

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

EXCITACION NUCLEAR POR DESEXCITACION ELECTRONICA

T E S I S

Que para obtener el título de

F I S I C O

p r e s e n t a

ENRIQUE LOPEZ MORENO

*1 ejem.
25*

6600

México, D.F. Febrero 1979



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE.

Pág. No.

INTRODUCCION.

CAPITULO I. EL SISTEMA ATOMICO.

Introducción.	1
I.1. EL HAMILTONIANO TOTAL DEL ATOMO.	2
Separación de las variables electrónicas y nucleares.	
I.2. EL SISTEMA ELECTRONICO.	5
La aproximación del Campo Central. Sistemas de acoplamiento. La interacción electrostática residual. Acoplamiento LS. La interacción espín-órbita. Acoplamiento jj.	
I.3. EL NUCLEO ATOMICO.	21
Isospín. Algunas características de las fuerzas nucleares. Algunas propiedades de la estructura nuclear. El momento dipolar magnético nuclear.	

CAPITULO II. TRANSICIONES ELECTROMAGNETICAS ATOMICAS.

Introducción.	34
PRIMERA PARTE. TRANSICIONES RADIATIVAS.	
II.1. TRANSICIONES ELECTRONICAS. (Rayos-X).	
El átomo en el campo de radiación. Elementos de matriz de la transición. Reglas de selección. Radiación dipolar eléctrica. Líneas espectrales en excitación natural. Reglas de selección para muchos electrones. Transiciones con multipolaridad más elevada. Velocidades de decaimiento radiativo para las capas K y L.	
II.2. TRANSICIONES NUCLEARES. (Rayos Gama).	51
Introducción. Probabilidades de transición para un solo protón. Reglas de selección. Unidades de Weiskopf. Transiciones por un solo neutrón. Probabilidades de transición para muchas partículas.	
SEGUNDA PARTE. TRANSICIONES NO-RADIATIVAS.	
II.3. TRANSICIONES ELECTRONICAS. (Efecto Auger).	62

Indice.

Pág. No.

1. <u>Introducción.</u> Clasificación de los electrones Auger. La Producción Fluorescente. La producción fluorescente en presencia de transiciones Coster-Kronig.	62
2. El Hamiltoniano del sistema, los elementos de matriz, y las funciones de onda.	68
3. Energías de los electrones Auger.	74
4.A. ATOMOS CON UNA SOLA VACANCIA INICIAL. Los elementos de matriz radiales. Esquemas de acoplamiento. Acoplamiento IS. Acoplamiento jj. Intensidades de los electrones Auger.	
4.B. ATOMOS CON UNA CONFIGURACION ARBITRARIA DE VACANCIAS.	88
Introducción.	89
i). Agujeros no-equivalentes en el estado inicial y en el estado final.	93
ii). Agujeros equivalentes en los estados inicial y final.	99
iii). Agujeros equivalentes en el estado final.	102
5. IMPORTANCIA DE LAS TRANSICIONES AUGER.	106
II.4. TRANSICIONES NUCLEARES. (Conversión Interna).	108
Introducción. La interacción electrostática residual. La interacción electromagnética retardada. El núcleo puntual. Propiedades cualitativas de los Coeficientes de Conversión Interna. Efectos del tamaño finito del núcleo. Valores numéricos de los Coeficientes de Conversión Interna.	
CAPITULO III. EXCITACION NUCLEAR POR DESEXCITACION ELECTRONICA.	127
Introducción.	127

Indice.

Pág. No.

III.1. Descripción del Sistema electrónico-nuclear.	128
III.2. Transiciones electromagnéticas. Probabilidad de formación de un estado nuclear excitado. . .	132
III.3. Estimaciones numéricas para la probabilidad de ENDE en ^{235}U y en ^{189}Os	136
III.4. Evidencia experimental de ENDE en ^{189}Os . . .	141

APENDICE A. CAMPOS MULTIPOLARES.

APENDICE B. CUANTIZACION DEL CAMPO ELECTROMAGNETICO.

APENDICE C. TRANSICIONES RADIATIVAS.

APENDICE D. LA INTERACCION ELECTROMAGNETICA ENTRE DOS CARGAS.

BIBLIOGRAFIA.

INTRODUCCION.

Si tenemos a una vacancia electrónica en alguna de las capas internas del átomo, ésta decae usualmente por medio de la emisión de fotones o de electrones. El decaimiento por medio de la emisión de fotones lleva a la producción de los rayos-X característicos del átomo. Muchos descubrimientos importantes en física atómica fueron realizados aún antes de que se pudiera predecir el decaimiento por medio de la emisión de electrones; éste último tipo de decaimiento no-radiativo, es un proceso de auto-ionización conocido con el nombre de Efecto Auger. Las transiciones electrónicas radiativas forman la base sobre la cual descansa nuestro conocimiento de la estructura atómica. Actualmente, las transiciones electrónicas no-radiativas son usadas como una medida sensible de la naturaleza detallada de las funciones de onda de los electrones atómicos. Todavía dentro del átomo, pero a nivel nuclear, las transiciones electromagnéticas radiativas (rayos γ) y las no-radiativas (conversión interna) juegan también un papel importante dentro del estudio de la estructura nuclear.

En la presente tesis consideramos a una nueva posibilidad de decaimiento de una vacancia electrónica que se encuentre en alguna de las capas internas del átomo: la vacancia es ocupada por uno de los electrones de las capas superiores y el sistema electrónico pasa así a un estado de menor energía, al tiempo que el núcleo recibe la energía cedida por el sistema electrónico quedando en un estado excitado. A éste proceso lo llamamos "Excitación Nuclear por Desexcitación Electrónica", abreviadamente: ENDE. Teóricamente, este proceso abre un nuevo campo de la espectroscopía, aparte de la electrónica y la nuclear: la espectroscopía nucleo-atómica; ya que interviene tanto los niveles electrónicos como los nucleares.

En el Capítulo I presentamos una somera descripción del sistema atómico. En el Capítulo II revisamos breve

INTRODUCCION.

mente a las transiciones electromagnéticas atómicas. En el Capítulo III estudiaremos el proceso de desexcitación electrónica por medio de la excitación nuclear (ENDE).

CAPITULO I.
EL SISTEMA ATOMICO.

Introducción.

En este capítulo nos proponemos presentar una somera descripción del sistema atómico, en la cual los sistemas nuclear y electrónico que lo constituyen se encuentran unidos, pero conservando cierta independencia; cada uno con una estructura de niveles de energía más o menos bien definida.

Desde los experimentos de Rutherford, una gran diversidad de experimentos han confirmado la imagen del átomo nuclear; es decir, del átomo formado por un pequeño núcleo muy masivo, positivamente cargado y rodeado por un conjunto de electrones con una carga eléctrica negativa y con una masa mucho más pequeña.

El comportamiento de los electrones atómicos se encuentra gobernado por los principios fundamentales de la Mecánica Cuántica, la mayoría de los cuales fueron derivados del estudio de estos mismos electrones. Hasta donde sabemos, la conducta del núcleo no viola a ninguno de los principios antes mencionados; sin embargo, el conocimiento de la estructura nuclear aún no es completo; y esto se debe en parte a que no existe una teoría completa de las fuerzas nucleares.

Las dimensiones típicas de un núcleo son de unos 10^{-12} cm., mientras que el radio atómico se encuentra entre $(2\sim 3)\times 10^{-8}$ cm. para casi todos los átomos; el radio de la primera órbita de Bohr (unidad atómica de longitud) es: $a = \frac{h}{m_e v} = 0.5282 \times 10^{-8}$ cm.

El núcleo y los electrones interactúan principalmente por medio de la interacción Coulombiana que existe entre cada protón y cada electrón. Un electrón interactúa también con cada uno de los otros electrones, principalmente por medio de la repulsión electrostática mutua. Entre las partículas nucleares existe otro tipo de -----

fuerza: la fuerza nuclear de corto alcance. Esta solo actúa dentro del núcleo.

En la primera sección nos ocuparemos de la descripción del sistema atómico total, y separaremos al problema en un problema nuclear, y otro electrónico. En la segunda sección consideraremos el comportamiento del sistema electrónico y en la tercera sección trataremos muy someramente al sistema nuclear.

I.1. El Hamiltoniano Total del Atomo.

La evolución del sistema atómico está descrita por un Hamiltoniano de la siguiente forma:

$$\mathcal{H} = H_N + H_e + H_{e,N} \quad (1.1)$$

Donde hemos expresado al Hamiltoniano en tres partes: H_N que opera solamente sobre las variables dinámicas del núcleo: (ξ_N) y es de la forma

$$H_N = \sum_{n=1}^A \frac{p_n^2}{2M_n} + \sum_{n \rightarrow n'} V_{n,n'} \quad (1.2)$$

donde la primera sumatoria representa a la energía cinética del núcleo, y la segunda representa a la interacción entre las partículas nucleares (protones y neutrones).

H_e opera solamente sobre variables electrónicas (ξ_e) , y es de la forma

$$H_e = \sum_{i=1}^Z \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=2}^Z \sum_{j=1}^{i-1} \frac{e^2}{|r_{ij}|} ; \quad (1.3)$$

la primera suma en el segundo miembro representa a la energía cinética de los Z electrones, la segunda es la energía de interacción electrón-electrón. $H_{e,N}$ opera tanto sobre variables nucleares como electrónicas y es de la forma

$$H_{e,N} = \sum_{\alpha=1}^Z \sum_{i=1}^Z \frac{e_\alpha e_i}{|r_\alpha - r_i|} \quad (1.4)$$

donde los subíndices- α señalan a los protones, y los

subíndices i a los electrones. M_n y m son las masas de la n -ésima partícula nuclear y del electrón, respectivamente.

$|r_{ij}| \equiv |r_i - r_j|$, representa en (1.3) a la distancia entre el electrón i , y el electrón j . Las r son vectores de posición en cada caso.

La descripción dinámica del sistema atómico se obtiene de la solución de la ecuación de Schrödinger (con \mathcal{H} como en (1.1)):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathcal{Y}_n, \xi_e; t) = \mathcal{H} \Phi(\mathcal{Y}_n, \xi_e; t) \quad (1.5)$$

En este capítulo estaremos interesados en las propiedades estacionarias del átomo, de modo que \mathcal{H} es elegida independiente del tiempo, y de aquí que a la usual separación de la dependencia temporal:

$$\Phi(\mathcal{Y}_n, \xi_e; t) = \Phi(\mathcal{Y}_n, \xi_e) e^{-iEt/\hbar} \quad (1.6)$$

$$\mathcal{H} \Phi(\mathcal{Y}_n, \xi_e) = E \Phi(\mathcal{Y}_n, \xi_e) \quad (1.7)$$

donde E es la energía total del sistema.

La ecuación (1.7) representa un problema de muchos cuerpos para el cual no tenemos esperanzas de encontrar una solución general exacta. Es por lo tanto necesario intentar aproximaciones con problemas más simples.

Supongamos que podemos aproximar al campo nuclear que experimentan los electrones, por el término monopolar en la expansión de $H_{e,N}$:

$$H_{e,N}^{(0)} = - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|r_i|} \quad (1.8)$$

donde $|r_i|$ es la distancia al núcleo desde el i -ésimo electrón. Esto es equivalente a decir que los electrones interactúan con un núcleo puntual, y esperamos que los

términos más altos puedan ser tratados como una perturbación. Si sustituímos a (1.6) en vez de (1.4), tenemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Phi(\xi_N, \xi_e) &= \left[H_N + \left\{ \sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|r_i|} \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_{ij}|} \right\} \right] \Phi(\xi_N, \xi_e) \\ &= E\Phi(\xi_N, \xi_e) \end{aligned} \quad (1.9)$$

En esta ecuación hemos expresado al Hamiltoniano no total, como la suma del Hamiltoniano nuclear (1.2) y el Hamiltoniano electrónico; por lo tanto es posible ahora llevar a cabo la separación de las variables ξ_N, ξ_e , expresando a la función de onda Φ como un producto:

$$\Phi(\xi_N, \xi_e) = \phi_N(\xi_N) \psi_e(\xi_e) \quad (1.10)$$

y tenemos las ecuaciones (con $E = E_N + E_e$):

$$\left. \begin{aligned} a) \quad & H_N \phi_N(\xi_N) = E_N \phi_N(\xi_N) \\ b) \quad & \left[\sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|r_i|} \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_{ij}|} \right] \psi_e(\xi_e) = E_e \psi_e(\xi_e) \end{aligned} \right\} \quad (1.11)$$

ϕ_N representa al estado del núcleo, y ψ_e al estado de los electrones. La factorización en (1.10) expresa la independencia que existe entre el núcleo y los electrones y constituye nuestro punto de partida en la solución de la ecuación más general (1.7); a partir de aquí introducimos algunas simplificaciones, como lo es el uso de algún potencial aproximado en el que se muevan los electrones; y también algunos refinamientos, como la consideración de otros términos en la expansión multipolar de (1.4) y entonces una solución general de (1.7) será una combinación lineal de funciones del tipo (1.10).

I.2. El Sistema Electrónico.

Consideremos la descripción de la configuración electrónica del átomo con una carga eléctrica nuclear (Ze); esto es, consideremos a la ecuación (1.11,b):

$$\left[-\sum_{i=1}^N \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{Ze^2}{|r_i|} \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_{ij}|} \right] \Psi_e(\xi_e) = E_e \Psi_e(\xi_e) \quad (2.1)$$

donde N es el número de electrones.

El punto de partida usual en los cálculos de las funciones de onda es la llamada aproximación del campo central, en la que se supone que cada electrón se mueve en un potencial esféricamente simétrico producido por el núcleo y los demás electrones, sometido a la condición de auto-consistencia. Esta aproximación es válida si el potencial $V(r)$ que experimenta un electrón, varía muy poco cuando consideramos las fluctuaciones debidas al desplazamiento de los otros electrones. Posteriormente se deben considerar las correcciones producidas por el potencial real, (este último incluye a los términos de repulsión entre los electrones, de modo que depende del estado dinámico de estos y no es posible esperar que un solo potencial $V(r)$ lo aproxime siempre). La importancia de estas correcciones varía de un elemento atómico a otro, como se verá más adelante.

El potencial central lo podemos evaluar de diferentes maneras. En el método de Hartree, suponemos que cada electrón se mueve en un potencial equivalente producido por el núcleo y los demás electrones. Este potencial equivalente se obtiene postulando la existencia de una densidad de carga asociada con cada electrón, que es igual a $(-e)$ veces su densidad de probabilidad para la posición. El potencial equivalente para el i -ésimo electrón es

$$V_i(r_1) = \sum_{k \neq i} \int d\tau_2 \frac{e}{r_{12}} |u_k(r_2)|^2 - \frac{Z}{r_1} \quad (2.2)$$

aquí k indica al conjunto de números cuanticos que describen al estado del k -ésimo electrón.

Debemos tener, para N electrones, N ecuaciones integro-diferenciales simultaneas no-lineales de la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_i(\mathbf{r})\right] u_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i u_i(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

Hacemos una aproximación más, reemplazando a $V_i(\mathbf{r})$ por su promedio esféricamente simétrico:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi} \int V_i(\mathbf{r}) d\Omega \quad (2.4)$$

Las soluciones de la ec.(2.3) se pueden expresar entonces como un producto de una función radial por los armónicos esféricos:

$$u_i(\mathbf{r}) = u_{nlm}(\mathbf{r}) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\Omega) \quad (2.5)$$

$R_{nl}(r)$ satisface a la ecuación radial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R_{nl}}{dr^2} + \left[\epsilon_{nl} - V_{nl}(r) - \frac{l(l+1)}{2mr^2} \right] R_{nl} = 0 \quad (2.6)$$

El procedimiento de Hartree es el de resolver el sistema de N ecuaciones en (2.6) por aproximaciones sucesivas, sujeto a la condición de auto-consistencia. Se propone primeramente a un conjunto de funciones aproximadas y se utilizan en la ec.(2.2) para obtener al potencial; con este, obtenemos nuevas funciones de onda con las ecs.(2.3)---(2.6) y se determinan nuevos potenciales. Este procedimiento se continúa hasta que los potenciales sean auto-consistentes con alto grado de exactitud. La función de onda para todos los electrones se toma como el producto de las funciones de onda de un solo electrón

$$\Psi_e(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = u_1(\mathbf{r}_1) u_2(\mathbf{r}_2) \cdots u_N(\mathbf{r}_N). \quad (2.7)$$

El Principio de Pauli no queda automáticamente satisfecho por esta función de onda; de manera que debemos elegir adecuadamente a los conjuntos de números cuánticos en la ec.(2.7).

Se puede demostrar que la aproximación de Hartree resulta de un principio variacional. Además es posible generalizar las ecuaciones de Hartree con el fin de satisfacer al Principio de Exclusión de Pauli, introduciendo funciones de prueba variacionales en la forma de un determinante de Slater (Teoría de Hartree-Fock) de los orbitales de partícula individual:

$$\Psi_e = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \mathcal{U}_1(\xi^{(1)}) & \mathcal{U}_1(\xi^{(2)}) & \dots & \mathcal{U}_1(\xi^{(N)}) \\ \mathcal{U}_2(\xi^{(1)}) & \mathcal{U}_2(\xi^{(2)}) & \dots & \mathcal{U}_2(\xi^{(N)}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathcal{U}_N(\xi^{(1)}) & \mathcal{U}_N(\xi^{(2)}) & \dots & \mathcal{U}_N(\xi^{(N)}) \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

cada orbital en este determinante es un producto de una parte espacial $\mathcal{U}(r)$ y una parte espinorial $\chi(\sigma)$, la cual es α ó β . σ es el argumento de χ , en el espacio de espín y vale 1 ó 2. Tenemos: Si $\chi = \alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, entonces $\chi(1) = 1$, $\chi(2) = 0$; similarmente, si $\chi = \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, entonces $\chi(1) = 0$, $\chi(2) = 1$. Pediremos que todos los orbitales sean ortonormales:

$$\mathcal{U}_i(\xi^{(j)}) = \mathcal{U}_i(r_j) \chi_i(\sigma_j) \quad (2.9)$$

$$\int \mathcal{U}_i^*(\xi^{(i)}) \mathcal{U}_j(\xi^{(i)}) d\tau_i = \delta_{ij}$$

La integración se realiza sobre las coordenadas espaciales y de espín. Debido a que orbitales con espines distintos, son automáticamente ortogonales, la ec.(2.9) se

reduce a la condición de que los orbitales espaciales correspondientes al mismo espín, sean ortonormales. Esta condición y la condición de variación

$$\delta \int \Psi_e^* H \Psi_e d\tau = 0 \quad (2.10)$$

nos llevan a N ecuaciones integrodiferenciales de la forma:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u_i(r_1) - \frac{Ze^2}{r_1} u_i(r_1) + \left[\sum_j \int d\tau_2 \frac{e}{r_{12}} |u_j(r_2)|^2 \right] u_i(r_1) + \\ & - \sum_j \delta(m_{s_i}, m_{s_j}) \left[\int d\tau_2 \frac{1}{r_{12}} u_j^*(r_2) u_i(r_2) \right] u_j(r_1) = \epsilon_i u_i(r_1) \\ & \dots (2.11) \end{aligned}$$

que son llamadas: "las ecuaciones de Hartree-Fock". Estas ecuaciones difieren de las ecuaciones de Hartree (2.3), en los términos:

$$\int d\tau_2 \frac{e}{r_{12}} |u_i(r_2)|^2 u_i(r_1) - \sum_j \delta(m_{s_i}, m_{s_j}) \left[\int d\tau_2 \frac{e}{r_{12}} u_j^*(r_2) u_i(r_2) \right] u_j(r_1) \quad (2.12)$$

al último término de esta expresión se le denomina "el término de intercambio". Las ecuaciones (2.11) También se resuelven por iteración: A partir de una expresión aproximada para las u_μ , obtenemos

$$\sum_\mu u_\mu(r_1) u_\mu^*(r_2) \quad (2.13)$$

y calculamos las expresiones correspondientes a los términos en (2.12), las cuales son introducidas en (2.11), en donde obtenemos un nuevo conjunto de ecuaciones de eigenvalores cuyas soluciones $u_1^{(1)}, \dots, u_\mu^{(1)}$, nos llevan a una expresión como en (2.13). Continuamos esta operación y si la serie de estos valores converge, dicha serie ten-

derá a la solución exacta.

Es posible dar un significado físico a cada uno de los términos que aparecen en las ecuaciones de Hartree-Fock. (Por brevedad no escribimos al factor $\delta(m_{s_i}, m_{s_j})$ de modo que en lo que sigue, las sumas corren sobre orbitales correspondientes al mismo espín). Para esto, definimos el potencial promedio:

$$\bar{V}^{(\lambda)}(r_1) = \int \left(\frac{e}{r_{12}} \sum_{j=1}^N u_j^*(r_2) u_j(r_2) \right) d\tau_2 - \int |u_\lambda(r_2)|^2 \frac{e}{r_{12}} d\tau_2 \quad (2.14)$$

y también a:

$$W^{(\lambda)}(r_1, r_2) = \left[\sum_{\mu} |u_{\mu}(r_1)|^2 - u_\lambda(r_1) u_\lambda^*(r_2) \right] \frac{e}{r_{12}} \quad (2.14')$$

y notamos que:

$$\int W^{(\lambda)}(r_1, r_2) u_\lambda(r_2) d\tau_2 = \sum_j \int d\tau_2 \frac{e}{r_{12}} u_j^*(r_2) u_\lambda(r_2) u_j(r_1) - \int |u_\lambda(r_2)|^2 \frac{e}{r_{12}} d\tau_2 \quad (2.15)$$

de modo que las ecs. (2.11) pueden escribirse de la forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{|r_i|} \right] u_i(r_i) + \bar{V}^{(i)}(r_i) u_i(r_i) - \int W^{(i)}(r_i, r_2) u_i(r_2) d\tau_2 = \epsilon_i u_i(r_i) \quad (2.16)$$

y podemos pensar en que el electrón en el estado (i), se encuentra dentro de un campo constituido por el campo nuclear y un campo promedio de los demás electrones, que consta de un potencial promedio de los demás electrones y un término de interacción con los estados ocupados restantes.

Podríamos pensar en que ϵ_i representa el valor de la energía que posee un electrón en el estado (i), pero debemos observar que aunque las cantidades $\epsilon_1, \dots, \epsilon_N$, representan aproximadamente a las energías de ionización de los N electrones, su suma no es la energía del sistema de N electrones, ya que se habría sumado dos veces a la energía de interacción mutua.

La antisimetría de las eigenfunciones Ψ_e , nos impide pensar en que cierto electrón posee un conjunto particular de números cuánticos; sin embargo, podemos decir que un cierto electrón se encuentra en un cierto estado, si con esto nos referimos a la existencia de un conjunto particular de números cuánticos.

Una vez que hemos estimado un valor para el potencial central $U(r)$, por este o algún otro método, podremos escribir al Hamiltoniano (2.1) en la forma

$$H_{at}^{(e)} = h^{(1)} + h^{(2)} + \dots + h^{(N)}$$

donde

$$h^{(i)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(r_i) \quad (2.17)$$

Los eigenvectores de $H_{at}^{(e)}$ son determinantes de Slater, los cuales pueden construirse a partir del conjunto de los vectores de la base de h. El eigenvalor de $H_{at}^{(e)}$ correspondiente a un cierto determinante de Slater es igual a la suma de las energías de los N estados individuales que aparecen en ese determinante.

En esta aproximación, el estado del átomo con N electrones (carga nuclear Ze), queda especificado por un conjunto completo de números cuánticos, el cual consiste en una lista de N conjuntos individuales de números cuánticos del problema de un solo electrón. El Principio de Pauli requiere que todos los conjuntos indivi-

duales sean distintos, y es por esto que en el átomo, los electrones se acomodan en capas. En un conjunto completo solamente puede haber un par de conjuntos individuales con la misma n (número cuántico principal), l (momento angular) y m_l (componente en z del anterior); ya que m_s (componente en z del espín) puede tomar los valores $\pm 1/2$. Para cada n, l , puede haber $(2l+1)$ valores distintos de m_l de modo que solamente $2(2l+1)$ pueden tener el mismo valor de n, l . Si usamos el esquema- j , tenemos que j puede ser $l + \frac{1}{2}$ ó $l - \frac{1}{2}$, donde el primero tiene $2l+2$ valores de m , el segundo $2l$; en total son también $2(2l+1)$.

Cuando un conjunto completo contiene el número máximo de conjuntos individuales con una n, l dada, decimos que existe una capa cerrada. Como en el problema de un solo electrón la energía depende solo de n, l , la energía en la aproximación del campo central solo depende de la distribución de los electrones en las diferentes capas; es decir, solo depende de la lista de los diferentes valores n, l de los conjuntos individuales. Esta lista de valores n, l se dice que especifica a una configuración electrónica. Usualmente, en vez de los valores numéricos l : 0, 1, 2, ..., se escribe l : s, p, d, f, g, ... Al especificar la configuración de un átomo se usa una notación como la siguiente:

Ar: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$; Cu: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s 3d^{10}$

En el estado base de un átomo, los electrones ocupan los estados más bajos de energía de una manera consistente con el Principio de Pauli. En cada estado s, no puede haber más de dos electrones; en un estado p, no más de seis; en un estado d, no más de diez; etc.. Como se sabe, de esta manera es posible explicar las características más importantes de la Tabla Periódica de los Elementos.

Los Sistemas de Acoplamiento.

La interacción electrostática residual. Acoplamiento LS.

Con cada configuración electrónica tenemos diferentes estados con distintos valores para el momento angular total. De modo que los estados con diferente valor de su momento angular total, son de la misma energía; esto es, están degenerados. Esta degeneración es eliminada parcialmente por la interacción electrostática residual, introducida como una perturbación. Un nivel individual es entonces partido dentro de varios multipletes y los corrimientos en la energía pueden ser calculados por Teoría de Perturbaciones.

Denotemos por H' a la interacción electrostática residual:

$$H' = - \sum_{i=1}^Z \frac{Z e^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{(i \neq j)=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N U(r_i) \quad (2.18)$$

De acuerdo con la Teoría de Perturbaciones para el caso degenerado, las correcciones a primer orden para la energía son obtenidas formando combinaciones lineales de las soluciones degeneradas tales que el Hamiltoniano de perturbación sea diagonal en el subespacio de los estados degenerados. Las correcciones a primer orden de la energía son simplemente los elementos de matriz diagonales del Hamiltoniano de la perturbación. De un modo equivalente podemos trabajar con el Hamiltoniano total $H = H_{at}^{(0)} + H'$

Por brevedad, los eigenvectores del Hamiltoniano $H_{at}^{(0)}$, los cuales son determinantes de Slater compuestos con los orbitales de todos los electrones en la configuración, pueden denotarse por

$$| m_{l_1} m_{s_1}, m_{l_2} m_{s_2}, \dots, m_{l_N} m_{s_N}; (\alpha) \rangle \quad (2.19)$$

donde solamente se escriben las m_{l_i}, m_{s_i} para los orbitales dentro de una capa incompleta (suponemos que las demás están cerradas); el índice (α), se extiende sobre todos los eigenestados degenerados y representa a un cierto determinante de Slater. Se supone que hay N electrones en la capa incompleta.

Por lo tanto, nuestro problema consiste en la obtención de combinaciones lineales de determinantes de Slater (2.19), tales que el Hamiltoniano total H sea diagonal.

Consideremos al momento angular orbital total

$$\mathbb{L} = \sum_i \mathbb{r}_i \times \mathbb{p}_i$$

donde \mathbb{p}_i es el momento lineal del i -ésimo electrón. Como

$$[\mathbb{L}, \frac{1}{r_{i2}}] = 0$$

tenemos que el Hamiltoniano H y el momento angular \mathbb{L} conmutan:

$$[\mathbb{L}, H] = 0 \quad (2.20)$$

Como \mathbb{L} depende simétricamente de operadores de una sola partícula, tenemos que \mathbb{L} puede diagonalizarse simultáneamente a H . Lo mismo puede decirse del espín total

$$[S, H] = 0 \quad (2.21)$$

y de aquí que es posible diagonalizarlo simultáneamente a H .

En cuanto que L^2, L_z, S^2, S_z , todos conmutan entre sí, podemos encontrar una representación en la que estos son diagonales. En esta representación, los elementos de matriz de H son

$$\begin{aligned} \langle L' M_L', S' M_S' | H | L M_L, S M_S \rangle &= \\ &= \delta_{L'L} \delta_{M_L M_L'} \delta_{S'S} \delta_{M_S M_S'} \langle L M_L, S M_S | H | L M_L, S M_S \rangle \end{aligned}$$

esto es, el Hamiltoniano total tiene elementos de matriz distintos de cero solamente entre estados con la misma LM_L, SM_S . En el caso en que más de un estado tenga la misma LM_L, SM_S , será necesario diagonalizar explícitamente a la submatriz no-diagonal que se haya formado.

Formamos a los estados

$$|LM_L, SM_S; \lambda\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(\lambda) |m_{e_1}, m_{s_1}, \dots, m_{e_N}, m_{s_N}; \alpha\rangle \quad (2.22)$$

Las C_{α} son los coeficientes apropiados de la transformación de la representación de los orbitales individuales, a la representación LM_L, SM_S . Cuando son dos los electrones por combinarse, las C_{α} son los coeficientes de Clebsch Gordan. Cuando son tres o más los electrones presentes, las C_{α} son coeficientes de transformación más generales. El índice λ distingue entre diferentes estados con la misma LM_L, SM_S , que pueden surgir en el último caso. La suma sobre α se lleva a cabo sobre los K eigenestados degenerados.

Debido a que el momento angular total de todos los electrones J es una constante del movimiento, los estados (2.22) se deben acoplar para dar una J total resultante:

$$\Psi_{JM} \equiv |LSJM\rangle = \sum_{M_L, M_S} (LM_L, SM_S | JM) |LM_L, SM_S; \lambda\rangle \quad (2.23)$$

aquí los $(LM_L, SM_S | JM)$ son los coeficientes de Clebsch-Gordan (que denotaremos por c-C-G) que acoplan $L+S=J$

La energía, corregida a primer orden, esta dada por la siguiente:

$$\langle LM_L, SM_S; \lambda' | H | LM_L, SM_S; \lambda \rangle = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha}^*(\lambda') C_{\beta}(\lambda) \langle m_{e_1}, m_{s_1}, \dots, m_{e_N}, m_{s_N}; \alpha | H | m_{e_1}, m_{s_1}, \dots, m_{e_N}, m_{s_N}; \beta \rangle \quad (2.24)$$

La suma es sobre todas las α, β posibles. La asignación de $m_l m_s$ en el estado α de la izquierda es en general diferente a la asignación de $m_l m_s$ en el lado derecho de

Escribamos para la H :

$$H = F_1 + F_2; \quad F_1 = \sum_i F_i; \quad F_2 = \sum_{i < j} g_{ij} \quad (2.25)$$

donde

$$f_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i}; \quad g_{ij} = \frac{e^2}{r_{ij}}$$

Los elementos de matriz (2.24) son (Bethe, 1968; pag.129):

$$\begin{aligned} \langle LM_L, SM_S; \lambda | H | LM_L, SM_S; \lambda \rangle &= \delta_{\lambda \lambda'} \left(\sum_{\substack{i \\ \text{capas} \\ \text{completas}}} \langle i | f_i | i \rangle + \right. \\ &+ \sum_{\substack{i < j \\ \text{capas} \\ \text{completas}}} [\langle ij | g_{ij} | ij \rangle - \langle ij | g_{ij} | ji \rangle] + N \langle i | f_i | i \rangle + \\ &+ N \sum_{\substack{j \\ \text{capas} \\ \text{completas}}} [\langle ij | g_{ij} | ij \rangle - \langle ij | g_{ij} | ji \rangle] \Big) + \sum_{\alpha} c_{\alpha}^*(\lambda') c_{\alpha}(\lambda) \cdot \\ &\times \sum_{\substack{i < j \\ \text{capas} \\ \text{incompletas}}} [\langle ij | g_{ij} | ij \rangle - \langle ij | g_{ij} | ji \rangle] + \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha}^*(\lambda') c_{\beta}(\lambda) \cdot \\ &\times [\langle ij | g_{ij} | ij \rangle - \langle ij | g_{ij} | ji \rangle] \quad \dots (2.26) \end{aligned}$$

La cantidad que multiplica a $\delta_{\lambda \lambda'}$ es independiente de los números cuánticos magnéticos y puede ser ignorada cuando se calculan diferencias de energía. En las expresiones que multiplican a N , la i se refiere a cualquier orbital en una capa incompleta, sin que impor-

te cual. El último término en (2.26) se refiere a determinantes de Slater en los estados inicial y final que difieren exactamente por dos orbitales dentro de la capa incompleta. Por lo tanto, la suma en α, β se restringe a los determinantes de Slater que cumplen con esta condición; la prima en la sumatoria indica esto último.

Tenemos así que, dentro de la aproximación a primer orden, la partición de los niveles está determinada justamente por los elementos de matriz de $g = \frac{e^2}{V_{12}}$, entre orbitales que están dentro de la capa incompleta. También observamos que debido a que las capas completas tienen la L y la S iguales a cero, los estados permitidos LM_L, SM_S son determinados solo por los orbitales de la capa incompleta.

Existen tabuladas numerosas comparaciones entre la teoría de las energías electrostáticas y el experimento (Condon & Shortley, 1951, pag.197). La diferencia entre los resultados experimentales y las fórmulas a primer orden, debe su origen principalmente a dos causas. Primero, la interacción espín-órbita (que consideraremos más adelante) puede ser tan grande, que el acoplamiento LS quede destruido. Segundo, aún cuando la interacción espín-órbita sea pequeña, los elementos de matriz hasta ahora despreciados, que conectan con diferentes configuraciones, pueden ser importantes. En la tabla I enlistamos una comparación típica.

De los numerosos cálculos que se han realizado, han surgido algunas reglas: (1) La energía más baja se tiene con el espín más elevado. Debido a que el espín más elevado corresponde a una combinación simétrica de las funciones individuales de espín, la función espacial será antisimétrica, produciéndose así la mínima repulsión Coulombiana. (2) Entre los multipletes con el espín más elevado, la L más alta corresponde a la energía más baja. Una M_L alta, implica a órbitas próximas al plano ecuato--

TABLA I.

Razones de Separación de Energía, Teórica y Experimental para varios términos.

Atomo	Configuración	$\left(\frac{{}^1S-{}^1D}{{}^1D-{}^3P}\right)$	Atomo	Configuración	$\left(\frac{{}^2P-{}^2D}{{}^2D-{}^4S}\right)$
Teoría	np^2	1.50	Teoría	np^3	0.667
C	$2p^2$	1.13	N	$2p^3$	0.500
N^+	$2p^2$	1.14	O^+	$2p^3$	0.509
O^+	$2p^2$	1.14	S^+	$3p^3$	0.651
Si	$3p^2$	1.48	As	$4p^3$	0.715
Ge	$4p^2$	1.50	Sb	$5p^3$	0.908
Sn	$5p^2$	1.39	Bi	$6p^3$	1.121

rial, lo que da lugar a que los electrones se encuentren más separados en promedio, haciendo que su interacción sea pequeña.

Estas dos reglas son conocidas como reglas de Hund. Han sido probadas y confirmadas en el estudio de muchos espectros. Las reglas de Hund son aplicables solamente al estado de más baja energía.

La interacción espín-órbita. El acoplamiento jj.

La interacción espín-órbita, que hasta ahora no habíamos considerado, es debida a la interacción del momento magnético del electrón con el campo magnético establecido por su movimiento. Este es un efecto relativista que puede analizarse completamente con la teoría de Dirac (ver L.I.Schiff, chap.13), aunque también es posible dar un tratamiento ad-hoc no-relativista (Bethe & Jackiw). En ambos casos, la energía de interacción está da-

da por

$$H_{so} = \frac{1}{2m^2c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \right) \ell \cdot s$$

y para varios electrones

$$H_{so} = \frac{1}{2m^2c^2} \sum_i \left(\frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \right)_i \ell_i \cdot s_i \quad (2.27)$$

Si la interacción espín-órbita es mucho más pequeña que la interacción electrostática residual, podremos considerar a (2.27) como una perturbación y evaluar sus elementos de matriz en el esquema etiquetado por SLJM. El momento angular total \mathbf{J} es, por supuesto, aún una constante del movimiento, y por lo tanto podremos cuantizar a \mathbf{J}^2 y J_z . Correspondientemente, los estados de la energía están descritos por L y S y entonces, para una LS dada, tiene lugar una partición de acuerdo con las diferentes J resultantes.

Convencionalmente, diremos que un multiplete definido ^{2S+1}L , se parte dentro de varios términos con J diferentes. Un término está representado por $^{2S+1}L_J$ y la J varía entre L+S y L-S.

Es posible demostrar que las capas completas no contribuyen a la energía espín-órbita, de modo que podemos escribir en vez de (2.27), a

$$H'_{so} = \frac{1}{2m^2c^2} \sum_{nl} \sum_{i=1}^N \ell_i \cdot s_i \quad (2.28)$$

donde la suma se extiende ahora sobre los N electrones dentro de la capa incompleta nl. La cantidad $\left(\frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \right)$ ha sido remplazada por \sum_{nl} , que es su promedio sobre la capa incompleta

$$\sum_{nl} = \int_0^{\infty} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} R_{nl}^2 dr \quad (2.29)$$

Deseamos evaluar a $\langle LSJM | H'_{so} | LSJM \rangle$,
que con (2.23) es

$$\langle LSJM | H'_{so} | LSJM \rangle = \sum_{\substack{M_L M_S M'_L M'_S \\ M_L + M_S = M'_L + M'_S}} \cdot \\ \cdot (LM'_L SM'_S | JM)^* (LM_L SM_S | JM) \langle LM'_L SM'_S | H'_{so} | LM_L SM_S \rangle \quad \dots (2.30)$$

Usando el teorema de Wigner-Eckart y sumando sobre los coeficientes C-G., tenemos:

$$\langle LSJM | H'_{so} | LSJM \rangle = \frac{1}{2m^2c^2} \sum_{nl} \sum_i \alpha(i) \beta(i) \langle LSJM | L \cdot S | LSJM \rangle$$

donde

$$\left. \begin{aligned} \alpha(i) &= \langle L || l_i || L \rangle \\ \beta(i) &= \langle S || s_i || S \rangle \end{aligned} \right\} \quad (2.31)$$

son los elementos de matriz reducidos; la doble barra indica que estas cantidades no dependen de los números cuánticos magnéticos.

Tenemos así que la interacción H'_{so} en (2.28) se puede replazar por

$$H''_{so} = \frac{1}{2m^2c^2} \sum_{nl} \sum_i \alpha(i) \beta(i) L \cdot S \quad (2.32)$$

Podemos evaluar ahora al elemento de matriz en (2.30) y obtenemos

$$E_{so} = \langle LSJM | H''_{so} | LSJM \rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \sum_{nl} \delta_{LS} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \quad (2.33)$$

donde

$$\delta_{LS} = \sum_i (\alpha(i) \beta(i)) \quad (2.34)$$

es un coeficiente numérico que se puede calcular si la función de onda del estado $LM_L SM_S$ es conocido en términos de la representación de las $m_{l_i} m_{s_i}$.

Como la única dependencia en J de E_{SO} en (2.33) se encuentra entre los paréntesis cuadrados, podemos evaluar la diferencia:

$$E_{SO}(J) - E_{SO}(J-1) = \left(\frac{1}{2} \frac{h}{mc}\right)^2 \sum_{n \ell} \gamma_{LS} 2J \quad (2.35)$$

Esta es la regla del intervalo de Landé, que establece que la separación de dos estados J pertenecientes a la misma LS , es proporcional al valor más grande de J .

Es posible generalizar la regla de Hund: Para obtener el término con la más baja energía en un multiplete (regular) correspondiente a una capa ocupada a menos de la mitad, se toma la S más alta, para tomar entonces a la L más alta, y finalmente a la J más baja. Para un multiplete (invertido) correspondiente a una capa ocupada a más de la mitad, se toma la S más elevada, entonces a la L más elevada, y finalmente a la J más elevada.

Para capas ocupadas hasta la mitad exactamente, no existe interacción espín-órbita a primer orden.

En algunos casos, principalmente para los elementos pesados, la interacción H_{SO} puede ser mucho mayor que la interacción electrostática. No será correcto en este caso desprestigiar a los elementos fuera de la diagonal de la interacción H_{SO} dentro del esquema de acoplamiento LS considerando solamente a los elementos diagonales; será conveniente entonces usar otro esquema de acoplamiento, tal que H_{SO} sea diagonal en él considerando entonces a la electrostática residual como una perturbación. El esquema que nos interesa debe acoplar l_i y s_i a j_i y entonces acoplar a las j_i para formar la J total. Este es el llamado esquema de acoplamiento jj , y es el más

----- natural en este caso debido a que la interacción conmuta con las \mathcal{L}_z , las \mathcal{J}_i^2 , y con \mathcal{J} . La función de onda para una configuración de dos electrones en este esquema es

$$\Psi_{JM} = \sum_{m_1} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2} \quad (2.36)$$

donde

$$\psi_{j_1 m_1} = \sum_{m_{l_1}} (l_1 m_{l_1} s_1 m_{s_1} | j_1 m_1) \varphi(l_1 m_{l_1}) \chi(m_{s_1})$$

$$\psi_{j_2 m_2} = \sum_{m_{l_2}} (l_2 m_{l_2} s_2 m_{s_2} | j_2 m_2) \varphi(l_2 m_{l_2}) \chi(m_{s_2})$$

Cada electrón está caracterizado por los números cuánticos $nljm$ en vez de $nlm_1 m_2$. Una configuración $(nl)^k$ es dividida dentro de subconfiguraciones, caracterizadas por el número K_1 de electrones que tienen $j=l+1/2$; esto puede denotarse como $(nl, l+1/2)^{K_1} \times (nl, l-1/2)^{k-K_1}$. El cálculo de la energía electrostática es mucho más complicado que en el esquema LS (Condon & Shortley, Chap.10).

Los dos casos mencionados anteriormente, en los que ya sea la interacción electrostática residual, o bien la interacción espín-órbita, dominan una sobre de la otra, corresponden a casos extremos que se dan solo aproximadamente en los extremos inicial y final de la tabla periódica de los elementos. Cuando ambas interacciones son equiparables, es necesario tratar con un acoplamiento intermedio.

I.3. El Nucleo Atómico.

En la sección I.1 planteamos el problema de la descripción del átomo en términos de las soluciones de

las ecuaciones (1.11). Hasta ahora solo hemos tratado con una sola de ellas: la ec. (1.11,b), la cual trata con la configuración electrónica. Volvamos ahora a la ec. (1.11,a) que se refiere al problema nuclear. Nuestro principal problema se encuentra en la descripción de la interacción nuclear $V_{n,n'}$. Como mencionamos en la introducción, aún no existe una teoría completa de las fuerzas nucleares, de modo que es necesario descansar en lo experimental mucho más de lo que sería si dispusiéramos de una teoría consistente.

Los dos tipos de partícula—neutrón y protón—que constituyen al núcleo, difieren una de la otra principalmente en que una se encuentra eléctricamente cargada y la otra es eléctricamente neutra. En muchos otros aspectos una es notablemente parecida a la otra. Ambas son fermiones con un espín intrínseco $s=1/2$. Sus masas son casi iguales ($m_p = 1836.1 m_e$; $m_n = 1838.6 m_e$).

Se ha encontrado que, aparte de las fuerzas eléctricas relativamente débiles, las fuerzas de interacción entre dos protones son muy similares a aquellas entre dos neutrones. A esta otra similitud se le conoce como la simetría de carga en las fuerzas nucleares.

La simetría de carga es, sin embargo, solo una de las manifestaciones de una similitud física de mayor alcance entre protones y neutrones, conocida como invarianza isotópica. Resulta conveniente considerar al neutrón y al protón como a dos estados de una misma entidad: El Nucleón. Es posible así introducir un formalismo conveniente para la descripción de la invarianza isotópica. Esto debe ser entendido en el mismo sentido en que los electrones polarizados positivamente y los polarizados negativamente son considerados dos estados de una misma entidad: el electrón. El formalismo isotópico se sigue de una manera natural del hecho de que la invarianza isotópica es equivalente a la posibilidad de clasificar a los

estados de un sistema de nucleones con respecto a la simetría de sus funciones de onda ϕ de las coordenadas y de espín, independientemente de los tipos de nucleones involucrados. Es definido así un nuevo número cuántico para la descripción de los estados del sistema, el cual determina de una manera única la simetría de las funciones ϕ . Tenemos de este modo que el protón y el neutrón se consideran como dos "estados de carga" del nucleón difiriendo en el valor de la componente de un nuevo vector \mathcal{T} , cuyas propiedades son análogas a las del vector de espín $1/2$. \mathcal{T} recibe el nombre de espín isotópico, o isospín. La tercera componente de \mathcal{T} para un nucleón, puede tomar solo dos valores $\mathcal{T}_3 = \pm \frac{1}{2}$. Convencionalmente se asigna el valor $1/2$ para el protón y $-1/2$ para el neutrón.

El isospín \mathcal{T} es un operador que actúa sobre la variable de carga \mathcal{T}_3 en la función de onda, de la misma manera que el operador de espín S actúa sobre la variable de espín σ . En virtud de la completa analogía entre ambos, los operadores $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2, \mathcal{T}_3$ están dados por las mismas matrices de Pauli σ (ec. (3) Ap.D) como en los operadores

S_1, S_2, S_3 . Para ser capaces de hacer uso pleno del formalismo de isospín, es necesario introducir operadores similares a los usados en el espacio de espín (de Shalit & Feshbach, 1974 pag. 31). En lugar de extendernos más en el tema del isospín, consideraremos de una manera muy breve algunas características de las fuerzas nucleares.

La principal característica de las fuerzas nucleares es su corto alcance; dichas fuerzas decrecen exponencialmente a distancias del orden de 1.5×10^{-13} cm. Además se han observado las siguientes características:

1). Dentro del núcleo, las fuerzas nucleares dominan sustancialmente a las interacciones electromagnéticas.

2). La fuerza entre dos nucleones es atractiva para distancias r a, donde "a" es del orden de la distancia entre los vecinos más próximos en el núcleo. Para

distancias $r < a$ ($\sim 0.5 \times 10^{-13}$ cm.) la fuerza se vuelve fuertemente repulsiva.

3). Las fuerzas nucleares tienen la propiedad de saturación. En otras palabras, su caracter general es tal que cada nucleón no puede interaccionar con más de u nos cuantos nucleones, dando como consecuencia que la energía de amarre aumenta linealmente con el número A de partículas.

4). La fuerza nuclear no solo depende de la se paración relativa de los dos nucleones, sino también de sus grados de libertad intrínsecos. Su dependencia en los espines de los nucleones en interacción se puede inferir del hecho de que el único sistema ligado (n - p) (el deuterón) tiene sus espines alineados paralelamente, dando por resultado un momento total $I=1$. No se conoce a ningún es tdo ligado del deuterón en el que los espines se encuentren alineados antiparalelamente dando una $I=0$.

La dependencia en el espín de la interacción nuclear, probablemente consta de tres partes diferentes: una interacción directa espín-espín de la forma $\sigma_1 \cdot \sigma_2 V(|r_1 - r_2|)$; una interacción espín-órbita de la forma: $[(\sigma_1 + \sigma_2) \cdot (r_1 - r_2)] \times (p_1 - p_2) V(|r_1 - r_2|)$; y una interacción tensorial del tipo:

$$\left\{ 3[\sigma_1 \cdot (r_1 - r_2)][\sigma_2 \cdot (r_1 - r_2)] - (r_1 - r_2)^2 \sigma_1 \cdot \sigma_2 \right\} V(|r_1 - r_2|)$$

La evidencia de estas componentes en la interacción nuclear proviene de muchas fuentes, siendo la más directa los experimentos de dispersión nucleón-nucleón.

Existen otras propiedades cuantitativas de las fuerzas nucleares (de Shalit & Feshbach pag. 11) que nosotros no consideraremos aquí. En cambio, diremos solo y nas cuantas palabras sobre la estructura nuclear.

Muchas de las propiedades nucleares pueden ser bien descritas con el modelo de capas, el cual es básicamente similar a la estructura de capas electrónicas en el

caso atómico. En este modelo se considera que cada nucleón dentro del núcleo se está moviendo en un campo autoconsistente debido a todos los demás nucleones. El estado del núcleo como un todo, queda descrito si se especifican los estados de los nucleones individuales.

El campo auto-consistente se elige esféricamente simétrico, y el centro de simetría es, por supuesto, el centro de masa del núcleo. Sin embargo, nos encontramos con la dificultad de que las funciones de onda del campo auto-consistente, construídas como determinantes de Slater formados con las funciones de onda de partícula individual, no conservan fijo al centro de masa. A pesar de que la velocidad media del centro de masa es cero al calcularse con dichas funciones, existe una probabilidad finita de encontrar una velocidad distinta de cero. Esta dificultad puede ser evitada eliminando desde un principio al movimiento del centro de masa en los cálculos de cualquier cantidad física por medio de las funciones de onda $\phi(r_1, r_2, \dots, r_A)$ del campo auto-consistente. Sea $f(r_i, p_i)$ alguna cantidad física, función de las coordenadas y los momentos de los nucleones. Entonces, al calcular sus elementos de matriz por medio de las funciones ϕ , debemos cambiar a los argumentos de f , sin alterar la $\phi(r_i)$, como sigue:

$$r_i \rightarrow r_i - R; \quad p_i \rightarrow p_i - \frac{P}{A} \quad (3.1)$$

donde R es el radio vector del centro de masa del núcleo, A , es el número de nucleones en él, P es su cantidad de movimiento como un todo.

Por ejemplo, el operador del momento dipolar eléctrico es $d = e \sum r_p$, donde la suma se debe hacer sobre todos los protones del núcleo. Para calcular sus elementos de matriz dentro del método del campo auto-consistente, este operador debe ser remplazado por $e \sum (r_p - R)$.

Las coordenadas del centro de masa del nucleo son

$$R = \frac{1}{A} \left(\sum_p r_p + \sum_n r_n \right) \quad (3.2)$$

Dado que el número de protones en el nucleo es Z , el operador del momento dipolar debe cambiarse a

$$e \sum_p r_p \rightarrow e \left(1 - \frac{Z}{A} \right) \sum_p r_p - e \frac{Z}{A} \sum_n r_n \quad (3.3)$$

Los protones aparecen aquí con una "carga efectiva":

$e \left(1 - \frac{Z}{A} \right)$ y los neutrones con una "carga": $(-e \frac{Z}{A})$.

Dentro de la aproximación no-relativista, la interacción de un nucleón con el campo auto-consistente es independiente del espín del nucleón; la única manera en que puede aparecer dicha dependencia es por medio de un término proporcional a $S \cdot M$, un pseudo-escalar formado con el espín y el vector unitario M en la dirección del radio vector r del nucleón.

La consideración de términos relativistas dependientes de la velocidad de los nucleones, puede introducir una dependencia entre la energía del nucleón y su espín. El mayor de dichos términos es lineal en la velocidad. De los tres vectores S, M, v , podemos formar un escalar con el producto: $M \times v \cdot S$. El operador de acoplamiento espín-órbita del nucleón dentro del nucleo es, por lo tanto:

$$V_{so} = -g(r) M \times v \cdot S$$

donde $g(r)$ es alguna función de r . Con $m_p r \times v = \hbar l$ podemos escribir para la ecuación anterior:

$$V_{so} = -f(r) l \cdot S \quad (3.4)$$

donde $f = \frac{\hbar g}{r m_p}$. Debemos notar que esta interacción es de primer orden en v/c , mientras que el acoplamiento espín-órbita de un electrón en un átomo es un efecto a segundo orden. Esta diferencia se debe al hecho de que las fuerzas nucleares dependen del espín aún dentro de la aproximación no-relativista.

La energía de interacción espín-órbita se encuentra concentrada principalmente en la región próxima a la superficie nuclear; esto es, $f(r)$ decrece dentro del núcleo. Esto es debido a que en la materia nuclear infinita no podría haber una interacción de este estilo, como queda claro si pensamos que al tratar con un sistema homogéneo, no existe una dirección preferida que pueda ser la de \mathcal{M} .

La interacción (3.4) produce una división en el nivel del nucleón con momento angular orbital l , dentro de dos niveles con momentos angulares $j = l \pm 1/2$

Debido a que

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \cdot \mathcal{S} &= \frac{1}{2} l & \text{para } j = l + \frac{1}{2} \\ &= -\frac{1}{2}(l+1) & \text{para } j = l - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.5)$$

la magnitud de esta división es

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{l-\frac{1}{2}} - E_{l+\frac{1}{2}} \\ &= \bar{f}(r) \left(l + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Los experimentos demuestran que el nivel con $j = l + 1/2$ (\mathcal{L} y \mathcal{S} paralelos) está por debajo del nivel con $j = l - 1/2$ esto significa que $f(r) > 0$.

El acoplamiento espín-órbita de un nucleón dentro del núcleo es relativamente débil comparado con su interacción en el campo auto-consistente. Este acoplamiento V_{so} resulta sin embargo generalmente grande comparado con la energía de interacción directa de dos nucleones dentro del núcleo debido a que esta última decrece más rápidamente al aumentar el peso atómico. De aquí que

el esquema de acoplamiento más adecuado a la descripción de los niveles nucleares es el del acoplamiento jj , a diferencia del caso atómico en el que es más adecuado el esquema LS .

El estado de cada nucleón en el núcleo está de terminado por su momento angular j y su paridad. Aunque los vectores \mathbf{L} y \mathbf{S} no son conservados separadamente, $|\mathbf{L}|$ tiene un valor bien definido, ya que la paridad es igual a $(-)^l$.

Los estados con una l y una j dadas, son convencionalmente numeradas por el número cuántico principal n (en orden de energía creciente), que para el caso nuclear toma valores enteros a partir de 1 (en el caso electrónico los valores de n parten de $l+1$). En la notación espectroscópica, las siguientes órbitas ($n l$) de partícula independiente son posibles:

$1s, 2s, 3s, \dots$ $2p, 3p, 4p, \dots$ $3d, 4d, 5d, \dots, etc.$

Los mismos estados en espectroscopía nuclear serán denotados por:

$1s, 2s, 3s, \dots$ $1p, 2p, 3p, \dots$ $1d, 2d, 3d, \dots etc.$

No es posible tener a más de $(2j+1)$ neutrones o más de $(2j+1)$ protones simultáneamente dentro de un estado con unos valores dados de n, l, j .

Los estados del núcleo como un todo (en una cierta configuración) son usualmente denotados por una letra dando el valor de \mathbf{I} (momento angular total de todos los nucleones) y un signo (+, ó -) indicando la paridad del estado.

De los análisis experimentales referentes a las propiedades nucleares es posible derivar algunas regularidades en las posiciones de los niveles nucleares. Ante

todo, se encuentra que la energía de un nucleón aumenta junto con el momento angular orbital l . Esto lo podemos interpretar como un aumento en la energía centrífuga que disminuye la energía de amarre del nucleón.

Además tenemos que para un valor dado de l , el nivel con $j = l + \frac{1}{2}$ yace por debajo del nivel con $j = l - \frac{1}{2}$.

La siguiente regla se refiere al isospín nuclear: La componente T_3 del isospín está determinada por el peso atómica y por el número atómico del núcleo:

$$T_3 = \sum \tau_3 = \frac{1}{2}(Z - N) = Z - \frac{A}{2} \quad (3.7)$$

Para un valor determinado de T_3 del isospín tenemos que $|\pi| \geq T_3$. Se encuentra que el estado base nuclear posee el valor más pequeño de los posibles valores del isospín π . Esto se aplica por supuesto, solo a núcleos que no son muy pesados, en los que la intracción Coulombiana no es tan importante como para que se viole la conservación del isospín.

Existen ciertas reglas relacionadas con los espines del estado base de los núcleos que determinan la manera en que el momento angular j de los nucleones individuales se suman para dar el espín total del núcleo. Dichas reglas representan la tendencia de los protones y los neutrones en estados similares a formar pares de momento angular opuesto; la energía de amarre de dichos pares pp y nn es del orden de 1 ó 2 MeV. Este fenómeno tiene el resultado particular de que un núcleo con un número par, tanto de protones como de neutrones (núcleo par-par), tiene un momento angular nulo. Si el núcleo contiene un número impar de protones o de neutrones, de modo que todos los nucleones fuera de capa cerrada se encuentren en estados similares, entonces el momento angular total del núcleo será usualmente igual al de un solo nu-

cleón, como si un solo nucleón hubiera quedado afuera después de formar a todos los pares posibles de protones y neutrones (las capas completas tienen momento angular total cero).

Finalmente, si ambos Z y N son impares, y todos los nucleones fuera de capa cerrada se encuentran en estados similares, J es entonces usualmente igual a dos veces el momento angular de un nucleón, como si un solo protón y un solo neutrón hubieran sobrado después de formar los pares, con sus momentos angulares paralelos.

De una manera similar al caso electrónico, los estados de los nucleones se pueden dividir dentro de grupos tales que su energía de amarre decrece conforme un grupo es completado y pasamos al siguiente. Los estados nucleónicos están distribuidos dentro de los siguientes grupos:

		Nucleones.	
$1s_{1/2}$	-	-	2
$1p_{3/2}$	$1p_{1/2}$	-	6
$1d_{5/2}$	$1d_{3/2}$	$2s_{1/2}$	$1f_{7/2}$
$2p_{3/2}$	$1f_{5/2}$	$2p_{1/2}$	$1g_{9/2}$
$2d_{5/2}$	$1g_{7/2}$	$1h_{11/2}$	$2d_{3/2}$
$2f_{7/2}$	$1h_{9/2}$	$2i_{13/2}$	$2f_{5/2}$
		$3s_{1/2}$	$3p_{3/2}$
		$3p_{1/2}$	$3p_{1/2}$
			20
			22
			32
			44

} (3.8)

Para cada grupo se exhibe el número total de vacancias para protón o neutrón. De acuerdo con estos números la ocupación de un grupo se completa cuando el número total Z de protones, o N de neutrones dentro del núcleo es igual a uno de los números: 2, 8, 28, 50, 82, 126, Estos son llamados los "números mágicos". Los núcleos doblemente mágicos, en los cuales tanto Z como N son números mágicos, son peculiarmente estables (${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{208}_{82}\text{Pb}$, ...). En comparación con los núcleos adyacentes estos ${}^{126}_{82}$ tienen una aversión poco usual por un nucleón más, y sus

primeros estados excitados son muy elevados.

Haremos finalmente algunos comentarios sobre los cálculos del momento magnético del núcleo dentro del modelo de capas. Tenemos que el momento magnético $\bar{\mu}$ se encuentra naturalmente en la dirección del momento angular total del núcleo \mathbb{I} , y que ésta es la única dirección preferida en el núcleo; su operador es:

$$\bar{\mu} = \mu_0 \mathcal{G} \mathbb{I} \quad (3.9)$$

donde μ_0 es el magnetón nuclear:

$$\frac{e\hbar}{2M_p c} = 3.1525 \times 10^{-18} \frac{\text{MeV}}{\text{Gauss}} \quad (3.10)$$

y \mathcal{G} es el factor giromagnético. El eigenvalor de la proyección del momento $\bar{\mu}$ es $\mu_z = \mu_0 \mathcal{G} M_I$. El momento magnético del núcleo (μ) es usualmente tomado como el valor máximo de la proyección: $\mu = \mu_0 \mathcal{G} I$. En esta notación:

El momento magnético del núcleo está compuesto por los momentos magnéticos de los nucleones fuera de capa cerrada, ya que dentro de las capas cerradas estos se anulan. Cada nucleón produce dentro del núcleo un momento magnético que consiste en dos partes: una parte de espín y (en el caso del protón) una parte orbital; esto es, está formado por la suma ($\mathcal{G}_s \mathcal{S} + \mathcal{G}_l \mathcal{L}$). Omitimos la μ_0 , midiendo en unidades de magnetón nuclear. Los factores giromagnéticos de espín y orbital son

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{G}_l &= \begin{cases} 1 & \text{protón.} \\ 0 & \text{neutrón.} \end{cases} \\ \mathcal{G}_s &= \begin{cases} 5.586 & \text{protón.} \\ -3.826 & \text{neutrón.} \end{cases} \end{aligned} \right\} (3.11)$$

Después de promediar con respecto al movimiento del nucleón en el núcleo, su momento magnético se vuelve proporcional a \hat{j} ; escribiéndolo en la forma $g_j \hat{j}$, tenemos

$$\begin{aligned} g_j \hat{j} &= g_s \overline{\hat{s}} + g_l \overline{\hat{l}} \\ &= \frac{1}{2}(g_l + g_s)\hat{j} + \frac{1}{2}(g_l - g_s)(\overline{\hat{l}} - \overline{\hat{s}}) \end{aligned}$$

y multiplicando a ambos lados de esta ecuación por $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ y tomando eigenvalores, obtenemos

$$g_j(j+1)j = \frac{1}{2}(g_l + g_s)j(j+1) + \frac{1}{2}(g_l - g_s)[l(l+1) - s(s+1)]$$

y poniendo $s=1/2$, $j=l \pm 1/2$:

$$g_j = g_l \pm \frac{g_s - g_l}{2l+1} \quad \text{para } j = l \pm \frac{1}{2} \quad (3.12)$$

Con los valores anteriores de las razones giromagnéticas tenemos para el momento magnético del protón $\mu_p = g_j j$:

$$\left. \begin{aligned} \mu_p &= \left(1 - \frac{2.29}{j+1}\right)j & \text{para } j = l - \frac{1}{2} \\ \mu_p &= (j + 2.29) & \text{para } j = l + \frac{1}{2} \end{aligned} \right\} (3.13)$$

y para el neutrón:

$$\left. \begin{aligned} \mu_n &= \frac{1.91}{j+1}j & \text{para } j = l - \frac{1}{2} \\ \mu_n &= -1.91 & \text{para } j = l + \frac{1}{2} \end{aligned} \right\} (3.14)$$

Si tenemos un solo nucleón fuera de capa cerrada, las fórmulas (3.13), (3.14) dan directamente el momento magnético del núcleo.

Un gran número de núcleos están descritos suficientemente bien por el modelo de capas; esto es, el campo auto-consistente con simetría esférica resulta ser una aproximación bastante buena en muchos casos. Existe, sin embargo, una clase de núcleos que tienen un espectro de energía que se aparta considerablemente de las predicciones del modelo de capas. Estos se encuentran aproximadamente en las regiones de peso atómico: $150 < A < 190$ y $A > 220$. Las observaciones experimentales demuestran que un modelo apropiado a estos núcleos está dado por un campo auto-consistente que posee un eje de simetría y un plano de simetría perpendicular a él. El concepto de núcleo-no-esférico ha sido extensamente desarrollado por A. Bohr y B. R. Mottelson (1952-1953).

CAPITULO II.
TRANSICIONES ELECTROMAGNETICAS ATOMICAS.

Introducción.

Hasta ahora hemos tratado al átomo como a un sistema de partículas que se encuentran dentro de una serie de estados estacionarios definidos y no tenemos razón para esperar que el sistema pase de un estado a otro. Cuando consideramos a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y a las interacciones de las partículas entre sí, o bien, de las partículas con el campo de radiación con el cual interaccionan debido a que poseen carga o momento magnético, nos encontramos con que existe la posibilidad de que el sistema efectúe transiciones entre los estados que teníamos.

Tenemos entonces que en un átomo, el núcleo y los electrones se encuentran formando un sistema en el cual el núcleo ocupa una posición central bastante bien definida, mientras que los electrones que le rodean ocupan usualmente las posiciones de mínima energía posible dentro de una estructura de capas. A esta situación nos referimos como el estado base del átomo si la energía es en efecto la mínima. El núcleo posee también diferentes estados en los cuales puede encontrarse.

Puede suceder que uno de los electrones atómicos reciba cierta cantidad de energía (por bombardeo electrónico, o de rayos-X por ejemplo) de modo que pase a un nivel con mayor energía o sea expulsado del átomo, dejando en su lugar a una vacancia. Tendremos entonces que el átomo se encontrará en un estado excitado y tenderá a alcanzar su estado base llenando la vacancia con uno de los electrones de las capas con mayor energía a la vez que emite un fotón. El átomo tiende al estado de mínima energía, pero la energía que a perdido el electrón al efectuar la transición anterior, aparece como un fotón salien

te de la misma energía — La energía total se conserva, al igual que el espín total y la paridad total—.

Podemos esquematizar la situación inicial del sistema como sigue:

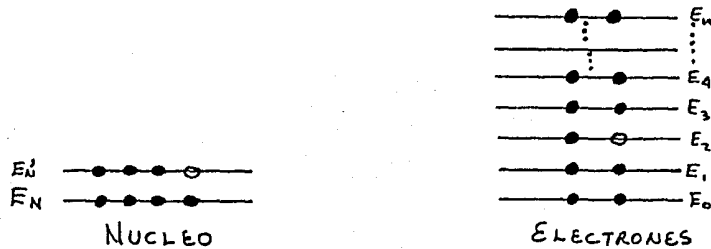


Fig. 1. Un átomo excitado.

En donde las líneas a la izquierda representan al núcleo en su estado base; las líneas a la derecha representan a un estado excitado del sistema electrónico, una línea con dos círculos negros representa un nivel electrónico correspondiente a una capa cerrada (con $2j+1$ electrones); una línea con un círculo blanco indica que existe una vacancia. En la fig. 1 existe una vacancia en el nivel de energía E_2 . Al llenarse esta vacancia puede tener lugar la emisión de rayos-X, lo que representamos como sigue:

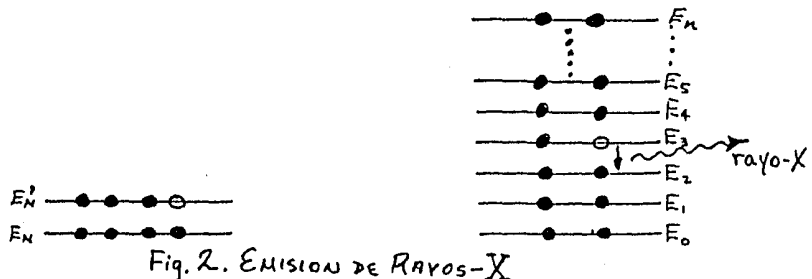


Fig. 2. EMISIÓN DE RAYOS-X

Otro fenómeno asociado con la desexcitación electrónica es el efecto Auger, el cual tiene lugar debido a las interacciones entre parejas de electrones. En este efecto la desexcitación se ve acompañada por la expulsión de uno de los electrones de las capas más altas

dentro del espectro continuo de energía, sin que tenga lugar la emisión de radiación. El esquema correspondiente es el siguiente:

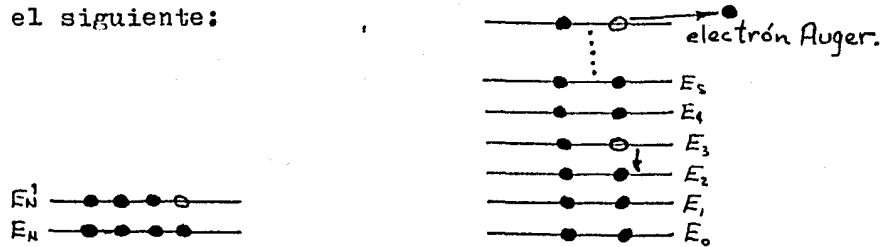


Fig. 3. EFECTO AUGER.

Aquí también se debe satisfacer la conservación de la energía, el espín y la paridad totales del sistema, siendo la diferencia $(E_3 - E_2)$ igual a la suma de la energía de ionización más la cinética del electrón saliente.

También podríamos tener la situación siguiente:



Fig. 4 Un núcleo excitado.

En donde representamos al núcleo en uno de los estados excitados. Es posible que el núcleo lleve a cabo una transición debido a su interacción con el campo electromagnético, emitiendo un rayo γ (radiación electromagnética, pero de mayor energía que los rayos-X):

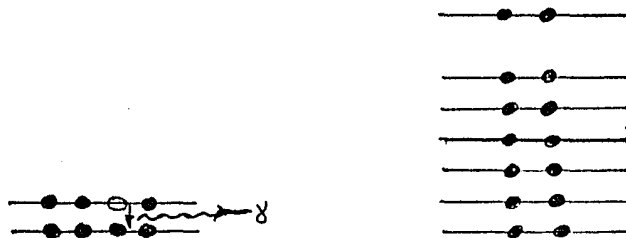


Fig. 5. RADIACION GAMA.

Así como la interacción mutua de los electrones puede dar lugar al efecto Auger en lugar de la emisión de radiación; en vez de radiación γ podemos tener que uno de los electrones atómicos puede ser expulsado debido a la interacción entre los protones y los electrones. Este es el efecto de Conversión Interna, y debe su nombre a que originalmente se pensó que el electrón era expulsado al ser golpeado por los rayos γ del núcleo; como veremos, este efecto sucede aún en ausencia de radiación. La situación esquemática original es la de la fig. 4, la final es:

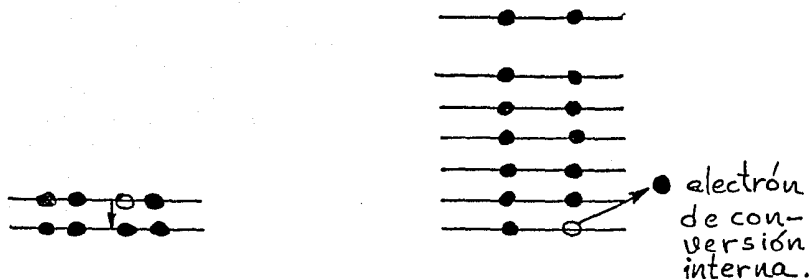


Fig. 6. Conversión Interna.

Existe otro proceso importante que llamaremos Excitación Nuclear por Desexcitación Electrónica (ENDE). Por el momento podemos describir este proceso como sigue: En el proceso de desexcitación electrónica, el electrón emite un fotón. Si el fotón es virtual y se absorbe por un electrón de las capas más altas, siendo este expulsado del átomo, tenemos el efecto Auger. Bajo ciertas condiciones, un fotón emitido virtualmente puede ser absorbido por el núcleo, quedando este último en un estado excitado. Para que este proceso de desexcitación nuclear se pueda realizar, la energía de excitación nuclear E_N , debe ser casi igual a la diferencia: $(E_3 - E_2)$ en la fig. 1; además se deben conservar el espín y la paridad totales. El esquema de la situación inicial es el de la fig. 1; para la situación final tenemos:

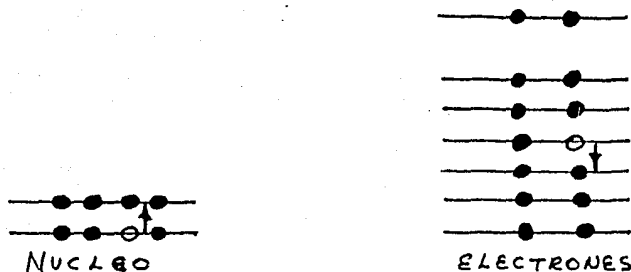


Fig.7.ENDE.

Tenemos entonces que si un átomo es excitado o pierde a uno de sus electrones dejando una vacancia en una de las capas internas, existirán tres procesos de desexcitación en competencia: Los dos primeros son, la emisión de rayos-X y el efecto Auger, en los cuales el exceso de energía es llavado fuera por fotones o electrones. El tercer proceso consiste en la excitación del núcleo, el cual recibe la energía por medio de las interacciones electromagnéticas con los electrones. Este último proceso es más restrictivo, ya que el núcleo no siempre se encuentra en condiciones de aceptar la energía cedida por los electrones.

Del mismo modo, el proceso de conversión interna y de radiación gama se encuentran en competencia cuando el núcleo excitado lleva a cabo una transición electromagnética hacia su estado base.

En este capítulo consideraremos la emisión de rayos-X, y de rayos gama; también a la emisión de electrones Auger y de conversión interna; en el capítulo siguiente consideraremos la probabilidad de que una transición electrónica de lugar a la excitación del núcleo.

PRIMERA PARTE. TRANSICIONES RADIATIVAS.

II.1. TRANSICIONES ELECTRONICAS. (RAYOS-X).

El Atomo en el Campo de Radiación.

Consideraremos ahora la descripción del sistema atómico sumergido en el campo de radiación. Estaremos interesados en la emisión de radiación electromagnética que tiene lugar debido a las transiciones electrónicas en el átomo, de modo que no incluimos a la descripción dinámica del núcleo. El átomo es tratado como un conjunto de N electrones, cada uno moviéndose en un potencial externo producido en parte por el núcleo, y acoplado al campo electromagnético. El Hamiltoniano correspondiente puede ponerse en la forma:

$$\mathcal{H} = H_{\text{rad}} + H_{\text{at}}^{(e)} + H' \quad (1.1)$$

donde H_{rad} es el Hamiltoniano de la radiación libre (ver ec. (2) B.):

$$H_{\text{rad}} = \frac{1}{8\pi} \sum_{\lambda} \int (E_{\lambda}^2 + H_{\lambda}^2) d\tau = \sum_{k, \lambda, l, m} \hbar \omega_k [a_{lm}^{(\lambda)\dagger}(k) a_{lm}^{(\lambda)}(k)] \quad (1.2)$$

El Hamiltoniano de los electrones atómicos es (ec. (1.1), b) Cap. I):

$$H_{\text{at}}^{(e)} = \left[- \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \frac{Ze^2}{|r_i|} \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_{ij}|} \right] \quad (1.3)$$

que nos describe la conducta de los electrones atómicos cuando no existe radiación. H' es el término de acoplamiento de los electrones atómicos con el campo de radiación; es una suma de N términos del tipo

$$H_i' = - \frac{e}{mc} \left[p_i \cdot A(r_i) + \hbar \sigma \cdot \nabla \times A(r_i) \right] \quad (1.4)$$

donde e, m, p_i , representan la carga, la masa y la cantidad de movimiento del i -ésimo electrón, respectivamente; $A(r_i)$ es el valor del potencial vectorial del campo en el punto donde se encuentra ese electrón; σ es la matriz de espín de Pauli.

La descripción de nuestro sistema la hacemos en una representación en la cual el Hamiltoniano no-perturbado:

$$H_0 = H_{\text{rad}} + H_{\text{at}}^{(e)} \quad (1.5)$$

sea diagonal. Para esto, tomamos la representación de ondas esféricas para la radiación (ver ap. A), y definimos a los vectores de la base de H_0 como los eigenvectores simultáneos de $H_{\text{at}}^{(e)}$ y de los operadores (ver ec.(203)) N_λ , que representan al número de fotones con un momento angular, una paridad y energía bien definidos. Un estado puede escribirse entonces como

$$\Psi = |\Psi_e; n, n_2 \dots n_\lambda \dots\rangle \quad (1.6)$$

donde Ψ_e es la función de onda en el espacio de configuración para los N electrones, y satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$H_{\text{at}}^{(e)} \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (1.7)$$

Elementos de Matriz de la Transición.

Consideremos al sistema electrónico en uno de sus estados excitados Ψ_i , con energía E_i . Este sistema puede llevar a cabo transiciones a alguno de los estados $\Psi_\alpha, \Psi_\beta, \dots$; cuyas energías respectivas E_α, E_β, \dots ; sean menores que E_i . La probabilidad de transición está dada por la Regla de Oro de Fermi (ver ec.(7c)):

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) \left| \langle \Psi_i | H' | \Psi_f \rangle \right|^2 \quad (1.8)$$

Si en el estado inicial no hay fotones y consideramos a la expansión multipolar del campo de radiación, tenemos para los elementos de matriz en la ec. anterior (ver Ap. C ecs. (8c), (9c) y (10c)):

$$\langle \Psi_i | H'(A) | \Psi_f \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \langle \Psi_{\nu JM} | H'(A_{lm}^{(\lambda)*}) | \Psi_{\nu' J' M'} \rangle \quad (1.9)$$

donde $\omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar}$

y el elemento de matriz a la derecha de la ec. (1.9) no involucra a los operadores $a_{lm}^{(\lambda)}$, $a_{lm}^{(\lambda)\dagger}$, o a factores dependientes del tiempo.

Reglas de Selección.

Regularmente solo uno o dos multipolos son necesarios para una predicción exacta de los experimentos. En la práctica basta generalmente con la consideración del término dipolar eléctrico, mientras que otros términos se vuelven importantes solo para elementos con valores grandes de Z . En el efecto fotoeléctrico tienen lugar multipolaridades arbitrariamente grandes conforme la energía se hace mayor; sin embargo, para el espectro de emisión usualmente solo contribuyen los dipolos y cuadrupolos eléctricos y magnéticos. Esto lo podremos comprender si observamos que la razón de las magnitudes de dos multipolos sucesivos decae rápidamente si las dimensiones de la fuente son pequeñas en comparación con la longitud de onda de la radiación emitida, siendo esta razón $O(ka)$, donde (a) es una medida del radio atómico, que es típicamente del orden: $a \approx a_0 / Z_{eff}$; con a_0 como el radio de Bohr y Z_{eff} es la carga nuclear efectiva, ($Z_{eff} \sim 1$ para los electrones de valencia, $Z_{eff} \leq Z$ para transiciones con rayos-X). Para estimar (ka) notamos que las energías de transición atómicas son generalmente del orden de:

$$\hbar\omega \leq Z_{eff}^2 \left(\frac{e^2}{a_0} \right) \quad (1.10)$$

y con

$$\frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (1.11)$$

tenemos

$$ka \leq \frac{Z_{\text{eff}}}{137} \quad (1.12)$$

Concluimos así que en los átomos, el término dipolar eléctrico es el más intenso, con los términos cuadrupolar eléctrico y dipolar magnético, más débiles por un factor ($Z_{\text{eff}}/137$).

Si el elemento de matriz dipolar eléctrico se anula, diremos que la transición está prohibida; lo cual significa que si se realiza, será por medio de alguno de los multipolos restantes. Si todas las contribuciones multipolares se anulan, diremos que la transición se encuentra estrictamente prohibida; lo cual significa que si se realiza, será por medio de términos de orden más alto en la perturbación, como es el término $e^2 R^2 / 2mc^2$ que hemos despreciado en la ec. (1.4), y que lleva a la emisión simultánea de dos fotones. Estas son dos primeras reglas de selección para la radiación atómica.

Radiación dipolar eléctrica.

Tomamos entonces únicamente la intervención del término dipolar eléctrico $A_{im}^{(E)}$ en la ec. (1.9), y de las ecs. (1.9c)-(2.1c) tenemos:

$$w = \frac{4}{3\hbar} \left(\frac{\omega}{c}\right)^3 \left| \langle \Psi_{JM} | \mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_q | \Psi_{J'M'} \rangle \right|^2 \quad (1.13)$$

donde: $\mathbf{D} = e \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha}$; $q: +, 0, -$.

Para evaluar los elementos de matriz en la ec. (1.13), es necesario estimar los valores de las funciones de onda de los electrones. Como vimos en la sec.2 del cap.I, una manera de hacer dicha estimación es por medio del método de Hartree-Fock, en el cual se supone que las funciones de onda de todos los electrones son un determinante de Slater formado con las funciones de onda de partícula independiente; a estas últimas se les pide que satisfagan un criterio de auto-consistencia, en el sentido de que sean soluciones de eigenvalores con el potencial y el término de intercambio determinados con esas mismas funciones de onda. Existen otros métodos dentro de la aproximación del campo central auto-consistente; la teoría relativista de Hartree-Fock, con la posibilidad de aceptar efectos de intercambio causados por las diferentes ocupaciones de los estados inicial y final, lleva a un buen acuerdo con las velocidades de emisión experimentales para la capa-K; lo mismo cabe esperar para la capa-L. (ver J. H. Scofield, "Radiative Transitions" (75)); al final de esta sección se reportan estos resultados.

Supongamos que las funciones de onda han sido evaluadas por el método de Hartree-Fock. Como \mathbb{D} es un operador de un cuerpo, tendrá elementos de matriz no-nulos entre estados determinantes diferentes solamente en el caso en que estos dos últimos difieran a lo más por un orbital (ver ecs. (35c-37c)). Los elementos de matriz se reducen a la forma:

$$\langle n l m_l m_s | \mathbb{D} | n' l' m_l' m_s' \rangle \quad (1.14)$$

Aquí hemos supuesto un mismo potencial para los estados inicial y final; como ya se mencionó, no es posible esperar que un solo potencial central aproxime al potencial atómico cuando la configuración electrónica cambie al des

plazarse la vacancia, y el hecho de que las funciones de onda de partícula independiente para los estados inicial y final sean distintos, nos lleva a efectos de intercambio debidos a un cierto traslape de los estados pertenecientes a distintas capas. Despreciando esto último, tenemos para la expresión (1.14) lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle n, l, m, m_s | \mathbb{D} \cdot \epsilon_q | n', l', m', m'_s \rangle &= \delta(m_s, m'_s) \int R_{n,l} R_{n',l'} Y_{l,m}^* \mathbb{D} \cdot \epsilon_q Y_{l',m'} d\tau \\ &= \delta(m_s, m'_s) \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int R_{n,l} R_{n',l'} r^2 dr \int Y_{l,m}^* Y_{1m} Y_{l',m'} d\Omega \end{aligned} \quad (1.15)$$

La parte angular se puede integrar y tenemos que el elemento de matriz en la ec. (1.15) es igual a:

$$\delta(m_s, m'_s) \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{(-1)^{l+l'-l_1-m}}{(2l+1)} (l' m', 1 m | l, m) (l' 0, 1 0 | l, 0) \int R_{n,l} R_{n',l'} r^2 dr \quad \dots (1.16)$$

Los coeficientes de C-G. nos llevan a las reglas de selección para la emisión de radiación dipolar eléctrica:

$$l' - l, \equiv \Delta l = \pm 1; \quad m' - m, = 0, \pm 1; \quad l' + l, : \text{impar.} \quad (1.17)$$

Las reglas de selección para la m están asociadas con el momento angular llevado por la radiación. La luz emitida en la dirección z , circularmente polarizada: $(\epsilon_x \pm i \epsilon_y)$, se lleva ± 1 unidades de momento angular sobre el eje- z ; de aquí que $\Delta m = \pm 1$. La analogía clásica no se puede hacer fácilmente para $\Delta m = 0$, donde tenemos luz polarizada linealmente en la dirección z , y por lo tanto, propagándose sobre el plano $X-Y$. El análogo clásico del estado cuántico en este caso para ciertas j, m , debe considerarse involucrando un promedio sobre todas las orientaciones de la componente de \mathbb{J} sobre

el plano X-Y; este promedio debe de ser nulo por simetría. Desde este punto de vista, las componentes perpendiculares de \mathbf{J} tienen un valor cero en promedio antes y después de la radiación, de modo que no hay cambio en su valor; esto está de acuerdo con el valor nulo del transporte de momento angular en este caso. Sin embargo, el momento angular orbital total en Mecánica Cuántica cambia por $\pm \hbar$, permitiendo a la luz emitida poseer una unidad de momento angular.

Lineas Espectrales en Excitación Natural.

Cuando un átomo no se encuentra perturbado por campos externos, su Hamiltoniano conmuta con el momento angular resultante \mathbf{J} . En consecuencia, un nivel de energía que corresponde a un cierto valor de j , se encuentra, como sabemos, $(2j+1)$ -degenerado, siendo caracterizados cada uno de los diferentes estados por los distintos valores de m . A un conjunto tal de $(2j+1)$ estados lo llamaremos un "nivel". Insistiremos en usar este término aún cuando una perturbación separe a los diferentes estados del conjunto. A la radiación asociada con una posible transición entre los estados pertenecientes a dos niveles la llamaremos una "línea". A la radiación resultante de una transición entre una pareja particular de estados la llamamos la "componente de la línea". Todas las componentes tienen el mismo número de onda, a menos que el átomo se encuentre perturbado por algún campo externo.

La "intensidad de una componente" del estado "a" al estado "b" que observamos es:

$$I(a,b) = N(a) \cdot \hbar \omega \cdot w(a \rightarrow b, k_\epsilon) \quad (1.18)$$

donde $N(a)$ denota al número de átomos con el estado "a" y $w(a \rightarrow b, k_\epsilon)$ es la probabilidad de emisión espontánea para esa transición. Aquí estamos pensando que la densidad

de radiación presente es tan pequeña, que la emisión inducida es despreciable. En la práctica no es fácil determinar $N(a)$; para comparar la teoría con el experimento es por lo tanto conveniente hacer cálculos de las intensidades relativas de grupos relacionados de líneas.

Si las condiciones de excitación atómica son lo suficientemente isotrópicas como para asegurar que el número de átomos es el mismo para los diferentes estados de un nivel, entonces tendremos lo que se llama "excitación natural". Si las condiciones no se satisfacen, podríamos tener que algunos de los subestados son mayormente poblados. Supondremos una excitación natural a menos que se afirme lo contrario.

La "intensidad de una línea" es igual a la suma de las intensidades de sus componentes. En excitación natural, para una línea del nivel A al nivel B, tenemos por lo tanto:

$$I(A,B) = N(a) \hbar \omega \left(\frac{4}{3\hbar} \right) \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \sum_{a,b} \left| \langle a | \mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_+ | b \rangle \right|^2 \quad (1.19)$$

para la radiación del dipolo eléctrico. A la suma de los cuadrados de los elementos de matriz nos referiremos como la fuerza de la línea, y lo denotamos por $S(A,B)$. Igualmente, a la cantidad $\left| \langle a | \mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_+ | b \rangle \right|^2$ la llamamos lo intenso de la componente a,b: $S(a,b)$.

La intensidad de una cierta línea es por lo tanto, proporcional al número de átomos en cualquiera de los estados iniciales, a ω^4 , y a $S(A,B)$. Esta última cantidad debe satisfacer las siguientes cualidades: Primero, debido a que la excitación es isotrópica y no existe un campo externo, esperamos que la radiación tenga la misma intensidad en todas direcciones y no esté polarizada. Segundo, si las condiciones iniciales son isotrópicas, esperamos que esta situación física permanezca así durante el proceso de radiación. Esto significa que la vida media

de cada estado de un nivel A debe ser la misma.

Reglas de Selección para Muchos Electrones.

Hemos supuesto en la ec. (1.14) que las funciones de onda electrónicas son determinantes de Slater; como sabemos, esto no es cierto en general. Consideremos al esquema de acoplamiento LS; debido a que $[D, S] = 0$, D no puede conectar a estados con diferente S ó M_S ; de aquí que las transiciones entre estados con diferente multiplicidad se encuentran prohibidas y tenemos que $\Delta M_S = 0$. En este caso los elementos de matriz del operador D se anulan a menos que $\Delta L = 0, \pm 1$; $\Delta J = 0, \pm 1$; y la polarización de la radiación sigue las mismas reglas de selección del espectro de un solo electrón: $M_J = M'_J$ para la componente en z, y $M'_J = M_J \pm 1$ para las componentes respectivamente.

En resumen, estas son las reglas de selección para el acoplamiento LS:

1. La paridad cambia.
2. La configuración debe cambiar por $\Delta \sum l_i = \pm 1$
3. La multiplicidad no cambia: $\Delta S = 0$
4. $\Delta M_S = 0$
5. $\Delta L = 0 \pm 1$
6. $\Delta M_L = 0$
7. $\Delta J = 0, \pm 1$
8. $J=0 \rightarrow J=0$: prohibida estrictamente.
9. $\Delta M_J = 0, \pm 1$

Las reglas 1, 7, 8, son válidas para cualquier esquema de acoplamiento. La segunda se cumple si tiene sentido hablar de configuración. Las demás son válidas solamente para el esquema de acoplamiento LS. Para el acoplamiento jj, solamente se cumplen las reglas 1, 2, 7, 8, 9.

Transiciones con Multipolaridad más Elevada.

Si una transición se encuentra prohibida, es decir, si los elementos de matriz dipolares eléctricos (ec. (1.13)) se anulan, debemos considerar a otros términos de la expansión multipolar del campo. Consideremos ahora solamente al término dipolar magnético $A_{1M}^{(M)*}$ dentro de los elementos de matriz para la emisión. En este caso calculamos a la probabilidad de transición por medio de las ecuaciones (12.C) y (33.C), obteniendo:

$$w(M1) = \frac{4}{3\hbar} \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \left| \langle \Psi_{lJM} | M \cdot \mathbf{e}_q^* | \Psi_{l'J'M'} \rangle \right|^2 \quad (1.20)$$

donde

$$\begin{aligned} M &= \frac{e}{2mc} (L + \hbar\sigma) = \frac{e}{2mc} (L + 2S) \\ &= \frac{e}{2mc} (J + S) \end{aligned} \quad (1.21)$$

es el momento dipolar magnético de todos los electrones.

Como $[J, H_{at}^{(0)}] = 0$, el elemento de matriz en se reduce a $\langle \Psi_{lJM} | S \cdot \mathbf{e}_q^* | \Psi_{l'J'M'} \rangle$, que se anula para acoplamiento puramente LS; de modo que sin interacción espín-órbita no tendremos radiación dipolar magnética. Las reglas de selección para la radiación dipolar magnética son:

1. La paridad debe permanecer igual.
2. $\Delta J = 0, \pm 1$
3. $\Delta M = 0, \pm 1$
4. $J = 0 \rightarrow J = 0$: prohibida estrictamente.
5. $\Delta l_i = \Delta n_i = 0$ (i corre sobre todos los orbitales)

Esta última regla se debe a que la interacción espín-órbita rompe el acoplamiento LS, mezclando estados con diferente L y S pero en general de la misma configuración; y

la radiación dipolar magnética tiene lugar, pero es bastante débil, ya que las diferencias en la energía entre dos estados tales, pertenecientes a la misma configuración, es bastante pequeña.

Consideremos ahora la emisión de radiación cuadrupolar eléctrica. El término responsable de estas transiciones es el momento $\mathcal{A}_{2\mu}^{(E)}$ de la expansión multipolar del campo; y de la ec. (31C) tenemos la siguiente expresión para la probabilidad de emisión cuadrupolar eléctrica:

$$W(E2) = \frac{\pi}{3\hbar} \left(\frac{\omega}{c}\right)^5 \left| \langle \Psi_{l'm} | e \sum_{\alpha} r_{\alpha}^2 Y_{2\mu}^{*}(\theta_{\alpha}, \phi_{\alpha}) | \Psi_{l'm'} \rangle \right|^2 \quad (1.22)$$

donde reconocemos a los elementos de matriz como los momentos cuadrupolares eléctricos de los electrones. El término debido al espín se ha despreciado por ser más pequeño. Las reglas de selección en este caso, para átomos con un solo electrón fuera de capa cerrada, son $\Delta l = 0, \pm 2$; $\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$; $\Delta S = 0$; $\Delta M_s = 0$; $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$; $l = 0 \rightarrow 0$ prohibida; $J = 0 \rightarrow 0$ prohibida y la paridad se conserva.

Para átomos con muchos electrones se puede demostrar que las reglas son las mismas con la sustitución de \mathcal{L} por \mathcal{L} y la modificación: $\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$. Además se puede demostrar que la transición $L: 0 \rightarrow 0$ aún se encuentra prohibida en el acoplamiento LS. También se puede demostrar que $L: 0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0$, y $J: 0 \rightarrow 0$ y $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$ están prohibidas.

Velocidades de Decaimiento Radiativo para las Capas K y L.

Existen, como se ha mencionado, diversos métodos de aproximación de las funciones de onda del átomo multielectrónico; el método de Hartree-Fock es el método estándar; sin embargo, desde el punto de vista computacional, la inclusión correcta de los términos de intercam

bio es muy costosa. Debido a esto, con mucha frecuencia se ha usado una aproximación en la que esos términos son remplazados por un potencial multiplicado por la función de onda (aproximación de Hartree-Slater). Versiones tanto relativistas como no-relativistas de este método han sido usadas ampliamente para calcular velocidades de emisión de rayos-X. Estos cálculos generalmente se basan en la hipótesis de que los electrones experimentan con el mismo potencial en sus estados inicial y final.

La formulación de Hartree-Fock se ha usado en numerosos tratamientos de las velocidades de transición para electrones de las capas más externas, pero solamente se ha usado en unos cuantos casos en los que intervienen los electrones de las capas internas. Las funciones de onda de partícula-independiente para los estados inicial y final de un ión difieren entre sí y de aquellas en el átomo neutro. Se han hecho algunos esfuerzos por considerar los efectos introducidos por esta diferencia entre el estado inicial y el final; en particular, Scofield (1974) ha tomado el caso en que se tengan vacancias en la capa-K, usando cálculos Hartree-Fock relativistas para un conjunto de elementos que cubren toda la Tabla Periódica.

Existen tablas (Scofield, 1975) para las velocidades de decaimiento radiativo total calculadas para una vacancia en la capa-K, así como para las razones de la intensidad de distintas componentes (ver tablas I, II). Las velocidades de transición por electrones de la capa-P, fueron calculadas usando un potencial de Hartree-Fock con la consideración de las distintas ocupaciones en los estados inicial y final. Las otras velocidades fueron calculadas usando un potencial de Hartree-Slater, considerando las ocupaciones del átomo neutro. Los valores enlistados para la velocidad total y las componentes $K\alpha$, $K\beta$, $K\alpha'$, $K\beta'$ incluyen las velocidades calculadas para excitaciones múltiples. También se han calculado las

TABLA I.

Calculated Values of Total Radiative K -Vacancy Decay Rate and Ratios of x-Ray Components

Z	Total (eV/Å)	$K\beta/K\alpha$	$K\alpha_2/K\alpha_1$	$K\beta_2/K\beta_1$	$K\beta_1'/K\alpha_1$	$K\beta_2'/K\alpha_1$
14	0.0238	0.0201	0.5037	0.5052	0.0143	
16	0.0161	0.0659	0.5053	0.5017	0.0992	
18	0.0799	0.1088	0.5049	0.5011	0.1638	
20	0.1312	0.1315	0.5061	0.5043	0.1982	
22	0.2020	0.1355	0.5076	0.5054	0.2043	
24	0.2970	0.1337	0.5091	0.5070	0.2018	
26	0.421	0.1391	0.5107	0.5079	0.2102	
28	0.586	0.1401	0.5121	0.5093	0.2119	
30	0.790	0.1410	0.5142	0.5108	0.2135	
32	1.051	0.1501	0.5149	0.5105	0.2229	0.0049
34	1.375	0.1624	0.5158	0.5116	0.2331	0.0131
36	1.766	0.1727	0.5186	0.5111	0.2381	0.0240
38	2.239	0.1831	0.5205	0.5115	0.2463	0.0320
40	2.800	0.1913	0.5225	0.5120	0.2543	0.0370
42	3.46	0.1981	0.5247	0.5125	0.2617	0.0403
44	4.23	0.2045	0.5269	0.5130	0.2684	0.0439
46	5.12	0.2100	0.5293	0.5135	0.2745	0.0466
48	6.14	0.2161	0.5317	0.5142	0.2802	0.0507
50	7.32	0.2230	0.5343	0.5148	0.2857	0.0561
52	8.67	0.2299	0.5370	0.5153	0.2906	0.0628
54	10.19	0.2368	0.5398	0.5157	0.2951	0.0695
56	11.91	0.2433	0.5428	0.5160	0.2997	0.0756
58	13.81	0.2470	0.5459	0.5164	0.3042	0.0777
60	15.93	0.2504	0.5491	0.5167	0.3086	0.0792
62	18.29	0.2534	0.5524	0.5169	0.3127	0.0807
64	20.89	0.2570	0.5559	0.5171	0.3166	0.0832
66	23.75	0.2588	0.5596	0.5173	0.3203	0.0832
68	26.88	0.2612	0.5631	0.5174	0.3240	0.0843
70	30.32	0.2634	0.5673	0.5175	0.3274	0.0853
72	34.09	0.2666	0.5714	0.5176	0.3307	0.0853
74	38.20	0.2698	0.5757	0.5176	0.3338	0.0913
76	42.66	0.2728	0.5802	0.5175	0.3369	0.0943
78	47.50	0.2758	0.5850	0.5173	0.3399	0.0972
80	52.72	0.2788	0.5899	0.5170	0.3430	0.1001
82	58.37	0.2821	0.5950	0.5165	0.3459	0.1043
84	64.46	0.2855	0.6004	0.5161	0.3489	0.1084
86	71.00	0.2890	0.6061	0.5154	0.3518	0.1126
88	78.00	0.2923	0.6120	0.5146	0.3547	0.1167
90	85.47	0.2952	0.6182	0.5134	0.3577	0.1205
92	93.41	0.2975	0.6247	0.5122	0.3606	0.1233
94	101.89	0.2996	0.6315	0.5107	0.3636	0.1259
96	110.81	0.3019	0.6387	0.5090	0.3665	0.1299
98	120.29	0.3037	0.6462	0.5070	0.3695	0.1315

TABLA II.

Calculated Values of the Ratios of K-Shell Emission Rates

Z	$(K-L_{II})/$ $K\alpha_1$	$K\beta_1/$ $K\alpha_1$	$K\beta_2/$ $K\beta_1$	$K\beta_3/$ $K\beta_1$	$K\beta_4/$ $K\beta_1$	$(K-O_{2,3})/$ $K\alpha_1$	$(K-P_{2,3})/$ $K\alpha_1$
14		0.0279					
16		0.0619					
18		0.1025					
20		0.1232					
22		0.1304		0.0001			
24		0.1289		0.0003			
26		0.1348		0.0005			
28		0.1361		0.0009			
30		0.1372		0.0015			
32		0.1436	0.0330	0.0020			
34		0.1504	0.0834	0.0026			
36		0.1537	0.1493	0.0033			
38	0.00001	0.1592	0.1938	0.0040			
40	0.00001	0.1646	0.2164	0.0047	0.0001		
42	0.00001	0.1695	0.2281	0.0055	0.0002		
44	0.00001	0.1740	0.2423	0.0064	0.0004		
46	0.00002	0.1781	0.2510	0.0072	0.0007		
48	0.00002	0.1819	0.2668	0.0082	0.0010		
50	0.00003	0.1854	0.2814	0.0092	0.0013	0.0015	
52	0.00004	0.1885	0.2991	0.0102	0.0017	0.0017	
54	0.00005	0.1914	0.3104	0.0113	0.0021	0.0025	
56	0.00007	0.1943	0.3239	0.0124	0.0025	0.0100	
58	0.00009	0.1969	0.3305	0.0136	0.0029	0.0100	
60	0.00011	0.1994	0.3355	0.0148	0.0032	0.0098	
62	0.00014	0.2019	0.3393	0.0161	0.0035	0.0097	
64	0.00017	0.2044	0.3440	0.0174	0.0039	0.0104	
66	0.00021	0.2066	0.3466	0.0187	0.0042	0.0096	
68	0.00026	0.2087	0.3467	0.0201	0.0046	0.0094	
70	0.00031	0.2108	0.3485	0.0215	0.0049	0.0091	
72	0.00038	0.2130	0.3526	0.0228	0.0054	0.0105	
74	0.00046	0.2150	0.3574	0.0242	0.0058	0.0116	
76	0.00056	0.2169	0.3624	0.0256	0.0063	0.0127	
78	0.00067	0.2188	0.3677	0.0270	0.0069	0.0135	
80	0.00081	0.2206	0.3728	0.0285	0.0074	0.0147	
82	0.00097	0.2224	0.3779	0.0299	0.0079	0.0160	0.0005
84	0.00116	0.2241	0.3822	0.0314	0.0085	0.0174	0.0014
86	0.00139	0.2258	0.3866	0.0328	0.0091	0.0186	0.0026
88	0.00165	0.2277	0.3908	0.0342	0.0097	0.0198	0.0035
90	0.00197	0.2295	0.3951	0.0356	0.0103	0.0209	0.0044
92	0.00234	0.2312	0.3992	0.0370	0.0109	0.0219	0.0040
94	0.00278	0.2331	0.4029	0.0384	0.0115	0.0229	0.0040
96	0.00330	0.2349	0.4063	0.0398	0.0121	0.0238	0.0043
98	0.00391	0.2368	0.4095	0.0411	0.0127	0.0246	0.0042

velocidades de decaimiento radiativo total (Scofield, 1975. y tabla III); estas fueron calculadas suponiendo un solo potencial para los estados inicial y final y con el modelo de Hartree-Slater.

II.2. TRANSICIONES NUCLEARES. (RAYOS GAMA).

Introducción.

Estaremos interesados en la emisión de radiación electromagnética que acompaña a una transición de un núcleo a partir de un estado inicial $|i\rangle$, a un estado final $|f\rangle$. Este proceso de emisión recibe el nombre de "radiación gama". Debido a la incertidumbre con que se conocen las fuerzas nucleares, no es posible dar una descripción completa de este proceso; sin embargo, los resultados que se han obtenido son de una gran utilidad. Así podemos notar que una notable propiedad de los estados nucleares, como lo es el isomerismo nuclear— en el que el tiempo de vida de un estado se puede volver muy grande si todas las transiciones a los estados con menor energía involucran pequeños cambios de esta y cambios grandes en el momento angular— puede entenderse en términos de la teoría. Por supuesto, también pueden suceder otros modos de decaimiento, como la conversión interna, o el decaimiento β , dependiendo de cada estado particular.

Como en el caso electrónico, encontramos conveniente describir al campo de radiación en términos de una expansión multipolar, clasificando a la radiación por órdenes multipolares l (ver Ap.A) de acuerdo con el momento angular l (en unidades de \hbar) que es llevado por cada fotón. Para cada orden multipolar tenemos de una manera natural a dos clases de radiación: una eléctrica 2^l -polar: E_l y otra magnética 2^l -polar: M_l , las cuales difieren en paridad.

La probabilidad de transición para un estado nuclear excitado, por medio de radiación γ , depende del orden multipolar, la energía de los rayos γ , y las funciones de onda de los estados nucleares involucrados en la transición. Sin embargo, como sabemos, la probabilidad de decaimiento γ debe decrecer rápidamente al aumentar el orden multipolar, sin que importen los detalles de las funciones de onda nucleares; sujeto esto, por supuesto, a reglas de selección y también al requisito de que la longitud de onda de la radiación sea grande comparada con el radio nuclear.

Por otra parte, la dependencia que existe entre la probabilidad de transición por decaimiento γ y las funciones de onda, nos permite esperar encontrar una información significativa sobre dichas funciones (calculada con algún modelo nuclear específico) si comparamos los resultados experimentales con los cálculos de las probabilidades de emisión γ .

Probabilidades de Transición para un solo Protón.

Nos restringiremos a transiciones entre estados nucleares próximos al estado base con diferencias en la energía menores a unos cuantos MeV. La longitud de onda ($\lambda = \frac{c}{\nu}$) de la luz es $\sim 1.97 \times 10^{-8}$ cm. para 1 MeV, que siempre es grande comparada con las dimensiones nucleares.

Para obtener una estimación del valor real de los momentos multipolares debemos adoptar algún modelo nuclear. Consideraremos primero la emisión espontánea de radiación por la transición de un solo protón no-relativista que se mueve dentro de un potencial debido a las demás partículas del núcleo. Supondremos que el potencial es central, independiente de la velocidad de los nucleones y del tiempo. El Hamiltoniano total del núcleo den-

tro del campo de radiación puede escribirse en el caso no-relativista como:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \left[\frac{(\mathbf{p}_{\alpha} - \frac{e_{\alpha}}{c} \mathbf{A})^2}{2M_{\alpha}} + V(\mathbf{r}_{\alpha}) - \mu_{\alpha} \frac{e\hbar}{2M_{\alpha}c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A} \right] + H_{\text{rad}} \quad \dots (2.1)$$

donde H_{rad} es el Hamiltoniano de la radiación libre (2.1B):

$$H_{\text{rad}} = \sum_{k, \lambda, l, m} \left[a_{lm}^{(\lambda)\dagger}(k) a_{lm}^{(\lambda)}(k) \right] \hbar \omega \quad (2.2)$$

M_{α} denota a la masa del nucleón, $\mu_{\alpha} \frac{e\hbar}{2M_{\alpha}c}$ su momento magnético, $\boldsymbol{\sigma}$ es la matriz de espín de Pauli, \mathbf{p} es el operador de momento.

La interacción entre el núcleo y el campo está dada por

$$H'(\mathbf{A}) = \sum_{\alpha} \left[-\frac{e_{\alpha}}{M_{\alpha}c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mu_{\alpha} \frac{e\hbar}{2M_{\alpha}c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A} \right] \quad (2.3)$$

La probabilidad de emisión espontánea está dada por

$$\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E) \left| \langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (2.4)$$

con

$$\Psi_f = | \Psi_{\nu I' M'} ; 0 \dots 1_{\lambda} \dots 0 \rangle \quad (2.5)$$

$$\Psi_i = | \Psi_{\nu I M} ; 0 \dots 0 \dots 0 \rangle \quad (2.6)$$

I denota al momento angular total del núcleo, M a su componente en z .

Como una consecuencia de las ecs. (8C) y (9C), el elemento de matriz en la ec. (2.4) satisface la siguiente relación:

$$\langle \Psi_i | H'(\mathbf{A}) | \Psi_f \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \langle \Psi_{\nu I' M'} | H'(\mathbf{A}_{lm}^{(\lambda)*}) | \Psi_{\nu I M} \rangle \quad (2.7)$$

donde $\omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar}$.

Consideremos ahora a los operadores multipolares $M_{lm}^{(\lambda)}$ y a las ecs. (19c)-(23c) para describir a la probabilidad de emisión espontánea como:

$$w_{i \rightarrow f}^{(\lambda l m)} = \frac{8\pi(l+1)}{\ell[(2l+1)!!]^2} \frac{k^{2l+1}}{\hbar} \left| \langle \Psi_{Y'I'M'} | M_{lm}^{(\lambda)} | \Psi_{YIM} \rangle \right|^2 \quad (2.8)$$

y para el elemento de matriz tenemos

$$\langle \Psi_{Y'I'M'} | M_{lm}^{(\lambda)} | \Psi_{YIM} \rangle = (I M \ell m | I' M') \langle I' || M_{\ell}^{(\lambda)} || I \rangle \quad \dots (2.9)$$

donde se aplicó el teorema de Wigner-Eckart, y el último factor es el llamado elemento de matriz reducido, que es independiente de los números cuánticos de proyección. La conservación del momento angular está implicada por el coeficiente de C-G., el cual se anula a menos que:

$$\Delta(I \ell I') \quad y \quad M' = M + m \quad (2.10)$$

De la conservación de la paridad tenemos que:

$$\Delta\pi \equiv \frac{\pi_i}{\pi_f} = \begin{cases} (-)^{\ell} & \text{para radiación } E\ell \\ (-)^{\ell-1} & \text{para radiación } M\ell \end{cases} \quad (2.11)$$

$\Delta\pi = +1$ significa que los estados inicial y final tienen la misma paridad; mientras que $\Delta\pi = -1$ significa que la paridad ha cambiado.

Para el caso de un protón que se mueve en un potencial central independiente de la velocidad, existe una regla de selección adicional:

$$|l_i - l_f| \leq \ell \leq l_i + l_f \quad (2.12)$$

Como sabemos, las transiciones por un solo protón tendrán lugar esencialmente por medio del orden multipolar más bajo posible. Los estados que pueden decaer únicamente emitiendo rayos γ de baja energía y con órdenes multipolares altos, tendrán tiempos de vida largos, siendo fáciles de observar. Estos son los llamados estados isoméricos, que tienen lugar preferentemente cerca de las configuraciones de capa cerrada. La existencia de estas islas de isómeros fué una de las observaciones que apoyaron el desarrollo del modelo de capas. De acuerdo con modelos nucleares más detallados, podríamos esperar encontrar algunas transiciones que involucren una considerable mezcla de los dos órdenes multipolares más bajos permitidos; esto es cierto en algunos casos, especialmente con mezclas de M1- E2.

En la tabla siguiente (Tabla I), enlistamos las multipolaridades que se esperan en la emisión γ por una transición entre dos estados con paridades y momentos angulares bien definidos. Se escriben los dos órdenes multipolares más bajos; el que se encuentra entre paréntesis, usualmente no es importante.

TABLA I.

POSIBLES MULTIPOLARIDADES PARA RADIACION γ A.M.A.

LOS DOS ORDENES MULTIPOLARES MAS BAJOS. $l \leq I+I'$

Cambio en la paridad ($\Delta\pi$)	Cambio en el momento angular $ I-I' $				
	0 o 1	2	3	4	5
Sí cambia (-)	E1 (M2)	M2 (E3)	E3 (M4)	M4 (E5)	E5 (M6)
No cambia (+)	M1 (E2)	E2 (M3)	M3 (E4)	E4 (M5)	M5 (E6)

Considerando ahora explícitamente a las funciones de onda de los estados inicial y final, tenemos que los elementos de matriz en la ec. (2.8) están evaluados en términos de eigenfunciones basadas en la aproximación del campo central y Ψ_{i, l, m_i} , Ψ_{f, l', m_f} pueden ser escritas como un producto de a) una función radial $R_{n, l}$, $R_{n', l'}$, la cual depende de los detalles del potencial, y b) una función de dos componentes $\Theta_{l, m_i}^{m_i}$, $\Theta_{l', m_f}^{m_f}$, la cual contiene a las variables angulares y de espín, pero no depende de los detalles del potencial. Tenemos así que de las ecs. (40c) - (45c) la velocidad de transición $E\ell$ para un solo protón es

$$w_{i \rightarrow f}(E\ell) = \frac{(2l+1)}{2[(2l+1)!!]^2} \omega \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{\omega a}{c} \right)^{2l} \left[\int_0^a R_{n', l} \left(\frac{r}{a} \right)^l R_{n, l} r^2 dr \right] S(j_i, l, j_f) \dots (2.13)$$

donde la a denota al radio nuclear. El factor S puede encontrarse tabulado (Moszkowski, 1965, par. 879), y es del orden de la unidad. Igualmente, la velocidad de transición $M\ell$ para un solo protón es:

$$w_{i \rightarrow f}(M\ell) = \frac{(2l+1)}{2[(2l+1)!!]^2} \omega \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{\omega a}{c} \right)^{2l} \frac{\hbar^2}{(m c a)^2} \left[\mu_{p\ell} - \frac{l}{l+1} \right] \left[\int_0^a R_{n', l} \left(\frac{r}{a} \right)^{l-1} R_{n, l} r^2 dr \right] S \dots (2.14)$$

Unidades de Weisskopf.

Podemos dar un valor aproximado de las velocidades de transición en (2.13) y (2.14) si hacemos la hipótesis de Weisskopf, tomando la imagen más simple posible de las funciones de onda nucleares, consistente en la consideración de las funciones de onda radiales R para los estados inicial y final, como constantes en todo el interior del núcleo ($r < a$) y nulas fuera de él ($r > a$). A estas estimaciones se les conoce como "unidades de Weisskopf"

y las correcciones a estas unidades, basadas en las ecs. son del orden de la unidad. Basados en este modelo de densidad constante, los valores de las integrales radiales están dados como:

$$\int_0^{\infty} R_{n,l} \left(\frac{r}{a}\right)^l R_{n,l} r^2 dr = \frac{3}{3+l} \quad (2.15)$$

Con la evaluación anterior podemos reescribir a las probabilidades de transición por decaimiento gama para un solo protón como:

$$\begin{aligned} w(E\ell) &= \frac{2(l+1)}{l[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{3}{l+3}\right)^2 \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{\omega a}{c}\right)^{2l} \omega \approx \\ & \frac{4.4(l+1)}{l[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{3}{l+3}\right)^2 \left(\frac{\hbar\omega}{197\text{MeV}}\right)^{2l+1} \left(\frac{a}{10^{-13}\text{cm}}\right)^{2l} \times \\ & \times S(j_i, l, j_f) \times 10^{21} \text{seg}^{-1} \end{aligned} \quad (2.16)$$

para el caso eléctrico; y para el caso magnético:

$$\begin{aligned} w(M\ell) &= \frac{0.19(l+1)}{l[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{3}{l+2}\right)^2 \left(\mu_{p,l} - \frac{l}{l+1}\right)^2 \left(\frac{\hbar\omega}{197\text{MeV}}\right)^{2l+1} \\ & \times \left(\frac{a}{10^{-13}\text{cm}}\right)^{2l-2} S(j_i, l, j_f) \times 10^{21} \text{seg}^{-1} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Se han calculado algunos valores numéricos que reproducimos en la Tabla II.

TABLA II.

Valores de las probabilidades de transición de un solo protón. ($a = 1.2 \times 10^{-13} \text{ A}^{1/3} \text{ cm}$; $\mu_p = 2.79$, $E_\gamma = \hbar\omega$ en MeV).

ORDEN MULTIPOLAR	ELECTRICO	MAGNETICO
1	$1.0 \times 10^{14} \text{ A}^{2/3} E_\gamma^3 \text{ S}$	$2.9 \times 10^{13} E_\gamma^3 \text{ S}$
2	$7.4 \times 10^7 \text{ A}^{4/3} E_\gamma^5 \text{ S}$	$8.4 \times 10^7 \text{ A}^{4/3} E_\gamma^5 \text{ S}$
3	$3.4 \times 10^1 \text{ A}^2 E_\gamma^7 \text{ S}$	$8.7 \times 10^1 \text{ A}^{4/3} E_\gamma^7 \text{ S}$
4	$1.1 \times 10^{-5} \text{ A}^{8/3} E_\gamma^9 \text{ S}$	$4.8 \times 10^{-5} \text{ A}^2 E_\gamma^9 \text{ S}$
5	$2.5 \times 10^{-12} \text{ A}^{10/3} E_\gamma^{11} \text{ S}$	$1.7 \times 10^{-11} \text{ A}^{8/3} E_\gamma^{11} \text{ S}$

Transiciones por un solo neutrón.

Debido a que los neutrones no poseen carga eléctrica, no esperamos que su movimiento orbital de lugar a una interacción con el campo electromagnético; esto es, si pensamos ahora en las transiciones debidas a un solo neutrón, cabe esperar que los términos de acoplamiento $\left(\frac{e_N}{M_N} \mathbf{p}_N \cdot \mathbf{A}\right)$ en la ec. (2.3) sean cero, debido a que $e_N = 0$ para los neutrones. Esto es correcto; sin embargo, en la transición de un nucleón, la cantidad de movimiento total se debe conservar; es así que al ser emitido un fotón el núcleo retrocede, modificándose los valores de los $\langle f | \mathcal{M}_{fi}^{(\epsilon)} | i \rangle$. Es posible tomar en cuenta a estas modificaciones si asignamos una "carga efectiva" a los protones y otra a los neutrones (ver ec. (3.3) cap.1). Para el momento dipolar eléctrico se puede suponer que cada protón tiene una carga efectiva igual a $(N/A)e$, y que cada neutrón una igual a $(-Z/A)e$. Los neutrones no radían en realidad, son los protones los que lo hacen al

retroceder junto con el núcleo. Para multipolaridades más altas las cargas efectivas son:

$$\text{CARGA EFECTIVA DEL PROTON: } e \left[\left(1 - \frac{1}{A}\right)^l + (-1)^l \frac{Z-1}{A^l} \right]$$

$$\text{CARGA EFECTIVA DEL NEUTRON: } e Z \left[-\frac{1}{A} \right]^l$$

Es posible obtener resultados similares para las partes orbitales de los multipolos magnéticos. En los dos casos vemos que el efecto es importante solo en elementos ligeros para los multipolos de orden más bajo. Similarmente, es necesario introducir un momento magnético efectivo, que dependerá también de la naturaleza de la partícula y del orden multipolar. La interacción entre el campo electromagnético y el espín del neutrón contribuye al elemento de matriz del multipolo eléctrico con una pequeña cantidad que es del mismo orden de magnitud que el elemento de matriz del multipolo magnético con un orden una unidad más alto.

Probabilidades de Transición para Muchas Partículas.

Como mencionamos antes, la dependencia que existe entre las funciones de onda y las probabilidades de transición por radiación γ , nos permite probar experimentalmente la validez del modelo nuclear usado para evaluar dichas funciones de onda. En el modelo simple que hemos usado, hemos tenido que incluir el efecto del recule nuclear para explicar la radiación por transiciones de un neutrón. En general, esta introducción de una carga efectiva no es suficiente para predecir los valores de las probabilidades de emisión γ ; esto es particularmente cierto para la emisión de radiación E2, en la cual las partículas exhiben una conducta colectiva, dando por resultado que las probabilidades de transición se vean au-

mentadas por un factor entre 10 y 100, principalmente en las regiones de núcleos deformados, que se encuentran lejos de capa cerrada. Los estados nucleares son bastante más complicados que lo que hemos supuesto anteriormente.

Si nos restringimos al modelo de partícula independiente, la hipótesis más simple consiste en suponer que la transición se debe a una sola partícula, entre dos estados del potencial esféricamente simétrico del modelo de capas. El cálculo es exactamente el que nos llevó a las ecs. (2.13) y (2.14), solo que ahora debemos dar un valor de las funciones de onda radiales, que resultan ser las funciones esféricas de Bessel con un cero en la superficie nuclear y un número de nodos apropiado a la capa que se esté considerando.

Como una refinación más, podemos pensar no solo en las funciones de onda de una sola de las partículas; sino que, aún dentro del modelo de partícula independiente, podemos tomar a las funciones de onda nucleares como combinaciones lineales apropiadas de productos de funciones de onda de una sola partícula: $\Psi_{\nu I M}$, como las denotamos antes

Como vimos: $|I_i - I_j| \leq l$; $|j_i - j_j| \leq l$; ;
 y no pueden ocurrir transiciones entre estados que difieren en el estado de más de una partícula: ya sea por más de una partícula saltando; o bien, por una sola saltando y las demás reacomodándose. Sin embargo, esto puede ser violado si las funciones de onda contienen alguna mezcla de otras configuraciones. Otra forma en la que interviene la presencia de las otras partículas, es disminuyendo las probabilidades de transición en algunos casos. Así tenemos que las probabilidades de transición entre estados con capas parcialmente ocupadas son generalmente menores a los cálculos de velocidades de transición con una sola partícula. Esta disminución se debe a que una fracción de los subestados del momento angular que esta-

rían disponibles a la transición para el caso de una sola partícula, se encuentran ya ocupados por otras partículas.

En general, las probabilidades de transición con una sola partícula deben ser multiplicadas por uno de los factores siguientes cuando tenemos el número de pares p_i , p_f , inicial y finalmente; y con 0 ó 1 partículas no-apareadas:

$$\frac{j_i + \frac{1}{2} - p_i}{j_i + \frac{1}{2}} \cdot \frac{j_f + \frac{1}{2} - p_f}{j_f + \frac{1}{2}}$$

PARA TRANSICIONES CON UN NUMERO IMPAR DE PARTICULAS.

$$\frac{p_i}{j_i + \frac{1}{2}} \frac{p_f}{j_f + \frac{1}{2}}$$

PARA TRANSICIONES CON UN NUMERO PAR DE PARTICULAS.

Y tenemos que la probabilidad de transición disminuye debido a la presencia de las partículas apareadas.

Generalmente las transiciones de mayor interés en física nuclear son aquellas en las que existe, ya sea un gran aumento, o bien, un gran retardo con respecto a las velocidades de transición de Weisskopf. Un gran aumento puede ser indicio de una mezcla de configuraciones, que en el caso extremo nos llevan a estados colectivos rotacionales o vibracionales. Por otro lado, un gran retardo puede señalar a una regla de selección aproximada, producto de alguna simetría o de la dinámica del sistema.

SEGUNDA PARTE. TRANSICIONES NO-RADIATIVAS.

II.3. TRANSICIONES ELECTRONICAS. EFECTO AUGER.

1. Introducción. Clasificación de los Electrones Auger.

Una vacancia interna en alguna de las capas atómicas puede decaer no solo por la emisión de fotones, sino también por medio de la expulsión simultanea de un electrón de las capas más externas en lo que denominamos una transición no-radiativa. Este decaimiento de las vacancias electrónicas por medio de la emisión de electrones es un proceso de auto-ionización que se encuentra en competencia con el decaimiento radiativo y ha adquirido diferentes nombres según qué electrones se vean involucrados en la transición. El término "efecto Auger" es el nombre genérico de este proceso no-radiativo. A partir de una vacancia interna dada, pueden resultar un gran número de diferentes transiciones Auger; si la vacancia original se encuentra en la subcapa "o" de la capa V, y es ocupada por un electrón de la subcapa "p" de la capa X, a la vez que el electrón (Auger) saliente deja una vacancia en la subcapa "q" de la capa Y, entonces usaremos la siguiente nomenclatura para el proceso Auger: $V_o^X Y_q$. En particular, si X ó Y son iguales a V, designaremos a la transición con el nombre de "Transición Coster-Kronig"; estas son transiciones entre subcapas de la misma capa atómica que contiene a la vacancia original, (ver fig.1).

La Producción Fluorescente.

La producción fluorescente de una capa ó subcapa se define como la probabilidad de que una vacancia en esa capa ó subcapa sea llenada por medio de una transición radiativa. Así tenemos que, para una muestra de muchos átomos, la producción fluorescente de una capa es igual al número de fotones emitidos al ser llenadas las vacancias

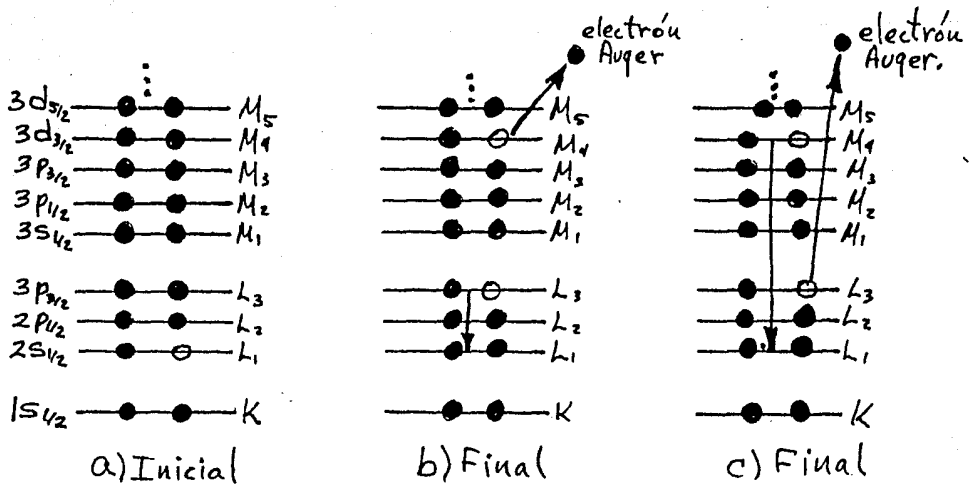


Figura 1. Diagrama de niveles cualitativo, ilustrando una transición Coster-Kronig. b) y c) son equivalentes.

de la capa, dividido por el número de vacancias originales en la capa.

En la capa K solamente tenemos dos electrones $s_{1/2}$, y la producción fluorescente es

$$\omega_k = \frac{I_k}{n_k} \quad (3.1)$$

donde I_k es el número total de los fotones-K emitidos por la muestra, n_k es el número de vacancias originales de la capa K.

Para las capas superiores, esta definición de la producción fluorescente se complica por dos razones: i). Las capas contienen más de una subcapa debido a que los electrones pueden tener diferentes números cuánticos para el momento angular. De esta manera, el promedio en la producción fluorescente depende del modo en que las capas sean ionizadas, dado que distintos métodos de ionización pueden dar lugar a conjuntos diferentes de vacancias originales.

ii). Las transiciones Coster-Kronig pueden hacer que una de las vacancias originales sea desplazada hacia una subcapa más alta, antes de que la vacancia sea llenada por o

tra transición.

En la mayoría de los experimentos diseñados para medir la producción fluorescente de una capa atómica, las vacancias originales se forman en varias de las subcapas. Sea ω_i^x la producción fluorescente de la i -ésima subcapa de una capa cuyo número cuántico principal denotamos por X ($=K, L, M, \dots$). De acuerdo con la ec.(3.1) tenemos:

$$\omega_i^x = \frac{I_i^x}{n_i^x} \quad (3.2)$$

El promedio en la producción fluorescente puede ser definido para la capa- X como:

$$\bar{\omega}_x = \sum_{i=1}^k N_i^x \omega_i^x, \quad (3.3)$$

donde N_i^x es el número relativo de vacancias originales en la subcapa- i , de la capa- X :

$$N_i^x = \frac{n_i^x}{\sum n_i^x}; \quad \sum_{i=1}^k N_i^x = 1 \quad (3.4)$$

en las ecs. las sumas se extienden sobre todas las k subcapas de la capa- X .

Si denotamos al número total de vacancias en la capa- X por N_x ,

$$N_x = \sum_{i=1}^k n_i^x, \quad I_x = \sum_{i=1}^k I_i^x \quad (\text{No. total de fotones-}X) \quad \dots(3.5)$$

entonces $\bar{\omega}_x$ se puede escribir como

$$\bar{\omega}_x = \frac{I_x}{N_x} \quad (3.6)$$

Para que la definición sea aplicable, la distribución de vacancias originales debe permanecer inalterada antes de que las vacancias sean ocupadas desde las capas superiores; es decir, no debemos tener involucradas transiciones Coster-Kronig.

Insistimos en que el promedio en la producción

fluorescente de la capa-X obtenido en cualquier medición dada, depende de la distribución de las vacancias; esta última dependerá del método seguido para la ionización que las originó.

La producción fluorescente en presencia de transiciones Coster-Kronig.

Si las vacancias originales alteran su distribución por transiciones Coster-Kronig antes de que las vacancias sean ocupadas por transiciones desde las capas superiores, podemos tomar dos aproximaciones:

i). El promedio en la producción fluorescente $\bar{\omega}_x$ puede considerarse como una combinación lineal de las producciones fluorescentes de las subcapas ω_i^x con una distribución de vacancias V_i^x , ya alterada por transiciones Coster-Kronig.

ii). La expresión $\bar{\omega}_x$ puede considerarse matemáticamente como una combinación lineal de la distribución de vacancias original N_i^x con un conjunto de coeficientes especialmente definidos γ_i^x . Estos deben escogerse ad-hoc para tomar en cuenta las transiciones Coster-Kronig.

La descripción en términos de la distribución alterada V_i^x , para el promedio en la producción fluorescente de la capa-X, se expresa como:

$$\bar{\omega}_x = \sum_{i=1}^k V_i^x \omega_i^x \quad (3.7)$$

Aquí V_i^x incluye a las vacancias desplazadas por transiciones Coster-Kronig, y denota al número relativo de vacancias de la subcapa- X_i . En contraste con la relación en la ec. (3.4), $\sum_i V_i^x > 1$, debido a que algunas de las vacancias creadas en las subcapas por debajo de X_1 deben contarse más de una vez conforme son desplazadas por transiciones Coster-Kronig.

La probabilidad de una transición Coster-Kronig

para desplazar a una vacancia desde una subcapa- X_1 hasta otra X_j , la denotaremos por f_{ij}^X , y podemos escribir las V_i^X en términos de los números relativos N_i^X de vacancias originales como sigue:

$$\left. \begin{aligned} V_1^X &= N_1^X \\ V_2^X &= N_2^X + f_{12}^X N_1^X \\ V_3^X &= N_3^X + f_{23}^X N_2^X + (f_{13}^X + f_{12}^X + f_{23}^X) N_1^X \\ &\vdots \\ V_k^X &= N_k^X + f_{k-1,k}^X N_{k-1}^X + \dots + (f_{1k}^X + f_{12}^X f_{2k}^X + f_{12}^X f_{13}^X f_{3k}^X + \dots) N_1^X \end{aligned} \right\} (3.8)$$

Debido a que la primera subcapa no recibe contribuciones a sus vacancias por transiciones Coster-Kronig, solo cuentan las originales; i.e., $V_1^X = N_1^X$; la segunda subcapa recibe las contribuciones de la primera con la probabilidad f_{12}^X , de modo que no solo contamos las originales N_2^X , sino también las contribuciones de la primera N_1^X , etc., etc..

La descripción en términos de la distribución original de vacancias N_i^X , para el promedio en la producción fluorescente de la capa- X , se expresa como:

$$\bar{\omega}_X = \sum_{i=1}^k N_i^X \nu_i^X \quad (3.9)$$

Un coeficiente ν_i^X representa al número total de rayos- X característicos a la capa- X (no necesariamente de la ocupación radiativa de una vacancia en la subcapa- X_1) resultantes por cada vacancia original en la subcapa- X_1 . Esta definición difiere de la de ω_i^X , en que para esta se pide que los rayos- X característicos observados deban producirse por transiciones a la subcapa- X_1 . Los productos $V_i^X \omega_i^X$ y $N_i^X \nu_i^X$ no son iguales. Solo las sumas (3.7), (3.9) son iguales al promedio de producción fluorescente $\bar{\omega}_X$. Observamos que la cantidad $V_i^X \omega_i^X$ representa al número de transiciones radiativas a partir de las capas superiores hacia la i -ésima subcapa por cada

vacancia en cualquier subcapa de toda la capa-X. Por otra parte, la cantidad $N_i^X \nu_i^X$ es el número de rayos-X emitidos en transiciones a todas las subcapas de la capa-X, por cada vacancia en la subcapa- X_i .

Podemos dar las relaciones de transformación entre los coeficientes ν_i^X y las ω_i^X , a partir de las ecs. (3.7), (3.8)

$$\nu_i^X = \omega_i^X + f_{i2}^X \omega_2^X + (f_{i3}^X + f_{i2}^X + f_{i23}^X) \omega_3^X + \dots + (f_{ik}^X + f_{i2}^X f_{2k}^X + f_{i3}^X f_{3k}^X + \dots + f_{i,k-1}^X f_{k-1,k}^X$$

+ productos de 3, 4, ..., (k-1), f_{ij}^X 's ordenadas para llevar la vacancia desde la subcapa 1 hasta la subcapa k) ω_k^X .

$$\vdots$$

$$\nu_{k-1}^X = \omega_{k-1}^X + f_{k-1,k}^X \omega_k^X.$$

$$\nu_k^X = \omega_k^X.$$

... (3.10)

Las ecuaciones anteriores nos dejan ver que el proceso de deducción de la producción fluorescente de una subcapa individual ω_i^X , a partir de las mediciones, puede ser muy complicado. Además para medir el promedio en la producción fluorescente $\bar{\omega}_X$ de una capa, para un número suficiente de distintas distribuciones originales, es necesario conocer también a las probabilidades de transición Coster-Kronig.

La producción Auger.

De la misma manera en que definimos a la producción fluorescente ω_i^X como la probabilidad de que una vacancia en la subcapa- X_i sea llenada por una transición radiativa, podemos definir a la producción Auger a_i^X como la probabilidad de que una vacancia en la i -ésima subcapa sea llenada por medio de una transición no-radiativa de un electrón de una capa más alta. En esta definición estamos excluyendo a las transiciones Coster-Kronig. Podemos verificar la siguiente relación:

$$\omega_i^X + a_i^X + \sum_{j=i+1}^k f_{ij}^X = 1 \quad (3.11)$$

Por analogía con la ec.(3.7) del promedio en la producción fluorescente, el promedio en la producción Auger se define como

$$\bar{a}_x = \sum_{i=1}^k V_i^x a_i^x \quad (3.12)$$

La suma de los promedios de producción fluorescente y Auger de una capa, para la misma distribución inicial de vacancias, es igual a la unidad:

$$\bar{a}_x + \bar{\omega}_x = 1 \quad (3.13)$$

2. El Hamiltoniano del sistema, los elementos de matriz y las funciones de onda.

Como vimos en el capítulo I, un punto de partida en los cálculos de las funciones de onda de los electrones atómicos, lo es la aproximación de partícula independiente; en la cual suponemos que cada electrón se mueve dentro de un potencial externo, que puede ser un campo central hidrogenoide apantallado, o bien, el obtenido por el método de Hartree-Fock, por solo mencionar dos ejemplos. Una vez evaluado el potencial, construimos el Hamiltoniano correspondiente al problema de campo central

$$H_{at}^{(e)} \Psi = E \Psi \quad (3.14)$$

La degeneración en el movimiento dentro del campo central es removida por la interacción residual de los electrones y por la interacción espín-órbita. De este modo, tenemos a una base de eigenfunciones obtenidas de la aproximación del campo central, con las cuales podemos formar combinaciones lineales adecuadas al esquema de acoplamiento LS, al jj, o bien a uno intermedio; en cada caso, diagonalizamos de un modo conveniente a la per

turbación introducida por

$$\left. \begin{aligned} H' &= - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_i U(r_i), \\ \text{por} \\ H_{so} &= \frac{1}{2m^2c^2} \sum_i \left(\frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \right)_i \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i \end{aligned} \right\} (3.15)$$

o bien, por una combinación lineal de las anteriores.

Los elementos de matriz.

La probabilidad de transición por unidad de tiempo está dada por la Regla de Oro de Fermi:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | H' | \psi_i \rangle \right|^2 \rho(E_f) \quad (3.16)$$

donde ψ_f , ψ_i son las funciones de onda de los estados final e inicial respectivamente, y $\rho(E_f)$ es la densidad de estados finales para la energía E_f que satisfacen la conservación de la energía. La expresión se debe sumar sobre todos los posibles estados finales.

En los cálculos más simples de las probabilidades de transición Auger, se considera que los electrones dentro de las capas incompletas se mueven en un campo central del núcleo apantallado por los electrones atómicos restantes, y se toma en cuenta la perturbación en (3.15) que quita la degeneración resultante. Además se trata al átomo con todas sus capas cerradas, excepto a la que contiene a la vacancia interna. Más adelante consideraremos el caso general, con una configuración arbitraria de vacancias; pero por el momento nos permitimos tratar con el caso más simple mencionado arriba.

Después de una transición Auger, el átomo quedará doblemente ionizado en otras (quizás las mismas) capas. Los estados de las anteriores configuraciones de ca-

pa casi-cerrada con dos vacancias, pueden expresarse en términos de las configuraciones de capa-cerrada junto con una configuración de dos electrones, en vez de dos vacancias. Se puede demostrar que los estados de los dos sistemas son equivalentes (Condon & Shortley, 1953, cap.XII) si es que se cambia el signo en el término de acoplamiento espín-órbita, y se agregan ciertos términos adicionales a los elementos de matriz diagonales de la interacción electrostática. Dado que estas adiciones son las mismas para todos los elementos diagonales de cierta configuración, estos no afectarán a las posiciones relativas de los términos dentro de una cierta configuración, sino solamente a la energía total de toda la configuración. Por lo tanto, los estados inicial y final pueden ser representados por las configuraciones de una pareja de electrones correlacionados con las dos vacancias que consisten (inicialmente) en una vacancia en una capa interna y un agujero en el continuo, y (finalmente) en dos vacancias en capas internas.

Tenemos entonces que el elemento de matriz directo en la ec.(3.16) es de la forma:

$$D = \left\langle \psi_a(1) \psi_b(2) \left| \frac{e^2}{|r_{12}|} \right| \psi_c(1) \psi_d(2) \right\rangle \quad (3.17)$$

aquí ψ_b es la función de onda del electrón en el continuo, mientras que ψ_a, ψ_c, ψ_d son funciones de onda de los estados ligados. La transición ($\psi_d \rightarrow \psi_a; \psi_c \rightarrow \psi_b$), es indistinguible de la anterior y da lugar al elemento de matriz de intercambio:

$$E = \left\langle \psi_a(2) \psi_b(1) \left| \frac{e^2}{|r_{12}|} \right| \psi_c(1) \psi_d(2) \right\rangle \quad (3.18)$$

La probabilidad de transición por unidad de tiempo es:

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |D - E|^2 \rho(E_f) \quad (3.19)$$

donde se usa $|D-E|$ debido a que la función de onda total en los estados inicial y final debe ser antisimétrica.

Las funciones de onda deben estar convenientemente normalizadas dentro de una esfera de radio R_0 tan grande, que todos los electrones Auger emergen virtualmente normales a la superficie de la esfera. La función de onda se aproximaría a la forma e^{ikr}/r excepto por un factor de fase. Por lo tanto, el flujo total saliente es ψ/R_0 electrones por unidad de tiempo, donde $\psi = \frac{\hbar k}{m}$ es la velocidad del electrón. La densidad de estados finales es $\rho(E_f) = \frac{R_0}{2\pi\hbar\psi}$. Se puede ajustar la normalización de la función de onda del continuo ψ_0 , para producir un electrón saliente por unidad de tiempo (Oppenheimer, 1929); entonces $\psi/R_0 = 1$ y $\rho(E_f) = 1/\hbar$, de modo que la probabilidad de transición ec.(3.19) se vuelve:

$$W_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} |D-E|^2 \quad (3.20)$$

La velocidad de decaimiento no-radiativo de un cierto estado atómico excitado, consiste en una suma de probabilidades W_{fi} pesadas adecuadamente, para todas las transiciones no-radiativas en las que se conserven el momento angular, la paridad y la energía.

Las funciones de onda.

Como se mencionó antes, en una primera aproximación, se puede representar a los electrones en los estados ligados por medio de funciones de onda de partícula independiente dentro de un potencial Coulombiano. Estas funciones de onda hidrogenoides son de la forma de la ec.

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.21)$$

donde n, l, m , son los números cuánticos principal, de momento angular orbital, y magnético, respectivamente; Y_{lm} es un armónico esférico. La función de onda radial está

dada en términos del polinomio de Laguerre:

$$R_{nl}(r) = A_{nl} \exp\left[-\frac{Z}{na}r\right] r^l \sum_{s=0}^{n-l-1} B_{nls} r^s \quad (3.22)$$

que es regular en el origen, y donde:

$$B_{nls} = (-1)^{s+1} \left\{ \frac{[(n+l)!]^2}{(2l+s+1)! s! (n-l-s-1)!} \right\} \left(\frac{ZZ}{na} \right)^s \quad (3.23)$$

y

$$A_{nl} = - \left\{ \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} \left(\frac{ZZ}{na} \right)^{l + (\frac{3}{2})} \quad (3.24)$$

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad \text{es el radio de Bohr.} \quad (3.25)$$

La función de onda (3.21) es el resultado exacto no-relativista para un solo electrón ligado dentro del campo de una carga puntual Ze . Dichas funciones describen aproximadamente a un solo electrón fuera de capa cerrada, siempre y cuando pueda suponerse que el campo es central y Z sea remplazada (para una carga efectiva) por $Z^* = Z - \sigma$. Los cálculos de las probabilidades de transición no-radiativa se simplifican si es posible usar las funciones de onda hidrogenoides analíticas, que dan a los elementos de matriz radiales en forma cerrada. Los cálculos con funciones de este tipo difieren en la elección que se hace de la constante de apantallamiento σ . La desventaja en estos casos radica en que no se tiene exactitud, la cual es posible mejorar con potenciales más realistas. En esta dirección se ha intentado básicamente con el método Hartree-Fock-Slater (Bambynek, 1972).

Consideremos ahora a las funciones de onda del continuo. Si se desprecia la carga nuclear, el electrón saliente de energía positiva y momento angular orbital (está descrito dentro de una aproximación no-relativista por la función de onda de partícula libre:

$$\psi_{\text{col}} = 2\sqrt{\frac{km}{\hbar}} \left(\frac{1}{kr}\right) f_e(kr) \quad (3.26)$$

donde

$$f_e(kr) = \sqrt{\frac{\pi kr}{z}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \quad (3.27)$$

y $J_{l+\frac{1}{2}}(kr)$ es la función ordinaria de Bessel de orden semi-entero.

La solución de la ecuación de Schrödinger para el caso en que tengamos un potencial Coulombiano de una carga puntual efectiva z^*e normalizada para representar a un electrón saliente por unidad de tiempo, es la función de onda de Gordon (Gordon, 1928; Gaunt, 1930):

$$\psi_{\text{col}} = \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \left(\frac{z^{l+1}}{(2l+1)!}\right) \exp\left[\frac{\pi z^*}{2k}\right] k^{l+\frac{1}{2}} \left|\Gamma\left(l+1+\frac{iz^*}{k}\right)\right| \\ \times r^l e^{-ikr} {}_1F_1\left[l+1+\frac{iz^*}{k}; 2l+2; 2ikr\right] Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \dots(3.28)$$

donde ${}_1F_1(a; b; c)$ es la función hipergeométrica confluyente, y k es el número de onda del electrón saliente. El apantallamiento de la función de onda afecta considerablemente las probabilidades de transición no-radiativas, (Kostrun, Chen, Craseman, 1971).

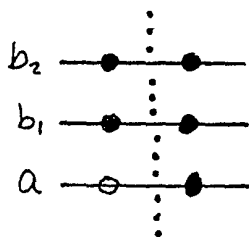
La función de onda Coulombiana del continuo (3.28) se reduce a la función (3.26) en el límite $z^* \rightarrow 0$; pero para una carga efectiva más realista, difiere mucho de la solución de partícula libre en la región en que las funciones de onda electrónicas de estados ligados son apreciables, siendo más corta la longitud de onda cerca del origen debido a la presencia del potencial Coulombiano atractivo.

También se han intentado diversas soluciones numéricas basadas en el método del campo auto-consistente.

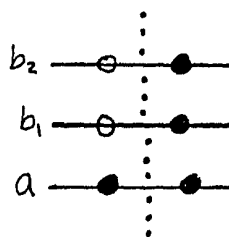
3. Energías de los Electrones Auger.

Un espectro de electrones Auger es una distribución de dichos electrones como una función de la energía. Con un espectrómetro calibrado podemos medir la energía de las líneas Auger; por otra parte, un espectro conocido con precisión nos puede servir para la calibración de la energía. La teoría debe predecir la energía y la forma de la estructura. En muchos casos el cálculo de la estructura (intensidad relativa) está en mejor acuerdo con el experimento que los cálculos de la energía.

Para tratar a las relaciones de energía en el proceso Auger, consideremos a un átomo al que etiquetamos por "0". Se retira a uno de sus electrones produciéndose una vacancia original en la subcapa a , (fig. 2a)). En esta situación se produce una transición Auger originando agujeros en las subcapas b_1 y b_2 , (fig. 2b)).



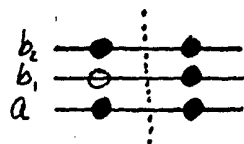
(a) SE CREA UNA VACANCIA EN LA SUBCAPA a .



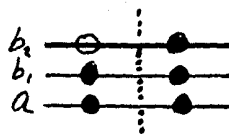
(b) UNA TRANSICION AUGER CREA DOS NUEVAS VACANCIAS EN LAS SUBCAPAS b_1 y b_2 .

FIGURA 2.

Consideremos aparte a dos casos en los que se crea una vacancia en el átomo Θ ; pero no en a ; sino en b_1 , en un caso; y en b_2 , en el otro (fig.3).



(a) SE CREA UNA VACANCIA EN LA SUBCAPA b_1 .



(b) SE CREA UNA VACANCIA EN LA SUBCAPA b_2 .

FIGURA 3.

Si describimos a cada una de las configuraciones anteriores por un Hamiltoniano distinto, tendremos:

H_0 es el Hamiltoniano del átomo original Θ . H_1 es el Hamiltoniano del ión en la fig. 2a). H_2 es el Hamiltoniano del átomo doblemente ionizado en la fig. 2b). H_1' es el Hamiltoniano del ión de la fig. 3a), y H_1'' es el de la fig. 3b). Las energías en cada uno de los casos las denotamos como:

$$\left. \begin{aligned} \langle \Theta | H_0 | \Theta \rangle = E_0, \quad \langle a | H_1 | a \rangle = E_a, \quad \langle b_1 | H_1' | b_1 \rangle = E_{b_1}, \\ \langle b_2 | H_1'' | b_2 \rangle = E_{b_2}, \quad \langle b_1 b_2 | H_2 | b_1 b_2 \rangle = E_{b_1 b_2} \end{aligned} \right\} (3.29)$$

Por conservación de la energía, la energía del electrón Auger es igual a la diferencia de energías:

$$E = E_a - E_{b_1 b_2} = (E_a - E_0) - (E_{b_1 b_2} - E_0) \quad (3.30)$$

Y por conveniencia hemos sumado y restado la cantidad en el último miembro de esta ecuación.

Para un átomo neutro con una sola vacancia en alguna de sus capas internas, tenemos que generalmente ya han sido medidos los potenciales de ionización; esto es

conocemos a $(E_a - E_0)$, $(E_{b_1} - E_0)$, $(E_{b_2} - E_0)$,

Nuestra dificultad se encuentra al estimar el valor de

$E_{b_1 b_2} - E_0$. A esta última cantidad la podemos escribir como: $E_{b_1 b_2} - E_0 = T_1 - T_2 - T_3$ donde:

$$T_1 = (E_{b_1} - E_0) + (E_{b_2} - E_0)$$

$$T_2 = (\langle b_1 | H_0 | b_1 \rangle - E_0) + (\langle b_2 | H_0 | b_2 \rangle - E_0) - (\langle b_1 b_2 | H_0 | b_1 b_2 \rangle - E_0)$$

$$T_3 = \langle b_1 | H_1' - H_0 | b_1 \rangle + \langle b_2 | H_1'' - H_0 | b_2 \rangle - \langle b_1 b_2 | H_2 - H_0 | b_1 b_2 \rangle$$

... (3.31)

y $\langle b_1 | H_0 | b_1 \rangle$ indica al Hamiltoniano del átomo inicial evaluado entre los estados iniciales del del átomo con un electrón b_1 omitido. La cantidad T_1 es, pues, una cantidad generalmente conocida; la cantidad T_2 puede ser calculada en términos de los elementos de matriz directo y de intercambio de la interacción electrostática y los parámetros de partición espín-órbita. Con respecto a la cantidad T_3 se han evaluado los elementos de matriz en algunos casos (Shirley 1972, 1973); en dichos cálculos se remplazan a los Hamiltonianos en T_3 por potenciales efectivos y se obtiene un resultado en términos de los elementos de matriz directo y de intercambio de la interacción electrostática. Los cálculos de Shirley están en un notable buen acuerdo con los resultados experimentales de las energías de los electrones Auger K-LI. En los trabajos anteriores se habían evaluado estas energías por medio de fórmulas semi-empíricas.

Para un átomo con múltiples vacancias, es necesario evaluar la diferencia de energía: $E = \langle a | H_1 | a \rangle + \langle b_1 b_2 | H_2 | b_1 b_2 \rangle$ a partir de primeros principios. Esto se debe a que no existen compiladas sistemáticamente las medidas de los potenciales de ionización para las ca

pas internas en átomos con múltiples vacancias.

4. Probabilidades de Transición Auger.

A. El Efecto Auger en Átomos con una Sola Vacancia Inicial.

Los elementos de matriz radiales.

Estaremos interesados en obtener la probabilidad de transición Auger para el caso en que tengamos originalmente a un solo agujero en una de las capas internas del átomo. En la sección 4.B. consideraremos configuraciones de vacancias más generales. Como vimos en la sec.2, ec.(6) en este capítulo, la probabilidad de transición en este caso está dada en términos de los elementos de matriz directo y de intercambio:

$$D = \langle \psi_a(1) \psi_b(2) | \frac{e^2}{|r_{12}|} | \psi_c(1) \psi_d(2) \rangle ; \quad E = \langle \psi_a(2) \psi_b(1) | \frac{e^2}{|r_{12}|} | \psi_c(1) \psi_d(2) \rangle$$

donde ψ_b es la función de onda del continuo, mientras que ψ_a , ψ_c , ψ_d , son funciones de onda de los estados ligados.

Es posible separar a estos elementos de matriz dentro de una parte radial y otra angular si se expresa al potencial de interacción de Coulomb en términos de la expansión multipolar:

$$\frac{1}{|r_{12}|} \equiv \frac{1}{|r_{12}|} = \sum_{\nu, \sigma} \delta_{\nu}(r_1, r_2) C_{\nu\sigma}^*(\Omega_1) \cdot C_{\nu\sigma}(\Omega_2) \quad (3.32)$$

donde $\delta_{\nu}(r_1, r_2) = \frac{r_2^{\nu}}{r_1^{\nu+1}}$;

$$C_{\nu\sigma} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\nu+1}} Y_{\nu\sigma}(\Omega) ; \quad Y_{\nu\sigma} \text{ es un armónico esférico.} \quad (3.33)$$

La parte radial del elemento de matriz directo es de la forma:

$$D_{\nu} \equiv \{ (n_1, l_1) | (n_3, l_3) (n_4, l_4), \nu, l_2 \} = e^2 \int \int_{r_1, r_2=0}^{\infty} \delta_{\nu} R_1(n_1, l_1) R_1(n_3, l_3) \times \dots$$

$$\times R_2(n_4 l_4) R_2(\omega l_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \dots (3.34)$$

Aquí las R 's son las funciones de onda radiales que describen a los estados caracterizados por los siguientes números cuánticos principal y orbital (fig.4):

$n_1 l_1$: del electrón en el estado que originalmente está vacante.

ωl_2 : del electrón expulsado al estado de energía positiva.

$n_3 l_3$: del electrón que llena la vacancia original.

$n_4 l_4$: del electrón que saldrá expulsado

Y además se ha cambiado a la notación $R_{nl}(r_i)$ por $R_i(nl)$.

Con las funciones de onda hidrogenoides ecs. (3.21) - (3.25) y la función de onda de Gordon (ec. (3.28) sec.3), los elementos de matriz radiales se pueden escribir dentro de una expresión analítica (Bambynek, 1972, pag.728). Las principales limitaciones en la exactitud de las amplitudes de transición en estos casos, se deben al uso de una teoría no-relativista. El uso de otras funciones de onda más exactas, generalmente involucra integraciones numéricas que no dan expresiones analíticas para los elementos de matriz.

Análogamente, tenemos una parte radial para el elemento de matriz de intercambio:

$$\begin{aligned} E_{ij} &\equiv \langle (n_1 l_1) | (n_4 l_4) (n_3 l_3), \nu, l_2 \rangle = \\ &= e^2 \int \int_{r_1, r_2=0}^{\infty} \gamma_{ij} R_1(n_1 l_1) R_1(n_4 l_4) R_2(n_3 l_3) R_2(\omega l_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2. \end{aligned} \quad (3.35)$$

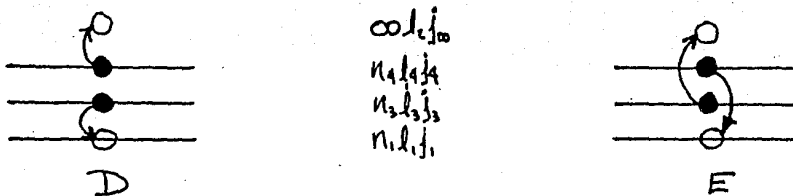


Figura 4. Representación esquemática de los procesos Auger directo (D), y de intercambio (E), mostrando la notación para los números cuánticos principal, momento angular orbital, y momento angular total; que caracterizan a los estados electrónicos en cuestión.

Una ulterior limitación en los cálculos anteriores de las probabilidades de transición Auger, radica en el uso de funciones de onda de un solo electrón, de modo que es necesario tomar esto en consideración.

Esquemas de acoplamiento.

La evaluación de los factores angulares en los elementos de matriz (ec. (3.16) sec. 3), depende de la elección del esquema de acoplamiento (del momento angular). Si se desprecia el acoplamiento espín-órbita, los estados de los dos agujeros iniciales y finales pueden expresarse, para diferentes valores del momento angular J , dentro de la representación (LSJM) del acoplamiento Russell-Saunders. Como sabemos, esto pierde validez en los átomos más pesados, donde la interacción espín-órbita ya no es despreciable, sobrepasando en algunos casos a la interacción electrostática residual. En esta última situación es más adecuado usar el acoplamiento jj . Si en lo que se está interesado es en las intensidades relativas de las diferentes transiciones no-radiativas que llevan a una cierta configuración de estados finales, es entonces importante elegir apropiadamente al esquema de acoplamiento según la región de la tabla periódica; en rigor, debemos usar un acoplamiento intermedio. Sin embargo, si el propósito del cálculo es meramente determinar la probabilidad de transición no-radiativa total para una cierta configuración de estados finales, sin importar el término, entonces la elección del esquema

de acoplamiento es indiferente, siempre y cuando la vacancia original no se encuentre dentro de la configuración final. La velocidad de transición total es entonces independiente del acoplamiento, estando relacionadas las funciones de onda en los distintos esquemas por medio de transformaciones unitarias.

Acoplamiento LS.

En el esquema (LSJM), las funciones de onda de dos partículas, adecuadamente normalizadas y antisimetrizadas (de-Shalit y Talmi, 1963, caps.19-21), son de la forma:

$$\left. \begin{aligned} \psi_A = (n_a l_a, n_b l_b; LSJM) &= \sqrt{2} \sum_{M_L, M_S} (S M_S L M_L | J M) \times \\ &\times \left[\phi(n_a l_a n_b l_b L M_L) + (-)^{l_a + l_b - L + S} \phi(n_b l_b n_a l_a L M_L) \right] \times \\ &\times \chi \left[\left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}\right) S M_S \right] \end{aligned} \right\} \quad (3.36)$$

donde

$$\left. \begin{aligned} \phi(n_\alpha l_\alpha n_\beta l_\beta L M_L) &= \sum_{m_\alpha m_\beta} (l_\alpha m_\alpha l_\beta m_\beta | L M_L) \phi_1(l_\alpha m_\alpha) \times \\ &\times \phi_2(l_\beta m_\beta) R_1(n_\alpha l_\alpha) R_2(n_\beta l_\beta) \end{aligned} \right\} \quad (3.37)$$

$$\chi \left[\left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}\right) S M_S \right] = \sum_{m_s, m_s'} \left(\frac{1}{2} m_s, \frac{1}{2} m_s' | S M_S \right) \chi_1(m_s) \chi_2(m_s') \quad (3.38)$$

Aquí $\phi_i(l_j; m_j)$, $R_i(n_j; l_j)$ y $\chi_i(m_s')$ son las funciones de onda de partícula independiente angular, radial, y de espín del electrón i , con números cuánticos n_j, l_j, m_j y m_s' .

La probabilidad de transición total hacia todos los posibles estados de L y S para una cierta configuración final del átomo es entonces:

$$w = \sum_{L,S} [(2S+1)(2L+1)/2(2l_1+1)] \sum_{l_2} \left| \frac{1}{\hbar} \langle n_1 l_1, m_{l_1}; SLJM | \times \right. \\ \left. \times \frac{e^2}{r_{12}} | n_3 l_3, m_{l_3}; SLJM \rangle \right|^2 \quad (3.39)$$

donde se supone que las funciones de onda se encuentran adecuadamente normalizadas y se sigue la notación anterior (fig. 4). En esta ecuación se sumó sobre los números cuánticos magnéticos del átomo final, y se promedió sobre los números cuánticos de la vacancia original.

Como se discutió al principio de esta sección, la separación dentro de factores radial y angular nos lleva a (Kostroun, 1971):

$$w = \sum_{S,L} [(2S+1)(2L+1)/2(2l_1+1)] \sum_{l_2} \left| \frac{1}{2\hbar} \sum_{\nu} (d_{\nu} D_{\nu} \pm (-)^{l_3+l_4} e_{\nu} E_{\nu}) \right|^2 \quad (3.40)$$

donde el signo (+) se usa si $(L+S)$ es impar, y el (-) si es es impar. Las funciones D_{ν} , E_{ν} , son los elementos de matriz radiales en las ecs. (3.34) y (3.35). Los factores angulares son:

$$d_{\nu} = (-)^{l_3+l_4+L} (l_1 \| C^{\nu} \| l_3) (l_2 \| C^{\nu} \| l_4) \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ l_4 & l_3 & \nu \end{matrix} \right\} \quad (3.41)$$

$$e_{\nu} = (-)^{l_3+l_4+L} (l_1 \| C^{\nu} \| l_4) (l_2 \| C^{\nu} \| l_3) \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ l_3 & l_4 & \nu \end{matrix} \right\} \quad (3.42)$$

donde $(l_3 \| C^{\nu} \| l_4)$ es el elemento de matriz reducido del armónico esférico multiplicado por $(4\pi/(2\nu+1))^{1/2}$, y $\left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & L \\ l_3 & l_4 & \nu \end{matrix} \right\}$ es el símbolo 6-j de Wigner. Podemos expresar a $(l_3 \| C^{\nu} \| l_4)$ en términos del símbolo 3-j de Wigner:

$$(l_1 \| C^{\nu} \| l_3) = (-)^{l_1} \sqrt{(2l_1+1)(2l_3+1)} \left(\begin{matrix} l_1 & \nu & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \quad (3.43)$$

Acoplamiento jj.

En el esquema jj, las funciones de onda de dos partículas adecuadamente antisimetrizadas y normalizadas están dadas por:

$$\begin{aligned} \psi_{JM} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_j} \sum_{m_a} \sum_{m_b} (j m_j, j' m_j' | JM) (\ell_a m_a, s m_s | j m_j) \\ &\times (\ell_b m_b, s' m_s' | j' m_j') \left[\phi_1(\ell_a m_a) \phi_2(\ell_b m_b) R_1(n_a \ell_a) R_2(n_b \ell_b) \chi_1(m_s) \chi_2(m_s') \right. \\ &\quad \left. - \phi_2(\ell_a m_a) \phi_1(\ell_b m_b) R_2(n_a \ell_a) R_1(n_b \ell_b) \chi_2(m_s) \chi_1(m_s') \right] \\ &\dots (3.44) \end{aligned}$$

para electrones no-equivalentes. Para electrones equivalentes ($n_a = n_b, \ell_a = \ell_b, j = j'$) la función de onda total antisimetrizada será:

$$\begin{aligned} \psi_{JM} &= \frac{1}{2} [1 - (-)^{2j-J}] \sum_{m_j} \sum_{m_a} \sum_{m_b} (j m_j, j m_j | JM) (\ell_a m_a, \frac{1}{2} m_j - m_a | j m_j) \\ &\times (\ell_b m_b, \frac{1}{2} M - m_j - m_b | j m_j) \phi_1(\ell_a m_a) \phi_2(\ell_b m_b) R_1(n_a \ell_a) R_2(n_b \ell_b) \quad (3.45) \\ &\times \chi_1(m_j - m_a) \chi_2(M - m_j - m_b) \end{aligned}$$

el factor antes de las sumas expresa que J debe ser par.

Nuevamente podemos separar a cada elemento de matriz $\langle n_a \ell_a j_a, n_b \ell_b j_b; J' M' | \frac{e^2}{r_{12}} | n_a \ell_a j_a, n_b \ell_b j_b, JM \rangle$ en una parte directa y otra de intercambio. La separación de las partes radial y angular resultará de la expansión (3.32)

Usando el resultado

$$\int Y_{\ell_1 m_1}^* Y_{\ell_2 m_2} Y_{\ell_3 m_3} d\Omega = \sqrt{\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)}{4\pi(2\ell_3+1)}} (l_1 m_1, l_2 m_2 | l_3 m_3) (l_1 0, l_2 0 | l_3 0)$$

podemos obtener para la parte angular y de espín:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle j'_a j'_b; J' M' \mid C_{\nu\sigma}^* \cdot C_{\nu\sigma} \mid j_a j_b; JM \right\rangle_{\text{directo}} = \delta_{m'_{j'_a} - m'_a, m'_{j'_b} - m_b} \\
 & \times \delta_{M' - m'_{j'_a} - m'_b, M - m_{j_a} - m_b} \left[\frac{(2l_a + 1)(2l_b + 1)}{(2l'_a + 1)(2l'_b + 1)} \right]^{1/2} (l_a 0, \nu 0 \mid l'_a 0) \\
 & \times (l_b 0, \nu 0 \mid l'_b 0) \sum_{m'_{j'_a}} \sum_{m_{j_a}} \sum_{m'_a} \sum_{m_a} \sum_{m'_b} \sum_{m_b} \sum_{\sigma} (-)^{\sigma} (l_a m_a, \nu \sigma \mid l'_a m'_a) \\
 & \times (l_b m_b, \nu (-\sigma) \mid l'_b m'_b) (j'_a m'_{j'_a}, j'_b m'_b \mid J' M') (j_a m_{j_a}, j_b m_{j_b} \mid JM) \\
 & \times (l'_a m'_a, \frac{1}{2} m_{j_a} - m_a \mid j'_a m'_{j'_a}) (l_a m_a, \frac{1}{2} m_{j_a} - m_a \mid j_a m_{j_a}) \\
 & \times (l'_b m'_b, \frac{1}{2} M - m_{j_a} - m_b \mid j'_b m'_{j'_b}) (l_b m_b, \frac{1}{2} M - m_{j_a} - m_b \mid j_b m_{j_b})
 \end{aligned} \quad (3.46)$$

Los dos coeficientes que aparecen justo antes de la suma implican que:

$$\sigma = m'_a - m_a = m_b - m'_b \quad (3.47)$$

por lo tanto

$$m'_a + m'_b = m_b + m_a$$

Esta última relación expresa el hecho de que la suma de las proyecciones de los números cuánticos orbitales se conserva. Esto, junto con las dos deltas de Krönecker en la ec. (3.46) nos da, después de sumar sobre los espines:

$$M' = M \quad (3.48)$$

Haciendo algo de álgebra (Asaad, 1936) y sumando sobre m_a, m_b, σ , y utilizando la relación de ortogonalidad de los coeficientes de C-G.:

$$\sum_{m_j} (j m_j, j' M - m_j \mid JM) (j m_j, j' M - m_j \mid J' M) = \delta_{J, J'} \quad (3.49)$$

obtenemos finalmente:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{h} \left\langle j'_a j'_b; J' M' \mid \frac{e^2}{r_{12}} \mid j_a j_b; JM \right\rangle_{\text{directo}} = \delta_{J, J'} \delta_{M, M'} (-)^{j_a + j_b + l_a + l_b + 1} \\
 & \times \left[\frac{(2l_a + 1)(2l_b + 1)(2j'_a + 1)(2j'_b + 1)(2j_a + 1)(2j_b + 1)}{Y} \right]^{1/2} \sum_{\nu} (-)^{\nu} (l_a 0, \nu 0 \mid l'_a 0) (l_b 0, \nu 0 \mid l'_b 0) \\
 & \times W(l_a j_a l'_a j'_a; \frac{1}{2} \nu) W(l_b j_b l'_b j'_b; \frac{1}{2} \nu) W(j_b \nu J j'_a; j'_b j_a) D_{\nu}
 \end{aligned} \quad (3.50)$$

donde las W son los coeficientes de Racah, los cuales satisfacen:

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ J_1 & J_2 & J_3 \end{matrix} \right\} = (-)^{j_1+j_2+J_1+J_2} W(j_1, j_2, J_2, J_1; j_3, J_3)$$

la D_y es la integral directa radial:

$$D_y = \left\{ (n_a l_a) | (n'_a l'_a) (n_b l_b), \nu, l'_b \right\} = e^z \int \int_{r_1, r_2=0}^{\infty} \delta_\nu(r_1, r_2) R_1(n_a l_a) R_1(n'_a l'_a) R_2(n_b l_b) R_2(n'_b l'_b) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \quad (3.51)$$

Similarmente, la contribución de la parte de intercambio estará dada por

$$\left. \begin{aligned} & \frac{1}{\hbar} \langle j'_a j'_b; J' M' | \frac{e^z}{r_1 r_2} | j_a j_b; J M \rangle_{\text{interc.}} = \delta_{J' J} \delta_{M' M} (-)^{J+l_a+l_b-1} \\ & \times \left[(2l_a+1)(2l_b+1)(2j_a+1)(2j_b+1)(2j'_a+1)(2j'_b+1) \right]^{1/2} \sum_{\nu} (-)^{\nu} (l_a 0, \nu 0 | l'_b 0) \\ & \times (l_b 0, \nu 0 | l'_a 0) W(l_b j_b l'_a j'_a; \frac{1}{2} \nu) W(l_a j_a l'_b j'_b; \frac{1}{2} \nu) \\ & \times W(j_a \nu J j'_a; j'_b j_b) E_{\nu} \end{aligned} \right\} \quad (3.52)$$

donde E_{ν} es la integral radial de intercambio:

$$E_{\nu} = \left\{ (n_a l_a) | (n_b l_b) (n'_a l'_a), \nu, l'_b \right\} = e^z \int \int_{r_1, r_2=0}^{\infty} \delta_{\nu}(r_1, r_2) R_1(n_a l_a) R_1(n_b l_b) \times R_2(n'_a l'_a) R_2(n'_b l'_b) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \quad (3.53)$$

Sumando sobre todos los números cuánticos de proyección ν y todas las posibles vacancias iniciales, obtenemos finalmente a la probabilidad de transición Auger:

$$\begin{aligned}
 w &= [2j_1 + 1]^{-1} \hbar^{-2} \sum_M \left| \langle n_1, l_1, j_1, m_1, l_2, j_2, m_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | \right. \\
 & \left. | n_3, l_3, j_3, m_3, l_4, j_4, m_4, JM \rangle \right|^2 = \tau^2 (2J+1) (2l_3+1) (2l_4+1) (2j_3+1) (2j_4+1) \\
 & \times (2j_2+1) \left[\sum_{\nu} (-)^{\nu} (2\nu+1) (l_3, 0, \nu, 0 | l_1, 0) (l_4, 0, \nu, 0 | l_2, 0) W(l_3, j_3, l_1, j_1, \frac{1}{2}, \nu) \right. \\
 & \times W(l_4, j_4, l_2, j_2, \frac{1}{2}, \nu) W(j_4, \nu, J, j_1, j_3, j_3) D_{\nu} - (-)^{J-(j_3+j_4)} \\
 & \times \sum_{\nu'} (-)^{\nu'} (2\nu'+1) (l_3, 0, \nu', 0 | l_2, 0) (l_4, 0, \nu', 0 | l_1, 0) W(l_4, j_4, l_1, j_1, \frac{1}{2}, \nu') \\
 & \left. \times W(l_3, j_3, l_2, j_2, \frac{1}{2}, \nu') W(j_3, \nu', J, j_1, j_3, j_4) E_{\nu'} \right]^2 \quad (3.54)
 \end{aligned}$$

se ha introducido en la expresión anterior al factor τ :

$$\tau = \begin{cases} 1 & \text{para electrones no-equivalentes.} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & \text{para electrones equivalentes en el estado inicial.} \end{cases} \quad (3.55)$$

y se ha usado la notación introducida en la fig. 4.

Intensidades de los Electrones Auger.

El espectro K-LL es el estudiado más extensamente para el caso en que el átomo contenga una sola vacancia original. Aunque existen todavía algunas discrepancias entre los cálculos y el experimento, se espera que estas desaparezcan con la inclusión de aproximaciones relativistas, de un acoplamiento intermedio, y la interacción de configuraciones.

En la tabla I (Bambynek et. al., pag. 742) se dan los resultados de los cálculos realizados por varios autores para la probabilidad total de transición Auger-K.

TABLA I. VELOCIDADES DE TRANSICION
 AUGER-K TOTALES.

TABLE II.III. Calculated total K-level Auger transition rates,
 in units of eV/h.

Element	Callan (1963b)	McGuire (1970a)	Kostroun (1971)
¹⁰ Ne		0.258	0.231
¹¹ Na		0.268	0.289
¹² Mg		0.325	0.358
¹³ Al		0.316	0.400
¹⁴ Si		0.358	0.438
¹⁵ P		0.428	0.475
¹⁶ S	0.46	0.425	0.508
¹⁷ Cl	0.50	0.515	0.536
¹⁸ Ar	0.56	0.544	0.576
¹⁹ K	0.60	0.597	0.611
²⁰ Ca	0.66	0.603	0.650
²¹ Sc	0.68	0.672	0.671
²² Ti	0.70	0.716	0.692
²³ V	0.72		0.710
²⁴ Cr	0.75		0.725
²⁵ Mn	0.78		0.740
²⁶ Fe	0.81	0.803	0.754
²⁷ Co	0.83		0.768
²⁸ Ni	0.84		0.780
²⁹ Cu	0.86		0.791
³⁰ Zn	0.88	0.854	0.802
³¹ Ga	0.93		0.818
³² Ge	0.96		0.833
³³ As	0.99		0.848
³⁴ Se	1.02		0.861
³⁵ Br	1.05		0.875
³⁶ Kr	1.08	1.03	0.888
³⁷ Rb	1.10		0.902
³⁸ Sr	1.11		0.912
³⁹ Y	1.13		0.928
⁴⁰ Zr	1.14	1.14	0.939
⁴¹ Nb	1.15		0.950
⁴² Mo	1.16		0.959
⁴³ Tc	1.17		0.968
⁴⁴ Ru	1.18	1.16	0.977
⁴⁵ Rh	1.19		0.985
⁴⁶ Pd	1.21		0.993
⁴⁷ Ag	1.22	1.20	1.000
⁴⁸ Cd	1.24		1.007
⁴⁹ In			1.016
⁵⁰ Sn		1.26	1.024
⁵¹ Te			1.038
⁵² Xe			1.051
⁵³ Ba			1.064
⁵⁴ Ce			1.074
⁵⁵ Nd			1.082
⁵⁶ Tb			1.102
⁷⁰ Yb			1.133

En muchas aplicaciones es de interés conocer las intensidades de grupos de líneas Auger, relativas a rayos-X, o a otros grupos de líneas Auger, así como las intensidades relativas de las componentes individuales de un cierto grupo. La variación con Z de dichas intensidades relativas es también de interés considerable.

Como definimos en la introducción (ec.(3.1)) la producción fluorescente de la capa-K está dada por:

$$\omega_K = \frac{P_{KX}}{P_{KX} + P_{KA}} \quad (3.56)$$

donde P_{KX} = probabilidad de transición radiativa de la capa-K; P_{KA} = probabilidad de emisión Auger-K; y en este caso, la cantidad

$$a_K = 1 - \omega_K \quad (3.57)$$

es la producción Auger-K.

Se han realizado varios intentos por ajustar la producción fluorescente de la capa-K determinada experimentalmente, a fórmulas semiempíricas. La base de los primeros intentos de este tipo fué el resultado teórico obtenido por Wentzel, en el que estima que P_{KA} debe ser independiente de Z , y P_{KX} debe variar aproximadamente como Z^4 ; en sus cálculos utiliza funciones de onda hidrogenoide sin apantallamiento. (Wentzel, 1927);

$$P_{KX} = aZ^4; \quad P_{KA} = b \quad (3.58)$$

y por lo tanto tendremos:

$$\omega_K = \frac{Z^4}{a + bZ^4} \quad (3.59)$$

la constante b/a es del orden de 10^6 (Backhurst, 1936; Burhop, 1952). Se han sugerido modificaciones a esta fórmula por varios autores; Burhop (1955) propuso la siguiente con el fin de incluir efectos de apantallamiento y relativistas:

$$\frac{\omega_K}{1 - \omega_K} = (-A + BZ - CZ^3)^4 \quad (3.60)$$

y de acuerdo con Hagedoorn y Wapstra(1960) los valores numéricos de las constantes son:

$$10^2 A = 6.4; \quad 10^2 B = 3.40; \quad 10^6 C = 1.03 \quad (3.61)$$

Listengarten (1962) calculó ω_K en la región $Z = 65 - 94$ usando funciones de onda relativistas y el esquema de acoplamiento jj. Sus valores se dan en la Tabla II. La producción fluorescente de la capa-K calculada por varios autores ha sido revisada por Bambynek (1972, sec.3.4 y Tablas III y IV)

Ultimamente ha sido posible calcular la producción fluorescente a partir de primeros principios. En es to han influido diversos factores:(1). La disponibilidad de rápidas computadoras ha hecho posible la inclusión de todas las transiciones que contribuyen a la anchura total Auger, del nivel K; (2). Se han hecho avances en el desarrollo de funciones de onda más realistas, tanto por mejoras en el apantallamiento de las funciones de onda hidrógenoide, como por el desarrollo de funciones de onda numéricas del campo auto-consistente; (3). Se han obtenido energías de amarre más exactas, las cuales son importantes debido a que las probabilidades de transición no-radiativa son muy sensitivas a las energías de los electrones salientes; (4). Se han obtenido resultados más generales y exactos para las probabilidades de transición radiativa.

Por encima de $Z \approx 50$ los valores teóricos de ω_K son ligeramente más altos que los valores derivados de los mejores ajustes de la ec.(3.60) a los resultados experimentales selectos, debido a que se han despreciado efectos relativistas.

Para la determinación de ω_K (o de a_K) es necesario medir las velocidades de emisión de rayos-X de la capa-K o de los electrones Auger-K, así como el número

de vacancias originales en la capa-K. Las vacancias en la capa-K son producidas por impacto de partículas cargadas, fotoionización, conversión interna y otros procesos, de los cuales depende el método a seguir en la determinación de ω_K ; este también depende del material del blanco, los detectores y otros factores.

Los primeros cálculos amplios de las velocidades de transición radiativa, Auger, y Coster-Kronig para la capa-L, fueron realizados por Mc. Guire (1971), quien da una lista de resultados para $12 \leq Z \leq 90$. Los cálculos están basados en un potencial Herman-Skilman no relativista; las probabilidades de transición Auger se calculan en el esquema de acoplamiento LS, mientras que las probabilidades de transición Coster-Kronig se calculan en acoplamiento jj. La producción fluorescente de las subcapas L_2 , L_3 y las probabilidades de transición Coster-Kronig L_2-L_3-X para: $26 \leq Z \leq 93$ ha sido calculada por Chen, Craseman y Kostrun (1971,a) a partir de funciones de onda no-relativistas hidrogenoides con apantallamiento; las correspondientes cantidades para la subcapa L_1 fueron calculadas por estos mismos autores en otra ocasión. Aunque existe en general un buen acuerdo con los resultados experimentales para la producción fluorescente de la capa-L, aún quedan problemáticas discrepancias entre las probabilidades de transición Coster-Kronig.

4B. El Efecto Auger en Átomos con una Configuración Arbitraria de Vacancias.

Hasta ahora se han considerado solamente los casos en que el átomo tiene capas cerradas y una sola vacancia inicial en una de sus capas internas. En la situación más general se tiene una distribución arbitraria de vacancias y es necesario entonces tomar en consideración a las expresiones apropiadas para las velocidades de transición Auger. En el límite en el que las capas se

vuelven a llenar, debemos recuperar las expresiones anteriores. Seguiremos el desarrollo de Mc. Guire (Mc. Guire 1975).

Introducción.

Como sabemos, siempre que la estructura física bajo consideración consista en dos ó más partículas idénticas, los requerimientos de la simetría impuestos por la estadística deben ser tomados en consideración. Nos ocupamos primero de la construcción de una función de onda Ψ para el sistema total que sea una eigenfunción del momento angular total y que también satisfaga la condición de antisimetría.

Debemos distinguir entre partículas idénticas y partículas equivalentes. Partículas equivalentes (u orbitales equivalentes) son aquellas para las que sus funciones de onda de partícula independiente son idénticas en lo que se refiere a los números cuánticos del momento angular y a la parte radial de dichas funciones. En el esquema de acoplamiento jj , esto supondría las mismas j, ℓ para cada partícula y designaríamos a la función de onda por Ψ_{jm} . Entonces φ_A, φ_B pueden diferir (y deben, si son fermiones) solamente por la m .

Si tenemos a un grupo de electrones equivalentes dentro de una cierta configuración, nos deberemos conformar con tratar al grupo como a un todo unitario en lo que al acoplamiento del momento angular se refiere, ya que no es posible definir al momento angular para una parte del grupo. Denotaremos a los términos permitidos de esta configuración por αSL . La construcción de estados antisimétricos es directa (de-Shalit y Talmi 1963, cap.25) excepto cuando tenemos electrones equivalentes. Para N electrones dentro de la misma órbita diremos que estos se encuentran en la configuración \mathcal{L}^N , dentro del esquema de acoplamiento LS ; en el esquema jj escribimos j^N para denotar a esta configuración. Podemos obtener una expre-

sión para la función de onda antisimétrica de estos n electrones utilizado los Coeficientes de Precedencia Fraccional (c.p.f.), que en acoplamiento LS dan (de-Shalit y Talmi, 1963, caps.26 y 31):

$$\psi(l^n \alpha SL) = \sum_{\alpha' S' L'} [l^{n-1}(\alpha' S' L') \{l SL\} \{l^n \alpha SL\}] \psi[l^{n-1}(\alpha' S' L') \{l SL\}] \dots (3.62)$$

en donde α' y α denotan a los números cuánticos adicionales para distinguir entre los diferentes posibles estados con los mismos valores de S' , L' , y S, L , respectivamente. La expresión análoga a la anterior pero en el esquema de acoplamiento jj es:

$$\psi(j^n \alpha JM) = \sum_{\alpha' J'} [j^{n-1}(\alpha' J') \{j J\} \{j^n \alpha JM\}] \psi[j^{n-1}(\alpha' J') \{j J\}] \quad (3.63)$$

Los c.p.f. en las ecs. (3.62) y (3.63) determinan el grado en que cada uno de los estados precedentes participan en la construcción del estado antisimétrico. Estos son característicos de la configuración y del momento angular involucrado, y no dependen de la dinámica del sistema, ni de la M . La notación especial: $[\dots \{ \dots \}]$, es usada para resaltar el hecho de que estos no forman una matriz cuadrada. Los estados $\psi(l^n \alpha SL)$, $\psi(j^n \alpha JM)$ son totalmente antisimétricos; mientras que los estados

$\psi[l^{n-1}(\alpha' S' L') \{l SL\}]$, $\psi[j^{n-1}(\alpha' J') \{j JM\}]$ solamente son parcialmente antisimétricos (en las coordenadas de los primeros $n-1$ electrones). Por lo tanto, cualquier función antisimétrica en las coordenadas de todas las partículas, debe ser una combinación lineal de estas últimas funciones de onda. El proceso de tomar las combinaciones lineales apropiadas es una proyección del espacio (caracterizado por S y L , ó bien por JM) de las funciones de onda antisimétricas en las primeras $n-1$ partículas, al subespacio de las funciones de onda completamente antisimétricas.

Para asegurar la normalización tanto en la ec. (3.62) como en (3.63), los c.p.f. deben estar también normalizados:

$$\sum_{\alpha' S' L'} [l^{\alpha' S' L'} \{ l^{n-1}(\alpha' S' L') \} l^{\alpha' S' L'}] [l^{n-1}(\alpha' S' L') \{ l^{\alpha' S' L'} \} l^{\alpha' S' L'}] = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (3.64)$$

en acoplamiento LS; ó bien, en acoplamiento jj:

$$\sum_{\alpha' J'} [j^n \alpha J \{ j^{n-1}(\alpha' J') \} j J] [j^{n-1}(\alpha' J') \{ j^n \alpha J \} j J] = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (3.65)$$

Estaremos interesados en el caso en el que tengamos varios grupos de electrones ó de agujeros equivalentes, formando a las diferentes capas de la configuración atómica: n_a partículas en la órbita j_a ; n_b partículas en la órbita j_b ; etc.. Esta configuración es denotada por $j_a^{n_a}, j_b^{n_b}, \dots$. Consideramos estados del sistema total en el cual cada configuración de partículas equivalentes esté en un estado antisimétrico definido con un momento angular total definido (J_a, J_b, \dots). Si hay varios estados con el mismo eigenvalor de J_i^2 dentro de la configuración $j_i^{n_i}$ de partículas equivalentes, habrá algunos números cuánticos adicionales: $\alpha_a, \alpha_b, \alpha_c, \dots$. Un estado que pertenece a un eigenvalor de la J^2 total del sistema completo, puede ser obtenido por un acoplamiento sucesivo de los vectores J_a, J_b, \dots , para obtener una J total. Si hay varias formas de obtener el valor de la J total, cada una de estas define a un estado independiente del sistema total. Estos pueden distinguirse por los valores de las sumas intermedias de los momentos angulares $J_a J_b (J_{ab}) J_c (J_{abc}), \dots$. Estados con conjuntos distintos de estas sumas, ó de J y M , son ortogonales. Las funciones de onda construídas de esta manera las podemos denotar por

$$\Psi [j_a^{n_a} (1, \dots, n_a; \alpha_a J_a) j_b^{n_b} (n_a+1, \dots, n_a+n_b; \alpha_b J_b) J_{ab} j_c (n_a+n_b+1, \dots, n_a+n_b+n_c; \alpha_c J_c) J_{abc} \dots; JM] \quad (3.66)$$

Esta notación implica que las partículas 1 a n_a , todas ocupan la órbita j_a , estando acopladas para formar el estado antisimétrico caracterizado por $\alpha_a J_a$; las partículas n_a+1 a n_a+n_b , todas ocupando la órbita j_b están acopladas para formar al estado antisimétrico $\alpha_b J_b$; etc.. Los momentos angulares J_a y J_b dan J_{ab} ; J_{ab} y J_c son acoplados a J_{abc} , etc., hasta sumar J . La función de onda (3.66) no es completamente antisimétrica. Es antisimétrica dentro de cada grupo de partículas equivalentes, pero no antisimétrica con respecto al intercambio de dos partículas de diferentes grupos. La función de onda antisimétrica se obtiene aplicando el operador

$$\mathcal{A} = \sqrt{\frac{n_a! n_b! \dots}{n!}} \sum_P (-1)^P P$$

a la función de onda en (3.66); y la podemos denotar por

$$\mathcal{I}[\alpha_a J_a \alpha_b J_b (J_{ab}) \alpha_c J_c (J_{abc}) \dots; JM] = \mathcal{A} \mathcal{I}[j_a^{n_a}(l_1, \dots, l_{n_a}; \alpha_a J_a) \dots] \quad \dots (3.67)$$

Funciones de onda antisimétricas con conjuntos distintos de números cuánticos, son distintos entre sí.

En el acoplamiento LS tenemos n_a partículas en la órbita l_a , n_b partículas en la órbita l_b , etc.. Construimos funciones de onda de toda la configuración: $l_a^{n_a} l_b^{n_b} \dots$ a partir de determinados estados antisimétricos para los grupos de partículas equivalentes. Estos estados están caracterizados por los espines S_a, S_b, \dots , los momentos angulares orbitales L_a, L_b, \dots , y los números cuánticos adicionales $\alpha_a, \alpha_b, \dots$. Ahora acoplamos sucesivamente a los espines: S_a se acopla a S_b para formar S_{ab} ; la suma intermedia S_{ab} es acoplada a S_c para formar S_{abc} ; etc., hasta formar a la S total. Similarmente, los momentos angulares orbitales son acoplados sucesivamente hasta que se obtiene a la L total. El momento angular total es obtenido acoplando S y L para formar $J = S + L$. Estas funciones de onda están caracterizadas por el conjunto de valores $S_a, S_b, \dots; l_a, l_b, \dots, \alpha_a, \alpha_b, \dots, l_{ab}, \dots; S, L, J$. de una manera única y completa. Estas funciones de onda

que no son antisimétricas ante el intercambio de partículas de grupos diferentes, pueden usarse en los cálculos en lugar de las funciones de onda completamente antisimétricas. Los elementos de matriz de operadores de una sola partícula pueden calcularse directamente con estas funciones. En el cálculo de elementos de matriz de operadores Q_{ik} de dos partículas, la antisimetrización puede introducirse hasta el último paso de la evaluación, dentro de configuraciones de dos partículas.

En esta última parte de la sección, trataremos a tres situaciones: En primer lugar tomaremos el caso en que la vacancia que será ocupada se encuentra en una capa distinta a las que se desocuparán, siendo estas últimas a su vez diferentes entre sí. Aquí estaremos excluyendo a las transiciones Coster-Kronig, y a las K-LL, por ejemplo. En segundo lugar tomaremos el caso en que la vacancia que será ocupada se encuentra dentro de alguna de las capas que se desocuparán. Estas son las transiciones Coster-Kronig. Y en tercer lugar tendremos que las dos vacancias creadas en la transición se encuentran ambas en la misma capa parcialmente ocupada. Esto incluye a las transiciones K-LL, y también a las transiciones llamadas Super-Coster-Kronig, en las cuales la vacancia que será ocupada se encuentra dentro de la misma capa en donde se formarán las otras dos.

i). Agujeros no-equivalentes en el estado inicial y en el estado final.

En el estado inicial tenemos una capa interna l_1 con $(M+1)$ agujeros descritos por los números cuánticos α_1, S_1, L_1 , y también un agujero en el continuo de energía E y los números cuánticos l_2 y j_2 . También tenemos capas más externas parcialmente ocupadas; una capa l_3 con N agujeros y números cuánticos α_3, S_3, L_3 ; y una capa l_4 con P agujeros y números cuánticos α_4, S_4, L_4 ; y el resto de los agujeros con los números cuánticos S_R, L_R

Para cada grupo de agujeros equivalentes tenemos funciones de onda antisimétricas de la forma (3.62) y debemos acoplar a estos grupos por medio de coeficientes C.-G., para formar al estado inicial con el número cuántico total el cual debe antisimetrizarse.

En el estado final tenemos a la capa l_1 con m agujeros y números cuánticos β_1, Q_1, P_1 ; a la capa l_3 $(n+1)$ agujeros y números cuánticos β_3, Q_3, P_3 ; a la capa l_4 con $(p+1)$ agujeros y números cuánticos β_4, Q_4, P_4 ; y el resto de los agujeros con números cuánticos Q_R, P_R . Los números cuánticos que describen al estado final son Q y P . Al igual que en el estado inicial, debemos acoplar a los diferentes grupos equivalentes para formar al estado final antisimétrico.

Con el estado inicial Ψ_i , denotado por:

$$\Psi_i = \Psi_i [l_1^{m+1} \alpha_1 S_1 L_1 l_2 j_2 (S_{12} L_{12}) l_3^n \alpha_3 S_3 L_3 (S_{123} L_{123}) l_4^p \alpha_4 S_4 L_4 (S_{1234} L_{1234}) S_R L_R (S_L); JM] \dots (3.68)$$

y el final por (Ψ_f) :

$$\Psi_f = \Psi_f [l_1^m \beta_1 Q_1 P_1 l_2 j_2 (Q_{12} P_{12}) l_3^{n+1} \beta_3 Q_3 P_3 (Q_{123} P_{123}) l_4^{p+1} \beta_4 Q_4 P_4 (Q_{1234} P_{1234}) Q_R P_R (Q P); JM] \quad (3.69)$$

llevaremos a cabo el cálculo de la probabilidad de transición Auger evaluando los elementos de matriz de la interacción electrostática residual entre los electrones con las funciones anteriores, y usando unidades atómicas, normalizando el orbital del continuo a 2π por hartree, sumando sobre los estados finales y promediando sobre los iniciales, para obtener:

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{(2L_i+1)(2S_i+1)(2P_i+1)(2Q_i+1)(2R_i+1)(2J_{i2}+1)}{(2L_R+1)(2S_R+1)(2L_3+1)(2S_3+1)(2L_4+1)(2S_4+1)}$$

$$\times (2P+1)(2Q+1)(2J+1) \prod_{i=1}^4 (2l_i+1) \sum_{A_i B_i C_i} (2C_i+1) \quad (3.70)$$

$$\times \prod_{i=1}^4 (2A_i+1)(2B_i+1) \delta(L_R P_R) \delta(Q_R, S_R) M^2 F_1^2$$

donde

$$F_1 = [(m+1)(n+1)(p+1)]^{1/2} [l_1^{m+1} \alpha_1 S_1 L_1 \{l_1^m \beta_1 Q_1 P_1\}] \quad (3.71)$$

$$\times [l_3^{n+1} \beta_3 Q_3 P_3 \{l_3^m \alpha_3 L_3 S_3\}] [l_4^{p+1} \beta_4 Q_4 P_4 \{l_4^m \alpha_4 S_4 L_4\}].$$

son los coeficientes de precedencia fraccional. Además

$$M = \sum \begin{pmatrix} f & g & d \\ f_1 & g_1 & d_1 \end{pmatrix} (-)^{2f-f_1-g-g_1+d+d_1} I(y y' f g)$$

$$\times (2f+1)(2g+1)(2f_1+1)(2g_1+1)(2d+1)(2d_1+1)(2b+1) \left\{ \begin{matrix} A_4 & g_1 & P_1 \\ l_1 & L_1 & d \end{matrix} \right\}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} B_4 & f_1 & Q_1 \\ 1/2 & S_1 & d_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_2 & l_1 & g \\ 1/2 & 1/2 & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & J_{12} & C_4 \\ J_1 & b & j_2 \end{matrix} \right\} (-)^{\theta} \left\{ \begin{matrix} l_2 & 1/2 & j_2 \\ p & q & J \\ d & d_1 & b \end{matrix} \right\} \quad (3.72)$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} L_1 & d & A_4 \\ S_1 & d_1 & B_4 \\ J_1 & b & C_4 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} A_1 & P_4 & P_3 \\ A_2 & L_4 & L_3 \\ g & l_4 & l_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} P & A_3 & P_2 \\ g & A_1 & A_2 \\ g_1 & P_1 & A_4 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} B_1 & Q_4 & Q_3 \\ B_2 & S_4 & S_3 \\ f & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} Q & B_3 & Q_R \\ f & B_1 & B_2 \\ f_1 & Q_1 & B_4 \end{matrix} \right\}$$

aquí

$$\theta = L_4 + P_4 - P_3 - L_3 + P_R - P_1 - L_1 + 2J_{12} + A_1 - A_4 + S_4 + Q_4 - Q_3 - S_3 + Q_R - Q_1 - S_1 + B_1 - B_4. \quad (3.73)$$

Los elementos de matriz radiales intervienen por medio del factor $I(\nu \nu' f g)$ dado por:

$$I(\nu \nu' S L) = \sum_{\nu} D_{\nu} \begin{pmatrix} l_1 & \nu & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & \nu & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_3 & \nu \\ l_4 & l_2 & L \end{Bmatrix} + \left. \begin{aligned} & (-)^{S-L} \sum_{\nu'} E_{\nu'} \begin{pmatrix} l_1 & \nu' & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & \nu' & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_4 & \nu' \\ l_3 & l_2 & L \end{Bmatrix} \end{aligned} \right\} (3.74)$$

Los parámetros C_i, A_i, B_i, d, f, g y b son variables mudas. Supongamos que $P_1 = Q_1 = L_3 = S_3 = L_4 = S_4 = P_2 = Q_2 = 0$; esto es, los electrones pasivos y los que llevarán a cabo la transición se encuentran en capas cerradas, y existe una vacancia inicial única; en este caso tendremos:

$$W_{i \rightarrow f}^L = (2j_z + 1)(2J_{1z} + 1) \prod_{i=1}^4 (2l_i + 1)(2P_i + 1)(2Q_i + 1) \left\{ \begin{matrix} l_2 & l_2 & Q \\ l_1 & l_2 & P \\ J_1 & j_z & J_{1z} \end{matrix} \right\}^2 \times \left\{ \sum_{\nu} D_{\nu} \begin{pmatrix} l_1 & \nu & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & \nu & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_3 & \nu \\ l_4 & l_2 & P \end{Bmatrix} + (-)^{P+Q} \sum_{\nu} E_{\nu'} \begin{pmatrix} l_1 & \nu & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & \nu & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & l_4 & \nu' \\ l_3 & l_2 & P \end{Bmatrix} \right\}^2 \quad (3.75)$$

El resultado en el acoplamiento LS se puede obtener sumando en la ec. (3.72) sobre J_z, J_{1z} y J :

$$W_{i \rightarrow f}^L = \frac{(2P_3 + 1)(2Q_3 + 1)(2P_4 + 1)(2Q_4 + 1)(2P_1 + 1)(2Q_1 + 1)}{(2L_R + 1)(2S_R + 1)(2L_3 + 1)(2S_3 + 1)(2L_4 + 1)(2S_4 + 1)} \prod_{i=1}^4 (2l_i + 1) \times \delta(L_R, P_R) \delta(S_R, Q_R) F_i^2 \sum_{x,y} (2x+1)(2y+1) \sum_{A_i, B_i} \prod_{i=1}^4 (2A_i + 1)(2B_i + 1) \times \left\{ \begin{matrix} A_2 & A_3 & x \\ P & A_4 & P_R \end{matrix} \right\}^2 \left\{ \begin{matrix} B_2 & B_3 & y \\ Q & B_4 & Q_R \end{matrix} \right\}^2 \left\{ \sum_{f,g} (-)^f I(\nu \nu' f g) (2f+1)(2g+1) \begin{Bmatrix} P_1 & g & x \\ l_2 & l_1 & l_1 \end{Bmatrix} \right\} \times \left\{ \begin{matrix} P_1 & g & x \\ A_2 & A_3 & A_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} Q_1 & f & y \\ l_2 & S_1 & l_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} Q_1 & f & y \\ B_2 & B_3 & B_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} A_1 & P_1 & P_3 \\ A_2 & L_1 & L_3 \\ g & l_4 & l_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} B_1 & Q_4 & Q_3 \\ B_2 & S_4 & S_3 \\ f & l_2 & l_2 \end{matrix} \right\} \quad (3.76)$$

Si los términos P_R, Q_R de la configuración pasiva de electrones no afecta a la energía del electrón Auger, podemos sumar sobre P y Q en la expresión anterior y encontramos:

$$\sum_{P,Q} w_{i \rightarrow f} = \frac{(2P_3+1)(2Q_3+1)(2P_4+1)(2Q_4+1)}{(2L_3+1)(2S_3+1)(2L_4+1)(2S_4+1)} \frac{(2l_2+1)}{8} \times \delta(L_R, P_R) \delta(Q_R, S_R) \sum_{f,g} (2f+1)(2g+1) [(\nu\nu'fg)^2 (m+1)(n+1)(p+1)] \times [l_1^{m+1} \alpha_1 S_1 L_1 \{ l_1^m \beta_1 Q_1 P_1 \}]^2 [l_3^{n+1} \beta_3 Q_3 P_3 \{ l_3^n \alpha_3 S_3 L_3 \}]^2 \times [l_4^{p+1} \beta_4 Q_4 P_4 \{ l_4^p \alpha_4 S_4 L_4 \}]^2 \quad (3.77)$$

Este resultado es independiente de la estructura de los electrones pasivos. Si en lo que estamos interesados es en la velocidad de transición total, bastará con suponer que los corrimientos en la energía debidos a la estructura de electrones pasivos no afectan a los elementos de matriz radiales. Estando interesados en la velocidad de transición total y sumando sobre: $\beta_1, P_1, Q_1; \beta_3, P_3, Q_3; \beta_4, P_4, Q_4$, encontramos:

$$\sum \left(\begin{matrix} \beta_1 & \beta_3 & \beta_4 \\ P_1 & P_3 & P_4 \\ Q_1 & Q_3 & Q_4 \end{matrix} \right) [l_1^{m+1} \alpha_1 S_1 L_1 \{ l_1^m \beta_1 Q_1 P_1 \}]^2 [l_3^{n+1} \beta_3 Q_3 P_3 \{ l_3^n \alpha_3 S_3 L_3 \}]^2 \times [l_4^{p+1} \beta_4 Q_4 P_4 \{ l_4^p \alpha_4 S_4 L_4 \}]^2 = (2L_3+1)(2S_3+1)(2L_4+1)(2S_4+1) \times \frac{4l_3+2-n}{n+1} \cdot \frac{4l_4+2-p}{p+1}$$

de modo que tenemos:

$$w_{i \rightarrow f} = (m+1)(4l_3+2-n)(4l_4+2-p) \left[\frac{1}{8} (2l_2+1) \right] \delta(L_R, P_R) \delta(S_R, Q_R) \times \sum_{f,g} (2f+1)(2g+1) [(\nu\nu'fg)^2] \quad (3.78)$$

Si escribimos $w_{i \rightarrow f} = w_{m+1, n, p}$, tendremos:

$$w_{100} = \frac{\prod_{i=1}^4 (2l_i+1)}{2(2l_1+1)} \delta(L_R, P_R) \delta(S_R, Q_R) \sum_{f, g} (2f+1)(2g+1) [(\nu\nu'fg)^2] \quad (3.79)$$

Esta es exactamente la velocidad de transición obtenida anteriormente en la ec. (3.40) de la sec. (3), para el acoplamiento LS.

La velocidad de transición Auger total para el caso en que tengamos a una sola vacancia original y a las demás capas cerradas en el esquema jj, la podemos obtener a partir de la ec. (3.75) por medio de una transformación de acoplamientos. Al derivar a la ec. (3.75) formamos al estado final acoplando l_3 a l_4 para obtener P , y S_3 a S_4 para obtener Q . Al estado inicial lo consideramos con una J total definida. Como la interacción electrostática se anula al evaluarla entre dos estados con números cuánticos totales distintos, solamente el estado final para el cual P y Q se combinen para dar J están permitidos. En efecto, tenemos al producto de coeficientes C.-G. de la forma $(l m_e, l' m_e' | P M_P) (s m_s, s' m_s' | Q M_Q) \times (P M_P, Q M_Q | J M)$. Equivalentemente podríamos haber usado a la combinación $(s m_s, l m_e | j m_j) (s' m_s', l' m_e' | j' m_j') (j m_j, j' m_j' | J M)$. Las combinaciones están dadas por la transformación que nos da a las funciones de onda en el esquema jj en términos de las funciones de onda del esquema LS (de-Shalit y Talmi, 1963; caps. 19-21):

$$\psi_A(n_a l_a j_a, n_b l_b j_b; J M) = \sum_{S, L} [(2S+1)(2L+1)(2j_a+1)(2j_b+1)]^{1/2} \times \begin{Bmatrix} 1/2 & l_a & j_a \\ 1/2 & l_b & j_b \\ S & L & J \end{Bmatrix} \psi_A(n_a l_a; n_b l_b; S L J M). \quad (3.80)$$

Así, obtendremos el resultado en el esquema jj si introducimos entre los signos de valor absoluto en la ec. () a la cantidad:

$$\sum_{P,Q} \left[(2j_3+1)(2j_4+1)(2P+1)(2Q+1) \right]^{1/2} \begin{Bmatrix} Q & P & J \\ S_3 & l_3 & j_3 \\ S_4 & l_4 & j_4 \end{Bmatrix}$$

De este modo obtenemos:

$$\left. \begin{aligned} W &= (2J+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1) \prod_{i=1}^4 (2l_i+1) \left| \sum_{\nu} D_{\nu} \begin{pmatrix} l_1 & \nu & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\ & \times \begin{pmatrix} l_2 & \nu & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & j_4 & J \\ j_2 & j_1 & \nu \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & l_4 & j_4 \\ \nu & j_2 & l_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & l_3 & j_3 \\ \nu & j_1 & l_1 \end{Bmatrix} - (-)^{J-2j_4} \sum_{\nu'} E_{\nu'} \\ & \times \left| \begin{pmatrix} l_1 & \nu' & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & \nu' & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & j_4 & J \\ j_1 & j_2 & \nu' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & l_4 & j_4 \\ \nu' & j_1 & l_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & l_3 & j_3 \\ \nu' & j_2 & l_2 \end{Bmatrix} \right|^2 \end{aligned} \right\} (3.81)$$

Este es el mismo resultado obtenido en la ec. () sec. 4.A. para el esquema de acoplamiento jj.

ii). Agujeros equivalentes en los estados inicial y final.

Los resultados de la secc. anterior son aplicables solamente si el agujero inicial pasa a otra capa durante la transición Auger. En general no son aplicables si la vacancia original pasa de una subcapa a otra dentro de la misma capa durante la transición. En este último caso, tenemos para el estado inicial a una capa l_1 con $m+1$ agujeros y números cuánticos α_1, S_1, L_1, J_1 ; un agujero en el continuo con números cuánticos l_2, s_2, j_2 ; una capa l_3 con n agujeros y números cuánticos α_3, S_3, L_3 ; y una estructura de electrones pasivos con números cuánticos S_R, L_R . El estado inicial tiene un número cuántico total J . En el estado final tenemos una capa l_1 con $m+1$ agujeros nuevamente, y los números cuánticos β_1, Q_1, P_1 ; una capa l_3 con $(n+1)$ agujeros y números cuánticos

β_3, Q_3, P_3 , y una estructura de electrones pasivos con números cuánticos Q_R, P_R . La velocidad de transición se puede encontrar modificando el álgebra que nos llevó a la ec. (3.70):

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{(2L_1+1)(2S_1+1)(2P_1+1)(2Q_1+1)(2P_3+1)(2Q_3+1)(2J_2+1)(2J_3+1)}{(2L_3+1)(2S_3+1)(2L_R+1)(2S_R+1)}$$

$$\times (2P+1)(2Q+1)(2J+1) \prod_{i=1}^4 (2L_i+1) \sum_{A_i, B_i, C_i} (2C_i+1) \prod_{i=1}^2 (2A_i+1)(2B_i+1)$$

$$\times \delta(S_R, Q_R) \delta(P_R, L_R) |F_2 M|^2$$

donde

$$F_2 = \sum_{A_i, P_i, Q_i} (-1)^{P_i+Q_i} [(m+1)(n+1)(m+1)]^{1/2} [l_1^{m+1} \alpha_1 S_1 L_1] [l_1^m \beta_1 Q_1 P_1]$$

$$\times [l_1^{m+1} \beta_1 Q_1 P_1] [l_1^m \beta_1 P_1 Q_1] [l_3^{n+1} \beta_3 Q_3 P_3] [l_3^n \alpha_3 S_3 L_3]$$

El elemento de matriz M es:

$$M = \sum_{d, d_1, b} (2d+1)(2d_1+1)(2b+1) \left\{ \begin{matrix} J & J_2 & Q_1 \\ J_1 & b & j_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_2 & s_2 & j_2 \\ p & Q & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & d & A_1 \\ S_1 & d_1 & B_1 \\ J_1 & b & C_1 \end{matrix} \right\}$$

$$\times \sum_{g, x} (-1)^{2g} (2x+1)(2g+1) \left\{ \begin{matrix} L_1 & l_2 & x \\ p & A_1 & d \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} p & A_1 & x \\ L_3 & A_2 & L_R \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_3 & A_2 & x \\ p_1 & l_3 & P_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} p_1 & l_3 & x \\ g_1 & P_1 & l_1 \end{matrix} \right\}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} g & P_1 & x \\ L_1 & l_2 & l_1 \end{matrix} \right\} \sum_{f, y} (-1)^f (2y+1)(2f+1) \left\{ \begin{matrix} s_1 & s_2 & y \\ s_3 & B_1 & d_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} Q & B_1 & y \\ s_3 & B_2 & S_R \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} s_3 & B_2 & y \\ Q_1 & s_3 & Q_3 \end{matrix} \right\}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} Q_1 & s_3 & y \\ f & Q_1 & s_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} f & Q_1 & y \\ S_1 & s_2 & S_1 \end{matrix} \right\} I(\nu \nu' f g).$$

(3.82)

Esta expresión puede simplificarse en ciertos casos límite. Cuando $P_i = Q_i = L_3 = S_3 = L_R = S_R = 0$ la ec. (3.82) se reduce a la ec. (3.75). Cuando $L_3 = S_3 = L_R = S_R = 0$ encontramos:

$$\begin{aligned}
 W_{i \rightarrow f} &= (2L_1+1)^2 (2S_1+1)^2 (2P+1)(2Q+1)(2J+1)(2j_2+1)(2P+1)^2 (2Q+1)^2 \\
 &\prod_{i=1}^4 (2l_i+1) \left\{ \begin{matrix} l_2 & s_2 & j_2 \\ P & Q & J \\ L_1 & S_1 & J_1 \end{matrix} \right\}^2 \left| \sum_{\beta_i, Q_i, P_i} (-)^{P_i+Q_i} \left[\begin{matrix} m+1 \\ l_1 \end{matrix} \alpha_i S_i L_i \right] \left[\begin{matrix} m \\ l_1 \end{matrix} \beta_i Q_i P_i \right] \right. \\
 &\times \left[\begin{matrix} m+1 \\ l_1 \end{matrix} \beta_i Q_i P_i \right] \left[\begin{matrix} m \\ l_1 \end{matrix} \beta_i Q_i P_i \right] \sum_{f, g} (-)^{f+2g} (2f+1)(2g+1) \left\{ \begin{matrix} P_1 & l_3 & P \\ g & P_2 & l_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} g & P_i & P \\ L_1 & l_2 & l_1 \end{matrix} \right\} \\
 &\times \left\{ \begin{matrix} Q_1 & s_3 & Q \\ f & Q_i & S_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} f & Q_i & Q \\ S_1 & s_2 & S_1 \end{matrix} \right\} \left| I(\nu \nu' f g) \right|^2 \dots (3.83)
 \end{aligned}$$

Finalmente, para el caso en que $L_3 = S_3 = P_i = Q_i = 0$ tenemos:

$$\begin{aligned}
 W_{i \rightarrow f} &= \frac{(2P+1)(2Q+1)(2J+1)(2j_2+1)(2J_{12}+1)}{(2L_R+1)(2S_R+1)} \prod_{i=1}^4 (2l_i+1) \\
 &\times \sum_{A_1, B_1, C_1} (2A_2+1)(2B_2+1)(2C_2+1) \left| \sum_{d, d_1, b} (2d+1)(2d_1+1)(2b+1) \left\{ \begin{matrix} J & J_{12} & C_1 \\ J_1 & b & j_2 \end{matrix} \right\} \right. \\
 &\left. \left\{ \begin{matrix} l_1 & l_2 & A_2 \\ P & L_R & d \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 1/2 & B_2 \\ Q & S_R & d_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_2 & s_2 & j_2 \\ P & Q & J \\ d & d_1 & b \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_1 & d & L_R \\ 1/2 & d_1 & S_R \end{matrix} \right\} \left| I(\nu \nu' B_2 A_2) \right|^2 \dots (3.84)
 \end{aligned}$$

Estas dos últimas expresiones pueden ser usadas para calcular las velocidades de transición Coster-Kronig cuando se tienen vacancias múltiples; digamos: $L_2 L_2 \rightarrow L_2 L_3 X$ con la primera, y $L_1 L_2 \rightarrow L_1 L_3 X$, con la segunda.

iii). Agujeros equivalentes en el estado final.

Para el caso en que tanto l_3 como l_4 se encuentren en la misma capa parcialmente ocupada, podemos derivar la velocidad de transición Auger a partir de la ec. (

) si tomamos $l_4 = S_4 = 0$ e insertamos una combinación apropiada de coeficientes de precedencia fraccional. En el estado inicial tenemos una capa l_1 con $(m+1)$ agujeros, y números cuánticos α_1, S_1, L_1, J_1 ; un agujero en el continuo con números cuánticos l_2, j_2 , una capa l_3 con n agujeros y números cuánticos α_3, S_3, L_3 ; y una estructura de electrones pasivos con los números cuánticos S_R, L_R . En el estado final tenemos a una capa l_1 con M agujeros y números cuánticos β_1, Q_1, P_1 ; una capa l_3 con $n+2$ agujeros y números cuánticos β_3, Q_3, P_3 ; y una estructura pasiva de electrones descrita por los números cuánticos Q_R, P_R . La probabilidad de transición Auger es en este caso:

$$\begin{aligned}
 W_{i \rightarrow f} &= \frac{(2L_1+1)(2S_1+1)(2P_3+1)(2Q_3+1)(2J_1+1)(2J_1+1)(2j_2+1)}{(2L_3+1)(2S_3+1)(2L_R+1)(2S_R+1)} \\
 &\times \prod_{i=1}^4 (2l_i+1) \sum_{A_i, B_i, C_i} (2C_i+1) \prod_{i=1}^2 (2A_i+1)(2B_i+1) \delta(L_R, P_R) \delta(Q_R, S_R) \\
 &\times |F_3 M|^2 \quad \dots (3.85)
 \end{aligned}$$

en esta ecuación la F_3 es:

$$\begin{aligned}
 F_3 &= \frac{1}{2} [(m+1)(n+1)(n+2)]^{1/2} [l_1^{m+1} \alpha_1 S_1 L_1 \{ l_1^m \beta_1 Q_1 P_1 \}] \\
 &\times \sum_{\beta_3, Q_3, P_3} (-1)^\theta [(2P_3'+1)(2Q_3'+1)]^{1/2} [l_3^{n+2} \beta_3 Q_3 P_3 \{ l_3^{n+1} \beta_3' Q_3' P_3' \}] \\
 &\times [l_3^{n+1} \beta_3' Q_3' P_3' \{ l_3^m \alpha_3 S_3 L_3 \}]
 \end{aligned}$$

y la M es

$$M = \sum \binom{f \ g \ d}{f_1 \ g_1 \ d_1} (-)^{d+d_1-f-f_1-g_1} (2f+1)(2f_1+1)(2g+1)(2g_1+1)$$

$$\times (2d+1)(2d_1+1)(2b+1) \left\{ \begin{matrix} A_2 g_1 P_1 \\ l_1 L_1 d \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} B_2 f_1 Q_1 \\ \frac{1}{2} S_1 d_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J J_2 C_2 \\ J_1 b j_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} \frac{1}{2} f \\ f_1 Q d_1 \end{matrix} \right\}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} l_2 l_1 g \\ g_1 P d \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} P_3 P_3' l_3 \\ l g L_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} Q_3 Q_3' \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} f S_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_2 \frac{1}{2} j_2 \\ P Q J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 d A_2 \\ S_1 d_1 B_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} P A_1 P_R \\ g P_3 L_3 \end{matrix} \right\}$$

$$\left\{ \begin{matrix} Q B_1 Q_R \\ f Q_3 S_3 \\ f_1 Q_1 B_2 \end{matrix} \right\} I(\nu\nu'fg)$$

La cantidad Θ es:

$$\Theta = P_3 - L_3 - P_R - P_1 - L_1 - A_2 + 2J_{12} + Q_3 - S_3 - Q_R - Q_1 - S_1 - B_2$$

Para el caso en que se tengan capas llenas con una sola vacancia original, la ec. (3.85) se reduce a la ec. (3.75) con un factor $(\frac{1}{2})$. Este factor surge al evaluar a $(n+1)(n+2)/4$ en $n=0$. El factor $[(n+1)(n+2)]^{1/2}$ aparece cuando sumamos dos agujeros no-equivalentes a una capa parcialmente llena. El factor $\frac{1}{2}$ surge en la permutación sobre las coordenadas espaciales.

En acoplamiento LS, la ec. (3.85) se vuelve:

$$W_{i \rightarrow f}^{\nu} = \frac{(2P_3+1)(2Q_3+1)(2P_1+1)(2Q_1+1)}{(2L_3+1)(2S_3+1)(2L_R+1)(2S_R+1)} \prod_{i=1}^4 (2l_i+1) \delta(L_R, P_R) \delta(Q_R, S_R)$$

$$\times \sum_{A_1, A_2, B_1, B_2} (2A_1+1)(2A_2+1)(2B_1+1)(2B_2+1) \sum_{x, y} (2x+1)(2y+1) \left\{ \begin{matrix} L_3 A_1 x \\ P A_2 P_R \end{matrix} \right\}^2 \quad (3.86)$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} S_3 B_1 y \\ Q B_2 Q_R \end{matrix} \right\}^2 \left| F_3 \sum_{f, g} (-)^g (2f+1)(2g+1) I(\nu\nu'fg) \left\{ \begin{matrix} P_3 P_3' l_3 \\ l_3 g L_3 \end{matrix} \right\} \right.$$

$$x \left\{ \begin{matrix} Q_3 Q_3' 1/2 \\ 1/2 f S_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} P_1 g x \\ L_3 A, P_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 l_2 x \\ g P_1 l_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} Q_1 f y \\ S_1 B Q_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1 1/2 y \\ f Q_1 1/2 \end{matrix} \right\} \Bigg|^2$$

Nuevamente, como en la ec. (3.77), encontramos que la expresión anterior se simplifica si sumamos sobre P y Q

$$\sum_{P, Q} w_{i \rightarrow f} = \frac{(2P_3+1)(2Q_3+1)(2L_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)(2l_4+1)}{2(2L_3+1)(2S_3+1)(2l_1+1)} \cdot \frac{(m+1)(n+1)(n+2)}{4}$$

$$x \delta(L_R, P_R) \delta(Q_R, S_R) \sum_{f, g} (2f+1)(2g+1) \left[(v v' f g) \left[l_1^{m+1} \alpha_1 S_1 L_1 \right] \left[l_1^m \beta_1 Q_1 P_1 \right] \right]^2$$

$$\left| \sum_{\beta_3, Q_3, P_3} \left[(2P_3+1)(2Q_3+1) \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} P_3 P_3' l_3 \\ l_3 g L_3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} Q_3 Q_3' 1/2 \\ 1/2 f S_3 \end{matrix} \right\} \left[l_3^{n+2} \beta_3 Q_3 P_3 \right] \left[l_3^{m+1} \beta_3' Q_3' P_3' \right] \right.$$

$$\left. \left[l_3^{n+1} \beta_3' Q_3' P_3' \right] \left[l_3^m \alpha_3 S_3 L_3 \right] \right|^2 \dots (3.87)$$

La cantidad dentro del signo de valor absoluto se encuentra relacionada con el llamado coeficiente de precedencia fraccional de dos partículas. Tal cantidad surge al acoplar l_3 y l_3 para formar $f g$ y acoplar $f g$ a $\alpha_3 S_3 L_3$ para formar $\beta_3 Q_3 P_3$. Dicho coeficiente se define como (Mc. Guire, 1971):

$$\left[l^{n+2} \beta Q P \right] \left[l^2 f g, l^m \alpha S L \right] = - \sum_{\delta, P', Q'} \left[(2f+1)(2g+1)(2P'+1)(2Q'+1) \right]^{1/2} \dots (3.88)$$

$$x \left\{ \begin{matrix} L l P' \\ l P g \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S 1/2 Q' \\ 1/2 Q f \end{matrix} \right\} \left[l^{n+2} \beta Q P \right] \left[l^{m+1} \delta Q' P' \right] \left[l^{m+1} \delta Q' P' \right] \left[l^m \alpha S L \right]$$

Los coeficientes de precedencia fraccional de dos partículas cumplen con las siguientes propiedades:

$$\sum_{\alpha, L, S} \sum_{f, g} [l^{n+2} \beta_{QP} \{l^2 f g, l^n \alpha SL\}]^2 = 1 \quad (3.89a)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\beta, P, Q} (2P+1)(2Q+1) \sum_{f, g} [l^{n+2} \beta_{QP} \{l^2 f g, l^n \alpha SL\}]^2 &= \\ = \frac{(4l+2-n)(4l+1-n)}{(n+2)(n+1)} (2L+1)(2S+1) & \quad (3.89b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, L, S} \sum_{\beta, P, Q} (2P+1)(2Q+1) [l^{n+2} \beta_{QP} \{l^2 f g, l^n \alpha SL\}]^2 &= \\ = \frac{2(2f+1)(2g+1)(4l)!}{(4l-n)!(n+2)!} & \quad (3.89c) \end{aligned}$$

Y tenemos que el término dentro de los signos de valor absoluto en la ec. (3.87) es:

$$[(2f+1)(2g+1)]^{-1} \left| [l_3^{n+2} \beta_3 Q_3 P_3 \{l_3^2 f g, l_3^n S_3 L_3\}] \right|^2$$

Al calcular la velocidad de transición total, nos encontramos con que al sumar sobre $\beta_1, P_1, Q_1, \nu \beta_3, P_3, Q_3$ no es posible simplificar a la expresión resultante; esto es, no podemos sumar los c.p.f. de dos partículas sobre f, g , ya que estos son también parámetros en $I(\nu, \nu, f, g)$. Para simplificar debemos sumar también al numerador sobre α_3, S_3, L_3 . Usando la relación:

$$\sum_{\alpha_3, S_3, L_3} (2L_3+1)(2S_3+1) = (4l_3+2)! / (4l_3+2-n)! n!$$

nos encontramos con que la velocidad de transición promediada es:

$$\begin{aligned}
 \overline{W}_{i \rightarrow f} &= (m+1) \frac{(4l_3+2-n)(4l_3+1-n)}{(4l_3+2)(3l_3+1)} \left(\frac{1}{2} \right) \left[\prod_{i=1}^4 \frac{(2l_i+1)}{2l_i+1} S(L_R, P_R) \right. \\
 &\times \delta(S_R, Q_R) \sum_{f,g} (2f+1)(2g+1) \left[(\nu \nu' f g)^2 \right] = \quad (3.90) \\
 &= (m+1) \frac{(4l_3+2-n)(4l_3+1-n)}{(4l_3+2)(4l_3+1)} \frac{1}{2} W_{1,0,0}.
 \end{aligned}$$

donde $W_{1,0,0}$, está dada por la ec. (3.79).

5. Importancia de las Transiciones No-Radiativas.

Desde el punto de vista fundamental, el estudio de las transiciones no-radiativas atómicas es importante por dos razones. Las probabilidades de transición Auger son más sensibles a la naturaleza detallada de las funciones de onda que otras muchas cantidades atómicas medibles. Es por lo tanto factible que un estudio sistemático de las transiciones Auger entre los distintos estados atómicos nos proporcione información que pueda ser usada para mejorar los métodos de obtención de funciones de onda numéricas. Más aún, un conocimiento detallado de las velocidades de transición Auger y de las energías, es necesario para la interpretación correcta de una gran variedad de mediciones en física atómica y nuclear. Algunas de las aplicaciones nucleares son:

i). Conversión interna.

1). Identificación de líneas de conversión de baja energía.

Con frecuencia, las líneas de conversión de baja energía se traslapan con el espectro Auger. El conocimiento de las intensidades relativas de las líneas Auger puede simplificar la identificación de las líneas de conversión.

2). Calibración de la energía de las líneas.

Como las líneas Auger aparecen en la mayoría de los espectros de conversión y las energías de varias de las líneas K-LL son conocidas con una gran precisión, estas pueden usarse para calibración en la región de energías bajas.

3). Determinación de los coeficientes de conversión K.

En algunos casos simples, la comparación de las intensidades medidas para los rayos gama y los rayos-X de la capa-K en un cristal de centelleo de eficiencias conocidas ϵ_γ , ϵ_{KX} , nos puede dar directamente a los coeficientes de conversión interna α_K (I. Bergström et.al., 1953):

$$\alpha_K = \frac{\text{rayos-X } K}{\gamma} \frac{\epsilon_\gamma}{\epsilon_{KX} \omega_K}$$

ii) Determinación de la multipolaridad de las transiciones Gama de baja energía.

En algunos casos, una línea de conversión-K puede tener una energía tan baja, que es difícilmente observada. Comparando las intensidades de los electrones Auger-K y las líneas de conversión-K detectables, y conociendo ω_K podemos hacer una estimación de la intensidad de la línea-K de baja energía. Si las correspondientes líneas de conversión-L son medidas, la razón de conversión K/L es obtenida, y esto da información sobre la multipolaridad de las transiciones gama de baja energía.

En física atómica, las secciones transversales para procesos en los cuales sean excitadas las capas internas, a menudo pueden ser medidas detectando las intensidades de la radiación característica, corrigiendo para la producción fluorescente.

La espectroscopía electrónica Auger y la difracción de electrones de baja energía, son usados extensamente en el estudio de la física de superficies para detectar pequeñas cantidades de contaminantes. Los átomos que residen en la superficie de una muestra, pueden ser identificados por sus energías Auger.

II.4. TRANSICIONES NUCLEARES. CONVERSION INTERNA.

Introducción.

La emisión de electrones de las capas atómicas por el decaimiento de un núcleo es el llamado proceso de conversión interna; este proceso se encuentra en competencia con el de emisión de rayos gama. Este proceso de emisión de electrones es completamente análogo al efecto Auger; la única diferencia es que en lugar de tener a dos electrones haciendo la transición, tenemos involucrados a un electrón y al núcleo. A la razón entre la emisión de electrones de conversión y la emisión de rayos gama se le denomina "coeficiente de conversión interna": α , en una analogía (incompleta) con los coeficientes de producción fluorescente ω_i , relacionados con el efecto Auger. Así, α puede ser cualquier número positivo. Esta cantidad no está definida para las transiciones nucleares entre dos estados con momento angular total nulo: $I_i=0 \rightarrow I_f=0$ puesto que, como sabemos, la emisión de radiación en este caso está estrictamente prohibida; podremos hablar entonces de la velocidad absoluta de transición no-radiativa por conversión interna. En esta última situación es aún posible una transición radiativa con la emisión simultánea de dos fotones; sin embargo, la velocidad de este último proceso es extremadamente lenta. Además, para cualquier tipo de transición ($I_i \rightarrow I_f$) ya sea que I_i y/o I_f sean cero, existe otro proceso electromagnético cuando la energía es suficiente ($E > 2mc^2$, $m \equiv$ masa del electrón), este es el proceso de producción de pares, en el que la energía de excitación nuclear aparece como un par electrón-positrón. La razón de los pares a los rayos gama es de unos 10^{-4} a 10^{-3} . En lo que sigue no consideraremos a la emisión simultánea de dos fotones, ni a la producción de pares.

Si ω_e es la probabilidad de emisión de un elec

trón de conversión interna, la vida media τ está dada por:

$$\frac{1}{\tau} = w_\gamma + w_e = w_\gamma + w_K + w_L + \dots$$

donde K, L, ..., se refieren a las distintas capas atómicas, w_γ es la probabilidad de emisión γ .

La interacción electrostática residual. Una consideración semi-cuantitativa de los coeficientes de conversión interna

El Hamiltoniano del sistema atómico lo consideraremos de la forma

$$\mathcal{H}_0 = H_N + H_{at}^{(e)} \quad (4.1)$$

donde el Hamiltoniano nuclear H_N , depende solamente de las variables nucleares. $H_{at}^{(e)}$, es el Hamiltoniano del electrón dentro de un campo promedio esféricamente simétrico. Este \mathcal{H}_0 es el Hamiltoniano no-perturbado que describe a los estados estacionarios desacoplados del núcleo y los electrones:

$$\Phi^0(\xi_N, \xi_e) = \phi(\xi_N) \psi^0(\xi_e) \quad (4.2)$$

Entre estos estados tienen lugar transiciones debido a la interacción residual entre el núcleo y los electrones:

$$H' = H_{e,N} - e \sum_i U(r_i) \quad (4.3)$$

Al calcular las probabilidades de conversión interna se han hecho diversos intentos de aproximación, los cuales difieren principalmente en el tipo de funciones de onda para los electrones atómicos y en el operador que determina a las transiciones.

En primer lugar daremos una discusión semi-cuantitativa con el propósito de aclarar la naturaleza del e-

fecto e indicar el procedimiento de un cálculo más exacto que se dará posteriormente.

Consideraremos por ahora solamente a transiciones multipolares eléctricas puras, a electrones de la capa-K dentro de una aproximación no-relativista, y a energías de transición suficientemente por encima del umbral-K. La región de validez de los resultados será la de Z 's pequeñas y energías grandes pero no relativistas.

Tenemos entonces que el estado electrónico inicialmente estará descrito por la función de onda:

$$\psi_{e_i}(r) = \left(\frac{Z^3}{\pi a^3}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{Zr_e}{a}\right], \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2 Z} \quad (4.4)$$

y en el estado final por la función de onda:

$$\psi_{e_f} = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_e] \quad (4.5)$$

La forma no-relativista en la ec. (4.4) es válida para Z 's pequeñas ($Z \ll 137$, ya que la velocidad del electrón en la capa-K es $cZ/137$); la forma en la ec. (4.5) es válida para energías elevadas de transición, ya que en ese caso se puede despreciar a la distorsión coulombiana. Si denotamos a las funciones de onda nucleares de los estados inicial y final respectivamente por: ϕ_{N_i} y ϕ_{N_f} , entonces las funciones de onda de todo el sistema serán de la forma:

$$\Phi_i(\xi_N, \xi_e) = \phi_{N_i}(\xi_i) \psi_{e_i}(\xi_i); \quad \Phi_f(\xi_N, \xi_e) = \phi_{N_f}(\xi_f) \psi_{e_f}(\xi_f) \quad (4.6)$$

La probabilidad por unidad de tiempo para la conversión interna de un electrón en el estado ψ está dado por la expresión general:

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \phi_{N_f} \psi_{e_f} | H' | \phi_{N_i} \psi_{e_i} \rangle \right|^2 d\rho \quad (4.7)$$

donde $d\rho = \frac{V m \hbar k}{(2\pi \hbar)^3} d\Omega$ es el número de estados fi

nales de los electrones emitidos en el ángulo sólido $d\Omega$ por intervalo unitario de energía.

Si la longitud de onda correspondiente a la energía de excitación del núcleo atómico es mucho mayor que a (el radio de Bohr), entonces los efectos del retardamiento en la interacción son pequeños y el operador H' se reduce a la interacción coulombiana residual entre el electrón y los protones del núcleo:

$$H' = \sum_{\alpha=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{q}_{\alpha}|} - eU(\mathbf{r}) \quad (4.8)$$

donde \mathbf{r} , \mathbf{q}_{α} son las coordenadas del electrón y de los protones medidas desde el centro de masa del núcleo. El operador de la ec. (4.7) anterior no contiene variables de espín; por lo tanto no podremos describir a las transiciones nucleares que correspondan a la radiación multipolar magnética.

Para $r \gg q_{\alpha}$, podemos realizar la expansión multipolar en (4.8):

$$\sum_{\alpha=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{q}_{\alpha}|} = \sum_{\alpha} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_M \frac{4\pi e^2}{(2l+1)r} \left(\frac{q_{\alpha}}{r}\right)^l Y_{lM}(\Theta, \varphi) Y_{lM}^*(\Theta_{\alpha}, \varphi_{\alpha}) \quad (4.9)$$

donde Θ , φ son los ángulos de \mathbf{r} ; Θ_{α} , φ_{α} son los ángulos de \mathbf{q}_{α} .

Usando a las ecs. (4.8) y (4.5) tenemos:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{N_f} \psi_{e_f} | H' | \phi_{N_i} \psi_{e_i} \rangle &= \sum_{l,M} \frac{4\pi e^2}{2l+1} \left\langle \phi_{N_f} \left| \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^l}{r^{l+1}} Y_{lM}^*(\Theta_{\alpha}, \varphi_{\alpha}) \right| \phi_{N_i} \right\rangle \\ &\times \left\langle \psi_{e_f} \left| \frac{Y_{lM}(\Theta, \varphi)}{r^{l+1}} \right| \psi_{e_i} \right\rangle \end{aligned} \quad (4.10)$$

Después de sustituir a las funciones de onda en las ecs. (4.4) y (4.5), el elemento de matriz que contiene a la integración sobre coordenadas electrónicas se reduce a la integral:

$$\langle \psi_{e_f} | \frac{Y_{\ell m}(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} | \psi_{e_i} \rangle = \frac{\sqrt{z^3}}{\sqrt{\pi a^3 V}} \int \frac{1}{r^{\ell+1}} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \exp[-\frac{zr}{a} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] dr \dots (4.11)$$

Expandiendo a $\exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]$ en funciones esféricas:

$$\exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] = 4\pi \sum_{\ell, m} (-i)^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta_k, \Phi_k) Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) \quad (4.12)$$

donde θ_k, Φ_k son los ángulos que definen a la dirección de \mathbf{k} . obtendremos, después de completar la integración sobre las coordenadas angulares θ, φ :

$$\langle \psi_{e_f} | \frac{Y_{\ell m}(\theta, \varphi)}{r^{\ell+1}} | \psi_{e_i} \rangle = 4\sqrt{\frac{\pi z^3}{a^3}} (-i)^\ell Y_{\ell m}(\theta_k, \Phi_k) \int r^{1-\ell} j_\ell(kr) \times \exp[-\frac{zr}{a}] dr \quad (4.13)$$

Al calcular esta integral es necesario tener en cuenta que dentro de nuestra aproximación ($ka \gg 1$), debido a las rápidas oscilaciones de las funciones esféricas de Bessel, solamente los valores pequeños de r son de importancia en la integral; por lo tanto:

$$\frac{\sqrt{z z^3}}{\pi a^3} k^{\ell-1} \int_0^\infty r^{1-\ell} j_\ell(kr) \exp(-\frac{zr}{a}) dr \approx \frac{k^{\ell-2}}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2\ell-1)} k^{\ell-1} \times \sqrt{\frac{z z^3}{\pi a^3}} \quad (4.14)$$

Sustituyendo a este valor en la ec. (4.13), y a (4.12) en (4.5), encontramos, integrando sobre las variables angulares del electrón emitido (y tomando en cuenta la ortogonalidad de las funciones esféricas), a la probabilidad de conversión interna (para un electrón) por unidad de tiempo:

$$W_{fi} = 64\pi \frac{e^4 M}{(\hbar a)^3} \sum \frac{z^3 k^{2\ell-3}}{[(2\ell+1)!!]^2} \left| \langle \phi_{N_f} | \sum_{\ell} q_\ell Y_{\ell m}(\theta, \varphi) | \phi_{N_i} \rangle \right|^2 \quad (4.15)$$

El cuadrado del elemento de matriz que aparece en esta última expresión es proporcional a la probabilidad de una transición nuclear, la cual corresponde a radiación electromagnética del tipo ($E\ell$), (ver ec. (2b) cap. II sec. 1.B).

Recordamos que la ec. (4.15) fué derivada bajo las condiciones $v/c \ll 1$ y $Ze^2/\hbar v \ll 1$. La dependencia del coeficiente de conversión interna en el número atómico y la energía está dada principalmente por:

$$\alpha_k \approx Z^3 \frac{k_e^{2l-3}}{k_y^{2l+1}} \quad (4.16)$$

Para una energía grande, pero no relativista, tenemos:

$$\frac{\hbar k_e^2}{Zmc} \approx k_y \quad (4.17)$$

y en la ec. () queda:

$$\alpha_k \approx Z^3 k_y^{-l-5/2} \quad (4.18)$$

De este simple análisis podemos concluir que los coeficientes crecerán con Z^3 aproximadamente, y disminuirán con k_y . Como veremos adelante, los coeficientes de conversión interna también aumentan con el orden multipolar.

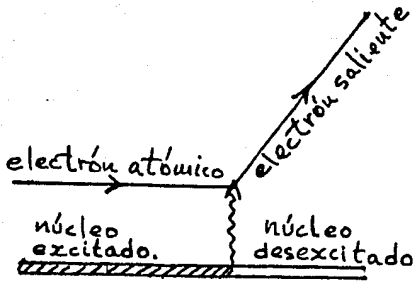
La interacción electromagnética retardada.

En una aproximación más exacta debemos considerar a las funciones de onda de Dirac para el electrón, y a la interacción electromagnética retardada entre el núcleo y el electrón (ver Apéndice D). La producción de electrones de conversión interna se considera entonces como un proceso de segundo orden, en el que un fotón virtual es emitido al decaer el núcleo, siendo absorbido por uno de los electrones atómicos (la producción de pares no será considerada aquí); ver fig.1.

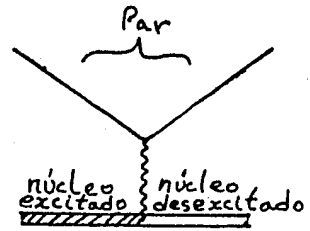
En un campo central V , las funciones de onda de los electrones satisfacen la ecuación de onda relativista:

$$(-\alpha \cdot p - \beta m + V) \psi = E \psi \quad (4.19)$$

α, β están definidos en la ec. (3D).



CONVERSION INTERNA.



PRODUCCION INTERNA DE PARES.

FIGURA 1.

En coordenadas polares la ec. (4.19) anterior es separada si escribimos a las soluciones ψ en la forma

$$\psi = \begin{pmatrix} -i f_k \chi_{-k}^\mu \\ g_k \chi_k^\mu \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

aquí los símbolos están definidos de la siguiente manera: K es el número cuántico que define tanto a la paridad π_e como al momento angular j del electrón de Dirac de acuerdo con:

$$\left. \begin{aligned} j &= |K| - \frac{1}{2} \\ \pi_e &= (-1)^{l_k + 1} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.21)$$

$$\left. \begin{aligned} l_k &= K \\ &= -K - 1 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.22)$$

y así tenemos que $j = l_k - \frac{k}{2|K|}$. La correlación con otras notaciones es

$$\left. \begin{aligned} K &= -1 & 1 & -2 & 2 \\ & s_{1/2} & p_{1/2} & p_{3/2} & d_{3/2} \\ & K, L_I, \dots L_{II}, M_{II}, \dots L_{III}, M_{III}, \dots M_{IV}, L_{IV}, \dots \end{aligned} \right\} (4.23)$$

La paridad Π_e , es el eigenvalor del operador de paridad relativista: βX (inversión espacial). Los espinores χ_k^μ donde μ es el eigenvalor de j_z , están definidos por

$$\chi_k^\mu = \sum_{\tau} \left(l_k \mu - \tau, \frac{1}{2} \tau | j \mu \right) \chi_{\frac{l_k}{2}}^{\tau} Y_{l_k}^{\mu - \tau} ; \tau = \pm \frac{1}{2} \quad (4.24)$$

donde

$$\chi_{\frac{l_k}{2}}^{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; \chi_{\frac{l_k}{2}}^{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} ; \quad (4.25)$$

χ_k^μ es una eigenfunción de j^2 y j_z con eigenvalores $j(j+1)$ y μ respectivamente. χ_{-k}^μ tiene estos mismos eigenvalores y está degenerado con respecto a \hat{j} y \hat{j}_z . Estos dos espinores se distinguen por el hecho de que:

$$(\sigma \cdot L + 1) \chi_k^\mu = -\kappa \chi_k^\mu \quad (4.26)$$

y se relacionan por:

$$\sigma_r \chi_k^\mu = -\chi_{-k}^\mu \quad (4.27)$$

De las ecs. (4.20), (4.26) se sigue que

$$\beta(\sigma \cdot L + 1) \psi = \kappa \psi \quad (4.28)$$

Usando el hecho de que

$$(\chi_k^\mu, \chi_{k'}^{\mu'}) = \delta_{\kappa \kappa'} \delta_{\mu \mu'} \quad (4.29)$$

donde este último producto escalar implica a una suma de espinores y a una integración sobre variables angulares, usando también a la identidad:

$$\alpha \cdot \nabla = \rho_1 \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) - \frac{1}{r} \rho_1 \sigma_r (\sigma \cdot L + 1) \quad (4.30)$$

donde : $\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$,

encontramos, a partir de las ecs. (4.26), (4.27) a las dos ecuaciones diferenciales que deben satisfacer las funciones radiales:

$$\left. \begin{aligned} \frac{df_k}{dr} &= \frac{k-1}{r} f_k - (E-V-1) g_k \\ \frac{dg_k}{dr} &= (E-V+1) f_k - \frac{k+1}{r} g_k \end{aligned} \right\} \quad (4.31)$$

La interacción del núcleo con el electrón se lleva a cabo por medio del acoplamiento de ambos con el campo electromagnético (ver Ap.D). El acoplamiento del núcleo con el campo electromagnético se expresa como una suma de operadores de un cuerpo, de modo que podemos pensar en que un solo nucleón lleva a cabo la transición, pero este puede ser cualquier nucleón. La probabilidad de transición esta dada por (Ap.D, ec.(30D)):

$$N_e = \frac{2\pi}{137} \iint d\tau_n d\tau (j_n \cdot j - p_n p) \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}|} \quad (4.32)$$

Aquí, el subíndice n se refiere a un nucleón, los demás símbolos se refieren al electrón. El símbolo de integración sobre el espacio del nucleón implica también una suma sobre todos los nucleones. j , y $i p$, son las componentes del cuadrivector de corriente de transición del electrón. Para una partícula de Dirac:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= ec \psi_f^* \boldsymbol{\alpha} \psi_i \\ p &= ec \psi_f^* \psi_i \end{aligned} \quad (4.33)$$

$\boldsymbol{\alpha}$ es la matriz de Dirac y ψ_f se debe normalizar en la escala de energía y ψ_i en el espacio de configuración. También j_n , $i p_n$ constituyen al cuadrivector de corriente del nucleón dinámico, en ausencia de un modelo nuclear no los podemos especificar con más detalle, pero como un ejemplo podremos tomar:

$$\mathbf{j}_n = \frac{e}{2iM} [\phi_f^* \nabla \phi_i - (\nabla \phi_f)^* \phi_i] + \mu \nabla \times \phi_f^* \sigma \phi_i \quad (4.34)$$

donde M , μ son la masa del nucleón y su momento magnético, respectivamente. En la ec. (4.32) suponemos que se ha sumado sobre todas las cantidades no observadas. Por ejemplo, esto incluye una suma sobre M_i y M_f , los números cuánticos magnéticos nucleares, y también una suma sobre todos los estados electrónicos posibles. Estos estados están descritos por los números cuánticos K y M (ver ec. (4.23)). Después de que se realicen todas las sumas, excepto sobre K , los coeficientes de conversión interna aparecerán como una suma de coeficientes parciales:

$$\alpha = \sum_K \alpha_K$$

De la ec. (28D, Ap.D) tenemos:

$$\left. \begin{aligned} j_n \cdot \mathbf{I} \frac{e^{ik|r_n-r|}}{|r_n-r|} \cdot \mathbf{j} &= 4\pi i k \sum_{\ell, m, \lambda} j_n \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)*}(kr_n) \cdot \mathbf{j} \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)}(kr) \\ &\text{Para } r > r_n \\ j_n \cdot \mathbf{I} \frac{e^{ik|r_n-r|}}{|r_n-r|} \cdot \mathbf{j} &= 4\pi i k \sum_{\ell, m, \lambda} j_n \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)*}(kr_n) \cdot \mathbf{j} \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)}(kr) \\ &\text{Para } r < r_n \end{aligned} \right\} (4.35)$$

y de la ec. (29D, Ap.D):

$$\frac{e^{ik|r_n-r|}}{|r_n-r|} = 4\pi i k \sum_{\ell, m} j_\ell(kr_2) h_\ell^{(1)}(kr_2) Y_{\ell m}^*(\hat{r}_n) Y_{\ell m}(\hat{r}) \quad (4.36)$$

Cuando las ecs. (4.35), (4.36) sean sustituidas en (4.32), necesitaremos solamente a un término en la suma sobre ℓ (para multipolos puros) y como $M_i = M + M_f$ solo a un término en la suma sobre M . Haciendo a un lado por el momento al campo longitudinal, necesitaremos solamente a $\lambda = E$ ó a $\lambda = M$, pero no a ambos, debido a la regla de selección:

$$\pi_i \pi_f = 1 \quad \begin{array}{ll} l = \text{par} & \text{para } \lambda = E \\ l = \text{impar} & \text{para } \lambda = M \end{array}$$

$$\pi_i \pi_f = -1 \quad \begin{array}{ll} l = \text{impar} & \text{para } \lambda = E \\ l = \text{par} & \text{para } \lambda = M \end{array}$$

Así, cuando sean necesarios dos multipolos, la combinación será $(M l)$ y $(E l+1)$, ó $(E l)$ y $(M l+1)$. Para un multipolo puro el elemento de matriz por evaluar es (por simplicidad omitimos los términos $(\rho_n \rho)$, de modo que (4.37) es rigurosamente aplicable solamente a multipolos magnéticos):

$$H_{fi} = 4\pi i k \left[\int_0^{\infty} d\tau_n j_n \cdot A_{\ell m}^* \int_{r_n}^{\infty} d\tau j \cdot A_{\ell m} + \int_0^{\infty} d\tau_n j_n \cdot A_{\ell m}^* \int_0^{r_n} d\tau j \cdot A_{\ell m} \right] \quad (4.37)$$

el índice λ ha sido abandonado. Podemos escribir a esta ecuación para exhibir explícitamente a las contribuciones de $r < r_n$:

$$H_{fi} = 4\pi i k \left\{ \int_0^{\infty} d\tau_n j_n \cdot A_{\ell m}^* \int_0^{\infty} d\tau j \cdot A_{\ell m} + \int_0^{\infty} d\tau_n j_n \cdot A_{\ell m}^* \int_0^{r_n} d\tau \left[-j \cdot A_{\ell m} + \left(\frac{h_e^{(1)}(kr_n)}{j_e(kr_n)} \right) j \cdot A_{\ell m} \right] \right\} \quad (4.38)$$

Después de que N_e es calculado con (4.38), el número de fotones por segundo, N_γ , es calculado con la misma normalización para el campo de radiación. Para el proceso de radiación el elemento de matriz es

$$H'_\gamma = \int_0^{\infty} dr_n j_n \cdot A_{\ell m}^*$$

Los coeficientes de conversión son:

$$\alpha = \frac{N_e}{N_\gamma}$$

El núcleo puntual.

Si consideramos al núcleo como puntual, entonces los coeficientes de conversión parciales, aparte de constantes multiplicativas, tienen la forma:

$$\alpha_k \sim \left| \int_0^\infty d\tau j \cdot A_{lm} \right|^2 \quad (4.39)$$

Los elementos de matriz nucleares se cancelan completamente en esta aproximación. Usando funciones de onda relativistas para el campo central, los elementos de matriz electrónicos pueden reducirse a integrales radiales de la forma (Rose, et. al., 1951):

$$\alpha_k = \frac{\pi k}{137 l(l+1)(2l+1)} B_{kk'}^\lambda \left| R_{kk'}^\lambda \right|^2 \quad (4.40)$$

las constantes numéricas $B_{kk'}^\lambda$, se dan en la tabla I para multipolos magnéticos. Para los multipolos eléctricos:

$$B_{kk'}^E = B_{-k,k'}^M / (k' - k)^2$$

El estado inicial ha sido denotado por k' . En términos de las dos funciones de onda radiales de Dirac, tanto para el estado inicial como para el final, las integrales radiales son:

$$R_{k,k'}^M = \int_0^\infty h_e^{(1)} (f_k g_{k'} + g_k f_{k'}) r^2 dr \quad \dots \dots \dots (4.41)$$

$$\left. \begin{aligned} R_{k,k'}^E &= (k' - k) \int_0^\infty h_{e-1}^{(1)} (g_k f_{k'} + f_k g_{k'}) r^2 dr + \\ &+ l \int_0^\infty [h_{e-1}^{(1)} (g_k f_{k'} - f_k g_{k'}) + h_e^{(1)} (f_k f_{k'} + g_k g_{k'})] r^2 dr \end{aligned} \right\} (4.42)$$

TABLA I.

CONSTANTES NUMERICAS EN LOS COEFICIENTES DE C.I.

ESTADO INICIAL	ESTADO FINAL	$B_{k,k'}^\lambda$
-1	$l+1$ $-l$	$2l^2(l+1)$ $2l(l+1)^2$
1	$-l-1$ l	$2l^2(l+1)$ $2l(l+1)^2$
-2	$l+2$ $-l-1$ l $-l+1$	$6l^2(l+1)(l+2)/2l+3$ $2l(l+1)(l+3)^2/2l+3$ $2l(l+1)(l-2)^2/2l-1$ $6l(l-1)(l+2)^2/2l-1$
2	$-l-2$ $l+1$ $-l$ $l-1$	$6l^2(l+1)(l+2)/2l+3$ $2l(l+1)(l+3)^2/2l+3$ $2l(l+1)(l-2)^2/2l-1$ $6l(l-1)(l+1)^2/2l-1$

Para un núcleo puntual es consistente representar al potencial nuclear por el campo coulombiano y en este caso se han evaluado las integrales radiales $R_{kk'}^\lambda$, (Rose, et. al. 1951). Un potencial más realista deberá incluir efectos de apantallamiento.

Propiedades cualitativas de los coeficientes de conversión interna.

Ante todo, observamos que para el núcleo puntual los coeficientes de conversión interna no dependen de la estructura nuclear. El núcleo sirve meramente como una fuente de energía (k), momento angular (l), y de

cambio en la paridad ($\pi_i \pi_f = \pi_r$). Los coeficientes α dependen por lo tanto de estas cantidades. Además los valores de α dependen del estado inicial (k' y el número cuántico principal), del número atómico Z , y del modelo usado para apantallamiento. La dependencia en π_r , para una l dada, es equivalente a la dependencia en λ ; es a decir, en si la transición es eléctrica ó magnética. De un modo cualitativo, tenemos que las siguientes características son generalmente válidas:

a). Conforme k aumenta, las α son usualmente funciones fuertemente decrecientes. Conforme k se acerca al valor umbral, los coeficientes tienden a alcanzar su valor máximo y decrecen alcanzando un valor no-nulo en el umbral. La inexactitud en las mediciones de k pueden llevar a grandes incertidumbres en α . Esta sensibilidad de los coeficientes de conversión interna a la energía, puede ser entendida cualitativamente como una consecuencia del traslape de las funciones de onda electrónicas y el campo de radiación, que para una fuente puntual tiene la dependencia $h_e^{(l)}(kr)$ para el orden multipolar l , donde $h_e^{(l)}$ es la función esférica de Hankel ec. (30A) Ap. A. y $k = (E_i - E_f)/\hbar c$. Esta función se vuelve más singular ya sea cuando $kr \rightarrow 0$, ó bien cuando $l \rightarrow \infty$ siendo $O[(1/kr)^{l+1}]$. Por lo tanto podemos esperar que los coeficientes de conversión interna sean mayores para las transiciones de más baja energía.

b). La dependencia en la paridad no es tan marcada, pero también es importante. Esto está en contraste con la emisión de rayos gamma no-polarizados, en donde para una cierta l , el flujo de Poynting es el mismo para E y M. El origen de la dependencia en la paridad se encuentra en parte, en la estructura de los potenciales electromagnéticos; en los que para una cierta l , los multipolos eléctricos tienen un momento angular orbital $l \pm 1$ mientras que para los multipolos magnéticos esta cantidad tiene el valor único l . Además los estados electrónicos

finales difieren en la conversión-(El) y en la (Ml). Por ejemplo, de la capa-K las transiciones $M1$ llevan a estados finales $s_{1/2}$ y $d_{3/2}$; las transiciones $E1$ llevan a los estados "duales" $p_{1/2}$ y $p_{3/2}$. El último par difiere en paridad del primero.

c). Como el radio de las órbitas K y L disminuye al aumentar Z, α debe ser más grande conforme Z aumenta. En general los coeficientes aumentan fuertemente con Z. Para la capa-K, α varía conforme Z^n , donde la n depende ligeramente en k y en l , pero es aproximadamente igual a 3. Para una k baja (≈ 0.05) y para la subcapa-L_I, se forma un máximo muy extendido como función de Z (para $Z \approx 60$) en transiciones multipolares eléctricas.

d). Manteniendo fijos a otros parámetros, tanto $\alpha(E1)$ como $\alpha(M1)$ aumentan con l . Esto lo podemos esperar si observamos que $h_l^{(1)}$ es más singular para l 's más grandes. Este aumento es particularmente notable para k 's tan bajas como 0.05, donde para $\Delta l = 1$ las α 's aumentan por un orden de magnitud. Para k grande, la dependencia en l tiende a desaparecer debido a que en la zona lejana todos los multipolos se ven iguales.

Efectos del tamaño finito del núcleo.

Hemos considerado como un punto de partida natural para el análisis teórico de los coeficientes de conversión interna, al núcleo con una extensión geométrica despreciable. En muchos casos esta aproximación está justificada. Sin embargo, podemos esperar grandes desviaciones en algunos casos debido a que el núcleo no es un punto. Cuando tomamos en consideración al tamaño finito del núcleo aparecen dos tipos de efecto. Estos son los llamados efectos nucleares estáticos y los dinámicos.

Los efectos estáticos surgen de la circunstancia de que la interacción electrostática se modifica por la extensión finita de la distribución de carga nuclear.

Esto significa que en la ec. (4.38) y en su contraparte eléctrica, solamente se considera al primer término correspondiente a $r > r_n$, y tanto r y r_n dentro del alcance $0 - R$. Prácticamente, r_n está restringida a la extensión $0 - R$. Aunque estemos incluyendo puntos para los cuales $r \leq R$, nos referiremos a esta situación como "el modelo de 'no-penetración' al núcleo". En este caso la modificación de α proviene de la alteración de las funciones de onda electrónicas ψ_i, ψ_f , especialmente para $r \leq R$. Los elementos de matriz nucleares que aparecen en N_f , también se encuentran como un factor en N_e , de modo que los coeficientes de conversión son aún independientes de la estructura nuclear; y el proceso de conversión depende, como en la aproximación del núcleo puntual, solamente del número atómico, la energía de transición y la multipolaridad y carácter del campo de radiación. El efecto estático del tamaño del núcleo (finito) produce una alteración profunda de $\alpha(MI)$ para la capa-K y la subcapa-L_I. El efecto sobre $\alpha(MI)$ para la subcapa-L_{II} es considerable y para la subcapa-L_{III} es despreciable. Para $M1$, los coeficientes de conversión $K' = -1, (K, L_I)$ muestran un decrecimiento con respecto a los valores del núcleo puntual, los cuales dependen de Z . Para $Z \leq 50$ el efecto no es importante, y para $Z \approx 100$ la reducción es de un factor entre 0.5 y 0.6. Esta reducción es una consecuencia de la eliminación de la singularidad existente para $|k| = 1$ en las funciones f y g , que para valores pequeños de r en el campo coulombiano, ó en el coulombiano con apantallamiento, tienen la conducta $f_k \sim r^{\delta-1}$, $g_k \sim r^{\delta-1}$, donde $\delta = [k^2 - (Z/137)^2]$. Cuando el potencial nuclear es remplazado por un potencial no-singular V ; por ejemplo, el de una distribución uniforme de carga:

$$\left. \begin{aligned}
 V &= -\frac{Z}{2(137)} \frac{1}{R} \left(3 - \frac{r^2}{R} \right) & r < R \\
 &= \frac{Z}{137r} U_{\text{Thomas Fermi Dirac}} & r > R
 \end{aligned} \right\} (4.43)$$

donde U_{TFD} es una función del apantallamiento, entonces

$$\left. \begin{aligned} f_k \sim r^{k-1}, g_k \sim r^k; & \quad (k \geq 1) \\ f_k \sim r^{-k}, g_k \sim r^{-k-1} & \quad (k \leq -1) \end{aligned} \right\} \quad (4.44)$$

y la singularidad ha desaparecido.

El potencial en la ec. (4.43) corresponde a una distribución uniforme de carga. Si cambiamos el radio R , ó si la forma de la distribución es cambiada de una manera razonable, los coeficientes de conversión son muy insensibles a tales cambios. Una vez que la singularidad se ha removido, no es muy importante como se comporta en realidad la distribución de carga nuclear.

La segunda clase de efectos debidos al tamaño finito del núcleo son los efectos dinámicos, que tienen su origen en los términos de penetración electrónica provenientes de la región $r < r_n$. Ahora, en la ec. (4.38) y en su contraparte eléctrica, tiene lugar un elemento de matriz distinto. Este es:

$$\int j_n \cdot A_{em}^* X(r_n) d\tau_n \quad (4.45)$$

donde, por ejemplo en el caso magnético:

$$X(r_n) = - \int_0^{r_n} d\tau \left[j \cdot A_{em} - \frac{\hbar^2(kr_n)}{j_l(kr_n)} j \cdot A_{em} \right]$$

En esta situación la razón de los elementos de matriz en N_e/N_p se modifica de:

$$\int d\tau j \cdot A_{em}, \quad a \quad \int d\tau j \cdot A_{em} (1 + \lambda)$$

donde

$$\lambda = \frac{\int j_n \cdot A_{em}^* X(r_n) d\tau_n}{\int j_n \cdot A_{em}^* d\tau_n \int d\tau j \cdot A_{em}}$$

La evaluación de esta razón λ es directamente dependiente de las características de la dinámica nuclear y requiere un modelo nuclear. Las determinaciones experimentales de los elementos de matriz de penetración, nos dan un nuevo modo de probar la validez de los modelos nucleares.

Los datos experimentales indican que los efectos dinámicos del tamaño finito nuclear son especialmente importantes para algunos núcleos pesados y principalmente para transiciones $M1$ y $E1$. No se debe suponer, sin embargo, que en todos los núcleos pesados los efectos de su estructura será exhibida; aún para transiciones $E1$ y $M1$. Debido al pequeño tamaño del núcleo los elementos de matriz de penetración tienen, bajo circunstancias normales, solamente un pequeño peso y pueden despreciarse en comparación con los elementos de matriz de conversión normales. En una base teórica, podemos esperar que a pesar de su pequeño peso los efectos dinámicos sean apreciables si se satisfacen las siguientes condiciones: (1) La transición radiativa es fuertemente retardada comparando con las predicciones de (Weisskopf) partícula independiente; debido esto a las reglas de selección para la desexcitación nuclear. (2) Estas reglas no imponen restricciones similares sobre el proceso de conversión en el interior del núcleo. Bajo estas circunstancias, los elementos de matriz de la transición radiativa y del proceso de conversión interna normal (correspondiente a la región extra-nuclear) son ambos anormalmente pequeños, mientras que los elementos de matriz de penetración aún conservan su valor. El proceso de conversión interna es entonces gobernado en alguna extensión, y quizás predominantemente, por los efectos de penetración.

Valores numéricos de los Coeficientes de Conversión Interna.

Existen numerosos cálculos detallados para los

coeficientes de conversión interna (c.c.i.) basados en diferentes modelos (H.C.Pauli, K.Alder, 1975). Los primeros cálculos exactos de los c.c.i. fueron realizados por M.E.Rose y colaboradores (Rose, 1951), quienes utilizaron el modelo del núcleo puntual. Los primeros cálculos incluyendo los efectos estáticos y dinámicos fueron realizados por L.A.Sliv e I.M.Band (Sliv, Band, 1956) (los c.c.i. calculados por estos autores también se encuentran en: Ap.5, Seighban, 1965). Estos cálculos se basan en hipótesis que toman en consideración al tamaño finito del núcleo con una distribución volumétrica de carga uniforme y una distribución superficial de corrientes de transición, así como al efecto de apantallamiento de los electrones atómicos usando el método de Thomas-Fermi-Dirac. Dado que los dos métodos anteriores consideran a los efectos dinámicos como pequeños, sus resultados deberían diferir muy poco. En la gran mayoría de los casos es to es así. En los pocos casos en que existen grandes diferencias no siempre es muy claro el motivo.

En la tabla II se presentan los valores de los coeficientes de conversión interna para la capa-K y la L, sobre la extensión $0.05 \leq k \leq 2.0$, y para $l \leq 5$. Para todos los estados iniciales los valores de X son ≥ 25 .

CAPITULO III.

EXCITACION NUCLEAR POR DESEXCITACION ELECTRONICA.Introducción.

En este último capítulo estaremos interesados en estudiar un nuevo proceso de excitación nuclear el cual tiene lugar debido a la desexcitación de los estados electrónicos en el átomo. Como mencionamos al final de la introducción al Capítulo II, en la desexcitación del sistema de electrones atómicos no solo compiten la emisión de rayos-X y el efecto Auger, también existe en competencia un tercer proceso de desexcitación por medio de la excitación de un estado nuclear si se satisfacen apropiadamente las condiciones de cambio de energía, espín y paridad. A este proceso lo llamamos excitación nuclear por desexcitación electrónica, abreviadamente, ENDE.

La verificación experimental de este proceso involucra dos implicaciones físicas: Una es la apertura de un nuevo campo de la espectroscopía, el cual puede llamarse espectroscopía núcleo-atómica, aparte de las espectroscopías convencionales atómica y nuclear, debido a la intervención tanto de los niveles electrónicos como los nucleares. Como una consecuencia se hace posible estudiar las interacciones entre el núcleo y los electrones y los problemas de estructura nuclear. El otro tipo de implicación, que puede ser de interés más práctico, está relacionado con la purificación de ciertos isótopos, tales como el ^{235}U . En la desexcitación del primer nivel nuclear excitado, el átomo de ^{235}U emite un electrón de conversión interna. Después de la emisión, este átomo se encuentra en una forma químicamente diferente a la de los otros átomos de uranio. Esto se debe a que uno de los electrones de valencia ha sido expulsado por conversión interna. En esta circunstancia es posible intentar algún método de separación química del ^{235}U de los otros isótopos de uranio (M. Morita, ref. 4, 1973). El proceso ENDE puede, en principio, proporcionarnos estados excitados de ^{235}U al bombardear una mezcla de isótopos de uranio con rayos-X ó electrones.

En la primera parte de este capítulo estudiaremos la teoría del proceso ENDE y obtendremos una expresión para la probabilidad de formación de un estado nuclear excitado. En la segunda parte revisamos dos posibilidades de ENDE y una verificación experimental, siguiendo los trabajos de M. Morita et al..

Descripción del sistema electrónico-nuclear.

En el capítulo I describimos al átomo como un sistema en el cual los estados nucleares y electrónicos evolucionan independientemente. Esta separación la realizamos suponiendo que el Hamiltoniano total del átomo: \mathcal{H} , puede descomponerse en dos partes:

$$\mathcal{H} = (H_N + H_{at}^{(e)}) + H' \equiv H_0 + H' \quad (1)$$

en donde H' actúa como una pequeña perturbación. El término H_0 está compuesto por H_N que actúa solamente sobre variables nucleares; y por $H_{at}^{(e)}$, que actúa solo sobre variables electrónicas:

$$H_{at}^{(e)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i (\nabla^2 + U(r_i)) \quad (2)$$

y describe a los electrones dentro de un campo esféricamente simétrico. La perturbación:

$$H' = -Ze^2 \sum_p \sum_i \frac{1}{|r_p - r_i|} - \sum U(r_i) \quad (3)$$

es la interacción residual entre los electrones y los protones que acopla a ambos sistemas.

El sistema total (núcleo-electrones) estará bien descrito en general por las eigenfunciones $\Phi_i(\xi_N, \xi_e)$ y los eigenvalores \mathcal{E}_i del Hamiltoniano no-perturbado H_0 :

$$H_0 \Phi_i \equiv (H_N + H_{at}^{(e)}) \Phi_i(\xi_N, \xi_e) = \mathcal{E}_i \Phi_i(\xi_N, \xi_e); \quad (4)$$

y es posible separar las variables nucleares de las electró-

nicas:

$$\begin{aligned} H_N \phi(\xi_N) &= E_N \phi(\xi_N) \\ H_{at}^{(e)} \psi(\xi_e) &= E_e \psi(\xi_e) \end{aligned} \quad (5)$$

donde:

$$\mathcal{E}_i = E_N(\phi_i) + E_e(\psi_i), \quad \Phi_i = \phi_i \psi_i \quad (5')$$

Tenemos así a una serie de eigenfunciones del sistema resultante núcleo-electrones que describen a los estados en los que éste se puede encontrar:

$$\Phi : \phi_0 \psi_0, \phi_1 \psi_1, \phi_1 \psi_2, \dots; \phi_2 \psi_0, \phi_2 \psi_1, \phi_2 \psi_2, \dots; \dots \quad (6)$$

Aquí ϕ se refiere a la función de onda del núcleo en su estado base y ϕ_1, ϕ_2, \dots , son los demás estados excitados del núcleo. ψ_j se refiere a la función de onda antisimétrica de Z electrones con un agujero en la j -ésima órbita.

Las transiciones electromagnéticas entre los estados en (6), dentro de las aproximaciones más bajas, son los procesos estudiados en el capítulo anterior. El proceso de emisión de rayos-X está representado por $\phi_1 \psi_i \rightarrow \phi_0 \psi_j$. Para el proceso Auger tendremos que usar $\phi_i \psi_i \rightarrow \phi_i \psi_j'$, donde ψ_j' se refiere al estado en que el agujero electrónico sube a la j -ésima órbita y uno de los electrones de las capas más externas sale al estado del continuo. Similarmente tendremos a las transiciones $\phi_2 \psi_i \rightarrow \phi_2 \psi_j$, nos estamos refiriendo al caso en que la transición electrónica es considerablemente más rápida que el decaimiento gama nuclear: $\phi_1 \psi_i \rightarrow \phi_1 \psi_j'$ ó que el proceso de conversión interna: $\phi_2 \psi_i \rightarrow \phi_1 \psi_j'$

: Las eigenfunciones del Hamiltoniano total \mathcal{H} corregidas a primer orden están dadas por:

$$\Psi_n = \Phi_n + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Phi_m | \mathcal{H} | \Phi_n \rangle}{E_n - E_m} \Phi_m \equiv \Phi_n + \Phi_n^{(1)} \quad (7)$$

y la energía corregida a segundo orden está dada por:

$$E_n = E_n + \langle \Phi_n | H' | \Phi_n \rangle + \sum_{\substack{m \\ m \neq n}} \frac{|\langle \Phi_n | H' | \Phi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} \quad (8)$$

$$\equiv E_n + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$$

La representación desacoplada en (6) puede expresarse en términos de una combinación lineal de eigenestados de J^2 (J : momento angular total de los electrones), de I^2 (I : momento angular total del núcleo), de F^2 ($F = I + J$), y de F_z :

$$\Phi = \phi_{IM_I} \psi_{JM_J} = \sum_F (IM_I, JM_J | FM) | FM \rangle \quad (9)$$

aquí M es el eigenvalor de F_z . Al invertir esta ecuación obtenemos las funciones de onda $|FM\rangle$ en la representación acoplada. Cuando consideramos a la interacción H' , las funciones de onda $|FM\rangle$ son aún eigenestados de F^2 y F_z , y podemos escribir:

$$|FM\rangle = |FM\rangle + |FM\rangle^{(1)} \quad (10)$$

donde

$$|FM\rangle^{(1)} = \sum_{M_I, M_J} (IM_I, JM_J | FM) \Phi^{(1)}$$

En el presente capítulo estaremos interesados en el caso en que la energía de excitación nuclear ($E_N(\phi_f) - E_N(\phi_i)$) es casi igual a la energía de desexcitación electrónica ($E_e(\psi_i) - E_e(\psi_f)$). En tales circunstancias tendremos:

$$E_f \equiv E_N(\phi_f) + E_e(\psi_f) \approx E_N(\phi_i) + E_e(\psi_i) \equiv E_i, \quad (11)$$

donde E_f , E_i , son los eigenvalores no-perturbados ec. (5') de los estados Φ_f , Φ_i , respectivamente. Esto es, estaremos interesados en un caso en el que dos estados son casi-degenerados: $\Phi_i = \phi_i \psi_i$, con el núcleo en su estado base y el sistema electrónico con un agujero en la i -ésima órbita; $\Phi_f = \phi_f \psi_f$,

en el cual el núcleo está en un estado excitado y el agujero electrónico ha saltado a la f-ésima órbita más externa. Debido a la presencia de esta casi-degeneración, las correcciones a la función de onda Φ_i por medio de la ec. (7) tendrán una contribución muy grande de la función Φ_f debido a que el denominador $(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f)$ es muy pequeño. Aplicando la Teoría de Perturbaciones para el caso degenerado, podremos obtener las correcciones a primer orden a las energías del sistema total, así como las funciones de onda correctas a orden cero en presencia de la perturbación H' , diagonalizando al Hamiltoniano total en el subespacio de las dos funciones degeneradas. De las dos raíces de la ecuación secular obtenemos los eigenvalores:

$$\epsilon^\pm = \frac{\mathcal{E}_i + h_{ii} + \mathcal{E}_f + h_{ff}}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{(\mathcal{E}_i + h_{ii}) - (\mathcal{E}_f + h_{ff})}{2} \right]^2 + h_{if}^2} \quad (12)$$

donde $\mathcal{E}_k = \langle \Phi_k | H_0 | \Phi_k \rangle$, con $k: i, f$.

y $h_{if} = \langle \Phi_i | H' | \Phi_f \rangle$.

Tomando a ϵ^\pm dentro de la submatriz 2x2 de energía obtenemos los coeficientes de la combinación lineal para las funciones correctas a orden cero:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1 &= \Phi_i \cos \theta + \Phi_f \sin \theta \\ \Psi_2 &= -\Phi_i \sin \theta + \Phi_f \cos \theta \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

donde

$$\cos^2 \theta = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{(H_i - H_f)/2}{\sqrt{(H_i - H_f)^2 + h_{if}^2}} \right]$$

$$\sin^2 \theta = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(H_i - H_f)/2}{\sqrt{(H_i - H_f)^2 + h_{if}^2}} \right]$$

y hemos escrito $H_k = \mathcal{E}_k + h_{kk}$

La razón en que se mezclan los estados está determinada por el ángulo θ como:

$$\sin \theta \cos \theta = \frac{\langle \Phi_f | H' | \Phi_i \rangle}{\epsilon(\Psi_i) - \epsilon(\Psi_f)} \approx \frac{\langle \phi_f \psi_f | H' | \phi_i \psi_i \rangle}{\epsilon_i - \epsilon_f} = \frac{E'}{\epsilon_i - \epsilon_f} \quad (14)$$

El Hamiltoniano de interacción H' se supone muy pequeño y por lo tanto tenemos:

$$\left. \begin{aligned} \epsilon^+ &= \epsilon(\Psi_i) \approx \epsilon_i \\ \epsilon^- &= \epsilon(\Psi_f) \approx \epsilon_f \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Transiciones Electromagnéticas. Probabilidad de Formación de un Estado Nuclear Excitado.

Consideremos nuevamente la situación desde un principio. A un átomo eléctricamente neutro con número atómico Z le es creada una vacancia en alguna de sus capas internas al ser excitado alguno de sus electrones. En esta circunstancia denotamos a la función de onda de los electrones por ψ_i . El sistema resultante de los electrones y el núcleo posee la serie de eigenestados: $\Phi_0, \Psi_1, \Psi_2, \Phi_3, \Phi_4, \dots$; en donde Φ_j es de la forma $\phi_k \psi_{e_j}$, y se han obtenido ψ_1, ψ_2 , como los estados mezclados en la ec. (13). Las transiciones entre estos estados son principalmente las emisiones de rayos-X y de electrones Auger, y el agujero electrónico salta hasta alcanzar la capa más externa posible. Nuestro problema consistirá en encontrar qué tanto por ciento de los estados nucleares permanece en su estado excitado al final de las transiciones electrónicas.

Las propiedades nucleares entran en la consideración de las transiciones en tres maneras:

- 1). Por medio de propiedades estáticas, distribución de carga e interacciones hiperfinas.
- 2). Dinámicamente, mezclando estados nucleares en los estados estacionarios del sistema.
- 3). En una proporción muy pequeña, por la contribución del movimiento nuclear interno a los elementos

de matriz de la transición.

Estrictamente hablando, siempre que el núcleo se ve involucrado dinámicamente, la transición ya no está determinada exclusivamente por los elementos de matriz electrónicos. Sin embargo, aún cuando la interacción núcleo-electrónica sea suficientemente grande como para introducir una mezcla apreciable de los estados estacionarios, el acoplamiento al campo de radiación y las interacciones entre partículas son aún predominantemente aquellas puramente electrónicas, como lo testifican las probabilidades mucho mayores para transiciones electromagnéticas entre los estados electrónicos comparadas con las que existen entre los estados nucleares. Tenemos que los elementos de matriz de transición son significativos solamente cuando sean diagonales en la parte nuclear de las funciones de onda.

Tenemos así que la creación de una vacancia en una de las capas internas del sistema electrónico puede dar por resultado al estado $\Phi_i = \phi_i \psi_i$ que contiene al núcleo en su estado base, correspondiente a un nivel casi-degenerado con el estado $\Phi_f = \phi_f \psi_f$, que contiene al núcleo en un estado excitado. Nos interesa determinar la probabilidad de que el sistema pase al estado Φ_f . Las funciones correctas a orden cero son Ψ_1 y Ψ_2 ec. (13), y de aquí que:

$$\Phi_i = \Psi_1 \cos \theta - \Psi_2 \sin \theta \quad (17)$$

La función de onda dependiente del tiempo la encontramos introduciendo los factores correspondientes:

$$\Phi_i(\xi_N, \xi_e; t) = e^{-i\epsilon^+ t/\hbar} \Psi_1 \cos \theta - e^{-i\epsilon^- t/\hbar} \Psi_2 \sin \theta \quad (18)$$

Tanto Ψ_1 como Ψ_2 contienen a la componente $\phi_f \psi_f$, como podemos ver si volvemos a expresar Ψ_1 y Ψ_2 con la ec. (13):

$$\begin{aligned} \Phi_i(\xi_N, \xi_e; t) = & \phi_i \psi_i \left(\cos^2 \theta e^{-\frac{i\epsilon^+ t}{\hbar}} + \sin^2 \theta e^{-\frac{i\epsilon^- t}{\hbar}} \right) \\ & + \phi_f \psi_f \left(\sin \theta \cos \theta e^{-\frac{i\epsilon^+ t}{\hbar}} - \cos \theta \sin \theta e^{-\frac{i\epsilon^- t}{\hbar}} \right) \end{aligned} \quad (19)$$

en el instante $t=0$, $\Phi_i(\mathcal{S}_0, \mathcal{S}_e; 0) = \phi_i \psi_i$.

El estado Φ_i decae emitiendo rayos-X y electrones Auger. Estas transiciones son del tipo:

$$\begin{aligned} \phi_i \psi_i &\longrightarrow \phi_i \psi_j ; j > i \\ \phi_f \psi_f &\longrightarrow \phi_f \psi_k ; k > f \end{aligned} \quad (20)$$

(ψ'_j, ψ'_k) para el proceso Auger)

Los procesos de desexcitación nuclear:

$$\begin{aligned} \phi_f \psi_f &\longrightarrow \phi_i \psi_f \\ \phi_f \psi_f &\longrightarrow \phi_i \psi'_k ; k > f \end{aligned} \quad (21)$$

los supondremos mucho más lentos.

La probabilidad de formación de un estado nuclear excitado está determinada por las velocidades de decaimiento hacia las componentes $\phi_f \psi_f$ en Ψ_1 y Ψ_2 ec. (18). Por ejemplo, la amplitud de transición para Ψ_1 está dada por

$$\begin{aligned} \langle \phi_f \psi_k | H_{int} | \Psi_1 \rangle &= \text{sen } \Theta \langle \phi_f \psi_k | H_{int} | \phi_f \psi_f \rangle \\ &\approx \text{sen } \Theta \langle \psi_k | (E \pm 1) | \psi_f \rangle \equiv M_f \text{sen } \Theta \end{aligned} \quad (22)$$

El Hamiltoniano H_{int} es el mismo para transiciones radiativas y no-radiativas. La parte principal de la amplitud de transición es la componente dipolar eléctrica, la cual estamos representando por M_f ; el subíndice f está por el estado nuclear excitado ϕ_f . El estado $\phi_f \psi_k$ decae sucesivamente a estados más bajos hasta que el agujero electrónico alcanza la capa más alta posible, donde el sistema electrónico es estable. Durante este período de transiciones electrónicas, el núcleo se encuentra aún en el estado ϕ_f . Esto es, el núcleo es producido en su estado excitado. Este estado decae posteriormente emitiendo un rayo gama, ó un electrón de conversión interna, regresando así a su estado base

La velocidad de producción del estado nuclear

excitado ϕ_f es proporcional a la probabilidad de decaimiento multiplicada por la densidad de estados inicial. Dado que el estado Ψ_1 es producido en la razón $\cos^2 \theta$ inicialmente y su velocidad de decaimiento es proporcional al cuadrado de la amplitud en la ec. (22), la velocidad de producción de ϕ_f por medio de Ψ_1 es

$$|M_f|^2 \operatorname{sen}^2 \theta \cos^2 \theta,$$

Del mismo modo, la velocidad de producción de ϕ_f por medio de Ψ_2 es

$$|M_f|^2 \cos^2 \theta \operatorname{sen}^2 \theta,$$

Dentro de una consideración similar tenemos las velocidades de producción del estado base nuclear en las transiciones $\Psi_1 \rightarrow \phi_i \psi_e$ y $\Psi_2 \rightarrow \phi_i \psi_e$, dadas respectivamente por

$$|M_i|^2 \cos^4 \theta \quad \text{y} \quad |M_i|^2 \operatorname{sen}^4 \theta,$$

con $M_i = \langle \psi_e | (E1) | \psi_i \rangle$,

donde el subíndice en M_i se refiere al estado base nuclear ϕ_i .

Finalmente, la velocidad de producción del estado excitado del núcleo contra la del estado base está dada por

$$P = \frac{|M_f|^2}{|M_i|^2} \frac{2 \cos^2 \theta \operatorname{sen}^2 \theta}{\cos^4 \theta + \operatorname{sen}^4 \theta} \quad (23)$$

En la expresión anterior deberíamos haber escrito $\sum_f |M_f|^2 / \sum_i |M_i|^2$, considerando a los diferentes estados finales ψ_r y ψ_s . Por simplicidad mantendremos la ec. (23) como está. Consecuentemente $|M_i|^2$, $|M_f|^2$ deben ser las probabilidades de aniquilación de los estados ψ_i , ψ_f , respectivamente. La razón $|M_f|^2 / |M_i|^2$ en principio puede calcularse y es también asequible experimentalmente. Si escribimos $\tan^2 \theta = x$, podemos simplificar la ec. (23) como sigue:

$$P = \frac{2x}{1+x^2} \frac{|M_f|^2}{|M_i|^2} \approx 2x \frac{|M_f|^2}{|M_i|^2}; \quad x \ll 1 \quad (24)$$

Estimaciones Numéricas para la Probabilidad de ENDE en ^{235}U y ^{189}Os .

En la mayoría de las transiciones electrónicas, como hemos visto, los cambios en el núcleo juegan un papel relativamente menor. Aún el caso de ENDE puede ser considerado como un tipo generalizado de interacción hiperfina, -- con las transiciones en los estados electrónicos responsables de la mayor parte de los cambios en la energía. Conforme el número atómico Z se hace mayor, el radio de la órbita electrónica se hace más pequeño y podremos esperar la posibilidad de apreciar la excitación nuclear.

En esta sección discutiremos dos casos en los cuales es posible el proceso ENDE, los cuales fueron encontrados por M. Morita et al. (M. Morita, 1973; K. Otozai, 1973) En uno de los casos se presenta una estimación numérica para el ^{235}U y en el otro para ^{189}Os .

Como hemos mencionado antes, el proceso ENDE se efectúa bajo las condiciones de conservación de la energía:

$E_N(\phi_f) + E_e(\psi_f) = E_N(\phi_i) + E_e(\psi_i)$ (así como del espín y paridad totales del sistema. Para tener un valor distinto de cero para la interacción Coulombiana, $\langle \Phi_f | H' | \Phi_i \rangle$ en la ec. (14), Φ_f y Φ_i deben tener el mismo espín y paridad. Supongamos un caso -- en el que J_k es igual al espín del agujero electrónico; -- con I_k como el momento angular total del núcleo ($k=i, f$); -- tendremos que el momento angular total del sistema inicial es $F_i = J_i + I_i$, y el del sistema final: $F_f = J_f + I_f$, y tenemos la condición:

$$F_i = I_i + J_i = I_f + J_f = F_f \quad (25)$$

Los elementos de matriz no-diagonales de la interacción Coulombiana se pueden derivar como sigue: La interacción H' de la ec. (3) se expande dentro de sus componentes multipolares:

$$H' = -e^2 Z \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_N^l}{r_e^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta_e, \phi_e) Y_{lm}(\theta_N, \phi_N) - \sum_i U(r_i) \quad (26)$$

Por simplicidad estamos suponiendo que $r_N < r_e$ despreciando la

contribución de la parte de penetración nuclear: $r_N > r_e$, en el cálculo siguiente. La energía E' de la ec. (14) es:

$$E' = \langle \phi_f \psi_f | H' | \phi_i \psi_i \rangle \approx \langle \Phi_f | H' | \Phi_i \rangle$$

Denotaremos ahora a la función de onda de un solo electrón de la órbita donde se encuentra el agujero electrónico por ϕ_k . Integrando sobre las variables electrónicas, excepto-- para aquellas que pertenecen al electrón que lleva a cabo la transición, tenemos:

$$E' = \langle \phi_f \psi_f | H' | \phi_i \psi_i \rangle = -4\pi e^2 Z \sum_{l,m} \frac{1}{2l+1} \quad (27)$$

$$\times \int_0^R \phi_f^* Y_{lm}(\theta_N, \phi_N) r_N^l \phi_i d\Omega_N r_N^2 dr_N \int_0^\infty \phi_i^* Y_{lm}(\theta_e, \phi_e) r_e^{-(l+1)} \phi_2 d\Omega_e r_e^2 dr_e$$

Aquí, la función de onda del electrón ϕ_i , representa a la órbita en donde se encuentra originalmente el agujero electrónico, y ϕ_2 a la órbita a donde salta el agujero.

Debido a que no conocemos suficientemente bien a las funciones de onda del núcleo y de los electrones, solamente haremos un cálculo del orden de magnitud para la probabilidad de formación de un estado nuclear excitado para los dos elementos mencionados al principio de esta sección. Tenemos así el siguiente resultado para la energía E' ec. (27):

$$E' = -\frac{4\pi}{2l+1} \alpha Z \langle r_N^l \rangle \langle r_e^{-(l+1)} \rangle mc^2 \quad (28)$$

donde $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$, $mc^2 = 0.51 \times 10^6 \text{ eV}$. $\langle r_N^l \rangle$ y $\langle r_e^{-(l+1)} \rangle$, son los elementos de matriz fuera de la diagonal de r_N^l y $r_e^{-(l+1)}$ respectivamente. Estas dos cantidades se miden en unidades de la 1-ésima y del inverso de la $(l+1)$ -ésima potencias de la longitud de onda de Compton ($= \frac{h}{mc} \approx 2.4 \times 10^{-10} \text{ cm}$), respectivamente. En seguida adoptamos la aproximación más simple para los elementos de matriz:

$$\langle r_N^l \rangle \sim R^l; \quad \text{y} \quad \langle r_e^{-(l+1)} \rangle \sim r_n^{-(l+1)} \quad (29)$$

Aquí R es el radio nuclear y r_n es el radio de la n -ésima

órbita de Bohr.

Para el ^{235}U tenemos el siguiente ajuste de energías (ver fig.1):

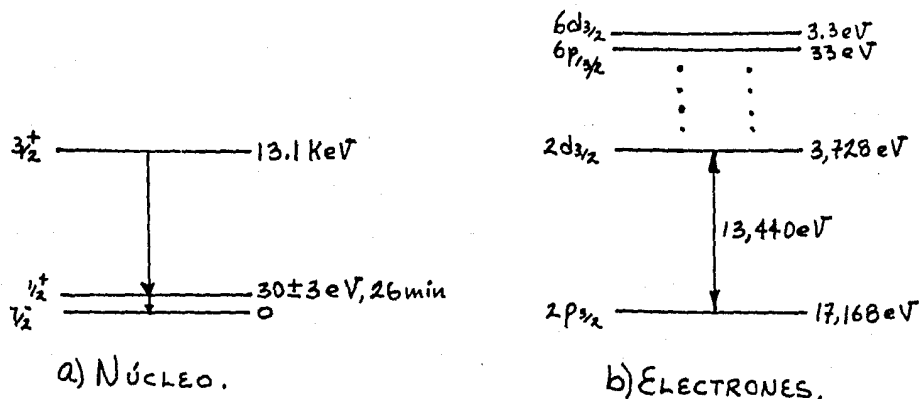


FIGURA 1. NIVELES ELECTRONICOS Y NUCLEARES EN EL ^{235}U .

La diferencia en la energía de los niveles $3p_{3/2}$ y $3d_{3/2}$ en la FIG.1b), casi coincide con la energía de excitación nuclear del estado $3/2^+$ en la FIG.1a):

$$\Delta E_N = 13.1 \text{ keV}$$

$$\Delta E_e = (17,168 - 3,728) \text{ eV} = 13,440 \text{ eV} \quad (30)$$

Además tenemos:

$$I_i = 7/2^-, J_i = 3/2^-; \quad I_f = 3/2^+, J_f = 3/2^+ \quad (31)$$

y de la ec.(25) tenemos:

$$F_i = 2, 3, 4, 5; \quad F_f = 0, 1, 2, 3. \quad (32)$$

Esto es, el estado Φ_i es una mezcla de los estados $2^+, 3^+, 4^+, 5^+$; y el estado Φ_f es una mezcla de los estados $0^+, 1^+, 2^+, 3^+$, y por lo tanto tenemos a los estados comunes 2^+ y 3^+ para Φ_i, Φ_f , siendo satisfecha la condición de espín y paridad.

En este caso particular, el octupolo eléctrico tiene un valor distinto de cero y así tenemos que en (28):

$$E^{\gamma} = -\frac{4\pi}{7} \frac{92}{137} R^3 r_2^{-4} mc^2 \quad (33)$$

suponemos además que el elemento de matriz octupolar eléctrico se incrementa por un factor de 10 debido al carácter de la deformación nuclear. Numéricamente:

$$r_2 \sim 6 \quad \text{y} \quad R \sim 2 \times 10^2 \quad (34)$$

y consecuentemente

$$E' \approx -0.04 \text{ eV} \quad (35)$$

De la ec. (14) tenemos que la razón en que se mezclan los estados es

$$\begin{aligned} \Delta m \theta \cos \theta &= \frac{E'}{E(\pi_1) - E(\pi_2)} \approx \frac{E'}{E_1 - E_2} = \frac{-0.04 \text{ eV}}{(13,440 - 13,100) \text{ eV}} \\ &= -1.1 \times 10^{-4} \end{aligned} \quad (36)$$

$$\text{y:} \quad \alpha = \tan^2 \theta \approx 1.2 \times 10^{-8} \quad (37)$$

La probabilidad de formación de un estado nuclear excitado está dada por la ec. (24):

$$P = \frac{1}{10} \times 2 \times 1.2 \times 10^{-8} \sim 2.4 \times 10^{-9} \quad (38)$$

Para el ^{189}Os , tenemos el siguiente ajuste de energías (ver FIG. 2):

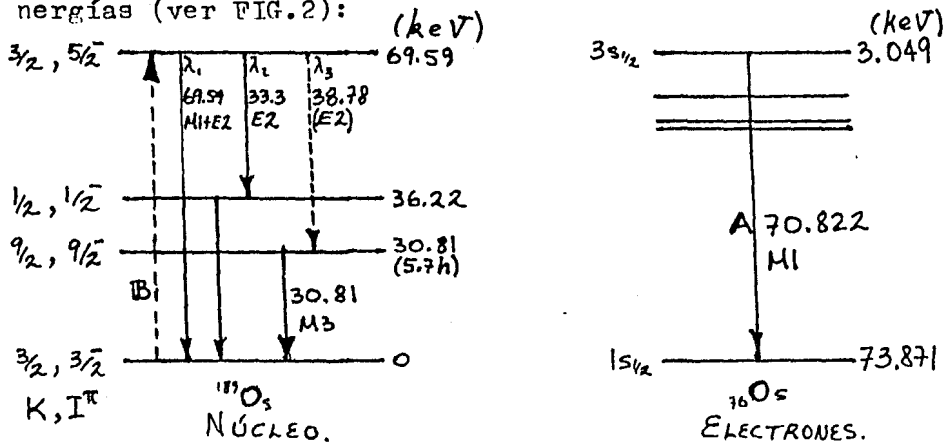


FIGURA 2. NIVELES ELECTRONICOS Y NUCLEARES EN EL ^{189}Os .

La diferencia en la energía de los niveles $3s_{1/2}$ y $1s_{1/2}$ es casi igual a la energía de excitación nuclear del estado con

$$(K_f, I_f^{\pi_f}) = (\frac{3}{2}, \frac{5}{2}^-):$$

$$\begin{aligned} \Delta E_N &= 69.59 \text{ keV} \\ \Delta E_e &= (73.871 - 3.049) \text{ keV} = 70.822 \text{ keV} \end{aligned} \quad (39)$$

Además tenemos

$$I_i^{\pi_i} = \frac{3}{2}^-, J_i = \frac{1}{2}^+; \quad I_f = \frac{5}{2}^-, J_f = \frac{1}{2}^+ \quad (40)$$

Esto es, el estado Φ_i es una mezcla de los estados $2^-, 1^-$; y el estado Φ_f es una mezcla de los estados $3^-, 2^-$; y tenemos al estado común 2^- para Φ_i, Φ_f , siendo satisfecha la condición de conservación del espín y la paridad.

En este caso, el cuadrupolo eléctrico (E2) tiene un valor distinto de cero y es del mismo orden de magnitud que la amplitud del dipolo magnético (M1); y tenemos así que la energía de interacción de la ec.(28) es:

$$E' = -\frac{8\pi}{5} \frac{76}{137} (5R^2) r_2^{-3} mc^2 \simeq -3eV \quad (41)$$

donde usamos los valores en (34) y supusimos que debido al carácter de deformación nuclear, E' se multiplica por 5.

De la ec.(14) tenemos que la razón en que se mezclan los estados es

$$\Delta m \theta \cos \theta \simeq \frac{-3eV}{(70822 - 69590)eV} = -2.43 \times 10^{-3} \quad (42)$$

y

$$\alpha = \tan^2 \theta \simeq 5.9049 \times 10^{-6} \quad (43)$$

La probabilidad del proceso ENDE en este caso está dada por (ec.(24)):

$$P = \frac{1}{10} \times 2 \times 6 \times 10^{-6} \sim 1 \times 10^{-6} \quad (44)$$

donde adoptamos a la razón de aniquilación del agujero electrónico: $|M_f/M_i|^2 = \frac{1}{10}$.

Evidencia Experimental de ENDE en ^{189}Os .

Una evidencia del proceso ENDE fué descubierta en ^{181}Os . (K. Otozai, 1973). Como se muestra en la fig. 2, si se crea una vacancia en la capa-K del $_{76}\text{Os}$ por medio de bombardeo electrónico, y tiene lugar la transición electrónica A, el estado nuclear excitado de 70 keV puede producirse por medio de la transición B. La combinación de desexcitación A y excitación B satisface las reglas de selección de ENDE debido a que ambas tienen las componentes comunes M1 y aproximadamente las mismas energías. El estado nuclear excitado $(K_f, I_f^{\pi_f}) = (\frac{3}{2}, \frac{5}{2}^-)$ de 70 keV, decae al estado isomérico $(K_i, I_i^{\pi_i}) = (\frac{9}{2}, \frac{9}{2}^-)$ de 5.7 hrs.. Es por medio de la detección de la radioactividad debida a la producción de este isómero que se obtuvo una evidencia indirecta del proceso ENDE.

El blanco fué preparado comprimiendo 0.5gr. de polvo de metal de Os no-radioactivo sobre un plato de Cu de 23mm ϕ usando una prensa de 26 tons.. Este blanco fué bombardeado con un haz de electrones obtenidos del cañon de electrones del microscopio electrónico Hitachi HU-10. La energía fué calibrada usando el anillo de difracción del plano (111) del metal de Au depositado sobre una película de plástico. Un bombardeo de 94-keV-100- μA -5.hrs. produjo la actividad mostrada en la fig. 3, que se midió detectando los electrones de conversión interna de 20 keV del isómero decaído. Estos electrones de conversión fueron medidos con un contador de flujo gaseoso GM de bajo ruido (Aloka) con un ruido de aproximadamente 0.9cpm. Esta curva de actividad muestra claramente la producción del isómero.

La sección transversal experimental σ se expresa como

$$\sigma = \frac{A}{ckixn(1-\exp[-\lambda t])} \quad (45)$$

donde A es la actividad medida, c la eficiencia de conteo, k el factor de conversión de la corriente eléctrica i a la razón de electrones proyectados, x es el alcance de los e-

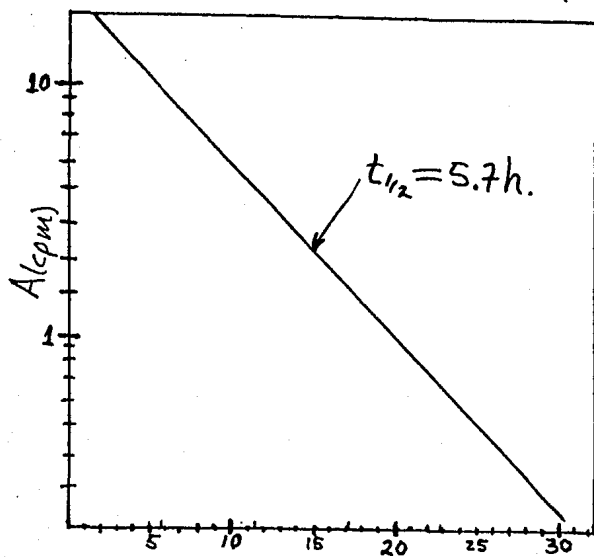
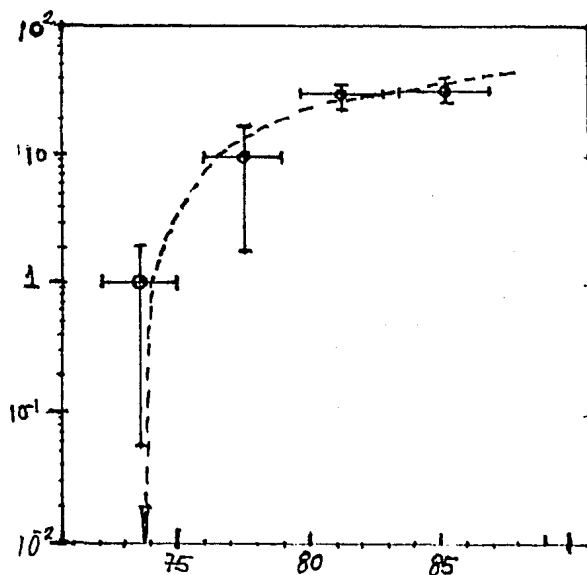


Fig. 3. Curva de decaimiento por la radioactividad producida.

Fig. 4. Función de excitación relativa para la producción del isómero.



lectrones de 20 keV en el blanco, n es la densidad atómica de ^{189}Os , λ es la constante de decaimiento del isómero, y t el tiempo de bombardeo. Dado que c, k, n , y x son constantes, la sección transversal relativa se expresa como:

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right) = \left(\frac{A}{A_0}\right) \left(\frac{i_0}{i}\right) \left[\frac{1 - \exp(-\lambda t_0)}{1 - \exp(-\lambda t)} \right] \quad (46)$$

donde el subíndice "0" representa a la energía estandar. La función de excitación relativa experimental se muestra en la fig.4, donde 73.6 keV se eligió como la energía estandar.

Podemos obtener una expresión teórica para la sección transversal σ_I de la producción del isómero, si tomamos a la sección transversal σ_k para la producción de una vacancia en la capa-K como (B.Davis, 1918):

$$\sigma_k = 9\pi \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \left[1 - \frac{\epsilon_{BK}}{\epsilon}\right] \quad (47)$$

donde g es la eficiencia de captura, a_0 el radio de Bohr, Z el número atómico, ϵ_{BK} la energía de amarre de la capa-K, ϵ la energía cinética del electrón. Y la sección transversal para ENDE es:

$$\sigma_N = \sigma_k P \quad (48)$$

donde P es la probabilidad de formación de estado nuclear excitado, ec.(24) Finalmente, la sección transversal σ_I es:

$$\sigma_I = \sigma_N B = 9\pi \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \left[1 - \frac{\epsilon_{BK}}{\epsilon}\right] P B \quad (49)$$

donde B es la razón de división para la transición a partir del estado nuclear excitado por ENDE, al isómero. La curva punteada en la fig.4 es la función de excitación relativa teórica obtenida ajustando $U = 9\pi \left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 P B$ en la ec.(49), de modo que se ajuste a los datos experimentales.

Se han hecho algunos intentos para estimar valores absolutos aproximados de σ_0 . Desde el punto de vista del experimento, se obtuvo el valor $\sigma_0 = 5 \times 10^{-9} \text{ b}$, usando $c = 0.05$ $k = 0.625 \times 10^{13} \text{ deg}^{-1} \mu\text{A}^{-1}$, $\alpha = 3 \times 10^5 \text{ cm}$, $n = 1.15 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$

$$\lambda = 2.03 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}, A = 5 \times 10^3 \text{ seq}^{-1}, i = 28 \mu\text{A},$$

$$\text{y } t = 185 \text{ min.}$$

dentro de la ec. (45). Desde el punto de vista de la teoría se obtuvo el valor $\sigma_0 = 4 \times 10^9 \text{ b}$, usando $\epsilon_0 = 74.1 \text{ keV}$ (la energía que da $(\sigma/\sigma_0) = 1$ sobre la curva en la fig. 4), $q = 1$, $z_0 = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$, $Z = 76$, $P = 1 \times 10^{-6}$ y $B = 7 \times 10^5$, dentro de la ec. (49). Basados en el valor $\sigma_0 = 5 \times 10^9 \text{ b}$ se ha hecho la estimación para la escala de mostrada a la derecha de la fig. 4.

Si las consideraciones anteriores son válidas, tendremos que la sección transversal para la producción de una vacancia en la capa-K para $\epsilon = 85 \text{ keV}$, es 2 kb ; la sección transversal para ENDE $\sigma_N = \sigma_K P$ es 2 mb , y la sección transversal del isómero $\sigma_I = \sigma_N B$ es $0.2 \mu\text{b}$.

Debemos excluir la probabilidad de que el núcleo haya sido excitado por medio de algún otro proceso. Entre éstos, el de orden más bajo es el de excitación Coulombiana del núcleo, debido a la dispersión inelástica del electrón por el núcleo. La sección transversal diferencial para este proceso está dada por (T. de Forest, 1966):

$$\frac{d\sigma_i}{d\Omega} = \frac{4\pi\alpha^2}{225} \frac{P_f}{P_i} [(E_i + E_f)^2 - (P_i - P_f)^2] B(E2) \quad (50)$$

donde no se han incluido las componentes transversales por tener un efecto pequeño en este caso. Los subíndices "i" y "f" de la energía total E y del momento P del electrón, representan a los canales de entrada y de salida respectivamente. La velocidad de transición reducida cuadrupolar eléctrica $B(E2)$ es de unos $3 \times 10^{-48} \text{ cm}^4$ y se obtuvo interpolando los datos experimentales para isótopos de Os con masa par. La sección transversal diferencial es del orden de 10 b/st con una débil depen-

dencia angular. Por lo tanto, la sección transversal de excitación Coulombiana es de unos 10^7 b, y así tenemos que la sección transversal del isómero por excitación Coulombiana es de unos 10^6 b, que se encuentra muy por debajo del límite de detección.

Finalmente, podemos concluir que el proceso de ENDE fué confirmado en el ^{189}Os , de acuerdo con los siguientes hechos:

- (1) La actividad del ^{189m}Os fué encontrada por medio del bombardeo electrónico.
- (2) La contribución de excitación Coulombiana es teóricamente despreciable y,
- (3) La función de excitación relativa es explicada por la teoría.

La sección transversal ENDE es del orden de mb en ^{189}Os .

CONCLUSION.

En la presente tesis se ha estudiado a un nuevo proceso de desexcitación del sistema de electrones atómicos, en el cual el núcleo adquiere directamente la energía que pierde el sistema electrónico; obteniéndose así a un estado nuclear excitado. Este es el proceso que hemos llamado ENDE.

Comparado con los otros dos procesos de desexcitación; i.e., la emisión de rayos-X y el Efecto Auger, la probabilidad del proceso ENDE tiene generalmente un valor extremadamente pequeño. Sin embargo, no es imposible detectar a la excitación nuclear, gracias a que antes de que el núcleo regrese a su estado base, el estado nuclear excitado obtenido por medio del proceso ENDE puede decaer a otro estado isomérico intermedio; dicho estado isomérico decae emitiendo electrones de conversión interna, los cuales son observados con relativa facilidad.

Nosotros hemos estudiado a la interacción Coulombiana como el mecanismo de interacción entre el núcleo y los electrones. Las demás interacciones electromagnéticas deben ser consideradas también.

APENDICE A.
CAMPOS MULTIPOLARES.

El campo de la radiación electromagnética puede ser obtenido del potencial vectorial A , que satisfaca la ecuación de onda en el espacio libre:

$$\nabla^2 A - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = 0 \quad (1A)$$

y, en la norma de Coulomb, la condición adicional:

$$\nabla \cdot A = 0 \quad (2A)$$

Los campos eléctrico y magnético se obtienen de

$$E = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}; \quad B = \nabla \times A \quad (3A)$$

La energía del campo se expresa como:

$$H = \frac{1}{8\pi} \int (|E|^2 + |B|^2) d\tau \quad (4A)$$

Definimos ahora a los armónicos esféricos vectoriales $Y(\theta, \phi)$ como funciones independientes del radio que son eigenfunciones simultáneas de J_z y $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, donde $[J_x, J_y] = iJ_z$. Dado que $[L, S] = 0$ donde $J = L + S$, podemos construir a los armónicos esféricos vectoriales como (Blatt y Weisskopf, 1952):

$$Y_{JM}^M(\theta, \phi) = \sum_{m=-l}^l \sum_{m'=-1}^1 (lm, 1m' | JM) Y_{lm}(\theta, \phi) \chi_{m'} \quad (5A)$$

donde $(lm, 1m' | JM)$ son los coeficientes de Clebsch-Gordan, $\chi_{m'}$ son las eigenfunciones de espín:

$$\chi_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y), \quad \chi_0 = e_z, \quad \chi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - ie_y) \quad (6A)$$

con $e_{x,y,z}$, tres vectores unitarios a lo largo de los ejes de coordenadas. Y para cada valor de $J \geq (J+1)J$ con $J \geq 1$ existen tres clases de armónico esférico vectorial, correspondiendo a $l = J+1$, $l = J$ y $l = J-1$. Observamos que solamente existen valores enteros de J . Para $J=0$ tenemos un solo valor, correspondiente a L igual la unidad y opuesto a S : $Y_{01}^0 = -\frac{e_r}{2\sqrt{\pi}}$

¹⁾ $[J_z, J_x] = iJ_y, [J_y, J_z] = iJ_x$

donde e_r es un vector unitario en la dirección radial.

Las funciones vectoriales Y_{JM}^M tienen paridad $(-)^l$.

Así, para valores definidos de J, M , la paridad de la función con $l=J$ es $(-)^J$, mientras que la paridad de las otras dos funciones es $(-)^{J+1}$. Para el caso $l=J$ introducimos la notación

$$Y_{JJ}^M \equiv X_{JM}(\theta, \phi) = \frac{Y_{JM}(\theta, \phi)}{\sqrt{J(J+1)}} \quad (7A)$$

Como el operador $(\nabla \times)$, conmuta con el operador J , el rotacional de una expresión con valores definidos de J y M , debe ser una combinación lineal de armónicos esféricos vectoriales con las mismas J y M . En particular tenemos

$$\begin{aligned} \nabla \times [f(r) X_{JM}(\theta, \phi)] &= \nabla \times [f(r) Y_{JJ}^M(\theta, \phi)] = f_+(r) Y_{J, J+1, 1}^M(\theta, \phi) \\ &+ f_-(r) Y_{J, J-1, 1}^M(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (8A)$$

Dado que los armónicos esféricos escalares forman un conjunto completo para funciones escalares, y las X_{JM} son un conjunto de vectores base en tres dimensiones, los armónicos esféricos vectoriales son también un conjunto completo, y un campo vectorial arbitrario puede expandirse dentro de una serie:

$$A(r) = \sum_{J=0}^{\infty} \sum_{M=-J}^J A(J, M; r) \quad (9A)$$

$$A(J, M; r) = r^{-1} [f(J, M; r) X_{JM} + g(J, M; r) Y_{J, J+1, 1}^M + h(J, M; r) Y_{J, J-1, 1}^M]$$

Cada término $A(J, M, r)$ es llamado un "campo multipolar puro", y es una eigenfunción de los operadores J^2 y J_z :

$$J^2 A(J, M; r) = J(J+1) A(J, M; r)$$

$$J_z A(J, M; r) = M A(J, M, r) \quad (10A)$$

Los armónicos esféricos vectoriales satisfacen las relaciones de ortonormalidad:

$$\int [Y_{J_1 M_1}^M(\theta, \phi)]^* [Y_{J_2 M_2}^{M'}(\theta, \phi)] d\Omega = \delta_{J_1 J_2} \delta_{M_1 M_2} \delta_{M M'} \quad (11A)$$

En la ec. (9A), $A(J, M, r)$ está compuesto por un término de paridad $(-)^J$: $A_{JM}^{(M)} = r^{-1} f(J, M; r) X_{JM}$ y por un segundo término de paridad $(-)^{J+1}$: $A_{JM}^{(E)} = r^{-1} [g(J, M; r) Y_{J, J-1, 1}^M + h(J, M; r) Y_{J, J-1, 1}^M]$. Aquí, los índices superiores (M), (E) se refieren a la naturaleza magnética y eléctrica respectivamente, que cada término exhibe.

Si nos restringimos a potenciales que varíen periódicamente con el tiempo, de las ecs. (1A), (2A) y (9A) tenemos que cada $A_{\ell m}^{(\lambda)}$ satisface (usaremos ℓ, m en vez de J, M , y $(\lambda) = (E) \text{ ó } (M)$) a la ecuación vectorial de Helmholtz sin divergencia:

$$\nabla \times (\nabla \times A_{\ell m}^{(\lambda)}) - k^2 A_{\ell m}^{(\lambda)} = 0 \quad (12A)$$

Es posible resolver esta ecuación para obtener una expansión en serie del potencial vectorial consistente en ondas esféricas estacionarias con un cierto punto O como centro, si se elige a una gran esfera de radio R_0 como volumen de integración, con la condición a la frontera de que las componentes tangenciales de A se anulen sobre la superficie de la esfera. Esto es equivalente a confinar al campo de radiación dentro de una esfera (de radio R_0) con una superficie perfectamente reflectora. El potencial vectorial para cada onda esférica decrece como $(1/r)$ para distancias r grandes del centro; pero permanece finito en todo el volumen de integración y en el centro de la esfera. Cada onda esférica (estacionaria) tiene un momento angular definido (ℓ) y corresponde a la onda esférica (saliente) emitida por un 2-polo oscilante apropiado (clásico) localizado en O . Las soluciones son (S.A. Moszkowski, 1965):

$$a) \quad A_{\ell m}^{(E)} = \frac{C_\ell}{k_\lambda} \nabla \times L U_{\ell m} \quad (13A)$$

$$b) \quad A_{em}^{(M)} = i C_e L U_{em} \quad (13A)$$

Donde las U_{em} son soluciones de la ecuación escalar de Helmholtz:

$$\nabla^2 u + k^2 u = 0 \quad (14A)$$

y son de la forma:

$$U_{em} = j_e(k_\lambda r) Y_{em}(\theta, \phi) \quad (15A)$$

con l entero ≥ 0 , y $|m| \leq l$. Aquí, j_e son las funciones esféricas de Bessel:

$$j_e(k_\lambda r) = \sqrt{\frac{\pi}{2k_\lambda r}} J_{l+\frac{1}{2}}(k_\lambda r) \quad (16A)$$

donde $J_{l+\frac{1}{2}}$ es una función de Bessel ordinaria de orden semi-entero. Los valores asintóticos de las j_e son:

$$j_e(k_\lambda r) \xrightarrow{k_\lambda r \rightarrow 0} \frac{(k_\lambda r)^l}{(2l+1)!!} ; [(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)] \quad (17A)$$

$$\text{donde } j_e(k_\lambda r) \xrightarrow{k_\lambda r \rightarrow \infty} \frac{\text{sen}[k_\lambda r - \frac{l\pi}{2}]}{k_\lambda r} \quad (18A)$$

Si se impone la condición a la frontera $u(R_0) = 0$ es necesario tener $j_e(k_\lambda R_0) = 0$. Esto requiere que $k_\lambda = \pi(n + \frac{1}{2})/R_0$, donde n es un entero positivo siempre que $R_0 \gg \lambda \pi/2k$.

Las U_{em} tienen varias características importantes:

1). Constituyen un conjunto completo ortogonal de soluciones no-singulares a la ecuación escalar de Helmholtz. La 'completez' significa que cualquier función que no tenga una singularidad en el origen y que se anule para $r = R_0$, puede expresarse como combinación lineal de las U_{em} . La condición de ortogonalidad:

$$\int_V U_{em}^* U_{em} dV = \left(\frac{R_0}{2k_\lambda^2}\right) \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \delta_{k_\lambda k_\lambda'} \quad (19A)$$

es una consecuencia de la ortogonalidad de los armónicos

esféricos y de las funciones esféricas de Bessel.

2). Son eigenfunciones de los operadores de momento angular orbital L^2, L_z

$$\left. \begin{aligned} L^2 U_{lm} &= l(l+1) U_{lm} \\ L_z U_{lm} &= m U_{lm} \end{aligned} \right\} \quad (20A)$$

3). Las U_{lm} satisfacen a la ecuación:

$$U_{lm}(-r) = (-)^l U_{lm}(r) \quad (21A)$$

En las ecs. (13), C_l es una constante independiente de m , que por la normalización satisface:

$$C_l = \left[\frac{8\pi\omega^2}{l(l+1)R_0} \right]^{1/2} \quad (22A)$$

y las U_{lm} satisfacen:

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} (r U_{lm}) \right]_{R_0} = 0 \quad (23A)$$

Las $A_{lm}^{(\lambda)}$ poseen propiedades similares a las de las U_{lm} :

1). Forman un conjunto completo ortogonal de soluciones a la ecuación vectorial de Helmholtz sin divergencia; de modo que cualquier función vectorial que no tenga una singularidad en el origen y cuyas componentes tangenciales se anulen en $r=R_0$ puede expresarse como alguna combinación lineal de $A_{lm}^{(\lambda)}$. La condición de ortogonalidad en este caso es

$$\int_V (A_{l'm'}^{(\lambda)})^* \cdot A_{lm}^{(\lambda)} dV = \frac{l(l+1)}{2k_\lambda^2} R_0 C_l^2 \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{k_\lambda k_\lambda'} \quad (24A)$$

2). Las soluciones $A_{lm}^{(\lambda)}$ son eigenvectores de los operadores de momento angular J^2, J_z .

3). Una característica del potencial vectorial $A_{lm}^{(\lambda)}$ pero no de las funciones U_{lm} , es su adicional división en campos eléctricos y magnéticos:

$$\begin{aligned} a) \quad E_{lm}^{(\lambda)} &= ik_\lambda A_{lm}^{(\lambda)} \\ b) \quad B_{lm}^{(\lambda)} &= \nabla \times A_{lm}^{(\lambda)} \end{aligned} \quad (25A)$$

notamos que:

$$\left. \begin{aligned} \text{a)} \quad E_{lm}^{(E)} = B_{lm}^{(M)} = i C_l \nabla \times L u_{lm} \\ \text{b)} \quad E_{lm}^{(M)} = -B_{lm}^{(E)} = -k_l C_l L u_{lm} \end{aligned} \right\} \quad (26A)$$

Estos campos satisfacen:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{lm}^{(M)} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{B}_{lm}^{(E)} = 0 \quad (27A)$$

Las dos soluciones: $A_{lm}^{(E)}$, $A_{lm}^{(M)}$, tienen paridad opuesta: $(-)^{l-1}$ y $(-)^l$, respectivamente. La paridad del campo de radiación E_l (multipolar eléctrico) o bien el M_l (multipolar magnético) llevan una paridad $(-)^l$ ó $(-)^{l-1}$, respectivamente. En cualquier caso, el conocimiento de k , l, m , y la paridad del potencial vectorial $A_{lm}^{(\lambda)}$ determina su forma de manera única.

Podemos escribir a los campos eléctrico y magnético en términos de los armónicos esféricos vectoriales:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{B} &= \sum_{l,m} \left[a_{\epsilon}(l,m) f_{\epsilon}(kr) X_{lm} - \frac{i}{k} a_{\mu}(l,m) \nabla \times g_{\mu}(kr) X_{lm} \right] \\ \mathbf{E} &= \sum_{l,m} \left[\frac{i}{k} a_{\epsilon}(l,m) \nabla \times f_{\epsilon}(kr) X_{lm} + a_{\mu}(l,m) g_{\mu}(kr) X_{lm} \right] \end{aligned} \right\} \quad (28A)$$

Los coeficientes $a_{\epsilon}(l,m)$, $a_{\mu}(l,m)$ determinan el 'peso' con que intervienen los campos multipolares eléctricos y magnéticos de cada orden (l, m) , y están determinados por las fuentes que producen el campo. $f_{\epsilon}(kr)$, $g_{\mu}(kr)$ son funciones radiales de la forma: $(A_{lm}^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + A_{lm}^{(2)} h_l^{(2)}(kr))$ donde $h_l^{(1)}(x) = j_l(x) + i n_l(x)$ son las funciones esféricas de Hankel; los coeficientes $A_{lm}^{(i)}$ están determinados por las condiciones a la frontera. Se puede demostrar que:

$$\left. \begin{aligned} \text{a)} \quad a_{\mu}(l,m) g_{\mu}(kr) &= \frac{k}{\sqrt{l(l+1)}} \int Y_{lm}^* \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} d\Omega \\ \text{b)} \quad a_{\epsilon}(l,m) f_{\epsilon}(kr) &= -\frac{k}{\sqrt{l(l+1)}} \int Y_{lm}^* \mathbf{r} \cdot \mathbf{E} d\Omega \end{aligned} \right\} \quad (29A)$$

de modo que si conocemos a los escalares $\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}$ y $\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}$ en dos

radios distintos, podremos especificar completamente a los campos.

Estaremos interesados en las propiedades de los campos multipolares en la zona lejana: ($kr \gg 1$)

Para la radiación de una fuente localizada, buscamos soluciones del tipo onda saliente. Entonces la función radial $f_e(kr)$ es proporcional a la función de Hankel esférica $h_e^{(1)}(kr)$:

$$f_e(kr) \xrightarrow{kr \gg 1} h_e^{(1)}(kr) \xrightarrow{kr \gg 1} (i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr} \quad (30A)$$

de modo que en la zona de radiación, el campo magnético para el multipolo (l, m) es como

$$B_{lm}^{(E)} \xrightarrow{kr \gg 1} (-i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr} \mathcal{L} Y_{lm} \quad (31A)$$

y el campo eléctrico lo calculamos con (Ecs. 25A):

$$E_{lm}^{(E)} = \frac{i}{k} \nabla \times B_{lm}^{(E)} \quad (32A)$$

y despreciando términos de orden superior a r^{-1} obtenemos

$$E_{lm}^{(E)} = (-i)^{l+1} \frac{e^{ikr}}{kr} (\mathcal{N} \times \mathcal{L} Y_{lm}), \quad \mathcal{N} = \frac{\mathcal{R}}{r} \quad (33A)$$

De las ecuaciones (33A) y (31A) tenemos

$$E_{lm}^{(E)} = B_{lm}^{(E)} \times \mathcal{N} \quad (34A)$$

Los campos en (31A) y (34A) son ambos transversales al radio vector, decrecen como r^{-1} ; esto es, son típicamente campos de radiación. Para los multipolos magnéticos debemos hacer nuevamente el intercambio $E^{(E)} \rightarrow -B^{(M)}$, $B^{(E)} \rightarrow E^{(M)}$.

Se puede demostrar que la energía dentro de una capa esférica, entre r y $(r+dr)$ para ($kr \gg 1$), debida a una superposición de multipolos eléctricos y magnéticos es

$$\frac{dU}{dr} = \frac{1}{8\pi k^2} \sum_{l,m} |a_E(l,m)|^2 + |a_M(l,m)|^2 \quad (35A)$$

y en esa misma región la densidad de momento angular (promediada en el tiempo):

$$dM = \frac{dr}{8\pi \omega k^2} \text{Re} \sum_{\substack{l,m \\ l',m'}} \{ [a_E^*(l',m') a_E(l,m) + a_M^*(l',m') a_M(l,m)] \times$$

$$\times \left\{ \int (\mathbf{L} \cdot \mathbf{X}_{l'm'})^* \mathbf{X}_{lm} d\Omega + [a_{\epsilon}^*(l',m') a_{\epsilon}(l,m) - a_{m}^*(l',m') a_{m}(l,m)] \right. \\ \left. \times \int (\mathbf{L} \cdot \mathbf{X}_{l'm'}) m \times \mathbf{X}_{lm} d\Omega \right\} \quad (36A)$$

Para el caso particular en que tengamos una superposición lineal de multipolos eléctricos (l, m) , con la misma l pero con valores distintos de m , tendremos:

$$\left. \begin{aligned} B_{\epsilon} &= \sum_m a_{\epsilon}(l,m) X_{lm} h_2^{(1)}(kr) e^{-i\omega t} \\ E_{\epsilon} &= \frac{i}{k} \nabla \times B_{\epsilon} \end{aligned} \right\} \quad (37A)$$

y la energía (promedio temporal) entre $r, r+dr$ es ($kr \gg 1$):

$$\frac{dU}{dr} = \frac{1}{8\pi k^2} \sum_m |a_{\epsilon}(l,m)|^2 \quad (38A)$$

independiente del radio. La densidad de momento angular es en este caso

$$\frac{dM}{dr} = \frac{1}{8\pi \omega k^2} \operatorname{Re} \sum_{m,m'} a_{\epsilon}^*(l,m') a_{\epsilon}(l,m) \\ \times \int Y_{lm'}^* \mathbf{L} Y_{lm} d\Omega \quad (39A)$$

de aquí observamos que

$$\frac{dM_z}{dr} = \frac{1}{8\pi \omega k^2} \sum_m m |a_{\epsilon}(l,m)|^2 \quad (40A)$$

En el caso en que tengamos un solo valor de m , M solo tiene componente en z y tenemos que

$$\frac{dM_z}{dr} = \frac{1}{8\pi \omega k^2} |a_{\epsilon}(l,m)|^2 = \frac{m}{\omega} \frac{dU}{dr} \quad (41A)$$

La interpretación cuántica de este resultado es que, si tenemos radiación multipolar de orden (l, m) , esta se lleva $m\hbar$ unidades de la componente en z del momento angular por cada

fotón con energía $\hbar\omega$. Es posible demostrar que en este caso el cuadrado del momento angular es $l(l+1)\hbar^2$. Cada fotón de un campo de radiación multipolar posee un momento angular determinado por su orden (l, m) , justamente como el momento angular de una partícula está determinado por los números cuánticos l y m .

Para una fuente localizada, los campos en la zona de radiación están dados por

$$\mathbf{B} \longrightarrow \frac{e^{-ikr-i\omega t}}{kr} \sum_{l,m} (-i)^{l+1} [a_E(l,m) X_{l,m} + a_M(l,m) Y X_{l,m}] \quad (42A)$$

$$\mathbf{E} \longrightarrow \mathbf{B} \times \mathbf{n} \quad (43A)$$

y la distribución de la potencia radiada por unidad de tiempo, por unidad de ángulo sólido es:

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{c}{8\pi k^2} \left| \sum_{l,m} (-i)^{l+1} [a_E(l,m) X_{l,m} Y + a_M(l,m) X_{l,m}] \right|^2 \quad (44A)$$

y la potencia radiada total es

$$P = \frac{c}{8\pi k^2} \sum_{l,m} [|a_E(l,m)|^2 + |a_M(l,m)|^2] \quad (45A)$$

Para un multipolo puro de orden (l, m) tenemos

$$\frac{dP(l,m)}{d\Omega} = \frac{c}{8\pi k^2} |a(l,m)|^2 |X_{l,m}|^2 \quad (46A)$$

Para un multipolo eléctrico (l, m) , el multipolo magnético (l, m) tiene la misma dependencia angular, pero las polarizaciones se encuentran en ángulo recto. No es posible por lo tanto, saber si la radiación es de carácter eléctrico o magnético haciendo mediciones de la distribución angular de la potencia radiada únicamente; es necesario, para saberlo, medir además la polarización. Observamos además que:

$$\sum_{m=-l}^l |X_{l,m}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \quad (47A)$$

Por

Por lo tanto, la distribución de la radiación es isotrópica para una fuente que consiste en un conjunto de multipolos de orden l , con coeficientes $Q(l, m)$ independientes de m , superpuestos incoherentemente. Esta situación se encuentra en las transiciones radiativas atómicas y nucleares, a menos que el estado inicial se prepare de antemano de alguna manera.

Consideremos ahora la manera en que los coeficientes multipolares se encuentran relacionados con las fuentes. Suponemos que estas constan de una densidad de carga ρ una densidad de corriente \mathbf{J} y una magnetización intrínseca \mathcal{M} ; además suponemos que tienen una dependencia temporal $(\exp(-i\omega t))$.

Podemos escribir a las ecuaciones de Maxwell como:

$$\left. \begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & \nabla \times \mathbf{E}' - ik\mathbf{B} &= \frac{4\pi i}{\omega} \nabla \times \mathbf{J} \\ \nabla \cdot \mathbf{E}' &= 0 & \nabla \times \mathbf{B} + ik\mathbf{E}' &= 4\pi \nabla \times \mathcal{M} \end{aligned} \right\} \quad (48A)$$

donde usamos la ecuación de continuidad $i\omega\rho = \nabla \cdot \mathbf{J}$ para definir $\mathbf{E}' = \mathbf{E} + \frac{4\pi i}{\omega} \mathbf{J}$.

Combinando las ecuaciones del rotacional y haciendo algo de álgebra, obtenemos las ecuaciones

$$\left. \begin{aligned} (\nabla^2 + k^2) \mathbf{r} \cdot \mathbf{B} &= -\frac{4\pi i}{c} \mathcal{L} \cdot (\mathbf{J} + c \nabla \times \mathcal{M}) \\ (\nabla^2 + k^2) \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}' &= 4\pi k \mathcal{L} \cdot (\mathcal{M} + \frac{1}{ck^2} \nabla \times \mathbf{J}) \end{aligned} \right\} \quad (49A)$$

y obtenemos, con la condición de ondas salientes

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) &= \frac{i}{c} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \mathcal{L}' \cdot [\mathbf{J}(\mathbf{x}') + c \nabla' \times \mathcal{M}(\mathbf{x}')] d^3x' \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}'(\mathbf{x}) &= -k \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \mathcal{L}' \cdot [\mathcal{M}(\mathbf{x}') + \frac{1}{ck^2} \nabla' \times \mathbf{J}(\mathbf{x}')] d^3x' \end{aligned} \right\} \quad (50A)$$

Para evaluar los coeficientes multipolares usamos la ec. (29A) y notamos que para ondas salientes $A_l^{(i)} = 0$, entonces. $f_e(kr) = g_e(kr) = h_e^{(1)}(kr)$ en la ec. (28A), además expandemos la función de Green (de 42A) en ondas esféricas, para obtener en la ec. (29A):

$$\left. \begin{aligned} a_e(l, m) &= \frac{4\pi k^3}{\sqrt{l(l+1)}} \int j_e(kr) Y_{em}^* \mathbb{L} \cdot \left(\mathcal{M} + \frac{1}{c k^2} \nabla \times \mathcal{J} \right) d^3x \\ a_m(l, m) &= -\frac{4\pi k^2}{\sqrt{l(l+1)}} \int j_e(kr) Y_{em}^* \mathbb{L} \cdot \left(\mathcal{J} + c \nabla \times \mathcal{M} \right) d^3x \end{aligned} \right\} \quad (51A)$$

Estas ecuaciones pueden tomar la forma

$$a_e(l, m) = \frac{4\pi k^2}{i\sqrt{l(l+1)}} \int Y_{em}^* \left\{ \begin{aligned} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} [r j_e(kr) + \frac{ik}{c} (r \cdot \mathcal{J}) j_e(kr)] \\ - ik \nabla \cdot (r \times \mathcal{M}) j_e(kr) \end{aligned} \right\} d^3x \quad (52A)$$

$$a_m(l, m) = \frac{4\pi k^2}{i\sqrt{l(l+1)}} \int Y_{em}^* \left\{ \begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{r \times \mathcal{J}}{c} \right) j_e(kr) + \nabla \cdot \mathcal{M} \frac{\partial}{\partial r} [r j_e(kr)] \\ - k^2 (r \cdot \mathcal{M}) j_e(kr) \end{aligned} \right\} d^3x \quad (53A)$$

Estas son expresiones válidas para cualquier frecuencia y tamaño de la fuente. En física atómica y nuclear las dimensiones de la fuente son muy pequeñas comparadas con la longitud de onda ($k r_{\max} \ll 1$). En ese caso podemos tomar las formas asintóticas de las funciones esféricas de Bessel; manteniendo solamente las potencias más pequeñas para los términos que involucran a ρ , \mathcal{J} , ó \mathcal{M} , tenemos las aproximaciones:

$$\left. \begin{aligned} a_e(l, m) &\approx \frac{4\pi k^{l+2}}{i(2l+1)!!} \left(\frac{l+1}{l} \right)^{1/2} (Q_{lm} + Q'_{lm}) \\ a_m(l, m) &\approx \frac{4\pi i k^{l+2}}{(2l+1)!!} \left(\frac{l+1}{l} \right)^{1/2} (M_{lm} + M'_{lm}) \end{aligned} \right\} \quad (54A)$$

donde

$$\left. \begin{aligned} Q_{lm} &= \int r^l Y_{lm}^* P d^3x \\ Q'_{lm} &= -\frac{ik}{l+1} \int r^l Y_{lm}^* \nabla \cdot (r \times \mathcal{M}) d^3x \end{aligned} \right\} (55)$$

Q_{lm} tiene la forma de un multipolo electrostático y Q'_{lm} es un momento multipolar eléctrico inducido debido a la magnetización, este último es generalmente más pequeño que el primero. En (54A) tenemos

$$\left. \begin{aligned} M_{lm} &= -\frac{1}{l+1} \int r^l Y_{lm}^* \nabla \cdot \left(\frac{r \times \mathcal{J}}{c} \right) d^3x \\ M'_{lm} &= -\int r^l Y_{lm}^* \nabla \cdot \mathcal{M} d^3x \end{aligned} \right\} (56)$$

en contraste con el caso anterior, M_{lm} y M'_{lm} son generalmente del mismo orden de magnitud.

Los términos sucesivos decrecen rápidamente.

APENDICE B.
CUANTIZACION DEL CAMPO ELECTROMAGNETICO.

Consideremos al campo electromagnético en ausencia de carga. La descripción clásica de este campo puede hacerse mediante un potencial vectorial A que satisface la ecuación de onda

$$\nabla^2 A - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

y una condición adicional:

$$\nabla \cdot A = 0 \quad (2)$$

en la norma de Coulomb. Los campos se obtienen de

$$E = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}; \quad B = \nabla \times A \quad (3)$$

Sea $\{T^{(1)}, T^{(2)}, \dots, T^{(r)}, \dots\}$ un conjunto completo de campos transversales, ortonormal:

$$\left. \begin{aligned} \nabla \cdot T^{(r)} &= 0; \quad \int (T^{(r)*} \cdot T^{(r')}) dV = \delta_{rr'} \\ \sum_r T_i^{(r)}(r) T_j^{(r)*}(r') &= \delta_{ij} \delta(r-r') \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Supongamos que dicho conjunto es una base de coordenadas normales reales:

$$\left. \begin{aligned} T^{(r)*} &= T^{(r)} \\ (\nabla^2 + k_r^2) T^{(r)} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Las coordenadas normales q_r están definidas por:

$$q_r = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int (T^{(r)} \cdot A) dV \quad (6)$$

estas cumplen con las ecuaciones de movimiento

$$\ddot{q}_r + k_r^2 q_r = 0 \quad (7)$$

características de osciladores armónicos con frecuencia k_r . El momento conjugado a q_r es p_r , puede ser obtenido de

$$p_r = \frac{1}{4\pi} \int (\mathbf{T}^{(r)} \cdot \dot{\mathbf{A}}) dV \quad (8)$$

y es igual a \dot{q}_r . La ecuación (7B) es equivalente a las ecuaciones de Hamilton:

$$\dot{q}_r = p_r ; \quad \dot{p}_r = -\omega_r^2 q_r \quad (9)$$

que pueden obtenerse del siguiente Hamiltoniano:

$$h_r = \frac{1}{2} (p_r^2 + k_r^2 q_r^2) \quad (10)$$

El Hamiltoniano de la radiación libre se obtiene sumando los Hamiltonianos correspondientes a los diferentes modos normales:

$$H_{\text{rad}} = \sum_r h_r \quad (11)$$

Es posible demostrar que H_{rad} es la energía de la radiación en términos de las variables canónicas.

La cuantización del campo electromagnético la podemos realizar de acuerdo con el principio de correspondencia si remplazamos las variables dinámicas q_r, p_r de la teoría clásica, por observables que obedecen las relaciones de conmutación

$$\left. \begin{aligned} [q_r, q_{r'}] &= [p_r, p_{r'}] = 0 \\ [q_r, p_{r'}] &= i\hbar \delta_{rr'} \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

El operador Hamiltoniano que determina la evolución del sistema es el operador definido por (10B) y (11B). La radiación es entonces vista como una superposición de osciladores armónicos cuantizados. Con cada modo de vibración tenemos una serie de niveles discretos equidistantes:

$$E_{n_r} = (n_r + \frac{1}{2}) \hbar c k_r ; \quad (n_r: 0, 1, 2, \dots, \infty) \quad (13)$$

La cuantización del campo la podemos hacer también en términos de los operadores de creación y aniquilación que denotamos por $a_{\mathbf{r}}^+$, $a_{\mathbf{r}}$ respectivamente:

$$a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{2k_{\mathbf{r}}}} (k_{\mathbf{r}} q_{\mathbf{r}} + i p_{\mathbf{r}})$$

$$a_{\mathbf{r}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2k_{\mathbf{r}}}} (k_{\mathbf{r}} q_{\mathbf{r}} - i p_{\mathbf{r}})$$
(14)

y de las relaciones de conmutación (12B) tenemos las reglas de conmutación:

$$[a_{\mathbf{r}}, a_{\mathbf{r}'}^+] = \hbar \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (15)$$

Los eigenvectores de se obtienen por la acción repetida de $a_{\mathbf{r}}^+$ sobre el eigenvector del estado base (del vacío). Un conjunto completo de eigenestados de H_{rad} se obtiene tomando el producto tensorial de los eigenestados de los Hamiltonianos parciales $h_{\mathbf{r}}$ en (10B). A cada estado lo etiquetamos con los números cuánticos $n_{\mathbf{r}}$ y la energía es la suma de las energías parciales:

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_{\mathbf{r}}, \dots} = \sum_{\mathbf{r}} (n_{\mathbf{r}} + \frac{1}{2}) \hbar c k_{\mathbf{r}} \quad (16)$$

El eigenvector correspondiente lo obtenemos a partir del vector $|0\rangle$ del estado base, por medio de

$$|n_1, n_2, \dots, n_{\mathbf{r}}, \dots\rangle = \prod_{\mathbf{r}} \frac{(a_{\mathbf{r}}^+)^{n_{\mathbf{r}}}}{(n_{\mathbf{r}}!)^{1/2}} |0\rangle \quad (17)$$

El potencial vectorial del campo lo obtenemos como:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}} q_{\mathbf{r}} \mathbf{T}^{(\mathbf{r})}(\mathbf{r}) \quad (18)$$

que con las ecuaciones (14B) queda:

$$A(\mathbf{r}) = \sum_{\tau} \frac{1}{\sqrt{2k_{\tau}}} (a_{\tau} + a_{\tau}^{\dagger}) T^{(\tau)}(\mathbf{r}) \quad (19)$$

En la ec. (17B) cada número cuántico n representa al número de cuantos vibracionales relativos a un modo de vibración particular, pero podemos también interpretar a la cuantización del campo como la introducción de excitaciones elementales; los fotones. Así, n_{τ} representa al número de estos corpúsculos con energía $\hbar c k_{\tau}$ en el estado descrito por $T^{(\tau)}$; ese valor de la energía es el eigenvalor del operador del número de fotones en el estado $T^{(\tau)}$:

$$n_{\tau} \equiv N_{\tau} = a_{\tau}^{\dagger} a_{\tau} \quad (20)$$

$a_{\tau}, a_{\tau}^{\dagger}$ son los operadores de aniquilación y creación, respectivamente, de un corpúsculo en el estado $T^{(\tau)}$.

Las funciones de onda en (17B) son simétricas con respecto al intercambio de fotones, de modo que estos deben seguir la estadística de Bose-Einstein; lo cual está de acuerdo con las observaciones experimentales de las propiedades termodinámicas de la radiación de un cuerpo negro. En la expresión (16B) tenemos que para cada oscilador existe una energía del punto cero ($\hbar c k_{\tau}/2$), de modo que todo el campo debe recibir una contribución infinita; nosotros ignoraremos esta contribución, restándola de cada término \hbar_{τ} , de modo que escribimos al nuevo Hamiltoniano como:

$$H_{\text{rad}} = \sum_{\tau} \hbar c k_{\tau} N_{\tau} \quad (21)$$

El método de cuantización delineado anteriormente es independiente de la base de campos vectoriales elegida, pero se ha supuesto que estos campos son reales. Es posible reformular este método para el caso en que los campos $T^{(\tau)}$ sean complejos. En particular esto es cierto para el caso de la expansión multipolar, donde el conjunto de campos $A_{\ell m}^{(\lambda)}$ (con: $0 \leq k \leq \infty$; $\ell: 1, 2, \dots, \infty$; $m: -\ell, \dots, \ell$; $\lambda: E \text{ ó } M$), forma un conjunto completo ortonormal de campos transversa-

les (ver Ap.A):

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad A_{\ell m}^{(M)}(k) &= i C_\ell \mathcal{L} [j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi)] \\ \text{b)} \quad A_{\ell m}^{(E)}(k) &= \frac{C_\ell}{k_\lambda} \nabla \times \mathcal{L} [j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi)] \end{aligned} \quad (22)$$

En términos de estos se expande el operador \mathbb{A} que describe al campo:

$$\mathbb{A} = \sum_{k, \lambda, \ell, m} \left\{ a_{\ell m}^{(\lambda)}(k) A_{\ell m}^{(\lambda)}(k) + a_{\ell m}^{(\lambda)\dagger}(k) A_{\ell m}^{(\lambda)*}(k) \right\} \quad (23)$$

donde interpretamos a los operadores $a_{\ell m}^{(\lambda)}$, $a_{\ell m}^{(\lambda)\dagger}$ como operadores de aniquilación y de creación, respectivamente, de fotones con energía k momento angular (ℓ, m) y paridad $(-)^{\ell \times (\tilde{\lambda})}$, donde $(\tilde{\lambda}) = (-)$ si $\lambda = E$; $(\tilde{\lambda}) = (+)$ si $\lambda = M$. Observamos que no existen fotones con momento angular cero.

APENDICE C.
TRANSICIONES RADIATIVAS.

Partículas y radiación.

Supongamos que tenemos confinados, dentro de un volumen esférico, a un sistema de partículas y a la radiación. Sin tomar en cuenta a la interacción del sistema de partículas con el de la radiación, podemos designar a su estado por

$$\Psi = | \psi_{part.} n_1 n_2 \dots n \dots \rangle \quad (1c)$$

donde $\psi_{part.}$ es la función de onda de las partículas, y los números n_λ son los números de ocupación de los distintos modos de la radiación.

El Hamiltoniano del sistema total está compuesto por tres partes:

$$\mathcal{H} = H_{part} + H_{rad} + H'; \quad (2c)$$

donde

$$H_{part} = \sum_{\alpha} \frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + V \quad (3c)$$

cuyos eigenestados constituyen los niveles del sistema en ausencia de radiación.

H_{rad} es el Hamiltoniano de la radiación libre, dado en la ec.(21B). La suma de estos dos últimos constituye al Hamiltoniano no perturbado, cuyas eigenfunciones son de la forma de la ec.(1C).

El Hamiltoniano de interacción es

$$H' = - \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha} c} \left(e_{\alpha} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_{\alpha} + \frac{e \hbar}{2} \mu_{\alpha} \cdot \nabla \times \mathbf{A} \right) \quad (4c)$$

Aquí hemos despreciado términos $O(A^2)$ y tomamos la norma de Coulomb: $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. La interacción se da por medio del acoplamiento de las cargas y los momentos magnéticos de las partículas con el campo.

Ahora tomamos la expansión multipolar del campo ec.(23B), y el primer término en la ec.(4C) queda:

$$-\sum_{\alpha} \frac{e_{\alpha}}{m_{\alpha} c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_{\alpha} = -\sum_{\alpha} \sum_{k, \lambda, l, m} \frac{e_{\alpha}}{m_{\alpha} c} \left\{ a_{\ell m}^{(\lambda)} \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)} \cdot \mathbf{p}_{\alpha} + a_{\ell m}^{(\lambda)\dagger} \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)*} \cdot \mathbf{p}_{\alpha} \right\} \quad (5c)$$

y para el segundo término en la ec. (4c) tenemos

$$-\sum_{\alpha} \frac{e \hbar}{2 m_{\alpha} c} \mu_{\alpha} \cdot \nabla \times \mathbf{A} = -\sum_{\alpha} \sum_{k, \lambda, l, m} \frac{e \hbar}{2 m_{\alpha} c} \mu_{\alpha} \cdot \left\{ a_{\ell m}^{(\lambda)} \nabla \times \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)} + a_{\ell m}^{(\lambda)\dagger} \nabla \times \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)*} \right\} \quad (6c)$$

Emisión de radiación electromagnética.

Consideramos que el Hamiltoniano de interacción en (4c) es una perturbación que induce transiciones entre los estados del Hamiltoniano no perturbado, que son de la forma de la ec. (1c). Las velocidades de transición están dadas por la Regla de Oro de Fermi:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} P_f(E) \left| \langle \Psi_f | H' | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (7c)$$

donde $P_f(E)$ denota al número de estados finales por intervalo unitario de energía;

Los elementos de matriz en (7c) los podemos separar con ayuda de (5c) y (6c) como la suma de:

$$\sum_J \sum_{k, \lambda, l, m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}}} [n_{\lambda}(l, m) + 1] \langle \Psi_f | \frac{e}{m_{\alpha} c} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)*} + \frac{e \hbar}{2} \mu_{\alpha} \cdot \nabla \times \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)*} | \Psi_i \rangle \quad (8c)$$

más:

$$\sum_J \sum_{k, \lambda, l, m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}}} n_{\lambda}(l, m) \langle \Psi_f | \frac{e}{m_{\alpha} c} \mathbf{p}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)} + \frac{e \hbar}{2} \mu_{\alpha} \cdot \nabla \times \mathbf{A}_{\ell m}^{(\lambda)} | \Psi_i \rangle \quad (9c)$$

donde hemos hecho uso de

$$\langle \dots n_{\lambda}(l, m) \dots | a_{\ell m}^{(\lambda)\dagger} | \dots n'_{\lambda}(l, m) \dots \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}}} [n_{\lambda}(l, m) + 1] \delta_{n, n'} \dots \delta_{n_{\lambda}, (n_{\lambda} + 1)}$$

$$\langle \dots n_{\lambda}(l, m) \dots | a_{\ell m}^{(\lambda)} | \dots n'_{\lambda}(l, m) \dots \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}}} n_{\lambda}(l, m) \delta_{n, n'} \dots \delta_{n_{\lambda}, (n_{\lambda} - 1)}$$

... (10c)

La interpretación física del resultado anterior es la siguiente: Si el campo electromagnético se encuentra sujeto a una interacción que es proporcional a la amplitud de uno (o varios) de los modos normales, las transiciones inducidas por esta interacción son aquellas en las que todos los modos normales permanecen en el mismo estado, excepto los responsables de la transición, los cuales pierden o ganan, en cada caso, un solo cuanto de excitación cada uno. Esta es una de las reglas de selección para la transición. Además tenemos que los cuadrados de los elementos de matriz en (8C) y (9C) contienen, según el caso, una dependencia con el número de fotones presentes. La probabilidad de absorción de energía por el sistema material es proporcional a $N_\lambda(\ell, m)$, que representa al grado de excitación del modo que está suministrando la energía al sistema material; como cabía esperar, esta contribución será nula si no existe energía disponible en ese modo de oscilación del campo. El factor para el caso de emisión es proporcional a $[N_\lambda(\ell, m) + 1]$, que es también mayor si ya existe alguna energía en ese modo. Es costumbre separar a la probabilidad de emisión en dos partes: una constante (con el 1), y otra proporcional a N_λ . A la primera se le llama coeficiente de emisión espontánea, ya que el sistema radiará en esa medida aún cuando $N_\lambda = 0$. A la otra parte se le denomina coeficiente de emisión inducida.

Emisión por un solo multipolo.

En la práctica estaremos interesados en el caso en que la longitud de onda de la radiación es mucho mayor que las dimensiones de la fuente (átomo ó núcleo); como sabemos, en ese caso solo uno dos multipolos contribuyen de manera importante (ver Ap.A), de modo que en la ec. (7C) únicamente consideramos la intervención del multipolo $A_{\ell m}^{(\lambda)}$ (para la emisión tomamos al complejo conjugado $A_{\ell m}^{(\lambda)*}$). Ahora bien, el número de posibles estados por intervalo unitario de energía dentro de un volumen esférico con un gran radio R . (para radiación con una λ , ℓ y m específicas) está dado por: (7).

$$P_F(E) = \frac{R_0}{\pi \hbar c} \quad (11c)$$

y de las ecs. (7C, 8C, 11C), obtenemos la siguiente expresión para la probabilidad de emisión espontánea:

$$w(i \rightarrow f, k_\lambda) = \frac{R_0}{\hbar c \omega} \left| \langle f | H'(A_{em}^{(\lambda)*}) | i \rangle \right|^2 \quad (12c)$$

De las ecs. (4C) y (22B), se sigue que:

$$H'(A_{em}^{E*}) = -\frac{C_0 e}{\omega} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} P_{\alpha} \cdot [\nabla \times \mathbb{L} (j_e(kr) Y_{em}(\theta, \phi))]^* +$$

$$- \sum_{\alpha} \frac{C_0 e \hbar}{2 m_{\alpha} c^2} \omega \mu_{\alpha} \cdot [\mathbb{L} (j_e(kr) Y_{em}(\theta, \phi))]^* \quad (13c)$$

$$H'(A_{em}^{M*}) = C_0 \sum_{\alpha} \left\{ \frac{i e P_{\alpha} \cdot [\mathbb{L} j_e Y_{em}]^*}{m_{\alpha} c} + \frac{i e \hbar}{2 m_{\alpha} c} \mu_{\alpha} \cdot [\nabla \times \mathbb{L} j_e Y_{em}]^* \right\}$$

Como mencionamos antes, estamos interesados en el caso en que las dimensiones de la fuente son muy pequeñas comparadas con la longitud de onda de la radiación, por lo cual tomamos el valor asintótico de la función esférica de Bessel:

$$j_l(kr) \xrightarrow{kr \rightarrow 0} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \quad (14c)$$

y hacemos uso de los siguientes resultados (Moszkowski, 1964 pag. 873):

Escribamos

$$u_{em} = \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} Y_{em}(\theta, \phi) \quad (15c)$$

entonces

$$[\nabla \times \mathbb{L} u_{em}]^* = i [r \nabla^2 u_{em}^* - (r \times \nabla + 2) \nabla u_{em}^*] \approx -i(l+1) [\nabla u_{em}]^* \quad (16c)$$

si $(kr \ll 1)$.

y tenemos también:

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | P \cdot (\nabla U_{em})^* | \psi_i \rangle &= -\frac{im}{\hbar} \langle \psi_f | \frac{P^2}{2m} U_{em} - U_{em} \frac{P^2}{2m} | \psi_i \rangle \\ &= -im\omega \langle \psi_f | U_{em}^* | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (18c)$$

Ahora introducimos a las cantidades $M_{lm}^{(\lambda)}$ como sigue (hacemos uso de las ecs. (15-18c)):

$$\langle \psi_f | H' (P_{em}^{(\lambda)})^* | \psi_i \rangle = C_l \frac{l+1}{(2l+1)!!} k^l \langle \psi_f | M_{lm}^{(\lambda)} | \psi_i \rangle \quad (19c)$$

donde:

$$M_{lm}^{(E)} = \sum_{\alpha} \left\{ e r_{\alpha}^l y_{em}^* - \frac{ie\hbar\omega}{2mc^2} \frac{(\mu_{\alpha} \times r_{\alpha})}{(l+1)} \cdot [\nabla(r_{\alpha}^l y_{em})]^* \right\} \quad (20c)$$

$$M_{lm}^{(M)} = \sum_{\alpha} \left(\frac{e\hbar}{m_{\alpha}c} \frac{1}{l+1} L \cdot [\nabla(r_{\alpha}^l y_{em})]^* + \frac{e\hbar}{2m_{\alpha}c} \mu_{\alpha} \cdot [\nabla(r_{\alpha}^l y_{em})]^* \right) \quad (21c)$$

Ahora podemos reescribir a (12c) con la constante:

$$C_l = \sqrt{\frac{8\pi\omega^2}{l(l+1)R_0}} \quad (22c)$$

y obtenemos

$$w(\lambda lm) = \frac{8\pi(l+1)}{\ell[(2l+1)!!]^2} \frac{k^{2l+1}}{\hbar} \left| \langle \psi_f | M_{lm}^{(\lambda)} | \psi_i \rangle \right|^2 \quad (23c)$$

Las cantidades $M_{lm}^{(E)}$, $M_{lm}^{(M)}$ son los operadores eléctrico y magnético respectivamente. El primer término en cada una de las expresiones (20c) y (21c) denota a las contribuciones debidas al movimiento orbital, mientras que el segundo término surge debido al espín intrínseco de las partículas.

Como vimos en el Apéndice A, cuando la fuente es pequeña comparada con la longitud de onda de la radiación,

la contribución de la parte orbital en $M_{lm}^{(E)}$ domina sobre la parte de espín por un factor del orden (ka) , donde a es la dimensión de la fuente. Tendremos así que:

$$M_{lm}^{(E)} \approx \sum_{\alpha} e r_{\alpha}^l Y_{lm}^* \quad (24c)$$

para el caso eléctrico; y al evaluar las velocidades de transición tomamos los elementos de matriz de este último operador. Para $l=1$ en (24c), al operador dipolar eléctrico; y expresando a Y_{lm} en términos de la base polar:

$$E_{\pm} = \mp \sqrt{\frac{1}{2}} (\hat{x} \pm i\hat{y}); \quad E_0 = \hat{z} \quad (25c)$$

tenemos

$$r_{\alpha} Y_{10}^* = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} r_{\alpha} \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z_{\alpha} = +\sqrt{\frac{3}{4\pi}} r_{\alpha} \cdot E_0$$

$$r_{\alpha} Y_{1,1}^* = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} r_{\alpha} \sin\theta e^{-i\varphi} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x_{\alpha} - iy_{\alpha}) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} r_{\alpha} \cdot E_{-} \quad (26c)$$

$$r_{\alpha} Y_{1,-1}^* = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} r_{\alpha} \sin\theta e^{i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x_{\alpha} + iy_{\alpha}) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} r_{\alpha} \cdot E_{+}$$

y el elemento de matriz del operador dipolar eléctrico es:

$$\langle \Psi_f | H' (A_{lm}^{(E)})^* | \Psi_i \rangle \approx \frac{2C_1 k}{3} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \langle \Psi_f | \sum_{\alpha} e r_{\alpha} \cdot E_q | \Psi_i \rangle \quad (27c)$$

donde reconocemos a los elementos de matriz de las componentes del momento dipolar \mathbb{D} de las partículas:

$$\mathbb{D} = e \sum_{\alpha} r_{\alpha} \quad (28c)$$

Usando la ec. (22c) para tenemos que la probabilidad de emisión espontánea de radiación dipolar eléctrica es:

$$\begin{aligned} W(E1) &= \frac{R_0}{\hbar c \omega} \left[\sqrt{\frac{4\pi\omega^2}{R_0}} \frac{2}{3} k \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left| \langle \Psi_f | \mathbb{D} \cdot E_q | \Psi_i \rangle \right| \right]^2 \\ &= \frac{4}{3\hbar} \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \left| \langle \Psi_f | \mathbb{D} \cdot E_q | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (29c) \end{aligned}$$

Si en la ec. (24c) tomamos $l=2$, obtenemos al operador cuadrupolar eléctrico:

$$M_{2m}^{(E)} \approx \sum_{\alpha} e r_{\alpha}^2 Y_{2m}^* \quad (30c)$$

y la probabilidad de emisión de radiación cuadrupolar eléctrica es

$$W(E2) = \frac{\pi}{3\hbar} \left(\frac{\omega}{c}\right)^5 \left| \langle \Psi_f | e \sum_{\alpha} r_{\alpha}^2 Y_{2m}^* | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (31c)$$

Como sabemos, en el caso magnético la contribución orbital es tan importante como la del espín para el $M_{lm}^{(M)}$ en la ec. (21c). De las ecs. (22, aB) y (14c), se sigue que

$$A_{lm}^{(M)*} \xrightarrow{kr \rightarrow 0} i C_l \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} Y_{lm}^* = \frac{k^l C_l}{(2l+1)!!} r \times \nabla [r^l Y_{lm}^*]$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} \frac{e}{mc} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \cdot A_{lm}^{(M)*} &= \frac{e k^l C_l}{mc(2l+1)!!} \left[\sum_{\alpha} p_{\alpha} \right] \cdot r \times \nabla [r^l Y_{lm}^*] = \\ &= \frac{e k^l C_l}{mc(2l+1)!!} \nabla [r^l Y_{lm}^*] \cdot \left[\sum_{\alpha} p_{\alpha} \right] \times r = \frac{e k^l C_l}{mc(2l+1)!!} L \cdot \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} E_{\varphi}^* \right) \end{aligned}$$

Además

$$\nabla \times A_{lm}^{(M)*} \xrightarrow{kr \rightarrow 0} \frac{(l+1) C_l k^l}{(2l+1)!!} \nabla [r^l Y_{lm}^*]$$

que para $l=1$ nos dá:

$$\frac{eh}{2mc} \sigma \cdot \nabla \times A_{1m}^{(M)*} = \frac{eh\omega^2}{mc^2 \sqrt{3} R_0} \sigma \cdot E_{\varphi}^*$$

Y sustituyendo estos resultados en la ec. (13b, C) tenemos:

$$\langle \Psi_f | H' (A_{1m}^{(M)*}) | \Psi_i \rangle = \frac{e\omega^2}{mc^2 \sqrt{3} R_0} \langle \Psi_f | (L + \hbar \sigma) \cdot E_{\varphi}^* | \Psi_i \rangle \quad (32c)$$

La probabilidad de transición en este caso la calculamos usando (12C):

$$w(MI) = \frac{4}{3\hbar} \left(\frac{\omega}{c}\right)^3 \left| \langle \psi_f | M \cdot \epsilon_f^* | \psi_i \rangle \right|^2 \quad (33C)$$

donde

$$M = \frac{e}{2mc} (L + \hbar \sigma) = \frac{e}{2mc} (L + 2S) = \frac{e}{2mc} (J + S) \quad (34C)$$

es el operador dipolar magnético de todas las partículas.

Supongamos ahora que es posible describir el movimiento de las partículas como si estas se encontraran dentro de un campo central. En este caso las funciones de onda pueden ser etiquetadas con los números cuánticos ν, J, M , donde ν es el número cuántico principal, y J, M , son el momento angular total de todas las partículas y su tercera componente, respectivamente.

Nos interesa evaluar a los elementos de matriz de la ec. (23C) entre dos estados dentro de esta aproximación del campo central. Sabemos que el operador $M_{lm}^{(E)}$ es una suma de una misma función de las coordenadas de una sola partícula, y en cada sumando adopta las coordenadas de cada una de las partículas (ver ecs. (19C-21C)). En este caso, tendremos elementos de matriz no-nulos entre estados diferentes, solamente en el caso en que estos últimos difieran a lo más por un orbital. Las funciones de onda de partícula individual pueden ser escritas como un producto de: a) una función radial R la cual depende de los detalles del potencial, y b) una función de dos componentes Θ_{lj}^m la cual contiene a las variables angulares y de espín, pero no depende de los detalles del potencial. Tenemos así que el elemento de matriz del multipolo eléctrico puede escribirse como

$$\langle f | M_{lm}^{(E)} | i \rangle = e \int_0^\infty R_f r^l K_i r^2 dr \int_{4\pi} \Theta_{l_f, j_f}^{m_f *} Y_{lm} \Theta_{l_i, j_i}^{m_i} d\Omega \quad (39C)$$

donde $d\Omega$ se refiere a la integración sobre todos los ángulos, y la suma, sobre los espines; hemos despreciado la contribución a $M_{lu}^{(e)}$ debida al espín.

Si los diferentes subestados magnéticos m_i se encuentran igualmente poblados y si las m_f no son detectadas, podremos entonces promediar la probabilidad de transición sobre las m_i y sumar sobre m_f para obtener la velocidad de transición observada:

$$w(\lambda l) = \frac{1}{(2j_i + 1)} \sum_{m_i} \sum_{m_f} \sum_m w(\lambda l m) \quad (40c)$$

Al calcular esta probabilidad de transición es conveniente introducir un "factor estadístico" S como sigue:

$$S(j_i, l, j_f) = \frac{4\pi}{(2j_i + 1)} \sum_{m_i} \sum_{m_f} \sum_m \left| \int_{4\pi} \Theta_{l, j_f}^{m_f*} Y_{lm}^* \Theta_{l, j_i}^{m_i} \right|^2 \quad (41c)$$

y puede expresarse en términos de los coeficientes de Clebsch-Gordan:

$$S(j_i, l, j_f) = (2j_f + 1) \left[\left(j_i \frac{1}{2}, j_f \left(-\frac{1}{2}\right) \middle| 0 \right) \right]^2 \quad (42c)$$

La velocidad de transición E_l para una sola partícula es:

$$w(E_l) = \frac{2(l+1)\omega}{4[(2l+1)!!]^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{\omega a}{c} \right)^{2l} \left[\int_0^\infty R_f \left(\frac{r}{a} \right)^l R_i r^2 dr \right]^2 S(j_i, l, j_f) \quad (43c)$$

donde la a denota al radio de la fuente.

El cálculo para el caso magnético es más complicado debido a la presencia del operador de gradiente; sin embargo, el elemento de matriz de $M_{lu}^{(M)}$ se simplifica para el caso en que $|j_i - j_f| = l$, que es el mínimo valor consistente con el cambio en el momento angular durante la transición (de Shalit y Feshbach, chap. VIII, ecs. (5.42), (5.43), 1974).

Si además se cumple que $|l_i - l_f| = l - 1$, tendremos que

$$\langle f | M_{lu}^{(M)} | i \rangle = \frac{e\hbar}{2mc} \left(\mu_p - \frac{1}{l+1} \right) \langle f | \sigma \cdot \nabla (r^l Y_{lm}^*) | i \rangle \quad (44c)$$

y obtenemos la velocidad de transición

$$w(Ml) = \frac{(2l+1)w e^2}{l[(2l+1)!!]^2 \hbar c} \left(\frac{wa}{c}\right)^{2l} \left(\frac{\hbar}{mca}\right)^2 \left(\mu_{pl} - \frac{l}{l+1}\right)^2 \int_0^\infty R_f \left(\frac{r}{a}\right)^{l-1} R_i r^2 dr S(j_i, l, j_f) \dots (45c)$$

APENDICE D.

LA INTERACCION ELECTROMAGNETICA ENTRE DOS CARGAS.

I. Discusión General.

Para un cálculo más exacto de los coeficientes de conversión interna, debemos considerar la descripción relativista de los electrones y la interacción electromagnética retardada entre estos y el núcleo. Estaremos interesados ahora en dicha interacción.

El sistema total en consideración consta del campo de radiación y dos partículas: 1 y 2 (el término 'partícula' incluye el caso de un núcleo, ó más exactamente, de un nucleón al cual se acoplará el campo de radiación). La partícula 1 será un electrón de Dirac. La ecuación Hamiltoniana del sistema es^(*):

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = [H_1(\bar{A}) + H_2(\bar{A}) + H_{rad}] \Phi \quad (1D)$$

t designa al tiempo, y las unidades son tales que $\hbar = c = 1$. En la ec. (1D) H_{rad} es el Hamiltoniano del campo de radiación libre; $H_1(\bar{A})$ y $H_2(\bar{A})$ se refieren a las partículas 1 y 2 en presencia del campo descrito por \bar{A} . Así, H_1 y H_2 contienen los términos de acoplamiento que representan a la interacción entre las partículas.

Para el electrón de Dirac:

$$H_1 = -\alpha \cdot (p - e\bar{A}) - \beta m + e\bar{U} \quad (2D)$$

En esta ecuación α y β son: $\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (3D)

donde cada elemento es una matriz 2x2 y σ son las matrices

(*) LA BARRA DESIGNA A LA PARTE REAL.

de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3'D)$$

La ec.(2D) se puede escribir como:

$$H_1 = H_1(0) + H_1(\bar{A}) \quad (4D)$$

donde

$$H_1(0) = -\alpha \cdot p - \beta m \quad (5D)$$

es el Hamiltoniano de la partícula libre, y

$$H_1(\bar{A}) = e(\alpha \cdot \bar{A} + \bar{U}) \quad (6D)$$

es el término de acoplamiento. Correspondiendo a la descomposición de \bar{A} y \bar{U} en campos complejos, podemos escribir:

$$H_1(\bar{A}) = H_1(A) e^{-i\omega t} + H_1(A^*) e^{i\omega t} \quad (7D)$$

y $H_1(A)$ es la función de A definida en la ec.(4D).

Es posible demostrar que el Hamiltoniano del electrón ec.(2D), es invariante ante transformaciones de norma, siendo estas transformaciones en los potenciales equivalentes a las transformaciones unitarias canónicas sobre la base Φ . Una transformación canónica no cambia a los resultados físicos. La importancia de este resultado se encuentra en que nos dicta la manera en que debemos construir al Hamiltoniano $H(A)$ a partir del Hamiltoniano de partícula libre $H(0)$. Para el electrón de Dirac la construcción del Hamiltoniano con invariancia de norma es precisamente el de la ec.(2D). Esto es válido aún cuando agregamos un término de campo central a H_1 . Sin embargo, si existen términos de interacción tales como los que representan a las fuerzas nucleares, la construcción de un Hamiltoniano con invariancia de norma puede resultar muy complicada y su forma exacta depende de las interacciones en cuestión. Dado que estas últimas no son bien conocidas aún es preferible tratar a la interacción de la segunda partícula con el campo de radiación de una manera general.

Consecuentemente escribimos para la partícula

$$2: \quad H_2(\bar{A}) = H(0) + H^{(1)}(\bar{A}) + H^{(2)}(\bar{A}) + \dots \quad (8D)$$

que corresponde a una expansión en el potencial vectorial. Así, $H(0)$ es el Hamiltoniano de partícula libre, $H^{(1)}(\bar{A})$ es una función lineal homogénea de \bar{A} . $H^{(2)}(\bar{A})$ es homogénea y de segundo grado en \bar{A} , etc.. Cada uno de estos términos debe ser hermitiano. Si estamos interesados en la emisión de un solo cuanto, podemos ignorar a los términos más allá de $H^{(1)}$. Nuevamente

$$H^{(1)}(\bar{A}) = H^{(1)}(A) e^{-i\omega t} + H^{(1)}(A^*) e^{i\omega t} \quad (9D)$$

A y A^* , son independientes del tiempo.

II. Resultados Específicos. (Rose, 1955).

La interacción entre las partículas 1 y 2 tiene lugar por medio del acoplamiento de cada partícula con el campo de radiación. La situación considerada es la siguiente: Al tiempo $t=0$ la partícula 1 se encuentra en un estado de energía cero (estado base del electrón, p.e.j.), y la partícula 2 se encuentra en un estado excitado de energía W . Este es el estado inicial y lo denotaremos con el índice "i". Existen dos estados intermedios descritos por el esquema siguiente:

	Partícula 1	Partícula 2	Energía del fotón
Estado j	0	0	ω
Estado j'	E	W	ω

Esto es, para el estado j, un fotón (virtual) con energía ω ha sido emitido por la partícula 2, cuya energía después de la emisión es cero. Para el estado j' un fotón con energía ω ha sido emitido por la partícula 1 la cual adquiere la energía E después de la emisión. En el estado final no existen fotones, la partícula 1 se encuentra en un estado de energía E y la partícula 2 está en un estado con cero energía. Este estado es alcanzado a partir del estado j (ó j') por medio de la absorción de la energía de radiación ω por

la partícula 1 (ó'2).

Expandemos a la función de onda total Φ dentro de funcionales de los estados: i, j, j', f :

$$\Phi = a_i(t)\Phi_i + a_j(t)\Phi_j + a_{j'}(t)\Phi_{j'} + a_f(t)\Phi_f \quad (10D)$$

Las ecuaciones de movimiento para las amplitudes de probabilidad a_i, \dots, a_f , toman la forma:

$$\left. \begin{aligned} a) \quad i\dot{a}_i &= W a_i + \int d\omega H_{\omega 0} a_j(\omega) + \int d\omega H'_{\omega 0} a_{j'}(\omega) \\ b) \quad i\dot{a}_j &= \omega a_j + H_{\omega 0} a_i + \int dE H_{\omega E} a_f(E) \\ c) \quad i\dot{a}_{j'} &= (\omega + W + E) a_{j'} + H'_{\omega 0} a_i + \int dE H'_{\omega E} a_f(E) \\ d) \quad i\dot{a}_f &= E a_f + \int d\omega H_{E\omega} a_j(\omega) + \int d\omega H'_{E\omega} a_{j'}(\omega) \end{aligned} \right\} (11D)$$

Aquí $\int d\omega$ implica una integración sobre todos los estados intermedios de energía de los fotones y una suma sobre λ, l, m , es decir, sobre el conjunto completo de campos multipolares en términos de los cuales se ha expandido al campo de radiación general. La integración designada por $\int dE$, suma sobre las energías del electrón de Dirac y también implica una suma de espines. Los elementos de matriz en las ecs. (11D) están definidos por:

$$\left. \begin{aligned} a) \quad H_{\omega 0} &= \sqrt{2\pi\omega} \int dV_1 \psi_f^* H_1 (|A_{lm}^{(\lambda)}\rangle) \psi_i \\ b) \quad H'_{\omega 0} &= \sqrt{2\pi\omega} \int dV_2 \phi_f^* H'' (|A_{lm}^{(\lambda)}\rangle) \phi_i \\ c) \quad H_{\omega 0} &= \sqrt{2\pi\omega} \int dV_2 \phi_f^* H'' (|A_{lm}^{(\lambda)*}\rangle) \phi_i \\ d) \quad H'_{\omega 0} &= \sqrt{2\pi\omega} \int dV_1 \psi_f^* H_1 (|A_{lm}^{(\lambda)*}\rangle) \psi_i \end{aligned} \right\} (12D)$$

Aquí ψ_i y ψ_f se refieren a la partícula 1, y ϕ_i, ϕ_f se refieren a la partícula 2. Las ecuaciones (11D) deben ser resueltas sujetas a las condiciones iniciales:

$$a_i = 1, \quad a_j = a_{j'} = a_f = 0, \quad \text{en } t = 0$$

La solución se realiza por los métodos usuales

de la teoría de perturbaciones y solo se consideran los órdenes más bajos. Esto implica que en la ec. (12a,D) los términos segundo y tercero al lado derecho se desprecien, y en (12b,D) y (12c,D) se desprecie al tercer término. Entonces:

$$\begin{aligned}
 a) \quad a_i &= e^{-iWt} \\
 b) \quad a_j &= \frac{H_{j0}}{\omega - W} (e^{-i\omega t} - e^{-iWt}) \\
 c) \quad a_{j'} &= \frac{H'_{j0}}{\omega + E} e^{-iWt} (e^{-i(\omega + E)t} - 1) \\
 d) \quad a_f &= \int d\omega \frac{H_{E\omega} H_{\omega 0}}{W - \omega} \left[\frac{e^{i(E-W)t} - 1}{E - W} - \frac{e^{i(E-\omega)t} - 1}{E - \omega} \right] \\
 &\quad + \int d\omega \frac{H'_{E\omega} H'_{\omega 0}}{\omega + E} \left[\frac{e^{i(E-W)t} - 1}{E - W} + \frac{e^{-i(W+\omega)t} - 1}{W + \omega} \right]
 \end{aligned} \quad (13D)$$

En esta última ecuación los términos segundo y cuarto no conservan la energía entre los estados inicial y final, y solo se retienen el primero y tercero que sí conservan la energía, llevándonos a una probabilidad de transición que crece linealmente con el tiempo.

Tenemos entonces

$$\begin{aligned}
 a_f &= \int d\omega \left[\frac{H_{E\omega} H_{\omega 0}}{W - \omega} \left(\frac{e^{i(E-W)t} - 1}{E - W} \right) + \frac{H'_{E\omega} H'_{\omega 0}}{\omega + E} \left(\frac{e^{i(E-W)t} - 1}{E - W} \right) \right] \\
 &= \frac{e^{i(E-W)t} - 1}{E - W} \int d\omega \left[\frac{H_{E\omega} H_{\omega 0}}{W - \omega} + \frac{H'_{E\omega} H'_{\omega 0}}{\omega + E} \right]
 \end{aligned} \quad (14D)$$

La probabilidad de transición durante el intervalo de tiempo τ durante el cual ha actuado la perturbación a partir de un tiempo $t=0$ es:

$$W(\tau) = |a_f|^2 = 2 \frac{1 - \cos[(E-W)\tau]}{(E-W)^2} |H_{fi}|^2 \quad (15D)$$

donde

$$H_{fi} = \int d\omega \left[\frac{H_{E\omega} H_{\omega 0}}{W - \omega} + \frac{H'_{E\omega} H'_{\omega 0}}{\omega + E} \right] \quad (16D)$$

Quando $E=W$, la función $f(E-W) = 2 \frac{1 - \cos(E-W)\tau}{E-W}$ tiene un valor máximo igual a τ^2 . Cuando $|E-W| = 2\pi/\tau, 4\pi/\tau, 6\pi/\tau, \dots$ esta función es igual a cero. Para valores de τ suficientemente grandes comparados con los períodos característicos del sistema, la función $f(E-W)$ puede expresarse en términos de la función delta:

$$f(E-W) \underset{\tau \rightarrow \infty}{\sim} 2\pi\tau \delta(E-W) \quad (17D)$$

Así, la fórmula para la probabilidad de transición en la ec. (15D) se puede reducir a la forma

$$W(\tau) = 2\pi |H_{fi}|^2 \tau \delta(E-W) \quad (18D)$$

Y la probabilidad de transición por unidad de tiempo es:

$$\int dE |a_f|^2 = 2\pi\tau |H_{fi}|^2 \quad (19D)$$

La integral en la ec. (16D) se realiza sobre el eje real de $\omega=0$ a $\omega=\infty$; y se evalúa con $W=E$. El desplazamiento de los polos dentro de la mitad superior del semiplano se efectúa sumando al término $i\eta$ ($\eta > 0$) en los denominadores de energía; Tenemos entonces para la ec. (16D):

$$H_{fi} = \int d\omega \left[\frac{H_{E\omega} H_{\omega 0}}{W - \omega + i\eta} + \frac{H'_{E\omega} H'_{\omega 0}}{\omega + W - i\eta} \right] \quad (20D)$$

Este elemento de matriz puede ser expresado en la forma

$$H_{fi} = \int d\omega \frac{H_{E\omega} H_{\omega 0}}{W - \omega + i\eta} \quad (21D)$$

con el camino de integración extendiéndose sobre todo el eje real $-\omega$. De las ecs. (12D) tenemos:

$$H_{fi} = 2\pi \int \frac{\omega d\omega}{W - \omega + i\eta} \sum_{\lambda \mu \lambda'} \int d\Omega_1 \psi_f^* H_i(A_{\lambda \mu}^{(\lambda)}) \psi_i \times \int d\Omega_2 \phi_f^* H^{(\lambda)}(A_{\lambda \mu}^{(\lambda)*}) \phi_i \quad (22D)$$

La integración sobre ω se lleva ahora a cabo cerrando el camino con un gran circuito semi-circular en el semi-plano superior o inferior. Ahora bien, tanto H_i como $H^{(\lambda)}$ son lineales

les en los potenciales, y dado que la dependencia en ω ($=ck$, $c=1$) está confinada en la función esférica de Bessel $j_l(kr)$ que cada uno de dichos potenciales contiene, con:

$$j_l = \frac{1}{2} (h_l^{(1)} + h_l^{(2)}),$$

tenemos que la conducta asintótica de cada operador consistirá en dos partes: una que contiene al factor $e^{i\omega r}$ ya que

$$h_l^{(1)} \sim (-i)^{l+1} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{e^{ikr}}{kr}$$

y otra que contiene a $e^{-i\omega r}$ de $h_l^{(2)}$. Para $r_1 \leq r_2$ el producto $H_1 H^{(1)}$ contiene cuatro términos proporcionales a $e^{i\omega(r_1+r_2)}$, $e^{i\omega(r_1-r_2)}$, $e^{-i\omega(r_1-r_2)}$, $e^{-i\omega(r_1+r_2)}$, respectivamente. Para $r_1 > r_2$, el camino puede cerrarse en la parte superior del semi-plano para los dos primeros. Para los otros dos con exponentes de coeficiente negativo de $i\omega$ el camino debe cerrarse en el semi-plano inferior y por lo tanto estos términos no contribuyen. Por lo tanto, solamente la parte saliente ($e^{i\omega r_1}$) de la onda estacionaria en el espacio V_1 contribuye a la integral. Así, al evaluar el residuo en (22D) reemplazamos a $j_l(kr_1)$ por $\frac{1}{2} h_l^{(1)}(kr_1)$. Esto significa que $A_{lm}^{(\lambda)}$ en el espacio V_1 es reemplazada por $\frac{1}{2} A_{lm}^{(\lambda)}$; $A_{lm}^{(\lambda)}$ es el potencial vectorial correspondiente a ondas estacionarias en la norma solenoidal, y $A_{lm}^{(\lambda)}$ difiere de este solamente en que j_l es reemplazada por $h_l^{(1)}$ de modo que se tendrán ondas salientes.

Así, para $r_1 > r_2$:

$$H_{fi} = -2\pi^2 ik \sum_{l,m,\lambda} \int dV_1 \psi_f^* H_l(A_{lm}^{(\lambda)}) \psi_i \int dV_2 \phi_f^* H^{(1)}(A_{lm}^{(\lambda)*}) \phi_i \quad (23D)$$

Similarmente, para $r_2 > r_1$:

$$H_{fi} = -2\pi^2 ik \sum_{l,m,\lambda} \int dV_1 \psi_f^* H_l(A_{lm}^{(\lambda)}) \psi_i \int dV_2 \phi_f^* H^{(1)}(A_{lm}^{(\lambda)*}) \phi_i \quad (24D)$$

donde se consideró que $W=E=\omega=k$. Este resultado será la base del tratamiento del problema de Conversión Interna en el capítulo II, sec.4.

Para la interacción entre dos partículas consideramos a dos electrones de Dirac. Entonces tanto H_1 como $H^{(1)}$ en las ecs. 20D-21D) tienen la forma de las ecs. (6D-7D), y

$$H_{fi} = 2\pi e_1 e_2 \int \frac{\omega d\omega}{W - \omega + i\eta} \sum_{\ell, m, \lambda} \int dr_1 \phi_f^* (\alpha_1 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)} + U_{\ell m}^{(\lambda)}) \phi_i$$

$$\int dr_2 \phi_f^* (\alpha_2 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)*} + U_{\ell m}^{(\lambda)*}) \phi_i \quad (25D)$$

Como ambos elementos de matriz son invariantes ante transformaciones de norma, no se pierde generalidad si se usa la norma solenoidal. Adoptando a esta norma tendremos $U^{(\lambda)} \cong 0$ excepto para los términos longitudinales $\lambda = \ell$, en este caso tendremos

$$A_{\ell m}^{(\lambda)} = \nabla S, \quad U_{\ell m}^{(\lambda)} = i\omega S, \quad S = i f(r) Y_{\ell m} \quad (26D)$$

$f(r)$ es una función radial. Para los términos longitudinales se cumple

$$\alpha_1 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)}(r_1) = \alpha_1 \cdot \nabla S = i(S H_1(0) - H_1(0) S)$$

y tenemos un resultado similar para $\alpha_2 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)}(r_2)$. Si ahora usamos la hermiticidad de $H_1(0)$ y:

$$H_1(0) \phi_i = 0, \quad H_1(0) \phi_f = E \phi_f, \quad H_2(0) \phi_i = W \phi_i, \quad H_2(0) \phi_f = 0$$

el elemento de matriz en la ec. (25D) se reduce a

$$H_{fi} = 2\pi e_1 e_2 \int \frac{\omega d\omega}{W - \omega + i\eta} \sum_{\ell, m, \lambda} \iint dr_1 dr_2 \phi_f^* \phi_f \left\{ \alpha_1 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)}(r_1) \right.$$

$$\left. \times \alpha_2 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)*}(r_2) + \left(1 - \frac{W+E}{\omega}\right) U_{\ell m}^{(\lambda)}(r_1) U_{\ell m}^{(\lambda)*}(r_2) \right\} \phi_i \phi_i$$

Efectuando la integración sobre ω como antes, obtenemos para $r_1 > r_2$

$$H_{fi} = -2\pi i e_1 e_2 k \sum_{\ell, m, \lambda} \iint dr_1 dr_2 \phi_f^* \phi_f \left\{ \alpha_1 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)}(r_1) \alpha_2 \cdot A_{\ell m}^{(\lambda)*}(r_2) \right.$$

$$\left. - U_{\ell m}^{(\lambda)}(r_1) U_{\ell m}^{(\lambda)*}(r_2) \right\} \phi_i \phi_i \quad (27D)$$

De la expansión de la diádica unitaria:

$$\frac{e^{ik|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|} I = 2\pi^2 ik \sum_{\ell, m, \lambda} A_{\ell m}^{(\lambda)}(kr_1) A_{\ell m}^{(\lambda)*}(kr_2) \quad (28D)$$

donde $r_3(r_2)$ es el mayor (menor) de $|r_1|, |r_2|$; así como de la expansión de la función de Green:

$$\frac{e^{ik|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|} = 4\pi ik \sum_{\ell, m} j_\ell(kr_2) h_\ell^{(1)}(kr_1) Y_{\ell m}^*(\hat{r}_2) Y_{\ell m}(\hat{r}_1) \quad (29D)$$

tenemos en la ec. (27D):

$$H_{fi} = e_1 e_2 \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_f^* \phi_f^* \frac{e^{ik|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|} (1 - \alpha_1 \cdot \alpha_2) \psi_i \phi_i \quad (30D)$$

Esto significa que el operador de interacción entre las dos partículas, cuyos elementos de matriz determinarán la probabilidad de transición, es:

$$H' = e_1 e_2 (1 - \alpha_1 \cdot \alpha_2) \frac{e^{ik|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|} \quad (31D)$$

Este corresponde a la interacción electromagnética retardada entre dos partículas con movimiento relativista. Es decir, $e_1 e_2 \psi_f^* \phi_f^* (1 - \alpha_1 \cdot \alpha_2) \psi_i \phi_i$, es la contracción entre dos cuadrivectores de corriente, y $\exp[ik|r_1-r_2|]/|r_1-r_2|$ es la función de Green que representa al retardamiento.

Bibliografia.

- Asaad, W.N., Nucl.Phys.44(1963)415.
- Bambynek, W., Grasmann, Fink, Freund, Mark, Swift, Preece, Rao, Rev.Mod.Phys.44(1972)716.
- Bethe, H.A., Jackiw, "Intermediate Quantum Mechanics", W.A. Benjamin(1968).
- Bohr, A., Mottelson, Kgl. Danske Videnskab Mat.Fys.Medd 27 (1953).
- Burhop, E.H.S., Asaad, Proc.Phys.Soc., 71(1958)369.
- Burhop, E.H.S., "The Auger Effect and Other Radiationless Transitions". Cambridge Univ.Press(1952)
- Condon, E.U., Shortley, "The Theory of Atomic Spectra", Cambridge Univ.Press(1970).
- deShalit, A., Feshbach, "Theoretical Nuclear Physics" vol.I. John Wiley & Sons Inc.(1974).
- deShalit, A., Talmi, "Nuclear Shell Theory" Academic Press, New York, (1963).
- Jackson, J.D., "Classical Electrodynamics". Second Ed. John Wiley & Sons, Inc., New York (1975).
- Kostroun, V.O., Chen, Grasmann, Phys.Rev.A3(1971)533.
- Listengarten, M.A., Izv.Akad.Nauk SSSR Ser.Fiz.26(1961)803 (Bull.Acad.Sci.USSR Phys.Ser25, 803).
- McGuire, E.J., "Auger and Coster-Kronig Transitions", en Atomic Inner-Shell Processes. Bernd Grasmann (Ed.) Academic Press (1975).
- Messiah, A., "Quantum Mechanics", North Holland, Amsterdam (1961).
- Morita, M., Prog.Theor.Phys,49(1973)1574.
- Moszkowski, S.A., "Multipole Fields", en Alpha, Beta, and Gamma Ray Spectroscopy. North Holland, Amsterdam(1965).
- Otozai, K., Arakawa, Morita, Prog.Theor.Phys.50(1973)1771.
- Rose, M.E., "Theory of Internal Conversion", en "Alpha, Beta, and Gamma Ray Spectroscopy", North Holland, Amsterdam(1965)
- Rose, M.E., "Mutipole Fields", John Wiley & Sons, New York (1955).

Bibliografía.

- Rose, M.E., Goertzel, Spinard, Harr, Strong, Phys.Rev.83(1951) 79.
- Scofield, J.H., "Radiative Transitions", en Atomic Inner-Shell Processes. Bernd Crasemann(Ed.) Academic Press(1975).
- Shirley, D.A., Phys.Rev.A7(1973)1520.
- Sliv, L.A., I.M.Band""Tables of Internal Conversion Coeficients, Appendix J" en Alpha, Beta, and Gama Ray Spectroscopy, North Holland, Amsterdam(1965).
- Tralli, N., G.Goertzel, Phys.Pev.83(1951)399.
- Weisskopf, V., Blatt, "Theoretical Nuclear Physics", Wiley, New York(1952).
- Wentzel, G., Z.Physik, 43(1927)524.