

*Algoritmos y Parámetros Físicos
Involucrados en el Cálculo de Modelos
de Atmósferas Estelares*

por Lic. David Constantino Merlo*

Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía y Física
como parte de los requerimientos para la obtención del grado de
Doctor en Astronomía de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Mayo, 2007

© FaMAF – UNC 2007

Director: Dr. Luis Ambrosio Milone

PACs: 52.25.Jm *Ionization in plasma.*
95.30.Jx *Radiative transfer; scattering.*
95.30.Ky *Atomic and molecular data (opacities, atomic partition functions).*
95.75.Pq *Mathematical procedures and computer techniques.*
97.10.Ex *Stellar atmospheres (photospheres); radiative transfer; opacity.*

* Becario de la Secretaría de Ciencia y Tecnología de la Universidad Nacional de Córdoba.

A mi esposa Silvia

y a mi hijo Leonardo

*"La verdad se robustece con la investigación y la dilación;
la falsedad, con el apresuramiento y la incertidumbre."*

Tácito♦

♦ **Cornelio Tácito** (55 – 120): historiador, senador, cónsul y gobernador romano.

RESUMEN

La idea central en que se fundamentó nuestro trabajo de Tesis fue analizar, con un cierto grado de detalle, las principales variables físicas que intervienen, directa o indirectamente, en el modelado de atmósferas estelares: funciones de partición atómicas, ionización y formación molecular, factores de Gaunt, secciones eficaces, densidades electrónicas y absorciones continuas (tanto atómicas como moleculares). A partir de ello se logró una descripción –que entendemos es más completa– del comportamiento del resto de las variables en mezclas gaseosas de diversas composiciones químicas.

Incidentalmente, estudiamos algunos algoritmos que se utilizan frecuentemente en el cálculo de los modelos: relación P_g - P_e - T y equilibrio molecular, por ejemplo. También fueron analizados la absorción continua de distintos elementos, la integración de la ecuación del equilibrio hidrostático, los procedimientos de corrección de la distribución inicial de temperatura y la solución de la ecuación del transporte. En cada uno de ellos se analizó la aplicabilidad, funcionalidad y limitaciones.

Luego, como segunda etapa integramos todos nuestros análisis y conclusiones obtenidas, a los efectos de establecer un código de cálculo que nos permitiese obtener la estructura física de una atmósfera estelar. Para ello, se analizaron distintos procedimientos de corrección en la distribución inicial de la temperatura y se resolvió –mediante técnicas estándar– la ecuación del transporte radiativo, logrando resultados compatibles con las hipótesis planteadas inicialmente.

Como subproducto del trabajo, se obtuvieron extensas tablas de valores de funciones de partición actualizadas de átomos, neutros y una vez ionizados, de las especies atómicas livianas, en las más variadas condiciones astrofísicas de interés, como así también valores más precisos y discriminados de los términos a incluir en la absorción continua del Hidrógeno y, finalmente, un código de cálculo flexible para computar modelos de atmósferas estelares.

ABSTRACT

The aim of this work was the analysis of algorithms and physical parameters involve in the calculation of model stellar atmospheres, *v.gr.*, atomic partition functions, functional relations connecting gaseous pressure, electronic pressure, molecular formation, temperature and chemical composition, atomic cross sections (for the absorption of radiation) and dispersion sources, as well as computational codes for calculating the models.

Special attention was dedicated to the integration of the equation of hydrostatic equilibrium. Our results were compared with those obtained by other authors, and reasonable agreements were found.

Efforts were also made on the implementation of methods that modified the originally adopted temperature distribution in the atmosphere (trying to obtain a constant energy flux throughout). Limitations and numerical instabilities were found.

The transfer equation was integrated solving directly the integral equation involving the source function.

As a by-product, extensive tables of updated atomic partition functions of the light elements were calculated. Also, carefully selected formulae for the monochromatic absorption and dispersion of some atomic and molecular species are discussed and enumerated. Finally, a flexible code for calculating model stellar atmospheres was obtained.

Índice

Prefacio.	1
Capítulo I : “Revisión del Cálculo de Funciones de Partición Atómicas”.	3
1. INTRODUCCIÓN.	3
2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.	4
2.1. TRAVING, BASCHEK & HOLWEGER (1966).	4
2.2. IRWIN (1981).	6
2.3. SAUVAL & TATUM (1984).	7
3. CÁLCULO DE FUNCIONES DE PARTICIÓN.	8
3.1. CONSIDERACIONES GENERALES.	8
3.1.1. Ion y término padre. Peso estadístico.	9
3.1.2. Análisis de los estados del B I: un ejemplo.	11
3.2. SELECCIÓN DE LOS RANGOS DE TEMPERATURA Y LIE.	14
3.3. ANÁLISIS DE ALGUNOS DETALLES INVOLUCRADOS EN NUESTRO PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO.	14
4. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS NUMÉRICOS.	17
4.1. ANÁLISIS DE LOS VALORES DE TBH.	17
4.2. ANÁLISIS DE LOS VALORES DE I Y ST.	18
5. DISCUSIÓN.	23
5.1. LIE: LIMITACIÓN EN EL PROCEDIMIENTO DE I Y EN EL DE ST.	23
5.2. PROCEDIMIENTO DE TBH: LÍMITE PARA LIE.	23
5.3. NIVELES DE ENERGÍA ATÓMICOS Y LIE.	24
6. CONCLUSIONES.	25
7. PUBLICACIONES.	27
<i>Referencias.</i>	28
<i>Apéndice 1.1: “Otros detalles del Cálculo de FsPAs”.</i>	29
<i>Apéndice 1.2: “Valores de Funciones de Partición Atómicas: H al Na”.</i>	33
Capítulo II : “Ionización y Formación Molecular en Mezclas Gaseosas”.	45
1. INTRODUCCIÓN.	45
2. CONDICIONES ADOPTADAS Y FÓRMULAS UTILIZADAS EN LOS CÁLCULOS.	46
2.1. CONSIDERACIONES GENERALES.	46
2.2. IONIZACIÓN Y FORMACIÓN MOLECULAR.	48
2.3. COMPOSICIONES QUÍMICAS.	48
3. ANÁLISIS DE LA IONIZACIÓN Y DE LA RELACIÓN (P_g , P_e , T).	51
3.1. IONIZACIÓN DEL H, He Y C.	51
3.2. LA RELACIÓN $\text{Log} (P_g / P_e)$ vs. $\text{Log} (P_e)$.	53
3.2.1. Generalidades.	53
3.2.2. Propiedades y Valores Particulares.	56
3.2.3. El caso de la mezcla HdCII.	59
3.3. PRINCIPALES CONTRIBUYENTES DE ELECTRONES.	62

3.4. DENSIDAD ELECTRÓNICA POR UNIDAD DE MASA.	64
3.5. DISCUSIÓN.	66
4. FORMACIÓN MOLECULAR.	68
4.1. INTRODUCCIÓN.	68
4.2. PLANTEAMIENTO DE LOS MÉTODOS.	68
4.3. CÁLCULOS NUMÉRICOS.	68
4.4. MÉTODO DE MIHALAS CORREGIDO.	72
4.5. APLICACIÓN AL CARBONO.	73
4.6. ABUNDANCIA RELATIVA DEL H ⁻ .	75
4.7. FORMACIÓN MOLECULAR EN DIFERENTES COMPOSICIONES QUÍMICAS.	75
4.8. DISCUSIÓN.	80
5. CONCLUSIONES.	80
6. TRABAJOS PUBLICADOS.	81
<i>Referencias.</i>	82
<i>Apéndice 2.1: "Importancia del valor correcto de las Funciones de Partición Atómicas".</i>	84
<i>Apéndice 2.2: "Estudio de la Relación Pg-Pe-T".</i>	86
Capítulo III : "Estudio de los Absorbedores Continuos".	89
1. INTRODUCCIÓN.	89
2. ABSORCIÓN CONTINUA DEL HIDRÓGENO.	90
2.1. GENERALIDADES.	90
2.2. DEFINICIONES Y EXPRESIONES DE CÁLCULO.	90
2.2.1. Factores de Gaunt.	91
2.2.1.1. Generalidades.	91
2.2.1.2. Tablas y Expresiones de Interpolación.	91
2.2.1.3. Estudio de las Expresiones de Interpolación.	93
2.2.1.4. Comentarios.	94
2.2.2. Número de Niveles Ligados a Considerar.	95
2.2.2.1. Generalidades.	95
2.2.2.2. Resultados Obtenidos.	95
2.2.2.3. Discusión.	97
3. ANÁLISIS DE LA ABSORCIÓN CONTINUA.	98
3.1. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.	98
3.1.1. Dispersiones.	98
3.1.1.1. Scattering Thomson.	98
3.1.1.2. Scattering Rayleigh.	98
3.1.2. Absorciones Atómicas y Moleculares.	99
3.1.2.1. Ion Negativo del Hidrógeno.	99
3.1.2.2. Hidrógeno Molecular.	100
3.1.2.3. Hidrógeno Cuasimolecular.	101
3.1.2.4. Helio Atómico.	101
3.1.2.5. Ion Negativo del Helio.	102
3.1.2.6. Especies Metálicas.	103
3.2. CÁLCULO DE ABSORCIONES Y DISPERSIONES.	109
3.3. IMPORTANCIA DE LAS ABSORCIONES Y DISPERSIONES.	113

4. COEFICIENTES DE ABSORCIÓN POR GRAMO DE MATERIAL ESTELAR.	117
4.1. CONVERSIÓN DE LA OPACIDAD A GRAMO DE MATERIAL ESTELAR.	117
4.2. RESULTADOS OBTENIDOS.	118
5. OPACIDAD MEDIA DE ROSSELAND.	122
5.1. INTRODUCCIÓN.	122
5.2. DEFINICIONES.	122
5.3. EXPRESIONES DE LA INTEGRACIÓN NUMÉRICA.	123
5.4. ANÁLISIS DEL INTEGRANDO ROSSELAND.	124
6. CONCLUSIONES.	132
7. PUBLICACIONES.	134
<i>Referencias.</i>	135

Capítulo IV : “Cálculo de un Modelo de Atmósfera Estelar – 1ª. Parte –”, 137

1. INTRODUCCIÓN Y CONDICIONES.	137
1.1. GENERALIDADES.	137
1.2. CONDICIONES IMPUESTAS EN NUESTRO TRATAMIENTO.	137
2. INTEGRACIÓN DE LA ECUACIÓN DEL EQUILIBRIO HIDROSTÁTICO.	138
2.1 RELACIÓN ENTRE LA PROFUNDIDAD GEOMÉTRICA Y ÓPTICA, PRESIÓN, TEMPERATURA, ETC.	138
2.2. PROCEDIMIENTO DE INTEGRACIÓN.	139
2.2.1. Comienzo de la Integración. Valores Iniciales. Parámetros. Distribución de la Temperatura.	139
2.2.2. Continuación de la Integración.	141
3. MODELOS PRELIMINARES.	144
3.1. INTRODUCCIÓN.	144
3.2. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS PRELIMINARES.	148
4. CÁLCULO DEL FLUJO ESTELAR.	149
4.1. INTRODUCCIÓN.	149
4.2. CÁLCULO DEL FLUJO.	150
5. CORRECCIÓN DEL FLUJO.	152
5.1. CONDICIONES EN EL FLUJO.	152
5.2. PROCEDIMIENTOS DE CORRECCIÓN.	152
5.3 APLICACIÓN DEL MÉTODO DE NAPPIER & DODD (1974).	154
5.3.1. Generalidades.	154
5.3.2. Procedimiento Numérico.	154
5.3.3. Resultados Obtenidos.	156
5.3.4. Comentarios.	160
5.4. PROCEDIMIENTO DE AVRETT-KROOK MODIFICADO (KURUCZ, 1970).	160
5.4.1. Generalidades.	160
5.4.2. Implementación del Método.	162
5.5. PROCEDIMIENTO DE AVRETT-KROOK (1963).	165
6. PUBLICACIONES.	169
<i>Referencias.</i>	170

Capítulo V : “Cálculo de un Modelo de Atmósfera Estelar = 2ª. Parte =”	171
1. INTRODUCCIÓN.	171
2. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DEL TRANSPORTE.	172
2.1. PROCEDIMIENTO NUMÉRICO.	172
2.2. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO.	173
2.2.1. Consideraciones Generales.	173
2.2.2. Cálculo de las Intensidades Específicas Medias Monocromáticas.	174
2.2.3. Determinación de las Funciones de Planck Monocromáticas.	175
2.2.4. Determinación de los Factores Dispersivos.	175
2.2.5. Implementación del Método Iterativo.	186
3. RESULTADOS OBTENIDOS.	187
4. ESTUDIO DE LA CONVERGENCIA DEL MÉTODO.	194
5. CONCLUSIONES.	194
<i>Referencias.</i>	196
Capítulo VI : “Epílogo”	197
1. INTRODUCCIÓN.	197
2. FUNCIONES DE PARTICIÓN.	197
3. IONIZACIÓN Y FORMACIÓN DE MOLÉCULAS.	199
4. ABSORCIÓN CONTINUA.	201
5. MODELOS DE ATMÓSFERAS.	203
6. TEMAS QUE DEBERÁN ANALIZARSE A LA BREVEDAD.	204
6.1. CAPAS MUY SUPERFICIALES EN LAS ATMÓSFERAS ESTELARES.	204
6.2. CONVECCIÓN.	205
6.3. BLANKETTING.	205
7. CONSIDERACIONES FINALES.	206
<i>Referencias.</i>	207
Agradecimientos.	209

Prefacio

El estudio de las atmósferas estelares comprende, entre otros, el análisis de las relaciones funcionales entre las variables y parámetros físicos que las caracterizan. El uso de programas de cálculo (códigos) escritos por otros autores, simplifica la tarea y permite avanzar con mayor rapidez en algunas etapas; como ejemplo cabe mencionar al programa **ATLAS** (Kurucz, 1970^(a), 1979^(b), 1997^(c)), el que merced al cuidado con que ha sido escrito y a la generosidad de su autor, ha alcanzado una difusión muy amplia. De todos modos, en relación con el uso de códigos escritos por otros investigadores, es oportuno hacer algunos comentarios: en ocasiones se desconocen, en forma parcial o total, sus contenidos numéricos y físicos, obteniéndose resultados con una componente desconocida por el usuario; puede así ocurrir que se lo aplique a condiciones para las que no han sido escritos. Naturalmente, lo aconsejable es estudiar primero con algún cuidado el programa a utilizar. En casos extremos, puede ocurrir que el código existente no se adapte al problema en estudio.

Nuestro interés –en este momento– es analizar atmósferas estelares de He, con una marcada deficiencia de H y un reforzamiento del C; en la **Introducción** del *Capítulo II*, resaltamos la importancia que reviste el estudio de las estrellas con estas características. Además, nuestros análisis nos han indicado que no es trivial adaptar el programa **ATLAS** a estas condiciones, además de que (tal como lo mostraremos más adelante) en él se hace una representación inadecuada **a nuestros fines** de la estructura del átomo de C para calcular su absorción continua. Llegamos así a la conclusión que resulta conveniente escribir un código propio, adecuado al problema a estudiar.

Por otra parte, hemos querido dejar abierta la posibilidad de estudios nuestros con objetivos más amplios en atmósferas estelares y, por lo tanto, consideramos necesario repasar con cuidado los temas clásicos que se analizan en los capítulos que van a continuación.

En las líneas que siguen damos el ordenamiento de los temas que se desarrollan en este trabajo, agrupados en *Capítulos*. Hemos adoptado un ordenamiento lógico; o sea que la lectura de un capítulo supone el conocimiento, o la lectura previa de los anteriores.

^(a) “Atlas: a Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres”, *SAO Special Report* N° 308, 1970.

^(b) “Model atmospheres for G, F, A, B, and O stars”, *Ap. J. Suppl. Ser.*, **40**, 1-340.

^(c) “Progress on Model Atmospheres and Line Data”, *Fundamental Stellar Properties, Proceedings of IAU Colloquium N° 189*, eds. T. R. Bedding, A. J. Booth & J. Davis), p. 217. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1997.

Es indudable el interés que reviste el estudio de las regiones estelares que no se encuentran en Equilibrio Termodinámico Local (ETL). Pero apenas se superan profundidades modestas en las atmósferas de las estrellas, las condiciones de validez del ETL se restablecen y ésta resulta ser una excelente aproximación a la realidad. En un plasma en ETL, el estado de excitación y de ionización de los átomos que lo forman queda determinado a través de las fórmulas de Boltzmann y de Saha, y éstas evidencian la importancia de las funciones de partición atómicas (FsPAs). Como consecuencia, en el *Capítulo I* se hace una revisión detallada del cálculo de las FsPAs, estudiándose las expresiones y procedimientos de cálculo utilizados. Se incluye a los elementos más livianos de la Tabla Periódica (en sus estados de ionización I y II), con una extensión al K y al Ca. La razón es que, entre los elementos más livianos, se encuentran los más abundantes en el Universo, siendo, por lo tanto, de interés conocer con precisión el valor de sus FsPAs. Nuestros resultados se comparan con los de otros autores, analizándose sus ventajas y limitaciones.

En el *Capítulo II* hacemos un análisis de la ionización y formación molecular en mezclas gaseosas de distintas composiciones químicas: Solar, de Población II, en otra de He muy deficiente en H y enriquecida en C (HdC) y, finalmente, en una de He que, aunque algo enriquecida en C, es deficiente en todos los “metales” (HdCII). Presentamos las fórmulas de excitación, ionización y disociación, y discutimos las relaciones (P_e, P_g, Q) y de densidad para las distintas mezclas.

El *Capítulo III* es dedicado a discutir las distintas fuentes de opacidad continua y de dispersión. Se estudian los procedimientos de cálculo y las expresiones de interpolación utilizadas, tratando de alcanzar una mayor precisión en los resultados.

Al *Capítulo IV* lo dedicamos a presentar la integración de la ecuación del equilibrio hidrostático. Aquí se analizan varios procedimientos para corregir la distribución de temperatura en un modelo de atmósfera estelar y así conseguir un flujo de energía constante. Mostramos las limitaciones de algunos de ellos y las ventajas de otros.

El procedimiento utilizado para integrar la ecuación del transporte es presentado en el *Capítulo V*.

En el *Capítulo VI* se analizan los aportes de este trabajo y los temas que sería necesario encarar a la brevedad para completarlo.

Al final de cada capítulo se incluyen las *Referencias* bibliográficas citadas en el mismo.

Capítulo I

REVISIÓN DEL CÁLCULO DE FUNCIONES DE PARTICIÓN ATÓMICAS

1. INTRODUCCIÓN.

El modelado de atmósferas estelares y el estudio de plasmas astrofísicos en Equilibrio Termodinámico Local (ETL) revisten aún hoy interés. En su análisis es necesario conocer con precisión las funciones de partición atómicas para el cálculo del equilibrio de ionización y la distribución de los átomos de un dado elemento entre sus varios estados excitados. Las fórmulas de Boltzmann y de Saha han encontrado diversas aplicaciones en el tratamiento clásico de las atmósferas estelares, mereciendo mencionarse la determinación de abundancia de los elementos químicos (con el apoyo de determinaciones espectroscópicas) y el estudio de perfiles de líneas espectrales. No es de extrañar, entonces, que paralelamente, los investigadores hayan puesto un considerable esfuerzo en el cálculo de las funciones de partición.

La función de partición para un sistema atómico se define de la siguiente forma:

$$u_j(T) = \sum_{i=0}^{\infty} g_{ij} e^{-\chi_{ij}/kT} \quad (1.1)$$

donde el índice i indica el nivel de excitación, j indica el estado de ionización, g_{ij} representa el peso estadístico del nivel atómico, caracterizado con una energía de excitación χ_{ij} , k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura. De acuerdo a esta definición, la función de partición *mide globalmente el peso estadístico del sistema en ese particular estado de ionización*; de este modo, cuanto mayor sea su valor, tanto más poblado estará ese estado.

Comenzando con los trabajos pioneros de Unsöld (1948) y Claas (1951), los aspectos teóricos del cálculo de las funciones de partición atómicas (FsPAs) se analizaron repetidamente (Griem, 1964; Fischel & Sparks, 1971), hasta los trabajos de Halenka & Grabowski (1977, 1984 y 1986), donde se consideraron en detalle las contribuciones de los estados atómicos múltiplemente excitados.

También fueron llevados a cabo cálculos numéricos, principalmente para obtener fórmulas de interpolación para representar FsPAs (de Jager & Neven (1957), Bolton (1970), Aller & Everett (1972), van Diest (1980), etc.).

De nuestro análisis se desprende que de aquellos trabajos en los que se calculan funciones de partición, hay sólo tres que cubren desde los elementos más livianos de la tabla periódica hasta los medianamente pesados (Ba), o directamente hasta los últimos (Pb, Th, U): Traving, Baschek & Holweger (TBH, 1966), Irwin (I, 1981) y Sauval & Tatum (ST, 1984), resultando entonces aconsejable (al menos en el sentido de la completitud de la información que encierran) concentrar en ellos nuestra atención.

Cuando se analiza en un grupo estelar, si una propiedad es común al grupo, o si se modifica de un ejemplar a otro, debemos asegurarnos que al análisis lo realicemos utilizando una base homogénea de datos; en caso contrario, si aparecen diferencias de ejemplar a ejemplar, no podemos saber si se trata de discrepancias reales, o sistemáticas. Una situación similar se plantea cuando se analiza un conjunto de estrellas utilizando modelos de atmósferas: entre otras cosas, es necesario que los valores de las funciones de partición que se utilizan sean homogéneos. Por lo tanto, es de interés primario determinar el acuerdo existente entre los valores encontrados en los trabajos de TBH, I y ST, y si los resultados se comparan satisfactoriamente, *establecer así una base homogénea de datos en lo que a funciones de partición se refiere.*

El análisis señalado en el párrafo anterior crece en importancia si además podemos determinar la confiabilidad de los resultados de esos autores, aunque esto significa la necesidad de nuestra parte de recalcular *cuidadosamente* funciones de partición; lo que así hicimos.

En los trabajos de TBH e I se utilizan las tablas de niveles atómicos de energía de Moore (AEL, Moore, 1949-1952-1958) para los respectivos cálculos de FsPAs, y aunque actualmente existen valores más modernos disponibles (Moore, 1965/1976; Martin, 1973; Bashkin & Stoner, 1976; etc.), nosotros preferimos utilizar aquéllos, y de este modo lograr que nuestros resultados sean directamente comparables con los primeros.

2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.

Describimos brevemente a continuación, los tres trabajos de interés.

2.1. TRAVING, BASCHEK & HOLWEGER (1966).

Estos autores llevan a cabo un proceso de ajuste tipo Chebyshev con el objeto de poder reemplazar todos los niveles atómicos por otros (ficticios) que en menor cantidad son representativos de aquéllos. La información original relativa a los niveles de energía fue obtenida de Moore (1949-1952-1958).

A continuación resumimos las expresiones dadas en este trabajo:

$$Q = g_0 + \sum_1^s Q' \quad (1.2)$$

donde Q es la función de partición propiamente dicha, g_0 es el peso estadístico del estado fundamental del átomo considerado y Q' la correspondiente contribución de cada subestructura atómica caracterizada por un ion padre origen (al concepto de “ion padre” lo discutiremos más adelante). Estas contribuciones son calculadas en forma discreta debido a los mencionados niveles ficticios, más una aproximación asintótica para tener en cuenta los niveles próximos a la ionización. O sea, que si la expresión correcta para realizar el cálculo es:

$$Q' = \sum_j g_j 10^{-\chi_j \theta} + 2g_{pr} Q_{as}(l, z) 10^{-\chi_{ion} \theta} \quad (1.3)$$

la aproximada que utilizan los autores es la siguiente:

$$Q' \approx \sum_v \alpha_v 10^{-\gamma_v \theta} + 2g_{pr} Q_{as}(l, z) 10^{-\chi_{ion} \theta} \quad (1.4)$$

donde:

- (g_j, χ_j) : peso estadístico y energía de cada nivel;
- (α_v, γ_v) : peso estadístico y energía, ambos ficticios;
- χ_{ion} : potencial de ionización;
- g_{pr} : peso estadístico del ion padre;
- l : número cuántico efectivo ($l = z [\text{Ry}/(\chi_{ion} - \chi_k)]^{1/2} + 1$);
- z : carga nuclear efectiva,
- θ : recíproca de la temperatura, $\theta = 5040 / T$.

En el segundo término del segundo miembro de la ecuación (1.4), aparece una aproximación asintótica de la función de partición para los niveles más excitados. La misma, que se aproxima con una serie de Rydberg, tiene la siguiente expresión:

$$Q_{as}(l, z) = \sum_{m=l}^{h(z)} m^2 e^{a(z, \theta)/m^2} \quad (1.5)$$

con:

$$a(z, \theta) = 31.321 z^2 \theta \quad \text{y} \quad h(z) = [13.595 z / \Delta\chi]^{1/2}, \quad (1.6)$$

donde $\Delta\chi$ es la disminución del potencial de ionización, en eV, provocado por las partículas perturbadoras.

Cada uno de los parámetros necesarios en las expresiones (1.4) y (1.5) vienen consignados en tablas, las cuales tienen la siguiente estructura (ver TABLA 1.1, en donde hemos elegido al elemento químico B II como ejemplo):

TABLA 1.1
Estructura de la tabulación de TBH. Ejemplo del B II.

Element	g_0	χ_{ion}	$2g_{pr}$	L	γ_v [eV]	α_v
B II	1	25.149	4	6.0	4.720	9.7257
					13.477	30.9262
					22.103	186.3466
	31.146	12	4.0	23.056	44.1629	
				24.734	60.8371	

Si queremos escribir la función de partición del B II, en conformidad con TBH, según (1.2), (1.4) y los valores consignados en la TABLA 1.1, será:

$$Q = 1 + 9.7257 \cdot 10^{-4.72 \theta} + 30.9262 \cdot 10^{-13.477 \theta} + 186.3466 \cdot 10^{-22.103 \theta} + 4 Q_{as}(6,2) \cdot 10^{-25.149 \theta} + 44.1629 \cdot 10^{-23.056 \theta} + 60.8371 \cdot 10^{-24.734 \theta} + 12 Q_{as}(4,2) \cdot 10^{-31.146 \theta} \quad (1.7)$$

Por otra parte, si suponemos, como ejemplo, $\Delta\chi = 0.1$ eV, de (1.6) resulta:

$$a(2, \theta) = 125.284 \theta \quad \text{y} \quad h(2) = \text{int}([13.595 \cdot 2 / 0.1]^{1/2} + 0.5) = 16 \quad (1.8)$$

y con estos valores podremos calcular los de Q_{as} .

2.2. IRWIN (1981).

En este trabajo se realizan aproximaciones polinomiales a las funciones de partición de 334 especies atómicas y moleculares, en el rango de temperatura [1000,16000] K. En sus consideraciones iniciales, el autor hace un breve comentario sobre la necesidad de ajustes interpolatorios por sobre los valores semianalíticos de TBH (1966) y los tabulados de Kurucz (1970), en los primeros por el tiempo de cálculo que insumen y en los segundos por enfrentarse a interpolaciones en tablas con valores de temperatura muy espaciadas (con la consabida pérdida de precisión).

En lo que a FsPAs se refiere, utiliza las aproximaciones de Chebyshev de TBH (1966) para evaluar la contribución de los niveles más bajos de energía de las especies neutras y una vez ionizadas de 37 elementos químicos, mientras que para las correspondientes a los niveles más excitados hace uso de series de Rydberg, truncando éstas a un nivel de corte de $\Delta\chi = 0.1$ eV bajo el continuo.

La expresión general de interpolación utilizada por el autor es la siguiente:

$$\ln(Q) = \sum_{i=0}^5 a_i (\ln T)^i \quad (1.9)$$

donde:

- Q : función de partición;
- a_i : coeficientes de ajuste polinomial,
- T : temperatura.

Los coeficientes a_i vienen tabulados para cada especie atómica como se lo indica en la TABLA 1.2, donde hemos elegido al C II como ejemplo.

TABLA 1.2
Coeficientes de ajuste para el C II.

Source (a)	Species (b)	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	$\ln(Q[16000 \text{ K}])$ (c)
1	6,01	-1.85578951D+02	1.16815901D+02	-2.91473937D+01	3.63531100D+00	-2.26513357D-01	5.63890268D-03	1.82927003D+00

(a) Fuente bibliográfica en donde se consultó el valor: 1-TBH (1966).

(b) Código identificativo de especies atómicas. Su formato es: ZZ.II, donde ZZ es el número atómico y II el estado de ionización (00: neutro, 01: una vez ionizado, etc.)

(c) Columna de verificación, calculando la función de partición mediante el polinomio de ajuste para T=16000 K.

2.3. SAUVAL & TATUM (1984).

Este es un trabajo orientado hacia el cálculo de funciones de partición y constantes de equilibrio de 300 especies moleculares diatómicas, en el rango de temperatura [1000,9000] K. Brinda una tabulación completa de los coeficientes c_n del desarrollo polinomial utilizado para átomos neutros y una vez ionizados presentes en las moléculas de interés, pero sin aclarar cuál es su fuente de información sobre valores de funciones de partición y/o niveles atómicos. El desarrollo polinomial aludido es el siguiente:

$$\log(Q) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} c_n (\log \theta)^n \quad (1.10)$$

La tabla dada por estos autores tiene la siguiente estructura, donde tomamos al O II como ejemplo:

TABLA 1.3
Coeficientes del ajuste polinomial de ST para el O II.

PARTITION FUNCTION						
ELEMENT	MAX.E.(¹)	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4
O +	0.00307	0.60405	-0.03025	0.04525		

(¹) Corresponde al error máximo del ajuste, según el procedimiento Mini-Max utilizado por los autores.

En la Fig. 1.1 mostramos los elementos y rangos de temperatura para los cuales los distintos autores analizados han calculado FsPAs.

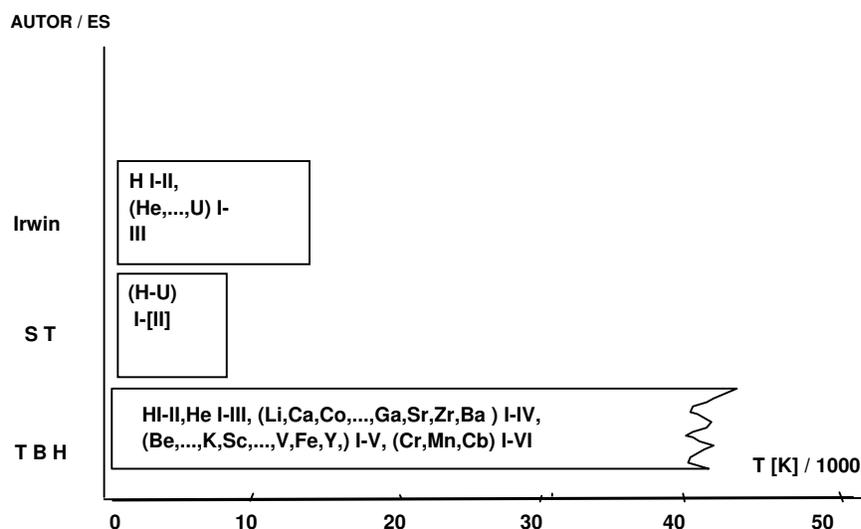


Fig. 1.1: Gráfico comparativo mostrando las especies atómicas y los intervalos de temperatura, empleados en el cálculo de FsPAs, por algunos de los autores consultados. Éstos fueron: *Irwin (I, 1981)*, *Sauval & Tatum (ST, 1984)* y *Traving, Baschek & Holweger (TBH, 1966)*.

3. CÁLCULO DE FUNCIONES DE PARTICIÓN.

3.1. CONSIDERACIONES GENERALES

Como nuestro interés está orientado hacia las capas más externas de las estrellas, en la discusión que sigue nos estaremos refiriendo a plasmas en los que, por las condiciones de densidad y temperatura, *los gases constitutivos pueden considerarse ideales*.

En un sentido amplio, a la función de partición atómica la definimos así (Griem, 1964; Traving *et al.*, 1966):

$$u_j(T) = \sum_{i=0}^{\infty} g_{ij} e^{-\frac{\chi_{ij}}{kT}} \quad (1.1)$$

(para el significado de las constantes, ver el punto **1** de este capítulo).

Para que el cálculo de (1.1) pueda efectivamente realizarse en el caso de átomos de una determinada clase, es necesario conocer los pesos estadísticos y las energías de excitación de sus distintos niveles. Esta información –que se obtiene en el laboratorio haciendo el análisis de los espectros de los distintos elementos– es razonablemente completa para los elementos livianos (números atómicos bajos en la tabla periódica) y considerablemente más fragmentaria para los pesados (números atómicos altos); similarmente, en un elemento determinado, el conocimiento de los niveles de más baja energía es usualmente completo (aquéllos de más bajo número cuántico principal n , en lo relativo a energía, peso estadístico, configuración, etc.) y se vuelve cada vez más incompleto para los niveles con n crecientes. Ejemplo de una publicación que reúne información sobre niveles de energía atómicos es la anteriormente citada de Moore (AEL, 1949-1952-1958).

Por otra parte, los pesos estadísticos usualmente se dividen por el peso estadístico del spin del núcleo; cuando se hace esta convención, toman el valor corriente $(2J+1)$ en todas las especies, con la única excepción de las moléculas homonucleares (Herzberg, 1950). Resulta claro, entonces, que la expresión (1.1) es divergente, ya que χ_{ij} tiende al valor del potencial de ionización y g_{ij} no tiende a cero (por ejemplo, $g_{ij} = 2i^2$ en el hidrógeno y átomos hidrogenoides en general). Esta situación se soluciona tomando en consideración que los orbitales electrónicos no pueden ser mayores que la distancia media entre los átomos del plasma (por las perturbaciones que mutuamente se producen, tornando inestables los orbitales próximos al continuo), y por lo tanto la sumatoria no debe extenderse más allá de un cierto $i_{\text{máx}}$. Este es un problema clásico que fue analizado por varios distinguidos investigadores: Planck (1924), Fermi (1924), Urey (1924) y Fowler (1929). Extendiendo los resultados de los autores anteriores, Unsöld (1948) mostró que en muchos casos de interés en las estrellas, la perturbación ejercida sobre un átomo por sus vecinos, puede expresarse en función de la densidad electrónica N_e ; así podemos escribir, $i_{\text{máx}} = f(N_e)$, y a (1.1) la escribimos más apropiadamente como sigue:

$$u_j(N_e, T) = \sum_{i=0}^{i_{\text{máx}}} g_{ij} e^{-\frac{\chi_{ij}}{kT}} \quad (1.11)$$

Físicamente es razonable pensar que existe una cierta *probabilidad* de que un átomo pueda retener a un electrón en una órbita ligada con número cuántico principal n , siendo esa probabilidad función de la densidad global de la materia en el punto considerado, de la temperatura y de la composición química. Esa probabilidad de que un electrón pueda ser retenido en una órbita n , debe ser incorporada en cada uno de los sumandos de la función de

partición, lo cual complica el cálculo. Para independizarse de la relación que vincula a $i_{\text{máx}}$ con N_e (o con T y P_e), atendiendo a que son varias las teorías que razonablemente pueden desarrollarse en ese sentido, desde hace tiempo distintos autores aplican un decremento al potencial de ionización y calculan funciones de partición en función de esa variable y de la temperatura (ver TBH, 1966; I, 1981; Halenka & Grabowski, 1977; etc.). Este es el procedimiento que también nosotros utilizaremos en este trabajo.

La incompletitud de las tablas de niveles de energía atómicos a la cual aludimos más arriba, obliga a analizar con algún cuidado la estructura del átomo en el momento de calcular su función de partición, requiriendo el uso de conceptos propios de la espectroscopía.

3.1.1. Ion y término padre. Peso estadístico.

El *ion padre* de un átomo es ese mismo átomo en el siguiente estado de ionización.

Término padre es el término espectroscópico que corresponde al ion padre.

Estos conceptos resultan de interés ya que, si queremos analizar la estructura de un átomo en particular, agregándole al ion padre un electrón (claramente estamos originando el átomo en estudio), y sumando los momentos angulares del electrón con los del *término padre*, determinamos toda la estructura espectral del átomo.

Las nociones de ion padre y término padre son particularmente útiles cuando se las utiliza vinculadas con las secuencias isoelectrónicas.

Ya que el ion padre tendrá un cierto valor de L y de S (números cuánticos totales, acimutal y de spin, respectivamente), su peso estadístico es el siguiente:

$$g_{\text{pr}} = (2L+1)(2S+1) \quad (1.12)$$

Aprovechando la introducción de g_{pr} , podemos ahora indicar que el peso estadístico de un estado caracterizado solamente por n (número cuántico principal) en un átomo cualquiera es:

$$g = 2g_{\text{pr}} n^2 \quad (1.13)$$

La TABLA 1.4 muestra, para distintas secuencias isoelectrónicas, el estado fundamental, el potencial de ionización, el ion padre, el término padre y el peso estadístico de este último, que han sido utilizados en nuestro trabajo.

En el punto 3.1.2. analizamos detalladamente al B I, para mostrar de dónde salen los valores consignados en la TABLA 1.4. Análisis similares se hicieron para los restantes elementos. Claramente, esta tarea es previa al cálculo de las FsP de los átomos respectivos.

TABLA 1.4
Iones padres y términos padres.

Elemento (Secuencia Isoelectrónica)	Estado Fundamental	$\chi_{\text{ion}} [eV]$ (Moore, 1949)	Ion Padre	Término Padre	g_{pr}
H I (He II, Li III, Be IV, B V, ...)	$1s^2 S_{1/2}$	13.598	H II	1S	1
He I (Li II, Be III, B IV, C V, ...)	$1s^2 ^1S_0$	24.580	He II	2S	2
Li I (Be II, B III, C IV, N V, ...)	(He I) $2s^2 S_{1/2}$	5.390	Li II	1S	1
Be I (B II, C III, N IV, O V, ...) <i>Estado múltiplemente excitado</i>	(He I) $2s^2 ^1S_0$ (He I) $2p^2 ^1D_2$	9.320 13.278	Be II	$(2s)^2 S$ $(2p)^2 P^o$	2 6
B I (C II, N III, O IV, F V, ...) <i>Estado múltiplemente excitado</i>	(Be I) $2p^2 P^o_{1/2}$ (He I) $2s 2p^2 ^4P_{1/2}$ (He I) $2s 2p^2 ^4P_{3/2}$ " " " (He I) $2p^3 ^4S^o_{3/2}$ " " " (He I) $2p^3 ^4S^o_{3/2}$ " " " (He I) $2p^3 ^4S^o_{3/2}$	8.296 12.924 17.394 20.556 20.984 24.120	B II	$(2s^2)^1 S$ $(2s2p)^3 P^o$ $(2s 2p)^1 P^o$ $(2p^2)^3 P$ $(2p^2)^1 D$ $(2p^2)^1 S$	1 9 3 9 5 1
C I (N II, O III, F IV, Ne V, ...) <i>Estado múltiplemente excitado</i>	(Be I) $2p^2 ^3P_0$ (He I) $2s 2p^3 ^5S^o_2$ " " " (He I) $2p^4 ^3P_2$ " " " (He I) $2p^4 ^3P_2$	11.264 16.594 20.552 23.225 24.977 28.869 29.914 32.179	C II	$(2s^2 2p)^2 P^o$ $(2s2p^2)^4 P$ $(2s2p^2)^2 D$ $(2s2p^2)^2 S$ $(2s2p^2)^2 P$ $(2p^3)^4 S^o$ $(2p^3)^2 D^o$ $(2p^3)^2 P^o$	6 12 10 2 6 4 10 6
N I (O II, F III, Ne IV, Na V, ...) <i>Estado múltiplemente excitado</i>	(Be I) $2p^3 ^4S^o_{3/2}$ (Li I) $2p^4 ^4P_{5/2}$ " " " (He I) $2p^5 ^2P^o_{3/2}^*$	14.545 20.392	N II	$(2s^2 2p^2)^3 P$ $(2s2p^3)^5 S^o$	9 5
O I (F II, Ne III, Na IV, Mg V, ...) <i>Estado múltiplemente excitado</i>	(Be I) $2p^4 ^3P_2$ (Li I) $2p^5 ^3P^o_2$	13.614 28.468	O II	$(2s^2 2p^3)^4 S^o$ $(2s 2p^4)^4 P$	4 12
F I (Ne II, Na III, Mg IV, Al V, ...) <i>Estado múltiplemente excitado</i>	(Be I) $2p^5 ^2P^o_{3/2}$ (Li I) $2p^6 ^2S_{1/2}$	17.442 37.849	F II	$(2s^2 2p^4)^3 P$ $(2s 2p^5)^3 P^o$	9 9
Ne I (Na II, Mg III, Al IV, Si V, ...)	(Be I) $2p^6 ^1S_0$	21.559	Ne II	$(2s^2 2p^5)^2 P^o$	6
Na I (Mg II, Al III, Si IV, P V, ...)	(Ne I) $3s^2 S_{1/2}$	5.138	Na II	$(2s^2 2p^6)^1 S$	1
K I (Ca II, Sc III, Ti IV, V V, ...)	(Ar I) $4s^2 S_{1/2}$	4.339	K II	$(3s^2 3p^6)^1 S$	1

* Estos términos no fueron observados en las tablas de Moore (1949, 1952, 1958)

3.1.2. Análisis de los estados del B I: un ejemplo.

Presentándolo como ejemplo, en este punto hacemos un análisis de los estados del B I. Mostramos su estado fundamental (o de energía mínima) y los normalmente excitados (en donde hay un único electrón que efectúa transiciones); a continuación presentamos aquéllos en los que hay más de un electrón excitado. Hemos analizado datos consignados en las tablas de Moore (1949, Vol. I, pág. 17), que reproducimos parcialmente a continuación (ver TABLA 1.5).

Se advierte la existencia de tres configuraciones electrónicas distintas, las que originan series de términos espectrales tal como inmediatamente lo mostramos:

TABLA 1.5
Niveles de energía del B I.

B I					B I				
Config.	Desig.	J	Level		Config.	Desig.	J	Level	
$2s^2 (1S)2p$	$2p^2 P^o$	$1/2$	0		$2s^2 (1S)5d$	$5d^2 D$	$1/2$	62481	
		$1/2$	16				$2/2$		
$2s 2p^2$	$2p^2 4P$	$1/2$	[28805]+x		$2s 2p^2$	$2p^2 2S$	$1/2$	63561	
		$1/2$	28810 +x		$2s^2 (1S)6d$	$6d^2 D$	$1/2$	63847	
		$2/2$	28816 +x				$2/2$		
$2s^2 (1S)3s$	$3s^2 S$	$1/2$	40040		$2s^2 (1S)7s$	$7s^2 S$	$1/2$	64156	
$2s 2p^2$	$2p^2 2D$	$1/2$	47857		$2s^2 (1S)7d$	$7d^2 D$	$1/2$	64664	
		$2/2$					$2/2$		
$2s^2 (1S)3d$	$3d^2 D$	$1/2$	54765		$2s^2 (1S)8d$	$8d^2 D$	$1/2$	65195	
		$2/2$					$2/2$		
$2s^2 (1S)4s$	$4s^2 S$	$1/2$	55009		$2s^2 (1S)9s$	$9s^2 S$	$1/2$	65553	
$2s^2 (1S)4d$	$4d^2 D$	$1/2$	59989		B II ($1S_0$)	Limit	-----	66930	
		$2/2$			$2s 2p^2$	$2p^2 2P$	$1/2$	72535	
$2s^2 (1S)5s$	$5s^2 S$	$1/2$	60146				$1/2$	72547	
$2s^2 (1S)6s$	$6s^2 S$	$1/2$	62098		$2p^3$	$2p^3 4S^o$	$1/2$	97037+x	

- La serie $1s^2 2s^2 n x^{(a)}$ –estados normales excitados– cuyo nivel fundamental es el $1s^2 2s^2 2p^2 P_{1/2}^o$ y la cual origina términos $2S, 2P, 2D, 2F$, etc. Los niveles de esta serie están indicados en la tabla precedente por



- La serie $1s^2 2s 2p n x$ –esta configuración corresponde a un estado múltiplemente excitado– cuyo nivel fundamental es el $1s^2 2s 2p^2 4P_{1/2}$, que a su vez origina las dos series siguientes^(b):

- a.1) $1s^2 2s 2p(3P^o)^{(c)} n x$, originando términos $2S, 2P, 2D, \dots, 4S, 4P, 4D, \dots$
- a.2) $1s^2 2s 2p(1P^o) n x$, originando términos $2S, 2P, 2D, \dots$

Los niveles de esta serie están indicados en la tabla precedente por



(a) Se introduce la notación $n x$ para representar cualquier electrón de número cuántico principal n y acimutal l .
 (b) La configuración $1s^2 2s 2p^2$, además del $4P$, origina términos $2S, 2P, 2D$, todos los cuales han sido observados.
 (c) El indicado entre paréntesis es el término padre, generador de la serie.

- La serie $1s^2 2p^2 n_x$ –otro estado múltiplemente excitado– cuyo nivel fundamental es el $1s^2 2p^3 \ ^4S^{\circ}_{3/2}$, que a su vez origina las tres series siguientes^(†):
 - b.1) $1s^2 2p^2(^3P) n_x$, que origina términos $^2S, ^2P, ^2D, \dots, ^4S, ^4P, ^4D, \dots$.
 - b.2) $1s^2 2p^2(^1D) n_x$, que origina términos $^2S, ^2P, ^2D, \dots$.
 - b.3) $1s^2 2p^2(^1S) n_x$, que origina términos $^2S, ^2P, ^2D, \dots$.

Los niveles de esta secuencia están indicados en la tabla precedente por 

Lo que terminamos de decir, se resume en la TABLA 1.6.

TABLA 1.6
Análisis espectroscópico del B I.

ELEMENTO: B I				
ESTADOS NORMALES:				
	<i>Configuración</i>		<i>Nivel</i>	
• Estado Fundamental:	$1s^2 2s^2 2p$		$^2P^{\circ}_{1/2}$	
• Estados Excitados:				
<u>Configuración</u>	<u>Término</u>	<u>Elec. Excit.</u>	<u>Términos que se originan</u>	<u>Energía de Ioniz. (eV)</u>
$1s^2 2s^2$	(1S)	$n x (3)$	[$^2S P^{\circ} D F^{\circ} \dots$]	8.296
ESTADOS MÚLTIPLEMENTE EXCITADOS:				
	<i>Configuración</i>		<i>Nivel</i>	
• Estado Fundamental:	a.) $1s^2 2s 2p^2$		$^4P_{1/2}^{(a)}$	
	b.) $1s^2 2p^3$		$^4S^{\circ}_{3/2}^{(b)}$	
• Estados Excitados:				
<u>Configuración</u>	<u>Término</u>	<u>Elec. Excit.</u>	<u>Términos que se originan</u>	<u>Energía de Ioniz. (eV)</u>
a.1) $1s^2 2s 2p$	($^3P^{\circ}$)	$n x (3)$	[$^2S P D \dots; ^4S P D \dots$]	12.924
a.2) $1s^2 2s 2p$	($^1P^{\circ}$)	$n x (3)$	[$^2S P D \dots$]	17.394
b.1) $1s^2 2p^2$	(3P)	$n x (3)$	[$^2S P D \dots; ^4S P D \dots$]	20.556
b.2) $1s^2 2p^2$	(1D)	$n x (3)$	[$^2S P D \dots$]	20.984
b.3) $1s^2 2p^2$	(1S)	$n x (3)$	[$^2S P^{\circ} D \dots$]	24.120

NB: $n x (3)$ significa: $n = 3, x = s, p, d$; $n = 4; x = s, p, d, f$; etc.

^(†) La configuración $1s^2 2p^3$ también origina términos $^2P^{\circ}, ^2D^{\circ}$, que no se han observado.

^(a) La configuración $2s 2p^2$ origina también términos $^2S P D$, los que han sido observados.

^(b) La configuración $2p^3$ origina también términos $^2P^{\circ} D^{\circ}$, que no se han observado.

Los potenciales de ionización resultan de las siguientes consideraciones.

Al límite de ionización para la primera secuencia se lo puede leer directamente al comienzo de la descripción del elemento en análisis, o en *Limit*, hacia el final de la TABLA 1.5, ya que corresponde también al potencial de ionización del elemento considerando la secuencia con un sólo electrón excitado. El mismo resulta ser igual a $\chi_0 = 66930 \text{ Ky}$, o equivalentemente $\chi_0 = 8.296 \text{ eV}^{(c)}$.

Para las series a.1 y a.2, el correspondiente potencial de ionización será la suma del potencial de ionización anterior más la energía del electrón generador de la secuencia. Para este último valor debemos efectuar la lectura de la energía en la tabla de niveles correspondiente al siguiente estado de ionización del átomo, el B II.

A continuación realizamos el cálculo para cada serie:

a.1) $1s^22s2p(^3P^0)$ nx:

$$\begin{aligned}\chi(^3P^0) &= \chi_0 + E(\text{B II} : 1s^22s2p(^3P^0)) \\ &= 66930 \text{ Ky} + 37333.6 \text{ Ky}\end{aligned}$$

$$= 104263.6 \text{ Ky} \equiv \boxed{12.924 \text{ eV}}$$

a.2.) $1s^22s2p(^1P^0)$ nx:

$$\begin{aligned}\chi(^1P^0) &= \chi_0 + E(\text{B II} : 1s^22s2p(^1P^0)) \\ &= 66930 \text{ Ky} + 73396.7 \text{ Ky}\end{aligned}$$

$$= 140326.7 \text{ Ky} \equiv \boxed{17.394 \text{ eV}}$$

Para las restantes series, repetimos el mismo procedimiento:

b.1) $1s^22p^2(^3P)$ nx:

$$\begin{aligned}\chi(^3P) &= \chi_0 + E(\text{B II} : 1s^22p^2(^3P)) \\ &= 66930 \text{ Ky} + 98910.3 \text{ Ky}\end{aligned}$$

$$= 165840.3 \text{ Ky} \equiv \boxed{20.556 \text{ eV}}$$

b.2) $1s^22p^2(^1D)$ nx:

$$\begin{aligned}\chi(^1D) &= \chi_0 + E(\text{B II} : 1s^22p^2(^1D)) \\ &= 66930 \text{ Ky} + 102362.1 \text{ Ky}\end{aligned}$$

$$= 169292.1 \text{ Ky} \equiv \boxed{20.984 \text{ eV}}$$

b.3) $1s^22p^2(^1S)$ nx:

$$\begin{aligned}\chi(^1S) &= \chi_0 + E(\text{B II} : 1s^22p^2(^1S)) \\ &= 66930 \text{ Ky} + 127662.0 \text{ Ky}\end{aligned}$$

$$= 194592.0 \text{ Ky} \equiv \boxed{24.120 \text{ eV}}$$

^(c) La constante de transformación de $\text{Ky} (\text{cm}^{-1})$ a eV utilizada, según Moore (1949), fue la siguiente:
 $c = 1.23951 \cdot 10^{-4} \text{ eV}\cdot\text{cm}$.

3.2. SELECCIÓN DE LOS RANGOS DE TEMPERATURA Y LIE.

Tal como lo dijimos anteriormente, las FsPAs dependen de la densidad de partículas perturbadoras N_p , las que originan una disminución del potencial de ionización (“lowering of the ionization energy”, LIE, $\Delta\chi$). En la literatura usual fueron derivadas diversas expresiones para LIE (Unsöld, 1948; Claas, 1951; Lochte-Holtgreven, 1958; Griem, 1964; Mihalas, 1978; etc.), y con el objeto de que las FsPAs sean independientes de la elección de la teoría que determine LIE, nuestros cálculos se hicieron suponiendo que $\Delta\chi$ es un parámetro independiente. El valor de $\Delta\chi$ fue seleccionado en el rango $0.005 \leq \Delta\chi \leq 1.5$ eV, y puesto que los valores de N_p involucrados están en el intervalo $10^{12} \leq N_p \leq 10^{18}$, las densidades menores corresponden a las capas más superficiales de una atmósfera estelar, mientras que las densidades más altas pertenecen a las zonas más profundas (ver punto 5.).

Para $T \geq 50000\text{K}$ y $10^{12} \leq N_e \leq 10^{18}$, los átomos de H I, He I, ... , Ne I y Na I, están fuertemente ionizados; por lo tanto, es innecesario conocer con precisión los valores de sus correspondientes FsPAs. Similarmente, para $T \geq 100000\text{K}$, se arriba a esta misma situación para los iones de He II, ... , Ne II y Na II. Luego, estos valores (50000K y 100000K) fueron seleccionados en nuestros cálculos como límites superiores para átomos neutros y una vez ionizados, respectivamente.

3.3. ANÁLISIS DE ALGUNOS DETALLES INVOLUCRADOS EN NUESTRO PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO.

Un estado atómico está descrito por una configuración electrónica; una configuración electrónica origina términos, los cuales –usualmente– tienen varios niveles de energía; cada nivel está caracterizado por su número cuántico J. Es cada uno de estos niveles el que contribuye al valor de la FPA.

Cuando examinamos una tabla de niveles de energía atómicos, muy pronto se evidencia el hecho de que los estados atómicos pueden clasificarse de acuerdo al siguiente esquema:

- a.) *Estados completamente conocidos*: son aquéllos en los que para cada nivel del término, su energía fue determinada experimentalmente.
- b.) *Estados parcialmente conocidos*: los que satisfacen sólo parcialmente la condición anterior.
- c.) *Estados completamente desconocidos*: aquéllos para los que no existe información experimental.

Usualmente la información es completa para números cuánticos principales n no mayores que 4 ó 5.

En el cálculo de las FsPAs, para los *estados completamente conocidos*, se sumó la contribución de cada nivel, recordando que el peso estadístico correspondiente es $g = 2J+1$. Para los *estados parcialmente conocidos*, se sumó la contribución de cada término, asignando el valor del peso estadístico $g = (2L+1)(2S+1)$; para los términos y/o niveles faltantes fueron adoptados los valores de energía más próximos. Finalmente, para los *estados completamente*

desconocidos, fueron adoptadas aproximaciones hidrogénicas a los valores de la energía, considerando el peso estadístico $g = 2g_{pr}n^2$, siendo g_{pr} es el peso estadístico del término padre.

También fueron considerados en el cálculo, los términos anómalos que corresponden a estados múltiplemente excitados; fueron seleccionados principalmente de los términos predichos de Moore (1949-1952-1958).

Por lo tanto, para el cálculo numérico de las FsPAs fue utilizada la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
 u(N_p, T) &= g_0 + u_1 + u_2 + \dots \\
 u_k &= \sum_i [2J(i) + 1] e^{-\chi_i/kT} + \sum_j [2L(j) + 1][2S(j) + 1] e^{-\chi_j/kT} + u_k^H \\
 u_k^H &= 2g_{pr} \sum_n n^2 e^{-\chi_n^H/kT}
 \end{aligned} \tag{1.14}$$

donde: g_0 es el peso estadístico del estado fundamental; u_1, u_2, \dots , son las contribuciones de los estados simple y múltiplemente excitados; mientras que la primera, segunda y tercera sumatoria en u_k son las contribuciones de los *estados completamente conocidos, parcialmente conocidos y completamente desconocidos* del átomo. Cada sumatoria fue efectuada bajo la condición de que cada nivel involucrado satisficiera la condición: $\chi_m < \chi_{ion} - \Delta\chi$, donde χ_{ion} es el potencial de ionización de la especie atómica considerada.

La TABLA 1.7 muestra los estados atómicos considerados en nuestros cálculos (para mayores detalles ver la TABLA 1.8). Para las constantes físicas utilizadas, fueron adoptados los valores recomendados por Cohen & Taylor (1991).

TABLA 1.7
Estados de los átomos considerados en nuestros cálculos de FsPAs.

Átomo	Config. Electr.	Nivel Fundam.	Estados Excitados	g_{pr}	χ_{ion} [cm ⁻¹]
H I	1s	² S _{1/2}	(¹ S) nx(1)	1	109678.758
He I	1s ²	¹ S ₀	1s (² S) nx(1)	2	198305
Li I	1s ² 2s	² S _{1/2}	1s ² (¹ S) nx(2)	1	43487.19
Be I	1s ² 2s ²	¹ S ₀	1s ² 2s(² S) nx(2)	2	75192.29
	1s ² 2p ²	¹ D ₂ (³ P, ¹ S)	1s ² 2p(² P ^o) nx(3)	6	107121.09
B I	1s ² 2s ² 2p	² P ^o _{1/2}	1s ² 2s ² (¹ S) nx(3)	1	66930
	1s ² 2s 2p ²	⁴ P _{1/2} (² DSP)	1s ² 2s 2p (³ P ^o) nx(3)	9	104263.6
			1s ² 2s 2p (¹ P ^o) nx(3)	3	140326.7
	1s ² 2p ³	⁴ S ^o _{3/2} (² PD ^o)*	1s ² 2p ² (³ P) nx(3)	9	165840.3
		1s ² 2p ² (¹ D) nx(3)	5	169292.1	
			1s ² 2p ² (¹ S) nx(3)	1	194592
C I	1s ² 2s ² 2p ²	³ P ₀ (¹ DS)	1s ² 2s ² 2p (² P ^o) nx(3)	6	90878.3
	1s ² 2s 2p ³		1s ² 2s 2p ² (⁴ P) nx(3)	12	133878.5
			1s ² 2s 2p ² (² D) nx(3)	10	165809.2
			1s ² 2s 2p ² (² S) nx(3)	2	187372.4
	1s ² 2p ⁴	³ P ₂ (³ P, ¹ DS)*	1s ² 2s 2p ² (² P) nx(3)	6	201503.4
			1s ² 2p ³ (⁴ S ^o) nx(3)	4	232902.7
			1s ² 2p ³ (² D ^o) nx(3)	10	241341.1
		1s ² 2s ³ (² P ^o) nx(3)	6	259609.9	
N I	1s ² 2s ² 2p ³	⁴ S ^o _{3/2} (² DP ^o)	1s ² 2s ² 2p ² (³ P) nx(3)	9	117345
	1s ² 2s 2p ⁴	⁴ P _{5/2} (² DPS)*	1s ² 2s ² 2p ² (¹ D) nx(3)	5	132660.7
			1s ² 2s ² 2p ² (¹ S) nx(3)	1	150032.1
			1s ² 2s 2p ³ (⁵ S ^o) nx(3)	5	164512.7
	1s ² 2p ⁵	² P ^o _{3/2} *	1s ² 2s 2p ³ (³ D ^o) nx(3)	15	209582.9
			1s ² 2s 2p ³ (³ P ^o) nx(3)	9	226563.2
		1s ² 2p ⁴ (³ P, ¹ DS) nx(3)	(³ P, ¹ DS)**	...	
O I	1s ² 2s ² 2p ⁴	³ P ₂ (¹ DS)	1s ² 2s ² 2p ³ (⁴ S ^o) nx(3)	4	109836.7
	1s ² 2s ² 2p ³ (² D ^o) nx(3)		10	136645.1	
	1s ² 2s ² 2p ³ (² P ^o) nx(3)		6	150303.6	
	1s ² 2s 2p ⁵	³ P ^o ₂ (¹ P ^o)	1s ² 2s 2p ⁴ (⁴ P) nx(3)	12	229674.4
			1s ² 2s 2p ⁴ (² D) nx(3)	10	275824.2
			1s ² 2s 2p ⁴ (² S) nx(3)	2	305547.1
		1s ² 2s 2p ⁴ (² P) nx(3)	6	322429.9	
F I	1s ² 2s ² 2p ⁵	² P ^o _{3/2}	1s ² 2s ² 2p ⁴ (³ P) nx(3)	9	140553.5
	1s ² 2s ² 2p ⁴ (¹ D) nx(3)		5	161426.5	
	1s ² 2s ² 2p ⁴ (¹ S) nx(3)		1	185472.5	
	1s ² 2s 2p ⁶	² S _{1/2}	1s ² 2s 2p ⁵ (³ P ^o) nx(3)	9	305351.2
1s ² 2s 2p ⁵ (¹ P ^o) nx(3)			3	380158.5	
Ne I	1s ² 2s ² 2p ⁶	¹ S ₀	1s ² 2s ² 2p ⁵ (² P ^o) nx(3)	6	173931.7
			1s ² 2s 2p ⁶ (² P ^o) nx(3)	2	390981.7
Na I	(Ne core) 3s	² S _{1/2}	(Ne core) (¹ S) nx(4)	1	41449.65
K I	(Ar core) 4s	² S _{1/2}	(Ar core) (¹ S) nx(5)	1	35009.78

Referencias:

* Estos términos no fueron observados en las tablas de Moore (1949-1952-1958)

** Estos términos no fueron observados en N II.

nx(1): n=2, x=s, p ; n=3, x=s, p, d ; etc.

nx(2): n=2, x=p ; n=3, x=s, p, d ; etc.

nx(3): n=3, x=s, p, d ; etc.

nx(4): n=3, x=p, d ; n=4, x=s, p, d, f ; etc.

nx(5): n=3, x=d ; n=4, x=p, d, f ; n=5, x=s, p, d, f, g ; etc.

TABLA 1.8
Características de los cálculos de TBH y este trabajo.

Átomo o Ion	Cantidad de Términos (TBH)	Cantidad de Términos (este trabajo)	$n_{\text{límite}}$ (TBH)	$n_{\text{límite}}$ (este trabajo)	$\Delta\chi_{\text{límite}}$ [eV]
H I	1	1	10	∞	0.14
He I	1	1	7	22	0.28
He II	1	1	11	∞	0.45
Li I	1	1	5	42	0.54
Li II	1	1	5	8	2.16
Be I	2	2	5-3	12-3	0.52
Be II	1	1	7	8	1.11
B I	1	6	8	9-2-2-2-2-2	0.22
B II	2	2	5-3	5-3	2.23
C I	1	8	5	11-3-2-2-2-2-2-2	0.54
C II	2	6	5-4	6-6-2-2-2-2	2.19
N I	2	6	5-3	12-2-2-2-2-2	0.55
N II	2	8	4-3	5-3-2-2-2-2-2-2	3.39
O I	3	7	7-5-2	10-7-3-3-3-3-3	0.28
O II	4	6	5-4-3-3	5-5-3-3-3-3	2.18
F I	2	5	3-3	4-3-2-2-2	1.47
F II	3	7	4-3-3	5-4-4-2-2-2-2	3.41
Ne I	2	3	5-5	13-11-2	0.45
Ne II	2	5	4-3	3-3-3-2-2	3.22
Na I	1	1	6	59	0.38
Na II	2	2	3-3	6-2	6.00
K I	1	1	6	79	0.38
Ca II	1	1	6	16	1.51

Referencias:

- Cantidad de Términos: cantidad de términos incluidos en el cálculo de las funciones de partición. Cuando este número es mayor que 1 significa que fueron considerados estados múltiplemente excitados.
- $n_{\text{límite}}$: número cuántico principal hasta el cual se utilizaron los valores de energía tabulados.
- $\Delta\chi_{\text{límite}}$: para valores de la disminución del potencial de ionización superiores a éste, la representación TBH deja de ser válida.

Detalles adicionales sobre nuestros cálculos de FsPAs pueden verse en el APÉNDICE I de este capítulo.

4. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS NUMÉRICOS.

I y ST realizaron sus cálculos para un valor $\Delta\chi = 0.1$ eV y para $T \leq 16000\text{K}$ y 9000K , respectivamente. Las fórmulas de TBH no tienen, en principio, ninguna limitación en el rango de temperatura, ni en la disminución del potencial de ionización (aunque existe una salvedad que discutimos en el punto 5.2); por ser más generales, comenzaremos analizando sus resultados.

4.1. ANÁLISIS DE LOS VALORES DE TBH.

En el trabajo de TBH se utilizaron los valores experimentales de Moore (1949-1952-1958) para el cálculo de las FsPAs de algunos elementos; cada cálculo (sumatoria) fue llevado a cabo hasta un valor determinado del número cuántico principal n ($n_{\text{límite}}$). A partir de allí se realizó una representación numérica como función de la temperatura de las FsPAs.

Comenzando en $n_{\text{límite}}+1$, fue utilizada una aproximación asintótica hidrogénica para los niveles atómicos. Para algunos átomos se consideraron estados simple y múltiplemente excitados; los estados fueron agrupados en grupos de términos, cada uno derivado de su correspondiente término padre. En la TABLA 1.8 se resumen los valores de $n_{\text{límite}}$ adoptados para cada elemento, como así también la cantidad de grupos de términos considerados por TBH. También se muestran, para comparación, los valores adoptados en nuestro análisis (tener en cuenta que nuestro valor de $n_{\text{límite}}$ es el mayor valor de n tabulado por Moore (1949-1952-1958)).

Nuestros resultados fueron comparados extensamente con los valores numéricos que resultaron de las fórmulas de TBH. En las TABLAS 1.9, 1.10 y 1.11 se muestra un muy buen acuerdo entre nuestros valores y los de TBH para el H I, He I y B II. Las discrepancias comienzan a partir de un valor de $\Delta\chi = 0.20$ eV (H I) y 0.50 eV (He I), las cuales serán explicadas luego (ver punto 5.2). Acuerdos similarmente buenos fueron encontrados para el He II, Li II, Be I, Na I, y Li III, Be IV, B V, etc.

También se encontraron muy buenos acuerdos para el B I, C I/II, N I/II, O I/II, F I/II y Ne I/II, si se adoptan los mismos conjuntos de términos múltiplemente excitados que TBH; pero como hemos considerado conveniente incluir algunos términos más para varios átomos (ver TABLA 1.8), surgen diferencias sistemáticas que se incrementan con el aumento de la temperatura (ver TABLA 1.12).

Los acuerdos no son tan buenos para el Li I, Be II, B III y C IV (ver TABLA 1.13). Analicemos el caso del Li I. En el trabajo de TBH se consideran niveles de energía de las tablas de Moore (1949) hasta $n = 5$ (ver TABLA 1.8); cuando fue necesario, nosotros consideramos hasta $n = 42$. Como ya dijimos, a partir de $n = 6$ estos autores adoptaron una aproximación hidrogénica para los niveles y utilizaron la expresión $\sqrt{13.595 Z^2 / \Delta\chi}$ para estimar los estados ligados superiores. Por lo tanto, para $\Delta\chi = 0.001$ eV, esta fórmula requiere sumar hasta $n = 116$, mientras que nuestro cálculo lo hizo solamente hasta $n = 73$; sin embargo, para $\Delta\chi = 0.10$ eV ya coincidimos en considerar –TBH y nosotros– $n = 11$ y, por lo tanto, desde allí y para LIE mayores, nuestro acuerdo vuelve a ser satisfactorio.

4.2. ANÁLISIS DE LOS VALORES DE I Y ST.

Como explicáramos previamente, estos autores cubren un rango muy limitado de temperatura y adoptan $\Delta\chi = 0.1$ eV. Dentro de estos límites y con la excepción de algunos casos –que mencionamos a continuación– los acuerdos entre TBH, I, ST y nuestros valores son muy satisfactorios, hallándose diferencias menores que 0.001 en el log u para los elementos considerados. El Li I, Be I, Na I y K I, muestran diferencias sistemáticas entre nuestros valores (o los de TBH) y los de I, o de ST, las que generalmente aumentan con la temperatura, por ejemplo, para $T = 16000\text{K}$ se encuentran diferencias del orden de 13% para el Na I, 18% para el Be I y, aproximadamente, del 10% al 15% para el Li I y K I.

TABLA 1.9
 Comparación de nuestros resultados (MM) y los resultados numéricos de TBH.
 $\log u$ (H I)

$\Delta\chi$ [eV]:	0.005		0.010		0.100	
T [K]	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
2000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
5000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
8000	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3010	0.3010
10000	0.3040	0.3040	0.3021	0.3021	0.3011	0.3011
14000	0.5112	0.5115	0.3847	0.3848	0.3049	0.3049
20000	1.5848	1.5855	1.1573	1.1579	0.3907	0.3908
30000	2.7042	2.7046	2.2365	2.2370	0.8977	0.8981
40000	3.2734	3.2737	2.8026	2.8029	1.3670	1.3673
50000	3.6154	3.6157	3.1437	3.1440	1.6811	1.6815
60000	3.8435	3.8437	3.3714	3.3716	1.8971	1.8974

$\Delta\chi$ [eV]:	0.200		0.250		0.500	
T [K]	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
2000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
5000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
8000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
10000	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011
14000	0.3030	0.3041	0.3026	0.3041	0.3020	0.3041
20000	0.3452	0.3734	0.3344	0.3734	0.3187	0.3734
30000	0.6623	0.8192	0.5881	0.8192	0.4585	0.8192
40000	1.0463	1.2662	0.9289	1.2662	0.6884	1.2662
50000	1.3313	1.5733	1.1963	1.5733	0.8985	1.5733
60000	1.5343	1.7862	1.3911	1.7862	1.0634	1.7862

TABLA 1.10

Comparación de nuestros resultados (MM) y los resultados numéricos de TBH.

 $\log u(\text{He I})$

$\Delta\chi$ [eV]:	0.005		0.010		0.100	
T [K]	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
8000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
14000	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
20000	0.0508	0.0510	0.0179	0.0180	0.0007	0.0007
30000	1.1868	1.1876	0.7679	0.7687	0.0679	0.0681
40000	2.1923	2.1930	1.7261	1.7267	0.4413	0.4416
50000	2.8093	2.8099	2.3386	2.3391	0.9137	0.9141
60000	3.2217	3.2222	2.7499	2.7503	1.2878	1.2882

$\Delta\chi$ [eV]:	0.200		0.250		0.500	
T [K]	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
8000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
14000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
20000	0.0003	0.0003	0.0002	0.0002	0.0001	0.0002
30000	0.0314	0.0315	0.0230	0.0231	0.0111	0.0231
40000	0.2452	0.2455	0.1879	0.1882	0.0946	0.1882
50000	0.6076	0.6080	0.4993	0.4997	0.2876	0.4997
60000	0.9408	0.9412	0.8082	0.8086	0.5206	0.8086

TABLA 1.11
Comparación de nuestros resultados (MM) y los resultados numéricos de TBH.

$\log u(B II)$

$\Delta\chi$ [eV]:	0.005		0.010		0.100	
T [eV]	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
8000	0.0047	0.0045	0.0047	0.0045	0.0047	0.0045
10000	0.0178	0.0173	0.0178	0.0173	0.0178	0.0173
14000	0.0782	0.0778	0.0779	0.0775	0.0777	0.0773
20000	0.3817	0.3824	0.2810	0.2815	0.2175	0.2179
30000	2.0811	2.0820	1.6432	1.6440	0.6264	0.6267
40000	3.1996	3.2003	2.7451	2.7458	1.3717	1.3721
50000	3.8906	3.8911	3.4342	3.4347	1.9980	1.9983
60000	4.3587	4.3591	3.9017	3.9021	2.4474	2.4477
70000	4.6966	4.6970	4.2394	4.2397	2.7771	2.7774
80000	4.9521	4.9524	4.4946	4.4949	3.0279	3.0281
90000	5.1519	5.1522	4.6943	4.6946	3.2247	3.2249
100000	5.3125	5.3127	4.8548	4.8550	3.3830	3.3832

$\Delta\chi$ [eV]:	0.200 eV		0.250		0.500	
T [K]	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
8000	0.0047	0.0045	0.0047	0.0045	0.0047	0.0045
10000	0.0178	0.0173	0.0178	0.0173	0.0178	0.0173
14000	0.0777	0.0773	0.0777	0.0773	0.0777	0.0773
20000	0.2159	0.2163	0.2156	0.2160	0.2152	0.2156
30000	0.5203	0.5204	0.4985	0.4987	0.4669	0.4669
40000	1.0560	1.0562	0.9663	0.9664	0.8044	0.8042
50000	1.6038	1.6040	1.4748	1.4749	1.2028	1.2026
60000	2.0271	2.0273	1.8829	1.8830	1.5569	1.5566
70000	2.3454	2.3455	2.1942	2.1943	1.8412	1.8410
80000	2.5899	2.5900	2.4348	2.4349	2.0666	2.0663
90000	2.7827	2.7828	2.6252	2.6253	2.2473	2.2470
100000	2.9383	2.9384	2.7792	2.7793	2.3945	2.3943

TABLA 1.12

Diferencias sistemáticas entre nuestros cálculos (MM) y los valores de TBH.

T [K]	Elemento				
	B I	C I	C II	N I	N II
10000	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
20000	0.15	0.02	0.00	0.03	0.00
30000	0.38	0.10	0.02	0.09	0.00
40000	0.56	0.19	0.15	0.12	0.09
60000	0.78	0.34	0.38	0.18	0.34
80000	0.92	0.44	0.50	0.23	0.46
100000	1.01	0.52	0.58	0.26	0.54

T [K]	Elemento					
	O I	O II	F I	F II	Ne I	Ne II
10000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
30000	0.02	0.05	0.00	0.02	0.00	0.01
40000	0.04	0.20	0.01	0.18	0.00	0.14
60000	0.06	0.32	0.02	0.30	0.02	0.20
80000	0.08	0.42	0.03	0.40	0.04	0.38
100000	0.12	0.48	0.05	0.46	0.08	0.42

TABLA 1.13Desacuerdos en el valor del $\log u(\text{Li I})$ entre nuestros valores (MM) y los de TBH.

$\Delta\chi$ [eV]:	0.005 eV		0.010		0.100	
	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
T [K]						
2000	0.3011	0.3010	0.3011	0.3010	0.3011	0.3010
5000	0.3587	0.3886	0.3471	0.3438	0.3205	0.3191
8000	1.3744	1.6242	1.2348	1.2063	0.4843	0.4842
10000	2.0150	2.2816	1.8603	1.8279	0.7341	0.7344
14000	2.7786	3.0505	2.6189	2.5849	1.2499	1.2500
20000	3.3567	3.6301	3.1955	3.1610	1.7430	1.7429
30000	3.8072	4.0814	3.6453	3.6105	2.1543	2.1542
40000	4.0326	4.3071	3.8703	3.8355	2.3645	2.3644
50000	4.1679	4.4425	4.0054	3.9705	2.4915	2.4915
60000	4.2580	4.5328	4.0955	4.0605	2.5766	2.5765

$\Delta\chi =$ Temp.	0.200 eV		0.250		0.500	
	MM	TBH	MM	TBH	MM	TBH
2000	0.3011	0.3010	0.3011	0.3010	0.3011	0.3010
5000	0.3199	0.3185	0.3197	0.3183	0.3195	0.3181
8000	0.4409	0.4399	0.4288	0.4287	0.4108	0.4107
10000	0.6114	0.6093	0.5737	0.5744	0.5150	0.5157
14000	1.0070	1.0013	0.9176	0.9180	0.7579	0.7585
20000	1.4344	1.4263	1.3084	1.3084	1.0556	1.0557
30000	1.8120	1.8028	1.6650	1.6649	1.3485	1.3485
40000	2.0093	1.9996	1.8538	1.8538	1.5100	1.5100
50000	2.1294	2.1196	1.9695	1.9695	1.6106	1.6107
60000	2.2102	2.2002	2.0474	2.0474	1.6790	1.6791

5. DISCUSIÓN.

5.1. LIE: LIMITACIÓN EN EL PROCEDIMIENTO DE I Y EN EL DE ST.

Si se adopta la “aproximación del vecino más cercano”, la relación entre la densidad de partículas perturbadoras (N_p) y LIE ($\Delta\chi$), es (Unsöld, 1948; Lochte-Holtgreven, 1958):

$$\Delta\chi = 7 \times 10^{-7} N_p^{1/3} Z^{2/3} \quad (1.15)$$

donde Z representa la carga nuclear efectiva ($Z=1$ neutro, etc.)

Adoptando como ejemplo a la atmósfera solar (Kurucz, 1979) y considerando $Z=1$, $\log N_p = \log 2Ne = 11.52$ ($\log \tau_{Ross} = -3.65$, es decir una capa muy superficial), el valor resultante para la disminución es de $\Delta\chi = 0.005$ eV, mientras que para $\log 2Ne = 16.03$ ($\log \tau_{Ross} = 2.01$, es decir una capa profunda), resulta $\Delta\chi = 0.154$ eV. Para una estrella B, $T_{eff} = 50000$ K, $\log g = 5$ y $\log 2Ne = 17.32$ (Kurucz, 1979), el resultado es de $\Delta\chi = 0.416$ eV.

Es decir, dentro de una misma atmósfera, como así también analizando diferentes atmósferas, la elección de un único valor para el $\Delta\chi$ (por ejemplo 0.1 eV) puede ser una pobre elección. Este punto podría entenderse como una limitación a las tabulaciones de Irwin (1981) y de Sauval & Tatum (1984). Más aún, estos autores cubren un rango de temperatura limitado, de tal forma que sus fórmulas pueden ser de utilidad únicamente en el estudio de atmósferas estelares de estrellas tardías (tipo espectral G o más tardío).

5.2. PROCEDIMIENTO DE TBH: LÍMITE PARA LIE.

La representación de TBH de las FsPAs, está dividida en dos partes: la primera corresponde a la contribución desde el nivel fundamental hasta un conjunto de niveles que tienen número cuántico principal n (n_{lim} , con energía de excitación χ_n). Esta parte es función de la temperatura y depende paraméricamente del valor de n , el cual es prefijado de antemano; no depende de LIE. La segunda parte es la contribución de los estados asintóticamente hidrogénicos; ésta depende del valor de $\Delta\chi$. Resulta claro que para valores de $\Delta\chi$ tales que, $\Delta\chi \geq \Delta\chi_{límite} = \chi_{ion} - \chi_n$, la contribución de la segunda parte se elimina, mientras que la contribución de la primera parte se mantiene sin cambio. Esto explica porqué en las TABLAS 1.9 y 1.10, a partir de $\Delta\chi = 0.20$ eV (para el H I) y de $\Delta\chi = 0.25$ eV (para el He I), los valores de las FsPAs de TBH no se modifican.

En la TABLA 1.8 se muestran los valores del $\Delta\chi_{límite}$ para los diferentes elementos analizados; claramente para $\Delta\chi > \Delta\chi_{límite}$, las fórmulas TBH no dan los valores correctos.

Es evidente que esta limitación no afecta a nuestro procedimiento de cálculo; la razón es que para cualquier valor de $\Delta\chi$, siempre suma las contribuciones de todos los niveles cuyas energías están por debajo de $\chi_{ion} - \Delta\chi$.

En el trabajo de TBH se incluyen grupos de términos para tener en cuenta estados múltiplemente excitados, pero hemos considerado necesario incluir también otros; en la TABLA 1.12 se muestran las diferencias que resultan. Teniendo en cuenta que las diferencias entre nuestro cálculos y los de TBH son casi independientes de $\Delta\chi$, se puede utilizar la TABLA 1.12 para reducir los valores de TBH a la cantidad de grupos de términos utilizada por nosotros.

5.3. NIVELES DE ENERGÍA ATÓMICOS Y LIE.

Debido a que los datos atómicos utilizados por nosotros para el cálculo de las FsPAs fueron publicados por Moore (1949-1952-1958) hace ya bastante tiempo, consideramos necesario analizar cuánto pueden llegar a modificarse nuestros resultados si se adoptaran valores más modernos. Para ello se calcularon nuevamente funciones de partición atómicas para el H I, He I, C I y N I.

Para el H I se utilizaron los datos atómicos de Erickson (1977). El nuevo valor para la energía de ionización ($109678.773704 \text{ cm}^{-1}$) difiere ligeramente del dado por Moore (1949) ($109678.758 \text{ cm}^{-1}$), lo cual resulta en pequeños cambios en las energías de los niveles atómicos y, consecuentemente, los nuevos valores de las funciones de partición son insignificadamente diferentes de aquéllos obtenidos previamente.

En el cálculo de las funciones de partición del He I se utilizaron los niveles de energía atómicos de Martin (1973). Se encontraron, en el peor de los casos, diferencias (en dex) de hasta 4 unidades en la cuarta cifra significativa con los valores previos.

Para el C I fueron utilizados los datos más actuales de Moore (1970-Sect. 3), encontrándose las siguientes diferencias:

- El potencial de ionización está disminuído en 57.88 cm^{-1} .
- A partir del número cuántico principal $n = 4$, se han podido observar los estados electrónicos f , aunque ello difícilmente afectaría nuestros resultados previos.
- No fue detectado ningún estado múltiplemente excitado nuevo.
- En promedio, los nuevos niveles de energía atómicos son 2 cm^{-1} más bajos (energías de excitación menores) que los dados por Moore (1949). Una excepción a esta regla ocurre en el estado $2s^2 2p(^2P^0) 4p \ ^3D$, el cual incrementa su energía en aproximadamente 600 cm^{-1} . El cálculo de las funciones de partición fue llevado a cabo utilizando estos nuevos valores y modificando las energías de los estados múltiplemente excitados. Como resultado, se encontraron diferencias (en dex) de sólo dos unidades en la cuarta cifra significativa (en el peor de los casos), siendo menores a una unidad como regla general.

Finalmente, se analizó el caso del N I, empleándose los datos atómicos de Moore (1975, Sect. 5). Generalmente hablando, la situación del N I es muy similar a la del C I, salvo una diferencia: aparecen en la nueva publicación algunos estados múltiplemente excitados que no habían sido previamente observados. Sin embargo, estos valores de energía están muy bien reproducidos por expresiones hidrogénicas y, por lo tanto, son ya tenidos en cuenta en nuestros cálculos anteriores. En conclusión puede afirmarse que, al igual que con el C I, se encontraron muy pequeñas variaciones en los valores de las FsPAs para el N I.

Así arribamos a la siguiente conclusión: para los elementos livianos, tal como los estudiados en este capítulo, el empleo de valores más modernos que los dados por Moore (1949-1952-1958), para los niveles de energía atómicos, no produce cambios significativos en los valores de las FsPAs. Las razones son dos: (1) La espectroscopía era ya una rama de la física experimental bien desarrollada en la primera mitad del siglo XX y no son de esperar cambios significativos en los valores de los niveles de energía atómicos más profundos de los átomos livianos, y (2) Las FsPAs son una forma grosera de pesar los niveles de energía atómicos y pequeños cambios en los valores de estos últimos, difícilmente se verán reflejados en el resultado final.

Finalmente, hay un punto que debemos enfatizar en relación al procedimiento de cálculo utilizado. Matemáticamente hablando, es de esperar que las FsPAs sean funciones continuas de las energías de los niveles atómicos. Sin embargo, el método (práctico) de disminuir el potencial de ionización, puede producir discontinuidades debidas a pequeños cambios de aquellas energías, a pequeños cambios en el potencial de ionización o a pequeñas variaciones en $\Delta\chi$ en sí mismo. Otras consecuencias que puede ocasionar este procedimiento, fueron discutidas por otros autores (Hummer & Mihalas, 1988; Mihalas, 1992), y aunque de indudable interés, este problema escapa al estudio que hacemos en este capítulo.

6. CONCLUSIONES.

Nuestras conclusiones son las siguientes:

- Generalmente hablando podemos decir que para el conjunto de elementos aquí considerados, los valores de las FsPAs obtenidos a través de las fórmulas de TBH, I y ST son homogéneos y precisos. Sin embargo existen limitaciones a esta afirmación, las cuales describiremos en los siguientes puntos.
- Los valores de las FsPAs de TBH tienen, en general, una precisión mejor que ± 0.001 dex para $\Delta\chi < \Delta\chi_{\text{límite}}$ (ver TABLA 1.8). Sin embargo hallamos algunas excepciones: los valores obtenidos para el Li I, Be II, B III y C IV son ligeramente excesivos, especialmente para $\Delta\chi < 0.01$ eV (debido a la inclusión de demasiados términos en la evaluación de las FsPAs, ver 4.1); no obstante, los resultados a partir de las fórmulas de TBH son todos correctos, al menos en el orden de magnitud.
- Para los átomos y iones B I, C I/II, N I/II, O I/II, F I/II y Ne I/II se incluyeron en nuestros cálculos algunos grupos de términos adicionales a los que incluyeron TBH (ver TABLA 1.8). Como lo muestra la TABLA 1.12, son significativas las diferencias para el B I, C I/II, N I/II, O I/II, F I/II y Ne II. Sin embargo creemos que los efectos sobre los resultados finales serán despreciables, porque los valores de las FsPAs se incrementan un tanto para $T > 20000\text{K}$, donde la ionización de los elementos neutros y ionizados es ya muy importante.
- Si aceptamos errores tan grandes como del 20%, pueden ser utilizadas las fórmulas de I y ST para todos los elementos estudiados; pero si se desean evitar errores mayores al 1%, no recomendamos el uso de estas fórmulas para el Li I, Be I, Na I y K I (las fórmulas de I no dan tampoco resultados dentro del 1% de error para el B I, ni para el C I).

Nuestro análisis muestra que, para los elementos más livianos, las fórmulas de TBH, aún después de 37 años de haber sido escritas, continúan dando los valores más confiables para las FsPAs.

En cuanto a las dificultades de carácter general que pueden afectar al cálculo de funciones de partición atómicas –más allá de los procedimientos numéricos– una de las principales es el desconocimiento de los niveles de energía ligados; el error sería grave si estos niveles fueran

próximos al fundamental, donde, afortunadamente, el conocimiento desde el laboratorio es más completo. El desconocimiento de las energías correctas de niveles fuertemente excitados sería menos grave, ya que éstos empezarían a contribuir para temperaturas muy altas, en las que de todos modos, los átomos están ya fuertemente ionizados y el valor correcto de las funciones de partición atómicas no es importante.

En relación a los autores estudiados, nuestros resultados presentan las siguientes ventajas:

- a.) Sistemáticamente se ha tratado de utilizar datos de espectroscopía y estructura atómica, más completos y modernos.
- b.) Se ha utilizado una gama de temperaturas y disminución de potenciales de ionización considerablemente más amplia (respecto de Irwin (1981) y Sauval & Tatum (1984)).
- c.) El procedimiento de TBH, si bien no tiene limitaciones por temperatura, deja de funcionar correctamente cuando la disminución del potencial de ionización excede cierto límite que depende del elemento.
- d.) Siguiendo los lineamientos de Halenka & Grabowski (1977, 1984, 1986) tomamos en cuenta –en forma más amplia que TBH– los estados múltiplemente excitados.

Las limitaciones de nuestro procedimiento son dos:

- 1.) Requeriría una parte importante de memoria para almacenar la información relativa a la estructura de los distintos átomos.
- 2.) En una mezcla gaseosa compleja, el cálculo de las FsPAs tomaría un tiempo considerable.

En el *Capítulo II* analizamos la importancia que tiene el uso del valor correcto de las FsPAs en la relación (P_e, P_g, T, Q) , y en el *Capítulo IV* extendemos el análisis a la integración de la ecuación del equilibrio hidrostático.

En el *Apéndice 1.1* se dan detalles adicionales sobre el procedimiento de cálculo utilizado.

En forma de *Apéndice 1.2* se agregan las FsPAs que hemos calculado para los elementos que van del H al Na. Esos valores están libres de errores sistemáticos y de otras limitaciones que afectan a los que se pueden obtener utilizando los procedimientos de TBH, ST o I. Los valores de la temperatura, así como los de la disminución del potencial de ionización, están finamente espaciados, lo cual permitiría –si se lo considera necesario– realizar una precisa interpolación en una o dos dimensiones. Las condiciones físicas corresponden a las que se encuentran en las atmósferas estelares.

7. PUBLICACIONES.

Durante la realización de esta investigación, se hicieron las siguientes publicaciones:

- “Partition functions of the light elements (H to Na), a revision”; Milone & Merlo (1998a).
- “Partition functions of the light elements, H to Na”; Milone & Merlo (1998b). Esta publicación es complementaria de la anterior, porque incluye un conjunto de tablas numéricas que por su extensión no se agregaron en la publicación anterior.

Resúmenes extensos:

- “Revisión del cálculo de funciones de partición”; Merlo & Milone (1996a) [reunión AAA, 1994].
- “Funciones de partición: su importancia en el cálculo de modelos de atmósferas estelares”; Milone & Merlo (1996a) [reunión AAA, 1994].

Resúmenes:

- “Funciones de partición atómicas: fuentes confiables de datos”; Merlo & Milone (1996b) [reunión AAA, 1996].
- “¿Es necesario calcular detalladamente funciones de partición atómicas?”; Milone & Merlo (1996b) [reunión AAA, 1996]

Referencias

- 📖 Aller, M.F. & C.H.M. Everett: 1972, *Ap. J.*, **172**, 447.
 📖 Bashkin, S. & J.O. Stoner: 1976, *Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams*, American Elsevier Publishing Company Inc., New York.
 📖 Bolton, C.T.: 1970, *Ap. J.*, **161**, 1187.
 📖 Claas, W.J.: 1951, *Rechs. Astrons. de l'Observ. d'Utrecht*, **XII**, I, 1.
 📖 Cohen, E.R. & B.N. Taylor: 1991, *Physics Today*, **88**, BG 9.
 📖 de Jager, T. & L. Neven: 1957, *Rechs. Astrons. de l'Observ. d'Utrecht*, **XIII**, 4, 5.
 📖 Erickson, G.W.: 1977, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **6**, 831.
 📖 Fermi, E.: 1924, *Z. f. Physik*, **26**, 54.
 📖 Fischel, D. & W.M. Sparks: 1971, *Ap. J.*, **164**, 359.
 📖 Fowler, R.H.: 1929, "Statistical mechanics" (Cambridge Univ. Press), Chap. XIV.
 📖 Griem, H.R.: 1964, "Plasma spectroscopy", New York: Mc Graw-Hill Book Co.
 📖 Halenka, J. & B. Grabowski: 1977, *Astron. Astrophys.*, **54**, 757.
 📖 Halenka, J. & B. Grabowski: 1984, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, **57**, 43.
 📖 Halenka, J. & B. Grabowski: 1986, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, **64**, 495.
 📖 Herzberg, G.: 1950, "Spectra of diatomic molecules", 2nd edit., New York: Van Nostrand, pp. 133-138.
 📖 Hummer, D.G. & D. Mihalas: 1988, *Ap.J.*, **331**, 794.
 📖 Irwin, A.W. (I): 1981, *Ap. J. Suppl. Ser.*, **45**, 621.
 📖 Kurucz, R.L.: 1979, *Ap. J. Suppl. Ser.*, **40**, 1.
 📖 Kurucz, R.L.: 1970, ATLAS: A Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres, *Smithsonian Ap. Obs. Spec. Report N° 309*.
 📖 Lochte-Holtgreven, W.: 1958, *Reports on Progress in Physics*, Vol. **XXI**, 312.
 📖 Martin, C.W.: 1973, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **2**, 257.
 📖 Merlo, D.C. & L.A. Milone: 1996a, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **39**, 9.
 📖 Merlo, D.C. & L.A. Milone: 1996b, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **40**, 27.
 📖 Mihalas, D.: 1967, *Methods in Computational Physics*, **7**, 1, Academic Press.
 📖 Mihalas, D.: 1978, "Stellar Atmospheres", 2nd edit., W.H. Freeman & Co.
 📖 Mihalas, D.: 1992, *Rev. Mexicana de Astronomía y Astrofísica*, **23**, 127
 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1996a, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **39**, 13.
 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1996b, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **40**, 27.
 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998a, *Astroph. Space. Sci.*, **359**, 173.
 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998b, *Trabajos de Astronomía Serie "A" N° 2/98*, Famaf (UNC).
 📖 Moore, Ch. E.: 1949-1952-1958, "Atomic energy levels", Vol 1-2-3, NBS Circ. 467.
 📖 Moore, Ch. E.: 1965/76, *National Standard Reference Data Series- NBS 3*, Sections 1/7.
 📖 Planck, M.: 1924, *Ann. Physik*, **75**, 673.
 📖 Sauval, A.J. & J.B. Tatum (ST): 1984, *Ap. J. Suppl. Ser.*, **56**, 193.
 📖 Traving, G., B. Baschek & H. Holweger (TBH): 1966, *Abhand. Hamburger Sternwarte*, Bd. **VIII**, 3
 📖 Unsöld, A.: 1948, *Zs. für Ap.*, **24**, 355.
 📖 Urey, H.C.: 1924, *Ap. J.*, **59**, 1.
 📖 van Diest, H.: 1980, *Astron. Astrophys.*, **83**, 378.

Apéndice 1.1

OTROS DETALLES DEL CÁLCULO DE FSPAS

La Tabla A1.1 reproduce parcialmente otra de Moore (1949)¹. Para el Li I muestra el término resultante (“Desig.”) según sea “la órbita” del electrón valencia (“Config.”); sirve como ejemplo de estados *completa* y *parcialmente conocidos*, y de otros *completamente desconocidos*. Un estado *completamente conocido* es $n = 4$, por ser conocidas las energías de las configuraciones desde $l=0$ hasta 3 (es decir 4s, 4p, 4d y 4f); $n = 5$ es un estado *parcialmente conocido* –no se observa el estado 5g– y análogamente, $n = 6$ es *parcialmente conocido*. De los *parcialmente conocidos*, el último estado consignado en la tabla de Moore es un 42p, o sea, que desde $n = 43$ comienzan los *completamente desconocidos*.

A los niveles o términos faltantes en los *parcialmente conocidos*, les asignamos la energía de otro próximo a ellos. Ciertamente que éste es un procedimiento aproximado, pero no debería introducir errores serios en el resultado final; traducidas a eV las incertezas en las energías asignadas, éstas nunca superan a 0.1 eV y usualmente son menores.

Las energías de los estados *completamente desconocidos* son aproximadas con una fórmula que representa adecuadamente a los niveles asintóticamente hidrogénicos (caso del Li I, Be II, ...; Na I, Mg II, ...):

$$\text{Energía} = \text{Energía}_{\text{ionizac}} - R_{\infty} z^2 / n^2 \quad (\text{A1.1})$$

(R_{∞} , constante de Rydberg para una masa nuclear infinita; z , carga efectiva del núcleo; n , número cuántico principal). El peso estadístico de estos estados es: $g = 2g_{\text{pr}} n^2$.

TABLA A1.1
Niveles de energía del Li I.

Config.	Desig.	J	Level
.....
4s	4s ² S	½	35012.06
4p	4p ² P ^o	½, 1½	36469.55
4d	4d ² D	1½	36623.38
4f	4f ² F ^o	2 ½	36623.40
		2½, 3½	36630.20
5s	5s ² S	½	38299.50
5p	5p ² P ^o	½, 1½	39015.56
5d	5d ² D	1½	39094.93
5f	5f ² F ^o	2 ½	39094.94
		2½, 3½	39104.50
6s	6s ² S	½	39987.64
6p	6p ² P ^o	½, 1½	40390.84
6d	6d ² D	1½	40437.31
		2½	40437.32
.....

¹ Moore, Ch. E.: 1949, “Atomic energy levels”, Vol 1-2-3, NBS Circ. 467, pág. 9.

Para calcular la función de partición de un átomo, debemos contar con una tabulación de sus niveles de energía; esta información está usualmente grabada en un soporte magnético en forma de archivo. La Tabla A1.2 ilustra una tal tabulación para el N I. Lo primero que aparece es un mensaje sobre el contenido del archivo (como “string”); luego, la energía de ionización en *Kaysar*, el peso estadístico del término padre y $z_{nuclear}$ (la carga nuclear efectiva que ve el electrón valencia). Luego, en tandas sucesivas para cada estado, un número de orden, número cuántico principal de la configuración, configuración (variable “string” que incluye número cuántico principal, símbolo del momento angular l , etc.), valor de j (peso estadístico = $2j + 1$, para los niveles) –o directamente el peso del término, o del conjunto de términos, para los estados parcialmente conocidos– y su energía. Para que el programa que lee el archivo sepa que se acabaron los estados *completamente conocidos*, se incluye una línea **0 “0a” 0 0**; otra línea con el formato **500 “0a” 0 0**, le indica que se acabaron los parcialmente conocidos. Así en la Tabla A1.2, las entradas 1 a 5 corresponden a los estados *completamente conocidos*, y del 7 al 22 a los *parcialmente conocidos*. Una línea **500 “0a” 0 0** también puede indicar que a continuación, el programa debe considerar la contribución de estados asintóticamente hidrogénicos, o que se incluyen estados múltiplemente excitados, o que se llegó al final del archivo.

En resumen digamos que, en los estados *completos*, el programa de cálculo suma la contribución de cada nivel, recordando que el peso estadístico de un nivel es $2j + 1$; en los estados *incompletos*, suma la contribución de los términos, siendo el peso de cada término $(2L+1)(2S+1)$. Lo que terminamos de decir es válido para los estados simple y múltiplemente excitados.

De este modo, para el cálculo de la función de partición nos queda la expresión:

$$u(N_e, T) = g_0 + \sum_i (2J(i) + 1) e^{-\frac{\chi_i}{kT}} + \sum_j (2L(j) + 1)(2S(j) + 1) e^{-\frac{\chi_j}{kT}} + 2g_{pr} \sum_n n^2 e^{-\frac{\chi_n}{kT}} \quad (A1.2)$$

en la cual, g_0 es el peso estadístico del estado fundamental del átomo, el primer sumando es la contribución de los estados completos, el segundo, la contribución de los estados incompletos, y el último, de los estados hidrogénicos; $J(i)$ y χ_i son, respectivamente, el número cuántico interior y la energía de excitación del i -ésimo nivel; $L(j)$, $S(j)$ y χ_j son, respectivamente, los números cuánticos y las energías de excitación del j -ésimo término, y, finalmente, n y χ_n son el número cuántico principal y la energía de excitación del correspondiente estado hidrogénico (ver 1.14).

La Tabla A1.3 muestra el archivo correspondiente al H I; los archivos para calcular FSPAs de otros átomos hidrogénicos (He II, Li III, etc.) son enteramente similares. Cuando el programa de cálculo opera con un archivo como éste, al encontrar sucesivamente las líneas **0 “0a” 0 0** y **500 “0a” 0 0**, salta a calcular la FPA considerando que se trata de un átomo estrictamente hidrogénico, o sea, que la fórmula A1.1 se reduce exclusivamente a la tercera sumatoria. La energía de cada estado (χ_n) es:

$$\text{Energía} = \text{Energía}_{ionizac} (1 - 1/n^2) \quad (A1.3)$$

La fig. A1.1 ilustra la condición en este caso para que el cálculo prosiga, o se detenga.

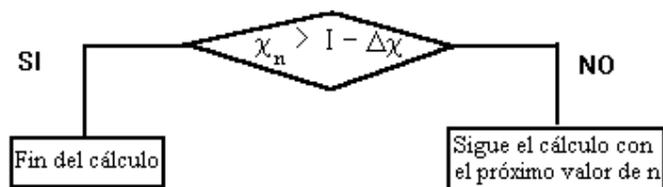


Fig. A1.1: Corte de control en el potencial de excitación de cada nivel hidrogenoide a ser considerado en el cálculo.

TABLA A1.2
 Archivo de datos. Ejemplo: N I.

"Elemento: N I, Referencia: Moore (1949), I, pp. 32-35 ; Secuencias: 3P,1D,1S (*:estado multiplemente excitado)"			
117345	9	1	
1	2	"2p3 4So"	1.5 0
2	2	"2p3 2Do"	2.5 19223
3	2	"2p3 2Do"	1.5 19231
4	2	"2p3 2Po"	1.5 28840
5	2	"2p3 2Po"	0.5 28840
6	0	"0a"	0 0
7	3	"3s"	18 84465.1
8	3	"3p"	54 95796.1
9	4	"4s"	18 103878.5
10	3	"3d"	90 104870
11	4	"4p"	54 105908.1
12	4	"4d"	90 110307.8
13	4	"4f"	126 110470.5
14	5	"5"	450 112187.4
15	6	"6"	648 113865.4
16	7	"7"	882 114762.1
17	8	"8"	1152 115378.6
18	9	"9"	1458 115804.1
19	10	"10"	1800 116099.4
20	11	"11"	2178 116314.9
21	12	"12"	2592 116461.9
22	13	"13"	3042 116467
23	500	"0a"	0 0
			132660.7 5 4
24	0	"0a"	0 0
25	3	"3s"	10 99661.5
26	3	"3p"	30 111720.8
27	3	"3d"	50 112320.8
28	500	"0a"	0 0
			150032.1 1 2
29	0	"0a"	0 0
30	500	"0a"	0 0
			164512.7 5 2
31	2	"*2s2p4 4P"	12 88145.3
32	0	"0a"	0 0
33	500	"0a"	0 0
			209582.9 15 2
34	0	"0a"	0 0
35	500	"0a"	0 0
			226563.2 9 2
36	0	"0a"	0 0
37	500	"0a"	0 0

TABLA A1.3
 Archivo de datos. Ejemplo: H I.

"Elemento: H I, Referencia: Moore (1949), I, pg. 1"			
109678.758	1	1	
1	0	"0a"	0 0
2	500	"0a"	0 0

Apéndice 1.2

VALORES DE FUNCIONES DE PARTICIÓN ATÓMICAS: H AL Na

(Extraído de “Partition functions of the light elements, H to Na”, Milone & Merlo (1998)¹)

- Tabla A2.1: H I página 34
- Tablas A2.2-3: He I-II página 35
- Tablas A2.4-5: Li I-II página 36
- Tablas A2.6-7: Be I-II página 37
- Tablas A2.8-9: B I-II página 38
- Tablas A2.10-11: C I-II página 39
- Tablas A2.12-13: N I-II página 40
- Tablas A2.14-15: O I-II página 41
- Tablas A2.16-17: F I-II página 42
- Tablas A2.18-19: Ne I-II página 43
- Tablas A2.20-21: Na I-II página 44

¹ Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998, *Trabajos de Astronomía Serie “A” N° 2/98*. Famaf (UNC).

TABLA A2.1
H I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
5000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
10000	0.3321	0.3040	0.3021	0.3012	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3010	0.3010	0.3010
15000	1.4845	0.6661	0.4621	0.3207	0.3088	0.3050	0.3034	0.3028	0.3024	0.3020	0.3020
20000	2.5992	1.5848	1.1573	0.5092	0.3907	0.3452	0.3256	0.3187	0.3133	0.3091	0.3091
30000	3.7391	2.7041	2.2365	1.2663	0.8977	0.6623	0.5194	0.4585	0.4071	0.3660	0.3660
40000	4.3100	3.2733	2.8026	1.7949	1.3670	1.0463	0.8085	0.6884	0.5737	0.4706	0.4706
50000	4.6525	3.6154	3.1437	2.1261	1.6811	1.3313	1.0517	0.8985	0.7403	0.5842	0.5842
60000	4.8809	3.8435	3.3714	2.3493	1.8971	1.5343	1.2344	1.0634	0.8790	0.6858	0.6858
70000	5.0441	4.0064	3.5341	2.5095	2.0533	1.6834	1.3721	1.1906	0.9898	0.7710	0.7710
80000	5.1664	4.1287	3.6561	2.6299	2.1712	1.7968	1.4783	1.2901	1.0783	0.8413	0.8413
90000	5.2616	4.2237	3.7510	2.7237	2.2632	1.8858	1.5623	1.3694	1.1498	0.8996	0.8996
100000	5.3377	4.2998	3.8270	2.7988	2.3370	1.9573	1.6302	1.4339	1.2086	0.9482	0.9482

TABLA A2.2

He I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
15000	0.0050	0.0005	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
20000	0.3704	0.0508	0.0179	0.0018	0.0007	0.0003	0.0002	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
30000	2.1968	1.1868	0.7679	0.1675	0.0679	0.0314	0.0163	0.0111	0.0072	0.0044	0.0044
40000	3.2268	2.1923	1.7261	0.7773	0.4413	0.2452	0.1373	0.0946	0.0607	0.0351	0.0351
50000	3.8461	2.8093	2.3386	1.3340	0.9137	0.6076	0.3913	0.2876	0.1936	0.1145	0.1145
60000	4.2590	3.2217	2.7499	1.7319	1.2878	0.9408	0.6674	0.5206	0.3728	0.2326	0.2326
70000	4.5540	3.5164	3.0441	2.0211	1.5680	1.2043	0.9042	0.7338	0.5512	0.3626	0.3626
80000	4.7752	3.7375	3.2650	2.2394	1.7818	1.4099	1.0959	0.9124	0.7087	0.4863	0.4863
90000	4.9473	3.9095	3.4368	2.4096	1.9495	1.5728	1.2507	1.0592	0.8422	0.5966	0.5966
100000	5.0850	4.0470	3.5742	2.5460	2.0842	1.7044	1.3771	1.1804	0.9545	0.6926	0.6926

TABLA A2.3

He II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
5000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
10000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
15000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
20000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
30000	0.3024	0.3012	0.3011	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
40000	0.5028	0.3235	0.3090	0.3018	0.3013	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011
50000	1.4742	0.6531	0.4584	0.3177	0.3077	0.3036	0.3023	0.3019	0.3016	0.3015	0.3014
60000	2.3620	1.3521	0.9616	0.4209	0.3518	0.3206	0.3106	0.3073	0.3050	0.3041	0.3034
70000	3.0119	1.9738	1.5333	0.6850	0.4918	0.3809	0.3406	0.3268	0.3168	0.3130	0.3100
80000	3.5011	2.4571	2.0052	1.0311	0.7306	0.5086	0.4100	0.3730	0.3450	0.3343	0.3256
90000	3.8818	2.8361	2.3809	1.3608	1.0031	0.6910	0.5238	0.4532	0.3959	0.3730	0.3539
100000	4.1865	3.1401	2.6836	1.6450	1.2602	0.8928	0.6683	0.5627	0.4699	0.4306	0.3968

TABLA A2.4

Li I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011	0.3011
5000	0.4874	0.3587	0.3471	0.3223	0.3205	0.3199	0.3196	0.3195	0.3193	0.3192	0.3191
10000	2.7107	2.0150	1.8603	0.9793	0.7341	0.6114	0.5426	0.5150	0.4902	0.4679	0.4660
15000	3.6135	2.9069	2.7467	1.7391	1.3542	1.0942	0.9046	0.8154	0.7289	0.6493	0.6425
20000	4.0657	3.3567	3.1955	2.1631	1.7430	1.4344	1.1846	1.0556	0.9220	0.7923	0.7809
30000	4.5180	3.8072	3.6453	2.5969	2.1543	1.8121	1.5142	1.3485	1.1653	0.9751	0.9576
40000	4.7442	4.0326	3.8703	2.8157	2.3645	2.0093	1.6918	1.5100	1.3030	1.0809	1.0600
50000	4.8799	4.1679	4.0054	2.9473	2.4915	2.1294	1.8014	1.6106	1.3900	1.1486	1.1255
60000	4.9703	4.2580	4.0955	3.0352	2.5766	2.2102	1.8755	1.6790	1.4496	1.1954	1.1708
70000	5.0350	4.3224	4.1598	3.0980	2.6374	2.2681	1.9288	1.7285	1.4929	1.2297	1.2040
80000	5.0834	4.3708	4.2081	3.1452	2.6831	2.3116	1.9691	1.7658	1.5257	1.2557	1.2292
90000	5.1211	4.4083	4.2456	3.1819	2.7187	2.3456	2.0005	1.7951	1.5515	1.2762	1.2491
100000	5.1513	4.4384	4.2756	3.2112	2.7472	2.3728	2.0257	1.8185	1.5722	1.2928	1.2652

TABLA A2.5

Li II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
15000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
20000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
30000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
40000	0.0022	0.0002	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
50000	0.1472	0.0155	0.0055	0.0005	0.0002	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
60000	0.9308	0.2244	0.0920	0.0090	0.0036	0.0013	0.0006	0.0004	0.0003	0.0002	0.0002
70000	1.7913	0.8106	0.4634	0.0677	0.0276	0.0103	0.0049	0.0032	0.0020	0.0015	0.0011
80000	2.4664	1.4344	1.0058	0.2565	0.1177	0.0466	0.0224	0.0143	0.0086	0.0065	0.0048
90000	2.9948	1.9524	1.5037	0.5701	0.3111	0.1393	0.0699	0.0452	0.0271	0.0202	0.0147
100000	3.4180	2.3728	1.9185	0.9131	0.5756	0.2994	0.6285	0.1084	0.0659	0.0494	0.0358

TABLA A2.6
Be I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0073	0.0070	0.0070	0.0070	0.0070	0.0070	0.0070	0.0070	0.0070	0.0070	0.0070
10000	1.6537	0.7360	0.4442	0.1876	0.1619	0.1531	0.1493	0.1478	0.1466	0.1457	0.1453
15000	3.2502	2.2209	1.7636	0.8939	0.6354	0.5036	0.4361	0.4090	0.3873	0.3712	0.3645
20000	4.0901	3.0556	2.5882	1.6125	1.2295	0.9704	0.8002	0.7204	0.6501	0.5949	0.5752
30000	4.9755	3.9391	3.4684	2.4580	2.0212	1.6809	1.4112	1.2605	1.1067	0.9635	0.9197
40000	5.4400	4.4030	3.9314	2.9124	2.4623	2.0998	1.7971	1.6178	1.4217	1.2200	1.1637
50000	5.7264	4.6890	4.2170	3.1938	2.7378	2.3656	2.0477	1.8545	1.6361	1.3981	1.3360
60000	5.9204	4.8829	4.4105	3.3850	2.9256	2.5478	2.2212	2.0201	1.7883	1.5266	1.4614
70000	6.0605	5.0228	4.5503	3.5231	3.0615	2.6801	2.3480	2.1418	1.9010	1.6228	1.5560
80000	6.1665	5.1286	4.6559	3.6276	3.1645	2.7805	2.4445	2.2347	1.9877	1.6973	1.6295
90000	6.2493	5.2114	4.7386	3.7094	3.2451	2.8593	2.5204	2.3079	2.0562	1.7565	1.6882
100000	6.3159	5.2779	4.8050	3.7751	3.3099	2.9226	2.5815	2.3670	2.1117	1.8047	1.7360

TABLA A2.7
Be II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
5000	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012	0.3012
10000	0.3152	0.3141	0.3140	0.3140	0.3140	0.3140	0.3140	0.3140	0.3140	0.3140	0.3140
15000	0.9423	0.4576	0.3960	0.3621	0.3599	0.3590	0.3587	0.3586	0.3585	0.3585	0.3585
20000	2.3457	1.3501	0.9804	0.5134	0.4594	0.4350	0.4268	0.4240	0.4218	0.4218	0.4210
30000	3.8702	2.8266	2.3746	1.3883	1.0682	0.8130	0.6876	0.6364	0.5944	0.5942	0.5794
40000	4.6347	3.5890	3.1331	2.0958	1.7074	1.3248	1.0745	0.9465	0.8230	0.8224	0.7750
50000	5.0935	4.0473	3.5905	2.5420	2.1373	1.7158	1.4107	1.2363	1.0473	1.0463	0.9671
60000	5.3994	4.3529	3.8956	2.8427	2.4316	1.9941	1.6640	1.4651	1.2348	1.2335	1.1312
70000	5.6179	4.5712	4.1137	3.0582	2.6438	2.1980	1.8543	1.6413	1.3846	1.3831	1.2649
80000	5.7817	4.7349	4.2773	3.2202	2.8036	2.3528	2.0007	1.7787	1.5043	1.5027	1.3731
90000	5.9092	4.8623	4.4045	3.3463	2.9282	2.4739	2.1162	1.8881	1.6010	1.5993	1.4614
100000	6.0111	4.9641	4.5063	3.4472	2.0281	2.5713	2.2095	1.9769	1.6804	1.6786	1.5344

TABLA A2.8

B I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748	0.7748
5000	0.7774	0.7771	0.7771	0.7770	0.7770	0.7770	0.7770	0.7770	0.7770	0.7770	0.7770
10000	1.8958	1.1115	0.9297	0.8093	0.7993	0.7959	0.7945	0.7940	0.7935	0.7932	0.7930
15000	3.3356	2.3144	1.8734	1.1380	0.9765	0.9086	0.8776	0.8663	0.8568	0.8502	0.8481
20000	4.1475	3.1143	2.6497	1.7077	1.3733	1.1742	1.0598	1.0128	0.9722	0.9425	0.9358
30000	5.0621	4.0258	3.5555	2.5492	2.1202	1.7945	1.5462	1.4173	1.2871	1.1715	1.1559
40000	5.5750	4.5381	4.0665	3.0483	2.6000	2.2412	1.9439	1.7740	1.5858	1.3914	1.3727
50000	5.9067	4.8694	4.3973	3.3743	2.9186	2.5470	2.2292	2.0402	1.8212	1.5740	1.5556
60000	6.1396	5.1020	4.6297	3.6040	3.1444	2.7662	2.4378	2.2383	2.0018	1.7202	1.7029
70000	6.3123	5.2746	4.8020	3.7746	3.3126	2.9303	2.5955	2.3897	2.1421	1.8372	1.8212
80000	6.4455	5.4076	4.9349	3.9063	3.4426	3.0577	2.7185	2.5084	2.2534	1.9320	1.9171
90000	6.5513	5.5134	5.0405	4.0111	3.5462	3.1592	2.8169	2.6037	2.3434	2.0098	1.9959
100000	6.6373	5.5994	5.1264	4.0963	3.6305	3.2420	2.8974	2.6819	2.4175	2.0746	2.0615

TABLA A2.9

B II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
10000	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178	0.0178
15000	0.1192	0.1002	0.0989	0.0983	0.0983	0.0983	0.0983	0.0983	0.0983	0.0983	0.0983
20000	1.0066	0.3817	0.2810	0.2214	0.2175	0.2159	0.2154	0.2152	0.2151	0.2150	0.2150
30000	3.1175	2.0811	1.6432	0.8116	0.6264	0.5203	0.4808	0.4669	0.4563	0.4521	0.4486
40000	4.2446	3.1996	2.7451	1.7287	1.3717	1.0560	0.8812	0.8044	0.7390	0.7113	0.6870
50000	4.9366	3.8906	3.4342	2.3921	1.9980	1.6038	1.3401	1.2028	1.0687	1.0055	0.9464
60000	5.4051	4.3587	3.9017	2.8523	2.4474	2.0271	1.7261	1.5569	1.3780	1.2869	1.1966
70000	5.7432	4.6966	4.2394	3.1867	2.7771	2.3454	2.0268	1.8412	1.6364	1.5275	1.4151
80000	5.9988	4.9521	4.4946	3.4401	3.0279	2.5899	2.2616	2.0666	1.8462	1.7256	1.5981
90000	6.1988	5.1519	4.6943	3.6385	3.2247	2.7827	2.4483	2.2473	2.0166	1.8882	1.7502
100000	6.3594	5.3125	4.8548	3.7981	3.3830	2.9383	2.5997	2.3945	2.1567	2.0228	1.8771

TABLA A2.10

C I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452	0.9452
5000	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634	0.9634
10000	1.3723	1.0585	1.0264	1.0106	1.0095	1.0091	1.0090	1.0089	1.0088	1.0088	1.0088
15000	3.0353	2.0429	1.6530	1.1662	1.0984	1.0741	1.0638	1.0602	1.0573	1.0553	1.0545
20000	4.0041	2.9737	2.5150	1.6376	1.3753	1.2428	1.1763	1.1509	1.1307	1.1172	1.1126
30000	5.0262	3.9902	3.5204	2.5216	2.1061	1.8035	1.5868	1.4811	1.3834	1.3085	1.2878
40000	5.5808	4.5439	4.0726	3.0568	2.6133	2.2640	1.9827	1.8275	1.6667	1.5237	1.4901
50000	5.9390	4.9017	4.4297	3.4079	2.9548	2.5885	2.2804	2.1011	1.9039	1.7097	1.6704
60000	6.1929	5.1553	4.6830	3.6582	3.2001	2.8253	2.5034	2.3109	2.0916	1.8605	1.8196
70000	6.3836	5.3459	4.8734	3.8466	3.3856	3.0057	2.6755	2.4747	2.2410	1.9826	1.9419
80000	6.5328	5.4949	5.0222	3.9941	3.5311	3.1478	2.8120	2.6056	2.3619	2.0827	2.0430
90000	6.6527	5.6148	5.1420	4.1128	3.6485	3.2628	2.9229	2.7125	2.4614	2.1660	2.1275
100000	6.7515	5.7135	5.2406	4.2106	3.7452	3.3576	3.0148	2.8015	2.5447	2.2362	2.1991

TABLA A2.11

C II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649	0.7649
5000	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728	0.7728
10000	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773	0.7773
15000	0.7948	0.7912	0.7909	0.7908	0.7908	0.7908	0.7908	0.7908	0.7908	0.7908	0.7908
20000	1.1451	0.8600	0.8332	0.8194	0.8186	0.8182	0.8181	0.8181	0.8180	0.8180	0.8180
30000	3.0844	2.0665	1.6620	1.0545	0.9667	0.9251	0.9112	0.9064	0.9029	0.9016	0.9004
40000	4.2619	3.2182	2.7663	1.7858	1.4749	1.2355	1.1231	1.0790	1.0440	1.0300	1.0180
50000	5.0040	3.9582	3.5023	2.4670	2.0837	1.7152	1.4852	1.3736	1.2716	1.2263	1.1855
60000	5.5167	4.4704	4.0135	2.9660	2.5640	2.1517	1.8632	1.7057	1.5445	1.4654	1.3891
70000	5.8932	4.8466	4.3894	3.3372	2.9285	2.4991	2.1847	2.0032	1.8055	1.7019	1.5964
80000	6.1820	5.1351	4.6776	3.6231	3.2111	2.7734	2.4458	2.2515	2.0323	1.9128	1.7868
90000	6.4102	5.3634	4.9057	3.8498	3.4358	2.9934	2.6581	2.4562	2.2238	2.0939	1.9537
100000	6.5955	5.5486	5.0909	4.0340	3.6187	3.1731	2.8330	2.6260	2.3848	2.2480	2.0978

TABLA A2.12N I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6020
5000	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065	0.6065
10000	0.7156	0.6783	0.6757	0.6744	0.6744	0.6743	0.6743	0.6743	0.6743	0.6743	0.6743
15000	2.1646	1.2768	1.0160	0.8074	0.7937	0.7817	0.7790	0.7780	0.7772	0.7767	0.7766
20000	3.3981	2.3750	1.9308	1.1774	1.0591	0.9349	0.9020	0.8899	0.8798	0.8735	0.8721
30000	4.6715	3.6358	3.1668	2.1776	1.9087	1.4979	1.3071	1.2176	1.1308	1.0700	1.0580
40000	5.3324	4.2956	3.8244	2.8105	2.5047	2.0246	1.7479	1.5953	1.4236	1.2783	1.2511
50000	5.7464	4.7091	4.2372	3.2161	2.8906	2.3973	2.0878	1.9056	1.6846	1.4707	1.4325
60000	6.0345	4.9970	4.5247	3.5000	3.1603	2.6663	2.3414	2.1443	1.8966	1.6351	1.5911
70000	6.2484	5.2108	4.7382	3.7115	3.3605	2.8693	2.5357	2.3300	2.0669	1.7725	1.7261
80000	6.4144	5.3766	4.9039	3.8757	3.5157	3.0280	2.6890	2.4779	2.2050	1.8873	1.8404
90000	6.5472	5.5093	5.0365	4.0073	3.6399	3.1558	2.8129	2.5981	2.3187	1.9839	1.9374
100000	6.6561	5.6181	5.1452	4.1152	3.7416	3.2609	2.9152	2.6976	2.4137	2.0659	2.0203

TABLA A2.13N II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266	0.9266
5000	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461	0.9461
10000	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755	0.9755
15000	1.0077	1.0075	1.0075	1.0075	1.0075	1.0075	1.0075	1.0075	1.0075	1.0075	1.0075
20000	1.1042	1.0436	1.0394	1.0373	1.0372	1.0371	1.0371	1.0371	1.0371	1.0371	1.0371
30000	2.7995	1.8325	1.5028	1.1498	1.1158	1.1011	1.0964	1.0949	1.0937	1.0932	1.0929
40000	4.0940	3.0529	2.6063	1.6897	1.4431	1.2822	1.2172	1.1936	1.1758	1.1688	1.1629
50000	4.9011	3.8556	3.4005	2.3767	2.0107	1.6794	1.4907	1.4064	1.3342	1.3038	1.2773
60000	5.4564	4.4102	3.9535	2.9091	2.5124	2.1136	1.8450	1.7047	1.5678	1.5035	1.4439
70000	5.8646	4.8180	4.3609	3.3100	2.9034	2.4798	2.1750	2.0031	1.8211	1.7287	1.6373
80000	6.1785	5.1318	4.6744	3.6205	3.2096	2.7751	2.4529	2.2644	2.0556	1.9441	1.8291
90000	6.4281	5.3813	4.9237	3.8682	3.4549	3.0144	2.6828	2.4848	2.2598	2.1361	2.0048
100000	6.6317	5.5848	5.1271	4.0705	3.6557	3.2116	2.8741	2.6702	2.4348	2.3030	2.1603

TABLA A2.14

O I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308	0.9308
5000	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472	0.9472
10000	1.0014	0.9766	0.9749	0.9741	0.9740	0.9740	0.9740	0.9740	0.9740	0.9740	0.9740
15000	2.1684	1.3571	1.1580	1.0216	1.0103	1.0065	1.0050	1.0044	1.0040	1.0037	1.0035
20000	3.3562	2.3404	1.9102	1.2472	1.1225	1.0735	1.0550	1.0448	1.0386	1.0349	1.0333
30000	4.6205	3.5851	3.1167	2.1358	1.7507	1.4917	1.3574	1.2502	1.1810	1.1365	1.1194
40000	5.2808	4.2440	3.7729	2.7602	2.3228	1.9836	1.7801	1.5735	1.4161	1.2971	1.2509
50000	5.6913	4.6540	4.1821	3.1613	2.7100	2.3463	2.1184	1.8647	1.6518	1.4693	1.3974
60000	5.9745	4.9370	4.4647	3.4402	2.9829	2.6088	2.3691	2.0936	1.8500	1.6234	1.5346
70000	6.1838	5.1461	4.6735	3.6469	3.1863	2.8065	2.5590	2.2725	2.0110	1.7537	1.6553
80000	6.3458	5.3080	4.8353	3.8072	3.3445	2.9610	2.7077	2.4153	2.1424	1.8630	1.7596
90000	6.4757	5.4378	4.9650	3.9359	3.4716	3.0856	2.8273	2.5318	2.2513	1.9551	1.8495
100000	6.5825	5.5445	5.0716	4.0417	3.5763	3.1884	2.9259	2.6287	2.3428	2.0335	1.9274

TABLA A2.15

O II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021	0.6021
5000	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025	0.6025
10000	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262	0.6262
15000	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891	0.6891
20000	0.7710	0.7629	0.7623	0.7621	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620
30000	2.1054	1.2663	1.0588	0.9040	0.8927	0.8880	0.8865	0.8860	0.8856	0.8855	0.8854
40000	3.5959	2.5603	2.1243	1.3129	1.1408	1.0455	1.0112	0.9993	0.9905	0.9872	0.9843
50000	4.5188	3.4740	3.0201	2.0144	1.6736	1.3889	1.2430	1.1828	1.1341	1.1143	1.0975
60000	5.1452	4.0991	3.6427	2.6027	2.2130	1.8312	1.5859	1.4639	1.3505	1.2995	1.2536
70000	5.6006	4.5541	4.0970	3.0476	2.6436	2.2268	1.9328	1.7711	1.6049	1.5230	1.4442
80000	5.9480	4.9013	4.4439	3.3908	2.9810	2.5497	2.2331	2.0503	1.8513	1.7472	1.6419
90000	6.2226	5.1758	4.7182	3.6631	3.2504	2.8118	2.4834	2.2889	2.0703	1.9518	1.8277
100000	6.4456	5.3987	4.9410	3.8846	3.4702	3.0273	2.6919	2.4904	2.2595	2.1314	1.9943

TABLA A2.16

F I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400	0.7400
5000	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620	0.7620
10000	0.7711	0.7700	0.7699	0.7699	0.7699	0.7699	0.7699	0.7699	0.7699	0.7699	0.7699
15000	1.3058	0.8601	0.8044	0.7760	0.7739	0.7733	0.7730	0.7729	0.7728	0.7728	0.7728
20000	2.6449	1.6635	1.2913	0.8629	0.8090	0.7905	0.7829	0.7802	0.7782	0.7767	0.7765
30000	4.1358	3.1010	2.6340	1.6705	1.3119	1.0887	0.9568	0.9016	0.8574	0.8210	0.8171
40000	4.8915	3.8547	3.3837	2.3718	1.9360	1.6012	1.3429	1.2067	1.0758	0.9480	0.9342
50000	5.3494	4.3121	3.8402	2.8188	2.3664	2.0017	1.6967	1.5196	1.3308	1.1183	1.0947
60000	5.6582	4.6206	4.1483	3.1232	2.6646	2.2887	1.9647	1.7692	1.5501	1.2826	1.2525
70000	5.8817	4.8440	4.3714	3.3442	2.8824	2.5008	2.1673	1.9620	1.7260	1.4241	1.3901
80000	6.0519	5.0141	4.5413	3.5128	3.0490	2.6639	2.3246	2.1135	1.8669	1.5423	1.5063
90000	6.1865	5.1485	4.6757	3.6461	3.1810	2.7936	2.4504	2.2354	1.9817	1.6411	1.6040
100000	6.2959	5.2579	4.7850	3.7547	3.2886	2.8994	2.5534	2.3357	2.0767	1.7245	1.6868

TABLA A2.17

F II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057	0.9057
5000	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345	0.9345
10000	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561	0.9561
15000	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798	0.9798
20000	1.0048	1.0022	1.0021	1.0020	1.0020	1.0020	1.0020	1.0020	1.0020	1.0020	1.0020
30000	1.9228	1.2418	1.1201	1.0453	1.0403	1.0383	1.0377	1.0375	1.0373	1.0372	1.0372
40000	3.4222	2.3951	1.9747	1.2789	1.1616	1.1033	1.0835	1.0768	1.0719	1.0700	1.0685
50000	4.3708	3.3268	2.8745	1.8911	1.5782	1.3371	1.2244	1.1805	1.1462	1.1327	1.1213
60000	5.0137	3.9677	3.5116	2.4763	2.0940	1.7293	1.5052	1.3985	1.3030	1.2614	1.2248
70000	5.4798	4.4333	3.9763	2.9283	2.5265	2.1158	1.8311	1.6778	1.5238	1.4497	1.3798
80000	5.8346	4.7879	4.3305	3.2779	2.8690	2.4402	2.1278	1.9491	1.7570	1.6580	1.5591
90000	6.1146	5.0678	4.6102	3.5553	3.1431	2.7056	2.3793	2.1870	1.9724	1.8569	1.7371
100000	6.3418	5.2949	4.8372	3.7810	3.3668	2.9245	2.5903	2.3900	2.1615	2.0354	1.9011

TABLA A2.18

Ne I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
15000	0.1309	0.0139	0.0048	0.0005	0.0002	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000
20000	1.3784	0.4930	0.2348	0.0304	0.0119	0.0058	0.0034	0.0026	0.0015	0.0011	0.0009
30000	3.1740	2.1403	1.6758	0.7435	0.4258	0.2459	0.1484	0.1148	0.0622	0.0384	0.0321
40000	4.0805	3.0439	2.5734	1.5685	1.1455	0.8316	0.6019	0.5029	0.3100	0.1999	0.1682
50000	4.6248	3.5877	3.1161	2.1003	1.6587	1.3137	1.0405	0.9130	0.6339	0.4440	0.3835
60000	4.9881	3.9507	3.4787	2.4589	2.0111	1.6556	1.3671	1.2288	0.9115	0.6769	0.5977
70000	5.2480	4.2105	3.7383	2.7163	2.2653	1.9047	1.6089	1.4652	1.1290	0.8695	0.7794
80000	5.4436	4.4060	3.9336	2.9102	2.4572	2.0935	1.7932	1.6464	1.2991	1.0244	0.9277
90000	5.5963	4.5586	4.0861	3.0617	2.6073	2.2413	1.9381	1.7891	1.4346	1.1497	1.0488
100000	5.7191	4.6813	4.2087	3.1835	2.7280	2.3604	2.0550	1.9043	1.5448	1.2525	1.1487

TABLA A2.19

Ne II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109	0.7109
5000	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480	0.7480
10000	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625	0.7625
15000	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676	0.7676
20000	0.7704	0.7702	0.7702	0.7702	0.7702	0.7702	0.7702	0.7702	0.7702	0.7702	0.7702
30000	1.2340	0.8412	0.7980	0.7752	0.7738	0.7732	0.7731	0.7730	0.7729	0.7729	0.7729
40000	2.8030	1.7964	1.4108	0.8885	0.8235	0.7941	0.7845	0.7814	0.7791	0.7782	0.7775
50000	3.8532	2.8106	2.3611	1.4139	1.1399	0.9497	0.8692	0.8395	0.8170	0.8082	0.8010
60000	4.5584	3.5126	3.0569	2.0276	1.6544	1.3097	1.1082	1.0164	0.9372	0.9036	0.8746
70000	5.0647	4.0182	3.5614	2.5146	2.1150	1.7098	1.4334	1.2872	1.1432	1.0752	1.0121
80000	5.4465	4.3999	3.9425	2.8902	2.4819	2.0546	1.7447	1.5685	1.3806	1.2845	1.1893
90000	5.7454	4.6986	4.2411	3.1863	2.7741	2.3371	2.0114	1.8198	1.6065	1.4920	1.3736
100000	5.9862	4.9393	4.4816	3.4254	3.0112	2.5689	2.2348	2.0346	1.8063	1.6803	1.5462

TABLA A2.20

Na I: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010	0.3010
5000	0.9574	0.4391	0.3616	0.3183	0.3142	0.3131	0.3125	0.3123	0.3121	0.3118	0.3115
10000	3.4349	2.4306	1.9827	1.1195	0.7845	0.6305	0.5443	0.5135	0.4801	0.4496	0.4349
15000	4.2973	3.2878	2.8310	1.8834	1.4164	1.1303	0.9236	0.8375	0.7362	0.6404	0.5974
20000	4.7287	3.7178	3.2589	2.2936	1.7940	1.4639	1.2019	1.0838	0.9371	0.7906	0.7251
30000	5.1600	4.1480	3.6875	2.7099	2.1885	1.8272	1.5209	1.3742	1.1822	0.9787	0.8870
40000	5.3758	4.3632	3.9020	2.9193	2.3893	2.0155	1.6908	1.5313	1.3181	1.0856	0.9802
50000	5.5052	4.4923	4.0307	3.0452	2.5106	2.1300	1.7951	1.6285	1.4031	1.1534	1.0396
60000	5.5915	4.5784	4.1165	3.1292	2.5916	2.2068	1.8655	1.6944	1.4611	1.1999	1.0807
70000	5.6531	4.6399	4.1778	3.1892	2.6496	2.2619	1.9162	1.7419	1.5031	1.2338	1.1107
80000	5.6993	4.6860	4.2238	3.2343	2.6932	2.3034	1.9543	1.7777	1.5348	1.2596	1.1335
90000	5.7353	4.7219	4.2595	3.2693	2.7271	2.3356	1.9841	1.8057	1.5597	1.2798	1.1515
100000	5.7640	4.7506	4.2881	3.2974	2.7542	2.3615	2.0080	1.8282	1.5797	1.2961	1.1659

TABLA A2.21

Na II: $\log u$.

T [K]	$\Delta\chi$ [eV]										
	0.001	0.005	0.010	0.050	0.100	0.200	0.350	0.500	0.750	1.000	1.500
2000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
10000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
15000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
20000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
30000	0.1944	0.1944	0.0216	0.0077	0.0007	0.0003	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0000
40000	1.7482	1.7482	0.7745	0.4364	0.0634	0.0266	0.0107	0.0057	0.0040	0.0028	0.0024
50000	2.9343	2.9343	1.8931	1.4466	0.5331	0.2902	0.1338	0.0716	0.0494	0.0327	0.0263
60000	3.7298	3.7298	2.6841	2.2287	1.2027	0.8347	0.5006	0.3102	0.2253	0.1532	0.1231
70000	4.2990	4.2990	3.2526	2.7957	1.7493	1.3501	0.9463	0.6718	0.5273	0.3855	0.3189
80000	4.7272	4.7272	3.6806	3.2232	2.1709	1.7626	1.3354	1.0257	0.8497	0.6620	0.5660
90000	5.0622	5.0622	4.0154	3.5578	2.5030	2.0910	1.6540	1.3286	1.1373	0.9244	0.8103
100000	5.3325	5.3325	4.2856	3.8279	2.7717	2.3576	1.9156	1.5820	1.3823	1.1549	1.0297

Capítulo II

IONIZACIÓN Y FORMACIÓN MOLECULAR EN MEZCLAS GASEOSAS

1. INTRODUCCIÓN.

En este capítulo hacemos un análisis de la ionización y formación molecular, en mezclas gaseosas de distintas composiciones químicas: Solar, de Población II, en otra de He muy deficiente en H y enriquecida en C (HdC) y, finalmente, en una de He que, aunque algo enriquecida en C, es deficiente en todos los “metales” (HdCII). En condiciones de ETL, las poblaciones de los sistemas atómicos están determinadas por las fórmulas de Boltzmann (estados excitados), Saha (ionización) y de disociación molecular. El **estado molecular** y el de **ionización** de una mezcla gaseosa, determinan el número de partículas libres por unidad de volumen (P_g y P_e) y se relacionan también, con la capacidad de absorción de una determinada especie; las poblaciones de los estados excitados determinan la capacidad de absorción desde esos niveles. Cuando se utiliza un código de cálculo, estos estados se calculan sin que el usuario tome conciencia de ello; nosotros aquí hemos querido analizar y resaltar con algún detalle, las diferencias que se presentan entre mezclas de distinta composición, tanto entre los distintos átomos donantes de electrones, como así también en sus estados de ionización y moleculares.

La relación (P_e, P_g), la ionización y el peso molecular medio como función de (P_e, T) fueron estudiados previamente por Annemarie Rosa (1948) y por Vardya (1961). Rosa analizó el comportamiento de una mezcla rica en Helio ($X = 0.56$, $Y = 0.41$, $Z = 0.03$), pero no consideró la formación de H^- ni de las moléculas a bajas temperaturas. Vardya consideró la formación de H^- y de moléculas de H en una mezcla de composición Solar (Aller, 1959) y con distintas abundancias de He, pero limitó su análisis al rango $2520 \text{ K} \leq T \leq 5040 \text{ K}$. Los resultados de estos autores muestran, que la inclusión de una gran cantidad de He produce un mayor número de electrones libres por núcleo en las temperaturas más altas ($T \approx 50000 \text{ K}$) y –consecuentemente– un peso molecular medio más bajo. En el otro extremo, la formación de moléculas a bajas temperaturas conduce a un peso molecular medio más alto, pero no necesariamente a una mayor densidad que la que resultaría si para las mismas T y P_e , no hubiera formación de moléculas. En este capítulo extendemos el análisis a mezclas de He-C.

Debemos destacar que, hace muchos años –y reiteradamente– Bidelman enfatizó el carácter interesante de un grupo de estrellas que, en sus propias palabras, consideraba “fascinantes” (Bidelman, 1979); algunas de sus peculiaridades podrían ser debidas a la deficiencia de Hidrógeno (Bidelman, 1948, 1952, 1953 y 1956). Los espectros de estas estrellas muestran características de supergigantes y serían clasificados como tardíos F, G o K, si no fuera por el reforzamiento o el debilitamiento de las líneas del C y del H, respectivamente. Algunos años más tarde, el análisis cuantitativo reveló que son

extremadamente deficientes en H y ricas en C (Warner, 1967), y la designación “estrellas de Carbono deficientes en Hidrógeno” (estrellas HdC) comenzó a usarse. Warner (1967) también sugirió su posible conexión con las “estrellas extremas de He” (Klemola, 1961; Hill, 1965), un punto de vista generalmente aceptado actualmente (Hunger, 1975, y varios trabajos en Hunger *et al.*, 1986). Así, las designaciones “rica en C y deficiente en H” y “mezcla extrema de He”, son usadas en este capítulo como sinónimos.

Las estrellas HdC son interesantes e importantes, ya que representan un episodio raro, o de corta duración en la evolución estelar (Clayton, 1996). Una cuestión adicional es que su composición química extremadamente peculiar genera problemas de interés. Por este motivo, aquí estudiamos el estado de ionización y molecular, y la relación funcional entre la presión electrónica, presión gaseosa y temperaturas –es decir, (P_e, P_g, T) – en una mezcla Solar, en otra de Población II y en otras dos deficientes en H (ver 2.3).

En nuestro análisis tomamos en consideración la formación de H^- y C^- ; para las temperaturas más bajas incluimos la formación de moléculas: H_2 y H_2^+ (en el caso de la composición Solar o la mezcla deficiente en metales), y C_2 y C_2^+ (en la abundancia deficiente en Hidrógeno). Dado que la formación de moléculas puede afectar severamente la densidad de partículas en el medio, se procedió, también, a realizar un estudio general de la formación molecular, analizando la importancia de cada contribuyente a la misma y su importancia relativa. En este sentido, se estudió y corrigió el método de Mihalas (1967), para que el mismo no produzca errores sistemáticos.

2. CONDICIONES ADOPTADAS Y FÓRMULAS UTILIZADAS EN LOS CÁLCULOS.

2.1. CONSIDERACIONES GENERALES.

En este capítulo se asume que cada elemento constitutivo de la mezcla gaseosa se comporta como un gas ideal, y que prevalecen condiciones de equilibrio termodinámico local (ETL). La temperatura fue elegida en el intervalo $2520 \text{ K} \leq T \leq 50400 \text{ K}$, y la presión electrónica variando entre los valores $-2.0 \leq \log(P_e) \leq +6.0$; claramente, estas condiciones representan aproximadamente las que se encuentran en las atmósferas estelares.

La fórmula de Saha fue escrita empleando los valores recomendados por Cohen & Taylor (1991) para la masa del electrón y para las constantes de Planck y de Boltzmann.

El estado fundamental del C^- es $1s^2 2s^2 2p^3 \ ^4S$ ($g=4$), aunque posiblemente exista un estado ligado excitado: $1s^2 2s^2 2p^3 \ ^2D$ ($g=10$, Myerscough & McDowell, 1964). Para las energías de disociación del C^- y el H^- adoptamos 1.24 eV y 0.754 eV, respectivamente, (Allen, 1976).

Para las constantes de disociación molecular, adoptamos fórmulas de interpolación obtenidas por Vardya (1961) para el H_2 y el H_2^+ , y por Sauval & Tatum (1984) para el C_2 y el C_2^+ .

En el rango de temperaturas donde la formación molecular es importante, para el H_2 y el H_2^+ hay un acuerdo estrecho entre los valores numéricos que se obtienen a partir de las fórmulas de Vardya (1961) y los provenientes del trabajo más moderno de Sauval & Tatum (1984).

Para el H I, He I/II, C I/II, N I/II, O I/II y para el Ne I/II se realizaron cálculos detallados de sus correspondientes funciones de partición, cada vez que esto fue necesario; el procedimiento correspondiente ha sido descrito por Milone & Merlo (1998a,b) (ver también el *Capítulo I* de este trabajo). Como es bien sabido, los valores de las funciones de partición atómicas (FsPAs) dependen de N_p (densidad de partículas perturbadoras) a través de la disminución de la energía de ionización (LIE, $\Delta\chi$). Nosotros adoptamos la expresión siguiente: $\Delta\chi = 7 \times 10^{-7} N_p^{1/3} Z^{2/3}$ (Unsöld, 1948; Lochte-Holtgreven, 1958), donde $Z=1$ corresponde a los átomos neutros, $Z=2$ a los átomos una vez ionizados, etc., $\Delta\chi$ está expresado en eV y $N_p = 2 N_e$, con N_e la densidad electrónica.

En las Tablas 2.1 y 2.2 mostramos los valores resultantes para las FsPAs del He I y C I, dentro del rango de temperaturas y presiones electrónicas que hemos analizado.

TABLA 2.1
Valores de funciones de partición del He I.

T [K]: log P_e	72000	50400	33600	25200	16800	12600	10080	8400	7200	6300	5600
-2.0	4.690	3.866	2.557	1.289	0.022	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-1.0	4.185	3.368	2.059	0.825	0.007	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.0	3.684	2.878	1.561	0.456	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1.0	3.196	2.358	1.092	0.194	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.0	2.678	1.898	0.667	0.076	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.0	2.216	1.425	0.361	0.027	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.0	1.719	0.931	0.133	0.010	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.0	1.250	0.519	0.059	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.0	0.777	0.297	0.028	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

TABLA 2.2
Valores de funciones de partición del C I.

T [K]: log P_e	72000	50400	33600	25200	16800	12600	10080	8400	7200	6300	5600
-2.0	6.503	5.951	5.178	4.486	3.216	2.046	1.229	1.014	0.984	0.975	0.969
-1.0	5.998	5.453	4.677	3.974	2.725	1.638	1.090	1.001	0.984	0.975	0.969
0.0	5.497	4.962	4.172	3.490	2.254	1.330	1.038	0.996	0.983	0.975	0.969
1.0	5.009	4.441	3.679	2.977	1.799	1.150	1.019	0.995	0.983	0.975	0.969
2.0	4.491	3.977	3.187	2.517	1.444	1.071	1.013	0.994	0.983	0.975	0.969
3.0	4.026	3.494	2.744	2.081	1.249	1.046	1.011	0.994	0.983	0.975	0.969
4.0	3.523	2.966	2.212	1.694	1.134	1.038	1.010	0.994	0.983	0.975	0.969
5.0	3.037	2.453	1.867	1.450	1.095	1.034	1.010	0.994	0.983	0.975	0.969
6.0	2.503	2.111	1.613	1.256	1.080	1.033	1.010	0.994	0.983	0.975	0.969

Para los valores de las FsPAs de los restantes elementos de nuestras mezclas, adoptamos los respectivos pesos estadísticos de sus estados atómicos fundamentales o, cuando hay varios términos muy próximos al estado fundamental, se tomó la suma de sus pesos estadísticos (ver Tabla 2.3).

En el *Apéndice 2.1* hacemos un breve análisis acerca de la importancia en utilizar valores correctos de las FsPAs.

Para calcular la densidad (ρ) se han considerado dos casos de mezclas gaseosas, a saber: i.) gases parcialmente ionizados, y ii.) gases principalmente neutros con la posibilidad de formar moléculas. Las expresiones que corresponden a cada caso son las usuales:

$$\rho_{\text{parc.ioniz.}} = m_0 \mu \frac{(P_g - P_e)}{kT} \quad ; \quad \rho_{\text{neutro}} = m_0 \mu \frac{P_e}{kT f_e} \sum_i \mu_i \alpha_i \quad (2.1)$$

donde m_0 es la unidad de masa atómica, μ el peso molecular medio de la mezcla neutra, $f_e = N_e / N_H$, con N_H el número total de átomos de H en todas las formas, μ_i el peso atómico del elemento i y $\alpha_i = N_i / N_H$.

2.2. IONIZACIÓN Y FORMACIÓN MOLECULAR.

Se supuso que cada átomo podía estar presente en forma neutra y ionizada, una o dos veces. Al H se lo consideró en los siguientes estados: H^- (ión negativo), H (neutro), H^+ (ionizado), H_2 (molécula neutra) y H_2^+ (molécula ionizada). En la mezcla rica en C se supuso que este átomo podía estar presente en los siguientes estados: C^- (ión negativo), C (neutro), C^+ (ionizado), C^{++} (dos veces ionizado), C_2 (molécula neutra) y C_2^+ (molécula ionizada).

Para calcular la población del H, en sus varios estados, hemos usado un procedimiento descrito por Mihalas (1967, pp. 10-11), el cual hemos corregido y extendido para calcular las poblaciones del C (ver apartados 4.4 y 4.5 de este capítulo).

2.3. COMPOSICIONES QUÍMICAS.

Para la mezcla Solar se adoptaron las abundancias publicadas por Anders & Grevesse (1989). Para la representativa de un objeto de Población II, simplemente tomamos las abundancias de todos los elementos que siguen al He (es decir, “metales”) en la mezcla Solar y las dividimos por 100.

En la mezcla rica en C y deficiente en H, se adoptó para el H, He, C, N y O, valores representativos que se encontraron en las atmósferas de estrellas extremas de He (Hunger, 1975); para los restantes elementos se eligieron abundancias solares. Consideraremos que esta mezcla es sólo representativa de la composición química de una rica en C y deficiente en H, pero no que sea necesariamente la única, ni la mejor posible (ver, por ejemplo, Pollard *et al.*, 1994). Actualmente se piensa que, en general, la abundancia del H relativa al He puede ser todavía más baja, mientras que el O podría ser más abundante que el valor adoptado por nosotros. El efecto que estos cambios tendrían sobre nuestras conclusiones es discutido más adelante (ver sección 4).

La cuarta mezcla considerada, surge de las siguientes consideraciones. UX Antliae es una estrella variable perteneciente a la clase de las R Coronae Borealis (Erro, 1940; Kilkenny & Westerhuys, 1990; Minniti, 1990; Milone, Minniti & Paolantonio, 1990) que, además, sería

un objeto de población II, porque se encuentra en el halo de nuestra galaxia (distancia al plano galáctico entre 3 y 8 Kpc) y tiene una velocidad radial de +144 Km/s (Kilkenny & Westerhuys, 1990; Lawson *et al.*, 1994). Por lo tanto, estaríamos en presencia de una estrella que, simultáneamente, sería deficiente en H y en metales, con un reforzamiento relativo del C (a esta composición la denominamos mezcla HdC de Población II (HdCII)); este supuesto fue confirmado por sendos análisis cuantitativos (Lambert & Rao, 1994; Rao & Lambert, 1996).

Según Rao & Lambert (1996), la abundancia del H en una fotosfera HdC puede ser tan alta como 10.7 (V854 Cen), o tan pequeña como 4.1 (V 3795 Sgr) (escala 12.0 para el H en una mezcla Solar), pero, V854 Cen es un objeto inusual para ser una estrella R CrB, porque casi no es deficiente en H. Así, una abundancia razonable para el H es 8.0. Para el He adoptamos el valor encontrado por Hunger (1975) en las estrellas extremas de He: 11.50. Para el C, N y O, fueron adoptados los valores encontrados por Rao & Lambert (1996). Los restantes elementos estudiados por Rao & Lambert (Na, Al, Si, S, Ca, Fe, Ni, Zn, Y y Ba) son deficientes por factores que van desde 2 hasta 10, en relación a los valores adoptados por nosotros en la mezcla HdC. Como nuestro interés es resaltar las diferencias en algunas variables físicas cuando pasamos de una mezcla de composición normal a otra “deficiente”, para los elementos que siguen al O en la mezcla HdCII finalmente adoptamos las mismas abundancias que en una mezcla de Población II.

Las abundancias y los parámetros seleccionados se muestran en la TABLA 2.3.

TABLA 2.3
Abundancias y parámetros atómicos utilizados.

Q	Abundancias				Ionización		Funciones de Partición			Masa atómica
	(1)	(2)	(3)	(4)	χ_1 [eV]	χ_2 [eV]	I	II	III	
H	1.00e12	1.00e12	1.00e08	1.00e08	13.598	-----	var	0.00	-----	1.0080
He	9.77e10	9.77e10	3.16e11	3.16e11	24.587	54.416	var	var	0.00	4.0026
C	3.63e08	3.63e06	6.31e09	8.13e08	11.260	24.383	var	var	0.00	12.0111
N	1.12e08	1.12e06	6.31e08	4.37e08	14.534	29.601	var	var	0.78	14.0067
O	8.51e08	8.51e06	3.16e08	1.58e08	13.618	35.117	var	var	0.95	15.9994
Ne	1.23e08	1.23e06	1.23e08	1.23e06	21.564	40.962	var	var	0.95	20.1790
Na	2.14e06	2.14e04	2.14e06	2.14e04	5.139	47.286	0.60	0.00	0.78	22.9898
Mg	3.80e07	3.80e05	3.80e07	3.80e05	7.646	15.035	0.15	0.31	0.00	24.3050
Al	2.95e06	2.95e04	2.95e06	2.95e04	5.986	18.826	0.81	0.01	0.30	26.9815
Si	3.55e07	3.55e05	3.55e07	3.55e05	8.151	16.345	1.04	0.77	0.00	28.0860
P	2.82e05	2.82e03	2.82e05	2.82e03	10.484	19.720	0.79	0.94	0.78	30.9750
S	1.62e07	1.62e05	1.62e07	1.62e05	10.360	23.330	0.94	0.72	1.15	32.0600
A	3.63e06	3.63e04	3.63e06	3.63e04	15.755	27.620	0.00	0.71	0.95	39.9490
K	1.32e05	1.32e03	1.32e05	1.32e03	4.341	31.630	0.60	0.00	0.78	39.1020
Ca	2.29e06	2.29e04	2.29e06	2.29e04	6.113	11.871	0.55	0.54	0.00	40.0800
Fe	4.68e07	4.68e05	4.68e07	4.68e05	7.870	16.160	1.74	1.80	1.40	55.8470
Ni	1.78e06	1.78e04	1.78e06	1.78e04	7.635	18.168	1.60	1.28	1.32	58.7100
Met	6.00e06	6.00e04	6.00e06	6.00e04	7.640	18.170	1.60	1.30	1.30	58.0000
$\bar{\mu} =$	1.298	1.275	4.211	4.042	ABUNDANCIAS:					
X =	0.706	0.720	7.4e-5	7.8e-5	(1) Composición solar (Anders & Grevesse, 1989)					
Y =	0.274	0.280	0.928	0.986	(2) Mezcla de Población II: [metalicidad solar / 100].					
Z =	0.0169	1.7e-4	0.016	0.006	(3) Mezcla HdC (Hunger, 1975).					
Z _C =	0.0031	3.1e-5	0.056	0.008	(4) Mezcla HdC de Población II (Rao & Lambert, 1996).					

χ_1, χ_2 : primer y segundo potencial de ionización.
(Allen, 1976).

(I,II,III): Logaritmo de las FsP para átomos neutros, ionizados y dos veces ionizados, respectivamente.

El término "var" significa que se calcularon para cada valor de log P_e y T.

$\bar{\mu}$: Peso molecular medio de la mezcla neutra.

X,Y,Z,Z_C : Abundancia másica del H, He, Metales (excepto el C) y el C.

3. ANÁLISIS DE LA IONIZACIÓN Y DE LA RELACIÓN (P_g, P_e, T).

3.1. IONIZACIÓN DEL H, He Y C.

Un estudio de la ionización de algunos átomos, como una función de T y P_e , es útil si se intenta analizar los detalles de la relación (P_e, P_g, T). Aunque en nuestro análisis estudiamos la ionización de todos los elementos que intervienen en nuestras mezclas para $\theta = 0.07, 0.10, 0.15, 0.20, 0.10, 0.80$, solamente mostramos aquí la evolución de la ionización del H, He y C, tanto en la Tabla 2.4 ($T=50400$ K y 6300 K) como en la Fig. 2.1 (para 25200 K y 12600 K).

TABLA 2.4
Comportamiento del H, He y C, para $T = 50400$ K y 6300 K.

T [K]:	50400					6300				
	H	He		C		H	He		C	
log P_e	N_1/N_t	N_1/N_t	N_2/N_t	N_1/N_t	N_2/N_t	N_1/N_t	N_1/N_t	N_2/N_t	N_1/N_t	N_2/N_t
-2.0	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.581	0.000	0.000	0.992	0.000
-1.0	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.122	0.000	0.000	0.928	0.000
0.0	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.014	0.000	0.000	0.565	0.000
1.0	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.001	0.000	0.000	0.115	0.000
2.0	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.013	0.000
3.0	1.000	0.001	0.999	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
4.0	1.000	0.014	0.986	0.001	0.999	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.0	1.000	0.127	0.873	0.002	0.998	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.0	1.000	0.593	0.407	0.014	0.986	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

$$\text{H : } N_1 / N_t = N_1 / (N_0 + N_1)$$

$$\text{He ; C : } N_{1,2} / N_t = N_{1,2} / (N_0 + N_1 + N_2)$$

Así podemos obtener, entre otras cosas, las siguientes conclusiones:

- El H está completamente ionizado para $T \geq 25200$ K, y para valores de P_e que se encuentran usualmente en las atmósferas estelares: $\log P_e \leq 6.0$. Similarmente, para $T \geq 12600$ K, prácticamente todo el H está ionizado si $\log P_e \leq 3.0$.
- El He está mayormente doblemente ionizado para $T \geq 50400$ K, si $\log P_e \leq 4.0$ (una fuerte recombinación de He III a He II comienza en $\log P_e \approx 3.5$, cuando $\log P_e$ crece). Para $T \geq 25200$ K, todos el He está una o dos veces ionizado, excepto para valores altos de P_e ($\log P_e \geq 4.8$). Similarmente, la mayor parte del He está neutro para $T \leq 12600$ K si $\log P_e > 0.6$.

Aunque no lo mostramos aquí, la evolución de la ionización del Ne es muy similar a la del He, pero juega un rol secundario en las mezclas que estamos considerando debido a que su abundancia es mucho más baja. Las ionización del N y del O son similares a la del C, y solamente se notan pequeñas diferencias mayormente debidas a las diferencias de sus potenciales de ionización.

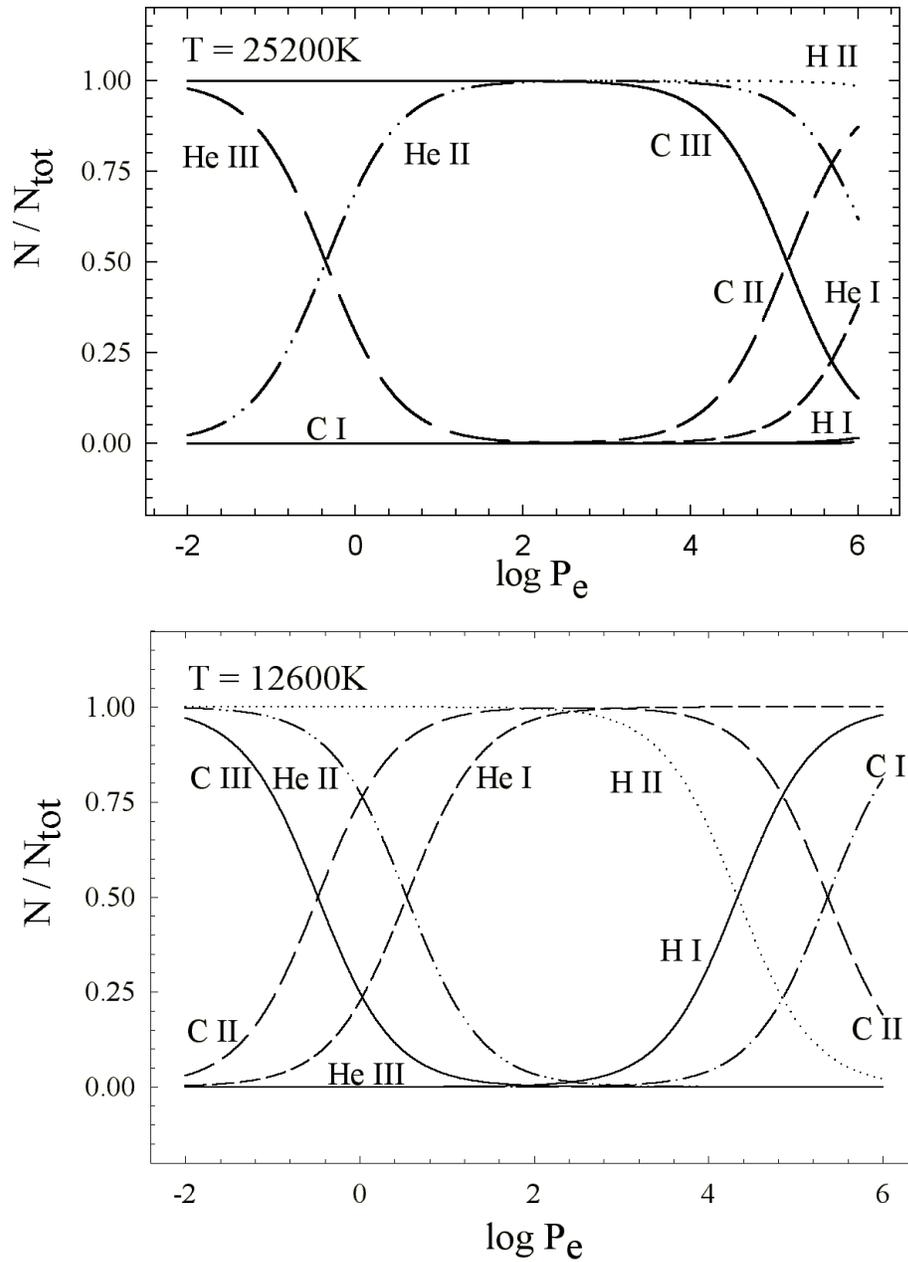


Fig. 2.1: Ionización del H, He y C como función del $\log P_e$, para $T = 25200\text{ K}$ y 12600 K .

3.2. LA RELACIÓN $\text{Log} (P_g/P_e)$ VS. $\text{Log} (P_e)$ 3.2.1. Generalidades.

Vamos a analizar ahora la relación $\log (P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$, la cual es interesante porque, entre otras cosas: a.) brinda la densidad relativa de átomos –de todas las especies y estados de ionización– a electrones libres (n_0/n_e+1) y, consecuentemente, b.) destaca dónde algunos átomos se están recombinando o ionizando.

En el *Apéndice 2.2* se describe sucintamente el procedimiento que diseñamos para calcular la relación (P_g, P_e, T).

Resulta claro que si $\log (P_g/P_e)$ crece cuando $\log P_e$ aumenta, algunos átomos se están recombinando en el medio; si lo contrario es cierto, algunos átomos se están ionizando.

En esta etapa no se consideró la formación de ninguno de los siguientes estados: H^- , H_2 , H_2^+ , C^- , C_2 , C_2^+ y CO .

La TABLA 2.5 muestra –para $T = 50400$ K, 25200 K, 12600 K y 6300 K, y para mezclas solares, de Población II y HdC– la dependencia de $\log (P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$ cuando $\log P_e$ crece desde -2.0 hasta 6.0 (ver también Figs. 2.2 y 2.3). De la misma forma que lo hicimos para la ionización, este análisis también lo realizamos para $T = 72000$ K, 33600 K, 16800 K, 10080 K, 8400 K y 7200 K, pero no lo mostramos aquí.

Finalmente acotamos que las propiedades de la mezcla HdCII son analizadas en 3.2.2.

TABLA 2.5
Relación $\log (P_g/P_e)$ vs. $\log (P_e)$ para distintas composiciones químicas.

T [K]:	50400			25200			12600			6300		
log P_e	Solar	PobII	HdC									
-2.0	0.283	0.283	0.176	0.283	0.283	0.178	0.301	0.301	0.297	0.460	0.461	1.676
-1.5	0.283	0.283	0.176	0.284	0.284	0.181	0.301	0.301	0.299	0.662	0.662	1.700
-1.0	0.283	0.283	0.176	0.286	0.286	0.190	0.301	0.302	0.304	0.999	1.000	1.731
-0.5	0.283	0.283	0.176	0.290	0.290	0.212	0.303	0.303	0.317	1.429	1.433	1.796
0.0	0.283	0.283	0.176	0.295	0.295	0.245	0.305	0.305	0.356	1.898	1.909	1.944
0.5	0.283	0.283	0.176	0.298	0.299	0.273	0.311	0.311	0.457	2.377	2.401	2.215
1.0	0.283	0.283	0.176	0.300	0.300	0.288	0.316	0.316	0.664	2.846	2.898	2.573
1.5	0.283	0.283	0.176	0.300	0.301	0.293	0.320	0.320	0.967	3.272	3.397	2.928
2.0	0.283	0.283	0.176	0.301	0.301	0.295	0.322	0.322	1.271	3.616	3.894	3.202
2.5	0.283	0.283	0.176	0.301	0.301	0.296	0.325	0.325	1.480	3.872	4.388	3.402
3.0	0.283	0.283	0.176	0.301	0.301	0.296	0.332	0.332	1.585	4.106	4.876	3.607
3.5	0.283	0.283	0.176	0.301	0.301	0.297	0.354	0.354	1.633	4.390	5.360	3.879
4.0	0.283	0.283	0.177	0.301	0.301	0.298	0.416	0.416	1.670	4.740	5.843	4.223
4.5	0.283	0.284	0.179	0.301	0.302	0.301	0.569	0.569	1.728	5.130	6.327	4.609
5.0	0.285	0.285	0.186	0.302	0.303	0.311	0.856	0.856	1.848	5.551	6.814	5.029
5.5	0.288	0.288	0.202	0.305	0.305	0.339	1.258	1.260	2.076	6.008	7.306	5.485
6.0	0.293	0.293	0.232	0.312	0.312	0.413	1.720	1.724	2.416	6.489	7.802	5.966

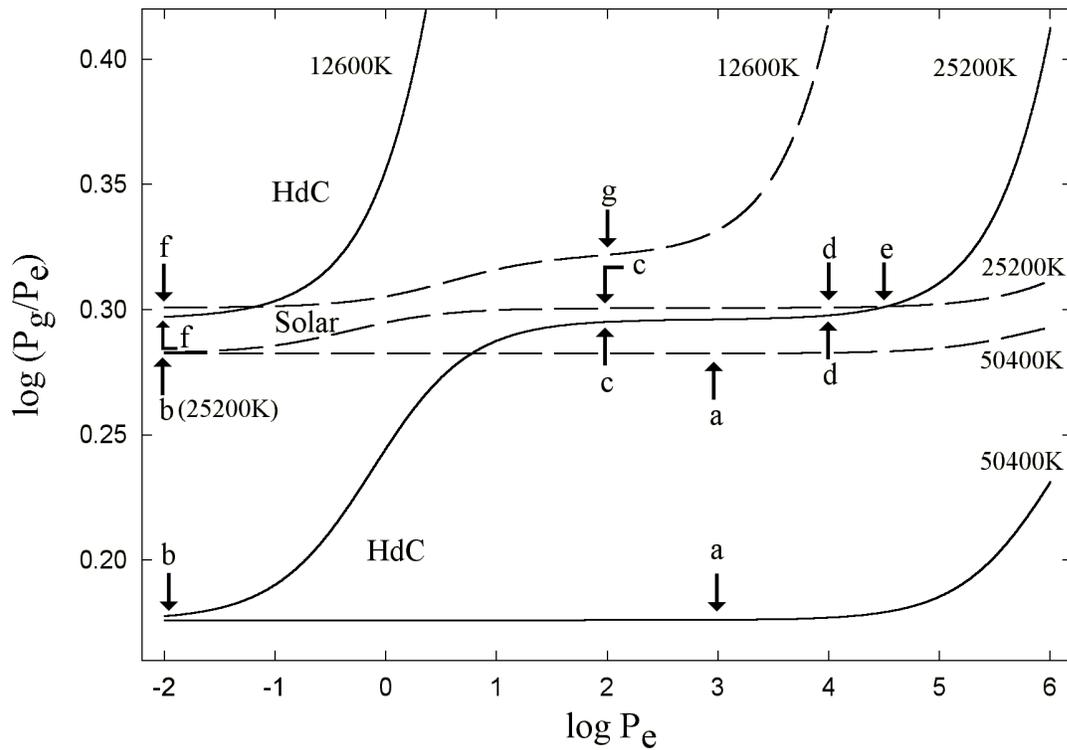


Fig. 2.2: Relación $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$.

- Para $T=50400$ K: **a**, comienza la recombinación del He III.
- Para $T=25200$ K: **b**, se incrementa la recombinación del He III a medida que $\log P_e$ crece; **c**, finaliza la recombinación del He III; **d**, comienza la recombinación del He II. Entre **c** y **d**, la mayoría de los átomos de H y He se encuentran una vez ionizados; en la mezcla HdC existe una importante contribución de electrones proveniente del H, C, N, O y Ne.
- Para $T=12600$ K: **f**, crece la recombinación del He II; **g**, finaliza la recombinación del He II y comienza la recombinación del H II.

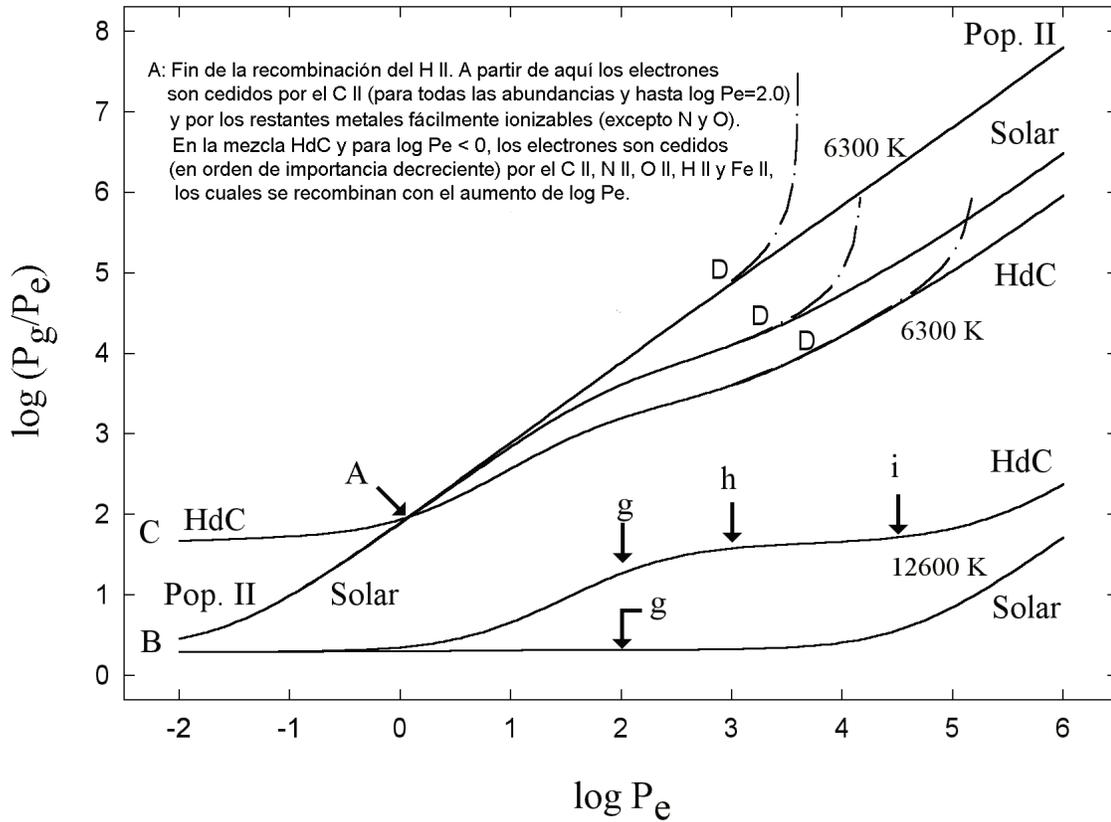


Fig. 2.3: Relación $\log (P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$.

- Para $T=12000$ K: **g**, finaliza la recombinación del He II y comienza la recombinación del H II. En la mezcla HdC se observa una meseta entre **h** e **i**, debido a la contribución de electrones del C II, mientras que contribuyen en menor grado el N II y el O II.
- Para $T=6300$ K: a partir del punto **D** crece significativamente la formación de H⁻ y C⁻.

3.2.2. Propiedades y Valores Particulares.

La TABLA 2.5 y las figuras 2.2 y 2.3 pueden ser explicadas en diversos aspectos, tanto cualitativos como cuantitativos. Cuando la mezcla extrema de He está completamente ionizada ($T = 50400$ K y 25000 K, $\log Pe < 3.0$ y $\log Pe < -3.5$, respectivamente), el He es casi el donante de electrones por excelencia y un constituyente de la mezcla; cuando la recombinación de He III a He II se ha completado, la población relativa de electrones (n_e/n_0) se reduce a la mitad; esto explica el “salto” en el valor de $\log(P_g/P_e)$ desde 0.176 a 0.301. Por otra parte, cuando la mezcla Solar o de Población II está completamente ionizada, el He contribuye en un 17% a la densidad electrónica (y un 9% a la densidad atómica), y se reduce a un 9% cuando la recombinación del He III finaliza; así, los cambios en $\log(P_g/P_e)$ son mayores en el caso de la mezcla HdC que en la Solar.

Cuantitativamente, los valores de 0.176 y 0.283 para la ionización completa –en mezclas extremas de He y Solar (o de Población II)– admiten una explicación simple: si llamamos N_H , N_{He} y N_t , respectivamente, a los números de átomos de H, He y total por unidad de volumen, entonces en la composición Solar y de Población II, $N_H/N_{He} \approx 10$ y $N_t \approx 1.1N_H$; si el He está doblemente ionizado, $\log(P_g/P_e) \approx 0.283$, mientras que si se encuentra una vez ionizado $\log(P_g/P_e) \approx 0.301$. Cuando el He permanece neutro y solamente el H se encuentra principalmente ionizado, $\log(P_g/P_e) \approx 0.322$. En la mezcla extrema de He, $N_t \approx N_{He}$; así, para una ionización simple o doble, $\log(P_g/P_e) \approx 0.176$ y 0.301 , respectivamente. Es decir, que la abundancia dominante del He o del H y del He en las mezclas consideradas determina el valor del límite inferior que la relación $\log(P_g/P_e)$ puede alcanzar (Merlo & Milone, 2003).

Debido a la presencia de otros elementos, además del He, en la abundancia HdC y del H en la Solar (o de Población II), cuando se cumple que $\log(P_g/P_e) \approx 0.301$ se concluye que, en promedio, los átomos en el medio se encontrarán una vez ionizados.

En la figura 2.3, la mayor densidad relativa de electrones en la mezcla Solar, con relación a la HdC, para $\log Pe < 0$ (intervalos BA y CA, respectivamente) es debida al H. Por el contrario, la más alta densidad relativa de electrones en la mezcla HdC para $\log Pe > 0$ es debido a la presencia del C II (hasta $\log Pe = 2.0$) y a la mayor proporción numérica de elementos posteriores al Ne en esta mezcla, relativa a la Solar. Efectivamente, en estas condiciones físicas, los únicos elementos capaces de donar electrones al medio son aquellos posteriores al Ne; tal como resulta de la TABLA 2.3, estos elementos están presentes en una proporción del 0.014 % en la mezcla Solar y de un 0.048 % en la mezcla HdC.

Es de resaltar, que la parte correspondiente a la Población II en la TABLA 2.5, para $T = 50400$ K, 25200 K y 12600 K, muestra (casi) los mismos valores que la mezcla Solar; solamente para $T = 6300$ K, y creciendo cuando $\log Pe$ crece, aparecen diferencias. La razón es que no hay diferencias para aquellas condiciones físicas donde los electrones son provistos, mayoritariamente, por el H y por el He. Las diferencias aparecen donde el H se encuentra neutro y se requiere el suministro de electrones libres por los metales.

Detalles adicionales y propiedades de la relación $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log(P_e)$ se muestran en las figuras 2.2 y 2.3. Si para $T = 6300$ K incluimos la formación del ión H^- en la mezcla de Población II (o en la Solar), y de H^- y C^- en la mezcla HdC, partiendo desde el punto D en las relaciones $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log(P_e)$ de la Fig. 2.3, el valor de $\log(P_g/P_e)$ crece y tiende a infinito cuando $\log(P_e)$ tiende a 3.60, 4.20 y 5.20, respectivamente. Esto se debe a que la

formación del H^- y del C^- es tan fuerte, que la densidad del material debe crecer indefinidamente para alcanzar los valores indicados de P_e ; para $\log(P_e) \geq 3.60, 4.20$ y 5.20 , respectivamente, las condiciones físicas son inalcanzables. De todos modos, estos hechos nos dicen que aun para una temperatura relativamente alta como $T = 6300$ K, si la presión electrónica es suficientemente grande, el problema debe ser analizado en toda su amplitud incluyendo, además de la presencia de iones negativos, también la formación de moléculas (Merlo & Milone, 2003).

Con fines puramente ilustrativos, en la TABLA 2.6 se muestran las densidades que corresponden a las temperatura y presiones que estamos considerando. Contrariamente a lo que los valores de esta tabla parecen indicar, debemos enfatizar que no es posible concluir – por lo menos apoyándose exclusivamente en ellos– que una atmósfera HdC sería generalmente más densa que otra de composición Solar en las capas de igual temperatura. La razón es que dos atmósferas de diferentes composiciones químicas no necesariamente tienen la misma presión electrónica en capas de igual temperatura, aún cuando tengan iguales temperatura efectiva y gravedad superficial.

Incidentalmente, la relación $\log P_g$ vs. $\log P_e$ se muestra en la Fig. 2.4

TABLA 2.6
Densidades para las condiciones físicas consideradas (g/cm^3).

$\log P_e$	HdC	Solar	Población II
$T = 25200$ K			
-2.0	1.0 e-14	5.7 e-15	5.6 e-15
0.0	1.5 e-12	6.0 e-13	5.9 e-13
2.0	2.0 e-10	6.2 e-11	6.1 e-11
4.0	2.0 e-8	6.2 e-9	6.1 e-9
6.0	3.2 e-6	6.5 e-7	6.4 e-7
$T = 12600$ K			
-2.0	3.9 e-14	1.2 e-14	1.2 e-14
0.0	5.1 e-12	1.3 e-12	1.2 e-12
2.0	7.1 e-9	1.4 e-10	1.3 e-10
4.0	1.8 e-6	2.0 e-8	2.0 e-8
6.0	1.0 e-3	6.4 e-5	6.3 e-5
$T = 6300$ K			
-2.0	3.7 e-12	4.7 e-14	4.6 e-14
0.0	7.0 e-10	1.9 e-10	1.9 e-10
2.0	1.3 e-6	1.0 e-6	1.8 e-6
4.0	1.3 e-3	1.4 e-3	8.2 e-3
6.0	7.4	7.6	55.6

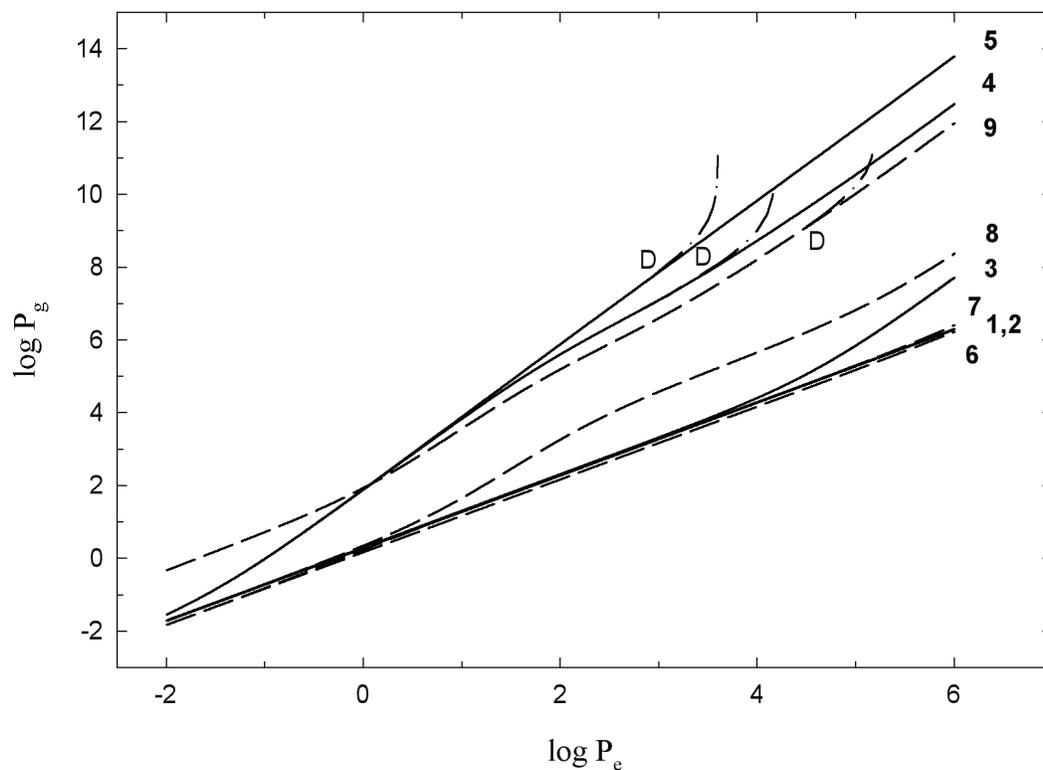


Fig. 2.4: Relaciones $\log P_g$ vs. $\log P_e$ para abundancias Solar, HdC y Población II.

- Abundancia Solar: **1, 2, 3, 4** y Abundancia HdC: **6, 7, 8, 9** para temperaturas de $T = 50400$ K, 25200 K, 12600 K y 6300 K, respectivamente.
- Abundancia Población II: **5** para $T = 6300$ K; a partir del punto D la formación de H^- y C^- crecen significativamente y las relaciones tienden a infinito (ver Fig. 2.3).

3.2.3. El caso de la mezcla HdCII.

En las Figs. 2.5 y 2.6 mostramos las relaciones $\log (P_g/P_e)$ vs. $\log (P_e)$ correspondiente a las mezclas: Solar, Población II, HdC y HdCII. Si bien los cálculos se hicieron también para $T = 72000$ K, 33600 K, 16800 K, 10800 K, 8400 K y 7200 K, por razones de espacio aquí se presentan sólo los resultados para $T = 50400$ K, 25200 K, 12600 K y 6300 K.

Los resultados muestran que para $T > 25000$ K y en todo el intervalo de P_e considerado, la densidad relativa de electrones a átomos es prácticamente una sola para la mezclas ricas en He (también se hace evidente, que esa densidad es menor en la mezcla de composición solar). En temperaturas intermedias ($T \approx 12600$ K), cuando se completa la recombinación del He, se acentúa la deficiencia de electrones en la mezcla HdC de Población II con respecto a la mezcla HdC. En las temperaturas más bajas ($T \leq 6000$ K) es muy acentuada la deficiencia de electrones en la mezcla HdC de Población II aún con relación a una de Población II; esta deficiencia decrece con el crecer de P_e , tendiendo asintóticamente la primera a la segunda.

Los hechos señalados se reflejan en las relaciones $\log P_g$ vs. $\log P_e$ que mostramos en la Fig. 2.7.

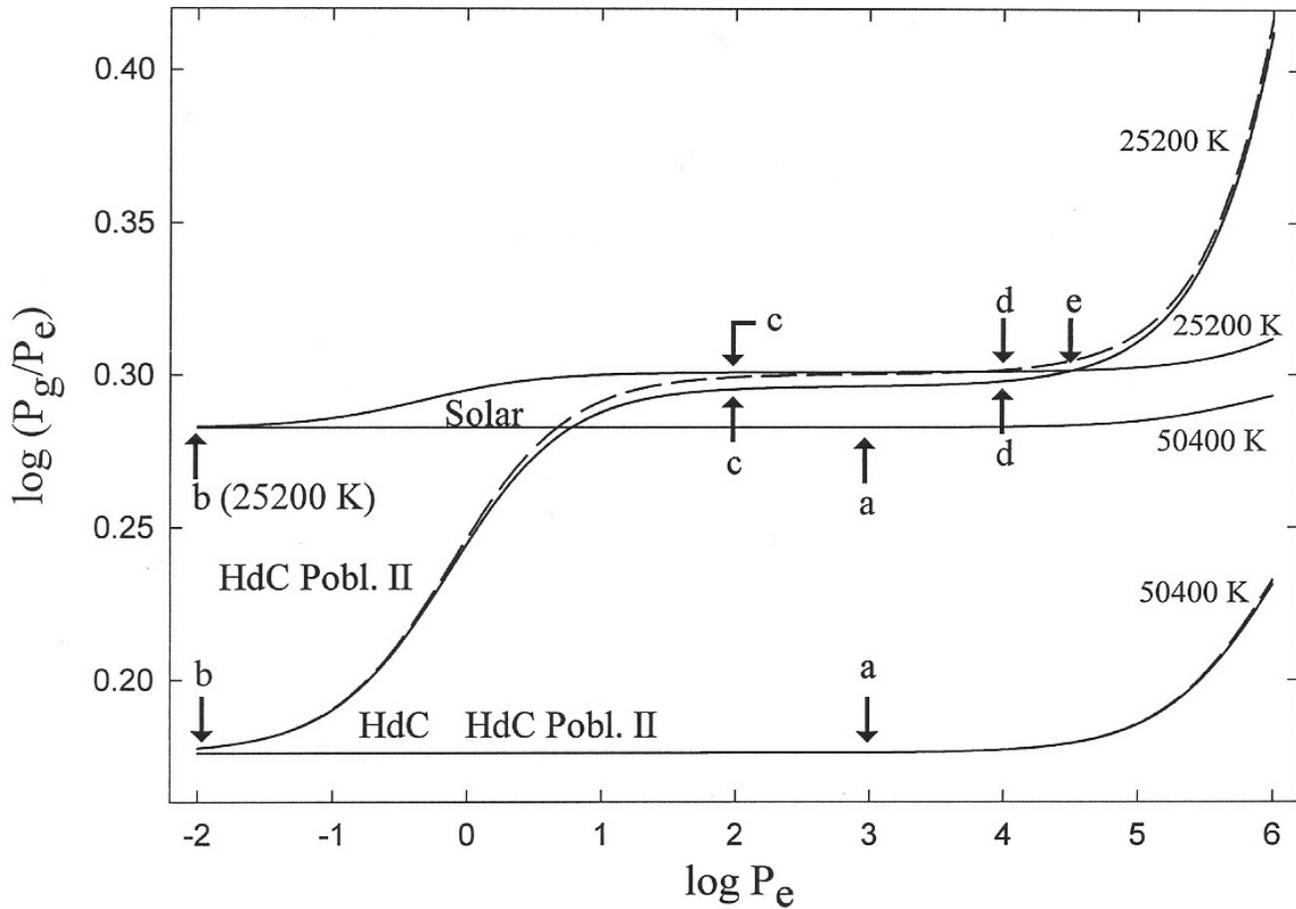


Fig. 2.5: Relaciones $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$ para abundancias Solar, HdC y HdCII.

- Para $T=50400$ K: **a**, comienza la recombinación del He III.
- Para $T=25200$ K: **b**, a medida que crece $\log(P_e)$ se incrementa la recombinación del He III; **c**, finalización de la recombinación del He III; **d**, comienza la recombinación del He II; **e**, comienza la recombinación del H II. Entre **c** y **d**, la mayoría de los átomos de H y de He se encuentran una vez ionizados; en la mezcla HdC aparece una significativa contribución de electrones provenientes del H, C, N, O y Ne.
- Para $T=12600$ K: **f**, se inicia la recombinación del He II; **g**: finaliza la recombinación del He II y comienza la recombinación del H II.

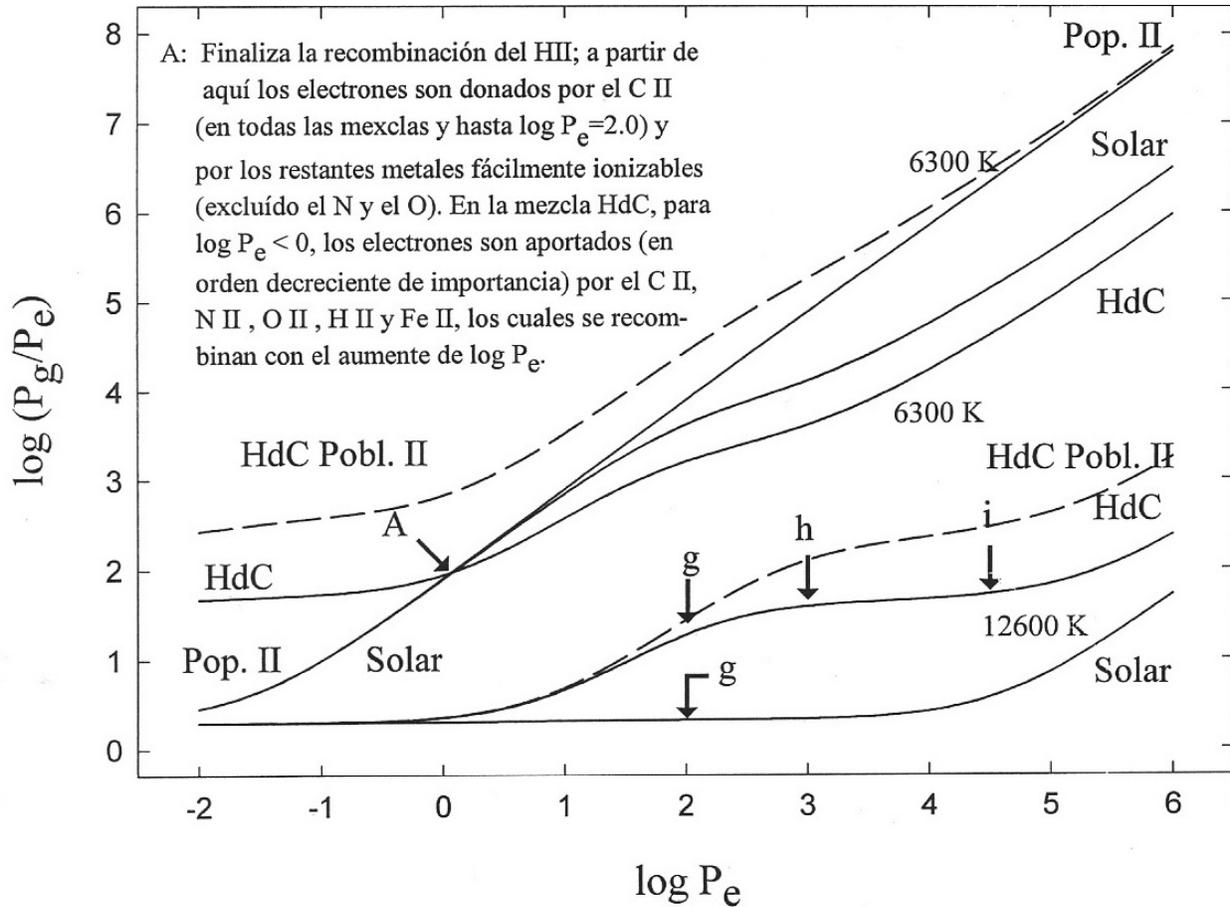


Fig. 2.6: Relaciones $\log (P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$ para abundancias Solar, Población II, HdC y HdCII.

- Para $T=12600$ K: **g**, finaliza la recombinación del He II y comienza la recombinación del H II. En la mezcla HdC puede ser observada una “meseta” entre **h** e **i**, debido a la contribución de los electrones aportados por el C II; el N II y el O II contribuyen en menor grado.

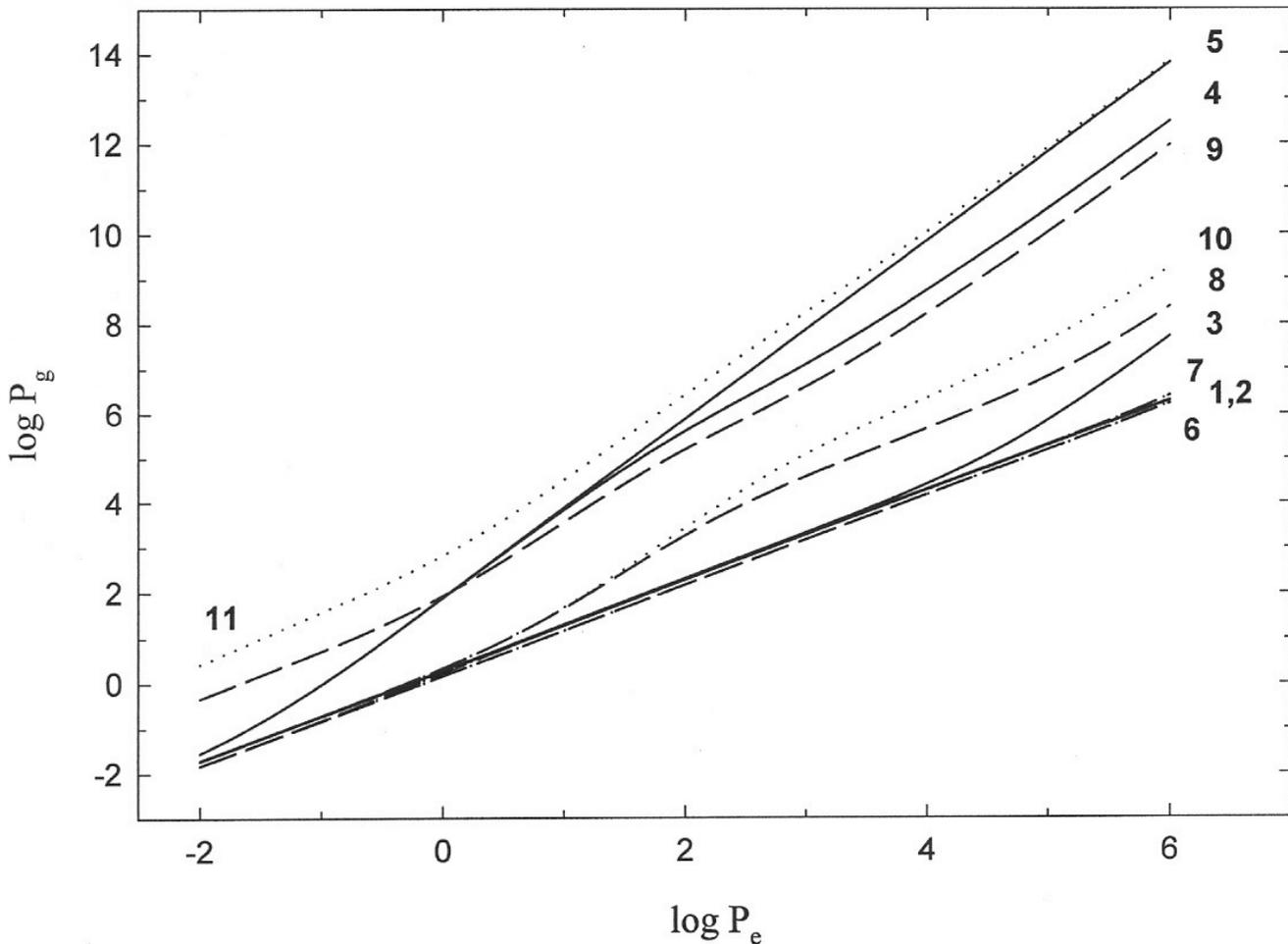


Fig. 2.7: Relaciones $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$ para abundancias Solar, HdC, Población II y HdCII.

- Abundancia Solar: **1, 2, 3, 4** y Mezcla HdC: **6, 7, 8, 9** para valores de $T = 50400$ K, 25200 K, 12600 K y 6300 K, respectivamente.
- Abundancia Población II: **5** para $T = 6300$ K
- Abundancia HdCII: **10, 11** para $T = 12600$ K y 6300 K.

3.3. PRINCIPALES CONTRIBUYENTES DE ELECTRONES.

Las figuras 2.8, 2.9 y 2.10 muestran los porcentajes de electrones aportados por los principales elementos de las diferentes muestras estudiadas para una temperatura de 6300 K; cabe remarcar que para $T = 12600$ K, 25200 K y 50400 K, los principales elementos donantes de electrones son el H y el He, o el He y el C, dependiendo de la composición de la mezcla. En la composición Solar, el H es el principal donante de electrones para $\log(P_e) < 2$; a medida que se incrementa la presión electrónica, el H comienza a recombinarse y empiezan a aparecer la contribución de otros elementos que, a pesar de su pobre abundancia relativa respecto al H, tienen menores potenciales de ionización. El mecanismo descrito en las figuras mencionadas es el resultado de la abundancia relativa de los elementos y de los valores de sus potenciales de ionización.

La Fig. 2.8 muestra que, para una mezcla de Población II, la contribución electrónica de los metales es muy pequeña, un hecho que restringe fuertemente la formación del ión H.

Finalmente, la Fig. 2.9 indica que en una atmósfera HdC, el rol del H en la mezcla Solar es de alguna medida tomado por el C, pero esta similitud es solo cualitativa y no cuantitativa, puesto que por cada gramo de material solar, 0.71 g corresponde al H, mientras que la mezcla HdC contiene solamente 0.06 g de C (según la composición química asumida). En consecuencia, el H ionizado aporta cerca de 100 veces más electrones por unidad de material estelar (en la mezcla Solar) que lo aportado por el C (en la mezcla HdC).

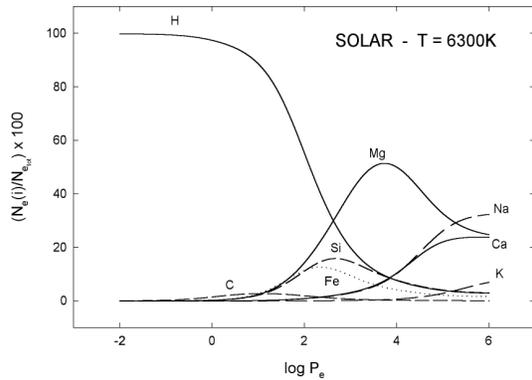


Fig. 2.8: Principales contribuyentes electrónicos en una abundancia Solar, correspondiente a una temperatura de 6300 K.

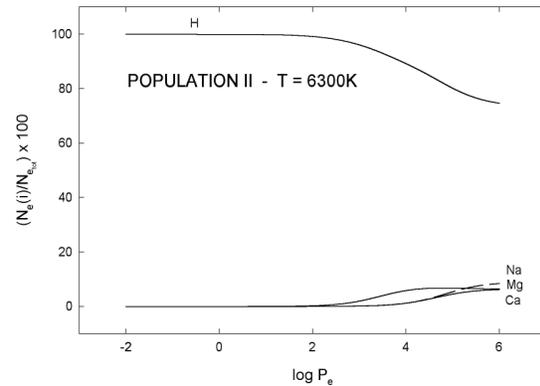


Fig. 2.9: Principales contribuyentes electrónicos en una abundancia de Población II, correspondiente a una temperatura de 6300 K.

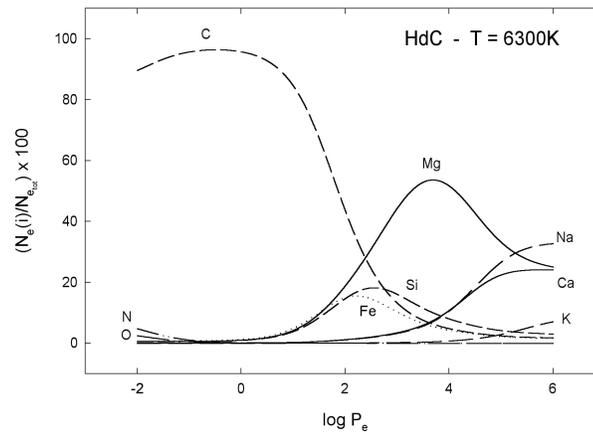


Fig. 2.10: Principales contribuyentes electrónicos en una abundancia HdC, correspondiente a una temperatura de 6300 K.

3.4. DENSIDAD ELECTRÓNICA POR UNIDAD DE MASA.

La TABLA 2.7 muestra la densidad electrónica por unidad de masa como función de la presión electrónica, la temperatura y la composición química para las cuatro composiciones químicas analizadas. A partir de ella puede analizarse la importancia relativa (de una mezcla a otra) de aquellos procesos en los cuales los electrones libres juegan un papel importante. Notemos que ninguno de los siguientes elementos fueron considerados en la misma: H_2 , C_2 , H^- , H_2^+ , C^- y C_2^+ . Las razones por las cuales excluimos los procesos que sustraen o aportan electrones al medio por parte de estos elementos fueron las siguientes:

- a.) Los iones H^- y C^- son de interés como fuentes de opacidades en las atmósferas de composición Solar o HdC, para temperaturas intermedias o relativamente bajas. Deseamos averiguar en qué medida su formación está afectada por la densidad electrónica, y resulta claro que cuando las densidades aumentan, la formación de los iones negativos se verá favorecida.
- b.) Los procesos que forman los iones negativos (en este caso H^- y C^-), absorben fuertemente los electrones libres y pueden modificar en forma considerable la densidad electrónica (ver apartado 3.2 y Figs. 2.5 y 2.6); nuestro interés, sin embargo, está dirigido a la determinación de la disponibilidad de electrones en el medio antes de que estos procesos tengan lugar.

TABLA 2.7

Densidad electrónica por gramo de material estelar (N_e/ρ)
para las distintas composiciones químicas analizadas.

$\log P_e$	HdCII	HdC	Solar	Población II
$T = 50400 \text{ K}$				
-2.0	3.0e23	2.86e23	5.06e23	5.14e23
0.0	3.0e23	2.86e23	5.06e23	5.14e23
2.0	3.0e23	2.86e23	5.06e23	5.14e23
4.0	3.0e23	2.84e23	5.05e23	5.13e23
6.0	2.0e23	2.03e23	4.81e23	4.89e23
$T = 25200 \text{ K}$				
-2.0	3.0e23	2.83e23	5.05e23	5.13e23
0.0	2.0e23	1.89e23	4.77e23	4.85e23
2.0	1.5e23	1.47e23	4.65e23	4.72e23
4.0	1.5e23	1.45e23	4.64e23	4.71e23
6.0	1.0e23	0.90e23	4.42e23	4.49e23
$T = 12600 \text{ K}$				
-2.0	1.5e23	1.45e23	4.64e23	4.72e23
0.0	1.1e23	1.13e23	4.55e23	4.62e23
2.0	8.1e21	8.10e21	4.22e23	4.29e23
4.0	3.2e21	3.15e21	2.89e23	2.94e23
6.0	6.1e20	6.00e20	9.04e21	9.11e21
$T = 6300 \text{ K}$				
-2.0	2.0e21	3.08e21	2.46e23	2.50e23
0.0	1.0e21	1.65e21	5.95e21	5.90e21
2.0	5.0e19	9.00e19	1.12e20	6.04e19
4.0	6.5e17	8.56e18	8.44e18	6.78e17
6.0	7.3e15	1.55e17	1.50e17	7.46e15

Analizaremos los resultados. Comenzamos por discutir las diferencias que aparecen entre una composición química y otra, para los mismos valores de P_e y T , tomando como referencia la mezcla Solar. Recordemos que la composición de Población II fue obtenida de la Solar reduciendo en dos órdenes de magnitud la abundancia numérica de los metales; entonces, digamos como ejemplo que por cada átomo de N quitado de la mezcla solar, la ley de la conservación de la masa requiere reemplazar aproximadamente 10 átomos de H y 1 de He en la abundancia de Población II. Si las condiciones físicas fueran tales que el He y el N estuviesen doblemente ionizados (esto es, a valores de temperaturas relativamente altas y presiones electrónicas suficientemente bajas), hallaríamos en la mezcla Solar 2 electrones por cada átomo de N; mientras que en la abundancia de Población II, aquellos átomos que reemplazan cada átomo de N quitado originaría 12 electrones. Este análisis realizado para el N puede ser repetido para con los demás elementos restantes más pesados que el He de la mezcla, concluyéndose que en las condiciones indicadas deberíamos esperar una mayor densidad electrónica por unidad de masa en la mezcla de Población II que en la solar. Por el contrario, para temperaturas relativamente bajas y presiones electrónicas altas (cuando el H y el He están principalmente en estado neutro), los electrones libres se originan principalmente de los metales fácilmente ionizables; como éstos son poco abundantes en la abundancia de Población II, hallamos una mayor densidad electrónica por unidad de masa en la mezcla solar que en la de Población II.

Los átomos de H son muy deficientes en la mezcla HdC y son principalmente reemplazados por los átomos de He. Un análisis similar al realizado anteriormente demuestra que cuando el H y el He están fuertemente ionizados, la densidad electrónica por unidad de masa es mayor en la mezcla Solar que en la HdC; la diferencia será aún más pronunciada cuando prácticamente todo el He esté recombinado y el H permanezca ionizado. Según se advierte en la TABLA 2.7, para la temperatura más baja ($T=6300$ K) y para $\log P_e \geq 4.0$, los únicos elementos capaces de aportar electrones son los átomos fácilmente ionizables; como lo demostráramos anteriormente (ver sección 4.3), éstos son ligeramente más abundantes en la mezcla HdC que en la Solar. Como consecuencia, bajo estas condiciones la densidad electrónica por unidad de masa es ligeramente mayor en la mezcla HdC que en la Solar, para las abundancias utilizadas.

En la sección 2.3 mencionamos que la abundancia de H en la mezcla HdC podría ser aún menor que la propuesta, mientras que el O podría ser ligeramente más abundante. Estas dos modificaciones trabajan en el mismo sentido, es decir, ambas disminuyen la densidad electrónica por unidad de masa en la mezcla HdC cuando el He, C, N, etc., están doblemente ionizados. Sin embargo, puesto que las contribuciones porcentuales de electrones del O (y particularmente del H) son relativamente más pequeñas que las del He, los valores en la TABLA 2.7 no estarían significativamente afectadas por las modificaciones referidas.

Aquellos procesos donde los electrones libres juegan un rol importante queda reflejado también en la TABLA 2.7. En efecto, para $T = 50400$ K (que involucra un importante flujo de radiación para longitudes de onda menores que los 1000 \AA), tanto en una atmósfera Solar como de Población II, las fuentes de opacidades corresponden a la dispersión Thomson (especialmente significativo para $\log P_e < 3.0$) y una contribución del H I y He II (para $\log P_e \geq 3.0$) (ver *Capítulo III*); aunque estos elementos están fuertemente ionizados (como H II y He III respectivamente), sus importantes abundancias resultará, no obstante, en la aparición de un significativo remanente de H I y He II. También puede verse que las mezclas ricas en He tienen aproximadamente la mitad de la densidad electrónica que la Solar (o la Población II); la conclusión es que para estas temperaturas, o similares, las mezclas ricas en He serán considerablemente más transparentes a la radiación que las otras dos (ver *Capítulo III*).

Por el otro lado, si bien en una mezcla HdC es modesta la contribución del He II a la opacidad, la cuota del H será prácticamente nula, y como lo muestra la TABLA 2.7, el scattering Thomson disminuye en un factor 0.5 para todo el rango de valores de P_e consideradas. Como conclusión podemos afirmar que bajo estas u otras condiciones similares, la mezcla HdC será considerablemente más transparente a la radiación que a las otras dos abundancias analizadas. Una situación similar ocurre cuando $T = 25200$ K, aunque para esta temperatura puede haber alguna contribución del H I (en la composición Solar) y del He I a la absorción continua; por lo tanto no podremos realizar una afirmación tan firme como la que hicimos antes.

En el otro extremo de bajas temperaturas (por ejemplo $T = 6300$ K) y $\log P_e \geq 2.0$, la densidad electrónica por unidad de masa es tan alta en la mezcla HdC que en la Solar y tan baja en la mezcla HdC de Población II como en la de Población II. Esto nos dice que la formación del ión C^- en la mezcla HdC podría ser mayor que la formación del ión H^- en la Solar. Sin embargo, la relativamente poca abundancia de C en la composición HdC (ver sección 4.3) limitará fuertemente la formación del ión C^- , impidiendo que alcance la importancia de absorción que tiene el ión H^- en la mezcla Solar. No obstante este simple análisis no nos permite concluir acerca de que si la opacidad por unidad de masa en la atmósfera HdC será menor, igual o mayor que en la Solar: dependerá de la importancia que tengan los absorbedores o dispersores tales como el C, He^- , los electrones, etc. (ver, por ejemplo, Myerscough, 1968; Gustaffson & Asplund, 1996). Asimismo, así como en la mezcla de Población II se forman muy pocos H^- , en la composición HdCII se formarán muy pocos C^- , pero la deficiencia es aún más acentuada por la escasez del C en la mezcla HdCII, con relación a la del H en la Población II. Podemos así concluir, que para temperaturas intermedias y bajas, en las zonas espectrales del visible e IR (zona donde preferentemente absorben el H^- y el C^-), la mezcla HdCII tendrá la máxima transparencia con relación a una solar (ver *Capítulo III*).

3.5. DISCUSIÓN.

Se elaboró un procedimiento que, con un mínimo de iteraciones, calcula la presión electrónica correspondiente a un valor de presión gaseosa dada.

Tal como fuera advertido en su oportunidad (Merlo, 1992; Milone & Merlo (1994)), este método resulta ser eficiente en los resultados, económico en los tiempos de cálculo numérico y muy sencillo de implementar. Además, se alcanza muy buena precisión de convergencia (errores relativos menores a 2×10^{-6} y 1×10^{-5} en $\log P_e$ y P_e , respectivamente) y rapidez de convergencia (no más de 20 iteraciones) (Milone & Merlo, 1994), por lo que lo torna de gran aplicabilidad en los algoritmos numéricos de cálculo de modelos de atmósferas estelares.

Se aplicó, asimismo, el método para obtener el porcentaje de electrones liberados por distintos elementos, en muestras que corresponden a composiciones típicas de estrellas de Poblaciones I y II, y para rangos de $\log P_e$ entre 0 y 1 y temperatura entre 5040 K y 10080 K. Para las temperaturas más bajas, el principal aporte de electrones proviene de elementos con más bajo potencial de ionización (Na, Mg y Ca), y en tanto entre los elementos de más alto potencial de ionización el principal contribuyente es el Hidrógeno (Merlo & Milone, 1992).

Al analizar el aporte de electrones por unidad de masa, para composiciones químicas correspondiente a mezcla Solar y de Población II, se encontró en esta última (en las mismas condiciones de P_e y T) una notable deficiencia de electrones, resultando la absorción correspondiente al H⁻ proporcionalmente menor (Merlo & Milone, 1992). De esta forma, estas atmósferas son más transparentes que las correspondientes a estrellas de composición solar, conduciendo este hecho a una mimetización en la apariencia de sus líneas metálicas (Wilson, 1961). Del estudio realizado también se desprende la sensibilidad de la estructura de ionización con la abundancia elegida, y de que por lo tanto se hace decisivo un planteo inicial de hipótesis para su elección.

Otro punto a destacar es el hecho de poder utilizar funciones de partición constantes en el cálculo de la ionización de la atmósfera, con la consabida economía de cálculo que ello provee.

Asimismo hallamos que en las capas más superficiales de las estrellas normales (y debido a la facilidad con que se ionizan y no a su abundancia) los principales donantes de electrones son los metales (Milone & Merlo, 1998c); en las capas intermedias y profundas, la principal contribución viene del H (aunque en las últimas hay una contribución importante del He). En las estrellas de Población II, prevalece en toda la superficie la contribución de electrones del H, sumándose el He en las capas más profundas. Finalmente en las estrellas HdC, como estamos suponiendo una abundancia solar para los metales, en las capas superficiales e intermedias, son éstos los principales donantes de electrones, en tanto en las más profundas y calientes lo es el He. De todos modos, con relación a las estrellas de composición química normal (en las que la abundancia de H por unidad de masa es $0.70 \leq X \leq 0.75$, y el peso molecular medio es $\mu \approx 1.30$) en las estrellas HdC, debido a la pequeña abundancia de C por unidad de masa ($Z_C \approx 0.060$) y al peso molecular medio relativamente alto ($\mu \approx 4.2$), en igualdad de condiciones físicas (temperatura y presión electrónica), la cantidad de electrones liberados por unidad de masa es considerablemente más pequeña.

Los hechos considerados conducen a afirmar que, en las atmósferas de estrellas con composición solar, la abundancia de los electrones provenientes de los metales favorece la formación del ión negativo del H (H⁻), y éste se convierte en la principal fuente de opacidad en el visual e infrarrojo; en las capas suficientemente calientes como para disociar el H⁻, la principal fuente de opacidad pasa a ser el H neutro. En el ultravioleta la opacidad proviene de la fotoionización de los metales. En una estrella de Población II disminuye la absorción en el ultravioleta debido a la deficiencia de los metales, y la absorción del H⁻ en el visible es prácticamente inexistente; en estrellas con temperaturas en el rango 5000-8000 K, la principal fuente de opacidad es el H atómico. En estrellas HdC (en el mismo rango de temperaturas señalado), en el ultravioleta la absorción es similar a la de las estrellas normales (abundancia metálica solar), pero en el visible e infrarrojo, falta la absorción del H⁻ y del H atómico, y la relativamente pequeña abundancia del C (por unidad de masa) no llega a reemplazar el papel del H; la conclusión es que estas atmósferas son más transparentes que las normales en el visible e infrarrojo (Milone & Merlo, 1998c).

4. FORMACIÓN MOLECULAR.

4.1. INTRODUCCIÓN.

Para atmósferas de baja temperatura es importante la formación de moléculas, la cual puede afectar el equilibrio poblacional de la misma. Usualmente, el cálculo de la formación molecular se desarrolla por aproximaciones sucesivas, partiendo de algún elemento importante por su abundancia.

Es por ello que decidimos revisar el problema de la formación de moléculas para el caso particular del hidrógeno, y en particular la precisión de los resultados. Por ello analizamos un proceso de cálculo (Mihalas, 1967) que presenta inestabilidades numéricas, determinando su origen y la manera en las que se las elimina. El procedimiento se extiende al caso de una atmósfera en la cual la abundancia del C está reforzada y el H es notablemente deficiente (Milone & Merlo, 2002b).

4.2. PLANTEAMIENTO DE LOS MÉTODOS.

Primeramente tratamos el problema en una manera *aproximada*, suponiendo despreciable la presencia molecular en cuanto a la contribución poblacional total y teniendo en cuenta las ecuaciones de disociaciones respectivas y algunas aproximaciones elementales. Es de esperar que para bajas temperaturas, donde la formación de moléculas es importante, este procedimiento no brinde resultados tan preciso como un procedimiento más riguroso, en donde esté contemplado la presencia molecular. Pero para altas temperaturas, en donde la influencia molecular es despreciable, ambos métodos (aproximado y preciso) deberían converger.

En segunda instancia, planteamos en forma rigurosa el método desarrollado por Mihalas (1967) para la formación de moléculas en las atmósferas estelares. El caso más simple de analizar es el de formación de moléculas de hidrógeno, donde se desprecia la presencia de otras moléculas que no sean las correspondiente a la molécula neutra del hidrógeno y a la ionizada. Además trabajamos en la hipótesis de que el hidrógeno es por lejos el elemento más abundante.

El planteo algebraico conduce a resolver una ecuación cuadrática del tipo $c_1 f_i^2 + c_2 f_i + c_3 = 0$, en donde los c_i ($i=1,2,3$) son constantes vinculadas con la composición química y las abundancias relativas de las distintas especies del Hidrógeno respecto al Hidrógeno neutro, y f_i es la abundancia relativa del hidrógeno neutro. Los experimentos numéricos muestran que $\Delta^{1/2} > c_2$ (donde Δ es el discriminante de la ecuación) para todos los valores de temperatura, presión electrónica y composición química considerados. Esto nos asegura la unicidad de la solución de la ecuación, y poder determinar de esta forma el valor de f_i , ya que nos quedaremos con la raíz positiva ($f_i = f_i^+$) por condiciones elementales de realidad física, y por ende todos las demás abundancias relativas podrán ser determinadas.

4.3. CÁLCULOS NUMÉRICOS.

Siguiendo las expresiones rigurosas de Mihalas (1967) y utilizando una abundancia Solar (Anders & Grevesse, 1989), decidimos comparar los resultados que surgen de las mismas con el método aproximado expuesto al comienzo, para valores de temperatura y presión electrónica arbitrarios.

Primeramente analizamos la unicidad de las raíces de la ecuación cuadrática citada, mostrándose en la TABLA 2.8 los valores de los coeficientes de la ecuación, la raíz cuadrada de los discriminantes respectivos y las correspondientes raíces, para valores de temperatura y presión electrónica variadas. En todos los casos se evidencia que $\Delta^{1/2} > c_2$, y por lo tanto tenemos dos raíces reales, positiva y negativa.

TABLA 2.8

Valores de las constantes, raíces y discriminante de la ecuación cuadrática.

$P_e = 0.01$						
T	c_1	c_2	c_3	$\Delta^{1/2}$	f_i^+	f_i^-
50400	7.45965E+36	3.56785E+24	-1.51122E+13	2.15327E+25	1.20413E-12	-1.68242E-12
25200	2.12116E+30	1.29956E+20	-7.18533E+10	7.91541E+20	1.55949E-10	-2.17216E-10
10080	3.09261E+14	4.77808E+08	-1.14607E+05	1.19165E+10	1.84936E-05	-2.00386E-05
5040	2.73860E-03	-1.91585E-03	-8.17350E-04	3.55304E-03	9.98482E-01	-2.98909E-01
2520	5.25117E-05	1.26358E-06	-1.26206E-06	1.63306E-05	1.43464E-01	-1.67526E-01
$P_e = 1$						
T	c_1	c_2	c_3	$\Delta^{1/2}$	f_i^+	f_i^-
50400	7.45965E+30	3.56785E+20	-1.51122E+11	2.15327E+21	1.20413E-10	-1.68242E-10
25200	2.12116E+24	8.65166E+15	-6.50789E+08	7.48101E+16	1.55949E-08	-1.96737E-08
10080	3.09839E+08	3.69751E+03	-1.06264E+03	1.14761E+06	1.84598E-03	-1.85791E-03
5040	2.74228E-05	2.30440E-04	-2.57772E-04	2.85268E-04	9.99679E-01	-9.40292E+00
2520	5.25117E-03	1.90754E-07	-3.92331E-08	2.87074E-05	2.71526E-03	-2.75159E-03
$P_e = 100$						
T	c_1	c_2	c_3	$\Delta^{1/2}$	f_i^+	f_i^-
50400	7.45965E+24	3.56759E+16	-1.51119E+09	2.15325E+17	1.20413E-08	-1.68239E-08
25200	2.12116E+18	6.70201E+11	-6.20383E+06	7.28603E+12	1.55949E-06	-1.87545E-06
10080	3.67967E+02	1.05406E+01	-1.06086E+01	1.25401E+02	1.56075E-01	-1.84720E-01
5040	8.52704E-06	5.37886E-05	-5.35900E-05	6.87100E-05	8.74948E-01	-7.18295E+00
2520	5.25117E-01	1.51525E-05	-4.21695E-10	3.33970E-05	1.73718E-05	-4.62273E-05

Posteriormente, comparamos los resultados hallados siguiendo el procedimiento de Mihalas (1967) con el método aproximado. De la comparación surgieron los resultados que se muestran en la TABLA 2.9, en donde se expresa en *itálica* los valores obtenidos con el método aproximado.

Notemos primeramente, y como era de esperar, que aparecen diferencias apreciables en H^0/H_t , H/H_t y H^+/H_t para temperaturas bajas ($T=2520$ K y $T=5040$ K (para presiones altas)), ya que aquí la hipótesis inicial del método aproximado pierde su validez, al aparecer en forma importante la presencia molecular.

Asimismo se observan claras diferencias para todos los valores de T y P_e en los cocientes H_2/H_t y H_2^+/H_t , como así también ciertos valores negativos en el método aproximado. Respecto a lo primero, ambos métodos deberían converger al mismo resultado cuando elevamos la temperatura, pues en estas condiciones la presencia molecular es despreciable y estamos bajo la hipótesis del método aproximado.

TABLA 2.9

Comparación entre los resultados siguiendo el procedimiento de Mihalas (1967) con nuestro método aproximado –en *itálica*–

H°/H_t						
$T \backslash P_e$	0.01		1		100	
50400	1.2014E-12	<i>1.2014E-12</i>	1.2014E-10	<i>1.2014E-10</i>	1.2014E-08	<i>1.2014E-08</i>
25200	1.5559E-10	<i>1.5559E-10</i>	1.5559E-08	<i>1.5559E-08</i>	1.5559E-06	<i>1.5559E-06</i>
10800	1.8451E-05	<i>1.8451E-05</i>	1.8417E-03	<i>1.8417E-03</i>	1.5577E-01	<i>1.5577E-01</i>
5040	9.9848E-01	<i>9.9848E-01</i>	9.9968E-01	<i>9.9999E-01</i>	8.7495E-01	<i>1.0000</i>
2520	1.4346E-01	<i>1.0000</i>	2.7152E-03	<i>1.0000</i>	1.7354E-05	<i>9.9999E-01</i>

H^+/H_t						
$T \backslash P_e$	0.01		1		100	
50400	1.0000	<i>1.0000</i>	1.0000	<i>1.0000</i>	1.0000	<i>1.0000</i>
25200	1.0000	<i>1.0000</i>	1.0000	<i>1.0000</i>	1.0000	<i>1.0000</i>
10800	9.9998E-01	<i>9.9998E-01</i>	9.9816E-01	<i>9.9816E-01</i>	8.4423E-01	<i>8.4423E-01</i>
5040	1.5208E-03	<i>1.5208E-03</i>	1.5226E-05	<i>1.5231E-05</i>	1.3327E-07	<i>1.5231E-07</i>
2520	9.7630E-19	<i>1.1365E-17</i>	1.8478E-22	<i>1.1365E-19</i>	1.1809E-26	<i>1.1365E-21</i>

H/H_t						
$T \backslash P_e$	0.01		1		100	
50400	1.8837E-26	<i>1.8837E-26</i>	1.8837E-22	<i>1.8837E-22</i>	1.8837E-18	<i>1.8837E-18</i>
25200	1.6417E-23	<i>1.6417E-23</i>	1.6417E-19	<i>1.6417E-19</i>	1.6417E-15	<i>1.6417E-15</i>
10800	3.2387E-17	<i>3.2387E-17</i>	3.2328E-13	<i>3.2328E-13</i>	2.7343E-09	<i>2.7343E-09</i>
5040	2.3618E-11	<i>2.3618E-11</i>	2.3646E-09	<i>2.3654E-09</i>	2.0696E-07	<i>2.3654E-07</i>
2520	1.0894E-10	<i>7.2441E-10</i>	2.0618E-10	<i>7.2441E-08</i>	1.3177E-10	<i>7.2441E-06</i>

H_2/H_t						
$T \backslash P_e$	0.01		1		100	
50400	7.3034E-22	<i>1.0943E-38</i>	1.0484E-19	<i>1.0943E-32</i>	4.7177E-18	<i>1.0943E-26</i>
25200	1.8601E-19	<i>5.6935E-34</i>	-6.4721E-17	<i>6.0239E-28</i>	3.0310E-15	<i>6.1854E-22</i>
10800	-8.6873E-16	<i>2.6899E-22</i>	2.0934E-13	<i>2.7905E-16</i>	7.7301E-10	<i>2.3619E-10</i>
5040	1.4511E-07	<i>1.2240E-07</i>	1.5289E-04	<i>1.5298E-04</i>	6.2526E-02	<i>8.1744E-02</i>
2520	4.2827E-01	<i>1.5300E+01</i>	4.9864E-01	<i>-2.2522E+04</i>	4.9999E-01	<i>-1.5261E+04</i>

H_2^+/H_t						
$T \backslash P_e$	0.01		1		100	
50400	7.9176E-09	<i>1.1863E-25</i>	1.1366E-08	<i>1.1863E-21</i>	5.1145E-09	<i>1.1863E-17</i>
25200	9.6177E-09	<i>2.9439E-23</i>	-3.3464E-08	<i>3.1147E-19</i>	1.5672E-08	<i>3.1982E-15</i>
10800	-9.2100E-11	<i>2.8518E-17</i>	2.2193E-10	<i>2.9584E-13</i>	8.1952E-09	<i>2.5040E-09</i>
5040	4.4399E-11	<i>3.7451E-11</i>	4.6780E-10	<i>4.6809E-10</i>	1.9131E-09	<i>2.5003E-09</i>
2520	7.0205E-21	<i>4.4912E-19</i>	8.1741E-23	<i>-6.6115E-18</i>	8.1962E-25	<i>-4.4799E-20</i>

Para afinar este análisis, decidimos hacer un estudio de los valores del método de Mihalas (1967) en simple y doble precisión. En ellos se encuentra que para H°/H_t , H^+/H_t y H/H_t la diferencia de los resultados en ambas precisiones es nula, mientras que para H_2/H_t y H_2^+/H_t se aprecian notables diferencias en órdenes de magnitud; también en estos últimos aparecen algunos valores con signo negativo (sin significado físico), atribuibles a una débil oscilación alrededor de 0, en magnitudes muy pequeñas. Todo esto queda plasmado en la TABLA 2.10.

TABLA 2.10

Comparación de los resultados del procedimiento de Mihalas (1967) en simple y en doble precisión (en *itálica*)

		H_2/H_t					
$T \backslash P_e$	0.01	1		100			
50400	7.3034E-22	<i>4.1879D-30</i>	1.0484E-19	<i>4.2029D-28</i>	4.7177E-18	<i>3.2128D-26</i>	
25200	1.8601E-19	<i>-1.6356D-28</i>	-6.4721E-17	<i>-8.4085D-26</i>	3.0310E-15	<i>6.1220D-22</i>	
10800	-8.6873E-16	<i>9.2065D-22</i>	2.0934E-13	<i>2.7909D-16</i>	7.7301E-10	<i>2.3619D-10</i>	
5040	1.4511E-07	<i>1.2240D-07</i>	1.5289E-04	<i>1.5298D-04</i>	6.2526E-02	<i>6.2526D-02</i>	
2520	4.2827E-01	<i>4.2827D-01</i>	4.9864E-01	<i>4.9864D-01</i>	4.9999E-01	<i>4.9999D-01</i>	

		H_2^+/H_t					
$T \backslash P_e$	0.01	1		100			
50400	7.9176E-09	<i>4.5401D-17</i>	1.1366E-08	<i>4.5564D-17</i>	5.1145E-09	<i>3.4830D-17</i>	
25200	9.6177E-09	<i>-8.4568D-18</i>	-3.3464E-08	<i>-4.3477D-17</i>	1.5672E-08	<i>3.1654D-15</i>	
10800	-9.2100E-11	<i>9.7604D-17</i>	2.2193E-10	<i>2.9589D-13</i>	8.1952E-09	<i>2.5040D-09</i>	
5040	4.4399E-11	<i>3.7451D-11</i>	4.6780E-10	<i>4.6781D-10</i>	1.9131E-09	<i>1.9131D-09</i>	
2520	7.0205E-21	<i>7.0205D-21</i>	8.1741E-23	<i>8.1741D-23</i>	8.1962E-25	<i>8.1962D-25</i>	

Advertimos, en primera instancia, que existe un marcado desacuerdo para temperaturas altas (de 8 a 9 órdenes de magnitud), discrepancia que se va reduciendo a medida que vamos disminuyendo la temperatura. Para analizar esto, estudiamos los errores involucrados en estos cálculos para H_2/H_t , ya que H_2^+/H_t se lo obtiene a partir de aquél.

De acuerdo a su definición, y siguiendo la notación de Mihalas, tenemos que:

$$f_5 = \frac{(1-af_1)}{b} \Rightarrow \Delta f_5 = -\frac{(a\Delta f_1 + f_1\Delta a)b + (1-af_1)\Delta b}{b^2} \quad (2.2)$$

Como en las variadas condiciones físicas de interés se cumple que $af_1 \approx 1$, entonces $(1-af_1) \approx 0$. Por lo tanto:

$$\frac{\Delta f_5}{f_5} = -\frac{(a\Delta f_1 + f_1\Delta a)b + (1-af_1)\Delta b}{(1-af_1)b} \approx -\frac{a\Delta f_1 + f_1\Delta a}{1-af_1} \quad (2.3)$$

Suponiendo que podemos expresar al valor f_1 como un cociente de dos números, tendremos:

$$f_1 = \frac{\alpha}{\beta} \Rightarrow \Delta f_1 = \frac{\beta\Delta\alpha - \alpha\Delta\beta}{\beta^2} \Rightarrow \frac{\Delta f_1}{f_1} = \frac{\Delta\alpha}{\alpha} - \frac{\Delta\beta}{\beta} \quad (2.4)$$

Por lo tanto en la ecuación (2.3) tendremos:

$$\frac{\Delta f_5}{f_5} = -\frac{af_1\left(\frac{\Delta\alpha}{\alpha} - \frac{\Delta\beta}{\beta}\right) + f_1\Delta a}{1-af_1} = -\frac{af_1\left(\frac{\Delta\alpha}{\alpha} - \frac{\Delta\beta}{\beta} + \frac{\Delta a}{a}\right)}{1-af_1} \quad (2.5)$$

Denotando con m a un exponente genérico que caracteriza el valor numérico de una magnitud en notación científica (Ralston, 1970), entonces en *precisión simple* tendremos:

$$|\Delta\alpha|, |\Delta\beta|, |\Delta a|, |\Delta b| \leq 5 \times 10^{-m-7} \Rightarrow |\Delta\alpha/\alpha|, |\Delta\beta/\beta|, |\Delta a/a|, |\Delta b/b| \leq 5 \times 10^{-7} \quad (2.6)$$

Luego,

$$\frac{|\Delta f_5|}{f_5} \approx \frac{1.5 \times 10^{-6}}{1 - af_1} \quad (2.7)$$

Por lo tanto, el error relativo presentará una singularidad en aquellas condiciones físicas en que $(1 - af_1) \approx 0$, y en estas condiciones aumentará el error de la determinación de f_5 .

En *precisión doble* tendremos que:

$$|\Delta\alpha|, |\Delta\beta|, |\Delta a|, |\Delta b| \leq 5 \times 10^{-m-14} \Rightarrow |\Delta\alpha/\alpha|, |\Delta\beta/\beta|, |\Delta a/a|, |\Delta b/b| \leq 5 \times 10^{-14} \quad (2.8)$$

Luego,

$$\frac{|\Delta f_5|}{f_5} \approx \frac{1.5 \times 10^{-13}}{1 - af_1} \quad (2.9)$$

En este caso, obtendremos de manera más precisa el valor de f_5 debido al factor más pequeño que atenúa al error relativo.

4.4. MÉTODO DE MIHALAS CORREGIDO.

Buscamos un algoritmo que nos independice de esta fluctuaciones de error en la determinación de las abundancias del H_2 y H_2^+ , que nos conduce a valores imprecisos de las mismas, por más pequeñas que sean éstos.

En las variadas condiciones físicas analizadas vimos que se cumple la relación $af_1 \approx 1$, por ello tendremos una singularidad en la definición de f_e , la cual ocasionará (dado que la proporción de electrones en el medio es una cantidad acotada y bien establecida) inestabilidades en la cuantificación de la misma. Dicho en otros términos, el producto bc también será del mismo orden que $(1 - af_1)$, de tal modo que el cociente brinde un número finito. Otro tanto ocurrirá con f_4 y f_5 , los cuales adoptarán valores muy pequeños, pero no nulos.

Para obtener un resultado preciso, implementamos un métodos iterativo de la siguiente forma. Primero, supondremos que $f_4^\circ = 0$, entonces tendremos una aproximación inicial para f_e° de la siguiente forma:

$$f_e^\circ = f_2 - f_3 + q \quad (2.10)$$

luego obtendremos una mejor aproximación para f_4 (que llamamos f_4^1) de la siguiente forma:

$$f_4^1 = G_2 G_4 f_1^2 / f_e^\circ \quad (2.11)$$

Entonces mejoramos el valor de f_e° en la siguiente manera:

$$f_e^1 = f_2 - f_3 + f_4^1 + q \quad (2.12)$$

Repitiendo este procedimiento en forma iterativa, obtendremos simultáneamente las soluciones finales para f_e y para f_4 . Este procedimiento muestra ser rápidamente convergente, precisando solamente de dos a tres iteraciones.

Finalmente, con el valor de f_4 obtenemos el de f_5 mediante la relación: $f_5 = f_4 / e$.

Las TABLA 2.11 muestra algunos resultados encontrados para f_4 , f_5 y f_e , los cuales no muestran ninguna dependencia con la precisión que se elija en el cálculo.

TABLA 2.11
Valores de la abundancias relativas de H_2^+ (f_4), H_2 (f_5) y de electrones (f_e)
hallados con nuestro método.

$P_e = 0.01 \text{ barya}$			
T	f_4	f_5	f_e
50400	1.18904E-25	1.09933E-38	1.19860E+00
25200	2.95068E-23	5.71984E-34	1.19643E+00
10080	2.85820E-17	2.70221E-22	1.04174E+00
5040	3.74390E-11	1.22642E-07	1.77328E-03
2520	7.00432E-21	4.28268E-01	6.30923E-07
$P_e = 1 \text{ barya}$			
T	f_4	f_5	f_e
50400	1.18904E-21	1.09933E-32	1.19860E+00
25200	3.12201E-19	6.05197E-28	1.13077E+00
10080	2.96523E-13	2.80339E-16	1.00048E+00
5040	4.66852E-10	1.52931E-04	1.42549E-04
2520	8.15529E-23	4.98642E-01	1.94108E-08
$P_e = 100 \text{ barya}$			
T	f_4	f_5	f_e
50400	1.18906E-17	1.09934E-26	1.198589+00
25200	3.20555E-15	6.21391E-22	1.10130E+00
10080	2.50887E-09	2.37195E-10	8.45276E-01
5040	1.90872E-09	6.25257E-02	2.67081E-05
2520	8.17735E-25	4.99991E-01	7.92380E-11

4.5. APLICACIÓN AL CARBONO.

Cuando el Hidrógeno no es el elemento más abundante, por ejemplo en estrellas de carbono deficientes en hidrógeno, se puede aplicar este método de la siguiente forma, en donde consideramos al Carbono como elemento más abundante después del Helio:

$$f_e^C = (C^+ - C^- + C_2^+ + H^+ - H^- + H_2^+ + Q) / N_{C_I} = N_e / N_{C_I} \quad (2.13)$$

Si se aproxima:

$$N_e / N_{C_I} \approx (C^+ - C^- + C_2^+ + Q) / N_{C_I} = f_e^C \quad (2.14)$$

Pero:

$$f_e^H = N_e / NH_t = (H^+ - H^- + H_2^+ + C^+ - C^- + C_2^+ + Q) / NH_t \quad (2.15)$$

$$\approx (H^+ - H^- + H_2^+) / NH_t + f_e^{C_1} (NC_t / NH_t) = f_e^{H_1} \quad (2.16)$$

$$\therefore f_e^{C_2} = (C^+ - C^- + C_2^+ + Q) / NC_t + f_e^{H_1} (NH_t / NC_t) - f_e^{C_1} \quad (2.17)$$

$$\therefore (C^+ - C^- + C_2^+ + Q) / NC_t = f_e^{C_1} + f_e^{C_2} - f_e^{H_1} (NC_t / NH_t) \quad (2.18)$$

Entonces:

$$f_e^{H_2} = (H^+ - H^- + H_2^+) / NH_t + f_e^{C_2} (NC_t / NH_t) \quad (2.19)$$

En los gráficos de las figuras 2.11 se muestran los cocientes de abundancias relativas correspondientes al H, H⁻, H⁺, H₂, H₂⁺ y e⁻ para dos valores de presiones electrónicas ($P_e = 1 \text{ bar}$ y $P_e = 10 \text{ bar}$) y una abundancia Solar de Anders & Grevesse (1989). Notar la importancia que puede tener la formación de moléculas, aun cuando se trabaje con un modelo de atmósfera con T_e solar (5800 K aproximadamente), en las capas menos profundas y relativamente frías de la atmósfera.

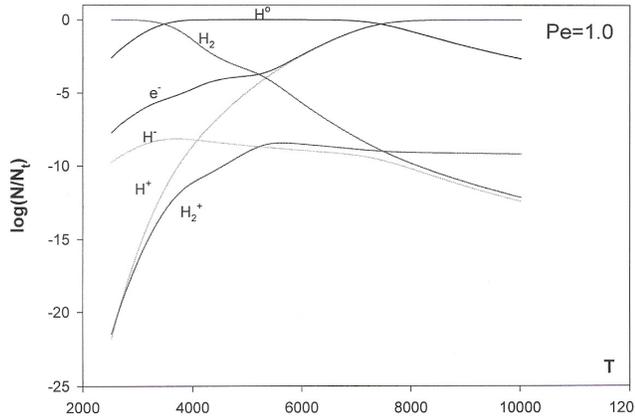


Fig. 2.11a: Gráficos comparativos mostrando la abundancia relativa de especies neutras, iónicas y moleculares del Hidrógeno para una presión electrónica unitaria y una abundancia Solar de Anders & Grevesse (1989).

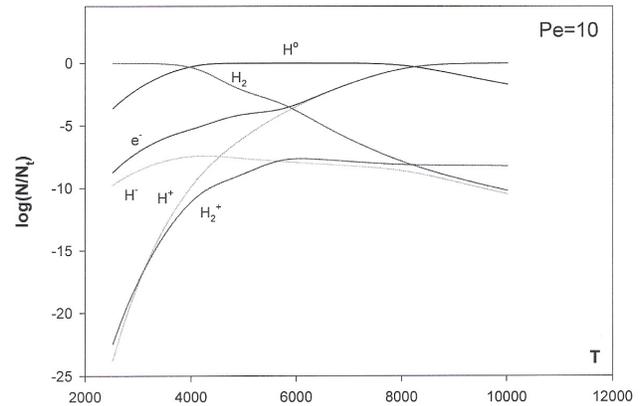


Fig. 2.11b: Gráficos comparativos mostrando la abundancia relativa de especies neutras, iónicas y moleculares del Hidrógeno para una presión electrónica $P_e = 10 \text{ dy/cm}^2$ y una abundancia Solar de Anders & Grevesse (1989).

4.6. ABUNDANCIA RELATIVA DEL H⁻.

Se analizó, además, la abundancia relativa del ión negativo del Hidrógeno para dos abundancias, la Solar y la de Población II. Los resultados se muestran en la siguiente tabla:

TABLA 2.12
Abundancias relativas del H⁻ para distintas abundancias y valores de (P_e, T).

$f_3 = N_{H^-} / N_{Htotal}$						
ABUNDANCIA	P_e	4000 K	5000 K	6000 K	7000 K	10000 K
Población II	1	2.54 e-9	2.43 e-9	1.15 e-9	5.23 e-10	3.84 e-13
	100	6.42 e-9	4.76 e-8	1.13 e-7	6.37 e-8	3.17 e-9
Solar	1	6.35 e-9	2.44 e-9	1.15 e-9	5.23 e-10	3.84 e-13
	100	8.02 e-8	2.09 e-7	1.15 e-7	6.37 e-8	3.17 e-9

Del análisis de la TABLA 2.12 advertimos lo siguiente:

- a.) Para bajas temperaturas, son los metales fácilmente ionizables los que aportan electrones al medio, haciendo posible la mayor formación de iones negativos del hidrógeno.
- b.) Cuando crece la temperatura, el átomo de hidrógeno empieza a aportar electrones al medio, y por tener la misma abundancia en ambas composiciones químicas, se igualan los valores de f_3 .
- c.) Para $P_e = 100 \text{ bar}$, el andar de f_3 presenta un máximo y luego decrece; ello se debe a la progresiva destrucción del H⁻ cuando se incrementa la temperatura.

4.7. FORMACIÓN MOLECULAR EN DIFERENTES COMPOSICIONES QUÍMICAS.

Además del estudio realizado en una abundancia solar, llevamos a cabo un estudio de la formación de moléculas en una mezcla HdC (ver abundancias en TABLA 2.1), para valores de $\log P_e = -2.0$ (1.0) 3.0. Las Figs. 2.12, 2.13, 2.14, 2.15 y 2.16 muestran algunos resultados para $\log P_e = 0.0$ y 2.0. El análisis de las mismas condujeron a las siguientes conclusiones:

- Cuando se incrementa la presión electrónica (por ejemplo de $P_e = 1.0 \text{ bar}$ a $P_e = 100 \text{ bar}$), perdura la presencia de una importante proporción de moléculas hasta valores altos de temperaturas; lo mismo sucede con los iones negativos, retardándose la formación de átomos neutros y de sus iones positivos.
- Es bien sabido que en la atmósfera del Sol, la presencia de solamente un ión H⁻ por cada 10^7 o 10^8 átomos de H es suficiente para que el H⁻ se constituya en la principal fuente de opacidad. Las Figs. 2.12, 2.13 y 2.14 muestran que existen, respectivamente, altas proporciones de C₂ (relativo al C) y de H₂ (relativo al H) en las abundancias HdC y Solar, aún para temperaturas entre 5000 K y 6000 K. Por lo tanto, debería esperarse una importante formación de C₂ o H₂, respectivamente, al menos en las capas superficiales de las atmósferas con temperaturas efectivas entre 5500 K y 6000 K. La

formación de moléculas afectará la densidad de partículas en el medio, y/o podrá convertirse en una importante fuente de opacidad.

- Pueden existir los siguientes estados del H: H_2 , H_2^+ , H^- , H y H^+ . En un notable paralelismo, el C podrá existir como C_2 , C_2^+ , C^- , C, C^+ (y C^{++}). Las energías de disociación de las moléculas, de los iones negativos y de los átomo ionizados serán, respectivamente, para el C: 6.2 eV, +1.2 eV, 11.3 eV; y para el H: 4.5 eV, +0.75 eV, 13.6 eV. Por lo tanto no nos debería sorprender que como consecuencia de ello, y tal como lo evidencia comparativamente las Figs. 2.12, 2.13 y 2.14, el C mimetiza el comportamiento del H en una atmósfera solar. De tal forma, y tal como lo indicamos en relación con la liberación de electrones (ver apartado 3.1), el paralelismo es sólo cualitativo y no cuantitativo, ya que la diferencia se origina en los 0.7 g de H por gramo de material solar versus los 0.06 g de C por gramo de material HdC. En otras palabras: por cada gramo de material HdC, se encontrará una menor cantidad de C, en sus diferentes formas, que la existente para el H en una mezcla Solar.

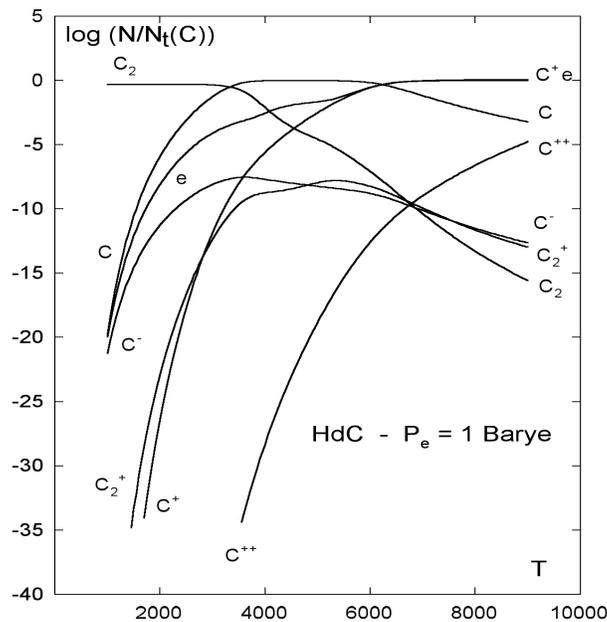


Fig. 2.12: Gráficos comparativos mostrando la abundancia relativa a la abundancia total de Carbono de especies neutra, iónicas y moleculares del Carbono, como también de la densidad electrónica, para una presión electrónica unitaria y una abundancia HdC.

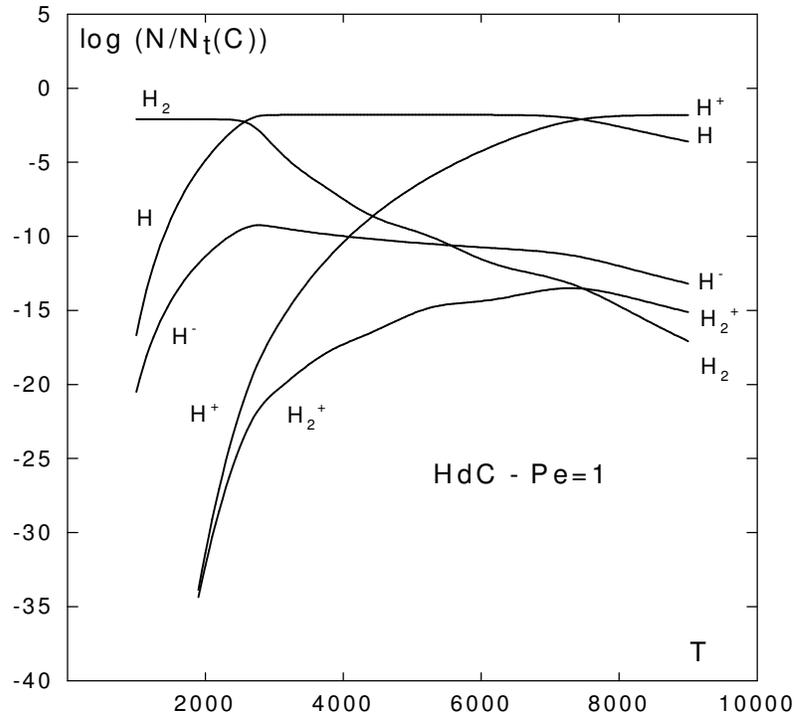


Fig. 2.13: Gráficos comparativos mostrando la abundancia relativa a la abundancia total de Carbono de especies neutra, iónicas y moleculares del Hidrógeno para una presión electrónica unitaria y una abundancia HdC.

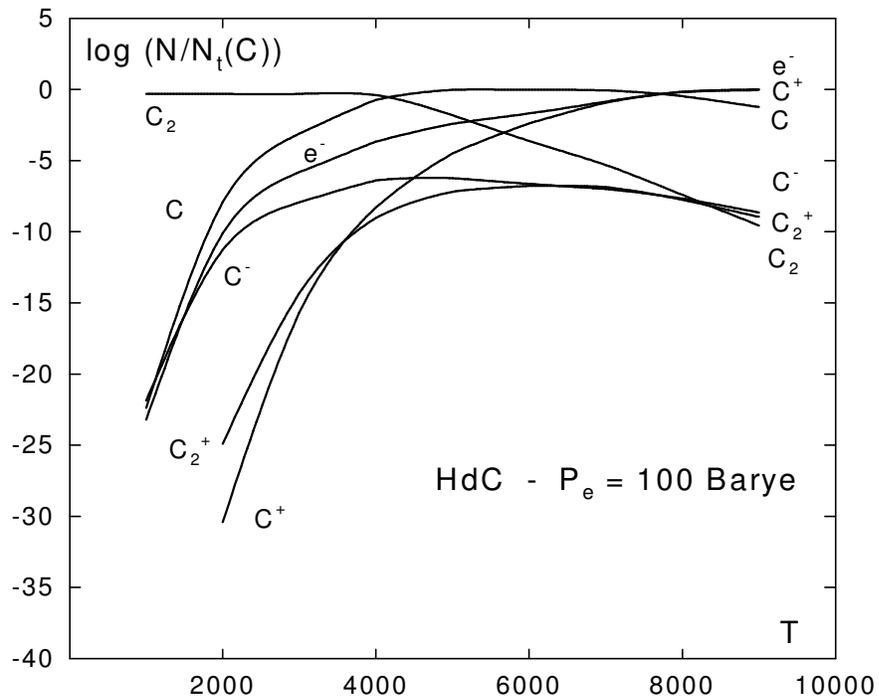


Fig. 2.14: Gráficos comparativos mostrando la abundancia relativa a la abundancia total de Carbono de especies neutra, iónicas y moleculares del Carbono, como también de la densidad electrónica.

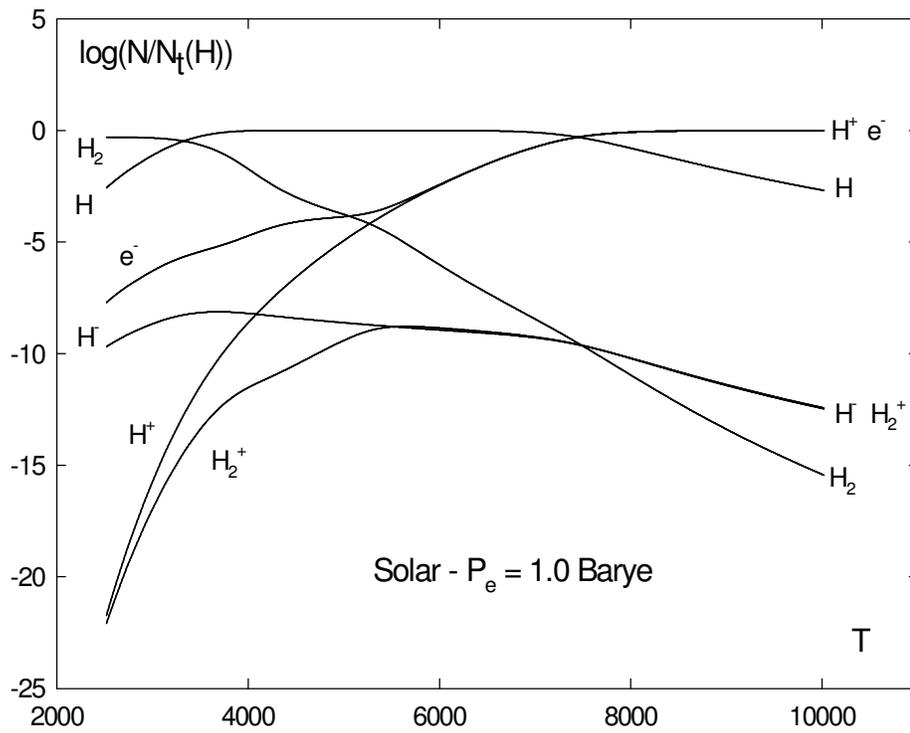


Fig. 2.15: Gráficos comparativos mostrando la abundancia relativa a la abundancia total de Hidrógeno de especies neutra, iónicas y moleculares del Hidrógeno, como también de la densidad electrónica, para una presión electrónica unitaria y una abundancia Solar.

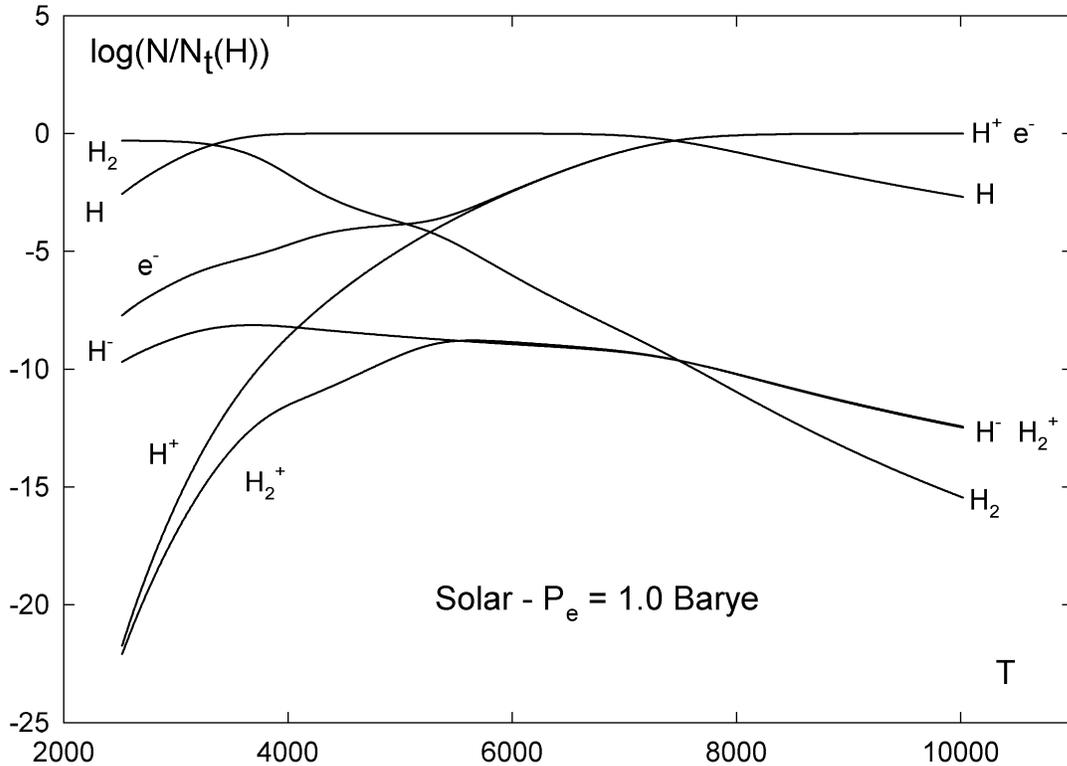


Fig. 2.16: Este gráfico muestra el número de electrones y de diferentes especies del H, normalizada al número total de átomos de C, para una $\log P_e = 0.0$ en una abundancia HdC.

Así, como dijimos antes, si para una dada temperatura, incrementamos la presión electrónica mientras permitimos la sola formación de iones negativos (H^- y C^-), se alcanza un valor límite para la presión electrónica correspondiente a una densidad infinita de materia (situación física inalcanzable). Si ahora incluimos la formación de moléculas (H_2 y/o C_2), no se alcanza la condición descrita aún para temperaturas relativamente bajas ($T=1000$ K) y presiones electrónicas relativamente altas ($P_e=10^4$); la razón es que prácticamente todos los átomos de H y/o de C se convertirán en moléculas (H_2 y/o C_2) y, aunque las densidades electrónicas por unidad de masa son extremadamente bajas, la cantidad de átomos libres disponibles para la formación de los iones negativos es aún menor; de tal manera, la materia no alcanza ningún punto crítico.

También puntualizamos que, debido a la extrema escasez del C por unidad de masa en la mezcla HdC de población II con relación a la del H en la Solar, el C mimetizará en forma cualitativa (y no cuantitativa) el comportamiento del H como formador de C_2 , C_2^+ y C^- .

4.8. DISCUSIÓN.

La formación de moléculas (H_2 , C_2 , etc.) puede ser importante aún cuando no se trabaje con atmósferas demasiado frías (Milone & Merlo, 1999). Con temperaturas efectivas del orden de la solar, o algo mayores, puede haber una cantidad importante de moléculas que se formen en las capas más superficiales. Esas moléculas afectan tanto a la radiación saliente (por su absorción), como así también al equilibrio poblacional de las especies presentes en el medio.

En lo que a absorción se refiere, y como lo veremos con mayor profundidad en el *Capítulo III*, resulta notable la importancia del ion H^+ , principalmente en el intervalo de temperaturas [4000,9000] K. Gran parte de la estructura fotosférica del Sol (y de estrellas similares) está determinada por él. Lo curioso es que, en estrellas de Población II, todavía es importante la absorción del H^+ en capas superficiales e intermedias; luego es superado por el Hidrógeno. En estrellas deficientes en Hidrógeno, el ion jugaría un papel secundario en las capas más superficiales, pero la absorción preponderante se debería al C, el Mg, el Al y el Si (Milone & Merlo, 1999).

5. CONCLUSIONES.

Cuando el C se convierte el segundo elemento más abundante después del H, resulta interesante conocer cómo el C toma el rol del H. En este aspecto, nuestro estudio permitió arribar a las siguientes conclusiones:

- La abundancia dominante de He (en la mezcla HdC), y del H ($N_H/N_{He} \approx 10$ en la abundancia Solar), determina los valores más bajos alcanzables en la relación $\log(P_g/P_e)$ vs $\log P_e$ en un caso y en otro (respectivamente 0.176 y 0.283) (Merlo & Milone, 2001).
- Para temperaturas relativamente altas ($T \geq 25200$ K), la densidad relativa de electrones a átomos es mayor en la mezcla HdC que en la Solar; para temperaturas intermedias, el H es el principal donante de electrones y la mezcla Solar es la que posee una mayor densidad relativa de electrones; para temperaturas relativamente bajas y/o presiones electrónicas suficientemente altas, la mezcla HdC es ligeramente más rica en metales fácilmente ionizables que la solar, causando que la primera tenga una densidad mayor en electrones libres (estos hechos están reflejados en las relaciones $\log P_g$ vs. $\log P_e$ de las diferentes composiciones químicas, con diferencias de hasta un orden de magnitud en temperaturas bajas e intermedias).
- Para $T \geq 25200$ K, y dentro del rango de $\log(P_e)$ analizado, las densidades electrónicas por unidad de masa son significativamente mayores en las mezclas solares y de población II que en la HdC; por el contrario, para bajas temperaturas y/o presiones electrónicas suficientemente altas, las densidades electrónicas por unidad de masa es ligeramente superior en la mezcla HdC que en la solar. De esto podremos inferir que para aquellos valores de temperaturas y presiones electrónicas que tengan a la dispersión Thomson como su principal fuente de opacidad, la mezcla HdC deberá ser menos opaca que la abundancia solar o de Población II; mientras que para temperaturas intermedias y bajas, a pesar de que las condiciones fueran propicias para la formación del ión C^- y para que éste sea una importante fuente de opacidad en la

mezcla HdC, el ión C⁻ nunca podrá alcanzar la importancia que tiene el ión H⁻ en la atmósfera solar debido a su pobre abundancia.

- Finalmente, para temperaturas intermedias y bajas, el C mimetiza en la mezcla HdC el comportamiento que tiene el H en la composición solar, tanto como donante de electrones, como formador de moléculas e iones negativos, como así también fuente de opacidad. Esta similitud, sin embargo, es solo cualitativa, no cuantitativa, puesto que la abundancia de C en la mezcla HdC es por lejos inferior a la del H en una composición Solar.

6. TRABAJOS PUBLICADOS.

Durante la realización de esta investigación, se hicieron las siguientes publicaciones:

- “Opacity errors in a model atmospheres”; Milone & Merlo (1994).
- “Ionization and molecular formation in a hydrogen-deficient carbon-rich mixture”; Merlo & Milone (2001).
- “Ionization and molecular formation in a HdC mixture of Population II”; Milone & Merlo (2002).

Resúmenes extensos:

- “Análisis de algunos elementos que intervienen en el cálculo de modelos de atmósferas estelares”; Merlo & Milone (1992) [reunión AAA, 1992].

Resúmenes:

- “Ionización en una atmósfera de carbono deficiente en hidrógeno”; Milone & Merlo (1998c) [reunión AAA, 1998].
- “Ionización y formación molecular en la atmósfera de UX Antliae”; Milone & Merlo (2001a) [X Reunión Latinoamericana de Astronomía, 2001].
- “Formación de moléculas en las atmósferas estelares”; Milone & Merlo (2001b) [X Reunión Latinoamericana de Astronomía, 2001].

Referencias

- Allen, C.W.: 1963, “*Astrophysical Quantities*”, (2nd edit., University of London, The Athlone Press).
- Allen, C.W.: 1976, “*Astrophysical Quantities*”, (3rd edit., University of London, The Athlone Press).
- Aller, L.H.: 1959, *Encyclopedia of Physics*, **51**, 343, ed. S. Fluggs (Berlin: Springer-Verlag).
- Aller, L.H.: 1960, “Interpretation of normal stellar spectra” in *Stellar & Stellar Systems*, **VI**, 232-259, ed. J.L. Greenstein (The University of Chicago Press).
- Anders, E. & N. Grevesse: 1989, *Geoch. et Cosmoch. Acta*, **53**, 197.
- Asplund, M., Gustaffson, B., Kiselman, D. & K. Eriksson: 1997, *Astron. Astrop.*, **318**, 521.
- Bidelman, W.P.: 1948, *Ap. J.*, **107**, 413.
- Bidelman, W.P.: 1952, *Ap. J.*, **116**, 227.
- Bidelman, W.P.: 1953, *Ap. J.*, **117**, 25.
- Bidelman, W.P.: 1956, *Vistas in Astronomy*, **2**, 1428.
- Bidelman, W.P.: 1979, *Mass Loss and Evolution of O-Type Stars*, eds. Conti, P.S. & de Loore, C.W.H., IAU Symposium N° 83 (Dordrecht-Bosotn-London, D. Reidel Publishing Company), 305.
- Clayton G.C.: 1996, *PASP*, **108**, 225.
- Cohen, E.R. & B.N. Taylor: 1991, *Physics Today*, **88**, BG 9.
- Erro, L.E.: 1940, *Harvard Bulletin*, 913.
- Gustaffson, B. & M. Asplund: 1996, Model atmospheres of cool hydrogen-deficient carbon stars, in *Hydrogen-Deficient Stars*, eds. Jeffery, C.S and Heber, U. (San Francisco, Astronomical Society of the Pacific), **96**, 27.
- Hill, P.W.: 1965, *M.N.R.A.S.*, **129**, 137.
- Hunger, K.: 1975, “*Properties and Problems of Helium Stars*”, in “Problems in Stellar Atmospheres and Envelopes”, edit. B. Baschek, W.H. Kegel & G. Traving, pp. 57-100, Springer-Verlag.
- Hunger, K., Schönberner, D. & Kameswara Rao, N. eds.: 1986, “*Hydrogen deficient stars and related objects*”, IAU Colloquium N° 87 (Dordrecht-Boston-London, D. Reidel Publishing Company).
- Kilkenny, D. & J.E. Westerhuys: 1990, *The Observatory*, **110**, 90.
- Klemola, A.R.: 1961, *Ap. J.*, **134**, 130.
- Kurucz, R.L.: 1979, *Ap.J. Supp. Ser.*, **40**, 1.
- Lambert, D.L., Gustaffson, B., Eriksson, K. & H. Himkle: 1986, *Ap.J. Supp. Ser.*, **62**, 373.
- Lambert, D.L. & N.K. Rao: 1994, *J. Astronomy & Astrophysics*, **15**, 47.
- Merlo, D.C.: 1992, Trabajo Especial de la Licenciatura en Astronomía. Director: Dr. Luis A. Milone, Famaf (UNC).
- Merlo, D.C. & L.A. Milone: 1992, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **37**, 28.
- Merlo, D.C. & L.A. Milone: 2003, *Astroph. Space Sci.*, **288**, 223.
- Mihalas, D.: 1967, *Methods in Computational Physics*, **7**, 1, Academic Press.
- Mihalas, D.: 1979, “*Stellar Atmospheres*”, 2nd edit., W.H. Freeman & Co.
- Milone, L.A., Minniti, E.R. & S. Paolantonio: 1990, *IBVS* 3505.
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1994, *Astroph. Space Sci.*, **220**, 235.
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998a, *Astroph. Space. Sci.*, **359**, 173.
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998b, *Trabajos de Astronomía Serie “A” N° 2/98*, Famaf (UNC).

-
- 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998c, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **42**, 29.
- 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1999, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **43**, 36.
- 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 2002a, Proceeding de la X Reunión Regional Latinaamericana de Astronomía, *Rev. Mex. Astr. Astrof.*, **14**, 123.
- 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 2002b, Proceeding de la X Reunión Regional Latinaamericana de Astronomía, *Rev. Mex. Astr. Astrof.*, **14**, 123.
- 📖 Minniti, E.R.: 1990, *IAU Circ.* 5058.
- 📖 Myerscough, V.P.: 1968, *Ap. J.*, **153**, 421.
- 📖 Myerscough, V.P. & M.R.C. McDowell: 1964, *M.N.R.A.S.*, **128**, 287.
- 📖 Pettit, E. & S.B. Nicholson: 1928, *Ap.J.*, **68**, 279.
- 📖 Pollard, K., Cottrell, P.L. & W.A. Larson: 1994, *M.N.R.A.S.*, **268**, 544.
- 📖 Ralston, A.: 1970, “*Introducción al Análisis Numérico*”, Edit. Limusa-Wiley S.A, p. 38.
- 📖 Rao, N.K. & D.L. Lambert: 1996, en “Hydrogen deficient stars”, *Astr. Soc. Pacif. Conf. Ser.*, **96**, 43.
- 📖 Rosa, A.: 1948, *Z. f. Astroph.*, **25**, 1.
- 📖 Russell, H.N.: 1934, *Ap. J.*, **79**, 317.
- 📖 Sauval, A.J. & J.B. Tatum (ST): 1984, *Ap. J. Suppl. Ser.*, **56**, 193.
- 📖 Scholz, M. & T. Tsuji: 1984, *Astron. Astrop.*, **130**, 11.
- 📖 Unsöld, A.: 1948, *Zs. für. Ap.*, **25**, 1.
- 📖 Vardya, M.S.: 1961, *Ap. J.*, **133**, 107.
- 📖 Warner, B.: 1967, *M.N.R.A.S.*, **137**, 119.
- 📖 Wilson, O.C.: 1961, *Ap. J.*, **133**, 457.
- 📖 Withbroe, G.L.: 1971, NBS SP-353, p. 127.

Apéndice 2.1

IMPORTANCIA DEL VALOR CORRECTO DE LAS FUNCIONES DE PARTICIÓN ATÓMICAS

En las Tablas A1.1 y A1.2 mostramos los valores que toma la relación $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log(P_e)$, en una mezcla cuya composición es –según Kurucz¹ (1979)– representativa de la Solar (Withbroe², 1971). Los valores de la Tabla A1.1 fueron obtenidos utilizando para el H, He, C, N, O y Ne –que son los elementos más abundantes– los valores preciso de las funciones de partición atómicas (FsPAs) que corresponden a cada una de las condiciones físicas allí indicadas; para los restantes elementos se tomaron valores constantes de las FsPAs (lo que estaría justificado por su escasa abundancia y, por lo tanto, su muy pequeña contribución a la P_e). En la Tabla A1.2, el cálculo se ha repetido utilizando valores constantes de las FPAs para todos los elementos.

Tal como se puede observar, los valores de una y otra tabla son coincidentes, apareciendo diferencias de 0.001 en valores de $T < 10080$ K y $\log(P_e) > 3.0$. Apoyándonos en este resultado, para el cálculo de nuestros modelos de atmósferas **hemos utilizado valores constantes para las FsPAs de todos los elementos**. De esta forma se reduce el tiempo de cálculo y el espacio de memoria necesario para almacenar la información sobre los niveles de energía de los átomos.

En consecuencia, uno puede preguntarse: *¿es necesario, en alguna circunstancia, calcular de manera precisa FsPAs?* La respuesta es afirmativa. En efecto, pensemos en una línea espectral débil, de un elemento fuertemente ionizado, en una región de la atmósfera en la que $\log(P_e)$ toma valores importantes; claramente, el número de átomos activos en la formación de la línea es pequeño, y el valor de la correspondiente FsPAs afecta (en forma porcentual) de manera importante a ese número.

¹ Kurucz, R.L., 1979, *Ap.J.Suppl. Ser.*, **40**, 1.

² Withbroe, G.L., 1971, *NBS SP-353*, p. 157.

TABLA A1.1
Valores de $\log(P_g/P_e)$ para distintos valores de Temperatura y Presiones Electrónicas.

		T [K]										
		72000	50400	33600	25200	16800	12600	10080	8400	7200	6300	5600
$\log(P_e)$	-2.0	0.280	0.280	0.280	0.281	0.301	0.301	0.315	0.325	0.330	0.464	1.423
	-1.5	0.280	0.289	0.280	0.282	0.301	0.301	0.320	0.325	0.341	0.666	1.891
	-1.0	0.280	0.280	0.280	0.284	0.301	0.302	0.323	0.326	0.373	1.004	2.368
	-0.5	0.280	0.280	0.281	0.289	0.301	0.303	0.324	0.329	0.463	1.434	2.836
	0.0	0.280	0.280	0.281	0.294	0.301	0.306	0.325	0.340	0.664	1.904	3.268
	0.5	0.280	0.280	0.281	0.298	0.301	0.312	0.326	0.370	1.000	2.384	3.616
	1.0	0.280	0.280	0.281	0.300	0.301	0.318	0.329	0.456	1.430	2.855	3.850
	1.5	0.280	0.280	0.282	0.300	0.301	0.322	0.338	0.649	1.901	3.289	4.013
	2.0	0.280	0.280	0.284	0.301	0.302	0.325	0.365	0.979	2.383	3.646	4.188
	2.5	0.280	0.281	0.288	0.301	0.304	0.328	0.441	1.406	2.857	3.917	4.431
	3.0	0.280	0.281	0.294	0.301	0.309	0.335	0.620	1.877	3.299	4.161	4.750
	3.5	0.280	0.281	0.298	0.301	0.316	0.357	0.935	2.360	3.685	4.451	5.107
	4.0	0.280	0.281	0.300	0.301	0.323	0.419	1.354	2.839	4.032	4.803	5.485
	4.5	0.281	0.281	0.301	0.301	0.330	0.573	1.823	3.296	4.391	5.193	5.901
	5.0	0.281	0.283	0.301	0.303	0.346	0.860	2.307	3.732	4.790	5.616	6.356
	5.5	0.281	0.287	0.301	0.306	0.391	1.263	2.792	4.167	5.223	6.074	6.836
6.0	0.281	0.292	0.302	0.313	0.507	1.726	3.271	4.619	5.686	6.555	7.328	

TABLA A1.2
Valores de $\log(P_g/P_e)$ para distintos valores de Temperatura y Presiones Electrónicas.

		T [K]										
		72000	50400	33600	25200	16800	12600	10080	8400	7200	6300	5600
$\log(P_e)$	-2.0	0.280	0.280	0.280	0.281	0.301	0.301	0.315	0.325	0.330	0.464	1.422
	-1.5	0.280	0.280	0.280	0.282	0.301	0.301	0.320	0.325	0.341	0.666	1.890
	-1.0	0.280	0.280	0.280	0.284	0.301	0.302	0.323	0.326	0.373	1.003	2.367
	-0.5	0.280	0.280	0.281	0.289	0.301	0.303	0.324	0.329	0.463	1.433	2.835
	0.0	0.280	0.280	0.281	0.294	0.301	0.306	0.325	0.340	0.663	1.903	3.267
	0.5	0.280	0.280	0.281	0.298	0.301	0.312	0.326	0.370	0.999	2.383	3.616
	1.0	0.280	0.280	0.281	0.300	0.301	0.318	0.329	0.455	1.429	2.854	3.850
	1.5	0.280	0.280	0.282	0.300	0.301	0.322	0.338	0.649	1.900	3.288	4.013
	2.0	0.280	0.280	0.284	0.301	0.302	0.325	0.365	0.978	2.382	3.645	4.188
	2.5	0.280	0.280	0.288	0.301	0.304	0.328	0.441	1.405	2.856	3.916	4.431
	3.0	0.280	0.281	0.294	0.301	0.309	0.335	0.619	1.876	3.298	4.161	4.750
	3.5	0.280	0.281	0.298	0.301	0.316	0.357	0.934	2.359	3.685	4.451	5.107
	4.0	0.280	0.281	0.300	0.301	0.323	0.419	1.353	2.837	4.031	4.803	5.485
	4.5	0.280	0.281	0.300	0.301	0.330	0.572	1.821	3.295	4.391	5.193	5.901
	5.0	0.281	0.283	0.301	0.303	0.346	0.859	2.306	3.731	4.790	5.616	6.356
	5.5	0.281	0.287	0.301	0.306	0.390	1.262	2.791	4.166	5.223	6.074	6.836
6.0	0.281	0.292	0.302	0.313	0.505	1.725	3.270	4.619	5.686	6.555	7.328	

Apéndice 2.2

ESTUDIO DE LA RELACIÓN P_g - P_e - T

A2.1. GENERALIDADES.

El análisis de la relación P_g - P_e - T , y en particular la relación $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$, es interesante ya que, entre otras consideraciones, nos brinda la densidad relativa de los átomos (en todas las especies consideradas en sus distintos estados de ionización) respecto a los electrones libres (n_0/n_{e+1}), y por lo tanto, especifica en qué regiones de la atmósfera los átomos se recombinan o se ionizan. Notemos que si los valores de $\log(P_g/P_e)$ se incrementan cuando $\log P_e$ también lo hace, implica que existen átomos que se están recombinando en el medio, mientras que el caso opuesto significará que se está llevando a cabo procesos de ionización en el mismo.

Cuando se resuelve numéricamente la ecuación del equilibrio hidrostático, para obtener la presión gaseosa, debemos comenzar el proceso dando un valor inicial de la presión gaseosa en una profundidad óptica correspondiente a la capa atmosférica inicial de integración. Para ello necesitaremos el valor de la presión electrónica correspondiente a la presión gaseosa inicial; por lo tanto, habrá que resolver una expresión no lineal del tipo $P_e = f^{-1}(P_g, T, Q)$, donde P_g es la presión gaseosa, T es la temperatura y Q simboliza la dependencia con la composición química. También surge necesaria la resolución de tal relación cuando se desea evaluar la opacidad, tanto en la integración numérica de un modelo como así también en el estudio de la absorción continua en diferentes situaciones astrofísicas.

El hecho de que se busque evaluar una función inversa procede de que se conoce explícitamente la relación funcional $P_g = f(P_e, T, Q)$, pero a la hora de la integración numérica (por ejemplo), resulta conveniente utilizar a P_g como variable de integración (e independiente) y por ello debe invertirse esta última relación.

El número de electrones generados en el material fotosférico dependerá de la composición química de la misma, debido a los procesos de ionización en el medio, los cuales estarán regidos por la temperatura.

Entonces, es fácil comprender que existe una interrelación física entre las presiones gaseosas y electrónica con la temperatura, y que a partir del conocimiento preciso de sus valores y la interpretación correcta de los mismos podremos conocer al detalle el estado de ionización de una atmósfera.

A2.2. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO.

Aunque la solución de la relación:

$$P_g = f(P_e, T, Q) \quad (\text{A2.1})$$

puede ser completamente resuelta cuando se especifican los procesos de ionización y de formación molecular, la relación inversa $P_e = f^{-1}(P_g, T, Q)$ debe ser resuelta en forma iterativa. Aquí se describirá brevemente una aproximación diseñada que trabaja en forma eficiente y precisa, que además muestra una convergencia rápida.

Primeramente, notemos que dado un valor de P_g , existe físicamente un valor límite superior para P_e :

$$P_e < P_g \quad (\text{A2.2})$$

Finalmente, acotamos que se encontró muy útil emplear variables logarítmicas en la integración numérica; por lo tanto, se sugiere utilizar $\log P_g$ y $\log P_e$ en vez de P_g y P_e , respectivamente.

El método comienza adoptando inicialmente el valor $\log P_e = \log P_g$ (llamando a este valor $(\log P_e)_1$) y $(\log P_e)_2 = (\log P_e)_1 - 1$ (en general, $(\log P_e)_{i+1} = (\log P_e)_i - 1$), se calcula el valor de $(\log P_g)_i$ mediante la expresión dada por (A2.1), hasta que se satisfaga la condición:

$$(\log P_g)_{j+1} \leq \log P_g \leq (\log P_g)_j \quad (\text{A2.3})$$

Es evidente que el valor de $\log P_e$ buscado se encuentra acotado de la siguiente forma:

$$(\log P_e)_j - 1 = (\log P_e)_{j+1} \leq \log P_e < (\log P_e)_j \quad (\text{A2.4})$$

A partir del valor de $(\log P_e)_j$, acotamos aun más la búsqueda eligiendo ahora $(\log P_e)_{j+1} = (\log P_e)_j - 0.1$, continuándose el proceso iterativo hasta que la condición (A2.3) se satisfaga completamente, ahora para un valor k -ésimo que cumpla la condición:

$$(\log P_e)_k - 0.1 = (\log P_e)_{k+1} \leq \log P_e < (\log P_e)_k \quad (\text{A2.5})$$

Finalmente, se incorpora un valor equidistante $(\log P_e)_{k+1/2} = (\log P_e)_k - 0.05$ y se calcula el correspondiente valor $(\log P_g)_{k+1/2}$. Posteriormente, se ajusta una parábola de segundo grado con los pares de puntos $((\log P_g)_i; (\log P_e)_i)$, con $i = k, k+1/2, k+1$, obteniéndose el valor de $\log P_e$ a partir del valor de $\log P_g$ deseado, reemplazando este último valor en la expresión interpolatoria de regresión hallada.

Este método está descrito con más detalle en Merlo (1992)¹ y en Milone & Merlo (1994)².

¹ Merlo, D.C.: 1992. *Trabajo Especial de la Licenciatura en Astronomía*. Director: Dr. Luis A. Milone, FaMAF (U.N.C.), pp.66-70.

² Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1994. *Astroph. Space Sci.*, **220**, 235.

Usualmente, este procedimiento conduce a errores relativos menores a 2×10^{-6} y 1×10^{-5} en $\log P_e$ y P_e , respectivamente. Por ejemplo, en un plasma de Hidrógeno puro a una temperatura $T = 8000$ K, seleccionando un valor de la presión gaseosa $P_g = 100$ Bar, luego de 11 iteraciones el método conduce a un valor de la presión electrónica $P_e = 18.1523 \text{ dy/cm}^2$, con un error menor a 2×10^{-4} (Milone & Merlo, 1994, *op.cit.*). Si la temperatura se reduce a un valor de $T = 5000$ K, y la presión gaseosa adopta un valor de $P_g = 0.2 \text{ bar}$, se obtiene un valor para la presión electrónica de $P_e = 1.50864 \times 10^{-3} \text{ dy/cm}^2$, con un error menor a 3×10^{-9} , en donde sólo fue necesario realizar 7 iteraciones (Milone & Merlo, 1994, *op.cit.*). Estos resultados muestra claramente lo rápido y preciso que constituye el método.

Capítulo III

ESTUDIO DE LOS ABSORBEDORES CONTINUOS

1. INTRODUCCIÓN.

Como paso previo a la resolución de la ecuación del transporte en un modelo de atmósfera estelar, la cual describe el flujo de la radiación a través de la misma, analizamos el coeficiente de absorción continua. La dependencia con la longitud de onda de este coeficiente configura el espectro continuo emitido por la estrella. Para ello debemos conocer con suficiente precisión el coeficiente de absorción másico y de esta forma poder realizar, con posterioridad, un ajuste del espectro deducido a partir del modelo calculado con el espectro real de la estrella.

El coeficiente de absorción continua es la suma de la absorción resultante de muchos procesos físicos, los cuales *grosso modo* pueden subdividirse en dos categorías, los procesos de ionización en donde ocurren transiciones ligado-libre y las transiciones libre-libre en donde una carga pasa cerca de otra y es acelerada debido al encuentro cercano con otra carga. Notemos que existe un tercer fenómeno físico que son las transiciones ligado-ligado las cuales originan líneas espectrales, que no se incluye en la absorción continua pero se superponen al continuo estelar, y si existe una superposición de líneas (bandas), actuarían como un proceso de absorción continua.

Generalmente, a la hora de efectuar el cálculo de coeficientes de absorción continua (utilizando modelos atómicos simples), se utiliza los resultados deducidos de la teoría fenomenológica de Bohr. Sabemos, asimismo, que la realidad atómica está mejor descrita a través de la mecánica cuántica, pero no obstante, existen ciertos resultados de la teoría clásica que pueden ser convertidos a los de la teoría cuántica a través de un factor multiplicativo. Éstos son los llamados “factores de Gaunt”, que aparecen –entre otros casos– en las absorciones ligado-libre y libre-libre del átomo de Hidrógeno, y que en este capítulo analizamos minuciosamente, estudiando diversas aproximaciones de interpolación como así también valores precisos calculados por diversos autores, y sus influencias en el resultado.

Los programas de cálculo de modelos de atmósferas estelares actuales, los cuales fueron escritos originalmente cuando los ordenadores tenían poca capacidad de almacenamiento y eran extremadamente lentos, pueden aún utilizar las aproximaciones utilizadas en aquella época para, entre otras cosas, calcular opacidades. No hace falta recordar el gran avance que se ha logrado en pocas décadas en la tecnología computacional, pero a pesar de ello, aquellas aproximaciones, que han subsistido en el tiempo, pueden introducir errores (Kurucz, 1994). Es por ello que en este capítulo analizamos el procedimiento de cálculo introducido en la evaluación numérica de la opacidad debida a los átomos hidrogenoides, esto es, especies atómicas que tienen un solo electrón ligado al núcleo, el cual está constituido por Z protones, siendo Z el número atómico.

En una estrella normal, la principal componente a la opacidad continua, en alguna forma u otra, es debida al Hidrógeno, debido a su gran abundancia respecto a los otros elementos químicos de la atmósfera. Es por ello que desarrollaremos aquí un análisis exhaustivo principalmente de la absorción ligado-libre de esta especie atómica.

Posteriormente, se considerarán absorciones por H^- , H_2^- , H_2^+ , He, C, Mg, Al y Si, como así también dispersiones producidas por el H, H_2 y He I, y el scattering Thomson de los electrones libres. Por otro lado, también se analizan los resultados en un medio en el que el He es el elemento más abundante, siguiéndole el C, en tanto el H es muy deficiente; este escenario corresponde a las llamadas estrellas de carbono deficientes en hidrógeno (“HdC stars”). Los resultados se comparan con lo que ocurre en una atmósfera de composición solar y en otra deficiente en metales (estrellas de Población II). Las condiciones físicas corresponden aproximadamente a las que se encuentran en las atmósferas estelares: $2520 \text{ K} \leq T \leq 50400$ y $-2.0 \leq \log P_e \leq 5.0$.

2. ABSORCIÓN CONTINUA DEL HIDRÓGENO.

2.1. GENERALIDADES.

Se llevó a cabo el cálculo del coeficiente de absorción continua para cada átomo hidrogenoide en el estado de ionización Z y para un número predeterminado de niveles, utilizando la idea de Unsöld (1938) de considerar la contribución de los niveles más excitados mediante una integral. Los autores no se ponen de acuerdo y sugieren diferentes cantidades de niveles a considerar en la sumatoria discreta de las contribuciones a las absorciones, de lo que en cierta forma dependerá el resultado al cual se arrije y la precisión obtenida en los mismos. Uno de nuestros objetivos fue determinar, como función de λ y T , cuáles serán los valores de este valor límite de n (de aquí en más $n_{\text{límite}}$), de tal modo que asegure una precisión mejor que el 0.1% en los resultados.

2.2. DEFINICIONES Y EXPRESIONES DE CÁLCULO.

El coeficiente de absorción continua por ión hidrogenico en el estado de ionización Z viene dado por la siguiente relación:

$$\kappa(\lambda, T) = \kappa_{bf} + \kappa_{ff} = cte. \lambda^3 \left(\frac{2}{u_z(T)} \sum_{n=n_0}^{\infty} \frac{g_{bf}(n)}{n^3} 10^{-\theta \chi_n} + g_{ff} \frac{\log e}{2\theta I} 10^{-\theta I} \right) \quad (3.1)$$

donde $u_z(T)$ es la función de partición del ión hidrogenoide en el estado de ionización Z , n_0 es el número cuántico principal del primer nivel cuyo potencial de ionización es menor que la energía de un fotón de longitud de onda λ (y puede realizarse la absorción), I es el potencial de ionización del ion, g_{bf} y g_{ff} son, respectivamente, los factores de Gaunt ligado-libre y libre-libre de los niveles (ligados o continuos) involucrados, y χ_n es la energía de excitación del n -ésimo nivel.

Como se advierte de la ecuación (3.1), dos elementos que intervienen en la misma son, por un lado, los factores de Gaunt ligado-libre y libre-libre, y por el otro, la cantidad de niveles involucradas en la sumatoria. Por lo tanto, y previo al cálculo de la absorción, realizamos un análisis en detalle de los mismos.

2.2.1. Factores de Gaunt

2.2.1.1. Generalidades.

Un punto importante, el cual debe ser analizado cuidadosamente en los actuales programas de modelos de atmósferas, es el relacionado con el cálculo de los factores de Gaunt. Recordemos que las derivaciones de la mecánica cuántica realizadas por Gaunt (1930) condujeron a expresiones muy similares a las que se obtuvieran utilizando la teoría de Bohr, por las que introdujo un factor de corrección en las absorciones ligado-libre y libre-libre para adecuarlas a los resultados cuánticos (este factor oscila alrededor del valor 1).

En este punto, lo que realizamos fue analizar las distintas expresiones de interpolación de diversos autores con valores tabulados, los cuales responden a cálculos cuánticos precisos, buscando seleccionar las que proveen mejores resultados respecto a estos últimos, dada la practicidad que significa en los actuales algoritmos de cálculos introducir expresiones analíticas polinomiales. Evidentemente, en casos de que no se disponga de una gran computadora o si se está calculando modelos preliminares, merece especial atención la representación de algunos parámetros, y analizar si la misma es suficientemente precisa.

La tendencia actual en los programas de cálculo de modelos actuales de atmósferas estelares (y quizás de otras regiones estelares) es precisamente trabajar con ajustes polinomiales basándose en tablas originales (Kurucz, 1994), pero si la computadora empleada para el cálculo no es demasiado rápida o no tiene la suficiente capacidad de memoria, la representación analítica de algunos parámetros (entre ellos los factores de Gaunt) merece el análisis detallado y objetivo.

2.2.1.2. Tablas y Expresiones de Interpolación.

Karzas & Latter (KL) (1961) realizaron cálculos de los factores de Gaunt ligado-libre y libre-libre promediados térmicamente; en su trabajo, sus resultados son presentados en forma de tablas (factor de Gaunt ligado-libre) y gráficos (factores de Gaunt libre-libre). Estos cálculos pueden considerarse precisos, ya que fueron obtenidos mediante técnicas precisas de la Mecánica Cuántica.

Por otra parte, y previamente, Menzel & Pekeris (MP) (1935) obtuvieron expresiones asintóticas de los factores de Gaunt ligado-libre y libre-libre, expresiones que fueron condensadas por Gray (1976, 1992). Éstas son las siguientes:

$$g_n = 1 - 0.3456 \cdot (\lambda R)^{-1/3} \cdot \left(\frac{\lambda R}{n^2} - \frac{1}{2} \right)$$

$$g_f = 1 + 0.3456 \cdot (\lambda R)^{-1/3} \cdot \left(\frac{\lambda kT}{hc} + \frac{1}{2} \right) = 1 + 0.3456 \cdot (\lambda R)^{-1/3} \cdot \left(\frac{\log e}{\theta \chi_\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.2)$$

donde g_n y g_f son, respectivamente, los factores de Gaunt ligado-libre y libre-libre; λ , la longitud de onda en Ångström; R es la constante de Rydberg, n es el número cuántico principal, k es la constante de Boltzmann, T es la temperatura, h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz, e es la base de los logaritmos naturales, θ es la función temperatura ($\theta = 5040/T$) y χ_λ es la energía del fotón ($\chi_\lambda = h\nu = 1.2398 \times 10^4 / \lambda[\text{Å}]$).

Gingerich (1964, 1969), por su parte, también brinda expresiones de interpolación para los factores de Gaunt, las cuales también son explicitadas por Mihalas (1967) y Kurucz (1970). Cabe mencionar que Gingerich proporciona sendas expresiones ligeramente distintas en los factores de Gaunt, por ello cuando nos refiramos a la primera expresión (Gingerich, 1964) la denotamos como G1, mientras que para la segunda (Gingerich, 1969) la indicamos como G2. Estas relaciones las resumimos a continuación:

- Factores de Gaunt ligado-libre:

$$g_{bf}(m, x) = a_m + \frac{b_m}{x} + \frac{c_m}{x^2} \quad (3.3)$$

con $x = \lambda^{-1}$ (λ en micrones) y los coeficientes para los seis primeros niveles vienen dados por la siguiente Tabla 3.1:

TABLA 3.1
Coeficientes de la aproximación polinomial de los factores de Gaunt ligado-libre.

n	a_n	b_n	c_n
1	0.9916	0.09068	-25.24
2	1.105	-0.7922	0.4356
3	1.101	-0.3290	0.1152
4	1.101	-0.1923	0.0511
5	1.102	-0.1304	0.02638
6	1.0986	-0.0902	0.01367

En este ajuste, los factores de Gaunt para valores de $m \geq 8$ pueden ser tomados igual a la unidad.

- Factores de Gaunt libre-libre:

G1: $T < 20000 \text{ K}$

$$g_{ff}(x, \theta) = 1.084 + \frac{0.0188}{\theta} + \frac{(0.00161 + \frac{0.02661}{\theta})}{x} - \frac{(0.0192 - \frac{0.03889}{\theta} + \frac{0.02833}{\theta^2} - \frac{0.007828}{\theta^3} + \frac{0.0007304}{\theta^4})}{x^2} \quad (3.4)$$

con $x = \lambda^{-1}$ (λ en micrones) y $\theta = 5040 / T$.

G2: $T \geq 20000 \text{ K}$

$$g_{ff}(\lambda, T) = f_1(T) + \lambda(f_2(T) + \lambda f_3(T)) \quad (3.5)$$

con λ en Ångström y las $f_i(T)$ ($i=1..3$) dadas por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
f_1(T) &= 1.0828 + 3.865 \times 10^{-6} T \\
f_2(T) &= 7.564 \times 10^{-7} + (4.92 \times 10^{-10} - 2.482 \times 10^{-15} T) T \\
f_3(T) &= 5.326 \times 10^{-12} + (-3.904 \times 10^{-15} + 1.879 \times 10^{-20} T) T
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Más recientemente, Hummer (H) (1988) utilizó aproximaciones de Chebyshev de grado 10 para realizar una doble interpolación en longitud de onda (λ) y temperatura (T), y obtener así representaciones precisas de los factores de Gaunt libre-libre. Esta expansión fue obtenida a partir de los valores originales de KL, de los cuales se obtuvo los 88 coeficientes necesarios mediante ajuste, siendo los errores del mismo menores del 0.7%, en el dominio $-4.0 \leq \log u \leq 1.5$ y $-3.0 \leq \log \gamma^2 \leq 3.0$, donde $u = h\nu / kT$ y $\gamma^2 = Z^2 R / kT$, teniendo las constantes el significado usual.

La expansión bidimensional utilizada por este autor es la siguiente, la cual fue obtenida siguiendo el procedimiento descrito por Clenshaw (1961):

$$g_{ff}(\gamma^2, u) = \sum_{j=0}^n {}' C_j(\gamma^2) T_j(x_u) \tag{3.7}$$

donde el símbolo primado significa que el primer término de la suma debe ser dividido por 2, y además:

$$x_u = \frac{2 \log u - 2.5}{5.5} ; C_j(\gamma^2) = \sum_{i=0}^m {}' D_{i,j} T_i(x_g) ; x_g = \frac{\log \gamma^2}{3} \tag{3.8}$$

y los coeficientes $D_{i,j}$ se encuentran tabulados (para $i = 0..10$ y $j = 0..7$) en Hummer (1988, p. 482).

2.2.1.3. Estudio de las Expresiones de Interpolación.

Respecto a los valores de los factores de Gaunt ligado-libre, la aproximación de Gingerich para $n = 1, 2, \dots, 6$ es muy buena, excepto para las longitudes de onda aproximadamente menores que 100 \AA donde los valores de KL decrecen monótonamente con la longitud de onda, obteniéndose desviaciones mucho menores al 1% respecto a los de KL (considerados como correctos). En la Fig. 3.1 se muestra esta comparación para valores de $n = 1, 2$ y 3 .

Para $n \geq 6$, la aproximación de MP es buena para rangos de longitud de onda de interés, esto es $\lambda > 10000 \text{ \AA}$, con un error menor al 1%. En cambio para longitudes de onda muy cortas es necesario utilizar los valores de KL.

Para los valores de los factores de Gaunt libre-libre, se obtuvieron que para temperaturas menores que 20000 K, el acuerdo entre las expresiones G1 y las de H es buena, obteniéndose desviaciones menores al 2%. Sin embargo, para temperaturas superiores a los 30000 K, la aproximación G1 es realmente pobre y es necesario recurrir a la aproximación G2; no obstante, para temperaturas menores que 20000 K y longitudes de onda menores que los 90000 \AA , las expresiones G1 son ligeramente más precisas que las G2.

Pero si son requeridos valores numéricos con precisiones menores al 1%, será necesario utilizar la fórmula de interpolación de H.

2.2.1.4. Comentarios

De nuestro análisis se desprende que, para los factores de Gaunt ligado-libre, la aproximación de G es buena; pero para números cuánticos principales altos ($n > 6$), es necesario acudir a otras aproximaciones: por ejemplo, la expresión asintótica de MP es muy precisa para $n = 6$. En el cálculo de absorción continua sugerimos, entonces, utilizar esta receta, es decir, la aproximación de G para los 6 primeros niveles cuánticos y para los restantes MP; así se lograrán errores menores al 1% (Milone & Merlo, 1994). No obstante, si se buscara precisiones más elevadas para todas las longitudes de onda, deberían utilizarse los valores tabulados de KL.

Del estudio llevado a cabo para los factores de Gaunt libre-libre podemos decir que, para temperaturas menores a los 20000 K, si bien existe un buen acuerdo entre los resultados de los autores analizados (Merlo & Milone, 1992), la aproximación G1 es muy útil; aunque si es posible una ligera degradación en el ajuste, podría utilizarse la aproximación G2 en todo el rango de temperaturas. No obstante, si la contribución libre-libre del coeficiente de absorción continua es importante, y se busca obtener una precisión mejor que el 1%, es recomendable utilizar la aproximación de H para los factores de Gaunt, aunque requiera mayor tiempo de cálculo numérico (Milone & Merlo, 1994).

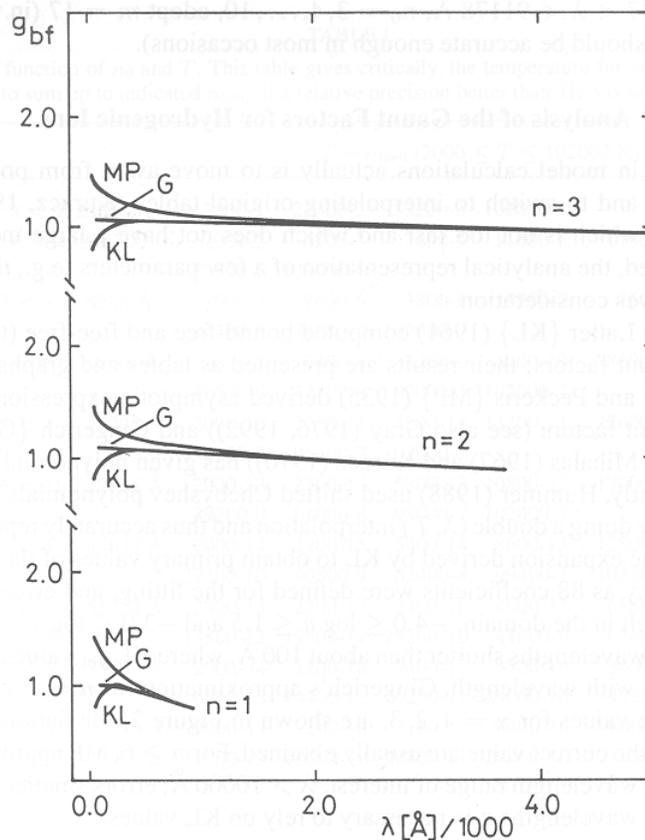


Fig. 3.1: Comparación de los factores de Gaunt ligado-libre (g_{bf}) entre los valores de Karzas & Latter (1961) (aproximados mediante trazo continuo) con las fórmulas de Menzel & Pekeris (1935) y de Gingerich (1964), para los tres primeros números cuánticos principales. (Extraído de Milone & Merlo (1994, p. 240)).

2.2.2. Número de Niveles Ligados a Considerar

2.2.2.1. Generalidades.

Unsöld (1938) estableció un procedimiento en que aproxima la relación (3.1) mediante una suma discreta de contribuciones de niveles (de n_0 hasta m), evaluándose el resto de las contribuciones mediante una integral de solución sencilla. Por lo tanto:

$$\kappa(\lambda, T) \approx \kappa(\lambda, T, m) = cte. \lambda^3 \left\{ \frac{2}{u_z(T)} \left[\sum_{n_0}^m \frac{g_{bf}(n)}{n^3} 10^{-\theta \chi_n} + \frac{\log e}{2\theta I} g_{bf} (10^{-\chi_{m+1}\theta} - 10^{-1\theta}) \right] + \frac{\log e}{2\theta I} g_{ff} 10^{-1\theta} \right\} \quad (3.9)$$

No existe un criterio único para fijar el valor de m en la expresión (3.9), es decir, el nivel a partir del cual cortar la serie y aproximar las contribuciones de los niveles ligados restantes por una integral. En este sentido Mihalas (1967) sugiere considerar entre 10 y 12 niveles ligados; en cambio Gray (1976, 1992) solo 3 niveles (es decir, de n_0 hasta n_0+2); mientras que Kurucz (1970, 1994) 8 estados ligados.

Por lo tanto, teniendo presente que nuestro estudio estaba dirigido hacia el análisis de la dependencia con m del valor de $\kappa(\lambda, T, m)$, introducimos un parámetro Δ_m que midiese la variación gradual relativa del coeficiente de absorción a medida que considerábamos una mayor cantidad de niveles discretos en la sumatoria; el mismo lo definimos de la siguiente forma:

$$\Delta_m = ABS \frac{[\kappa(\lambda, T, m+1) - \kappa(\lambda, T, m)]}{\kappa(\lambda, T, m)} \quad (3.10)$$

Debemos hacer notar que en todos los cálculos se utilizó la aproximación: $u_z(T) \approx 2$.

Entonces, para cada par de valores (λ, T) , se obtuvo un valor m , al cual llamamos $n_{\text{límite}}$ (o n_{lim} para abreviar), de tal manera que siempre se cumpliese: $\forall m \geq n_{\text{lim}}, \Delta_m < 0.001$.

Notemos que Δ_m será una función de λ a través de la dependencia de ésta con g_{bf} y g_{ff} , y también debido a que n_0 varía escalonadamente con la longitud de onda, mediante las series espectrales involucradas: $\lambda < 912 \text{ \AA}$, $n_0 = 1$; $912 \text{ \AA} < \lambda < 3647 \text{ \AA}$, $n_0 = 2$; etc. Sin embargo, y respecto de la primera dependencia con λ , encontramos que n_{lim} es casi independiente de las representaciones adoptadas para g_{bf} y g_{ff} , esto es, las aproximaciones de Menzel y Pekeris (1935), de Gingerich (1964, 1969), o la unitaria. Consecuentemente, resultó ventajoso en este análisis adoptar la última aproximación ($g_{bf} = g_{ff} = 1$).

2.2.2.2. Resultados Obtenidos.

Algunos resultados se muestran en la Figura 3.2, en donde se utilizó la aproximación de Menzel & Pekeris (1935) para los factores de Gaunt. Del gráfico podemos ver, por ejemplo, que para $\lambda = 5000 \text{ \AA}$ y $T = 2000 \text{ K}$, un valor de $\Delta < 0.001$ es alcanzable sumando solamente dos términos ($n_0 = 3$, $n_{\text{lim}} = 4$); sin embargo, si se incrementa la temperatura, aumenta la contribución de los términos más excitados y serán necesarios, para un rango de temperaturas aproximado de $13000 \text{ K} < T < 29000 \text{ K}$, 8 términos (es decir, $n_{\text{lim}} = 10$); a partir de allí, $n_{\text{lim}} = 9$. La razón de la disminución del valor de n_{lim} es el aumento de la importancia de la absorción free-free respecto a la absorción bound-free.

En la Tabla 3.2 se muestran valores más generales de n_{lim} correspondientes a sendos valores de temperatura, para distintas regiones espectrales. En todos los casos se consideraron temperaturas en el intervalo $2000 \text{ K} \leq T \leq 102000 \text{ K}$ y longitudes de ondas menores que 91179 \AA . En todos los casos se adoptaron valores unitarios para los factores de Gaunt.

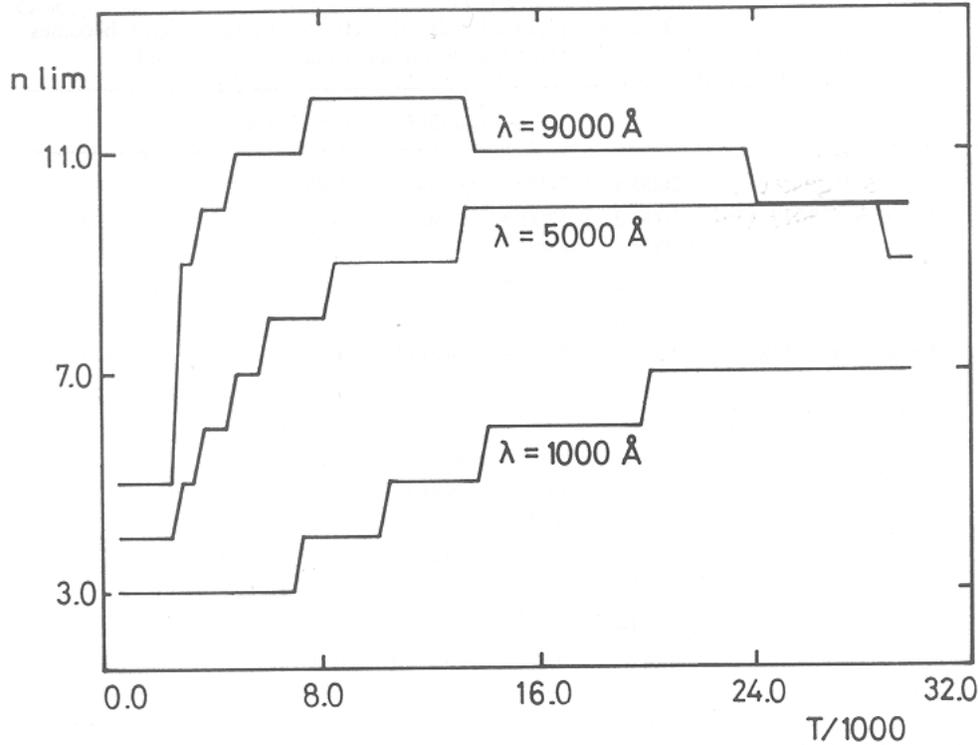


Fig. 3.2: Valor de n_{lim} en función de λ y de T . Aquí se usó la aproximación de Menzel & Pekeris (1933) para los factores de Gaunt. (Extraído de Milone & Merlo (1994, p. 237))

TABLA 3.2

Valores de n_{lim} como función de n_0 y de T . Esta tabla proporciona críticamente la temperatura para la cual es necesario sumar desde el nivel n_0 hasta el nivel n_{lim} , obteniéndose una precisión de 0.001.

n_0	Intervalo	$T - n_{lim}$											
		2000 1									27400 2	53200 3	102000 3
1	$\lambda < 912$	2000 1											
2	$912 < \lambda < 3647$	2000 2			4200 3		7600 4	11600 5	17800 6		35400 7	85000 6	102000 6
3	$3647 < \lambda < 8206$	2000 4		2600 5	3800 6	5200 7	7600 8	13000 9			34200 8	76000 7	102000 7
4	$8206 < \lambda < 14588$	2000 7	2400 8	3200 9	4400 10		8600 11	12800 10		30000 9	52600 8	90000 7	102000 7
5	$14588 < \lambda < 22795$	2000 10	2200 11	3200 12				13200 11	22600 10	36400 9	58200 8	95400 7	102000 7
6	$22795 < \lambda < 32824$	2000 13		2800 14		5800 13	10800 12	17000 11	25600 10	39200 9	61000 8	98000 7	102000 7
7	$32824 < \lambda < 44677$	2000 14	2200 15		5400 14	8600 13	12800 12	18600 11	27400 10	40800 9	62400 8	99400 7	102000 7
8	$44677 < \lambda < 58354$	2000 14	2200 17	2400 16	4600 15	6800 14	9800 13	13800 12	19600 11	28200 10	41600 9	63400 8	102000 8
9	$58354 < \lambda < 73854$	2000 14	2200 18	2400 17	3800 16	5400 15	7600 14	10400 13	14400 12	20200 11	29000 10	42200 9	102000 9
10	$73854 < \lambda < 91178$	2000 14	2200 18	3200 17	4400 16	6000 15	8000 14	11000 13	15000 12	20800 11	29400 10		102000 10

Es claro de la Tabla 3.2 que no es posible la adopción de un único valor de n_{lim} para distintos valores de temperatura y longitud de onda; asimismo, permite identificar la cantidad de términos a tener en cuenta en la sumatoria y de este modo evitar realizar cálculos innecesarios, lográndose por ello utilizar la cantidad apropiada de términos y asegurarse, por lo tanto, obtener resultados con errores menores del 0.1% en $\kappa(\lambda, T)$. Por lo tanto, dado que las estrellas pueden ser clasificadas aproximadamente de acuerdo a sus temperaturas atmosféricas del siguiente modo: M y K tardías ($2000 \text{ K} \leq T \leq 10000 \text{ K}$), K-G-F ($4000 \text{ K} \leq T \leq 15000 \text{ K}$); A ($5000 \text{ K} \leq T \leq 25000 \text{ K}$); B-O ($13000 \text{ K} \leq T \leq 70000 \text{ K}$), las siguientes conclusiones pueden extraerse de la Tabla 3.2, en donde m representa el último nivel a considerar en la sumatoria de (3.9):

* Estrellas M, K, G, F y A: ($2000 \text{ K} \leq T \leq 25000 \text{ K}$)

- $\lambda \leq 912 \text{ \AA}$: $n_0 = 1, m = 1$
- $912 \text{ \AA} < \lambda \leq 3647 \text{ \AA}$: $n_0 = 2, m = 6$
- $n_0 = 3, 4, \dots, 10, m = n_0 + 7$

* Estrellas B y O: ($13000 \text{ K} \leq T \leq 70000 \text{ K}$)

- $\lambda \leq 912 \text{ \AA}$: $n_0 = 1, m = 3$
- $912 \text{ \AA} < \lambda \leq 3647 \text{ \AA}$: $n_0 = 2, m = 7$
- $3647 \text{ \AA} < \lambda \leq 91178 \text{ \AA}$: $n_0 = 3, 4, 5, m = n_0 + 6$
- $3647 \text{ \AA} < \lambda \leq 91178 \text{ \AA}$: $n_0 = 6, 7, \dots, 10, m = 12$

2.2.2.3. Discusión.

Nuestros resultados han demostrado que en el cálculo de la absorción continua para átomos hidrogénicos no es posible adoptar un único valor para el límite superior de la suma discreta de niveles m , ni tampoco utilizar una fórmula tal como $m = n_0 + k$, donde k es un número fijo.

En la búsqueda de disminuir los errores de cálculo, haciéndolos menores que un valor prefijado, y también tratando de evitar cálculos innecesarios, se arriba a una dependencia compleja de m con n_0 y la temperatura T .

No obstante ello, y por practicidad, se puede establecer las siguientes reglas, las cuales son independientes de la temperatura y pueden aplicarse en forma precisa y eficiente:

- $\lambda \leq 912 \text{ \AA}$: $n_0 = 1, m = 3$
- $912 \text{ \AA} < \lambda \leq 3647 \text{ \AA}$: $n_0 = 2, m = 7$
- $3647 \text{ \AA} < \lambda \leq 91178 \text{ \AA}$: $n_0 = 3, 4, \dots, 10, m = 17$ ($m = 15$ resulta en muchas ocasiones preciso)

Aquí observamos que el valor de $n_{lim}(m)$, a partir del cual la sumatoria (ecuaciones (3.8) y (3.9)) puede ser reemplazada por una integral, es creciente con la longitud de onda y la temperatura, hasta un valor máximo de esta última desde donde aquél decrece (Merlo & Milone, 1992), tal como lo demuestra la Figura 3.2. Evidentemente esto es debido a que cuando crece la temperatura, se van poblando los niveles superiores del átomo, tornándose importante su contribución a la opacidad, hasta llegar al límite de la ionización en donde tal consideración carece de importancia.

Respecto al coeficiente medio de Rosseland, encontramos que para valores de $\log P_e$ comprendido entre -1 y 3 , y valores de temperatura inferiores a 16000 K, es suficiente considerar a lo máximo cuatro series para obtener esta opacidad con una precisión relativa mejor que 1×10^{-5} (Merlo & Milone, 1992).

3. ANÁLISIS DE LA ABSORCIÓN CONTINUA.

3.1. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.

Con el objetivo puesto en disponer de un código de cálculo de opacidades que nos permita analizar su influencia en la estructura de las atmósferas de las estrellas, se realizó una exhaustiva revisión bibliográfica y de esta forma actualizar expresiones analíticas como así también coleccionar tabulaciones que nos permitan armar una base de datos lo suficientemente completa.

3.1.1. Dispersiones

3.1.1.1. Scattering Thomson:

En las estrellas frías, la dispersión electrónica incrementa su importancia debido a las bajas presiones. Por ejemplo (Gray, 1992), en estrellas pertenecientes a la secuencia principal, con $P_g \approx P_H \approx 10^3 - 10^4$ dy/cm², resulta $\kappa(e)/P_e \approx 10^{-27} - 10^{-29}$ cm² por partícula de Hidrógeno y por unidad de presión electrónica. Teniendo en cuenta que la dispersión electrónica tiene una eficiencia acromática, teniendo el coeficiente de absorción el valor $\alpha(e) = 0.6648 \times 10^{-24}$ cm²/electrón, y escribiendo la absorción por átomo de Hidrógeno como $\kappa(e) = \alpha(e)(P_e/P_H)$, donde P_H es la presión parcial de H, concluimos que $\alpha(e)$ es pequeño respecto a otros absorbentes. Sin embargo, para estrellas Supergigantes, en donde valores típicos de presiones electrónicas son del orden de 10 dy/cm² a 100 dy/cm², conducen a valores considerables altos de $\kappa(e)$.

3.1.1.2. Scattering Rayleigh:

Este proceso dispersivo es importante en la región ultravioleta del espectro, en estrellas con atmósferas suficientemente frías que permitan la formación de moléculas. Dalgarno (1962) presenta las siguientes expresiones de interpolación para el cálculo de las secciones eficaces de estas dispersiones para el Hidrógeno y Helio atómicos, y para el Hidrógeno molecular, en donde las longitudes de onda λ están expresadas en Å :

$$\sigma_v(H) = \frac{N(H, n=1)}{\rho} \left(\frac{5.799 \times 10^{-13}}{\lambda^4} + \frac{1.422 \times 10^{-6}}{\lambda^6} + \frac{2.784}{\lambda^8} \right) \quad (3.11)$$

$$\text{donde } \lambda = 2.997925 \times 10^{15} / \min(v, 2.922 \times 10^{15})$$

$$\sigma_v(He) = \frac{N(He, n=1)}{\rho} \cdot \frac{5.484 \times 10^{-14}}{\lambda^4} \left(1 + \frac{2.44 \times 10^5}{\lambda^2} + \frac{5.94 \times 10^{-10}}{\lambda^2 (\lambda^2 - 2.90 \times 10^5)} \right)^2 \quad (3.12)$$

$$\text{donde } \lambda = 2.997925 \times 10^{15} / \min(v, 5.15 \times 10^{15})$$

$$\sigma_v(H_2) = \frac{N(H_2)}{\rho} \left(\frac{8.14 \times 10^{-13}}{\lambda^4} + \frac{1.28 \times 10^{-6}}{\lambda^6} + \frac{1.61}{\lambda^8} \right) \quad (3.13)$$

3.1.2. Absorciones Atómicas y Moleculares

En una primera etapa se analizaron las siguientes especies atómicas y moleculares: H^- , H_2 , H_2^- , H_2^+ , cuasi- H_2 , He y He^- , resumiéndose a continuación los valores, expresiones y/o procedimientos de ajustes llevados a cabo con cada uno de ellos.

En una segunda etapa se analizó la influencia en el coeficiente de absorción de algunas especies metálicas. En este sentido se tomaron como referencia los elementos utilizados por Vernazza *et al.* (1976) en el cálculo de la opacidad continua para la determinación de la estructura de la cromosfera solar; estos elementos fueron el C I, el Mg I, Al I y el Si I.

3.1.2.1. Ion Negativo del Hidrógeno:

El átomo de Hidrógeno es capaz de mantener un segundo electrón en un estado ligado debido a que la simple combinación electrón-protón está altamente polarizada. La ionización de este electrón adicional requiere de 0.754 eV y por lo tanto todos los fotones con longitudes de onda menores que 16444 Å podrán realizar este proceso. El origen de estos iones se deben a colisiones entre átomos y electrones, siendo las principales fuentes de estos últimos los provenientes de los metales ionizados.

- *Absorción Ligado-Libre:* diversos autores han calculado coeficientes de absorción ligado-libre para este ion, coincidiendo todos en que el mismo presenta un máximo en 8500 Å (Gray, 1992). Entre ellos merece destacar los resultados de Wishart (1979), los cuales pueden ser ajustados en el intervalo $\lambda \in [2250, 15000]$ Å con una precisión del 0.2 % a través de la siguiente expresión:

$$\alpha_{bf}(\lambda) = \sum_{i=0}^6 a_i \lambda^i \quad (3.14)$$

donde α_{bf} está en unidades de $10^{-18} \text{ cm}^2/\text{H}^-$, el factor de emisión estimulada no está incluido, λ está en Å y las constantes de ajuste tienen los siguientes valores: $\{a_i; i=0..6\} = \{ 1.99654; -1.18267e-5; 2.64243e-6; -4.40424e-10; 3.23992e-14; -1.39568e-18; 2.78701e-23 \}$.

Teniendo en cuenta la ecuación de ionización del H^- , la expresión del coeficiente de absorción de este ión en unidades de cm^2 por átomo de H neutro es la siguiente:

$$\kappa(H_{bf}^-) = 4.158 \times 10^{-10} \alpha_{bf} P_e \theta^{5/2} 10^{0.754\theta} \quad (3.15)$$

- *Absorción Libre-Libre*: la contribución libre-libre de la absorción del H^- se torna dominante en la región infrarroja del espectro (Gray, 1992), coincidiendo el cálculo de varios autores en un comportamiento creciente con la longitud de onda. De ellos, merece destacar el trabajo de Bell & Berrington (1987). El siguiente polinomio ajusta los datos de estos autores con una precisión del 1% para $\theta = (5040 / T) \in [0.5, 2.0]$ y $\lambda \in [2600, 113900] \text{ \AA}$:

$$\kappa(H_{ff}^-) = P_e \alpha_{ff} = 10^{-26} P_e 10^{f_0(\lambda) + f_1(\lambda) \log \theta + f_2(\lambda) \log^2 \theta} \quad (3.16)$$

donde está incluido el factor de emisión estimulada, y además:

$$\begin{aligned} f_0(\lambda) &= -2.2763 - 1.6850 \log \lambda + 0.76661 \log^2 \lambda - 0.0533464 \log^3 \lambda \\ f_1(\lambda) &= 15.2827 - 9.2846 \log \lambda + 1.99381 \log^2 \lambda - 0.142631 \log^3 \lambda \\ f_2(\lambda) &= -197.789 + 190.266 \log \lambda - 67.9775 \log^2 \lambda + 10.6913 \log^3 \lambda \\ &\quad - 0.625151 \log^4 \lambda \end{aligned} \quad (3.17)$$

- *Otras Absorciones Continuas*: además de las citadas, existen algunas resonancias del ión H^- (Gray, 1992), las cuales incrementan las transiciones desde estados ligados hacia niveles inestables de energías en el continuo. Estas absorciones se extienden sobre intervalos muy cortos de longitudes de onda, y probablemente afecten muy poco en la opacidad estelar. Asimismo, Myerscough (1968) encontró que el continuo prohibido del H^- afecta despreciablemente en los espectros.

3.1.2.2. Hidrógeno Molecular:

Estas moléculas aparecen en las atmósferas de un gran número de estrellas frías. Las moléculas de H_2 son más numerosas que el Hidrógeno atómico para estrellas más frías que las de tipo espectral M intermedias, y si bien estas moléculas no absorben en el rango visible, sus iones sí lo hacen (Gray, 1992).

La absorción del H_2^+ es un significativo absorbedor en el espectro ultravioleta. Los trabajos que al respecto merecen destacarse son las tabulaciones de Bates (1951, 1952) para $\lambda \in [3846; 200000] \text{ \AA}$ y $T_3 \in [2.5; 12]$, pudiéndose utilizar expresiones asintóticas para λ mayores. Estos cálculos fueron realizados utilizando el momento dipolar cuántico, pero tratando a los núcleos como partículas clásicas. Matsushima (1964) demostró que la absorción del H_2^+ es menor del 10 % que la absorción del H^- para longitudes de onda mayores a los 4000 \AA .

El ión negativo H_2^- es el contribuyente molecular más importante a la opacidad continua en las atmósferas de las estrellas tardías, particularmente en las estrellas M donde la abundancia del Hidrógeno molecular es importante, teniendo una gran eficiencia en el rango infrarrojo (John, 1994). Los cálculos llevados a cabo por este autor lo llevan a concluir que los valores más precisos de la absorción libre-libre del ión H_2^- se obtienen a partir del método basado en la transferencia elástica del impulso lineal a las secciones eficaces. También existen tabulaciones más antiguas brindadas por Somerville (1964), para los siguientes valores de longitudes de onda y temperaturas: $\lambda \in [3038; 151878]$ y $\theta \in [0.8; 3.6]$.

3.1.2.3. Hidrógeno Cuasimolecular:

Para temperaturas no demasiadas bajas ($kT \approx$ calor de disociación molecular) y para bajas presiones, la mayoría de las moléculas están disociadas, tornando al gas monoatómico. Por lo tanto, los espectros de absorción consistirán esencialmente de líneas atómicas. Sin embargo, cuando la presión es suficientemente alta, los átomos se encuentran en un “estado de colisión” o de “cuasimolécula”, con valores de energía potencial ligeramente diferente al que tendrían individualmente. Si en estas circunstancias tuviera lugar un proceso de absorción, serían absorbidas frecuencias distintas a las que serían absorbidas por los átomos en forma individual. Puesto que las energías cinéticas y potenciales de los átomos colisionantes pueden tomar cualquier valor, dentro de un cierto intervalo, resultará un espectro continuo de absorción (Herzberg, 1959).

Para el caso de la cuasimolécula de Hidrógeno, la influencia de la opacidad de esta especie fue investigada por varios autores, mereciéndose destacar el trabajo de Doyle (1968), quien la encuentra significativa para $\lambda = 2500 \text{ \AA}$ en las atmósferas de estrellas tipo solar. En el mismo trabajo brinda una tabulación a doble entrada en $\lambda [\text{\AA}]$ y $\kappa [\text{cm}^2]$.

3.1.2.4. Helio Atómico:

- *Absorción Ligado-Libre:* Jacobs (1974) calculó secciones eficaces de fotoionización de los estados excitados 2^1S , 2^3S , 2^1P y 2^3P del Helio neutro para energías fotoelectrónicas por debajo del límite $n=2$ del He^+ , utilizando funciones de onda de estados ligados obtenidas por Hylleraas y funciones de onda de acople final próxima del $1s2s2p$.

Rohrmann (1997), mediante ajuste por cuadrados mínimos, encuentra expresiones de interpolación simples que ajustan los resultados de secciones eficaces con un error porcentual menor al 10%, esto es, del mismo orden de precisión que las secciones eficaces obtenidas por Jacobs. Estos ajustes responden a la ecuación:

$$\alpha_v = \alpha_0 \frac{\exp(-\beta E)}{E^\gamma}, \text{ con } [E] = \text{Ry} \quad (3.18)$$

Las constantes de ajuste se resumen en la siguiente Tabla 3.3:

TABLA 3.3
Parámetros del ajuste por cuadrados mínimos de Rohrmann (1997).

Estado Inicial	$\lambda_i [\text{\AA}]$	Eu[Ry]	α_0 [$\text{MB}=10^{-18}\text{cm}^2$]	β	γ	$\langle\sigma_a\rangle[\%]$	$\langle\sigma_a\rangle[\%]$
2^3S	2601.01	0.35043	0.9097	0.2978	0.9520	4.9	9.1
2^1S	3122.03	0.29191	3.5756	1.7884	0.2361	4.7	10.2
$2^3\text{P}^o_{2,1,0}$	3422.01	0.26631	0.2888	0.6165	1.6907	3.2	4.5
2^1P^o	3680.02	0.24765	0.1682	1.3149	1.7775	7.2	9.0

donde:

$$\boxed{\hspace{15em}} \quad (3.19)$$

Para $n=1$ y $n=3$ existen expresiones de ajustes de interpolación dada por Kurucz (1970), las cuales resumimos a continuación:

TABLA 3.4
Ajuste interpolatorio de Kurucz (1970).

Nivel	E_i	λ_i [Å]	$\ln \alpha_i$
1^1S	0.0	504.30	$33.32 - 2.00 \ln \nu$
3^3S	22.7185	6634.04	$12.69 - 1.54 \ln \nu$
3^1S	22.9203	7437.17	$23.85 - 1.86 \ln \nu$
3^3P^o	23.0071	7845.92	$49.30 - 2.60 \ln \nu$
$3^3D + 3^1D$	23.0737	8193.29	$85.20 - 3.69 \ln \nu$
3^1P^o	23.0870	8263.30	$58.81 - 2.89 \ln \nu$

El autor recomienda tratar hidrogénicamente los niveles con $n \geq 4$, teniendo en cuenta las siguientes expresiones de los pesos estadísticos y las energías de ligaduras:

$$g_n = 4n^2 \quad \text{y} \quad E_n = 24.587 - 13.595 / n^2.$$

- *Absorción Libre-Libre*: opacidades libre-libre han sido calculadas por Peach (1967), pero dado que tiene un valor aproximadamente igual al del Hidrógeno, pueden ser utilizados los valores de este último.

3.1.2.5. Ion Negativo del Helio:

- *Absorción Ligado-Libre*: la absorción ligado-libre de este ión es considerada generalmente despreciable debido a que, tal como ocurre con el ión negativo del Hidrógeno, tiene un solo nivel ligado, pero esta vez con una energía de ligadura mas fuerte (19 eV) (Gray, 1992). Además bajo condiciones normales, la población de este nivel es considerablemente baja para merecer alguna consideración.
- *Absorción Libre-Libre*: en las estrellas frías, las transiciones libre-libre de este ión pueden ser de importancia para longitudes de onda larga. Cálculos llevados a cabo por McDowell *et al.* (1966) muestran un comportamiento cualitativo similar a la opacidad libre-libre del ión H. El ajuste polinomial de estos autores, el cual brinda la sección eficaz con una precisión mejor del 2% para $\lambda > 3000 \text{ \AA}$ y en donde se incluye la emisión estimulada, es el siguiente:

$$\log \alpha(\text{He}_{\text{ff}}^-) = b_0(\theta) + b_1(\theta)\lambda^{1/3} + b_2(\theta)\lambda^{1/2} + b_3(\theta)\lambda \quad (3.20)$$

donde como es usual $\theta=5040/T$, y los coeficientes de ajuste tienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} b_0(\theta) &= -3.183 \cdot 10 + 1.358\theta - 1.047 \cdot 10^{-1}\theta^2 - 2.819 \cdot 10^{-2}\theta^3 \\ b_1(\theta) &= 4.332 \cdot 10^{-1} - 1.268 \cdot 10^{-1}\theta - 3.535 \cdot 10^{-3}\theta^2 + 6.869 \cdot 10^{-3}\theta^3 \\ b_2(\theta) &= -4.808 \cdot 10^{-2} + 1.960 \cdot 10^{-2}\theta + 4.305 \cdot 10^{-5}\theta^2 - 9.558 \cdot 10^{-4}\theta^3 \\ b_3(\theta) &= 1.788 \cdot 10^{-5} - 1.192 \cdot 10^{-5}\theta + 7.870 \cdot 10^{-7}\theta^2 + 3.936 \cdot 10^{-7}\theta^3 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Por lo tanto el coeficiente de absorción del ión por átomo de Hidrógeno estará dado por la relación:

$$\kappa(He_{ff}^-) = P_e \alpha(He_{ff}^-) A(He) \left[1 + \frac{\Phi(He)}{P_e} \right]^{-1} \quad (3.22)$$

donde P_e es la presión electrónica, $A(He)$ representa la abundancia relativa del Helio respecto al Hidrógeno y el último factor del segundo miembro toma en consideración la ionización del Helio.

3.1.2.6. Especies Metálicas:

Dado que se utilizaron diversas expresiones de interpolación para las secciones eficaces ligado-libre de las diferentes series correspondientes a los elementos metálicos elegidos, se llevó a cabo un cuidadoso análisis espectroscópico con el objeto de disponer de una actualizada y completa estructura de niveles y subniveles atómicos para poder realizar el cálculo.

La expresión utilizada para el coeficiente de absorción ligado-libre, en unidades de cm^{-1} , fue la siguiente:

$$\kappa(\lambda) = \sum_{l=1}^8 n_l (1 - e^{-h\nu/kT}) \sigma_l(\lambda) \times 10^{-18} \quad (3.23)$$

con $\sigma_l(\lambda)$ la sección eficaz del elemento en cuestión y correspondiente a la serie l , siendo evidentemente nula para todas aquellas longitudes de onda superiores a una longitud de onda crítica.

Para calcular la absorción por átomo en el nivel fundamental procedimos como sigue:

$$\frac{\kappa(\lambda)}{n_0} = \sum_{l=1}^8 \frac{n_l}{n_0} (1 - e^{-h\nu/kT}) \sigma_l(\lambda) \times 10^{-18} \quad (3.24)$$

Pero:

$$\frac{n_l}{n_0} = \frac{g_l}{g_0} 10^{-\chi_l \theta} \quad (3.25)$$

por lo tanto, obtenemos finalmente:

$$\kappa_0 = \frac{\kappa(\lambda)}{n_0} = \frac{(1 - 10^{-h\nu\theta}) 10^{-18}}{g_0} \sum_{l=1}^8 g_l 10^{-\chi_l \theta} \sigma_l(\lambda) \quad (3.26)$$

Para cada elemento analizado, el método de trabajo fue el siguiente:

1. Representamos esquemáticamente los niveles considerados en el trabajo de Vernazza *et al.* (1976).
2. Determinamos para cada uno de ellos el correspondiente número de onda $\tilde{\nu}$; si correspondía a términos singuléticos nos quedamos con los valores más actuales tabulados por Moore NSRDS-NBS (1980), si nó, adoptamos el correspondiente al de menor energía. Si se juntaron o fundieron varios términos, hicimos una media aritmética a tres cifras significativa para el valor del número de onda.
3. Una vez calculado los $\tilde{\nu}$ correspondientes, se obtienen las longitudes de onda críticas de cada nivel a partir de la relación: $\lambda_{\text{crit}} = 10^8/\tilde{\nu}^*$, con $[\lambda_{\text{crit}}] = \text{Å}$, redondeando al Ångström, donde $\tilde{\nu}^* = \tilde{\nu}_{\text{ioniz}} - \tilde{\nu}$.
4. Calculamos la correspondiente energía de excitación, dada por la expresión: $\chi = hc\tilde{\nu}$.
5. Se determinaron los términos faltantes hasta el valor de n considerado, calculando los $\tilde{\nu}$, λ_{crit} y χ siguiendo el criterio explicitado anteriormente. Para estos términos y para los valores de n superiores, se utilizó una aproximación hidrogenoide, para lo cual también se calculó el Z_{ef} , definido como $Z_{\text{ef}} = n (E_i/E_H)^{1/2}$, siendo E_i el potencial de ionización de los términos, es decir, $E_i = I - \chi_i$, y E_H el potencial de ionización del Hidrógeno, esto es, $E_H = 13.598 \text{ eV}$.

A continuación mostramos los resultados hallados siguiendo este procedimiento en los cuatro elementos considerados, presentando a los mismos en forma tabular.

TABLA 3.5
Actualización de las configuraciones electrónicas del C I.

CARBONO (C I)					
Estado Fundamental: $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_0$					
Potencial de Ionización: 11.260 eV – 90820.42 cm^{-1}					
Nivel	Config. Electr.	$\tilde{\nu}$ [cm^{-1}]	λ_{crit} [\AA]	χ [eV]	
1	$2p^2 \ ^3P$	90820	1101	0.0	
2	$2p^2 \ ^1D$	80628	1240	1.264	
3	$2p^2 \ ^1S$	69172	1446	2.684	
4	$2p^3 \ ^5S^o$	57085	1752	4.183	
5	$3s \ ^3P^o$	30487	3280	7.480	
6	$3s \ ^1P^o$	28839	3648	7.685	
7	$2p^3 \ ^3D^o$	26734	3741	7.946	
8	$3p \ ^3SPD$	20220	4945	8.753	
Términos Faltantes					
Config. Electr.	$\tilde{\nu}$ [cm^{-1}]	λ_{crit} [\AA]	χ [eV]	Z _{ef}	g
$3p \ ^1PDS$	71800	5258	8.902	1.249	9
$2p^3 \ ^3P^o$	75255	6425	9.330	0.753	9
$3d$ $^1D^o, ^3F^oD^o, ^1F^oP^o,$ $^3P^o$	78450	8084	9.727	1.007	60
Niveles con $n \geq 4$					
n	$\tilde{\nu}$ [cm^{-1}]	λ_{crit} [\AA]	χ [eV]	Z _{ef}	
4	82560	12106	10.236	1.10	
5	85800	19919	10.638	1.07	
6	87400	29236	10.836	1.06	
7	88400	41315	10.960	1.04	
8	89000	54945	11.035	1.03	
9	89400	70402	11.084	1.02	
10	89700	89252	11.121	1.01	
11	89900	108646	11.146	1.01	

TABLA 3.6
Actualización de las configuraciones electrónicas del Mg I.

MAGNESIO (Mg I)					
Estado Fundamental: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 \ ^1S_0$					
Potencial de Ionización: 7.646 eV – 61671.02 cm⁻¹					
Nivel	Config. Electr.	$\tilde{\nu}$ [cm ⁻¹]	λ_{crit} [Å]	χ [eV]	
1	$3s^2 \ ^1S$	61671	1622	0.0	
2	$3p^3 \ ^3P_0$	39803	2511	2.709	
3	$3p^3 \ ^1P_0$	26620	3757	4.346	
4	$4s^3 \ ^3S$	20474	4884	5.108	
5	$4s^3 \ ^1S$	18168	5504	5.394	
6	$3d^4 \ ^1D$	15268	6550	5.753	
7	$4p^3 \ ^3P^o$	13830	7231	5.932	
8	$3d^3 \ ^3D$	13714	7292	5.946	
Términos Faltantes					
Config. Electr.	$\tilde{\nu}$ [cm ⁻¹]	λ_{crit} [Å]	χ [eV]	Z _{ef}	g
$3s 4p \ ^1P^o$	49347	8114	6.118	1.34	3
$3s 4d \ ^1,3D$ $3s 4f \ ^1,3F^o$	54175	13340	6.717	1.05	48
$3p^2 \ ^3P$	57800	25833	7.166	0.56	9
Niveles con $n \geq 5$					
n	$\tilde{\nu}$ [cm ⁻¹]	λ_{crit} [Å]	χ [eV]	Z _{ef}	
5	55200	15454	6.844	1.21	
6	57500	23975	7.129	1.17	
7	58700	33658	7.278	1.15	
8	59500	46061	7.377	1.13	
9	59970	59844	7.435	1.12	
10	60330	72938	7.480	1.10	
11	60640	93369	7.518	1.09	
12	60800	114808	7.538	1.07	
13	60900	129698	7.551	1.09	
14	61000	149027	7.563	1.09	
15	61100	175125	7.575	1.08	
16	61200	212305	7.588	1.04	
17	61250	237518	7.594	1.05	
18	61300	269527	7.600	1.05	
19	61350	311507	7.606	1.03	
20	61375	337815	7.610	1.03	
21	61400	368976	7.613	1.03	
22	61425	406471	7.616	1.03	
23	61450	452448	7.619	1.02	
24	61475	510152	7.622	1.01	
25	61483	531858	7.623	1.03	
26	61495	568117	7.624	1.05	
27	61508	613422	7.626	1.04	
28	61520	662164	7.628	1.02	
29	61531	714184	7.629	1.03	
30	61540	763242	7.630	1.03	

TABLA 3.7
Actualización de las configuraciones electrónicas del Al I.

ALUMINIO (Al I)					
Estado Fundamental: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 P_{1/2}^o$					
Potencial de Ionización: 5.986 eV – 42278.37 cm^{-1}					
Nivel	Config. Electr.	$\tilde{\nu}$ [cm^{-1}]	λ_{crit} [\AA]	χ [eV]	
1	$3s^2 ({}^1S) 3p^2 P^o$	48278	2071	0.0	
2	$3s^2 ({}^1S) 4s^2 S$	22931	4361	3.143	
3	$3s 3p^2 {}^4P$	19258	5193	3.598	
4	$3s^2 ({}^1S) 3d^2 D$	15843	6312	4.022	
5	$3s^2 ({}^1S) 4p^2 P^o$	15329	6524	4.085	
6	$3s^2 ({}^1S) 5s^2 S$	10589	9444	4.673	
7	$3s^2 ({}^1S) 4d^2 D$	9349	10696	4.827	
8	$3s^2 ({}^1S) 5p^2 P^o$	8006	12490	4.993	
Términos Faltantes					
Config. Electr.	$\tilde{\nu}$ [cm^{-1}]	λ_{crit} [\AA]	χ [eV]	Z_{ef}	g
$3s^2 ({}^1S) 4f^2 F^o$	6959	14370	5.123	1.01	14
$3s^2 ({}^1S) 5d^2 D$	5246	19062	5.335	1.09	42
$3s^2 ({}^1S) 5f^2 F^o$					
Niveles con $n \geq 6$					
n	$\tilde{\nu}$ [cm^{-1}]	λ_{crit} [\AA]	χ [eV]	Z_{ef}	
6	43700	21842	5.418	1.23	
7	45100	31463	5.592	1.19	
8	46000	43891	5.703	1.15	
9	46560	58195	5.773	1.11	
10	46925	73890	5.818	1.12	
11	47100	84863	5.840	1.14	
12	47300	102211	5.865	1.13	
13	47500	128474	5.889	1.10	
14	47600	147412	5.902	1.10	
15	47700	172900	5.914	1.09	
16	47800	209043	5.926	1.06	
17	47851	233989	5.933	1.06	
18	47900	264292	5.939	1.06	
19	47941	296410	5.944	1.06	
20	47975	329630	5.948	1.06	
21	48005	365805	5.952	1.05	
22	48031	404253	5.955	1.05	
23	48051	439812	5.958	1.04	
24	48070	479916	5.960	1.05	
25	48087	522548	5.962	1.05	
26	48102	566990	5.964	1.05	
27	48115	612107	5.966	1.04	
28	48127	660633	5.967	1.05	
29	48137	707364	5.968	1.05	
30	48147	761209	5.970	1.03	
31	48155	810570	5.971	1.03	
32	48163	866776	5.972	1.03	
33	48170	922765	5.972	1.06	
34	48177	986485	5.973	1.05	

TABLA 3.8
Actualización de las configuraciones electrónicas del Si I.

SILICIO (Si I)					
Estado Fundamental: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 \ ^3P_0$					
Potencial de Ionización: $8.152 \text{ eV} - 65747.5 \text{ cm}^{-1}$					
Nivel	Config. Electr.	$\nu^- [\text{cm}^{-1}]$	$\lambda_{\text{crit}} [\text{\AA}]$	$\chi [\text{eV}]$	
1	$3p^2 \ ^3P$	65748	1521	0.0	
2	$3p^2 \ ^1D$	59449	1682	0.781	
3	$3p^2 \ ^1S$	50353	1986	1.909	
4	$3p^2 \ ^3S^o$	32421	3084	4.132	
5	$4s \ ^3P^o$	26064	3837	4.920	
6	$4s \ ^1P^o$	24756	4039	5.082	
7	$3p^3 \ ^3D^o$	20471	4885	5.614	
8	$4p \ ^{1,3}SPD$	16448	6080	6.112	
Términos Faltantes					
Config. Electr.	$\nu^- [\text{cm}^{-1}]$	$\lambda_{\text{crit}} [\text{\AA}]$	$\chi [\text{eV}]$	Z _{ef}	g
$3s^2 3p \ (^2P^o) 3d$ $^{1,3}P^oD^oF^o$	51500	7019	6.385	1.08	60
$3s 3p^3 \ ^3P^o$	56700	11053	7.030	0.86	9
$3s^2 3p \ (^2P^o) 4d$ $^{1,3}P^oD^oF^o$	58500	13798	7.253	1.03	60
$3s^2 3p \ (^2P^o_{0/2}) 4f$ [$2\frac{1}{2}, 3\frac{1}{2}$] f [$1\frac{1}{2}, 4\frac{1}{2}$]	59000	14820	7.315	0.96	84
Niveles con $n \geq 5$					
n	$\nu^- [\text{cm}^{-1}]$	$\lambda_{\text{crit}} [\text{\AA}]$	$\chi [\text{eV}]$	Z _{ef}	
5	59500	16006	7.337	1.19	
6	61900	25991	7.675	1.12	
7	63000	36397	7.811	1.11	
8	63700	48840	7.898	1.09	
9	64200	64620	7.960	1.07	
10	64700	95465	8.022	0.98	

Las expresiones de interpolación utilizadas para evaluar la sección eficaz $\sigma_l(\lambda)$ se resumen a continuación para cada uno de los elementos metálicos considerados, recordando que $\sigma_l(\lambda) = 0$ para las longitudes de onda mayores que la longitud de onda crítica de cada serie λ_l . También se especifican los valores de las funciones de partición utilizadas para el cálculo, las cuales fueron tomadas como constantes.

Finalmente digamos que para el cálculo final de las absorciones metálicas redujimos la cantidad de niveles cuasihidrogénicos en el Mg I (tomando hasta $n = 15$ y $Z_{ef}(n \geq 15) = 1.05$) y en el Al I (considerando hasta $n = 22$ y $Z_{ef}(n \geq 11) = 1.08$).

TABLA 3.9

Resumen de las expresiones de interpolación para evaluar las secciones eficaces del C I, Mg I, Al I y Si I.

$\sigma_l(\lambda)$			
CARBONO (C I)	MAGNESIO (Mg I)	ALUMINIO (Al I)	SILICIO (Si I)
$(l = 1, 2, 3)$ $\sigma_l(\lambda) = a_l (\lambda/\lambda_l)^{s_l} - b_l (\lambda/\lambda_l)^{s'_l}$ $a_1=40.4 ; s_1=2 ; b_1=28.2 ; s'_1=3$ $a_2=28.7 ; s_2=1.5 ; b_2=18.4 ; s'_2=2.5$ $a_3=33.6 ; s_3=1.5 ; b_3=24.0 ; s'_3=2.5$	$(l = 1, 2, 4, 5, 6, 7, 8)$ $\sigma_l(\lambda) = a_l (\lambda/\lambda_l)^{s_l}$ $a_1=1.1 \quad s_1=10$ $a_2=20 \quad s_2=2.7$ $a_4=2.1 \quad s_4=2.6$ $a_5=0.43 \quad s_5=2.6$ $a_6=45 \quad s_6=2.7$ $a_7=25 \quad s_7=2.7$ $a_8=33.8 \quad s_8=2.8$	$(l = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8)$ $\sigma_l(\lambda) = a_l (\lambda/\lambda_l)^{s_l}$ $a_1=65 \quad s_1=4.4$ $a_2=10 \quad s_2=2$ $a_3=10 \quad s_3=2$ $a_4=47 \quad s_4=1.83$ $a_5=14.5 \quad s_5=1$ $a_6=56.7 \quad s_6=1.9$ $a_7=50 \quad s_7=3$ $a_8=50 \quad s_8=3$	$(l=1)$ $37: \lambda \in [1350, \lambda_l]$ $\sigma_l(\lambda) =$ $37(\lambda/1350): \lambda < 1350 \text{ \AA}$
$(l = 4, 5, 6, 7, 8)$ $\sigma_l(\lambda) = a_l (\lambda/\lambda_l)^{s_l}$ $a_4=1 \quad s_4=3$ $a_5=0.2 \quad s_5=1.2$ $a_6=1.54 \quad s_6=1.2$ $a_7=16 \quad s_7=3$ $a_8=2.1 \quad s_8=1.5$	$(l=3)$ $\sigma_3(\lambda) = 16(\lambda/\lambda_3)^{2.1} - 7.8(\lambda/\lambda_3)^{9.5}$		$(l = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8)$ $\sigma_l(\lambda) = a_l (\lambda/\lambda_l)^{s_l}$ $a_2=35 \quad s_2=3$ $a_3=46 \quad s_3=0.5$ $a_4=15 \quad s_4=3$ $a_5=1.25 \quad s_5=2$ $a_6=4.09 \quad s_6=2$ $a_7=18 \quad s_7=3$ $a_8=14.1 \quad s_8=3$
$\log(u_0, u_1, u_2) = (1.00, 0.80, 0.00)$	$\log(u_0, u_1, u_2) = (0.15, 0.31, 0.00)$	$\log(u_0, u_1, u_2) =$ $(0.81, 0.01, 0.3)$	$\log(u_0, u_1, u_2) = (1.04, 0.77, 0.00)$

3.2. CÁLCULO DE ABSORCIONES Y DISPERSIONES.

En nuestro estudio de los absorbedores continuos, utilizamos para nuestros cálculos de absorciones y dispersiones las expresiones de los siguientes autores, correspondientes a las especies atómicas y moleculares que se detallan a continuación:

- H (Milone & Merlo, 1994), H^- (Gray, 1992), H_2^- (Somerville, 1964; Mihalas, 1967) y H_2^+ (Kurucz, 1970).
- Dispersión Rayleigh del H, H_2 (Mihalas, 1967).
- Dispersión Thompson electrónica (teoría).
- He (Kurucz, 1970), Dispersión Rayleigh He (Kurucz, 1970).
- C, Mg, Al, Si: (Vernazza *et al.*, 1976).

Las longitudes de onda seleccionadas para el cálculo estuvieron comprendidas en el intervalo $\lambda \in [100;100000]$ Å, aunque en las figuras adjuntas se muestran intervalos considerablemente menores. Las expresiones de interpolación utilizadas para la evaluación numérica de las absorciones y dispersiones fueron empleadas en el intervalo de validez de las mismas.

En los gráficos adjuntos se muestran absorciones por átomo de elemento considerado en el nivel fundamental; en el caso del H^- , la ligado-libre es por ión negativo y la libre-libre por átomo de Hidrógeno neutro y para $P_e = 1$ Bar. Todas están corregidas por emisiones estimuladas. Las dispersiones son por partículas dispersantes. Las temperaturas elegidas fueron $T = 5040$ K y $T = 7000$ K.

Las Figs. 3.3 y 3.4 muestran que los máximos de las absorciones atómicas desde el nivel fundamental toman valores muy similares, entre -17 y -16 (en su logaritmo decimal). Las absorciones en la zona visible e IR, se escalonan según los potenciales de excitación de los distintos átomos. La menor capacidad de absorción corresponde al He I, con potenciales de excitación del orden de los 20 eV; le sigue el H I con potenciales de excitación de 12 o 13 eV. Luego –en orden de absorciones crecientes– se escalonan el C I (con potenciales de excitación del orden de los 9 eV), el Si I (con potenciales de excitación del orden de los 6 eV), el Mg I (con potenciales de excitación del orden de los 5 eV) y el Al I (con potenciales de excitación del orden de los 4 eV). Esto da una idea de la importancia que pueden cobrar estos elementos como absorbedores, según sea su abundancia y estado de ionización.

El gráfico de la Fig. 3.4 muestra la gran importancia del H^- para absorber en transiciones bound-free, y la importancia que tiene la dispersión Rayleigh del H I, He I y H_2 , como así también la molécula H_2 para absorber en transiciones libre-libre (importancia por elemento absorbente y dispersivo).

Para la comparación de los absorbedores continuos en medios de distintas composición química, empleamos tres abundancias distintas, una correspondiente a estrellas de carbono deficientes en hidrógeno (Hunger, 1975), otra correspondiente a una composición Solar (Anders & Grevesse, 1989) y finalmente una deficiente en metales –Población II– (Anders & Grevesse (1989) modificada, disminuida la abundancia metálica en dos órdenes de magnitud).

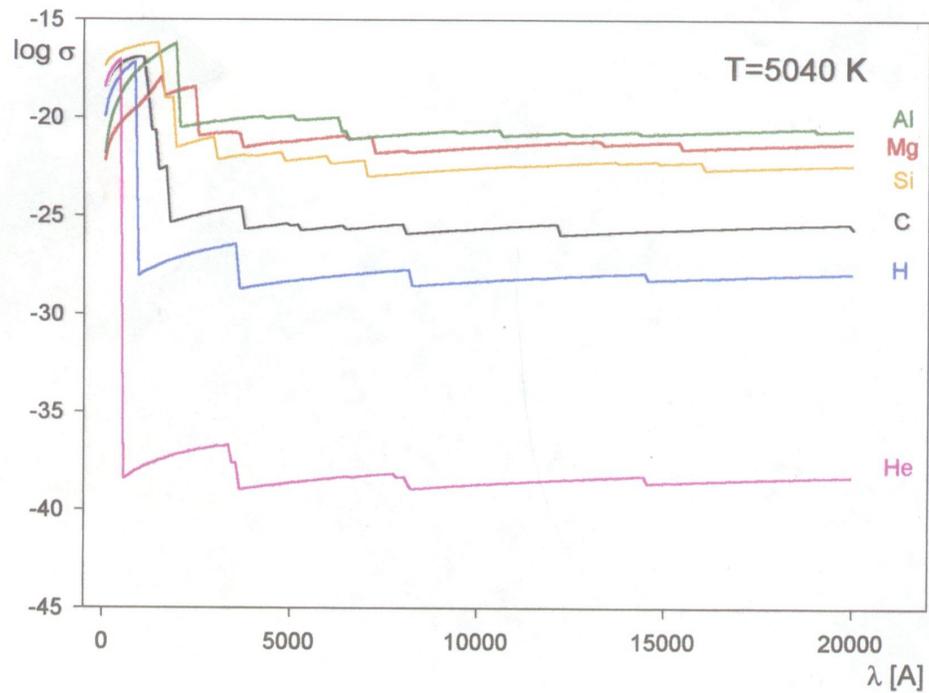


Fig. 3.3a: Secciones eficaces para el H, He, C, Mg, Al y Si para $T = 5040$ K.

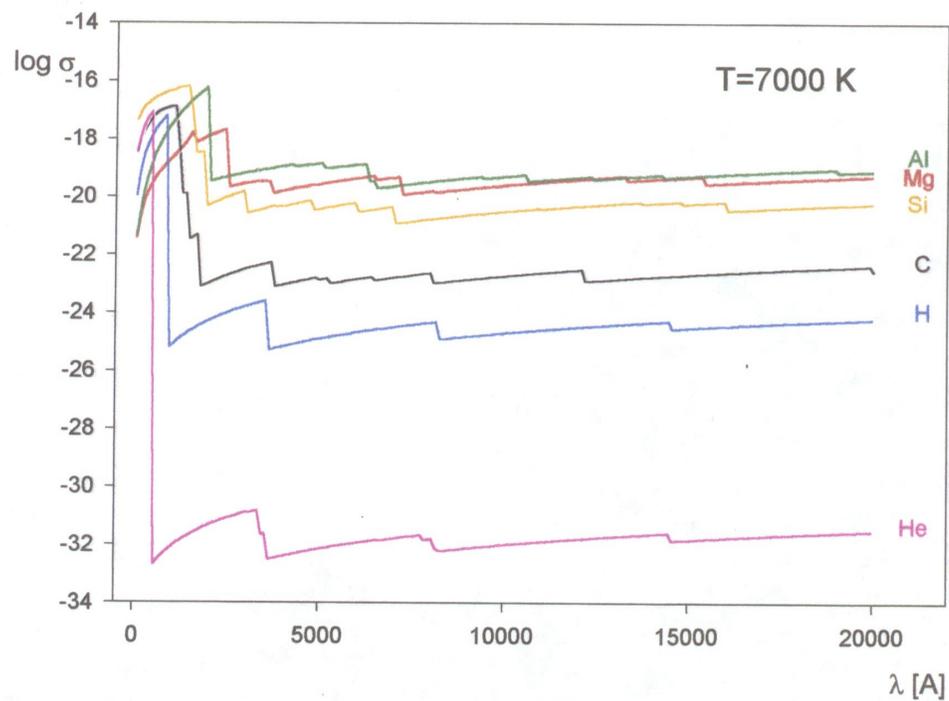


Fig. 3.3b: Secciones eficaces para el H, He, C, Mg, Al y Si para $T = 7000$ K.

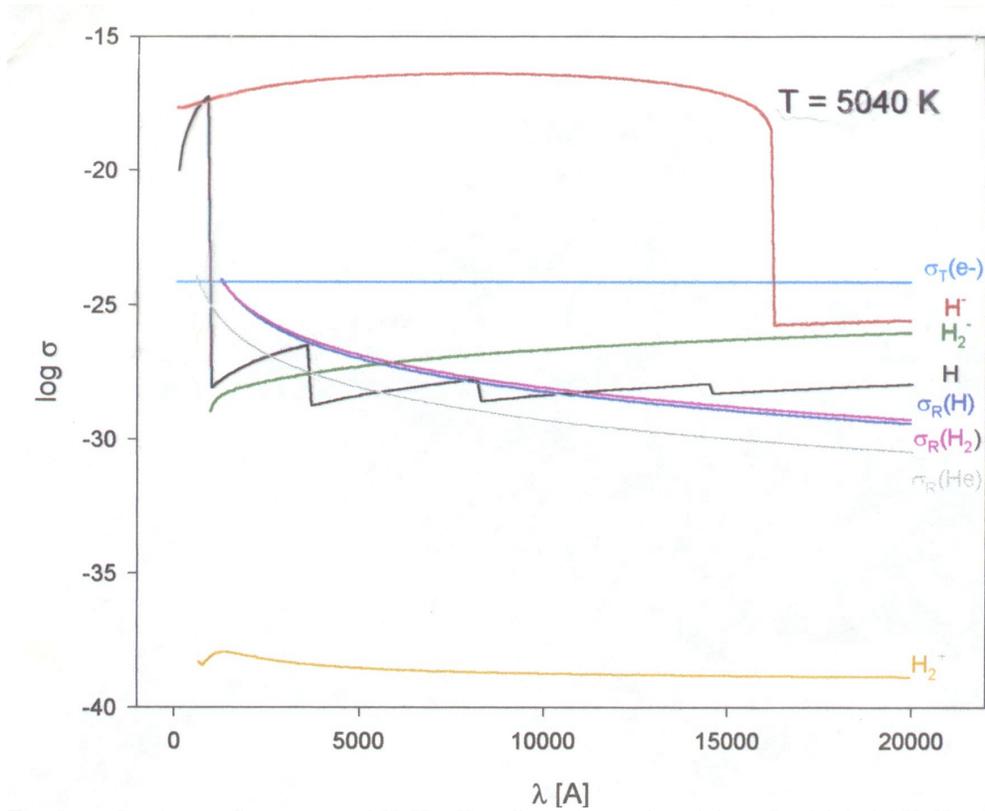


Fig. 3.4a: Secciones eficaces para el H, H^+ y H_2^- ; dispersiones electrónica y Rayleigh del H, H_2 y He para $T = 5040$ K.

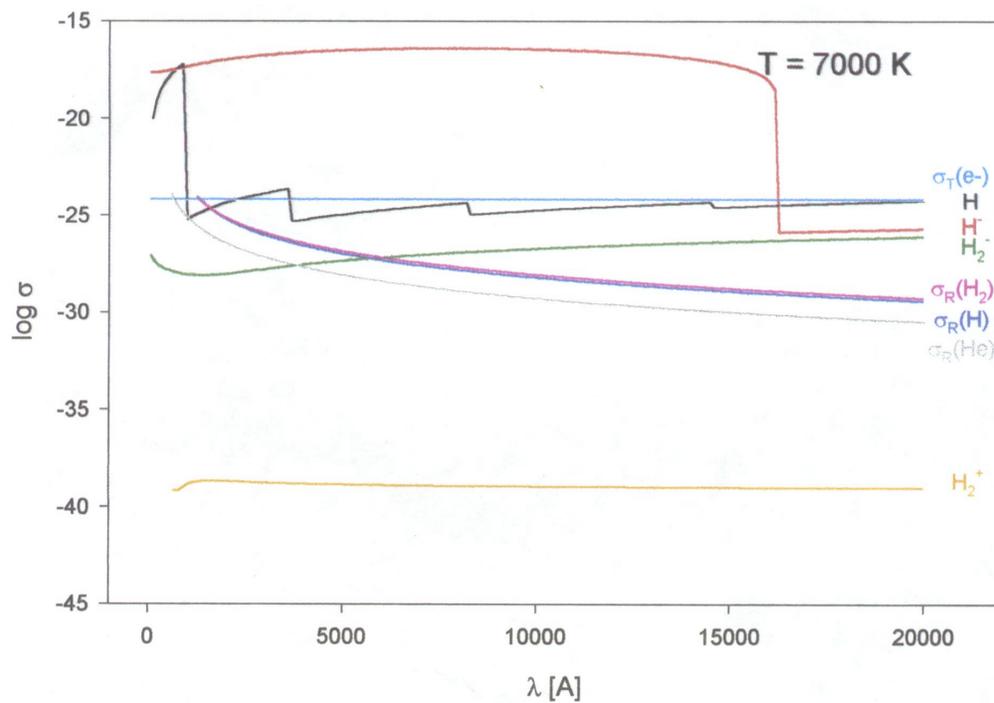


Fig. 3.4b: Secciones eficaces para el H, H^+ y H_2^- ; dispersiones electrónica y Rayleigh del H, H_2 y He para $T = 7000$ K.

3.3. IMPORTANCIA DE LAS ABSORCIONES Y DISPERSIONES.

Se hace evidente que en el visible e IR cercano, las absorciones se escalonan según los potenciales de excitación de los distintos átomos. De este modo, la menor capacidad de absorción corresponde al He I, con potenciales de excitación del orden de los 20 eV; a partir de allí crece y alcanza un máximo con el Al I, que tiene potenciales de excitación del orden de 4 eV. Este resultado es útil para analizar el peso que pueden cobrar estos elementos como absorbedores, según sea sus abundancias y estado de ionización. Por otra parte, se hace evidente la gran importancia del H⁻ para absorber en transiciones ligado-libre y la relativa importancia que cobra la dispersión Rayleigh del H I, He I y H₂, y también la molécula H₂ para absorber en transiciones libre-libre.

En una capa con una $T = 5040$ K y $\log(P_e) = 1$ (lo que en el Sol, o en una estrella similar, con $T_e \approx 5800$ K, corresponde a una capa muy superficial) vemos la gran importancia de la absorción del H⁻. Lo notable es que aún en la estrella de Población II, con una deficiencia de metales de 1:100, continúa siendo la absorción preponderante (Milone & Merlo, 1999). Igualmente, en un medio fuertemente deficiente en Hidrógeno, la absorción del H⁻, si bien es ligeramente menor que la del C, Mg, Al y Si, compite en importancia con la de ellos. Todo esto queda reflejado en las figuras 3.5 y 3.6.

En condiciones que corresponderían a capas un tanto más profundas ($T = 7200$ K y $\log(P_e)$ que en cada caso se indican), vemos que para la abundancia Solar, continúa siendo el H⁻ el elemento determinante de la absorción en el medio, en tanto que en el medio deficiente en metales, la absorción del H atómico compite con la del H⁻. Por fin, en el medio fuertemente deficiente en hidrógeno, el carbono pasa a ser el absorbedor preponderante, en tanto el H y el H⁻ pasan a jugar un papel secundario (Milone & Merlo, 1999). Todo esto queda expuesto en las figuras 3.5 a 3.7.

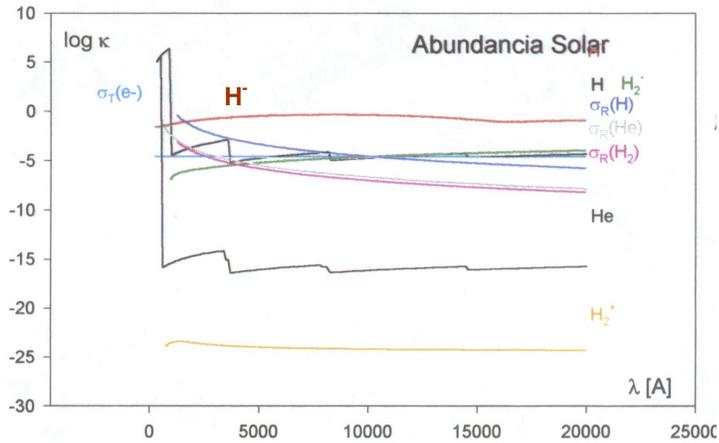


Fig. 3.5a: Coeficiente de absorción para el H, H⁻, H₂⁻, H₂⁺ y He, y dispersiones electrónica y Rayleigh del H, H₂ y He, para $T=5040$ K y $\log P_e=1$, en una abundancia Solar.

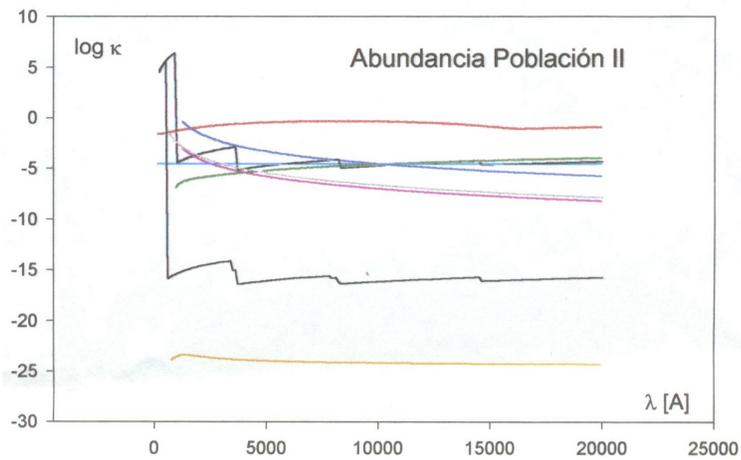


Fig. 3.5b: Coeficiente de absorción para el H, H⁻, H₂⁻, H₂⁺ y He, y dispersiones electrónica y Rayleigh del H, H₂ y He, para $T=5040$ K y $\log P_e=1$, en una abundancia de Población II.

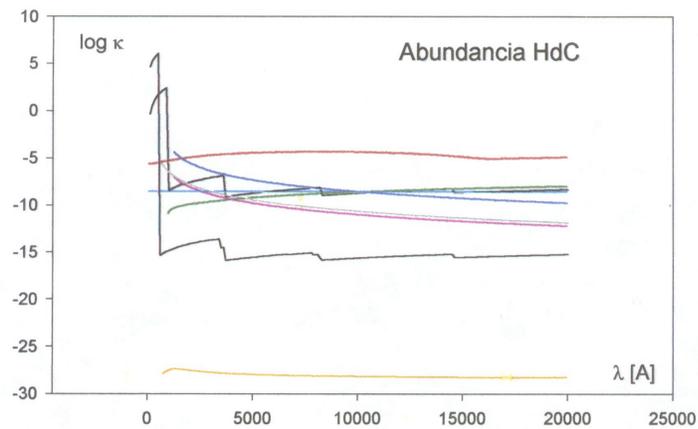


Fig. 3.5c: Coeficiente de absorción para el H, H⁻, H₂⁻, H₂⁺ y He, y dispersiones electrónica y Rayleigh del H, H₂ y He, para $T=5040$ K y $\log P_e=1$, en una abundancia HdC.

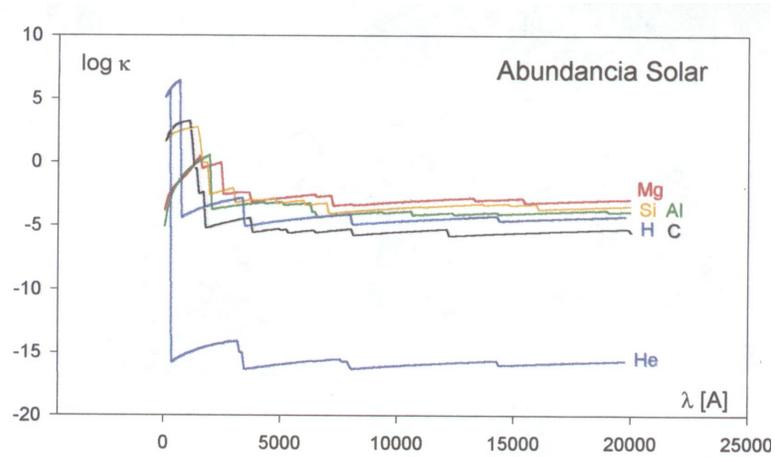


Fig. 3.6a: Coeficiente de absorción para el H, He, C, Mg, Al y Si, para $T = 5040$ K y $\log P_e = 1$, en una abundancia Solar.

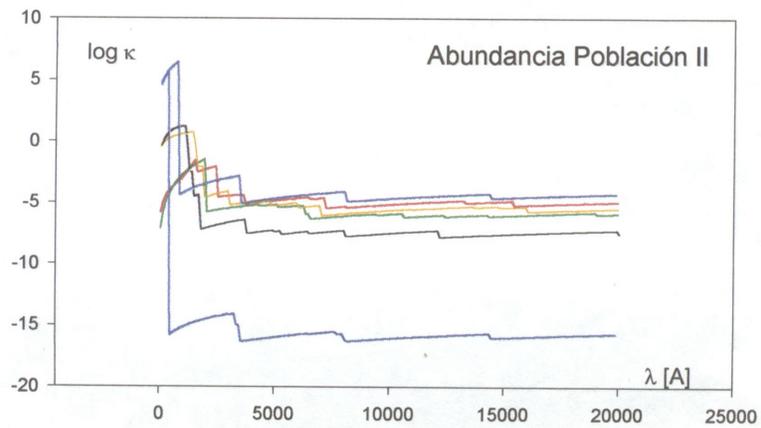


Fig. 3.6b: Coeficiente de absorción para el H, He, C, Mg, Al y Si, para $T = 5040$ K y $\log P_e = 1$, en una abundancia de Población II.

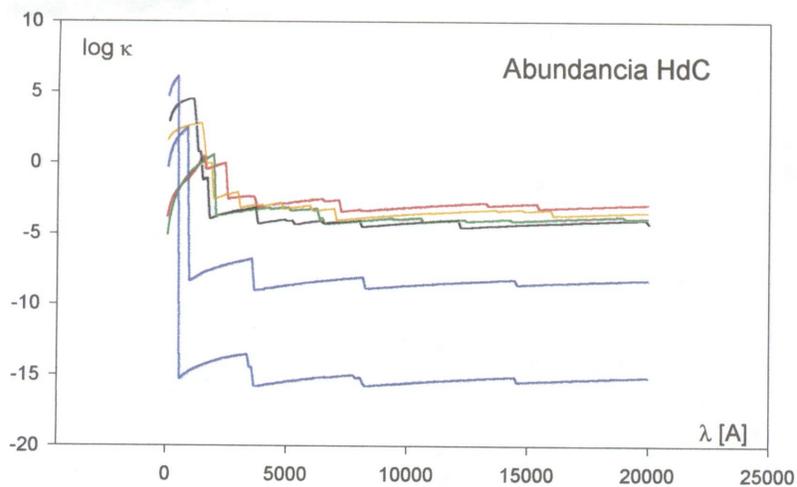


Fig. 3.6c: Coeficiente de absorción para el H, He, C, Mg, Al y Si, para $T = 5040$ K y $\log P_e = 1$, en una abundancia HdC.

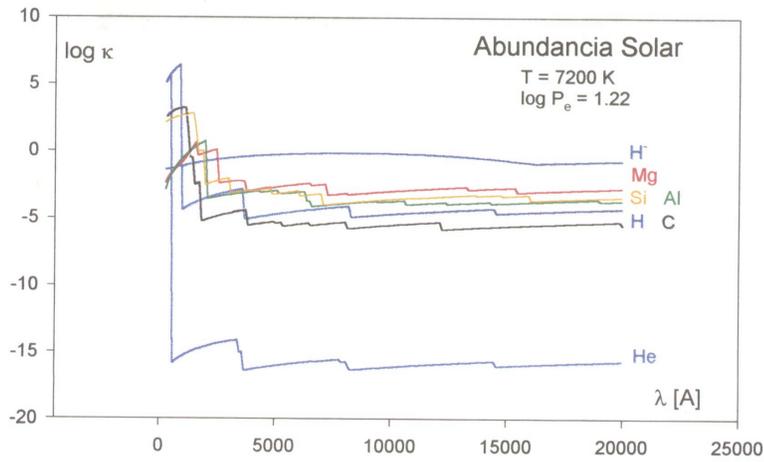


Fig. 3.7a: Coeficiente de absorción para el H, H⁺, He, C, Mg, Al y Si, para $T = 7200 \text{ K}$ y $\log P_e = 1.22$, en una abundancia Solar.

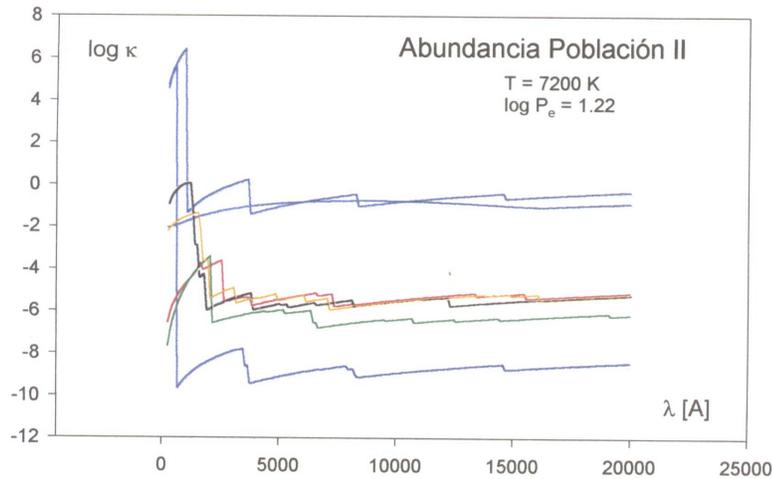


Fig. 3.7b: Coeficiente de absorción para el H, H⁺, He, C, Mg, Al y Si, para $T = 7200 \text{ K}$ y $\log P_e = 1.22$, en una abundancia de Población II.

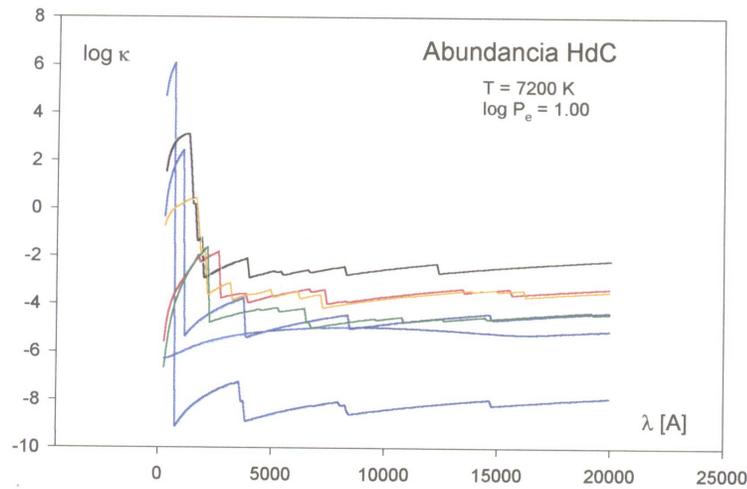


Fig. 3.7c: Coeficiente de absorción para el H, H⁺, He, C, Mg, Al y Si, para $T = 7200 \text{ K}$ y $\log P_e = 1.00$, en una abundancia HdC.

4. COEFICIENTES DE ABSORCIÓN POR GRAMO DE MATERIAL ESTELAR.

En esta sección se resumen los pasos llevados adelante para convertir los coeficientes de absorción calculados a coeficientes máscicos de absorción, esto es, expresarlos por unidad de masa del material estelar considerado. En esta etapa juega un papel relevante la abundancia elegida en la atmósfera en estudio.

4.1. CONVERSIÓN DE LA OPACIDAD A GRAMO DE MATERIAL ESTELAR.

La expresión utilizada para el coeficiente de absorción ligado-libre en unidades de cm^{-1} fue:

$$\kappa(\lambda) = \sum_{l=1}^8 n_l (1 - e^{-h\nu/kT}) \sigma_l(\lambda) \times 10^{-18} \quad (3.27)$$

con $\sigma_l(\lambda)$ la sección eficaz del elemento en cuestión y correspondiente a la serie l , siendo evidentemente nula para todas aquellas longitudes de onda superiores a una longitud de onda crítica.

Para calcular la absorción por átomo en el nivel fundamental procedimos como sigue:

$$\frac{\kappa(\lambda)}{n_0} = \sum_{l=1}^8 \frac{n_l}{n_0} (1 - e^{-h\nu/kT}) \sigma_l(\lambda) \times 10^{-18} \quad (3.28)$$

Pero:

$$\frac{n_l}{n_0} = \frac{g_l}{g_0} 10^{-\chi_l \theta} \quad (3.29)$$

Por lo tanto obtenemos:

$$\kappa_0 = \frac{\kappa(\lambda)}{n_0} = \frac{(1 - 10^{-h\nu \theta}) 10^{-18}}{g_0} \sum_{l=1}^8 g_l 10^{-\chi_l \theta} \sigma_l(\lambda) \quad (3.30)$$

Luego, la absorción por átomo en el correspondiente estado de ionización será:

$$\kappa' = \kappa_0 \frac{g_0}{u(T)} \quad (3.31)$$

Entonces, la absorción por átomo de esa clase vendrá dada por la relación:

$$\kappa'' = \kappa_0 \frac{g_0}{u(T)} \frac{\sum_l n_l}{n_{Total}} \quad (3.32)$$

Luego, la absorción por átomo de Hidrógeno es igual a:

$$\kappa_H = \kappa_0 \frac{g_0}{u(T)} \frac{\sum_l n_l}{n_{Total}} \frac{n_{Total}}{n_H} \quad (3.33)$$

Por lo tanto, si queremos calcular el coeficiente de absorción por unidad de volumen, utilizaremos $n_H = n_H^{vol}$; mientras que si deseamos la absorción por unidad de masa, emplearemos el valor $n_H = n_H^{masa}$.

La densidad del material en g/cm^3 viene dada por la relación: $\rho = \sum_i m_i N_i$, donde m_i es la masa atómica (en gramos) del elemento i y N_i su abundancia por cm^3 .

Pero:

$$\sum_i m_i N_i = m_H N_H + m_{He} N_{He} + \dots = m_H N_H \left(1 + \frac{m_{He}}{m_H} \frac{N_{He}}{N_H} + \dots\right) = m_H N_H \left(\frac{\sum_i \alpha_i A_i}{A_H}\right) \quad (3.34)$$

donde α_i es la abundancia relativa al H del elemento i y A_i la masa atómica.

Ahora:

$$N_A = N_H + N_{He} + \dots = N_H (1 + N_{He}/N_H + \dots) = N_H (\sum_i \alpha_i) \Rightarrow N_H = N_A / \sum_i \alpha_i \quad (3.35)$$

donde $N_A = (P_g - P_e)/kT$.

Luego:

$$\rho = \frac{m_H N_A \sum_i \alpha_i A_i}{\sum_i \alpha_i A_H} = m_H \frac{(P_g - P_e)}{kT} \frac{\sum_i \alpha_i A_i}{\sum_i \alpha_i A_H} \equiv m_H \frac{(P_g - P_e)}{kT} \mu \quad (3.36)$$

donde definimos μ como el peso molecular medio.

Si designamos con n_H al número de partículas de H por gramo de material estelar, tendremos finalmente:

$$n_H = \frac{N_H}{\rho} = \frac{N_A}{\sum_i \alpha_i} \frac{1}{\rho} = \frac{(P_g - P_e)}{kT} \frac{1}{\sum_i \alpha_i} \frac{1}{\rho} = \frac{\rho}{\mu m_H} \frac{1}{\sum_i \alpha_i} \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\mu m_H \sum_i \alpha_i} \quad (3.37)$$

A continuación indicamos los valores de n_H hallados para cada abundancia elegida:

- n_H (HdC) = $4.41840 \times 10^{19} g^{-1}$
- n_H (Solar) = $4.22069 \times 10^{23} g^{-1}$
- n_H (Pob.II) = $5.18573 \times 10^{23} g^{-1}$

4.2. RESULTADOS OBTENIDOS.

En las figuras 3.8 a 3.10 se brindan gráficos en donde se compara, para cada una de las abundancias químicas consideradas, la absorción total másica para valores de $(T; \log(P_e)) = (5040 K; 1)$ y $(7200 K; 1.22)$. En el eje x tenemos la longitud de onda expresada en \AA y en el eje y tenemos el logaritmo decimal de la opacidad; esta última elección nos permite tener una idea aproximada de los órdenes de magnitud involucrados en cada una de las absorciones y cómo aportan cada una a la absorción total.

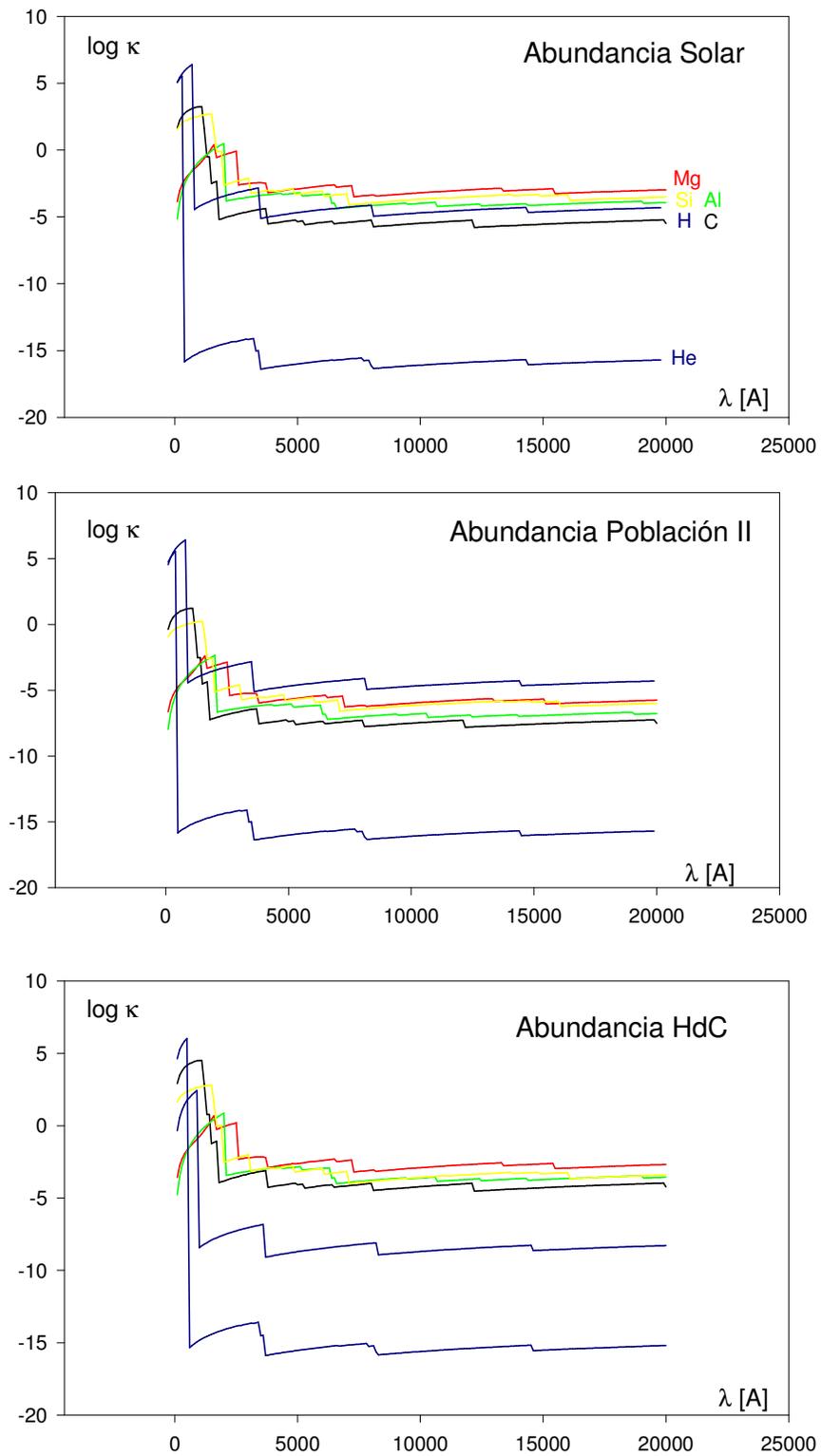


Fig. 3.8: Gráficos del coeficiente másico de absorción y dispersión para el H, He y algunos metales en las distintas abundancias de trabajo, correspondientes a una $T = 5040 \text{ K}$ y $\log P_e = 1$.

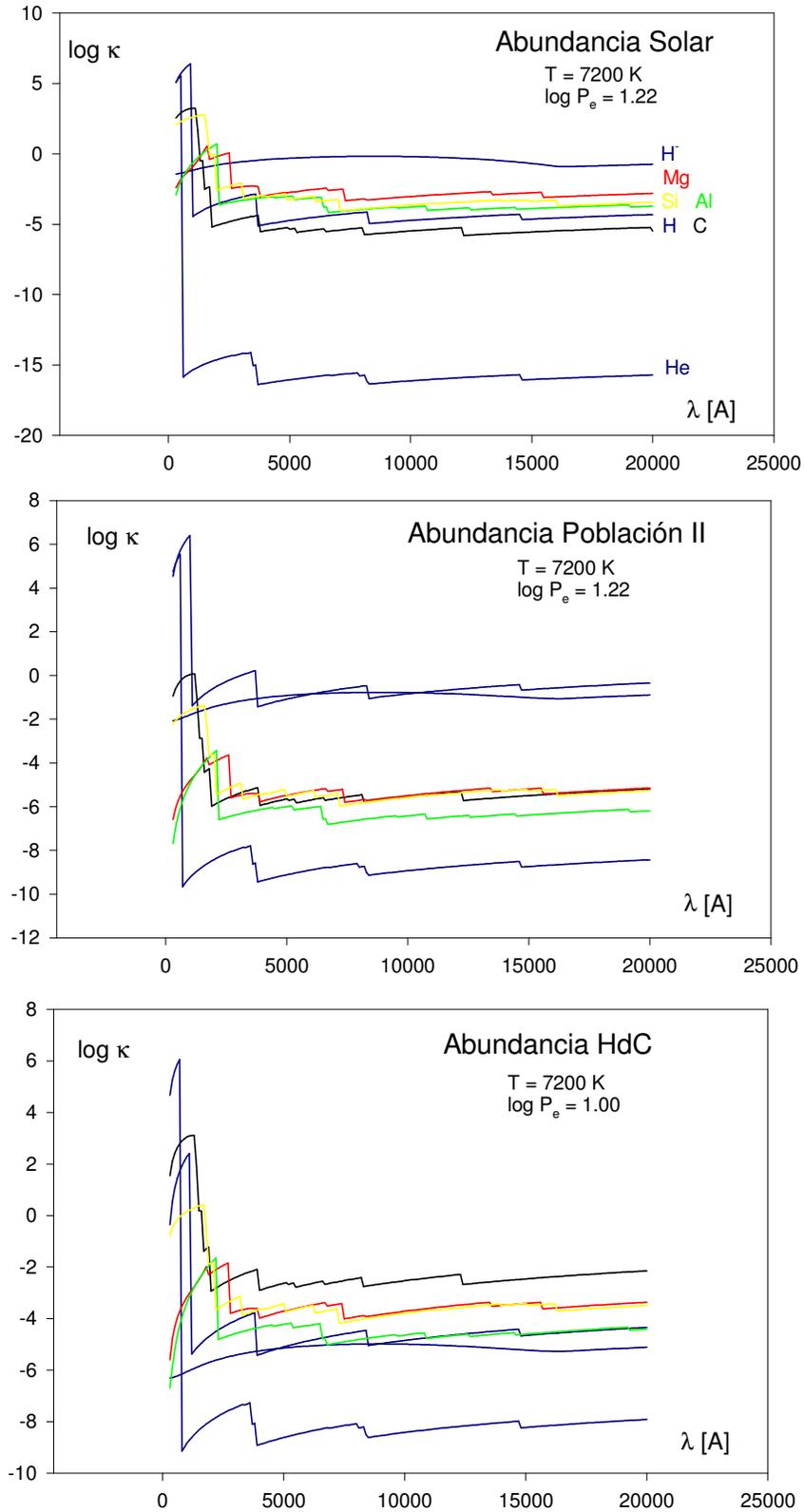


Fig. 3.9: Gráficos del coeficiente másico de absorción para el H, He y algunos Metales, en las distintas abundancias de trabajo, correspondientes a una $T = 7200$ K y $\log P_e = 1$ o $\log P_e = 1.22$.

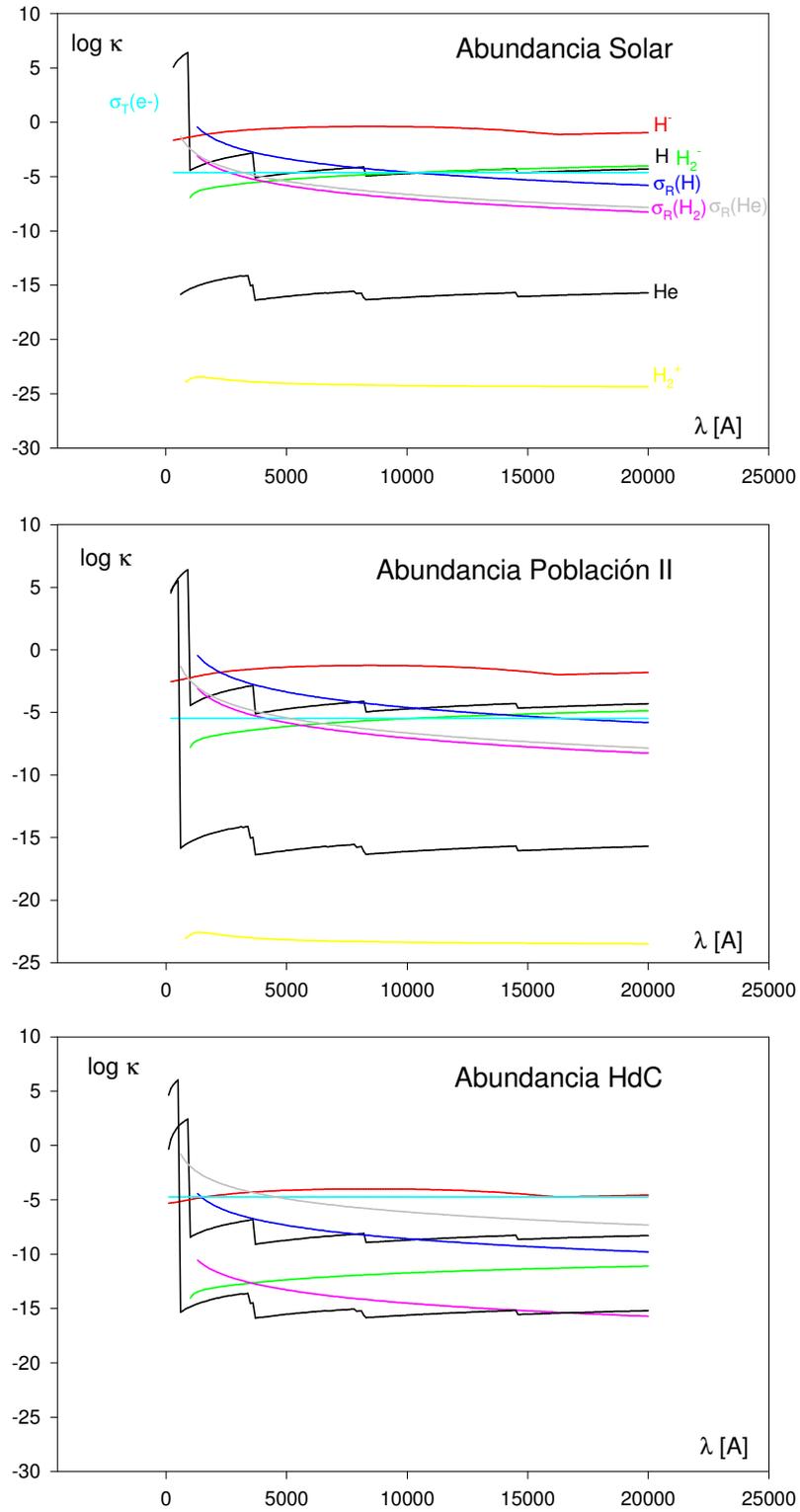


Fig. 3.10: Gráficos del coeficiente másico de absorción y dispersión para varias especies del H y del He, en las distintas abundancias de trabajo, correspondientes a una $T = 7200 K$ y $\log P_e = 1$.

5. OPACIDAD MEDIA DE ROSSELAND.

5.1. INTRODUCCIÓN.

En la integración de la ecuación del equilibrio hidrostático aparece como una de las posibles variables de integración la profundidad óptica media, en donde cumple un papel protagónico la absorción cuantificada a través de un coeficiente de opacidad. Éste es elegido siguiendo alguna conveniencia particular: a veces se utiliza la absorción monocromática en alguna longitud de onda característica (por ejemplo $\lambda=5000 \text{ \AA}$), otras algún coeficiente de absorción medio (integrado en frecuencias con un peso particular).

Si bien es cierto que ninguna opacidad media que se defina permitirá una completa correspondencia entre un problema no gris (real) y un problema gris, sin embargo proveerá una útil estima inicial de la estructura de temperatura en la atmósfera estelar que se estudie considerando como primera aproximación, por ejemplo, $T(\tau_R)=T_{\text{gris}}(\tau_R)$, mejorándose luego esta estima con un procedimiento de corrección diseñado para establecer el equilibrio radiativo en el campo de radiación no gris.

En este sentido consideraremos el coeficiente medio de Rosseland como opacidad media, el cual recibe el nombre de su creador y como veremos, debido a la naturaleza armónica de la promediación, da mayor peso a aquellas regiones espectrales donde la absorción es menor, y por ende, donde la mayor parte de la radiación es transportada. Otra de las características de este coeficiente, derivada de su definición, es su consistencia con la aproximación de difusión; dicho en otros términos, la profundidad óptica τ_R derivada de aquél permite recuperar la solución asintótica de la ecuación del transporte y el valor del flujo correctos a grandes profundidades ($\tau_R \gg 1$), por lo que la distribución de la temperatura queda determinada con mucha precisión a través de la relación: $T^4 = (3/4)T_{\text{ef}}^4 (\tau_R - q(\tau_R))$, donde $q(\tau)$ es la función de Hopf.

5.2. DEFINICIONES.

Partiendo de la ecuación del transporte y tomando adecuados momentos en la misma se obtiene las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\frac{\partial K_v}{\partial z} = -\kappa_v H_v \quad (\text{caso no gris}) \quad (3.38a) \quad \frac{dK}{dz} = -\kappa H \quad (\text{caso gris}) \quad (3.38b)$$

en donde H y K son respectivamente el flujo de Eddington y la presión de radiación (en unidades de $c/4\pi$).

Si queremos obtener el valor correcto del flujo de energía integrado, definiremos un coeficiente medio $\langle \kappa \rangle$ que satisfaga una ecuación similar a la ecuación (3.38a) para el caso *gris* pero partiendo de la ecuación (3.38b) para el caso *no gris* :

$$-\int_0^\infty \frac{\partial K_v}{\partial z} \frac{d\nu}{\kappa_v} \stackrel{(3.27)}{=} \int_0^\infty H_v d\nu = H \stackrel{(3.27)}{\equiv} -\frac{dK}{dz} \stackrel{\text{"gris"}}{=} \langle \kappa \rangle \quad (3.39)$$

o equivalentemente,

$$\frac{1}{\langle \kappa \rangle} \equiv \frac{\int_0^{\infty} \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{\partial K_\nu}{\partial z} d\nu}{\int_0^{\infty} \frac{\partial K_\nu}{\partial z} d\nu} \quad (3.40)$$

Existe una dificultad práctica en saber de antemano el valor de K_ν , por lo que el cálculo no podría efectuarse hasta que la ecuación del transporte fuese resuelta. Sin embargo, como dijimos anteriormente, realizamos la aproximación para grandes profundidades de la atmósfera, en donde se cumple que $K_\nu \rightarrow J_\nu/3$ y $J_\nu \rightarrow B_\nu$, en donde J_ν y B_ν son respectivamente la intensidad específica media y la función de Planck, ambas monocromáticas.

Por lo tanto, si escribimos:

$$\frac{\partial K_\nu}{\partial z} \approx \frac{1}{3} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} \frac{dT}{dz} \quad (3.41)$$

definimos la opacidad media κ_R de la siguiente forma:

$$\frac{1}{\kappa_R} \equiv \frac{\frac{1}{3} \frac{dT}{dz} \int_0^{\infty} \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} d\nu}{\frac{1}{3} \frac{dT}{dz} \int_0^{\infty} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} d\nu} = \frac{\int_0^{\infty} \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} d\nu}{\int_0^{\infty} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} d\nu} \quad (3.42)$$

o de una manera más breve:

$$\kappa_R^{-1} = \frac{\pi}{4\sigma_R T^3} \int_0^{\infty} \kappa_\nu^{-1} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} d\nu \quad (3.43)$$

5.3. EXPRESIONES DE LA INTEGRACIÓN NUMÉRICA.

Un haz de radiación es afectado por la suma de la absorciones radiativas y dispersivas, obteniéndose así lo que podríamos llamar un coeficiente de extinción o de absorción total. Éste es el que interviene en la ecuación del transporte y también en el coeficiente medio de Rosseland. Si tenemos en cuenta la expresión de la función de Planck en la definición de κ_R y efectuamos la derivación parcial respecto a la temperatura, se arriba a la siguiente expresión:

$$\kappa_R^{-1} = \frac{\pi h^2}{2\sigma_R c^2 T^5} \int_0^{\infty} \frac{\nu^4 e^{h\nu/kT}}{\kappa_\nu (e^{h\nu/kT} - 1)^2} d\nu \quad (3.44)$$

donde las constantes tienen el significado usual y en κ_ν se incluyen tanto las absorciones radiativas (corregidas por las emisiones estimuladas) como las dispersiones, es decir, representa un coeficiente de extinción monocromático.

Pero como integraremos en longitud de onda, aplicando el cambio de dominio de integración correspondiente se obtiene:

$$\kappa_R^{-1} = \frac{\pi h^2 c^3}{2\sigma k T^5} \int_0^\infty \frac{1}{\lambda^6 \kappa_\lambda} \frac{e^{hc/k\lambda T}}{(e^{hc/k\lambda T} - 1)^2} d\lambda \quad (3.45)$$

Utilizando los valores de las constantes físicas de Cohen & Taylor (1991), y llamando $\lambda_A = \lambda \cdot 10^8$ [Å] (ya que integraremos en intervalos de longitudes de onda expresados en Ångström), se obtiene:

$$\kappa_R^{-1} = \frac{\alpha}{T^5} \int_0^\infty \frac{1}{\lambda_A^6 \kappa_{\lambda_A}} \frac{e^{\beta/\lambda_A T}}{(e^{\beta/\lambda_A T} - 1)^2} d\lambda_A \quad (3.46)$$

donde: $\alpha = 2.37348511 \times 10^{39} \text{ Å}^5 \text{ K}^5$ y $\beta = 1.438768689 \times 10^8 \text{ Å K}$.

Definiendo $u(\lambda_A, T) = \beta/\lambda_A T$ y realizando el cambio de variable adecuado obtenemos:

$$\kappa_R^{-1} = \int_0^\infty \frac{1}{\kappa_u} G(u) du \quad (3.47)$$

donde:

$$G(u) = \frac{15}{4\pi^4} u^4 \frac{e^u}{(e^u - 1)^2} \quad (3.48)$$

Luego, procedimos a subdividir el dominio de integración en intervalos que tenían por extremos importantes discontinuidades. La fórmula de integración numérica a utilizar, en cada uno de ellos, fue la de Newton-Cotes de 5 abscisas, la cual indicamos a continuación:

$$\int_a^b f(x) \approx \frac{1}{90}(b-a)[7f(a) + 32f(a + \frac{b-a}{4}) + 12f(a + \frac{b-a}{2}) + 32f(a + \frac{3(b-a)}{4}) + 7f(b)] \quad (3.49)$$

5.4. ANÁLISIS DEL INTEGRANDO ROSSELAND.

Los gráficos de las Figs. 3.11 y 3.12 muestran para dos tipos de abundancias, Solar y HdC respectivamente, el comportamiento del coeficiente de absorción total con la longitud de onda para distintos valores de temperatura comprendidos entre 3000 K y 8000 K y presiones electrónicas unitaria y diez veces superior. En los mismos se evidencian ciertas discontinuidades debido a los distintos cortes de las series de los principales elementos químicos considerados. Estas discontinuidades deberán ser tenidas en cuenta a la hora de llevar a cabo la integración numérica y calcular la opacidad media de Rosseland.

Del análisis minucioso realizado con el comportamiento del coeficiente de absorción monocromático con las abundancias de trabajo, en particular la variada cantidad de discontinuidades debidas a los límites de las distintas series, se concluyó que la integración numérica debería realizarse dividiendo al dominio en un conjunto de intervalos limitados por las discontinuidades citadas. En este sentido se llevó adelante este estudio para las abundancias de trabajo, advirtiéndose que estos saltos estaban presentes en determinados valores de temperatura. Sin embargo, dado que nuestro objetivo fue generalizar este procedimiento, se decidió tomar **todas** las longitudes de onda en donde ocurrían estas discontinuidades, las cuales llamaremos de ahora en más **longitudes de onda críticas** (λ_c). Por ello, aunque para un dado valor de temperatura no aparezca tal discontinuidad, es decir un

intervalo en donde el coeficiente de absorción presente un comportamiento suave, la partición del integrando en este intervalo no afectaría, en principio, al resultado total.

Por ello seleccionamos todas las λ_c de los elementos químicos absorbedores, con particular énfasis en los absorbedores de la atmósfera HdC ya que, como se advierten en las figuras 3.12, son en estas composiciones en donde el coeficiente de absorción presentan mayores irregularidades. Para las abundancias de estrellas de Población II se decidió trabajar con los intervalos que resultaran del análisis de la abundancia Solar. Luego de analizar los gráficos de las opacidades monocromáticas para distintas temperaturas se adoptaron los siguientes intervalos de integración (en Å):

- Abundancia Solar: [100,911.8], [911.8,3647.1], [3647.1,8206], [8206,14588.5], [14588.5,100000].
- Abundancia HdC: [100,911.8], [911.8,3084], [3084,3741], [3741,6524], [6524,7019], [7019,7231], [7231,8084], [8084,14588.5], [14588.5,100000]

Una vez establecidos los intervalos de integración, el algoritmo de integración es relativamente sencillo ya que en cada intervalo el comportamiento del integrando será suave. El programa confeccionado para tal fin simplemente cubre el dominio de integración, seccionándolo en cada uno de los intervalos según la abundancia elegida, y procede a evaluar las opacidades monocromáticas, para un determinado valor de temperatura y presión electrónica, correspondiente a cada uno de los elementos considerados en la misma. Posteriormente, en cada intervalo de longitud de onda aplica la fórmula de cuadratura, sumándose posteriormente todas las contribuciones.

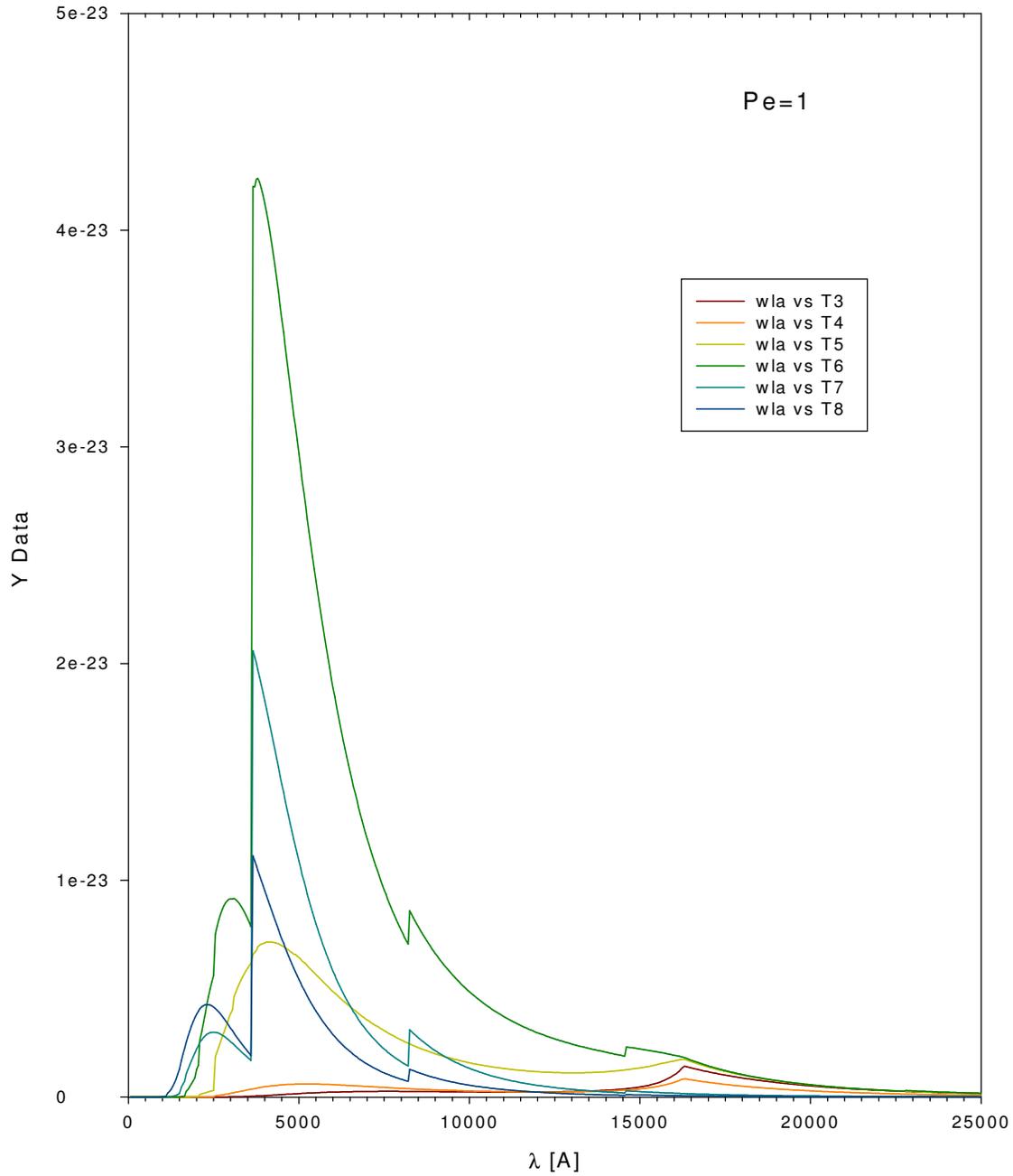


Fig. 3.11a:

Gráfico del coeficiente de absorción total en función de la longitud de onda, correspondiente a una atmósfera de composición Solar y presión electrónica unitaria. Las longitudes de onda (wla) están expresadas en *Ångström* y las temperaturas en miles de grados *Kelvin* ($T_N = N \times 1000 K$).

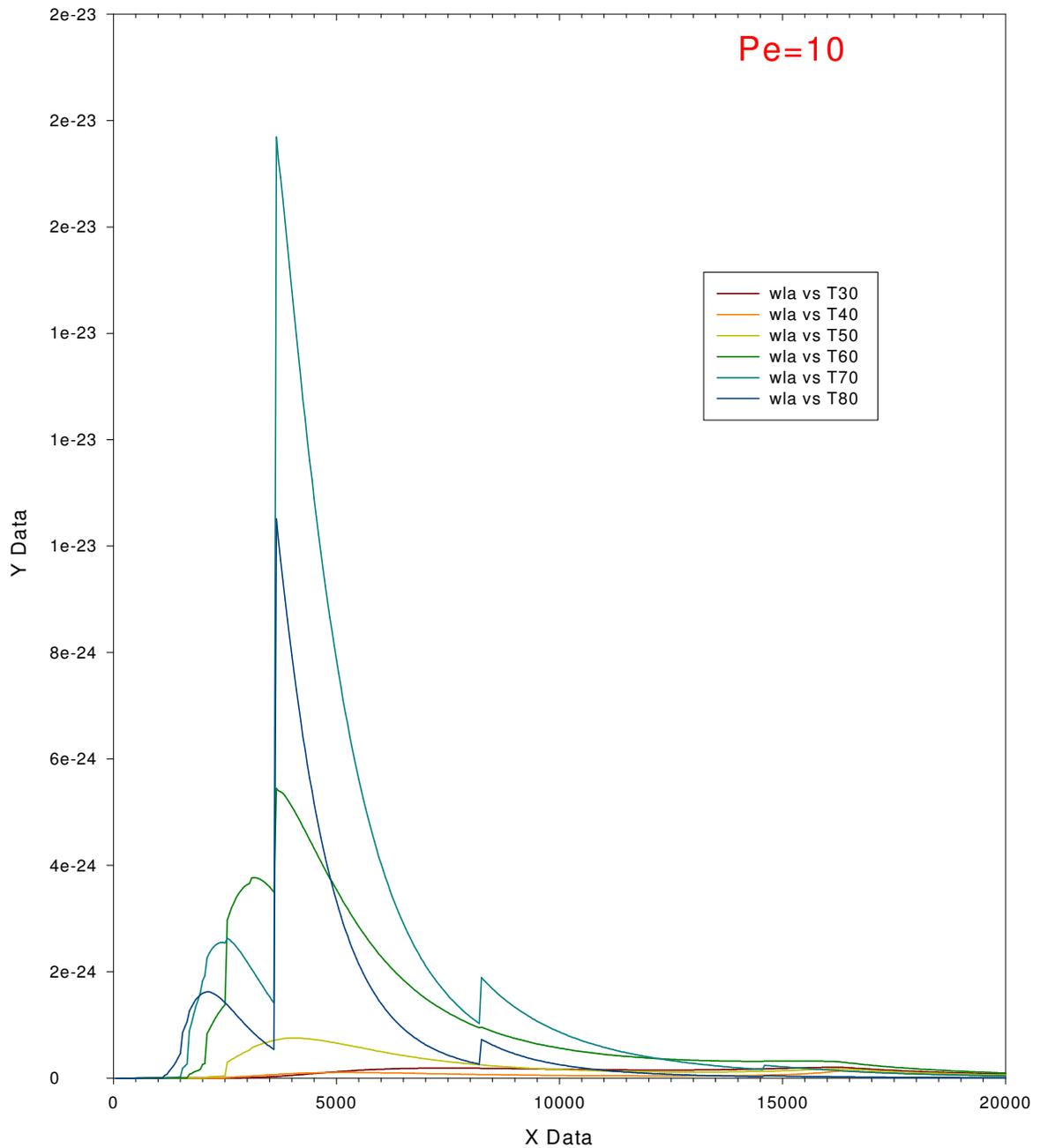
**Fig. 3.11b:**

Gráfico del coeficiente de absorción total en función de la longitud de onda, correspondiente a una atmósfera de composición Solar y presión electrónica de 10 dyn/cm^2 . Las longitudes de onda (wla) están expresadas en \AA ngström y las temperaturas en centenas de grados Kelvin ($T_N = N \times 100 \text{ K}$). Notar que la escala en el eje de las ordenadas es de 2×10^{-24} , a una sola cifra significativa.

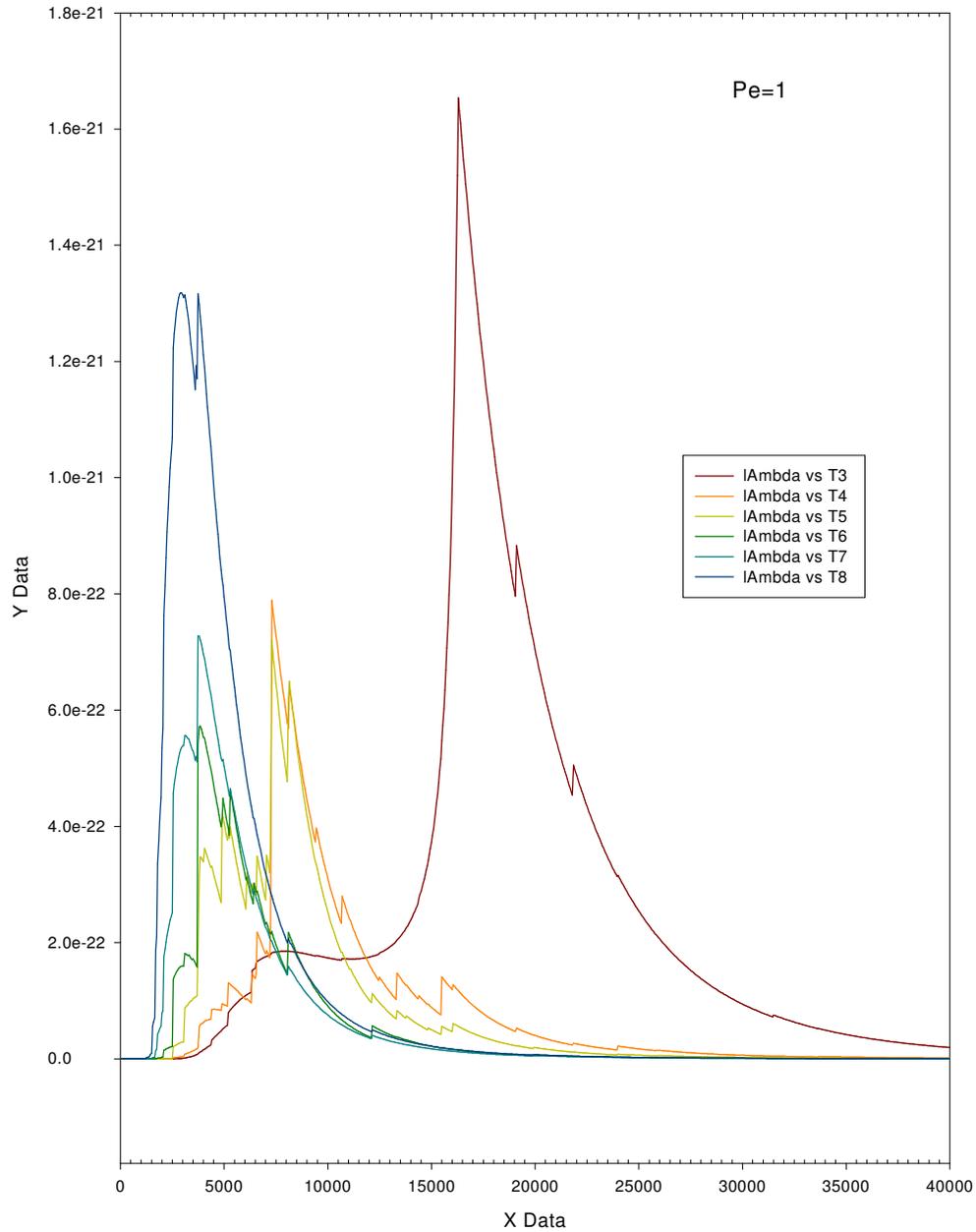


Fig 3.12a:

Gráfico del coeficiente de absorción total en función de la longitud de onda, correspondiente a una atmósfera HdC y presión electrónica unitaria. Las longitudes de onda (λ) están expresadas en \AA y las temperaturas en miles de grados Kelvin ($T_N = N \times 1000 \text{ K}$).

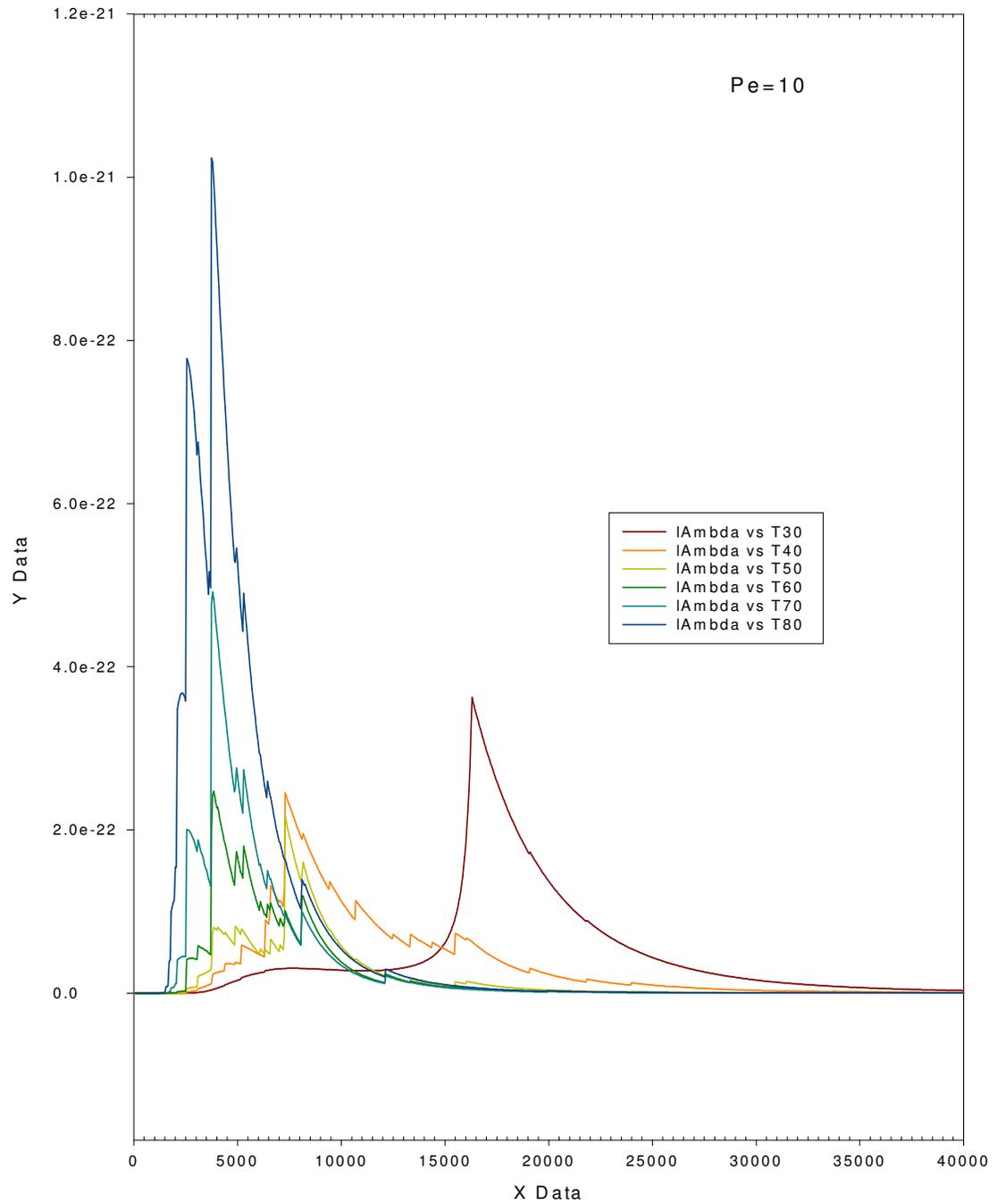
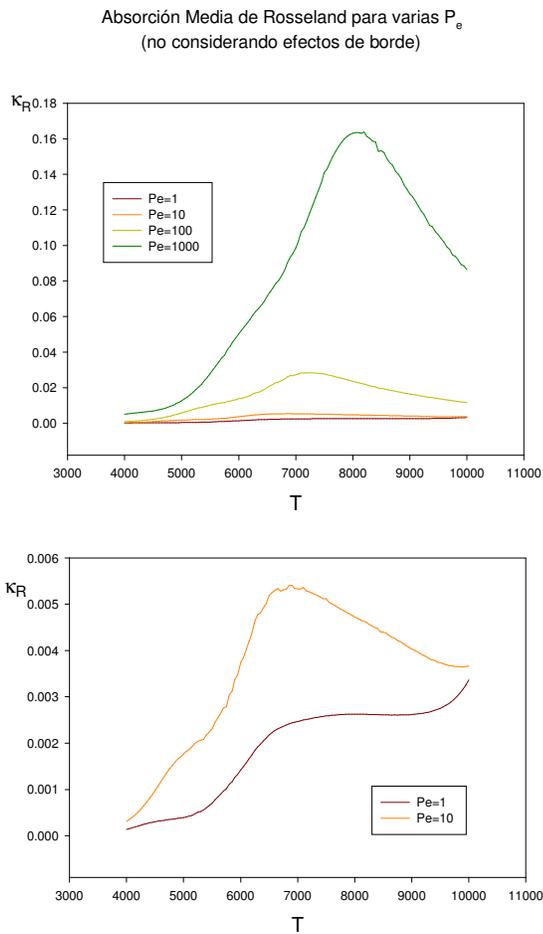
**Fig 3.12b:**

Gráfico del coeficiente de absorción total en función de la longitud de onda, correspondiente a una atmósfera HdC y presión electrónica de 10 dyn/cm^2 . Las longitudes de onda ($l\text{Ambda}$) están expresadas en Ångström y las temperaturas en centenas de grados *Kelvin* ($T_N = N \times 100 \text{ K}$).

Notemos que debido a las discontinuidades en los extremos de cada intervalo de integración, los valores de $f(a)$ y $f(b)$ de la ecuación (3.49) fueron reemplazado, respectivamente, por $f(a+\Delta)$ y $f(b-\Delta)$, con un valor de Δ convenientemente elegido, el cual, en nuestros cálculos, correspondió a $\Delta = 0.05$. Esto permite evitar estimaciones incorrectas en el cálculo del coeficiente medio de Rosseland, ya que excluye la valuación del integrando en las longitudes de onda críticas. Por lo tanto, la fórmula de Newton-Cotes corregida, modificando la evaluación en los extremos del intervalo, queda expresada de la siguiente forma:

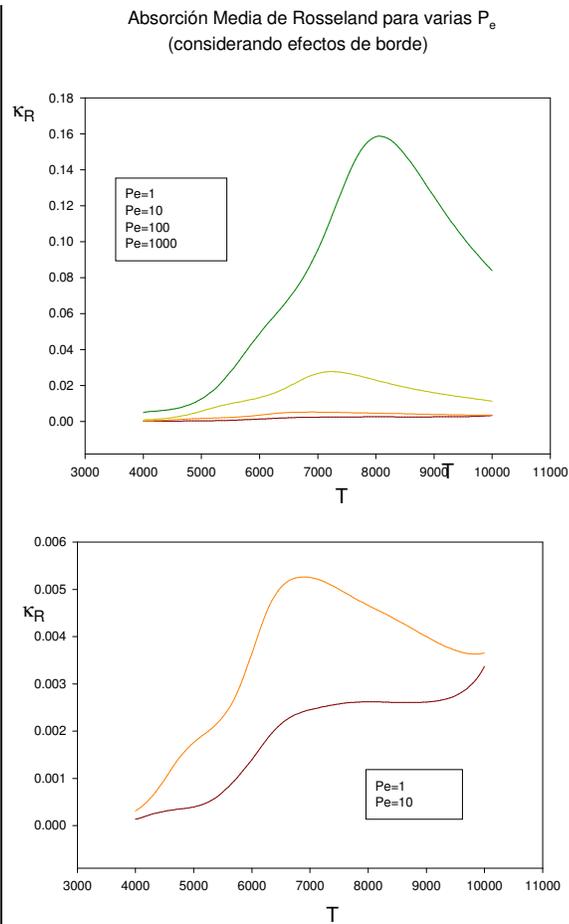
$$\int_a^b f(x) \approx \frac{1}{90}(b-a)[7f(a+\Delta) + 32f(a+\frac{b-a}{4}) + 12f(a+\frac{b-a}{2}) + 32f(a+\frac{3(b-a)}{4}) + 7f(b-\Delta)] \quad (3.50)$$

Las ligeras oscilaciones que aparecen en las figuras 3.13a, en comparación con el comportamiento más regular de las figuras 3.13b muestran las consecuencias, gráficas y numéricas, de no introducir esta pequeña corrección en el algoritmo de integración numérica, el cual que denominamos “efectos de borde”.



Figs. 3.13a

Gráficos del coeficiente de absorción medio de Rosseland para varias valores de presiones electrónicas. En los mismos no se considera los “efectos de borde” ocasionados por las discontinuidades del coeficiente de absorción monocromático. Aquí la abundancia de referencia elegida fue la **Solar**. En el gráfico inferior se modificó la escala en el eje de las abscisas para analizar en detalle las diferencias entre los gráficos allí indicados.



Figs. 3.13b

Gráficos del coeficiente de absorción medio de Rosseland para varias valores de presiones electrónicas. En los mismos se tuvieron en cuenta los “efectos de borde” ocasionados por las discontinuidades del coeficiente de absorción monocromático. Aquí la abundancia de referencia elegida fue la **Solar**. En el gráfico inferior se modificó la escala en el eje de las abscisas para analizar en detalle las diferencias entre los gráficos allí indicados.

En la Fig. 3.14 se realiza una comparación (gráfica y numérica) del coeficiente medio de Rosseland para las tres abundancias estándar de trabajo, correspondientes a valores logarítmicos de presiones electrónicas comprendidas entre 0 y 3 (con paso unitario), en donde se estudian la influencia de elegir uno u otro conjunto de intervalos de subdivisión en la integración numérica. El objetivo del mismo fue analizar hasta qué punto la elección influye en los resultados finales del cálculo. En este sentido podemos decir que el efecto de utilizar un conjunto u otro de particiones se pone en evidencia para valores elevados de la presión electrónica, lo que podríamos justificar con una incompletitud, por parte nuestra, de otros absorbedores que para estos valores de presiones electrónicas, amortiguarían estas discordancias y las minimizarían.

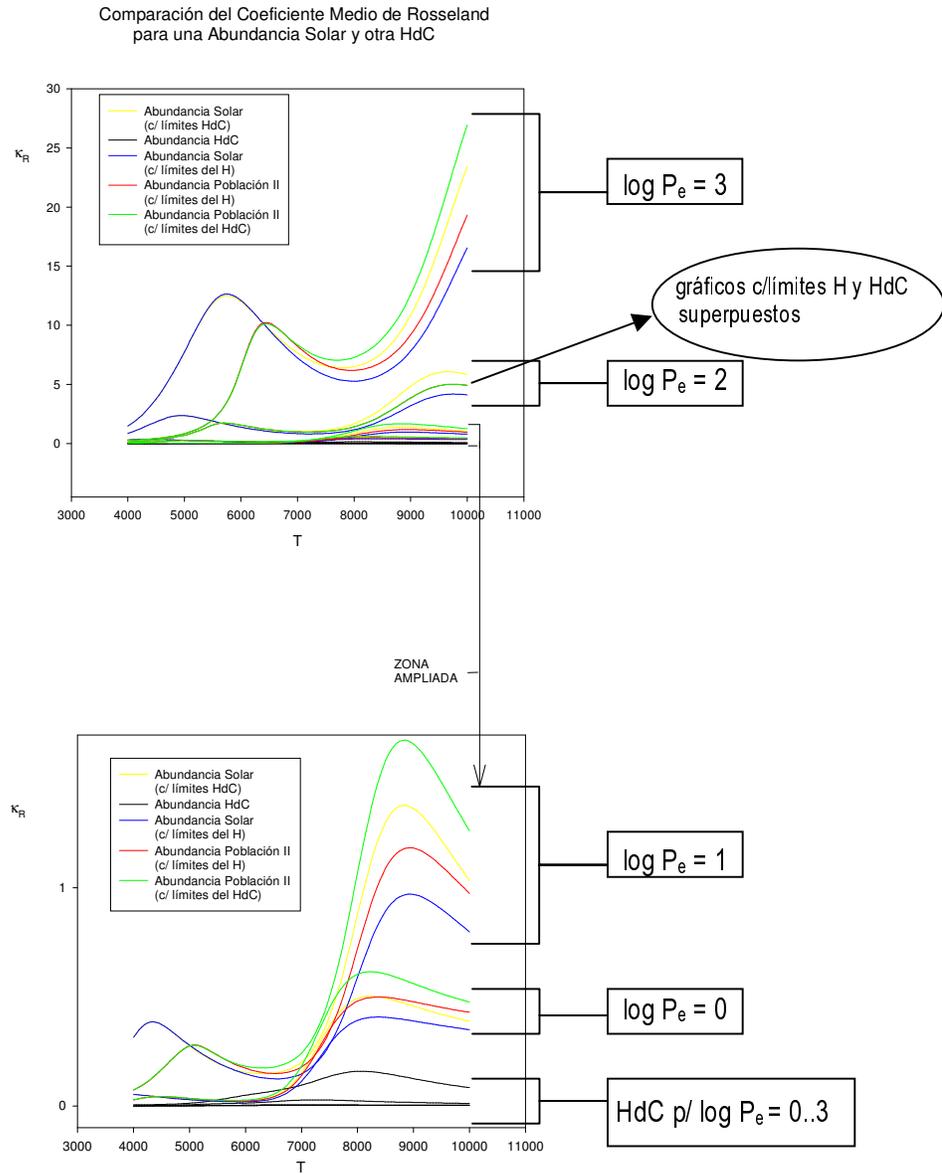


Fig. 3.14: Comparación de los valores del coeficiente de absorción medio de Rosseland para las distintas abundancias y presiones electrónicas indicadas. En el gráfico inferior se modificó la escala del eje de las abscisas de tal manera de visualizar con mayor detalle la zona indicada en el diagrama superior.

6. CONCLUSIONES.

Fueron calculados factores de Gaunt ligado-libre y libre-libre mediante procedimientos cuánticos, para una extensa gama de energías y para electrones moviéndose en un campo Coulombiano (Karzas & Latter, 1961).

Estos valores pueden ser aproximados tomándolos directamente iguales a la unidad (Ünsold, 1938), o por fórmulas asintóticas (Menzel & Pekeris, 1935; Gray, 1976, 1992), o por otras polinómicas (Gingerich, 1964, 1969; Mihalas, 1967). Recientemente, Hummer (1988) extendió, para las transiciones libre-libre los cálculos de Karzas & Latter (1961), representando mediante ajuste por polinomios de Chebyshev los valores calculados.

En temperaturas intermedias ($5000 \leq T \leq 7000$ K) la absorción del H es importante; para temperaturas mayores, la dispersión Thomson de electrones juega un rol preponderante, salvo para presiones electrónica altas que, por efectos de la disminución en los procesos de ionización, hace que el H o el He aporte a la opacidad.

De nuestro estudio de los factores de Gaunt ligado-libre podemos afirmar que para números cuánticos principales bajos ($n \leq 6$), la aproximación de Gingerich (1964) es buena, siendo necesario acudir a la aproximación de Menzel & Pekeris (1935) para números cuánticos principales mayores. Con ello se logran errores menores al 1% (Milone & Merlo, 1994). Sin embargo, para obtener precisiones más elevadas es necesario acudir a los valores tabulados de Karzas & Latter (1961).

En lo que respecta a los factores de Gaunt libre-libre, encontramos que para $T < 20000$ K es muy satisfactoria la primera aproximación de Gingerich (1964). Sin embargo, aunque si es permisible una disminución en la precisión de los resultados, se puede utilizar la segunda aproximación de Gingerich (1969) para cualquier valor de temperatura. Por el contrario, y generalmente en casos en que sea importante la absorción libre-libre, para lograr resultados más precisos que el 1%, recomendamos el uso de la aproximación de interpolación bidimensional de Hummer (1988).

Como era previsible, nuestros cálculos conducen a afirmar que no se puede adoptar un único valor límite de serie en la contribución ligado-libre para la absorción del hidrógeno, apareciendo una dependencia compleja entre este valor límite con el valor del límite inicial del nivel a partir del cual efectuar la suma y la temperatura T .

Sin embargo, establecimos como receta simple, precisa y eficiente de cálculo la siguiente, la cual no depende de la temperatura:

- $\lambda \leq 912 \text{ \AA}$: $n_0 = 1$; $m = 3$
- $912 \text{ \AA} < \lambda \leq 3647 \text{ \AA}$: $n_0 = 2$; $m = 7$
- $3647 \text{ \AA} < \lambda \leq 91178 \text{ \AA}$: $n_0 = 3, \dots, 10$; $m = 17$ ($m = 15$ resulta en muchas ocasiones preciso)

En lo que a absorción se refiere, resulta notable la importancia del ion H^- . Gran parte de la estructura fotosférica del Sol (y de estrellas similares) está determinada por él. Lo curioso es que en estrellas de Población II, todavía es importante la absorción del H^- en capas superficiales e intermedias; luego es superado por el Hidrógeno. En estrellas deficientes en Hidrógeno, el ion jugaría un papel secundario en las capas más superficiales, pero la absorción preponderante se debe al C, Mg, Al y Si.

En longitudes de onda corta, la absorción de los metales configura en cierta medida el perfil de la absorción continua en todas las abundancias químicas analizadas. Sin embargo en la abundancia HdC, y para temperaturas moderadas, da forma al perfil en todo el rango de longitudes de onda analizadas.

En longitudes de onda muy cortas (menores que los 1000 Å), el H (hasta el límite de Lyman: 911.8 Å) y el He (hasta 504.3 Å), en sus transiciones desde el nivel fundamental, dan forma al perfil de la absorción continua.

En lo relativo a las absorciones, establecimos criterios para el cálculo del coeficiente de absorción medio de Rosseland para las distintas abundancias utilizadas (Solar, Población II y HdC). En este sentido, definimos dos particiones distintas para la integración en longitudes de onda, advirtiendo algunas discrepancias en los valores obtenidos de la opacidad media para valores elevados de la presión electrónica, los cuales se deben, a nuestro juicio, a que en estas situaciones físicas es necesario la inclusión de otros absorbedores que unificarían los guarismos obtenidos.

Pusimos de manifiesto, finalmente, la diferenciación en los valores del coeficiente de absorción medio de Rosseland para las distintas abundancias utilizadas y en diferentes condiciones físicas de temperatura y presión electrónica. Teniendo en cuenta que dicho coeficiente medio es una promediación armónica en la cual se le da mayor peso a aquellas frecuencias con menor valor del coeficiente monocromático de absorción (y por lo tanto donde mayor transporte de radiación se produce) resulta entendible los resultados expuestos en las figuras 3.13 y 3.14; en efecto, los valores del coeficiente medio de Rosseland para la mezcla HdC están muy por debajo que los de las otras abundancias debido a la absorción de los metales considerados en nuestros cálculos, de abundancias relativas mayores que en las otras abundancias. Además, la ligera superioridad de la absorción media en las atmósferas deficientes en metales (Población II) se justifica debida a la absorción casi exclusiva del Hidrógeno, que la transforma en una fotosfera un poco más transparente que la Solar, debido a la presencia en esta última de incipientes absorbedores metálicos.

7. PUBLICACIONES.

Durante la realización de esta investigación, se hicieron las siguientes publicaciones:

- “Opacity errors in model atmospheres”; Milone & Merlo (1994).

Resúmenes extensos:

- “Análisis de algunos elementos que intervienen en el cálculo de modelos de atmósferas estelares”; Merlo & Milone (1992) [reunión AAA, 1992].
- “Absorción continua en una atmósfera de carbono deficiente en hidrógeno”; Milone & Merlo (1999) [reunión AAA, 1999].
- “Fuentes de absorción continua y dispersión para temperaturas bajas e intermedias en atmósferas estelares”; Milone & Merlo (2005) [reunión AAA, 2005].

Ponencia oral:

- “Coeficientes de absorción en atmósferas de bajas temperaturas”; Merlo & Milone [2^{as} Jornadas de Atmósferas Estelares, 9-10 de diciembre de 1999, Facultad de Ciencias Astronómicas y Geofísicas, Universidad Nacional de La Plata].

Referencias

- 📖 Anders, E. & N. Grevesse: 1989, *Geoch. et Cosmoch. Acta*, **53**, 197.
 📖 Bates, D.R.: 1951, *M.N.R.A.S.*, **111**, 303.
 📖 Bates, D.R.: 1952, *M.N.R.A.S.*, **112**, 40.
 📖 Bell, K.L. & K.A. Berrington: 1987, *J. Physics B: Atomic Molec. Phys.*, **20**, 801.
 📖 Clenshaw, C.W.: 1961, in “*Modern Computing Methods*” (2nd edit.; London: Nat. Physical Lab., *Notes on Appl. Sci.*, N° 16), p. 76.
 📖 Cohen, E.R. & B.N. Taylor: 1991, *Physics Today*, **88**, BG 9.
 📖 Dalgarno, A.: 1962, *Geophys. Corp. of America*, GCA Tech. Rep., #62-28-A.
 📖 Doyle, R.O.: 1968, *Ap.J.*, **153**, 987.
 📖 Gaunt, J.A.: 1930, *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, Ser. A, **229**, 1045.
 📖 Gingerich, O.: 1964, Proc. 1st Harvard–Smithsonian Conf. on Stellar Atmospheres, *Smithsonian Ap. Obs. Spec. Report* N° 167.
 📖 Gingerich, O.: 1969, *Theory and Observation of Normal Stellar Atmospheres*, Proc. 3rd Harvard–Smithsonian Conf. on Stellar Atmospheres, The M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, p. 399.
 📖 Gray, D.F.: 1976, “*The observation and analysis of stellar photospheres*”, 1st edit., Wiley & Sons, New York.
 📖 Gray, D.F.: 1992, “*The observation and analysis of stellar photospheres*”, 2nd edit., Cambridge University Press.
 📖 Herzberg, G.: 1959, “*Molecular Spectra and Molecular Structure: I. Spectra of Diatomic Molecules*”, 2nd edit., New York: Van Nostrand, pp. 403-404.
 📖 Hummer, D.G.: 1988, *Ap. J.*, **327**, 477.
 📖 Hunger, K.: 1975, “*Properties and Problems of Helium Stars*”, in “*Probl. in Stellar Atm. and Envelopes*”, ed. B.Baschek, W.H.Kegel & G.Traving, pp.57-100, Springer-Verlag.
 📖 Jacobs: 1974, *Phys. Rev. A*, **9(5)**, 1938-1946.
 📖 John, T.L.: 1994, *M.N.R.A.S.*, **269**, 865.
 📖 Karzas, W.J. & R. Latter (KL): 1961, *Ap. J. Suppl.*, **6**, 167.
 📖 Kurucz, R.L.: 1970, ATLAS: A Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres, *Smithsonian Ap. Obs. Spec. Report* N° 309.
 📖 Kurucz, R.L.: 1994, comunicación privada.
 📖 Matsushima, S.: 1964, *Proc. First Harvard-Smithsonian Conf. Stellar Atmospheres*, Smithsonian Special Report 167, Cambridge, Mass., p.42.
 📖 McDowell, M.R.C., J.H. Williamson & V.P. Myerscough: 1966, *Ap. J.*, **144**, 827.
 📖 Menzel, D.H. & Pekeris, C.L. (MP): 1935, *M.N.R.A.S.*, **96**, 77.
 📖 Merlo, D.C. & L.A. Milone: 1992, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **37**, 28.
 📖 Mihalas, D.: 1967, *Methods in Computational Physics*, **7**, 1, Academic Press.
 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1994, *Astroph. Space Sci.*, **220**, 235.
 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1999, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **43**, 36.
 📖 Milone, L.A. & D.C. Merlo: 2005, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **48**, 246.
 📖 Moore, Ch. E.: 1980, NSRDS-National Bureau of Standards.
 📖 Myerscough, V.P.: 1968, *Ap. J.*, **153**, 421.
 📖 Peach, G.: 1967, *M.N.R.A.S.*, **71**, 1-11.
 📖 Rohrmann, R.D.: 1997, comunicación privada.
 📖 Sommerville, W.B.: 1964, *Ap. J.*, **139**, 192.
 📖 Unsöld, A.: 1938, “*Physik der Sternatmosphären*”, Springer-Verlag, Berlín.
 📖 Vernazza, J.E., Avrett, E.H. & R. Loeser: 1976, *Ap. J. Suppl.*, **30**, 1.
 📖 Wishart, A.W.: 1979, *M.N.R.A.S.*, **187**, *Short Comm.*, 59P-60P.

Capítulo IV

CÁLCULO DE UN MODELO DE ATMÓSFERA ESTELAR – 1ª. PARTE –

1. INTRODUCCIÓN Y CONDICIONES.

1.1. GENERALIDADES.

Las atmósferas estelares están formadas por las capas más externas de las estrellas. Se caracterizan porque la radiación puede escapar de ellas –al menos parcialmente– y así hacerse accesible a la observación directa. Históricamente se las dividía en tres capas: fotosfera, capa inversora y cromosfera (Münch, 1960), pero en la actualidad se la considera dividida en la fotosfera (en la cual se forma simultáneamente el espectro continuo y el de líneas), la cromosfera y la corona. De las dos últimas no nos ocuparemos en este estudio.

1.2. CONDICIONES IMPUESTAS EN NUESTRO TRATAMIENTO.

- ☑ **Geometría.** Vamos a considerar atmósferas (¡fotosferas!) de un espesor pequeño en relación al radio estelar (lo cual es correcto para la generalidad de las estrellas). De esta manera, se puede considerar a la atmósfera como estratificada en capas plano-paralelas, y todas las variables físicas son función de una variable geométrica: la profundidad en la atmósfera. Queda claro, entonces, que en nuestro tratamiento estamos excluyendo desde un principio, a las estrellas con atmósferas extendidas.
- ☑ **Equilibrio Hidrostático.** Existe abundante información, de que en la mayoría de las estrellas no existen cambios en sus dimensiones geométricas - radios - y por lo tanto, las condiciones en sus distintas capas son de **equilibrio hidrostático**. Excepciones a lo dicho son distintos tipos de estrellas variables: novas, supernovas, Cefeidas, etc. Para nuestro estudio, consideraremos atmósferas que se encuentran en condiciones de **equilibrio hidrostático**.
- ☑ **Equilibrio Energético:** A priori en las estrellas existe una clara distinción entre dos regiones bien diferenciadas: por un lado, el **interior** en donde ocurren las reacciones termonucleares y por ende la generación de energía, y por otro, la **fotosfera estelar**, en donde la misma se transporta hacia el medio interestelar. Por ello admitimos, en primera instancia, que en esta última no existe ningún tipo de generación de energía, lo que implica necesariamente que el flujo total transportado se mantiene constante en cada profundidad (capa) de la atmósfera. Si se incluyen efectos de transporte no radiativos, como la convección o el magnetismo, deben ser considerados explícitamente en la ecuación de conservación referida.

Cabe mencionar que este equilibrio no se alcanza con cualquier distribución de temperatura en la atmósfera, por lo que a la hora de iniciar el cálculo de un modelo se introduce una aproximación de la misma, la cual luego deberá ser corregida para cumplir con la constancia requerida.

- ☑ **Ecuaciones de Estado.** Admitiremos que en nuestros modelos de atmósferas estelares es válida la ecuación de estado de los gases ideales. Similarmente, admitiremos que la distribución de velocidades de las distintas partículas es la de Maxwell-Boltzmann. Para la distribución de las partículas en sus distintos estados de energía y naturaleza, aceptamos que son válidas las ecuaciones de Boltzmann, la de Saha y la de disociación molecular. O sea, **que estaremos en la hipótesis de Equilibrio Termodinámico Local (ETL).**

No tomaremos en consideración:

- ☒ **Estructura fina.** En las atmósferas de las estrellas aparecen ciertos detalles característicos, los cuales son observados en el Sol y ahora son también estudiados en algunas estrellas (ver la revisión que al respecto realiza Berdyugina (2005); Gray (2005) realiza un estudio en estrellas frías; Oláh *et al.*, 2006, estudian FK Comae Berenice).
- ☒ **Campos magnéticos.** No los tomamos en consideración, sean éstos de carácter permanente, o transitorio.
- ☒ **Granulación.** El efecto de la granulación ocurre en la parte superior de la zona convectiva que comprende las zonas más externas de todas la estrellas frías (ver, al respecto, al trabajo de Frutiger *et al.* (2005), quienes estudian la granulación de α Cen A y B).

2. INTEGRACIÓN DE LA ECUACIÓN DEL EQUILIBRIO HIDROSTÁTICO.

2.1 RELACIÓN ENTRE LA PROFUNDIDAD GEOMÉTRICA Y ÓPTICA, PRESIÓN, TEMPERATURA, ETC.

El procedimiento que describimos a continuación, fue delineado hace muchos años por B. Strömgren (1944) y, en época más reciente, por Mihalas (1967).

En el cálculo de un modelo de atmósfera estelar, se determinan las relaciones que vinculan a las variables físicas –tales como, P gaseosa, P electrónica, temperatura, densidad, etc.– entre sí, o con otras variables geométricas, como la profundidad lineal, o la profundidad óptica.

Si suponemos que el modelo en estudio está en condiciones de **equilibrio hidrostático**, la ecuación del equilibrio hidrostático nos da una primera relación que vincula a algunas de las variables mencionadas:

$$\triangleright \frac{dP}{dx} = \rho g \quad (4.1)$$

donde P es la presión total ($P = P_g + P_r + P_t + \text{etc.}$; donde P_g es la presión gaseosa, P_r la presión de radiación y P_t la presión de turbulencia), g es la gravedad superficial y ρ la densidad. Nótese que aquí x se mide positivamente en el sentido entrante a la atmósfera.

Por otra parte, cuando un haz de radiación se propaga en un medio en el que se producen absorciones, es conveniente definir para un camino geométrico dado, su **espesor óptico**:

$$\triangleright d\tau_\nu = \rho\kappa_\nu dx \quad (4.2)$$

donde τ_ν es la profundidad óptica a la frecuencia ν , ρ la densidad, κ_ν el coeficiente de total de absorción monocromático ($\kappa_\nu = k_\nu + \sigma_\nu$, con k_ν el coeficiente de absorción propiamente dicho y σ_ν el coeficiente de dispersión) y x la profundidad geométrica.

Si dx corresponde a una variación geométrica de la profundidad en la atmósfera, $d\tau_\nu$ será la correspondiente modificación en la profundidad óptica.

De (4.1) y (4.2) obtenemos, entonces:

$$\frac{dP}{d\tau_\nu} = \frac{g}{\kappa_\nu} \quad (4.3)$$

la cual es una forma alternativa de la ecuación del equilibrio hidrostático.

Suele ser conveniente introducir un coeficiente medio de absorción en lugar del monocromático. En nuestro caso utilizamos el coeficiente medio de Rosseland κ_R . La nueva profundidad óptica se relaciona con aquélla por la relación:

$$d\tau_R / d\tau_\nu = \kappa_R / \kappa_\nu \quad (4.4)$$

Vamos a señalar aquí, que las presiones y profundidades ópticas que encontraremos en nuestros cálculos, pueden modificarse tanto como 10 o hasta 12 órdenes de magnitud, desde las capas más superficiales a las más profundas; por lo tanto, en algún momento es adecuado pasar a trabajar con variables logarítmicas.

2.2. PROCEDIMIENTO DE INTEGRACIÓN.

2.2.1. Comienzo de la Integración. Valores Iniciales. Parámetros. Distribución de la Temperatura.

De la ecuación (4.3) resulta:

$$\tau(P) = \int_0^P \frac{\kappa_R}{g} dP = \int_{P_0}^{P_1} \frac{\kappa_R}{g} dP + \int_{P_1}^P \frac{\kappa_R}{g} dP \quad (4.5)$$

donde P_1 es un valor pequeño de la presión elegido cerca de la superficie de la atmósfera.

Las condiciones iniciales de la integración se establecen en la capa superficial, donde $x = 0$, $P = P_0 = 0$, $\tau = 0$, $T = T_0$, $\rho = 0$.

Eligiendo un valor pequeño para P_1 en la ecuación (4.5), por ejemplo $P_1 = 0.1$, 0.01 ó 0.001 dy/cm^2 , nos aseguramos que $T(P_1) \approx T_0$. Si admitimos que cuando $x \rightarrow 0$, $\kappa_R \rightarrow \kappa_0$ (constante), porque si $P \rightarrow 0$ también $P_e \rightarrow 0$, luego los átomos se ionizan y no pueden producir

las absorciones *bound-free*; luego para P crecientes (es decir x crecientes en valor absoluto), κ_R también aumentará. Por lo tanto podemos escribir:

$$\tau_1 = \int_0^{P_1} \frac{\kappa_R}{g} dP \leq \frac{\kappa_1}{g} P_1 \quad (4.6)$$

siempre y cuando $\kappa_R(P) \leq \kappa_R(P_1) = \kappa_1$ para $0 \leq P < P_1$.

Considerando, por ejemplo, $\frac{\kappa_1}{g} P_1 < 10^{-7}$ (lo que usualmente se consigue eligiendo $P_1 = 0.1 \text{ dy/cm}^2$), podemos reescribir la ecuación (4.5) de la siguiente forma:

$$\tau(P) = \tau_1 + \int_{P_1}^P \frac{\kappa_R}{g} dP \approx \int_{P_1}^P \frac{\kappa_R}{g} dP \quad (4.7)$$

con un error menor que 10^{-7} .

Con la condición establecida para fijar el valor de P_1 , de aquí en adelante calcularemos la profundidad óptica τ con la siguiente expresión:

$$\tau(P) = \int_{P_1}^P \frac{\kappa_R}{g} dP = \int_{\log P_1}^{\log P} \frac{\kappa_R P}{Cg} d(\log P) = \tau(\log P) \quad (4.8)$$

donde: $\log(P) = C \ln(P)$, $C = \log e = (\ln 10)^{-1}$ y $d(\log P) = C (dP/P)$. El cambio de variable se debe a que cuando $0 \leq \tau \leq 100$, $10^{-1} \leq P \leq 10^5$, es decir, existe un amplio rango de valores de la variable independiente –aproximadamente 6 órdenes de magnitud– en un intervalo considerablemente menor de la variable dependiente.

La ecuación (4.8) debe ser resuelta **numéricamente**. Los pasos de integración apropiados pueden ser 0.1, 0.05 ó 0.025.

Se hace evidente que en cada capa de la atmósfera, los valores que tomen las variables físicas serán funciones de la temperatura, la composición química y –a través de la ecuación del equilibrio hidrostático– de la gravedad superficial g .

Para la temperatura se adopta una distribución aproximada, lo cual no es grave, ya que, posteriormente, **una de las etapas del cálculo será corregir la distribución inicial hasta conseguir un flujo de energía constante en toda la atmósfera**. En nuestro procedimiento de cálculo adoptamos la siguiente expresión:

$$T^4(\tau) = \frac{3}{4} T_e^4 [a + b\tau + cE_2(\tau) + dE_3(\tau)] \quad (4.9)$$

donde: $a = q(\infty) = 0.71044609$ (siendo $q(\tau)$ la función de Hopf), $b = 1$, $c = -0.24390999$, $d = 0.22162979$, $E_2(\tau)$ y $E_3(\tau)$ las integrales exponenciales de orden 2 y 3 respectivamente. Los valores utilizados de a , b , c y d proporcionan los valores exactos de $q(\tau)$ para los valores de τ de 0, 1 y ∞ , según los valores de la misma extraídos de Mihalis (1978, p. 72; Tabla 3-2).

La ecuación (4.9) representa aproximadamente la distribución de temperatura en una atmósfera gris, con temperatura efectiva T_e .

Resulta así que los **parámetros** del modelo son: la **composición química**, la **gravedad superficial** y la **temperatura efectiva**. Esta última, fija el monto total de la energía emitida, por segundo y por centímetro cuadrado, en el modelo.

2.2.2. Continuación de la Integración.

Para proceder a la integración de la ecuación (4.8) definimos:

$$y = \tau(\log P) \quad ; \quad x = \log P \quad ; \quad f = \frac{\kappa_R P}{Cg} \tag{4.10}$$

y utilizamos la fórmula de Gregory (Scheid (1977), págs. 108 y 117). Así nos queda:

$$\begin{aligned} \tau_n = y_n = \int_{x_1}^{x_n} f(x) dx \approx & \frac{1}{2} h(f_1 + 2 \sum_{i=2}^{n-1} f_i + f_n) + \frac{1}{12} h(\Delta f_1 - \Delta f_{n-1}) - \frac{1}{24} h(\Delta^2 f_1 + \Delta^2 f_{n-2}) \\ & + \frac{19}{720} h(\Delta^3 f_1 - \Delta^3 f_{n-3}) - \frac{3}{160} h(\Delta^4 f_1 + \Delta^4 f_{n-4}) + \frac{863}{60480} h(\Delta^5 f_1 - \Delta^5 f_{n-5}) + \dots \end{aligned} \tag{4.11}$$

en donde las diferencias se forman de acuerdo al esquema presentado en la siguiente tabla:

TABLA 4.1
Diferencias de distintos órdenes utilizadas en el procedimiento de integración

X	y	f	$\Delta^1 f$	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$	$\Delta^4 f$	$\Delta^5 f$
X_1	y_1	f_1					
X_2	y_2	f_2	$\Delta^1 f_1 = f_2 - f_1$				
X_3	y_3	f_3	$\Delta^1 f_2$	$\Delta^2 f_1 = \Delta^1 f_2 - \Delta^1 f_1$	$\Delta^3 f_1 = \Delta^2 f_2 - \Delta^2 f_1$		
X_4	y_4	f_4	$\Delta^1 f_3$	$\Delta^2 f_2$	$\Delta^3 f_2$	$\Delta^4 f_1 = \Delta^3 f_2 - \Delta^3 f_1$	
X_5	y_5	f_5	$\Delta^1 f_4$	$\Delta^2 f_3$	$\Delta^3 f_3$	$\Delta^4 f_2$	$\Delta^5 f_1 = \Delta^4 f_2 - \Delta^4 f_1$
x_6	y_6	f_6	$\Delta^1 f_5$	$\Delta^2 f_4$	$\Delta^3 f_4$	$\Delta^4 f_3$	$\Delta^5 f_2$
x_7	y_7	f_7	$\Delta^1 f_6$	$\Delta^2 f_5$			
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

Supongamos que queremos utilizar la expresión (4.11) hasta el orden quinto en diferencias ($\Delta^5 f$). Teniendo presente que $f = f(P, T(\tau))$, elegimos x y $h = x_{i+1} - x_i$ suficientemente pequeños de modo que cuando se alcance la capa de la atmósfera correspondiente a x_7 , aún siga valiendo la aproximación $T(y_7) \approx T_0$ (la temperatura de borde o superficial de la atmósfera); si esta condición no se logra, elegimos un valor menor de x_1 y/o disminuimos el paso de integración.

De este modo, para $i = 1..7$, conocemos con suficiente precisión los valores de P y T ($\approx T_0$), lo cual nos permitirá calcular los valores de f_i ; el valor que se obtiene para y_7 es correcto con una precisión de sexto orden¹.

A continuación se indican las expresiones que resultan para los valores de y_i , con $i = 1..7$:

$$\begin{aligned}
 y_1 &= f_1 \\
 y_2 &= \frac{1}{2}h(f_1 + f_2) \\
 y_3 &= y_2 + \frac{1}{2}h(f_2 + f_3) + \frac{1}{12}h(\Delta f_1 - \Delta f_2) \\
 y_4 &= y_3 + \frac{1}{2}h(f_3 + f_4) + \frac{1}{12}h(\Delta f_2 - \Delta f_3) - \frac{1}{24}h(\Delta^2 f_1 + \Delta^2 f_2) \\
 y_5 &= y_4 + \frac{1}{2}h(f_4 + f_5) + \frac{1}{12}h(\Delta f_3 - \Delta f_4) + \frac{1}{24}h(\Delta^2 f_2 - \Delta^2 f_3) + \frac{19}{720}h(\Delta^3 f_1 - \Delta^3 f_2) \\
 y_6 &= y_5 + \frac{1}{2}h(f_5 + f_6) + \frac{1}{12}h(\Delta f_4 - \Delta f_5) + \frac{1}{24}h(\Delta^2 f_3 - \Delta^2 f_4) + \frac{19}{720}h(\Delta^3 f_2 - \Delta^3 f_3) - \frac{3}{160}h(\Delta^4 f_1 + \Delta^4 f_2) \\
 y_7 &= y_6 + \frac{1}{2}h(f_6 + f_7) + \frac{1}{12}h(\Delta f_5 - \Delta f_6) + \frac{1}{24}h(\Delta^2 f_4 - \Delta^2 f_5) + \frac{19}{720}h(\Delta^3 f_3 - \Delta^3 f_4) + \frac{3}{160}h(\Delta^4 f_2 - \Delta^4 f_3) \\
 &\quad + \frac{863}{60480}h(\Delta^5 f_1 - \Delta^5 f_2)
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Así, entonces, podemos generalizar el valor de y_7 de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 y_{2n+1} &= \int_{x_1}^{x_{2n+1}} f(x)dx \approx y_{2n} + h[\frac{1}{2}(f_{2n} + f_{2n+1}) - \frac{1}{12}\Delta^2 f_{2n-1} - \frac{1}{24}\Delta^3 f_{2n-2} - \frac{19}{720}\Delta^4 f_{2n-3} - \frac{3}{160}\Delta^5 f_{2n-4} \\
 &\quad - \frac{863}{60480}\Delta^6 f_{2n-5}]
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

En la Tabla 4.2 se muestra la progresión de las diferencias que intervienen en el cálculo de y_{2n+1} , de acuerdo a la ecuación (4.13).

Habiendo calculado así y_{2n+1} , con una aproximación suficiente, utilizamos ahora una pareja de fórmulas *predictoras-correctoras* de Adams para calcular y_{2n+2} (Scheid, op.cit., p. 194). Para ello, redefinimos las siguientes variables: $y_{2n+1} \equiv y_n$, $y_{2n+2} \equiv y_{n+1}$, con lo cual tendremos:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1}^{(p)} &= y_n + \frac{1}{24}h(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \\
 y_{n+1}^{(c)} &= y_n + \frac{1}{24}h(9f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(p)}) + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

¹ Con dos valores, f_1 y f_2 , se calcula y_2 con una aproximación de primer orden; con 3 valores, con una aproximación de segundo orden; etc. En general, con $(2n+1)$ valores conocidos, f_1, \dots, f_{2n+1} , podemos calcular el valor de y_{2n+1} con una aproximación de orden $2n$.

TABLA 4.2
 Progresión de las diferencias de distintos órdenes aplicadas en la ecuación (4.13).

x	y	f	$\Delta^1 f$	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$	$\Delta^4 f$	$\Delta^5 f$	$\Delta^6 f$
x_{2n-5}	y_{2n-5}	f_{2n-5}						
x_{2n-4}	y_{2n-4}	f_{2n-4}	$\Delta^1 f_{2n-5}$					
x_{2n-3}	y_{2n-3}	f_{2n-3}	$\Delta^1 f_{2n-4}$	$\Delta^2 f_{2n-5}$				
x_{2n-2}	y_{2n-2}	f_{2n-2}	$\Delta^1 f_{2n-3}$	$\Delta^2 f_{2n-4}$	$\Delta^3 f_{2n-5}$	$\Delta^4 f_{2n-5}$		
x_{2n-1}	y_{2n-1}	f_{2n-1}	$\Delta^1 f_{2n-2}$	$\Delta^2 f_{2n-3}$	$\Delta^3 f_{2n-4}$	$\Delta^4 f_{2n-4}$	$\Delta^5 f_{2n-5}$	
x_{2n}	y_{2n}	f_{2n}	$\Delta^1 f_{2n-1}$	$\Delta^2 f_{2n-2}$	$\Delta^3 f_{2n-3}$	$\Delta^4 f_{2n-3}$	$\Delta^5 f_{2n-4}$	$\Delta^6 f_{2n-5}$
x_{2n+1}	y_{2n+1}	f_{2n+1}	$\Delta^1 f_{2n}$	$\Delta^2 f_{2n-1}$	$\Delta^3 f_{2n-2}$			

Con el procedimiento *predictor-corrector* se calcula un valor de la variable dependiente (utilizando parámetros físicos de la capa anterior), luego se aplica la fórmula de Gregory y se vuelve a calcular dicha variable. En concreto, con $f_{n+1}^{(c)} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(c)})$ agregamos “una línea” más a la Tabla 4.1 (para formar la correspondiente Tabla 4.2): x_{n+1} y_{n+1} $f_{n+1}^{(c)}$ Δ_n^1 Δ_{n-1}^2 ... etc. (hasta la diferencia que estemos considerando), y utilizando (4.13) obtenemos un nuevo valor $y_{n+1}^{(c_2)}$, el cual se reemplaza en la función $f(x_m, y_m)$ para obtener $f_{n+1}^{(c_2)}$ y de este modo corregir “la línea” de la Tabla 4.2. El proceso se itera hasta que $|y_{n+1}^{(c_j)} - y_{n+1}^{(c_{j-1})}|$ es menor que algún valor preestablecido. Alcanzado este punto, se pasa a la siguiente capa del modelo haciendo la asignación $(n+1) \mapsto n$ y repitiéndose todo el proceso hasta completar la integración.

Conviene destacar que, a medida que nos vayamos adentrando en la atmósfera, este proceso iterativo convergerá cada vez con mayor dificultad (si lo hace), ya que la presión gaseosa crece rápidamente. Por ello, cuando esto suceda, deberemos conmutar las variables de integración.

La profundidad geométrica se calculó integrando la siguiente ecuación diferencial:

$$dx/d(\log P) = (\ln(10) k_B / g m_H \mu) (P T / (P_e - P)) \tag{4.15}$$

Asimismo, la densidad en cada capa del modelo se calcula utilizando la expresión analizada en el apartado 4.1 del *Capítulo 3*, la cual recordamos a continuación:

$$\rho = m_H \frac{(P_g - P_e)}{kT} \mu \tag{4.16}$$

con el significado usual de las variables y donde μ es el peso molecular medio.

3. MODELOS PRELIMINARES.

3.1. INTRODUCCIÓN.

A manera de ejemplo, incluimos a continuación algunos resultados preliminares que se obtuvieron en esta etapa de cálculo, considerando las tres abundancias de trabajo (Solar, Población II y HdC).

Para los mismos, se ha tomado en consideración todas las absorciones y dispersiones estudiados en el *Capítulo 3*. Aquí mostramos los resultados de modelos puramente radiativos correspondientes al valor de $T_{ef} = 5500 K$ y gravedad superficial de $\log g = 4.0$.

En la Tabla 4.3 se resume algunos valores representativos del mismo, mientras que en las Figs. 4.1 a 4.7 se brindan los gráficos correspondientes a una temperatura efectiva de 5500 K, en donde se muestran y comparan algunas de sus variables. Se contrasta, además, con un modelo Solar –de las mismas características– extraído de Kurucz (1979), el cual fue calculado mediante el código ATLAS6 (gráfico continuo en rojo).

Si bien –como es sabido– para el valor de temperatura efectiva elegido aparece la convección como mecanismo principal de transporte de la radiación, se eligió este valor de temperatura efectiva para comparar nuestros valores del coeficiente de absorción, densidades y presiones, las que si bien están afectados indirectamente por este fenómeno a través de distribución de temperatura, nos dieran idea comparativa con los valores obtenidos por Kurucz.

TABLA 4.3
Modelos preliminares de atmósferas de composiciones Solar, de Población II y HdC.

** Temperatura Efectiva : 5500.00 **							
** Log (Graved.Superf.) : 4.0000 **							
** Abundancia Utilizada : SOLAR-Kurucz **							
log(Pg)	log(Pe)	log(Pr)	log(tau)	T	log(kR)	log(rho)	log(-x)
-2.0000	-4.3651	-0.0003	-8.7655	4461.57	-2.766	-13.4484	7.4484
0.0000	-3.3083	-0.0003	-7.9165	4461.57	-3.494	-11.4468	7.8648
2.0000	-2.0360	-0.0003	-5.9038	4461.58	-3.191	-9.4466	7.8648
4.0000	-0.3310	0.0069	-2.3620	4480.02	-1.638	-7.4484	7.8649
5.0000	0.7254	0.2232	-0.5184	5074.25	-0.785	-6.5025	7.8692
5.2171	1.3935	0.4888	0.0336	5912.43	-0.377	-6.3517	7.8821
5.2534	1.9152	0.6581	0.2836	6517.45	-0.003	-6.3580	7.9016
5.2894	3.1328	1.0699	0.7836	8261.10	0.984	-6.4277	7.9233
5.3096	4.9733	2.3741	2.1336	17502.39	2.262	-6.9989	7.9472
5.3318	5.0166	2.6730	2.4336	20788.14	1.959	-7.0703	7.9978
** Abundancia Utilizada : Pob. II **							
log(Pg)	log(Pe)	log(Pr)	log(tau)	T	log(kR)	log(rho)	log(-x)
-2.0000	-4.3787	-0.0003	-8.7249	4461.57	-2.725	-13.4657	7.4657
0.0000	-3.3761	-0.0003	-7.8988	4461.57	-3.494	-11.4641	7.8821
2.0000	-2.3701	-0.0003	-6.1612	4461.58	-3.463	-9.4639	7.8821
4.0000	-1.3120	0.0008	-3.2864	4464.30	-2.574	-7.4642	7.8821
5.0000	-0.6177	0.0285	-1.6641	4536.30	-1.938	-6.4711	7.8826
5.5166	1.6288	0.5467	0.1241	6112.77	-0.192	-6.0841	7.9375
5.5388	2.8671	0.9301	0.6241	7622.42	0.738	-6.1586	7.9495
5.5465	4.1393	1.4326	1.1741	10179.03	1.866	-6.2930	7.9547
5.5492	5.1267	2.1165	1.8741	15089.87	2.719	-6.6501	7.9578
5.5574	5.2389	2.6635	2.4241	20675.20	2.236	-6.8568	7.9762
** Abundancia Utilizada : HdC Star **							
log(Pg)	log(Pe)	log(Pr)	log(tau)	T	log(kR)	log(rho)	log(-x)
-2.0000	-3.9875	-0.0003	-8.9985	4461.57	-2.998	-12.9494	6.9494
0.0000	-2.7871	-0.0003	-8.1617	4461.57	-3.771	-10.9456	7.3650
2.0000	-1.3518	-0.0003	-6.7962	4461.57	-4.112	-8.9451	7.3650
4.0000	0.2585	-0.0001	-4.1571	4462.01	-3.453	-6.9450	7.3650
6.0000	1.5987	0.0397	-1.4953	4565.40	-2.782	-4.9549	7.3657
6.5051	2.7289	0.4663	-0.0034	5836.35	-1.532	-4.5566	7.4152
6.5671	3.8620	1.1267	0.8466	8535.83	-0.225	-4.6604	7.4481
6.5923	4.8054	1.7936	1.5466	12530.11	0.165	-4.8082	7.4668
6.6245	5.0088	2.1388	1.8966	15284.82	0.309	-4.8658	7.4966
6.6482	5.7931	2.6860	2.4466	20944.09	1.644	-5.0336	7.5255

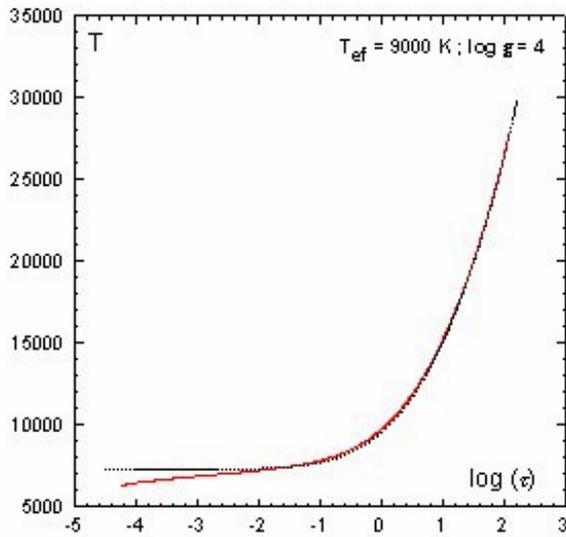


Fig. 4.1: Distribución de la temperatura en una atmósfera gris con $T_e = 9000$ K; la misma es independiente de la composición química y depende sólo de T_e . Como comparación (en rojo) se muestra el andar de T en un modelo de Kurucz (1979), totalmente radiativo, de composición solar, $\log(g) = 4.0$, y de misma g y T_{ef} .

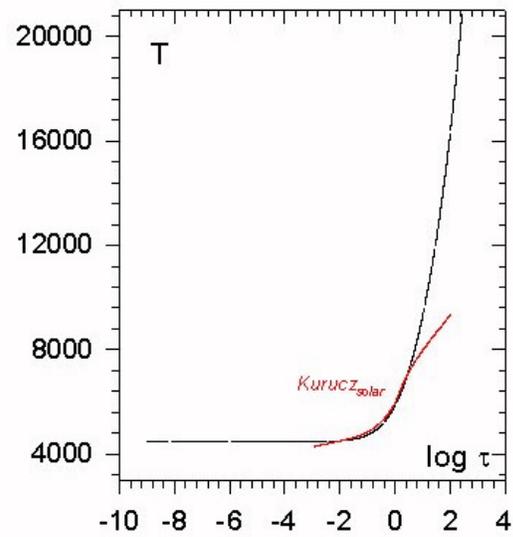


Fig. 4.2: Distribución inicial adoptada para la temperatura, en nuestros modelos preliminares con $T_{ef} = 5500$ K. Como comparación (en rojo) se muestra el andar de T en un modelo de Kurucz (1979), parcialmente convectivo, de composición solar, y de misma g y T_{ef} .

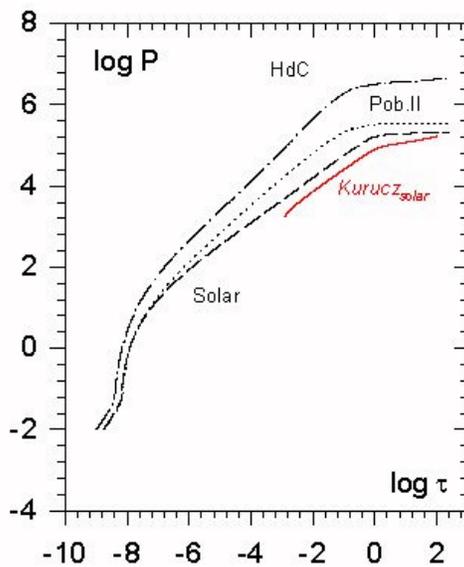


Fig. 4.3: Variación de la presión con la profundidad óptica en las abundancias indicadas, para $T_{ef} = 5500$ K y $\log(g) = 4.0$. Como comparación (en rojo) se muestran resultados de Kurucz (ver Fig. 4.2 por detalles).

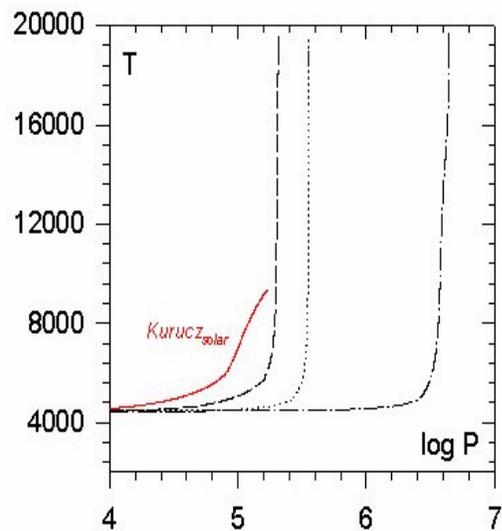


Fig. 4.4: Variación de la temperatura con la presión en las abundancias indicadas, para $T_{ef} = 5500$ K y $\log(g) = 4.0$. Como comparación (en rojo) se muestran resultados de Kurucz (1979).

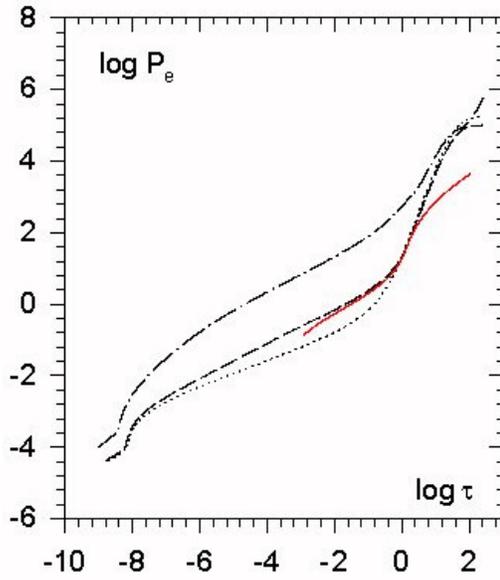


Fig. 4.5: Variación de la presión electrónica con la profundidad óptica en las abundancias indicadas. Iguales condiciones a las indicadas en las figuras anteriores; lo mismo para Kurucz (1979).

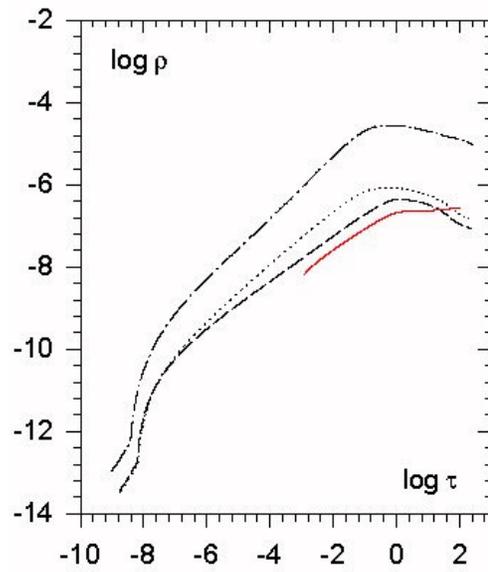


Fig. 4.6: Variación de la densidad con la profundidad óptica en las abundancias indicadas. Iguales condiciones a las indicadas en las figuras 4.3 y 4.4; lo mismo para Kurucz (1979).

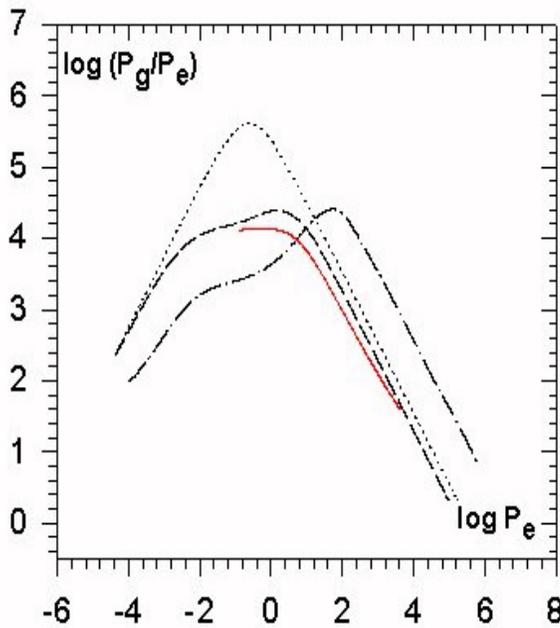


Fig. 4.7: Variación de la relación $\log (P_g/P_e)$ vs. $\log (P_e)$, en las abundancias indicadas. Iguales condiciones a las indicadas en las figuras 4.3 y 4.4; lo mismo para Kurucz (1979).

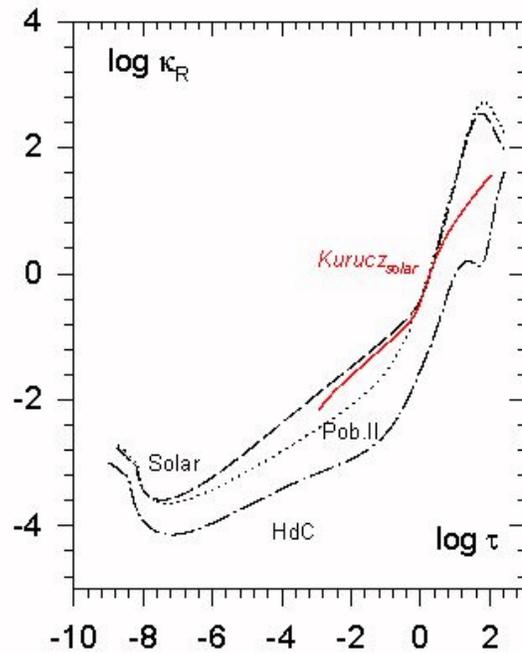


Fig. 4.8: Variación del coeficiente medio de Rosseland con la profundidad óptica en las abundancias indicadas. Iguales condiciones a las indicadas en las figuras 4.3 y 4.3; lo mismo para Kurucz (1979).

3.2. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS PRELIMINARES.

La Fig. 4.1 nos muestra la distribución de la temperatura contra la profundidad óptica en el caso gris, para $T_{ef} = 9000$ K; resaltamos que la misma es independiente de la composición química y depende sólo de T_{ef} . De la comparación con los resultados que obtiene Kurucz (1979) para un modelo de composición solar, igual T_{ef} y $\log(g) = 4.0$ (modelo que satisface la condición de flujo constante en toda la atmósfera y resulta ser totalmente radiativo), se hace evidente que la aproximación gris a la distribución de temperatura es excelente en los modelos totalmente radiativos, salvo en las capas más superficiales, en donde se evidencian ciertas diferencias debidas, principalmente, a la influencia de las absorciones en frecuencias por debajo de la discontinuidad de Lyman, ya que las mismas pesan más fuertemente allí, como así también a la gran importancia que cobran en estas regiones los procesos dispersivos.

La Fig. 4.2 nos muestra la distribución inicial adoptada para la temperatura contra la profundidad óptica, en el caso de una $T_{ef} = 5500$ K. Se muestra también la distribución de la temperatura en un modelo de Kurucz (1979), de composición solar, igual T_{ef} y $\log(g) = 4.0$. El modelo de Kurucz es radiativo en las capas más superficiales y convectivo en las más profundas (en las que la convección transporta prácticamente el 100 % de la energía); como consecuencia, se hace evidente que en nuestro modelo preliminar rápidamente se alcanza un gradiente de temperatura mucho mayor que en el de Kurucz (y así alcanzamos temperatura de unos 20000 K en las capas muy profundas), en tanto la convección “suaviza” drásticamente el gradiente de temperatura en su modelo, alcanzándose temperaturas de menos de 10000 K en las capas más profundas.

En la Fig. 4.3 se compara el andar de la presión con la profundidad óptica, apareciendo la composición química como parámetro. Recordemos que éstos son resultados preliminares; de todos modos, se evidencia que nuestros valores son compatibles con los de Kurucz.

La Fig. 4.4 muestra, que a medida que se incrementa la profundidad óptica en la atmósfera, la temperatura crece abruptamente con $\log P$ (de manera casi discontinua). Esto explica por qué, en el proceso de integración de la ecuación del equilibrio hidrostático, se alcanza un punto en el cual resulta necesario cambiar de variable de integración, pasando de $\log P$ a $\log \tau$. Estos resultados (¡preliminares!) parecen estar indicando, que para un valor dado de $\log P$, la temperatura más alta se encontraría en el modelo Solar, seguida de la del modelo de Población II y finalmente, la de composición HdC (la más baja).

En la Fig. 4.5 mostramos la evolución de la presión electrónica con la profundidad óptica, mediante la relación $\log P_e$ vs. $\log \tau$. Se advierte un buen acuerdo con los valores de Kurucz, en un cierto intervalo de $\log \tau$.

La Fig. 4.6 muestra el comportamiento de la densidad con la profundidad óptica, a través de la relación $\log \rho$ vs. $\log \tau$. El decrecimiento de ρ con τ , a partir de un cierto máximo en nuestros resultados, es atribuible a la incorrecta distribución de temperatura adoptada, lo cual afecta a P_g y P_e .

En la Fig. 4.7 se muestra la relación $\log(P_g/P_e)$ vs. $\log P_e$. Recordemos que a temperatura constante, cuando $\log(P_g/P_e)$ crece con $\log P_e$ creciente, los elementos se están recombinando (ver 3.2, primeros párrafos). En las capas muy superficiales de la atmósfera en estudio, la temperatura es prácticamente constante e igual a la “temperatura de borde” (temperatura superficial, $T_0 \approx 4460$ K). En consecuencia, la Fig. 4.7 nos está diciendo, que

cuando nos adentramos en la atmósfera –log P_e crecientes– los átomos se recombinan hasta alcanzar un máximo, y a partir de allí –no obstante que log P_e continúa creciendo– comienzan a ionizarse como consecuencia del aumento considerable de la temperatura.

La Fig. 4.8 muestra el comportamiento del coeficiente de absorción medio de Rosseland con la profundidad óptica. Comencemos por recordar que estamos considerando el coeficiente medio de Rosseland por **gramo de material estelar**, el cual toma en cuenta **absorciones más dispersiones**. En las capas más superficiales de la atmósfera (con temperatura prácticamente constante y P_e decreciente a medida que nos vamos hacia fuera de la misma) **los átomos se van ionizando y pierden su capacidad de absorber, pero la densidad electrónica por gramo de material estelar crece**, tanto más, cuanto más pequeña sea P_e (ver la TABLA 2.7 del *Capítulo 2*, en todas las temperaturas); es así, que **la dispersión toma valores importantes en esas capas**. O sea, que la absorción y la dispersión trabajan en sentidos opuestos cuando nos desplazamos desde una cierta profundidad óptica hacia capas más superficiales: la primera decrece, en tanto la segunda crece; es el balance entre estos dos factores lo que determinará el valor del coeficiente de absorción total. Como ejemplo: miremos lo que ocurre con las distintas curvas si, partiendo de $\log(\tau) = 0$, nos desplazamos hacia valores más pequeños de τ ; al principio decrecen, es decir que pesa más la disminución de la absorción que lo que puede crecer la dispersión; en $\log(\tau) \approx -7.0$, se produce un equilibrio entre los dos factores, pero si continúa decreciendo τ , la dispersión sobrepasa en importancia a la absorción y la compensa con creces. En las capas más profundas de la atmósfera, κ_R disminuye debido a la fuerte ionización que va afectando a todas las especies atómicas.

4. CÁLCULO DEL FLUJO ESTELAR.

4.1. INTRODUCCIÓN.

El análisis de un espectro estelar requiere calcular el flujo emergente de un modelo de atmósfera estelar, mediante la solución de la ecuación del transporte. Existen técnicas numéricas que resuelven el problema del transporte en términos de ecuaciones diferenciales; en este sentido, existen métodos muy generales, flexibles y poderosos que surgen de considerar la ecuación del transporte como un problema de valores de frontera bipuntual utilizando ecuaciones de diferencias. También existen otros que resuelven la ecuación en términos de ecuaciones integrales.

Como dijimos en la sección **1.1** de este capítulo, consideraremos a la atmósfera estática, unidimensional y plano-paralela. Para algunas técnicas desarrolladas, existen fuertes razones físicas y matemáticas que las avalan, las cuales son especialmente diseñadas para, en algunos casos, superar ciertas dificultades que son características del transporte radiativo en medios ópticamente gruesos en presencia de términos de *scattering*.

El cálculo del flujo efectivo a diferentes profundidades, para verificar el equilibrio radiativo, es ciertamente una etapa complicada en el estudio de un modelo de atmósfera. Este cálculo implica, en realidad, el manejo de una gran cantidad de material numérico y la resolución de ecuaciones integro-diferenciales correspondientes a otras tantas longitudes de onda que cubren el conjunto del espectro. La dificultad de estos cálculos obliga a tener que llevarlos a cabo con computadoras; es por ello que se hace imprescindible la revisión de los distintos métodos de cálculo.

Con el paso del tiempo, se ha tendido a eliminar todo tipo de interpolaciones gráficas y a reemplazar las fórmulas de Gauss por las de Newton-Cotes para ciertos cálculos de integrales, no incluyendo nuevos órdenes (que se determinan gráficamente en la técnica manual) (Cayrel, 1958).

4.2. CÁLCULO DEL FLUJO.

La teoría clásica de las atmósferas estelares establece que en condiciones de estratificación plano-paralela de la atmósfera, el flujo monocromático radiativo viene expresado de la siguiente forma:

$$F_v(\tau_v) = 2\pi \int_{\tau_v}^{\infty} S_v(t_v) E_2(t_v - \tau_v) dt_v - 2\pi \int_0^{\tau_v} S_v(t_v) E_2(\tau_v - t_v) dt_v \quad (4.17)$$

donde S_v es la función fuente, E_2 la integral exponencial de segundo orden y τ_v la profundidad óptica monocromática. Esta expresión, como sabemos, nos mide –en cada τ_v – el balance entre la radiación emergente de capas más profundas y la incidente de capas más superficiales.

Para hallar el correspondiente flujo total, en condiciones de equilibrio radiativo², tendremos que integrar en frecuencias a la ecuación (4.17), es decir:

$$F(\tau) = \int_0^{\infty} F_v(\tau_v) d\nu \quad (4.18)$$

donde τ representa una profundidad óptica media, que en nuestro caso consideraremos la obtenida a partir del coeficiente medio de Rosseland, el cual se relaciona con τ_v a través de la ecuación (4.4), citada en la primera parte del este Capítulo y que escribimos a continuación:

$$d\tau / d\tau_v = \kappa_R / \kappa_v \quad (4.4')$$

Si la reescribimos e integramos convenientemente, queda expresada de la siguiente forma:

$$\tau_v(\tau) = \int_0^{\tau} \left(\kappa_v / \kappa_R \right) dt \quad (4.19)$$

Esta ecuación es muy importante a la hora de llevar a cabo el proceso de integración del flujo, ya que para cada profundidad óptica τ en que se desee calcular el mismo, necesitamos conocer los valores de las correspondientes profundidades ópticas monocromáticas τ_v , en las frecuencias que se utilizarán para evaluar el flujo integrado de la ecuación (4.18), y así poder calcular los flujos monocromáticos correspondientes de la ecuación (4.17).

Para llevar adelante este procedimiento, y hacerlo más ágil numéricamente, una vez calculado el modelo (almacenado en la memoria del ordenador para su utilización), y para cada profundidad óptica del mismo, procedimos a calcular los correspondientes valores de τ_v para cada frecuencia de trabajo, mediante un procedimiento gaussiano de integración numérica. Para ello, consideramos arbitrariamente diez intervalos de profundidades ópticas, algunos de los cuales seguramente quedaban excluidos del cálculo según el valor particular de τ ; los mismos fueron³: [0;2], [2;5], [5;10], [10;20], [20;80] y [80;100]; valores mayores de τ no contribuyen de manera significativamente al cálculo. En cada uno de estos intervalos aplicamos el procedimiento citado dividiéndolo intervalo en 10 puntos, utilizando los valores

² Por el momento no tomamos en cuenta el fenómeno de convección.

de temperatura y presiones correspondientes –para evaluar κ_ν y κ_R –, mediante una simple interpolación cuadrática de Lagrange.

Para la integración en frecuencia de la ecuación (4.18), se utilizaron los intervalos que se muestran –a modo de ejemplo, para la integración de un modelo Solar– en la Tabla 4.4, tanto en longitud de onda como en frecuencia.

TABLA 4.4

Intervalos de longitudes de onda y frecuencias utilizados en la integración del flujo.

1	$99930.7 \text{ \AA} > \lambda > 22794.6 \text{ \AA}$	$3.00 \times 10^{13} \text{ Hz} < \nu < 1.32 \times 10^{14} \text{ Hz}$
2	$22794.6 \text{ \AA} > \lambda > 14588.5 \text{ \AA}$	$1.32 \times 10^{14} \text{ Hz} < \nu < 2.05 \times 10^{14} \text{ Hz}$
3	$14588.5 \text{ \AA} > \lambda > 8206.0 \text{ \AA}$	$2.05 \times 10^{14} \text{ Hz} < \nu < 3.65 \times 10^{14} \text{ Hz}$
4	$8206.0 \text{ \AA} > \lambda > 3647.1 \text{ \AA}$	$3.65 \times 10^{14} \text{ Hz} < \nu < 8.22 \times 10^{14} \text{ Hz}$
5	$3647.1 \text{ \AA} > \lambda > 911.8 \text{ \AA}$	$8.22 \times 10^{14} \text{ Hz} < \nu < 3.29 \times 10^{15} \text{ Hz}$
6	$911.8 \text{ \AA} > \lambda > 504.3 \text{ \AA}$	$3.29 \times 10^{15} \text{ Hz} < \nu < 5.94 \times 10^{15} \text{ Hz}$
7	$504.3 \text{ \AA} > \lambda > 100.0 \text{ \AA}$	$5.94 \times 10^{15} \text{ Hz} < \nu < 3.00 \times 10^{16} \text{ Hz}$

Posteriormente, se consideraron en cada uno de estos intervalos diez valores, calculándose los pesos y abscisas gaussianas correspondientes (en el ejemplo Solar, 70 en total), y fueron en estas abscisas (frecuencias) en donde se calcularon los τ_ν correspondientes para cada profundidad óptica de interés, formando de este modo la matriz de trabajo TAUNUI.

Esta matriz es imprescindible para evaluar la función fuente en el integrando de la ecuación (4.17). En efecto, si consideramos en primera aproximación que la función fuente está representada por la función de Planck $B_\nu(T)$, para hallar el flujo monocromático en la frecuencia ν necesitaremos también el valor de la temperatura T correspondiente a la profundidad óptica τ_ν en la que se desea evaluar a la misma. Pero esta temperatura estará dada por una ley de distribución, que es función de la profundidad óptica media τ (la distribución original será luego corregida para satisfacer la constancia del flujo).

A este problema lo solucionamos de la siguiente forma: extraemos de la matriz TAUNUI la columna con los valores de τ_ν correspondientes a la frecuencia de trabajo ν_i , disponiendo de esta manera de pares ordenados (τ, τ_{ν_i}) ; luego, mediante interpolación cuadrática de Lagrange, obtenemos el valor de τ necesario para calcular la temperatura que necesitamos para evaluar la función de Planck.

Con los flujos monocromáticos ya calculados, el último paso constituye calcular el flujo total mediante la integración de la ecuación (4.18), también por un procedimiento gaussiano.

Finalmente, existen dos aspectos que conviene comentar; en primer lugar, cuando se considere oportunamente el fenómeno de la convección, el procedimiento es similar al explicado aquí, con el agregado del cálculo del flujo convectivo y toda la problemática que éste encierra, el cual se adicionará al flujo radiativo para darnos el flujo total. En segundo término, hasta aquí utilizamos la función de Planck como función fuente; cuando analicemos y resolvamos la ecuación del transporte, utilizaremos una mejor representación.

³ Observemos que no existe ningún problema de doble valuación al considerar intervalos cerrados, ya que la integración gaussiana no evalúa en los límites del intervalo de integración.

5. CORRECCIÓN DEL FLUJO.

5.1. CONDICIONES EN EL FLUJO.

En el cálculo de un modelo de atmósfera estelar existe ciertas condiciones que debe satisfacer el flujo neto integrado. Aceptando trabajar en equilibrio radiativo y suponiendo a la atmósfera estratificada en capas plano-paralelas, se deben cumplir las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dF(\tau)}{d\tau} = 0 \quad ; \quad F(\tau) = \frac{\sigma}{\pi} T_e^4 \quad (4.20)$$

donde T_e es la temperatura efectiva que caracteriza al modelo y σ la constante de Boltzmann.

Si bien las ecuaciones (4.20) parecen equivalentes, la primera afirma que el flujo en cada capa de la atmósfera no varía (constancia del flujo), mientras que la segunda nos dice cuánto debe ser el valor del mismo.

Basándose en el hecho de que, en primera aproximación, el espectro continuo del Sol podría representarse por el de una atmósfera gris, las primeras investigaciones utilizaron una distribución de temperatura gris dada por la siguiente expresión:

$$T^4(\tau) = \frac{3}{4} T_e^4 (\tau + q(\tau)) \quad (4.21)$$

donde $q(\tau)$ es la función de Hopf.

Actualmente, se parte de alguna distribución inicial de temperatura, se calcula luego el modelo y el flujo en cada capa considerada del mismo, y finalmente se corrige la distribución de temperatura originalmente adoptada hasta lograr verificar las ecuaciones (4.20).

5.2. PROCEDIMIENTOS DE CORRECCIÓN.

Strömgren (1944) y luego Swihart (1956) desarrollan la cuarta potencia de la distribución de temperatura, utilizando las integrales exponenciales de segundo y tercer orden, de la siguiente forma:

$$T^4(\tau) = \frac{3}{4} T_e^4 [a + b\tau + cE_2(\tau) + dE_3(\tau)] \quad (4.22)$$

donde a , b , c y d son constantes que se pueden ajustar con las condiciones sobre el flujo. Comparando (4.21) y (4.22) se deduce que se adoptó el siguiente desarrollo para $q(\tau)$:

$$q(\tau) = a + (b-1)\tau + cE_2(\tau) + dE_3(\tau) \quad (4.23)$$

Introduciendo el operador Φ_τ^4 , el flujo integrado en la profundidad τ y bajo la aproximación gris resultará:

⁴ Matemáticamente definido como $\Phi_\tau^4 [f(t)] \equiv 2 \int_\tau^\infty f(t) E_2(t-\tau) dt - 2 \int_0^\tau f(t) E_2(\tau-t) dt$, siendo $E_2(x)$ la integral exponencial de segundo orden.

$$F_g(\tau) = \Phi_\tau[B(t)] \quad (4.24)$$

en donde suponemos que la función fuente es la función de Planck. Luego, dado que $B(\tau) = (\sigma/\pi)T^4(\tau)$, y teniendo en cuenta (4.23), la ecuación (4.24) quedará entonces expresada de la siguiente forma:

$$F_g(\tau) = 2 \int_\tau^\infty \frac{\sigma}{\pi} T^4(t) E_2(t-\tau) dt - 2 \int_0^\tau \frac{\sigma}{\pi} T^4(t) E_2(\tau-t) dt$$

$$F_g(\tau) = \frac{3\sigma}{4\pi} T_e^4 \left[2 \int_\tau^\infty (a + bt + cE_2(t) + dE_3(t)) E_2(t-\tau) dt - 2 \int_0^\tau (a + bt + cE_2(t) + dE_3(t)) E_2(\tau-t) dt \right] \quad (4.25)$$

De la linealidad de los integrandos, resulta:

$$F_g(\tau) = \frac{3\sigma}{4\pi} T_e^4 [a\phi_0 + b\phi_1 + c\phi_2 + d\phi_3] \quad (4.26)$$

donde se ha definido:

$$\phi_0 = \Phi_\tau[1] \quad \phi_1(\tau) = \Phi_\tau[t] \quad \phi_2(\tau) = \Phi_\tau[E_2(t)] \quad \phi_3(\tau) = \Phi_\tau[E_3(t)]$$

Estos valores de ϕ_0 , ϕ_1 , ϕ_2 y ϕ_3 fueron originalmente tabulados por Kourganoff (1952), pero para valores de τ menores o iguales a 3.25.

Imponiendo la segunda condición de (4.20) en (4.26), obtenemos:

$$\frac{\sigma}{\pi} T_e^4 = \frac{3}{4} \frac{\sigma}{\pi} T_e^4 [a\phi_0 + b\phi_1 + c\phi_2 + d\phi_3] \quad (4.27)$$

arribándose a la siguiente igualdad:

$$\frac{4}{3} = a\phi_0 + b\phi_1 + c\phi_2 + d\phi_3 \quad (4.28)$$

Notemos que el primer miembro de (4.28) es independiente de τ , lo cual sugiere que con cuatro valores distintos de τ se obtendrían las cuatro constantes deseadas (a , b , c y d). Sin embargo, si consideramos una mayor cantidad de profundidades ópticas, se podría resolver (4.28) mediante cuadrados mínimos. En efecto, si aplicamos un método variacional a la ecuación (4.26), considerando variaciones sobre (los ahora parámetros) a , b , c y d , nos queda la ecuación siguiente:

$$\Delta F_g(\tau) = \frac{3\sigma}{4\pi} T_e^4 [\phi_0 \Delta a + \phi_1 \Delta b + \phi_2 \Delta c + \phi_3 \Delta d] \quad (4.29)$$

la cual nos relaciona la diferencia entre los valores del flujo calculado en cada capa y el valor correcto ($\Delta F_g(\tau) = F(\tau) - F_g$) y las correcciones que habrá que introducir en las constantes citadas (Δa , Δb , Δc y Δd) para lograr la constancia del flujo.

5.3 APLICACIÓN DEL MÉTODO DE NAPPIER & DODD (1974).

5.3.1. Generalidades.

Nappier & Dodd (1974) modificaron ligeramente este procedimiento clásico, extendiéndolo al caso no gris y eligiendo diez profundidades ópticas, en donde calcularon los flujos y las variaciones de éstos respecto al valor ideal.

En símbolos, si llamamos $\lambda_1=a$, $\lambda_2=b$, $\lambda_3=c$ y $\lambda_4=d$ a las constantes que definen a $T^4(\tau)$ (ecuación 4.22), y siendo $F=F(\tau;\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3,\lambda_4)$ la función que define al flujo, entonces $\Delta F(\tau) = \Sigma(\partial F/\partial \lambda_i)_\tau \Delta \lambda_i$ representa la variación del mismo debido a las variaciones de las constantes mencionadas. Partiendo, entonces, de una distribución inicial de temperatura, fijada por los valores respectivos de $\{\lambda_i\}^0 = \{\lambda_i^0\}$ (con $i=1..4$), dada por $T_0=T(\tau;\{\lambda_i^0\})$, entonces realizando variaciones en cada una de las constantes $\{\Delta \lambda_i\}^0 = \{\Delta \lambda_i^0\}$ ($i=1..4$), que respondan a minimizar las variaciones del flujo respecto al valor ideal, se obtendrá nuevas distribuciones de temperatura $T_1=T(\tau;\{\lambda_i^0 + \Delta \lambda_i^0\})$. Iterando el procedimiento se obtendrán correcciones a los valores de las constantes. Si el procedimiento funciona correctamente, se obtendrán valores decrecientes en los flujos residuales. Llamando: $p_i = \partial F/\partial \lambda_i$, $p_i^- = (F_i^- - F_i)/\Delta$ y $p_i^+ = (F_i^+ - F_i)/\Delta$, con $i=1..4$, donde F_i^- y F_i^+ representan el valor del flujo obtenido –respectivamente– disminuyendo y aumentando el valor de λ_i en un valor Δ , entonces podemos realizar la siguiente aproximación:

$$p_i \approx \frac{1}{2} (p_i^- + p_i^+) = (F_i^+ - F_i^-) / 2\Delta \quad (i=1..4) \quad (4.30)$$

Una vez calculados los valores de las derivadas del flujo en cada profundidad óptica, se obtienen los valores de las correcciones en los parámetros mediante un procedimiento de cuadrados mínimos (ver siguiente apartado), obteniéndose de este modo los valores de las constantes corregidas: $a' = a + \Delta a$; $b' = b + \Delta b$; $c' = c + \Delta c$; $d' = d + \Delta d$. Luego, con estos nuevos valores de a' , b' , c' y d' , se itera el proceso hasta que los valores del flujo se mantengan razonablemente constantes dentro de un cierto intervalo de confianza prefijado.

5.3.2. Procedimiento Numérico.

En nuestro procedimiento aumentamos la cantidad de profundidades ópticas consideradas, llevándolas hasta cuarenta, distribuyéndolas sobre toda la atmósfera. Los valores elegidos fueron los siguientes:

TABLA 4.5

Profundidades ópticas empleadas en el procedimiento de corrección de la distribución de la temperatura inicial de la temperatura.

τ									
0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0	9.0	10.0	11.0
12.0	13.0	15.0	20.0	25.0	30.0	35.0	40.0	45.0	50.0
55.0	60.0	65.0	70.0	75.0	80.0	85.0	90.0	95.0	100.0

Para cada una de las profundidades ópticas elegidas, la variación en el flujo debido a las variaciones en las constantes que definen la ley de distribución de temperatura serán las siguientes:

$$\begin{aligned}
 \Delta F(\tau_1) &= p_1(\tau_1) \Delta a + p_2(\tau_1) \Delta b + p_3(\tau_1) \Delta c + p_4(\tau_1) \Delta d \\
 \Delta F(\tau_2) &= p_1(\tau_2) \Delta a + p_2(\tau_2) \Delta b + p_3(\tau_2) \Delta c + p_4(\tau_2) \Delta d \\
 &\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
 \Delta F(\tau_{40}) &= p_1(\tau_{40}) \Delta a + p_2(\tau_{40}) \Delta b + p_3(\tau_{40}) \Delta c + p_4(\tau_{40}) \Delta d
 \end{aligned}
 \tag{4.31}$$

Denotando por $x_i := p_1(\tau_i)$, $y_i := p_2(\tau_i)$, $u_i := p_3(\tau_i)$, $v_i := p_4(\tau_i)$ y $z_i := \Delta F(\tau_i)$, con $i=1..40$, nos queda planteado el siguiente sistema de ecuaciones lineales, una para cada una de las profundidades ópticas elegidas:

$$\begin{aligned}
 z_1 &= x_1 \Delta a + y_1 \Delta b + u_1 \Delta c + v_1 \Delta d \\
 z_2 &= x_2 \Delta a + y_2 \Delta b + u_2 \Delta c + v_2 \Delta d \\
 &\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
 z_{40} &= x_{40} \Delta a + y_{40} \Delta b + u_{40} \Delta c + v_{40} \Delta d
 \end{aligned}
 \tag{4.32}$$

Este sistema se puede reducir, aplicando el método de cuadrados mínimos, a las siguientes ecuaciones normales:

$$\begin{aligned}
 [zx] &= [xx] \Delta a + [xy] \Delta b + [xu] \Delta c + [xv] \Delta d \\
 [zy] &= [yx] \Delta a + [yy] \Delta b + [yu] \Delta c + [yv] \Delta d \\
 [zu] &= [ux] \Delta a + [uy] \Delta b + [uu] \Delta c + [uv] \Delta d \\
 [zv] &= [vx] \Delta a + [vy] \Delta b + [vu] \Delta c + [vv] \Delta d
 \end{aligned}
 \tag{4.33}$$

donde hemos introducido la siguiente notación: $[\alpha, \beta] = \sum_{i=1}^{40} \alpha_i \beta_i$, con $\alpha, \beta = x, y, u, v, z$.

El sistema de ecuaciones dado por (4.33) puede ser transformado a una forma matricial de la forma $\mathbf{A} \boldsymbol{\delta} = \mathbf{B}$, donde \mathbf{A} es una matriz 4x4 y tanto $\boldsymbol{\delta}$ como \mathbf{B} son vectores de cuatro dimensiones, definidos de la siguiente manera:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} [xx] & [xy] & [xu] & [xv] \\ [yx] & [yy] & [yu] & [yv] \\ [ux] & [uy] & [uu] & [uv] \\ [vx] & [vy] & [vu] & [vv] \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\delta} = \begin{pmatrix} \Delta a \\ \Delta b \\ \Delta c \\ \Delta d \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} [zx] \\ [zy] \\ [zu] \\ [zv] \end{pmatrix}
 \tag{4.34}$$

Existen en la literatura varios métodos numéricos para resolver estos tipos de ecuaciones; nosotros utilizamos un esquema de eliminación Gauss-Jordan, el cual demuestra ser muy estable comparados con otros, si se utiliza el mecanismo de pivoteo (Press *et al.*, 1992, p. 29); estos autores brindan, además, una subrutina que lleva a cabo el proceso de cálculo y la cual es de fácil adaptación a nuestros programas (*gaussj.f*).

Por lo tanto, en cada iteración se calcularon 360 flujos, correspondientes a cuarenta profundidades ópticas elegidas, y para cada una de ellas ocho valores de flujos distintos (dos para cada valor de constante modificada independientemente –uno por exceso y otro por defecto–) más cuarenta valores de flujos correspondientes a la distribución de temperatura sin modificar las constantes; esto permite obtener 160 valores de derivadas (4 para cada profundidad óptica).

Un índice que nos permite decidir la eficiencia del método fue definido por Napier & Dodd (1974, p. 295) de la siguiente forma:

$$I = \int_0^5 \left(\frac{\Delta F}{F} \right)^2 d\tau \quad (4.35)$$

donde ΔF representa la diferencia entre el flujo ideal y el flujo real F en la profundidad τ . Conviene destacar que en este trabajo, y como se advierte en la ecuación (4.35), los autores aplican el método hasta $\tau=5$; en nuestro caso, incrementaremos el límite superior de la integral hasta $\tau=100$, es decir:

$$I = \int_0^{100} \left(\frac{\Delta F}{F} \right)^2 d\tau \quad (4.36)$$

5.3.3. Resultados Obtenidos.

Las Tablas 4.6 a 4.8 resumen algunos valores obtenidos mediante este procedimiento, en el cual se utilizaron (para comparación) los mismos valores de temperatura y gravedad, como así también las mismas abundancias químicas, citadas al comienzo de este capítulo.

TABLA 4.6

Flujos residuales porcentuales ($\Delta F/F$)% aplicando el método de Nappier & Dodd, para un modelo Solar ($T_e = 5500$ K; $\log g = 4.0$)

Ite.	tau=	1.0E-01	2.0E-01	3.0E-01	4.0E-01	5.0E-01	6.0E-01	7.0E-01	8.0E-01	9.0E-01	1.0E+00	2.0E+00	3.0E+00	4.0E+00	5.0E+00
		6.0E+00	7.0E+00	8.0E+00	9.0E+00	1.0E+01	1.1E+01	1.2E+01	1.3E+01	1.5E+01	2.0E+01	2.5E+01	3.0E+01	3.5E+01	4.0E+01
		4.0E+01	4.5E+01	5.0E+01	5.5E+01	6.0E+01	6.5E+01	7.0E+01	7.5E+01	8.0E+01	8.5E+01	9.0E+01	9.5E+01	1.0E+02	
	a	0.710446	b	1.000000	c	-0.243910	d	0.221630							
0		-4.6E+00	-4.8E+00	-5.1E+00	-5.3E+00	-5.5E+00	-5.8E+00	-6.0E+00	-6.3E+00	-6.6E+00	-6.8E+00	-8.4E+00	-8.2E+00	-7.1E+00	-6.0E+00
		-5.1E+00	-4.4E+00	-3.9E+00	-3.5E+00	-3.1E+00	-2.8E+00	-2.5E+00	-2.2E+00	-1.7E+00	-1.1E+00	-8.5E-01	-6.6E-01	-6.7E-01	
I=0.0450		-5.5E-01	-3.8E-01	-3.8E-01	-3.8E-01	-4.7E-01	-1.2E-01	-5.9E-02	-2.6E-01	1.9E-01	6.2E-02	4.7E-03	2.3E-01	-1.1E-01	
	da	=-2.341094E-02	db	= 1.120064E-02	dc	= 1.523062E-03	dd	= 1.116954E-04							
	a	0.687035	b	1.011201	c	-0.242387	d	0.221742							
1		-5.5E+00	-5.4E+00	-5.4E+00	-5.4E+00	-5.5E+00	-5.6E+00	-5.7E+00	-5.9E+00	-6.1E+00	-6.3E+00	-7.5E+00	-7.2E+00	-6.1E+00	-4.9E+00
		-4.0E+00	-3.3E+00	-2.8E+00	-2.4E+00	-2.0E+00	-1.7E+00	-1.4E+00	-1.1E+00	-6.3E-01	7.7E-02	3.0E-01	3.6E-01	5.1E-01	
I=0.0464		6.5E-01	8.3E-01	8.3E-01	7.2E-01	7.4E-01	1.1E+00	9.9E-01	1.2E+00	1.4E+00	1.4E+00	1.3E+00	9.5E-01	1.3E+00	
	da	= 6.961682E-03	db	= 1.252921E-03	dc	= 1.443298E-03	dd	= 8.073982E-05							
	a	0.693997	b	1.012454	c	-0.240944	d	0.221822							
2		-4.9E+00	-5.0E+00	-5.0E+00	-5.1E+00	-5.2E+00	-5.3E+00	-5.5E+00	-5.7E+00	-5.9E+00	-6.1E+00	-7.4E+00	-7.0E+00	-5.9E+00	-4.8E+00
		-3.9E+00	-3.2E+00	-2.7E+00	-2.2E+00	-1.9E+00	-1.6E+00	-1.3E+00	-9.7E-01	-4.9E-01	1.9E-01	4.1E-01	5.5E-01	6.0E-01	
I=0.0514		7.3E-01	9.1E-01	8.8E-01	8.2E-01	1.1E+00	1.2E+00	1.0E+00	1.4E+00	1.4E+00	1.4E+00	1.3E+00	1.3E+00	1.4E+00	
	da	=-1.936403E-03	db	=-7.142025E-04	dc	= 1.457753E-03	dd	= 9.600956E-05							
	a	0.692060	b	1.011739	c	-0.239486	d	0.221918							
3		-5.1E+00	-5.1E+00	-5.1E+00	-5.2E+00	-5.3E+00	-5.5E+00	-5.6E+00	-5.8E+00	-6.0E+00	-6.2E+00	-7.5E+00	-7.1E+00	-6.0E+00	-4.9E+00
		-3.9E+00	-3.2E+00	-2.7E+00	-2.3E+00	-2.0E+00	-1.6E+00	-1.3E+00	-9.7E-01	-4.9E-01	1.2E-01	3.4E-01	4.7E-01	5.4E-01	
I=0.0487		6.7E-01	8.6E-01	8.5E-01	7.3E-01	9.3E-01	1.2E+00	9.9E-01	1.3E+00	1.4E+00	1.4E+00	1.3E+00	1.3E+00	1.2E+00	
	da	= 4.736914E-04	db	= 2.807874E-04	dc	= 1.443450E-03	dd	= 8.969449E-05							
	a	0.692534	b	1.012020	c	-0.238042	d	0.222008							
4		-5.0E+00	-5.0E+00	-5.1E+00	-5.2E+00	-5.3E+00	-5.4E+00	-5.6E+00	-5.8E+00	-6.0E+00	-6.2E+00	-7.4E+00	-7.1E+00	-6.0E+00	-4.8E+00
		-3.9E+00	-3.2E+00	-2.7E+00	-2.3E+00	-2.0E+00	-1.6E+00	-1.3E+00	-9.7E-01	-4.9E-01	1.5E-01	3.7E-01	5.0E-01	5.6E-01	
I=0.0498		6.9E-01	8.8E-01	8.4E-01	7.8E-01	9.9E-01	1.2E+00	1.0E+00	1.4E+00	1.4E+00	1.2E+00	1.3E+00	1.3E+00	1.2E+00	
	da	=-6.278547E-04	db	=-1.038476E-04	dc	= 1.441388E-03	dd	= 9.209076E-05							
	a	0.691906	b	1.011916	c	-0.236601	d	0.222100							
5		-5.0E+00	-5.1E+00	-5.1E+00	-5.2E+00	-5.3E+00	-5.5E+00	-5.6E+00	-5.8E+00	-6.0E+00	-6.2E+00	-7.5E+00	-7.1E+00	-6.0E+00	-4.8E+00
		-3.9E+00	-3.2E+00	-2.7E+00	-2.3E+00	-2.0E+00	-1.6E+00	-1.3E+00	-9.7E-01	-4.9E-01	1.3E-01	3.6E-01	4.5E-01	5.5E-01	
I=0.0495		6.9E-01	8.7E-01	8.6E-01	7.5E-01	9.6E-01	1.2E+00	1.0E+00	1.4E+00	1.4E+00	1.2E+00	1.3E+00	1.3E+00	1.2E+00	
	da	=-1.271616E-04	db	= 6.835233E-05	dc	= 1.433766E-03	dd	= 9.064187E-05							

TABLA 4.8

Flujos residuales porcentuales ($\Delta F/F$)% aplicando el método de Nappier & Dodd para un modelo HdC ($T_e = 5500$ K; $\log g = 4.0$)

Ite.	tau=	1.0E-01	2.0E-01	3.0E-01	4.0E-01	5.0E-01	6.0E-01	7.0E-01	8.0E-01	9.0E-01	1.0E+00	2.0E+00	3.0E+00	4.0E+00	5.0E+00	
		6.0E+00	7.0E+00	8.0E+00	9.0E+00	1.0E+01	1.1E+01	1.2E+01	1.3E+01	1.5E+01	2.0E+01	2.5E+01	3.0E+01	3.5E+01	4.0E+01	
		4.0E+01	4.5E+01	5.0E+01	5.5E+01	6.0E+01	6.5E+01	7.0E+01	7.5E+01	8.0E+01	8.5E+01	9.0E+01	9.5E+01	1.0E+02		

	a = 0.710446	b = 1.000000	c = -0.243910	d = 0.2271630												
0		-1.3E+01	-1.3E+01	-1.2E+01	-1.2E+01	-1.2E+01	-1.2E+01	-1.1E+01	-1.1E+01	-1.0E+01	-9.7E+00	-6.2E+00	-6.0E+00	-7.4E+00	-8.7E+00	
I=0.4990		-9.3E+00	-9.4E+00	-9.2E+00	-8.8E+00	-8.3E+00	-7.8E+00	-7.3E+00	-6.8E+00	-5.9E+00	-4.3E+00	-3.4E+00	-2.9E+00	-2.6E+00	-2.9E+00	
	da = 1.276374E-01	db = 1.984266E-02	dc = 1.532949E-03	dd = 8.509346E-04												

	a = 0.838084	b = 1.019843	c = -0.242377	d = 0.222481												
1		-3.6E+00	-5.0E+00	-5.8E+00	-6.2E+00	-6.3E+00	-6.3E+00	-6.2E+00	-6.0E+00	-5.8E+00	-5.5E+00	-3.5E+00	-4.3E+00	-6.0E+00	-7.1E+00	
I=0.1975		-7.6E+00	-7.5E+00	-7.2E+00	-6.7E+00	-6.2E+00	-5.6E+00	-5.1E+00	-4.6E+00	-3.7E+00	-2.2E+00	-1.3E+00	-7.9E-01	-5.6E-01	-5.6E-01	
	da = -1.905040E-03	db = -2.399413E-03	dc = 1.473728E-03	dd = 8.885770E-04												

	a = 0.836178	b = 1.017443	c = -0.240903	d = 0.223370												
2		-3.8E+00	-5.2E+00	-6.0E+00	-6.4E+00	-6.6E+00	-6.6E+00	-6.5E+00	-6.3E+00	-6.1E+00	-5.8E+00	-3.7E+00	-4.5E+00	-6.2E+00	-7.3E+00	
I=0.2186		-7.8E+00	-7.7E+00	-7.4E+00	-6.9E+00	-6.4E+00	-5.9E+00	-5.3E+00	-4.9E+00	-4.0E+00	-2.4E+00	-1.5E+00	-1.0E+00	-7.9E-01	-7.9E-01	
	da = 5.655864E-03	db = 1.973344E-05	dc = 1.430672E-03	dd = 8.940445E-04												

	a = 0.841834	b = 1.017463	c = -0.239473	d = 0.224264												
3		-3.4E+00	-4.9E+00	-5.7E+00	-6.2E+00	-6.4E+00	-6.4E+00	-6.3E+00	-6.2E+00	-6.0E+00	-5.7E+00	-3.7E+00	-4.5E+00	-6.2E+00	-7.3E+00	
I=0.2215		-7.8E+00	-7.7E+00	-7.4E+00	-6.9E+00	-6.4E+00	-5.9E+00	-5.3E+00	-4.8E+00	-4.0E+00	-2.4E+00	-1.5E+00	-1.0E+00	-7.8E-01	-7.8E-01	
	da = 1.105604E-02	db = 8.805441E-04	dc = 1.328545E-03	dd = 8.777908E-04												

	a = 0.852890	b = 1.018344	c = -0.238144	d = 0.225142												
4		-2.6E+00	-4.2E+00	-5.2E+00	-6.0E+00	-6.0E+00	-6.0E+00	-6.0E+00	-5.8E+00	-5.6E+00	-5.4E+00	-3.5E+00	-4.4E+00	-6.1E+00	-7.3E+00	
I=0.2130		-7.7E+00	-7.7E+00	-7.3E+00	-6.8E+00	-6.3E+00	-5.8E+00	-5.2E+00	-4.8E+00	-3.9E+00	-2.3E+00	-1.4E+00	-9.2E-01	-7.0E-01	-7.0E-01	
	da = -1.031285E-02	db = -9.177179E-04	dc = 1.403008E-03	dd = 9.021524E-04												

	a = 0.842578	b = 1.017426	c = -0.236741	d = 0.226044												
5		-3.2E+00	-4.8E+00	-5.7E+00	-6.2E+00	-6.4E+00	-6.4E+00	-6.4E+00	-6.2E+00	-6.0E+00	-5.7E+00	-3.7E+00	-4.5E+00	-6.2E+00	-7.4E+00	
I=0.2195		-7.8E+00	-7.7E+00	-7.4E+00	-6.9E+00	-6.4E+00	-5.9E+00	-5.3E+00	-4.8E+00	-4.0E+00	-2.4E+00	-1.5E+00	-1.0E+00	-7.8E-01	-7.8E-01	
	da = 4.043284E-03	db = 4.831188E-04	dc = 1.364767E-03	dd = 8.840937E-04												

5.3.4. Comentarios.

Del análisis de los índices I de las Tablas 4.6 a 4.8 podemos advertir, en primer término, que no es necesario llevar adelante demasiadas iteraciones para lograr una estabilización razonable del método, ya que se observa una ligera oscilación alrededor de un valor medio,

Otro punto que merece destacarse son los valores obtenidos de los mismos, comparándolos con aplicaciones similares del método en el trabajo original de Nappier & Dodd (1974). En efecto, en un modelo Solar de similares características que el nuestro ($T_{ef} = 6000$ K, $\log g = 4$), los autores realizan cuatro iteraciones y los valores de los índices I que obtienen son, respectivamente, los siguientes: 611.55, 20.89, 0.55 y 0.50. Si los comparamos con los hallados en nuestro procedimiento (ver Tabla 4.6), se advierte que se obtuvieron valores dos órdenes de magnitud menores, comparado con los índices más bajos obtenidos por los autores; si tenemos en cuenta, además, el comentario previo a la ecuación (4.36) en el sentido que evaluamos dicho índice hasta una profundidad óptica de $\tau = 100$ (y no de $\tau = 5$ como se hace en el trabajo citado) y que el integrando es definido positivo, nos hace concluir que nuestro procedimiento de cálculo de flujo sería más preciso que el empleado por dichos autores.

Sin embargo, si analizamos en detalle la evolución de los flujos residuales porcentuales en cada una de las capas utilizadas en el procedimiento, no se advierte mejoras sustanciales de los mismos en cada iteración, lo que implícitamente se pone de manifiesto en las pequeñas variaciones de los índices I (del orden de las milésimas). Esto nos diría que el método no es lo suficientemente preciso como para disminuir aún más los errores en los flujos, a pesar de que se obtuvieron correcciones Δa , Δb , Δc y Δd cada vez menores en los parámetros que definen la distribución de temperatura en la atmósfera.

Comparando entre sí las Tablas 4.6 a 4.8, notamos que los errores –y por lo tanto índices I – más bajos fueron obtenidos en el modelo de Población II ($I = 0.002$), mientras que los valores más altos (dos órdenes de magnitud mayor) fueron obtenidos en el modelo HdC ($I \cong 0.2$); el modelo Solar se ubica comparativamente entre ellos ($I \cong 0.05$).

Finalmente digamos que, si bien hasta aquí nuestros modelos son estrictamente radiativos, el método de corrección de la distribución de temperatura debería funcionar eficientemente, independientemente de las hipótesis introducidas en el cálculo.

5.4 PROCEDIMIENTO DE AVRETT-KROOK MODIFICADO (KURUCZ, 1970).

5.4.1. Generalidades.

En vista a las dificultades que se hallaron en la convergencia del procedimiento de Nappier & Dodd (1974), decidimos implementar el procedimiento aplicado y descrito en el ATLAS 5 (Kurucz, 1970; pp. 105-108), el cual resumimos a continuación.

Llamando H al flujo integrado a partir de una distribución inicial de temperaturas $T_0(\tau)$ y \mathcal{H} al flujo ideal deseado, que satisface la condición del equilibrio radiativo ($\mathcal{H} = \sigma T_c^4/4\pi$), entonces nos aparecerá en cada capa del cálculo del modelo un error ΔH dado por la expresión:

$$\Delta H = \int_0^{\infty} H_v d\nu - \mathcal{H} \quad (4.37)$$

la cual se utilizará para modificar la distribución de temperaturas inicial y lograr aquella que satisfice las condiciones de las ecuaciones (4.20). Puesto que el flujo observado proviene de las regiones de la atmósfera ópticamente gruesas ($0.1 \leq \tau \leq 2.0$), las temperaturas de las capas más superficiales no afectan en gran medida al mismo. Por ello, es muy difícil utilizar los errores del flujo cerca de la superficie para derivar los cambios en la temperatura. No obstante, la expresión:

$$\frac{dH_v}{d\tau_v} = J_v - S_v \quad (4.38)$$

es sensible a la temperatura en las regiones ópticamente delgadas y puede ser utilizada para obtener correcciones de la temperatura cercanas a la superficie, ajustando la derivada del flujo en las regiones ópticamente gruesas donde se conoce la temperatura. Un procedimiento estándar que utiliza este mecanismo es el llamado *procedimiento iterativo A*, el cual da como resultado J_v .

Kurucz adapta el procedimiento de Avrett & Krook (1963), partiendo del segundo momento de la ecuación del transporte:

$$\frac{dK_v}{d\tau_v} = H_v \quad (4.39)$$

la cual puede ser escrita de la siguiente manera:

$$\frac{dK_v}{dM} = (\kappa_v + \sigma_v)H_v \quad (4.40)$$

donde M es una variable másica definida por la expresión:

$$dM = \rho dx \quad (4.41)$$

donde ρ es la densidad volumétrica de masa y x la profundidad geométrica. Realizando las siguientes perturbaciones a estas variables:

$$K_v \mapsto K_v + \Delta K_v ; M \mapsto M + \Delta M ; (\kappa_v + \sigma_v) \mapsto (\kappa_v + \sigma_v) + \Delta(\kappa_v + \sigma_v) ; H_v \mapsto H_v + \Delta H_v$$

se obtiene la siguiente ecuación diferencial de primer orden:

$$\frac{d\Delta K_v}{dM} = (\kappa_v + \sigma_v)\Delta H_v + \Delta(\kappa_v + \sigma_v)H_v + (\kappa_v + \sigma_v)H_v \frac{d\Delta M}{dM} \quad (4.42)$$

de la cual, resuelta en términos de ΔM , se obtiene la siguiente relación:

$$\Delta T = -\frac{dT}{dM} \Delta M \quad (4.43)$$

Si bien conocemos los valores de H_v , $(\kappa_v + \sigma_v)$ y ΔH de la integración realizada en el modelo calculado, se desconocen ΔH_v , $\Delta(\kappa_v + \sigma_v)$ y ΔK_v ; por ello, dividiendo miembro a miembro la ecuación (4.42) por $(\kappa_v + \sigma_v)$ e integrándola en frecuencias, para obtener el valor de ΔH , se obtiene:

$$\Delta H = \int_0^{\infty} \Delta H_v dv = \int_0^{\infty} \frac{1}{(\kappa_v + \sigma_v)} \frac{d\Delta K_v}{dM} dv - \int_0^{\infty} \frac{\Delta(\kappa_v + \sigma_v)}{(\kappa_v + \sigma_v)} H_v dv - \int_0^{\infty} H_v \frac{d\Delta M}{dM} dv \quad (4.44)$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones (4.37) y (4.44), y asumiendo *ad-hoc* (tal como lo hace Kurucz) que las dos primeras integrales se cancelan mutuamente, se obtiene la siguiente ecuación diferencial para ΔM :

$$H \frac{d\Delta M}{dM} = H - \mathcal{H} \quad (4.45)$$

cuya solución será, fijando la condición de contorno $\Delta M (M = 0) = 0$, la siguiente:

$$\Delta M = \int_0^M \frac{\Delta H(y)}{H(y)} dy \quad (4.46)$$

donde $\Delta H(y) = H(y) - \mathcal{H}$. Por lo tanto la corrección térmica al flujo será finalmente:

$$\Delta T_{\text{flujo}} = - \frac{dT}{dM} \Delta M \quad (4.47)$$

5.4.2. Implementación del Método.

La ecuación (4.47) nos proporciona la corrección que debemos efectuar al valor de la temperatura en cada capa del modelo, atento a obtener el flujo constante e igual al valor ideal \mathcal{H} en dicha profundidad óptica. Para ello adaptamos nuestro código de cálculo de integración del modelo, primeramente para evaluar la variable másica M , integrando la ecuación diferencial (4.41) en cada capa del modelo; luego, se evaluó ΔM a partir de la integral de la ecuación (4.46) luego de integrar el modelo y calcular los flujos respectivos en cada profundidad óptica del mismo; y finalmente el cálculo de $\frac{dT}{dM}$, también a partir del modelo integrado.

Para el cálculo de la derivada se utilizó el método de la bisección citado en el ATLAS 5 (Kurucz, 1970; pp.27-28). El mismo se basa en bisecar el ángulo formado por las rectas secantes a ambos lados de la ordenada en donde se desea hallar la derivada de la función. Llamando x_{j-1} , x_j y x_{j+1} las abscisas anterior, local y posterior, y f_{j-1} , f_j y f_{j+1} a las ordenadas respectivas, entonces:

$$\left(\frac{df}{dx} \right)_j = \frac{S(T_j + T_{j+1})}{1 - T_j T_{j+1}} \quad (4.48)$$

donde:

$$T_j = \frac{D_j}{1 + \sqrt{1 + D_j^2}}; T_{j+1} = \frac{D_{j+1}}{1 + \sqrt{1 + D_{j+1}^2}}; D_j = \frac{1}{S} \cdot \frac{f_j - f_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}; D_{j+1} = \frac{1}{S} \cdot \frac{f_{j+1} - f_j}{x_{j+1} - x_j}$$

$$S = \frac{\max(|f_{j-1}|, |f_j|, |f_{j+1}|)}{|x_j|}$$

Aquí S representa un factor de escala que transforman D_j y D_{j+1} a magnitudes adimensionales.

Los resultados obtenidos no fueron del todo satisfactorios, como lo muestran las Tablas 4.9 y 4.10 siguientes, las cuales muestran las sucesivas correcciones al flujo en algunas de las capas consideradas, para una atmósfera de composición Solar y temperaturas efectivas de 5500 K y 9000 K, respectivamente. El último valor de la temperatura efectiva fue tomada como referencia, ya que según los modelos estándar de Kurucz (1979), para la misma no aparece el fenómeno de convección, el cual no está siendo considerado en nuestros cálculos en este momento. Conviene aclarar que la cantidad de iteraciones realizada no responde a algún particular criterio de convergencia, sino que fue establecida arbitrariamente de antemano.

Del análisis de los resultados que muestran las tablas se advierte una clara oscilación del método, que provoca, por un lado, un mejoramiento en las condiciones de flujo constante en algunas capas del modelo, pero un empeoramiento del mismo, incluso respecto del valor inicial calculado a partir de la distribución de temperatura inicial adoptado, el cual llegó ser en algunos casos muy buenos, con apartamientos porcentuales menores al 1 %.

Debido a que Kurucz adapta el método original publicado por Avrett & Krook (1963), a continuación explicaremos los lineamientos generales del mismo, como así también la extensión del mismo para considerar el efecto de las dispersiones propuesta por Karp (1972). El mismo constituye un procedimiento mejorado y adaptable a nuestras hipótesis de trabajo, el cual implementaremos a corto plazo.

TABLA 4.9

Evolución del flujo integrado en las sucesivas iteraciones, para una atmósfera de composición Solar, $g=4$ y $T_{ef} = 5500$ K, aplicando el método de Avrett & Krook modificado (Kurucz, 1970). Los números entre paréntesis representan errores porcentuales definidos como $e\% = 100(1 - H/F(\tau))$, donde en este caso $H = 1.651669 \times 10^{10}$ erg/s.

Capa	tau	Iteración No.:	0	1	2	3	4	5
2	0.001		1.58201E+10	1.57494E+10	1.57255E+10	1.57035E+10	1.56826E+10	1.56621E+10
			(-4.2E+00 %)	(-4.6E+00 %)	(-4.8E+00 %)	(-4.9E+00 %)	(-5.1E+00 %)	(-5.2E+00 %)
6	0.010		1.58071E+10	1.57380E+10	1.57135E+10	1.56910E+10	1.56697E+10	1.56488E+10
			(-4.3E+00 %)	(-4.7E+00 %)	(-4.9E+00 %)	(-5.0E+00 %)	(-5.1E+00 %)	(-5.3E+00 %)
12	0.139		1.57477E+10	1.56823E+10	1.56545E+10	1.56290E+10	1.56047E+10	1.55810E+10
			(-4.7E+00 %)	(-5.1E+00 %)	(-5.2E+00 %)	(-5.4E+00 %)	(-5.5E+00 %)	(-5.7E+00 %)
16	0.500		1.56262E+10	1.55606E+10	1.55290E+10	1.55002E+10	1.54729E+10	1.54460E+10
			(-5.4E+00 %)	(-5.8E+00 %)	(-6.0E+00 %)	(-6.2E+00 %)	(-6.3E+00 %)	(-6.5E+00 %)
20	1.150		1.53694E+10	1.53034E+10	1.52900E+10	1.52764E+10	1.52615E+10	1.52440E+10
			(-6.9E+00 %)	(-7.3E+00 %)	(-7.4E+00 %)	(-7.5E+00 %)	(-7.6E+00 %)	(-7.7E+00 %)
26	2.750		1.52279E+10	1.52151E+10	1.52029E+10	1.51941E+10	1.51916E+10	1.51836E+10
			(-7.8E+00 %)	(-7.9E+00 %)	(-8.0E+00 %)	(-8.0E+00 %)	(-8.0E+00 %)	(-8.1E+00 %)
30	4.900		1.55933E+10	1.55609E+10	1.54762E+10	1.54120E+10	1.53649E+10	1.53339E+10
			(-5.6E+00 %)	(-5.8E+00 %)	(-6.3E+00 %)	(-6.7E+00 %)	(-7.0E+00 %)	(-7.2E+00 %)
33	10.000		1.60470E+10	1.60718E+10	1.61273E+10	1.61999E+10	1.62860E+10	1.63701E+10
			(-2.8E+00 %)	(-2.7E+00 %)	(-2.4E+00 %)	(-1.9E+00 %)	(-1.4E+00 %)	(-8.9E-01 %)
35	15.000		1.62669E+10	1.63682E+10	1.64000E+10	1.64277E+10	1.64450E+10	1.64618E+10
			(-1.5E+00 %)	(-9.0E-01 %)	(-7.1E-01 %)	(-5.4E-01 %)	(-4.3E-01 %)	(-3.3E-01 %)
37	20.000		1.63682E+10	1.73385E+10	1.73749E+10	1.74887E+10	1.75018E+10	1.73744E+10
			(-9.0E-01 %)	(5.0E+00 %)	(5.2E+00 %)	(5.9E+00 %)	(6.0E+00 %)	(5.2E+00 %)
38	50.000		1.64846E+10	1.60737E+10	1.59019E+10	1.57280E+10	1.56214E+10	1.55714E+10
			(-1.9E-01 %)	(-2.7E+00 %)	(-3.7E+00 %)	(-4.8E+00 %)	(-5.4E+00 %)	(-5.7E+00 %)
39	75.000		1.65153E+10	1.63524E+10	1.64562E+10	1.65548E+10	1.68849E+10	1.69082E+10
			(-8.7E-03 %)	(-9.9E-01 %)	(-3.7E-01 %)	(2.3E-01 %)	(2.2E+00 %)	(2.4E+00 %)
40	100.000		1.72486E+10	1.63651E+10	1.67893E+10	1.72519E+10	1.81363E+10	1.83295E+10
			(4.4E+00 %)	(-9.2E-01 %)	(1.7E+00 %)	(4.5E+00 %)	(9.8E+00 %)	(1.1E+01 %)

TABLA 4.10

Evolución del flujo integrado en las sucesivas iteraciones, para una atmósfera de composición Solar, $g=4$ y $T_{ef} = 9000$ K, aplicando el método de Avrett & Krook modificado (Kurucz, 1970). Los números entre paréntesis representan errores porcentuales definidos como $e\% = 100(1 - H/F(\tau))$, donde en este caso $H = 1.1842470 \times 10^{11}$ erg/s.

Capa	tau	Iteración No.:	0	1	2	3	4	5
2	0.001		1.14311E+11	1.12871E+11	1.12331E+11	1.11861E+11	1.11367E+11	1.10818E+11
			(-3.5E+00 %)	(-4.7E+00 %)	(-5.1E+00 %)	(-5.5E+00 %)	(-6.0E+00 %)	(-6.4E+00 %)
6	0.010		1.13949E+11	1.12584E+11	1.12034E+11	1.11553E+11	1.11048E+11	1.10486E+11
			(-3.8E+00 %)	(-4.9E+00 %)	(-5.4E+00 %)	(-5.8E+00 %)	(-6.2E+00 %)	(-6.7E+00 %)
12	0.139		1.13645E+11	1.12240E+11	1.11510E+11	1.10862E+11	1.10179E+11	1.09424E+11
			(-4.0E+00 %)	(-5.2E+00 %)	(-5.8E+00 %)	(-6.4E+00 %)	(-7.0E+00 %)	(-7.6E+00 %)
16	0.500		1.16627E+11	1.14831E+11	1.13806E+11	1.12943E+11	1.12047E+11	1.11010E+11
			(-1.5E+00 %)	(-3.0E+00 %)	(-3.9E+00 %)	(-4.6E+00 %)	(-5.4E+00 %)	(-6.3E+00 %)
20	1.150		1.21498E+11	1.19481E+11	1.18544E+11	1.18006E+11	1.17186E+11	1.15909E+11
			(2.6E+00 %)	(8.9E-01 %)	(1.0E-01 %)	(-3.5E-01 %)	(-1.0E+00 %)	(-2.1E+00 %)
26	2.750		1.22308E+11	1.22858E+11	1.22403E+11	1.20411E+11	1.17732E+11	1.15068E+11
			(3.3E+00 %)	(3.7E+00 %)	(3.4E+00 %)	(1.7E+00 %)	(-5.8E-01 %)	(-2.8E+00 %)
30	4.900		1.15424E+11	1.13430E+11	1.13083E+11	1.12856E+11	1.12827E+11	1.12792E+11
			(-2.5E+00 %)	(-4.2E+00 %)	(-4.5E+00 %)	(-4.7E+00 %)	(-4.7E+00 %)	(-4.8E+00 %)
33	10.000		1.15675E+11	1.11387E+11	1.12113E+11	1.12712E+11	1.13179E+11	1.13557E+11
			(-2.3E+00 %)	(-5.9E+00 %)	(-5.3E+00 %)	(-4.8E+00 %)	(-4.4E+00 %)	(-4.1E+00 %)
35	15.000		1.17104E+11	1.12425E+11	1.12075E+11	1.11742E+11	1.11424E+11	1.11120E+11
			(-1.1E+00 %)	(-5.1E+00 %)	(-5.4E+00 %)	(-5.6E+00 %)	(-5.9E+00 %)	(-6.2E+00 %)
37	20.000		1.17835E+11	1.17305E+11	1.16494E+11	1.15786E+11	1.15097E+11	1.14421E+11
			(-5.0E-01 %)	(-9.5E-01 %)	(-1.6E+00 %)	(-2.2E+00 %)	(-2.8E+00 %)	(-3.4E+00 %)
38	50.000		1.18397E+11	1.09824E+11	1.09488E+11	1.09139E+11	1.08739E+11	1.08310E+11
			(-2.3E-02 %)	(-7.3E+00 %)	(-7.5E+00 %)	(-7.8E+00 %)	(-8.2E+00 %)	(-8.5E+00 %)
39	75.000		1.18423E+11	1.11728E+11	1.12473E+11	1.13101E+11	1.13640E+11	1.14102E+11
			(-1.1E-03 %)	(-5.7E+00 %)	(-5.0E+00 %)	(-4.5E+00 %)	(-4.0E+00 %)	(-3.7E+00 %)
40	100.000		1.18521E+11	1.12860E+11	1.14040E+11	1.15323E+11	1.16677E+11	1.18059E+11
			(8.2E-02 %)	(-4.7E+00 %)	(-3.7E+00 %)	(-2.6E+00 %)	(-1.5E+00 %)	(-3.1E-01 %)

5.5. PROCEDIMIENTO DE AVRETT-KROOK (1963).

Constituye un método de perturbación iterativo que se utiliza para la determinación y corrección de la distribución de temperatura, en una atmósfera estratificada en capas plano-paralelas. Se basa en un método perturbativo en coordenadas desarrollado por Lighthill (1949) y aplicado a un problema de atmósfera gris por Krook (1963); Avrett & Krook (1963) levantan la restricción gris, perturbando tanto la variable independiente como a la variable dependiente.

Se utiliza los errores en el flujo obtenido, utilizando una distribución inicial de temperatura, conjuntamente con el momento de primer orden de la ecuación del transporte, para encontrar correcciones aditivas, tanto en la temperatura como en la profundidad óptica. Ambas correcciones, simultáneamente, determinan la distribución de temperatura mejorada que conducen a la condición de flujo constante.

Se parte de la ecuación del transporte radiativo:

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} I_v(\tau, \mu) = \kappa_v(\tau) \{I_v(\tau, \mu) - B_v[T(\tau)]\} \quad (4.49a)$$

con las condiciones de contorno:

$$\begin{cases} I_v(0, \mu) = 0, & \mu < 0 \\ \lim_{\tau \rightarrow \infty} I_v(\tau, \mu) e^{-c\tau} = 0, & c > 0 \end{cases} \quad (4.49b)$$

donde se ha tomado como función fuente a la función de Planck $B_v[T(\tau)]$ y se indica con $T(\tau)$ la distribución de temperatura, la que debe determinarse para que la solución $I_v(\tau, \mu)$ de la ecuación (4.49) satisfaga la condición de flujo constante siguiente:

$$\frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\nu \int_{-1}^1 \mu I_v(\tau, \mu) d\mu = \frac{\sigma}{4\pi} T_e^4 \equiv \mathcal{H} \quad (4.50)$$

Esta función de distribución térmica se determina introduciendo variaciones a las magnitudes astrofísicas involucradas, por ejemplo:

$$I_v = I_v^{(0)} + I_v^{(1)} \text{ y } T = T^{(0)} + T^{(1)}, \quad (4.51)$$

y expresiones similares para J_v y H_v , en donde las variables de orden cero son obtenidas a partir de la distribución de temperatura inicial. Con el objeto de corregir el flujo, se reemplaza la expresión de I_v de la ecuación (4.50), obteniéndose la siguiente condición:

$$\frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\nu \int_{-1}^1 \mu I_v^{(1)}(\tau, \mu) d\mu = \mathcal{H} - \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\nu \int_{-1}^1 \mu I_v^{(0)}(\tau, \mu) d\mu \quad (4.52)$$

a partir de la cual se resuelve para $T^{(1)}$ y se determina una mejor estima para la temperatura. Asimismo, también se desarrolla la profundidad óptica a partir de la relación:

$$\tau = t + \tau^{(1)}(t), \quad (4.53)$$

donde se introdujo la función $\tau^{(1)}(t)$ para facilitar la solución de las ecuación diferenciales de primer orden. Desarrollando en series de Taylor al coeficiente de absorción y a la función de Planck, introduciendo la notación $(\dot{})$ como la derivación respecto de t y $(\dot{})$ respecto de la temperatura, y reemplazando en la ecuación del transporte se obtiene, respectivamente, las ecuaciones de orden cero y de primer orden siguientes:

$$\mu I_v^{(0)\prime} = \kappa_v [I_v^{(0)} - B_v] \quad (4.54)$$

$$\mu I_v^{(1)\prime} = \kappa_v \left[I_v^{(1)} - T^{(1)} \dot{B}_v \right] + \left[\tau^{(1)} \kappa_v' + \tau^{(1)\prime} \kappa_v \right] \left[I_v^{(0)} - B_v [T^{(0)}(t)] \right] \quad (4.55)$$

con las mismas condiciones de contorno dada en (4.49b).

Entonces, a partir de la distribución inicial de temperatura $T^{(0)}(\tau)$, se obtienen las soluciones $I_v^{(0)}(\tau, \mu)$, $J_v^{(0)}(\tau)$ y $H_v^{(0)}(\tau)$. Aplicando (4.53) y las correspondientes condiciones de contorno, podremos obtener una solución mejorada al problema de primer orden, mediante la aproximación de Eddington, introduciendo dos ecuaciones de momentos, con la correspondiente condición de contorno.

En términos de estas expresiones, la ecuación (4.52) puede escribirse como

$$H^{(1)}(t) = \mathcal{H} - H^{(0)}(t), \quad (4.56)$$

donde $H^{(0)}$ y $H^{(1)}$ son los flujos integrados en la aproximación inicial y en la primera aproximación, respectivamente.

Luego, se puede determinar la corrección $T^{(1)}(t)$, una vez especificada la función $\tau^{(1)}(t)$. Una de las ecuaciones fundamentales es (4.56), puesto que nos brinda la información, en cada capa considerada del modelo, del apartamiento del flujo al valor correcto del mismo –supuesto constante–, el cual se cumplirá para algún par de funciones $\tau^{(1)}(t)$ y $T^{(1)}(t)$, los cuales determinan la distribución de temperaturas final $T(\tau)$ del modelo a través de las ecuaciones perturbativas iniciales.

Es suficiente, en este procedimiento, una elección de $\tau^{(1)}(t)$ que sea consistente con la ecuación (4.56). Por ello se toma $\tau^{(1)}(t)$ como la solución de la ecuación diferencial de primer orden siguiente:

$$\tau^{(1)\prime} H^{(0)} + \tau^{(1)} \int_0^{\infty} \frac{\kappa_v'}{\kappa_v} H_v^{(0)} dv = H^{(0)} - \mathcal{H}, \text{ con } \tau^{(1)}(0) = 0, \quad (4.57)$$

Bajo la suposición, justificada por lo iterativo del método, que $\frac{dJ_v^{(1)}(t)}{dt} = 0$, se obtiene:

$$J_v^{(1)}(t) = -\sqrt{3} H_v^{(0)} [1 - (\mathcal{H}/H^{(0)}(0))] \quad (4.58)$$

la cual conduce a la ecuación correctiva para la temperatura, cuya expresión implícita es la siguiente:

$$T^{(1)} \int_0^\infty \kappa_\nu \dot{B}_\nu d\nu = [1 + \tau^{(1)}] H^{(0)} + \tau^{(1)} \int_0^\infty \kappa_\nu [J_\nu^{(0)} - B_\nu] d\nu - \sqrt{3} [1 - (\mathcal{H} / H^{(0)}(0))] \int_0^\infty \kappa_\nu H_\nu^{(0)}(0) d\nu \quad (4.59)$$

donde:

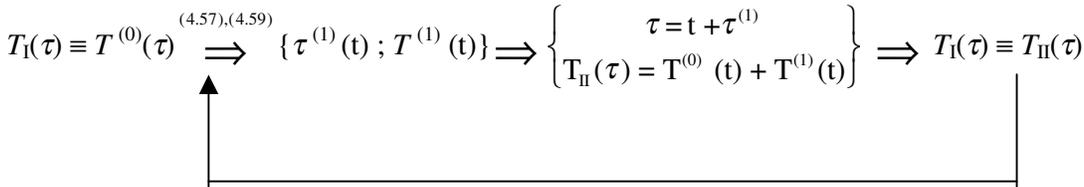
$$\dot{B}_\nu = \frac{dB_\nu}{dT^{(0)}} = \left(\frac{h\nu}{k} \right) (T^{(0)}(t))^{-2} \left(\frac{B_\nu [T^{(0)}(t)]}{1 - e^{-h\nu/kT^{(0)}(t)}} \right) \quad (4.60)$$

Por lo tanto, dada la distribución inicial de temperatura $T^{(0)}(t)$, la corrección a la misma $T^{(1)}(t)$ se sigue inmediatamente resolviendo la ecuación (4.59). Asimismo, la intensidad específica y el flujo monocromático –en la aproximación inicial– vienen dados por las expresiones usuales siguientes, evaluados en esta distribución de temperatura:

$$J_\nu^{(0)}(t) = \frac{1}{2} \int_0^\infty E_1(|x_\nu - t_\nu|) B_\nu [T^{(0)}(x)] dx_\nu \quad (4.61)$$

$$H_\nu^{(0)}(t) = \frac{1}{2} \int_0^\infty E_2(x_\nu - t_\nu) B_\nu [T^{(0)}(x)] dx_\nu - \frac{1}{2} \int_0^{t_\nu} E_2(t_\nu - x_\nu) B_\nu [T^{(0)}(x)] dx_\nu \quad (4.62)$$

El siguiente esquema sintetiza el método descrito:



Notemos que tanto $H_\nu^{(0)}(\tau)$ como $J_\nu^{(0)}(\tau)$ son calculadas por medio de las expresiones rigurosas que las define; esto nos asegura que el proceso iterativo convergerá a la solución buscada, ya que las aproximaciones realizadas afectan solamente a la velocidad de convergencia del método.

Mihalas (1965) generalizó el método permitiendo la aparición de términos dispersivos. Para ello, sustituye la derivada del flujo $H_\nu^{(0)}$, el cual presenta inestabilidades numéricas, por la siguiente expresión (la cual se deduce a partir de la ecuación del transporte):

$$\frac{dH_\nu^{(0)}}{dt} = \int_0^\infty \kappa_\nu \{ J_\nu^{(0)}(t) - B_\nu [T^{(0)}(t)] \} d\nu \quad (4.63)$$

Si están presentes procesos de *scattering*, las correcciones a las temperaturas y a las profundidades ópticas se tornan más difíciles de obtener, debido tanto al efecto de las mismas sobre la función fuente como así también al desacople del campo de radiación con la distribución local de temperatura. Si bien en el trabajo original de Avrett y Krook (1962) se brindan un conjunto de fórmulas correctivas para ello, Mihalas introduce simplificaciones basadas en la analogía que existe entre los dos casos extremos de condiciones atmosféricas, la absorción y la dispersión puras; obteniendo la misma ecuación correctiva en profundidad óptica τ_I (ecuación (4.57)), mientras que para la corrección en temperatura encuentra la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
T^{(1)} \int_0^{\infty} \eta_{\nu} (1 - \rho_{\nu}) \dot{B}_{\nu} d\nu &= [1 + \tau_1'] \int_0^{\infty} \eta_{\nu} (1 - \rho_{\nu}) (J_{\nu}^{(0)} - B_{\nu}^{(0)}) d\nu + \tau_1 \int_0^{\infty} [\kappa_{\nu}' (1 - \rho_{\nu}') - \kappa_{\nu} \rho_{\nu}'] (J_{\nu}^{(0)} - B_{\nu}^{(0)}) d\nu \\
&\quad - \sqrt{3} [1 - (\mathcal{H} / H^{(0)})] \int_0^{\infty} \kappa_{\nu} (1 - \rho_{\nu}) H_{\nu}^{(0)}(0) d\nu
\end{aligned} \tag{4.64}$$

la que se resuelve luego de obtenida la corrección τ_1 .

Mihalas advierte que en modelos calientes, la convergencia de este método puede ser mas lenta debido principalmente a la preeminencia del *scattering*, por lo que sólo la “experiencia” permite analizar la aplicabilidad del mismo.

Asimismo, Karp (1972) introduce nuevas mejoras al método, las cuales permiten superar problemas de convergencia en capas superficiales, debido principalmente a la inclusión de frecuencias por debajo de la discontinuidad de Lyman, ya que las mismas pesan más fuertemente las capas superficiales en la integral del flujo que en los modelos donde no son incluidas. El resultado de esto es acentuar los errores introducidos, asumiendo que los errores en la intensidad media no dependen de la profundidad óptica.

Partiendo de las ecuaciones originales de Avrett & Krook (1963), se elige ahora τ_1 de tal manera que se cumpla $J_{\nu}^{(1)'} = \sqrt{3} H_{\nu}^{(1)'}$, lo que conduce a $J_{\nu}^{(1)}(\tau) = \sqrt{3} H_{\nu}^{(1)}(\tau)$, y asumiendo que se cumple $H_{\nu}^{(1)}(\tau) = \frac{H^{(1)}}{H^{(0)}} H_{\nu}^{(0)}(\tau)$, entonces, si se incluye *scattering*, las ecuaciones correctivas de la profundidad óptica y la temperatura serán las siguientes:

$$\tau^{(1)'} + \tau^{(1)} \frac{\int_0^{\infty} \eta_{\nu}' H_{\nu}^{(0)} d\nu}{\int_0^{\infty} \eta_{\nu} H_{\nu}^{(0)} d\nu} = (1 - \mathcal{H} / H^{(0)}) - \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{H^{(0)'}}{\int_0^{\infty} \eta_{\nu} H_{\nu}^{(0)} d\nu}, \text{ con } \tau^{(1)}(0) = 0, \tag{4.65}$$

$$\begin{aligned}
T^{(1)} \int_0^{\infty} \eta_{\nu} (1 - \rho_{\nu}) \dot{B}_{\nu} d\nu &= [1 + \tau_1'] \int_0^{\infty} \eta_{\nu} (1 - \rho_{\nu}) (J_{\nu}^{(0)} - B_{\nu}^{(0)}) d\nu + \tau_1 \int_0^{\infty} [\eta_{\nu}' (1 - \rho_{\nu}') - \eta_{\nu} \rho_{\nu}'] (J_{\nu}^{(0)} - B_{\nu}^{(0)}) d\nu \\
&\quad - \sqrt{3} [1 - (\mathcal{H} / H^{(0)})] \int_0^{\infty} \eta_{\nu} (1 - \rho_{\nu}) H_{\nu}^{(0)} d\nu
\end{aligned} \tag{4.66}$$

Ambas ecuaciones forman un sistema el cual se resuelve, como antes, en forma iterativa.

La última ecuación merece un breve comentario: en efecto, remitiéndose al artículo de Karp (1972), allí aparecen intercambiados τ_1 y τ_1' , error que se repite en la reproducción de esta ecuación en la segunda edición del clásico libro de texto sobre atmósferas estelares de Mihalas (1978, pp. 174-175), con la particularidad que en este último explicita al factor η_{ν} como coeficiente de extinción atmosférica χ_{ν} , es decir, suma de las absorciones y dispersiones monocromáticas, error que no aparece en la edición anterior de su libro (Mihalas, 1970) y en la anterior publicación citada (Mihalas (1963), ecuación 27), con las adaptaciones del caso. Esta

conclusión es resultado de haber llevado adelante toda la deducción matemática involucrada en la obtención de las ecuaciones (4.65) y (4.66), la cual resumimos en este apartado por cuestión de espacio.

Entonces podemos decir, a grandes rasgos, que el procedimiento se divide en dos etapas:

- **1ª etapa:** Resolución de la ecuación diferencial de primer orden (4.65)

La misma debe hacerse en cada profundidad óptica (por ejemplo, las cuarenta que se han utilizado en este trabajo). Los valores de η y η' pueden ser calculados simultáneamente cuando se obtiene el modelo interpolado.

También se necesitan los cociente relativos del flujo ideal y el calculado en el proceso (buen referente para analizar la aproximación a la condición de flujo ideal en cada profundidad óptica) como así también la derivada del flujo $H^{(0)}$ con la profundidad óptica, (en cada capa).

La resolución de la ecuación diferencial no debería traer problemas, ya que existe solución analítica que involucra solamente el cálculo de integraciones parciales, a medida que se avanza en el proceso.

- **2ª etapa:** Determinación de la corrección térmica (4.66)

Una vez resuelta (4.65), se procede a reemplazar la solución de la misma en la ecuación (4.66), para cada profundidad óptica. Teniendo que en cuenta que esta ecuación involucra también la derivada $\tau^{(1)}$, la misma puede ser obtenida de la ecuación diferencial anterior por simple operaciones algebraicas.

Con los valores de $\tau^{(1)}$ y $T^{(1)}$ hallados para cada capa, se procede a actualizar los valores de las profundidades ópticas y temperaturas correspondientes, y a partir de esta nueva distribución térmica, se vuelve a integrar el modelo y a recalcular los flujos correspondientes, repitiéndose el ciclo hasta que se logre una adecuada convergencia.

6. PUBLICACIONES.

Durante la realización de esta investigación, se realizó la siguiente publicación, correspondiente a la presentación del trabajo en la XLVI Reunión de la Asociación Argentina de Astronomía, que tuvo lugar en la ciudad de La Plata en septiembre de 2003.

- “Un procedimiento simple para obtener un flujo constante en una atmósfera estelar” (Merlo, D.C & L.A. Milone), 2003, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, 46, 42.

Referencias

- 📖 Avrett, E.H. & M. Krook: 1963, *Ap. J.*, **137**, 874.
- 📖 Berdyugina, S.V.: 2005, *Living Rev. Solar Phys.*, **2**, N° 8.
- 📖 Cayrel, R.: 1958, *Supp. Ann. d'Astroph.*, N° 6.
- 📖 Frutiger, C. , Solanki, S.K. & G. Mathis: 2005, *Astron. Astrophys.*, **444**, 549.
- 📖 Gray, D.F.: 2005, *P.A.S.P.*, **117**, 711.
- 📖 Karp, A.H.: 1972, *Ap. J.*, **173**, 649.
- 📖 Krook, M.: 1963, *Ap. J.*, **137**, 874.
- 📖 Kurucz, R.L.: 1970, ATLAS: A Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres, *Smithsonian Ap. Obs. Spec. Report N° 309*.
- 📖 Kurucz, R.L.: 1979, *Ap. J. Suppl. Ser.*, **40**, 1.
- 📖 Lighthill, M.J.:1949, *Phil.Mag.*, **40**, 1179.
- 📖 Merlo, D.C.: 1992. Trabajo Especial de la Licenciatura en Astronomía.
Director: Dr. Luis A. Milone. FaMAF (UNC).
- 📖 Merlo, D.C. & L.A. Milone: 1992. *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **37**, 28.
- 📖 Merlo, D.C. & L.A. Milone: 2003. *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **46**, 42.
- 📖 Mihalas, D.: 1965, *Ap. J. Suppl. Ser.* N° 92, **9**, 321.
- 📖 Mihalas, D.: 1967, *Methods in Computational Physics*, **7**, 1, Academic Press.
- 📖 Mihalas, D.: 1970, “*Stellar Atmospheres*”, 1st edit, W.H. Freeman & Co., San Francisco.
- 📖 Mihalas, D.: 1978, “*Stellar Atmospheres*”, 2nd edit, W.H. Freeman & Co., San Francisco.
- 📖 Münch, G.: 1960, “*The Theory of Model Stellar Atmospheres*”, Stars and Stellar Systems Vol. **VI**, pp. 1-87, J.L. Greenstein (edit.), The University of Chicago Press.
- 📖 Nappier, W.McD. & R.J. Dodd: 1974, *Astroph. Space Sci.*, **30**, 291.
- 📖 Oláh, K.; Korhonen, H.; Cobráis, Zs.; Forgács-Dajka, E. & K.G. Strassmeier: 2006, *Astron. Astrophys.*, **452**, 303.
- 📖 Press, W., Teukolsky, S., Vetterling, W. & B. Flannery: 1992, “*Numerical Recipes in FORTRAN*”, 2nd edit., Cambridge University Press.
- 📖 Scheid, F.: 1977, “*Análisis Numérico*”, Serie Schaum, Edit McGraw-Hill.
- 📖 Strömngren, B.: 1944, “*Tables of Model Atmospheres*”, Copenhagen.
- 📖 Swihart, T.L.: 1956, *Ap. J.*, **123**, 139.

Capítulo V

CÁLCULO DE UN MODELO DE ATMÓSFERA ESTELAR – 2ª. PARTE –

1. INTRODUCCIÓN.

Una vez resuelta la ecuación del equilibrio hidrostático, y de esta forma disponiendo del comportamiento preliminar de las variables astrofísicas en la atmósfera en estudio –entre ellas los coeficientes de absorción radiativo y de dispersión–, estamos en condiciones de resolver la ecuación del transporte radiativo.

En condiciones absolutamente radiativas (es decir, despreciando fenómenos de *scattering*) se asume que la función fuente está dada por la función de Planck, o sea, $S_\nu = B_\nu(T)$. Por lo tanto, la intensidad específica media J_ν y el flujo F_ν vienen dados por las conocidas relaciones:

$$J_\nu(\tau_\nu) = \frac{1}{2} \int_0^\infty B_\nu[T(t_\nu)] E_1 |\tau_\nu - t_\nu| dt_\nu \quad (5.1)$$

$$F_\nu(\tau_\nu) = 2\pi \int_{\tau_\nu}^\infty B_\nu[T(t_\nu)] E_2(t_\nu - \tau_\nu) dt_\nu - 2\pi \int_0^{\tau_\nu} B_\nu[T(t_\nu)] E_2(\tau_\nu - t_\nu) dt_\nu \quad (5.2)$$

donde E_1 y E_2 son, respectivamente, las integrales exponenciales de orden 1 y 2, las cuales pueden ser obtenidas –numéricamente– en cada capa de la atmósfera.

Ahora, si somos más realistas e introducimos los fenómenos dispersivos, la función fuente puede ser descompuesta en una parte radiativa y otra dispersiva, tal como fuera propuesta por Milne y Eddington:

$$S_\nu = \frac{\kappa_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu} B_\nu(T) + \frac{\sigma_\nu}{\kappa_\nu + \sigma_\nu} J_\nu \quad (5.3)$$

donde κ_ν y σ_ν son los coeficientes de absorción radiativo y de dispersión, respectivamente.

En condiciones de geometría plana, la ecuación del transporte viene expresada por la conocida ecuación diferencial:

$$\cos\theta \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - S_\nu \quad (5.4)$$

de la cual, luego de reemplazar la expresión de la función fuente de la ecuación (5.3) en la (5.4), resulta la ecuación integral siguiente:

$$S_v(\tau_v) = \frac{\kappa_v}{\kappa_v + \sigma_v} B_v(T) + \frac{1}{2} \frac{\sigma_v}{\kappa_v + \sigma_v} \int_0^{\infty} S_v(t_v) E_1 | \tau_v - t_v | dt_v \quad (5.5)$$

Luego, a partir de su resolución, se obtiene el flujo de una manera directa.

2. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DEL TRANSPORTE.

2.1. PROCEDIMIENTO NUMÉRICO.

En su clásica publicación, Kurucz (1970) propone un reconocido método numérico de resolución de la ecuación del transporte, el cual utilizamos en nuestro trabajo. El mismo comienza reescribiendo la función fuente, dada por la ecuación (5.3) de la siguiente forma:

$$S_v = (1 - \alpha_v) \bar{S}_v + \alpha_v J_v(\bar{S}_v) \quad (5.6)$$

donde se introdujeron las siguientes definiciones:

$$\alpha_v = \frac{\sigma_v}{\kappa_v + \sigma_v} \quad ; \quad \bar{S}_v = \frac{B_v}{\kappa_v} \quad (5.7)$$

La ecuación integral (5.5) puede ser reescrita en forma matricial de la siguiente manera:

$$S = (I - \alpha) \bar{S} + \alpha \Lambda S \quad (5.8)$$

la cual, operando algebraicamente, resulta:

$$(I - \alpha \Lambda) S = (I - \alpha) \bar{S} \quad (5.9)$$

donde I es la matriz identidad, α es una matriz diagonal, Λ es un operador¹ numérico matricial y tanto S como \bar{S} son vectores columnas. La solución de este sistema de ecuaciones puede ser resuelto utilizando, por ejemplo, un proceso iterativo de Gauss-Seidel, ya que la matriz Λ es casi diagonal².

¹ Este operador representa el momento de primer orden de la intensidad específica, definido como

$$M_1(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} S(\tau) E_1 | t - \tau | dt$$

, el cual representa, como sabemos, a la intensidad específica media.

² Dado el rápido decaimiento exponencial de la integral exponencial de orden 1.

El procedimiento iterativo funciona de la siguiente forma: se asigna un valor inicial para S , dado por $S^{(0)} = \bar{S}$, el cual reemplazado en la ecuación (5.9) nos dará un vector que diferirá en una cantidad vectorial $\Delta^{(0)}$ del vector $(I - \alpha) \bar{S}$, es decir:

$$\Delta^{(0)} = (I - \alpha \Lambda) S^{(0)} - (I - \alpha) \bar{S} \quad (5.10)$$

Llamando $\Delta S^{(0)}$ a la corrección buscada, que resuelve la ecuación (5.9), deberá satisfacerse entonces la siguiente igualdad:

$$(I - \alpha \Lambda)(S^{(0)} + \Delta S^{(0)}) = (I - \alpha) \bar{S} \quad (5.11)$$

cuya solución conduce a la siguiente expresión:

$$\Delta S^{(0)} = (I - \alpha \Lambda)^{-1} [(I - \alpha) \bar{S} - (I - \alpha \Lambda) S^{(0)}] = -(I - \alpha \Lambda)^{-1} \Delta^{(0)} \quad (5.12)$$

Dado que la matriz $(I - \alpha \Lambda)$ es casi diagonal (por lo comentado anteriormente), entonces se puede realizar la siguiente aproximación:

$$(I - \alpha \Lambda)^{-1} \approx \text{diag}((I - \alpha \Lambda)^{-1}_{ii}) = \text{diag}\left(\frac{1}{1 - \alpha_i \Lambda_{ii}}\right) \quad (5.13)$$

Reemplazando (5.13) en (5.12), hallamos la corrección deseada, esto es:

$$\Delta S^{(0)} \approx \text{diag}\left(-\frac{1}{1 - \alpha_i \Lambda_{ii}}\right) \Delta^{(0)} \quad (5.14)$$

Con esta corrección mejoramos el valor del vector S , obteniendo $S^{(1)} = S^{(0)} + \Delta S^{(0)}$, el cual se reemplaza en la ecuación (4.44) –repetiéndose el ciclo– hasta lograr una convergencia razonable.

El autor previene que el término $(I - \alpha)$ pueda ocasionar dificultades numéricas en el cálculo, por lo que transforma algebraicamente la ecuación (5.9) y la reescribe de la siguiente forma equivalente:

$$(I + D - D \Lambda) S = \bar{S} \quad (5.9')$$

donde D es una matriz diagonal definida como el cociente entre las dispersiones y las absorciones en cada frecuencia de trabajo.

2.2. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

2.2.1. Consideraciones Generales.

En primer lugar conviene recordar que en este trabajo se han utilizado cuarenta profundidades ópticas en el procedimiento de corrección de temperatura, las cuales recordamos a continuación, tal como lo mostramos en la TABLA 4.5 del capítulo anterior.

Asimismo, en la TABLA 4.4 del citado capítulo especificamos los intervalos de longitudes de onda elegidos (que resultan del procedimiento de integración gaussiana empleado) que se utilizaron en el cálculo de todas las integraciones espectrales; las mismas las recordamos a continuación, especificando en esta oportunidad los valores particulares de cada una de ellas:

TABLA 5.1
Intervalos de longitudes de onda y valores particulares de los mismos utilizados en la solución de la ecuación del transporte

1	$100.0 \text{ \AA} < \lambda < 504.3 \text{ \AA}$	105.27 \AA; 127.28 \AA; 164.81 \AA; 214.54 \AA; 272.06 \AA; 332.24 \AA; 389.76 \AA; 439.49 \AA; 477.02 \AA; 499.03 \AA
2	$504.3 \text{ \AA} < \lambda < 911.8 \text{ \AA}$	509.62 \AA; 531.79 \AA; 569.62 \AA; 619.75 \AA; 677.72 \AA 738.38 \AA; 796.35 \AA; 846.48 \AA; 884.31 \AA; 906.48 \AA
3	$911.8 \text{ \AA} < \lambda < 3647.1 \text{ \AA}$	947.49 \AA; 1096.35 \AA; 1350.26 \AA; 1686.72 \AA; 2075.84; 2483.06 \AA; 2872.18 \AA; 3208.64 \AA; 3462.55 \AA; 3611.41 \AA
4	$3647.1 \text{ \AA} < \lambda < 8206.0 \text{ \AA}$	3706.58 \AA; 3954.68 \AA; 4377.87 \AA; 4938.65 \AA; 5587.20 \AA; 6265.90 \AA; 6914.45 \AA; 7475.23 \AA; 7898.42 \AA; 8146.52 \AA
5	$8206.0 \text{ \AA} < \lambda < 14588.5 \text{ \AA}$	8289.27 \AA; 8636.62 \AA; 9229.08 \AA; 10014.18 \AA; 10922.15 \AA; 11872.35 \AA; 12780.32 \AA; 13565.42 \AA; 14157.88 \AA; 14505.23 \AA
6	$14588.5 \text{ \AA} < \lambda < 22794.6 \text{ \AA}$	14695.56 \AA; 15142.15 \AA; 15903.90 \AA; 16913.31 \AA; 18080.71 \AA; 19302.39 \AA; 20469.79 \AA; 21479.20 \AA; 22240.95 \AA; 22687.54 \AA
7	$22794.6 \text{ \AA} < \lambda < 99930.7 \text{ \AA}$	23800.97 \AA; 27998.84 \AA; 35159.15 \AA; 44647.43 \AA; 55620.86 \AA; 67104.44 \AA; 78077.87 \AA; 87566.15 \AA; 94726.46 \AA; 98924.33 \AA

2.2.2. Cálculo de las Intensidades Específicas Medias Monocromáticas.

Con esto en mente, procedimos –en primer lugar– a la determinación de la intensidad específica media monocromática, según la ecuación (5.1), para cada una de las cuarenta profundidades ópticas citadas. En esta oportunidad, consideramos como función fuente a la función de Planck como aproximación de orden cero en el procedimiento.

Las TABLAS 5.2 a 5.5 muestran los resultados hallados en cada uno de los modelos allí indicados; las profundidades ópticas elegidas las tomamos representativas de capas superficiales, intermedias y profundas de la atmósfera, siendo ellas las siguientes: $\tau = 1 \times 10^{-4}$, 0.065, 1.15, 4.90 y 100. Dado que la integración numérica de cada modelo utiliza la presión gaseosa o la profundidad óptica como variable de integración (ver *Capítulo 4*, apartado 2.2), fue necesario –al igual que en el procedimiento de corrección de la distribución de la temperatura– interpolar el modelo calculado en las cuarenta profundidades ópticas de trabajo, y obtener así las condiciones astrofísicas en cada una de ellas. Éstas son indicadas también en las tablas referidas.

2.2.3. Determinación de las Funciones de Planck Monocromáticas.

Recordando la ecuación (5.2), y dado que en primera aproximación utilizamos la función fuente igual a la función de Planck, se evaluaron las funciones de Planck monocromáticas en cada capa predefinida del modelo. Dado que las mismas son independientes de la composición química de la mezcla gaseosa, se indican en las tablas 5.6 y 5.7 los valores encontrados en los modelos de temperaturas efectivas de 5500 K y 9000 K, respectivamente, para las mismas profundidades ópticas seleccionadas en las tablas anteriores. Esto nos permite visualizar las diferencias entre las intensidades específicas medias y las funciones de Planck monocromáticas, en las mismas condiciones astrofísicas.

2.2.4. Determinación de los Factores Dispersivos.

Como lo indicamos en las ecuaciones (5.3), (5.6) y (5.7), se introduce un factor dispersivo monocromático que tiene en cuenta el fenómeno de *scattering* en el transporte de la radiación. En virtud de ello adaptamos nuestro código de cálculo del coeficiente de absorción monocromático, con el objeto de discriminar la contribución dispersiva (σ_ν) de la radiativa (κ_ν).

Para ello se calcularon los factores α_ν en cada longitud de onda y profundidad óptica considerada. A modo de ejemplo, se muestran en las tablas 5.8 a 5.11 los resultados obtenidos en las mismas capas seleccionadas anteriormente.

TABLA 5.2

Valores de la intensidad específica media monocromática en cinco capas de un modelo de composición Solar, $T_{\text{ef}} = 5500 \text{ K}$ y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente. Los valores están expresados en $(\text{erg}/\text{cm}^2) \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$.

	log (Pg)	log (Pe)	log (Pr)	tau	T [K]	log (kR)	log (rho)	log (-x)	
Capa 1	2.8309	-1.3317	-0.0001	0.0001	4462.18	-2.585	-8.6163	8.2880	
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
2.5E-03	1.4E-01	1.0E+01	2.6E+02	3.1E+03	1.7E+04	4.2E+05	5.1E+05	5.6E+05	5.9E+05
7.0E+05	8.3E+05	8.3E+05	8.1E+05	7.6E+05	6.9E+05	6.4E+05	5.9E+05	5.5E+05	5.3E+05
5.1E+05	4.8E+05	4.3E+05	3.7E+05	3.1E+05	2.6E+05	2.3E+05	2.0E+05	1.9E+05	1.8E+05
1.7E+05	1.6E+05	1.5E+05	1.3E+05	1.0E+05	7.9E+04	6.4E+04	5.4E+04	4.7E+04	4.4E+04
3.7E+04	2.1E+04	8.9E+03	3.6E+03	1.6E+03	7.6E+02	4.2E+02	2.7E+02	2.0E+02	1.7E+02
Capa 10	4.3868	0.0539	0.0709	0.0650	4648.25	-1.312	-7.0776	8.4699	
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
5.0E-03	1.7E-01	7.8E-34	8.6E+02	8.6E+03	6.0E+04	4.8E+05	5.9E+05	6.5E+05	6.9E+05
8.1E+05	9.4E+05	9.5E+05	9.5E+05	9.1E+05	8.6E+05	7.9E+05	7.3E+05	6.8E+05	6.5E+05
6.3E+05	5.9E+05	5.3E+05	4.5E+05	3.7E+05	3.1E+05	2.6E+05	2.3E+05	2.1E+05	2.0E+05
2.0E+05	1.9E+05	1.7E+05	1.4E+05	1.1E+05	8.9E+04	7.5E+04	7.4E+04	5.7E+04	5.2E+04
4.3E+04	2.3E+04	1.0E+04	4.6E+03	2.2E+03	1.0E+03	7.0E+02	4.2E+02	3.0E+02	2.6E+02
Capa 20	5.0069	1.3331	0.5056	1.1500	5970.25	-0.456	-6.5660	8.5322	
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	1.9E+04	8.6E+04	1.6E+04	1.7E+06	2.0E+06	2.4E+06	2.8E+06
2.7E+06	2.8E+06	3.0E+06	3.0E+06	3.0E+06	2.4E+06	2.2E+06	1.9E+06	1.7E+06	1.6E+06
1.6E+06	1.5E+06	1.3E+06	1.1E+06	1.7E+06	6.6E+05	6.4E+05	4.7E+05	4.3E+05	3.6E+05
3.4E+05	3.4E+05	2.6E+05	2.1E+05	1.9E+05	1.9E+05	1.2E+05	1.0E+05	9.6E+04	9.6E+04
8.7E+04	6.5E+04	2.0E+04	1.1E+04	3.7E+03	2.3E+03	1.5E+03	8.4E+02	4.7E+02	2.8E+02
Capa 30	5.1258	2.8274	0.9872	4.9000	7877.28	0.732	-6.5697	8.5473	
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	4.7E+06	3.9E+05	5.7E+05	9.3E+06	1.1E+07	1.0E+07	1.6E+07
1.3E+07	1.2E+07	1.4E+07	9.7E+06	8.2E+06	5.7E+06	9.5E+06	9.7E+06	3.6E+06	3.1E+06
3.4E+06	3.4E+06	3.0E+06	2.0E+06	1.4E+06	1.3E+06	1.1E+06	8.5E+05	7.5E+05	6.5E+05
6.1E+05	8.4E+05	6.4E+05	3.8E+05	3.3E+05	2.6E+05	2.2E+05	3.1E+05	1.5E+05	1.8E+05
1.1E+05	8.7E+04	5.7E+04	7.6E+03	4.1E+03	4.6E+02	3.4E+03	5.6E+02	2.8E+03	1.4E+01
Capa 40	5.1600	4.8132	2.2413	100.0000	16214.24	2.282	-7.1075	8.5552	
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	8.2E+07	3.2E+06	3.6E+07	2.7E+04	3.6E+03	9.0E+05	2.0E+00
7.4E+07	3.5E+07	2.3E+06	5.1E+05	1.9E+03	5.3E+05	2.9E+07	5.5E+07	1.7E-01	4.9E-02
2.2E+02	1.4E+03	3.8E+06	5.0E-02	5.1E+07					
2.7E-15	1.2E-74	7.4-130	2.5-174	1.7-201	9.3E-91	7.8-119	6.5-169	6.4-241	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00					

TABLA 5.6

Valores de las funciones de Planck monocromáticas en cinco capas de un modelo con $T_{\text{ef}}=5500$ K. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indica el valor de la temperatura correspondiente. Los valores están expresados en $(\text{erg}/\text{cm}^2) \text{s}^{-1} \text{\AA}^{-1}$.

T [K]									
Capa 1	4462.18								
8.9-117	3.4E-94	1.1E-69	1.4E-50	2.7E-37	2.1E-28	1.6E-22	1.0E-18	2.1E-16	3.3E-15
1.2E-14	1.3E-13	5.2E-12	3.3E-10	1.8E-08	5.9E-07	9.7E-06	7.9E-05	3.2E-04	6.9E-04
2.6E-03	1.3E-01	1.1E+01	4.4E+02	5.5E+03	2.9E+04	8.1E+04	1.5E+05	2.2E+05	2.6E+05
2.8E+05	3.5E+05	4.7E+05	5.9E+05	6.8E+05	7.2E+05	7.2E+05	6.9E+05	6.6E+05	6.5E+05
6.4E+05	6.1E+05	5.6E+05	4.9E+05	4.2E+05	3.6E+05	3.0E+05	2.7E+05	2.4E+05	2.3E+05
2.2E+05	2.0E+05	1.8E+05	1.5E+05	1.2E+05	1.0E+05	8.6E+04	7.5E+04	6.7E+04	6.3E+04
5.4E+04	3.2E+04	1.5E+04	6.3E+03	2.8E+03	1.4E+03	8.0E+02	5.2E+02	3.9E+02	3.3E+02
Capa 10	4648.25								
1.9-111	8.6E-90	2.7E-66	5.8E-48	3.1E-35	1.0E-26	4.3E-21	1.9E-17	3.2E-15	4.4E-14
1.5E-13	1.5E-12	5.0E-11	2.7E-09	1.2E-07	3.4E-06	4.9E-05	3.6E-04	1.4E-03	2.9E-03
1.0E-02	4.1E-01	2.9E+01	9.4E+02	1.0E+04	4.9E+04	1.3E+05	2.3E+05	3.1E+05	3.7E+05
4.0E+05	4.9E+05	6.3E+05	7.7E+05	8.6E+05	8.9E+05	8.7E+05	8.3E+05	7.9E+05	7.6E+05
7.4E+05	7.1E+05	6.4E+05	5.6E+05	4.8E+05	4.0E+05	3.4E+05	2.9E+05	2.6E+05	2.5E+05
2.4E+05	2.2E+05	2.0E+05	1.6E+05	1.4E+05	1.1E+05	9.4E+04	8.1E+04	7.2E+04	6.8E+04
5.8E+04	3.4E+04	1.6E+04	6.7E+03	3.0E+03	1.5E+03	8.4E+02	5.5E+02	4.0E+02	3.4E+02
Capa 20	5970.25								
3.5E-83	2.1E-66	3.1E-48	4.3E-34	2.7E-24	9.3E-18	1.9E-13	1.1E-10	5.5E-09	4.1E-08
1.0E-07	5.8E-07	8.4E-06	1.7E-04	3.0E-03	3.6E-02	2.7E-01	1.2E+00	3.2E+00	5.5E+00
1.4E+01	2.1E+02	4.7E+03	5.4E+04	2.8E+05	7.7E+05	1.4E+06	1.9E+06	2.3E+06	2.5E+06
2.6E+06	2.8E+06	3.0E+06	3.1E+06	3.0E+06	2.7E+06	2.4E+06	2.1E+06	1.9E+06	1.8E+06
1.8E+06	1.6E+06	1.4E+06	1.2E+06	9.5E+05	7.6E+05	6.2E+05	5.3E+05	4.7E+05	4.3E+05
4.2E+05	3.8E+05	3.3E+05	2.7E+05	2.2E+05	1.8E+05	1.5E+05	1.3E+05	1.1E+05	1.0E+05
8.9E+04	5.1E+04	2.3E+04	9.4E+03	4.1E+03	2.0E+03	1.1E+03	7.3E+02	5.4E+02	4.6E+02
Capa 30	7877.28								
4.1E-59	1.7E-46	7.2E-33	2.8E-22	5.6E-15	3.9E-10	5.9E-07	6.5E-05	1.1E-03	4.9E-03
9.4E-03	3.4E-02	2.4E-01	2.1E+00	1.6E+01	9.8E+01	4.1E+02	1.2E+03	2.4E+03	3.5E+03
6.6E+03	4.4E+04	3.5E+05	1.7E+06	4.7E+06	8.1E+06	1.1E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07
1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.0E+07	8.7E+06	7.1E+06	5.8E+06	4.9E+06	4.3E+06	3.9E+06
3.8E+06	3.4E+06	2.9E+06	2.3E+06	1.8E+06	1.4E+06	1.1E+06	9.1E+05	8.0E+05	7.4E+05
7.0E+05	6.4E+05	5.4E+05	4.4E+05	3.5E+05	2.8E+05	2.3E+05	1.9E+05	1.7E+05	1.6E+05
1.4E+05	7.5E+04	3.3E+04	1.3E+04	5.8E+03	2.8E+03	1.6E+03	1.0E+03	7.3E+02	6.2E+02
Capa 40	16214.24								
2.3E-20	1.9E-14	4.1E-08	2.9E-03	5.5E+00	7.4E+02	1.7E+04	1.2E+05	4.0E+05	7.3E+05
9.5E+05	1.6E+06	3.4E+06	7.9E+06	1.7E+07	3.3E+07	5.4E+07	7.7E+07	9.7E+07	1.1E+08
1.3E+08	2.3E+08	3.7E+08	4.6E+08	4.4E+08	3.6E+08	2.9E+08	2.4E+08	2.0E+08	1.8E+08
1.7E+08	1.5E+08	1.1E+08	8.1E+07	5.6E+07	4.0E+07	2.9E+07	2.2E+07	1.9E+07	1.7E+07
1.6E+07	1.4E+07	1.1E+07	8.3E+06	6.1E+06	4.5E+06	3.5E+06	2.8E+06	2.4E+06	2.2E+06
2.1E+06	1.9E+06	1.6E+06	1.2E+06	9.7E+05	7.6E+05	6.1E+05	5.1E+05	4.5E+05	4.1E+05
3.5E+05	1.9E+05	7.7E+04	3.1E+04	1.3E+04	6.2E+03	3.4E+03	2.2E+03	1.6E+03	1.3E+03

TABLA 5.7

Valores de las funciones de Planck monocromáticas en cinco capas de un modelo $T_{\text{ef}} = 9000$ K. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indica el valor de la temperatura correspondiente. Los valores están expresados en $(\text{erg}/\text{cm}^2) \text{s}^{-1} \text{\AA}^{-1}$.

T [K]									
Capa 1		7301.74							
4.8E-65	2.1E-51	1.2E-36	3.4E-25	2.8E-17	5.2E-12	1.5E-08	2.5E-06	5.5E-05	2.7E-04
5.6E-04	2.3E-03	1.9E-02	2.0E-01	2.0E+00	1.4E+01	6.7E+01	2.1E+02	4.6E+02	7.1E+02
1.4E+03	1.2E+04	1.2E+05	7.4E+05	2.3E+06	4.5E+06	6.4E+06	7.6E+06	8.1E+06	8.3E+06
8.4E+06	8.5E+06	8.3E+06	7.6E+06	6.6E+06	5.6E+06	4.6E+06	3.9E+06	3.5E+06	3.2E+06
3.1E+06	2.8E+06	2.4E+06	1.9E+06	1.5E+06	1.2E+06	9.5E+05	7.9E+05	6.9E+05	6.4E+05
6.2E+05	5.6E+05	4.8E+05	3.9E+05	3.1E+05	2.5E+05	2.0E+05	1.7E+05	1.5E+05	1.4E+05
1.2E+05	6.8E+04	3.0E+04	1.2E+04	5.3E+03	2.6E+03	1.4E+03	9.2E+02	6.8E+02	5.7E+02
Capa 10		7606.23							
8.5E-62	1.0E-48	1.4E-34	1.3E-23	5.1E-16	5.5E-11	1.1E-07	1.5E-05	2.9E-04	1.3E-03
2.6E-03	1.0E-02	7.5E-02	7.2E-01	6.3E+00	4.1E+01	1.8E+02	5.4E+02	1.1E+03	1.7E+03
3.3E+03	2.4E+04	2.2E+05	1.2E+06	3.4E+06	6.2E+06	8.4E+06	9.7E+06	1.0E+07	1.0E+07
1.0E+07	1.0E+07	1.0E+07	9.0E+06	7.7E+06	6.3E+06	5.2E+06	4.4E+06	3.9E+06	3.6E+06
3.5E+06	3.1E+06	2.6E+06	2.1E+06	1.6E+06	1.3E+06	1.0E+06	8.5E+05	7.5E+05	6.9E+05
6.6E+05	6.0E+05	5.1E+05	4.2E+05	3.3E+05	2.7E+05	2.2E+05	1.8E+05	1.6E+05	1.5E+05
1.3E+05	7.2E+04	3.1E+04	1.3E+04	5.5E+03	2.7E+03	1.5E+03	9.6E+02	7.1E+02	6.0E+02
Capa 20		9679.49							
1.6E-44	2.0E-34	1.5E-23	4.0E-15	2.5E-09	1.7E-05	5.2E-03	2.0E-01	1.9E+00	5.9E+00
9.8E+00	2.6E+01	1.2E+02	6.2E+02	3.0E+03	1.2E+04	3.5E+04	7.6E+04	1.3E+05	1.7E+05
2.8E+05	1.1E+06	4.9E+06	1.4E+07	2.6E+07	3.4E+07	3.6E+07	3.6E+07	3.5E+07	3.3E+07
3.3E+07	3.0E+07	2.7E+07	2.2E+07	1.7E+07	1.3E+07	1.0E+07	8.3E+06	7.1E+06	6.5E+06
6.2E+06	5.5E+06	4.5E+06	3.5E+06	2.7E+06	2.1E+06	1.6E+06	1.3E+06	1.1E+06	1.1E+06
1.0E+06	9.1E+05	7.7E+05	6.2E+05	4.9E+05	3.9E+05	3.1E+05	2.6E+05	2.3E+05	2.2E+05
1.8E+05	1.0E+05	4.3E+04	1.7E+04	7.4E+03	3.6E+03	2.0E+03	1.3E+03	9.3E+02	7.8E+02
Capa 30		12890.09							
8.3E-30	2.9E-22	3.8E-14	6.7E-08	1.2E-03	7.6E-01	4.8E+01	6.8E+02	3.3E+03	7.4E+03
1.1E+04	2.1E+04	6.1E+04	2.0E+05	5.9E+05	1.5E+06	3.0E+06	5.1E+06	7.3E+06	8.7E+06
1.2E+07	2.8E+07	6.8E+07	1.2E+08	1.4E+08	1.4E+08	1.3E+08	1.1E+08	9.9E+07	9.2E+07
8.8E+07	7.8E+07	6.3E+07	4.7E+07	3.4E+07	2.5E+07	1.9E+07	1.5E+07	1.2E+07	1.1E+07
1.1E+07	9.4E+06	7.6E+06	5.8E+06	4.3E+06	3.2E+06	2.5E+06	2.0E+06	1.7E+06	1.6E+06
1.5E+06	1.4E+06	1.2E+06	9.2E+05	7.2E+05	5.7E+05	4.6E+05	3.8E+05	3.4E+05	3.1E+05
2.6E+05	1.4E+05	5.9E+04	2.4E+04	1.0E+04	4.8E+03	2.7E+03	1.7E+03	1.2E+03	1.1E+03
Capa 40		26532.40							
3.9E-06	1.1E-02	5.0E+01	2.8E+04	1.8E+06	2.4E+07	1.2E+08	3.2E+08	5.6E+08	7.3E+08
8.3E+08	1.0E+09	1.5E+09	2.1E+09	2.8E+09	3.5E+09	4.1E+09	4.5E+09	4.8E+09	4.9E+09
5.1E+09	5.4E+09	4.9E+09	3.6E+09	2.4E+09	1.6E+09	1.1E+09	7.9E+08	6.3E+08	5.6E+08
5.1E+08	4.2E+08	3.0E+08	2.0E+08	1.3E+08	9.0E+07	6.3E+07	4.8E+07	3.9E+07	3.5E+07
3.3E+07	2.8E+07	2.2E+07	1.6E+07	1.2E+07	8.7E+06	6.6E+06	5.3E+06	4.5E+06	4.1E+06
3.9E+06	3.5E+06	2.9E+06	2.3E+06	1.8E+06	1.4E+06	1.1E+06	9.1E+05	7.9E+05	7.3E+05
6.1E+05	3.2E+05	1.3E+05	5.2E+04	2.2E+04	1.0E+04	5.7E+03	3.6E+03	2.7E+03	2.2E+03

TABLA 5.8

Valores de los coeficientes dispersivos monocromáticos en cinco capas de un modelo de composición Solar, $T_{\text{ef}} = 5500$ K y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente. Notar que los mismos nos indican, en cada caso, la importancia del fenómeno de *scattering*.

	$\log(Pg)$	$\log(Pe)$	$\log(Pr)$	τ	T	$\log(kR)$	$\log(\rho)$	$\log(-x)$	
Capa 1	2.8309	-1.3317	-0.0001	0.0001	4462.18	-2.585	-8.6163	8.2880	
9.6E-10	6.3E-10	3.5E-10	1.9E-10	1.1E-10	6.6E-11	4.4E-11	3.3E-11	2.7E-11	2.4E-11
4.0E-11	3.5E-11	2.9E-11	5.0E-08	2.4E-08	1.2E-08	6.6E-09	4.2E-09	3.0E-09	2.5E-09
9.9E-05	4.3E-05	3.6E-03	2.4E-01	7.6E-02	2.0E-02	6.6E-01	5.3E-01	4.3E-01	3.8E-01
3.6E-01	3.8E-01	2.6E-01	1.6E-01	9.0E-02	5.4E-02	3.8E-02	3.2E-02	2.6E-02	2.4E-02
2.3E-02	2.0E-02	1.7E-02	1.5E-02	1.3E-02	1.3E-02	1.4E-02	1.7E-02	1.9E-02	2.1E-02
2.2E-02	2.6E-02	4.2E-02	4.5E-02	3.8E-02	3.3E-02	2.9E-02	2.6E-02	2.4E-02	2.3E-02
2.1E-02	1.6E-02	1.1E-02	6.5E-03	4.3E-03	3.0E-03	2.2E-03	1.8E-03	1.5E-03	1.4E-03
Capa 10	4.3868	0.0539	0.0709	0.0650	4648.25	-1.312	-7.0776	8.4699	
6.5E-10	4.2E-10	2.4E-10	1.3E-10	7.2E-11	4.4E-11	3.0E-11	2.2E-11	1.8E-11	1.6E-11
2.7E-11	2.4E-11	2.0E-11	5.0E-08	2.4E-08	1.2E-08	6.7E-09	4.2E-09	3.0E-09	2.5E-09
2.3E-05	9.7E-06	8.2E-04	3.1E-02	7.1E-03	1.8E-03	1.1E-01	6.2E-02	4.2E-02	3.4E-02
3.1E-02	2.9E-02	1.7E-02	9.1E-03	4.9E-03	2.8E-03	1.9E-03	1.5E-03	1.2E-03	1.1E-03
1.0E-03	9.2E-04	7.6E-04	6.3E-04	5.5E-04	5.2E-04	5.4E-04	6.3E-04	7.1E-04	7.8E-04
8.2E-04	9.4E-04	1.4E-03	1.5E-03	1.3E-03	1.1E-03	9.3E-04	8.2E-04	7.6E-04	7.3E-04
6.5E-04	5.0E-04	3.2E-04	2.0E-04	1.3E-04	8.9E-05	6.6E-05	5.3E-05	4.5E-05	4.1E-05
Capa 20	5.0069	1.3331	0.5056	1.1500	5970.25	-0.456	-6.5660	8.5322	
2.8E-09	1.8E-09	1.0E-09	5.4E-10	3.1E-10	1.9E-10	1.3E-10	9.4E-11	7.7E-11	6.9E-11
1.1E-10	1.0E-10	8.3E-11	5.0E-08	2.4E-08	1.2E-08	6.7E-09	4.2E-09	3.0E-09	2.5E-09
9.4E-05	4.0E-05	3.3E-03	4.0E-02	9.0E-03	2.3E-03	2.1E-02	1.1E-02	7.2E-03	5.7E-03
6.0E-03	4.7E-03	2.7E-03	1.5E-03	8.6E-04	5.3E-04	3.9E-04	3.3E-04	2.8E-04	2.6E-04
2.6E-04	2.4E-04	2.1E-04	2.0E-04	1.9E-04	2.0E-04	2.1E-04	2.4E-04	2.7E-04	2.9E-04
3.0E-04	3.2E-04	4.0E-04	3.8E-04	3.3E-04	2.9E-04	2.5E-04	2.3E-04	2.1E-04	2.0E-04
1.9E-04	1.4E-04	9.0E-05	5.6E-05	3.6E-05	2.5E-05	1.9E-05	1.5E-05	1.3E-05	1.2E-05
Capa 30	5.1258	2.8274	0.9872	4.9000	7877.28	0.732	-6.5697	8.5473	
7.0E-08	4.6E-08	2.5E-08	1.4E-08	7.8E-09	4.8E-09	3.2E-09	2.4E-09	2.0E-09	1.7E-09
2.9E-09	2.6E-09	2.1E-09	5.2E-08	2.5E-08	1.3E-08	7.5E-09	4.9E-09	3.6E-09	3.1E-09
3.0E-04	1.6E-04	8.2E-03	1.8E-02	3.8E-03	1.1E-03	1.1E-03	6.2E-04	4.2E-04	3.4E-04
1.0E-03	8.6E-04	6.4E-04	4.8E-04	3.7E-04	3.1E-04	2.7E-04	2.6E-04	2.4E-04	2.3E-04
2.8E-04	2.8E-04	2.7E-04	2.6E-04	2.6E-04	2.6E-04	2.6E-04	2.6E-04	2.6E-04	2.6E-04
3.0E-04	3.0E-04	3.1E-04	2.8E-04	2.4E-04	2.1E-04	1.8E-04	1.7E-04	1.5E-04	1.5E-04
1.5E-04	1.1E-04	6.9E-05	4.2E-05	2.7E-05	1.8E-05	1.3E-05	1.1E-05	9.6E-06	8.8E-06
Capa 40	5.1600	4.8132	2.2413	100.0000	16214.24	2.282	-7.1075	8.5552	
1.5E-05	1.0E-05	5.9E-06	3.5E-06	2.1E-06	1.4E-06	1.0E-06	7.8E-07	6.6E-07	6.0E-07
5.3E-06	4.7E-06	3.8E-06	3.6E-06	2.6E-06	2.0E-06	1.6E-06	1.4E-06	1.2E-06	1.1E-06
7.4E-03	4.8E-03	2.9E-03	1.4E-03	7.8E-04	4.7E-04	3.1E-04	2.3E-04	1.9E-04	1.7E-04
1.0E-03	8.5E-04	6.5E-04	4.7E-04	3.5E-04	2.6E-04	2.0E-04	1.7E-04	1.5E-04	1.4E-04
2.4E-04	2.2E-04	1.8E-04	1.5E-04	1.2E-04	1.0E-04	8.5E-05	7.4E-05	6.8E-05	6.4E-05
7.9E-05	7.4E-05	6.6E-05	5.7E-05	4.9E-05	4.2E-05	3.7E-05	3.3E-05	3.1E-05	2.9E-05
3.0E-05	2.1E-05	1.3E-05	7.8E-06	4.8E-06	3.2E-06	2.3E-06	1.9E-06	1.7E-06	1.6E-06

TABLA 5.9

Valores de los coeficientes dispersivos monocromáticos en cinco capas de un modelo de composición Solar, $T_{\text{ef}} = 9000 \text{ K}$ y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente. Notar que los mismos nos indican, en cada caso, la importancia del fenómeno de *scattering*.

	log (Pg)	log (Pe)	log (Pr)	tau	T	log (kR)	log (rho)	log (-x)	
Capa 1	1.0187	-0.0522	0.8554	0.0001	7301.74	-0.529	-11.2830	8.0286	
5.7E-06	3.8E-06	2.2E-06	1.2E-06	7.0E-07	4.4E-07	3.0E-07	2.3E-07	1.9E-07	1.7E-07
3.7E-07	3.2E-07	2.7E-07	2.9E-07	2.0E-07	1.5E-07	1.2E-07	9.8E-08	8.6E-08	8.0E-08
5.0E-01	4.4E-01	5.7E-01	5.2E-01	3.3E-01	2.1E-01	1.5E-01	1.2E-01	9.6E-02	8.6E-02
7.9E-01	7.5E-01	7.0E-01	6.2E-01	5.4E-01	4.7E-01	4.0E-01	3.5E-01	3.2E-01	3.0E-01
6.0E-01	5.8E-01	5.4E-01	4.9E-01	4.3E-01	3.8E-01	3.4E-01	3.1E-01	2.9E-01	2.8E-01
4.0E-01	3.8E-01	3.5E-01	3.2E-01	2.8E-01	2.5E-01	2.3E-01	2.1E-01	1.9E-01	1.9E-01
2.2E-01	1.6E-01	1.2E-01	7.1E-02	4.5E-02	3.0E-02	2.2E-02	1.7E-02	1.8E-02	1.6E-02
Capa 10	3.1007	1.6199	0.9264	0.0650	7606.23	-0.090	-8.5952	8.6193	
4.9E-07	3.2E-07	1.8E-07	9.5E-08	5.4E-08	3.3E-08	2.3E-08	1.7E-08	1.4E-08	1.2E-08
2.1E-08	1.8E-08	1.5E-08	6.4E-08	3.4E-08	2.0E-08	1.3E-08	9.4E-09	7.7E-09	6.9E-09
6.5E-03	4.5E-03	6.8E-02	1.0E-01	2.7E-02	9.9E-03	7.0E-03	4.6E-03	3.5E-03	3.0E-03
4.0E-02	3.5E-02	2.8E-02	2.2E-02	1.7E-02	1.4E-02	1.1E-02	9.9E-03	8.9E-03	8.4E-03
1.7E-02	1.6E-02	1.5E-02	1.4E-02	1.2E-02	1.1E-02	9.5E-03	8.7E-03	8.1E-03	7.8E-03
1.2E-02	1.1E-02	1.0E-02	9.1E-03	7.8E-03	6.7E-03	5.8E-03	5.2E-03	4.8E-03	4.6E-03
5.2E-03	3.6E-03	2.5E-03	1.5E-03	9.1E-04	6.1E-04	4.4E-04	3.5E-04	3.4E-04	3.1E-04
Capa 20	3.5810	2.8879	1.3607	1.1500	9769.49	1.291	-8.3040	8.6779	
3.8E-06	2.5E-06	1.4E-06	7.8E-07	4.5E-07	2.8E-07	1.9E-07	1.4E-07	1.2E-07	1.1E-07
2.0E-07	1.8E-07	1.5E-07	1.9E-07	1.2E-07	8.9E-08	6.9E-08	5.6E-08	4.9E-08	4.6E-08
2.2E-02	1.6E-02	3.3E-02	1.1E-02	4.7E-03	2.5E-03	1.7E-03	1.2E-03	9.7E-04	8.6E-04
1.3E-02	1.1E-02	8.2E-03	6.0E-03	4.4E-03	3.3E-03	2.6E-03	2.1E-03	1.9E-03	1.7E-03
4.2E-03	3.8E-03	3.3E-03	2.7E-03	2.2E-03	1.8E-03	1.5E-03	1.3E-03	1.2E-03	1.1E-03
1.7E-03	1.6E-03	1.4E-03	1.2E-03	1.0E-03	8.9E-04	7.7E-04	6.9E-04	6.4E-04	6.1E-04
6.7E-04	4.7E-04	3.1E-04	1.9E-04	1.2E-04	7.7E-05	5.6E-05	4.5E-05	4.4E-05	4.0E-05
Capa 30	3.6988	3.3490	1.8428	4.9000	12890.09	1.484	-8.4758	8.7045	
1.5E-05	1.0E-05	6.0E-06	3.5E-06	2.2E-06	1.4E-06	1.0E-06	8.1E-07	6.8E-07	6.2E-07
7.0E-06	6.2E-06	5.1E-06	4.8E-06	3.5E-06	2.7E-06	2.1E-06	1.8E-06	1.6E-06	1.5E-06
6.3E-02	4.2E-02	2.5E-02	1.3E-02	7.1E-03	4.3E-03	2.9E-03	2.1E-03	1.7E-03	1.5E-03
1.4E-02	1.2E-02	8.9E-03	6.4E-03	4.7E-03	3.5E-03	2.7E-03	2.2E-03	1.9E-03	1.8E-03
3.7E-03	3.3E-03	2.8E-03	2.3E-03	1.9E-03	1.5E-03	1.3E-03	1.1E-03	1.0E-03	9.6E-04
1.3E-03	1.2E-03	1.1E-03	9.2E-04	7.9E-04	6.8E-04	5.9E-04	5.3E-04	4.9E-04	4.7E-04
4.9E-04	3.4E-04	2.3E-04	1.3E-04	8.4E-05	5.6E-05	4.2E-05	3.3E-05	3.2E-05	3.0E-05
Capa 40	4.8803	4.5720	3.0968	100.0000	26532.40	1.135	-7.6487	9.0628	
1.8E-03	1.2E-03	7.2E-04	4.2E-04	2.6E-04	1.7E-04	1.3E-04	9.9E-05	8.4E-05	7.6E-05
1.5E-03	1.4E-03	1.1E-03	8.8E-04	6.9E-04	5.5E-04	4.5E-04	3.8E-04	3.4E-04	3.2E-04
8.6E-02	5.8E-02	3.3E-02	1.8E-02	1.0E-02	6.4E-03	4.4E-03	3.4E-03	2.9E-03	2.7E-03
7.3E-03	6.2E-03	4.8E-03	3.6E-03	2.7E-03	2.1E-03	1.6E-03	1.4E-03	1.2E-03	1.1E-03
1.5E-03	1.4E-03	1.2E-03	9.9E-04	8.1E-04	6.7E-04	5.7E-04	5.0E-04	4.5E-04	4.3E-04
4.8E-04	4.5E-04	4.0E-04	3.5E-04	3.0E-04	2.6E-04	2.3E-04	2.1E-04	1.9E-04	1.8E-04
1.7E-04	1.2E-04	7.7E-05	4.5E-05	2.8E-05	1.9E-05	1.4E-05	1.1E-05	1.0E-05	9.4E-06

TABLA 5.10

Valores de los coeficientes dispersivos monocromáticos en cinco capas de un modelo de Población II, $T_{\text{eff}} = 5500$ K y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente. Notar que los mismos nos indican, en cada caso, la importancia del fenómeno de *scattering*.

	$\log(\text{Pg})$	$\log(\text{Pe})$	$\log(\text{Pr})$	τ	T	$\log(\text{kR})$	$\log(\rho)$	$\log(-\kappa)$	
Capa 1	3.1518	-1.7761	-0.0001	0.0001	4462.18	-2.995	-8.3125	8.3494	
1.8E-10	1.2E-10	6.5E-11	3.5E-11	1.9E-11	1.2E-11	8.0E-12	5.9E-12	4.8E-12	4.3E-12
6.7E-12	5.9E-12	4.9E-12	4.3E-08	2.1E-08	1.0E-08	5.8E-09	3.6E-09	2.6E-09	2.2E-09
2.8E-04	1.4E-04	4.2E-01	9.9E-01	9.9E-01	9.5E-01	9.1E-01	8.4E-01	7.7E-01	7.3E-01
7.2E-01	6.5E-01	5.1E-01	3.6E-01	2.3E-01	1.5E-01	9.8E-02	7.1E-02	5.8E-02	5.1E-02
4.8E-02	4.1E-02	3.3E-02	2.6E-02	2.1E-02	1.9E-02	1.8E-02	1.9E-02	2.1E-02	2.3E-02
2.5E-02	2.9E-02	4.1E-02	4.3E-02	3.4E-02	2.8E-02	2.3E-02	2.0E-02	1.8E-02	1.7E-02
1.5E-02	1.0E-02	6.1E-03	3.7E-03	2.4E-03	1.6E-03	1.2E-03	9.6E-04	8.2E-04	7.6E-04
Capa 10	4.9487	-0.4942	0.0709	0.0650	4648.25	-1.847	-6.5330	8.5376	
5.5E-11	3.6E-11	2.0E-11	1.1E-11	5.9E-12	3.6E-12	2.4E-12	1.8E-12	1.5E-12	1.3E-12
2.1E-12	1.8E-12	1.5E-12	4.4E-08	2.1E-08	1.1E-08	5.8E-09	3.6E-09	2.6E-09	2.2E-09
2.5E-04	1.2E-04	1.2E-01	9.0E-01	8.2E-01	5.9E-01	4.1E-01	2.7E-01	1.9E-01	1.6E-01
1.4E-01	1.0E-01	6.2E-02	3.4E-02	1.8E-02	1.0E-02	6.6E-03	4.7E-03	3.7E-03	3.2E-03
3.0E-03	2.6E-03	2.0E-03	1.5E-03	1.2E-03	1.0E-03	9.3E-04	9.4E-04	1.0E-03	1.1E-03
1.1E-03	1.2E-03	1.6E-03	1.5E-03	1.1E-03	8.3E-04	6.4E-04	5.3E-04	4.6E-04	4.3E-04
3.6E-04	2.1E-04	1.1E-04	6.4E-05	4.0E-05	2.7E-05	2.0E-05	1.6E-05	1.4E-05	1.3E-05
Capa 20	5.3482	1.4058	0.5056	1.1500	5970.25	-0.374	-6.2421	8.5737	
1.7E-09	1.1E-09	6.0E-10	3.2E-10	1.8E-10	1.1E-10	7.5E-11	5.5E-11	4.5E-11	4.0E-11
6.3E-11	5.5E-11	4.6E-11	4.3E-08	2.1E-08	1.0E-08	5.8E-09	3.6E-09	2.6E-09	2.2E-09
2.9E-04	1.4E-04	1.8E-01	4.0E-01	1.4E-01	5.0E-02	2.1E-02	1.1E-02	7.1E-03	5.5E-03
5.8E-03	4.1E-03	2.4E-03	1.3E-03	7.2E-04	4.4E-04	3.0E-04	2.3E-04	1.9E-04	1.7E-04
1.7E-04	1.5E-04	1.3E-04	1.2E-04	1.1E-04	1.1E-04	1.2E-04	1.3E-04	1.5E-04	1.6E-04
1.7E-04	1.9E-04	2.2E-04	2.1E-04	1.8E-04	1.6E-04	1.4E-04	1.2E-04	1.2E-04	1.1E-04
1.0E-04	7.3E-05	4.6E-05	2.9E-05	1.9E-05	1.3E-05	9.4E-06	7.5E-06	6.5E-06	5.9E-06
Capa 30	5.3958	2.9606	0.9872	4.9000	7877.28	0.819	-6.3164	8.5796	
5.6E-08	3.6E-08	2.0E-08	1.1E-08	6.0E-09	3.7E-09	2.5E-09	1.8E-09	1.5E-09	1.3E-09
2.1E-09	1.8E-09	1.5E-09	4.5E-08	2.2E-08	1.1E-08	6.4E-09	4.1E-09	3.1E-09	2.6E-09
7.1E-04	4.0E-04	1.3E-01	3.5E-02	8.0E-03	2.4E-03	9.7E-04	5.1E-04	3.4E-04	2.8E-04
7.1E-04	5.6E-04	4.0E-04	2.9E-04	2.3E-04	1.9E-04	1.6E-04	1.5E-04	1.4E-04	1.4E-04
1.6E-04	1.6E-04	1.5E-04	1.5E-04	1.5E-04	1.5E-04	1.5E-04	1.6E-04	1.6E-04	1.6E-04
1.9E-04	1.9E-04	1.9E-04	1.7E-04	1.5E-04	1.3E-04	1.1E-04	1.0E-04	9.5E-05	9.1E-05
8.9E-05	6.4E-05	4.2E-05	2.5E-05	1.6E-05	1.1E-05	8.1E-06	6.4E-06	5.8E-06	5.3E-06
Capa 40	5.4107	5.0514	2.2413	100.0000	16214.24	2.550	-6.8635	8.5827	
1.5E-05	1.0E-05	6.1E-06	3.5E-06	2.1E-06	1.4E-06	1.0E-06	7.7E-07	6.5E-07	5.9E-07
3.0E-06	2.7E-06	2.2E-06	2.0E-06	1.5E-06	1.2E-06	9.2E-07	7.8E-07	6.9E-07	6.5E-07
4.3E-03	2.8E-03	1.8E-03	8.4E-04	4.5E-04	2.7E-04	1.8E-04	1.3E-04	1.1E-04	9.9E-05
5.8E-04	4.9E-04	3.7E-04	2.7E-04	2.0E-04	1.5E-04	1.2E-04	9.7E-05	8.5E-05	7.9E-05
1.4E-04	1.2E-04	1.1E-04	8.7E-05	7.1E-05	5.8E-05	4.9E-05	4.3E-05	3.9E-05	3.7E-05
4.6E-05	4.3E-05	3.8E-05	3.3E-05	2.8E-05	2.4E-05	2.1E-05	1.9E-05	1.8E-05	1.7E-05
1.7E-05	1.2E-05	7.7E-06	4.5E-06	2.8E-06	1.9E-06	1.4E-06	1.1E-06	9.8E-07	9.0E-07

TABLA 5.11

Valores de los coeficientes dispersivos monocromáticos en cinco capas de un modelo HdC, $T_{\text{ef}}= 5500$ K y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente. Notar que los mismos nos indican, en cada caso, la importancia del fenómeno de *scattering*.

	log (Pg)	log (Pe)	log (Pr)	tau	T	log (kR)	log (rho)	log (-x)	
Capa 1	3.7039	0.0504	-0.0001	0.0001	4462.18	-3.564	-7.2413	7.8971	
4.1E-10	2.8E-10	1.7E-10	9.8E-11	6.1E-11	4.1E-11	3.0E-11	2.4E-11	2.0E-11	1.8E-11
1.4E-09	1.3E-09	1.2E-09	6.9E-06	3.8E-06	2.1E-06	1.3E-06	9.3E-07	7.2E-07	6.3E-07
5.0E-07	2.4E-07	5.1E-06	5.4E-04	1.6E-03	4.8E-04	3.8E-02	5.8E-02	4.4E-02	3.9E-02
3.7E-02	9.0E-02	6.6E-02	5.7E-02	4.2E-02	3.3E-02	4.2E-02	1.9E-01	1.6E-01	1.8E-01
1.7E-01	1.5E-01	1.3E-01	1.1E-01	9.4E-02	7.7E-02	6.6E-02	8.1E-02	7.6E-02	7.3E-02
7.1E-02	6.9E-02	1.1E-01	1.2E-01	1.0E-01	8.9E-02	7.8E-02	7.0E-02	6.7E-02	6.3E-02
5.7E-02	6.1E-02	4.6E-02	2.9E-02	2.1E-02	1.6E-02	1.2E-02	9.6E-03	8.1E-03	7.5E-03
Capa 10	5.7547	1.5148	0.0709	0.0650	4648.25	-2.745	-5.2080	8.0821	
1.1E-10	7.2E-11	4.3E-11	2.5E-11	1.6E-11	1.1E-11	7.7E-12	6.1E-12	5.2E-12	4.9E-12
3.6E-10	3.3E-10	3.0E-10	6.8E-06	3.7E-06	2.1E-06	1.3E-06	9.2E-07	7.2E-07	6.2E-07
4.9E-07	2.4E-07	4.1E-06	8.0E-05	3.9E-04	1.1E-04	1.1E-02	1.0E-02	7.1E-03	6.1E-03
5.7E-03	1.0E-02	7.0E-03	4.3E-03	3.1E-03	2.0E-03	2.9E-03	9.5E-03	7.9E-03	8.2E-03
7.7E-03	6.8E-03	5.6E-03	4.7E-03	4.3E-03	3.5E-03	3.0E-03	3.8E-03	3.5E-03	3.5E-03
3.3E-03	3.2E-03	5.2E-03	4.9E-03	4.1E-03	3.8E-03	3.2E-03	2.9E-03	2.9E-03	2.8E-03
2.4E-03	2.5E-03	1.9E-03	1.1E-03	8.0E-04	5.9E-04	4.6E-04	3.6E-04	3.0E-04	2.8E-04
Capa 20	6.2714	2.6385	0.5054	1.1500	5970.25	-1.523	-4.7990	8.1224	
4.2E-10	2.9E-10	1.7E-10	1.0E-10	6.3E-11	4.2E-11	3.1E-11	2.4E-11	2.1E-11	1.9E-11
1.4E-09	1.3E-09	1.2E-09	6.8E-06	3.7E-06	2.1E-06	1.3E-06	9.2E-07	7.1E-07	6.2E-07
4.9E-07	2.4E-07	5.0E-06	1.4E-04	2.3E-04	6.9E-05	2.0E-03	2.0E-03	1.4E-03	1.2E-03
1.1E-03	2.1E-03	1.4E-03	1.1E-03	7.6E-04	5.8E-04	6.6E-04	1.9E-03	1.6E-03	1.9E-03
1.8E-03	1.6E-03	1.3E-03	1.1E-03	8.7E-04	7.1E-04	6.5E-04	7.4E-04	6.9E-04	6.6E-04
6.4E-04	6.2E-04	8.4E-04	8.5E-04	7.2E-04	6.3E-04	5.7E-04	5.1E-04	4.8E-04	4.6E-04
4.1E-04	3.9E-04	2.8E-04	1.7E-04	1.2E-04	8.7E-05	6.6E-05	5.2E-05	4.4E-05	4.1E-05
Capa 30	6.3684	3.4780	0.9872	4.9000	7877.28	-0.548	-4.8239	8.1325	
2.4E-09	1.6E-09	9.7E-10	5.7E-10	3.6E-10	2.4E-10	1.7E-10	1.4E-10	1.2E-10	1.1E-10
1.1E-08	1.1E-08	9.6E-09	9.7E-06	5.3E-06	3.0E-06	1.9E-06	1.3E-06	1.0E-06	8.9E-07
7.1E-07	3.5E-07	1.6E-05	2.7E-04	5.1E-04	1.9E-04	7.3E-04	5.5E-04	4.1E-04	3.5E-04
3.2E-04	1.0E-03	7.4E-04	5.8E-04	5.7E-04	4.4E-04	4.5E-04	4.9E-04	4.2E-04	7.0E-04
6.7E-04	6.0E-04	5.0E-04	4.0E-04	3.2E-04	2.6E-04	3.8E-04	3.5E-04	3.3E-04	3.1E-04
3.0E-04	2.8E-04	2.7E-04	2.5E-04	2.2E-04	1.8E-04	2.2E-04	1.9E-04	1.8E-04	1.7E-04
1.5E-04	1.1E-04	8.3E-05	5.5E-05	3.7E-05	2.6E-05	2.0E-05	1.5E-05	1.3E-05	1.2E-05
Capa 40	6.4990	4.9999	2.2413	100.0000	16214.24	0.557	-5.0201	8.1566	
6.2E-08	4.2E-08	2.5E-08	1.5E-08	9.2E-09	6.2E-09	4.5E-09	3.5E-09	3.0E-09	2.7E-09
6.4E-05	6.0E-05	5.3E-05	2.1E-03	1.1E-03	6.5E-04	4.0E-04	2.8E-04	2.2E-04	1.9E-04
2.2E-04	1.3E-04	1.6E-03	2.4E-03	1.3E-03	7.6E-04	5.1E-04	4.0E-04	9.6E-04	8.6E-04
1.3E-03	1.4E-03	1.1E-03	7.8E-04	5.9E-04	4.4E-04	3.6E-04	3.0E-04	3.2E-04	3.1E-04
4.1E-04	3.7E-04	3.2E-04	2.6E-04	2.1E-04	1.8E-04	1.6E-04	1.4E-04	1.2E-04	1.2E-04
1.4E-04	1.3E-04	1.2E-04	1.0E-04	8.8E-05	7.6E-05	6.8E-05	6.1E-05	5.7E-05	5.4E-05
5.4E-05	3.8E-05	2.4E-05	1.5E-05	9.3E-06	6.4E-06	4.7E-06	3.7E-06	3.2E-06	2.9E-06

2.2.5. Implementación del Método Iterativo.

Llevando adelante el procedimiento descrito en el apartado **2.1**, comenzamos evaluando la ecuación (5.6), tomando como valor aproximado de \bar{S}_ν a la función de Planck y a la intensidad específica media J_ν , la calculada a partir de este valor aproximado de la función fuente. Este cálculo fue realizado para cada una de las setenta longitudes de onda y en las cuarenta profundidades ópticas de trabajo.

Posteriormente se obtuvieron las primeras 70×40 correcciones $\Delta^{(0)}$ correspondientes, aplicando la ecuación (5.10). Dado que el mismo es un proceso iterativo, se debe especificar algún criterio de convergencia adecuado, a partir del cual decidir cuándo el mismo ha convergido al resultado deseado. Para ello, definimos un error relativo para cada ciclo iterativo k –para cada longitud de onda λ_i y profundidad óptica τ_j – de la siguiente manera:

$$e_{ijk} \equiv e^{(k)}(\lambda_i, \tau_j) = \frac{\Delta S^{(k)}}{S^{(k)}(\lambda_i, \tau_j)} \quad (5.15)$$

El criterio de convergencia adoptado fue el siguiente: en cada ciclo iterativo k y para cada profundidad óptica τ_j , se calculó un error cuadrático medio definido de la siguiente forma:

$$\langle \varepsilon_j^{(k)} \rangle = \frac{1}{70} \sqrt{\sum_{i=1}^{70} e_{ijk}^2} \quad (5.16)$$

Luego, con el objetivo de determinar un error promedio en el ciclo iterativo, se determinó la media aritmética de este error cuadrático medio en las cuarenta profundidades ópticas de trabajo, es decir:

$$\bar{\varepsilon}^{(k)} = \frac{1}{40} \sum_{j=1}^{40} \langle \varepsilon_j^{(k)} \rangle \quad (5.17)$$

Por lo tanto, se utilizó este último error promedio para establecer un criterio de convergencia, estableciendo de antemano un valor mínimo ε_0 para el cual podamos asegurar haber hallado la solución del problema cuando se verifique que $\bar{\varepsilon}^{(k)} < \varepsilon_0$.

3. RESULTADOS OBTENIDOS.

A continuación se muestran los resultados obtenidos al aplicar el método explicado, en los modelos que se tomaron como referencia en este capítulo. Primeramente, mostramos los errores calculados en cada iteración, ordenados en las cuarenta profundidades de trabajo, adoptándose como valor de convergencia $\epsilon_0 = 1 \times 10^{-3}$. Luego, en las TABLAS 5.12 a 5.16 los correspondientes valores de las funciones fuentes monocromáticas obtenidas, con el mismo valor de convergencia citado.

```

** Temperatura Efectiva : 5500.00 **
** Log (Graved.Superf.) : 4.0000 **
** Abundancia Utilizada : SOLAR-Kurucz **
** Flujo Ideal : 1.6516690E+10**

```

Iteración: 0

Errores cuadráticos medios:

```

4.6E-02 2.6E-02 2.2E-02 1.8E-02 1.5E-02 1.2E-02 1.0E-02 8.1E-03 6.0E-03 4.6E-03
3.6E-03 2.7E-03 1.9E-03 1.3E-03 9.4E-04 5.3E-04 4.8E-04 2.3E-04 2.1E-04 3.9E-04
3.1E-04 1.0E-03 1.3E-04 3.9E-04 4.0E-04 3.3E-04 2.8E-04 1.7E-04 1.3E-04 4.5E-04
1.7E-04 1.7E-04 1.0E-04 7.4E-05 7.2E-05 8.5E-05 1.4E-04 1.0E-04 1.2E-04 1.4E-04

```

$\bar{\epsilon}^{(0)} = 4.64610E-3$

Iteración: 1

Errores cuadráticos medios:

```

5.3E-04 4.3E-04 4.0E-04 3.7E-04 3.4E-04 3.2E-04 3.2E-04 2.7E-04 2.0E-04 1.6E-04
1.4E-04 1.2E-04 7.3E-05 5.4E-05 4.1E-05 2.3E-05 1.7E-05 1.1E-05 1.0E-05 7.5E-06
1.4E-05 8.1E-05 2.5E-05 7.4E-06 6.4E-06 5.8E-06 8.3E-06 1.2E-05 1.8E-05 3.8E-05
7.2E-06 3.8E-07 1.0E-06 1.7E-07 1.8E-08 7.8E-08 8.0E-07 1.3E-08 7.4E-08 1.7E-08

```

$\bar{\epsilon}^{(1)} = 1.01666E-4$

```

** Temperatura Efectiva : 9000.00 **
** Log (Graved.Superf.) : 4.0000 **
** Abundancia Utilizada : SOLAR-Kurucz **
** Flujo Ideal : 1.1842470E+11**

```

Iteración: 0

Errores cuadráticos medios:

```

1.2E+01 2.1E+00 1.3E+00 7.7E-01 4.9E-01 3.1E-01 2.2E-01 1.7E-01 1.2E-01 9.3E-02
7.5E-02 6.2E-02 5.2E-02 4.3E-02 3.5E-02 2.9E-02 2.3E-02 1.9E-02 1.5E-02 1.2E-02
9.4E-03 7.5E-03 6.0E-03 4.6E-03 3.7E-03 3.0E-03 2.3E-03 2.0E-03 1.5E-03 1.1E-03
7.6E-04 5.7E-04 9.6E-04 1.6E-03 9.6E-04 8.5E-04 2.0E-03 1.9E-03 6.8E-03 1.4E-03

```

$\bar{\epsilon}^{(0)} = 0.45485$

Iteración: 1

Errores cuadráticos medios:

```

2.7E-03 2.5E-03 2.5E-03 2.4E-03 2.4E-03 2.3E-03 2.2E-03 2.1E-03 2.0E-03 1.9E-03
1.9E-03 1.8E-03 1.7E-03 1.6E-03 1.5E-03 1.5E-03 1.3E-03 1.2E-03 1.1E-03 9.7E-04
8.6E-04 7.8E-04 6.7E-04 5.6E-04 4.8E-04 4.2E-04 3.5E-04 3.3E-04 2.8E-04 2.5E-04
2.3E-04 2.3E-04 1.0E-04 2.2E-04 1.0E-04 3.6E-05 2.0E-04 2.2E-04 2.5E-03 2.8E-05

```

$\bar{\epsilon}^{(1)} = 1.15619E-3$

Iteración: 2

Errores cuadráticos medios:

```

2.0E-04 2.0E-04 2.0E-04 1.9E-04 1.9E-04 1.8E-04 1.8E-04 1.7E-04 1.7E-04 1.6E-04
1.6E-04 1.5E-04 1.5E-04 1.4E-04 1.4E-04 1.3E-04 1.2E-04 1.1E-04 1.0E-04 9.3E-05
8.4E-05 7.8E-05 6.7E-05 5.6E-05 4.8E-05 4.2E-05 3.6E-05 3.6E-05 2.9E-05 2.6E-05
2.4E-05 2.4E-05 1.3E-05 3.7E-05 1.2E-05 1.8E-06 2.5E-05 4.2E-05 1.2E-03 7.5E-06

```

$\bar{\epsilon}^{(2)} = 1.04909E-4$

```

** Temperatura Efectiva :    5500.00    **
** Log (Graved.Superf.) :     4.0000    **
** Abundancia Utilizada : Pob. II      **
** Flujo Ideal           : 1.6516690E+10**

```

Iteración: 0

Errores cuadráticos medios:

```

5.0E-01  5.0E-01  5.1E-01  5.1E-01  5.1E-01  5.2E-01  5.2E-01  5.2E-01  5.1E-01  5.0E-01
4.6E-01  4.1E-01  3.5E-01  2.7E-01  2.0E-01  1.3E-01  8.7E-02  5.5E-02  3.6E-02  2.4E-02
1.5E-02  8.6E-03  5.4E-03  5.3E-03  1.9E-03  1.3E-03  1.1E-03  4.0E-04  2.4E-04  4.7E-05
8.3E-05  2.2E-04  1.2E-04  5.9E-05  5.4E-05  5.6E-05  4.4E-04  6.5E-05  7.0E-05  7.5E-05

```

$\bar{\epsilon}^{(0)} = 0.17886$

Iteración: 1

Errores cuadráticos medios:

```

1.7E-02  1.7E-02  1.8E-02  2.1E-02  1.8E-02  1.8E-02  1.8E-02  1.7E-02  1.6E-02  2.1E-02
1.5E-02  1.3E-02  2.1E-02  1.1E-02  9.1E-03  8.1E-03  6.5E-03  6.1E-03  4.6E-03  3.5E-03
2.7E-03  1.9E-03  1.5E-03  1.6E-03  1.1E-03  1.1E-03  9.7E-04  8.5E-04  7.3E-04  5.7E-04
3.6E-04  2.3E-04  3.8E-06  3.7E-07  2.3E-07  2.2E-06  1.6E-05  1.3E-07  2.4E-08  2.0E-08

```

$\bar{\epsilon}^{(1)} = 7.33396E-3$

Iteración: 2

Errores cuadráticos medios:

```

7.7E-03  7.9E-03  8.1E-03  9.2E-03  8.0E-03  8.2E-03  8.0E-03  7.8E-03  7.5E-03  9.7E-03
6.6E-03  6.1E-03  1.0E-02  4.6E-03  3.5E-03  2.9E-03  2.3E-03  2.1E-03  1.6E-03  1.1E-03
8.1E-04  4.8E-04  3.2E-04  3.4E-04  1.1E-04  5.6E-05  3.1E-05  1.5E-05  1.0E-05  7.0E-06
4.3E-06  2.8E-06  4.6E-08  4.2E-10  1.4E-09  6.0E-08  4.4E-07  2.9E-09  2.5E-11  3.4E-11

```

$\bar{\epsilon}^{(2)} = 3.12826E-3$

Iteración: 3

Errores cuadráticos medios:

```

4.9E-03  5.0E-03  5.1E-03  5.7E-03  5.1E-03  5.1E-03  5.0E-03  4.9E-03  4.8E-03  6.0E-03
4.3E-03  4.0E-03  6.4E-03  2.9E-03  2.1E-03  1.6E-03  1.2E-03  1.1E-03  7.8E-04  5.2E-04
3.8E-04  2.3E-04  1.5E-04  1.2E-04  4.6E-05  2.3E-05  1.1E-05  4.2E-06  1.8E-06  5.6E-07
8.4E-08  3.5E-08  5.7E-10  6.6E-12  3.7E-11  1.6E-09  1.2E-08  7.8E-11  4.7E-13  6.0E-14

```

$\bar{\epsilon}^{(3)} = 1.93967E-3$

Iteración: 4

Errores cuadráticos medios:

```

3.6E-03  3.7E-03  3.8E-03  4.1E-03  3.7E-03  3.7E-03  3.7E-03  3.6E-03  3.6E-03  4.3E-03
3.3E-03  3.1E-03  4.7E-03  2.2E-03  1.6E-03  1.2E-03  8.9E-04  7.3E-04  5.3E-04  3.6E-04
2.6E-04  1.6E-04  9.7E-05  6.4E-05  2.9E-05  1.5E-05  7.0E-06  2.8E-06  1.2E-06  3.7E-07
4.2E-08  9.6E-10  7.0E-12  1.7E-13  1.0E-12  4.4E-11  3.2E-10  2.1E-12  1.3E-14  4.5E-16

```

$\bar{\epsilon}^{(4)} = 1.42599E-3$

Iteración: 5

Errores cuadráticos medios:

```

2.9E-03  3.0E-03  3.0E-03  3.2E-03  3.0E-03  3.0E-03  2.9E-03  2.9E-03  2.9E-03  3.4E-03
2.7E-03  2.6E-03  3.7E-03  1.9E-03  1.3E-03  1.0E-03  7.6E-04  6.1E-04  4.5E-04  3.0E-04
2.2E-04  1.3E-04  8.2E-05  4.8E-05  2.4E-05  1.3E-05  5.9E-06  2.4E-06  1.0E-06  3.2E-07
3.8E-08  7.6E-10  1.5E-13  4.7E-15  2.8E-14  1.2E-12  8.8E-12  5.8E-14  3.5E-16  1.1E-17

```

$\bar{\epsilon}^{(5)} = 1.15238E-3$

Iteración: 6

Errores cuadráticos medios:

```

2.5E-03  2.5E-03  2.5E-03  2.7E-03  2.5E-03  2.5E-03  2.5E-03  2.5E-03  2.5E-03  2.8E-03
2.3E-03  2.3E-03  3.1E-03  1.7E-03  1.2E-03  9.2E-04  7.1E-04  5.7E-04  4.2E-04  2.9E-04
2.1E-04  1.3E-04  7.9E-05  4.4E-05  2.3E-05  1.2E-05  5.7E-06  2.3E-06  1.0E-06  3.2E-07
3.7E-08  7.5E-10  1.1E-13  1.4E-16  7.5E-16  3.3E-14  2.4E-13  1.6E-15  9.2E-18  1.9E-18

```

$\bar{\epsilon}^{(6)} = 9.84331E-4$

```
** Temperatura Efectiva : 5500.00 **
** Log (Graved.Superf.) : 4.0000 **
** Abundancia Utilizada : HdC Star **
** Flujo Ideal : 1.6516690E+10**
```

```
Iteración: 0
```

```
Errores cuadráticos medios:
```

```
2.2E-03 7.6E-04 5.9E-04 4.6E-04 3.6E-04 2.9E-04 2.3E-04 1.8E-04 1.5E-04 1.3E-04
8.0E-05 6.7E-05 6.5E-05 4.8E-05 2.6E-05 2.2E-05 1.8E-05 2.8E-05 2.1E-05 1.8E-05
1.0E-05 1.2E-05 2.2E-05 9.7E-06 9.6E-06 4.4E-05 1.8E-05 2.7E-05 1.1E-05 1.1E-05
1.2E-05 2.9E-05 1.4E-04 9.2E-05 1.7E-04 2.3E-04 3.7E-04 8.7E-05 1.3E-04 1.0E-04
 $\bar{\epsilon}^{(0)} = 1.80835E-4$ 
```

TABLA 5.12

Valores de las funciones fuentes monocromáticas en cinco capas de un modelo de composición Solar, $T_{\text{ef}} = 5500$ K y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente.
Los valores están expresados en $(\text{erg}/\text{cm}^2) \text{s}^{-1} \text{\AA}^{-1}$.

	$\log(\text{Pg})$	$\log(\text{Pe})$	$\log(\text{Pr})$	τ	T	$\log(\text{kR})$	$\log(\rho)$	$\log(-x)$	
Capa 1	2.8309	-1.3317	-0.0001	0.0001	4462.18	-2.585	-8.6163	8.2880	
8.9-117	3.4E-94	1.1E-69	1.4E-50	2.7E-37	2.1E-28	1.6E-22	1.0E-18	2.1E-16	3.3E-15
1.2E-14	1.3E-13	5.2E-12	3.3E-10	1.8E-08	5.9E-07	9.7E-06	7.9E-05	3.2E-04	6.9E-04
2.6E-03	1.3E-01	1.1E+01	3.9E+02	5.4E+03	2.9E+04	3.2E+05	3.5E+05	3.7E+05	3.9E+05
4.3E+05	5.4E+05	5.6E+05	6.3E+05	6.9E+05	7.2E+05	7.1E+05	6.9E+05	6.6E+05	6.4E+05
6.3E+05	6.0E+05	5.6E+05	4.9E+05	4.2E+05	3.6E+05	3.0E+05	2.6E+05	2.4E+05	2.2E+05
2.2E+05	2.0E+05	1.8E+05	1.5E+05	1.2E+05	1.0E+05	8.6E+04	7.4E+04	6.7E+04	6.3E+04
5.4E+04	3.2E+04	1.5E+04	6.3E+03	2.8E+03	1.4E+03	8.0E+02	5.2E+02	3.8E+02	3.3E+02
Capa 10	4.3868	0.0539	0.0709	0.0650	4648.25	-1.312	-7.0776	8.4699	
1.9-111	8.6E-90	2.7E-66	5.8E-48	3.1E-35	1.0E-26	4.3E-21	1.9E-17	3.2E-15	4.4E-14
1.5E-13	1.5E-12	5.0E-11	2.7E-09	1.2E-07	3.4E-06	4.9E-05	3.6E-04	1.4E-03	2.9E-03
1.0E-02	4.1E-01	2.9E+01	9.3E+02	1.0E+04	4.9E+04	1.7E+05	2.5E+05	3.3E+05	3.8E+05
4.1E+05	5.0E+05	6.4E+05	7.7E+05	8.6E+05	8.9E+05	8.7E+05	8.2E+05	7.9E+05	7.6E+05
7.4E+05	7.1E+05	6.4E+05	5.6E+05	4.8E+05	4.0E+05	3.4E+05	2.9E+05	2.6E+05	2.5E+05
2.4E+05	2.2E+05	1.9E+05	1.6E+05	1.4E+05	1.1E+05	9.4E+04	8.1E+04	7.2E+04	6.8E+04
5.8E+04	3.4E+04	1.6E+04	6.7E+03	3.0E+03	1.5E+03	8.4E+02	5.5E+02	4.0E+02	3.4E+02
Capa 20	5.0069	1.3331	0.5056	1.1500	5970.25	-0.456	-6.5660	8.5322	
3.5E-83	2.1E-66	3.1E-48	4.3E-34	2.7E-24	9.3E-18	1.9E-13	1.1E-10	5.5E-09	4.1E-08
1.0E-07	5.8E-07	8.4E-06	1.7E-04	3.0E-03	3.6E-02	2.7E-01	1.2E+00	3.2E+00	5.5E+00
1.4E+01	2.1E+02	4.7E+03	5.3E+04	2.8E+05	7.7E+05	1.4E+06	1.9E+06	2.3E+06	2.5E+06
2.6E+06	2.8E+06	3.0E+06	3.1E+06	3.0E+06	2.7E+06	2.4E+06	2.1E+06	1.9E+06	1.8E+06
1.8E+06	1.6E+06	1.4E+06	1.2E+06	9.5E+05	7.6E+05	6.2E+05	5.3E+05	4.7E+05	4.3E+05
4.2E+05	3.8E+05	3.3E+05	2.7E+05	2.2E+05	1.8E+05	1.5E+05	1.3E+05	1.1E+05	1.0E+05
8.9E+04	5.1E+04	2.3E+04	9.4E+03	4.1E+03	2.0E+03	1.1E+03	7.3E+02	5.4E+02	4.6E+02
Capa 30	5.1258	2.8274	0.9872	4.9000	7877.28	0.732	-6.5697	8.5473	
4.1E-59	1.7E-46	7.2E-33	2.8E-22	5.6E-15	3.9E-10	5.9E-07	6.5E-05	1.1E-03	4.9E-03
9.4E-03	3.4E-02	2.4E-01	2.1E+00	1.6E+01	9.8E+01	4.1E+02	1.2E+03	2.4E+03	3.5E+03
6.6E+03	4.4E+04	3.5E+05	1.8E+06	4.6E+06	8.1E+06	1.1E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07
1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.0E+07	8.7E+06	7.1E+06	5.8E+06	4.9E+06	4.3E+06	3.9E+06
3.8E+06	3.4E+06	2.9E+06	2.3E+06	1.8E+06	1.4E+06	1.1E+06	9.1E+05	8.0E+05	7.4E+05
7.0E+05	6.4E+05	5.4E+05	4.4E+05	3.5E+05	2.8E+05	2.3E+05	1.9E+05	1.7E+05	1.6E+05
1.4E+05	7.5E+04	3.3E+04	1.3E+04	5.8E+03	2.8E+03	1.6E+03	1.0E+03	7.3E+02	6.2E+02
Capa 40	5.1600	4.8132	2.2413	100.0000	16214.24	2.282	-7.1075	8.5552	
2.3E-20	1.9E-14	4.1E-08	2.9E-03	5.5E+00	7.4E+02	1.7E+04	1.2E+05	4.0E+05	7.3E+05
9.5E+05	1.6E+06	3.4E+06	7.9E+06	1.7E+07	3.3E+07	5.4E+07	7.7E+07	9.7E+07	1.1E+08
1.3E+08	2.3E+08	3.7E+08	4.5E+08	4.4E+08	3.6E+08	2.9E+08	2.4E+08	2.0E+08	1.8E+08
1.7E+08	1.5E+08	1.1E+08	8.1E+07	5.6E+07	3.9E+07	2.9E+07	2.2E+07	1.9E+07	1.7E+07
1.6E+07	1.4E+07	1.1E+07	8.3E+06	6.1E+06	4.5E+06	3.5E+06	2.8E+06	2.4E+06	2.2E+06
2.1E+06	1.9E+06	1.6E+06	1.2E+06	9.7E+05	7.6E+05	6.1E+05	5.1E+05	4.5E+05	4.1E+05
3.5E+05	1.9E+05	7.7E+04	3.1E+04	1.3E+04	6.2E+03	3.4E+03	2.2E+03	1.6E+03	1.3E+03

TABLA 5.13

Valores de las funciones fuentes monocromáticas en cinco capas de un modelo de composición Solar, $T_{\text{ef}}=9000$ K y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente.
Los valores están expresados en $(\text{erg}/\text{cm}^2) \text{s}^{-1} \text{Å}^{-1}$.

	$\log(P_g)$	$\log(P_e)$	$\log(P_r)$	τ	T	$\log(kR)$	$\log(\rho_h)$	$\log(-x)$	
Capa 1	1.0187	-0.0522	0.8554	0.0001	7301.74	-0.529	-11.2830	8.0286	
4.8E-65	2.1E-51	1.2E-36	3.4E-25	2.8E-17	5.2E-12	1.5E-08	2.5E-06	5.5E-05	2.7E-04
5.6E-04	2.3E-03	1.9E-02	2.0E-01	2.0E+00	1.4E+01	6.7E+01	2.1E+02	4.6E+02	7.1E+02
1.4E+06	9.1E+05	7.0E+05	3.1E+06	3.1E+06	4.6E+06	6.3E+06	7.3E+06	7.9E+06	8.1E+06
1.5E+07	1.3E+07	1.0E+07	7.9E+06	6.2E+06	5.0E+06	4.1E+06	3.5E+06	3.1E+06	2.9E+06
2.6E+06	2.4E+06	2.0E+06	1.6E+06	1.3E+06	1.0E+06	8.2E+05	6.9E+05	6.1E+05	5.7E+05
5.2E+05	4.8E+05	4.1E+05	3.4E+05	2.7E+05	2.2E+05	1.8E+05	1.6E+05	1.4E+05	1.3E+05
1.1E+05	6.3E+04	2.8E+04	1.2E+04	5.1E+03	2.5E+03	1.4E+03	9.1E+02	6.7E+02	5.7E+02
Capa 10	3.1007	1.6199	0.9264	0.0650	7606.23	-0.090	-8.5952	8.6193	
8.5E-62	1.0E-48	1.4E-34	1.3E-23	5.1E-16	5.5E-11	1.1E-07	1.5E-05	2.9E-04	1.3E-03
2.6E-03	1.0E-02	7.5E-02	7.2E-01	6.3E+00	4.1E+01	1.8E+02	5.4E+02	1.1E+03	1.7E+03
2.8E+04	3.7E+04	3.3E+05	1.7E+06	3.5E+06	6.2E+06	8.4E+06	9.7E+06	1.0E+07	1.0E+07
1.1E+07	1.1E+07	1.0E+07	9.0E+06	7.6E+06	6.3E+06	5.2E+06	4.4E+06	3.9E+06	3.6E+06
3.4E+06	3.1E+06	2.6E+06	2.1E+06	1.6E+06	1.3E+06	1.0E+06	8.5E+05	7.5E+05	6.9E+05
6.6E+05	6.0E+05	5.1E+05	4.2E+05	3.3E+05	2.7E+05	2.2E+05	1.8E+05	1.6E+05	1.5E+05
1.3E+05	7.2E+04	3.1E+04	1.3E+04	5.5E+03	2.7E+03	1.5E+03	9.6E+02	7.1E+02	6.0E+02
Capa 20	3.5810	2.8879	1.3607	1.1500	9769.49	1.291	-8.3040	8.6779	
1.6E-44	2.0E-34	1.5E-23	4.0E-15	2.5E-09	1.7E-05	5.2E-03	2.0E-01	1.9E+00	5.9E+00
9.8E+00	2.6E+01	1.2E+02	6.2E+02	3.0E+03	1.2E+04	3.5E+04	7.6E+04	1.3E+05	1.7E+05
5.4E+05	1.3E+06	5.2E+06	1.4E+07	2.6E+07	3.4E+07	3.6E+07	3.6E+07	3.5E+07	3.3E+07
3.3E+07	3.0E+07	2.7E+07	2.2E+07	1.7E+07	1.3E+07	1.0E+07	8.3E+06	7.1E+06	6.5E+06
6.2E+06	5.5E+06	4.5E+06	3.5E+06	2.7E+06	2.1E+06	1.6E+06	1.3E+06	1.1E+06	1.1E+06
1.0E+06	9.1E+05	7.7E+05	6.2E+05	4.9E+05	3.9E+05	3.1E+05	2.6E+05	2.3E+05	2.2E+05
1.8E+05	1.0E+05	4.3E+04	1.7E+04	7.4E+03	3.6E+03	2.0E+03	1.3E+03	9.3E+02	7.8E+02
Capa 30	3.6988	3.3490	1.8428	4.9000	12890.09	1.484	-8.4758	8.7045	
8.3E-30	2.9E-22	3.8E-14	6.7E-08	1.2E-03	7.6E-01	4.8E+01	6.8E+02	3.3E+03	7.4E+03
1.1E+04	2.1E+04	6.1E+04	2.0E+05	5.9E+05	1.5E+06	3.0E+06	5.1E+06	7.3E+06	8.7E+06
1.3E+07	2.9E+07	6.9E+07	1.2E+08	1.4E+08	1.4E+08	1.3E+08	1.1E+08	9.9E+07	9.2E+07
8.8E+07	7.8E+07	6.3E+07	4.7E+07	3.4E+07	2.5E+07	1.9E+07	1.5E+07	1.2E+07	1.1E+07
1.1E+07	9.4E+06	7.6E+06	5.8E+06	4.3E+06	3.2E+06	2.5E+06	2.0E+06	1.7E+06	1.6E+06
1.5E+06	1.4E+06	1.2E+06	9.2E+05	7.2E+05	5.7E+05	4.6E+05	3.8E+05	3.4E+05	3.1E+05
2.6E+05	1.4E+05	5.9E+04	2.4E+04	1.0E+04	4.8E+03	2.7E+03	1.7E+03	1.2E+03	1.1E+03
Capa 40	4.8803	4.5720	3.0968	100.0000	26532.40	1.135	-7.6487	9.0628	
3.9E-06	1.1E-02	5.0E+01	2.8E+04	1.8E+06	2.4E+07	1.2E+08	3.2E+08	5.6E+08	7.3E+08
8.3E+08	1.0E+09	1.5E+09	2.1E+09	2.8E+09	3.5E+09	4.1E+09	4.5E+09	4.8E+09	4.9E+09
4.7E+09	5.1E+09	4.9E+09	3.6E+09	2.4E+09	1.6E+09	1.1E+09	8.1E+08	6.3E+08	5.5E+08
5.1E+08	4.2E+08	3.0E+08	2.0E+08	1.3E+08	8.9E+07	6.3E+07	4.8E+07	3.9E+07	3.5E+07
3.3E+07	2.8E+07	2.2E+07	1.6E+07	1.2E+07	8.7E+06	6.6E+06	5.3E+06	4.5E+06	4.1E+06
3.9E+06	3.5E+06	2.9E+06	2.3E+06	1.8E+06	1.4E+06	1.1E+06	9.1E+05	7.9E+05	7.3E+05
6.1E+05	3.2E+05	1.3E+05	5.2E+04	2.2E+04	1.0E+04	5.7E+03	3.6E+03	2.7E+03	2.2E+03

TABLA 5.14

Valores de las funciones fuentes monocromáticas en cinco capas de un modelo de composición Población II, $T_{\text{ef}} = 5500$ K y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente. Los valores están expresados en $(\text{erg}/\text{cm}^2) \text{s}^{-1} \text{\AA}^{-1}$.

	$\log(\text{Pg})$	$\log(\text{Pe})$	$\log(\text{Pr})$	τ	T	$\log(\text{kR})$	$\log(\rho)$	$\log(-x)$	
Capa 1	3.1518	-1.7761	-0.0001	0.0001	4462.18	-2.995	-8.3125	8.3494	
8.9-117	3.4E-94	1.1E-69	1.4E-50	2.7E-37	2.1E-28	1.6E-22	1.0E-18	2.1E-16	3.3E-15
1.2E-14	1.3E-13	5.2E-12	3.3E-10	1.8E-08	5.9E-07	9.7E-06	7.9E-05	3.2E-04	6.9E-04
2.6E-03	1.3E-01	9.1E+00	8.5E+04	2.4E+05	3.6E+05	4.7E+05	5.2E+05	5.4E+05	5.5E+05
6.3E+05	6.3E+05	6.4E+05	6.6E+05	7.0E+05	7.2E+05	7.1E+05	6.8E+05	6.6E+05	6.4E+05
6.3E+05	6.0E+05	5.5E+05	4.9E+05	4.2E+05	3.6E+05	3.0E+05	2.6E+05	2.4E+05	2.2E+05
2.2E+05	2.0E+05	1.8E+05	1.5E+05	1.2E+05	1.0E+05	8.6E+04	7.4E+04	6.7E+04	6.3E+04
5.4E+04	3.2E+04	1.5E+04	6.3E+03	2.8E+03	1.4E+03	8.0E+02	5.2E+02	3.8E+02	3.3E+02
Capa 10	4.9487	-0.4942	0.0709	0.0650	4648.25	-1.847	-6.5330	8.5376	
1.9-111	8.6E-90	2.7E-66	5.8E-48	3.1E-35	1.0E-26	4.3E-21	1.9E-17	3.2E-15	4.4E-14
1.5E-13	1.5E-12	5.0E-11	2.7E-09	1.2E-07	3.4E-06	4.9E-05	3.6E-04	1.4E-03	2.9E-03
1.0E-02	4.1E-01	3.0E+01	3.3E+05	3.1E+05	3.2E+05	3.2E+05	3.5E+05	3.9E+05	4.3E+05
4.7E+05	5.3E+05	6.5E+05	7.8E+05	8.6E+05	8.9E+05	8.7E+05	8.2E+05	7.8E+05	7.6E+05
7.4E+05	7.1E+05	6.4E+05	5.6E+05	4.8E+05	4.0E+05	3.4E+05	2.9E+05	2.6E+05	2.5E+05
2.4E+05	2.2E+05	1.9E+05	1.6E+05	1.4E+05	1.1E+05	9.4E+04	8.1E+04	7.2E+04	6.8E+04
5.8E+04	3.4E+04	1.6E+04	6.7E+03	3.0E+03	1.5E+03	8.4E+02	5.5E+02	4.0E+02	3.4E+02
Capa 20	5.3482	1.4058	0.5056	1.1500	5970.25	-0.374	-6.2421	8.5737	
3.5E-83	2.1E-66	3.1E-48	4.3E-34	2.7E-24	9.3E-18	1.9E-13	1.1E-10	5.5E-09	4.1E-08
1.0E-07	5.8E-07	8.4E-06	1.7E-04	3.0E-03	3.6E-02	2.7E-01	1.2E+00	3.2E+00	5.5E+00
1.4E+01	2.1E+02	4.8E+03	2.2E+05	3.5E+05	8.0E+05	1.4E+06	1.9E+06	2.3E+06	2.5E+06
2.6E+06	2.8E+06	3.0E+06	3.1E+06	3.0E+06	2.7E+06	2.4E+06	2.1E+06	1.9E+06	1.8E+06
1.8E+06	1.6E+06	1.4E+06	1.2E+06	9.5E+05	7.6E+05	6.2E+05	5.3E+05	4.7E+05	4.3E+05
4.2E+05	3.8E+05	3.3E+05	2.7E+05	2.2E+05	1.8E+05	1.5E+05	1.3E+05	1.1E+05	1.0E+05
8.9E+04	5.1E+04	2.3E+04	9.4E+03	4.1E+03	2.0E+03	1.1E+03	7.3E+02	5.4E+02	4.6E+02
Capa 30	5.3958	2.9606	0.9872	4.9000	7877.28	0.819	-6.3164	8.5796	
4.1E-59	1.7E-46	7.2E-33	2.8E-22	5.6E-15	3.9E-10	5.9E-07	6.5E-05	1.1E-03	4.9E-03
9.4E-03	3.4E-02	2.4E-01	2.1E+00	1.6E+01	9.8E+01	4.1E+02	1.2E+03	2.4E+03	3.5E+03
6.6E+03	4.4E+04	3.7E+05	1.7E+06	4.7E+06	8.1E+06	1.1E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07
1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.0E+07	8.7E+06	7.1E+06	5.8E+06	4.9E+06	4.3E+06	3.9E+06
3.8E+06	3.4E+06	2.9E+06	2.3E+06	1.8E+06	1.4E+06	1.1E+06	9.1E+05	8.0E+05	7.4E+05
7.0E+05	6.4E+05	5.4E+05	4.4E+05	3.5E+05	2.8E+05	2.3E+05	1.9E+05	1.7E+05	1.6E+05
1.4E+05	7.5E+04	3.3E+04	1.3E+04	5.8E+03	2.8E+03	1.6E+03	1.0E+03	7.3E+02	6.2E+02
Capa 40	5.4107	5.0514	2.2413	100.0000	16214.24	2.550	-6.8635	8.5827	
2.3E-20	1.9E-14	4.1E-08	2.9E-03	5.5E+00	7.4E+02	1.7E+04	1.2E+05	4.0E+05	7.3E+05
9.5E+05	1.6E+06	3.4E+06	7.9E+06	1.7E+07	3.3E+07	5.4E+07	7.7E+07	9.7E+07	1.1E+08
1.3E+08	2.3E+08	3.7E+08	4.6E+08	4.4E+08	3.6E+08	2.9E+08	2.4E+08	2.0E+08	1.8E+08
1.7E+08	1.5E+08	1.1E+08	8.1E+07	5.6E+07	4.0E+07	2.9E+07	2.2E+07	1.9E+07	1.7E+07
1.6E+07	1.4E+07	1.1E+07	8.3E+06	6.1E+06	4.5E+06	3.5E+06	2.8E+06	2.4E+06	2.2E+06
2.1E+06	1.9E+06	1.6E+06	1.2E+06	9.7E+05	7.6E+05	6.1E+05	5.1E+05	4.5E+05	4.1E+05
3.5E+05	1.9E+05	7.7E+04	3.1E+04	1.3E+04	6.2E+03	3.4E+03	2.2E+03	1.6E+03	1.3E+03

TABLA 5.15

Valores de las funciones fuentes monocromáticas en cinco capas de un modelo de composición HdC, $T_{\text{ef}} = 5500$ K y $\log g = 4$. Los valores están ordenados en longitudes de ondas crecientes, siendo éstas las mostradas en la TABLA 5.1. En cada capa se indican los valores de las condiciones astrofísicas de las mismas, según el modelo integrado previamente. Los valores están expresados en $(\text{erg}/\text{cm}^2) \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$.

	$\log(\text{Pg})$	$\log(\text{Pe})$	$\log(\text{Pr})$	τ	T	$\log(\text{kR})$	$\log(\rho)$	$\log(-x)$	
Capa 1	3.7039	0.0504	-0.0001	0.0001	4462.18	-3.564	-7.2413	7.8971	
8.9-117	3.4E-94	1.1E-69	1.4E-50	2.7E-37	2.1E-28	1.6E-22	1.0E-18	2.1E-16	3.3E-15
1.2E-14	1.3E-13	5.2E-12	3.3E-10	1.8E-08	5.9E-07	9.7E-06	7.9E-05	3.2E-04	6.9E-04
2.6E-03	1.3E-01	1.1E+01	4.4E+02	5.5E+03	2.9E+04	8.1E+04	1.5E+05	2.2E+05	2.6E+05
2.8E+05	3.7E+05	4.8E+05	5.9E+05	6.8E+05	7.2E+05	7.1E+05	7.4E+05	6.9E+05	6.7E+05
6.6E+05	6.2E+05	5.6E+05	4.9E+05	4.2E+05	3.5E+05	3.0E+05	2.6E+05	2.3E+05	2.2E+05
2.1E+05	2.0E+05	1.7E+05	1.5E+05	1.2E+05	1.0E+05	8.4E+04	7.3E+04	6.5E+04	6.2E+04
5.3E+04	3.1E+04	1.4E+04	6.3E+03	2.8E+03	1.4E+03	8.0E+02	5.2E+02	3.8E+02	3.3E+02
Capa 10	5.7547	1.5148	0.0709	0.0650	4648.25	-2.745	-5.2080	8.0821	
1.9-111	8.6E-90	2.7E-66	5.8E-48	3.1E-35	1.0E-26	4.3E-21	1.9E-17	3.2E-15	4.4E-14
1.5E-13	1.5E-12	5.0E-11	2.7E-09	1.2E-07	3.4E-06	4.9E-05	3.6E-04	1.4E-03	2.9E-03
1.0E-02	4.1E-01	2.9E+01	9.4E+02	1.0E+04	4.9E+04	1.3E+05	2.3E+05	3.1E+05	3.7E+05
4.0E+05	4.9E+05	6.3E+05	7.7E+05	8.6E+05	8.9E+05	8.7E+05	8.3E+05	7.9E+05	7.6E+05
7.5E+05	7.1E+05	6.4E+05	5.6E+05	4.8E+05	4.0E+05	3.4E+05	2.9E+05	2.6E+05	2.5E+05
2.4E+05	2.2E+05	1.9E+05	1.6E+05	1.4E+05	1.1E+05	9.4E+04	8.1E+04	7.2E+04	6.8E+04
5.8E+04	3.4E+04	1.6E+04	6.7E+03	3.0E+03	1.5E+03	8.4E+02	5.5E+02	4.0E+02	3.4E+02
Capa 20	6.2714	2.6385	0.5054	1.1500	5970.25	-1.523	-4.7990	8.1224	
3.5E-83	2.1E-66	3.1E-48	4.3E-34	2.7E-24	9.3E-18	1.9E-13	1.1E-10	5.5E-09	4.1E-08
1.0E-07	5.8E-07	8.4E-06	1.7E-04	3.0E-03	3.6E-02	2.7E-01	1.2E+00	3.2E+00	5.5E+00
1.4E+01	2.1E+02	4.7E+03	5.4E+04	2.8E+05	7.7E+05	1.4E+06	1.9E+06	2.3E+06	2.5E+06
2.6E+06	2.8E+06	3.0E+06	3.1E+06	3.0E+06	2.7E+06	2.4E+06	2.1E+06	1.9E+06	1.8E+06
1.8E+06	1.6E+06	1.4E+06	1.2E+06	9.5E+05	7.6E+05	6.2E+05	5.3E+05	4.7E+05	4.3E+05
4.2E+05	3.8E+05	3.3E+05	2.7E+05	2.2E+05	1.8E+05	1.5E+05	1.3E+05	1.1E+05	1.0E+05
8.9E+04	5.1E+04	2.3E+04	9.4E+03	4.1E+03	2.0E+03	1.1E+03	7.3E+02	5.4E+02	4.6E+02
Capa 30	6.3684	3.4780	0.9872	4.9000	7877.28	-0.548	-4.8239	8.1325	
4.1E-59	1.7E-46	7.2E-33	2.8E-22	5.6E-15	3.9E-10	5.9E-07	6.5E-05	1.1E-03	4.9E-03
9.4E-03	3.4E-02	2.4E-01	2.1E+00	1.6E+01	9.8E+01	4.1E+02	1.2E+03	2.4E+03	3.5E+03
6.6E+03	4.4E+04	3.5E+05	1.7E+06	4.7E+06	8.1E+06	1.1E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07
1.2E+07	1.2E+07	1.2E+07	1.0E+07	8.7E+06	7.1E+06	5.8E+06	4.9E+06	4.3E+06	3.9E+06
3.8E+06	3.4E+06	2.9E+06	2.3E+06	1.8E+06	1.4E+06	1.1E+06	9.1E+05	8.0E+05	7.4E+05
7.0E+05	6.4E+05	5.4E+05	4.4E+05	3.5E+05	2.8E+05	2.3E+05	1.9E+05	1.7E+05	1.6E+05
1.4E+05	7.5E+04	3.3E+04	1.3E+04	5.8E+03	2.8E+03	1.6E+03	1.0E+03	7.3E+02	6.2E+02
Capa 40	6.4990	4.9999	2.2413	100.0000	16214.24	0.557	-5.0201	8.1566	
2.3E-20	1.9E-14	4.1E-08	2.9E-03	5.5E+00	7.4E+02	1.7E+04	1.2E+05	4.0E+05	7.3E+05
9.5E+05	1.6E+06	3.4E+06	7.9E+06	1.7E+07	3.3E+07	5.4E+07	7.7E+07	9.7E+07	1.1E+08
1.3E+08	2.3E+08	3.7E+08	4.5E+08	4.4E+08	3.6E+08	2.9E+08	2.4E+08	2.0E+08	1.8E+08
1.7E+08	1.5E+08	1.1E+08	8.1E+07	5.6E+07	3.9E+07	2.9E+07	2.2E+07	1.9E+07	1.7E+07
1.6E+07	1.4E+07	1.1E+07	8.3E+06	6.1E+06	4.5E+06	3.5E+06	2.8E+06	2.4E+06	2.2E+06
2.1E+06	1.9E+06	1.6E+06	1.2E+06	9.7E+05	7.6E+05	6.1E+05	5.1E+05	4.5E+05	4.1E+05
3.5E+05	1.9E+05	7.7E+04	3.1E+04	1.3E+04	6.2E+03	3.4E+03	2.2E+03	1.6E+03	1.3E+03

4. ESTUDIO DE LA CONVERGENCIA DEL MÉTODO.

En todo cálculo numérico iterativo, la precisión alcanzada en el resultado final del mismo nos garantizará, evidentemente, la confiabilidad del mismo. Por lo tanto, una adecuada elección de un error a partir del cual establecer la finalización del ciclo es, de por sí, muy importante.

Por ello, decidimos analizar el número de iteraciones que resultan modificando el valor de ϵ_0 , disminuyéndolo hasta un valor de 1×10^{-10} , obteniéndose las siguientes cantidades de iteraciones en los modelos considerados:

TABLA 5.16
Análisis del número de iteraciones necesarias para una precisión prefijada

ϵ_0	Número máximo de iteraciones k tal que $\bar{\epsilon}^{(k)} < \epsilon_0$			
	Abundancia Solar		Abundancia Pob. II	Abundancia HdC
	$T_{ef} = 5500$ K	$T_{ef} = 9000$ K	$T_{ef} = 5500$ K	$T_{ef} = 5500$ K
1.0×10^{-3}	2	3	7	1
1.0×10^{-4}	3	4	> 60*	2
1.0×10^{-5}	3	5	> 60	2
1.0×10^{-6}	4	9	> 60	3
1.0×10^{-7}	5	13	> 60	3
1.0×10^{-8}	5	17	> 60	4
1.0×10^{-9}	6	21	> 60	4
1.0×10^{-10}	7	24	> 60	5

*Aquí se quiere indicar que existe una convergencia lenta que supera las 60 iteraciones. Se obtuvieron errores cuadráticos medios decrecientes, pero con leves variaciones entre un ciclo y el otro.

5. CONCLUSIONES.

Uno de los objetivos principales de este capítulo, como del anterior –ya que éste es continuación de aquél–, fue esencialmente el mejoramiento de los modelos preliminares, calculados a partir de una ley de distribución de temperatura inicial.

Para ello se analizaron diversos métodos que se plantean este objetivo, atacando el problema desde diversas perspectivas. En primer instancia se estudió el procedimiento propuesto por Strömgren (1944) y sistematizado por Swihart (1956); en él se plantea un ajuste por cuadrados mínimos para determinar ciertos coeficientes con que se ajusta la distribución de temperaturas del modelo, imponiendo la dos condiciones sobre el flujo: su constancia e igualación al flujo ideal. Sin embargo, nos inclinamos a analizar la modificación variacional introducida a este procedimiento, por parte de Nappier & Dodd (1974), los cuales no condujeron a resultados aceptables, tal como lo mostraron las TABLAS 4.6 a 4.8, donde si bien se aprecian que las correcciones a los coeficientes de ajustes van reduciéndose en cada paso iterativo, no conduce a una reducción sistemática en los errores del flujo calculado, respecto al ideal.

Por ello nos inclinamos a buscar en la literatura algún otro método que nos proporcionase resultados más confiables. Una de las referencias clásicas de modelación de atmósferas es, sin duda, el programa ATLAS de Kurucz, en sus distintas versiones. En su ATLAS5, Kurucz (1970) propone una simplificación del Método de Avreet & Krook (1963), el cual se basa en un método perturbativo sobre algunas variables del modelo. Su implementación, tal como lo mostraron las TABLAS 4.9 y 4.10, produjo oscilaciones en los errores alrededor de un valor medio, que no era precisamente cero.

Finalmente, analizamos el Método de Avreet & Krook (1963), el cual fuera mejorado luego por Karp (1972), contemplando la posibilidad de efectos dispersivos. Este método presenta ciertas diferencias con los anteriores, ya que a pesar de que se trata también de un modelo perturbativo, modifica tanto la variable dependiente como la independiente, siendo necesario introducir un procedimiento interpolatorio para poder definir una distribución de temperatura en la atmósfera. La implementación del mismo será un objetivo a emprender en breve.

Por otra parte, además de las condiciones astrofísicas que caracterizan a la atmósfera de una estrella, a través de la obtención de diversas variables de interés, es necesario la resolución de la ecuación del transporte, cuya solución nos permite cuantificar –entre otras cosas– la forma en que se transporta la radiación debido a los diversos procesos que ocurren en la misma. En este sentido se implementó un procedimiento iterativo, el cual ha demostrado ser muy eficiente, con una cantidad no muy elevada de iteraciones, aún con exigencias muy altas en el criterio de convergencia, tal como quedó demostrado en la TABLA 5.16. Claramente aparecen convergencias más difíciles en atmósferas en donde los procesos dispersivos logren desacoplar lo suficiente el campo de radiación de las condiciones físicas locales, y esto se logra evidentemente en las atmósferas con abundancia importante de Hidrógeno (abundancias de estrellas de Población II). Esto se puso de manifiesto cuando mostramos en las TABLAS 5.8 a 5.11, ya que si se compara la TABLA 5.10 con la 5.8 encontramos valores máximos ligeramente superiores en la composición química deficiente de metales. Teniendo en cuenta que el particular criterio de convergencia elegido le da mayor peso a los errores máximos, justifica la dificultad de convergencia del mismo.

La última etapa, que permitiría cerrar todo lo llevado adelante en estos dos últimos capítulos, es empalmar el método de corrección de la distribución de la temperatura con la resolución iterativa de la ecuación del transporte. En efecto, una vez que se hayan obtenido los flujos integrados, en cada capa, a valores próximos al ideal, y que también se haya solucionado la ecuación del transporte, se debería verificar si esta última solución es compatible con la distribución de temperaturas que conduce a la constancia del flujo. Si éste no fuera el caso, se debería repetir el ciclo, ahora con los dos procedimientos empalmados y actuando en conjunto.

Referencias

- 📖 Avrett, E.H. & M. Krook: 1963, *Ap. J.*, **137**, 874.
- 📖 Karp, A.H.: 1972, *Ap. J.*, **173**, 649.
- 📖 Krook, M.: 1963, *Ap. J.*, **137**, 874.
- 📖 Kurucz, R.L.: 1970, ATLAS: A Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres, *Smithsonian Ap. Obs. Spec. Report N° 309*.
- 📖 Nappier, W.McD. & R.J. Dodd: 1974, *Astroph. Space Sci.*, **30**, 291.
- 📖 Strömgren, B.: 1944, “*Tables of Model Atmospheres*”, Copenhagen.
- 📖 Swihart, T.L.: 1956, *Ap.J.*, **123**, 139.

Capítulo VI

EPÍLOGO

1. INTRODUCCIÓN.

La idea central en que se fundamentó nuestro trabajo de Tesis fue analizar, con un cierto grado de detalle, las principales variables físicas que intervienen, directa o indirectamente, en la modelización de atmósferas estelares, y con él, la descripción lo más completa posible del comportamiento de las variables físicas en mezclas gaseosas de diversas composiciones químicas, obteniendo, posteriormente a partir de ella, la predicción de magnitudes físicas tan relevantes como el espectro emergente de una estrella, y su correspondiente comparación con las observaciones.

También, planteamos en nuestro trabajo el estudio de ciertos algoritmos que se utilizan frecuentemente en el cálculo de los modelos referidos, estudiando la aplicabilidad, funcionalidad y limitaciones de cada uno de ellos.

En este capítulo final presentaremos, a modo de cierre, las principales contribuciones de nuestro trabajo, las conclusiones arribadas en el mismo, las limitaciones que presentan nuestros resultados y los temas pendientes de estudio, con el objeto de completar acabadamente la tarea emprendida.

2. FUNCIONES DE PARTICIÓN.

En este estudio, comenzamos realizando en el *Capítulo I* una revisión general del cálculo de las funciones de partición atómicas, con dos objetivos bien claros: por un lado, determinar si las mismas constituyen una base de datos lo suficientemente homogéneas y completas, y por el otro, si los valores de la bibliografía son verdaderamente confiables, para poder utilizarlos en diversas aplicaciones astrofísicas.

Como sabemos, para cualquier átomo o ion, las funciones de partición atómicas dependen de la densidad de la mezcla gaseosa analizada como así también de la temperatura. La costumbre ha hecho, en general, adoptar valores medios o independientes de los mismos en diversas aplicaciones astrofísicas (ionizaciones y excitaciones atómicas, determinación de composiciones químicas mediante curvas de crecimiento, etc.), no solo en el campo estelar, sino también en medios de bajas densidades e incluso en atmósferas planetarias, cálculo de variables termodinámicas como la energía libre de Helmholtz, entre otras. Si bien se conoce clásicamente su definición, se ha encontrado que son pocos los autores que toman en cuenta la contribución de la diversidad de niveles que conforman la estructura atómica. También hallamos que ha sido costumbre en la literatura, expresar los valores de las mismas en términos de expresiones de interpolación (de diversa índole).

Otro punto interesante, en el estudio llevado adelante, lo constituye las dos posturas bien definidas en el cómputo de las mismas; por un lado, la suma de las contribuciones de los distintos niveles pesados por coeficientes¹ que permiten una adecuada convergencia en los cálculos, y por el otro, la disminución de los potenciales de ionización. Ambos responden, de una manera u otra, al mismo efecto: la perturbación que sufren los átomos de las partículas vecinas, que motivan ligeras modificaciones en la energía de ligadura de los electrones, cambiando los estados energéticos de los mismos.

El tema del cálculo de las funciones de partición no es un tema completamente acabado y resuelto. En efecto, Cardona *et al.* (2005) obtuvieron funciones analíticas del comportamiento de la función de partición –en la región de validez de los gases ideales y en condiciones de ionización parcial– bajo la condición de equilibrio termodinámico. Bajo consideraciones aceptables, determinan los estados electrónicos más excitados para átomos hidrogenoides o no, definiendo para estos últimos aproximaciones hidrogénicas para la carga efectiva y los pesos estadísticos.

El principal aporte de nuestro trabajo al tema se tradujo en sendas publicaciones (Milone & Merlo, 1998a,b), en donde revisamos la temática, se analizaron detalladamente los niveles de energías actualizados y presentamos extensas tablas² con valores de funciones de partición de átomos, neutros y una vez ionizados, de las especies atómicas livianas comprendidas entre el Hidrógeno hasta el Sodio inclusive. En los mismos, utilizamos el procedimiento de disminución de los potenciales de ionización en ciertas cantidades tabuladas, las cuales dependen de las condiciones físicas del medio y pueden evaluarse de una manera más simple.

Nuestros resultados presentan algunas ventajas respecto a los de los autores analizados; en primer lugar, utilizamos datos de espectroscopía y estructura atómica más completos y modernos; asimismo, trabajamos con valores de temperaturas y disminución de potenciales de ionización considerablemente mayores; también, tomamos en cuenta los estados atómicos múltiplemente excitados en una forma más amplia que la bibliografía en el tema presentan.

Las limitaciones que presentan nuestro procedimiento no son muy relevantes, ya que una de ellas versa en la capacidad de almacenamiento que se debería disponer para los estados atómicos, y por el otro, el tiempo de cálculo involucrado; no obstante, ambos constituyen un tema menor, en un panorama de constantes avances informáticos en el tema.

¹ Estos factores reciben el nombre de *probabilidades de ocupación*, los cuales están justificados a través de una teoría fenomenológica desarrollada por Hummer & Mihalas (1988) y confirmados, tanto por mediciones espectroscópicas de laboratorio (Seaton, 1980), como a través del análisis de espectros de enanas blancas (Bergeron *et al.*, 1991).

² Ver las Tablas presentadas en el *Apéndice 1.2* del *Capítulo I*.

3. IONIZACIÓN Y FORMACIÓN DE MOLÉCULAS.

No es ninguna novedad que en las atmósferas de estrellas con temperatura efectivas bajas, llamadas comúnmente “estrellas frías”, los procesos de absorción de la radiación emergente, tanto en la región visible del espectro como en la infrarroja, se debe principalmente a la presencia de bandas moleculares. Por ello, a la hora de llevar a cabo el cálculo de la absorción continua, la contribución de estas especies moleculares –en las condiciones físicas citadas– no debe desestimarse.

En los últimos años se han llevado adelante considerables esfuerzos en este sentido, tratando a la absorción molecular bajo la filosofía de las funciones de distribución de opacidades³ (ver, por ejemplo, el trabajo de Eriksson *et al.* (1984)).

Como sabemos, el estado molecular y el de ionización de una mezcla gaseosa, determinan el número de partículas libres por unidad de volumen, relacionándose –también– con la capacidad de absorción de una determinada especie.

Las poblaciones de los estados excitados determinan la capacidad de absorción desde esos niveles. Cuando se utiliza un código de cálculo, estos estados se calculan sin que el usuario tome conciencia de ello. Atento a ello, en el *Capítulo II* analizamos y explicamos detalladamente las diferencias que se presentan entre cuatro mezclas de distintas composiciones, tanto entre los distintos átomos que aportan electrones al medio, como así también en sus estados de ionización y moleculares.

Las composiciones químicas utilizadas presentan características muy diferenciadas entre sí, algunas de las cuales son de interés particular para nosotros: Solar (como referencia estándar), de Población II (deficiente en metales), otra HdC (de He muy deficiente en H y enriquecida en C) y, finalmente, en una HdCII (de He, algo enriquecida en C, pero deficiente en todos los metales).

En nuestro análisis tomamos en consideración la formación de H^- y C^- ; para las temperaturas más bajas incluimos la formación de moléculas: H_2 y H_2^+ (en el caso de la composición Solar o la mezcla deficiente en metales), y C_2 y C_2^+ (en la abundancia deficiente en Hidrógeno). Dado que la formación de moléculas puede afectar severamente la densidad de partículas en el medio, se procedió, también, a realizar un estudio general de la formación molecular, analizando la importancia de cada contribuyente a la misma y su importancia relativa. En este sentido, corregimos el método propuesto por Mihalas (1967), para que el mismo no produzca errores sistemáticos (Milone & Merlo, 2002).

Con los valores de las funciones de partición –calculadas en el capítulo anterior– y un conjunto de expresiones de interpolación que proporcionan los coeficientes de disociación molecular recopilados por Mihalas (1967) –necesarios para evaluar la densidad molecular–, se llevó adelante el correspondiente estudio de la ionización de cada mezcla gaseosa analizada, determinando la contribución de electrones al medio en diversas condiciones físicas de temperaturas y presiones gaseosas.

En esta parte del trabajo se confeccionaron una serie de tablas y gráficos que nos permitieron analizar las particulares condiciones físicas de cada una de las abundancias

³ Fueron introducidas originalmente por Labs (1951) y luego sistematizadas por Kurucz (1979).

elegidas, identificando procesos de ionizaciones y recombinaciones de especies atómicas y ionizadas, como así también los principales contribuyentes de electrones al medio.

Cuando el C se convierte el segundo elemento más abundante después del H, como sucede en las estrellas HdC, resulta interesante conocer cómo el C toma el rol del H. En este aspecto, nuestro estudio permitió aportar los siguientes resultados:

- La elaboración, por una parte, de un procedimiento iterativo simple que calcula la relación (P_g, P_e, T) , el cual resulta ser eficiente en los resultados, económico en los tiempos de cálculo y muy sencillo de implementar⁴ en los algoritmos numéricos de cálculo de modelos de atmósferas estelares (Merlo (1992); Milone & Merlo (1994)). Asimismo, logramos mejorar un procedimiento de equilibrio molecular establecido por Mihalas (1967), con el objeto de obtener resultados mas precisos (Milone & Merlo, 2002).
- La abundancia dominante de He (en la mezcla HdC), y del H ($N_H/N_{He} \approx 10$ en la abundancia Solar), determina los valores más bajos alcanzables en la relación $\log(P_g/P_e)$ vs $\log P_e$ en un caso y en otro (0.176 y 0.283, respectivamente) (Merlo & Milone, 2001).
- Para temperaturas relativamente altas ($T \geq 25200 K$), la densidad relativa de electrones a átomos es mayor en la mezcla HdC que en la Solar; para temperaturas intermedias, el H es el principal donante de electrones y la mezcla Solar es la que posee una mayor densidad relativa de electrones; para temperaturas relativamente bajas y/o presiones electrónicas suficientemente altas, la mezcla HdC es ligeramente más rica en metales fácilmente ionizables que la Solar, causando que la primera tenga una densidad mayor en electrones libres (estos hechos están reflejados en las relaciones $\log P_g$ vs. $\log P_e$ de las diferentes composiciones químicas, con diferencias de hasta un orden de magnitud en temperaturas bajas e intermedias).
- Para $T \geq 25200 K$, y dentro del rango de $\log P_e$ analizado, las densidades electrónicas por unidad de masa son significativamente mayores en las mezclas Solares y de Población II que en la HdC; por el contrario, para bajas temperaturas y/o presiones electrónicas suficientemente altas, las densidades electrónicas por unidad de masa es ligeramente superior en la mezcla HdC que en la solar. De esto podremos inferir que para aquellos valores de temperaturas y presiones electrónicas que tengan a la dispersión Thomson como su principal fuente de opacidad, la mezcla HdC deberá ser menos opaca que la abundancia solar o de Población II; mientras que para temperaturas intermedias y bajas, a pesar de que las condiciones fueran propicias para la formación del ión C^- y para que éste sea una importante fuente de opacidad en la mezcla HdC, el ión C^- nunca podrá alcanzar la importancia que tiene el ión H^- en la atmósfera solar debido a su pobre abundancia.
- Finalmente, para temperaturas intermedias y bajas, el C mimetiza en la mezcla HdC el comportamiento que tiene el H en la composición Solar, tanto como donante de electrones, como formador de moléculas e iones negativos, como así también fuente de opacidad. Esta similitud, sin embargo, es solo cualitativa, no cuantitativa, puesto que la abundancia de C en la mezcla HdC es por lejos inferior a la del H en una composición Solar.

⁴ Errores relativos menores a 2×10^{-6} y 1×10^{-5} en $\log P_e$ y P_e , respectivamente, con no más de 20 iteraciones.

Finalmente, también señalamos en este capítulo que no es necesario utilizar valores precisos de las funciones de partición atómicas en el cálculo de las presiones electrónicas, para las temperaturas y densidades electrónicas presentes en las atmósferas estelares; es suficiente el sólo el empleo de valores medio. Este hecho reduce el tiempo de cómputo y la capacidad de memoria necesaria para almacenar información sobre los niveles de energía atómicos.

4. ABSORCIÓN CONTINUA.

Los valores del coeficiente de absorción continua, por gramo de material estelar, dependerá de qué tipo de transiciones se consideren en el cálculo, y éstas –a su vez– de la abundancia que se considere en el mismo.

Una descripción realista del fenómeno exige hacer uso de los resultados de la Mecánica Cuántica, lo que a la hora de implementarlo en un código numérico puede ocasionar dificultades adicionales.

Esto motivó que históricamente se plantearan aproximaciones o expresiones de interpolación, que simplifican los cálculos, con el mínimo de sacrificios en la precisión de los resultados. Por ello, una descripción fenomenológica del átomo mediante el modelo de Bohr, si bien no es del todo realista, tampoco produce significativas diferencias en las magnitudes astrofísicas de interés.

Sin embargo, cuando aparecen discrepancias, siempre se trató de superarlas introduciendo correcciones que afectasen, de la menor manera posible, a las expresiones. Los programas de cálculo de modelos de atmósferas estelares actuales, los cuales fueron escritos originalmente cuando los ordenadores tenían poca capacidad de almacenamiento y eran extremadamente lentos, pueden aún utilizar las aproximaciones utilizadas en aquella época para, entre otras cosas, calcular opacidades. No hace falta recordar el gran avance que se ha logrado en pocas décadas en la tecnología computacional, pero a pesar de ello, aquellas aproximaciones, que han subsistido en el tiempo, pueden introducir errores (Kurucz, 1994).

Es por ello que en el *Capítulo III* analizamos el procedimiento de cálculo introducido en la evaluación numérica de la opacidad debida a átomos hidrogenoides, como así también algunas especies metálicas de interés: C, Mg, Al y Si. En este último caso, y aprovechando todo el trabajo desarrollado en el primer capítulo de la Tesis, analizamos con cierto detalle las distintas configuraciones electrónicas de los átomos metálicos citados, y los valores más actuales de las secciones eficaces correspondientes. Esto nos condujo a obtener coeficientes de absorción más realistas.

También se analizaron las influencias de los distintos procesos dispersivos, tanto en el coeficiente de absorción monocromático como así también en el coeficiente medio de Rosseland. Respecto a este último, hicimos un análisis particular de criterios convenientes de cálculo en situaciones físicas y medios gaseosas (abundancias) donde cobra cierta importancia las absorciones metálicas. Todas estas consideraciones estuvieron orientadas hacia la futura implementación de cálculo de un modelo de atmósfera.

Las conclusiones de nuestro trabajo en estos temas los indicamos a continuación:

- Los factores de Gaunt (1930) pueden ser aproximados tomándolos directamente iguales a la unidad (Ünsold, 1938), o por fórmulas asintóticas (Menzel & Pekeris, 1935; Gray, 1976, 1992), o por otras polinómicas (Gingerich, 1964, 1969; Mihalas, 1967). Hummer (1988) extendió, para las transiciones libre-libre los cálculos de Karzas & Latter (1961), representando mediante ajuste por polinomios de Chebyshev los valores calculados.
- De nuestro estudio de los factores de Gaunt ligado-libre podemos afirmar que para números cuánticos principales bajos ($n \leq 6$), la aproximación de Gingerich (1964) es buena, siendo necesario acudir a la aproximación de Menzel & Pekeris (1935) para números cuánticos principales mayores. Con ello se logran errores menores al 1% (Milone & Merlo, 1994). Sin embargo, para obtener precisiones más elevadas es necesario acudir a los valores tabulados de Karzas & Latter (1961).
- En lo que respecta a los factores de Gaunt libre-libre, encontramos que para $T < 20000$ K es muy satisfactoria la primera aproximación de Gingerich (1964). Sin embargo, aunque si es permisible una disminución en la precisión de los resultados, se puede utilizar la segunda aproximación de Gingerich (1969) para cualquier valor de temperatura. Por el contrario, y generalmente en casos en que sea importante la absorción libre-libre, para lograr resultados más precisos que el 1%, recomendamos el uso de la aproximación de interpolación bidimensional de Hummer (1988)
- En temperaturas intermedias ($5000 \leq T \leq 7000$ K) la absorción del H es importante; para temperaturas mayores, la dispersión Thomson de electrones juega un rol preponderante, salvo para presiones electrónica altas que, por efectos de la disminución en los procesos de ionización, hace que el H o el He aporte a la opacidad.
- Nuestros cálculos conducen a afirmar que no se puede adoptar un único valor límite de serie en la contribución ligado-libre para la absorción del Hidrógeno, apareciendo una dependencia compleja entre este valor límite con el valor del límite inicial del nivel (a partir del cual efectuar la suma) y la temperatura T . No obstante ello, establecimos como receta simple, precisa y eficiente de cálculo la siguiente, la cual no depende de la temperatura:
 - $\lambda \leq 912 \text{ \AA}$: $n_0 = 1, m = 3$
 - $912 \text{ \AA} < \lambda \leq 3647 \text{ \AA}$: $n_0 = 2, m = 7$
 - $3647 \text{ \AA} < \lambda \leq 91178 \text{ \AA}$: $n_0 = 3, 4, \dots, 10, m = 17$
($m = 15$ resulta en muchas ocasiones preciso)
- En lo que a absorción se refiere, resulta notable la importancia del ion H⁺. Gran parte de la estructura fotosférica del Sol (y de estrellas similares) está determinada por él. Lo curioso es que en estrellas de Población II, todavía es importante la absorción del H⁺ en capas superficiales e intermedias; luego es superado por el Hidrógeno. En estrellas deficientes en Hidrógeno, el ion jugaría un papel secundario en las capas más superficiales, pero la absorción preponderante se debe al C, Mg, Al y Si.
- En longitudes de onda corta, la absorción de los metales configura en cierta medida el perfil de la absorción continua en todas las abundancias químicas analizadas. Sin embargo en la abundancia HdC, y para temperaturas moderadas, da forma al perfil en todo el rango de longitudes de onda analizadas.

- En longitudes de onda muy cortas (menores que los 1000 Å), el H (hasta el límite de Lyman: 911.8 Å) y el He (hasta 504.3 Å), en sus transiciones desde el nivel fundamental, dan forma al perfil de la absorción continua.
- En lo relativo a las absorciones, establecimos criterios para el cálculo del coeficiente de absorción medio de Rosseland para las distintas abundancias utilizadas (Solar-Población II-HdC). En este sentido, definimos dos particiones distintas para la integración en longitudes de onda, advirtiendo algunas discrepancias en los valores obtenidos de la opacidad media para valores elevados de la presión electrónica, los cuales se deben, a nuestro juicio, a que en estas situaciones físicas es necesario la inclusión de otros absorbedores que unificarían los resultados obtenidos.
- Teniendo en cuenta que dicho coeficiente medio es una promediación armónica, en la cual se da mayor peso a aquellas frecuencias con menor valor del coeficiente monocromático de absorción (y por lo tanto donde mayor transporte de radiación se produce), resulta entendible que los valores del coeficiente medio de Rosseland, para la mezcla HdC, están muy por debajo que los de las otras abundancias debido a la absorción de los metales considerados en nuestros cálculos, de abundancias relativas mayores que en las otras abundancias. Además, la ligera superioridad de la absorción media en las atmósferas deficientes en metales (Población II) se justifica debida a la absorción casi exclusiva del Hidrógeno, que la transforma en una fotosfera un poco más transparente que la Solar, debido a la presencia en esta última de incipientes absorbedores metálicos.

5. MODELOS DE ATMÓSFERAS.

En nuestro objetivo primario de disponer de algoritmos propios, que nos permitan calcular la estructura fotosférica de atmósferas de Carbono con deficiencia en Helio, llevamos adelante una secuenciación de análisis y estudios –incluidos en los capítulos anteriores–, teniendo en meta aquella premisa inicial.

Como vimos en capítulos anteriores de esta Tesis, la estructura de la atmósfera está principalmente determinada por el coeficiente de opacidad del material constitutivo. Las contribuciones a la misma puede ser dividida en un aporte debido a las transiciones continuas y la debida a las líneas, y esta división está determinada por la naturaleza de la relación entre opacidad y frecuencia. En efecto, el coeficiente de opacidad continua varía lenta y suavemente con la frecuencia (excepto, claro, en los límites de las series espectrales respectivas). Sin embargo, la opacidad de las líneas es una función de comportamiento más abrupto con la frecuencia.

En los *Capítulo IV* y *V* integramos todos nuestros análisis y conclusiones, a los efectos de establecer un código de cálculo que nos permitiese obtener la estructura física de una atmósfera estelar. Nuestros resultados preliminares mostraron resultados acordes con nuestras hipótesis de trabajos, los cuales serán objeto de mejoras y optimización a corto plazo, ya que una de las aplicaciones de nuestros resultados será la modelización de atmósfera de estrellas HdC. Al respecto recordemos que en las atmósferas de estrellas frías, las absorciones de líneas cobran una relevante importancia, principalmente la molecular, ya que la misma produce –por la gran cantidad de transiciones– el “bloqueo” de la radiación saliente, efecto se

denomina generalmente *blanketting*. También debe destacarse el fenómeno convectivo que aparecen en dichas atmósferas.

En las estrellas de Carbono, debido al incremento de este elemento y sus especies moleculares respecto a las estrellas que consideramos “normales” (abundancia Solar), aparecen bandas de absorción en el rango visual e infrarrojo del espectro. De las moléculas diatómicas, las más significantes son CN, CO y C₂; mientras que de las moléculas poliatómicas, son más importantes los aportes de C₃, CH₂, HCN y SiC₂ (Alksne *et al.*, 1991, p. 65). El radical CN tiene el mayor efecto sobre la estructura de la atmósfera, ya que su abundancia se debe a la importante abundancia de C y N en la misma; en las capas más externas de la atmósfera, es el CO el que juega un rol importante, aunque –al igual que la mayoría de las moléculas– sus transiciones electrónicas ocurren en la región ultravioleta del espectro y se tornan insignificante, debido a la gran cantidad de moléculas presentes (Alksne *et al.*, 1991, p. 66).

Luego, como una primera aproximación al estudio de estas atmósferas peculiares, aplicaremos nuestros programas para describir las condiciones físicas de las fotosferas de estrellas de Carbono. Al respecto, Johnson & Yorke (1986) presentaron modelos de atmósferas de estrellas R con hipótesis de trabajo similares a las nuestras, esto es, estratificación plano-paralela, en ETL y con geometría horizontalmente homogénea. Si bien los autores también consideraron el *blanketting* debido a las líneas atómicas y de las líneas moleculares del CN, CO, C₂, CH, NH, OH y MgH –efecto que hasta ahora no hemos incluido en nuestros algoritmos– constituyen un buen punto de partida para poner a prueba nuestros códigos.

En este sentido, adaptaremos nuestras abundancias para compatibilizarlas con la utilizada con los autores, en particular utilizando ahora una relación $(C/O) = 1.74$, un valor de $\log g = 2$ y valores de temperaturas efectivas de 4200 K, 4600 K, 5000 K y 5400 K.

6. TEMAS QUE DEBERÁN ANALIZARSE A LA BREVEDAD

Cuando se emprende una tarea en base a ciertos objetivos preestablecidos, generalmente siempre aparecen otros nuevos que nos desvían ligeramente del camino trazado, ya que los mismos merecen también nuestra atención. Y nuestro caso no fue una excepción. Esto condujo a que hayan quedado algunas temáticas que debemos analizar y profundizar con el mismo rigor con fueron tratados los temas descriptos en este trabajo.

6.1. CAPAS MUY SUPERFICIALES EN LAS ATMÓSFERAS ESTELARES.

El procedimiento de conseguir la correcta distribución de temperatura, según los errores que se encuentran en los flujos de energía, pueden suministrar información confiable (en la temperatura y las restantes variables físicas) hasta profundidades ópticas de $0.1 \leq \tau \leq 0.5$. Para las capas más superficiales, hay un real desacople entre la radiación y la materia (jugando un papel importante la dispersión), resultando más apropiado trabajar con la derivada en el flujo, consiguiendo que la misma sea constante e igual a cero con la profundidad óptica; pequeños errores en el flujo pueden producir errores inaceptables en su derivada (y, en consecuencia, una incorrecta determinación de la estructura fotosférica). Se debe, entonces, conseguir un empalme suave entre lo que acontece en las capas profundas y las superficiales.

6.2. CONVECCIÓN.

En términos generales podemos decir que el equilibrio radiativo prevalece en estrellas de tipos espectrales A y más tempranos; en tipos espectrales más tardíos, debido a las condiciones locales de temperatura y densidad, el rápido incremento de la opacidad en las regiones donde el Hidrógeno se está ionizando y excitando, provoca que el gradiente de temperatura requerido para transportar el flujo radiativamente sea muy elevado, de modo tal que la atmósfera se vuelve inestable frente a la convección.

En estos casos, clásicamente se aplica el criterio establecido por Schwarzschild (Menzel, 1966, p. 25), para determinar las regiones de la atmósfera en las que ocurre este fenómeno, y la teoría de longitud de mezclado o “*mixing-length*” (ver, por ejemplo, Böhm-Vitense, 1958) –muchas veces escalada a alguna variable del modelo– para el cálculo del aporte convectivo al flujo total. Asimismo, también deben ser considerados los efectos de ionización y de la presión de radiación (Chandrasekhar, 1957).

Dada la importancia que cobra la convección en las capas fotosféricas de estrellas de tipos espectrales intermedio y tardíos, su incorporación en el cálculo de nuestros modelos se vuelve imprescindible. La convección es un punto que prioritariamente será tomado en consideración en nuestros próximos códigos de trabajo.

6.3. BLANKETTING.

El *blanketting* de la radiación, tanto de las líneas atómicas como la de las moleculares, afecta la estructura de la atmósfera de dos maneras (Alksne *et al.*, 1991): introduciendo el efecto retrotérmico y enfriando las capas superficiales. El primero se debe a que un número elevado de líneas se forman en las capas más internas de la atmósfera ($\tau \sim 0.1-1.0$) y retienen la radiación, filtrándose entre los “bordes” de aquéllas; esto conduce a un incremento del nivel del continuo y, consecuentemente, a una mayor temperatura. Sin embargo, el efecto retrotérmico es muy distinto en las bandas moleculares hacia las longitudes de onda más cortas, alejados del máximo de la distribución espectral de energía de la estrella. Debido a que la absorción de la radiación en las bandas está acompañada de su redistribución en frecuencias, en vez de que los fotones más energéticos se absorban en estas bandas, se emiten fotones de longitudes de onda cortas en la región de máxima radiación espectral. Esto conduce a un suministro de energía del campo de radiación hacia la mezcla gaseosa y, consecuentemente, a un incremento de su temperatura. En las estrella de Carbono, este rol lo juega las moléculas de C_2 , un sistema de bandas Swam muy brillantes en el visual y las moléculas de CN.

Por el contrario, las moléculas con líneas intensas se forman en las capas superiores y más frías de la atmósfera, especialmente si estas bandas de absorción se encuentran en la región de máxima radiación o hacia las longitudes de onda más cortas del mismo. En las estrellas de Carbono, este calentamiento es provocado por las bandas moleculares del CO (Alknis *et al.*, 1991). Los estados fundamentales rotativos-oscilatorios correspondientes se forman en el infrarrojo cercano y presentan líneas intensas de absorción bien separadas, con intervalos libres de *blanketting* entre ellas. Por lo tanto, la radiación fluye libremente a través de ellos, no habiendo ningún efecto retrotérmico en este caso. Sin embargo, a medida que nos acercamos a la superficie de la atmósfera, la intensidad de las líneas decrece debido a la disminución de la densidad del gas. Los rangos de frecuencias que han sido bloqueadas por

estas líneas, ahora se tornan accesibles para el flujo de la radiación. Debido a que el mismo debe conservarse, esta redistribución del flujo en un intervalo mucho mayor de frecuencias, disminuye el nivel del continuo y, consecuentemente, la temperatura.

7. CONSIDERACIONES FINALES

La experiencia personal de haber trabajado en estos temas nos ha permitido, por un lado, profundizar aspectos que generalmente no se tienen en cuenta en la modelización de fotosferas, familiarizándonos con temas que consideramos son de interés, tal el caso de los métodos matriciales para integrar la ecuación del transporte.

Por otra parte, y no menos importante, es la familiaridad que hemos adquirido con la escritura de programas de cómputo (frecuentemente complejos) que permiten encarar la solución de diversos problemas relativos a las atmósferas estelares. En este aspecto, pudimos comprender muchas aproximaciones y/o consideraciones puestas de manifiesto en la bibliografía clásica del tema, llegando incluso a cuestionar algunas de ellas, siguiendo – quizás– el consejo que nos legara alguna vez Oppenheimer⁵, cuando afirmara que *“un científico debe tomarse la libertad de plantear cualquier cuestión, de dudar de cualquier afirmación, de corregir errores”*.

También, pudimos elaborar códigos propios de cálculo de modelos, conociendo al detalle el funcionamiento de los mismos, conociendo sus ventajas y limitaciones. Los mismos son programas de cálculo “abierto” y flexible, en el cual se permite modificar, introducir o quitar elementos (en forma de módulos o subprogramas) a voluntad; v.gr., composición química, absorciones, dispersiones, mecanismos de transporte de energía, adaptación de nuevos módulos de programas, etc.

Somos conciente que durante medio siglo se han venido elaborando programas cada vez más elaborados y refinados, los cuales algunos son de uso público y pueden ser utilizados por la comunidad astronómica, gracias a la buena voluntad de sus autores. Desde un principio nuestro objetivo no fue competir con ellos, solamente disponer de “herramientas caseras” – bien conocidas por nosotros– a partir de las cuales podamos disponer de resultados confiables, dentro de las limitaciones con que los mismos fueron diseñados.

Consideramos que el objetivo se ha alcanzado, pero la tarea no se ha concluido. Como comentamos anteriormente, han quedado temas por seguir investigando e incorporando a nuestros programas, lo que constituyen nuevos desafíos a seguir enfrentando en el futuro inmediato.

No queremos terminar estas líneas sin recordar una frase de Gandhi⁶, que resume –si se quiere– la tarea emprendida, cuando dijo que *“nuestra recompensa se encuentra en el esfuerzo y no en el resultado; un esfuerzo total es una victoria completa”*.

⁵ Julius Robert Oppenheimer (1904-1967), físico estadounidense.

⁶ Mahatma Gandhi (1869-1948), político y pensador hindú.

Referencias

- Alksne, Z.K., Alksnis, A.K. & U.K. Dzervitis: 1991, “*Properties of Galactic Carbons Stars*”, Orbit Book Company, Inc.
- Avrett, E.H. & M. Krook: 1963, *Ap. J.*, **137**, 874.
- Bergeron, P., Wesemael & G. Fontaine: 1991, *Ap. J.*, **367**, 253.
- Böhm-Vitense, E.: 1958, *Zeitschrift für Astrophysik*, **46**, 108.
- Cardona, O., Simonneau & L. Crivellari: 2005, *Rev. Mex. Fís.*, **51** (5), 476.
- Chandrasekhar, S.: 1957, “*An Introduction to the Study of Stellar Structure*”, Dover, New York.
- Eriksson, K., Gustaffson, B., Jørgensen, U.G. & A. Norlund: 1984, *Astron. Astrophys.*, **132**, 37.
- Gaunt, J.A.: 1930, *Phil. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A*, **229**, 1045.
- Gingerich, O.: 1964, Proc. 1st Harvard–Smithsonian Conf. on Stellar Atmospheres, *Smithsonian Ap. Obs. Spec. Report N° 167*.
- Gingerich, O.: 1969, *Theory and Observation of Normal Stellar Atmospheres*, Proc. 3rd Harvard-Smithsonian Conf. on Stellar Atmospheres, The M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts, p. 399.
- Gray, D.F.: 1976, “*The observation and analysis of stellar photospheres*”, 1st edit., Wiley & Sons, New York.
- Gray, D.F.: 1992, “*The observation and analysis of stellar photospheres*”, 2nd edit., Cambridge University Press.
- Hummer, D.G.: 1988, *Ap. J.*, **327**, 477.
- Johnson, H.R. & S.B. Yorke: 1986, *Ap. J.*, **311**, 299.
- Karp, A.H.: 1972, *Ap. J.*, **173**, 649.
- Karzas, W.J. & R. Latter: 1961, *Ap. J. Suppl.*, **6**, 167.
- Krook, M.: 1963, *Ap. J.*, **137**, 874.
- Kurucz, R.L.: 1970, ATLAS: A Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres, *Smithsonian Ap. Obs. Spec. Report N° 309*.
- Kurucz, R.L.: 1979, *Ap. J.*, **49**, 1.
- Kurucz, R.L.: 1994, comunicación privada.
- Labs, D.: 1951, *Zeitschrift für Astrophysik*, **29**, 199.
- Menzel, D. (edit.): 1966, “*Select Papers on the Transfer of Radiation*”, Dover: New York.
- Menzel, D.H. & Pekeris, C.L. (MP): 1935, *M.N.R.A.S.*, **96**, 77.
- Merlo, D.C.: 1992, Trabajo Especial de la Licenciatura en Astronomía. Director: Dr. Luis A. Milone, Famaf (UNC).
- Merlo, D.C. & L.A. Milone: 1992, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **37**, 28.
- Merlo, D.C. & L.A. Milone: 2003, *Astroph. Space Sci.*, **288**, 223.
- Mihalas, D.: 1967, *Methods in Computational Physics*, **7**, 1, Academic Press.
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1994, *Astroph. Space Sci.*, **220**, 235.
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998a, *Astroph. Space Sci.*, **359**, 173.
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998b, *Trabajos de Astronomía Serie “A” N° 2/98*, FaMAF (UNC).
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 1998c, *Bol. Asoc. Arg. Astr.*, **42**, 29.
- Milone, L.A. & D.C. Merlo: 2002, “*Proceeding de la X Reunión Regional de Astronomía*”, *Rev. Mex. Astr. Astrof.*, **14**, 123.

- 📖 Nappier, W.McD. & R.J. Dodd: 1974, *Astroph. Space Sci.*, **30**, 291.
- 📖 Seaton, M.J.: 1990, *J. Phys. B*, **23**, 3255.
- 📖 Strömgren, B.: 1944, “*Tables of Model Atmospheres*”, Copenhagen.
- 📖 Swihart, T.L.: 1956, *Ap. J.*, **123**, 139.
- 📖 Unsöld, A.: 1938, “*Physik der Sternatmosphären*”, Springer-Verlag, Berlin.
- 📖 Wilson, O.C.: 1961, *Ap. J.*, **133**, 457.

Agradecimientos

Todo el trabajo desarrollado y presentado aquí, no podría haberse culminado sin el aporte de las siguientes personas e Instituciones, las cuales me es muy grato citar a continuación:

- ☺ A mis dos amores, mi esposa Silvia Moyano Lagord y mi hijo Leonardo Braian, quienes me brindaron siempre su apoyo incondicional y el soporte afectivo necesario para continuar y finalizar este emprendimiento.
- ☺ Al Dr. Luis Milone, por su constante apoyo en todos estos años de trabajo juntos e ininterrumpido, y haberse adaptado a las diferentes etapas de mi vida.
- ☺ A las Miembros del Tribunal, Dras. Olga Pintado, Zulema González de López García y Mercedes Gómez, por aceptar las “condiciones de contorno” de este trabajo y sus acertadas observaciones, que permitieron pulir y optimizar la presentación del mismo.
- ☺ A mis familiares, amigos y colegas, tanto del Observatorio Astronómico como de la FaMAF, quienes de un modo u otro me dieron su apoyo explícito e implícito en la prosecución de este objetivo.
- ☺ A la Secretaría de Ciencia y Tecnología (SeCyT) de la Universidad Nacional de Córdoba, por el usufructo de una Beca Doctoral que me permitió llevar adelante una gran parte de este trabajo.

In Memoriam. No quiero pasar este momento sin recordar a dos personas que abandonaron la existencia física, pero que continúan en mis recuerdos. A mi abuela Mariana, a quien le hubiera gustado tanto compartir conmigo este logro tan ansiado; y a una querida colega del Observatorio, la Dra. Mirta Mosconi, quien aún en sus últimos tiempos en la Institución, tenía el tiempo de interesarse en nuestro trabajo y alentarnos en su finalización.