



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

Curso Académico:

*A mi familia y amigos, ya que sin su apoyo
no hubiera llegado hasta aquí.*

*A mi tutor, Igor Mijail Tkachenko Gorski
por toda su ayuda durante estos años
y por depositar su confianza en mí.*

*A Lluís Coloma de la Fuente, por acompañarme
y hacer posible este gran proyecto.*

*A Denis Dubovtsev y Saule Syzganbayeva de
la Universidad Nacional al-Farabi de
Kazajstán, por su gran colaboración.*

RESUMEN

El objetivo de este proyecto es construir un algoritmo fiable que permita estimar propiedades dinámicas de materia densa a elevadas temperaturas o plasmas fuertemente acoplados, caracterizados por un gran rango de variación de temperatura (10^4 - 10^7 K) y densidad (10^{20} - 10^{24} partículas/cm³), abarcando algunos órdenes de magnitud.

La materia densa ha sido objeto de investigación durante las últimas décadas, debido a su potencial tecnológico. Principalmente, destaca la posibilidad de obtener energía mediante una reacción de fusión controlada (por confinamiento inercial o magnético), que puede suponer uno de los mayores hitos en el campo de la obtención de energía en la historia.

Sin embargo, uno de los principales problemas de un plasma denso es la dificultad para medir las propiedades dinámicas del mismo, debido a las condiciones de temperatura y densidad a las que se encuentra. Por lo tanto, es necesario un modelo fiable que permita estimar sus propiedades, a partir de parámetros conocidos. Actualmente, los modelos existentes (*RPA*, *Mermin approximation*, *FCDF model*...) solo son aplicables bajo ciertas condiciones, debido a que se basan en aproximaciones tradicionales.

Con el objetivo de realizar una evaluación analítica de las propiedades dinámicas de los mencionados sistemas, se sugiere una aproximación matemática alternativa que sea capaz de tener en cuenta automáticamente todas *sum rules* (una serie de leyes de conservación). Las características específicas de los sistemas físicos incluidos en las *sum rules* son calculados independientemente utilizando métodos estándar de estadística cuántica dentro de la teoría de reacción lineal de Kubo. Esta aproximación reduce los cálculos del factor de estructura dinámico y de los parámetros de los modos colectivos para el conocimiento de las propiedades estáticas, obtenidas mediante el ajuste de los correspondientes datos computacionales. La validez de la aproximación se confirma mediante la comparación con los datos de simulaciones que hay disponibles.

Palabras clave: plasma, materia densa, temperatura, densidad, propiedades dinámicas, función dieléctrica, método de momentos.

RESUM

L'objectiu d'aquest projecte és la construcció d'un algoritme fiable que permeti dur a terme estimacions de les propietats dinàmiques de la matèria densa a altes temperatures amb plasmes fortament acoblats, que es caracteritzen per tindre un gran nombre de valors en els quals la temperatura (10^4 - 10^7 K) i la densitat (10^{20} - 10^{24} partícules/cm³), varien abastant alguns ordres de magnitud.

La matèria densa ha estat un objecte d'investigació durant les últimes dècades gràcies al seu potencial tecnològic. Principalment, cal destacar la possibilitat d'obtenir energia mitjançant la fusió controlada (per confinament inercial magnètic), que pot suposar un dels majors avanços en el camp d'obtenció d'energia de la història.

No obstant això, un dels principals problemes d'un plasma dens és la dificultat per mesurar les seues propietats dinàmiques, a causa de les condicions de temperatura i densitat que presenta. És per això que és necessari un model fiable que permeti estimar les propietats del plasma partint de paràmetres coneguts. Actualment, els models existents (*RPA*, *Mermin approximation*, *FCDF model*...) només poden aplicar-se en certes circumstàncies, ja que es fonamenten en aproximacions tradicionals.

Amb l'objectiu de dur a terme una avaluació analítica de les propietats dinàmiques dels sistemes nomenats, es suggereix una aproximació matemàtica alternativa que siga capaç de tindre en consideració de forma automàtica totes les *sum rules*, que són una sèrie de lleis de conservació. Les característiques específiques dels sistemes físics inclosos a les *sum rules* es calculen de forma independent mitjançant mètodes estàndard d'estadística quàntica seguint el formalisme de la teoria de reacció lineal de Kubo. Aquesta aproximació redueix els càlculs del factor d'estructura dinàmica i dels paràmetres dels modes col·lectius per al coneixement de les propietats estàtiques, obtingudes gràcies als ajustos duts a terme amb les dades computacionals. La validesa de l'aproximació es confirma en comparar els resultats amb les dades de les simulacions disponibles.

Paraules clau: plasma, matèria densa, temperatura, densitat, propietats dinàmiques, funció dielèctrica, mètode de moments.

ABSTRACT

The aim of the project is to construct a closed algorithm of reliable evaluation of dynamic characteristics of warm dense matter or strongly coupled plasmas characterized by a wide range of variation of temperature (10^4 - 10^7 K) and density (10^{20} - 10^{24} particles/cm³), spanning a few orders of magnitude.

The dense matter has been investigated for last decades, due to his technologic potential. Mainly, it can be used in order to obtain energy by a controlled fusion reaction (inertial confinement or magnetic), that could become a landmark in the energy generation field.

Nevertheless, one of the main problems of a strongly coupled plasma is the difficulty of measuring his dynamic properties, due to the extreme temperature and density. Therefore, it is required a reliable model that allows to estimate his characteristics, based on well-known parameters. Nowadays, the different models (*RPA*, *Mermin Aproximation*, *FCDF Model...*) could be used under certain conditions, because of they are based on traditional approximations.

With the aim of analytical evaluation of dynamic characteristics of the above systems, an alternative mathematical approach is suggested capable of taking all *sum rules* (a set of conservation laws) into account automatically. Specifics of physical systems are included into the *sum rules* calculated independently using standard methods of quantum statistics within the Kubo linear-reaction theory. This approach effectively reduces the calculation of the dynamic structure factor and the parameters of collective modes to the knowledge of the system static characteristics, obtained by fitting the corresponding computational data. The validity of the approach is confirmed by comparison with available simulation data.

Key words: plasma, dense matter, temperature, density, dynamics properties, dielectric function, method of moments.

ÍNDICE

DOCUMENTOS CONTENIDOS EN EL TFG:

- Memoria
- Presupuesto

ÍNDICE DE LA MEMORIA:

1. OBJETIVO	9
2. JUSTIFICACIÓN	11
3. INTRODUCCIÓN	13
3.1 Definición de plasma.....	13
3.2 Utilidad plasma a nivel industrial.....	14
3.2.1. Fusión termonuclear controlada	14
3.2.2. Investigaciones astrofísicas	17
3.2.3. Transporte espacial.....	17
3.3. Parámetros característicos de un plasma	18
3.4. Función dieléctrica de un medio	20
3.5. Función de estructura estática	23
4. ANTECEDENTES	27
4.1. Modelo de Lindhard (RPA).....	27
4.2. Modelo de Mermin.....	27
4.3. Modelo de Arista y Brandt	28
4.4. Versiones extendidas.....	28
4.5 Dinámica Molecular	29
5. MODELO MATEMÁTICO	31
5.1. Introducción	31
5.2. Reconstrucción de la función dieléctrica inversa.....	33
5.3. Función de pérdidas	37
5.4. Factor de estructura dinámico	38
5.5. Fórmulas de Cardano	40
6. RESULTADOS	41
6.1. Plasma de un componente.....	41

6.1.1. OCP cuántico.....	41
6.1.2. OCP Clásico	45
6.1.3 Resultados OCP.....	47
6.2 Plasma de dos componentes	53
6.2.1. TCP cuántico	54
6.2.2 TCP clásico	55
6.2.3 Resultados TCP	56
7. CONCLUSIONES	67
8. POSIBLES MEJORAS	69
9. ANEJOS	71
9.1 Anejo I: Cálculo de los polinomios D_n y E_n	71
9.2. Anejo II: Obtención de la función de Nevanlinna.....	74
9.3 Anejo III: Ejemplo de programación en Mathematica.	76
10. BIBLIOGRAFÍA	79

ÍNDICE DEL PRESUPUESTO:

1. UNIDADES FUNCIONALES	83
2. PRECIO DE LA MANO DE OBRA	83
3. PRESUPUESTOS PARCIALES	84
4. PRESUPUESTO TOTAL	85

ÍNDICE DE TABLAS:

Tabla 1. Comparación de la parte real de las soluciones de Cardano para OCP	52
Tabla 2. Comparación de la parte real de las soluciones de Cardano para TCP	66
Tabla 3. Unidades funcionales del presupuesto	83
Tabla 4. Cotizaciones a la seguridad social	83
Tabla 5. Cálculo del sueldo bruto anual	85
Tabla 6. Coste por hora de la mano de obra	84
Tabla 7. Presupuesto parcial para unidad funcional estudios previos	84
Tabla 8. Presupuesto parcial para unidad funcional programación y simulación	85
Tabla 9. Presupuesto parcial para unidad funcional elaboración del trabajo	85
Tabla 10. Presupuesto de ejecución material	85
Tabla 11. Presupuesto de ejecución por contrata	85
Tabla 12. Presupuesto total	86

ÍNDICE DE FIGURAS:

Figura 1. Esquema del proceso para estimar la temperatura y densidad de un plasma a partir de experimentos de dispersión de rayos-x de Thomson. Fuente: elaboración propia	11
Figura 2. Condiciones en las que se encuentra el plasma de forma natural o experimental. Fuente: plasmacom.blogspot.com	13
Figura 3. Esquema de una reacción de fusión entre Deuterio y Tritio. Fuente: http://www.ejemplode.com/37-fisica/3025-ejemplo_de_fusion_nuclear.html	14
Figura 4. Influencia de la temperatura y la densidad en el criterio de Lawson. Fuente: https://it.wikipedia.org/wiki/Criterio_di_Lawson	15
Figura 5. Esquema de una reacción de fusión por confinamiento inercial. Fuente: https://www.astrofisyca.com/2014/02/la-fusion-nuclear-por-confinamiento.html	16
Figura 6. Reactores de fusión por confinamiento magnético: <i>Tomamak</i> a la izquierda y <i>Stellarator</i> a la derecha. Fuente: http://fusion4freedom.com/stellar-work/	16
Figura 7. Esquema del propulsor de una aeronave propulsada por plasma. Fuente: https://www.pinterest.es/pin/788552215976849989/	17
Figura 8. Influencia de la temperatura y densidad electrónica sobre el parámetro de Brueckner y el de Coulomb. Fuente: https://www.plasma-universe.com/Plasma	20
Figura 9. Átomo antes de la aplicación de un campo eléctrico. Fuente: Raymond C. Rumpf; “ <i>Electromagnetic Properties of Materials-Part 1. Lorentz and Drude Models</i> ”	20
Figura 10. Átomo tras la aplicación de un campo eléctrico. Fuente: Raymond C. Rumpf; “ <i>Electromagnetic Properties of Materials-Part 1. Lorentz and Drude Models</i> ”	21
Figura 11. Desplazamiento del núcleo dentro del átomo. Fuente: Raymond C. Rumpf; “ <i>Electromagnetic Properties of Materials-Part 1. Lorentz and Drude Models</i> ”	21
Figura 12. Esquema de un sistema de iones sobre un fondo de electrones uniforme. Fuente: Universidad de Oxford; “Graduate Class in Plasma Physics: Statistical Theory and Strongly Coupled Plasmas”	23
Figura 13. Función impulso o Delta de Dirac. Fuente: elaboración propia	24
Figura 14. Influencia del parámetro de coulomb sobre el estado físico del plasma. Fuente: http://www.lanl.gov/projects/dense-plasma-theory/	25
Figura 15. Diferencia entre plasma de un componente y de dos componentes. Fuente: Universidad de Oxford; “Graduate Class in Plasma Physics: Statistical Theory and Strongly Coupled Plasma”	41
Figura 16. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=0.993$ y $q=0.6187$. Fuente: elaboración propia	47

Figura 17. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=2$ y $q=0.6015$. Fuente: elaboración propia	48
Figura 18. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=4$ y $q=0.6945$. Fuente: elaboración propia	48
Figura 19. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=8$ y $q=1.389$. Fuente: elaboración propia	49
Figura 20. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=20$. Fuente: elaboración propia	49
Figura 21. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=50$. Fuente: elaboración propia	50
Figura 22. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=100$. Fuente: elaboración propia	50
Figura 23. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=150$. Fuente: elaboración propia	51
Figura 24. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP cuántico con $\theta=0.69$, $r_s=4$ y $q=0.6$. Fuente: elaboración propia	52
Figura 25. Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP cuántico con $\theta=0.69$, $r_s=4$ y $q=1.2$. Fuente: elaboración propia	53
Figura 26. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=8$ y $q=0.438$. Fuente: elaboración propia	56
Figura 27. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=0.5$ y $q=0.438$. Fuente: elaboración propia	57
Figura 28. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=0.124$ y $q=0.438$. Fuente: elaboración propia	57
Figura 29. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=1$, $r_s=4$ y $q=0.619$ Fuente: elaboración propia	58
Figura 30. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=1$, $r_s=1$ y $q=0.619$. Fuente: elaboración propia	58
Figura 31. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=2$ y $q=0.875$. Fuente: elaboración propia	59
Figura 32. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=0.78$. Fuente: elaboración propia	59

Figura 33. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=1.102$. Fuente: elaboración propia	60
Figura 34. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=1.35$. Fuente: elaboración propia	60
Figura 35. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=1.559$. Fuente: elaboración propia	61
Figura 36. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=0.78$. Fuente: elaboración propia	61
Figura 37. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=1.102$. Fuente: elaboración propia	62
Figura 38. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=1.35$. Fuente: elaboración propia	62
Figura 39. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=1.559$. Fuente: elaboración propia	63
Figura 40. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=0.78$. Fuente: elaboración propia	63
Figura 41. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=1.102$. Fuente: elaboración propia	64
Figura 42. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=1.35$. Fuente: elaboración propia	64
Figura 43. Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=1.559$. Fuente: elaboración propia	65
Figura 44. Constantes introducidas en <i>Mathematica</i> . Fuente: elaboración propia	76
Figura 45. Parámetros adimensionales introducidos en <i>Mathematica</i> . Fuente: elaboración propia	76
Figura 46. Programación de las frecuencias características del sistema. Fuente: elaboración propia	77
Figura 47. Programación del DSF y su representación en <i>Mathematica</i> . Fuente: elaboración propia	78

MEMORIA

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

1. OBJETIVO

El objetivo principal de este proyecto es obtener un modelo matemático fiable de diagnóstico de las propiedades de sistemas a usar en futuras instalaciones de fusión termonuclear, precisamente, que permita estimar la función dieléctrica inversa de un plasma denso, en un amplio rango de temperaturas y densidades. A partir de dicho modelo, se obtendrá una expresión para el factor de estructura dinámico, que dependerá de la temperatura y densidad del sistema.

Además, se comprobará que el factor de estructura dinámico obtiene buenos resultados bajo diferentes aproximaciones: plasmas de uno o dos componentes, y tratamiento clásico o cuántico, para así comprobar la versatilidad del modelo desarrollado.

Por último, se comparan los resultados obtenidos con otros modelos teóricos y con simulaciones numéricas de dinámica molecular, que son los más parecidos a los datos experimentales que se pueden obtener, para poder estudiar los puntos fuertes y débiles del modelo. Todos los modelos a comparar se han obtenido de artículos publicados en revistas científicas de prestigio.

En conclusión, se pretende demostrar que dicho modelo puede ser de gran utilidad para investigaciones en el campo de la física de plasmas, como pueden ser las investigaciones que se están llevando a cabo actualmente para el desarrollo de la energética de fusión termonuclear por confinamiento inercial, debido a su simplicidad, versatilidad y rapidez de ejecución.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

2. JUSTIFICACIÓN

Para poder avanzar en el campo de estudio de la materia en condiciones extremas de densidad y temperatura que se utilizará en futuros equipos de fusión termonuclear. En estas condiciones la materia se encuentra en la forma de plasma casi completamente ionizado y es necesario conocer que ocurre dentro del propio plasma. Hoy en día, resulta muy complejo poder obtener información real sobre las propiedades internas, como puede ser la temperatura o la densidad, ya que los métodos experimentales de diagnóstico en un plasma son muy complejos de realizar, dadas las condiciones extremas a las que se produce. Ello hace que sea imposible utilizar cualquier instrumento típico para medir temperaturas o densidades.

Los pocos métodos existentes para medir dichas propiedades se basan en el bombardeo de rayos X en el sistema (S. H. Glenzer, R. Redmer (2009) [1]), ya que es posible medir el espectro de dispersión generado por el sistema, para ciertas condiciones, y obtener una función de dispersión o factor de estructura dinámico. Este factor de estructura dinámico obtenido contiene información sobre procesos colectivos que tienen lugar en el interior del plasma como, por ejemplo, excitaciones colectivas o fluctuaciones de densidad.

Durante años se han desarrollado diferentes modelos teóricos para obtener una estimación de la temperatura y densidad del sistema mediante la comparación con los datos experimentales. Sin embargo, la gran mayoría de modelos existentes son de una complejidad muy elevada, lo que hace que sean muy costosos de simular, porque requieren de una elevada capacidad de computación y tiempo. Además, suelen ser muy específicos para unas condiciones, es decir, son modelos cuyos resultados solo son fiables bajo unas temperaturas o densidades específicas mientras que el dominio de existencia de plasmas de fusión es muy amplio.

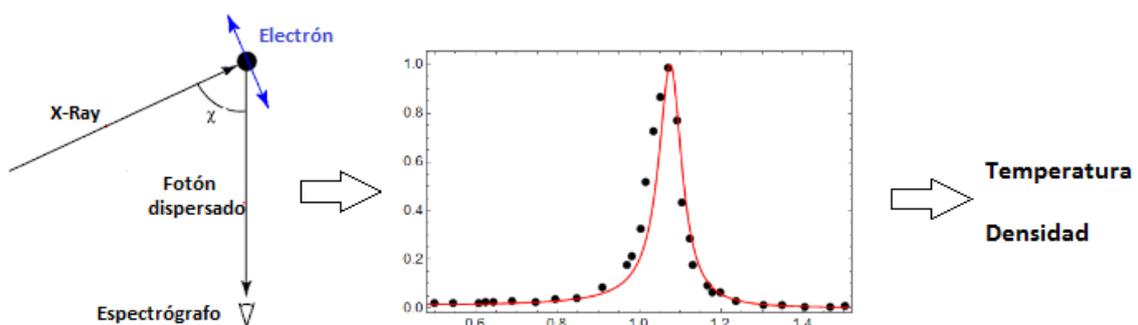


Figura 1: Esquema del proceso para estimar la temperatura y densidad de un plasma a partir de experimentos de dispersión de rayos-x de Thomson.

Con la aplicación del modelo que se va a desarrollar en este trabajo se espera que la obtención de resultados sea mucho más fiable, además de que sea posible obtenerlos de forma rápida, sin necesidad de un equipo de simulación de elevada capacidad de computación.

Desde el punto de vista académico, la realización de este trabajo supone la adquisición de una formación completa a través de las asignaturas cursadas durante el Grado de Ingeniería Química (Tecnología Nuclear, Física, Ciencia de los Materiales, Matemáticas y Química, entre otras).

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Además de para asentar los conocimientos ya adquiridos, nos ha permitido profundizar en otros temas que se encuentran en la vanguardia de la investigación hoy en día, como se trata del campo de investigación de la materia densa o la física de plasmas.

En el plano personal, este trabajo supone la culminación a varios años de colaboración muy exitosos con el profesor Igor Mijail Tkachenko Gorski, donde se han conseguido hasta cuatro publicaciones científicas en diferentes revistas (D. YU. Dubovtsev y otros, 2018 [2]; S.A Syzganbayeva y otros, 2018 [3]; I.M. Tkachenko y otros, 2017 [4]; Yu. V. Arkhipov y otros, 2017 [5]), todas relacionadas con este proyecto.

3. INTRODUCCIÓN

3.1 Definición de plasma

Según Francis F. Chen [6], se considera como plasma cualquier sistema cuasineutral de partículas cargadas y neutras, las cuales exhiben un comportamiento colectivo. Se dice que es cuasineutral, puesto que la densidad de iones y electrones es similar, pero existen una serie de fuerzas electromagnéticas entre las partículas que lo conforman.

A diferencia de un sistema de moléculas neutras ordinarias, como puede ser el aire (el movimiento de dichas moléculas solo puede ser perturbado por una colisión o por una fuerza macroscópica externa), el mero movimiento de las partículas cargadas en un plasma puede generar corrientes, y por lo tanto campos magnéticos. Además, si se generan concentraciones locales de cargas libres, bien positivas, o bien negativas, aparecerá un campo eléctrico. Estos campos generados, debido al carácter de largo rango (*long range*) de la interacción Coulombiana, afectan al movimiento de otras partículas más lejanas. Por ello, un plasma presenta un comportamiento colectivo, ya que el movimiento de las partículas no depende únicamente de las condiciones locales, sino también del estado del sistema en otras regiones más alejadas.

El plasma se puede encontrar de forma natural en el interior o en la superficie de objetos astronómicos, como por ejemplo estrellas de neutrones, enanas blancas, planetas gigantes, o en estrellas. Antes del descubrimiento de la materia oscura, era la forma de materia más abundante en el espacio. También se pueden crear en el laboratorio, con unas condiciones de densidad y temperatura bastante extremas.

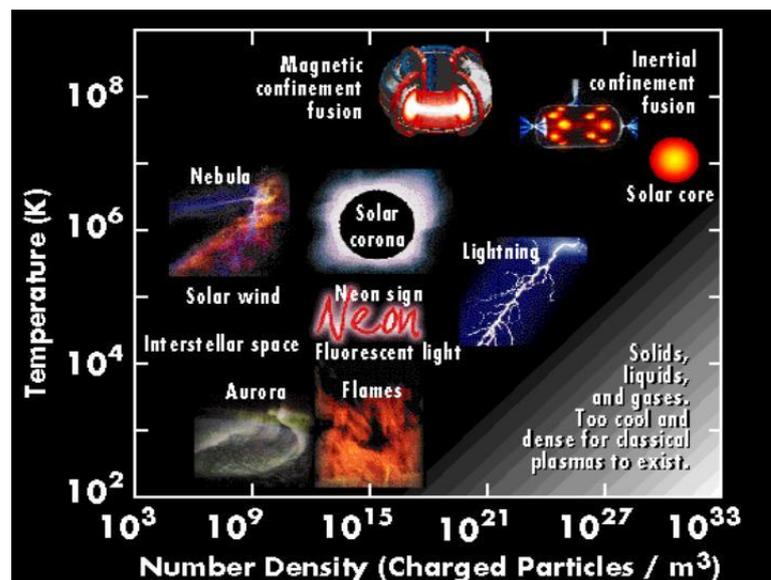


Figura 2: Condiciones en las que se encuentra el plasma de forma natural o experimental.

3.2 Utilidad plasma a nivel industrial

Como bien explica J. Gutiérrez Muñoz [7], la principal utilidad de un plasma radica en su potencial para la obtención de energía, mediante una fusión termonuclear controlada, aunque tienen otras utilidades en el mundo de la investigación astrofísica, o incluso en el transporte espacial.

3.2.1. Fusión termonuclear controlada

Una fusión nuclear consiste en la unión del núcleo de dos partículas para formar uno de mayor masa. Para conseguirlo se deben aproximar los núcleos, para lo cual es necesario vencer la repulsión debida a los electrones que orbitan dichos núcleos. Una vez superada esta barrera, se siguen aproximando hasta que la fuerza nuclear fuerte sea superior a la repulsión coulombiana positiva de los núcleos.

La única forma posible de conseguir esta fusión de núcleos es suministrando una gran cantidad de energía. Ésta puede aplicarse de muy diversas formas: acelerando haces partículas hasta velocidades cercanas a la luz y haciéndolas colisionar frontalmente, comprimir el sistema hasta conseguir una densidad y temperatura suficientes para vencer la repulsión coulombiana, o bien aumentando la temperatura del sistema hasta que las reacciones de fusión se realizan espontáneamente.

Durante estos procesos mencionados, los átomos involucrados pierden sus electrones debido a que pueden absorber suficiente energía como para abandonar el núcleo, quedando un gas ionizado, es decir, un plasma.

El combustible utilizado en las reacciones de fusión son los isótopos del Hidrógeno, Deuterio y Tritio, por su mayor facilidad para ser ionizados. El Deuterio puede ser obtenido del agua, mientras que el Tritio debe ser producido artificialmente. Uno de los inconvenientes de la fusión termonuclear con Tritio es que es un elemento radiactivo de unos 12,3 años de vida media. Comparándolo con el tiempo de desintegración de los residuos provenientes de la fisión nuclear es un tiempo mucho menor.

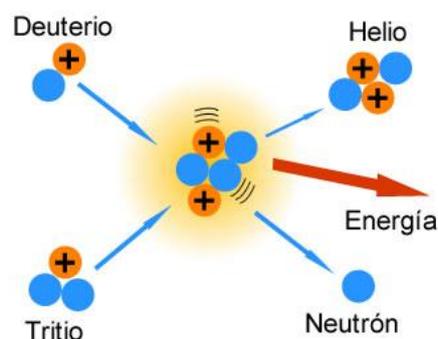


Figura 3: Esquema de una reacción de fusión entre Deuterio y Tritio.

Como resultado de la reacción de fusión, se obtiene Helio 4 y un neutrón, el cual lleva la mayor parte de la energía producida del acoplamiento de los isótopos. Los neutrones liberados con alta energía pueden ser utilizados para producir Tritio a partir de Deuterio. Colocando un recubrimiento de este material en el reactor, además de generar el combustible necesario para la reacción, serviría como protección, evitando el escape de neutrones con un alto nivel de energía.

Como ya se ha mencionado, para que se dé la fusión son necesarias unas ciertas condiciones de temperatura y densidad en el plasma. A estas condiciones energéticas mínimas iniciales se le conoce como el criterio de Lawson. Éste depende del tipo de reactor, del rendimiento del convertidor de energía, de la carga de núcleos a fusionar, etc.

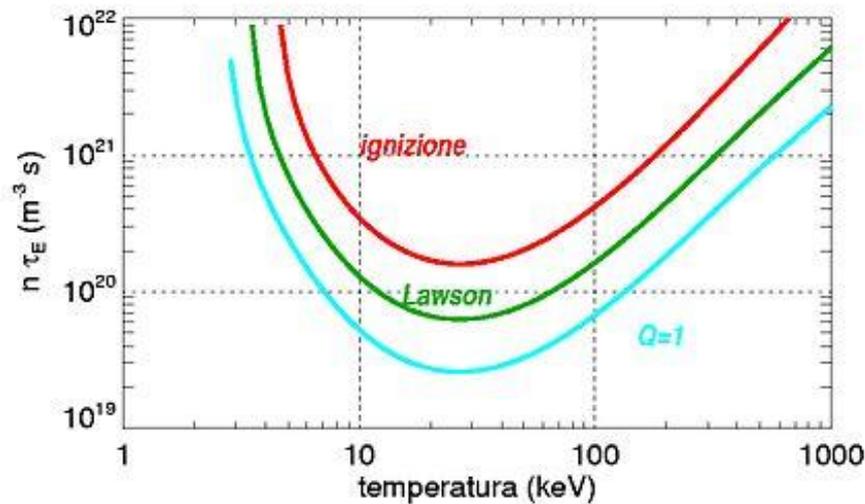


Figura 4: Influencia de la temperatura y la densidad en el criterio de Lawson.

Como se puede observar, las condiciones reales para que se dé la ignición son ligeramente superiores a las que estima Lawson, debido a que no contabiliza las pérdidas por radiación. El hecho de que se alcancen temperaturas y densidades tan elevadas impide un confinamiento mediante una barrera física. Es necesario un método de confinamiento mediante campos magnéticos fuertes o mediante un bombardeo constante de radiación o partículas cargadas.

Fusión por confinamiento inercial del plasma

Este método se basa en la inyección de una gran cantidad de energía sobre el combustible, el cual está confinado en una cápsula, mediante haces de alta energía que pueden ser: luz láser, electrones o iones. La capa más externa se calienta muy rápido, explosionando y comprimiendo las capas interiores debido a la conservación del momento. Al incidir el haz de partículas, las capas más exteriores son expulsadas con un cierto momento cinético, y por lo tanto las capas más internas se ven comprimidas con ese mismo momento, alcanzándose grandes densidades y temperaturas y creando las condiciones de fusión (criterio de Lawson).

Se requiere una enorme potencia ya que la energía se debe suministrar en unos nanosegundos para que la fusión se realice de forma correcta (se alcance la temperatura y densidad idónea en todo el blanco). Este método tiene la gran ventaja de no necesitar estabilizar el plasma mediante campos magnéticos elevados, por lo que no van a surgir inestabilidades.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

El inconveniente de esta técnica es la imposibilidad de trabajar en continuo. Además, la utilización de haces de partículas trae consigo una baja tasa de rendimiento en la transferencia de energía a la cápsula objetivo. Se calcula que en torno a un 10% o 20% de la energía invertida en la creación y aceleración del haz alcanza la cápsula, mientras que solo un 1% es utilizada en la compresión, ya que el resto se pierde en la vaporización y aceleración de la región más superficial (ablación).

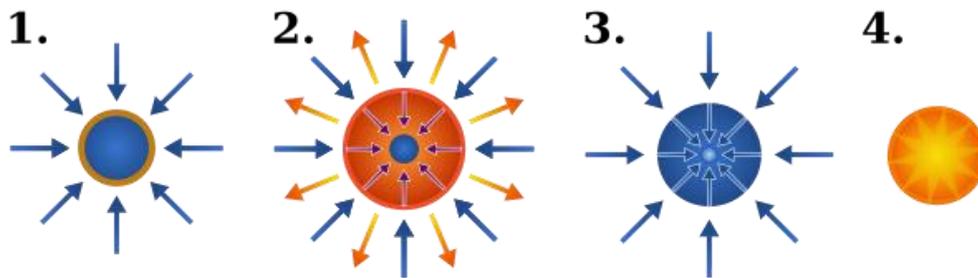


Figura 5: Esquema de una reacción de fusión por confinamiento inercial.

Fusión por confinamiento magnético

El confinamiento magnético se obtiene generando un campo magnético toroidal muy intenso mediante bobinas de corriente, el cual confina el plasma, mientras es calentado mediante radiación microondas. Las bobinas operan en condiciones de superconductividad, lo que eleva considerablemente el coste.

Las partículas ionizadas estarán fuertemente afectadas por el campo magnético y tenderán a seguir las líneas de campo, diseñadas para doblar sobre sí mismos dentro del reactor. Se puede aplicar calentamiento adicional en forma de haces de partículas neutras, para aumentar la densidad y temperatura todavía más.

Existen varios diseños alternativos para la estructura del campo magnético. El tipo más popular se llama *Tokamak*, y en esta configuración una parte del campo magnético confinante está generado por corrientes eléctricas que fluyen en el plasma mismo. Otro diseño popular es el *Stellarator*, que es una configuración en el que la mayor parte del campo magnético confinante puede ser generado por las bobinas de campo externos, así proporcionando un mayor control sobre el plasma.

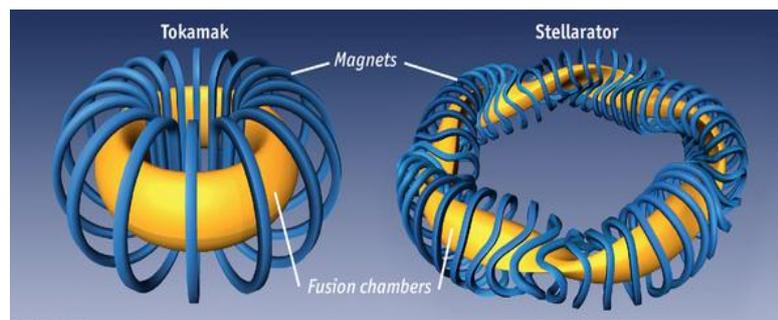


Figura 6: Reactores de fusión por confinamiento magnético: Tokamak a la izquierda y Stellarator a la derecha.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

A la hora de llevarlos a la práctica, únicamente con el *Tokamak* se ha conseguido crear y mantener plasma estable durante unas fracciones de segundo, debido a que los electrones e iones tienen un camino menor que recorrer, evitando grandes pérdidas, pese a que su grado de curvatura sea mayor.

El gran inconveniente de este método es que las líneas de campo magnética internas al plasma quedan tan distorsionadas que se llegan a cerrar sobre si mismas, creando lo que se conoce como “islas magnéticas”, haciendo aparecer inestabilidades. Ello hace que la fusión inercial tenga mejores expectativas.

3.2.2. Investigaciones astrofísicas

Existen muchas incógnitas sobre reacciones que tienen lugar en otros planetas o en estrellas. Por ejemplo, el núcleo del Sol se estima que se encuentra a una temperatura de unos 2 keV, la cual no es suficiente para que se encuentre en estado de plasma, sin embargo, se sabe que la radiación que emana de la estrella es producida por reacciones termonucleares de fusión.

La teoría cinética de plasmas también podría aplicarse al estudio del movimiento de las estrellas en la galaxia, ya que su comportamiento es similar al de las partículas en un plasma.

3.2.3. Transporte espacial

Durante los últimos años se han desarrollado algunos prototipos de motores para aeronaves, propulsados por un plasma denso. Estos motores se basan en la creación de un campo magnético capaz de comprimir y excitar un gas, como puede ser aire, o argón, para convertirlo en un plasma, de forma parecida a un reactor de fusión. Al aplicar un campo eléctrico perpendicular al campo magnético, la reacción impulsaría la aeronave.

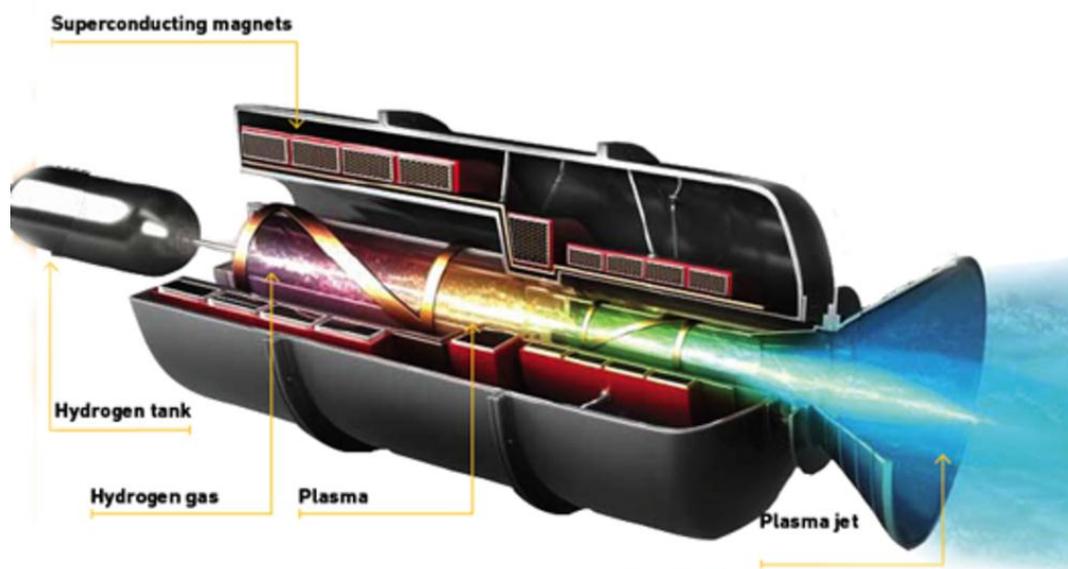


Figura 7: Esquema del propulsor de una aeronave propulsada por plasma

La principal ventaja de esta serie de motores es que pueden operar perfectamente en condiciones de vacío, y que la energía disipada en forma de calor es mucho menor que en un reactor aeroespacial convencional, ya que toda la energía se concentra mediante los campos hacia el exterior.

Algunos de estos motores se han conseguido utilizar con éxito en satélites que se encuentran orbitando la Tierra bien ahora o bien en un futuro cercano.

3.3. Parámetros característicos de un plasma

La primera tarea de la física de plasmas consiste en definir adecuadamente los parámetros que van a condicionar el comportamiento de un plasma, puesto que sus características serán diferentes.

Según S. Ichimaru [8], dentro de un plasma, las partículas interactúan entre sí mediante fuerzas de Coulomb, tendiendo al estado de energía potencial mínima. En contraposición, la energía térmica interna de cada partícula le induce a la agitación y desorden. Esta relación entre la energía de Coulomb media por partícula y su energía cinética (térmica) se cuantifica mediante el parámetro de acoplamiento de Coulomb:

$$\Gamma = \frac{(Ze)^2}{ak_B T} = \frac{\beta(Ze)^2}{a} \quad [\text{Eq 3.1}]$$

Donde Ze es la carga del ión, T la temperatura, k_B es la constante de Boltzmann y “ a ” es el radio Wigner-Seitz, radio de una esfera cuyo volumen es igual al volumen ocupado por un electrón, y se calcula a partir de la densidad electrónica (n) como:

$$a = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n}} \quad [\text{Eq 3.2}]$$

Al aumentar Γ , el plasma muestra un menor número de colisiones, propiciando cambios de fase, hasta llegar a cristalizar. Así pues, valores de $\Gamma \ll 1$ corresponden a plasmas débilmente acoplados (la energía térmica de las partículas es mucho mayor que la potencial), donde la interacción de Coulomb es tratada teóricamente como una perturbación, y no se contemplan las colisiones entre partículas. Estas condiciones corresponden, por ejemplo, a la capa superior del Sol, o al plasma producido por confinamiento inercial.

Cuando $\Gamma \gg 1$, corresponde a plasmas fuertemente acoplados (la energía potencial de las partículas es mucho mayor que la térmica), donde empiezan a tener mayor importancia interacciones entre partículas, y sus posiciones están más correlacionadas. Para valores en torno a 175 se produce una cristalización del plasma de un componente.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Cuando la temperatura del sistema es baja, y la densidad electrónica alta los electrones del plasma degeneran parcialmente, es decir, muestran sus propiedades cuánticas. El grado de degeneración de un plasma se mide por medio del parámetro de degeneración de Fermi:

$$\theta = \frac{k_B T}{E_F},$$

[Eq 3.3]

Donde E_F es la energía de Fermi de los electrones, calculada como:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}.$$

[Eq 3.4]

Aquí \hbar es la constante reducida de Planck, m la masa del electrón, y k_F el número de onda de Fermi de un electrón en estado paramagnético:

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}.$$

[Eq 3.5]

Para valores $\theta < 0.1$, los electrones del sistema están en completa degeneración, por lo que los efectos térmicos son despreciables respecto de los efectos cuánticos. Para el caso $\theta > 10$ se trata de un sistema no degenerado, donde ocurre lo contrario, los efectos térmicos son más importantes que los cuánticos, y se puede tratar el plasma como un sistema clásico. Para valores intermedios, el sistema se encuentra en un grado de degeneración intermedia, por lo que ambos efectos coexisten.

El último parámetro utilizado para definir un plasma es el parámetro de Brueckner, el cual compara el radio de Wigner-Seitz con el radio de Bohr:

$$r_S = \frac{a}{a_B},$$

[Eq 3.6]

Donde el radio de Bohr se define como:

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

[Eq 3.7]

Cuando $r_S < 1$ es debido a una densidad del sistema muy alta, mientras que en el caso de que $r_S \gg 1$ será el caso de una baja densidad.

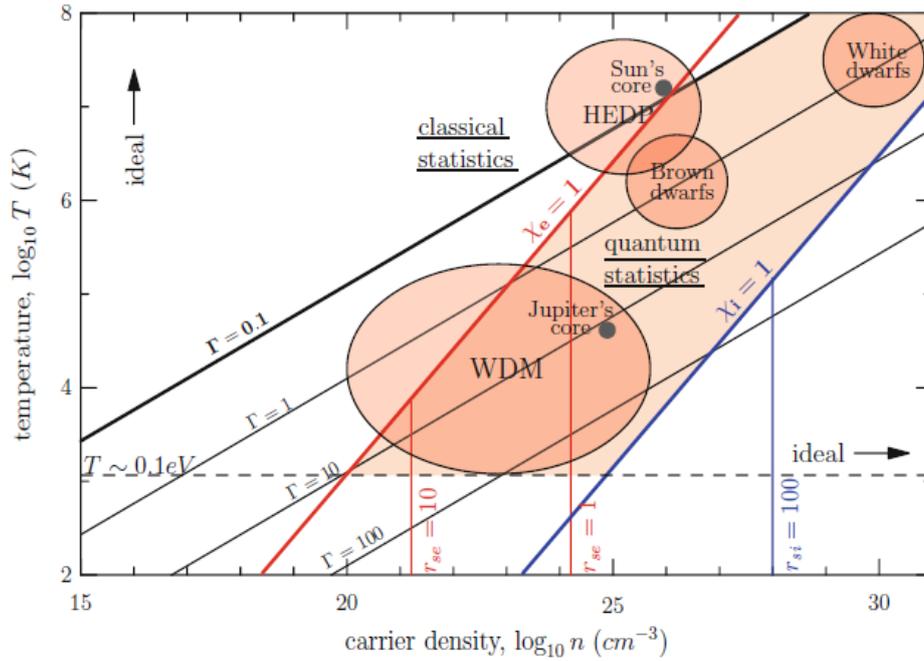


Figura 8: Influencia de la temperatura y densidad electrónica sobre el parámetro de Brueckner y el de Coulomb.

3.4. Función dieléctrica de un medio

Para entender el concepto de respuesta electromagnética o dieléctrica de un medio, hay que remontarse a inicios del siglo XX, momento en el que Paul Drude y Hendrik Lorentz proponen un modelo clásico para explicar el transporte de los electrones en un material [9].

Cuando un átomo se encuentra en estado de equilibrio (no se aplica ningún campo eléctrico) el núcleo ocupa la posición central de la nube de electrones, pero en el momento en que un campo eléctrico aparece, este núcleo se ve desplazado generando un momento dipolar:

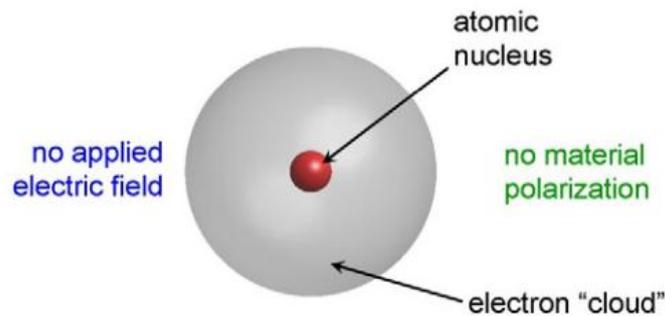


Figura 9: Átomo antes de la aplicación de un campo eléctrico.

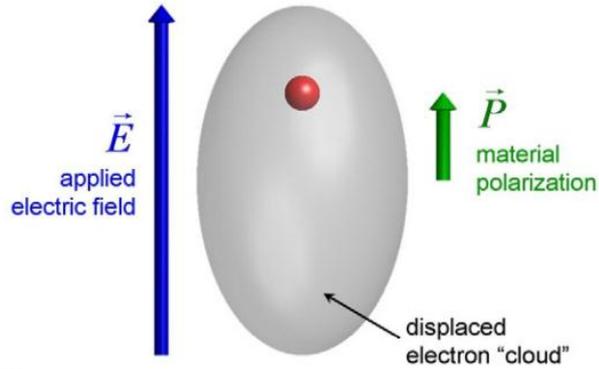


Figura 10: Átomo tras la aplicación de un campo eléctrico.

Para hablar de la función dieléctrica del sistema, es necesario partir de la ecuación de movimiento de una partícula cargada:

$$m \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + m\gamma \frac{\partial r}{\partial t} + m\omega_0^2 r = -qE$$

[Eq 3.8]

Donde m es la masa de la partícula, γ es el factor de amortiguamiento, ω_0 es la frecuencia natural de dicha partícula, r es la distancia entre el núcleo y el centro del átomo, y q su carga. Aplicando la transformada de Fourier a [Eq 3.8] y despejando r se obtiene:

$$m(-i\omega)^2 r(\omega) + m\gamma(-i\omega)r(\omega) + m\omega_0^2 r(\omega) = -qE(\omega)$$

$$(-m\omega^2 - i\omega m\gamma + m\omega_0^2)r(\omega) = -qE(\omega)$$

$$r(\omega) = \frac{-qE(\omega)}{m(-\omega^2 - i\omega\gamma + \omega_0^2)}$$

[Eq 3.9]

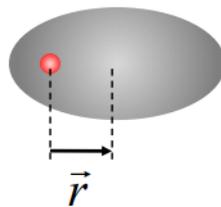


Figura 11: Desplazamiento del núcleo dentro del átomo.

Debido al desplazamiento del núcleo aparece un momento dipolar, el cual depende del valor de la carga y de la distancia al centro:

$$\mu(\omega) = -q r(\omega)$$

[Eq 3.9]

Sustituyendo [Eq 3.8] en [Eq 3.9]:

$$\mu(\omega) = \frac{q^2 E(\omega)}{m(-\omega^2 - i\omega\gamma + \omega_0^2)}$$

[Eq 3.10]

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Por otro lado, utilizando la definición momento dipolar según Lorentz:

$$\mu(\omega) = \alpha(\omega) E(\omega) \quad [\text{Eq 3.11}]$$

Donde $\alpha(\omega)$ es la polarizabilidad de Lorentz para un único átomo. Sustituyendo [Eq 3.10] en [Eq 3.11]:

$$\alpha(\omega) = \frac{q^2}{m(-\omega^2 - i\omega\gamma + \omega_0^2)} \quad [\text{Eq 3.12}]$$

Dado que cuando se somete un sistema de partículas a un campo eléctrico no se va a producir una polarización uniforme, la polarización por unidad de volumen se define como un promedio estadístico del momento dipolar que se ha producido por el número de partículas en ese volumen:

$$P(\omega) = N\langle\mu(\omega)\rangle \quad [\text{Eq 3.13}]$$

De las ecuaciones clásicas de Maxwell para un campo eléctrico en un medio material:

$$D(\omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\omega) E(\omega) \quad [\text{Eq 3.14}]$$

$$P(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) E(\omega) \quad [\text{Eq 3.15}]$$

Donde D el campo vectorial de desplazamiento eléctrico, ε_0 es la permitividad en el vacío, χ corresponde a la susceptibilidad del medio (mide la facilidad de polarización) y ε es la función dieléctrica. Si se combinan [Eq 3.13] y [Eq 3.15]:

$$N\langle\mu(\omega)\rangle = \varepsilon_0 \chi(\omega) E(\omega) \quad [\text{Eq 3.16}]$$

Despejando $\chi(\omega)$ de [Eq 3.16] y sustituyendo por [Eq 3.12]:

$$\begin{aligned} \chi(\omega) &= \frac{N\langle\mu(\omega)\rangle}{\varepsilon_0 E(\omega)} = \frac{N\alpha(\omega)}{\varepsilon_0} \\ \chi(\omega) &= \left(\frac{Nq^2}{m \varepsilon_0}\right) \frac{1}{-\omega^2 - i\omega\gamma + \omega_0^2} \end{aligned} \quad [\text{Eq 3.17}]$$

Al término constante de la anterior ecuación se le denomina frecuencia del plasma:

$$\omega_p^2 = \frac{Nq^2}{m \varepsilon_0} \quad [\text{Eq 3.18}]$$

Debido a la relación que existe entre la susceptibilidad y la función dieléctrica del sistema:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \chi(\omega) \quad [\text{Eq 3.19}]$$

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Combinando [Eq 3.17], [Eq 3.18] y [Eq 3.19]:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{-\omega^2 - i\omega\gamma + \omega_0^2}$$

[Eq 3.20]

La función dieléctrica se trata pues de una función compleja, con una parte real y otra imaginaria:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) + i\varepsilon_i(\omega)$$

[Eq 3.21]

La parte real de la función dieléctrica contiene información respecto a la respuesta del sistema frente a una perturbación externa. La parte imaginaria corresponde a la dispersión que se va a dar en la respuesta con el tiempo. Ambas partes están relacionadas entre sí mediante las relaciones de Kramers-Kronig, que posteriormente se explican con más detalle.

El estudio de la función dieléctrica de un medio permite, por lo tanto, el conocimiento de cómo evolucionarán sus propiedades internas, como puede ser la conductividad, el factor de estructura dinámico, el poder de frenado, etc.

3.5. Función de estructura estática

La posición de cada ion en un plasma viene descrita por una función δ de Dirac desplazada respecto del origen de coordenadas (Universidad de Oxford, 2009 [10]):

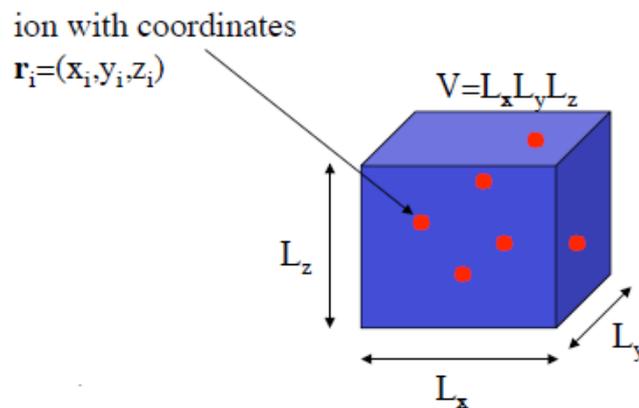


Figura 12: Esquema de un sistema de iones sobre un fondo de electrones uniforme.

El operador densidad del sistema vendrá dada por la suma de todas las posiciones de los iones:

$$\rho(r) = \sum_1^N \delta(r - r_i)$$

[Eq 3.22]

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

La función impulso o δ de Dirac es una distribución de densidad de una masa concentrada en un punto:

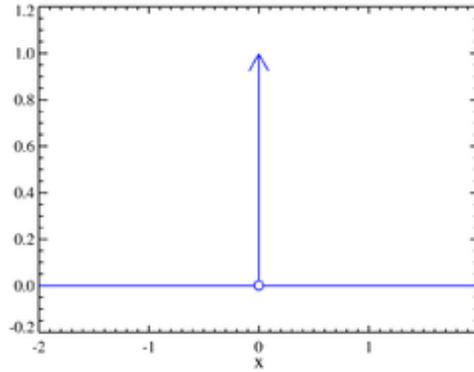


Figura 13. Función impulso o Delta de Dirac.

Presenta las siguientes propiedades:

- 1 Su área total es 1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) = 1$$

- 2 Es nula para cualquier otro punto que no sea una masa.

$$\delta(r - r_i) = \begin{cases} \infty & \text{si } r = r_i \\ 0 & \text{si } r \neq r_i \end{cases}$$

- 3 Su producto con cualquier otra función es el siguiente:

$$\begin{aligned} \delta(t)x(t) &= \delta(t)x(0) \\ \delta(t - t_0)x(t) &= \delta(t - t_0)x(t_0) \end{aligned}$$

Para poder caracterizar un sistema de muchas partículas son necesarias funciones que relacionen la probabilidad de encontrar grupos de partículas en un tiempo y lugar determinados. La función de correlación de pares expresa la probabilidad condicional de que dos partículas se encuentren separadas una distancia r en el espacio:

$$h(r) = \frac{V}{N(N-1)} \left\langle \sum_{i \neq j=1}^N \delta(r - r_i + r_j) \right\rangle$$

[Eq 3.23]

Donde N corresponde al número total de iones que hay en un volumen V . Se puede normalizar de la siguiente forma:

$$\frac{1}{V} \int h(r) d^3r = 1$$

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Dado que la interacción entre partículas tiene un rango finito, para partículas separadas una gran distancia r :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} h(r) = 0$$

La función de distribución de pares describe la probabilidad de encontrar una partícula a la distancia r , suponiendo que hay una partícula en el origen de coordenadas $r=0$. Esta función se define como:

$$g(r) = h(r) + 1$$

[Eq 3.24]

Dado que los iones se encuentran distribuidos uniformemente siempre hay probabilidad de encontrar otro ion para una distancia r . Esta probabilidad depende en gran medida del parámetro de acoplamiento de Coulomb.

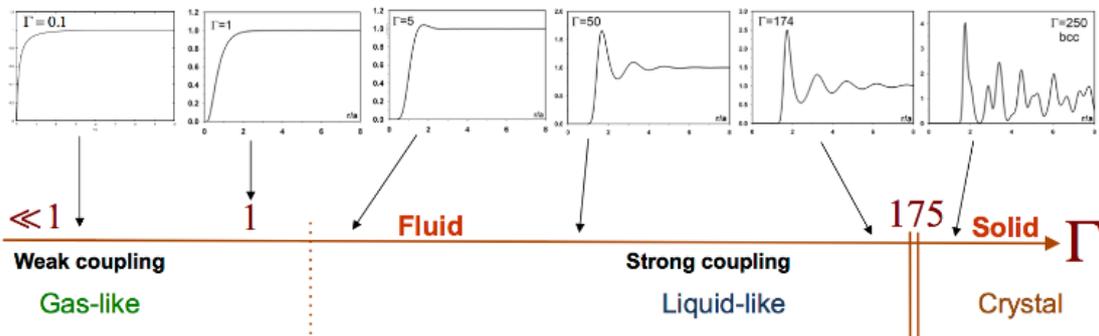


Figura 14: Influencia del parámetro de coulomb sobre el estado físico del plasma.

Como se puede apreciar, para altos valores de Γ , los picos de la función de densidad se corresponderán con la posición de los iones en la estructura cuasicristalina propia del sólido.

El factor de estructura estático se define como la transformada espacial de Fourier del operador densidad anteriormente definido en [Eq 3.22]:

$$S(k) = \frac{1}{N} \langle \rho(k) \rho(-k) \rangle$$

[Eq 3.25]

Donde:

$$\rho(k) = \int \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i) e^{-ikr} d^3r = \sum_{i=1}^N e^{-ikr_i}$$

Por lo que:

$$S(k) = \frac{1}{N} \langle \sum_{i=j=1}^N e^{-ik(r_i - r_j)} \rangle = 1 + \frac{1}{N} \langle \sum_{i \neq j=1}^N e^{-ik(r_i - r_j)} \rangle$$

[Eq 3.26]

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Esta expresión se relaciona con la función de correlación de pares a través de su transformada de Fourier:

$$h(k) = \frac{V}{N(N-1)} \int \left\langle \sum_{i \neq j=1}^N \delta(r - r_i + r_j) \right\rangle e^{-ikr} d^3r = \frac{V}{N(N-1)} \left\langle \sum_{i \neq j=1}^N e^{-ik(r_i - r_j)} \right\rangle$$

$$S(k) = 1 + \frac{N-1}{V} h(k)$$

[Eq 3.27]

De modo que también está relacionado con la función de distribución de pares:

$$S(k) = 1 + \frac{N-1}{V} \int [g(r) - 1] e^{-ikr} d^3r$$

[Eq 3.28]

Y con la transformada inversa de Fourier de [Eq 3.28]:

$$g(r) = 1 + \frac{V}{N-1} \frac{1}{(2\pi)^3} \int [S(k) - 1] e^{-ikr} d^3k$$

[Eq 3.29]

4. ANTECEDENTES

4.1. Modelo de Lindhard (RPA)

En 1954, J. Lindhard [11] publica la que es la primera teoría consistente para la estimación de la función dieléctrica de un sistema de materia densa basándose en el método RPA (*random phase approximation*), desarrollado unos años antes por David Bohm y David Pines. Se trata del primer modelo que tiene en cuenta las interacciones de Coulomb débiles entre los electrones del sistema, debidas al apantallamiento electrónico. El comportamiento de los electrones se trata desde el punto de vista semiclásico, dependiendo del movimiento de los otros electrones, además del campo externo aplicado. Las corrientes y las cargas inducidas en los electrones obedecen la ecuación de Dirac, que tiene en cuenta, a parte de las partículas cuyo movimiento viene descrito mediante la ecuación de Schrödinger, el campo electromagnético en el sistema. La función dieléctrica queda de la siguiente forma:

$$\epsilon_L(k, \omega) = 1 + \frac{e^2}{\pi^2 k^2} \int \frac{\hat{f}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \hat{f}(\mathbf{k}')}{\omega - E_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}'}} d\mathbf{k}'$$

[Eq 4.1]

Donde E_k corresponde a la energía de Fermi para esa longitud de onda, y $\hat{f}(k)$ es la función de Fermi-Dirac. El principal inconveniente de este modelo es que no contempla las colisiones entre electrones que pueden tener lugar, pero conserva el número local de electrones en el sistema. Por lo tanto solo se obtendrán buenos resultados para $\Gamma < 1$.

4.2. Modelo de Mermin

N. D. Mermin, en 1970 [12], obtuvo una variación de la función dieléctrica de Lindhard, capaz de tener en cuenta las colisiones entre electrones, además de la conservación de electrones local. Esto se debe a que utiliza la aproximación de tiempo de relajación, la cual establece que el sistema inicialmente se encuentra en equilibrio, y que, tras una perturbación externa, el sistema va a volver al equilibrio inicial debido a la dispersión producida por las colisiones entre electrones, transcurrido un tiempo llamado tiempo de relajación. Este tiempo dependerá del gradiente de temperatura y densidad en el sistema. El modelo resultante es el siguiente:

$$\epsilon_M(k, \omega) = 1 + \frac{(\omega + iv)[\epsilon_L(k, \omega + iv) - 1]}{\omega + iv \frac{\epsilon_L(k, \omega + iv) - 1}{\epsilon_L(k, 0) - 1}}$$

[Eq 4.2]

Donde v es la frecuencia de las colisiones. Este término acota la vida de las oscilaciones, cumpliendo de esta forma la conservación local antes mencionada (Yu. V. Arkhipov y otros, 2014 [13]).

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

El principal inconveniente de este modelo es que, a pesar de cumplir la *f-sum rule*, no satisface la cuarta *sum rule*, generando divergencias para frecuencias altas. Además, no es aplicable para sistemas formados por líquidos electrónicos, sea cual sea su parámetro de acoplamiento o su degeneración.

Se trata pues de un modelo peor que el de Lindhard, puesto que frecuencia de colisiones utilizada no es la adecuada, lo que induce a que la contribución cinética de los electrones no sea correcta, y no se obtengan buenos resultados para ciertas condiciones.

4.3. Modelo de Arista y Brandt

El siguiente modelo data de 1984, desarrollado por R. Arista y W. Brandt [14]. En su trabajo, parten de la ecuación clásica de Lindhard, y proponen aproximaciones matemáticas basadas en el comportamiento de las asíntotas (altas y bajas frecuencias o longitudes de onda) para poder obtener por separado la parte real y la parte imaginaria de la función dieléctrica, ya que analíticamente no es posible.

Para poder llevar a cabo la obtención de la parte real e imaginaria por separado, proponen unas funciones de interpolación. Dichas funciones solo van a funcionar correctamente para unas condiciones concretas (diferentes grados de degeneración del plasma) y para $\Gamma < 1$. El inconveniente es que un cambio importante en las condiciones del sistema supone que las expresiones dejen de tener buenos resultados.

4.4. Versiones extendidas

Los posteriores modelos postulados, ya en el siglo XXI, se basaron en modificaciones de los anteriores, ajustándolos para que fueran adecuados a unas ciertas condiciones. Por ejemplo, la versión extendida de la aproximación RPA (Yu. V. Arkhipov y otros, 2014 [13]), que consiste en la introducción de la corrección local de campo dinámica (*Dynamic local-field correction, DLFC*):

$$\epsilon_{XRPA}(k, \omega) = 1 + \frac{\Phi(k)\Pi(k, \omega)}{1 - \Phi(k)\Pi(k, \omega)G(k, \omega)}$$

[Eq 4.3]

Donde $G(k, \omega)$ corresponde a la corrección local de campo dinámica, $\Phi(k)$ a la transformada de Fourier del potencial de Coulomb del sistema, y $\Pi(k, \omega)$ un operador de polarización de modo que los modelos de Arista y Brandt y de Lindhardt se recuperan con $G(k, \omega) = 0$.

Esta corrección local es una función compleja que depende de la frecuencia y longitud de onda, y que contiene toda la información en lo referente a las colisiones (ecuaciones de movimiento de las partículas, amortiguamiento de las ondas, transporte, etc). Normalmente se suele obtener a

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

partir de simulaciones de dinámica molecular, ya que de forma analítica es imposible, que consiste en una técnica de simulación que permite visualizar el movimiento de las partículas, y sus interacciones durante el tiempo que dure dicha simulación. Por lo general, estas simulaciones conllevan un gran gasto computacional, ya que, para obtener unos mejores resultados, se necesita la simulación de un mayor número de partículas y más tiempo.

Posteriormente también se modificó el modelo de Mermin tradicional obteniendo la versión extendida de la aproximación de Mermin (C. Fortman y otros, 2010 [15]):

$$\begin{aligned} \epsilon_{XBM}(k, \omega) \\ = 1 + \frac{\omega\Phi(k)\Pi(k, \omega)\Pi(k, 0)}{\omega\Pi(k, 0)[1 - \Phi(k)\Pi(k, \omega)G(k, \omega)] + i\nu(\omega)\Pi(k, \omega)[1 - \Phi(k)\Pi(k, 0)G(k)]} \end{aligned} \quad [\text{Eq 4.4}]$$

Este último incorpora tanto las colisiones entre electrones, como las colisiones entre iones, pudiendo aplicarse a un plasma de dos componentes.

4.5 Dinámica Molecular

Como explica M.P. Allen [16], las simulaciones computacionales se utilizan para entender las propiedades de posicionamiento de moléculas, a partir de su estructura e interacciones microscópicas entre ellas. Las dos principales técnicas para llevar esto a cabo son Dinámica Molecular y Monte Carlo. La diferencia entre ambos es que Dinámica Molecular permite simular propiedades dinámicas del sistema, es decir, propiedades que varían en el tiempo.

El método de simulación de Dinámica Molecular se basa en introducir unas condiciones iniciales para un sistema de moléculas, y una función potencial, la cual va a determinar la interacción entre partículas. Tras introducir estos datos iniciales, se deja interaccionar las moléculas durante un tiempo prefijado. Las trayectorias de las moléculas son calculadas resolviendo las ecuaciones de movimiento de Newton.

Para obtener unos mejores resultados es necesario introducir un gran número de moléculas en el sistema inicial, y dejarlo interactuar durante más tiempo. Por ello, se trata del método que mejores resultados obtiene, pero los requerimientos de tiempo y capacidad computacional son muy elevados.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

5. MODELO MATEMÁTICO

5.1. Introducción

Según I.M. Tkachenko y otros [17], la base y el objetivo matemático radican en reconstruir la función de densidad de una función de distribución $d\sigma(x)$ (como por ejemplo la función de pérdidas), la cual es una función estrictamente positiva, continua en R :

$$d\sigma(x) > 0,$$

[Eq 5.1]

Los momentos de dicha función de distribución deben ser conocidos previamente y calculados como:

$$\mu_r = \int_{-\infty}^{+\infty} x^r d\sigma(x) \quad r = 0,1,2,3, \dots$$

[Eq 5.2]

Si dicha función es simétrica, todos los momentos impares se anulan. A este problema se le conoce como el “problema de momentos clásico de Hamburger”. La condición necesaria y suficiente para que exista dicha función, con esos momentos, la dio Hamburger, probando que la sucesión de los momentos $\{\mu_r\}_{r=0}^{\infty}$ debía ser tal que todos los determinantes de Hankel sean positivos:

$$\Delta_r = \det \begin{bmatrix} \mu_0 & \cdots & \mu_r \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_r & \cdots & \mu_{2r} \end{bmatrix}$$

[Eq 5.3]

Si se cumple esta condición anterior, entonces existe una función $\varphi(z) \in R$, analítica en el semiplano complejo superior, y continua sobre la recta real, tal que:

$$\varphi(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\sigma(x)}{x-z}, \quad \text{Im } z > 0$$

[Eq 5.4]

La solución al problema de Hamburger la proporciona el Teorema o algoritmo de Nevanlinna (I.M. Tkachenko y otros, 1996 [17]), el cual afirma que dada una sucesión de números $\{\mu_r\}_{r=0}^{\infty}$ positiva es posible obtener una sucesión de polinomios $\{D_n(t)\}_{n=0}^{\infty}$ por medio de un proceso constructivo de Gramm-Schmidt, que satisfagan las siguientes propiedades:

1. $D_n(t)$ es un polinomio de grado n cuyo coeficiente del término de mayor grado es positivo.

2. Son polinomios ortonormales respecto a $d\sigma(x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_n(x)D_m(x)d\sigma(x) = \delta_{nm} \quad [\text{Eq 5.5}]$$

Donde δ_{nm} es la delta de Kronecker.

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{si } n = m \\ 0 & \text{si } n \neq n \end{cases}$$

Y donde:

$$\Delta_{-1} = 1 \quad \Delta_0 = \mu_0 \quad D_0 = 1$$

Los polinomios conjugados a estos anteriores se calculan como:

$$E_n(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{D_n(z) - D_n(x)}{z - x} d\sigma(x) \quad [\text{Eq 5.6}]$$

Los polinomios ortogonales de tipo $D_n(z)$ se les denomina de primer orden, mientras que los de tipo $E_n(z)$ son denominados de segundo orden. Estos polinomios van a ser independientes de la función de distribución, y solo van a depender de los momentos de la misma.

Por lo tanto, las soluciones al problema de momentos de Hamburger se pueden parametrizar por medio de la fórmula de Nevanlinna:

$$\varphi(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\sigma(x)}{x - z} = - \frac{E_{n+1}(z) + Q_n(z)E_n(z)}{D_{n+1}(z) + Q_n(z)D_n(z)}, \quad \text{Im } z > 0, \quad n = 0,1,2 \dots \quad [\text{Eq 5.7}]$$

De acuerdo con el teorema de Nevanlinna, esta construcción mediante polinomios establece una correspondencia uno a uno entre las funciones de distribución $\sigma(x)$, cuyos momentos son conocidos, y la funciones $Q_n(z)$ analíticas en el semiplano superior y continuas sobre el eje real que cumplen que en el infinito:

$$\frac{Q(z)}{z} \rightarrow 0 \quad [\text{Eq 5.8}]$$

Lo que garantiza que los momentos se cumplan automáticamente. La dificultad reside en que $Q_n(z)$ son funciones no conocidas inicialmente, ni tienen un significado físico, por lo que deben calcularse de forma matemática para el modelo que se quiera aplicara. Posteriormente se explicará como se obtiene para poder aplicarlo al modelo desarrollado en este trabajo.

5.2. Reconstrucción de la función dieléctrica inversa

El método de momentos permite expresar las propiedades dinámicas de un sistema (dependen de la frecuencia) en función de las propiedades estáticas (independientes de la frecuencia). Las características físicas del sistema son tenidas en cuenta a través de las reglas de suma (I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18]). Además, no se utiliza ningún parámetro de perturbación, en otras palabras, no se prevé que Γ sea pequeño.

La respuesta del sistema a un cambio en el campo eléctrico externo viene descrita por la función dieléctrica inversa, $\epsilon^{-1}(k, \omega)$. Se trata de una función compleja del tipo [Eq 3.21] cuya parte real describe la energía intercambiada en el campo eléctrico externo y el interno, y la parte imaginaria corresponde a la energía perdida durante el proceso.

A partir de las reglas de suma, es posible conocer los momentos de la función de pérdidas, definida como:

$$L(k, \omega) = -\frac{\text{Im}\epsilon^{-1}(k, \omega)}{\omega} \quad [\text{Eq 5.9}]$$

Que matemáticamente no es más que una función de distribución, por lo tanto, su función de densidad:

$$L(k, \omega)d\omega = d\sigma(x) \quad [\text{Eq 5.10}]$$

Sus momentos se calculan aplicando [Eq 5.2] de la siguiente forma:

$$C_k(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^k L(k, \omega)d\omega \quad [\text{Eq 5.11}]$$

La función de pérdidas, al tratarse de una función analítica holomorfa, limitada en el plano superior del plano complejo, puede ser construida por medio de la integral de Cauchy. En un contorno cerrado, donde z es un número complejo de parte real muy grande:

$$L(k, z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{L(k, \omega)}{\omega - z} d\omega, \quad z = \omega + i0^+ \quad [\text{Eq 5.12}]$$

Haciendo unos cambios matemáticos en [Eq 5.12]:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{L(k, \omega)}{\omega - z} d\omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{L(k, \omega)}{-z(1 - \frac{\omega}{z})} d\omega = \frac{-1}{\pi z} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{L(k, \omega)}{(1 - \frac{\omega}{z})} d\omega \quad [\text{Eq 5.13}]$$

Es posible convertir la integral en un desarrollo en serie (procedimiento de Gauss):

$$\frac{1}{1 - \frac{\omega}{z}} = 1 + \frac{\omega}{z} + \left(\frac{\omega}{z}\right)^2 + \left(\frac{\omega}{z}\right)^3 + \dots$$

[Eq 5.14]

Cuya condición necesaria para que converja es:

$$\left|\frac{\omega}{z}\right| < 1$$

[Eq 5.15]

Sin embargo, [Eq 5.15] no se cumple dado que ω va a tener valores entre $\pm\infty$ y z es grande, pero finita. Esto hace que [Eq 5.13]:

$$L(k, z \rightarrow \infty) \cong -\frac{C_0(k)}{z} - \frac{C_2(k)}{z^3} - \frac{C_4(k)}{z^4} - o\left(\frac{1}{z^5}\right)$$

[Eq 5.16]

Los momentos impares son nulos, debido a que la función $L(k, \omega)$ es una función compleja cuya parte imaginaria es siempre mayor que 0. En 1961, los científicos soviéticos V.I. Perel' y G.M. Eliashberg [19] demostraron rigurosamente que los momentos pares de orden mayor que 4 en un plasma de dos componentes divergen, mientras que, en un plasma de un componente, existen momentos pares mayores de orden 4, pero con los cinco primeros momentos se puede caracterizar perfectamente el sistema (0,1,2,3,4). Por lo tanto, es posible reconstruir la función dieléctrica inversa a partir únicamente de los 3 momentos que convergen: $C_0(k), C_2(k), C_4(k)$. Los valores de estos momentos coinciden con las reglas de sumas.

Las relaciones de Kramers-Kronig permiten relacionar la parte real e imaginaria de ciertas funciones complejas suma (I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18]). Estas funciones deben representar procesos físicos que sean lineales y causales:

$$\begin{aligned} \text{Re } \epsilon^{-1}(\omega, k) &= 1 + \frac{1}{\pi} V.P. \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \epsilon^{-1}(\omega', k)}{\omega' - \omega} d\omega' \\ \text{Im } \epsilon^{-1}(\omega, k) &= -\frac{1}{\pi} V.P. \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re } \epsilon^{-1}(\omega', k) - 1}{\omega' - \omega} d\omega' \end{aligned}$$

[Eq 5.17]

Por lo tanto, es posible aplicar [Eq 5.17] a la función dieléctrica inversa, ya que cumple todos los requisitos. Así pues, por definición queda:

$$\epsilon^{-1}(k, \omega) = 1 + \frac{1}{\pi} V.P. \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \epsilon^{-1}(k, \omega')}{\omega' - \omega} d\omega' + i \text{Im } \epsilon^{-1}(k, \omega)$$

[Eq 5.18]

Si realizamos el cambio de variable $z = \omega + i0^+$ en [Eq 5.18] queda la siguiente expresión:

$$\epsilon^{-1}(k, z) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \epsilon^{-1}(k, \omega')}{\omega' - z} d\omega',$$

[Eq 5.19]

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Y para poder trabajar con números adimensionales se realiza también otro cambio de variable en [Eq 5.19] para la longitud de onda $q = ka$:

$$\epsilon^{-1}(q, z) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Im \epsilon^{-1}(q, \omega)}{\omega - z} d\omega = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega L(q, \omega)}{\omega - z} d\omega$$

[Eq 5.20]

Sumando y restando z en el numerador de [Eq 5.20] y separando en diferentes integrales:

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(q, z) &= 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\omega + z - z)L(q, \omega)}{\omega - z} d\omega \\ &= 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\omega - z)L(q, \omega)}{\omega - z} d\omega - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z L(q, \omega)}{\omega - z} d\omega \\ &= 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} L(q, \omega) d\omega - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z L(q, \omega)}{\omega - z} d\omega \end{aligned}$$

[Eq 5.21]

Por definición, según [Eq 5.11]:

$$C_0(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} L(k, \omega) d\omega$$

[Eq 5.22]

Combinando [Eq 5.22] con [Eq 5.21]:

$$\epsilon^{-1}(q, z) = 1 - C_0(q) - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega L(q, \omega)}{\omega - z} d\omega$$

[Eq 5.23]

Aplicando el teorema de Nevanlinna visto en [Eq 5.7] queda:

$$\epsilon^{-1}(q, z) = 1 - C_0(q) + z \frac{E_3(z; q) + Q_2(q)E_2(z; q)}{D_3(z; q) + Q_2(q)D_2(z; q)}$$

[Eq 5.24]

Los polinomios se obtienen mediante el proceso de ortonormalización de Gramm-Schmidt. El espacio vectorial de los polinomios tiene la base canónica:

$$B = \{1, t, t^2, t^3, \dots\}$$

Pero dicha base no es ortogonal, es decir, el producto escalar entre sus funciones es diferente de 0. Por lo tanto, hay que obtener los polinomios ortogonales. Partiendo de que $D_0 = 1$, se pueden construir el resto de los polinomios como [Eq 5.5]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_n(x; q) D_m(x; q) L(q, x) d(x) = \delta_{nm}$$

Los polinomios conjugados vienen determinados como [Eq 5.6]:

$$E_j(x; q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{D_j(\omega; q) - D_j(x; q)}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega$$

El cálculo matemático de los polinomios D_n y E_n puede se ha realizado en el Anejo I (punto 9.1 del trabajo). En resumen:

$$\begin{aligned} D_0(x; q) &= 1, & D_1(x; q) &= x, & D_2(x; q) &= x^2 - \omega_1^2(q), & D_3(x; q) &= x^3 - x\omega_2^2(q), \\ E_0(x; q) &= 0, & E_1(x; q) &= C_0, & E_2(x; q) &= xC_0, & E_3(x; q) &= C_0(x^2 + \omega_1^2(q) - \omega_2^2(q)), \end{aligned}$$

[Eq 5.25]

Donde las frecuencias características del sistema, calculadas en función de los momentos son:

$$\begin{aligned} \omega_1^2(q) &= \frac{C_2(q)}{C_0(q)} \\ \omega_2^2(q) &= \frac{C_4(q)}{C_2(q)} \end{aligned}$$

[Eq 5.26]

Sustituyendo por los polinomios de Nevanlinna de [Eq 5.25] en [Eq 5.24]:

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(q, z) &= 1 - C_0(q) + z \frac{C_0(q)[z^2 + \omega_1^2(q) - \omega_2^2(q)] + Q_2[C_0(q)z]}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \\ &= 1 + C_0(q) \frac{z[z^2 + \omega_1^2(q) - \omega_2^2(q)] + Q_2z^2 - [z^3 - z\omega_2^2(q)] - Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \\ &= 1 + C_0(q) \frac{z[z^2 + \omega_1^2(q) - \omega_2^2(q)] + Q_2z^2 - [z^3 - z\omega_2^2(q)] - Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \\ &= 1 + C_0(q) \frac{z[z^2 + \omega_1^2(q) - \omega_2^2(q)] + Q_2z^2 - [z^3 - z\omega_2^2(q)] - Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \\ &= 1 + C_0(q) \frac{z[z^2 + \omega_1^2(q) - \omega_2^2(q)] + Q_2z^2 - [z^3 - z\omega_2^2(q)] - Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \\ &= 1 + C_0(q) \frac{[z^3 - z^3] + z\omega_1^2(q) + [-z\omega_2^2(q) + z\omega_2^2(q)] + [Q_2z^2 - Q_2z^2] + Q_2\omega_1^2(q)}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \\ &= 1 + C_0(q) \frac{z\omega_1^2(q) + Q_2\omega_1^2(q)}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} = 1 + C_0(q) \frac{z\omega_1^2(q) + Q_2\omega_1^2(q)}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \end{aligned}$$

[Eq 5.27]

De la definición de ω_1^2 :

$$C_0(q) = \frac{C_2(q)}{\omega_1^2(q)} = \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2(q)}$$

[Eq 5.28]

Sustituyendo en [5.28]

$$\begin{aligned}\epsilon^{-1}(q, z) &= 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2(q)} \frac{\omega_1^2(q)(z + Q_2)}{[z^3 - z\omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]} \\ &= 1 + \frac{\omega_p^2(z + Q_2)}{z[z^2 - \omega_2^2(q)] + Q_2[z^2 - \omega_1^2(q)]}\end{aligned}\quad [\text{Eq 5.29}]$$

Finalmente proyectamos en el eje real: $z = \omega$:

$$\epsilon^{-1}(q, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega + Q_2)}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + Q_2[\omega^2 - \omega_1^2(q)]}\quad [\text{Eq 5.30}]$$

Donde el parámetro de Nevanlinna se define como (I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18]):

$$Q_2(q) = ih_0(q)\quad [\text{Eq 5.31}]$$

5.3. Función de pérdidas

El siguiente paso es obtener la parte imaginaria de la función dieléctrica, para así llegar a la función de pérdidas (ver [Eq 5.9]). Para hallar la parte imaginaria de la función dieléctrica, se le resta el complejo conjugado y se divide por $2i$. Por ejemplo, sea z una función compleja del tipo:

$$z = x + iy$$

Para obtener la parte imaginaria de dicha función:

$$\text{Im } z = \frac{1}{2i} [x + iy - (x - yi)] = \frac{1}{2i} [2iy] = y\quad [\text{Eq 5.32}]$$

Aplicando dicho principio a la inversa de la función dieléctrica [Eq 5.30]:

$$\begin{aligned}\text{Im } \epsilon^{-1}(q, \omega) &= \frac{1}{2i} \left[1 + \frac{\omega_p^2(\omega + ih_0(q))}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + ih_0(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]} - 1 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\omega_p^2(\omega - ih_0(q))}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - ih_0(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]} \right] \\ &= \frac{1}{2i} \left[\frac{\omega_p^2(\omega + ih_0(q))}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + ih_0(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\omega_p^2(\omega - ih_0(q))}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - ih_0(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]} \right] \\ &= \frac{1}{2i} \left[\frac{\omega_p^2(\omega + ih_0(q))(\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - ih_0(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)])}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 - i^2 h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\omega_p^2(\omega - ih_0(q))(\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + ih_0(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)])}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 - i^2 h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\omega_p^2}{2i} \left[\frac{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_1^2(q)] - i^2h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2]}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right. \\
&+ \left. \frac{-\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_1^2(q)] + i^2h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right] \\
&= \frac{\omega_p^2}{2i} \left[\frac{ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_1^2(q)]}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right. \\
&+ \left. \frac{ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_1^2(q)]}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right] \\
&= \frac{\omega_p^2}{2i} \left[\frac{2ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - 2ih_0(q)\omega[\omega^2 - \omega_1^2(q)]}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right] \\
&= \frac{2i\omega\omega_p^2}{2i} \left[\frac{h_0(q)[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - h_0(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right] \\
&= h_0(q)\omega\omega_p^2 \left[\frac{[\omega^2 - \omega_2^2(q)] - [\omega^2 - \omega_1^2(q)]}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right] \\
&= h_0(q)\omega\omega_p^2 \left[\frac{\omega_1^2(q) - \omega_2^2(q)}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right]
\end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$Im \epsilon^{-1}(q, \omega) = \frac{h_0(q)\omega\omega_p^2(\omega_1^2(q) - \omega_2^2(q))}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \quad [\text{Eq 5.33}]$$

La función de pérdidas de un sistema será, combinando [Eq 5.9] con [Eq 5.33]:

$$L(q, \omega) = -\frac{Im \epsilon^{-1}(q, \omega)}{\omega} = -\frac{h_0(q)\omega_p^2(\omega_1^2(q) - \omega_2^2(q))}{\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \quad [\text{Eq 5.34}]$$

Para obtener el valor de $h_0(q)$ no existe un método matemático genérico. Sin embargo, se sabe que la función de perdidas presenta un extremo en $\omega = 0$. La solución estaría en realizar la derivada de dicha función, e igualar a cero para frecuencia nula. El problema reside en que la función de perdidas depende de ω^2 lo que hace que las derivadas de orden impar se anulan $\omega = 0$ y no se pueda despejar $h_0(q)$. Por lo que se necesita realizar su segunda derivada. Su cálculo matemático puede observarse en el Anejo II, realizado paso a paso.

5.4. Factor de estructura dinámico

Como afirma L.D. Landau en su quinto tomo [20], la función de pérdidas se relaciona con la función de estructura dinámica por medio del teorema de fluctuación-disipación para un sistema cuántico:

$$-Im \epsilon^{-1}(q, \omega) = \omega L(q, \omega) = \frac{\pi\Phi(q)(1 - e^{-\beta\omega\hbar})S(q, \omega)}{\hbar} \quad [\text{Eq 5.35}]$$

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Donde $\Phi(q)$ se corresponde con el potencial de Coulomb:

$$\Phi(q) = \frac{4\pi e^2 a^2}{q^2}$$

[Eq 5.36]

La anterior ecuación también se puede aplicar a un sistema clásico, donde $\hbar \rightarrow 0$, quedando la famosa ecuación de Vlasov (aplicando las leyes de l'Hopital para resolver el límite):

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{(1 - e^{-\beta\omega\hbar})}{\hbar} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\frac{d}{d\hbar}(1 - e^{-\beta\omega\hbar})}{\frac{d}{d\hbar}\hbar} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\beta\omega e^{-\beta\omega\hbar}}{1} = \beta\omega$$

Sustituyendo en [Eq 5.35] y despejando el factor de estructura dinámico:

$$-Im \epsilon^{-1}(q, \omega) = \omega L(q, \omega) = \pi\omega\beta\Phi(q)S(q, \omega)$$

$$S(q, \omega) = \frac{L(q, \omega)}{\pi\beta\Phi(q)}$$

[Eq 5.37]

Utilizando la ecuación que conserva las propiedades de un sistema cuántico:

$$S(q, \omega) = \frac{\omega\hbar q^2}{4\pi^2 e^2 a^2 (1 - e^{-\beta\omega\hbar})} \left(\frac{h_0(q)\omega_p^2 (\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q))}{\omega^2 [\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) [\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right)$$

[Eq 5.38]

Multiplicando numerador y denominador por 3 y por β , y reagrupando términos:

$$S(q, \omega) = \frac{\beta n \omega \hbar q^2}{3\pi\Gamma(1 - e^{-\beta\omega\hbar})} \left(\frac{h_0(q)\omega_p^2 (\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q))}{\omega^2 [\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) [\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right)$$

[Eq 5.39]

Para el caso de un sistema clásico, la expresión se simplifica aún más:

$$S(q, \omega) = \frac{q^2}{\pi\beta 4\pi e^2 a^2} \left(\frac{h_0(q)\omega_p^2 (\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q))}{\omega^2 [\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) [\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right)$$

[Eq 5.40]

Reagrupando nuevamente:

$$S(q, \omega) = \frac{q^2 n}{3\pi\Gamma} \left(\frac{h_0(q)\omega_p^2 (\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q))}{\omega^2 [\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) [\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right)$$

[Eq 5.41]

5.5. Fórmulas de Cardano

Existe un método para obtener directamente los puntos máximos del factor de estructura dinámico. Este consiste en obtener las soluciones canónicas del denominador de la función dieléctrica inversa [Eq 5.30]. El denominador en cuestión es el siguiente:

$$z[z^2 - \omega_2^2(q)] + ih_0(q)[z^2 - \omega_1^2(q)] = 0$$

[Eq 5.42]

Como se puede observar, la ecuación resultante es de tercer orden. Para encontrar sus soluciones exactas se procede con las fórmulas de Cardano, que aplicadas a la ecuación anterior generan las siguientes soluciones (I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18]):

$$\begin{aligned}\omega_{sh} &= -wX(q) - w^2Y(q) - \frac{ih_0(q)}{3} \\ \omega'_{sh} &= -X(q) - Y(q) - \frac{ih_0(q)}{3} \\ \omega_{ush} &= -w^2X(q) - wY(q) - \frac{ih_0(q)}{3}\end{aligned}$$

[Eq 5.43]

Donde ω_{ush} (*unshifted*) se trata de una solución cuya parte real será 0, es decir, se trata de un máximo para frecuencia nula, mientras que ω_{sh} y ω'_{sh} (*shifted*) van a ser máximos de parte real simétrica, uno positiva que debe coincidir con el que se puede observar en las representaciones, y otro negativa. Cada frecuencia obtenida es un número complejo, cuya parte real coincide con la frecuencia de los puntos máximos que se dan en la representación del factor de estructura dinámico, mientras que la parte imaginaria está relacionada con la anchura de dichos picos.

Los parámetros de los que dependen se calculan como:

$$\begin{aligned}Z^3(q) &= \sqrt{-\left(\frac{\omega_2^2(q)}{3} - \frac{h_0^2(q)}{9}\right)^3 - \left(\frac{h_0(q)W(q)}{2}\right)^2} \\ W(q) &= -\frac{\omega_2^2(q)}{3} + \omega_1^2(q) + \frac{2h_0^2(q)}{27} \\ X(q) &= \sqrt[3]{\frac{h_0(q)W(q)}{2i} + Z^3(q)} \\ Y(q) &= \sqrt[3]{\frac{h_0(q)W(q)}{2i} - Z^3(q)} \\ w &= e^{\frac{2\pi i}{3}}\end{aligned}$$

[Eq 5.44]

6. RESULTADOS

6.1. Plasma de un componente

Según Setsuo Ichimaru [8], un plasma es OCP (*one-component plasma*) cuando el sistema está compuesto por partículas con idéntica carga, que interactúan únicamente a través del potencial de Coulomb, y que están inmersas en un campo uniforme de carga contraria, que asegura la neutralidad del sistema. A esto se le conoce también como mar de Dirac: los electrones forman una matriz que impide el movimiento de los mismos por sus relaciones cuánticas, mientras que los iones al ser mayores, pesan más sus propiedades térmicas y se mueven con libertad.

Así pues, partiendo del hecho de que la masa de los electrones es mucho menor que la de los iones, lo que les confiere una mayor velocidad es posible suponer un sistema formado por una serie de iones sobre un fondo uniforme de electrones degenerados. La dinámica del sistema vendrá dada por las interacciones entre los iones.

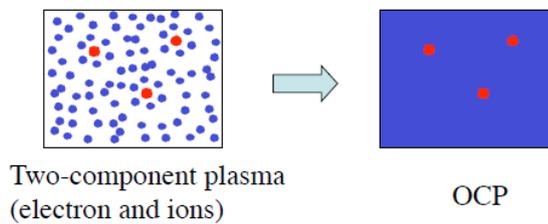


Figura 15: Diferencia entre plasma de un componente y de dos componentes.

La diferencia entre un OCP tratado de forma clásica o cuántica, únicamente va a cambiar la definición de los momentos. Por lo tanto, se van a tratar ambos casos de forma independiente. El estudio de un OCP es interesante desde un punto de vista meramente académico, por su mayor simplicidad.

6.1.1. OCP cuántico

Como ya se ha explicado anteriormente, en un sistema cuántico los efectos de interacción entre las partículas tienen una gran importancia, igual o mayor que la de los efectos térmicos, provocados por el movimiento de dichas partículas.

El momento $C_0(k)$ se define como:

$$C_0(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} L(k, \omega) d\omega = 1 - \epsilon^{-1}(k, 0) \quad [6.1]$$

Dicho momento se obtiene estrictamente mediante las relaciones de Kramers Krönig, en [Eq 5.17], para el caso en que la frecuencia sea 0:

$$\epsilon^{-1}(k, 0) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im} \epsilon^{-1}(k, \omega')}{\omega'} d\omega' = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (-L(k, \omega')) d\omega' = 1 - C_0 \quad [\text{Eq 6.2}]$$

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Es posible despejar:

$$C_0(k) = 1 - \epsilon^{-1}(k, 0) \quad [\text{Eq 6.3}]$$

Donde $\epsilon^{-1}(k, 0)$ se puede reconstruir a partir de sus asíntotas (Yu. V. Arkhipov y otros (2016) [21]):

$$\begin{aligned} \epsilon(k \rightarrow 0, 0) &\approx 1 + \frac{k_D^2}{k^2} \\ \epsilon(k \rightarrow \infty, 0) &\approx 1 + \frac{k_q^4}{k^4} \end{aligned} \quad [\text{Eq 6.4}]$$

Uniéndolas para crear la función:

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{1}{\frac{k^2}{k_D^2} + \frac{k^4}{k_q^4}} \quad [\text{Eq 6.5}]$$

Donde $k_D^2 = 4\pi n e^2 \beta$, y $k_q^4 = \frac{16\pi n m e^2}{\hbar^2}$. Sustituyendo por sus definiciones en [Eq 6.5] y reordenando:

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{1}{\frac{k^2}{k_D^2} + \frac{k^4}{k_q^4}} = 1 + \frac{k_D^2 k_q^4}{k^2 k_q^4 + k^4 k_D^2} = \frac{k^2 k_q^4 + k^4 k_D^2 + k_D^2 k_q^4}{k^2 k_q^4 + k^4 k_D^2} \quad [\text{Eq 6.6}]$$

Combinando [Eq 6.6] con [Eq 6.3]:

$$C_0 = 1 - \epsilon^{-1}(k, 0) = \frac{k^2 k_q^4 + k^4 k_D^2 + k_D^2 k_q^4 - k^2 k_q^4 - k^4 k_D^2}{k^2 k_q^4 + k^4 k_D^2 + k_D^2 k_q^4} = \frac{k_D^2 k_q^4}{k^2 k_q^4 + k^4 k_D^2 + k_D^2 k_q^4} \quad [\text{Eq 6.7}]$$

Sustituyendo k por el parámetro adimensional q=ka en [Eq 6.7]:

$$C_0(q) = \frac{a^6 k_D^2 k_q^4}{q^2 a^4 k_q^4 + q^4 a^2 k_D^2 + a^6 k_D^2 k_q^4} \quad [\text{Eq 6.8}]$$

Y dado que:

$$k_D^2 a^2 = 4\pi e^2 \beta \left(\frac{3}{4\pi a^3} \right) a^2 = \frac{3}{a} \beta e^2 = 3\Gamma$$

$$k_q^4 a^4 = \frac{16\pi m e^2}{\hbar^2} \left(\frac{3}{4\pi a^3} \right) a^4 = \frac{12a^4 m e^2}{a^3 \hbar^2} = \frac{12a^4}{a^3 a_B} = 12r_s \quad [\text{Eq 6.9}]$$

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Sustituyendo [Eq 6.9] en [Eq 6.8]:

$$C_0(q) = \frac{3\Gamma * 12r_S}{q^2 12r_S + q^4 3\Gamma + 3\Gamma * 12r_S} \quad [\text{Eq 6.10}]$$

El segundo momento $C_2(k)$ coincide con la f-sum rule (I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18]):

$$C_2(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^2 = \frac{3(Ze)^2}{m a^3} \quad [\text{Eq 6.11}]$$

Y el cuarto momento $C_4(k)$ (I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18]):

$$C_4(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^4 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^4 [1 + W(k)] \quad [\text{Eq 6.12}]$$

Donde:

$$W(k) = K(k) + U(k) \quad [\text{Eq 6.13}]$$

La primera contribución se corresponde la contribución cinética del sistema, que incluye además los efectos cuánticos de degeneración del sistema, debido a la dispersión que se produce (J. Ortner y otros, 2001 [22]):

$$K(k) = \frac{\langle v_e^2 \rangle k^2}{\omega_p^2} + \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \frac{k^4}{\omega_p^2} \quad [\text{Eq 6.14}]$$

El primer término se trata del término cinético anteriormente mencionado, donde $\langle v_e^2 \rangle$ es el promedio de la velocidad de los electrones al cuadrado, que se puede expresar mediante la integral de Fermi de la siguiente forma:

$$\langle v_e^2 \rangle = \frac{3 F_{3/2}(\eta)}{m \beta \theta^{-3/2}} \quad [\text{Eq 6.15}]$$

Donde F_v es la integral de Fermi de orden v :

$$F_v = \int_0^{+\infty} \frac{x^v}{\exp(x - \eta) + 1} dx \quad [\text{Eq 6.16}]$$

Y $\eta = \beta\mu$ es el potencial químico adimensional del sistema electrónico. Dicho término adimensional, necesario para obtener el valor de la integral de Fermi de orden 3/2 se puede obtener matemáticamente a partir de la condición de normalización de la distribución de Fermi-Dirac:

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{3} D^{3/2} \quad [\text{Eq 6.17}]$$

Donde D se corresponde con la inversa del parámetro de degeneración de Fermi:

$$D = \theta^{-1} = E_F \beta$$

[Eq 6.18]

Para dejar la expresión $K(k)$ en función de el parámetro adimensional $q=ka$:

$$\begin{aligned} K(q) &= \frac{3 F_{3/2}(\eta)}{m \beta D^{3/2}} q^2 + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 \frac{q^4}{3e^2 a^2} = \frac{F_{3/2}(\eta)}{\beta D^{3/2}} q^2 + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 \frac{q^4}{\frac{3e^2}{m} a} = \\ &= \frac{F_{3/2}(\eta) q^2}{D^{\frac{3}{2}}} \frac{a}{\beta e^2} + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 \frac{m q^4}{3e^2 a} = \frac{F_{3/2}(\eta) q^2}{D^{3/2} \Gamma} + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 \frac{m q^4}{3e^2 r s a_B} = \\ &= \frac{F_{3/2}(\eta) q^2}{D^{3/2} \Gamma} + \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 \frac{m q^4}{3e^2 r s \frac{\hbar^2}{m e^2}} = \frac{F_{3/2}(\eta) q^2}{D^{3/2} \Gamma} + \left(\frac{1}{2m}\right)^2 \frac{m^2 q^4}{3 r s} = \\ &= \frac{F_{3/2}(\eta) q^2}{D^{3/2} \Gamma} + \frac{q^4}{12 r s} \end{aligned}$$

[Eq 6.19]

El término $U(k)$ se trata de la contribución debido a la interacción entre electrones, en un sistema Coulombiano, donde $q=ka$, $p=k'a$ (I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18]):

$$U(k) = \frac{1}{2\pi^2 n} \int_0^{+\infty} k'^2 [S(k') - 1] f(k'; k) dk' = \frac{1}{3\pi} \int_0^{+\infty} p^2 [S(p) - 1] f(p; q) dp$$

[Eq 6.20]

$$f(p, q) = \frac{5}{6} - \frac{p^2}{2q^2} + \left(\frac{p^3}{4q^3} - \frac{p}{2q} + \frac{q}{4p} \right) \ln \left| \frac{q+p}{q-p} \right|$$

[Eq 6.21]

El factor de estructura $S(p)$ que hay dentro de la integral no es fácil calcularlo, ya que se obtiene mediante un algoritmo matemático, que requiere bastante tiempo de computación y, además, la solución depende de las condiciones y del sistema estudiado, por lo tanto, su rango de validez no se puede aplicar a cualquier sistema. En 1998, Chabrier y Potekhin [23] obtuvieron una aproximación a dicha ecuación basándose en la ecuación de estado, cuyo resultado fue:

$$U(q) = -\frac{4q^2}{45\Gamma} \Gamma^{\frac{3}{2}} \left[\frac{A_1}{\sqrt{A_2 + \Gamma}} + \frac{A_3}{1 + \Gamma} \right]$$

[Eq 6.22]

Donde:

$$A_1 = -0.9052, \quad A_2 = 0,6322, \quad A_3 = -\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{A_1}{\sqrt{A_2}}$$

Por lo tanto, las frecuencias características del sistema serán (independientes de la frecuencia) [Eq 5.25]:

$$\begin{aligned}\omega_1^2(q) &= \frac{C_2(q)}{C_0(q)} = \omega_p^2 \left[1 + \frac{q^2}{3\Gamma} + \frac{q^4}{12r_s} \right] \\ \omega_2^2(q) &= \frac{C_4(q)}{C_2(q)} = \omega_p^2 [1 + K(q) + U(q)]\end{aligned}$$

[Eq 6.23]

Para utilizar una ecuación que solo depende de parámetros adimensionales, se realiza el siguiente cambio de variable, para que las frecuencias sean adimensionales:

$$w = \frac{\omega}{\omega_p} \qquad w_1^2(q) = \frac{\omega_1^2(q)}{\omega_p^2} \qquad w_2^2(q) = \frac{\omega_2^2(q)}{\omega_p^2}$$

[Eq 6.24]

Sustituyendo en el factor de estructura dinámico de [Eq 5.39] queda:

$$\begin{aligned}S(q, w) &= \frac{\beta n(w\omega_p)\hbar q^2}{3\pi\Gamma(1 - e^{-\beta(w\omega_p)\hbar})} \left(\frac{h_0(q)\omega_p^5(w_2^2(q) - w_1^2(q))}{\omega_p^6 w^2 [w^2 - w_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)\omega_p^6 [w^2 - w_1^2(q)]^2} \right) = \\ &= \frac{\beta n(w\omega_p)\hbar q^2}{3\pi\Gamma(1 - e^{-\beta(w\omega_p)\hbar})} \left(\frac{h_0(q)(w_2^2(q) - w_1^2(q))}{\omega_p w^2 [w^2 - w_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[w^2 - w_1^2(q)]^2} \right) = \\ &= \frac{\beta n w \hbar q^2}{3\pi\Gamma(1 - e^{-\beta w \omega_p \hbar})} \left(\frac{h_0(q)(w_2^2(q) - w_1^2(q))}{w^2 [w^2 - w_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[w^2 - w_1^2(q)]^2} \right)\end{aligned}$$

[Eq 6.25]

6.1.2. OCP Clásico

Como explica Yu. V. Arkhipov y otros [24], en un OCP plasma clásico, los efectos térmicos son mayores que las fuerzas debidas a la interacción entre las partículas. Por lo tanto, estas últimas se pueden despreciar. De esta forma, las definiciones de algunos momentos van a verse simplificadas.

En primer lugar, el momento $C_0(k)$, se define igual que antes como en [Eq 6.1]:

$$C_0(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} L(k, \omega) d\omega = 1 - \epsilon^{-1}(k, 0)$$

Con la diferencia de que la función dieléctrica estática se simplifica a su versión más clásica:

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{k_D^2}{k^2}$$

[Eq 6.26]

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

De esta forma:

$$C_0 = 1 - \epsilon^{-1}(k, 0) = \frac{k_D^2}{k^2 + k_D^2} \quad [\text{Eq 6.27}]$$

Sustituyendo k por el parámetro adimensional q=ka:

$$C_0(q) = \frac{a^2 k_D^2}{q^2 + a^2 k_D^2} \quad [\text{Eq 6.28}]$$

Donde, aplicando las simplificaciones de [Eq 6.9]:

$$C_0(q) = \frac{3\Gamma}{q^2 + 3\Gamma} \quad [\text{Eq 6.29}]$$

El segundo momento $C_2(k)$ coincide con la f-sum rule, al igual que en [Eq 6.11]:

$$C_2(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^2 = \frac{3(Ze)^2}{m a^3}$$

Y el cuarto momento $C_4(k)$ también coincide con el de la aproximación clásica [Eq 6.12]:

$$C_4(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^4 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^4 [1 + W(k)]$$

La primera contribución se simplifica únicamente a la contribución cinética del sistema:

$$K(k) = \frac{\langle v_e^2 \rangle k^2}{\omega_p^2} \quad [\text{Eq 6.30}]$$

Donde $\langle v_e^2 \rangle$ se puede expresar mediante su versión más clásica, es decir, no contempla los efectos de acoplamiento:

$$\langle v_e^2 \rangle = \frac{3}{m \beta} \quad [\text{Eq 6.31}]$$

Para dejar la expresión $K(k)$ en función de el parámetro adimensional q=ka:

$$K(q) = \frac{\frac{3}{m \beta} q^2}{\frac{3e^2}{m a^3} a^2} = \frac{a q^2}{e^2 \beta} = \frac{q^2}{\Gamma} \quad [\text{Eq 6.32}]$$

El término $U(k)$ corresponde al mismo que en [Eq 6.22].

$$U(q) = -\frac{4q^2}{45\Gamma} \Gamma^{\frac{3}{2}} \left[\frac{A_1}{\sqrt{A_2 + \Gamma}} + \frac{A_3}{1 + \Gamma} \right]$$

Por lo tanto, las frecuencias características para un OCP clásico:

$$\omega_1^2(q) = \frac{C_2(q)}{C_0(q)} = \omega_p^2 \left[1 + \frac{q^2}{3\Gamma} \right]$$

$$\omega_2^2(q) = \frac{C_4(q)}{C_2(q)} = \omega_p^2 [1 + K(q) + U(q)]$$

[Eq 6.33]

El factor de estructura dinámico utilizado debe ser la versión clásica [Eq 5.41], donde se realiza el cambio de variable de [Eq 6.24], quedando:

$$S(q, \omega) = \frac{q^2 n}{3\pi\Gamma} \left(\frac{h_0(q) \omega_p^5 (w_2^2(q) - w_1^2(q))}{\omega_p^6 w^2 [w^2 - w_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) \omega_p^6 [w^2 - w_1^2(q)]^2} \right)$$

$$= \frac{q^2 n}{3\pi\Gamma \omega_p} \left(\frac{h_0(q) (w_2^2(q) - w_1^2(q))}{\omega_p w^2 [w^2 - w_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) [w^2 - w_1^2(q)]^2} \right)$$

[Eq 6.34]

6.1.3 Resultados OCP

Las ecuaciones anteriormente derivadas son introducidas en el programa de tratamiento numérico *Mathematica*. Este permite ejecutar todas las expresiones, dadas unas condiciones iniciales, y obtener un factor de estructura dinámico para esas condiciones prefijadas. Puede verse un ejemplo de programación en el Anejo III.

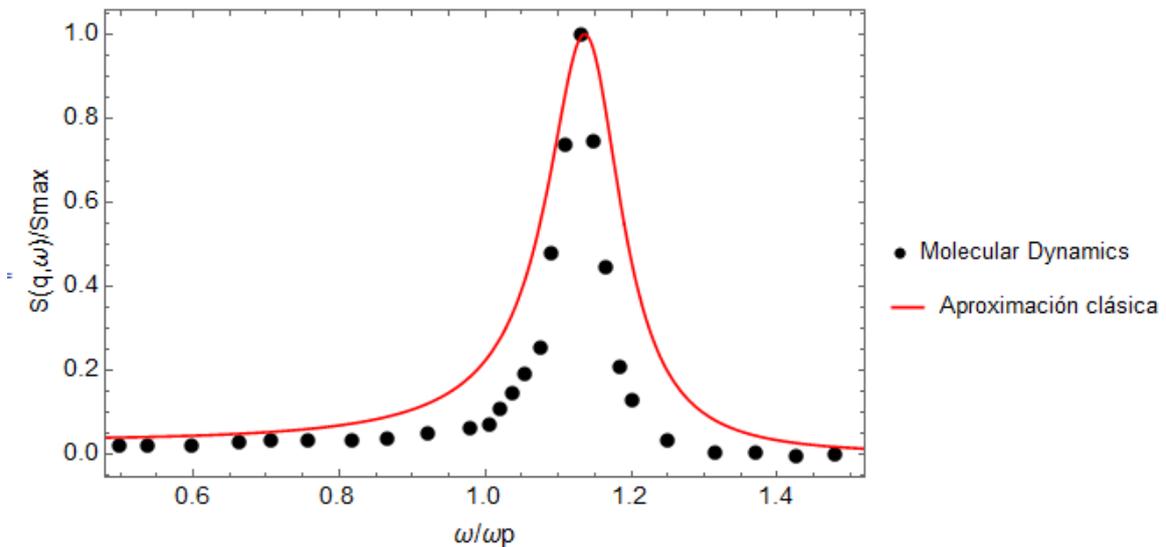


Figura 16: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=0.993$ y $q=0.6187$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de A. Wierling y otros, 2002 [25], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

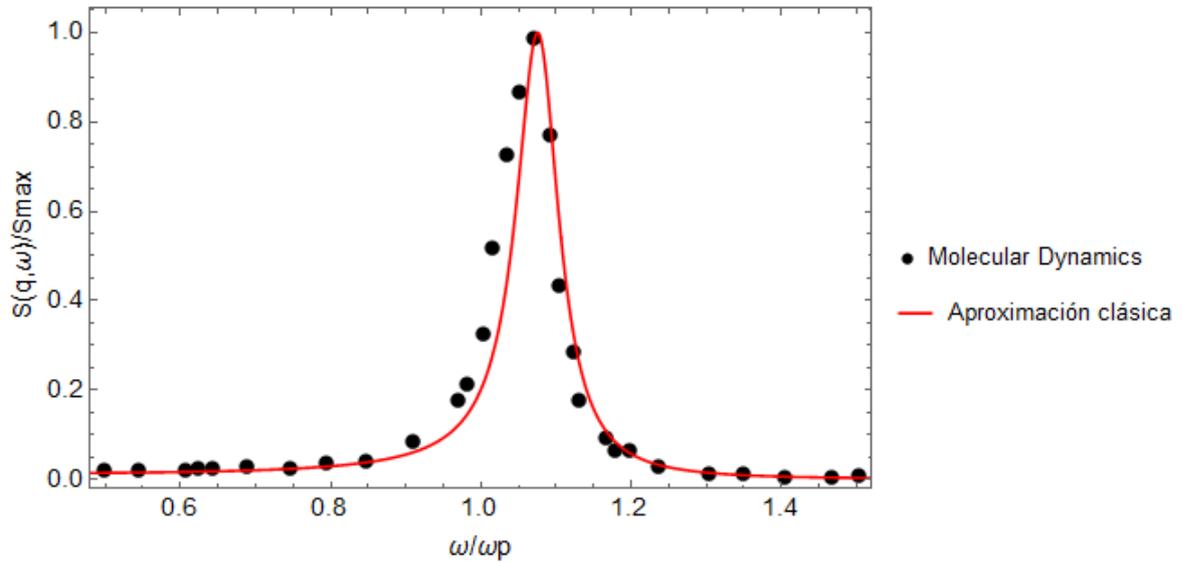


Figura 17: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=2$ y $q=0.6015$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de A. Wierling y otros, 2002 [25], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

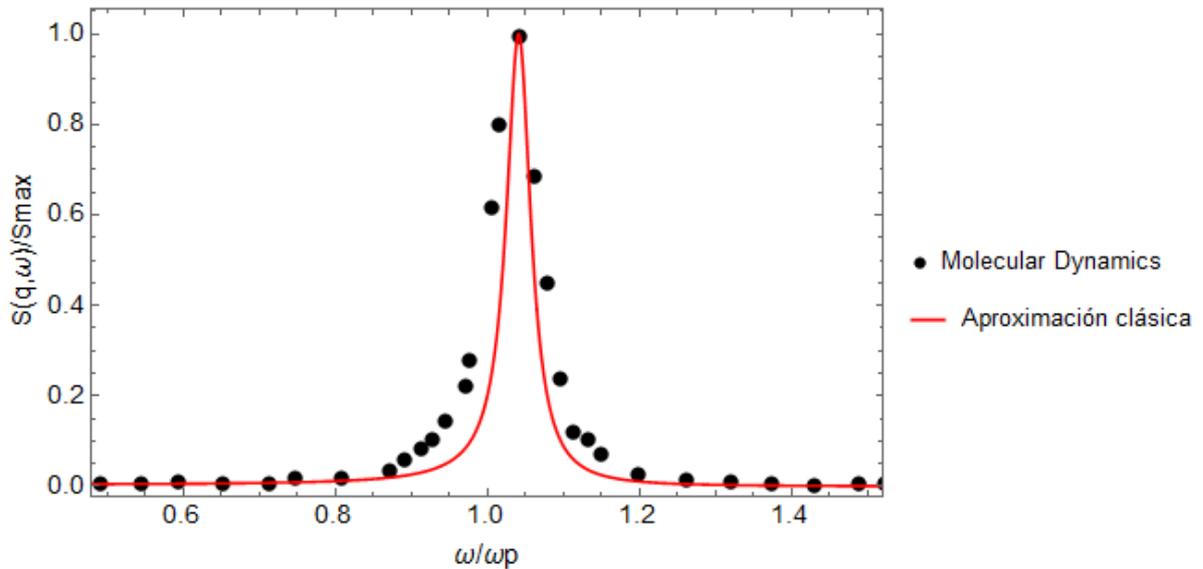


Figura 18: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=4$ y $q=0.6945$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de A. Wierling y otros, 2002 [25], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

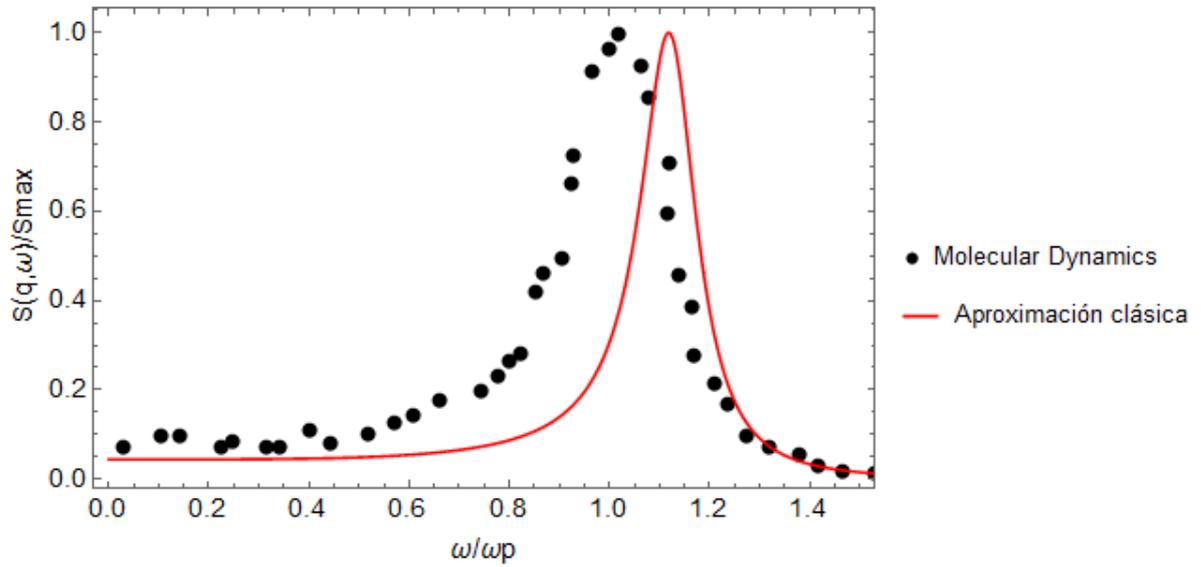


Figura 19: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=8$ y $q=1.389$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de A. Wierling y otros, 2002 [25], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

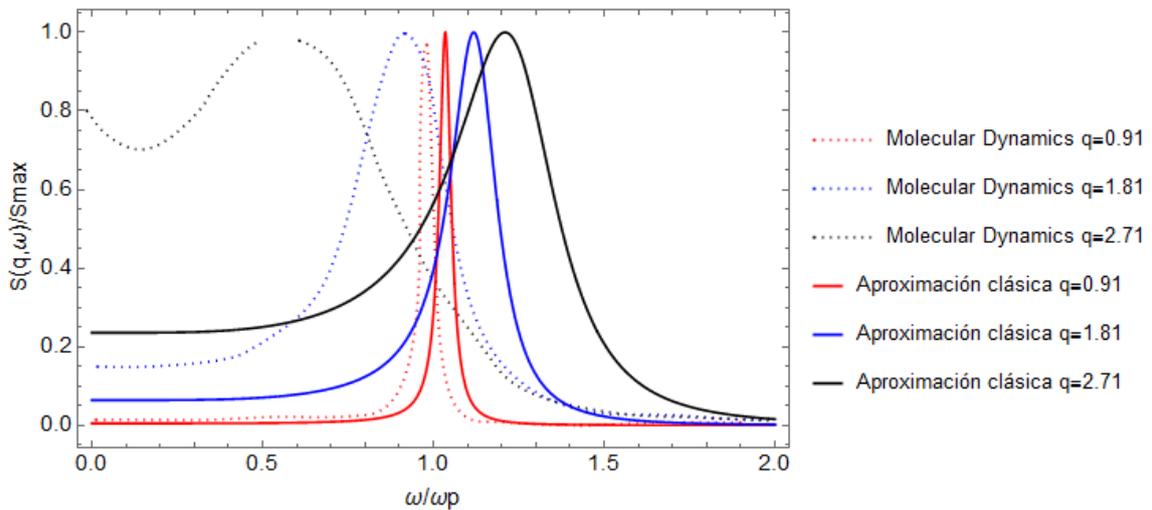


Figura 20: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=20$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de J.P Hansen y I.R. McDonald, 1975 [26], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

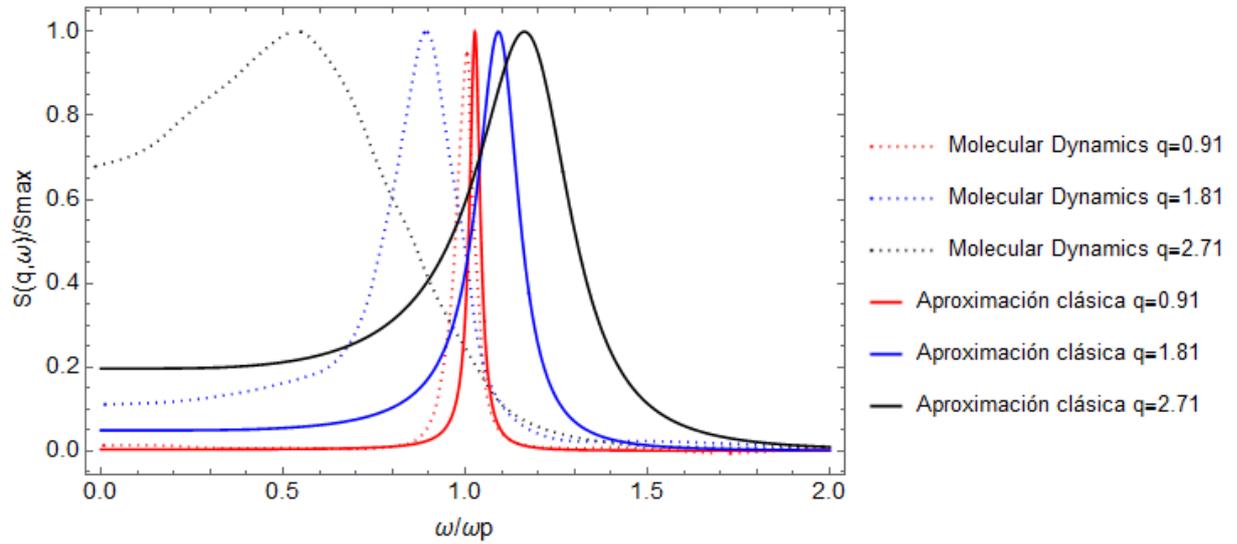


Figura 21: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=50$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de J.P Hansen y I.R. McDonald, 1975 [26], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

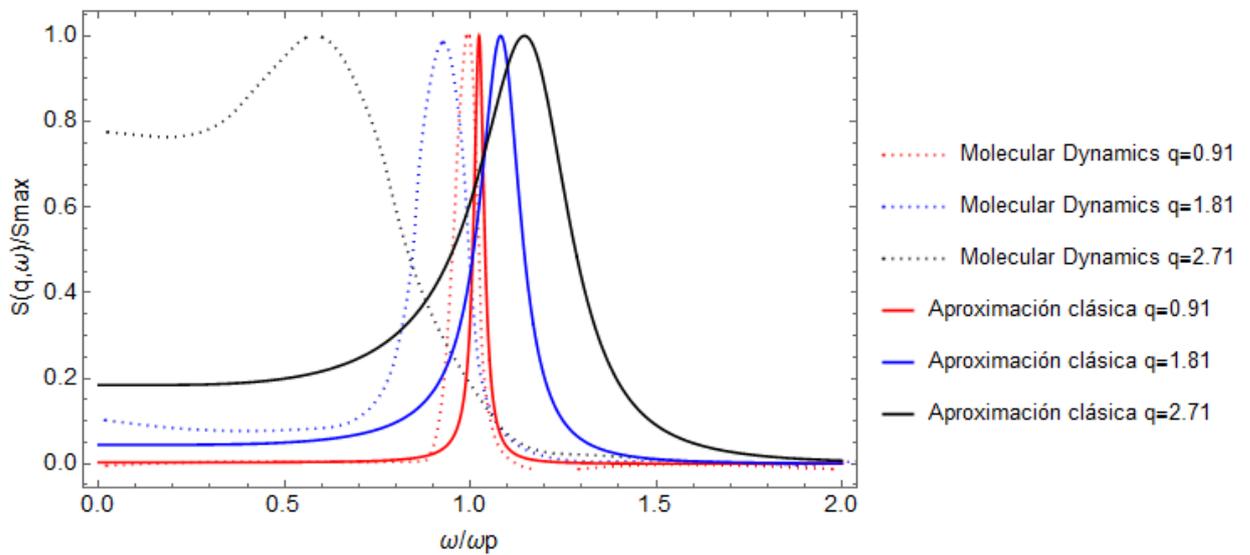


Figura 22: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=100$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de J.P Hansen y I.R. McDonald, 1975 [26], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

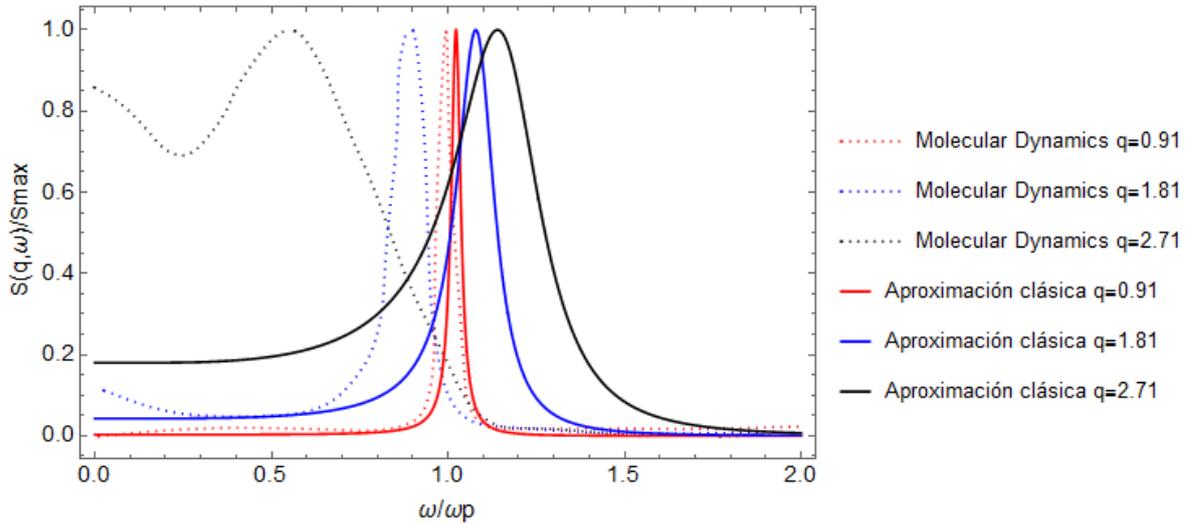


Figura 23: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP clásico con $\Gamma=150$. Los resultados de dinámica molecular se han obtenido de J.P Hansen y I.R. McDonald, 1975 [26], mientras que la aproximación clásica con las expresiones en el apartado 6.1.1 del presente trabajo.

Comparando las Figuras 16, 17 y 18 se puede observar como el modelo para un OCP con aproximación clásica se ajusta perfectamente. En Figura 19, el modelo presenta un pico ligeramente desviado a la derecha. Esto se debe a que el valor de q ha aumentado bastante.

Posteriormente, en las Figuras 20, 21, 22 y 23, se puede apreciar como un aumento de q hace que el modelo falle nuevamente. Esto se debe a que valores de q por encima de la unidad se corresponden con distancias entre electrones menores o muy cercanas a a (radio de Wigner-Seitz), lo cual no tiene sentido físico. Debido a ello, podría ser que las simulaciones de dinámica molecular tampoco sean correctas.

Otro factor determinante puede ser que la definición para $U(q)$ utilizada no funcione bien para q grande, debido a que se trata de una interpolación. Sería necesario mejorar dicha interpolación o un modelo más sofisticado que permita estimar $U(q)$ de forma más precisa.

Al margen de esto, se puede ver como el modelo para un OCP con aproximación clásica se ajusta con buena precisión a los resultados de dinámica molecular, para valores de $q < 1$, en un amplio rango de Γ .

Además, se ha comprobado el funcionamiento de la parte real de las soluciones de Cardano, obteniéndose los siguientes resultados.

Tabla 1: Comparación de la parte real de las soluciones de Cardano para un OCP.

Caso		DSF	Cardano
Γ	q	Clásico	Clásico
0,993	0,6187	1,136	1,139
2	0,6015	1,072	1,072
4	0,6945	1,054	1,054
8	1,389	1,118	1,123
50	0,91	1,057	1,059
50	1,81	1,090	1,096
50	2,71	1,162	1,187

Como se puede observar en la Tabla 1, se ha analizado el funcionamiento de las soluciones analíticas de Cardano para el cálculo de la frecuencia a la que se da el máximo DSF para las condiciones de las Figuras 16, 17, 18, 19, 23, 24 y 25. Se puede observar como se obtienen unos resultados bastante precisos para el sistema OCP.

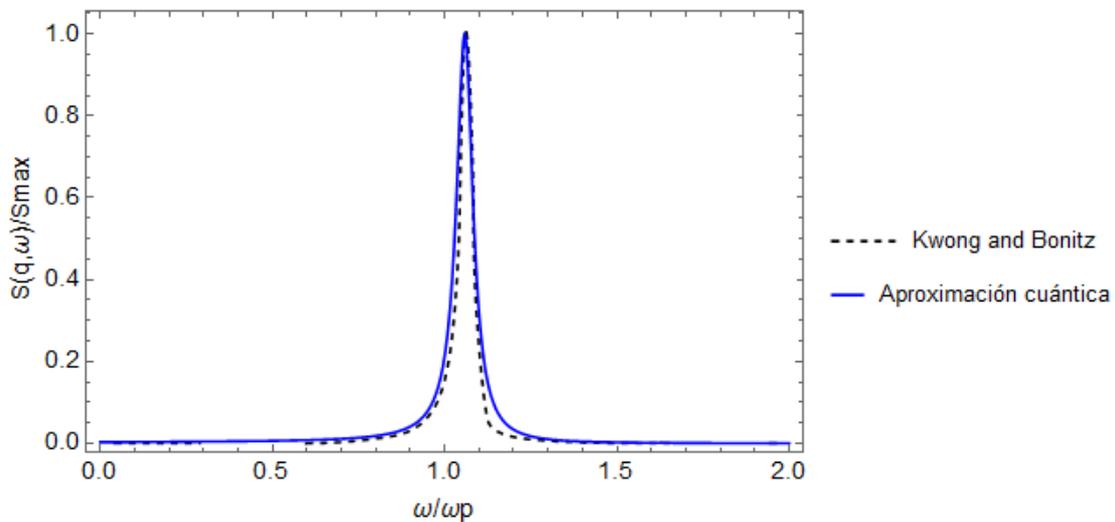


Figura 24: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP cuántico con $\theta=0.69$, $r_s=4$ y $q=0.6$. Los resultados teóricos se han obtenido de N.H. Kwong y M. Bonitz, 2000 [27], mientras que la aproximación cuántica con las expresiones en el apartado 6.1.2 del presente trabajo.

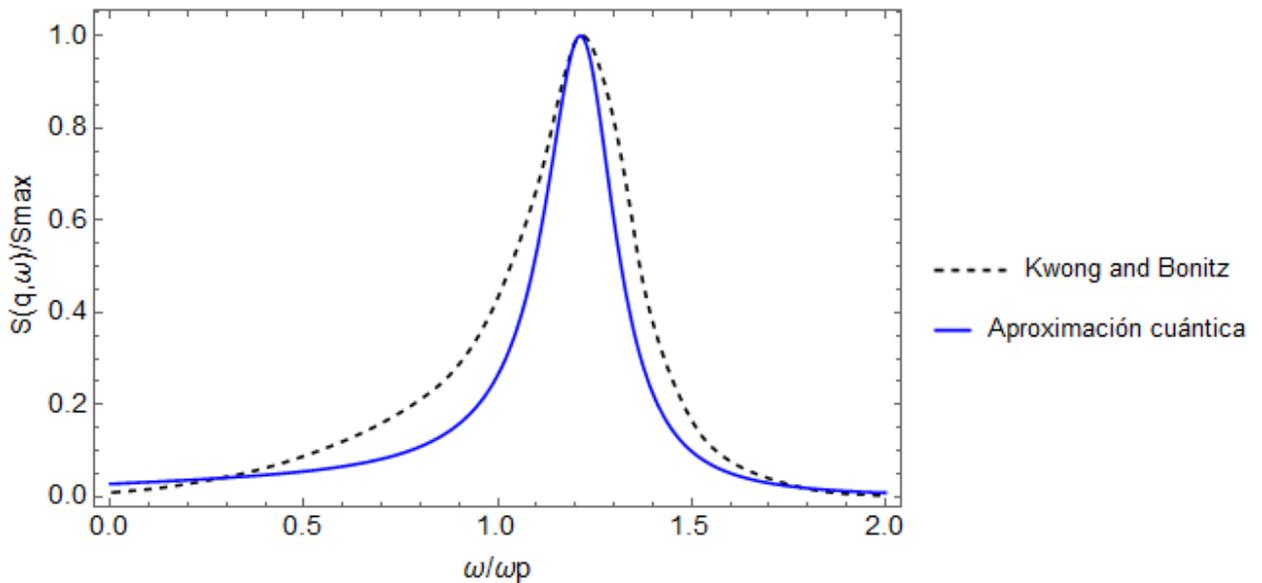


Figura 25: Factor de estructura dinámico normalizado para un OCP cuántico con $\theta=0.69$, $r_s=4$ y $q=1.2$. Los resultados teóricos se han obtenido de N.H. Kwong y M. Bonitz, 2000 [27], mientras que la aproximación cuántica con las expresiones en el apartado 6.1.2 del presente trabajo.

A pesar de la escasez de resultados con los que compara el modelo para OCP con aproximación cuántica (Figura 24 y 25), los resultados son excelentes, puesto que los máximos en el factor de estructura estático coinciden, y los tramos de pendiente positiva y negativa son muy cercanos a los datos a comparar.

Por último, se ha comparado la precisión de las ecuaciones de Cardano sobre el denominador de la función dieléctrica inversa para la obtención de la frecuencia a la que se produce el máximo factor de estructura dinámico, obteniéndose:

6.2 Plasma de dos componentes

Como afirma I.M. Tkachenko y otros, 2012 [18], para que el modelo se ajuste más a un plasma real, se debe tener en cuenta el efecto de interacción entre protones y electrones, suponiendo un plasma donde la densidad electrónica y de iones sea la misma. De esta forma el sistema pasa a considerarse formado por dos componentes, o “*Two-Component Plasma*” (TCP). A partir de este modelo se pueden estudiar el factor de estructura dinámico carga-carga, el factor de estructura estático parcial de cada especie, las funciones de distribución radial, etc. Se trata del sistema más interesante desde el punto de vista científico por su similitud a las condiciones en que se da la fusión inercial. Por ello, hay una mayor cantidad de modelos para comparar.

A la hora de calcular los momentos hay unas pequeñas modificaciones, puesto que se deben tener la presencia tanto de electrones como de protones (hay una gran diferencia de masa), además de tener en cuenta las interacciones entre ellos.

6.2.1. TCP cuántico

Para el cálculo del momento C_0 se procede de idéntica forma a el caso OCP cuántico, [Eq 6.8], pero se deben tener en cuenta las masas de ambas partículas:

$$C_0(q) = 1 - \epsilon^{-1}(q, 0) = \frac{\alpha^6 k_D^2 k_q^4}{q^2 \alpha^4 k_q^4 + q^4 \alpha^2 k_D^2 + \alpha^6 k_D^2 k_q^4}$$

Donde ahora $k_D^2 = 4\pi e^2 \beta (n_e + Z n_i)$, y $k_q^4 = \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} (n_e m_e + Z^2 n_i m_i)$.

El momento C_2 es el mismo que para OCP puesto que se trata de la f-sum rule nuevamente [Eq 6.11] :

$$C_2(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^2$$

Y el cuarto momento $C_4(k)$ al igual que en [Eq 6.12]:

$$C_4(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^4 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^4 [1 + W(k)]$$

Donde:

$$W(k) = K(k) + U(k) + H$$

[Eq 6.35]

Los 2 primeros términos se calculan de forma idéntica a OCP cuántico [Eq 6.19] y [Eq 6.22] :

$$K(q) = \frac{F_{3/2}(\eta) q^2}{D^{3/2} \Gamma} + \frac{q^4}{12 r_s}$$

$$U(q) = -\frac{4q^2}{45\Gamma} \Gamma^{\frac{3}{2}} \left[\frac{A_1}{\sqrt{A_2 + \Gamma}} + \frac{A_3}{1 + \Gamma} \right]$$

El nuevo término H se corresponde con la interacción ión-electrón del sistema:

$$H = \frac{1}{3} h_{ei}(0) = \frac{1}{6\pi^2 n} \int_0^{+\infty} p^2 S_{ei}(p) dp = \frac{4}{3} \frac{Z r_s \sqrt{\Gamma}}{\sqrt{3Z\Gamma + 4r_s + 4\Gamma \sqrt{3(1+Z)r_s}}}$$

[Eq 6.36]

Por lo tanto, las frecuencias características del sistema serán:

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

$$\omega_1^2(q) = \frac{C_2(q)}{C_0(q)} = \omega_p^2 \left[1 + \frac{q^2}{a^2 k_D^2} + \frac{q^4}{a^4 k_q^4} \right]$$

$$\omega_2^2(q) = \frac{C_4(q)}{C_2(q)} = \omega_p^2 [1 + K(q) + U(q) + H]$$

[Eq 6.37]

La expresión para el factor de estructura dinámico va a ser la misma que en el OCP cuántico [Eq 6.25]:

$$S(q, w) = \frac{\beta n w \hbar q^2}{3\pi\Gamma(1 - e^{-\beta w \omega_p \hbar})} \left(\frac{h_0(q) (w_2^2(q) - w_1^2(q))}{w^2 [w^2 - w_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) [w^2 - w_1^2(q)]^2} \right)$$

6.2.2 TCP clásico

Este tipo de sistemas es el de mayor importancia, debido a su mayor similitud con las condiciones reales, puesto que las condiciones dadas en la fusión nuclear son las más parecidas.

Para el cálculo del momento C_0 se procede de idéntica forma a el caso OCP clásico [Eq 6.28], pero se deben tener en cuenta las masas de ambas partículas:

$$C_0(k) = 1 - \epsilon^{-1}(k, 0) = \frac{a^2 k_D^2}{q^2 + a^2 k_D^2}$$

El momento C_2 es el mismo que para OCP puesto que se trata de la f-sum rule nuevamente [Eq 6.11]:

$$C_2(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^2$$

Y el cuarto momento $C_4(k)$ también es el mismo [Eq 6.12]:

$$C_4(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^4 L(k, \omega) d\omega = \omega_p^4 [1 + W(k)]$$

Donde:

$$W(k) = K(k) + U(k) + H$$

Los 2 primeros términos se calculan de forma idéntica a OCP clásico [Eq 6.32] y [Eq 6.22]:

$$K(q) = \frac{q^2}{\Gamma}$$

$$U(q) = -\frac{4q^2}{45\Gamma} \Gamma^{\frac{3}{2}} \left[\frac{A_1}{\sqrt{A_2 + \Gamma}} + \frac{A_3}{1 + \Gamma} \right]$$

El nuevo término H se trata nuevamente [Eq 6.36]:

$$H = \frac{4}{3} \frac{Zr_s\sqrt{\Gamma}}{\sqrt{3Z\Gamma + 4r_s + 4\Gamma\sqrt{3(1+Z)r_s}}}$$

Por lo tanto, las frecuencias características del sistema serán:

$$\omega_1^2(q) = \frac{C_2(q)}{C_0(q)} = \omega_p^2 \left[1 + \frac{q^2}{a^2 k_D^2} \right]$$

$$\omega_2^2(q) = \frac{C_4(q)}{C_2(q)} = \omega_p^2 [1 + K(q) + U(q) + H]$$

[Eq 6.38]

La expresión para el factor de estructura dinámico va a ser la misma que en el OCP clásico:

$$S(q, \omega) = \frac{q^2 n}{3\pi\Gamma\omega_p} \left(\frac{h_0(q) (\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q))}{\omega_p \omega^2 [\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q) [\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2} \right)$$

6.2.3 Resultados TCP

Para este caso de sistemas TCP se van a comparar en la misma gráfica la aproximación clásica y cuántica, debido a la ausencia de resultados meramente cuánticos. De esta forma, se podrá ver que aproximación funciona mejor.

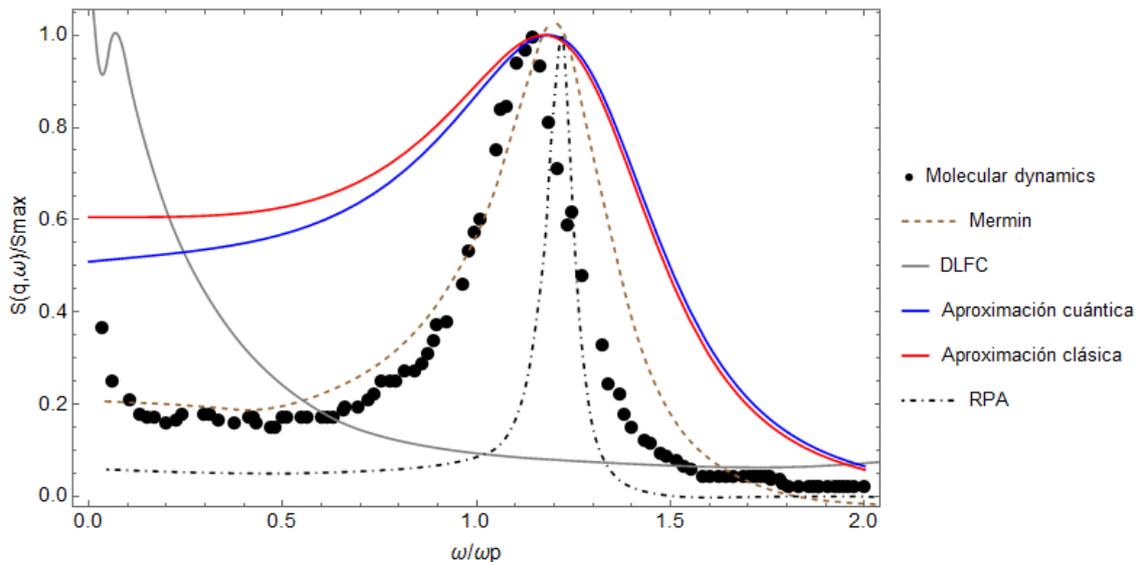


Figura 26: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=8$ y $q=0.438$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de G. Zwicknagel y Th. Psciwiul [28].

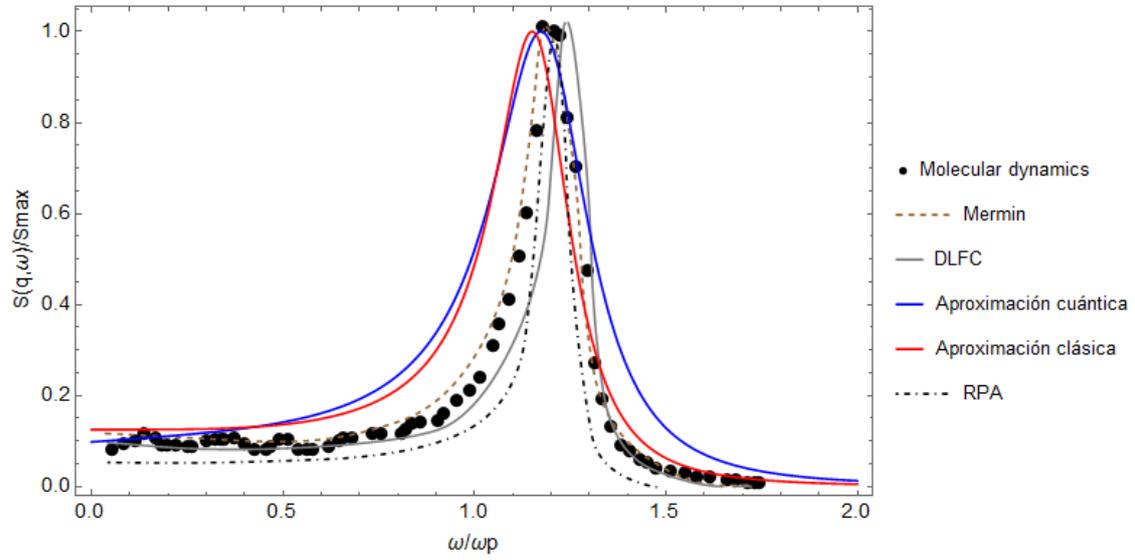


Figura 27: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=0.5$ y $q=0.438$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de G. Zwicknagel y Th. Pschiwul [28].

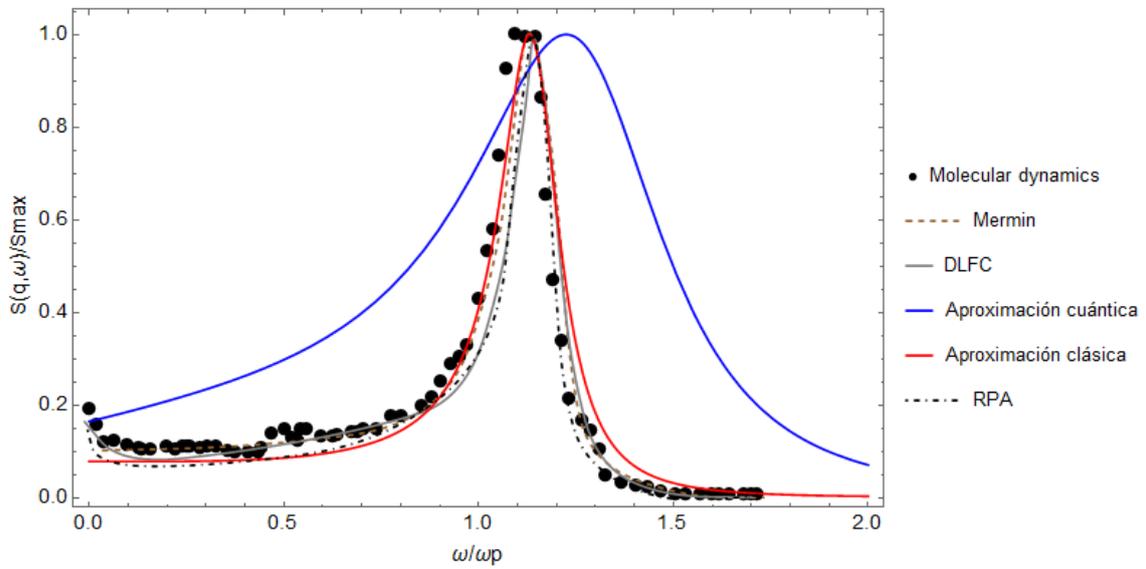


Figura 28: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=0.124$ y $q=0.438$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de G. Zwicknagel y Th. Pschiwul [28].

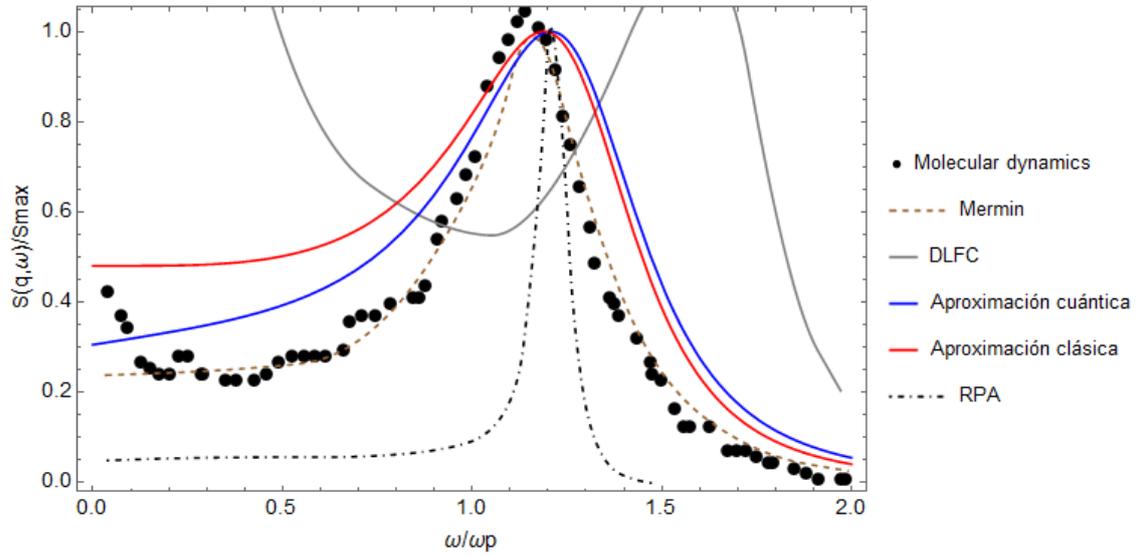


Figura 29: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=1$, $r_s=4$ y $q=0.619$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de G. Zwicknagel y Th. Pschiwul [28].

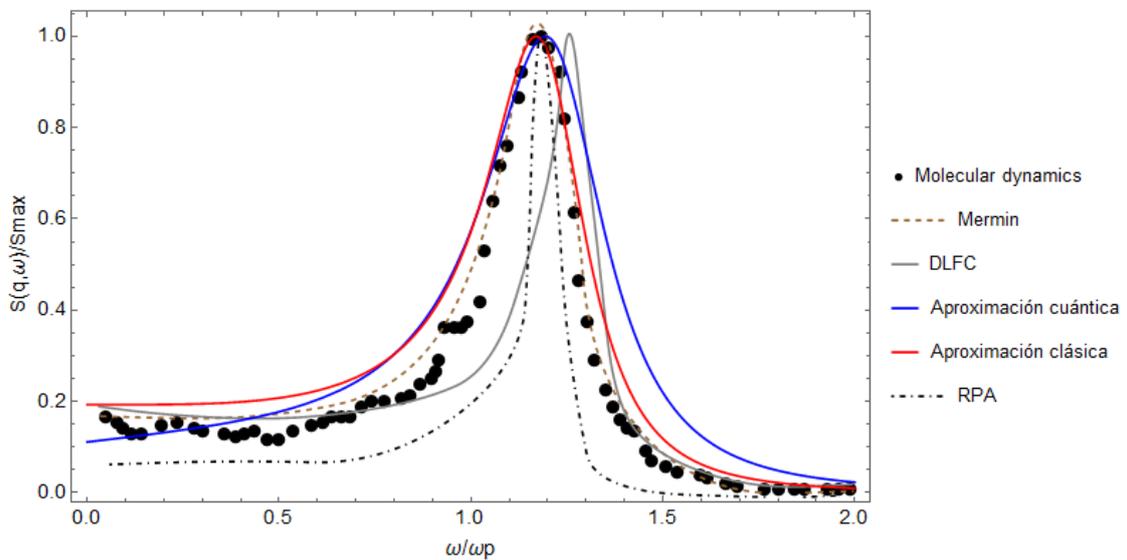


Figura 30: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=1$, $r_s=1$ y $q=0.619$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de G. Zwicknagel y Th. Pschiwul [28].

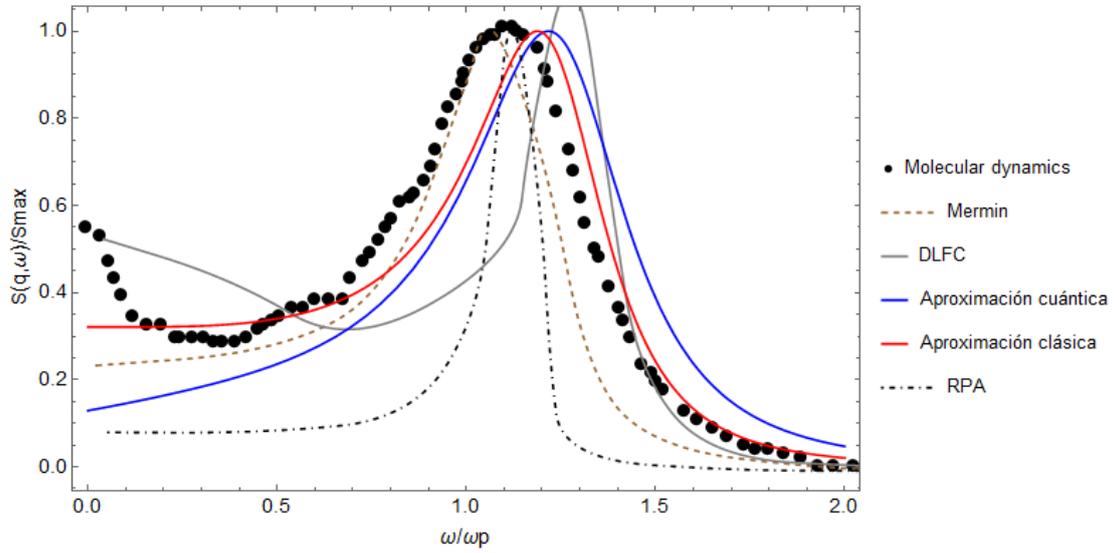


Figura 31: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=2$ y $q=0.875$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de G. Zwicknagel y Th. Pschiwul [28].

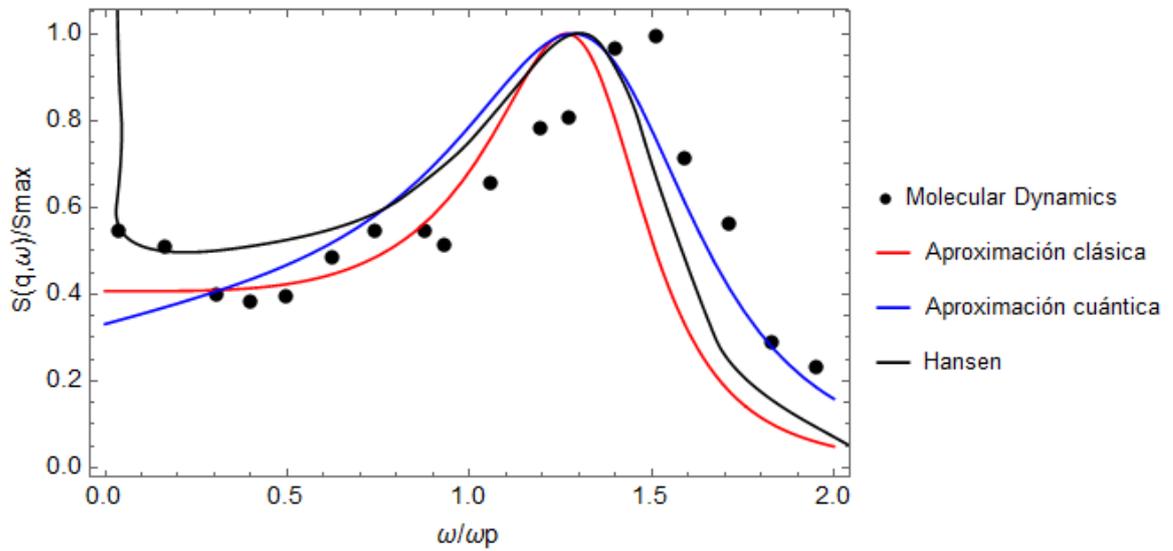


Figura 32: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=0.78$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

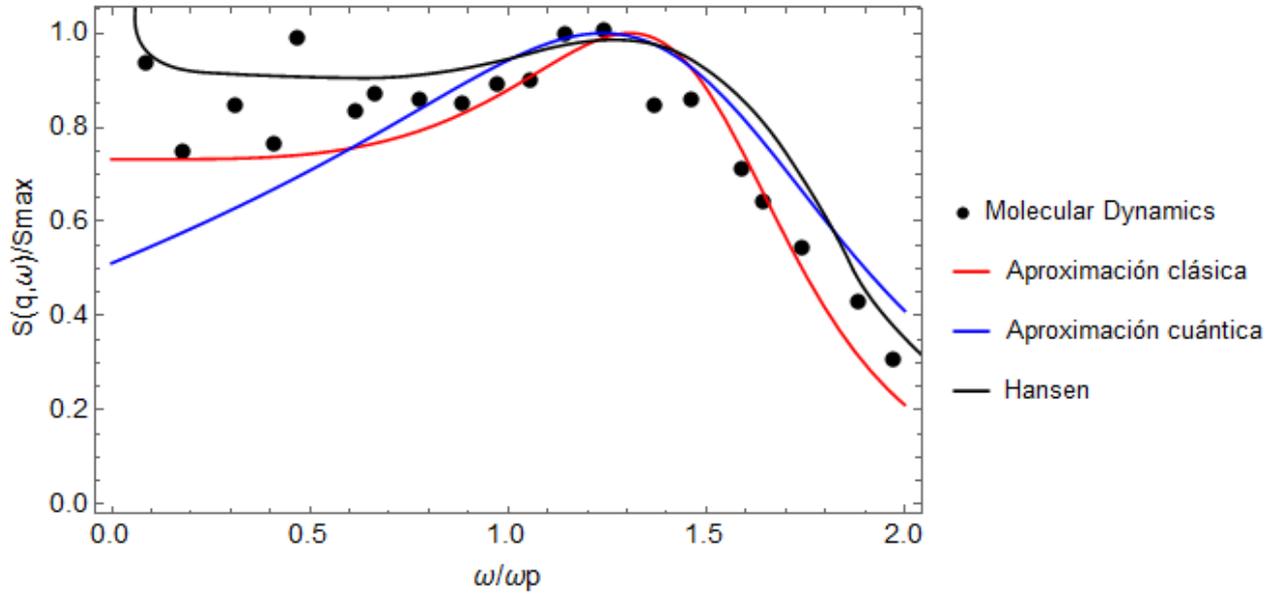


Figura 33: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=1.102$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

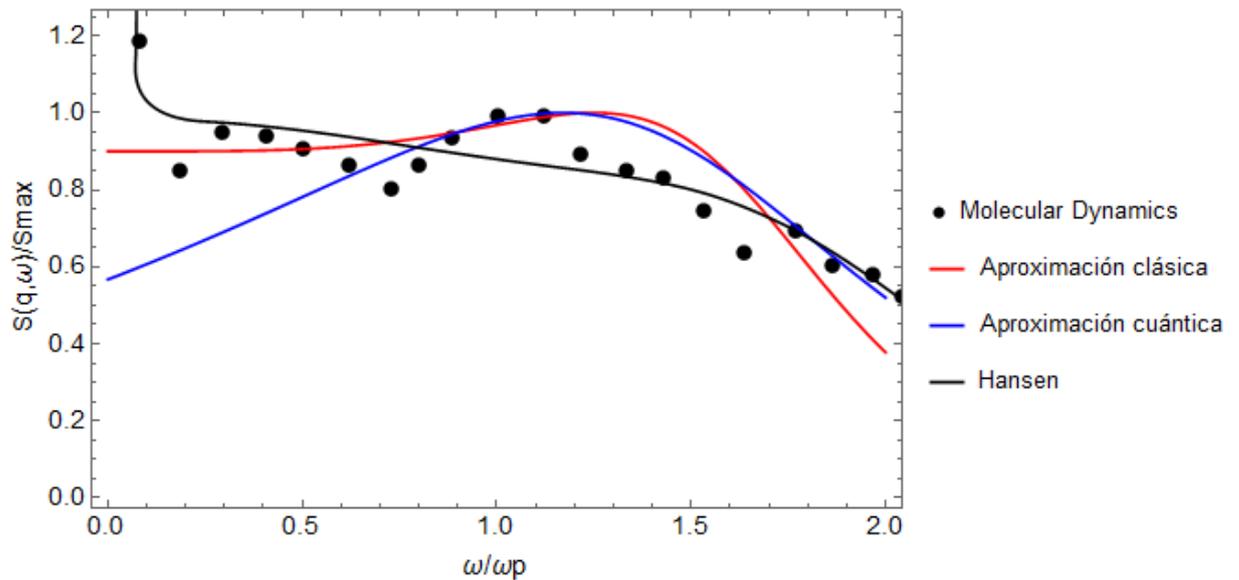


Figura 34: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=1.35$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

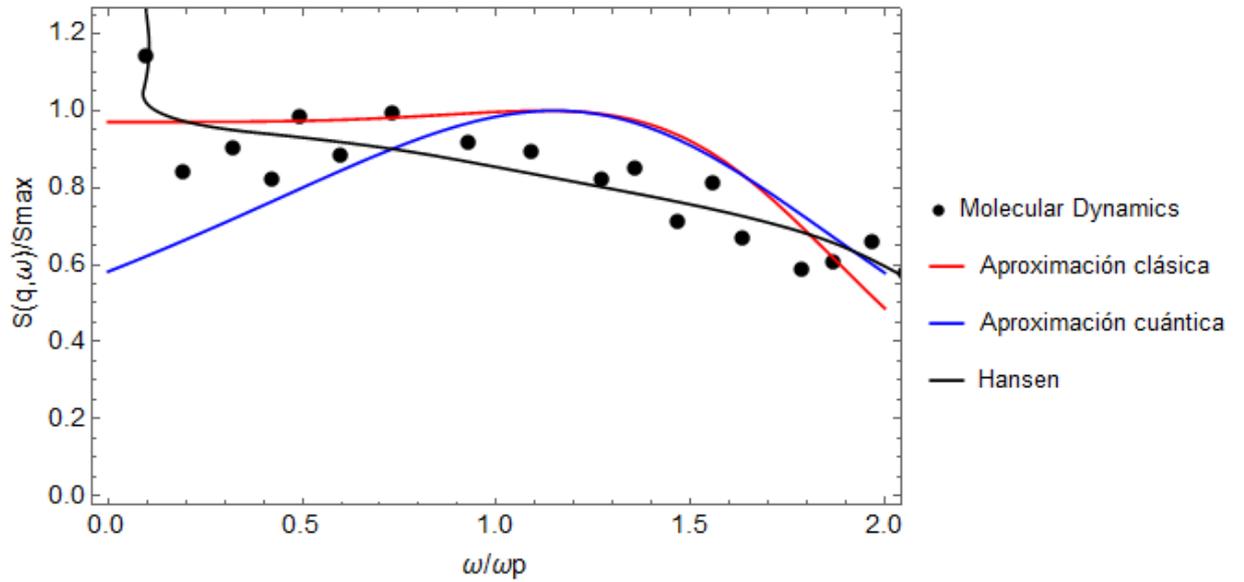


Figura 35: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.4$, $r_s=0.5$ y $q=1.559$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

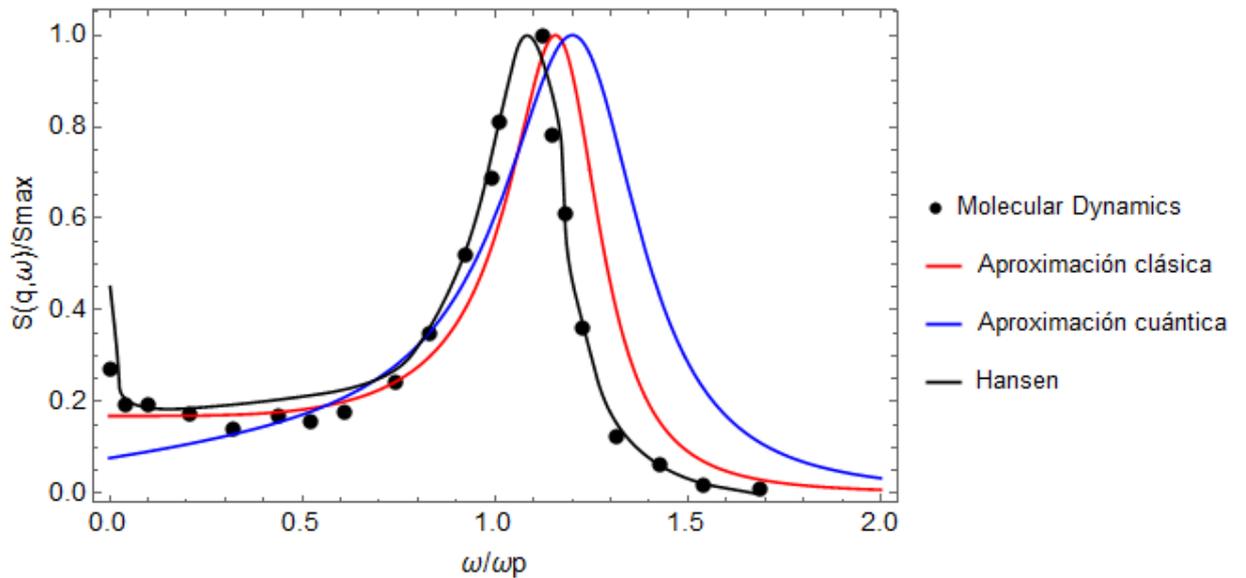


Figura 36: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=0.78$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

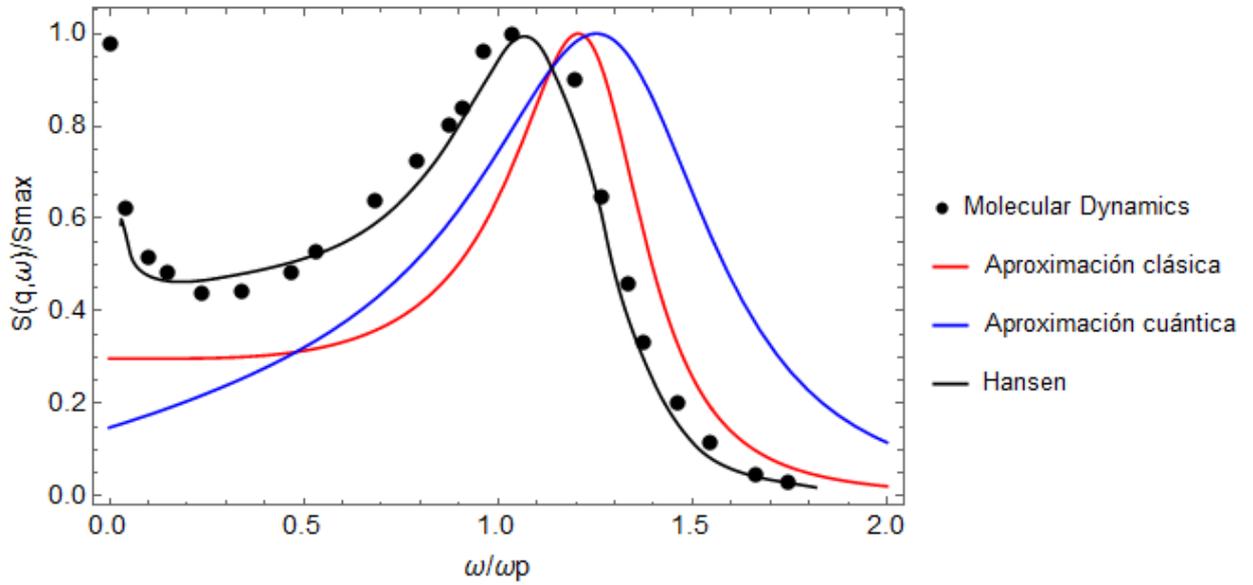


Figura 37: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=1.102$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

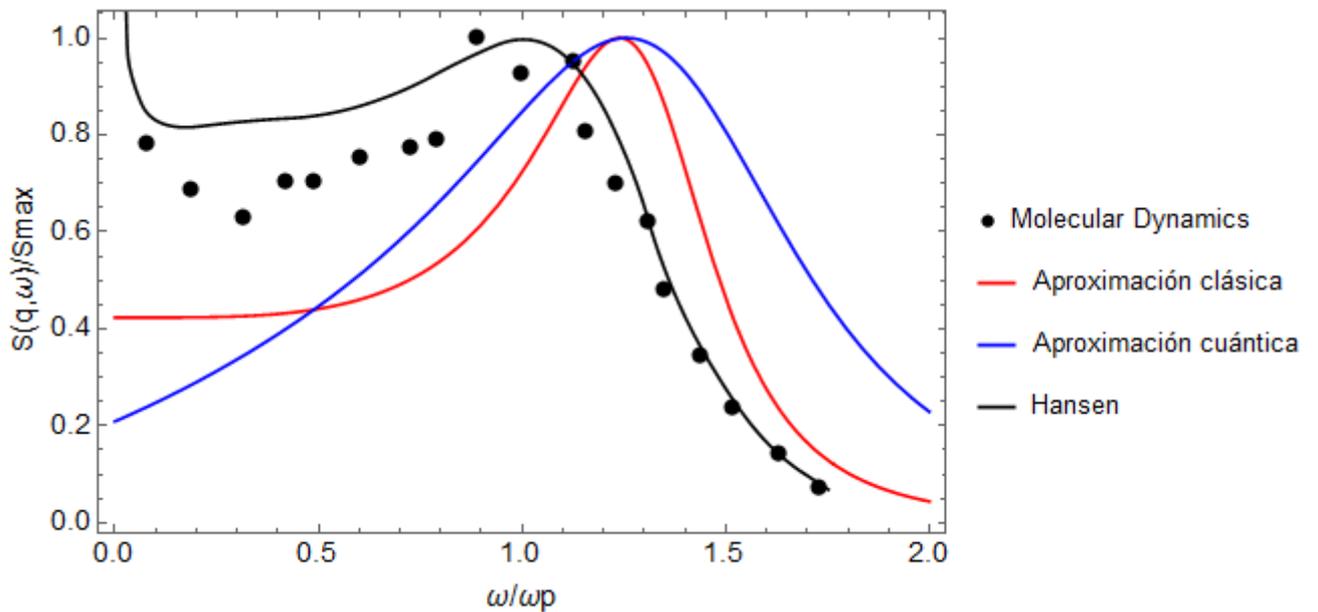


Figura 38 Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=1.35$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

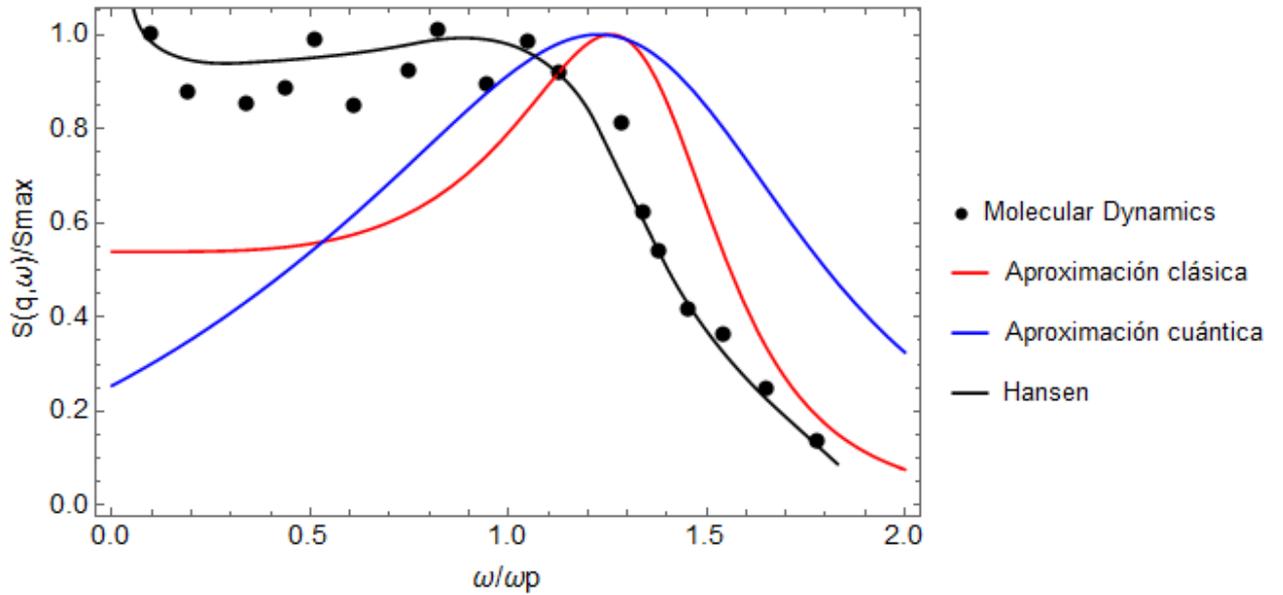


Figura 39: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=2$, $r_s=1$ y $q=1.559$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

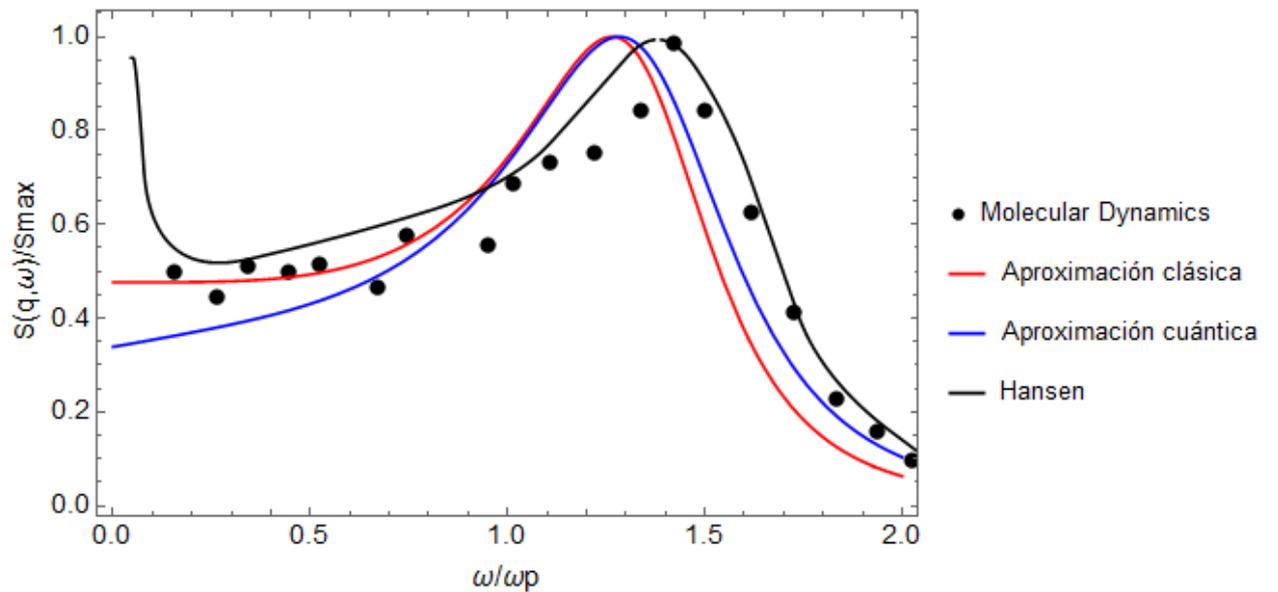


Figura 40: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=0.78$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

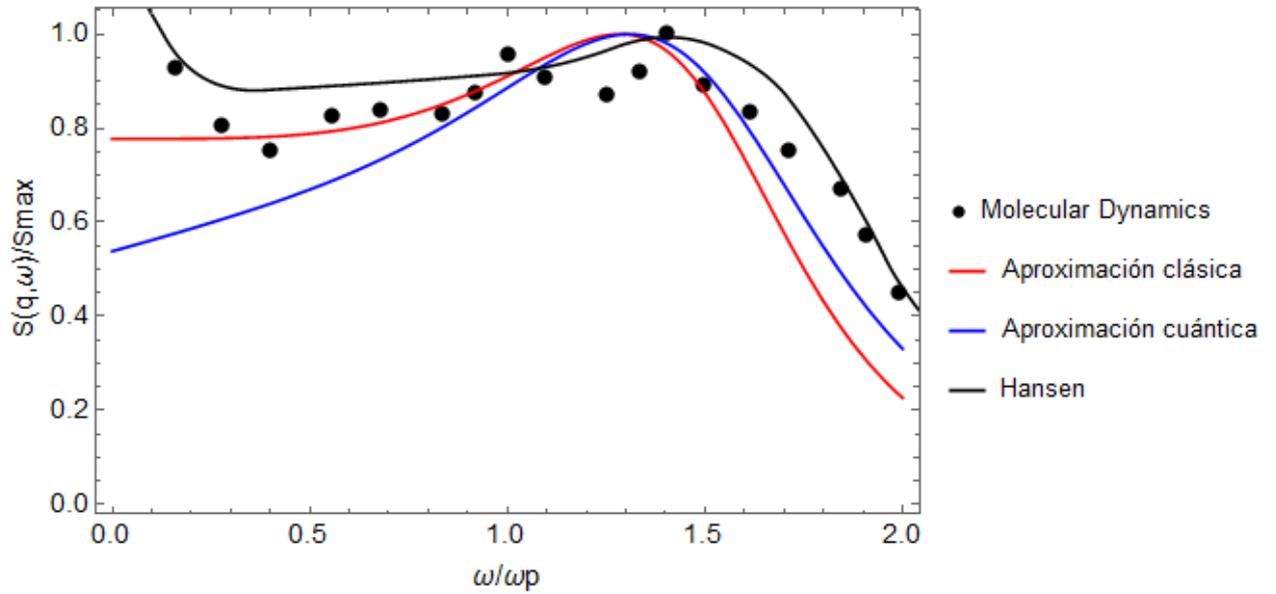


Figura 41: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=1.102$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

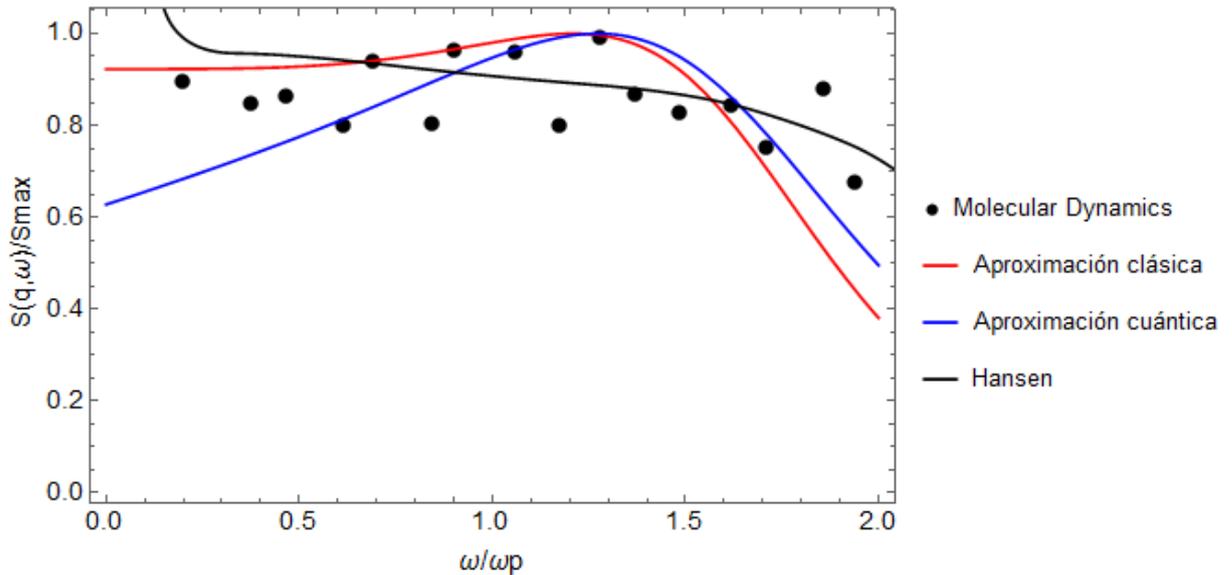


Figura 42: Factor de estructura dinámico normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=1.35$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

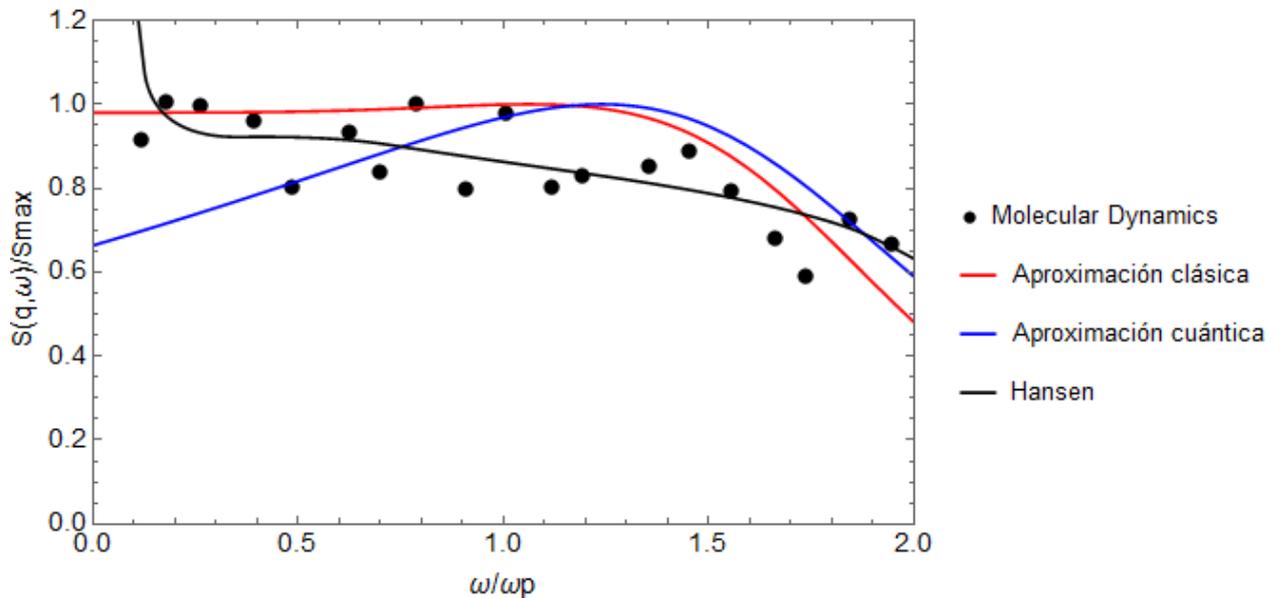


Figura 43: Factor de estructura dinámica normalizado para un TCP con $\Gamma=0.5$, $r_s=1$ y $q=1.559$. La aproximación clásica se ha realizado a partir del apartado 6.2.1 y la cuántica del apartado 6.2.2 del presente trabajo. Los otros modelos a comparar se han obtenido de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29].

Al observar las comparaciones realizadas con los resultados de G. Zwignagel y Th. Pschiwul [28] (Figuras 26, 27, 28, 29, 30 y 31) se puede llegar a la conclusión de que el modelo desarrollado funciona y obtiene mejores resultados que RPA o RPA con DLFC. Únicamente es mejorado por el modelo de Mermin, que para estas condiciones de Γ y r_s funciona perfectamente, puesto que la frecuencia de colisiones de la que depende ha sido desarrollada a partir de un modelo dinámico de elevada complejidad, para que funcione perfectamente en estas condiciones tan concretas.

Debido a que un valor de Γ bajo corresponde a un sistema donde la contribución cinética es más importante que los efectos cuánticos, la aproximación clásica del modelo desarrollado en este trabajo funciona mejor. Sin embargo, la diferencia con la aproximación cuántica es muy pequeña en la mayoría de los casos.

Al igual que ocurría en OCP, un aumento de q por encima de la unidad genera que, tanto el modelo clásico como cuántico presenten el punto máximo desplazado a la derecha (observar Figura 29). La justificación vendría a ser la misma que para OCP, se trata de una condición que no tiene sentido físico, y la función de interpolación $U(q)$ provoca ciertos fallos.

Posteriormente se ha comparado el modelo propio con los resultados de J.P. Hansen y I.R. McDonald [29] (Figuras 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42 y 43), para observar como afecta las variaciones en los parámetros Γ , r_s y q de forma más individual. El modelo de Hansen se basa en una serie de funciones de memoria numéricas para obtener la función dieléctrica inversa.

A primera vista, ocurre al igual que en las comparaciones con G.Zwignagel y Th. Pschiwul, que para estas condiciones funciona mejor la aproximación clásica.

Respecto a las variaciones en Γ y r_s , ambas aproximaciones responden adecuadamente, por lo que el modelo desarrollado en este trabajo es capaz de trabajar bajo diferentes valores de Γ y r_s de forma fiable.

En cuanto a diversos valores de q , ocurre lo mismo que en otras representaciones. Para valores de $q > 1$, el modelo presenta problemas y deja de coincidir con los resultados de dinámica molecular.

Por último, se ha comparado la precisión de las ecuaciones de Cardano sobre el denominador de la función dieléctrica inversa para la obtención de la frecuencia a la que se produce el máximo factor de estructura dinámico, obteniéndose:

Tabla 2: Comparación de la parte real de las soluciones de Cardano para TCP.

Γ	Caso		DSF		Cardano	
	rs	q	Clásico	Cuántico	Clásico	Cuántico
0,5	8	0,438	1,173	1,185	1,292	1,293
0,5	0,5	0,438	1,151	1,174	1,166	1,191
0,5	0,124	0,438	1,131	1,225	1,139	1,270
0,5	4	0,619	1,189	1,207	1,270	1,272
1	1	0,619	1,170	1,194	1,195	1,218
2	2	0,875	1,188	1,217	1,235	1,255

Como se puede observar, se trata de las condiciones para las Figuras 26, 27, 28, 29, 30 y 31. Si se observan dichas gráficas se puede concluir que aquellas en las que la representación tiene una mayor amplitud genera mayor error en las soluciones de Cardano. Esto se debe a que, como se ha explicado antes, las soluciones de Cardano tienen una parte real y una imaginaria. La parte imaginaria es proporcional a la amplitud de la función DSF. Si esta parte imaginaria es cercana al orden de la parte real, las soluciones de Cardano se vuelven más imprecisas. Por ello, aquellas Figuras (como la 27 y 28) que tienen un pico máximo bien definido se pueden calcular de forma más precisa con Cardano. Esto se da siempre que $rs < 1$, y q no sea grande.

Por lo tanto, las soluciones de Cardano pueden ser útiles para una primera estimación de la frecuencia que genera el máximo DSF, siempre que rs y q sean pequeños, de modo que la amplitud de la función DSF sea pequeña.

7. CONCLUSIONES

A lo largo de este proyecto se ha desarrollado un modelo matemático aplicable para la estimación de la función dieléctrica inversa. Posteriormente, se ha obtenido el factor de estructura dinámico, diferenciando para un sistema meramente clásico, y otro en el que los efectos cuánticos son importantes, y deben tenerse en cuenta.

Dicho modelo se caracteriza por su sencillez (en comparación con los modelos anteriores al mismo: *RPA*, *Mermin*, *DLFC*, etc.) ya que su base es matemática, además del hecho de que cumpla con todas las *sum rules*, lo que garantiza su convergencia para todos los casos.

Para comprobar la validez de este nuevo modelo, se ha comparado con resultados de dinámica molecular y con otros modelos, obtenidos de diversos artículos científicos. En primer lugar, se ha tratado de aplicar en un sistema de un componente clásico, probando un amplio rango de valores para el parámetro de acoplamiento Γ . El punto fuerte que ha mostrado el modelo ha sido su versatilidad respecto a este parámetro, mientras que la debilidad ha sido aumentar q por encima de 1. Esto puede deberse a la definición utilizada para $U(q)$ deje de funcionar correctamente, puesto que se debe a una interpolación. Otro posible motivo es la definición de $\omega_1(q)$ utilizada, la cual se basa en el comportamiento de las asíntotas de $\varepsilon^{-1}(q, 0)$. Un mejor ajuste de estas funciones podría llevar a mejores resultados para q grandes.

En cuanto a las comparaciones con sistemas de un componente cuántico, debido a la escasez de modelos y resultados con los que comparar no se puede saber si el modelo se aplicara bien en un amplio rango de condiciones, sin embargo, para los casos existentes se ajusta perfectamente.

En segundo lugar, se han realizado simulaciones para sistemas de dos componentes. En ellos se ha comparado simultáneamente la aproximación clásica y cuántica. Por lo general, ambas consideraciones se han ajustado bien a los datos, sin embargo, debido a la naturaleza de los sistemas que se modelizaban, la aproximación clásica parece obtener mejores ajustes, tanto en su máximo factor de estructura, como en el tramo de pendiente positiva y negativa.

Tras comparar detenidamente los resultados obtenidos, la conclusión es similar a la de sistemas de un componente: el modelo funciona perfectamente bajo diferentes valores de Γ y rs , presentando ciertos problemas para valores de $q > 1$, en otras palabras, a las distancias entre partículas menores que su radio de Wigner-Seitz.

Por último, se ha comprobado como las soluciones de Cardano pueden ser una buena forma de realizar una primera estimación de la frecuencia a la que se da el máximo DSF, siempre que la amplitud de la función sea pequeña, es decir, cuando el modo colectivo este bien definido.

En resumen, se ha obtenido un modelo muy versátil, puesto que funciona bien bajo diferentes sistemas (un componente o dos componentes) y bajo diversas aproximaciones (clásico o cuántico), que proporciona buenos resultados para un amplio rango de temperaturas y densidades. Su gran sencillez hace que sea ejecutable en un ordenador sin gran capacidad computacional, y obtener los resultados en unos segundos, mientras otros modelos requieren de largos tiempos de computación.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

8. POSIBLES MEJORAS

En este apartado se van a debatir las posibles mejoras que podrían introducirse al modelo anteriormente desarrollado.

Como ya se ha explicado durante las conclusiones, el punto débil del modelo se encuentra en la definición de $\omega_1(q)$ y de $U(q)$, puesto que presentan ciertos problemas para valores de $q > 1$, desembocando a que el modelo se ajuste a los datos de dinámica molecular sólo cualitativamente y no cuantitativamente. La solución a este problema puede estar en la investigación de las propiedades estáticas, puesto que $U(q)$ depende directamente del factor de estructura estático. Actualmente se utilizan funciones de interpolación para obtener esa expresión, pero con una función de base física se podrían obtener mejores resultados. De esta forma, una mejor aproximación reducirá el error final.

Otro enfoque distinto puede ser utilizar diferentes potenciales de interacción entre partículas. Durante este trabajo siempre se ha utilizado el potencial de Coulomb debido a su mayor sencillez, sin embargo, este presenta ciertas limitaciones. Entre otros, se podría simular el potencial de Deutsh, o el de Yukawa para comparar sus resultados.

Como última propuesta, se podría realizar una reconstrucción física más precisa del parámetro de Nevanlinna de la [Eq 5.31].

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

9. ANEJOS

9.1 Anejo I: Cálculo de los polinomios D_n y E_n

Para obtener los polinomios de la [Eq 5.24] se deben utilizar las [Eq 5.5] y [Eq 5.6], partiendo de que $D_0 = 1$.

El polinomio D_1 solo puede ser x para que se cumpla:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_0(x; q) D_1(x; q) L(q, x) d(x) = 0 \quad [\text{Eq 9.1}]$$

Sustituyendo los polinomios se obtiene efectivamente:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} 1 x L(q, x) d(x) = C_1 = 0 \quad [\text{Eq 9.2}]$$

Para la construcción de D_2 partiendo de un polinomio genérico $D_2(x; q) = x^2 + ax + b$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_0(x; q) D_2(x; q) L(q, x) d(x) = 0 \quad [\text{Eq 9.3}]$$

Que al sustituir por sus valores:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} 1(x^2 + ax + b)L(q, x)d(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} ax L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} b L(q, x)d(x) \\ &= C_2 + aC_1 + bC_0 = 0 \rightarrow b = -\frac{C_2}{C_0} = -\omega_1^2(q) \end{aligned} \quad [\text{Eq 9.4}]$$

Procediendo de forma idéntica:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_1(x; q) D_2(x; q) L(q, x) d(x) = 0 \quad [\text{Eq 9.5}]$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} x(x^2 + ax + b)L(q, x)d(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^3 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} ax^2 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} bx L(q, x)d(x) \\ &= C_3 + aC_2 + bC_1 = 0 \rightarrow a = 0 \end{aligned} \quad [\text{Eq 9.6}]$$

Combinando [Eq 9.4] y [Eq 9.6] obtenemos D_2 como:

$$D_2(x; q) = x^2 - \omega_1^2(q) \quad [\text{Eq 9.7}]$$

De la misma forma, para D_3 se parte del polinomio genérico $D_3(x) = x^3 + cx^2 + hx + g$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_0(x; q)D_3(x; q)L(q, x)d(x) = 0 \quad [\text{Eq 9.8}]$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} 1(x^3 + cx^2 + hx + g)L(q, x)d(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^3 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} cx^2 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} hx L(q, x)d(x) \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} g L(q, x)d(x) = C_3 + cC_2 + hC_1 + gC_0 = 0 \rightarrow g = -\frac{cC_2}{C_0} = -c\omega_1^2(q) \end{aligned} \quad [\text{Eq 9.9}]$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_1(x; q)D_3(x; q)L(q, x)d(x) = 0 \quad [\text{Eq 9.10}]$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} x(x^3 + cx^2 + hx + g)L(q, x)d(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} cx^3 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} hx^2 L(q, x)d(x) \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} gx L(q, x)d(x) = C_4 + cC_3 + hC_2 + gC_1 = 0 \rightarrow h = -\frac{C_4}{C_2} = -\omega_2^2(q) \end{aligned} \quad [\text{Eq 9.11}]$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D_2(x; q)D_3(x; q)L(q, x)d(x) = 0 \quad [\text{Eq 9.12}]$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2 - \omega_1^2)(x^3 + cx^2 + hx + g)L(q, x)d(x) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^5 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} cx^4 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} hx^3 L(q, x)d(x) + \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} gx^2 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} -\omega_1^2 x^3 L(q, x)d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} -\omega_1^2 cx^2 L(q, x)d(x) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_{-\infty}^{+\infty} -\omega_1^2 h x L(q, x) d(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} -\omega_1^2 g L(q, x) d(x) \\
 & = C_5 + cC_4 + hC_3 - \omega_1^2 C_3 + gC_2 - \omega_1^2 cC_2 - \omega_1^2 hC_1 - \omega_1^2 gC_0 \\
 & = cC_4 + gC_2 - \omega_1^2 cC_2 + \omega_1^2 c\omega_1^2 C_0 = cC_4 - \frac{cC_2}{C_0} C_2 - \frac{cC_2}{C_0} C_2 + c \left(\frac{C_2}{C_0} \right)^2 C_2 \\
 & = cC_4 - 2 \frac{cC_2^2}{C_0} + \frac{cC_2^2}{C_0} = cC_4 - \frac{cC_2^2}{C_0} = c \frac{C_0 C_4 - C_2^2}{C_0} = 0 \rightarrow c = 0
 \end{aligned}$$

[Eq 9.13]

Puesto que $C_0 C_4 - C_2^2 \neq 0$, es la condición de Hamburger para que el problema de momentos tenga solución (I.M. Tkachenko y otros, 1996 [17]).

$$\det \begin{bmatrix} C_0 & 0 & C_2 \\ 0 & C_2 & 0 \\ C_2 & 0 & C_4 \end{bmatrix} = C_2 (C_0 C_4 - C_2^2) > 0$$

[Eq 9.14]

Por lo tanto, combinando [Eq 9.9], [Eq 9.11] y [Eq 9.13]:

$$D_3(x; q) = x^3 - x\omega_2^2(q)$$

[Eq 9.15]

Los polinomios conjugados vienen determinados como [Eq 5.6]:

$$E_j(x; q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{D_j(\omega; q) - D_j(x; q)}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega$$

Por lo tanto:

$$E_0(x; q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 - 1}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega = 0$$

[Eq 9.16]

$$E_1(x; q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega - x}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} L(q, \omega) d\omega = C_0$$

[Eq 9.17]

$$\begin{aligned}
 E_2(x; q) & = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega^2 - \omega_1^2(q) - x^2 + \omega_1^2(q)}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\omega - x)(\omega + x)}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega \\
 & = \int_{-\infty}^{+\infty} (\omega + x) L(q, \omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega L(q, \omega) d\omega + \int_{-\infty}^{+\infty} x L(q, \omega) d\omega \\
 & = C_1 + xC_0 = xC_0
 \end{aligned}$$

[Eq 9.18]

$$\begin{aligned}
 E_3(x; q) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega^3 - \omega\omega_2^2(q) - x^3 + x\omega_2^2(q)}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\omega^3 - x^3) - (\omega - x)\omega_2^2(q)}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(\omega - x)(\omega^2 + \omega x + x^2) - (\omega - x)\omega_2^2(q)}{\omega - x} L(q, \omega) d\omega \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} [(\omega^2 + \omega x + x^2) - \omega_2^2(q)] L(q, \omega) d\omega \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^2 L(q, \omega) d\omega + \int_{-\infty}^{+\infty} \omega x L(q, \omega) d\omega + \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 L(q, \omega) d\omega \\
 &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \omega_2^2(q) L(q, \omega) d\omega = C_2 + xC_1 + x^2C_0 - \omega_2^2(q)C_0 \\
 &= C_2 + C_0(x^2 - \omega_2^2(q)) = C_0\omega_1^2(q) + C_0(x^2 - \omega_2^2(q)) \\
 &= C_0(x^2 + \omega_1^2(q) - \omega_2^2(q))
 \end{aligned}$$

[Eq 9.19]

9.2. Anejo II: Obtención de la función de Nevanlinna

Para poder obtener la función de Nevanlinna debe realizarse la segunda derivada respecto a la frecuencia de la [Eq 5.34] e igualar la frecuencia a 0, debido a que en este punto, la función de pérdidas presenta un extremo, y de esta forma se puede igualar la segunda derivada a 0 y finalmente despejar la función de Nevanlinna. Así pues, en primer lugar, se calcula la primera derivada:

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial L(q, \omega)}{\partial \omega} \\
 &= -\frac{h_0(q)\omega_p^2(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q)) * (2\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + 4\omega^3[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + 4\omega h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_2^2(q)])}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^2} \\
 &= -\frac{h_0(q)\omega_p^2(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q)) * (2\omega^5 + 2\omega\omega_2^4(q) - 4\omega^3\omega_2^2(q) + 4\omega^5 - 4\omega^3\omega_2^2(q) +}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^2} \\
 &\quad + 4h_0^2(q)\omega^3 - 4h_0^2(q)\omega\omega_1^2(q)}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^2} \\
 &= -\frac{h_0(q)\omega_p^2(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q)) * (6\omega^5 + \omega^3[-8\omega_2^2(q) + 4h_0^2(q)] + \omega[2\omega_2^4(q) - 4h_0^2(q)\omega_1^2(q)])}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^2}
 \end{aligned}$$

[Eq 9.20]

A continuación, se realiza su segunda derivada:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial^2 L(q, \omega)}{\partial \omega^2} \\
 &= - \frac{h_0(q) \omega_p^2 \left(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q) \right) * (30\omega^4 + 3\omega^2[-8\omega_2^2(q) + 4h_0^2(q)] + [2\omega_2^4(q) - 4h_0^2(q)\omega_1^2(q)]) *}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^4} \\
 & * \frac{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^2 + 2(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 - h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2) *}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^4} \\
 & * \frac{(2\omega[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + 4\omega^3[\omega^2 - \omega_2^2(q)] + 4\omega h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_2^2(q)]) * h_0(q) \omega_p^2 \left(\omega_1^2(q) - \omega_2^2(q) \right) *}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^4} \\
 & * \frac{(6\omega^5 + \omega^3[-8\omega_2^2(q) + 4h_0^2(q)] + \omega[2\omega_2^4(q) - 4h_0^2(q)\omega_1^2(q)])}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^4}
 \end{aligned}$$

[Eq 9.21]

Dado que el punto de interés es $\omega = 0$:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial^2 L(q, \omega = 0)}{\partial \omega^2} \\
 &= - \frac{h_0(q) \omega_p^2 \left(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q) \right) * [2\omega_2^4(q) - 4h_0^2(q)\omega_1^2(q)] * ((\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^2)}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^4} \\
 &= - \frac{h_0(q) \omega_p^2 \left(\omega_1^2(q) - \omega_2^2(q) \right) * [2\omega_2^4(q) - 4h_0^2(q)\omega_1^2(q)]}{(\omega^2[\omega^2 - \omega_2^2(q)]^2 + h_0^2(q)[\omega^2 - \omega_1^2(q)]^2)^4} = 0 \\
 &\rightarrow h_0(q) \omega_p^2 \left(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q) \right) * [2\omega_2^4(q) - 4h_0^2(q)\omega_1^2(q)] = 0 \rightarrow h_0(q) = 0
 \end{aligned}$$

[Eq 9.22]

Esta primera solución no es válida puesto que anularía toda la función de pérdidas.

$$\begin{aligned}
 & -2\omega_p^2 \omega_1^2(q) \omega_2^4(q) + 2\omega_p^2 \omega_2^6(q) + 4h_0^2(q) \omega_p^2 \omega_1^4(q) - 4h_0^2(q) \omega_p^2 \omega_1^2(q) \omega_2^2(q) = 0 \\
 & \rightarrow h_0^2(q) [4\omega_p^2 \omega_1^4(q) - 4\omega_p^2 \omega_1^2(q) \omega_2^2(q)] = 2\omega_p^2 \omega_1^2(q) \omega_2^4(q) - 2\omega_p^2 \omega_2^6(q) \\
 & \rightarrow h_0^2(q) = \frac{2\omega_p^2 \omega_1^2(q) \omega_2^4(q) - 2\omega_p^2 \omega_2^6(q)}{4\omega_1^4(q) \omega_p^2 - 4\omega_p^2 \omega_1^2(q) \omega_2^2(q)} = \frac{2\omega_p^2 \omega_2^4(q) [\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q)]}{4\omega_p^2 \omega_1^2(q) [\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q)]} \\
 & \rightarrow h_0(q) = \pm \sqrt{\frac{\omega_2^4(q)}{2\omega_1^2(q)}} = + \frac{\omega_2^2(q)}{\sqrt{2}\omega_1(q)}
 \end{aligned}$$

[Eq 9.23]

La solución negativa no es posible porque convierte la función de pérdidas en negativa, por lo que solo puede ser la función positiva.

9.3 Anejo III: Ejemplo de programación en Mathematica.

En este punto se va a explicar mediante capturas de pantalla como se ha programado el modelo en el programa *Mathematica*. Se va a explicar el caso de sistema de un componente clásico, ya que es el más simple.

En primer lugar, se deben introducir una serie de constantes físicas de las que va a depender el modelo. Las unidades utilizadas con el sistema cegesimal (centímetro, gramo segundo). Para la energía se ha utilizado la unidad ergios.

DATOS FIJOS

```
Carga de un electrón ( $\text{erg}^{0.5} * \text{cm}^{0.5}$ )  
e = 4.803204 * 10-10  
Masa de un electron (g)  
me = 9.1093829 * 10-28  
Masa de un ión (g)  
mi = 1.672621 * 10-24  
Constante reducida de Planck (erg * seg)  
hred = 1.05457 * 10-27  
Constante de Boltzmann (erg / K)  
kB = 1.3806488 * 10-16  
Radio de Bohr (cm)  
aB = hred2 / (me * e2)  
5.29176 * 10-9
```

Figura 44: Constantes introducidas en Mathematica.

El siguiente paso es introducir los parámetros adimensionales variables en el modelo, que van a ser diferentes para cada caso. Para el caso de que el sistema fuera cuántico, o de dos componentes sería necesario introducir más parámetros.

DATOS VARIABLES

```
Número atómico  
Z = 1  
Parametro de coplamiento de Coulomb  
r = 20
```

Figura 45: Parámetros adimensionales introducidos en Mathematica.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

A continuación, si el sistema fuera cuántico o de dos componentes sería necesario programar algunas ecuaciones para obtener por ejemplo la temperatura, el radio de Wigner-Seitz, las integrales de Fermi, etc. Pero al tratarse de un sistema clásico de un componente, se puede pasar a definir las frecuencias características del sistema.

W1²

$$w1[q] = \sqrt{1 + \frac{q^2}{3 * r}}$$

W2²

$$K[q] = \frac{q^2}{r}$$

$$U[q] = \frac{-4 q^2}{45 * r} * r^{3/2} * \left(\frac{-0.9052}{\sqrt{0.6322 + r}} + \frac{\frac{-\sqrt{3}}{2} + \frac{0.9052}{\sqrt{0.6322}}}{1 + r} \right)$$

$$w2[q] = \sqrt{1 + K[q] + U[q]}$$

Figura 46: Programación de las frecuencias características del sistema.

Nótese que para un componente cuántico, o para dos componentes las definiciones son ligeramente diferentes.

El siguiente paso sería calcular la función de pérdidas o *Loss Function*.

LOSS FUNCTION

$$h0[q] = \frac{w2[q]^2}{w1[q] * \sqrt{2}};$$

Función de pérdidas :

$$L[q, w] = (h0[q] * (w2[q]^2 - w1[q]^2)) / (w^2 * (w^2 - w2[q]^2)^2 + h0[q]^2 * (w^2 - w1[q]^2)^2);$$

```
LF = Plot[L[1, w], {w, -3, 3}, PlotRange -> All, AxesOrigin -> {0, 0},
  AxesLabel -> {"w/omega_p", "L(q, w)"}, PlotStyle -> Red]
```

Figura 47: Programación de la función de pérdidas.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

El último comando programado sirve para obtener una representación de la función de pérdidas. De esta forma, se puede saber si hay algún error anterior si la gráfica no fuera adecuada.

El último paso es obtener el factor de estructura estático y su representación. Este se calcula a partir de la función de pérdidas obtenida anteriormente. Se debe calcular su punto máximo para poder normalizar la gráfica. El ultimo comando es para obtener la representación.

DSF

```
q = 0.91
```

```
0.91
```

DSF en función de la Loss Function

$$DSF[q, w] := \frac{q^2}{3 * \pi * \Gamma} * L[q, w];$$

Se obtiene la frecuencia para el punto de máximo DSF

```
wlmax = w /. Last[FindMaximum[S1[q, w], {w, 1}]]
```

Se calcula el valor de DSF máximo para normalizar

```
Simax = S1[q, wlmax]
```

```
DSF1 = Plot[S1[q, w] / Simax, {w, 0, 2}, PlotRange -> All, AxesOrigin -> {0, 0},
  FrameLabel -> {"w/wp", "S(q, w) / Smax"}, PlotStyle -> Red,
  PlotLegends -> {"Aproximación clásica q=0.91", Red},
  LabelStyle -> Directive[Black, 14], Frame -> True]
```

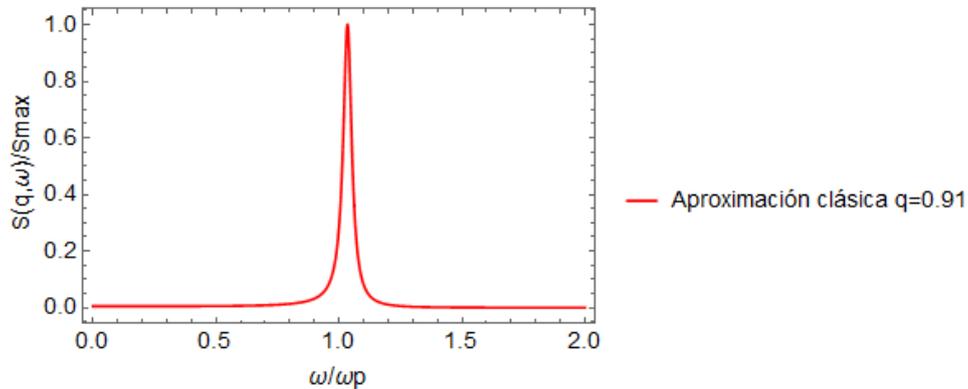


Figura 48: Programación DSF y su representación en Mathematica.

10. BIBLIOGRAFÍA

- [1] S. H. Glenzer, R. Redmer, *RevModPhys*.81.1625 (2009)
- [2] D. Yu. Dubovtsev, S.A. Syzganbayeva, Kh. Santybayev, J. Ara, LL. Coloma; “*Las propiedades electrodinámicas de plasmas no ideales de un componente*”; *Libro de Resúmenes*, 251 (2018).
- [3] S.A. Syzganbayeva, D. Yu. Dubovtsev, Kh. Santybayev, J. Ara, LL. Coloma; “*El poder de frenado de plasmas de dos componentes*”; *Libro de Resúmenes*, 269 (2018).
- [4] I.M. Tkachenko, J. Ara, LL. Coloma, Yu. V. Arkhipov, A.B. Ashikbayeva, A. Askaruly, A.E. Davletov, D. Yu. Dubovtsev, S. Syzganbayeva; “*Direct estimate of the hydrogen plasma polarizational stopping power*”; *News and Reports from High Energy Density generated by Heavy Ion and Laser Beams* (2017).
- [5] Yu. V. Arkhipov, A.B. Ashikbayeva, A. Askaruly, A.E. Davletov, D. Yu. Dubovtsev, A. Bourtebaev, EA. Grushevskaya, K.O. Lyabukhina, M. Nurseitova, S. Syzganbayeva, I.M. Tkachenko, J. Ara, LL. Coloma; “*Collective processes in a dense one component plasma*”; *Open Systems* (2017).
- [6] Francis F. Chen; “*Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion, Volume 1: Plasma Physics*”; Universidad de California (1974).
- [7] Julio Gutiérrez Muñoz; “*Generación de energía nucleoelectrónica: fusión y fisión, Vol.2. Fusión y fisión: reactores, materiales y residuos*”; Universidad de Alcalá (2014).
- [8] Setsuo Ichimaru; “*Statistical Plasma Physics, Volumen II: Condensed Plasmas*”; Universidad de Illinois (2004).
- [9] Raymond C. Rumpf; “*Electromagnetic Properties of Materials-Part 1. Lorentz and Drude Models*”. Obtenido de:
<http://emlab.utep.edu/ee5390em21/Lecture%20%20%20Lorentz%20and%20Drude%20models.pdf>
- [10] Universidad de Oxford; “*Graduate Class in Plasma Physics: Statistical Theory and Strongly Coupled Plasmas*”; (Junio de 2009). Obtenido de: <https://www2.physics.ox.ac.uk>
- [11] J. Lindhard, K. Dan. *Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* 28, 1 (1954).
- [12] N. D. Mermin, *Phys. Rev. B* 1, 2362 (1970).
- [13] Yu. V. Arkhipov, A. B. Ashikbayeva, A. Askaruly, A. E. Davletov, and I. M. Tkachenko *Phys.Rev. E* 90, 053102 (2014).
- [14] N. R. Arista and W. Brandt, *Phys. Rev. A* 29, 1471 (1984).

- [15] C. Fortmann, A. Wierling, and G. Röpke, Phys. Rev. E 81, 026405 (2010)
- [16] Michael P. Allen; “*Introduction to Molecular Dynamics Simulation*”; Neumann Institute (2004). Obtenido de: <https://udel.edu/~arthij/MD.pdf>
- [17] I.M. Tkachenko, M. Urrea, P. Fernández; “*Algoritmos de reconstrucción de funciones de distribución*”; Universidad Politécnica de Valencia (1996).
- [18] I.M. Tkachenko, Y.V. Arkhipov, A. Askaruly; “The Method of Moments and its Applications in Plasma Physics”; Lambert; Saarbrücken, (2012).
- [19] V. I. Perel’ and G. M. Eliashberg, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 41, 886 (1961) [Sov. Phys. JETP 14, 633 (1962)].
- [20] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Física Estadística, Volumen 5 del Curso de Física Teórica, Ed. Reverté, 2002.
- [21] Yu.V. Arkhipov, A.B. Ashikbayeva, A. Askaruly, A.E. Davletov, D.Yu. Dubovtsev, I. M. Tkachenko; “Screened Effective Interaction Potencial for Two-Component Plasmas”; (2016).
- [22] J. Ortner, I.M. Tkachenko, Phys.Rev. E 63, 026403 (2001).
- [23] G. Chabrier, A. Y. Potekhin, Phys.Rev. E58 (1998) 4941-4949.
- [24] Yu. V. Arkhipov, A. Askaruly, D. Ballester, A. E. Davletov, I. M. Tkachenko, and G.Zwicky, Phys. Rev. E 81, 026402 (2010).
- [25] A. Wierling, T. Pschiwul, G. Zwicky, Physics of Plasmas, 9 (12), 4871 (2002)
- [26] J. P. Hansen, I.R. McDonald, and E.L. Pollock, Phys. Rev.A 11, 1025 (1975)
- [27] N.-H. Kwong and M. Bonitz, Phys. Rev. Lett. 84, 8, 1768, (2000).
- [28] G. Zwicky, Th. Pschiwul, Math. Gen. 36, 6251-6258 (2003). TCP ZWICK
- [29] J. P. Hansen and I. R. Mc Donald, Phys. Rev. A 23, 2041 (1981)

PRESUPUESTO

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

1. UNIDADES FUNCIONALES

En primer lugar, se hace referencia a las diferentes unidades funcionales de las que va a constar el presupuesto. Al tratarse de un proyecto realizado en su mayoría con un ordenador, la división en unidades funcionales queda de la siguiente manera:

Tabla 3: Unidades funcionales del presupuesto.

Grupo	Unidad funcional
1	Estudios previos
2	Programación y simulación de los casos
3	Elaboración del trabajo

2. PRECIO DE LA MANO DE OBRA

Para el cálculo de la mano de obra se parte de la suposición de un Ingeniero Químico contratado por una empresa, donde:

- Salario neto pagado por la empresa: 2500 €/mes.
- Percibe 12 mensualidades más 2 pagas extra a lo largo del año.
- Durante el año hay 260 días laborables, con jornada de 8 horas.
- Se supone que el contrato es indefinido, y no se realizan horas extra.

Para obtener el coste real por hora se deben aplicar todos los porcentajes de cotización a la seguridad social por parte de la empresa. Los porcentajes a la seguridad social serán:

Tabla 4: Cotizaciones a la seguridad social.

Comunes	23,60%
Desempleo	5,50%
Formación profesional	0,60%
FOGASA	0,20%

Para obtener el salario bruto se debe multiplicar el salario neto por el número de mensualidades que se perciben (incluyendo las pagas extra), cotizaciones de forma anual.

Tabla 5: Cálculo del sueldo bruto anual.

Concepto	Unidad	Medición
Sueldo neto (mensual)	Euros/Unidad	2.500,00 €
Sueldo neto (anual)	Euros/Año	35.000,00 €
Contingencias comunes	Euros/Año	8.260,00 €
Desempleo	Euros/Año	1.925,00 €
Formación profesional	Euros/Año	210,00 €
IRPF	Euros/Año	70,00 €
Sueldo bruto (anual)	Euros/Año	45.465,00 €

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Finalmente, se puede calcular el precio de la mano de obra por hora. El número de horas al año se calcula como 260 días laborables, multiplicando por las 8 horas al día que se trabaja.

Tabla 6: Coste por hora de la mano de obra.

Concepto	Unidad	Medición
Coste bruto (anual)	Euros/Año	45.465,00 €
Días laborables	Días	260
Jornada laboral	Horas/Día	8
Horas laborables	Horas/Año	2080
Precio mano obra	Euros/Hora	21,86 €

3. PRESUPUESTOS PARCIALES

En primer lugar, el presupuesto de la unidad funcional estudios previos esta formado por todo el material (artículos y libros) consultado para poder realizar el trabajo, además de las horas invertidas.

Tabla 7: Presupuesto parcial para unidad funcional estudios previos.

Número	Descripción	Cantidad	Precio	Importe
1.1	Ingeniero Químico (horas)	200	21,86 €	4.371,63 €
1.2	RevModPhys. 81. 1625 (2009)	1	29,78 €	29,78 €
1.3	Francis F. Chen (1974)	1	63,06 €	63,06 €
1.4	Julio Gutiérrez Muñoz (2014)	1	81,70 €	81,70 €
1.5	Setsuo Ichimaru (2004)	1	24,67 €	24,67 €
1.6	Phys. Rev. B 1, 2362 (1970)	1	21,42 €	21,42 €
1.7	Phys. Rev. A 29, 1471 (1984)	1	21,42 €	21,42 €
1.8	Phys.Rev. E 90, 053102 (2014)	1	21,42 €	21,42 €
1.9	Phys. Rev. E 81, 026405 (2010)	1	21,42 €	21,42 €
1.10	I.M. Tkachenko, M. Urrea, P. Fernández (1996)	1	9,02 €	9,02 €
1.11	I.M. Tkachenko, Y.V. Arkhipov, A. Askaruly (2012)	1	63,40 €	63,40 €
1.12	L. D. Landau, E. M. Lifshitz (2002)	1	47,42 €	47,42 €
1.13	Phys.Rev. E 63, 026403 (2001)	1	21,42 €	21,42 €
1.14	Physics of Plasmas, 9 (12), 4871 (2002)	1	21,42 €	21,42 €
1.15	Phys.Rev. E58 (1998) 4941-4949	1	21,42 €	21,42 €
1.16	Math. Gen. 36, 6251-6258 (2003)	1	21,42 €	21,42 €
1.17	Phys. Rev. E 81, 026402 (2010)	1	21,42 €	21,42 €
1.18	Phys. Rev. Lett. 84, 8, 1768, (2000)	1	21,42 €	21,42 €
1.19	Phys. Rev. A 23, 2041 (1981)	1	21,42 €	21,42 €
Total				4.926,30 €

La unidad funcional programación y simulación de los casos esta compuesta por el equipo informático, además de la licencia del software de tratamiento matemático, y las horas invertidas.

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Tabla 8: Presupuesto parcial para unidad funcional programación y simulación.

Número	Descripción	Cantidad	Precio	Importe
2.1	Ingeniero Químico (horas)	20	21,86 €	437,16 €
2.2	Ordenador portatil	1	300,00 €	300,00 €
2.3	Licencia anual <i>Mathematica</i>	1	145,00 €	145,00 €
Total				882,16 €

Por último, en la unidad funcional elaboración del trabajo se incluye la licencia del software utilizado para redactar, además de las horas invertidas. El precio del equipo informático ya ha sido incluido anteriormente.

Tabla 9: Presupuesto parcial para unidad funcional elaboración del trabajo.

Número	Descripción	Cantidad	Precio	Importe
3.1	Ingeniero Químico (horas)	80	21,86 €	1.748,65 €
3.2	Licencia anual <i>Microsoft Office 2016</i>	1	100,00 €	100,00 €
3.3	Impresión y encuadernación	1	40,00 €	40,00 €
Total				1.888,65 €

En resumen, el presupuesto de ejecución material (PEM) es el siguiente.

Tabla 10: Presupuesto de ejecución material.

Número	Descripción	Importe
1	Estudios previos	4.926,30 €
2	Programación y simulación de los casos	882,16 €
3	Elaboración del trabajo	1.888,65 €
Total		7.697,12 €

4. PRESUPUESTO TOTAL

A continuación, se va a calcular el presupuesto de acción por contrata, el cual se obtiene sumando al presupuesto de ejecución material los porcentajes destinados a gastos generales y beneficio industrial (13% y 6% respectivamente).

Tabla 11: Presupuesto de ejecución por contrata.

Descripción	Importe
Presupuesto de ejecución material	7.697,12 €
Gastos generales	1.000,63 €
Beneficio industrial	461,83 €
Presupuesto de ejecución por contrata	9.159,58 €

Estudio autosuficiente no perturbativo de las propiedades dinámicas de sistemas coulombianos de fusión inercial.

Por último, se aplicará el IVA correspondiente (21 %) para obtener el presupuesto total.

Tabla 12: Presupuesto total.

Descripción	Importe
Presupuesto de ejecución por contrata	9.159,58 €
IVA	1.923,51 €
Presupuesto Total	11.083,09 €

El presupuesto total de este proyecto asciende a ONCE MIL OCHENTA Y TRES EUROS CON NUEVE CENTIMOS.