Estructura 3

NOTAS DE CLASE 16. Un foton desaparece. Efecto fotoelectrico

J. E. Miraglia

Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas

y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Argentina.

(Dated: November 13, 2013)

Abstract

HOJA DE RUTA. Identificacion del proceso. Regla de oro de Fermi. Densidad de estados finales e integracion.

APROXIMACION DE ONDA PLANA.

IMPLICANCIAS FISICAS. caso particular. Miscelaneas. Opacidad estelar.

falta dibujos , espanol y bibliografia.

PACS numbers:

I. HOJA DE RUTA

Sigamos la misma rutina de siempre.

Identificacion del proceso. Es exactamente inverso a la captura radiativa. Tiene una gran importancia historica ya que fue el tema por el cual le adjudicaron el premio Nobel a Einstein, de cualquier manera actualmente es mas conocido como fotoionizacion y tiene una gran aplicacion en fisica atomica y materia condensada. Esquematicamente se puede representar asi

$$\begin{aligned} \hbar\omega + \text{Blanco} &\rightarrow \text{Blanco}^{+} + e \qquad (1) \\ \text{Blanco} &= \text{Atomos, Moleculas,..Iones,} \end{aligned}$$

A veces se considera efecto fotoelectrico tambien a la excitacion esto es cuando finaliza en Blanco* en lugar de Blanco$^+$, que seria fotoexcitacion. El formalismo es totalmente equivalente Lo que determina la energia final del electron emitido es, como siempre, el balance de la energia

$$\begin{aligned} E_i &= \hbar\omega + \varepsilon_i = E_f = \varepsilon_f \qquad (2) \\ \hbar\omega + \varepsilon_i &= \frac{(\hbar k_f)^2}{2m_e} \text{ (si ionizacion, con } \psi^-_{\overrightarrow{k}_f}) \qquad (3) \\ \hbar\omega + \varepsilon_i &= \varepsilon_f \qquad \text{(si excitacion, con } \psi_f) \qquad (4) \end{aligned}$$

Por primera vez aparece el termino que **destruye un foton** del medio que da lugar a la emision de un electron con $\overrightarrow{k}_f$.

$$\begin{aligned} \langle (N-1)_{\lambda\overrightarrow{k}}, \psi^-_{\overrightarrow{k}_f} | H^-_{\lambda\overrightarrow{k}} | N_{\lambda\overrightarrow{k}}, \psi_i \rangle &= \frac{q}{m} A_N \, \widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}} \cdot \left\langle \overrightarrow{p} e^{+i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}} \right\rangle_{\overrightarrow{k_f}\leftarrow i}, \qquad (5) \\ \left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}} \overrightarrow{p} \right\rangle_{\overrightarrow{k_f}\leftarrow i} &= \langle \psi^-_{\overrightarrow{k}_f} | \widehat{\overrightarrow{p}} e^{+i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}} | \psi_i \rangle. \qquad (6) \end{aligned}$$

Regla de oro de Fermi La probabilidad de transicion ya lo hemos escrito y resulta ser con $q = -e$

$$\frac{d\, W^-_{i\rightarrow f}}{dt\; d\overrightarrow{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[\underbrace{\frac{(\hbar k_f)^2}{2m_e}}_{E_f} - \underbrace{(\varepsilon_i + \hbar\omega)}_{E_i}] \frac{q^2}{m^2} A_N^2 \left| \widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}} \cdot \left\langle \overrightarrow{p} e^{+i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}} \right\rangle_{\overrightarrow{k_f}\leftarrow i} \right|^2 . \qquad (7)$$

En el modelo de electron independiente tenemos

$$\begin{aligned}
\psi_i &= \psi_{nlm}(\overrightarrow{r}), &(8)\\
\psi^-_{\overrightarrow{k}_f}(\overrightarrow{r}) &= \psi_{\overrightarrow{k}_f}(\overrightarrow{r}) D^-(a_f, \overrightarrow{k_f}|\overrightarrow{r}), &(9)\\
\psi_{\overrightarrow{k}}(\overrightarrow{r}) &= \frac{\exp(i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r})}{(2\pi)^{3/2}}, \quad \text{onda plana} &(10)\\
\langle \psi^-_{\overrightarrow{k}} | \psi_{nlm} \rangle &= 0 \qquad \text{ortogonalidad.} &(11)
\end{aligned}$$

Si la interaccion fuese Coulombiana pura, entonces como siempre,

$$\begin{aligned}
D^-(a_f, \overrightarrow{k}|\overrightarrow{r}) &= \exp(a\pi/2)\Gamma(1+ia)_1F_1(-ia;1;-ikr - i\overrightarrow{k}\cdot\overrightarrow{r}), &(12)\\
a_f &= -Zeqm_e/k_f\hbar^2, &(13)
\end{aligned}$$

Los elementos de matriz son analiticos y otra vez mas se llega a las famosas integrales de Nordsieck (ver apendice anteriores).

Densidad de estados finales e integracion. La densidad de estados finales es simplemente el espacio de momentos del electron emitido $d\overrightarrow{k}_f$ (no tengo fotones en el canal final)

$$d\overrightarrow{f} = \underbrace{d\overrightarrow{k_f}}_{\text{electron}}. \tag{14}$$

La integral es simple y resula ser

$$\begin{aligned}
\int d\overrightarrow{k}_f\, \delta\left[\frac{(\hbar k_f)^2}{2m} - \hbar\omega - \varepsilon_i\right] &= \int d\overrightarrow{k}_f\, \delta\left[\frac{\hbar^2}{2m_e}(k_f^2 - k_{f\omega}^2)\right], \quad \text{con} &(15)\\
&= \int d\Omega_f \frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{k_{f\omega}^2}{2k_f} = \int d\Omega_f\, \frac{m}{\hbar^2}k_{f\omega}, \text{ con} &(16)\\
k_{f\omega} &= \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(\hbar\omega + \varepsilon_i)}, &(17)\\
\frac{m}{\hbar^2}k_{f\omega} &= \textbf{densidad de estados} &(18)
\end{aligned}$$

Notese que ahora $k_{f\omega} = k_f(\omega)$. Reemplazando en la probabilidad, tenemos

$$\frac{d\,W^-_{i\to f}}{dt\;d\Omega_f} = \frac{2\pi}{\hbar}\;\frac{m_e}{\hbar^2}k_{f\omega}\;\frac{e^2}{m_e^2}\;A_N^2\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle\overrightarrow{p}\,e^{i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\right\rangle_{\overrightarrow{k}^-_{f\omega}\leftarrow i}\right|^2. \tag{19}$$

Aqui $\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}$ se refiere al versor de polarizacion del foton incidente. Si tuviesemos polarizacion circular debemos reemplazar $\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}$ por $\widehat{\varepsilon}^{\pm}_{\overrightarrow{k}}$.

Seccion eficaz. Ya que tenemos un flujo incidente de fotones podemos calcular la seccion eficaz simplemente dividiendo la probabilidad por el flujo incidente de fotones, o sea

$$\frac{d\ \sigma}{d\Omega_f}=\frac{d\ W^{-}_{i\to f}}{dt\ d\Omega_f}\frac{1}{J_{in}}, \tag{20}$$

donde J_{in} ya fue calculado en los primeros capitulos y resultaba ser

$$J_{in}=\frac{N_{\lambda\overrightarrow{k}}}{\mathcal{V}}c, \qquad \text{tal que } \mathcal{V}\text{=Volumen}. \tag{21}$$

Puede verse que sus unidades son efectivamente 1/(seg. m^2). Reemplazando resulta

$$\begin{aligned}\frac{d\ \sigma}{d\Omega_f} &= \overbrace{\frac{\mathcal{V}}{N_{\lambda\overrightarrow{k}}\ c}}^{1/J_{in}}\frac{2\pi}{\hbar}\ \ \frac{m_e}{\hbar^2}k_{f\omega}\ \frac{e^2}{m_e^2}\overbrace{\frac{\hbar N_{\lambda\overrightarrow{k}}}{2\varepsilon_0\omega_{fi}\mathcal{V}}}^{A_N^2}\left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle\overrightarrow{p}\,e^{i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\right\rangle_{\overrightarrow{k}_{f\omega}\ \leftarrow i}\right|^2,\\ &= \frac{(2\pi)^2}{m_e\hbar^2\omega c}k_{f\omega}\ \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\ \left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle\overrightarrow{p}\,e^{i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\right\rangle_{\overrightarrow{k}_{f\omega}\ \leftarrow i}\right|^2.\end{aligned} \tag{22}$$

Y asi hemos rapidamente encontrado el elemento. Notese que el volumen $\mathcal{V}$ se simplifico por lo que el resultado es independiente de $\mathcal{V}$. (Razon por la cual en algunos textos se escribe directamente $\mathcal{V}=1$ del vamos). Para los calculos en cuestion pasamos del MKS a unidades atomicas $\hbar=m=e^2/4\pi\varepsilon_0=1$ que resulta

$$\frac{d\ \sigma}{d\Omega_f}=\frac{(2\pi)^2}{\omega c}k_{f\omega}\ \ \left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda\overrightarrow{k}}\cdot\left\langle\overrightarrow{p}\,e^{i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\right\rangle_{\overrightarrow{k}^{-}_{f\omega}\ \leftarrow i}\right|^2. \tag{23}$$

II. APPROXIMACION DE ONDA PLANA

Como hemos indicado el elemento de matriz $\left\langle e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}\overrightarrow{p}\right\rangle_{\overrightarrow{k}^{-}_{f}\ \leftarrow i}$ para el caso Culombiano resulta analitico. Para otro caso mas general de potencial central, se requier alguna dosis de algebra. Si adoptamos la aproximacion dipolar $e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{r}}=1$, entonces

$$\langle\overrightarrow{p}\rangle_{\overrightarrow{k}^{-}_{f\omega}\ \leftarrow i}=\int d\overrightarrow{r}\ \psi^{-}_{\overrightarrow{k}_f}(\overrightarrow{r})\ \left(\frac{1}{i}\overrightarrow{\nabla}_{\overrightarrow{r}}\right)\psi_i(\overrightarrow{r}). \tag{24}$$

Si ademas consideramos que la energia del foton incidente es grande de modo tal que podamos simplificar el continuo $\psi^{-}_{\overrightarrow{k}_f}$ por la onda plana $\psi_{\overrightarrow{k}_f}$,(es una aproximacion muy grosera) entonces $\langle\overrightarrow{p}\rangle_{\overrightarrow{k}_f\ \leftarrow i}$ se reduce a

$$\langle\overrightarrow{p}\rangle_{\overrightarrow{k}_{f\omega}\ \leftarrow i}\simeq\overrightarrow{k}_{f\omega}\ \widetilde{\psi}_i(\overrightarrow{k_f}). \tag{25}$$

La seccion ficaz diferencial queda entonces

$$\frac{d\ \sigma}{d\Omega_f} \cong \frac{(2\pi)^2}{\omega c} k_f \left| \widetilde{\psi}_{_i}(\overrightarrow{k}_{f\omega}) \ \right|^2 \ \left| \widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \cdot \overrightarrow{k}_{f\omega} \right|^2 . \tag{26}$$

El primer punto interesante es que, nuevamente, la seccion eficaz diferencial mapea la densidad de velocidades del electron en el estado inicial

Y ahora nos queda definir los versores. Seguimos el mismo criterio de siempre

$$\begin{cases} \widehat{k} = (0,\ 0,\ 1) \qquad \text{direccion de incidencia del foton} \\ \widehat{\varepsilon}_{1\overrightarrow{k}} = (1,\ 0,\ 0), \qquad \text{y} \qquad \widehat{\varepsilon}_{2\overrightarrow{k}} = (0,\ 1,\ 0), \\ \\ \widehat{k}_f = (\sin\theta_f \cos\varphi_f,\ \sin\theta_f \sin\varphi_f,\ \cos\theta_f) = \widehat{k}_{f\omega}, \quad \text{electron} \end{cases}, \tag{27}$$

$$\begin{cases} \widehat{\varepsilon}_{1\overrightarrow{k}} \cdot \ \overrightarrow{k_f} = k_{f\omega} \sin\theta_f \cos\varphi_f, \\ \widehat{\varepsilon}_{2\overrightarrow{k}} \cdot \ \overrightarrow{k_f} = k_{f\omega} \sin\theta_f \sin\varphi_f, \end{cases} \tag{28}$$

Si el estado inicial no esta alineado con algun eje de cuantificacion resulta

$$\frac{d\ \sigma}{d\Omega_f} \cong \frac{(2\pi)^2}{\omega c} k_f^3 \left| \widetilde{\psi}_{_i}(\overrightarrow{k}_{f\omega}) \ \right|^2 \ \sin^2\theta_f \cos^2\varphi_f . \tag{29}$$

Integrando

$$\int d\Omega_f \sin^2\theta_f \cos^2\varphi_f = \frac{4\pi}{3}, \text{ llegamos a} \tag{30}$$

$$\sigma \cong \frac{2^4\pi^3}{3\omega c} k_{f\omega}^3 \left| \widetilde{\psi}_{_i}(\overrightarrow{k}_{f\omega}) \ \right|^2 \tag{31}$$

Y asi nos queda en forma compacta la seccion eficaz para cualquier estado inicial. No necesitamos ninguna expresion particular, dentro -por supuesto- la aproximacion de onda plana.

A. IMPLICANCIAS FISICAS

B. Caso particular

Si consideramos el estado fundamental de un atomo hydrogenico ψ_{1s} tenemos

$$\widetilde{\psi}_{_i}(k_{f\omega}) = \widetilde{\psi_{1s}}(k_{f\omega}) \ = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{Z^{5/2}}{(Z^2 + k_{f\omega}^2)^2}, \tag{32}$$

donde Z es la carga nuclear, luego

$$\sigma \cong \frac{2^7\pi}{3\omega c} \frac{Z^5 k_{f\omega}^3}{(Z^2 + k_{f\omega}^2)^4}. \tag{33}$$

Es mas comun expresar la ecuacion en terminos de ω, $k_{f\omega} = \sqrt{2(\omega + \varepsilon_i)}k_{_{f\omega}} = \sqrt{2(\omega + \varepsilon_i)} = \sqrt{2}\sqrt{\omega - Z^2/2}$,

$$\begin{aligned} \sigma &\cong \frac{2^{17/2}\pi}{3\omega c}\frac{Z^5(\omega - Z^2/2)^{3/2}}{(Z^2 + 2\omega - Z^2)^4}, \\ &\cong \frac{2^4\sqrt{2}\pi}{3c}\frac{Z^5(\omega - Z^2/2)^{3/2}}{\omega^5}. \end{aligned} \tag{34}$$

Notemos que ω tiene que ser mayor que $Z^2/2$, esto implica que el foton debe tener obviamente mas energia que el umbral de ionizacion. Cuando $\omega >> Z^2/2 = |\varepsilon_i|$, que corresponde al rango de aplicabilidad de la onda plana, resulta que

$$\sigma \underset{\omega\to\infty}{\longrightarrow} \frac{2^4\sqrt{2}\pi}{3c}\frac{Z^5}{\omega^{7/2}}. \tag{35}$$

Ecuacion esta muy famosa que se encuentra en cualquier libros de texto.

C. Miscelaneas

i) $\sigma \simeq c^{-1}$ con lo cual es muy importante con respecto a otros procesos radiativos.

ii) $\sigma \to \omega^{-7/2}$ con lo cual, asintoticamente, no puede competir con otros procesos a grandes valores de ω, como bremsstrahlung por ejemplo.

iii) Tiene un maximo alrededor de $\omega \sim Z^2/2 \sim \varepsilon_i$

4i) para estados del tipo ns, puede verse que se escalea con la regla de Oppemheimer

$$\sigma \to \frac{\sigma(n=1)}{n^3} \tag{36}$$

y resulta asi porque la transformada de Fourier a grandes velocidades esta relacionada con el comportamiento al origen de las funciones de onda en el espacio de coordenadas y justamente la regla n^{-3} es el comportamiento al origen.

5i) Notese que la Eq.(29) resulta ser proporcional a $\sin^2\theta$ que es la distribucion angular tipica de la aproximacion dipolar. Si se hubiese considerado el momento del foton (retardacion) hubiesemos llegado a $\widetilde{\psi}_{_i}(\overrightarrow{k_f} + \overrightarrow{k})$ en lugar de $\widetilde{\psi}_{_i}(\overrightarrow{k_f})$, con lo que la distribucion deberia haber sido movida ligeramente hacia adelante.

6i) Veamos un orden de magnitud Supondamos una radiacion del orden de $\omega = 10|\varepsilon_i| = 10Z^2/2 = 5$ para hidrogeno ($Z = 1$) (esto ya pertenece al rango de los rayos X). la seccion eficaz es

$$\sigma = \frac{2^4\sqrt{2}\pi}{3\times 137}\frac{(1/2)^5}{5^{7/2}} \simeq 10^{-4}\text{a.u.}, \quad (37)$$

$$\simeq 2.7\times 10^{-21} cm^2 \simeq 2700 \text{ Barns.} \quad (38)$$

pueden alcanzar los megaBarn para mas bajos ω. Recordemos algunos ordenes de magnitud

$$\begin{cases} \text{Fisica atomica} & \sim 10^{-17}\ \ cm^2 \\ \text{Fisica Nuclear} & \sim 10^{-24}\ cm^2 \\ \text{Fisica de particulas} & \text{menor que } 10^{-27}\ cm^2 \end{cases} \quad (39)$$

7i) Si hubiesemos impactado con fotones de una heliticidad determinada no hubiese cambiado el resultado.

8i) **Opacidad estelar** Opacidad se llama a la atenuacion de la radiacion electromagnetica. La materia estelar se compone, digamos muy aproximadamente, en masa, 10% de Helio muy pocos porcentajes de elementos entre $Z = 6$ a 30. El resto es hidrogeno. La temperatura (superficial de las estrellas varia entre 3000 y 20 000 grados K). Estrellas calientes del orden de los 10000 grados (o sea con energias del orden de $\mathrm{k}_B T \sim 0.86$ eV), con lo cual el hidrogeno esta parcialmente ionizado. En las estrellas frias esta mas o menos neutro. Los electrones emitidos por fotoionizacion son a veces capturados por H^0 para dar H^- (Chandrasekar) que a su vez es fotoionizado por fotones muy pocos energeticos del orden de 0.8 eV ($\sim \mathrm{k}_B T$).