

Estructura de la materia 3

TEMA 14. UN FOTON DESAPARECE.

EL EFECTO FOTOELECTRICO

J. E. Miraglia

*Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas
y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Argentina.*

(Dated: May 31, 20150)

Abstract

HOJA DE RUTA. Identificación del proceso. Regla de oro de Fermi. Densidad de estados
finales e integración.

APROXIMACION DE ONDA PLANA.

IMPLICANCIAS FISICAS. Caso particular. Miscelaneas. Opacidad estelar.

falta dibujos , espanol y bibliografia.

PACS numbers:

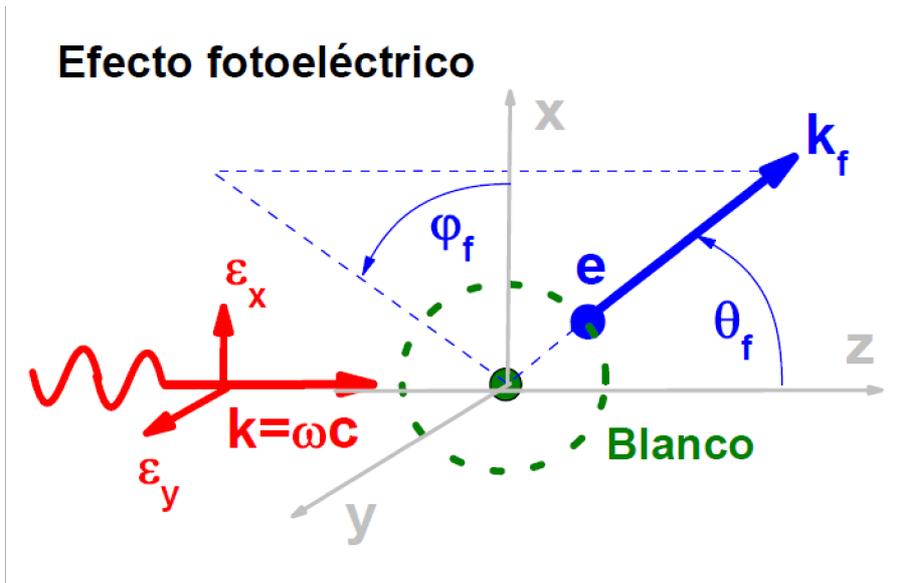


FIG. 1:

I. HOJA DE RUTA

Sigamos la misma rutina de siempre

Identificación del proceso. Es el proceso inverso a la captura radiativa. Tiene una gran importancia histórica ya que fue el tema por el cual le adjudicaron el premio Nobel a Einstein. Actualmente es más conocido como fotoionización y tiene una gran aplicación en física atómica y materia condensada. En general podemos tener dos casos

$$\hbar\omega + \text{Blanco} \rightarrow \text{Blanco}^+ + e, \quad \text{fotoionización} \quad (1)$$

$$\hbar\omega + \text{Blanco} \rightarrow \text{Blanco}^*, \quad \text{fotoexcitación} \quad (2)$$

Blanco = Átomos, Moléculas,..Iones,

la excitación esto es cuando finaliza en Blanco* en lugar de Blanco+, que sería fotoexcitación. Fotoionización es simplemente el caso en que el electrón termina en el estado continuo del blanco. El formalismo es totalmente equivalente. Lo que determina la energía final del

electrón emitido es, como siempre, el balance de la energía

$$E_i = \hbar\omega + \varepsilon_i = E_f = \varepsilon_f \quad (3)$$

$$\hbar\omega + \varepsilon_i = \frac{(\hbar k_f)^2}{2m_e} \quad (\text{si ionización, con } \psi_{\vec{k}_f}^-) \quad (4)$$

$$\hbar\omega + \varepsilon_i = \varepsilon_f \quad (\text{si excitación, siendo } \varepsilon_f \text{ la autoenergía de } \psi_f) \quad (5)$$

$$\text{debería ser exacto)} \quad (6)$$

Nos concentraremos en fotoionización. Por primera vez aparece el término que **destruye un fotón** del medio que da lugar a la emisión de un electrón con \vec{k}_f . El término de interés es

$$\langle (N-1)_{\lambda\vec{k}}, \psi_{\vec{k}_f}^- | H_{\lambda\vec{k}}^- | N_{\lambda\vec{k}}, \psi_i \rangle = \frac{q}{m} A_N \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \langle \widehat{\vec{p}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} \rangle_{\vec{k}_f \leftarrow i}, \quad (7)$$

$$\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \widehat{\vec{p}} \rangle_{\vec{k}_f \leftarrow i} = \langle \psi_{\vec{k}_f}^- | \widehat{\vec{p}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi_i \rangle. \quad (8)$$

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

$$\frac{d W_{\vec{k}_f \leftarrow i}^-}{dt d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta \left[\underbrace{\frac{(\hbar k_f)^2}{2m_e}}_{E_f} - \underbrace{(\varepsilon_i + \hbar\omega)}_{E_i} \right] \frac{q^2}{m^2} A_N^2 \left| \hat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \langle \widehat{\vec{p}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} \rangle_{\vec{k}_f \leftarrow i} \right|^2. \quad (9)$$

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

$$d\vec{f} = \underbrace{d\vec{k}_f}_{\text{electrón}}. \quad (10)$$

La integral de la delta de Dirac es simple y resulta ser

$$\int d\vec{k}_f \delta \left[\frac{(\hbar k_f)^2}{2m} - \hbar\omega - \varepsilon_i \right] = \int d\vec{k}_f \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(k_f^2 - \frac{2m_e}{\hbar^2} (\hbar\omega + \varepsilon_i) \right) \right], \quad (11)$$

$$= \int d\Omega_f \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{k_\omega^2}{2k_\omega} = \int d\Omega_f \rho(\omega), \quad (12)$$

$$\rho(\omega) = \frac{m_e}{\hbar^2} k_\omega(\omega) \quad \text{densidad de estados} \quad (13)$$

$$k_\omega = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} (\hbar\omega + \varepsilon_i)}, \quad (14)$$

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

$$\frac{d W_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^-}{dt d\Omega_f} = \frac{2\pi}{\hbar} \overbrace{\frac{m_e}{\hbar^2} k_\omega}^{\rho(\omega)} \frac{e^2}{m_e^2} A_N^2 \left| \hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}} \cdot \left\langle \widehat{\vec{p}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right\rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^- \right|^2. \quad (15)$$

Aqui $\hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}$ se refiere al versor de polarización del fotón incidente. Si tuviésemos polarización circular debemos reemplazar $\hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}$ por $\hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}^\pm$. Notese que la probabilidad es proporcional a la intensidad del flujo fotónico A_N^2 .

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

$$\frac{d \sigma_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^-}{d\Omega_f} = \frac{d W_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^-}{dt d\Omega_f} \frac{1}{J_{in}}, \quad (16)$$

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

$$J_{in} = \frac{N_{\lambda \vec{k}}}{\mathcal{V}} c, \quad \text{tal que } \mathcal{V} = \text{Volumen}. \quad (17)$$

Puede verse que sus unidades son efectivamente $1/(\text{seg} \cdot \text{m}^2)$. Reemplazando resulta

$$\begin{aligned} \frac{d \sigma_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^-}{d\Omega_f} &= \frac{\overbrace{1/J_{in}}^{\mathcal{V}}}{N_{\lambda \vec{k}}} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{m_e}{\hbar^2} k_\omega \frac{e^2}{m_e^2} \overbrace{\frac{\hbar N_{\lambda \vec{k}}}{2\varepsilon_0 \omega_f \mathcal{V}}}_{A_N^2} \left| \hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}} \cdot \left\langle \widehat{\vec{p}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right\rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^- \right|^2, \\ &= \frac{(2\pi)^2}{m_e \hbar^2 \omega c} k_\omega \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0} \left| \hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}} \cdot \left\langle \widehat{\vec{p}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right\rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^- \right|^2. \end{aligned} \quad (18)$$

Y así hemos rápidamente encontrado el elemento de interés. Notese que el volumen \mathcal{V} se simplificó por lo que el resultado es independiente de \mathcal{V} . Para los cálculos en cuestión pasamos del MKS a unidades atómicas $\hbar = m = e^2/4\pi\varepsilon_0 = 1$ y resulta

$$\frac{d \sigma_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^-}{d\Omega_f} = \frac{(2\pi)^2}{\omega c} k_\omega \left| \hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}} \cdot \left\langle \widehat{\vec{p}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right\rangle_{\vec{k}_{f\omega} \leftarrow i}^- \right|^2. \quad (19)$$

Reducción del elemento de matriz

En el modelo de electrón independiente tenemos, para un caso hidrogenico,

$$\left\langle \widehat{\vec{p}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right\rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}^- = \int d\vec{r} \psi_{\vec{k}_\omega}^-(\vec{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi_i(\vec{r})$$

$$\left\{ \begin{array}{ll}
\psi_i = \psi_{nlm}(\vec{r}), & \text{estado ligado inicial,} \\
\psi_{\vec{k}_\omega}^-(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}_\omega}^-(\vec{r}) D^-(a_f, \vec{k}_\omega | \vec{r}), & \text{estado continuo final} \\
\psi_{\vec{k}_\omega}^-(\vec{r}) = \frac{\exp(i \vec{k}_\omega \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}, & \text{onda plana} \\
D^-(a, \vec{k}_\omega | \vec{r}) = \exp(a\pi/2) \Gamma(1+ia) {}_1F_1(-ia; 1; -ik_\omega r - i \vec{k}_\omega \cdot \vec{r}), & \\
a_f = \frac{Ze^2 m}{k_\omega \hbar^2}, & \text{parámetro de Sommerfeld,} \\
\langle \psi_{\vec{k}_\omega}^- | \psi_{nlm} \rangle = 0 & \text{ortogonalidad.}
\end{array} \right. \quad (20)$$

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

II. APPROXIMACION DE ONDA PLANA

Como hemos indicado el elemento de matriz $\langle \widehat{p} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}$ para el caso Culombiano resulta analítico. Para otro caso mas general de potencial central, se requier alguna dosis de álgebra.

Primero. Si adoptamos la aproximación dipolar $e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} = 1$, entonces

$$\langle \widehat{p} \rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i} = \int d\vec{r} \psi_{\vec{k}_\omega}^-(\vec{r}) \left(\frac{1}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right) \psi_i(\vec{r}). \quad (21)$$

Segundo. Consideramos que la energía del fotón incidente es grande de modo tal que podamos simplificar el continuo $\psi_{\vec{k}_\omega}^-$ por la onda plana $\psi_{\vec{k}_\omega}^-$, (es una aproximación muy grosera, como se indicó, ya que $\langle \psi_{\vec{k}_\omega}^- | \psi_{nlm} \rangle \neq 0$) entonces $\langle \widehat{p} \rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}$ se reduce a

$$\langle \widehat{p} \rangle_{\vec{k}_\omega \leftarrow i} \simeq \int d\vec{r} \psi_{\vec{k}_\omega}^-(\vec{r}) \left(\frac{1}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \right) \psi_i(\vec{r}) \quad (22)$$

$$= \vec{k}_\omega \tilde{\psi}_i(\vec{k}_\omega). \quad (23)$$

La sección eficaz multiplediferencial queda entonces

$$\frac{d \sigma_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}}{d\Omega_f} \simeq \frac{(2\pi)^2}{\omega c} k_f \left| \tilde{\psi}_i(\vec{k}_\omega) \right|^2 \left| \hat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}} \cdot \vec{k}_\omega \right|^2. \quad (24)$$

El primer punto interesante es que, la sección eficaz diferencial mapea la densidad de velocidades del electrón en el estado inicial. La recombinación radiativa mapeaba el estado final.

Y ahora nos queda definir los versores. Seguimos el mismo criterio de siempre (ver dibujo)

$$\begin{cases} \hat{k} = (0, 0, 1) & \text{dirección de incidencia del fotón,} \\ \hat{\varepsilon}_{1\vec{k}} = \hat{\varepsilon}_x = (1, 0, 0), & \text{y } \hat{\varepsilon}_{2\vec{k}} = \hat{\varepsilon}_y = (0, 1, 0), \\ \hat{k}_\omega = (\sin \theta_f \cos \varphi_f, \sin \theta_f \sin \varphi_f, \cos \theta_f), & \text{electrón,} \end{cases} \quad (25)$$

Si el estado inicial no esta alineado con algún eje de cuantificación específico y el foton tiene polarización lineal a lo largo de $\hat{\varepsilon}_x$ resulta

$$\frac{d \sigma_{\vec{k}_\omega \leftarrow i}}{d\Omega_f} \cong \frac{(2\pi)^2}{\omega c} k_f^3 \left| \tilde{\psi}_i(\vec{k}_\omega) \right|^2 \sin^2 \theta_f \cos^2 \varphi_f, \quad (26)$$

y finalmente integrando

$$\int d\Omega_f \sin^2 \theta_f \cos^2 \varphi_f = \frac{4\pi}{3}, \quad (27)$$

llegamos a la seccion eficaz total

$$\sigma_{\vec{k}_\omega \leftarrow i} \cong \frac{2^4 \pi^3}{3\omega c} k_\omega^3 \left| \tilde{\psi}_i(\vec{k}_\omega) \right|^2. \quad (28)$$

Y asi nos queda en forma compacta la sección eficaz muy simple para cualquier estado inicial, dentro -por supuesto- de la aproximación de onda plana.

A. IMPLICANCIAS FISICAS

B. Caso particular

Si consideramos el estado fundamental de un átomo hidrogénico ψ_{1s} , $\varepsilon_{1s} = -Z^2/2$ tenemos

$$\tilde{\psi}_i(k_\omega) = \tilde{\psi}_{1s}(k_\omega) = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{Z^{5/2}}{(Z^2 + k_\omega^2)^2}, \quad (29)$$

donde Z es la carga nuclear, luego

$$\sigma_{k_\omega \leftarrow 1s} \cong \frac{2^7 \pi}{3\omega c} \frac{Z^5 k_\omega^3}{(Z^2 + k_\omega^2)^4}. \quad (30)$$

Es mas común expresar la ecuación en términos de ω directamente, $k_\omega = \sqrt{2}\sqrt{\omega - Z^2/2}$,

$$\begin{aligned} \sigma_\omega &\cong \frac{2^{17/2} \pi}{3\omega c} \frac{Z^5 (\omega - Z^2/2)^{3/2}}{(Z^2 + 2\omega - Z^2)^4}, \\ &\cong \frac{2^4 \sqrt{2} \pi}{3c} \frac{Z^5 (\omega - Z^2/2)^{3/2}}{\omega^5}. \end{aligned} \quad (31)$$

Notemos que ω tiene que ser mayor que $Z^2/2$, esto implica que el fotón debe tener obviamente mas energía que el umbral de ionización. De lo contrario no habrá fotoionización. Cuando $\omega \gg Z^2/2 = |\varepsilon_i|$, que corresponde al rango de aplicabilidad de la onda plana, resulta que

$$\sigma_\omega \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} \frac{2^4 \sqrt{2} \pi}{3c} \frac{Z^5}{\omega^{7/2}}. \quad (32)$$

Ecuación muy famosa que se encuentra en cualquier libro de texto.

C. Miscelaneas

- i) $\sigma_\omega \simeq c^{-1}$, con lo cual es muy importante con respecto a otros procesos radiativos.
- ii) $\sigma_\omega \rightarrow \omega^{-7/2}$, asintoticamente, no puede competir con otros procesos a grandes valores de ω , como bremsstrahlung por ejemplo.
- iii) Tiene un máximo alrededor de $\omega \sim Z^2/2 \sim \varepsilon_i$
- 4i) Para estados del tipo ns , puede verse que se escala con la regla de Oppenheimer

$$\sigma_\omega \rightarrow \frac{\sigma(n=1)}{n^3} \quad (33)$$

y resulta así 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.(26) resulta ser proporcional a $\sin^2 \theta$ que es la distribución angular típica de la aproximación dipolar. Si se hubiese considerado el momento del fotón (retardación) hubiesemos llegado a $\tilde{\psi}_i(\vec{k}_f + \vec{k})$ en lugar de $\tilde{\psi}_i(\vec{k}_f)$, con lo que la distribución debería haber sido desplazada ligeramente hacia adelante.

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

$$\sigma_\omega = \frac{2^4 \sqrt{2} \pi}{3 \times 137} \frac{(1/2)^5}{5^{7/2}} \simeq 10^{-4} \text{a.u.}, \quad (34)$$

$$\simeq 2.7 \times 10^{-21} \text{cm}^2 \simeq 2700 \text{ Barns}. \quad (35)$$

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

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Física Atómica} & \sim 10^{-17} \text{ cm}^2 \\ \text{Física Nuclear} & \sim 10^{-24} \text{ cm}^2 \\ \text{Física de partículas} & \text{menor que } 10^{-27} \text{ cm}^2 \end{array} \right. \quad (36)$$

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

8i) **Opacidad estelar** Opacidad se llama a la atenuación de la radiación electromagnética. 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 hidrógeno. 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 energías del orden de $k_B T \sim 0.86$ eV), con lo cual el hidrógeno esta parcialmente ionizado. En las estrellas frías está mas o menos neutro. Los electrones emitidos por fotoionización son a veces capturados por H^0 para dar H^- (Chandrasekar) que a su vez es fotoionizado por fotones muy pocos energéticos del orden de 0.8 eV ($\sim k_B T$).