

Ion multicargado de dos electrones: primera corrección perturbativa a la energía por interacción Coulomb; estados 2^1S_0 y 2^3S_1

J.J. Barera, Dpto. de Física General y Teórica, Universidad de Oriente

RESUMEN

Se obtienen expresiones analíticas cerradas, usando funciones hipergeométricas, de la primera corrección perturbativa por interacción Coulomb, a la energía de los estados helioides 2^1S_0 y 2^3S_1 de iones de Z elevada, partiendo en aproximación inicial de electrones Dirac-Coulomb. Se obtienen los primeros términos del desarrollo en potencias de $(\alpha Z)^2$ de la expresión correspondiente al estado 1^1S_0 desarrollando las funciones hipergeométricas en sus parámetros.

ABSTRACT

Analytic expressions, using hypergeometric functions, for the first perturbative correction to the energy, produced by the Coulomb interaction among the electrons, are obtained for the helium states 2^1S_0 and 2^3S_1 of ions with high Z . Dirac-Coulomb electrons are considered in the null approximation. The leading terms of the expansion in the parameter $(\alpha Z)^2$ of the corresponding expression for the 1^1S_0 state are obtained.

INTRODUCCIÓN

En los últimos años existe interés creciente en el estudio de sistemas atómicos obtenidos por ionización múltiple de átomos pesados; esto está enlazado con la necesidad práctica del estudio de la sustancia en tales condiciones: sustancia estelar /1/, en condiciones de laboratorio en el plasma /2/ y como resultado de la acción de la radiación laser sobre la sustancia /3/.

Tales sistemas son fuertemente relativistas debido a las grandes velocidades de movimiento de los electrones (de orden αZc , donde $\alpha \approx 1/137$ es la constante de estructura fina, Z la carga nuclear y c la velocidad de la luz en el vacío), por lo que su tratamiento perturbativo exige la consideración de inicio de electrones relativistas (entiéndase electrones Dirac-Coulomb) que interactúan entre sí y con el vacío físico vía el campo cuantizado de radiación. Considerando el orden relativo (respecto a la energía no relativista) de la contribución principal a la energía de las distintas interacciones de los electrones atómicos: interacción Coulomb $-1/Z$, interacción magnética y retardo $-1/2 (\alpha Z)^2$, correcciones radiativas $-\alpha (\alpha Z)^2$, es claro que el efecto predominante es la interacción Coulomb, aunque cuando Z crece los tres se hacen comparables.

Para el estado base del ión helioido multicargado, Labzovskii obtuvo expresión analítica cerrada de la primera corrección de la energía por interacción Coulomb entre electrones /4/.

$$\Delta E_C^{(1)}(1^1S_0) = \frac{2^{1-4\gamma_1} \Gamma(4\gamma_1+1)}{(2\gamma_1+1)\Gamma^2(2\gamma_1+1)} F(1, 4\gamma_1+1, 2\gamma_1+2; 1/2) (Z\alpha^2 mc^2) \quad (1)$$

aquí $\gamma_1 = (1-\alpha^2 Z^2)^{1/2}$, Γ es la conocida función gamma de Euler /5/ y F la función hipergeométrica de Gauss /5/. En el límite no relativista $\alpha Z \ll 1$ y $\gamma_1 \approx 1$ y como $F(1, 5, 4; 1/2) = 5/2$ se tiene

$$\Delta E_C^{(1)}(1^1S_0, NR) = 5/8 (Z\alpha^2 mc^2) \quad (1a)$$

que es el conocido resultado de los cursos elementales de Mecánica Cuántica /6/. Es interesante la obtención de términos sucesivos a (1a) del desarrollo de (1) en potencias de $(\alpha Z)^2$, en este trabajo abordamos este problema ejemplificando con el término siguiente.

El objetivo principal de este trabajo es obtener expresiones cerradas para la primera corrección a la energía por interacción Coulomb entre los electrones helioides en el caso de los estados excitados 2^1S_0 y 2^3S_1 .

CORRIMIENTO DE LA ENERGÍA

La ausencia en la teoría cuántica relativista multipartícula de una ecuación estacionaria del tipo Schroedinger, complica notablemente el cálculo de la energía de un sistema de partículas. La ecuación relativista multipartícula es del tipo Bethe-Salpeter, inicialmente introducida por estos autores para el caso de dos partículas /7/ usando la teoría covariante de perturbaciones de la electrodinámica Cuántica, y en la cual aparece un tiempo para cada una de las partículas del sistema. Uno de los procedimientos más extendidos para el cálculo de la energía del átomo relativista se basa en la utilización de la fórmula adiabática de Gell-Mann y Low /8/, que

utiliza la construcción algo artificial de la matriz S, dependiente del parámetro adiabático.

Tal método fue aplicado inicialmente al átomo relativista de dos electrones por Sucher /9/ y al multielectrónico por Labzovskii /10/. En el problema multipartícula relativista aparecen dos dificultades que lo peculiarizan, una es la ya indicada existencia de un tiempo para cada partícula, lo que físicamente refleja la retardación de las interacciones; la otra es la necesidad de renormalizar las expresiones divergentes cuantoelectrodinámicas asociadas a la automasa, partes vértice y polarización del vacío. No obstante, la teoría de la renormalización sólo se formula de forma general y sencilla en la formulación covariante a través de funciones de Green, y aunque para el método adiabático se ha confirmado su renormalizabilidad en los primeros órdenes perturbativos /11/, parece difícil demostrarla para un orden cualquiera. Esta limitación del método adiabático ha favorecido el desarrollo de métodos de resolución desde la ecuación Bethe-Salpeter, que realizan la resolución perturbativa de la correspondiente ecuación de tiempos coincidentes /12/, y en los cuales las interacciones se describen por potenciales dependientes de la energía: cuasipotenciales. Recientemente Braun dio un paso simplificador en tal procedimiento /13/, al hermetizar dichos cuasipotenciales (en cada orden de su desarrollo perturbativo) lo que permitió la restauración de la condición de normalización usual frente a la más complicada de la función de Bethe-Salpeter /14/, logrando formular el problema del átomo relativista con una capa abierta, mediante una ecuación matricial sobre el subespacio de estados Dirac-degenerados de dicha capa, que tiene forma de una ecuación efectiva de tipo Schroedinger.

En el caso de interacción Coulomb entre electrones dichos métodos conducen al conocido resultado para el corrimiento de la energía desde el valor correspondiente al caso no interactuante /10,13/

$$E_C^{(1)} = \langle \psi | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi \rangle \quad (2)$$

donde el supraíndice indica el orden perturbativo y ψ es la función de onda antisimetrizada en aproximación nula del estado investigado. En el caso degenerado es necesario resolver la ecuación secular correspondiente como en el caso no relativista. Los estados de nuestro interés: $2^1S_0, 2^3S_1$ son degenerados entre sí y con otros estados, no obstante a consecuencia de la conservación del momentum angular y paridad totales, la ecuación secular (determinante) para ellos se diagonaliza y vale (2).

ESTADO 2^1S_0 : La función de onda en acople- jj

$$\psi = \frac{1}{2} \left(\psi_{1s_1}^{+\frac{1}{2}}(1) \psi_{2s_1}^{-\frac{1}{2}}(2) - \psi_{1s_1}^{-\frac{1}{2}}(1) \psi_{2s_1}^{+\frac{1}{2}}(2) - (1 \leftrightarrow 2) \right)$$

donde las funciones ψ son los estados estacionarios de Dirac-Coulomb /14/

$$\psi_{ns\frac{1}{2}}^m = \begin{pmatrix} f_{ns}(r) \Omega_{\frac{1}{2}} 0m(\vec{n}) \\ g_{ns}(r) \Omega_{\frac{1}{2}} 1m(\vec{n}) \end{pmatrix} \quad (3)$$

aquí

$$f_{1s}(r) = (2Z\alpha m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1+\epsilon_1}{2\Gamma(2\gamma_1+1)}} \exp(-\frac{1}{2}\rho) \rho^{\gamma_1-1} = -\sqrt{\frac{1+\epsilon_1}{1-\epsilon_1}} g_{1s}(r) \quad (3a)$$

$$f_{2s}(r) = -(2Z\alpha m/N_2)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1+\epsilon_2}{4N_2(N_2+1)}} \frac{\exp(-\rho/2N_2) \rho^{\gamma_1-1}}{\sqrt{\Gamma(2\gamma_1+2)}} \frac{N+1}{N_2^{\gamma_1-1}} \left(\frac{N+1}{N_2} \rho - N_2(2\gamma_1+1)\right) \quad (3b)$$

para g_{2s} una expresión análoga a la de f_{2s} cambiando $(1+\epsilon_2)$ bajo el radical por $(1-\epsilon_1)$ y el último factor entre paréntesis por $(-\frac{N_2+1}{N_2} \rho + (N_2+2)(2\gamma_1+1))$.

Arriba

$$\epsilon_1 = (1+(\alpha Z/\gamma_1)^2)^{-\frac{1}{2}}; \quad \epsilon_2 = (1+(\alpha Z/1+\gamma_1)^2)^{-\frac{1}{2}}; \quad N_2 = (2(1+\gamma_1))^{\frac{1}{2}}; \quad \rho = 2\alpha Zmr$$

Sustituyendo la función de onda en (2) obtenemos

$$\Delta E_c^{(1)}(2^1S_0) = \Delta E(1) + \Delta E(2) \quad (4)$$

aquí

$$\Delta E(1) = \langle 1s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) 2s_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}(2) | e^2/r_{12} | 1s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) 2s_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}(2) \rangle \quad (4a)$$

$$\Delta E(2) = \langle 1s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) 2s_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}(2) | e^2/r_{12} | 1s_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}(2) 2s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) \rangle \quad (4b)$$

sustituyendo (3;3a,b) en (4a,b) y efectuando la integración en los ángulos y suma en spines se obtiene

$$\Delta E(1) = \alpha \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \frac{1}{r} \langle (f_{1s}^2(r_1) + g_{1s}^2(r_1)) (f_{2s}^2(r_2) + g_{2s}^2(r_2)) \rangle \quad (5a)$$

$$\Delta E(2) = \alpha \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \frac{1}{r} \langle (f_{1s}(r_1) f_{1s}(r_2)) [f_{2s}(r_1) f_{2s}(r_2) + g_{2s}(r_1) \quad (5b)$$

$$g_{2s}(r_2)] + g_{1s}(r_1) g_{1s}(r_2) [f_{2s}(r_1) f_{2s}(r_2) + g_{2s}(r_1) g_{2s}(r_2)] \rangle$$

Sustituyendo las expresiones anteriores de las funciones radiales, empleando la fórmula de integración /15/

$$\int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 r_1^a r_2^b \exp(-\alpha_1 r_1) \exp(-\alpha_2 r_2) r_{<}^n r_{>}^{-m} = \Gamma(x) (\alpha_1 + \alpha_2)^{-x} x \quad (6)$$

$$x(b+n+3)^{-1} F(1, x, b+n+4; \alpha_2 / \alpha_1 + \alpha_2) + (a+n+3)^{-1} F(1, x, a+n+4; \alpha_1 / \alpha_1 + \alpha_2)$$

y después de algunas modificaciones reduciendo sucesivamente en una unidad los parámetros β y α de las funciones hipergeométricas usando /5/

$$(\gamma - \alpha - \beta)F + \beta(1-z)F(\beta+1) - (\gamma - \alpha)F(\alpha-1) = 0$$

$$(\gamma - \beta)zF(\gamma+1) + \gamma(1-z)F - \gamma F(\alpha-1) = 0 \quad (7)$$

donde $F = F(\alpha, \beta, \gamma; z)$, $F(\alpha-1) = F(\alpha-1, \beta, \gamma; z)$, $F(\beta+1) = F(\alpha, \beta+1, \gamma; z)$, $F(\gamma+1) = F(\alpha, \beta, \gamma+1; z)$, se arriba a

$$\Delta E(1) = \frac{Z\alpha^2 mc^2}{N_2 (2\gamma_1 + 2)} \frac{\Gamma(4\gamma_1 + 1)}{(N_2 + 1)\Gamma^2(2\gamma_1 + 1)} \left(\frac{N_2}{N_2 + 1}\right)^{4\gamma_1 + 1} \left\{ \left[1 + \frac{(N_2 + 1)^2}{2\gamma_1 + 1} \right] \times \right.$$

$$\times F\left(1, 4\gamma_1 + 1, 2\gamma_1 + 2; \frac{1}{N_2 + 1}\right) + \left[\frac{N_2^2 + 2\gamma_1}{2\gamma_1 + 1} + 2(1 - \epsilon_2) \frac{N_2 + 1}{2\gamma_1 + 1} \right] \times$$

$$\left. \times F\left(1, 4\gamma_1 + 1, 2\gamma_1 + 2; \frac{N_2}{N_2 + 1}\right) - \frac{(N_2 + 1)^2}{2\gamma_1 + 1} \right\} \quad (8)$$

$$\Delta E(2) = \frac{Z\alpha^2 mc^2}{N_2 (2\gamma_1 + 2)} \frac{\Gamma(4\gamma_1 + 1)}{(N_2 + 1)\Gamma^2(2\gamma_1 + 1)} \left(\frac{N_2}{N_2 + 1}\right)^{4\gamma_1 + 1} \left\{ \left[\frac{4}{2\gamma_1 + 1} + \frac{16\gamma_1}{2\gamma_1 + 1} + 2N_2^2 - \right. \right.$$

$$\left. - \frac{4(\gamma_1 + 1)}{2\gamma_1 + 1} N_2 + 4(1 - \epsilon_2) \left[2 - N_2 + \frac{2\gamma_1}{2\gamma_1 + 1} \right] F\left(1, 4\gamma_1 + 1, 2\gamma_1 + 2; \frac{1}{2}\right) \right\} \quad (9)$$

En el límite no relativista $\gamma_1 \cong 1, N_2 \cong 2, \epsilon_2 \cong 1$; entonces los términos con factor $(1 - \epsilon_2)$ no contribuyen en el orden de interés y se tiene

$$\Delta E(1)_{NR} = \frac{Z\alpha^2 mc^2}{2^4} \frac{\Gamma(5)}{3\Gamma^2(3)} \left(\frac{2}{3}\right)^5 \left\{ 4F\left(1, 5, 4; \frac{1}{3}\right) + 2F\left(1, 5, 4; \frac{2}{3}\right) - 3 \right\} = \frac{153}{729} Z\alpha^2 mc^2$$

$$\Delta E(2)_{NR} = \frac{Z\alpha^2 mc^2}{2^4} \frac{\Gamma(5)}{3\Gamma^2(3)} \left(\frac{2}{3}\right)^5 \frac{4}{3} = \frac{16}{729} Z\alpha^2 mc^2$$

donde hemos usado $F(1, 5, 4; \frac{1}{3}) = \frac{27}{16}$; $F(1, 5, 4; \frac{2}{3}) = \frac{9}{2}$. Sustituyendo los dos últimos resultados en (4) obtenemos la energía no relativista

$$\Delta E_c^{(1)} (2^1 S_0)_{NR} = \frac{169}{729} Z\alpha^2 mc^2 \quad (10)$$

de acuerdo con cálculos no relativistas /6/.

ESTADO $2^3 S_1$. La función de onda en acople-jj

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{1s_{\frac{1}{2}}}^{+\frac{1}{2}}(1) \psi_{2s_{\frac{1}{2}}}^{+\frac{1}{2}}(2) - \psi_{1s_{\frac{1}{2}}}^{+\frac{1}{2}}(2) \psi_{2s_{\frac{1}{2}}}^{+\frac{1}{2}}(1) \right\}$$

Por simplicidad escogemos el estado con proyección de momentum +1 teniendo en cuenta que en ausencia de campo externo la energía no depende de dicha proyección. Sustituyendo la anterior función en (2) resulta

$$\Delta E_c^{(1)}(2^3S_1) = \Delta E_d - \Delta E_i \quad (11)$$

donde

$$\Delta E_d = \langle 1s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) 2s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(2) | e/r_1 | 1s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) 2s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(2) \rangle$$

$$\Delta E_i = \langle 1s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) 2s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(2) | e/r_2 | 1s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(2) 2s_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}}(1) \rangle$$

sustituyendo (3,3a,b) en (11), efectuando la integración en los ángulos y suma en spines se obtiene

$$\Delta E_d = \Delta E(1)$$

$$\Delta E_i = \alpha \int_0^{\infty} r_1^2 dr_1 \int_0^{\infty} r_2^2 dr_2 \left\{ \int_{r_>} [f_{1s}(r_1) f_{1s}(r_2) f_{2s}(r_1) f_{2s}(r_2) + g_{1s}(r_1) g_{1s}(r_2) g_{2s}(r_1) g_{2s}(r_2)] + \frac{1}{9} \int_{r_>} [f_{1s}(r_1) f_{1s}(r_2) g_{2s}(r_1) g_{2s}(r_2) + g_{1s}(r_1) g_{1s}(r_2) f_{2s}(r_1) f_{2s}(r_2)] \right\}$$

así ΔE_d está dado por (8); empleando 3a/b) en la expresión de ΔE_i y con (6,7) después de algunas manipulaciones resulta

$$\begin{aligned} \Delta E_i = & \frac{Z\alpha^2 mc^2}{N} \frac{1}{2\gamma_1 + 2} \frac{1}{N_2 + 1} \frac{\Gamma(4\gamma_1 + 1)}{(2\gamma_1 + 1)} \left(\frac{N_2}{N_2 + 1} \right)^{4\gamma_1 + 1} \left\{ \left[(1 + \epsilon_1 \epsilon_2) \left((N_2 - 1)^2 + 3 - 4 \frac{N\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 + 1} \right) + \right. \right. \\ & + \frac{2}{9} (1 + \epsilon_1) (1 - \epsilon_2) \left(N_2 - 2 \frac{2\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 - 1} \right) + \frac{2}{9} (1 - \epsilon_1 \epsilon_2) \left((N_2 - 1)^2 \frac{2\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 - 1} + \right. \\ & + \frac{(6\gamma_1 - 5)(\gamma_1 + 1)}{(2\gamma_1 + 1)(2\gamma_1 - 1)} - N_2 + 2(1 - \epsilon_1)(1 - \epsilon_2) \left. \left. \left(N_2 - \frac{2\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 + 1} \right) \right] F\left(1, 4\gamma_1 + 1, 2\gamma_1 + 2, \frac{1}{2}\right) + \right. \\ & + \frac{4}{3} \frac{2 + \epsilon_1 \epsilon_2}{2\gamma_1 + 1} - \frac{4}{9} (1 + \epsilon_1) (1 - \epsilon_2) \left(N_2 - 2 \frac{2\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 - 1} \right) - \frac{4}{9} (1 - \epsilon_1 \epsilon_2) \left((N_2 - 1)^2 \frac{2\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 - 1} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 - 1} + \frac{6\gamma_1 - 5}{2\gamma_1 + 1} \frac{\gamma_1 + 1}{2\gamma_1 - 1} - N_2 \right) \right\} \quad (12) \end{aligned}$$

El límite no relativista de (12) conduce a

$$\Delta E_i^{NR} = \frac{16}{729} Z\alpha^2 mc^2$$

así la primera corrección no relativista a la energía sigue desde (11) sustituyendo $\Delta E_C^{(1)NR}$ y la anterior ΔE_i^{NR}

$$\Delta E_C^{(1)}(2^3S_1)^{NR} = 137/729 Z\alpha^2 mc^2 \quad (13)$$

de acuerdo con cálculos no relativistas /6/.

CONCLUSIONES

La obtención de expresiones analíticas exactas para el corrimiento de la energía por interacción de electrones en el átomo relativista no sólo posee valor desde el punto de vista formal, sino también práctico; tales expresiones permiten efectuar un desarrollo en el parámetro $(Z\alpha)^2$, lo que es de gran interés, pues al aumentar la exactitud en el estudio de tal sistema, es necesario no sólo la inclusión de efectos de órdenes superiores, sino también la consideración de las contribuciones en estos órdenes de las interacciones principales. Se han hecho cálculos exactos en los menores órdenes para el ión helioide /16/ y aproximados en órdenes mayores /17, 18/, pero en algunos casos no hay siempre concordancia /18/, lo que demuestra la utilidad de las expresiones exactas que permitan dilucidar sobre estas discrepancias.

Como ejemplo de uno de tales desarrollos consideraremos el de la expresión (1) para el corrimiento Coulomb del estado base. Limitándonos a los dos primeros términos es suficiente aproximar $\gamma_1 = 1 - \frac{1}{2}x$, denotando $x = (Z\alpha)^2$. Podemos escribir

$$\Delta E_C^{(1)}(1^1S_0)(Z\alpha^2 mc^2)^{-1} = K(x)F(x) \quad (14)$$

donde $K(x) = \frac{2^{Y+2x} \Gamma(5-2x)}{(3-x)\Gamma^2(3-x)}$; $F(x) = F(1, 5-2x, 4-x; \frac{1}{2})$

Desarrollando $K(x)$ en potencias de x

$$K(x) = K_0 + K_1 x; \quad K_0 = \frac{1}{4}; \quad K_1 = \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{5}{24} \quad (15)$$

Desarrollando $F(x)$ en potencias de x , para lo cual empleamos la identidad /5/

$$F(2a, 2b, a+b+1; \frac{1}{2}) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(a+b+1)}{b-a} \left(\frac{1}{\Gamma(b)\Gamma(a+\frac{1}{2})} - \frac{1}{\Gamma(a)\Gamma(b+\frac{1}{2})} \right)$$

con $a = \frac{1}{2}$, $b = \frac{5}{2} - x$; se obtiene

$$F(x) = F_0 + F_1 x; \quad F_0 = \frac{5}{2}; \quad F_1 = \frac{61}{12} - 8 \ln 2 \quad (16)$$

Sustituyendo (15,16) en (14)

$$\Delta E_C^{(1)}(1^1S_0)(Z\alpha^2 mc^2) = K_0 F_0 + (K_1 F_0 + K_0 F_1) x + \dots \quad (17)$$

con $K_0 F_0 = \frac{5}{8}$ como antes obtuvimos y $K_1 F_0 + K_0 F_1 = -\frac{3}{4} \ln 2 + \frac{3}{4}$

Es interesante destacar que el segundo término de (17) da la contribución a la energía de interacción correspondiente a los operadores Breit-Pauli que surgen de la interacción Coulomb entre electrones /14/.

BIBLIOGRAFÍA

1. Kononov, E.Ya., Riabtsev A.N.; *Uzv. AN CCCP, ser. fiz* 45, 2361 (1981)
2. Cowan, R.D.; *Phys Scripta* 24, 615 (1981)
3. Key M.H.; *Adv. Atom. and Mol. Phys* 16, 201 (1980)
4. Labzovskii L.N., Klimchiskaya G.L.; *JETF* 60, 2019 (1971)
5. Luke Y.L.; *Mathematical Functions and their approximations, Ac.Press* (1975), traducción al ruso: Mir (1980)
6. Morrison M., Estle T., Lane N; *Quantum States of Atoms, Molecules and Solids, Prent.- Hall* (1976)
7. Salpeter E., Bethe H.; *Phys Rev* 84, 1232 (1951)
8. Gell-Mann M., Low F.; *Phys Rev* 84, 350 (1951)
9. Sucher J.; *Phys Rev* 109, 1010 (1958)
10. Labzovskii L.N.; *JETF* 59, 168 (1970)
11. Braun M.A., Gurchumelia A.D.; *Teor. Mat. Fiz* 45, 199 (1980)
12. Braun M.A.; *Teor. Mat. Fiz* 34, 59 (1978)
13. Braun M.A.; *Teor. Mat. Fiz* 59, 388 (1984)
14. Berestetskii V., Lifshitz E., Pitaevskii L.; *Teoría Cuántica Relativista, Reverté* (1971)
15. Gradshteyn I., Riyik I.; *Tablitsi integralov, summ i proizvedenii, Nauka* (1971)
16. Dalgarno A., Stewart A.; *Proc. Phys. Soc. (Lond.)* 75, 441 (1960)
Stewart A.; *Proc. Phys. Soc. (Lond.)* 88, 311 (1966)
Doyle H.; *Adv. Atom. and Mol. Phys* 5, 337 (1969)
17. Safronova U.I.; *Phys. Scr.* 23, 241 (1981)
18. Mohr P.J.; *Phys. Rev. A* 32, 1949 (1985)

Recibido: 31 de diciembre de 1986.

Irregularidad de la capa nitrurada en fundiciones grises

Leonides Peraza López, I.S.T.C.

Alejandro Duffus Scott, U.C.L.V.

RESUMEN

En el presente trabajo se estudia un fenómeno que se presenta durante la nitruración gaseosa a 600°C durante seis horas de las fundiciones perlíticas, en relación con la irregularidad de aparición de las fases nitrogenadas que aparentemente contradice la cinética de formación de estas fases. Mediante técnicas metalográficas y de difracción de Rayos X se pone en evidencia el fenómeno y se explica por la formación de huecos en la superficie de las muestras y por la alta concentración de carbono en estas zonas.

ABSTRACT

It was studied a phenomenon reminded in a gas nitriding of pearlitic gray cast iron at a temperature of 600°C during six hours in relation to the abnormality of the formation of nitrogenized phases which refuse apparently the kinetics of these phases.

This phenomenon was manifested by X Rays and metallographic techniques. It was explained by the formation of superficial holes during the nitriding process as well as the high carbon concentration at these regions.

INTRODUCCIÓN

La nutrición de las fundiciones grises es un método muy efectivo para mejorar las propiedades mecánicas superficiales y la resistencia al desgaste de este tipo de aleación.

Se conoce que la capa nitrurada en las fundiciones grises está constituida por las fases ϵ y γ' (nitruros de hierro) y la fase α_n (Ferrita nitro

genada) al igual que en los aceros ferríticos, (1,2) con espesores de hasta 170 μ m de modo que las fases más ricas en nitrógeno aparecen desde la superficie hacia el interior de las muestras.

Este trabajo tiene como objetivo reportar el hecho sorprendente de que al analizar roentgenográficamente una fundición perlítica nitrurada a 600°C durante seis horas se encontrará la presencia de la fase ϵ a profundidades del orden de 110 μ m aún cuando la fase γ' ya no estaba presente, lo cual contradice aparentemente la cinética de formación de las fases nitrogenadas.

En este trabajo se brinda además una explicación satisfactoria a este fenómeno, basándose en un modelo simple que se ajusta muy bien a la realidad.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para este estudio, se tomaron muestras de una fundición gris perlítica con grafito en forma laminar que se utiliza en la EMPRÓMEC "9 de Abril" de Sagua la Grande, para fabricar las bombas que manipulan soluciones azucaradas. La composición química de las fundiciones es: C: 2,9%; Si: 2,00%; Mn: 0,51%; P: 0,23%; S: 0,08%.

Las muestras fueron nitruradas en un horno tubular con flujo continuo de amoníaco cuyo grado de disociación fue de 45 a 55%, la temperatura fue de 600°C y el tiempo de permanencia fue de seis horas.

Se realizaron los registros de R-X con el difractómetro HGZ-3 utilizándose el método de retirada sucesiva de capas por medios mecánicos. [3]. Se utilizó radiación de Fe no filtrada.

El análisis metalográfico se realizó en el microscopio NEOPHOT-2.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los difractogramas que aparecen en la figura 1 han sido seleccionados entre otros para mostrar el fenómeno.

Se observa que para profundidades del orden de 10 μ m Fig. 1a y 45 μ m Fig. 1b. Aparecen los reflejos (111) γ' , (101) ϵ y (110) α indicando la presencia de los nitruros de hierro ϵ y γ' y de la ferrita α . Sin embargo, a profundidades cercanas a 85 μ m Fig. 1c, aún cuando aparece el máximo (101) ϵ con cierta intensidad, no aparece ya el máximo (111) γ' lo que atestigua que aunque a esa profundidad existe la fase ϵ no está la fase γ' . Esto es a todas luces una contradicción puesto que la fase ϵ es más rica en nitrógeno que la fase γ' y por lo tanto, si no se tiene en cuenta ningún otro efecto, debería obtenerse una distribución inversa de las fases.

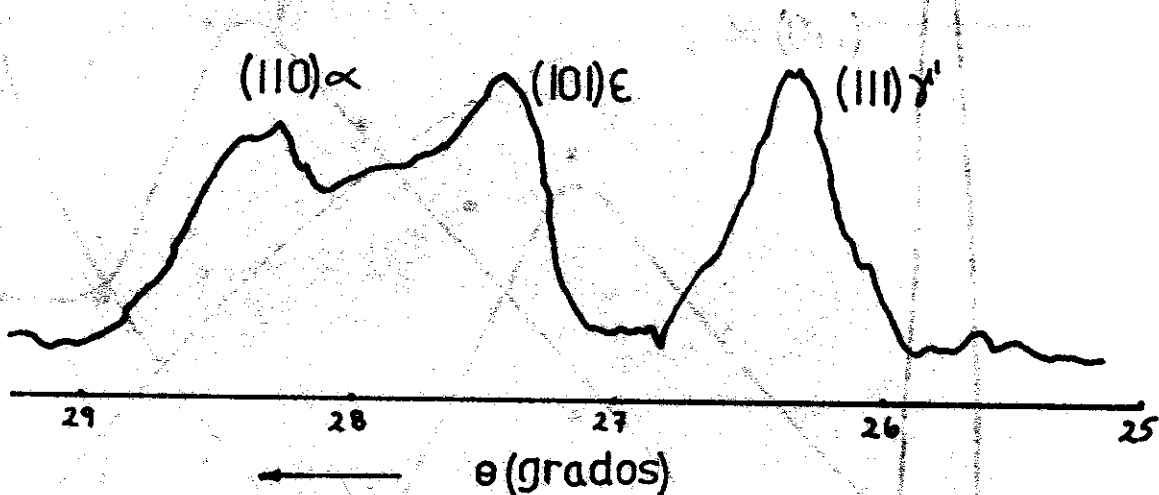
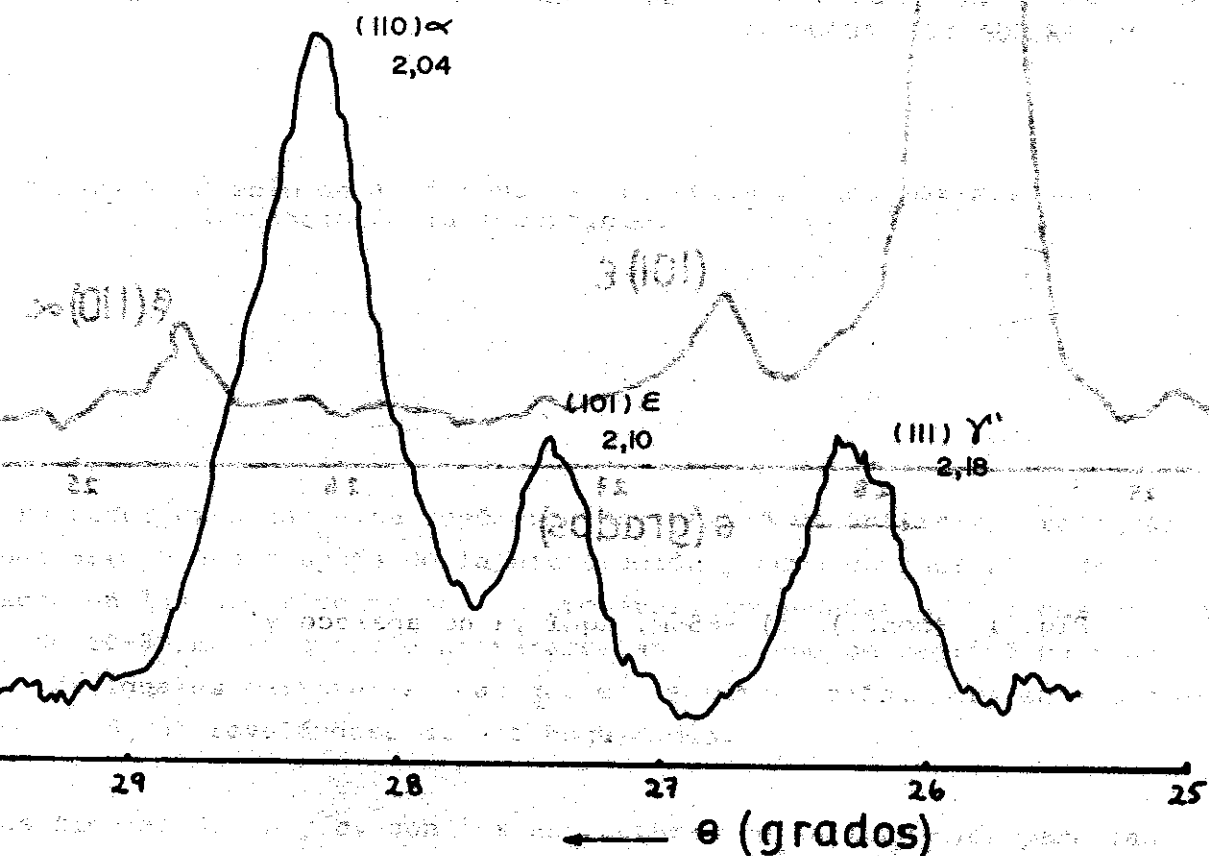


Figura 1. Difractogramas tomados a distintas profundidades.

a) $-10\mu\text{m}$, se observa los reflejos característicos de las fases ϵ , γ' y α



b) -45 m , se observan también los picos de ϵ , γ' y α

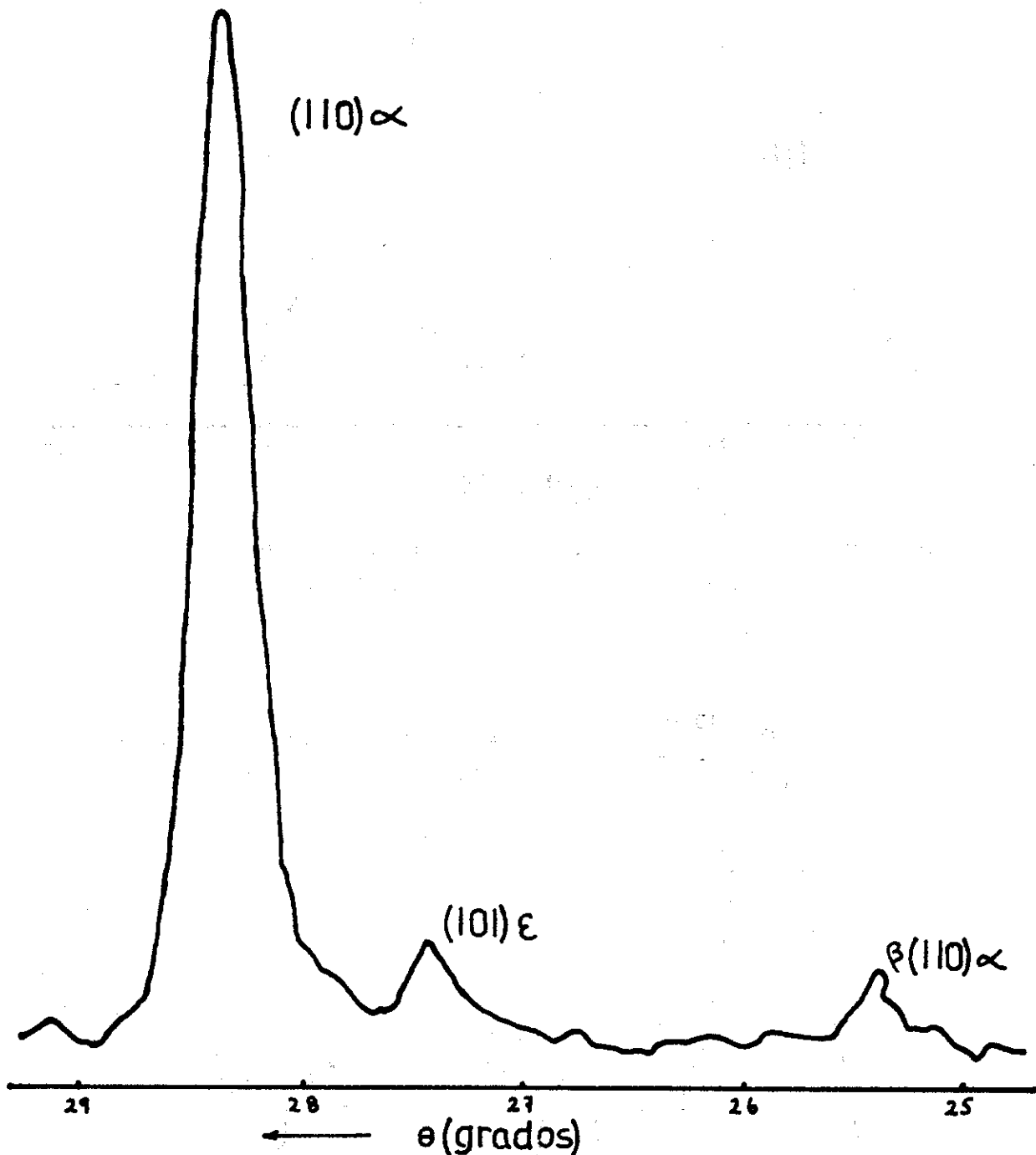


Fig. 1 (cont.) c) $-85\mu\text{m}$, aquí ya no aparece γ'

Para enfatizar este hecho, a partir de 9 difractogramas obtenidos al retirarse sucesivamente las capas nitruradas, se construyó la figura 2 en que se ploteó la intensidad relativa de los máximos de difracción contra la distancia a la superficie de las muestras. Se observa que en la zona entre 35 y $55\mu\text{m}$ la concentración de la fase ϵ aumenta bruscamente.

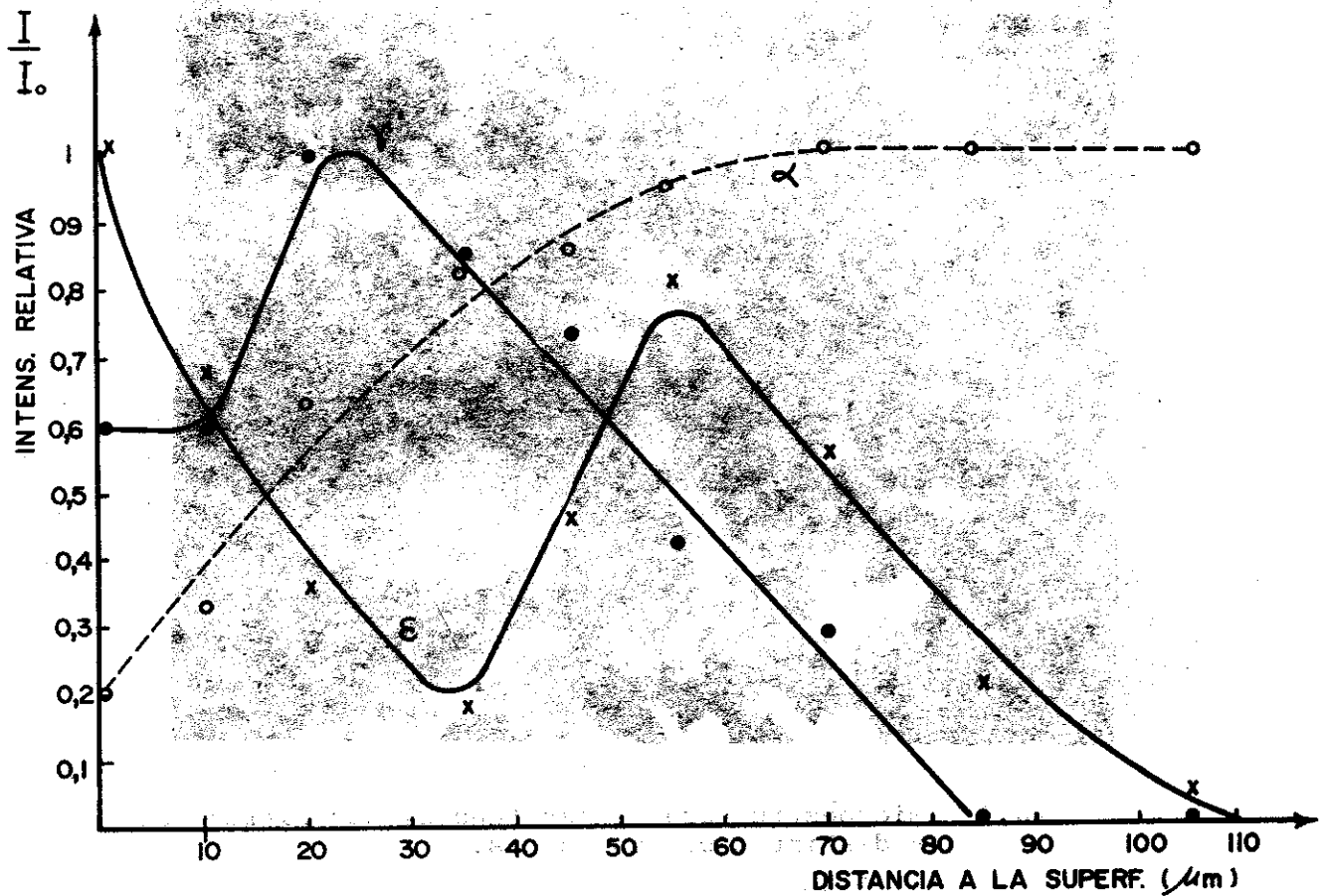


Figura 2. Cambio de la intensidad relativa de los máximos con la distancia de la superficie.

Para poder explicar este fenómeno, se realizó un análisis metalográfico el cual arrojó que después de la nitruración y como consecuencia de ella aparecen en las superficies de las probetas, hoquedades con dimensiones del orden de 60-80 μm. Esto puede aseverarse así por que se realizó un tratamiento de iguales características que en la nitruración, pero en atmósfera inerte de N₂ no revelándose dichas hoquedades.

Las figuras 3a, b y c, son las estructuras de la fundición para las mismas profundidades donde fueron tomados los difractogramas, por lo que existe una correspondencia con las Fig. 1 a, b y c.

Aquí se observa cómo la capa nitrurada persiste alrededor de esas hoquedades aún para profundidades del orden 85 μm.



Figura 3. Microestructura de las fundiciones nitruradas a distintas profundidades.

a) 10 μ m



Figura 3. b) 45 μ m

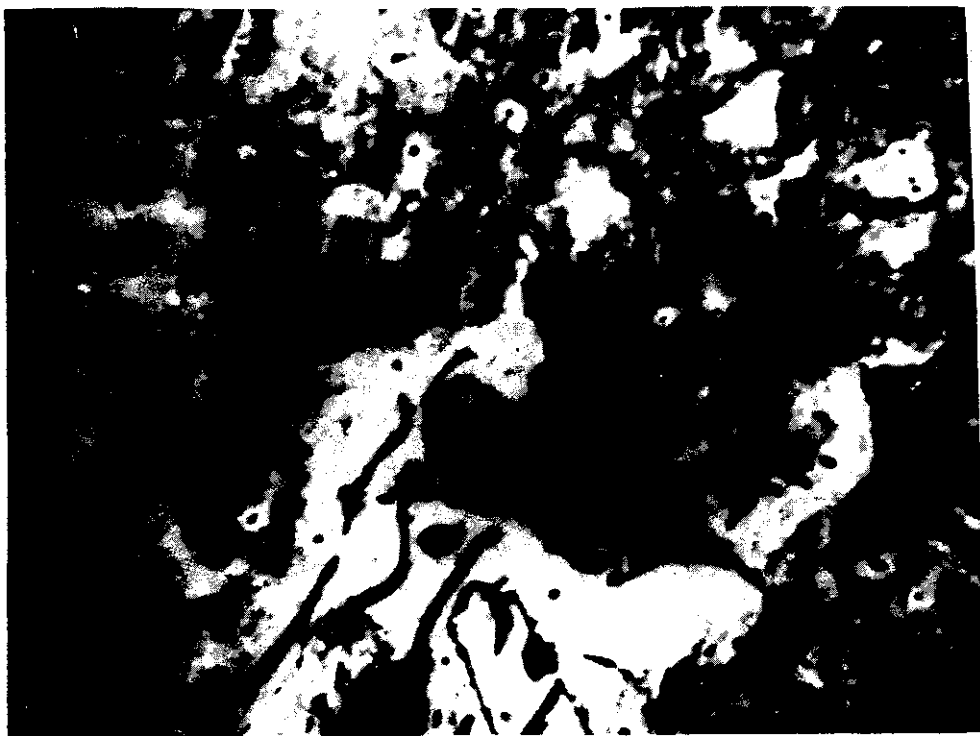


Fig. 3 (cont.) c) 85 μ m

En la figura 4 se muestran las gráficas de la abundancia de las hoquedades, de la capa nitrurada y del grafito en dependencia de la profundidad, puede observarse que el por ciento de capa nitrurada sigue la misma tendencia que el por ciento de huecos, anulándose ambos alrededor de 110 μ m. De modo que se puede plantear que esas hoquedades sirven de vía para que penetren los átomos de N y enriquezcan las zonas internas de las muestras, así fue como se construyó el modelo simple que aparece en la figura 5 en la que se observa como para profundidades entre 85 y 105 μ m ya no existe fase γ' mientras que aún está presente la fase ϵ .

Por otro lado, la alta concentración de carbono de las fundiciones grises, y en particular de las paredes de las hoquedades aumenta el dominio de estabilidad de la fase ϵ y disminuye el de la fase γ' puesto que de acuerdo con el diagrama de equilibrio Fe-C-N la fase ϵ puede contener una cantidad considerable de carbono mientras que la fase γ' no. [4]

La unión de ambos factores, las hoquedades y alta concentración de C pueden explicar el hecho aparentemente contradictorio de la presencia de ϵ sin γ' a esas profundidades.

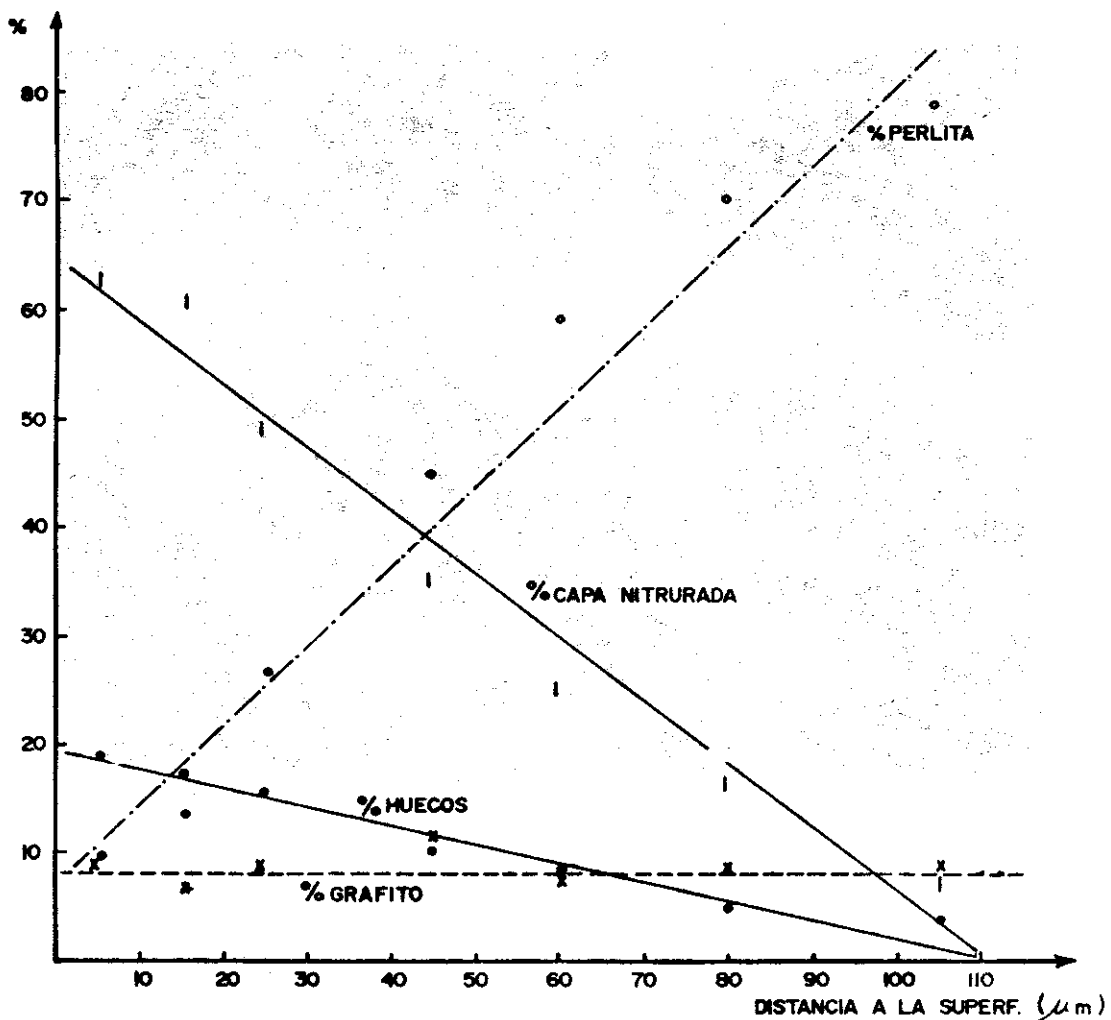


Figura 4. Variación del por ciento de perlita, capa nitrurada, huecos e inclusiones de grafito con la distancia a la superficie.

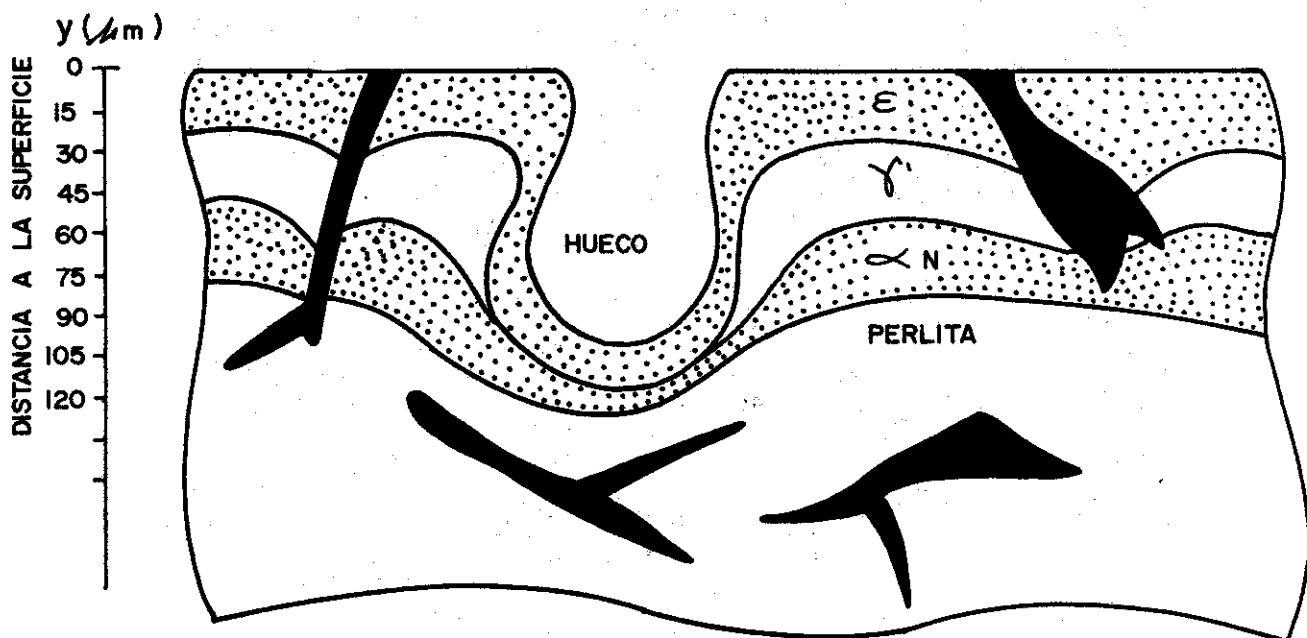


Figura 5. Modelo esquemático de las fases en la capa nitrurada.

CONCLUSIONES

1. Cuando se nitruran a 600°C durante seis horas a las fundiciones grises perlíticas aparecen en las superficies hoquedades de dimensiones del orden de 70µm cuyo mecanismo de formación no es conocido hasta ahora.
2. Las hoquedades sirven la vía para la penetración hacia las capas más internas de átomos de nitrógeno, formándose la fase ε la cual es más estable que la fase γ' producto de la alta concentración de carbono en esas zonas.
3. Debe estudiarse ese fenómeno para otras temperaturas y tiempos de permanencia.

BIBLIOGRAFÍA

1. González, R.F. y A.Duffus
"Difusión de nitrógeno en hierro fundido con distribución no convencional de grafito".
Construcción de maquinarias, Año 10, No.2, Abril-Junio 1985.
pp. 55.
2. Rufz, F. y M.Pérez
"Mejoramiento del hierro fundido para la fabricación de bombas de guarapo". Trabajo de Diploma, U.C.L. V. 1983.
3. Sánchez, H., J.León y R.González
Estudio Roengenográfico de muestras nitruradas, 1983.
4. Naumann, F.K. y G.Langenscheid
Archivofur dos Eisen Huttenvesen 36, Jahrgang Heft. 9 de setiembre, 1985, 678.

Recibido: 11 de abril de 1986.

CONCLUSIONES

1. Cuando se nitruran a 600°C durante seis horas a las fundiciones grises perlíticas aparecen en las superficies hoquedades de dimensiones del orden de 70µm cuyo mecanismo de formación no es conocido hasta ahora.
2. Las hoquedades sirven la vía para la penetración hacia las capas más internas de átomos de nitrógeno, formándose la fase ε la cual es más estable que la fase γ' producto de la alta concentración de carbono en esas zonas.
3. Debe estudiarse ese fenómeno para otras temperaturas y tiempos de permanencia.

BIBLIOGRAFÍA

1. González, R.F. y A.Duffus
"Difusión de nitrógeno en hierro fundido con distribución no convencional de grafito".
Construcción de maquinarias, Año 10, No.2, Abril-Junio 1985.
pp. 55.
2. Ruíz, F. y M.Pérez
"Mejoramiento del hierro fundido para la fabricación de bombas de guarapo". Trabajo de Diploma, U.C.L. V. 1983.
3. Sánchez, H., J.León y R.González
Estudio Roengenográfico de muestras nitruradas, 1983.
4. Naumann, F.K. y G.Langenscheid
Archivofur dos Eisen Huttenvesen 36, Jahrgang Heft. 9 de setiembre, 1985, 678.

Recibido: 11 de abril de 1986.