

Estructura 3

NOTA 15. Un fotón aparece. Recombinación radiativa

J. E. Miraglia

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

(Dated: March 4, 2016)

Abstract

HOJA DE RUTA. Identificación del proceso. Regla de oro de Fermi. Densidad de estados finales e integración. Reducción del elemento de matrix. Sección eficaz.

CALCULO. APPROXIMACION DE ONDA PLANA

IMPLICANCIAS FISICAS

falta dibujos , espanol y bibliografia.

PACS numbers:

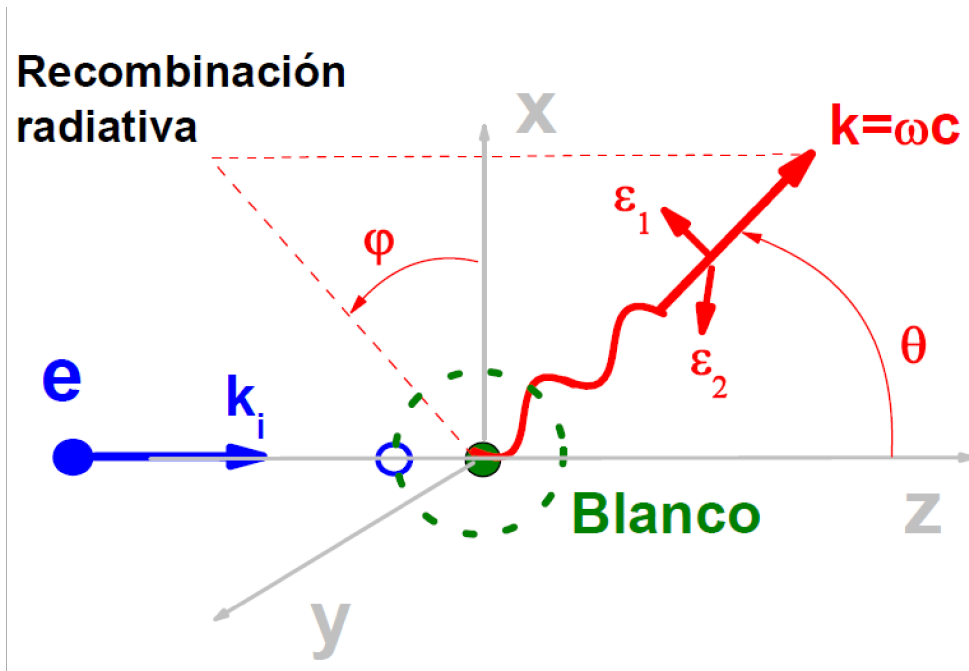


FIG. 1:

I. HOJA DE RUTA

Seguiremos el esquema de la hoja de ruta.

Identificación del proceso

Veremos la emisión de un fotón caracterizado por un *wave vector* \vec{k} , y una polarización (lineal) $\hat{\epsilon}_{\lambda\vec{k}}$. En su caso mas general el campo fotónico pasa de $N_{\lambda\vec{k}} \rightarrow N_{\lambda\vec{k}} + 1$, mientras que los otros nodos $N_{\lambda'\vec{k}'}$ quedan inalterados (si los hubiera). La captura o recombinación radiativa considera que el estado inicial está en el **continuo**, es decir: incide un electrón libre que finalmente queda atrapado en un estado ligado del blanco

$$e(\psi_{\vec{k}_i}^{\pm}) + \text{Blanco}^{+q} \rightarrow \text{Blanco}^{q-1}(\psi_f) + \hbar\omega. \quad (1)$$

Si el blanco fuera un núcleo **desnudo (sin electrones)**, este proceso es posible **si y solo si** hay emisión de radiación. Sin emisión de un foton sería imposible ya que no conserva la energía. No hay que confundir: para blancos **multielectrónicos** la recombinación es posible sin la emisión de radiación, por ejemplo

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

a este proceso *radiationless* se lo llama recombinación dielectrónica y lo identificamos como

el proceso inverso a Auger. Estos procesos compiten dependiendo del rango energético del electrón incidente y el blanco en cuestión. La energía del fotón emitido $\hbar\omega$, queda determinada por la conservación de la energía

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

Como las energías finales (ε_f) e iniciales (ε_i) están perfectamente determinadas, la energía emitida debe ser única y por lo tanto el espectro es de línea siempre y cuando el haz de electrones incidentes sea monoenergético. Normalmente no lo es, y por lo tanto debe hacerse una promedia con una distribución de velocidades dada por el experimento en cuestión. El elemento de matriz interviniente es

$$\begin{aligned} \langle (N_{\lambda\vec{k}} + 1) \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | N_{\lambda\vec{k}} \psi_{\vec{k}_i}^+ \rangle &= \langle (N_{\lambda\vec{k}} + 1)_{\lambda\vec{k}}, \psi_f | \left[\frac{q}{m} A_1 \widehat{\vec{p}} \widehat{a}_{\lambda\vec{k}}^\dagger \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} + i\delta_\omega \right] | N_{\lambda\vec{k}}, \psi_{\vec{k}_i}^+ \rangle \\ &= \frac{q}{m} A_1 \underbrace{\sqrt{N_{\lambda\vec{k}} + 1}}_{A_{N+1}} \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}} \cdot \langle \psi_f | \widehat{\vec{p}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} + i\delta_\omega | \psi_{\vec{k}_i}^+ \rangle \end{aligned} \quad (5)$$

$$= \frac{q}{m} A_{N+1} \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \cdot \left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{f \leftarrow \vec{k}_i} \quad (6)$$

La diferencia con la emisión espontánea de línea es que el estado inicial aquí es el continuo.

La regla de oro de Fermi. Siguiendo con la misma notación (con $q = -e$) y suponiendo que no hay fotones en el medio, esto es en el vacío, la regla de oro de Fermi nos dice ($N_{\lambda\vec{k}} = 0$)

$$\frac{d W_{i \rightarrow f}^+}{dt d\vec{f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) \sum_{\lambda} \left| \langle 1_{\lambda\vec{k}} \psi_f | H_{\lambda\vec{k}}^+ | 0_{\lambda\vec{k}} \psi_{\vec{k}_i}^+ \rangle \right|^2, \quad (7)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \delta[(\varepsilon_f + \hbar\omega) - \varepsilon_i] \frac{e^2}{m^2} A_1^2 \sum_{\lambda} \left| \widehat{\varepsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \cdot \left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{f \leftarrow \vec{k}_i} \right|^2. \quad (8)$$

Densidad de estados finales e integración. Recordemos que el diferencial de estados finales del fotón $d\vec{f}$ en la caja de volumen \mathcal{V}

$$d\vec{f} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} d\vec{k} = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \overbrace{\frac{d\Omega}{c^3} d\omega \omega^2}^{d\vec{k}} \quad (9)$$

donde con \vec{k} queremos indicar todo el espacio de posibilidades y $k = \omega/c$ (no confundir con \vec{k}_i que corresponde al número de onda del electrón). La función delta de Dirac nos

restringirá a un solo valor que es el que conserva la energía y descartará los otros:

$$\int d\vec{k} \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \overbrace{\delta[(\varepsilon_i - \varepsilon_f)/\hbar - \omega]}^{\delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f - \hbar\omega)} = \int d\Omega \rho(\omega_{if}), \quad (10)$$

$$\rho(\omega_{if}) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{\omega_{if}^2}{\hbar c^3} = \text{densidad de estados, con} \quad (11)$$

$$\omega_{if} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar}. \quad (12)$$

O sea que el fotón sale con una energía $\hbar\omega_{if}$ determinada por la Eq.(12). Reemplazando Eq.(10) en (8) nos queda

$$\begin{aligned} \frac{d W_{i \rightarrow f}^+}{dt d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{m^2} \frac{\overbrace{\mathcal{V} \omega_{if}^2}^{\rho(\omega_{if})}}{(2\pi)^3 \hbar c^3} \frac{\overbrace{\hbar}^{A_1^2}}{2\varepsilon_0 \omega_{if} \mathcal{V}} \sum_{\lambda} \left| \widehat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}^* \cdot \left\langle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{f \leftarrow \vec{k}_i} \right|^2, \\ &= \frac{\omega_{if}}{\hbar c^3} \frac{1}{m^2} \frac{1}{(2\pi)} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{\lambda} \left| \widehat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}^* \cdot \left\langle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{f \leftarrow \vec{k}_i} \right|^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Notesé que el volumen \mathcal{V} se simplifica en forma natural, por lo que el resultado es independiente de \mathcal{V} (por eso, a veces, se pone $\mathcal{V} = 1$ desde el comienzo).

Sección eficaz. En este proceso **sí** podemos definir una sección eficaz ya que hay flujo de partículas entrantes. Para calcular la sección eficaz debemos hacer

$$\frac{d \sigma_{f \leftarrow \vec{k}_i}}{d\Omega} = \frac{d W_{f \leftarrow \vec{k}_i}^+}{dt d\Omega} \frac{1}{J_{in}} \quad (14)$$

donde J_{in} es el flujo incidente (el electrónico en nuestro caso) que es por definición

$$\begin{aligned} \vec{J}_{in} &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi_{\vec{k}_i}^{+*} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_{\vec{k}_i}^+ - \psi_{\vec{k}_i}^+ \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_{\vec{k}_i}^{+*} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi_{\vec{k}_i}^{*} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_{\vec{k}_i} - \psi_{\vec{k}_i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi_{\vec{k}_i}^* \right) \\ &= \frac{\hbar \vec{k}_i}{(2\pi)^3 m}. \end{aligned} \quad (15)$$

que vimos anteriormente. Resulta luego

$$\begin{aligned} \frac{d \sigma_{f \leftarrow \vec{k}_i}}{d\Omega} &= \underbrace{\frac{(2\pi)^3 m \omega_{if}}{\hbar k_i}}_{1/J_{in}} \frac{1}{\hbar c^3} \frac{1}{m^2} \frac{1}{(2\pi)} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{\lambda} \left| \widehat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}^* \cdot \left\langle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{f_i} \right|^2, \\ \frac{d \sigma_{f \leftarrow \vec{k}_i}}{d\Omega} &= \frac{(2\pi)^2 \omega_{if}}{\hbar^2 c^3 m k_i} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{\lambda} \left| \widehat{\varepsilon}_{\lambda \vec{k}}^* \cdot \left\langle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{f \leftarrow \vec{k}_i} \right|^2, \end{aligned} \quad (16)$$

De aquí en más debería continuarse sin problemas: el cálculo es sencillo.

Reducción del elemento de matriz. Concentremos en un núcleo Coulombiano desnudo suponiendo que el electrón cae a un estado nlm cuya energía es la hidrogenoide. En particular para $Z = 1$, se reduce al caso hidrogénico

$$e + H^+ \rightarrow H(nl) + \hbar\omega. \quad (17)$$

el elemento será

$$\left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{nlm \leftarrow \vec{k}_i^+} = \int d\vec{r} \psi_{nlm}^*(r) \left[e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \right] \psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}). \quad (18)$$

y los estados iniciales y finales son

$$\left\{ \begin{array}{ll} \psi_f = \psi_{nlm}, \quad \rightarrow \quad \varepsilon_f = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{me^4}{\hbar^2}, & \text{estado ligado} \\ \psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) D^+(a, \vec{k}_i | \vec{r}), & \text{estado continuo} \\ \psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}, & \text{onda plana, si Coulombiano entonces} \\ D^+(a, \vec{k}_i | \vec{r}) = \exp(a\pi/2) \Gamma(1 - ia) {}_1F_1(+ia; 1; +ik_i r - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}), \\ a = Ze^2 m / k \hbar^2, & \text{parámetro de Sommerfeld,} \\ \left\langle \psi_{nlm} | \psi_{\vec{k}_i}^+ \right\rangle = 0, & \text{ortogonalidad,} \end{array} \right.$$

El elemento de matriz (18) involucra integrales de Nordsieck (ver apéndice de notas anteriores)

II. CALCULO. APROXIMACION DE ONDA PLANA.

Hagamos dos aproximaciones para tener una idea de su comportamiento.

Primero, consideremos la aproximación dipolar $\left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{fi} \simeq \left\langle \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{fi}$.

Segundo, consideremos que el electrón impacta a grandes velocidades, $a \propto 1/k_i \rightarrow 0$ cuando $k_i \rightarrow \infty$, de manera que puede despreciarse el factor $D^+(a, \vec{k}_i | \vec{r})$ y así el estado inicial se reduce a la onda plana $\psi_{\vec{k}_i}(\vec{r})$. Una aproximación grosera, ya que perdemos la ortogonalidad, o sea $\left\langle \psi_{nlm} | \psi_{\vec{k}_i} \right\rangle \neq 0$. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \left\langle \widehat{\vec{p}} \right\rangle_{fi} &\simeq \int d\vec{r} \psi_f^*(r) \overbrace{\left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)}^{\widehat{\vec{p}}} \overbrace{\frac{\exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}}^{\text{onda plana}}, \\ &= \hbar \vec{k}_i \int d\vec{r} \psi_f^*(r) \frac{\exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} = \hbar \vec{k}_i \tilde{\psi}_f^*(\vec{k}_i), \end{aligned} \quad (19)$$

donde $\tilde{\psi}_f(\vec{k}_i)$ es la transformada de Fourier del estado ligado final. Reemplazando la Eq.(19) en (16) tenemos la sección eficaz multidiferencial de salida del fotón

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{f\leftarrow\vec{k}_i}}{d\Omega} &= \frac{(2\pi)^2\omega_{if}}{\hbar^2c^3m} \frac{e^2}{k_i4\pi\epsilon_0} \hbar^2k_i^2 |\tilde{\psi}_f(\vec{k}_i)|^2 \sum_{\lambda} \left| \hat{\epsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \cdot \hat{k}_i \right|^2, \\ &= \frac{(2\pi)^2\omega_{if}}{c^3m} \frac{k_i}{4\pi\epsilon_0} |\tilde{\psi}_f(\vec{k}_i)|^2 \sum_{\lambda} \left| \hat{\epsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \cdot \hat{k}_i \right|^2. \end{aligned} \quad (20)$$

Introduciendo las siguientes coordenadas (ver dibujo)

$$\left\{ \begin{array}{ll} \hat{k}_i = (0, 0, 1), & \text{electrón incidente,} \\ \hat{k} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta), & \text{fotón saliente,} \\ \hat{\epsilon}_{1\vec{k}} = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0), & \text{versor de polarización,} \\ \hat{\epsilon}_{2\vec{k}} = (\cos\theta \cos\varphi, \cos\theta \sin\varphi, -\sin\theta), & \text{versor de polarización} \\ \hat{\epsilon}_{1\vec{k}} \times \hat{\epsilon}_{2\vec{k}} = \hat{k}, \text{ y } \hat{\epsilon}_{1\vec{k}} \cdot \hat{k} = \hat{\epsilon}_{2\vec{k}} \cdot \hat{k} = 0, & \end{array} \right. \quad (21)$$

y sumando sobre los dos posibles versores de polarización, se ve facilmente que

$$\sum_{\lambda} \left| \hat{\epsilon}_{\lambda\vec{k}}^* \cdot \hat{k}_i \right|^2 = \sin^2\theta, \quad (22)$$

resultando

$$\frac{d\sigma_{f\leftarrow\vec{k}_i}}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^2\omega_{if}}{c^3m} \frac{k_i}{4\pi\epsilon_0} |\tilde{\psi}_f(\vec{k}_i)|^2 \sin^2\theta. \quad (23)$$

De aquí salen interesantes conclusiones.

i) Los fotones salen mayormente en forma perpendicular a la dirección de incidencia del electrón ($\sin^2\theta$), que es el sello de la aproximación dipolar. Si no hubiesemos considerado la aproximación dipolar sale ligeramente desparado hacia adelante (retardación).

ii) El espectro fotónico en energía esta modulado por $|\tilde{\psi}_f(\vec{k}_i)|^2$, con lo cual describe la distribución de velocidades del estado ψ_f .

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

$$\sigma_{f\leftarrow\vec{k}_i} = \frac{2^5\pi^3\omega_{if}k_i}{3c^3m} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} |\tilde{\psi}_f(\vec{k}_i)|^2, \quad (24)$$

Ahora pasamos A unidades atómicas, $\hbar = m = e^2/4\pi\epsilon_0 = 1$ y la expresión se simplifica a

$$\sigma_{f\leftarrow\vec{v}} = \frac{2^5\pi^3\omega_{if}v}{3c^3} |\tilde{\psi}_f(\vec{v})|^2, \quad (25)$$

donde usamos el hecho que en unidades atómicas $k_i = mv/\hbar = v =$ velocidad del electrón incidente en unidades atómicas. Notar que $\sigma_{f\leftarrow\vec{v}}$ también va a depender de la distribución de velocidades $|\tilde{\psi}_f(\vec{v})|^2$, no importa el ángulo de salida del fotón.

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

$$\tilde{\psi}_f(\vec{k}_i) = \tilde{\psi}_{1s}(\vec{k}_i) = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{Z^{5/2}}{(Z^2 + v^2)^2}, \quad y \quad (26)$$

$$\omega_{if} = \varepsilon_i - \varepsilon_f = \frac{v^2}{2} - \left(-\frac{Z^2}{2}\right) = \frac{(v^2 + Z^2)}{2}, \quad (27)$$

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

$$\sigma_{1s \leftarrow v} = \frac{2^5 \pi^3 (v^2 + Z^2)}{3c^3} \frac{2^3}{2} \frac{Z^5}{\pi^2 (Z^2 + v^2)^4}, \quad (28)$$

$$= \frac{2^7 \pi}{3c^3} \frac{v Z^5}{(Z^2 + v^2)^3}, \quad (29)$$

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

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \sigma_{1s \leftarrow v} = \frac{2^7 \pi}{3c^3} \frac{Z^5}{v^5}, \quad (30)$$

que es una expresión muy popular. Es de alguna manera la inversa del efecto fotoeléctrico. A pequeñas velocidades σ crece linealmente con v y tiene un máximo alrededor de $Z = v$ (se obtiene haciendo $d\sigma/dv = 0$). O sea es máxima cuando la velocidad del electrón incidente es del orden de la velocidad media del estado ligado final y luego caerá, para estados ns , como v^{-5} .

III. IMPLICANCIAS FISICAS.

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



El electrón 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 así llamado *traveling orbital* que representa los electrones del átomo incidente observados desde el proton con

velocidad $-\vec{v}$

$$\exp(-i\vec{v}\cdot\vec{r})\psi_{1s}(r) = \exp(-i\vec{v}\cdot\vec{r}) \int d\vec{k} \underbrace{\frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{1^{5/2}}{(1^2+k^2)^2}}_{\tilde{\psi}_{1s}(k)} \overbrace{\frac{\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}}^{\psi_{1s}(r)} \quad (32)$$

$$= \int d\vec{k}' \underbrace{\frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{1^{5/2}}{(1^2+(\vec{k}'+\vec{v})^2)^2}}_{\text{paquete Lorentziano}} \underbrace{\frac{\exp(i\vec{k}'\cdot\vec{r})}{(2\pi)^{3/2}}}_{\text{onda plana referida al } H^+ \text{ del LHS}} \quad (33)$$

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

$$H^+ + e \rightarrow H(1s) + \hbar\omega \quad (34)$$

La única diferencia es que el espectro fotónico no da una delta de Dirac, sino un perfil que tiene que ver precisamente con la transformada de Fourier, o más precisamente la distribución de velocidades.

En colisiones mecánicas, esto es **sin emisión de radiación**, el proceso del tipo (31) se comporta a altas velocidades como v^{-12} (o v^{-11} si se tiene en cuenta el segundo orden perturbativo). Pero como vimos, la captura radiativa da un comportamiento v^{-5} , con lo cual a muy altas velocidades es el mecanismo más relevante de neutralización!. Las energías en la que la captura radiativa es más importante que la mecánica es del orden de 10 MeV para protones ó $v \sim 20a.u.$ En conclusión: los iones muy veloces que vienen de otras estrellas se neutralizan en el camino según este mecanismo radiativo (el mecánico es depreciable).