En las figuras 1.1 y 1.2, extraídas del trabajo de Allen, las líneas quebradas representarían el flujo emitido desde partículas de polvo circumestelar, hipótesis con la que se intentó explicar las observaciones.

En la 1.3, extraída del trabajo de Woolf, se observan las curvas que representarían emisión f-f originada en un gas ionizado, y emisión desde partículas de polvo.

¹Johnson et al., 1966; Woolf et al, 1970; Allen, 1973; Gehrz et al., 1974; Barlow and Cohen, 1977

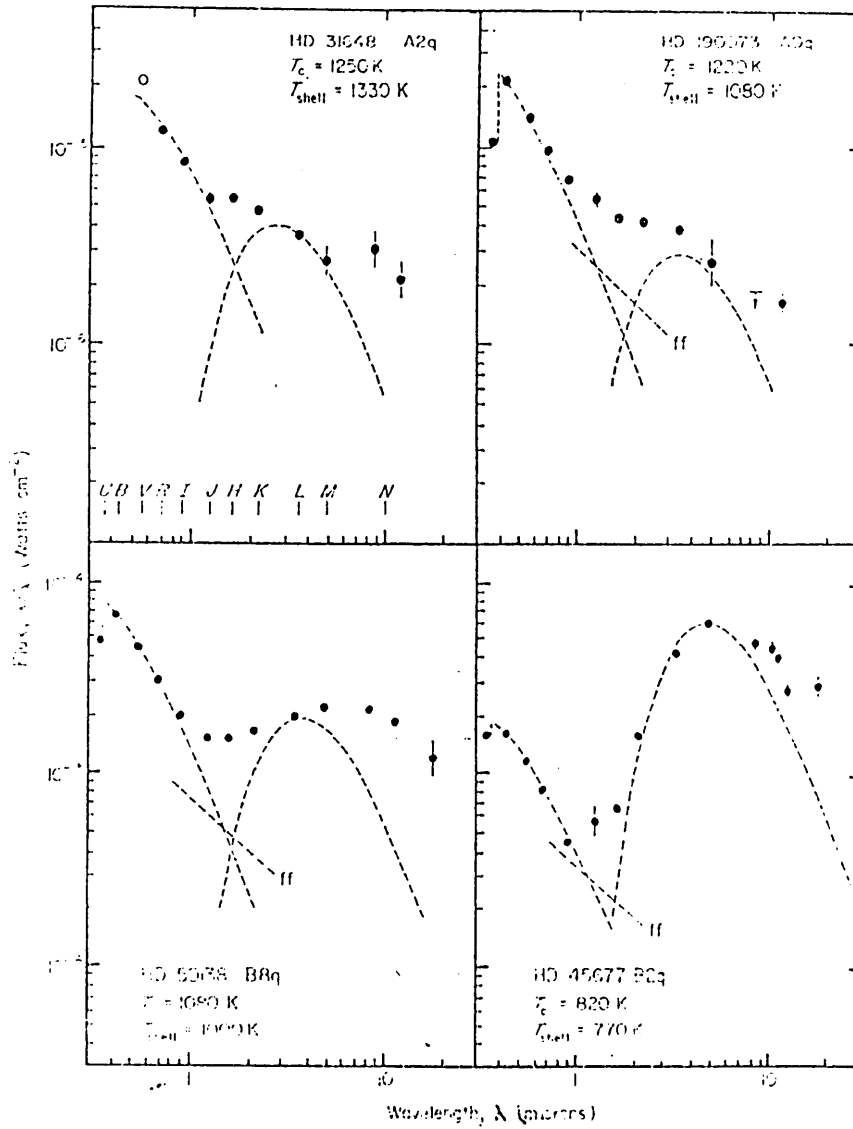


Figura 1.1: Observaciones fotométricas de 4 estrellas Be. Figura extraída de Allen D.A, 1973, MNRAS 161, 145

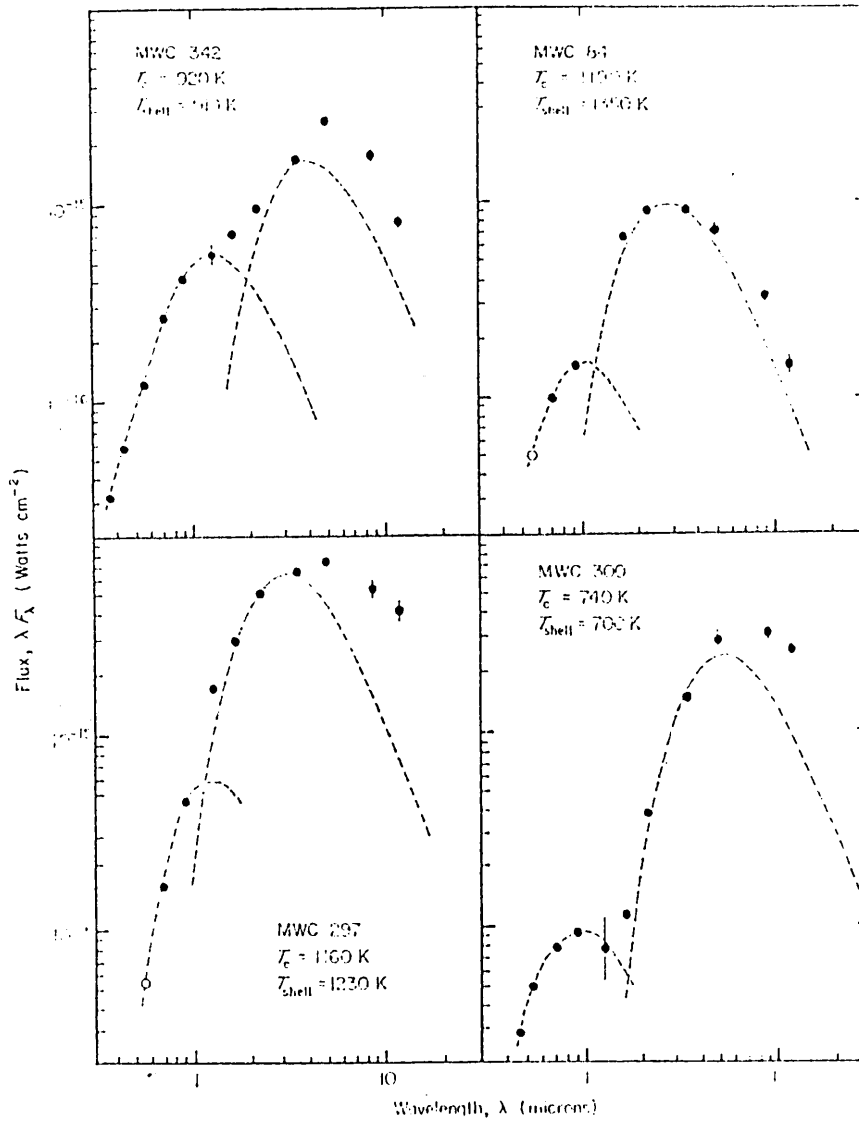


Figura 1.2: Observaciones fotométricas de 4 estrellas Be. Figura extraída de Allen D.A, 1973, MNRAS 161, 145

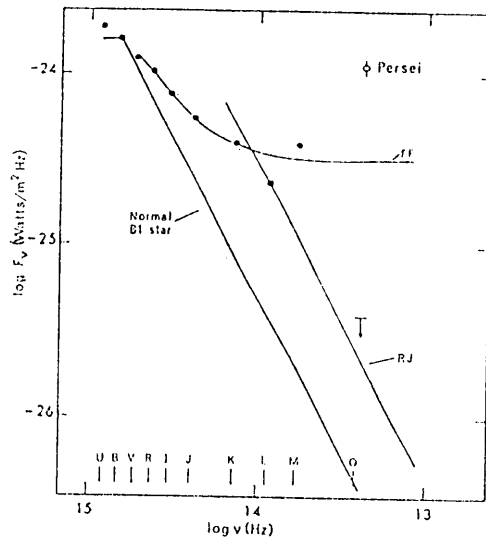
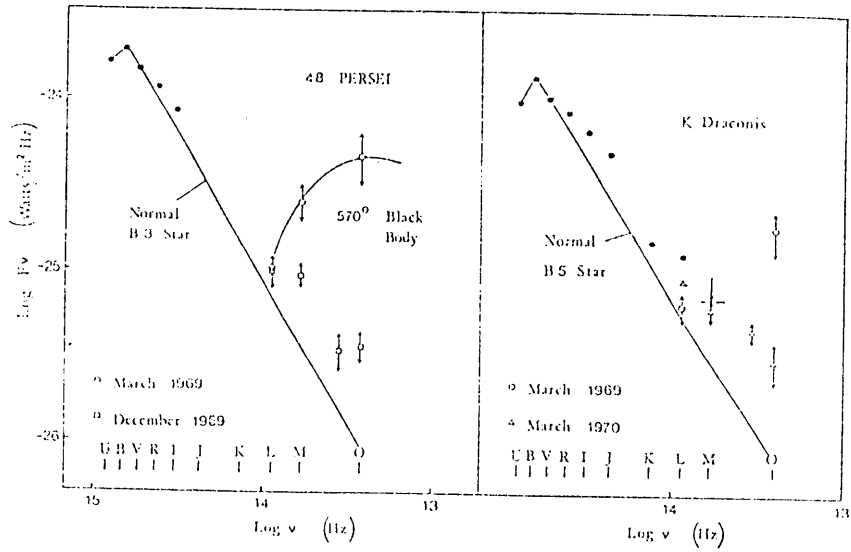


Figura 1.3: Observaciones fotométricas de 3 estrellas Be. Figura extraída de Woolf et al, 1970, *Astron. Astrophys.*, 9, 252-258

1.2 Teorías Desarrolladas Hasta El Presente

1.2.1 Emisión Libre-Libre y Libre-Ligado del H

Numerosos trabajos se han realizado con el fin de estudiar la influencia de los procesos ff y bf del H en el flujo infrarrojo de las estrellas **Be**.

En los primeros trabajos² se calculó la emisión f-f del H originada en una envoltura de gas, ionizado por la radiación fotosférica y con una temperatura electrónica (T_e) del orden de $10^4 K$, que rodeaba la estrella; esto explicó excesos de sólo pocas décimas de magnitud.

Trabajos posteriores³ tuvieron en cuenta también el proceso de emisión f-b para explicar el pico que, en los alrededores de 1μ , se observa en algunas estrellas; sin embargo el pico encontrado teóricamente está corrido cerca de 3000\AA hacia el rojo con respecto al observado.

Más tarde⁴ se consideró una envoltura más fría ($T_e \simeq 3 \times 10^3 K$) y se tuvo en cuenta, además de las regiones HII, otras regiones donde el H es neutro pero los metales están ionizados, siendo estos entonces una importante fuente de electrones libres; con estas nuevas hipótesis se pudieron explicar excesos mayores.

Posteriormente⁵ se estudió la influencia de una región coronal que, bajo ciertas condiciones, produciría gran aumento en el flujo de radiación infrarroja.

Muchos trabajos analizaron luego la influencia sobre el flujo infrarrojo de los procesos de emisión f-f y f-b del H asumiendo diferentes estructuras de la atmósfera; uno de ellos⁶ supone la existencia de un disco circumestelar isotérmico, concentrado en el plano ecuatorial visto de polo.

Finalmente⁷ se estudió la contribución de un viento estelar y una estructura cromosférica por medio de una solución rigurosa de la ecuación de transferencia radiativa para un medio esféricamente simétrico; se concluyó que la cromósfera tiene un efecto relevante sobre el continuo infrarrojo y despreciable sobre el ultravioleta y el visible, y que la más importante fuente de

²Woolf y otros (1970), Gehrz y otros (1974)

³Milkey y Dyck (1973)

⁴Dyck y Milkey (1972)

⁵Cassinelli y Hartmann (1977)

⁶Waters (1986)

⁷Vázquez, Cidale y Ringuélet (1993)

emisión es el proceso f-f del H.

1.2.2 Reemisión Térmica desde Partículas de Polvo

El exceso IR de muchas estrellas **Be** puede explicarse asumiendo algunas de la hipótesis mencionadas en el apartado anterior. Pero, para justificar el gran exceso observado en muchas estrellas **B[e]**, es necesario buscar otra explicación.

Pecker (1962,1963) fue el primero en sugerir que partículas de polvo presentes en la envoltura estelar podrían ser las causantes del exceso IR observado en estrellas jóvenes.

Varios modelos se construyeron tratando de interpretar con esta teoría el exceso IR de algunas estrellas **B[e]**⁸. Se hicieron hipótesis sobre distribución, distancia a la estrella y composición de las partículas de polvo para diferentes casos particulares.

Así, algunas veces se logró explicar las observaciones; sin embargo las hipótesis argumentadas no son satisfactorias.

1.2.3 Existencia de una Compañera Fría

La existencia de una compañera fría, cuyo flujo continuo se sumaría al de la estrella principal, no es un argumento válido en general, para explicar los excesos IR de las estrellas **Be** o **B[e]**. Se puede aplicar sólo a casos particulares en los cuales las observaciones muestran variaciones periódicas en los espectros características de los sistemas binarias.

⁸Savage et al (1978), Swings (1973), Sitko y Savage (1980), Catalá (1983)

Capitulo 2

Descripción Física del Proceso y su Inserción en la Envoltura Estelar

2.1 Por Qué RD del MgII

El exceso de flujo infrarrojo observado en las estrellas **Be** es un fenómeno asociado a las envolturas estelares que rodean este tipo de estrellas; para explicarlo debemos tener en cuenta entonces, todos los procesos físicos que en ellas ocurren. Algunos de ellos ya se han tratado en numerosos trabajos, como la emisión f-f y f-b del H. Otros procesos pueden tener lugar en las zonas externas de la envoltura donde los valores de la densidad y la temperatura electrónica son bajos y el campo de radiación diluido. La recombinación dielectrónica (RD) es un proceso atómico que necesariamente debe ser tenido en cuenta a bajas densidades como mostraron Burgess y Seaton ¹. Este es un proceso importante en las atmósferas estelares tanto a altas como a bajas temperaturas, aunque el tratamiento es diferente.

Átomos de muchos elementos (una o varias veces ionizados) pueden sufrir RD, pero, para que el efecto sobre el continuo IR de la estrella sea importante, debe existir en la zona un número suficiente de átomos ionizados del elemento considerado. Este está determinado por la abundancia del elemento relativa al H, su potencial de ionización, la temperatura y la densidad electrónica del

¹A. Burgess and M. J. Seaton, (1964)

medio.

Una estimación del número de átomos de los distintos elementos esperable en las atmósferas estelares, puede obtenerse aplicando la ley de Saha. Así, en la figura 2.1, vemos como varía el número de átomos contenido en la unidad de volumen de algunos elementos una y dos veces ionizados en función del número atómico Z para $T_e = 5000K$ y $N_e = 1E9 \text{ part./cm}^3$ (condiciones justificadas en la sección 2.4).

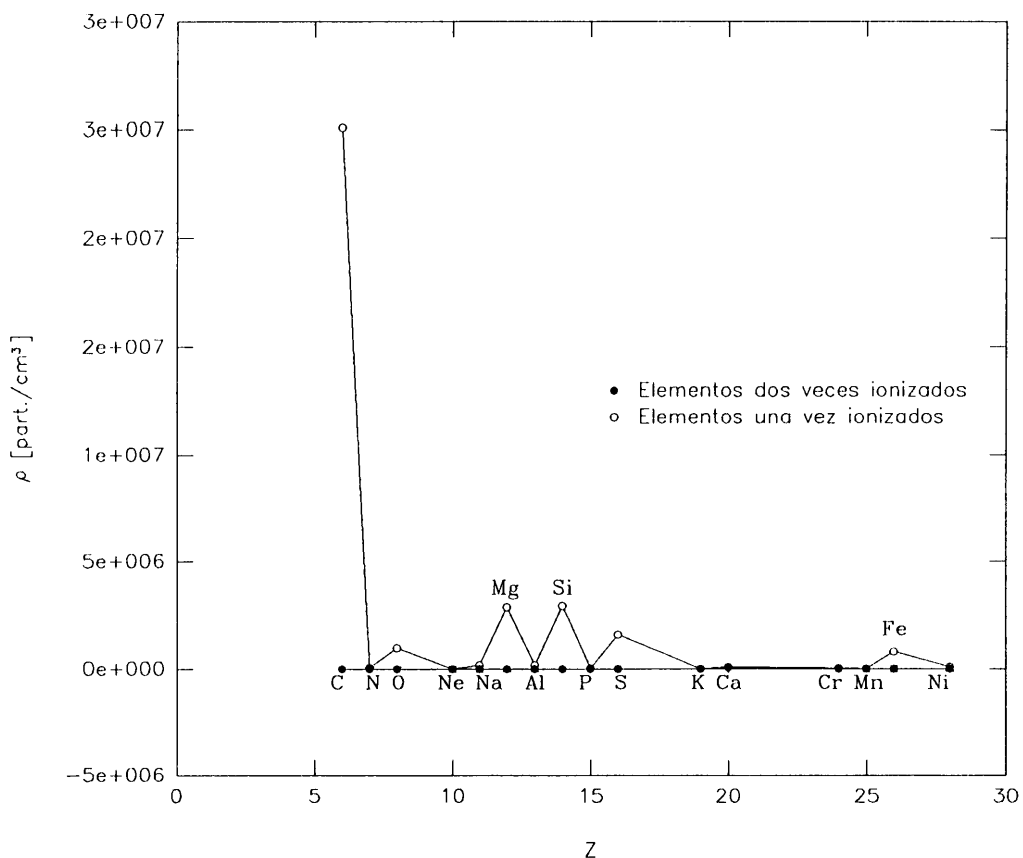


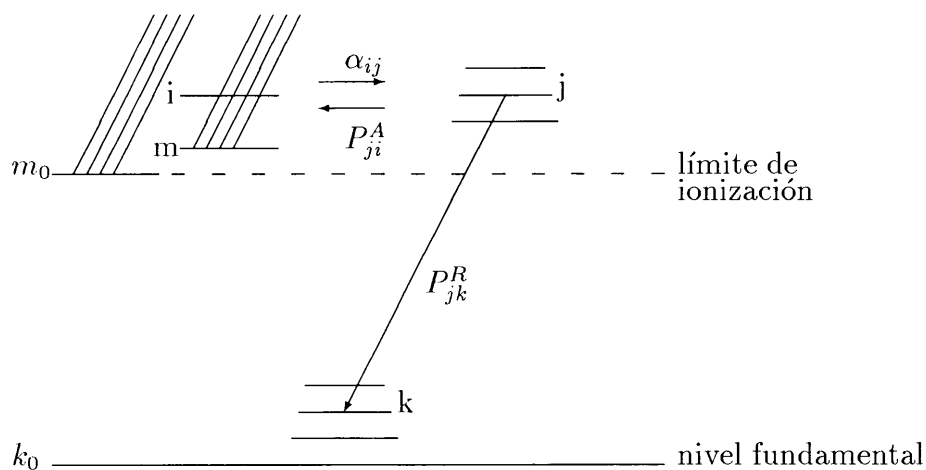
Figura 2.1: Densidad de átomos una y dos veces ionizados de los elementos con apreciable abundancia cósmica en función de su número atómico

Claramente vemos que ciertos elementos son más numerosos que otros, líneas de los cuales son realmente observadas en los espectros de estrellas **Be** en la zona del UV y el V. Entre todos ellos el **MgII** es el que tiene la

estructura atómica más simple: presenta $1e^-$ fuera de capa cerrada. Este tipo de estructura facilita que se produzcan interacciones con otras partículas y hace más probable el proceso. Además, la estructura simple del MgII hace que este sea el elemento que presenta menos dificultades para su tratamiento.

2.2 Recombinación Dielectrónica

La recombinación dielectrónica y su proceso atómico inverso están esquematizados abajo.



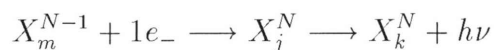
Aquí se muestran el estado básico (k_0) del ion (Z,N), de carga atómica Z y N electrones, y su primer límite de ionización; este último coincide con el estado básico (m_0) del ion ($Z,N-1$), de carga Z y $N-1$ electrones. La excitación de $1e^-$ de la última capa del ion (Z,N) dará origen a estados excitados (k)

ubicados debajo del límite de ionización. En cambio, la excitación de $1e^-$ interno o de 2 o más e^- de cualquier subcapa, dará origen a estados (j) ubicados arriba de dicho límite; estos últimos pueden sufrir una transición no radiativa a un estado (i) del sistema formado por el ion (Z,N-1) en algún estado ligado (m) y $1e^-$ libre. A este proceso se lo conoce como autoionización y en él debe verificarse $E_i = E_m + E_{e^-}$, donde E_i representa la energía del estado i, E_m la energía del estado m y E_{e^-} la energía cinética del e^- libre.

El proceso inverso del anterior es la captura -electrónica: si la energía del e^- libre es tal que $E_i \simeq E_j$, siendo E_j la energía del estado j del ion (Z,N), el e^- libre puede excitar $1e^-$ del ion (Z,N-1) perdiendo suficiente energía como para ser capturado en un estado ligado, originando un nivel j del ion (Z,N).

Los estados j que se encuentran arriba del nivel de ionización son inestables, pudiendo sufrir autoionización; el ion (Z,N) se estabilizará si se produce una desexcitación a un estado ubicado debajo de dicho nivel.

La captura electrónica seguida de la referida desexcitación constituyen la llamada recombinación dielectrónica, que podemos simbolizar como:



En acoplamiento LS deben conservarse el momento angular, el spin y la paridad en el proceso de captura. Las mismas reglas deben cumplirse en la autoionización.

2.3 Estructura Atómica del Mg

Un átomo de Mg en su estado neutro contiene 12 electrones que se distribuyen en las distintas capas obedeciendo el principio de exclusión de Pauli. Así, la configuración de su estado básico es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$.

La excitación de uno de los electrones $3s$ de la última capa originará estados excitados con configuración $1s^2 2s^2 2p^6 3s n l$; estos serán singuletes o tripletes según que el valor del número cuántico de spin, S, sea 0 o 1. Las distintas series de niveles correspondientes a los estados excitados convergen todas a un único límite de ionización ubicado a 7.646 eV (61671.02 cm^{-1}) arriba del estado básico.

La excitación de los dos electrones de la última capa dará lugar a estados ubicados arriba del límite de ionización antes mencionado; si la configuración electrónica de estos estados es $1s^2 2s^2 2p^6 3pnl$ se encontrarán debajo del segundo límite ubicado a $497340.33 \text{ cm}^{-1}$ arriba del estado básico. Por las condiciones físicas imperantes en la zona donde la RD tiene lugar, no consideraremos en el cálculo aquellos niveles que se encuentran por encima de este segundo límite (ver sección 2.4 y 2.5).

Se puede comprobar, que no todos los niveles que se encuentran por encima del límite de ionización pueden autoionizar en acoplamiento LS: los términos $^3D^\circ$ y $^1D^\circ$, que resultan de las configuraciones $3pnd$ (aquí hemos obviado la configuración del corazón atómico que permanece fija), dan origen a niveles impares; sin embargo no es posible formar niveles continuos de MgII con esa paridad, conservando el spin y el momento angular total, a partir del estado fundamental del ion ($1s^2 2s^2 2p^6 3s$) y $1e_-$ libre; lo mismo ocurre con los términos 3P y 1P de las configuraciones $3pnp$.

Aunque los estados mencionados arriba no pueden autoionizar en acoplamiento LS, comparten las propiedades autoionizantes de otros estados que sí pueden hacerlo, debido a la mezcla de configuraciones. Existen cálculos que permiten estimar la probabilidad de autoionización de estos estados, determinando el acoplamiento spin-órbita entre niveles autoionizantes y no autoionizantes ²(ver sección 5.3).

2.4 Propiedades Físicas de la Zona Estudiada

Aceptaremos el modelo atmosférico propuesto inicialmente por Ringuelet, Fontenla y Rovira³; este esquema, desarrollado posteriormente por Thomas⁴, considera tres regiones en la atmósfera de una estrella **Be**:

- La fotosfera, en equilibrio radiativo e hidrostático.
- La cromósfera, una zona en expansión, geoméricamente delgada, donde se encuentra el máximo de temperatura.

²H. Nussbaumer y P. J. Storey (1986)

³A. E. Ringuelet, J. M. Fontenla y M. Rovira (1981)

⁴R. N. Thomas (1982)

- La envoltura templada, una región muy extendida, con baja densidad y baja temperatura electrónica, también en expansión.

Adoptaremos una ley de temperaturas como la mostrada en la figura 2.2, extraída del trabajo de Cidale y Ringuet ⁵.

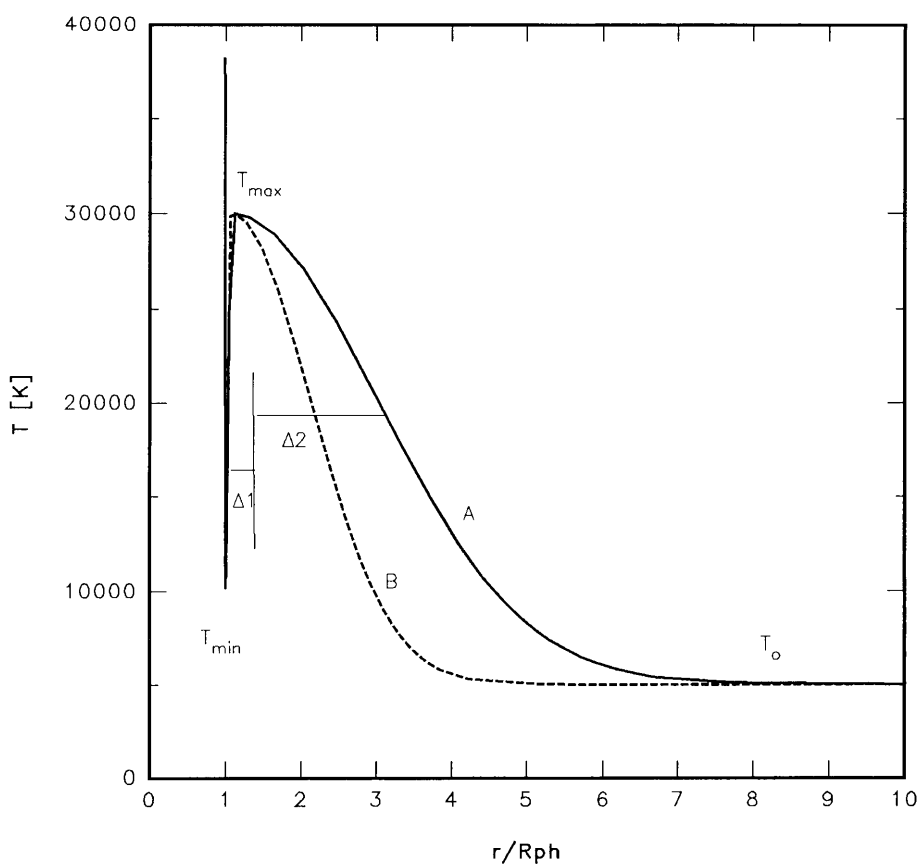


Figura 2.2: *Distribución de la temperatura con la distancia a la estrella*

r : distancia desde el centro de la estrella. R_{ph} : radio fotosférico.

$\Delta 1$ y $\Delta 2$: parámetros que controlan la posición del máximo de temperatura y la extensión de la cromósfera.

T_{min} : temperatura mínima (comienzo de la cromósfera).

T_{max} : temperatura máxima alcanzada en la cromósfera.

⁵L. S. Cidale y A. E. Ringuet (1993)

Aquí se puede observar la marcha de la temperatura con la distancia a la estrella, para dos posibles conjuntos de valores de los parámetros (libres) T_{\min} , T_{\max} , T_0 , $\Delta 1$ y $\Delta 2$.

Para la densidad electrónica asumiremos una distribución como la que se muestra en la figura 2.3 En ella se pueden observar dos posibles cur-

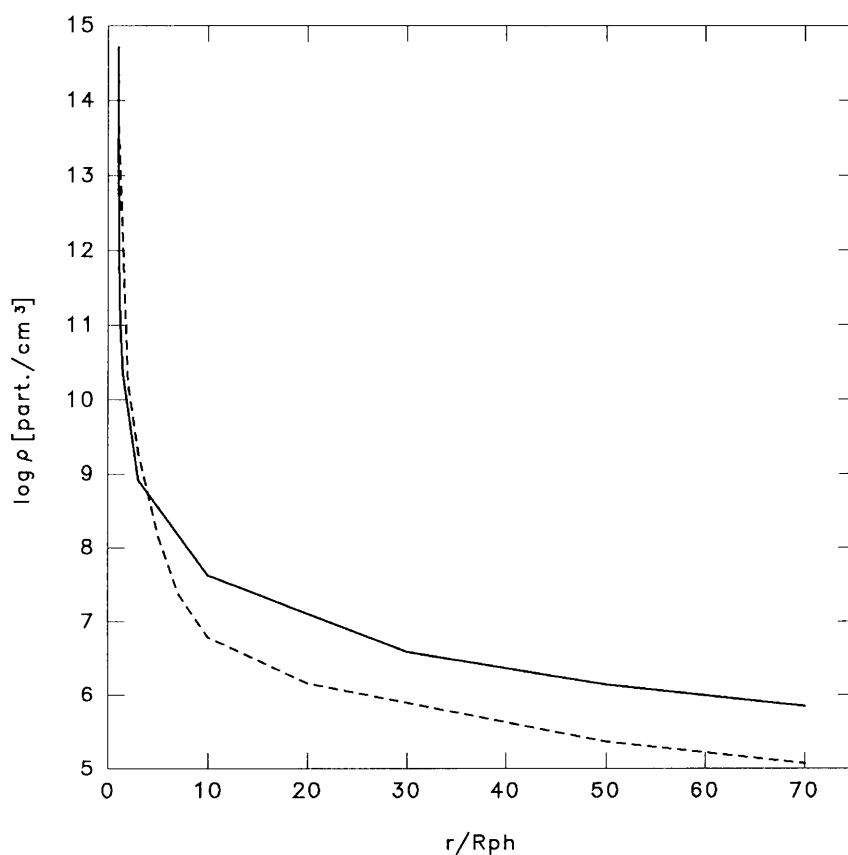


Figura 2.3: *Distribución de la densidad de partículas con la distancia a la estrella*

vas obtenidas asumiendo dos diferentes valores para la tasa de pérdida de masa y dos diferentes leyes de velocidades, extraídas del trabajo de Cidale y Ringuelet.

Nosotros enfocaremos nuestra atención en la zona más externa de la atmósfera estelar, después de alcanzada la temperatura asintótica, T_0 ; consideraremos por lo tanto una zona de temperatura constante.

Basándonos en el esquema de atmósfera expuesto, los siguientes intervalos de valores posibles para la temperatura y la densidad electrónica serán adoptados para la envoltura templada:

$$3000^\circ K < T_e < 10000^\circ K$$

$$10^7 \frac{\text{part.}}{\text{cm}^3} < N_e < 10^{11} \frac{\text{part.}}{\text{cm}^3}$$

Para la distancia desde la estrella central, d (ver sección 2.6.1), a la cual se alcanza la temperatura asintótica, adoptaremos un valor mínimo de $3R^*$, donde R^* representa el radio estelar. A esta distancia, la radiación proveniente de la fotosfera estará considerablemente diluída.

2.5 Inserción en la Envoltura Estelar

Para insertar la RD del MgII en la envoltura estelar debemos tener en cuenta todos los procesos que puede sufrir este átomo bajo las condiciones físicas imperantes en la zona considerada.

Si consideramos una zona de la envoltura estelar donde la densidad electrónica es suficientemente baja y el campo de radiación suficientemente diluído, podemos despreciar todos los procesos inducidos colisional o radiativamente (ver sección 5.2 y 5.4). Bajo estas condiciones, un nivel autoionizante del átomo de MgI sólo podrá ser poblado por captura electrónica y des poblado por autoionización o transiciones radiativas espontáneas.

Fuera de equilibrio termodinámico (ET) la ecuación de equilibrio estadístico podrá escribirse entonces:

$$\sum_i N_e N_m(\text{MgII}) \alpha_{ij} = N_j(\text{MgI}) \left(\sum_i P_{ji}^A + \sum_k P_{jk}^R \right) \quad (2.1)$$

donde:

N_e : número de e^- por unidad de volumen.

$N_m(\text{MgII})$: número de átomos de MgII que se encuentran en el estado m.

α_{ij} : coeficiente de captura electrónica.

$N_j(\text{MgI})$: número de átomos de MgI que se encuentran en el estado j.

P_{ji}^A : probabilidad de autoionización del nivel j al i del continuo.

P_{jk}^R : probabilidad de transición radiativa del nivel j al k.

Las sumatorias de índice i se extienden sobre todos los estados continuos del átomo de MgII que cumplan las reglas de selección (es decir, sobre todos los pares de padres y e^- libres que juntos formen el estado i).

La sumatoria de índice k se extiende sobre todos los niveles energéticamente más bajos que j del átomo de MgI que cumplan las reglas de selección con respecto a j.

En ET se cumple además, para cada estado continuo de MgII y cada nivel autoionizante de MgI que cumplen las reglas de selección, la ecuación de balance detallado para la captura electrónica y su proceso inverso, la autoionización:

$$N_e N_m^s(\text{MgII}) \alpha_{ij} = N_j^s(\text{MgI}) P_{ji}^A, \quad (2.2)$$

y la ley de Saha:

$$\frac{N_j^s(\text{MgI})}{N_e N_m^s(\text{MgII})} = \frac{g_j}{2g_m} \left(\frac{h^2}{2\pi m K T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-E_j}{K T}} \quad (2.3)$$

donde:

$N_m^s(\text{MgII})$: número de átomos de MgII en el estado m dado por Saha.

$N_j^s(\text{MgI})$: número de átomos de MgI en el estado autoionizante j dado por Saha.

g_j y g_m : pesos estadísticos de los niveles j y m respectivamente.

E_j : energía del estado j relativa al estado m.

De la igualdad 2.1 podemos obtener una expresión para $N_j(\text{MgI})$; si en ella

sustituimos α_{ij} por su expresión extraída de 2.2, podremos escribir la tasa de caída radiativa desde el nivel j del MgI al estado ligado h de la siguiente manera:

$$N_j(\text{MgI})P_{jh}^R = N_e P_{jh}^R \sum_i N_m(\text{MgII}) \frac{N_j^s(\text{MgI})P_{ji}^A}{N_e N_m^s(\text{MgII})(\sum_i P_{ji}^A + \sum_k P_{jk}^R)} \quad (2.4)$$

También podemos escribir esta tasa en función de la densidad total $N(\text{MgII})$ (número de átomos de MgII fuera de ET en todos los estados) y de un coeficiente de RD para la transición $j \rightarrow h$:

$$N_j(\text{MgI})P_{jh}^R = N_e N(\text{MgII})\alpha_{jh}^D \quad (2.5)$$

Comparando 2.4 y 2.5 obtenemos para α_{jh}^D :

$$\alpha_{jh}^D = \frac{N_j^s(\text{MgI})P_{jh}^R}{N_e N^s(\text{MgII})} \sum_i \frac{N_m(\text{MgII})N^s(\text{MgII})P_{ji}^A}{N(\text{MgII})N_m^s(\text{MgII})(\sum_i P_{ji}^A + \sum_k P_{jk}^R)} \quad (2.6)$$

con $N^s(\text{MgII})$: número de átomos de MgII en todos los estados dado por Saha.

En las condiciones de densidad electrónica y campo de radiación que estamos considerando, las tasas de excitación son despreciables comparadas con las tasas de decaimiento radiativo; podemos asumir entonces que todos los iones se encuentran en su estado básico, y la ecuación 2.6 quedará:

$$\alpha_{jh}^D = \frac{N_j^s(\text{MgI})P_{jh}^R}{N_e N^s(\text{MgII})} \sum_i \frac{P_{ji}^A}{(\sum_i P_{ji}^A + \sum_k P_{jk}^R)} \quad (2.7)$$

La sumatoria de índice i que se encuentra en el denominador, no se extiende ahora a todos los continuos accesibles que cumplen las reglas de se-

lección; sólo alcanza a aquellos estados continuos formados a partir del estado básico del átomo de MgII.

Los cálculos realizados ⁶ muestran que $P^A \gg P^R$ para estados autoionizantes del MgI que pueden autoionizar en acoplamiento LS; para los estados que no pueden autoionizar en acoplamiento LS se han hecho cálculos ⁷ que permiten estimar la probabilidad de autoionización por estar acoplados a estados con un valor grande de P^A ; los resultados obtenidos nos permiten despreciar en $2.7 \sum_k P_{jk}^R$ frente a $\sum_i P_{ji}^A$ (ver sección 5.3).

Además en $\sum_i P_{ji}^A$ podemos despreciar los términos que representan autoionizaciones a niveles de configuraciones excitadas del MgII (lo cual no introduce un gran error).

Obtenemos entonces para el coeficiente de recombinación dielectrónica correspondiente al nivel autoionizante j y el nivel ligado h :

$$\alpha_{jh}^D = \frac{N_j^s(\text{MgI})P_{jh}^R}{N_e N^s(\text{MgII})} \quad (2.8)$$

El coeficiente total para h (correspondiente a todos los niveles autoionizantes y el nivel ligado h) será:

$$\alpha_h^D = \sum_j \alpha_{jh}^D \quad (2.9)$$

y el coeficiente efectivo para una línea de longitud de onda λ_{lh} :

$$\alpha_{eff}^D(\lambda_{lh}) = \frac{P_{lh}^R}{\sum_{k<l} P_{lk}^R} \alpha_h^D \quad (2.10)$$

La emisividad en la línea debida a la RD estará dada por la siguiente expresión:

⁶Burke y Moores (1968)

⁷Nussbaumer y Storey (1986)

$$\epsilon(\lambda_{lh}) = N_e N(\text{MgII}) \alpha_{eff}^D(\lambda_{lh}) h\nu_{lh} \quad (2.11)$$

Teniendo en cuenta 2.8, 2.9, 2.10 y la ley de Saha obtenemos finalmente:

$$\epsilon(\lambda_{lh}) = N_e N(\text{MgII}) \frac{P_{lh}^R}{\sum_{k<l} P_{lk}^R} \sum_j \left[\frac{g_j}{2g_m} \left(\frac{h^2}{2\pi m K T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_j}{K T}} P_{jh}^R \right] h\nu_{lh} \quad (2.12)$$

$\epsilon(\lambda_{lh})$ representa la energía emitida en la línea de longitud de onda λ_{lh} , por unidad de tiempo y unidad de volumen de material, debido a la RD del MgII.

Al considerar bajas temperaturas es suficiente que \sum_j se extienda a unos pocos niveles autoionizantes ubicados arriba del primer límite de ionización. Para estos niveles el decaimiento radiativo se realiza por medio del e^- capturado ⁸.

2.6 Evaluación de la Influencia de la RD del MgII en el Continuo de la Estrella

2.6.1 Geometría del Problema

Estudiaremos la influencia del proceso de RD en el flujo continuo proveniente de la fotosfera estelar teniendo en cuenta el esquema de la figura 2.4.

Allí, el círculo central representa la estrella cuya superficie irradia aproximadamente como un cuerpo negro. Si B_λ representa la función de Planck, $\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B_\lambda d\lambda$ será la energía irradiada por unidad de tiempo y unidad de superficie de la estrella, en el intervalo de longitudes de onda $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$.

Para obtener la energía irradiada por unidad de tiempo, por toda la superficie estelar, en el intervalo de longitudes de onda considerado, debemos evaluar la siguiente expresión:

⁸Nussbaumer y Storey (1983)

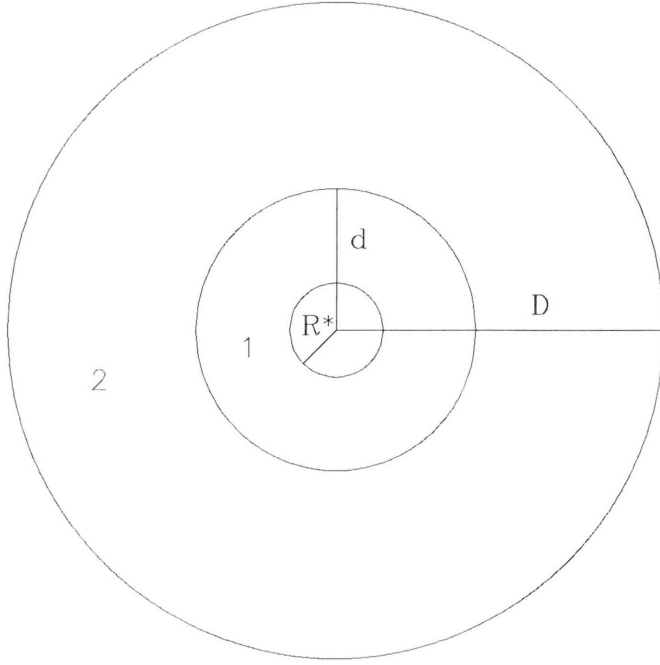


Figura 2.4: *Representación esquemática de una estrella **Be** y su envoltura*

$$4\pi R^{*2} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B_\lambda d\lambda \quad (2.13)$$

donde R^* representa el radio de la estrella central.

La zona **1** representa una zona de la envoltura donde ocurren diferentes procesos, de los cuales la emisión f-f y f-b del H contribuyen al flujo infrarrojo; estos procesos no los tendremos en cuenta por ahora pues nos interesa evaluar la influencia de la RD solamente.

En la zona **2** se han alcanzado las condiciones físicas consideradas en el apartado 2.4. Para la RD que tiene lugar en esta región, debemos obtener ahora una expresión comparable con la 2.13.

Teniendo en cuenta la definición de $\epsilon(\lambda_{lh})$ dada en el apartado 2.5, $\sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} \epsilon(\lambda_{lh})$ representará la energía irradiada por unidad de tiempo y por unidad de volumen, en el intervalo de longitudes de onda $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$, debido a la recombinación dielectrónica del MgII. Para considerar todo el material de la zona donde el proceso ocurre, debemos multiplicar por el volumen correspondiente, teniendo, entonces, la energía irradiada por unidad

de tiempo, en el intervalo de longitudes de onda considerado, la siguiente expresión:

$$V \sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} \epsilon(\lambda_{lh}) \quad (2.14)$$

donde V simboliza el volumen del material emisor; y, si consideramos simetría esférica:

$$\frac{4}{3}\pi(D^3 - d^3) \sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} \epsilon(\lambda_{lh}) \quad (2.15)$$

Las expresiones 2.13 y 2.15 representan ambas energía irradiada por unidad de tiempo (con unidades cgs de *erg/s*); podemos sumar, entonces, las cantidades para obtener la energía total irradiada por la estrella y su envoltura (si consideramos que en esta el único proceso que ocurre es la RD del MgII) en el intervalo $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$, obteniendo:

$$4\pi R^{*2} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B_\lambda d\lambda + \frac{4}{3}\pi(D^3 - d^3) \sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} \epsilon(\lambda_{lh}) \quad (2.16)$$

Ya que esta energía será irradiada en todas direcciones, sólo una fracción de ella llegará al observador, siendo esta:

$$F_0 = \frac{4\pi R^{*2} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B_\lambda d\lambda + \frac{4}{3}\pi(D^3 - d^3) \sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} \epsilon(\lambda_{lh})}{4\pi D_{ob}^2} \quad (2.17)$$

donde F_0 es el flujo observado y D_{ob} la distancia de la estrella al observador.

2.6.2 Comparación con las Observaciones

Las observaciones estelares con las que contamos en la zona espectral infrarroja, han sido obtenidas con el sistema UBVRIJHKLMNQ de Johnson modificado⁹.

Para poder comparar nuestros cálculos con las observaciones, las ecuaciones de la sección 2.6.1 deben ser evaluadas para los intervalos de longitudes de onda correspondientes a los distintos filtros de los sistemas de colores; λ_1 y λ_2 serán, entonces, las longitudes de onda extremas de cada uno de los filtros utilizados.

Además, debemos considerar la función sensibilidad de los filtros que afecta a las observaciones y, por lo tanto, tenerla en cuenta en los cálculos.

⁹Johnson (1964, 1966a), Landolt-Börnstein (1982), Mendoza (1967)

Capítulo 3

Metodología Empleada para el Cálculo

Nuestro propósito es evaluar la expresión 2.16, lo que implica calcular, básicamente, las probabilidades de transición radiativa, P^R , que figuran en la expresión de $\varepsilon(\lambda)$. Para esto necesitamos las integrales radiales, que se calculan con las autofunciones radiales.

Con las autofunciones radiales también calculamos los elementos de matriz del operador Hamiltoniano, cuyos autovalores representan los niveles de energía, E , necesarios también para el cálculo de $\varepsilon(\lambda)$.

3.1 Teoría Básica de la Estructura y Espectros Atómicos

Las funciones de onda, ψ , que representan los distintos estados físicos de un átomo, deben satisfacer la ecuación de Schrödinger:

$$H\psi = E\psi$$

donde H representa el Hamiltoniano del sistema, y sus autovalores, E , los niveles de energía del átomo.

Para un átomo con N e^- el hamiltoniano puede escribirse como:

$$H = -\sum_i \Delta_i - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_{i>j} \sum \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i(r_i) l_i s_i \quad (3.1)$$

en el sistema de unidades atómicas o de Hartree¹.

Aquí el primer término representa la energía cinética de los N electrones del átomo, el segundo, su energía potencial y el siguiente tiene en cuenta la interacción electrostática de Coulomb entre los electrones. El último término de la 3.1 representa la suma sobre todos los electrones de la interacción magnética entre el spin del electrón y su movimiento orbital; siendo l y s los operadores de momento angular orbital y de spin respectivamente, ξ un factor de proporcionalidad que puede escribirse como $\xi(r) = \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{r} \left(\frac{dV(r)}{dr} \right)$, $V(r)$ la función de energía potencial para 1 e^- en el átomo con N electrones y α la constante de estructura fina.

En 3.1 no hemos considerado todavía las correcciones relativistas.

Si hacemos la aproximación de campo central, esto es, si suponemos que cada electrón se mueve independientemente de los otros en el campo electrostático del núcleo y de los otros N-1 electrones, para cada electrón podemos escribir, en analogía con la función de onda que describe el estado de un átomo conteniendo un solo electrón, una función de onda como sigue:

$$\varphi_i(r_i) = \frac{1}{r_i} P_{n_i l_i}(r_i) Y_{l_i m_i}(\theta_i, \phi_i) \sigma_{m_{s_i}}(s_{i_z}), \quad 1 \leq i \leq N \quad (3.2)$$

con:

θ_i, ϕ_i y r_i : coordenadas esféricas del e^- i en un sistema con origen en el núcleo del átomo

n, l, s y m : números cuánticos principal, orbital, de spin y magnético respectivamente

$P_{n_i l_i}(r_i)$: parte radial de las autofunciones

¹En este sistema se considera \hbar como la unidad de medida de los momentos angulares, m_e , la masa del electrón, como la unidad de medida de las masas y e , la carga del electrón, la unidad de medida de las cargas. Así, el radio de la primera órbita de Bohr $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^4}$ constituye la unidad atómica de longitud. La unidad atómica de energía resulta igual al doble de la energía de ionización del hidrógeno, $\frac{m_e e^4}{\hbar^2}$, pero es más cómodo utilizar la mitad de este valor denominado Rydberg

$Y_{l_i m_{l_i}}(\theta_i, \phi_i)$: parte angular de las autofunciones; son los llamados armónicos esféricos cuya expresión general es

$$Y_{l_i m_{l_i}}(\theta_i, \phi_i) = (-1)^{\frac{(m+|m|)}{2}} \left[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}$$

donde $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ es la función asociada de Legendre.

Las funciones Y son las autofunciones de los operadores L^2 y L_z con autovalores $l(l+1)\hbar^2$ y $m_l\hbar$ respectivamente.

$\sigma_{m_{s_i}}(s_{i_z})$: parte de las autofunciones correspondiente al spin; puede escribirse como

$$\sigma_{m_{s_i}}(s_{i_z}) = \delta_{m_{s_i} s_{i_z}}$$

donde $\delta_{m_{s_i} s_{i_z}}$ es la delta de Kronecker.

Las funciones σ son las autofunciones de los operadores S^2 y S_z con autovalores $\frac{3}{4}\hbar^2$ y $\pm\frac{1}{2}\hbar$ respectivamente.

La autofunción para el átomo entero será una combinación lineal de productos de las N autofunciones para los N electrones, convenientemente antisimetrizada, de tal manera que refleje la indistinguibilidad física de los electrones.

Para la parte radial $P_{nl}(r)$ de las autofunciones $\varphi(r)$, no es posible encontrar una solución analítica exacta como para el caso hidrogenoide, ya que ahora $V(r)$ no es una simple función de Coulomb, $\frac{-2Z}{r}$. Debemos emplear entonces métodos numéricos, determinando primero $V(r)$ y luego $P_{nl}(r)$.

3.2 Cálculo de las Autofunciones Radiales

Para cada configuración atómica

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_q l_q)^{w_q}, \quad \sum_{i=1}^q w_i = N$$

habrá q diferentes funciones radiales $P_{n_i l_i}(r_i)$, una para cada subcapa de electrones equivalentes (ya que estas funciones sólo dependen de n y l).

Este conjunto de funciones se buscará de tal manera de minimizar la energía promedio de la configuración dada por

$$E_{av} = \frac{\sum_{\text{estados}} E^K}{n^\circ \text{ de estados}},$$

siendo E^K la energía del estado K, sin violar la siguiente condición de ortonormalización

$$\int_0^\infty P_{n_i l_i}^*(r_1) P_{n_j l_j}(r_1) dr_1 = \delta_{n_i n_j}.$$

La determinación de las P minimizando E_{av} es consistente con la aproximación de campo central hecha, ya que, esta energía es equivalente a la de un átomo esféricamente simetrizado.

Por lo tanto las P_i serán determinadas de tal modo que, cualquier pequeña variación $\delta P_i(r)$, implique una variación δE_{av} igual a cero.

Este planteo nos conduce a un conjunto de ecuaciones integro-diferenciales acopladas²: las ecuaciones de Hartree-Fock, que podemos escribir como

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} \right. \\ & \left. + \sum_{j=1}^q (w_j - \delta_{ij}) \int_0^\infty \frac{2}{r_{>}} P_j^2(r_2) dr_2 - (w_1 - 1) A_i(r) \right] P_i(r) \\ & = \epsilon_i P_i(r) + \sum_{j(\neq i)=1}^q w_j [\delta_{l_i l_j} \epsilon_{ij} + B_{ij}(r)] P_j(r) \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde

$$A_i(r) = \frac{2l_i+1}{4l_i+1} \sum_{K>0} \begin{pmatrix} l_i & K & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \int_0^\infty \frac{2r_{<}^K}{r_{>}^{K+1}} P_i^2(r_2) dr_2$$

y

²R. D. Cowan (1981)

$$B_{ij}(r) = \frac{1}{2} \sum_K \begin{pmatrix} l_i & K & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \int_0^\infty \frac{2r_{<}^K}{r_{>}^{K+1}} P_j(r_2) P_i(r_2) dr_2$$

La 3.3 representa un conjunto de q ecuaciones, una para cada subcapa, en las cuales :

$r_{<}$ y $r_{>}$ representan el menor y el mayor valor de r y r_2 ,

$\begin{pmatrix} l_i & K & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} l_i & K & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ son símbolos 3-j (funciones algebraicas de 6 argumentos),

y los símbolos ϵ son los multiplicadores de Lagrange.

Los primeros dos términos de 3.3 se originan en la variación de la energía cinética, E_K^i , y el tercero en la variación de la energía potencial nuclear, E_n^i .

El siguiente término, $V_H(r) = \sum_{j=1}^q (w_j - \delta_{ij}) \int_0^\infty \frac{2}{r_{>}} P_j^2(r_2) dr_2$, proviene de la interacción electrostática directa entre electrones, para electrones equivalentes y no equivalentes a i ; físicamente representa la energía potencial del i ésimo electrón del átomo en el campo esféricamente promediado de los otros $N-1$ electrones.

Los términos que contienen ϵ surgen de los requerimientos impuestos de ortogonalidad entre P_i y P_j , y normalización de P_j .

Los términos que contienen A y B se originan en la interacción electrostática de intercambio entre los electrones, para electrones equivalentes y no equivalentes a i .

El conjunto de ecuaciones 3.3 sólo puede resolverse por un método iterativo, del cual cada ciclo consiste en:

- Adopción de un conjunto de funciones de prueba $P_j(r)$, con $1 \leq j \leq q$
- Cálculo, para cada i , de V_H , A_i y B_{ij} ; estimación de ϵ_{ij} de tal manera de cumplir con las condiciones de ortogonalidad entre los distintos $P_j(r)$.
- Resolución de las ecuaciones 3.3 obteniendo nuevas funciones $P_i(r)$.

Estos tres pasos se repiten hasta que las funciones obtenidas en el tercer paso coincidan con las funciones de prueba introducidas al comienzo y todas sean ortogonales entre sí.

El método H-F presenta complicaciones e inestabilidades además de ser numericamente complejo y consumir mucho tiempo de cálculo.

Por otra parte, el potencial $V(r)$ deducido luego de la ecuación 3.3, no representa en general una curva suave, lo cual complica luego los cálculos de las correcciones relativistas y el parámetro spin-órbita.

Debido a esto, se han implementado métodos más simples que consisten en resolver ecuaciones de la forma:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + V^i(r)\right]P_i(r) = \epsilon_i P_i(r) \quad (3.4)$$

donde $V^i(r)$ es la función energía potencial local en el cual el electrón i se mueve.

Cada una de las distintas aproximaciones, H, HFS, HS y HX, implica asumir una expresión diferente para la función potencial, de la siguiente manera:

- Método Hartree: H

Aquí se asume $V^i(r) = -\frac{2Z}{r} + V_H(r)$

lo que equivale a despreciar en la 3.3 los términos de intercambio. Este potencial no es suficientemente atractivo por lo que las funciones de onda se extienden muy lejos del núcleo y las energías de ligadura son demasiado pequeñas comparadas con los experimentos.

- Método Hartree-Fock-Slater: HFS

En esta aproximación se toma $V^i(r) = -\frac{2Z}{r} + V_c(r) - \frac{3}{2}\left(\frac{24\rho}{\pi}\right)^{1/3}$

donde $V_c(r) = \sum_{j=1}^q w_j \int_0^\infty \frac{2}{r_2} P_j^2(r_2) dr_2$

representa la energía potencial de $1e^-$, en un campo de N electrones, esféricamente promediado

y $\rho(r) = \sum_{j=1}^q w_j P_j(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{j=1}^q w_j P_j^2(r)$

es la densidad total de electrones, esféricamente promediado, a la distancia r del núcleo.

De tal manera, en esta aproximación, se tienen en cuenta los términos de interacción directa y de intercambio con los términos segundo y tercero que figuran en la expresión de $V^i(r)$; pero, a diferencia del método H, en estos términos entran en juego los N electrones del átomo, incluso el electrón i. El potencial $V^i(r)$ es, entonces, el mismo para todos los i, lo que ahorra tiempo de cálculo y produce automáticamente funciones $P_i(r)$ ortogonales.

Ya que el término de autointeracción de intercambio contenido en el tercer término de $V^i(r)$ no cancela exactamente el término de autointeracción directa contenido en V_c , los resultados obtenidos muestran un pobre acuerdo con el experimento.

- Método Hartree-Intercambio: HX

La forma adoptada para $V_i(r)$ es ahora
$$V^i(r) = -\frac{2Z}{r} + V_H(r) + V_X(r)$$

Aquí se consideró la interacción directa del electrón i con los otros N-1 electrones en $V_H(r)$, e independientemente, en $V_X(r)$, la autointeracción. Así, $V_X(r)$ puede elegirse de tal manera de cumplir, lo más cercanamente posible, las propiedades de los términos exactos de las ecuaciones de HF que reemplaza.

Con una función $V_X(r)$ construída de esta manera, el método HX da resultados en buen acuerdo con los obtenidos por el HF y con el experimento.

- Método Hartree-Slater: HS Es similar al anterior pero se adopta para $V_X(r)$ una forma que no contiene parámetros ajustables empíricamente como aquél.

En general da buenos resultados, pero, existen algunas configuraciones de algunos elementos para las cuales los resultados son malos.

3.3 Cálculo de las Integrales Radiales

Una vez obtenidas las funciones radiales podemos calcular varias de las integrales radiales correspondientes a cada una de las configuraciones, a saber:

- Energía Cinética del Electrón.

$$E_K^i = \langle i | -\Delta | i \rangle = \int_0^\infty P_{n_i l_i}^*(r) \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} \right] P_{n_i l_i}(r) dr$$

- Energía de Interacción del Electrón con el Núcleo.

$$E_n^i = \langle i | -\frac{2Z}{r} | i \rangle = \int_0^\infty \left(-\frac{2Z}{r} \right) | P_i(r) |^2 dr$$

- Energía de Interacción de Coulomb entre Electrones: Integrales de Slater.

$$F^K(ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^K}{r_{>}^{K+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P_i(r_1) P_j(r_2) dr_1 dr_2$$

$$G^K(ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^K}{r_{>}^{K+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P_j(r_1) P_i(r_2) dr_1 dr_2$$

- Energía de Ligadura Total del Electrón.

$$E^i = E_K^i + E_n^i + \sum_{j \neq i} E^{ij}$$

- Operador Spin-Órbita.

$$\xi_i = \int_0^\infty \xi(r) | P_i(r) |^2 = \frac{\alpha^2}{2} \int_0^\infty \frac{1}{r} \left(\frac{dV}{dr} \right) | P_i(r) |^2 dr$$

- Valores de Expectación de r^n .

$$\langle r^n \rangle = \int_0^\infty r^n |P_i(r)|^2 dr$$

Combinando funciones radiales de distintas configuraciones podemos calcular otras integrales radiales que se utilizan en el cálculo de interacción de configuraciones y probabilidades de transición como son:

- Energía de interacción de Coulomb entre electrones.

Cuando consideramos interacción de configuraciones las integrales de Slater deben ser reemplazadas por otras más generales de las cuales $F^K(ij)$ y $G^K(ij)$ representan casos especiales:

$$E^{12} = \langle ij | \frac{2}{r_{12}} | tu \rangle = \delta_{m_{s_i} m_{s_t}} \delta_{m_{s_j} m_{s_u}} \sum_{K=0}^{\infty} R^K(ij, tu) \sum_{-K}^K \delta_{q, m_{l_i} - m_{l_t}} \delta_{q, m_{l_j} - m_{l_u}} (-1)^q c^K(l_i m_{l_i}, l_t m_{l_t}) c^K(l_j m_{l_j}, l_u m_{l_u})$$

con

$$R^K(ij, tu) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_<^K}{r_>^{K+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P_t(r_1) P_u(r_2) dr_1 dr_2$$

y c^K coeficientes tabulados, combinación de símbolos 3j.

Podemos observar que:

$$F^K(ij) = R^K(ij, ij)$$

$$G^K(ij) = R^K(ij, ji)$$

- Operadores Multipolares.

Si A_{ji} representa la probabilidad total, por unidad de tiempo, para un átomo en el estado j , de sufrir una transición a cualquiera de los g_i estados del nivel de energía i , y a_{ji} representa la probabilidad, por unidad de tiempo, para un átomo en el estado j , de sufrir una transición al estado i , será:

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji}$$

Haciendo un desarrollo en multipolos de la interacción entre el campo electromagnético y cada uno de los momentos multipolares eléctricos y magnéticos del átomo, encontramos las contribuciones de cada uno de estos momentos a las probabilidades de transición, a saber:

1. Dipolo Eléctrico.

$$a_{E_1} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \sum_q |\langle \gamma J M | P_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle|^2$$

con

a_0 : radio de Bohr

$\sigma = 1/\lambda$, con λ medida en cm.

$P_q^{(1)} = \sum_{i=1}^N r(i) c_q^{(1)}(i)$: componente q del momento dipolar eléctrico del átomo (medido en unidades de $-ea_0$).

2. Dipolo Magnético.

$$a_{M_1} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 (\alpha/2)^2 \sigma^3}{3h} \sum_q |\langle \gamma J M | J_q^{(1)} + S_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle|^2$$

con

$J_q^{(1)} + S_q^{(1)}$: componente q del momento dipolar magnético del átomo.

α : constante de estructura fina.

3. Cuadrupolo Eléctrico.

$$a_{E_2} = \frac{64\pi^6 e^2 a_0^4 \sigma^5}{15h} \sum_q |\langle \gamma J M | P_q^{(2)} | \gamma' J' M' \rangle|^2$$

con

$P_q^{(2)} = \sum_{i=1}^N r(i)^2 c_q^{(2)}(i)$: componente q del momento cuadrupolar eléctrico del átomo (medido en unidades de $-ea_0^2$).

3.4 Esquemas de Acoplamiento

- Acoplamiento LS.

Este tipo de acoplamiento se da cuando la interacción electrostática entre electrones es mucho más fuerte que la interacción entre el spin de un electrón y su movimiento orbital. Por lo tanto, en el Hamiltoniano del sistema, despreciamos todos los términos que representen interacciones distintas a la de Coulomb.

Simbólicamente podemos escribir:

$$L = \sum_i l_i$$

$$S = \sum_i s_i$$

$$J = L + S$$

Acoplamiento LS se cumple para elementos con número atómico, Z , chico.

- Acoplamiento JJ.

Tiene lugar cuando la interacción entre el spin de un electrón y su movimiento orbital es mucho más fuerte que la interacción electrostática entre electrones. En el Hamiltoniano despreciamos, entonces, los términos correspondientes a interacciones distintas de la interacción spin-órbita.

Simbólicamente:

$$l_i + s_i = j_i, \quad \text{una para cada } i$$

.

$$j_1 + j_2 = J_2$$

$$J_2 + j_3 = J_3$$

$$J_{N-1} + j_N = J_N = J$$

El acoplamiento JJ se da principalmente en elementos con Z grande.

- Acoplamiento en Pares.

En este caso la energía de la configuración excitada depende sólo debilmente del spin del electrón excitado.

Para configuraciones con sólo dos electrones tendremos dos casos extremos:

$$l_1 + s_1 = j_1$$

$$j_1 + l_2 = K$$

$$K + s_2 = J$$

o

$$l_1 + l_2 = L$$

$$L + s_1 = K$$

$$K + s_2 = J$$

En el primer caso hablamos de acoplamiento jK y en el segundo de acoplamiento LK. En ambos casos el spin del electrón excitado, s_2 , es sumado a la resultante de los otros momentos angulares.

Este tipo de acoplamiento ocurre principalmente cuando el electrón excitado tiene un momento angular grande: electrones f o g.

El esquema de acoplamiento depende del elemento y de la configuración de que se trate, y en general no se cumple exactamente ninguno de los 4 acoplamientos citados. Por lo tanto, la manera más correcta de calcular los niveles de energía del átomo, es en el llamado acoplamiento intermedio, que consiste en diagonalizar el Hamiltoniano completo del sistema, sin despreciar ninguno de los términos.

3.5 Reglas de Selección

Las reglas de selección, que permiten que una transición radiativa tenga lugar, dependen de los términos que consideremos en el desarrollo multipolar y del esquema de acoplamiento; las más importantes se pueden esquematizar como sigue:

- Dipolo eléctrico.

Para la paridad: sólo están permitidas transiciones entre estados de paridad opuesta.

Para el momento angular total: $\Delta J = 0, \pm 1$, y no está permitida la transición $J = 0 \rightarrow J' = 0$.

Para el momento magnético total: $\Delta M = 0, \pm 1$

Estas reglas valen rigurosamente para cualquier tipo de acoplamiento en la aproximación de dipolo eléctrico. Además existen reglas adicionales para cada tipo de acoplamiento:

1. Acoplamiento LS.

Para el momento angular de spin total: $\Delta S = 0$

Para el momento angular orbital total: $\Delta L = 0, \pm 1$, y no está permitida la transición $L = 0 \longrightarrow L' = 0$

Para el momento angular orbital del electrón óptico: $\Delta l = \pm 1$

Cuando la transición es del tipo $\dots l_1^{w_1} l_2 \longrightarrow \dots l_1^{w_1} l'_2$, donde los puntos indican subcapas cerradas comunes a las dos configuraciones, se cumplen las siguientes reglas para los otros esquemas de acoplamiento:

2. Acoplamiento LK.

Para el momento angular K: $\Delta K = 0, \pm 1$, y no está permitida la transición $K = 0 \longrightarrow K' = 0$

Para el momento angular orbital total: $\Delta L = 0, \pm 1$, y no está permitida la transición $L = 0 \longrightarrow L' = 0$

3. Acoplamiento jK.

Para el momento angular K: $\Delta K = 0, \pm 1$, y no está permitida la transición $K = 0 \longrightarrow K' = 0$

Para el momento j_1 : $\Delta j_1 = 0$

4. Acoplamiento Jj.

Para el momento angular total del electrón óptico: $\Delta j_2 = 0, \pm 1$, y no está permitida la transición $j_2 = 0 \longrightarrow j'_2 = 0$

Para el momento angular total de la subcapa abierta: $\Delta J_1 = 0$

Todas estas reglas son violadas con mayor o menor frecuencia para configuraciones en las cuales no se cumple exactamente ninguno de los esquemas de acoplamiento (mezcla de configuraciones), o porque se tornan importantes los términos de cuadrupolo eléctrico y dipolo magnético. La regla que prohíbe transiciones entre niveles ambos con $J = 0$ es la que más se mantiene, aunque, transiciones de este tipo

podrían ocurrir si los niveles fueran mezclados por efecto Stark. Violaciones a una de las más rigurosas de las reglas, como es el cambio en la paridad, ocurren también cuando un campo eléctrico externo mezcla estados de paridad opuesta.

- Cuadripolo Eléctrico.

Para la paridad: sólo están permitidas transiciones entre estados de igual paridad.

Para el momento angular total: $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$, con $J + J' \geq 2$

Para el momento magnético total: $\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$

En acoplamiento LS se cumplen además:

Para el momento angular orbital total: $\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$, con $L + L' \geq 2$

Para el momento angular de spin total: $\Delta S = 0$

Para el momento angular orbital del electrón óptico: $\Delta l = 0, \pm 2$, con $l + l' \geq 2$

- Dipolo magnético.

Para la paridad: sólo están permitidas transiciones entre estados de igual paridad.

Para el momento angular total: $\Delta J = 0, \pm 1$, y no está permitida la transición $J = 0 \rightarrow J' = 0$

Para el momento magnético total: $\Delta M = 0, \pm 1$

En acoplamiento LS sólo puede haber transiciones entre niveles de la misma configuración, por lo tanto debe ser $L = L'$ y $S = S'$; a lo sumo pueden diferir en el valor de J.

Líneas correspondientes a transiciones que violan las reglas de selección de dipolo eléctrico se llaman tradicionalmente líneas prohibidas. Líneas prohibidas muy frecuentemente observadas en astrofísica son aquellas que tienen lugar en plasmas de baja densidad, para las cuales la tasa de desexcitación colisional es muy baja; esto hace que se superpueblen los estados metaestables (estados para los cuales las transiciones espontáneas a niveles más bajos están prohibidas por radiación de dipolo eléctrico). La baja probabilidad de transición es compensada entonces por la alta población de los niveles.

3.6 Aplicaciones al Átomo de Mg

Pra realizar los cálculos para el átomo de Mg se han utilizado una serie de programas (ver siguiente sección) teniendo en cuenta que:

- Dada la cantidad de configuraciones con distintas características involucradas en los cálculos, estos deben llevarse a cabo en acoplamiento intermedio, lo que permitirá, entre otras cosas, considerar como autoionizantes niveles que no lo son en acoplamiento LS.
- No deben despreciarse los términos de dipolo magnético y cuadrupolo eléctrico, para dar lugar a transiciones prohibidas como las explicadas en la sección anterior para los niveles metaestables.
- Deben considerarse los efectos relativistas, ya que estos se vuelven apreciables en los cálculos de la energía de ligadura total para átomos con $Z \geq 10$. Para ello es suficiente utilizar el método de las perturbaciones ya que este es acertado cuando los electrones ópticos son los electrones exteriores.
- El método HX es el más apropiado para llevar a cabo un trabajo como el nuestro ya que, aunque todos los métodos dan resultados muy parecidos en general, para algunas configuraciones muy sensibles a la elección particular del potencial, los resultados que mejor ajustan con el experimento son los obtenidos con este método.

3.7 Programas Fortran Utilizados

Varios fueron los programas empleados en el cálculo.

Inicialmente se utilizó una serie de cinco programas Fortran elaborados por Robert D. Cowan: RCN, HF8, RCN2, RCG y RCE, de los cuales daremos una breve descripción.

- Programa RCN.

Originalmente, este programa se basó en el creado por Herman y Skillman (1963) y ha sufrido modificaciones importantes.

El programa calcula las autofunciones radiales, $P_{nl}(r)$, para un átomo esféricamente simétrico, correspondientes a las distintas configuraciones electrónicas. Este cálculo puede realizarlo utilizando uno de los siguientes métodos que representan aproximaciones al método de Hartree-Fock (HF):

1. Hartree (H)
2. Hartree-Fock-Slater (HFS)
3. Hartree más Intercambio Estadístico (HX)
4. Hartree-Slater (HS)
5. También puede utilizar el verdadero método Hartree-Fock (HF)

Con las autofunciones radiales calcula luego las integrales de Coulomb, F^k y G^k , las integrales de spin-órbita, ζ_{nl} , y otras integrales radiales requeridas para obtener la energía cinética del electrón y la energía de atracción nuclear. Calcula también las correcciones relativistas y de correlación a las energía de ligadura de un electrón y a la energía de ligadura electrónica total.

La entrada a este programa es un archivo llamado in36 cuya primera línea es una línea de control. Los datos consignados en ella indican cual de los métodos antes mencionados será usado y si se tendrán en cuenta las correcciones relativistas y de intercambio; también desde esta línea se controla la información que se obtendrá en la salida del programa.

Las siguientes líneas en el archivo de entrada corresponden una a cada configuración electrónica introducida, conteniendo: número atómico del elemento considerado, estado de ionización, y las especificaciones orbitales y de ocupación de la configuración electrónica correspondiente.

La salida de RCN es un archivo llamado out36; la información que él nos suministra depende de las cantidades introducidas en la línea de control de in36. En la forma más usual, a la salida de RCN encontramos: energía de interacción de Coulomb entre dos electrones, energía de ligadura de $1e^-$ y total (con o sin correcciones relativistas y de intercambio) y los valores para F, G y ζ . También resultan dos archivos binarios, como salida de RCN, que constituyen la entrada a RCN2 o HF8.

- Programa HF8.

Este programa está basado en uno creado por C. Froese-Fischer, y modificado para aceptar como entrada la salida de RCN y para incorporar las correcciones relativistas en las ecuaciones.

Calcula los mismos parámetros que RCN pero sólo con el método HF. Existen algunas diferencias de cálculo que crean ventajas y desventajas con respecto al RCN.

La salida de este programa conforma la entrada a RCN2.

- Programa RCN2.

Con las autofunciones radiales halladas por RCN o HF8, este programa calcula integrales radiales para cada par de configuraciones, como las integrales de Coulomb de interacción de configuraciones, R^k , las integrales de spin-órbita, $\zeta_{nl'n''}$, y las integrales radiales de dipolo eléctrico y dipolo magnético.

La salida de este programa es un archivo donde se encuentran todas las cantidades requeridas para que el programa RCG calcule los niveles de energía del átomo y su espectro.

- Programa RCG.

Este programa calcula los niveles de energía del átomo y los autovectores en acoplamiento intermedio. Con estos valores calcula luego la longitud de onda de las líneas espectrales, la fuerza de oscilador asociada y la correspondiente probabilidad de transición.

La salida de RCG es el archivo outg11 donde se encuentran tabulados, para cada línea espectral, la longitud de onda, λ , la fuerza de oscilador, gf, y la probabilidad de transición pesada de Einstein, gA; también se encuentran tabulados la energía, el valor de j y la configuración dominante, para cada uno de los dos niveles involucrados en la transición.

- Programa RCE.

Este programa realiza un ajuste por cuadrados mínimos de varios parámetros teóricos, de tal modo que los valores de los niveles de energía esten en el mejor acuerdo posible con las observaciones.

Capítulo 4

Resultados

Los programas Fortran utilizados nos permiten introducir en el archivo de entrada a RCN un número máximo de configuraciones y un número máximo de subcapas electrónicas. Respetando esto, se han considerado las configuraciones que nos permitió la memoria de la computadora.

Con estas configuraciones se corrieron los programas RCN, RCN2 y RCG. El archivo outg11, salida de RCG, se reformó de tal manera de servir como entrada a un programa creado para evaluar la expresión 2.12 para todas las líneas permitidas que resultaron de los programas anteriores.

En la sección 2.6.1 vimos que para obtener el flujo que llega a la tierra debemos considerar la distancia al observador, D_{ob} (expresión 2.17); en un gráfico logarítmico, $4\pi D_{ob}^2$ representa un factor aditivo, y, ya que no conocemos D_{ob} , no lo tendremos en cuenta aquí.

Los cálculos fueron hechos para distintos valores de los parámetros de la estrella, R^* y T_{eff} , y de la envoltura, T_e , N_e y V (volumen del material emisor) para diferentes grupos de configuraciones.

4.1 Primer Grupo de Configuraciones

En una primera etapa el archivo in36 fue conformado de la siguiente manera:

```
2 -9 2 10 0.2 5.e-08 1.e-11-2 190 1.0 0.65 0.0 0.00 -6
12 1Mg I 3s2 3s2
12 1Mg I 3s 4s 3s 4s
12 1Mg I 3s 5s 3s 5s
12 1Mg I 3s 6s 3s 6s
12 1Mg I 3s 7s 3s 7s
12 1Mg I 3s 8s 3s 8s
12 1Mg I 3s 9s 3s 9s
12 1Mg I 3s 10s 3s 10s
12 1Mg I 3s 11s 3s 11s
12 1Mg I 3s 12s 3s 12s
12 1Mg I 3s 3d 3s 3d
12 1Mg I 3s 4d 3s 4d
12 1Mg I 3s 5d 3s 5d
12 1Mg I 3s 6d 3s 6d
12 1Mg I 3s 7d 3s 7d
12 1Mg I 3s 8d 3s 8d
12 1Mg I 3s 9d 3s 9d
12 1Mg I 3s 10d 3s 10d
12 1Mg I 3s 11d 3s 11d
12 1Mg I 3s 12d 3s 12d
12 1Mg I 3p2 3p2
12 1Mg I 3p 4p 3p 4p
12 1Mg I 3p 5p 3p 5p
12 1Mg I 3p 6p 3p 6p
12 1Mg I 3p 4s 3p 4s
12 1Mg I 3p 5s 3p 5s
12 1Mg I 3p 6s 3p 6s
12 1Mg I 3p 3d 3p 3d
12 1Mg I 3p 4d 3p 4d
12 1Mg I 3p 5d 3p 5d
12 1Mg I 3p 6d 3p 6d
```

12	1Mg I	3s 3p	3s 3p
12	1Mg I	3s 4p	3s 4p
12	1Mg I	3s 5p	3s 5p
12	1Mg I	3s 6p	3s 6p
12	1Mg I	3s 7p	3s 7p
12	1Mg I	3s 8p	3s 8p
12	1Mg I	3s 9p	3s 9p
12	1Mg I	3s 10p	3s 10p
12	1Mg I	3s 11p	3s 11p
12	1Mg I	3s 12p	3s 12p
12	1Mg I	3s 4f	3s 4f
12	1Mg I	3s 5f	3s 5f
12	1Mg I	3s 6f	3s 6f
12	1Mg I	3s 7f	3s 7f
12	1Mg I	3s 8f	3s 8f
12	1Mg I	3s 9f	3s 9f
12	1Mg I	3s 10f	3s 10f
12	1Mg I	3s 11f	3s 11f
12	1Mg I	3s 12f	3s 12f

-1

Podemos ver que se tuvieron en cuenta configuraciones como $3p^2$ que originarían niveles metaestables (correspondientes al término 3P) en la aproximación de dipolo eléctrico.

Como se explicó en secciones anteriores, por las características del medio donde tiene lugar el proceso, se consideró suficiente introducir configuraciones que dan origen a niveles ubicados hasta el segundo límite de ionización.

El comportamiento del flujo emitido con la variación de los distintos parámetros, para este grupo de configuraciones, está expuesto en las secciones 4.1.1, 4.1.2 y 4.1.3; en todas las figuras $\log \lambda$ representa el logaritmo de la longitud de onda expresada en micrones, y $\log(F_\lambda \lambda)$ ¹ el logaritmo del producto del flujo y la longitud de onda expresado en watts.

¹Ya que cada término de la expresión 15 representa un flujo integrado en un intervalo de longitudes de onda, podemos escribir

4.1.1 Comportamiento del Flujo con las Condiciones Físicas de la Envoltura Estelar.

Manteniendo fijos los valores de los parámetros estelares ($T_{eff} = 13500K$, $R^* = 4R_s$), veremos como se comporta el flujo emitido cuando varían los valores de los parámetros de la envoltura.

Comportamiento del Flujo con la Temperatura.

En la figura 4.1 se muestra el flujo resultante para tres valores diferentes de la temperatura electrónica; para comparación se muestra también el flujo correspondiente a una estrella B normal (flujo fotosférico aproximado con una función de Planck). Se han tomado valores iguales de N_e y V para las tres curvas para poner en evidencia el efecto sobre el flujo de T_e solamente.

En las figuras 4.2 y 4.3 se muestra explícitamente la distribución del flujo con la temperatura, para distintas longitudes de onda (las longitudes de onda efectivas de los filtros del sistema de Johnson y del IRAS, sin tener en cuenta su sensibilidad) y dos diferentes valores de la densidad electrónica. En ambas se consideró el flujo originado en la RD del MgII solamente, sin tener en cuenta el flujo fotosférico).

Observemos que las curvas para los distintos filtros, aunque muestran aproximadamente el mismo comportamiento con la temperatura, no son paralelas; al variar entonces el valor de T_e , las curvas de las figuras 4.1 se desplazan en sentido vertical variando levemente la forma.

También, las curvas que representan la variación del flujo con la temperatura, varían levemente su forma cuando varía la densidad electrónica, des-

$$4\pi R^{*2} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B_\lambda d\lambda + \frac{4}{3}\pi(D^3 - d^3) \sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} \epsilon(\lambda_{lh}) \simeq \sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} F_\lambda \Delta\lambda_{1,2}$$

y considerar

$$F_{\lambda\lambda} = \frac{\sum_{\lambda_1}^{\lambda_2} F_\lambda \Delta\lambda_{1,2}}{\Delta\lambda_{1,2}} \lambda_{eff}$$

plazaándose la temperatura a la cual el flujo es máximo (aproximadamente igual para todas las longitudes de onda).

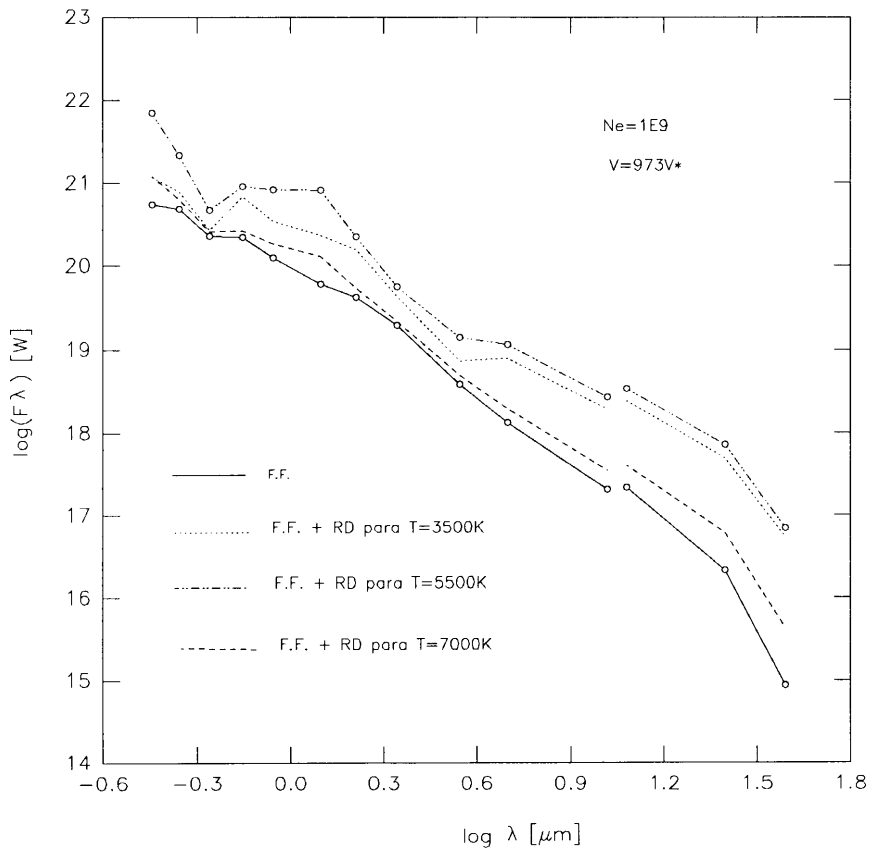


Figura 4.1: Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la temperatura electrónica

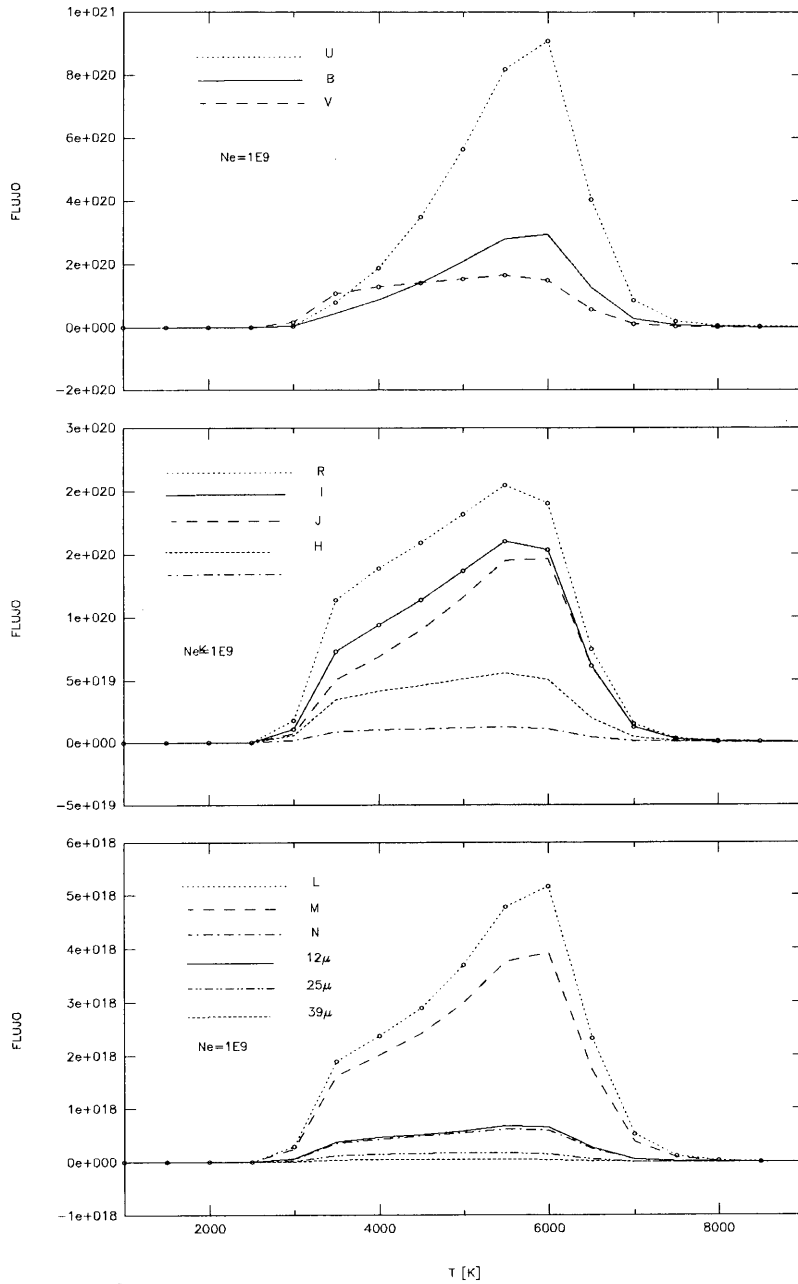


Figura 4.2: Distribución del flujo con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados, para una densidad electrónica de $1E9$ part./cm^3 .

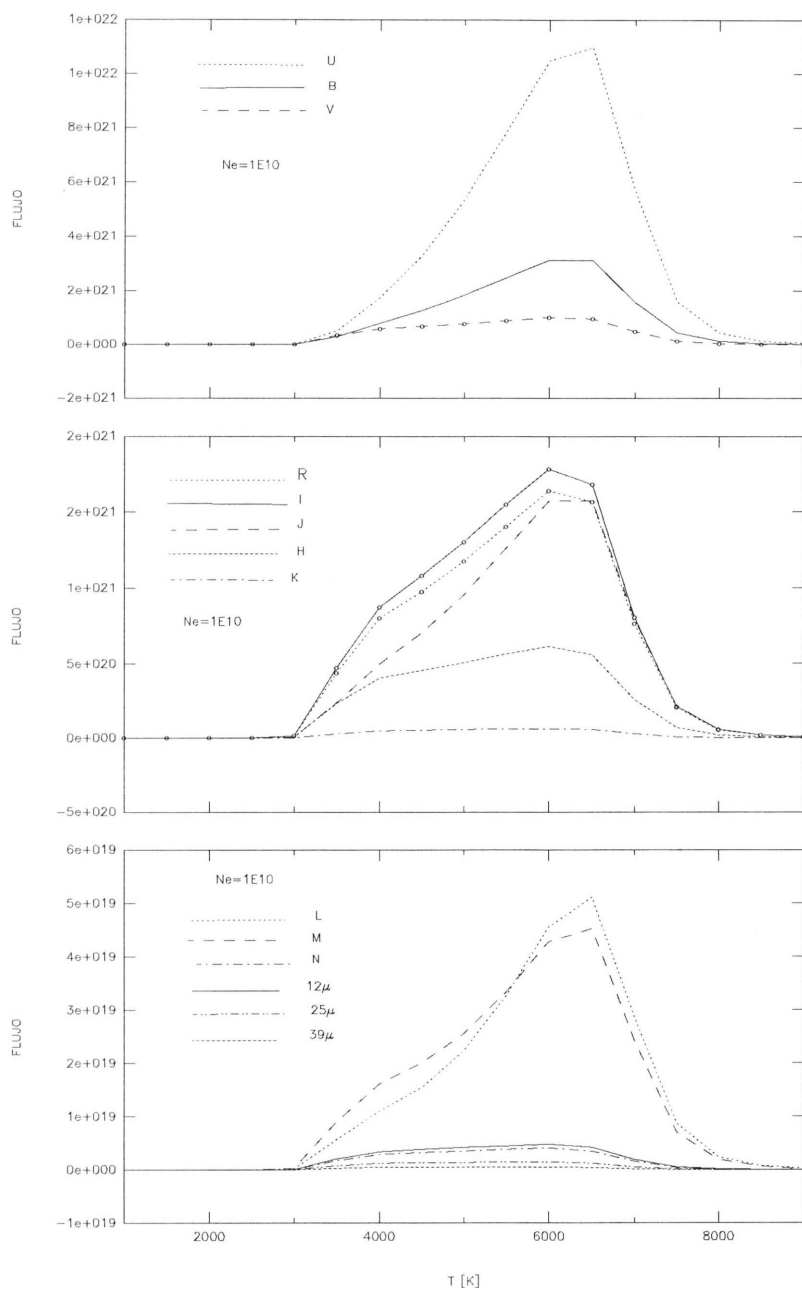


Figura 4.3: Distribución del flujo con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados, para una densidad electrónica de $1E10$ part./ cm^3 .

Comportamiento del Flujo con la Densidad electrónica.

En las siguientes tres figuras podemos observar el comportamiento del flujo con la densidad electrónica. En la 4.4 se muestra la distribución del flujo con la longitud de onda para tres diferentes valores de la densidad electrónica.

La distribución del flujo con la densidad electrónica para diferentes valores de la longitud de onda, se muestra en la figura 4.5 para una temperatura electrónica de 5500K y en la 4.6 para una temperatura electrónica de 3500K.

Es evidente el aumento del flujo emitido cuando crece la densidad electrónica de la zona de la envoltura estelar donde la RD del MgII ocurre.

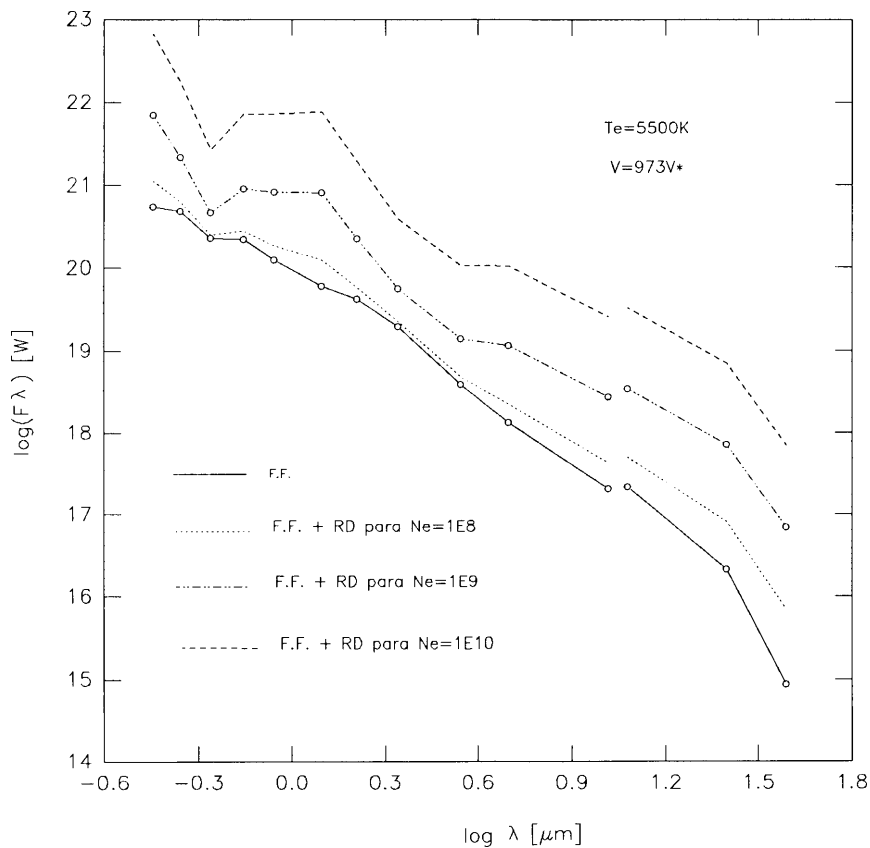


Figura 4.4: Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la densidad electrónica

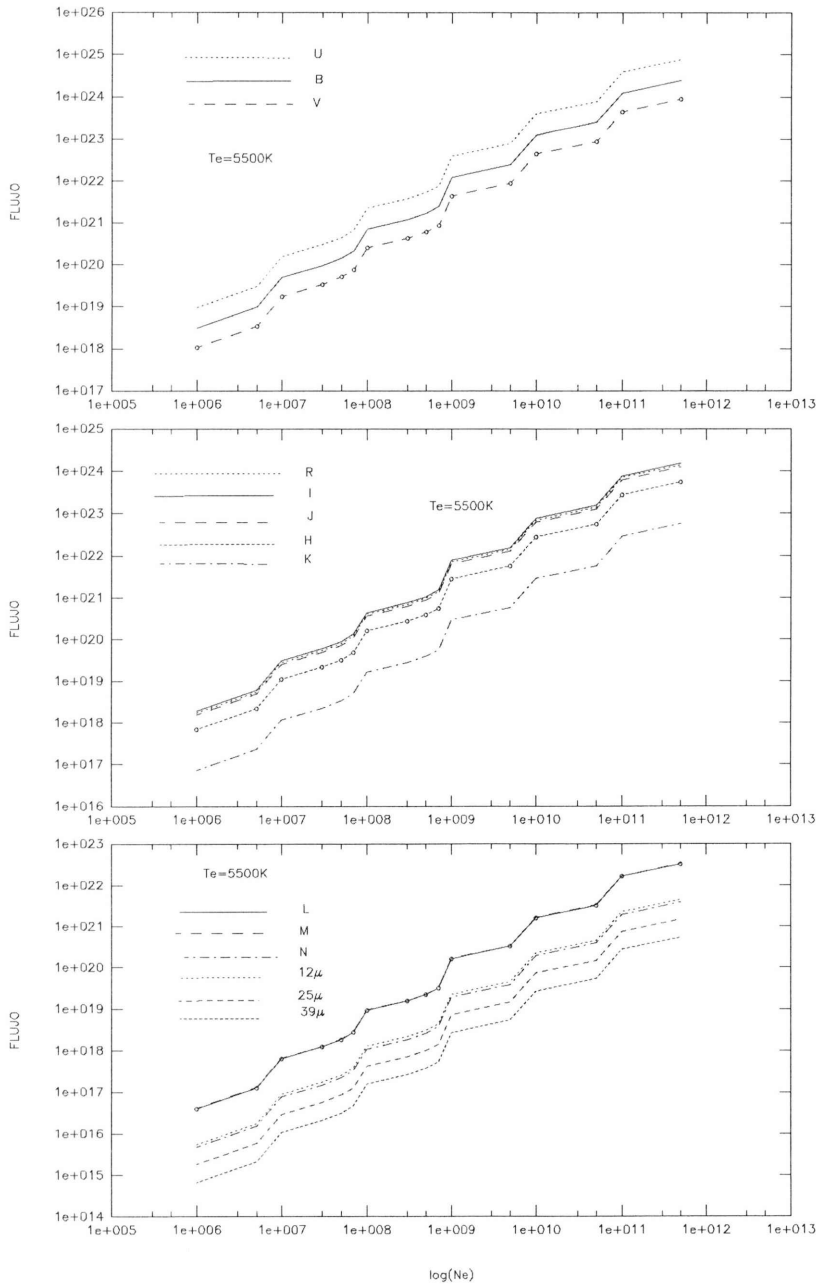


Figura 4.5: Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la densidad electrónica para las longitudes de onda de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), correspondiente a una temperatura electrónica de 5500K

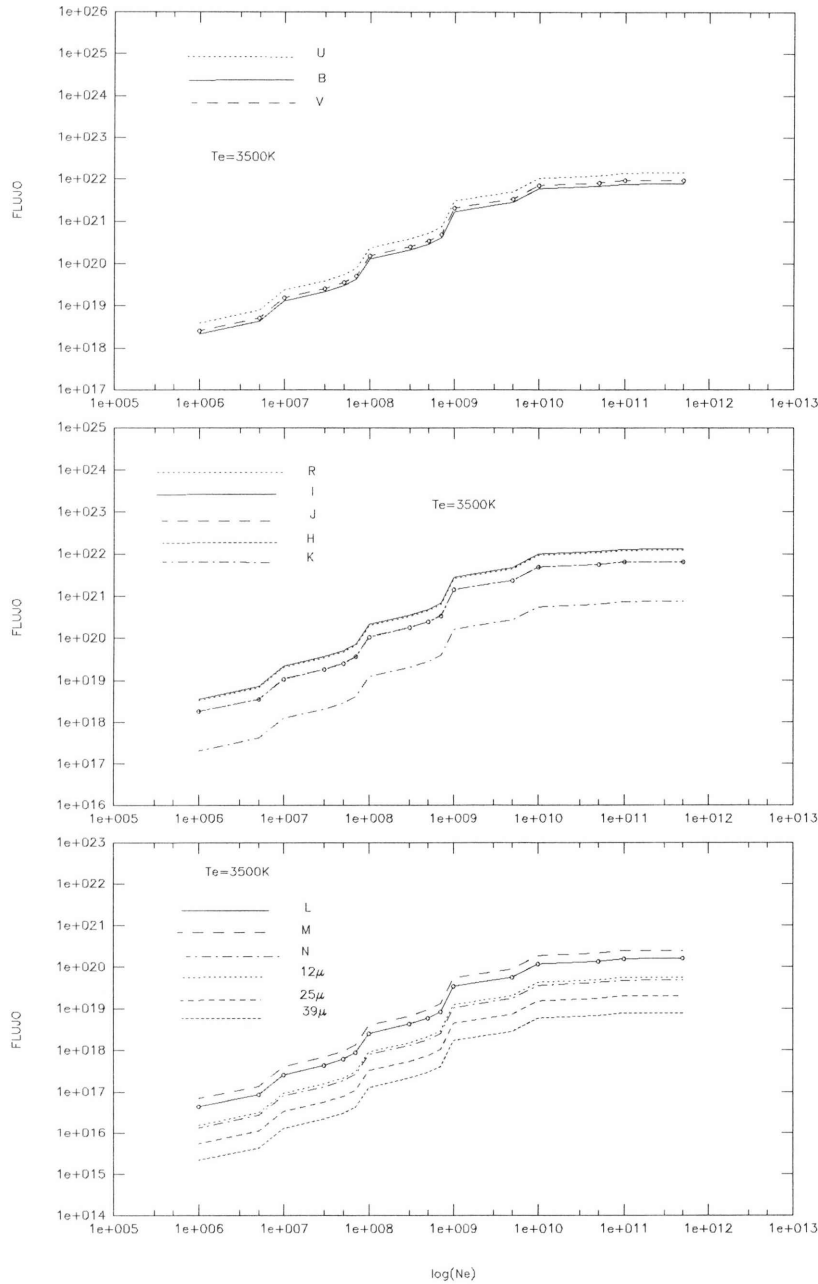


Figura 4.6: Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la densidad electrónica para las longitudes de onda de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), correspondiente a una temperatura electrónica de 3500K

Comportamiento del Flujo con el Volumen del Material Emisor.

En la figura 4.7 mostramos el flujo resultante para tres posibles valores del volumen del material responsable de la RD del MgII.

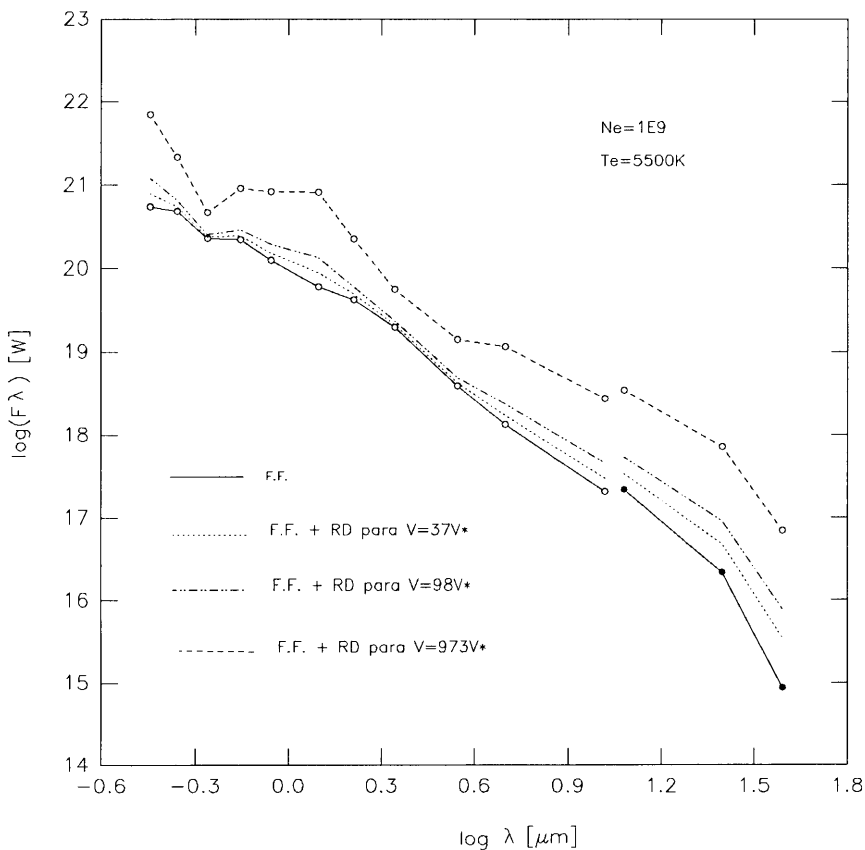


Figura 4.7: Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes del volumen del material emisor

Para tener una idea más clara de lo que estos valores de V representan dentro de la atmósfera estelar, podemos ponerlos en términos de d y D (ver esquema 2.4 de sección 2.6.1). Para ello fijamos un valor para d y, utilizando la expresión $V = \frac{4}{3}\pi(D^3 - d^3)$ calculamos el correspondiente para D ; algunos valores así obtenidos se encuentran consignados en las tablas que siguen:

$V = 98V_*$		
$d = 3R_*$	$d = 5R_*$	$d = 10R_*$
$D = 5R_*$	$D = 6R_*$	$D = 10.3R_*$

$V = 702V_*$		
$d = 3R_*$	$d = 5R_*$	$d = 10R_*$
$D = 9R_*$	$D = 9.4R_*$	$D = 11.94R_*$

$V = 973V_*$		
$d = 3R_*$	$d = 5R_*$	$d = 10R_*$
$D = 10R_*$	$D = 10.32R_*$	$D = 12.54R_*$

Basándonos en el modelo de atmósfera adoptado, hemos considerado que, un valor mínimo adecuado para \mathbf{d} es $3R_*$.

Valores adecuados para \mathbf{V} podrán obtenerse en cada caso (para cada conjunto de valores de los otros parámetros), imponiendo la condición de que el flujo observado comience a apartarse del de una estrella \mathbf{B} normal a partir de $\lambda \simeq 1\mu$, como muestran las observaciones (ver figuras 1.1 y 1.2).

4.1.2 Comportamiento del Flujo con las Configuraciones Atómicas

Configuraciones que dan Origen a Niveles Ligados

La contribución de las distintas configuraciones al flujo total emitido, puede observarse en la figura 4.8.

En ella, una de las curvas fue obtenida con todas las configuraciones detalladas en la sección 4.1 (*"grupo d"*); es decir, esta curva representa la contribución al flujo de todas las configuraciones con $n < 12$ y $l < 3$. Las otras tres curvas, representan el mismo flujo sin considerar la contribución de configuraciones con $n=11$ (*"grupo c"*) en un caso, $n=10$ y 11 en otro (*"grupo b"*) y $n=9, 10$ y 11 (*"grupo a"*) en el último. Las configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes son las mismas en los cuatro casos.

Es obvio que cada configuración contribuye al flujo total emitido, pero, esta contribución no está igualmente distribuída a lo largo del espectro: a medida que n aumenta el incremento de flujo se hace más evidente en las longitudes de onda larga.

Configuraciones que dan Origen a Niveles Autoionizantes

Las figuras 4.9 y 4.10 nos permiten deducir la contribución al flujo total emitido de las distintas configuraciones que dan origen a los niveles autoionizantes.

En ellas se observa el flujo emitido considerando cinco grupos distintos de estas configuraciones, manteniendo iguales en todos ellos las configuraciones que dan origen a niveles ligados. Los cinco grupos fueron conformados de la siguiente manera:

"grupo A": $3p^2$; *"grupo B"*: $3p^2$ y $3p3d$; *"grupo C"*: $3p^2$, $3p3d$ y $3p4s$; *"grupo D"*: $3p^2$, $3p3d$, $3p4s$ y $3p4p$; *"grupo E"*: $3p^2$, $3p3d$, $3p4s$, $3p4p$, $3p4d$, $3p5s$, $3p5p$ y $3p5d$. En este último grupo, entonces, están consideradas todas las configuraciones con las que hemos trabajado en secciones anteriores.

Inmediatamente podemos concluir que el grueso de la RD del MgII, para las condiciones físicas imperantes en las atmósferas estelares y para configuraciones que dan origen a niveles ligados con $n < 12$ y $l < 3$, proviene de la configuración $3p^2$.

Además observamos que, cuanto más alejada energéticamente está una configuración del límite de ionización del átomo, menor es su contribución.

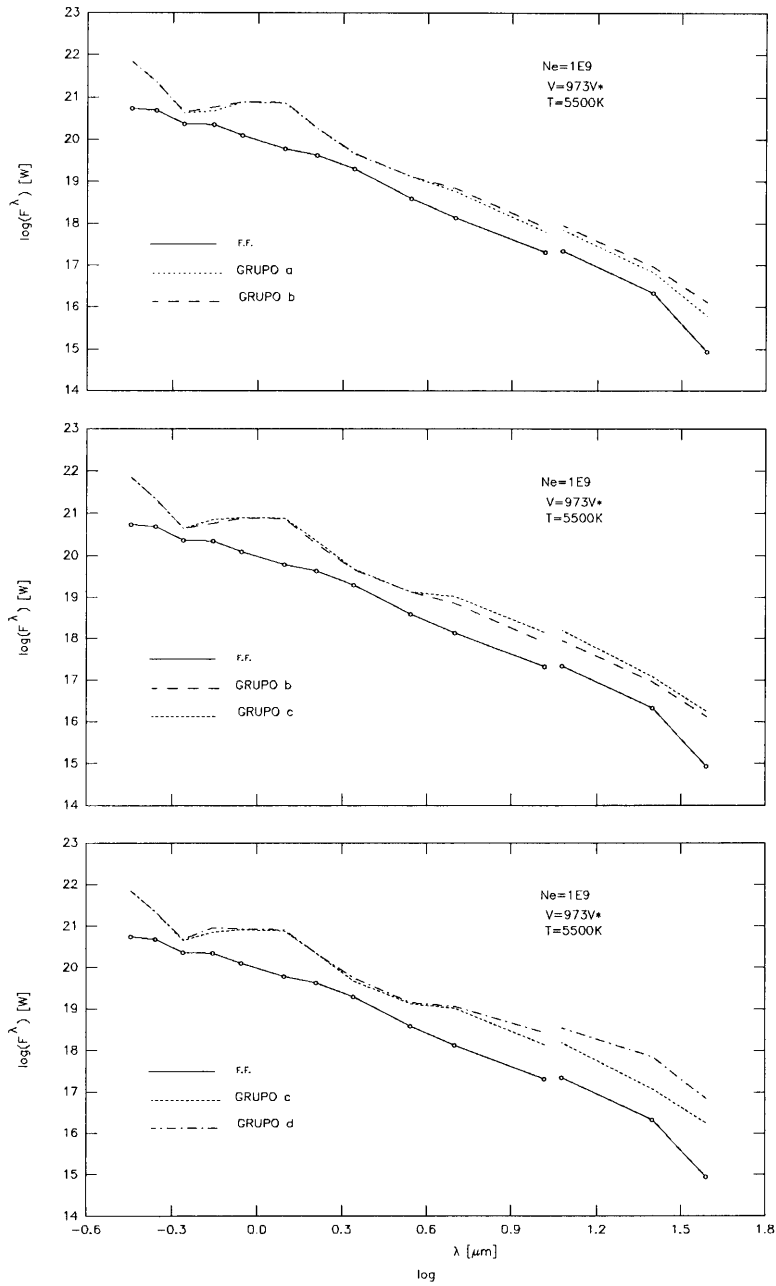


Figura 4.8: Distribución del flujo con la longitud de onda, para cuatro grupos de configuraciones que dan origen a niveles ligados.

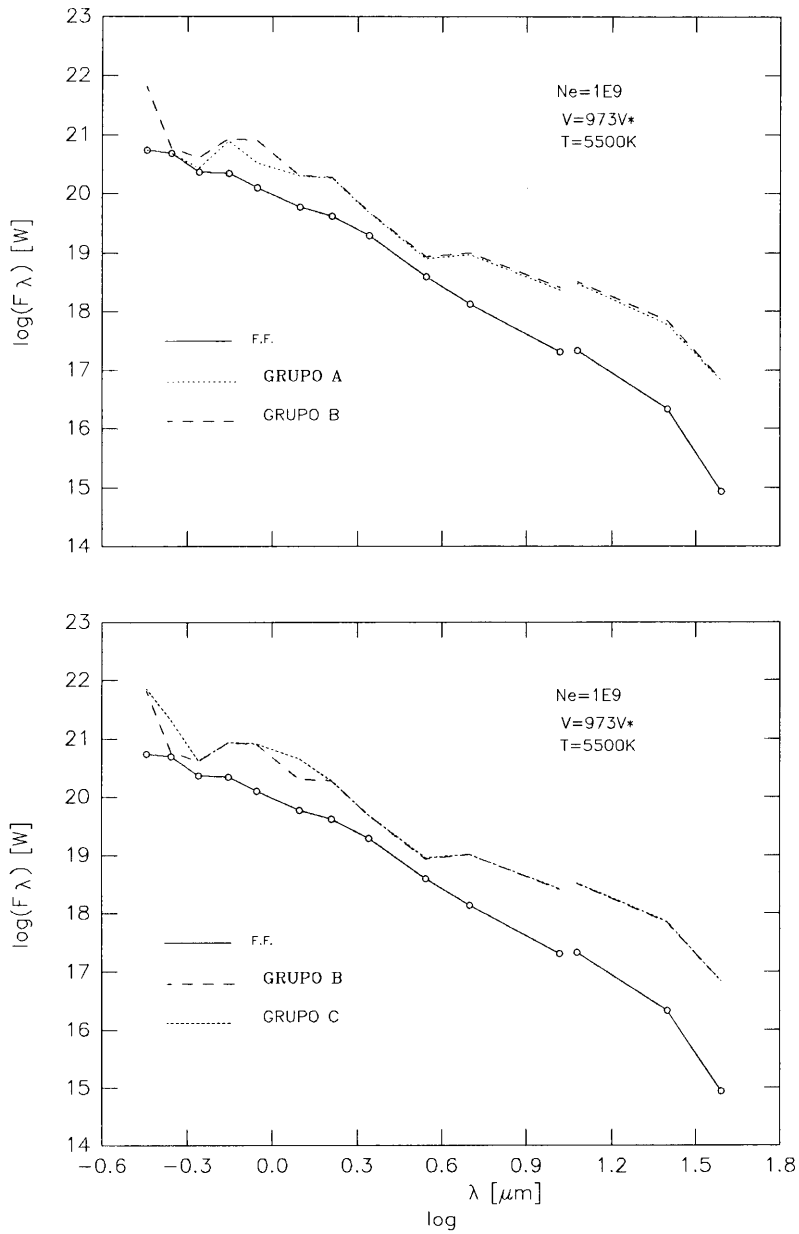


Figura 4.9: Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes.

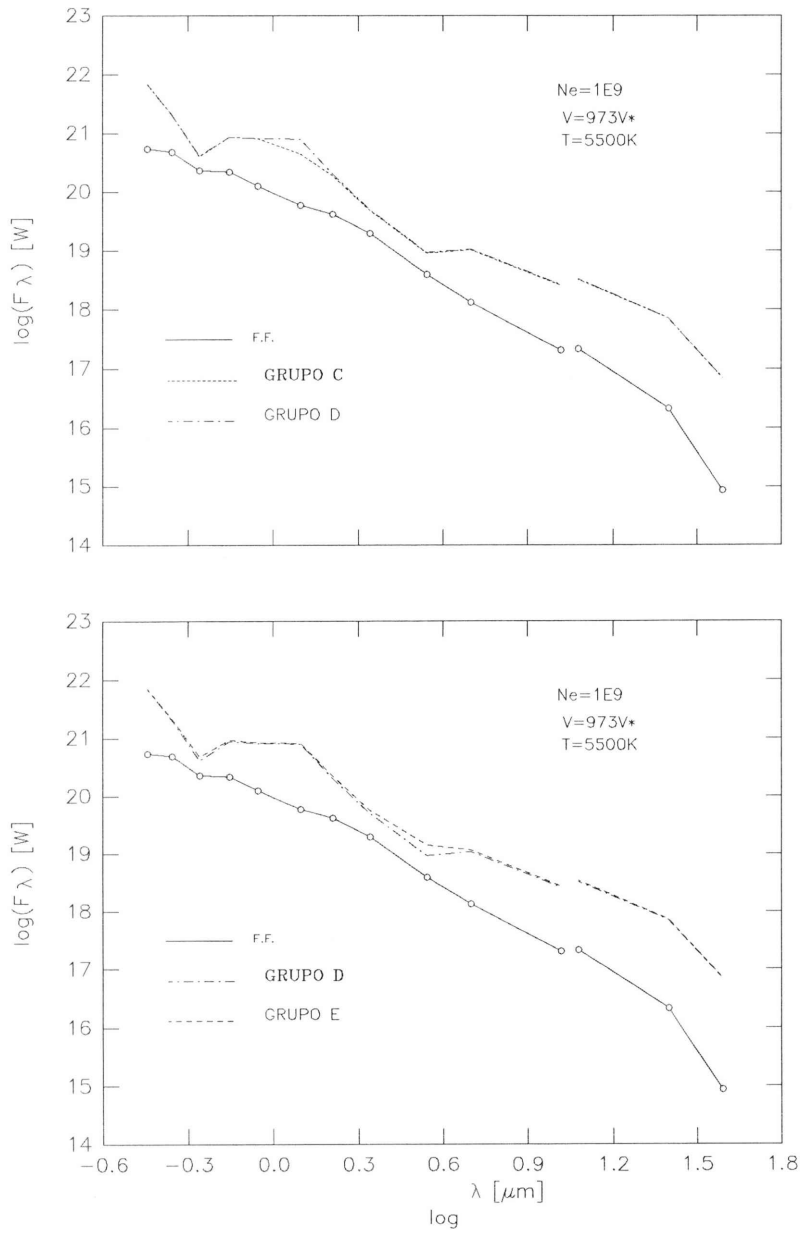


Figura 4.10: Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes.

4.1.3 Comportamiento del Flujo con los Parámetros estelares (T_{eff} y R_*).

La variación de T_{eff} y R_* no afecta el cálculo de la RD bajo las hipótesis asumidas (la RD del MgII es un fenómeno asociado a la envoltura estelar): la distribución con T_e y N_e del flujo irradiado debido a la RD, se mantiene cuando variamos los valores de los parámetros de la estrella; sólo variarán los valores requeridos para V, el volumen de material requerido para que el flujo observado se aparte del fotosférico a partir de $\lambda \simeq 1\mu$, ya que varía el flujo fotosférico.

4.2 Segundo Grupo de Configuraciones.

Si queremos evaluar, o al menos estimar, la contribución al flujo de configuraciones ligadas con $n > 12$, debemos introducir en nuestros cálculos aproximaciones adicionales. La tendencia del comportamiento del flujo cuando aumenta n , se desprende de lo expuesto en la sección 4.1.2, pero no podemos efectuar los cálculos como lo hicimos hasta ahora.

Consideremos la ecuación 2.12 que hemos usado para calcular la emisión en las líneas:

$$\epsilon(\lambda_{lh}) = N_e N(\text{MgII}) \frac{P_{lh}^R}{\sum_{k<l} P_{lk}^R} \sum_j \left[\frac{g_j}{2g_m} \left(\frac{h^2}{2\pi m K T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-E_j}{K T}} P_{jh}^R \right] h \nu_{lh} \quad (4.1)$$

donde $\sum_{k<l} P_{lk}^R$ representa la suma de las probabilidades de transición espontánea desde el nivel l hacia todos los niveles k de menor energía. Con los programas de Cowan, obtenemos los valores de estas probabilidades para todos los niveles originados en las configuraciones que introducimos en in36.

Si queremos trabajar con un grupo de configuraciones con $n > 12$, sin introducir las configuraciones que darían lugar a niveles energéticamente más bajos, no dispondremos de todos los valores P_{lk}^R necesarios para evaluar $\sum_{k<l} P_{lk}^R$.

Para resolver este inconveniente, se calculó $\sum_{k<l} P_{lk}^R$ utilizando una expresión teórica deducida para átomos hidrogenoides²:

$$A = \frac{1.57 E 10 Z_c^4}{n_i n_j^3 (n_j^2 - n_i^2)} \quad (4.2)$$

Aquí A representa la probabilidad de decaimiento radiativo desde todos los niveles con número cuántico principal n_j hacia cualquier nivel con número cuántico principal n_i . Para calcular $\sum_{k<l} P_{lk}^R$ se reemplazaron los números cuánticos, n_i y n_j , por los números cuánticos efectivos para adaptarla a átomos no hidrogenoides como el MgI.

²R. D. Cowan, (1981)

Para estimar cuán buena es esta aproximación, la aplicamos al primer grupo de configuraciones, para el cual teníamos los valores de P_{lk}^R dados por el programa de Cowan, y comparamos los resultados. Estos pueden observarse en la figura 4.11.

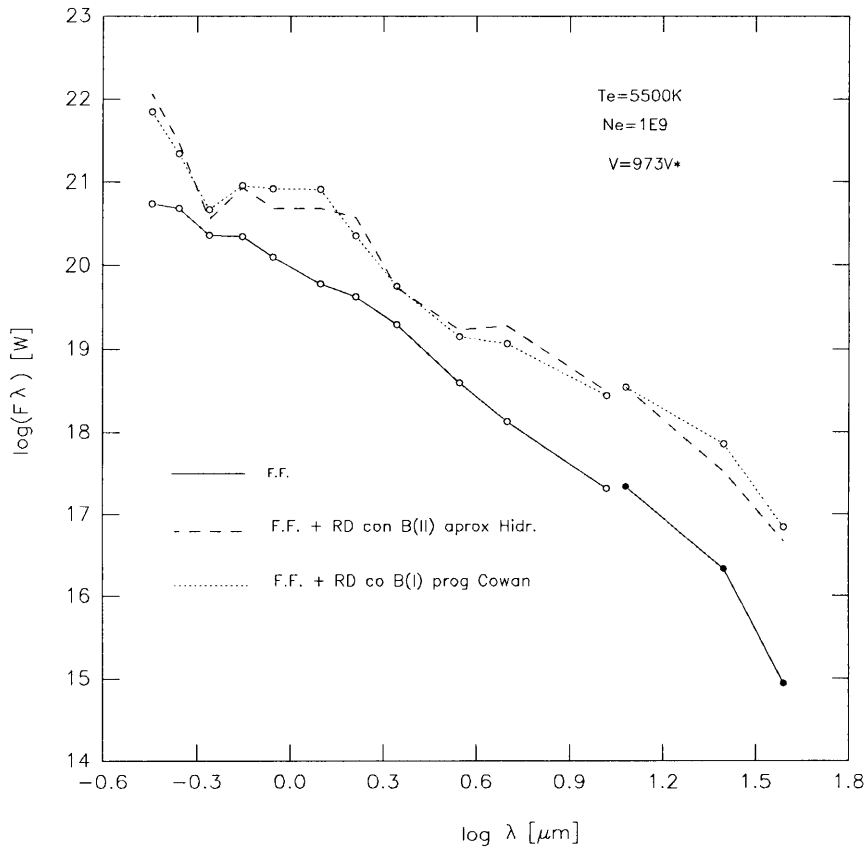


Figura 4.11: *Distribución del flujo con la longitud de onda, para el primer grupo de configuraciones, utilizando las probabilidades calculadas por el programa de Cowan en un caso y la expresión hidrogenoide en el otro*

De la figura anterior se desprende que podemos trabajar con la expresión 4.2 para estimar la contribución al flujo de las configuraciones con n grande.

Así, en esta segunda etapa, se trabajó con un grupo de configuraciones con $n > 12$ que dan origen a niveles ubicados debajo del límite de ionización, manteniendo las mismas configuraciones que dan origen a los niveles au-

toionizantes. El archivo de entrada, in36, utilizado en esta ocasión fue el siguiente:

```

2 -9 2 10 0.2 5.e-08 1.e-11-2 190 1.0 0.65 0.0 0.00 -6
12 1Mg I 3s2 3s2
12 1Mg I 3s 13s 3s 13s
12 1Mg I 3s 14s 3s 14s
12 1Mg I 3s 15s 3s 15s
12 1Mg I 3s 16s 3s 16s
12 1Mg I 3S 17s 3s 17s
12 1Mg I 3S 18s 3s 18s
12 1Mg I 3S 19s 3s 19s
12 1Mg I 3S 20s 3s 20s
12 1Mg I 3S 21s 3s 21s
12 1Mg I 3S 22s 3s 22s
12 1Mg I 3s 13d 3s 13d
12 1Mg I 3s 14d 3s 14d
12 1Mg I 3s 15d 3s 15d
12 1Mg I 3s 16d 3s 16d
12 1Mg I 3s 17d 3s 17d
12 1Mg I 3s 18d 3s 18d
12 1Mg I 3s 19d 3s 19d
12 1Mg I 3s 20d 3s 20d
12 1Mg I 3s 21d 3s 21d
12 1Mg I 3s 22d 3s 22d
12 1Mg I 3p2 3p2
12 1Mg I 3p 4p 3p 4p
12 1Mg I 3p 5p 3p 5p
12 1Mg I 3p 6p 3p 6p
12 1Mg I 3p 4s 3p 4s
12 1Mg I 3p 5s 3p 5s
12 1Mg I 3p 6s 3p 6s
12 1Mg I 3p 3d 3p 3d
12 1Mg I 3p 4d 3p 4d
12 1Mg I 3p 5d 3p 5d
12 1Mg I 3p 6d 3p 6d

```

12	1Mg I	3s 13p	3s 13p
12	1Mg I	3s 14p	3s 14p
12	1Mg I	3s 15p	3s 15p
12	1Mg I	3s 16p	3s 16p
12	1Mg I	3s 17p	3s 17p
12	1Mg I	3s 18p	3s 18p
12	1Mg I	3s 19p	3s 19p
12	1Mg I	3s 20p	3s 20p
12	1Mg I	3s 21p	3s 21p
12	1Mg I	3s 22p	3s 22p
12	1Mg I	3s 13f	3s 13f
12	1Mg I	3s 14f	3s 14f
12	1Mg I	3s 15f	3s 15f
12	1Mg I	3s 16f	3s 16f
12	1Mg I	3s 17f	3s 17f
12	1Mg I	3s 18f	3s 18f
12	1Mg I	3s 19f	3s 19f
12	1Mg I	3s 20f	3s 20f
12	1Mg I	3s 21f	3s 21f
12	1Mg I	3s 22f	3s 22f

-1

4.2.1 Comportamiento del Flujo con las Condiciones Físicas de la Envoltura Estelar.

Al igual que para el primer grupo, mantuvimos fijos los valores de los parámetros estelares en $13500K$ para la T_{eff} y en $4R_s$ para el R^* , para observar el comportamiento del flujo emitido cuando varían los valores de los parámetros de la envoltura.

Comportamiento del Flujo con la Temperatura.

En la figura 4.12 vemos como para este nuevo grupo de configuraciones aumenta considerablemente, con respecto al grupo anterior, el flujo en la banda N del sistema de Johnson y en las tres bandas del IRAS, para las tres temperaturas consideradas, siendo nulo para las restantes bandas.

Este comportamiento está expuesto explícitamente en la figura 4.13. En ellas podemos ver como la temperatura para la cual el flujo es máximo es la misma que para el primer grupo de configuraciones, desplazándose de la misma manera al variar la densidad electrónica.

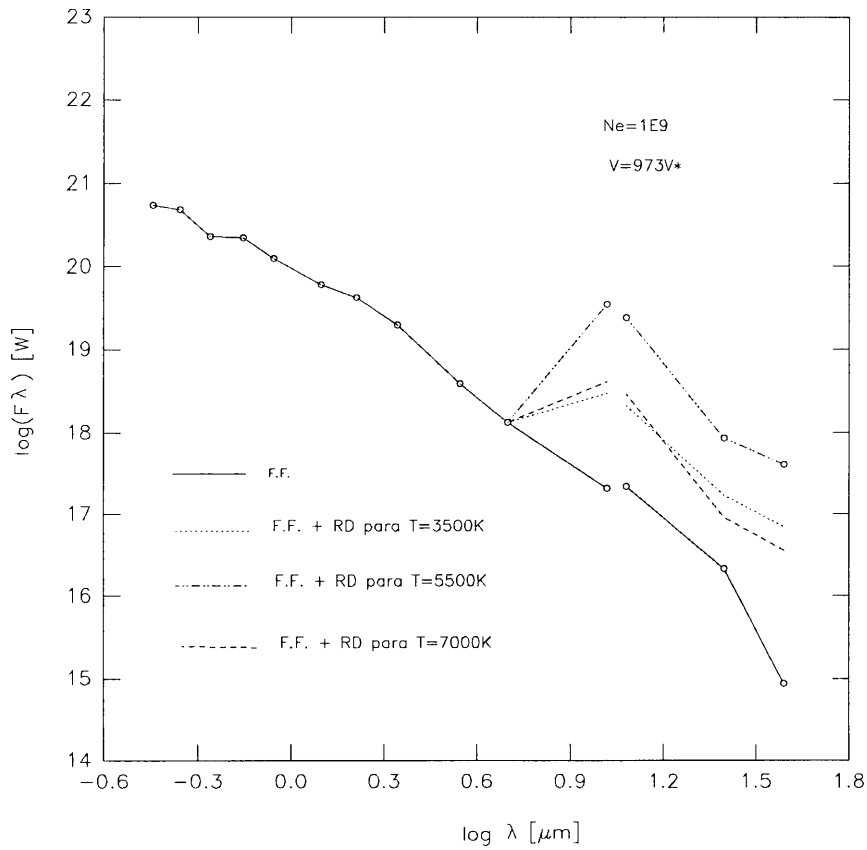


Figura 4.12: Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la temperatura electrónica

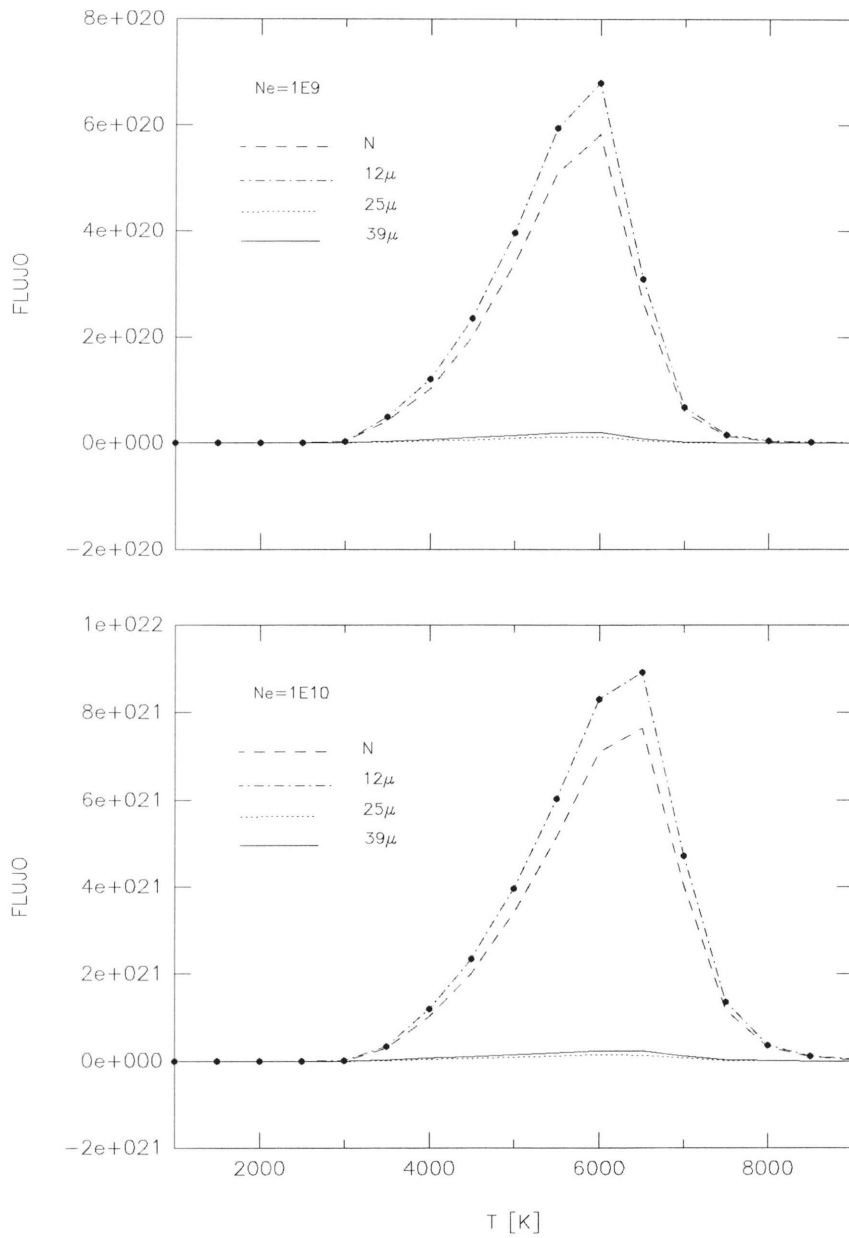


Figura 4.13: Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), para densidades electrónicas de $1E9$ y $1E10$ part./cm³.

Comportamiento del Flujo con la Densidad Electrónica.

Las figuras 4.14 y 4.15, al igual que las 4.4, 4.5 y 4.6 obtenidas para el primer grupo de configuraciones, nos permiten decir que, el flujo emitido en cada longitud de onda para una determinada temperatura, es una función creciente de la densidad electrónica si esta se mantiene dentro de ciertos límites (observar el desplazamiento de las curvas de las figuras 4.2, 4.3 y 4.13 hacia temperaturas mayores cuando aumenta la densidad).

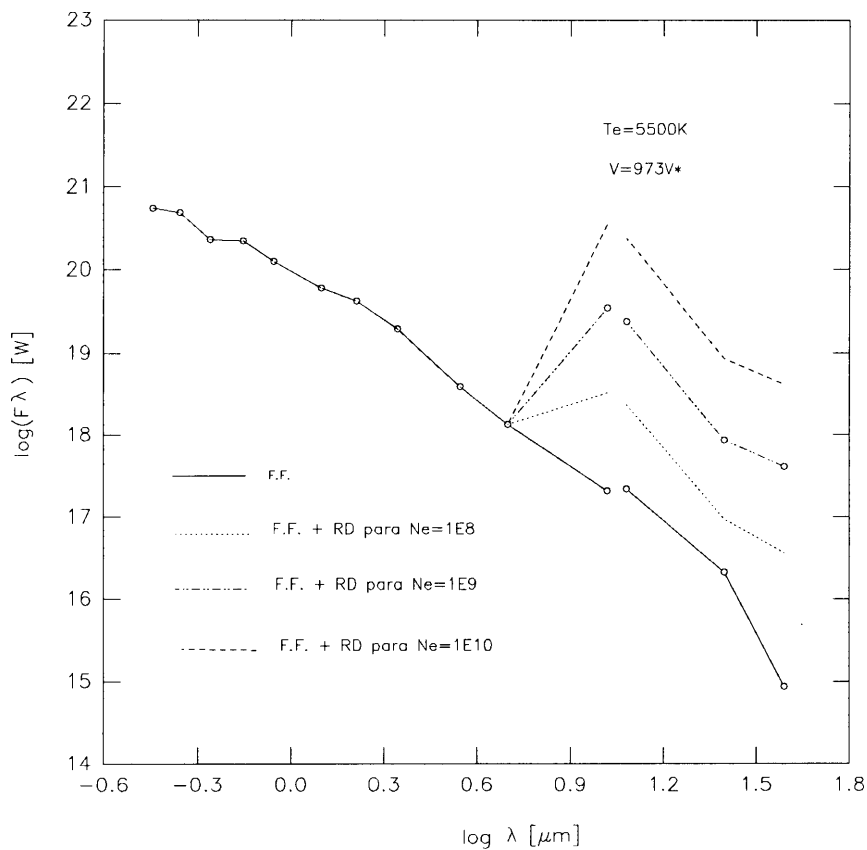


Figura 4.14: Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes de la densidad electrónica

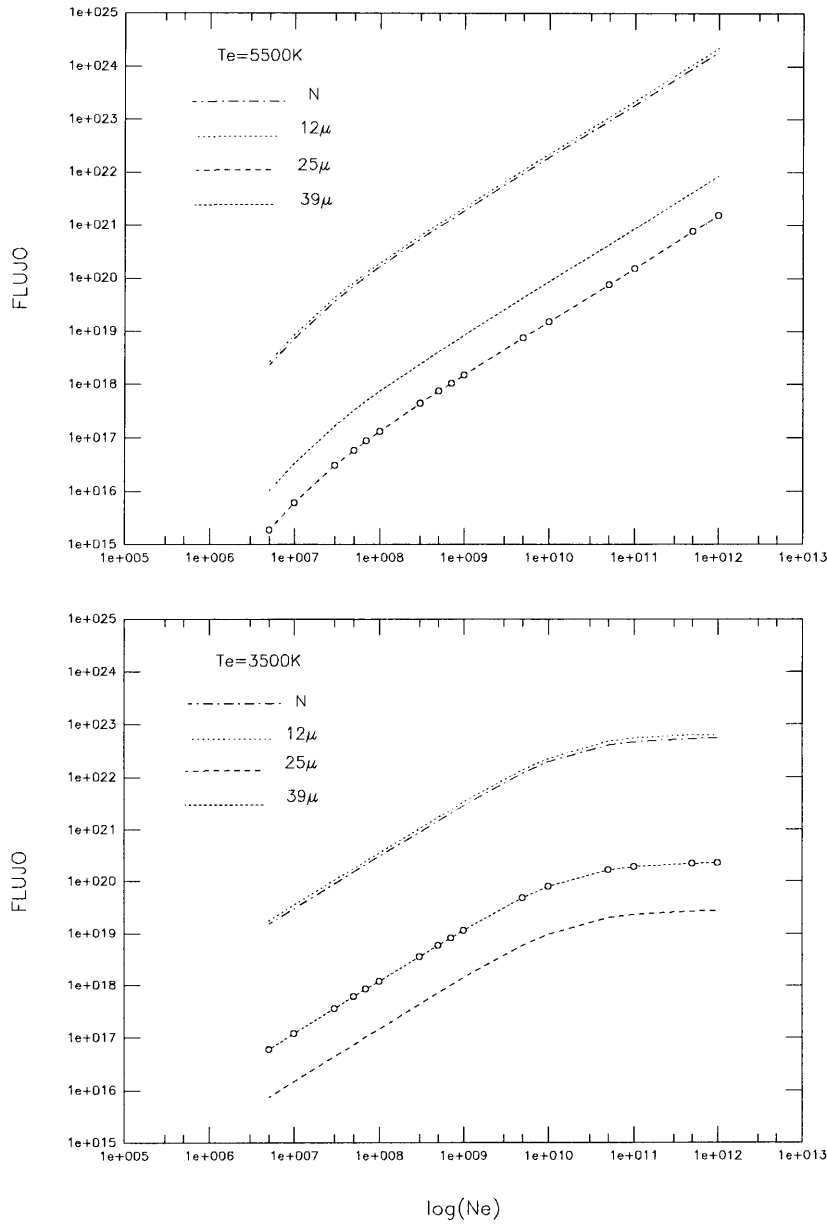


Figura 4.15: *Distribución del flujo (debido a la RD del MgII solamente) con la densidad electrónica para las longitudes de onda de los filtros de los sistemas de colores usados (sin considerar la sensibilidad de los filtros), para temperaturas electrónicas de 5500K y 3500K.*

Comportamiento del Flujo con el Volumen del Material Emisor.

El comportamiento del flujo frente a un cambio en magnitud del volumen del material emisor no depende de las configuraciones involucradas; al aumentar el valor de V aumenta proporcionalmente el flujo emitido. Para este nuevo grupo de configuraciones podemos observar este comportamiento en la figura 4.16.

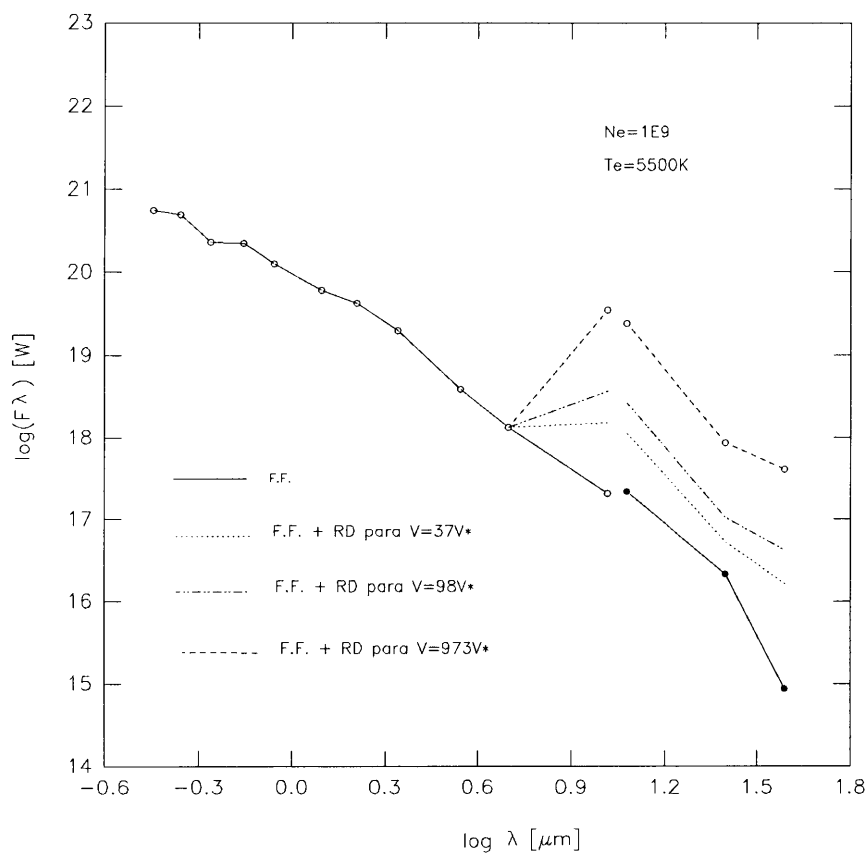


Figura 4.16: *Distribución del flujo con la longitud de onda para tres valores diferentes del volumen del material emisor*

Los valores adecuados para V están enteramente determinados por el primer grupo de configuraciones, ya que, este segundo grupo, no contribuye al flujo en $\lambda \simeq 1\mu$.

4.2.2 Comportamiento del Flujo con las Configuraciones Atómicas

Configuraciones que dan Origen a Niveles Ligados

Confirmando lo dicho en la sección 4.1.2 para el primer grupo de configuraciones, cuando aumenta el número cuántico principal de la configuración considerada, el flujo emitido se observa en longitudes de onda más largas. Este comportamiento puede verse claramente en la figura 4.17. En ella una de las curvas fué obtenida considerando todas las configuraciones detalladas en la sección 4.2; esta es la curva obtenida con el llamado "grupo g", conformado por todas las configuraciones con $13 < n < 22$ y $l < 3$. Otra de las curvas se obtuvo omitiendo la contribución de las configuraciones con $n=21$ ("grupo f") y la restante omitiendo, también, la contribución de las configuraciones con $n=20$ ("grupo e").

Configuraciones que dan Origen a Niveles Autoionizantes

Para obtener las figuras 4.18 y 4.19 se trabajó con los cinco diferentes grupos de configuraciones autoionizantes consideradas en la sección 4.1.2. Puede observarse una fuerte contribución de las configuraciones $3p^2$, $3p3d$ y $3p4p$. También podemos concluir que las configuraciones que se encuentran energéticamente más arriba que la $3p4p$, contribuyen muy poco a la emisión del flujo para la temperatura considerada en la figura.

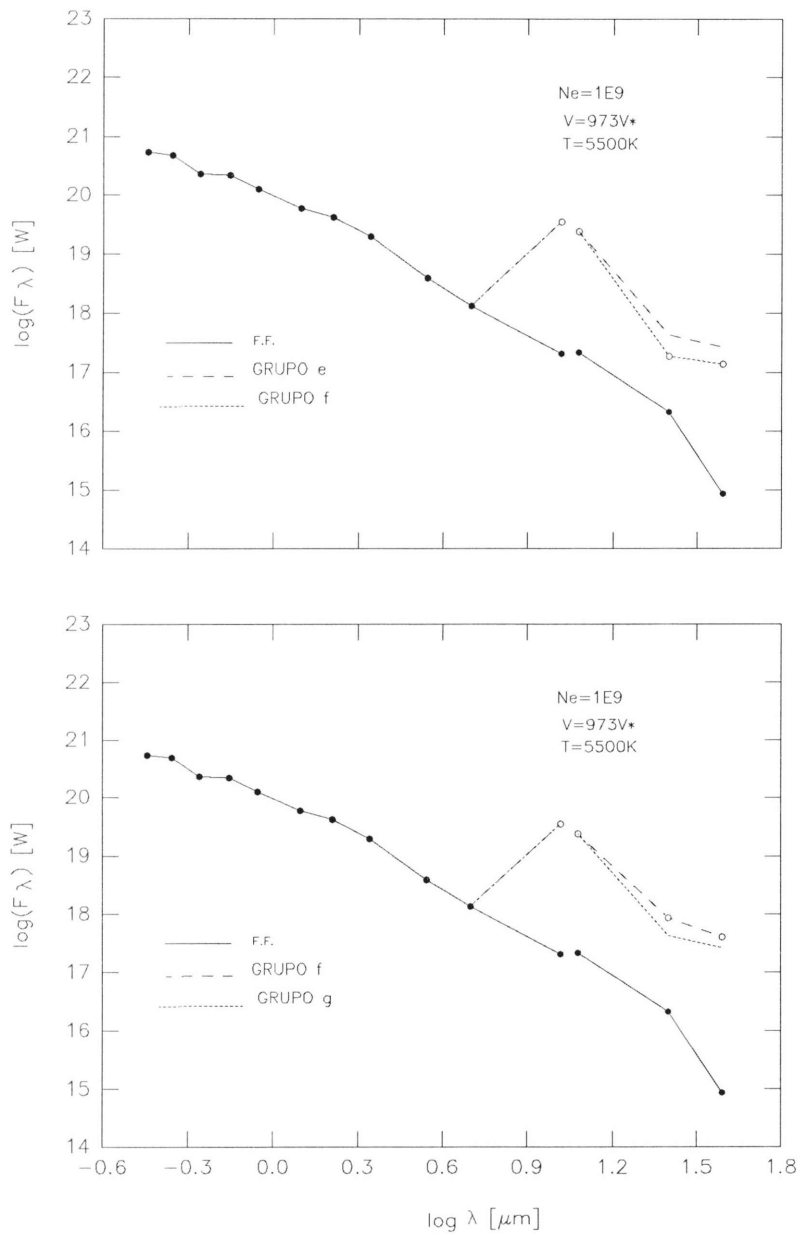


Figura 4.17: Distribución del flujo con la longitud de onda, para tres grupos de configuraciones que dan origen a niveles ligados.

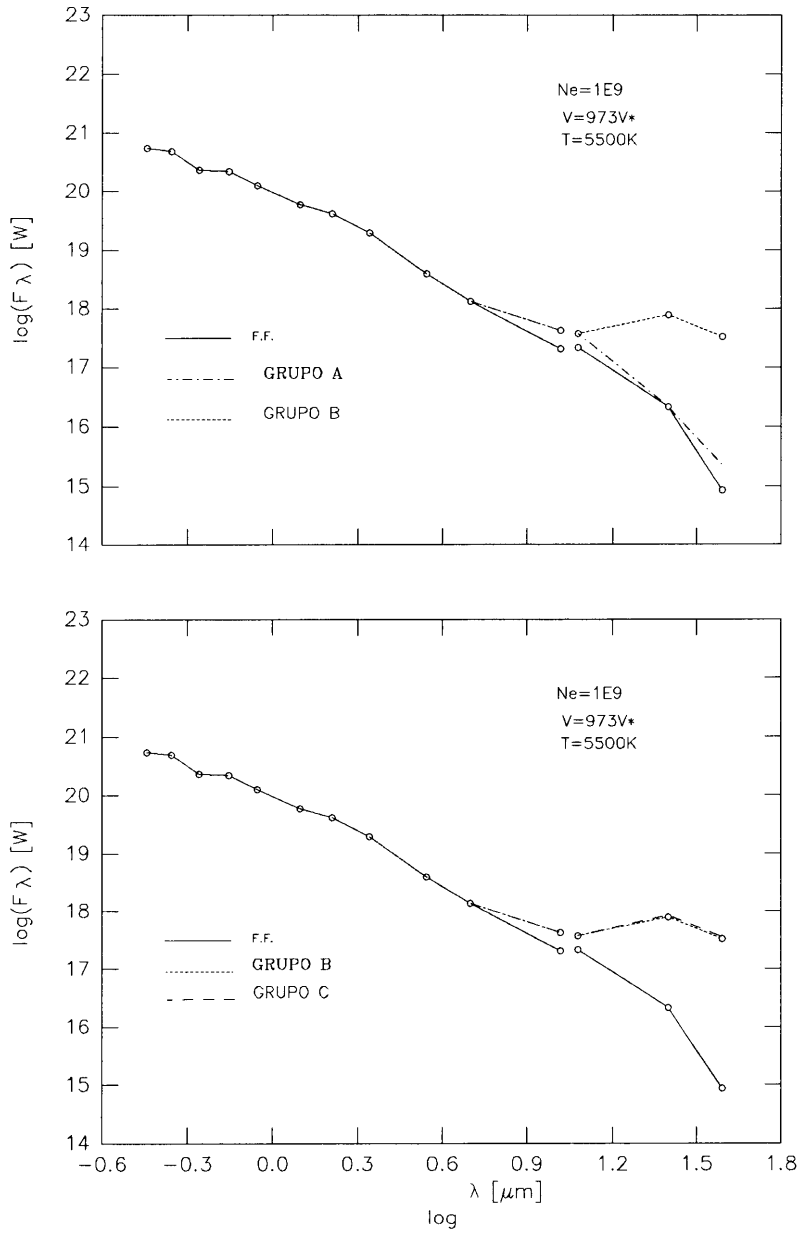


Figura 4.18: Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes.

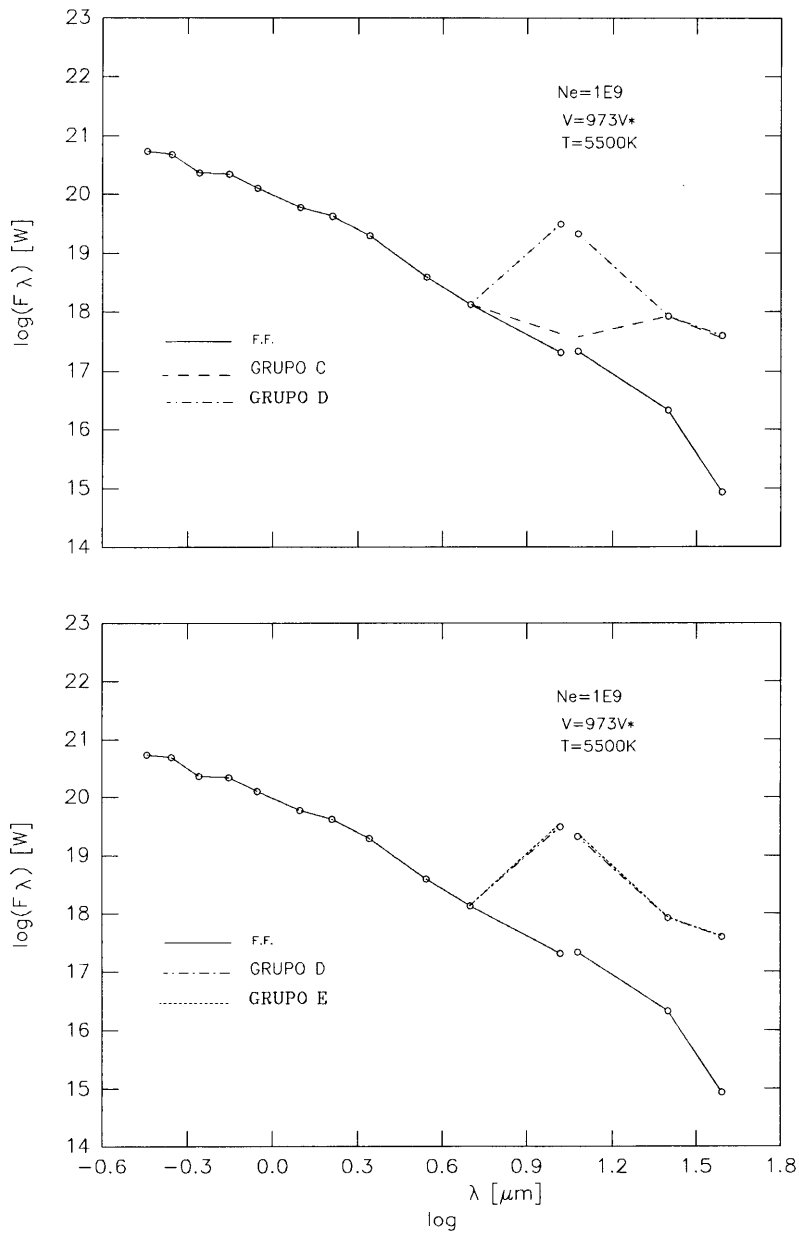


Figura 4.19: Distribución del flujo con la longitud de onda, para dos grupos de configuraciones que dan origen a niveles autoionizantes.

4.3 Estimación del Flujo Emitido por Todas las Configuraciones Atómicas.

4.3.1 Configuraciones Ligadas

De lo expuesto en páginas anteriores se desprende la diferente contribución al flujo total de los dos grupos de configuraciones con los que hemos trabajado. Fundamentalmente es diferente la distribución del flujo con la longitud de

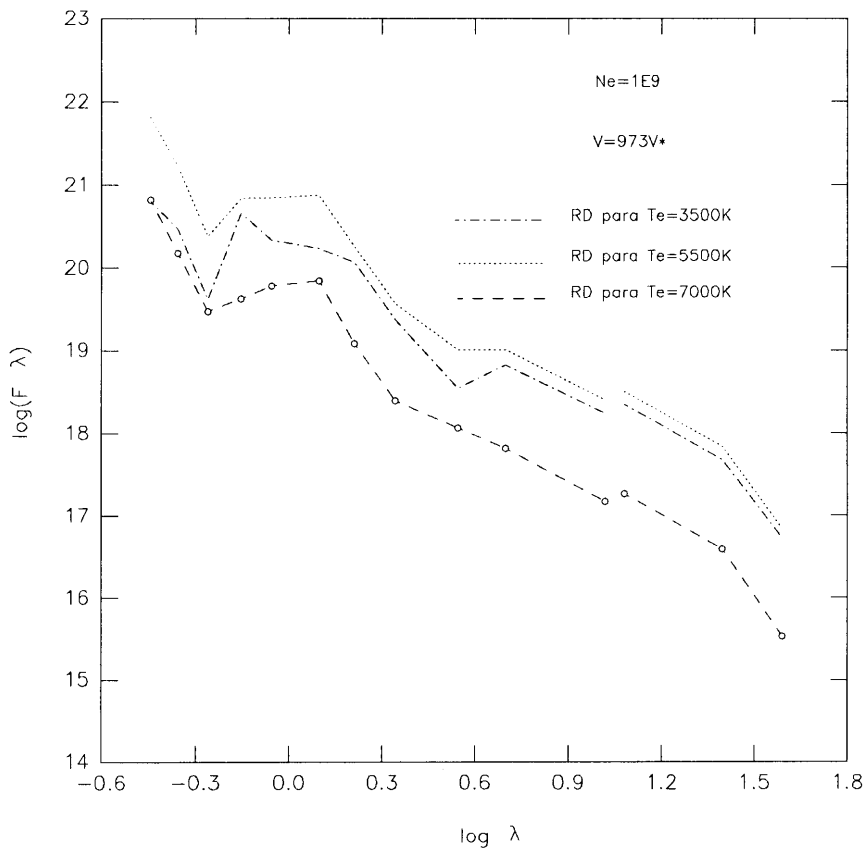


Figura 4.20: *Distribución del flujo originado en la RD del MgII solamente, con la longitud de onda. Curvas obtenidas con el primer grupo de configuraciones*

onda para valores fijos de los otros parámetros, lo que puede verse claramente en las figuras 4.20 y 4.21.

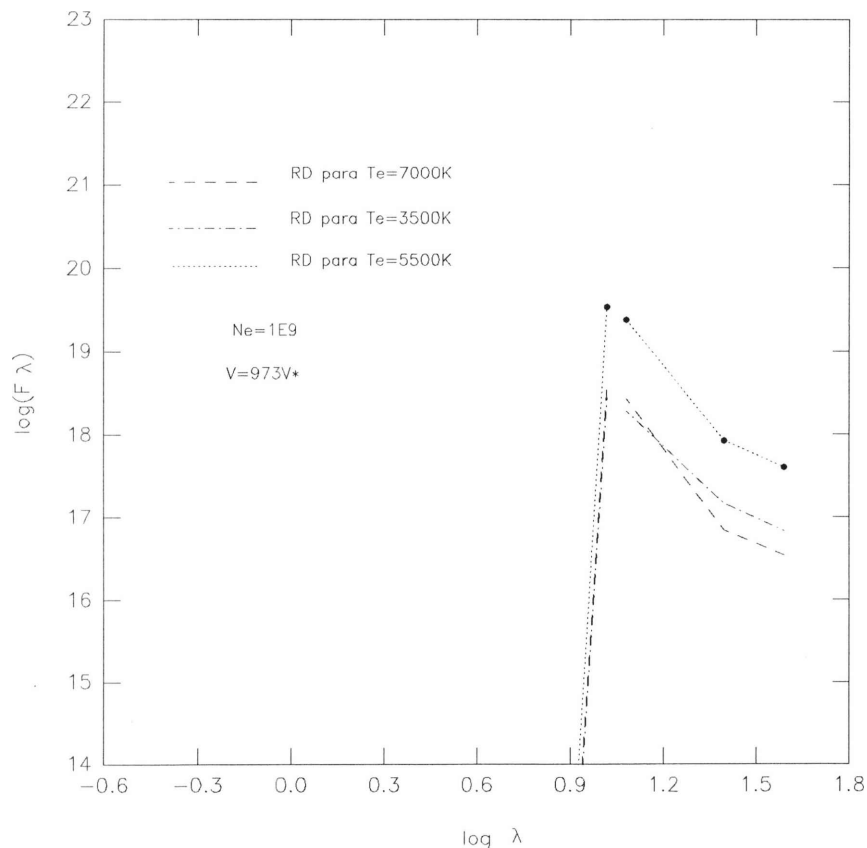


Figura 4.21: *Distribución del flujo originado en la RD del MgII solamente, con la longitud de onda. Curvas obtenidas con el segundo grupo de configuraciones*

Si existen condiciones físicas del medio (envoltura estelar), otras que las que hemos considerado en este trabajo, que determinen que contribuyan unas configuraciones y no otras a la emisión del flujo, no podemos decirlo todavía; por ahora consideraremos que todas pueden contribuir.

Considerando que los resultados obtenidos en las secciones anteriores nos indican que

1. el segundo grupo de configuraciones considerado, con $n > 12$, con-

tribuye al flujo emitido fundamentalmente en longitudes de onda larga siendo muy pequeño el flujo emitido en longitudes de onda cortas

2. y que configuraciones con $n > 21$, no consideradas en este trabajo, contribuirán al flujo emitido básicamente en longitudes de onda aún más largas que las estudiadas por nosotros

podremos estimar el flujo total emitido por todas las configuraciones atómicas, sumando los obtenidos con los dos grupos separadamente.

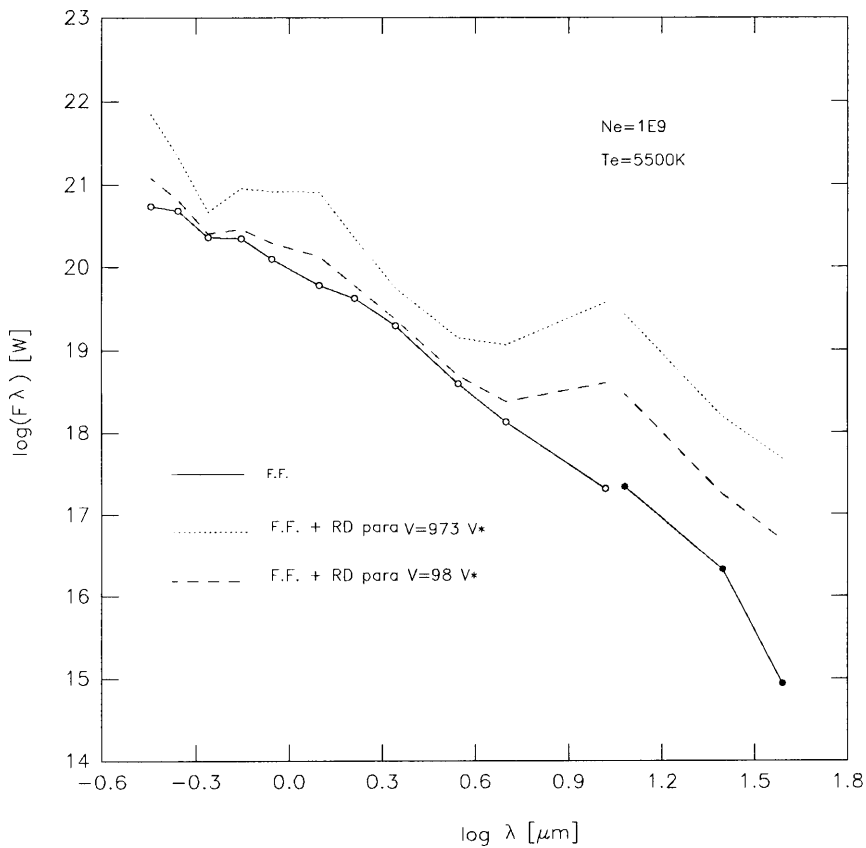


Figura 4.22: Distribución del flujo con la longitud de onda sumando los efectos de los dos grupos de configuraciones, para una temperatura electrónica de 5500K y para dos posibles valores del volumen del material emisor

El resultado puede observarse en la figuras 4.22 para una temperatura

electrónica de 5500K y una densidad electrónica de $1E9 \text{ part./cm}^3$. Debemos tener presente que en la figura anterior no está considerada la contribución al flujo de la energía emitida en las posibles líneas originadas entre ambos grupos de configuraciones. Estas líneas serían las responsables de la pequeña contribución de las configuraciones con valores de n grande, al flujo en las longitudes de onda corta. La emisión en ellas será pequeña ya que la probabilidad de transición espontánea decrece cuando crece Δn .

4.3.2 Configuraciones Autoionizantes

La mayor o menor contribución de una configuración al flujo total emitido, estará determinada, fundamentalmente, por la temperatura del medio. Esta temperatura determinará que proporción de electrones libres habrá con suficiente energía cinética como para alcanzar los estados originados en dicha configuración.

Para las condiciones físicas imperantes en las envolturas de las estrellas **Be**, las configuraciones electrónicas ubicadas arriba del límite de ionización que contribuirán significativamente al proceso de RD del MgII, serán aquellas cercanas a dicho límite.

En la figura 4.20 se refleja lo recién expresado: la temperatura del medio es suficientemente baja como para que la recombinación se produzca, básicamente, vía la configuración $3p^2$ (comparar con la figura 4.9) Por lo tanto, dentro del intervalo de temperaturas consideradas, no cometeremos error apreciable al no tener en cuenta las configuraciones con $n > 5$.

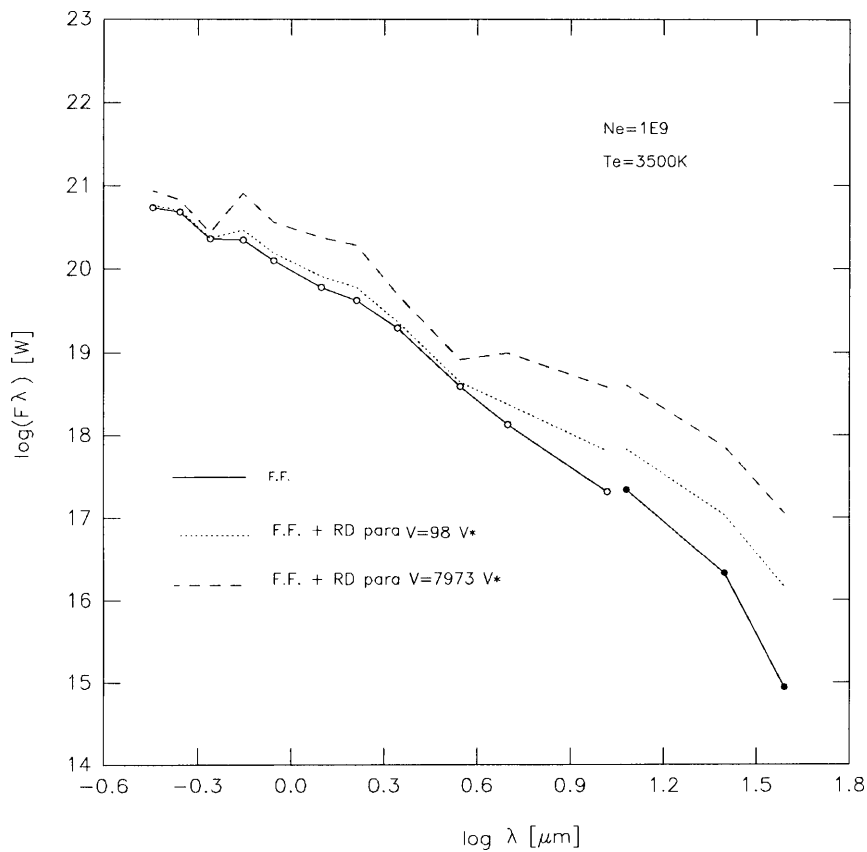


Figura 4.23: Distribución del flujo con la longitud de onda sumando los efectos de los dos grupos de configuraciones, para una temperatura electrónica de 3500K y para dos posibles valores del volumen del material emisor

4.4 Consideraciones sobre la opacidad.

Hasta ahora hemos considerado un medio totalmente transparente a todas las longitudes de onda: ópticamente delgado.

En esta sección consideraremos la posibilidad de que el medio sea ópticamente grueso en las líneas que tienen al nivel fundamental del átomo de MgI como nivel inferior. Esta es una fuerte posibilidad debido a la gran cantidad de átomos que se encuentran en su estado fundamental.

Trataremos el problema considerando que la emisión de fotones debida a transiciones que terminan en el estado fundamental del átomo está exactamente compensada por la absorción de fotones debida a transiciones desde el estado fundamental.

El flujo obtenido considerando un medio ópticamente opaco se muestra en la figura 4.24 donde se observa, básicamente, un aumento de flujo en las longitudes de onda correspondientes a los filtros H y M del sistema de Johnson.

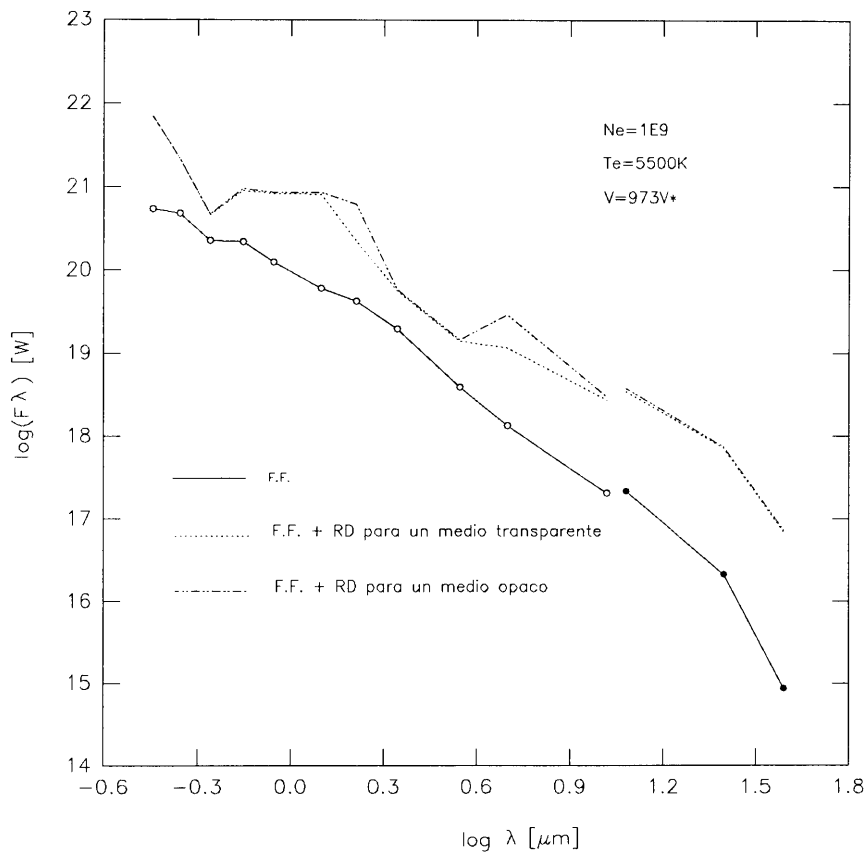


Figura 4.24: *Distribución del flujo con la longitud de onda correspondiente al primer grupo de configuraciones, para un medio ópticamente opaco. Se muestra también la curva correspondiente a un medio ópticamente delgado para comparación.*

Capítulo 5

Rango de Validez de las Aproximaciones. Incertezas.

5.1 Rango de Validez en la Temperatura.

Las aproximaciones hechas dejan de ser válidas tanto a muy bajas como a muy altas temperaturas.

A muy bajas temperaturas (típicamente entre 500K y 5000K) tales que la energía media de los electrones libres sea menor que la energía del más bajo estado autoionizante relativa al primer umbral de ionización ($KT \ll E_0$), la recombinación dielectrónica debe tratarse dentro del cuadro de las fotoionizaciones; así, el efecto de los estados autoionizantes aparecerá como resonancias en las secciones eficaces de fotoionización.

Nuestro tratamiento subestima el valor del coeficiente de RD a muy bajas temperaturas.

A muy altas temperaturas, tales que la energía media de los electrones libres sea mayor que la energía de excitación de la primera transición resonante del ion que se recombina ($KT > E_R$), el proceso de RD debe tratarse como lo hizo Burgess; así se tendrán en cuenta recombinaciones a estados con número cuántico principal grande ($n \approx 100$) y no se tomará en cuenta el decaimiento del electrón exterior.

Nuestro tratamiento, también en este caso, subestima los valores de los coeficientes.

Para estimar una temperatura debajo de la cual las aproximaciones no son

válidas, podemos hacer $T \approx E_0/3K$ (teniendo en cuenta el ancho apreciable de los estados autoionizantes); para el átomo de MgI $E_0 \approx 0.82eV$ y resulta entonces una temperatura mínima de aproximadamente 3000K.

Igualmente podemos estimar una temperatura máxima por encima de la cual nuestros resultados no serían correctos calculando $T \approx 2E_R/3K$; para el Mg $E_R \approx 4.4eV$ lo que implica una temperatura máxima de aproximadamente 35000K.

5.2 Rango de Validez en la Densidad electrónica.

El rango de validez en la densidad electrónica estará dado por el intervalo en el cual es válido desprestigiar los procesos colisionales.

Al plantear las ecuaciones de equilibrio estadístico, en la sección 2.5, hemos considerado que un nivel autoionizante sólo puede poblarse por captura electrónica y despoblarse por autoionización o caída radiativa. Hemos supuesto que es poco probable que este nivel se despueble por excitación, desexcitación o ionización colisional. Para ello nos basamos en el método propuesto por Wilson ¹ quién supone que todos los niveles con número cuántico n menor que un cierto n_t , tienen una probabilidad mucho mayor de sufrir un decaimiento radiativo antes que una transición colisional.

Considerando que:

la probabilidad de decaimiento radiativo desde un nivel con número cuántico principal n es inversamente proporcional a la quinta potencia de n ;

la probabilidad de que se produzca una transición colisional desde el mismo nivel es proporcional a la densidad electrónica, N_e , y a la cuarta potencia de n ;

y la probabilidad de una ionización colisional es proporcional a la segunda potencia de n ,

Wilson obtiene una expresión para n_t dada por:

$$n_t^7 = \frac{5.6E17(Z - N + 1)^6 T^{1/2}}{N_e}$$

¹R. Wilson, (1962)

la cual evaluamos para distintos valores de N_e y T_e . Algunos resultados así obtenidos se muestran en el cuadro que sigue.

T	N_e	n_t
3000	1E7	60
7000	1E7	64
3000	1E9	31
7000	1E9	33
3000	1E10	23
7000	1E10	24
3000	1E11	16
7000	1E11	17
3000	1E12	11

En la figura 5.1 se ha graficado N_e como función de T_e para valores fijos de n_t ; de esta manera, siendo n_t el mayor valor del número cuántico principal de las configuraciones con las que estamos trabajando, la curva correspondiente nos permite obtener para cada valor de T_e el máximo valor aceptable para la densidad electrónica para el que podemos despreciar los procesos colisionales.

Ya que nosotros trabajamos con $n \leq 20$, en la última curva de la figura 5.1 podemos apreciar el intervalo de densidades electrónicas dentro del cual es válido despreciar los procesos colisionales para el intervalo de temperaturas electrónicas que hemos adoptado

Podemos decir entonces que, para las configuraciones con las que hemos trabajado, no cometemos error apreciable si consideramos densidades electrónicas de hasta $1E10 \text{ part./cm}^3$ despreciendo las colisiones.

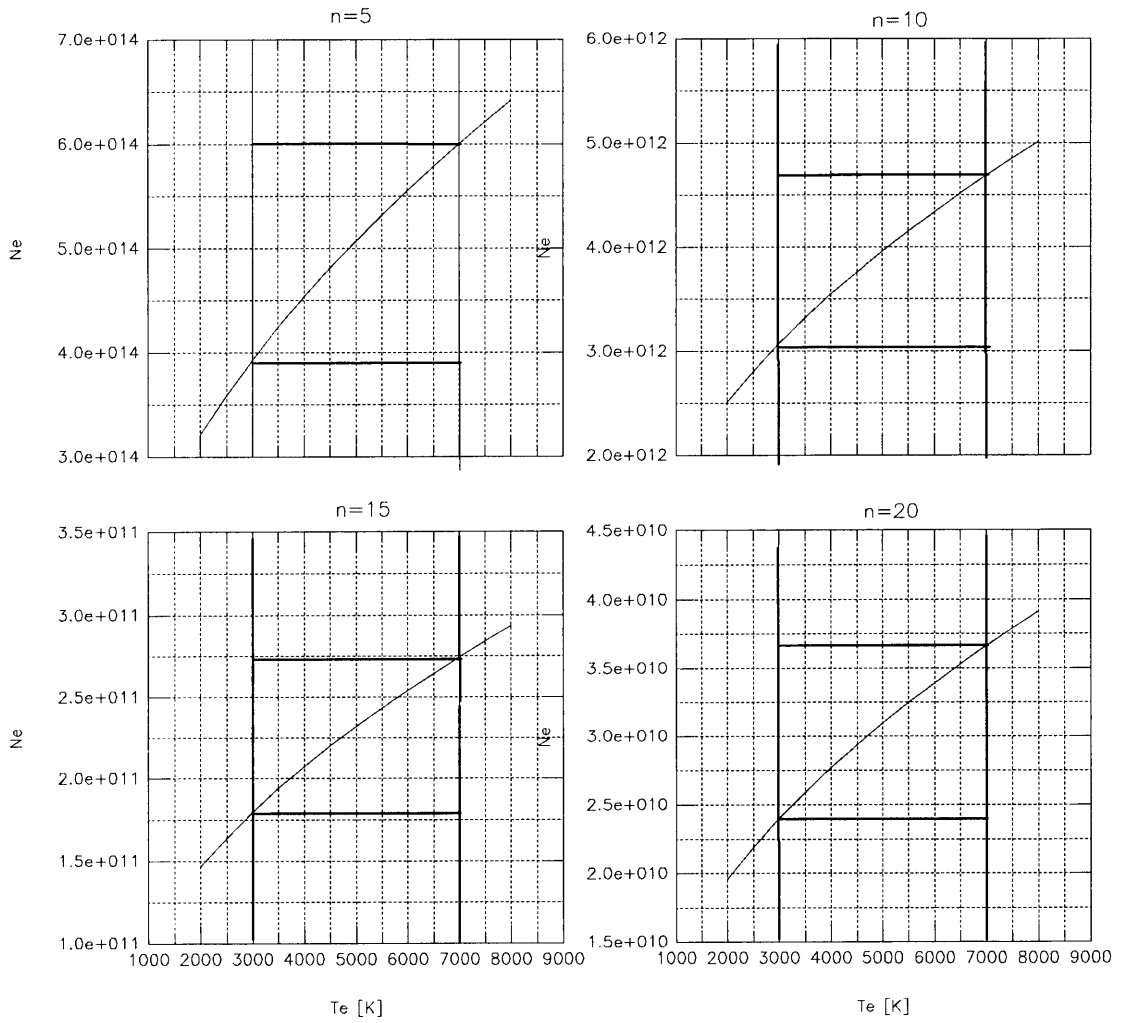


Figura 5.1: Mximo valor de N_e aceptable si despreciamos las colisiones en funci3n de T_e para cuatro diferentes valores de n_t

5.3 Error Cometido al considerar $P^A \gg P^R$ en todos los casos

Para estimar este error consideremos las expresiones que representan las probabilidades de autoionización y decaimiento radiativo:

- Para un nivel permitido a autoionizar en acoplamiento LS:
 1. Si la transición se produce sin cambios en el número cuántico principal del corazón de electrones y del electrón exterior: $\Delta n = 0$
Esto implica que el decaimiento del átomo se produce vía el electrón exterior; en este caso la expresión que nos da la probabilidad de decaimiento radiativo es:

$$P_{jk}^R \propto \alpha^3 z$$

donde α es la constante de estructura fina y z la carga atómica del ion que se recombina.

2. Si la transición se produce cambiando el número cuántico principal: $\Delta n \neq 0$
En este caso el decaimiento del átomo se produce vía el electrón interior y las correspondiente expresion es:

$$P_{jk}^R \propto \frac{\alpha^3 z^4}{\nu^3}$$

con $\nu = n - \mu$; aquí ν representa el número cuántico efectivo y μ el defecto cuántico.

Para ambos casos, 1 y 2, la probabilidad de autoionización se puede escribir como:

$$P_j^A \propto \frac{1}{\nu^3}$$

La variación de esta última expresión con el número cuántico l es como l^{-5} aproximadamente; típicamente primero crece y luego decrece rápidamente para $l > 3$.

Obtenemos entonces:

$$\frac{P_j^A}{P_{jk}^R} \propto \frac{1}{\alpha^3 z \nu^3} \text{ si } \Delta n = 0 \quad \text{y} \quad \frac{P_j^A}{P_{jk}^R} \propto \frac{1}{\alpha^3 z^4} \text{ si } \Delta n \neq 0$$

Deducimos entonces que $P^A \gg P^R$ siempre que z , ν y l sean pequeños.

Para las configuraciones con las que hemos trabajado se cumple que $\nu < 20$ y $l \leq 3$, y ya que para el MgI, $z=1$, podemos despreciar P^R frente a P^A para todos los niveles que pueden autoionizar en acoplamiento LS.

- Para un nivel prohibido a autoionizar en acoplamiento LS:

Para estimar la probabilidad de autoionización de estos niveles debemos considerar el acoplamiento entre estos y aquellos que si pueden autoionizar en acoplamiento LS. Al primer orden en la teoría de perturbaciones, el coeficiente de acoplamiento entre ambos tipos de niveles se puede escribir como:

$$c_{ij} = \frac{\xi_{ij}}{\Delta E_{ij}}$$

válida para niveles correspondientes a términos originados en la misma configuración.

Introduciendo en esta última las expresiones para ξ , operador spin-órbita, y E , energía electrostática total, llegamos a:

$$c_{ij} = \frac{z_{so}^4 \nu^3}{2c^2 n_c^3 z}$$

con

n_c : número cuántico principal del corazón de electrones

ν : número cuántico efectivo del término

z_{so} : verifica $z < z_{so} < Z$ donde Z es la carga atómica del núcleo.

Si sólo existe este acoplamiento, será:

$$P_j^A = c_{ij}^2 P_i^A$$

c_{ij} aumenta rápidamente como una función de z y ν hasta que $P_j^A \approx P_i^A$.

Por otra parte, ya que P^A es casi independiente de Z y la probabilidad de decaimiento radiativo aumenta cuando crece Z , para átomos livianos la autoionización se produce más frecuentemente que la radiación y ocurre lo contrario para átomos pesados; en la figura 5.2 podemos ver una curva teórica dada por Wentzel y corroborada por el experimento, que muestra este hecho.

En esta figura la ordenada p da la fracción de átomos en el estado j que emiten radiación desde este estado; $1 - p$ da entonces la fracción de estos átomos que dejan el estado j por autoionización. La abscisa indica el número atómico Z .

Los cálculos y conclusiones de Nussbaumer y Storey ² para el átomo de MgI ($z=1$, $Z=12$) confirman lo antes dicho, y nos permiten incluir en nuestros cálculos las configuraciones $3p4p$ y $3p3d$ que dan origen a niveles que no pueden autoionizar en acoplamiento LS. Según estos autores, la inclusión de términos prohibidos a autoionizar en acoplamiento LS, aumenta el coeficiente de recombinación total en un 10 % .

²H. Nussbaumer y P.J. Storey (1985)

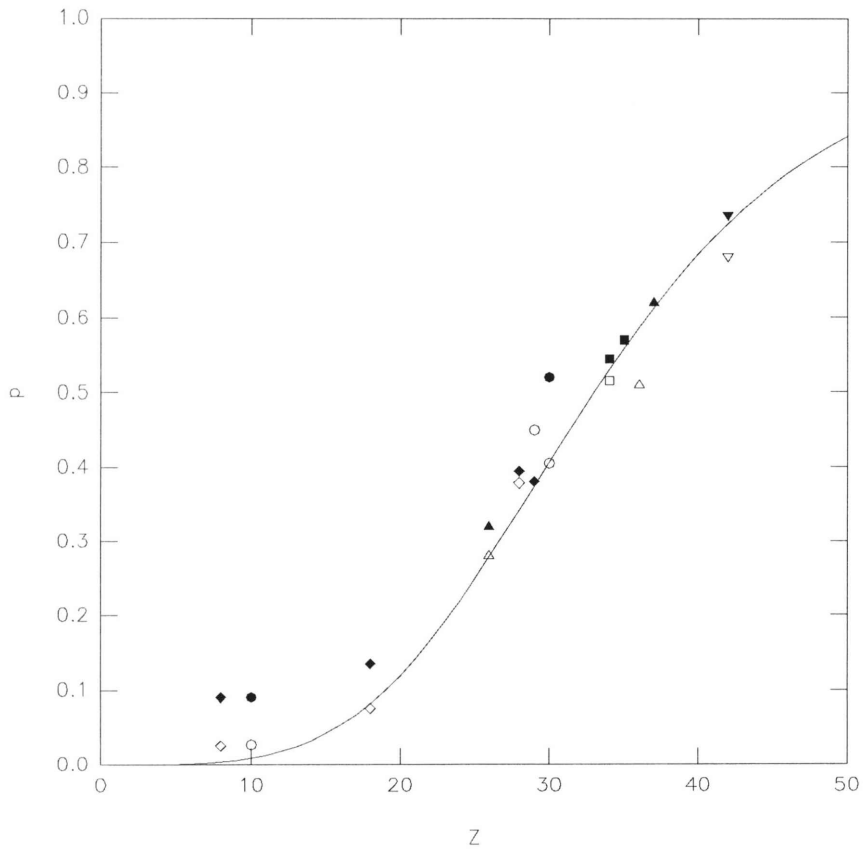


Figura 5.2: *Fracción de átomos que abandonan un dado estado emitiendo radiación, en función del número atómico. La línea llena representa la curva teórica y los símbolos los datos experimentales. Figura extraída de Condon y Shortley, 1953*

5.4 Influencia de las Transiciones Radiativas Espontáneas e Inducidas

1. Niveles Autoionizantes.

Para estimar la influencia de las transiciones radiativas espontáneas e inducidas, en las poblaciones de los niveles autoionizantes, despreciadas en nuestros cálculos, plantearemos ahora la ecuación de equilibrio estadístico para un nivel autoionizante j , considerando dichos procesos:

$$\begin{aligned} \sum_i N_e N_m(\text{MgII}) \alpha_{ij} + \sum_{j' > j} N_{j'}(\text{MgI}) P_{j'i}^R + \sum_{k, j' < j} N_k(\text{MgI}) P_{kj}^{RI} J_{kj} \\ + \sum_{j' > j} N_{j'}(\text{MgI}) P_{jk}^{RI} J_{jk} = \\ N_j(\text{MgI}) \sum_i P_{ji}^A + N_j(\text{MgI}) \sum_{k, j' < j} P_{jk}^R \\ + N_j(\text{MgI}) \sum_{j' > j} P_{jj'}^{RI} J_{jj'} + N_j(\text{MgI}) \sum_k P_{jk}^{RI} J_{jk} \end{aligned}$$

Aquí, el primer término del primer miembro y los dos primeros términos del segundo, tienen el mismo significado que en la sección 2.5,

$\sum_{j'} N_{j' > j}(\text{MgI}) P_{j'i}^R$ y $\sum_{j' > j} N_{j'}(\text{MgI}) P_{jk}^{RI} J_{jk}$ representan respectivamente las transiciones espontáneas e inducidas desde niveles autoionizantes más altos que j hasta j ,

$\sum_{k, j' < j} N_k(\text{MgI}) P_{kj}^{RI} J_{kj}$ las transiciones inducidas desde abajo hacia j ,

$N_j(\text{MgI}) \sum_{j' > j} P_{jj'}^{RI} J_{jj'}$ simboliza las transiciones radiativas inducidas desde j hacia niveles autoionizantes más altos y

$N_j(\text{MgI}) \sum_{k, j' < j} P_{jk}^{RI} J_{jk}$ toma en cuenta las transiciones inducidas desde j hacia los niveles más bajos.

J representa el campo de radiación en la zona donde el proceso ocurre y se puede escribir $J = J_0 W$, donde J_0 es la radiación fotosférica y W el factor de dilución.

De la ecuación anterior, procediendo como en la sección 2.5, obtenemos una expresión para α_{jh}^D :

$$\begin{aligned} \alpha_{jh}^D = & P_{jh}^R \left[\frac{N_j^s(\text{MgI})}{N^s(\text{MgII})N_e} + \frac{\sum_{j'>j} N_{j'}(\text{MgI}) P_{j'j}^R}{N(\text{MgII})N_e \sum_i P_{ji}^A} \right. \\ & + \sum_{k,j'<j} \frac{N_k(\text{MgI}) P_{kj}^{RI} J_{kj}}{N(\text{MgII})N_e \sum_i P_{ji}^A} + \sum_{j'>j} \frac{N_{j'}(\text{MgI}) P_{j'j}^{RI} J_{j'j}}{N(\text{MgII})N_e \sum_i P_{ji}^A} \left. \right] \\ & / \left[1 + \frac{\sum_{j'>j} P_{jj'}^{RI} J_{jj'}}{\sum_i P_{ji}^A} + \frac{\sum_{k,j'<j} P_{jk}^{RI} J_{jk}}{\sum_i P_{ji}^A} \right] \end{aligned}$$

Analizaremos el orden de importancia de cada uno de estos términos frente al primer término del numerador.

El segundo término del numerador es despreciable frente al primero debido a la presencia del cociente $P_{j'j}^R / \sum_i P_{ji}^A$ (ver sección anterior).

Para estimar los restantes términos supondremos que el campo de radiación fotosférico está bien representado por la función de Planck a la temperatura efectiva de la estrella, y usaremos la expresión $(R^*/D)^2$ para el factor de dilución; teniendo en cuenta que la probabilidad de transición radiativa inducida puede expresarse en función de la espontánea como

$$P^{RI} = \frac{c^2}{2h\nu} P^R$$

podemos escribir entonces

$$P^{RI} J = P^R \frac{1}{(\exp(\frac{h\nu}{KT}) - 1)} W$$

Para las configuraciones involucradas en nuestros cálculos evaluamos $\sum P^{RI} J$ tomando un valor de 10^{-1} para W (ver ítem siguiente); encontramos que este factor se mantiene menor que $1E7$ para todos los

términos en la expresión de α y para todos los niveles autoionizantes. Considerando que P^A es del orden de 10^{13} , despreciamos los dos últimos términos del numerador y del denominador en dicha expresión.

Concluimos que no cometemos error apreciable en el cálculo de los coeficientes de RD, al no tener en cuenta las transiciones radiativas inducidas, hacia o desde niveles más altos o más bajos, y las espontáneas desde niveles más altos, que pueblan o despueblan un nivel autoionizante.

2. Niveles Ligados.

El hecho de despreciar las transiciones radiativas inducidas desde los niveles ligados influirá en el cálculo de la emisividad en las líneas.

Hemos calculado la emisividad en una línea de longitud de onda λ_{lh} con la expresión

$$\epsilon(\lambda_{lh}) = N_e N(\text{MgII}) \frac{P_{lh}^R}{\sum_{k<l} P_{lk}^R} \alpha_h^D h\nu_{lh}$$

suponiendo que el nivel l sólo puede despoblarse por caída radiativa espontánea.

Pero, si consideramos que también puede despoblarse por transiciones radiativas inducidas hacia niveles más bajos y más altos, obtendremos la expresión

$$\epsilon(\lambda_{lh}) = N_e N(\text{MgII}) \frac{P_{lh}^R}{\sum_{k<l} P_{lk}^R + \sum_{k \neq l} P_{kl}^{RI} J_{kl}} \alpha_h^D h\nu_{lh}$$

donde el nuevo término en el denominador representa las transiciones radiativas inducidas desde el nivel l hacia todos los demás.

Con las mismas consideraciones que antes para J y diferentes valores para W , calculamos la emisividad en las líneas con esta última expresión. En las figuras siguientes mostramos el flujo obtenido para los valores de los parámetros que en ellas se mencionan.

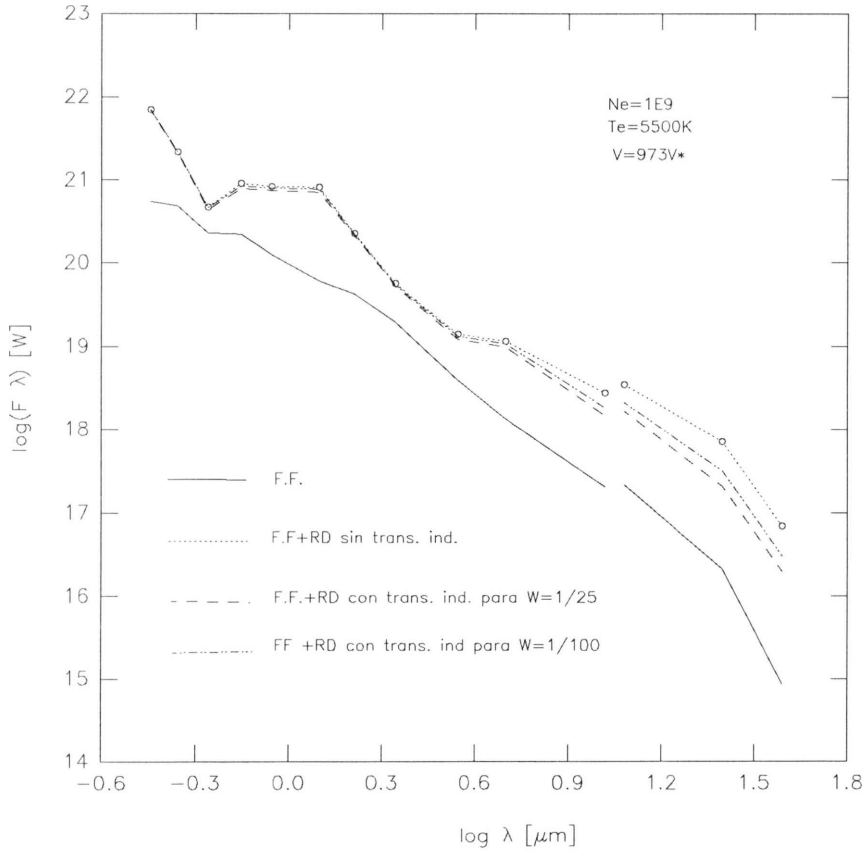


Figura 5.3: *Distribución del flujo con la longitud de onda para valores fijos de T_e , N_e y V . Dos de las curvas fueron obtenidas teniendo en cuenta las transiciones inducidas desde los niveles ligados, suponiendo un factor de dilución de $1/25$ en un caso y $1/100$ en el otro; la restante curva fue obtenida despreciando dichas transiciones*

En la figura 5.3 podemos apreciar en que proporción disminuye el flujo al tener en cuenta las transiciones inducidas desde los niveles ligados. Las curvas fueron obtenidas suponiendo un factor de dilución $1/25$, correspondiente a una distancia de $5R^*$ desde el centro de la estrella, y $1/100$, correspondiente a una distancia de $10R^*$ desde el centro de la estrella.

Si suponemos, entonces, que el volumen de material emisor está ubicado a suficiente distancia desde el centro de la estrella, podremos despreciar

las transiciones inducidas desde los niveles ligados sin cometer error apreciable en el cálculo del flujo emitido.

En este trabajo se ha calculado la emisividad en las líneas debida sólo al proceso de RD; el no considerar que un nivel ligado puede poblarse por otros procesos además de la caída radiativa desde niveles más altos (transiciones radiativas inducidas o recombinación radiativa), no implica un error, pues esto formaría parte de otros procesos que, sumado a la RD aumentaría la emisividad en las líneas.

5.5 Error en la Determinación del Número de Átomos de MgII

En un plasma de alta densidad, donde las transiciones colisionales son mucho más frecuentes que las radiativas, la distribución de átomos en los varios estados de ionización está determinada por consideraciones puramente estadísticas y se cumple la ley de Saha.

Cuando las densidades son bajas, tal distribución debe determinarse teniendo en cuenta todos los procesos de recombinación e ionización (todos los átomos estarán en su estado fundamental) que puedan tener lugar en las condiciones de T_e y N_e consideradas. De esta manera se plantearon las ecuaciones de equilibrio estadístico en la sección 2.5. De la ecuación 2.5 de dicha sección podemos obtener una expresión para el coeficiente de RD correspondiente a la transición $j \rightarrow h$:

$$\alpha_{jh}^D = \frac{N_j(\text{MgI})P_{jh}^R}{N_e N(\text{MgII})}$$

que al comparar con la expresión 2.7:

$$\alpha_{jh}^D = \frac{N_j^s(\text{MgI})P_{jh}^R}{N_e N^s(\text{MgII})} \sum_i \frac{P_{ji}^A}{(\sum_i P_{ji}^A + \sum_k P_{jk}^R)}$$

nos permite interpretar al coeficiente $\sum_i \frac{P_{ji}^A}{(\sum_i P_{ji}^A + \sum_k P_{jk}^R)}$ como una medida del apartamiento de su valor de equilibrio, de la población del nivel autoionizante j del MgI relativa a la población total del MgII.

Con las aproximaciones hechas en la sección 2.5 hemos establecido que este coeficiente es igual a 1; esto nos permite decir que la población de los niveles autoionizantes del MgI están dadas por su valor en equilibrio, lo que no podemos asegurar para los niveles ligados.

En la literatura podemos encontrar numerosos trabajos que calculan el balance de ionización de varios elementos en plasmas de baja densidad³.

³C. Jordan, (1968); H. P. Summers, (1974); R. Sutherland and M. A. Dopita, (1993)

Según los procesos atómicos tenidos en cuenta en ellos, la temperatura para la cual el Mg está totalmente ionizado (una vez), toma distintos valores.

El error que cometemos utilizando el valor dado por Saha para el número de átomos de MgII, sin embargo, no afectará la distribución del flujo originado en la RD del MgII con la longitud de onda; utilizando escalas logarítmicas, un valor para $N(\text{MgII})$ diferente del equilibrio, sólo desplazará las curvas en sentido vertical. Para obtener curvas coincidentes con las mostradas en nuestros gráficos, bastará con modificar adecuadamente el valor del volumen del material emisor.

Las curvas que representan la distribución del flujo con la temperatura sí modificarán su forma, desplazándose la temperatura para la cual el flujo es máximo. Para independizar el flujo emitido por la RD del MgII del valor adjudicado al número de átomos de este elemento, y conocer como se distribuye con la temperatura, construimos las curvas de la figura 5.4. Allí, sobre el eje de las ordenadas, se han volcado los cocientes entre el flujo y el número de átomos de MgII dado por Saha, para la temperatura y densidad electrónica considerada. Vemos que las curvas representan funciones crecientes de la temperatura a partir de cierta temperatura umbral, en acuerdo con el hecho de que, a medida que aumenta la temperatura, mayor es el número de estados autoionizantes que contribuyen al proceso. Estas funciones serán moduladas por otra función de la temperatura y densidad electrónica, que represente $N(\text{MgII})$ fuera del equilibrio.

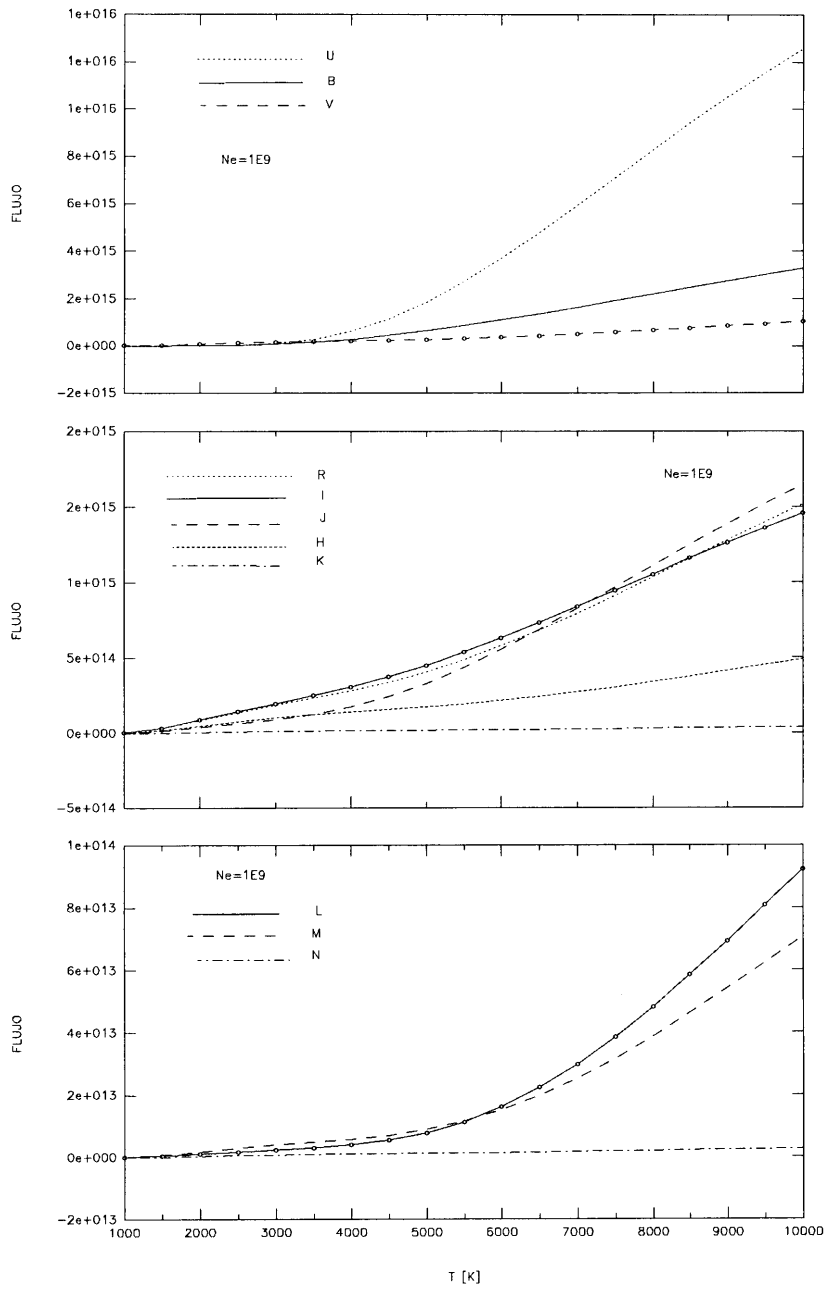


Figura 5.4: Distribución del cociente $F/N(MgII)$ con la temperatura para las longitudes de onda efectivas de los filtros de los sistemas de colores usados, para una densidad electrónica de $1E9$ part./ cm^3 .

Capítulo 6

Conclusiones

Hemos estudiado la influencia del proceso de recombinación dielectrónica del átomo de MgII en el flujo infrarrojo de las estrellas **Be**. Aunque es esta una aproximación de orden cero, donde no se han tenido en cuenta mecanismos como el transporte radiativo, o fuentes de opacidad debida a otros procesos atómicos, podemos decir que la RD del MgII contribuye efectivamente al flujo infrarrojo en las estrellas **Be**.

Para aplicar este trabajo a objetos particulares, debemos tener en cuenta, además, que la RD del MgII es uno de los procesos que contribuirá al exceso infrarrojo de la estrella; a él debemos agregarle otros procesos como la emisión f-f y f-b del H o la RD de otros elementos. Resultados más realistas se conseguirán si se consideran también: zonas con gradientes de temperatura, zonas con gradientes de densidad, otra geometría distinta de la esférica, distribución del material emisor en diversas zonas de la envoltura con diferentes condiciones físicas y no concentrado en una sola región.

Las simplificaciones impuestas a las ecuaciones del problema teniendo en cuenta las condiciones físicas de las atmósferas estelares de estas estrellas, son aplicables a cualquier medio de baja densidad, baja temperatura electrónica y campo de radiación diluído. Por lo tanto, este trabajo será adecuado para estudiar otros objetos, además de las estrellas **Be**, con condiciones físicas similares (por ejemplo las nebulosas planetarias).

De este primer estudio, surgen claramente algunas conclusiones:

- las condiciones físicas de la envoltura estelar determinan la magnitud y distribución del flujo emitido debido a la RD del MgII,

- la temperatura electrónica de la envoltura estelar es el parámetro que fundamentalmente determina la distribución del flujo con la longitud de onda,
- la densidad electrónica y el volumen del material emisor, básicamente, incrementan el flujo total emitido sin alterar la distribución con la longitud de onda,
- la probable opacidad del medio también provoca variaciones en el flujo emitido, influyendo en su magnitud y distribución con la longitud de onda.

A modo de prueba, hemos volcado en los gráficos que siguen las observaciones fotométricas de dos estrellas **Be** que muestran excesos no explicados hasta ahora. En ellos sólo se ha tenido en cuenta el tipo espectral de la estrella, para asignar un valor a su temperatura efectiva y a su radio; no se han hecho suposiciones sobre las condiciones físicas de su envoltura, y no se ha tenido en cuenta la posible opacidad del medio. Como vemos, se podrían encontrar conjuntos adecuados de valores para los parámetros de las envolturas de estas estrellas, que expliquen las observaciones.

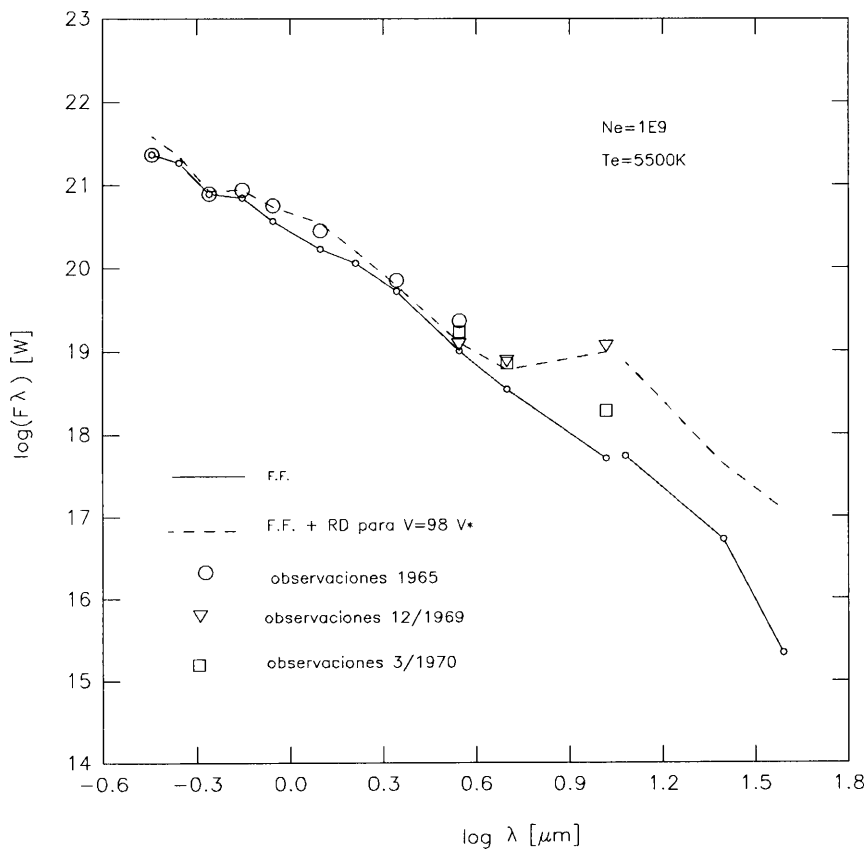


Figura 6.1: Observaciones fotométricos de la estrella k Dra. Datos extraídos de N. J. Woolf, W. A. Stein, y P. A. Strittmatter, 1970, *Astron. and Astrophys.*, 9, 252-258.

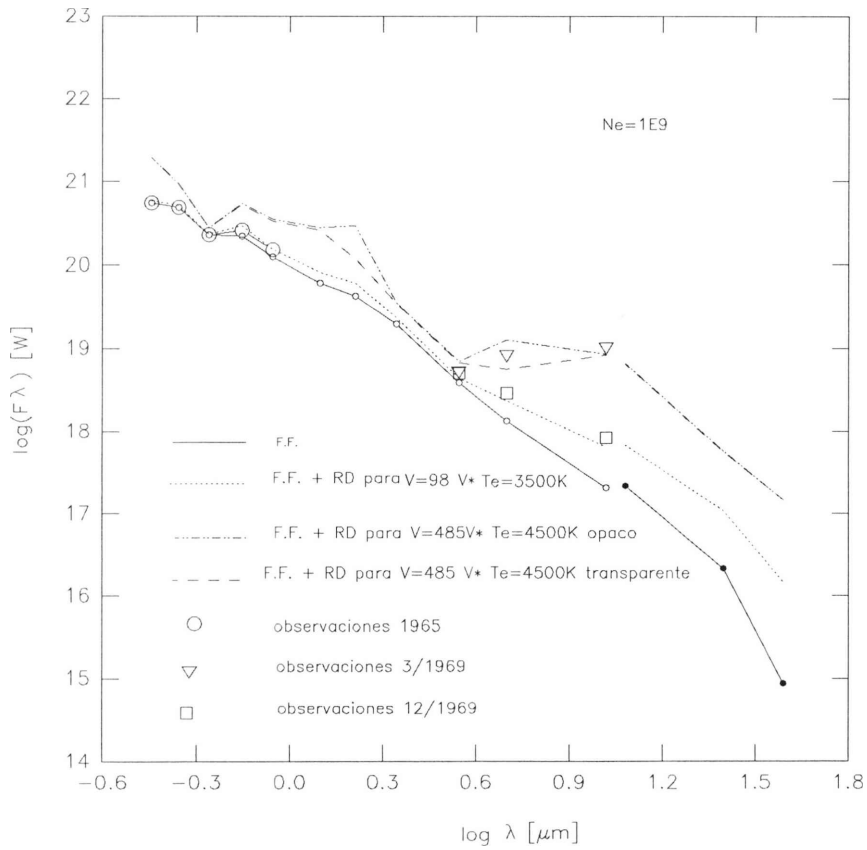


Figura 6.2: Observaciones fotométricas de la estrella 48 Per. Datos extraídos de N. J. Woolf, W. A. Stein, y P. A. Strittmatter, 1970, *Astron. and Astrophys.*, 9, 252-258.

BIBLIOGRAFÍA

- Allen, D. A.; 1973, *Mon. Not. R. astr. Soc.*, **161**, 145-166
- Arnaud, M., and Rothenflug, R., 1985, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, **60**, 425-457
- Barlow, M. J., and Cohen, M.; 1977, *Astrophys. J.*, **213**, 737
- Burgess A., and Seaton, M. J., 1964, *Mon. Not. Roy. astron. Soc.*, **127**, 355
- Burke, P. G., and Moores D. L., 1968, *J. Phys. (Proc. Phys. Soc.)*, ser. 2, **1**, printed in Great Britain
- Cassinelli, J. P., and Hartmann, L., 1977, *Astrophys. J.*, **212**, 488
- Catalá, C., 1983, *Astron. Astrophys.*, **125**, 313-319
- Cidale, L., and Ringuelet, A., 1993, *Astrophys. J.*, **411**, 874-881
- Condon, E. U., Shortley, G. H., 1953, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge, at The University Press
- Cowan, R. D.; 1981, "The Theory of Atomic Structure and Spectra", University of California Press.
- Dyck, H. M., and Milkey, R. W., 1972, *Astronomical Society of the Pacific*, **84**, N 501
- Gehrz, R. D., Hackwell, J. A., and Jones, T. W., 1974, *Astrophys. J.*, **191**, 675
- Johnson, H. L., 1964, *Mon. and Tacub. observatory Bull.*, **3**, 305
- Johnson, H. L., 1966, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, **4**, 193 (Palo Alto, Calif., Annual Reviews, Inc.)
- Jordan, C., 1969, *Mon. Not. R. astr. Soc.*, **142**, N 4,

501-521

Landolt-Bornstein, 1982, grupo 6, vol. **2**,

Mendoza, E., 1967, *Boletín de los observatorios Tonantzintla y Tacubaya*, N **28**, vol **4**, 114

Milkey, R. W., and Dyck, H. M., 1973, *Astrophys. J.*, **181**, 83

Nussbaumer, H., and Storey, P. J., 1983, *Astron. Astrophys.*, **126**, 75-79

Nussbaumer, H., and Storey, P. J., 1984, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, **56**, 293-312

Nussbaumer, H., and Storey, P. J., 1986, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, **64**, 545-555

Ringuelet, A., Fontenla, J. M., and Rovira, M., 1981, *Astron. Astrophys.*, **100**, 79

Savage, B. D., Wesseliuss, P. R., Swings, J. P., and Thé, P. S., 1978, *Astrophys. J.*, **224**, 149

Sitko, M. L., and Savage, B. D., 1980, *Astrophys. J.*, **237**, 82

Storey, P. J., 1981, *Mon. Not. R. astr. Soc.*, **195**, short communication, 27-31

Summers, H. P., 1974, *Mon. Not. R. astr. Soc.*, **169**, 663-680

Swings, J. P., 1973, *Astron. Astrophys.*, **26**, 443

Thomas, R. N., 1983, *Stellar Atmospheric Structural Patterns (NASA SP-47)*

Vázquez, A., Cidale, L., and Ringuelet, A., 1993, *A. Astrophys.*, **419**, 286-293

Wilson, R., 1962, *F. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **2**, 477

*Wolf, N. J., Stein, W. A., and Strittmatter, P. A., 1970,
Astron. Astrophys., 9, 252-258*