Estructura 3

NOTA 14.   Un foton aparece. Recombinacion radiativa

J. E. Miraglia

Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas

y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Argentina.

(Dated: November 8, 2013)

Abstract

HOJA DE RUTA. Identificaciondel proceso. Regla de oro de Fermi. Densidad de estados finales e integracion. Reduccion del elemento de matriz. Seccion eficaz.

CALCULO. APPROXIMACION DE ONDA PLANA

IMPLICANCIAS FISICAS

falta dibujos , espanol y bibliografia.

PACS numbers:

I. HOJA DE RUTA

Siguiendo el mismo esquema de siempre.

Identificacion del proceso

Veremos la emision de un foton caracterizado por un wave vector $\overrightarrow{k}$, y una polarizacion (lineal) $\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}$. En su caso mas general el campo fotonico pasa de $N_{\lambda\overrightarrow{k}} \rightarrow N_{\lambda\overrightarrow{k}} + 1$, mientras que los otros nodos $N_{\lambda'\overrightarrow{k'}}$ quedan inalterados (si los hubiera). La captura o recombinacion radiativa considera que el estado inicial esta en el **continuo**, es decir: incide un electron libre que finalmente queda atrapado en un estado ligado del blanco

$$e(\psi^{+}_{\overrightarrow{k}_i}) + \text{Blanco}^{+q} \rightarrow \text{Blanco}^{q-1}(\psi_f) + \hbar\omega. \tag{1}$$

Si el blanco fuera un nucleo **desnudo (sin electrones)**, este proceso es posible si y solo si hay emision de radiacion. Sin emision de un foton, este proceso seria imposible ya que no conserva la energia. No hay que confundir, para blancos **multielectronicos** este proceso es posible sin la emision de radiacion, por ejemplo

$$e + He^{+}(1s) \rightarrow He(nl, n'l'), \tag{2}$$

a este proceso **-no radiativo-** se la llama recombinacion dielectronica y lo vimos como el proceso inverso al Auger. Este proceso compite en algunos casos dependiendo del rango energetico del electron incidente y el blanco en cuestion..

Las huellas de este proceso la marca la emision de un foton $\hbar\omega$ cuya energia queda determinada por la conservacion de la energia

$$E_i = \varepsilon_i = \frac{(\hbar k_i)^2}{2m} = E_f = \varepsilon_f + \hbar\omega. \tag{3}$$

Como las energias finales (ε_f) e iniciales (ε_i) estan perfectamente determinadas, la energia emitida debe ser unica y por lo tanto el espectro es de linea siempre y cuando el haz de electrones incidentes sea monoenergetico. Normalmente no lo es. El elemento de matriz interviniente es

$$\langle 1_{\lambda\overrightarrow{k}}\ \psi_f | H^{+}_{\lambda\overrightarrow{k}} | 0_{\lambda\overrightarrow{k}}\ \psi^{+}_{\overrightarrow{k}_i} \rangle = -\frac{e}{m}\ A_1 \langle 1_{\lambda\overrightarrow{k}}\ \psi_f |\ \widehat{\overrightarrow{p}} | 0_{\lambda\overrightarrow{k}}\ \psi^{+}_{\overrightarrow{k}_i} \rangle \tag{4}$$

La diferencia con la emision espontanea de linea es que el estado inicial aqui es el continuo. Vamos a calcular en detalle el caso hidrogenico

$$e + H \rightarrow H(nl) +\ \hbar\omega.$$

La regla de oro de Fermi. Siguiendo con la misma notacion (con $q = -e$) y suponiendo que no hay fotones en el medio esto es el vacio, la regla de oro de Fermi nos da

$$\frac{d\,W^{+}_{i\to f}}{dt\; d\overrightarrow{f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f - E_i)\,\left|\langle 1_{\lambda\overrightarrow{k}}\;\psi_f|H^{+}_{\lambda\overrightarrow{k}}|0_{\lambda\overrightarrow{k}}\;\psi^{+}_{\overrightarrow{k}_i}\rangle\right|^2, \tag{5}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\delta[(\varepsilon_f + \hbar\omega) - \varepsilon_i]\frac{e^2}{m^2}\;A_1^2\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\widehat{\overrightarrow{p}}\right\rangle_{f\;\leftarrow\overrightarrow{k}_i}\right|^2. \tag{6}$$

Densidad de estados finales e integracion. Recordemos que el diferencial de estados finales del foton $d\overrightarrow{f}$ en la caja de volumen V

$$d\overrightarrow{f} = \sum_{\lambda}\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}d\overrightarrow{k} = \sum_{\lambda}\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\overbrace{d\Omega\;d\omega\;\omega^2}^{d\overrightarrow{k}}}{c^3} \tag{7}$$

donde con $\overrightarrow{k}$ queremos indicar todo el espacio de posibilidades y $k = \omega/c$. La funcion delta de Dirac nos restringira a un solo valor del momento del foton: que es el que conserva la energia y descartara los otros:

$$\int d\overrightarrow{k}\;\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\overbrace{\delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f - \hbar\omega)}^{\frac{1}{\hbar}\delta\left[(\varepsilon_i-\varepsilon_f)/\hbar-\omega)\right]} = \int\; d\Omega\;\rho(\omega_{if}), \tag{8}$$

$$\rho(\omega_{if}) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{if}^2}{\hbar c^3} \qquad \textbf{densidad de estados}\text{, con}$$

$$\omega_{if} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar} \tag{9}$$

O sea que el foton sale con una energia bien determinada y esta dado por la Eq.(9). Reemplazando Eq.(8) en (6) queda

$$\frac{d\,W^{+}_{i\to f}}{dt\;d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{\omega_{if}^2}{\hbar c^3}\frac{e^2}{m^2}\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3}\;\overbrace{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{if}\mathcal{V}}}^{A_1^2}\sum_{\lambda}\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\widehat{\overrightarrow{p}}\right\rangle_{f\leftarrow\overrightarrow{k}_i}\right|^2$$

$$= \frac{\omega_{if}}{\hbar c^3}\frac{1}{m^2}\frac{1}{(2\pi)}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\;\sum_{\lambda}\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\widehat{\overrightarrow{p}}\right\rangle_{f\;\leftarrow\overrightarrow{k}_i}\right|^2 \tag{10}$$

Notese que el volumen $\mathcal{V}$ se simplifica en forma natural, por lo que el resultado es independiente de $\mathcal{V}$ (tal es asi que en agunos casos se pone $\mathcal{V} = 1$ desde el comienzo).

Reduccion del elemento de matriz. Concentremosno en un nucleo Culombiano desnudo suponiendo que el electron cae en un estado nlm cuya energia es la hidrogenoide

$$\begin{aligned}
\psi_f &= \psi_{nlm}, \quad \rightarrow \quad \varepsilon_f = -\frac{Z^2}{2n^2}\frac{me^4}{\hbar^2}, \quad \text{estdo ligado} && (11)\\
\psi^+_{\overrightarrow{k}_i}(\overrightarrow{r}) &= \psi_{\overrightarrow{k}_i}(\overrightarrow{r})D^+(a, \overrightarrow{k_i}|\overrightarrow{r}), \qquad \text{estado continuo} && (12)\\
\psi_{\overrightarrow{k}_i}(\overrightarrow{r}) &= \frac{\exp(i\overrightarrow{k_i}.\overrightarrow{r})}{(2\pi)^{3/2}} = \quad \text{onda plana}, && (13)\\
D^+(a, \overrightarrow{k_i}|\overrightarrow{r}) &= \exp(a\pi/2)\Gamma(1-ia)_1F_1(+ia; 1; +ik_ir - i\overrightarrow{k}_i.\overrightarrow{r}), && (14)\\
a &= Ze^2m/k\hbar^2, \qquad \text{que satisface}, && (15)\\
\left\langle \psi_{nlm}|\psi_{\overrightarrow{k}_i}\right\rangle &= 0, \quad \text{ortogonalidad}, && (16)\\
\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\overrightarrow{p}\right\rangle_{nlm \leftarrow \overrightarrow{k}_i^+} &= \int d\overrightarrow{r}\psi^*_{nlm}(r)\left[e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}_r\right]\psi^+_{\overrightarrow{k}_i}(\overrightarrow{r}). && (17)
\end{aligned}$$

El elemento de matrix (17) involucra integrales de Nordsieck (ver apendice de notas anteriores)

<u>**Seccion eficaz**</u>. En este proceso podemos definir una seccion eficaz ya que hay flujo de particulas entrantes. Para calcular la seccion eficaz debemos hacer

$$\frac{d\,\sigma}{d\Omega} = \frac{\frac{d\ W^+_{i\to f}}{dt\ d\Omega}}{J_{in}} \tag{18}$$

donde J_{in} es el flujo incidente (el electronico) que es por definicion

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{J}_{in} &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^{+*}_{\overrightarrow{k}_i}\overrightarrow{\nabla}_{\overrightarrow{r}}\psi^+_{\overrightarrow{k}_i} - \psi^+_{\overrightarrow{k}_i}\overrightarrow{\nabla}_{\overrightarrow{r}}\psi^{+*}_{\overrightarrow{k}_i}\right)\\
&\quad \text{se supone que en el pasado remoto}\\
&= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*_{\overrightarrow{k}_i}\overrightarrow{\nabla}_{\overrightarrow{r}}\psi_{\overrightarrow{k}_i} - \psi_{\overrightarrow{k}_i}\overrightarrow{\nabla}_{\overrightarrow{r}}\psi^*_{\overrightarrow{k}_i}\right)\\
&= \frac{\hbar\overrightarrow{k}_i}{(2\pi)^3m}. && (19)
\end{aligned}$$

Lo que resulta

$$\begin{aligned}
\frac{d\,\sigma}{d\Omega} &= \frac{\omega_{if}}{\hbar c^3}\frac{1}{m^2}\frac{1}{(2\pi)}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{(2\pi)^3m}{\hbar k_i}\right]\sum_\lambda\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\overrightarrow{p}\right\rangle_{fi}\right|^2,\\
\frac{d\,\sigma}{d\Omega} &= \frac{(2\pi)^2\omega_{if}}{\hbar^2c^3m\ k_i}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_\lambda\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\widehat{\overrightarrow{p}}\right\rangle_{f\ \leftarrow\overrightarrow{k}_i}\right|^2, && (20)
\end{aligned}$$

De aqui en mas deberia continuarse sin problemas: el calculo es sencillo.

II. CALCULO. APPROXIMACION DE ONDA PLANA.

Hagamos dos aproximaciones para tener una idea de su comportamiemto. *Primero* consideremos la aproximacion dipolar $\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\overrightarrow{p}\right\rangle_{fi} \simeq \langle\overrightarrow{p}\rangle_{fi}$. En *segundo* lugar consideremos que el electron impacta a grandes velocidades, $a \propto 1/k_i \to 0$ cuando $k_i \to \infty$, de manera que puede despreciarse el factor $D^{+}(a, \overrightarrow{k_i}|\overrightarrow{r})$ en la Eq.(12) y asi el estado final se reduce a una onda plana (una aproximacion grosera, ya que perdemos la ortogonalidad). Entonces tenemos

$$\begin{aligned} \langle\overrightarrow{p}\rangle_{fi} &\simeq \int d\overrightarrow{r}\ \psi_f^*(r)\overbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\right)}^{\widehat{\overrightarrow{p}}}\overbrace{\frac{\exp(i\overrightarrow{k_i}.\overrightarrow{r})}{(2\pi)^{3/2}}}^{\text{onda plana}}, \\ &= \hbar\overrightarrow{k_i}\int d\overrightarrow{r}\ \psi_f^*(r)\frac{\exp(i\overrightarrow{k_i}.\overrightarrow{r})}{(2\pi)^{3/2}} = \hbar\overrightarrow{k_i}\widetilde{\psi}_f^*(\overrightarrow{k}_i), \end{aligned} \tag{21}$$

donde $\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{k}_i)$ es la transformada de Fourier del estado ligado final. Reemplazando la Eq.(21) en (20) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d\,\sigma}{d\Omega} &= \frac{(2\pi)^2\omega_{if}}{\hbar^2c^3m\ k_i}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\hbar^2k_i^2\ |\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{k}_i)|^2\sum_\lambda\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\widehat{k}_i\right|^2, \\ &= \frac{(2\pi)^2\omega_{if}\ k_i}{c^3m}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}|\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{k}_i)|^2\sum_\lambda\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\widehat{k}_i\right|^2. \end{aligned} \tag{22}$$

Introduciendo las siguientes coordenadas

$$\begin{cases} \widehat{k}_i = (0,\ 0,\ 1), \qquad \text{electron incidene}, \\ \widehat{k} = (\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta), \qquad \text{foton}, \\ \widehat{\varepsilon}_{1\overrightarrow{k}} = (-\sin\varphi,\ \cos\varphi,\ 0), \\ \widehat{\varepsilon}_{2\overrightarrow{k}} = (\cos\theta\cos\varphi,\ \cos\theta\sin\varphi,\ -\sin\theta), \\ \widehat{\varepsilon}_{1\overrightarrow{k}}\times\widehat{\varepsilon}_{2\overrightarrow{k}} = \widehat{k}, \quad \text{y} \quad \widehat{\varepsilon}_{1\overrightarrow{k}}\cdot\widehat{k} = \widehat{\varepsilon}_{2\overrightarrow{k}}\cdot\widehat{k} = 0, \end{cases} , \tag{23}$$

luego

$$\sum_\lambda\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\widehat{k}_i\right|^2 = \sin^2\theta, \tag{24}$$

Con lo que resulta

$$\frac{d\,\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^2\omega_{if}\ k_i}{c^3m}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}|\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{k}_i)|^2\sin^2\theta. \tag{25}$$

De aqui salen interesantes conclusiones.

i) Los fotones salen en su mayoria en forma perpendicular a la direccion de incidencia del electron ($\sin^2\theta$). Si no hubiesemos considerado la proximacion dipolar sale ligeramente despazado hacia adelante (retardacion).

ii) El espectro fotonico en energia esta modulado por $|\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{k}_i)|^2$, con lo cual describe la distribucion de velocidades del estado ψ_f.

Usando el hecho que $\int d\Omega \sin^2\theta = 8\pi/3$ resulta que

$$\sigma = \frac{2^5\pi^3\omega_{if}k_i}{3c^3m}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}|\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{k}_i)|^2, \tag{26}$$

Ahora pasamos A unidades atomicas, $\hbar = m = e^2/4\pi\varepsilon_0 = 1$ y la expresion se simplifica a

$$\sigma = \frac{2^5\pi^3\omega_{if}v}{3c^3}|\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{v})|^2, \tag{27}$$

donde usamos el hecho que en unidades atomicas $k_i = mv/\hbar = v =$ velocidad del electron incidente en unidades atomicas. Notar que σ tambien va a depender de la distribucion de velocidades, no importa el angulo de salida del foton.

En el caso particular de ser capturado en el estado fundamental ψ_{1s},

$$\widetilde{\psi}_f(\overrightarrow{k}_i) = \widetilde{\psi}_{1s}(\overrightarrow{k}_i) = \frac{2^{3/2}}{\pi}\frac{Z^{5/2}}{(Z^2+v^2)^2}, \text{ y} \tag{28}$$

$$\omega_{if} = \varepsilon_i - \varepsilon_f = \frac{v^2}{2} - \left(-\frac{Z^2}{2}\right) = \frac{(v^2+Z^2)}{2}, \tag{29}$$

donde hemos generalizado a atomos hidrogenoides con carga nuclear Z. Reemplazando queda

$$\sigma = \frac{2^5\pi^3}{3c^3}\frac{(v^2+Z^2)}{2}\frac{2^3}{\pi^2}\frac{Z^5}{(Z^2+v^2)^4}, \tag{30}$$

$$= \frac{2^7\pi}{3c^3}\frac{vZ^5}{(Z^2+v^2)^3}, \tag{31}$$

y en el limite de alta velocidad de incidencia se reduce a

$$\lim_{v\to\infty}\sigma = \frac{2^7\pi}{3c^3}\frac{Z^5}{v^5}, \tag{32}$$

que es una expresion muy conocida. Sera de alguna manera la inversa del efecto fotoelectrico. A pequenas velocidades σ crece linealmente con v y tiene un maximo alrededor de $Z = v$ (se obtiene haciendo $d\sigma/dv = 0$). O sea es maxima cuando la velocidad del electron incidente es del orden de la velocidad media del estado ligado final y luego caera, para estados ns, como v^{-5}.

III. IMPLICANCIAS FISICAS.

Intercambio de carga en gases. La captura radiativa es un mecanismo importante de neutralizacion en plasmas, pero ocurre tambien en colisiones atomicas para los procesos que involucran atomos en lugar de electrones incidentes. En estos casos los electrones lo provee los atomos incidentes. Tomemos el caso mas sencillo

$$H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+ \tag{33}$$

El electron en el $H(1s)$ del LHS puede aproximarse en buena medida como un paquete cuya forma esta dado por la transformada de Fourier. o sea, escribamos el asi llamado *traveling orbital*

$$\exp(-i\overrightarrow{v}.\overrightarrow{r})\psi_{1s}(r) = \exp(-i\overrightarrow{v}.\overrightarrow{r})\overbrace{\int d\overrightarrow{k}\,\underbrace{\frac{2^{3/2}}{\pi}\frac{1^{5/2}}{(1^2+k^2)^2}}_{\widetilde{\psi}_{1s}(k)}\frac{\exp(i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r})}{(2\pi)^{3/2}}}^{\psi_{1s}(r)} \tag{34}$$

$$\int d\overrightarrow{k'}\,\underbrace{\frac{2^{3/2}}{\pi}\frac{1^{5/2}}{(1^2+(\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{v})^2)^2}}_{\substack{\text{paquete}\\ \text{Lorentziano}}}\qquad\underbrace{\frac{\exp(i\overrightarrow{k'}.\overrightarrow{r})}{(2\pi)^{3/2}}}_{\substack{\text{onda plana}\\ \text{referida al H}^+\text{ del LHS}}} \tag{35}$$

con lo que el problema se reduce a una convolucion Lorentziana del proceso

$$H^+ + e \rightarrow H(1s) + \hbar\omega \tag{36}$$

La unica diferencia es que el espectro fotonico no da una delta de Dirac sino un perfil que tiene que ver precisamente con la transformada de Fourier, o mas precisamente tha distribucion de velocidades.

En colisiones mecanicas, esto es **sin emision de radiacion,** el proceso del tipo (33) se comporta a altas velocidades como v^{-12} (o v^{-11} si se tiene en cuenta el segundo orden perturbativo), pero la captura radiativa da un comportamiento v^{-5}, con lo cual a muy altas velocidades es el mecanismo mas relevante de neutralizacion!. Las energias en la que la captura radiativa es mas importante que la mecanica es del orden de 10 MeV de protones o $v \sim 20a.u.$ En conclusion: los iones muy veloces que vienen de otras estrellas se neutralizan en el camino segun este mecanismo radiativo (el mecanico es depreciable).