

291
48



Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

ESTUDIO DE LA INTERACCION POSTERIOR A LA COLISION Y EL MODELO "SHAKE DOWN"

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
ALEJANDRO VILLALBA LOERA

Abril 1984



Universidad Nacional
Autónoma de México



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 está 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.

TEMARIO

INTRODUCCION	1
CAPITULO I	5
CAPITULO II: LA INTERACCION POSTERIOR A LA COLISION..	11
IPC de Barker y Berry	15
CAPITULO III: EL MODELO " SHAKE DOWN "	23
CAPITULO IV: INCLUSION DEL EFECTO DEL CAMPO ELECTRICO SOBRE EL DECAIMIENTO DEL ESTADO AUTOIONIZANTE	34
CONCLUSIONES	43
BIBLIOGRAFIA	46

ESTUDIO DE LA INTERACCION POSTERIOR
A LA COLISION Y EL MODELO "SHAKE DOWN"

INTRODUCCION

Este es uno de varios trabajos tanto teóricos como experimentales que se desarrollan en el laboratorio de Física Atómica y Molecular de la Facultad de Ciencias de la U.N.A.M. y los cuales forman parte de un intento de reproducir y explicar una serie de observaciones que se han obtenido en experimentos de colisiones de electrones con átomos de helio para baja energía de los electrones incidentes. Estos experimentos se han llevado a cabo tanto en el laboratorio de F.A.M. como en otros centros de investigación de varios países.

En el presente trabajo se plantea una modificación a un modelo cuántico, llamado "shake down", para tratar de explicar de una mejor forma las observaciones experimentales que se han hecho sobre la producción de estados Rydberg. En particular se estudian los datos experimentales mostrados en la figura 2, los cuales se obtienen mediante colisión de electrones con átomos de helio cuando la energía de los electrones incidentes está cercana al umbral de autoionización del estado $(2P^2)'D$ del He. Esquemáticamente tenemos lo siguiente:

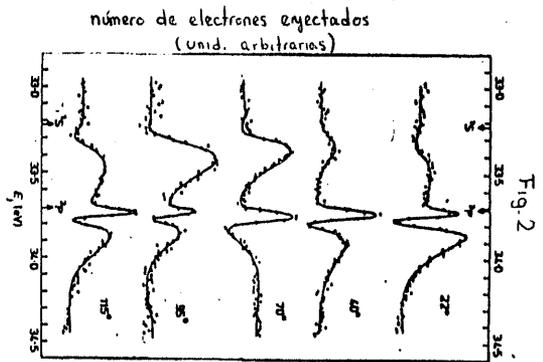
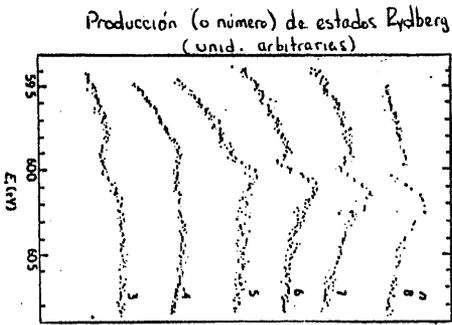


Fig.1

Este proceso es una de las varias manifestaciones de lo que se ha llamado la Interacción Posterior a la Colisión (IPC).

La modificación al modelo consiste en agregar un término que toma en cuenta que el estado autoionizante decae en presencia de una partícula cargada (el electrón dispersado) y que esto afecta a la forma funcional del decaimiento del estado autoionizante. El modelo original supone una forma de decaimiento exponencial dado por:

$$e^{-t/\tau}$$



con τ el tiempo de vida del estado autoionizante. En este trabajo se plantea que el término que debe ser el que describa el decaimiento del estado autoionizante está dado por la forma

$$e^{-\frac{1}{2} - aE}$$

con a una constante y E la magnitud del campo del electrón dispersado.

Con esta modificación se obtiene una mejor concordancia con los datos experimentales (fig. 2) y se resuelve una de las más importantes aproximaciones hechas en el modelo, la cual no considera el efecto de la presencia del electrón dispersado sobre el decaimiento del estado autoionizante.

Cuando un átomo es excitado, mediante procesos de colisión con partículas cargadas, a un estado autoionizante y este estado eyecta a un electrón tendremos un sistema en el cual coexisten tres partículas cargadas (átomo autoionizado, electrón eyectado y electrón dispersado) y en donde el estado final del sistema (i.e. energía, momento angular, etc.) dependerá de las interacciones coulombianas entre estas tres partículas. Esta interacción se ha llamado la Interacción Posterior a la Colisión (IPC).

Debido a esta interacción, la energía del electrón eyectado sufrirá un cambio respecto a su energía en ausencia de IPC y este cambio de energía se ha llesado a medir.

Desde los primeros experimentos de Barker y Berry (1966) en los cuales se excitan estados autoionizantes del He mediante iones He^+ con energía cercana al umbral de autoionización se susirió que los cambios en energía que sufren los electrones eyectados pudieran ser causados por IPC. Mediante una consideración clásica sencilla, Barker y Berry concluyen que el cambio de energía del electrón eyectado es, aproximadamente, la energía potencial coulombiana del electrón eyectado que se encuentra en el campo del ión dispersado.

Un fenómeno análogo al anterior fue observado por Hicks et al (1974), pero ahora para colisiones electrón-átomo, en particular para el He. Se encuentra que la energía de los electrones eyectados del estado autoionizante es mayor que la medida espectroscópicamente. Es decir, el electrón eyectado gana energía y esta energía la pierde o la cede el electrón dispersado. En la figura 3 (Read, 1975) se ven claramente estos corrimientos en las posiciones de las conspicuidades en los experimentos donde se observan a los electrones eyectados. Las conspicuidades o máximos localizados a 33.2 eV y 33.7 eV de energía son debidas a electrones eyectados de los niveles autoionizantes ($2s^2$) 1S y ($2s2p$) 3P del He. Se observa que para energías E_1 (energía del electrón dispersado) en ausencia de IPC o energía sobre el nivel del estado autoionizante) menores, los corrimientos de las conspicuidades son mayores. Durante todo el trabajo llamaremos conspicuidades a los máximos y mínimos que aparecen en las curvas como las figuras 2 y 3.

Estos corrimientos ΔE en las posiciones de las conspicuidades dependen entonces de E_i y experimentalmente se encuentra que esta dependencia es de la forma

$$\Delta E = a E_i^{-m}$$

con a y m constantes.

Para valores pequeños de E_i (i.e. cuando la energía del electrón incidente $E_i \sim E_a$, la energía del estado autoionizante) tenemos que $\Delta E \sim E_i$; es decir, el electrón dispersado cede prácticamente toda su energía, debido a IPC, al electrón eyectado. Si uno está midiendo umbrales de autoionización mediante este método, encontrará entonces un umbral desplazado en energía respecto a las mediciones espectroscópicas. Este fenómeno también fue observado por Hicks et al (1974) para el estado $(2s^2)^1S$ del He.

Por otro lado, para valores de E_i que se encuentran entre el umbral desplazado y la energía del estado autoionizante, tenemos que $\Delta E > E_i$; es decir, el electrón dispersado cede más energía que la energía cinética que posee, quedándose con una energía negativa y entonces es capturado por el ión residual de la autoionización. Se forma entonces un estado Rydberg (con n alta en general) del átomo neutro. Este fenómeno ha sido observado por Smith et al (1974) y King et al (1975) y en la figura 3 se muestran los datos experimentales obtenidos del He con el proceso mostrado en la figura 1. En la figura 3 se muestra la existencia de varias conspicuidades en la medición de la producción de estados Rydberg cuando la energía de los electrones incidentes se encuentra cercana a la energía del estado autoionizante, que en el caso de la figura 3 se deduce (King et al, 1975) que es el estado $(2p^2)^1D$ del He con una energía de 59.90 ± 0.02 eV. (Hicks, 1974). De la misma figura se ve que la energía de las conspicuidades aumenta a medida que la energía del estado ligado disminuye.

En este trabajo nos concentraremos únicamente en esta última manifestación de IPC y entonces los datos experimentales que se intentan reproducir son los mostrados en la figura 2 y el proceso que se estudiará está mostrado en la figura 1.

Este trabajo se divide en cuatro capítulos. El primero es una breve introducción a ciertos fenómenos de colisiones atómicas como, por ejemplo, resonancias e IPC. El segundo capítulo es un análisis de la IPC desarrollado por Barker y Berry (1966) donde incluimos la modificación hecha por Nienhuis y Heideman (1975) y mencionamos el intento que se hace para utilizar este modelo para predecir las observaciones hechas por Hicks et al (1974). El tercer capítulo consiste en la descripción del modelo "shake down" y sus predicciones. Y por último, en el cuarto capítulo se propone la modificación, ya mencionada, al modelo "shake down" y la comparación con los datos experimentales.

C A P I T U L O I

En ciertas ramas de la física se ha llegado al nivel de investigación en el cual se estudian fenómenos que están sorprendentemente fuera del alcance de las percepciones y de las extensiones humanas de tal forma que para poder verificar experimentalmente las teorías o modelos que los explican se han tenido que dar grandes avances tecnológicos, en particular de los instrumentos de medición, para obtener las resoluciones suficientes para detectar dichos fenómenos.

Estas investigaciones no son de menos importancia que las propiedades físicas más al alcance de los sentidos humanos. Muchos fenómenos importantes que anteriormente no era posible observar debido a limitaciones tecnológicas, hoy en día constituyen una parte esencial en el estudio de la física. El ejemplo se ve claramente con el desarrollo de la mecánica cuántica, en donde se han estudiado fenómenos físicos de dimensiones reducidas y, como se ha visto, estos han sido de gran trascendencia, impulsando el desarrollo actual de la física y dando lugar a toda una revolución tecnológica dentro de la cual podemos mencionar algunos ejemplos como el diodo semiconductor, el transistor, el laser etc.

Dentro de esta categoría se puede encuadrar no sólo a fenómenos que van desde lo más pequeño de la materia, como hasta ahora se han mencionado, sino también a fenómenos que varían muy lentamente o muy rápidamente con el tiempo y a fenómenos de dimensiones enormes en comparación con las dimensiones humanas. Es curioso que éstos fenómenos tan insólitos en épocas pasadas lleguen a ser, hoy en día, los descubrimientos más importantes de la época.

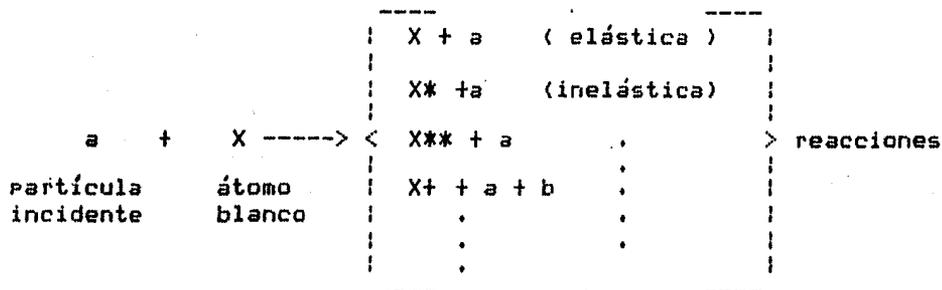
Por otro lado, es importante no olvidar, ni rezagar, la investigación en las ramas en donde los fenómenos anteriormente mencionados no son los que juegan el papel más importante; es decir, las áreas clásicas en la física donde en general el estudio se enfoca a las propiedades macroscópicas y que están más al alcance de las percepciones humanas. A tal grado se ha llegado que frecuentemente uno piensa que estas últimas ramas de la investigación son ya inusitadas, no obstante que vienen siendo las áreas de más utilidad en el sentido de la aplicación cotidiana y de la ciencia física social.

Antes de empezar hacemos un breve paréntesis para dar someramente algunas definiciones que se estarán utilizando durante todo el presente trabajo. Se estará haciendo referencia a la sección transversal que se mide en ciertos experimentos. Esta la podemos definir como (Blatt y Weisskoff, 1952)

número de eventos de un cierto tipo por unidad de tiempo por átomo

número de partículas incidentes por unidad de área por unidad de tiempo

También se maneja la nomenclatura para describir ciertos procesos de colisiones y ciertos estados de las partículas involucradas. Por ejemplo el proceso de colisión



denota la colisión de la partícula a con el átomo blanco X y cuyos estados finales o canales de salida pueden ser los mostrados a la derecha de la flecha (reacciones) en donde los estados están denotados como sigue:

X^* = átomo simplemente excitado.

X^{**} = átomo doblemente excitado.

(p. ej. el estado $(2p^2)^1D$ del He)

X^+ = ión positivo del átomo.

Con esto en mente, nos adentramos a un fenómeno físico que por su pequeñez no había sido detectado y a su vez no se le dió la importancia como la que hoy se le atribuye sino hasta principios de la década de 1960.

En la física nuclear, la observación de resonancias en las secciones transversales de dispersión de partículas por núcleos ha sido uno de los métodos más utilizados para el estudio de las entidades nucleares.

Al contrario, en la física atómica, esto no ocurría así. El estudio de los átomos se efectuaba por otros métodos, como por ejemplo la espectroscopía de las descargas eléctricas en gases. Hasta que hace cerca de 20 años, esta mentalidad cambió debido al descubrimiento de resonancias atómicas en las curvas de sección transversal contra energía, para dispersión de electrones por átomos de helio.

De hecho, desde 1921, James Franck, cuando realizaba experimentos con las descargas eléctricas en gas neón, suspiró que cuando un electrón del neón es excitado a un orbital desocupado, entonces es posible que un segundo electrón pueda quedar capturado o ligado en

este orbital creándose así un estado excitado del ión negativo del neón.

Sólo es hasta 40 años después, que se le empezó a dar importancia a las resonancias atómicas, cuando Ugo Fano (1961) resaltó este fenómeno, después de la observación de tal ión excitado. El gran descubrimiento de resonancias atómicas se produjo en 1963 cuando George J. Schulz observó una resonancia en helio, en sus experimentos de medición de la sección transversal de excitación por colisión de electrones con dichos átomos. De ahí en adelante, se detectaron muchos más fenómenos de este tipo.

Estos fenómenos ya se conocían muy bien en la física nuclear y de hecho las teorías atómicas siguen teniendo la influencia de los hasta entonces desarrollados modelos nucleares.

Más aún, la resonancia observada por Schulz es el tipo más sencillo de resonancias llamadas Bohr-Feshbach, en las cuales se logra la captura temporal del proyectil, debido a la transferencia de energía de éste hacia las partículas en el blanco.

En 1936 Bohr susirió la siguiente explicación para el fenómeno de resonancia: el proyectil, colisionando con el sistema de muchas partículas, puede cederle tanta energía al blanco que no le quede suficiente para poder escapar, creándose, temporalmente, un estado ligado hasta que los intercambios de energía internos concentren la suficiente energía en una partícula para que ésta pueda escapar.

Esta idea fue llevada al rigor matemático por Herman Feshbach (1958 y 1962) y tales resonancias se denominan de Feshbach.

Tanto los experimentos como la teoría iban arrojando resultados importantes, notándose que en los distintos fenómenos observados estaban involucrados más de un tipo de proceso. Así también aparecen las resonancias de forma (o "shape resonances").

Una manera sencilla de entender este tipo de resonancias consiste en primero explicar, como lo hizo George Gamow (1928), el tiempo de vida de núcleos que decaen emitiendo partículas alfa cuando éstas últimas penetran la barrera de potencial coulombiano del núcleo, en lo que se conoce como el efecto túnel. Uno, entonces, puede imaginar precisamente el proceso inverso en el cual la partícula alfa (como proyectil) penetra el pozo de potencial del núcleo. Uno esperaría que la sección transversal de dispersión, para este fenómeno, mostrara una resonancia cuando la energía del proyectil fuese cercana a la energía del estado que decae. Esto es lo que ahora se conoce como resonancia de forma debido a que sus propiedades se determinan precisamente por la forma del pozo de potencial. Y continúan las clasificaciones de las resonancias, como lo hacen Taylor et al (1966), donde le dan el nombre de resonancias de coraza excitada a ciertos estados compuestos.

Estos son estados doblemente excitados (o con excitaciones múltiples) del ión negativo formado cuando se le agrega el electrón proyectil al estado excitado. Este tipo de resonancias son las análogas a los estados compuestos ("compound states") en la física nuclear.

Así pues, este tipo de resonancias encontradas en las secciones transversal de dispersión se han atribuido a los estados compuestos formados por electrón y átomo, con dos o más electrones excitados; donde el tiempo de vida de estos estados es muy pequeño.

Taylor et al (1966), a su vez mencionan que uno puede imaginarse la formación de las resonancias de coraza excitada ("core excited") mediante el siguiente proceso virtual: el electrón proyectil excita a uno o a varios electrones del átomo blanco de tal manera que el núcleo ya no está igualmente apantallado por los electrones de la nube atómica; entonces el electrón proyectil alcanza a experimentar una pequeña carga positiva y puede ser capturado o atraído por el átomo, para formar temporalmente un ión negativo. Este ión negativo decae, vía autoionización (o preionización), para formar al átomo blanco, excitado en general, y, por otro lado, al electrón dispersado.

Más aún, existe una clasificación de estas resonancias de coraza excitada a saber: resonancias del Tipo I y resonancias del Tipo II. Esta clasificación se debe a que un electrón, en el campo del potencial del estado excitado, puede quedar en un estado ligado o en un estado virtual de dicho potencial.

Resumiendo lo anterior podemos decir que existen tres tipos principales de estados resonantes en átomos y moléculas: resonancias de coraza excitada del Tipo I y del Tipo II, y resonancias de una partícula (o de partícula sencilla). El tiempo de vida para las resonancias del Tipo I, parecen estar entre 10^{-14} y 10^{-13} seg. o más, mientras que las del Tipo II y las de una partícula están cerca de los 10^{-15} o menos.

Existen varios tratamientos teóricos para describir el fenómeno de resonancias, entre ellos se encuentran un gran número de métodos aproximados, todos ellos englobados en el esquema general de resonancias de Feshbach o dispersión resonante.

Una de las teorías que ha sido más viable en el estudio de los perfiles de las líneas de las resonancias es la teoría de U. Fano (1961), en la cual desarrolla sus ideas centrado en lo que se llama interacción de configuración. Muestra que existe interacción o interferencia de un estado discreto autoionizante con el continuo de estados, lo que lo lleva a ciertas curvas de formas asimétricas y que describen los aspectos principales de las resonancias.

Hay que hacer notar que Fano desarrolla su formalismo para el fenómeno de autoionización usando este mismo esquema, donde la energía del estado discreto de un átomo doblemente excitado (o con excitación múltiple) es mayor que la energía del primer nivel de ionización del átomo neutro y este puede entonces sufrir el proceso llamado autoionización o preionización. La idea de Fano es la de proponer una

interacción de configuración, es decir, la interacción del estado discreto con energía en el continuo de energías, con el o los estados del continuo de energía. Esta interacción en los estados discretos provoca que un electrón del átomo excitado sea eyectado hacia el continuo de energías, quedando el átomo ionizado.

Para esto se propone que la función de estados que describe al sistema (i.e. al átomo que se autoioniza) esté compuesta por una combinación de funciones de estados del discreto y funciones de estados del continuo. En el desarrollo se obtienen los perfiles de línea que explican el proceso autoionizante, así como los tiempos de vida de los mismos.

A. Ramos O. (1984) demuestra que los resultados de Fano son formalmente equivalentes a los obtenidos por la teoría de dispersión de Feshbach.

Imaginemos ahora el proceso de una colisión atómica en la cual un proyectil, digamos un electrón, excita a uno o varios electrones de un átomo blanco, quedando este átomo en un estado excitado. Es decir, el electrón del átomo blanco llega a estar en un orbital donde su número cuántico n es alto y, al mismo tiempo, el electrón proyectil se encuentra en las vecindades del átomo excitado (blanco).

En este momento podemos hablar del sistema formado por un átomo excitado y un electrón en las vecindades de este último.

Así podemos pensar que estos dos entes interactúan debido a que el átomo excitado se encuentra en el campo coulombiano del electrón dispersado, y este último siente la presencia del átomo excitado. En la primera interacción uno esperaría que estuvieran presentes fenómenos como: variación en el tiempo de vida del estado autoionizante, corrimiento Stark en los niveles del átomo, polarización de las cargas coulombianas, por mencionar algunos. La segunda interacción se espera que juegue un papel de menor importancia en el proceso y no se tomará en cuenta.

Al final del proceso, el sistema estará descrito por una función de estados y se encontrará en uno de los muchos estados finales en los que puede terminar el proceso; los llamados canales de salida del proceso.

En este trabajo nos concentraremos precisamente en los aspectos relacionados con la variación del tiempo de vida del estado autoionizante debido a la primera interacción mencionada. El tratamiento que se intenta hacer en este trabajo está estrechamente ligado con este esquema, en el cual tenemos un átomo excitado que está en presencia del campo de una carga. Para esto necesitamos conocer algunas de las propiedades de los átomos excitados cuando se encuentran en presencia de un campo eléctrico.

Del estudio de los átomos excitados, por ejemplo Smirnov (1981) y Bayfield (1979) en átomos Rydberg, se resalta el hecho de que estos átomos, en contraposición a los átomos normales, son muy susceptibles a campos eléctricos pequeños. Además se menciona, Smirnov (1981), que

la frecuencia de ionización de los átomos Rydberg cuando se encuentran en presencia de un campo eléctrico uniforme, aumenta exponencialmente con la magnitud del campo eléctrico. Si pensamos en el tiempo de vida de los estados excitados, esto nos diría que su tiempo de vida disminuye exponencialmente con la magnitud del campo.

Precisamente éste es el objetivo de este trabajo; a saber, el incluir el efecto de la presencia del campo eléctrico al modelo "Shake Down" (King et al 1975) . Este modelo es uno de los más exitosos intentos para tratar de explicar al fenómeno que se denomina interacción posterior a la colisión (IPC).

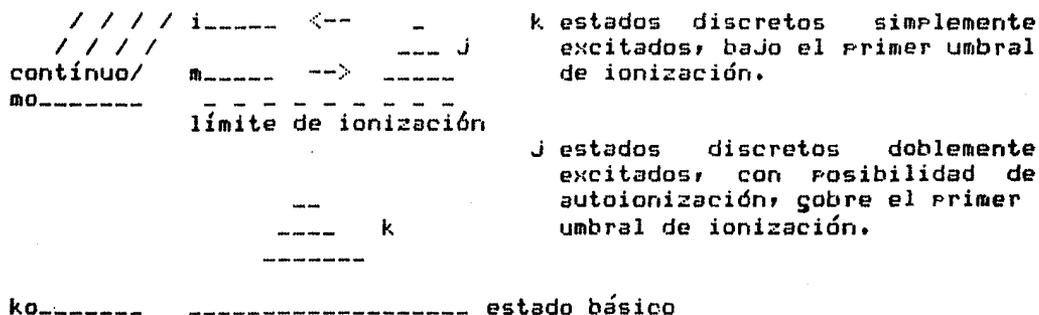
Brevemente mencionamos en lo que consiste este fenómeno y para esto regresamos al esquema del electrón colisionando con un átomo. Primero suponemos que el electrón tiene una energía cercana a la energía necesaria para excitar doblemente al átomo. Después de la excitación, el electrón tendrá una energía muy pequeña y por ende, esperaríamos que se encontrará en las vecindades del átomo que se autoioniza. Al autoionizarse el átomo blanco, el electrón eyectado y el electrón dispersado cercano interactúan en un intercambio de energía que se ha llesado a medir. Esto es, muy esquemáticamente, la interacción posterior a la colisión. Como se ve, el nombre hace alusión al hecho de que la interacción entre los electrones ocurre después de la excitación del átomo blanco.

En los siguientes capítulos, se estudian estos temas de una manera más adentrada. Se explica lo que es la interacción posterior a la colisión y el modelo "Shake Down"; y se finaliza con el adresado a este modelo, que consiste en incluir el efecto de la presencia del campo eléctrico del electrón dispersado sobre el tiempo de vida del estado autoionizante y se intenta hacer la comparación de las predicciones del modelo, ya modificado, con los datos experimentales.

II. LA INTERACCION POSTERIOR A LA COLISION

En el capítulo anterior se discutieron algunos fenómenos que se producen en los experimentos de dispersión de electrones por átomos. Estos fenómenos presentes dependen, claro está, de la región de energía de los electrones incidentes. Por ejemplo, si la energía, E_i , del electrón incidente es menor que la necesaria para excitar al átomo al nivel de excitación más próximo, entonces se tendrá el caso de dispersión elástica. Por otro lado, si la energía, E_i es suficiente para arrancar al electrón del átomo, entonces tendremos el caso de dispersión inelástica y un proceso de ionización directa. Aparte de estos dos niveles energéticos, existen varios más que se pueden estudiar. Aquí nos concentraremos, en general, en los intervalos de energías del electrón incidente cercanos al primer nivel de doble excitación del átomo blanco. Es decir, arriba del primer umbral de ionización del átomo.

Los estados autoionizantes o preionizantes (ver Herzenberg pas.167 y 171 o Cowan pas. 550) ocurren cuando se excita más de un electrón en el átomo de tal manera que la energía del estado compuesto sea mayor que la energía del primer umbral de ionización. Esto se muestra esquemáticamente en la siguiente figura:



Entonces, como lo describe U. Fano (1961), estos estados discretos interactúan con el continuo (con estados de la misma paridad y J ; ver Cowan pas. 514) dando lugar a ensanchamientos en el nivel discreto y a la autoionización del átomo por medio de una transición no radiativa (sin emisión de radiación) hacia el continuo. (nota: ver Fano y Cowan cap 18 ps. 530). De hecho, estos estados excitados autoionizantes suelen llamarse semidiscretos por estas mismas razones (ver Cowan Pas. 514).

Para tener una referencia directamente sobre el helio que es el elemento que se analiza en este trabajo, anexamos un diagrama de los niveles principales del helio.

Vamos a describir, con mayor detalle, el proceso que se va a estudiar que es la excitación, por medio de colisión con electrones, de estados autoionizantes cuyos tiempos de vida son pequeños.

En este proceso, un electrón (de hecho, un haz de electrones) con energía un poco mayor a la del umbral de excitación del estado autoionizante (i.e. a la energía en la cual se producen estados

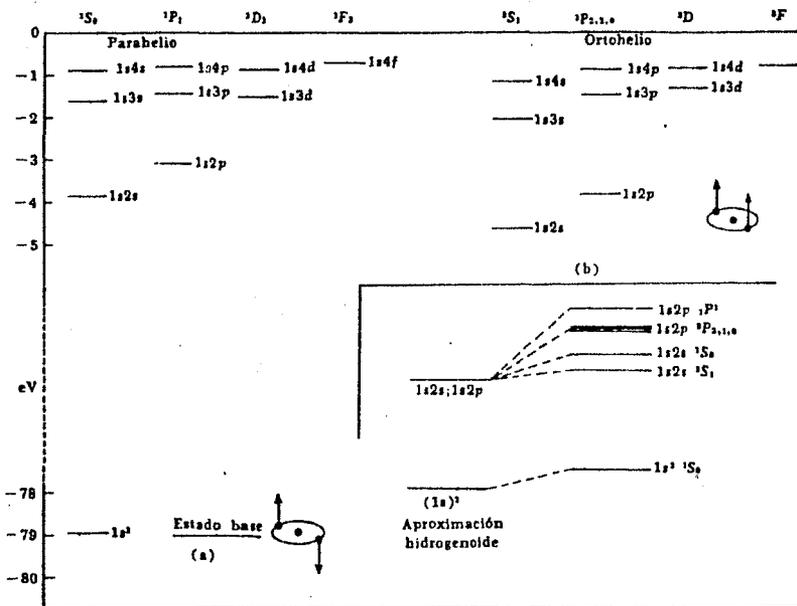


FIG. 18.2. Niveles de energía del He; se muestran esquemáticamente los espectros del paralelo (a) y del ortohelio (b), indicando tanto las configuraciones electrónicas como el estado atómico. En el inserto se muestra cómo se separan los niveles hidrogenoides debido al intercambio. Debido al acoplamiento espín-órbita, etc., niveles como $^3P_{2,1,0}$ no son realmente degenerados.

autoionizantes) colisiona con un átomo neutro, que en general se encuentra en su estado básico.



Fis.II.1

Ocurre que el electrón excita al átomo al estado autoionizante y luego se dispersa, alejándose del átomo. Por su parte el átomo decae por medio de una transición no radiativa, eyectando un electrón y desexcitándose para quedar en un nivel de menor energía (ver figura I.1).

En esta etapa del proceso, tendremos al átomo ionizado, es decir al ión positivo del átomo que en general está excitado; al electrón dispersado alejándose del ión y al electrón eyectada por el átomo.

El análisis del estado final de este proceso, lo que serían los canales de salida del proceso, implicaría ya sea un profundo estudio de teoría de dispersión, un análisis de un problema de tres cuerpos (el ión, el electrón eyectado y el electrón dispersado) o de ciertos modelos aproximados que tratan de explicar las observaciones experimentales. Describiremos aquí, precisamente, algunos de los modelos que se aplican para estudiar este fenómeno.

El problema consiste, como lo menciona Spence (1976), en un fenómeno de correlación de los electrones en movimiento cuando estos están en presencia de un campo tipo coulombiano provocado por el ión positivo.

Las fuerzas de correlación pueden ser de muy largo alcance (de varias veces el tamaño del átomo) y pueden alterar tanto a la energía como al momento angular de los estados finales.

Se han hecho muchos experimentos que demuestran esto. Por ejemplo Spence (1975,1977,1978), muestra que existe intercambio de energía entre el electrón eyectado y el electrón dispersado, cuando la energía incidente esta cercana a la del umbral de autoionización del átomo blanco y observa que esto provoca un corrimiento en los umbrales del estado autoionizante respecto a las mediciones espectroscópicas. Análogamente podemos mencionar los experimentos efectuados por King G.C. et al (1975); Hicks P.J. et al (1974 y 1975) ; Nesbet(1976), que analiza la resonancia de He-; y Marchand y Cardinal(1979) o Dawson,Gomez et al(1983), que analizan la producción de estados metaestables por colisión electrónica.

Al fenómeno de intercambio de energía entre el electrón dispersado y el electrón eyectado se le ha llamado Interacción Posterior a la Colisión (IPC). No obstante, este nombre no es muy

apropiado ya que no se puede considerar que la interacción ha finalizado hasta que todas las interacciones hayan cesado (Spence, 1976).

Podemos sintetizar la manifestación de la IPC en estas tres formas (Read, 1975):

a) Cambios en la energía, respecto a las energía esperada, de los electrones eyectados por el átomo en estado autoionizante.

b) Desplazamientos en las mediciones de la energía de los umbrales de autoionización (i.e. de la energía necesaria para poder excitar al átomo a un estado autoionizante) respecto a los valores espectroscópicos.

c) La observación de ciertas estructuras o conspicuidades en la sección transversal de excitación de átomos neutros a estados Rydberg, es decir, en la sección transversal para la producción de estados Rydberg.

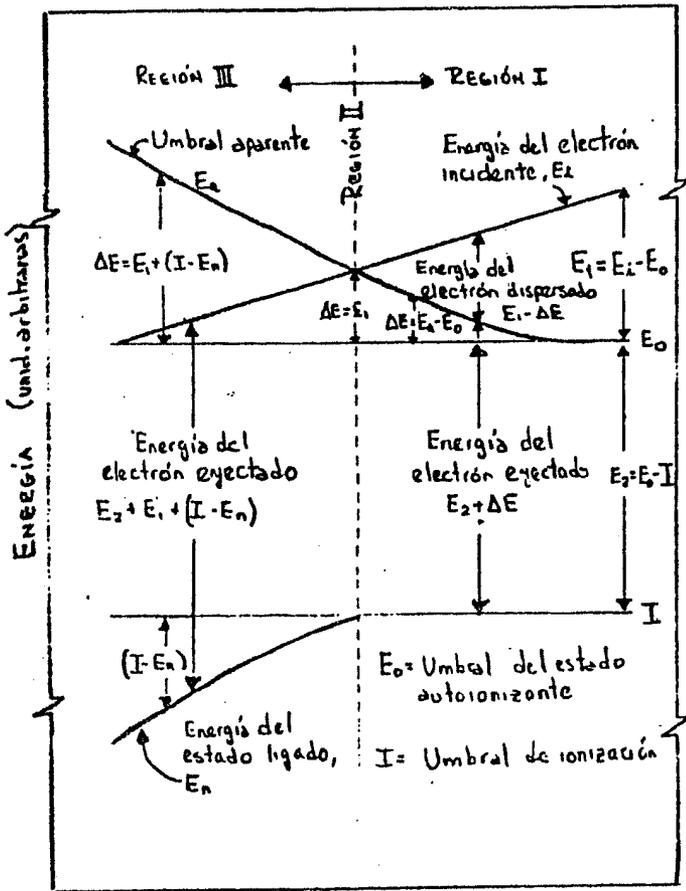
Todos estos fenómenos se muestran siempre y cuando la energía del electrón incidente esté cercana a la del umbral para la producción de estados autoionizantes y cuando el tiempo de vida de estos estados es corto, ($T \sim 0,09$ eV.); ya que de lo contrario, el electrón dispersado tendrá suficiente energía para alejarse rápidamente del átomo y estará lo suficiente retirado (si el tiempo de vida o su energía es grande) para no tener interacción fuerte con el electrón eyectado. Para entender mejor estos tres casos, hacemos referencia a la figura II.2 (Spence 1976). El eje horizontal representa la energía de exceso, E_i , del electrón dispersado después de la excitación del estado autoionizante. Es decir, E_i es la energía que tendría el electrón dispersado en ausencia de IPC. E_i es la energía del electrón incidente; E_0 es el umbral de autoionización, es decir, el obtenido por mediciones espectroscópicas. I es el potencial del primer nivel de ionización del átomo blanco. E_a es el umbral de autoionización aparente o desplazado (medido en estos experimentos) respecto al valor espectroscópico; y ΔE es el intercambio de energía; es decir, ΔE es ya sea la energía ganada por el electrón eyectado o la pérdida de energía del electrón dispersado.

Como se muestra, la figura se divide en tres regiones energéticas. Mientras E_i decrece desde valores mayores al umbral de autoionización, el intercambio energético ΔE aumenta ya que el electrón incidente estará más cercano al átomo autoionizante y la interacción con el electrón dispersado será mayor.

En la región I la energía E_i del electrón dispersado, es mayor que su pérdida de energía ΔE ; es decir, $E_i > \Delta E$. Entonces el electrón dispersado todavía está libre ya que su energía final ($E_i - \Delta E$) es aun positiva.

En esta región, el intercambio de energía ΔE se obtiene midiendo la ganancia de energía del electrón eyectado o la pérdida de energía del electrón dispersado. Esta es precisamente la manifestación mencionada en el inciso a).

FIG. II.2



ENERGÍA ELECTRÓNICA RESIDUAL $E_1 = E_2 - E_0$
(unid. arbitrarias)

En la región II, $E_1 \sim \sqrt{\Delta E}$ y el electrón dispersado tiene una energía prácticamente nula ya que la ha cedido al electrón eyectado mediante el fenómeno de IPC.

En un experimento donde se estuvieran midiendo umbrales de excitación de estados autoionizantes, tenemos que la energía umbral es precisamente la que se obtiene cuando la energía del electrón proyectil es nula. Si en este caso estamos midiendo umbrales de autoionización, le asignaremos a este umbral, precisamente la energía E_i . Esto es debido a que al enviar al electrón incidente con energía E_i , estamos midiendo una energía final nula, lo que aparentemente diría que el electrón cedió exactamente esa energía para excitar al átomo al estado autoionizante. Pero, en realidad, se está midiendo un valor de energía mayor que la del umbral, ya que el exceso de energía E_i se le ha cedido al electrón eyectado. Entonces se obtiene un valor nulo en la energía final del electrón dispersado cuando la energía incidente es mayor, por E_i , que la del umbral de excitación del estado autoionizante, E_0 . Esta es la manifestación mencionada en el inciso b).

En la región III, tenemos el caso en el que $E_1 < \sqrt{\Delta E}$; es decir, el electrón dispersado con energía E_1 (muy pequeña) cede más energía que la energía cinética que posee. Por lo que su energía final ($E_1 - \sqrt{\Delta E}$) es negativa y entonces el electrón dispersado ya no está libre sino que queda capturado por el ión positivo, residuo de la autoionización. Esto ocurre, claro está, en la región III sólo cuando E_i es mayor que la energía del umbral de excitación del estado autoionizante, E_0 , pero menor que el umbral desplazado, E_a . Es decir $E_0 < E_1 < E_a$.

Así pues, tenemos la formación de un átomo neutro excitado. En este caso $\sqrt{\Delta E} = E_1 + (I - E_n)$ donde E_n es la energía del estado excitado del átomo Rydberg recién formado. De hecho, este es otro proceso para producir átomos neutros en estados Rydberg. Se han efectuado un gran número de experimentos que trabajan en las tres regiones mencionadas anteriormente, arrojando los resultados de los incisos a), b), c).

De estos resultados se ha tratado de correlacionar los datos, llegando a la expresión siguiente:

$$\sqrt{\Delta E} = a E_1^m \dots\dots\dots(III.1)$$

con a y m constantes, $E_1 = E_i - E_0$. Como se ve, esta expresión relaciona el intercambio de energía entre los electrones, debido a IPC, con la energía del electrón dispersado en ausencia de IPC. Pero el valor del exponente, m , ha sido causa de controversia. De hecho, experimentalmente, el valor de este exponente se da como $m = -1.2$ (Spence 1976). Para ciertos estados, el exponente aparece en el intervalo de -0.5 a -0.9 (Kins G.C. et al 1975).

Teóricamente se ha obtenido $m = 0.5$ y $a = \frac{1}{2} \pi I^{1/2}$, con $I = 13.6 \text{ eV}$ (Barker y Berry 1966). El mismo valor se encuentra (Nienhaus y Heideman ,1975) pero para el intervalo $E_1 \gg \sqrt{\Delta E}$ y $E_1 \ll \sqrt{\Delta E}$ (región que está muy lejana a la experimental). Para valores un poco grandes

de El se obtiene $m = -1.0$.

Se han desarrollado varios modelos para tratar de explicar este fenómeno de IPC. A continuación se dará una explicación de dos de estos modelos, mientras que al final del capítulo se mencionarán algunos otros que tratan de llevar a explicaciones coherentes de los fenómenos observados.

IPC DE BARKER Y BERRY.

Barker y Berry (1966) midieron la distribución de las energías de los electrones eyectados cuando excitaban estados autoionizantes del He por medio de colisiones con iones He⁺, en el intervalo de energía de 1 eV. a 4 keV. Se muestra a continuación el proceso que se observó:



donde He^{**} significa el átomo de helio doblemente excitado y He⁺ indica al ión positivo de helio. Observaron que una conspicuidad a 36 eV. tenía un perfil asimétrico de energía y que su posición dependía de la energía incidente. Trataron de relacionar esta conspicuidad con el estado (2s2p)³P del helio, pero el ancho de líneas obtenido resultó mayor que lo esperado para ese estado.

Para explicar estos corrimientos de energía, Barker y Berry propusieron el modelo de Interacción Posterior a la Colisión. Este modelo se basa en la idea clásica de los potenciales involucrados en la colisión. Se dice que el cambio de energía en el electrón eyectado es aproximadamente la energía potencial del electrón en el campo del ión (que es el proyectil). El estado autoionizante decae estando aún en presencia del potencial coulombiano del ión He⁺ dispersado; por lo tanto, la energía final del electrón eyectado, decrece en una cantidad igual a su energía potencial (negativa) que posee debido a la presencia de He⁺ al momento de la autoionización del átomo.

Claramente este modelo no es válido para cambios grandes en la energía que pueden ocurrir cuando el electrón es eyectado estando el átomo (He) y el ión (He⁺) muy cercanos. Esto último se podría explicar por el hecho de que habrá interacciones fuertes entre el átomo autoionizante y el ión He⁺ cercano, de tal manera que la probabilidad de decaimiento exponencial del estado autoionizante, en la cual se basa el modelo, se ve fuertemente afectada.

De hecho, el modelo supone que la distancia internuclear involucrada es mucho mayor que la distancia de máxima aproximación. También se hace la suposición de que el tiempo de vida del estado autoionizante permanecerá prácticamente constante, con un valor casi igual al del estado autoionizante. Además, la velocidad del ión (que en general varía) se toma como su valor asintótico, es decir, el valor que debiera tener a una distancia infinita de separación respecto al blanco.

Para la colisión $\text{He}^+ \text{ con } \text{He}$, el modelo demuestra que la distribución de energía para el electrón eyectado obtenida para energías mayores que 32eV (es decir, para la parte que incluye la conspicuidad observada a 36eV) ocurrirá cuando la autoionización se lleve a cabo siendo la distancia internuclear ($\text{He}^+ - \text{átomo blanco}$) mayor que aproximadamente 50 Å. Esta parte del espectro del electrón eyectado está dada por (usando la notación de Read (1975) y no la de Barker y Berry (1966))

$$P(\Delta E)d(\Delta E) = b/(\Delta E) \exp[-b/\Delta E] d(\Delta E) \quad (\text{II.2})$$

donde P es la distribución de probabilidad de energía, ΔE es la depresión o cambio de energía experimentada por el electrón eyectado (en eV) con respecto a la que se obtuviera para distancias internucleares infinitas entre el átomo autoionizante y el ión positivo y

$$b = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\tau} = \frac{e^2\Gamma}{4\pi\epsilon_0k(2E_1/M_H)^{1/2}} \quad \dots(\text{II.3})$$

Como se mencionó, v es la velocidad para separaciones infinitas; τ es el tiempo de vida medio del estado autoionizante; e la carga del electrón y ϵ_0 la permitividad del vacío.

Con la ecuación II.3 se obtiene el perfil asimétrico mencionado y que presenta una cola larga para ΔE grandes.

Por medio de un análisis sencillo se obtiene que el valor más probable de ΔE , es decir, la conspicuidad observada, es

$$\Delta E_{\text{max}} = b/2 \quad (\text{II.4})$$

Entonces este modelo demuestra que los valores de ΔE en los cuales ocurren las conspicuidades, debieran ser proporcionales a E ya que $b \propto E$, como se pueda observar de (II.3). Por lo tanto

$$\Delta E_{\text{max}} = b/2 = a E_1^{-1/2} \quad \text{con } a = \text{cte.} \quad \dots(\text{II.5})$$

Hacemos notar, de antemano, una observación muy importante hecha en el trabajo de Barker y Berry (1966), y esta es que los valores predichos por su modelo y los obtenidos experimentalmente difieren en casi un orden de magnitud. Resaltan que esto es debido principalmente a la suposición de la forma del campo del ión en el estado autoionizante y al efecto de este campo sobre el tiempo de vida del estado. Esto será una de las ideas principales que se tratarán en los próximos capítulos.

Estos mismos fenómenos de corrimientos o desplazamientos de energía de los electrones eyectados fueron observados por Hicks et al (1974), en experimentos de excitación de estados autoionizantes del helio, por electrones cuyas energías estaban cercanas al umbral de excitación del estado autoionizante. En este caso, los electrones dispersados, con energías de algunos electron volt, son los análogos a los iones He⁺ de los experimentos de Barker y Berry; ambos proyectiles teniendo velocidades del mismo orden de magnitud.

La diferencia estriba en el cambio de signo de la carga de las partículas incidentes, lo que provoca que el electrón eyectado gane energía y no la pierda, de acuerdo a lo observado por Hicks et al en sus experimentos. Además, reconocieron que el fenómeno de IPC podría estar presente en este proceso, siendo que la función de onda del electrón dispersador, que se mueve lentamente, crea un potencial coulombiano en la región del átomo autoionizante. También notaron que las velocidades de los electrones dispersados (lentos) y eyectados (rápidos) son muy distintas.

Hicks et al. aplicaron el modelo de Barker y Berry a sus observaciones, específicamente a los primeros cuatro estados autoionizantes del Helio, por medio de la ecuación (II.4) y se vieron obligados a agregar una constante E_c para poder ajustar sus datos al modelo, es decir, tomaron

$$\Delta E = \frac{1}{2} \left[\frac{e^2 \Gamma}{4\pi\epsilon_0 \hbar (2E/m)^{1/2}} \right] - E_c = \frac{\Gamma}{2} \left[\frac{I}{E_1} \right]^{1/2} - E_c \dots (II.6)$$

con $I = 13.6 \text{ eV}$ y E_c una constante empírica.

Además, los valores de Γ necesarios para obtener buenos ajustes, tuvieron que ser mayores que los valores experimentales. Y como se ve, hubo la necesidad de incluir la constante E_c , la cual no se puede explicar con las ideas del modelo.

Nienhaus y Heideman (1975) llevan a cabo un análisis similar al de Barker y Berry, pero ahora con el fenómeno observado por Hicks et al (1974). Se supone, como en el modelo de Barker y Berry, que la ganancia de energía del electrón eyectado, \mathcal{E} , está dada por:

$$\mathcal{E} = \frac{e^2}{v t} \dots \dots \dots (II.7)$$

donde

$$v = \left(\frac{2E_1}{m} \right)^{1/2} \dots \dots \dots (II.8)$$

es la velocidad del electrón dispersado, justo después de la excitación del estado autoionizante y siendo que este estado decae en un tiempo t , después de su excitación.

En el proceso temporal tenemos que desde el momento en que el electrón dispersado excita al átomo, hasta que este último decae, existe un tiempo τ (la vida del estado autoionizante). Mientras tanto, el electrón dispersado con velocidad v , ha avanzado una distancia $r = vt$ y en este momento el estado autoionizante decae. Entonces se puede decir que el electrón que se va a eyectar, está en el potencial del electrón dispersado, el cual se da (aproximadamente) como:

$$U = e^2 / r \dots\dots\dots (II.9)$$

con $r=vt$. Precisamente esta es la energía que adquiere o gana el electrón dispersado.

Como el tiempo de vida τ y el ancho de línea Γ del estado autoionizante están relacionados por

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \dots\dots\dots (II.10)$$

entonces la probabilidad de que el estado autoionizante decaiga entre el tiempo t y $t+dt$ se puede escribir como

$$\exp(-\frac{t}{\tau}) \frac{dt}{\tau} = \exp(-\frac{t\Gamma}{\hbar}) \Gamma \frac{dt}{\hbar} \dots\dots (II.11)$$

Siguiendo las ideas de Barker y Berry se tiene que para un valor fijo de E_1 , la probabilidad de pérdida de energía está dada por:

$$P(\frac{E}{E_1}) dE = \frac{b}{E^2} \exp(-\frac{b}{E}) dE \dots\dots\dots (II.12)$$

con

$$b = \frac{e^2}{vt} = \frac{\Gamma e^2}{v\hbar} = \frac{\Gamma e^2}{\hbar} \left(\frac{m}{2E_1}\right)^{1/2} =$$

$$= \Gamma \left(\frac{me^2}{2KE_1}\right)^{1/2} = \Gamma \left(\frac{R}{E_1}\right)^{1/2} \dots\dots\dots (II.13)$$

donde, en el último paso, hemos utilizado las ecuaciones (II.8) , (II.9) y se tomó

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 1 \text{ Rydberg} = 13.6058 \text{ eV} \dots \text{(II.13)}$$

que es la energía de ionización del átomo de hidrógeno.

Usando (II.13), la ecuación (II.12) se puede escribir como :

$$P(\epsilon/\epsilon_1)d\epsilon = \frac{T}{\epsilon} \left(\frac{R}{\epsilon_1}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{T}{\epsilon} \left(\frac{R}{\epsilon_1}\right)^{1/2}\right] d\epsilon \dots \text{(II.14)}$$

Antes de seguir adelante, resumimos las hipótesis de este modelo:

i) La ganancia de energía ϵ (ec. II.7) es igual a la energía potencial coulombiana (ec. II.9) del electrón eyectado en el campo del electrón dispersado.

ii) La velocidad v del electrón dispersado, en el intervalo de tiempo desde la excitación hasta el decaimiento del átomo autoionizante, está dada por la ec.(II.8) lo que implica que se puede despreciar la energía potencial del electrón eyectado en el campo del átomo autoionizante.

iii) El tiempo de vida promedio, del estado autoionizante no se altera por la presencia del electrón dispersado.

Para que sean válidas las afirmaciones i) y ii) se requiere que la distancia $r=vt$ no sea muy pequeña; es decir, el electrón eyectado esté suficientemente alejado del átomo.

Si la suposición iii) no fuera válida, uno esperaría que el tiempo de vida del estado autoionizante fuera menor, debido a la presencia del campo del electrón dispersado (nota: ver Sairnov y capítulo anterior); entonces tendríamos que los valores de mayor ϵ aumentarían su probabilidad. Es decir, la curva de probabilidad acrecentaría, respecto a la ecuación (III.10) a medida que ϵ aumenta.

Podemos agregar a estas suposiciones el hecho de que el electrón, como se ve de las ecuaciones del modelo, se considera una partícula clásica.

El asesinato de Nienhaus y Heideman al modelo de Barker y Berry estriba en la forma de medir las energías de los electrones eyectados o dispersados. Se observa que Hicks et al.(1974) efectúan sus experimentos por el método de pérdida de energía constante y esto se toma en cuenta en el asesinato al modelo. Entonces la diferencia

$$E_0 = E_{ev} \quad (1) \quad (II.15)$$

se mantiene constante; donde E_0 es la energía del electrón incidente y E_{ev} es la energía del electrón eyectado. Entonces, como

$$E_1 = E_0 - E_{ei} \quad (2) \quad (II.16)$$

con E_{ei} la energía del estado autoionizante, y

$$E_{eJ} = E_{ei} - E_i + \epsilon \quad (II.17)$$

resulta que
$$E_f = E_1 - \epsilon \quad (II.18)$$

debe ser constante en las mediciones de Hicks et al. Así pues, E_i varía conjuntamente con ϵ . El perfil predicho por el modelo tendrá la forma siguiente:

$$\sigma_{ei}(E_0) P(\epsilon/\epsilon + E_f) \dots\dots\dots (II.19)$$

con

$$E_0 = E_{ei} + E_i = E_{ei} + E_f + \epsilon$$

y $\sigma_{ei}(E_0)$ la sección transversal para la excitación del estado autoionizante.

Pero ahora se hace la suposición de que σ es constante en un intervalo igual al ancho de la distribución P . Con esto tendremos la probabilidad

$$P_{ion}(\epsilon) = \frac{\pi}{\epsilon^2} \exp\left[-\frac{\pi}{\epsilon} \left(\frac{R}{\epsilon + E_f}\right)^{1/2}\right] \frac{\pi}{\epsilon^2} \left(\frac{R}{\epsilon + E_f}\right)^{1/2} \dots\dots(II.20)$$

Analógicamente se puede aplicar el modelo para estudiar la excitación de estados Rydbers. Para estos experimentos la energía final del electrón dispersado (ec. II.8) es negativa y

$$E_f = E_{exc} - E_i = -E_b \dots\dots\dots(II.21)$$

donde E_b es la energía de excitación del estado final. Es decir, E_b es la energía con la cual el electrón dispersado queda capturado en el átomo Rydbers. En este caso tendremos la captura del electrón solo si:

$$\epsilon = E_1 + E_b \quad \dots\dots\dots(\text{II.22})$$

Se espera que la contribución a la sección transversal para la excitación de un estado excitado debido a IPC, cuando la energía incidente es $E_0 = E_{ai} + E_1$, sea proporcional a la ec. (2) con ξ dada por la ecuación (II.22). Entonces

$$P_{ion}(E_1) = \frac{\Gamma}{(E_1 + E_b)^2} \exp\left[-\frac{\Gamma}{E_1 + E_b} \left(\frac{R}{E_1}\right)^{1/2}\right] \left(\frac{R}{E_1}\right)^{1/2} \quad \dots(\text{II.23})$$

con E_1 dado por (II.16).

Tomando $A = (\Gamma^2/R)^{1/3}$ tenemos que (II.20) esta dada por:

$$P_{ion}(x) = \exp\left[-\frac{1}{x(x+a)^{1/2}}\right] \quad \dots(\text{II.24})$$

con $x = E/A$ y $a = E_f/A$

Para (II.23) tenemos

$$P_{exc}(y) = \exp\left[-\frac{1}{(y+b)y^{1/2}}\right] \frac{1}{(y+b)^2 y^{1/2}} \quad \dots\dots(\text{II.25})$$

con $y = E_1/A$ y $b = E_b/A$.

Se obtiene que los máximos de estos perfiles, están dados por la expresión

$$\frac{E_1 + \epsilon/2}{A} = \frac{2\epsilon E_1^{3/2} + 1/2 \cdot \epsilon^2 E_1^{1/2}}{A} \quad \dots\dots(\text{II.26})$$

siendo la misma forma para ambas distribuciones.

De esto se obtienen los resultados ya mencionados en los cuales tenemos

$$\varepsilon = \frac{\pi}{2} \left(\frac{R}{E_1} \right)^{1/2} \quad \text{para } E_1 \gg \varepsilon \quad \dots\dots(II.27)$$

$$\varepsilon = \frac{\pi}{2} \left(\frac{R}{E_1} \right)^{1/2} \quad \text{para } E_1 \gg \varepsilon \quad \dots\dots(II.28)$$

y entre estos dos intervalos, la distribución varía más rápido que $E_1^{-1/2}$, lo cual está cualitativamente de acuerdo con lo obtenido en los experimentos de Hicks et al y se ve que este modelo contiene al modelo de Barker y Berry de E_1 .

Por último, aclaramos que la concordancia del modelo con los datos experimentales no es completa, aunque los resultados sugieren que existe una contribución significativa de IPC a los datos experimentales.

III. EL MODELO "SHAKE DOWN"

Este modelo, al contrario que el modelo clásico de Barker y Berry, trata de explicar el fenómeno de IPC usando las herramientas de la mecánica cuántica.

Como hemos mencionado, el efecto de IPC se ha manifestado principalmente en tres formas distintas, y experimentalmente se encuentra que el intercambio de energía ΔE entre el electrón dispersado y el electrón eyectado tiene una dependencia con E_i de la forma:

$$\Delta E = a(E_i - E_a)^n = a E_i^n \dots \dots \dots (III.1)$$

en la que E_i es la energía del electrón incidente, E_a la energía del estado autoionizante y E_i la energía del electrón dispersado en ausencia de IPC. Se supone que la constante de proporcionalidad depende del tiempo de vida del estado autoionizante y, probablemente, de otros efectos como la polarizabilidad del estado y el efecto Stark.

El se obtiene inmediatamente del experimento y sólo depende de las condiciones de éste. ΔE se deduce de forma distinta en cada experimento, dependiendo del efecto de IPC que se esté observando. Si lo que se estudian son a los electrones eyectados, ΔE es el incremento de energía de estos electrones. Pero en experimentos en donde se intenta medir las energías umbrales de los estados autoionizantes, entonces ΔE es el corrimiento del umbral respecto a las mediciones espectroscópicas. Por último, cuando $E_i < \Delta E$, el electrón dispersado queda capturado y se producen átomos Rydbergs; en este caso ΔE será $E_i + E_b$, en donde E_b es la energía de amarre del electrón Rydbergs, o sea la energía con la cual el electrón dispersado queda ligado en el campo del átomo que se autoionizó. Por ahora trataremos el modelo "Shake Down" en este último caso, i.e. el de la producción de átomos Rydbergs.

El nombre del modelo proviene de la analogía hecha entre el fenómeno de producción de Rydbergs, por medio de IPC, y el fenómeno que ocurre en espectroscopía electrónica Auger. Para explicar esto ponemos el siguiente ejemplo: cuando un electrón de capa interna K de un átomo, es arrancado vía absorción de radiación K (rayos X) o por colisión electrónica, el ión queda en un estado altamente excitado. Este estado se encuentra a un nivel de energía considerablemente mayor que el del primer umbral de ionización del átomo. Inclusive podemos afirmar que se encuentra sobre el del nivel de energía necesario para arrancar a un electrón de la capa L.

El cambio brusco en la carga efectiva nuclear que sienten los electrones de las capas externas del átomo pueden ocasionar que uno o más de estos electrones lleguen a ser excitados a niveles más altos energía e inclusive a ser eyectados del átomo. Es decir, en lugar de que ocurra una transición en la cual un electrón de capa L caiga a la

capa K vía la emisión de un fotón, sucede que el electrón se puede excitar o desprender de la capa L. Se utiliza el nombre de proceso o efecto Auser para englobar a cualquier proceso de este tipo. A este efecto se le llama "shake up" o "shake off" dependiendo si el electrón se excita o se desprende del átomo excitado. (Carlson T.A. ,1975).

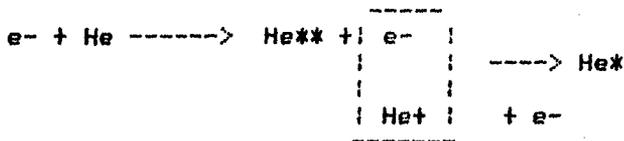
Se puede obtener una descripción teórica de este proceso, si uno supone válida la aproximación repentina. En ésta se supone que el tiempo que tarda en ser eyectado el electrón de capa interna es muy corto comparado con el período orbital del electrón de capa externa que se está considerando. Además de esto, la explicación al fenómeno supone que uno puede representar al electron que sufre el proceso (en este ejemplo, el electrón de capa L) por medio de una función de onda de una sola partícula.

Con estas suposiciones se plantea que la probabilidad de que este electrón sufra la transición desde su estado inicial $\Psi_0^{(z)}$, en el átomo con z electrones, al estado final $\Psi_n^{(z-1)}$, en donde n representa al conjunto de números cuánticos del estado excitado o del continuo, dependiendo si se trata de "shake up" o "shake off", está dado por

$$P_n = \left| \int \Psi_0^{(z)*} \Psi_n^{(z-1)} d\vec{r} \right|^2 \dots\dots (III.2)$$

Kins et al (1975) utilizan esta idea y proponen una descripción análoga para explicar los perfiles de la sección transversal para la excitación de estados Rydberg como una consecuencia de la IPC. Mencionaremos aquí que este modelo también se aplica al tratar de explicar los perfiles que se obtienen al observar a los electrones eyectados. Hacemos notar, para mayor claridad, que hablaremos de la región de energía en la cual $\Delta E > E_i$, i.e. el electrón dispersado pierde más energía cinética de la que posee, para que exista posibilidad de captura del electrón. Estrictamente esta región está descrita por $0 < E_i < \Delta E$; o como se mencionó anteriormente $E_0 < E_i < E_a$.

Cuando el átomo blanco se doble excita (ver Fig. II.1), el electrón proyectil se dispersa y en este intervalo de energía, E_i será muy pequeña, de tal forma que el electrón dispersado se aleja lentamente del átomo, con un momento angular h_l e inicialmente se describe por una función de onda saliente, $\Psi_{kl}^{(z)}$, en el continuo. Pero después de que el átomo blanco se autoioniza, el electrón dispersado siente el cambio de carga del átomo y puede ser capturado por el ión residual mediante un proceso que, por analogía con el efecto Auser, se ha llamado "shake down". En este caso, el electrón dispersado quedará descrito por una onda coulombiana saliente $\Psi_{kl}^{(z)}$, si no es capturado, o por una función de onda de un electrón en un estado Rydberg n_l de átomo neutro que se formaría al quedar capturado el proyectil.



Fis. III.1

Con estas ideas tenemos que la probabilidad de que el electrón dispersado quede en un estado Rydberg del átomo blanco es, en la aproximación repentina:

$$P_{n\ell}(k) = |q_{n\ell}(k)|^2 \dots\dots\dots(III.3)$$

en donde

$$q_{n\ell}(k) = \int \psi_{k\ell}^{(2)*} \psi_{n\ell}^{(1)} d\vec{r} \dots\dots\dots(III.4)$$

Para poder comparar este modelo con sus datos experimentales, Kins et al (1975) calcularon y graficaron $q_{n\ell}(k)$ como función de la energía. El del electrón dispersado, para nueve valores de n (2 a 10), dos valores de ℓ (0 y 1) y para varios valores del tiempo de vida τ del estado autoionizante. Las funciones de onda que se toman son por un lado una función hidrogenoide $\psi_{n\ell}^{(1)}(k)$ para el estado Rydberg y para la función de onda del continuo se toma su parte radial como:

$$\psi_k^{(2)} = \frac{\sin(kr+\delta)}{r} e^{-\frac{r}{2\tau k}} \dots\dots\dots(III.5)$$

para el caso $\ell=0$, y

$$\psi_k^{(2)} = \left(\frac{\sin(kr+\delta)}{kr} - \frac{\cos(kr+\delta)}{r} \right) e^{-\frac{r}{2\tau k}} \dots\dots\dots(III.6)$$

para el caso de $\ell=1$.

La parte exponencial se ha incluido para permitir el decaimiento del estado autoionizante (Bottcher 1975) y d es un corrimiento de fase. También se ha elegido un volumen de normalización en el cual se tiene una sección transversal constante (en ausencia de "shake down") para la excitación del estado autoionizante.

Antes de continuar con la descripción y los resultados del modelo, será útil mencionar y tratar de aclarar ciertas ideas que se están manejando pero no se ven muy transparentes a primera vista.

Para empezar notamos que $\psi_k^{(2)}$ para $l=1$ es

$$\psi_k^{(2)} = k j_0(kr) e^{-\frac{r}{2\tau k}} \dots\dots\dots(III.7)$$

donde J_0 es la función de Bessel esférica J_l para $l=0$.

También

$$\psi_k^{(2)} = k j_1(kr) e^{-\frac{r}{2\tau k}} \dots\dots\dots(III.8)$$

Para $l=1$ y las funciones $J(kr)$ no son más que la parte radial de las funciones de onda para una partícula libre (con $l=0$ o $l=1$ según el caso), es decir, funciones de onda esféricas salientes. Esta parte sigue la hipótesis de que se puede expresar al electrón dispersado con una función de onda de una partícula y precisamente debe ser una función de onda saliente descrita por las funciones Bessel (ignorando el efecto que produce la presencia del átomo, es decir se toma su forma asintótica). Hacemos notar que como se está considerando que el hamiltoniano del sistema es independiente del tiempo, se puede hacer una separación de variables en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo que conduce a soluciones del tipo

$$\psi_p(r,t) = \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

de tal forma que la información importante del problema está contenida en la función radial $\psi(r)$.

El término exponencial que modula a las funciones, es proporcional a la probabilidad de decaimiento del estado autoionizante. Y entonces se puede ligar de una manera no muy formal, a este modelo con el de Barker y Berry presentado anteriormente. En este último modelo la probabilidad de decaimiento del estado autoionizante, es proporcional a $\exp(-t/\tau)$ con τ , el tiempo de vida de este estado. Además, el electrón dispersado recorre una

distancia $r=vt$ en el tiempo t . Ahora bien, usando unidades atómicas ($\hbar = m = e^2 = 1$) tenemos

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{k^2}{2} \quad \dots\dots(III.9)$$

y como $p = mv = \hbar k$ entonces $v = k$ \dots\dots(III.10)

de donde

$$\exp(-t/z) = \exp\left(-\frac{r}{vz}\right) = \exp\left(-\frac{r}{zk}\right) \quad \dots\dots(III.11)$$

que es la forma que se usa en este modelo para permitir el decaimiento del estado autoionizante. Esta exponencial se analizará con más detalle en el capítulo siguiente. Por ahora sólo tratamos de dar ciertas analogías de las ideas de este modelo con los otros.

También se menciona que las funciones son hidrogenoides, aunque no se da la forma explícita tomada. Mencionamos, antes de continuar, que hemos esbozado lo más importante del modelo y que en el trabajo de Kins et al no se hace ningún tipo de cálculo explícito. Las gráficas obtenidas por el modelo se muestran a continuación. Las gráficas que resultan, hemos calculado explícitamente las integrales de traslape $qnl(k)$.

Primeramente pondremos explícitamente la parte radial de la función de onda hidrogenoide que se utilizará (Pauling pag. 136)

$$\Psi_{n+l}^{(1)} = - \left[\frac{(2z)^3}{(na_0)^3} \frac{(n-l-1)!}{2n \{(n+l)!\}^3} \right]^{1/2} e^{-\alpha r/2} (\alpha r)^l L_{n+l}^{2l+1} \quad \dots(III.12)$$

con $\alpha = \frac{2z}{na_0}$ y $a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ \dots\dots(III.13)

sin considerar la parte angular, pues ésta sólo afecta a la constante de normalización.

Si ahora tomamos el caso más sencillo que se grafica en el modelo, para $n=4$, $l=0$ (i.e. el estado $4s$) usamos unidades atómicas y tomamos $Z=2$ (i.e. Helio) que es el elemento que principalmente se estudia al presentar el modelo, tenemos:

$$\psi_{40}^{(1)}(r) = \frac{2^{3/2}}{48} (24 - 36r + 12r^2 - r^3) e^{-r/2} \dots \text{(III.14)}$$

Substituyendo las funciones $\psi_{k0}^{(2)}$ (con $d=0$) y $\psi_{40}^{(1)}$ en la ec. III.13 tendremos

$$Q_{40}(k) = N \int \frac{\sin(kr)}{r} (24 - 36r + 12r^2 - r^3) e^{-\frac{r}{2}(1/k+1)} r^2 dr \dots \text{(III.15)}$$

con
$$N = \frac{\sqrt{2\pi}}{24}$$

Hasta ahora no se han mencionado los límites de integración. Kins et al (1975) aclaran que una de las varias aproximaciones del modelo (las cuales se mencionaran más adelante) es que se usan las formas asintóticas de las funciones de onda y los detalles de su comportamiento para r pequeña se han omitido (no obstante esto no será importante para valores grandes de n).

Con esto en mente uno pensaría entonces, que los límites de la integral serán de R_0 a ∞ , con R_0 pequeña pero mayor que cero, para no considerar los detalles para r pequeña. Esclareceremos ahora cuál R_0 es la apropiada.

Para esto regresamos un poco a las ideas clásicas de Barker y Berry y a un esquema muy simplificado del fenómeno.

Si consideramos clásicamente que la interacción (IPC) entre el electrón dispersado y el eyectado se produce justo en el radio R del estado doblemente excitado (que para el He en el estado $(2p^2)^1D$ con $n=2$ será el radio de Bohr para la orbita con $n=2$, aproximadamente) y el electrón está a una distancia $r=vt$ (con $r \gg R$ ya que se estudian los electrones eyectados i.e. no hay captura) tendremos que la interacción es proporcional a

$$1/r = 1/vt \dots \text{(III.16)}$$

según Barker y Berry. La velocidad del electrón para 1 eV, que es el

orden de magnitud de E_1 para la cual se observa IPC es

$$v \sim 5.9 \times 10^6 \text{ m/seg} \quad \dots\dots(III.17)$$

Con esta velocidad, el electrón dispersado se encuentra, en un tiempo

$$\tau = 9.1 \times 10^{-15} \text{ seg} \quad \dots\dots(III.18)$$

a una distancia del orden de

$$r \sim 54 \text{ \AA} \quad \dots\dots(III.19)$$

del átomo blanco.

Esta distancia resulta muy parecida a la distancia $r = 5 \text{ nm}$ en la cual Barker y Berry postulan válido su modelo para cuando estudian electrones eyectados o dispersados. De hecho, en el análisis de los electrones eyectados, Read menciona que se trabaja en el intervalo en donde las distancias varían de 20 \AA a 500 \AA .

Esto nos da una idea de lo que se considera una distancia lejana al átomo. Y éstas se utilizan en los modelos aplicados a los electrones eyectados o dispersados.

Trabajando de una forma análoga en el estudio de producción de Rydbergs, tenemos que la mayor pérdida de energía del electrón dispersado ocurre cuando este electrón queda capturado en un estado de n baja. En nuestro caso ésto implica $n=4$. La energía de amarre para este estado es del orden de

$$E_b \sim -3.4 \text{ eV} \quad \dots\dots(III.20)$$

Como las pérdidas de energía se encuentran experimentalmente que siguen la relación

$$\sqrt{\Delta E} = 0.57 E_1^{-1.2} \quad \dots\dots(III.21)$$

tenemos que

$$E_1 - \sqrt{\Delta E} = E_b \quad \dots\dots(III.22)$$

$$y \quad E_1 - 0.57 E_1^{-1.2} \approx -3.4 \text{ eV} \quad \dots\dots(III.23)$$

para $n=4$

lo que daría la energía E_1 más pequeña para la cual tendremos producción de estados Rydbergs.

Esto aproximadamente da $E_1 \sim 0.215 \text{ eV}$

Repetiendo el procedimiento de calcular la distancia a la cual se encuentra el electrón con energía E_1 en un tiempo τ después de la excitación, resulta

$$r \sim 6.6 \text{ \AA} \dots\dots\dots(\text{III.25})$$

que debe de ser el orden de magnitud que se debe tomar para R_0 .

Por otra parte, si el electrón proyectil queda atrapado en un estado s Rydberg, el radio promedio al cual se encuentra es aproximadamente

$$r = \frac{n^2 a_0}{Z} = \frac{16 a_0}{2} = 4 \text{ \AA}$$

Ahora ya estamos en posibilidades de graficar las curvas de $q_{nl}(k)$ contra E_l y estas se muestran en la figura III.2

En todas las gráficas se ha tomado

$$E_l = \frac{k^2 k^2}{2m} \dots\dots\dots(\text{III.26})$$

y $\tau = 9.1 \times 10^{-15}$ seg. que es el tiempo de vida del estado $(2P^2)^1D$ del Helio. Se elige este estado ya que se espera que es el que menos interferencia sufra debido a la presencia de resonancias cercanas u otros efectos similares.

Se ha graficado la curva de q para $n=8$ para diferentes valores del corrimiento de fase d . Solo se dan cuatro valores de d en el intervalo de 0° a 180° , ya que $q(k)$ sólo cambia de signo cuando d aumenta en 180° .

Se elige tomar q y no su cuadrado P , ya que es más probable que los resultados experimentales reflejen la forma de q si es que existe interferencia coherente entre el proceso "shake down" y otros procesos para producción de estados Rydberg; y también si las amplitudes de los otros procesos son mayores que los del mecanismo "shake down".

Las curvas se normalizan de una forma tal que el máximo de ellas corresponda a la unidad. Se ve que las integrales de traslape $q(k)$ son oscilatorias y con longitud de onda que aumenta con k y con E_l . Las posiciones y las amplitudes relativas de las conspicuidades dependen del defasamiento d . Los cálculos para $l=1$ muestran que las integrales de traslape conservan la misma dependencia respecto a E_l . El cambiar l por una unidad tiene el mismo efecto, en las conspicuidades, que al cambiar d en 90° ; no obstante, las amplitudes relativas cambian más significativamente.

Las rápidas oscilaciones para pequeños valores de k y E_l serían difíciles de observar experimentalmente debido a la resolución del aparato, que se estima de 100 meV (FWHM); y para llevar a cabo una comparación más realista, las funciones $q_{nl}(k)$ se han convolucionado con una función gaussiana con un ancho de 100meV, y los resultados se muestran en la Fig III.3) denotados por $q_{nl}(k)$.

Para comparar este modelo con el experimento se toman las mediciones hechas por King et al (1975) de las funciones de excitación de Rydbergs que se miden a un ángulo de 0° para estados con números principales n de 3 a 8 y donde se ha hecho la suma para todos los valores de los números cuánticos S, L y J para cada valor de n. Esto último es también debido a la resolución del aparato de medición.

Se observa que las gráficas calculadas tienen las mismas formas que las obtenidas experimentalmente. Esto es más notable en el caso de n=8, en donde primero se tiene una depresión a 0.12 eV sobre la energía del estado $(2p^2)^1D$ (que está a 59.90 ± 0.02 eV) y luego una conspicuidad más ancha con un máximo a 0.31 eV sobre el nivel del estado autoionizante, seguido finalmente por otra depresión aún más ancha, a una energía mayor.

Se puede ver que esto coincide con los cálculos del modelo aunque las amplitudes y las posiciones de las conspicuidades no coinciden exactamente. Existe una coincidencia similar a la anterior, cuando se comparan las curvas para las distintas n. Se puede ver que estas similitudes disminuyen al tomar distintos valores de d. Y esto es algo que el modelo no puede aún explicar.

Un aspecto contrastante de este modelo respecto al modelo clásico, es que las estructuras que predice este modelo, son prácticamente insensibles a τ o T. El modelo también encuentra que las conspicuidades de las funciones $q_n(k)$ dependen del número cuántico n, aproximadamente como:

$$\sqrt{\Delta E} = (E_1 + BE_n)^m \sim E_1 \dots \dots \dots (III.27)$$

en donde BE_n es la energía de amarre del electrón Rydbergs en el estado excitado n y el exponente m se obtiene de la pendiente de las gráficas de $\log \sqrt{\Delta E}$ contra E_1 (Read 1974 y Smith et al 1974) resultando estar entre -0.2 y -0.3

Los cálculos de este modelo son aproximados en muchos aspectos. Mencionamos las aproximaciones más importantes:

i) Tal vez la aproximación más importante sea el hecho de que la correlación en el tiempo, entre el electrón dispersado y el decaimiento del estado autoionizante, sólo se ha tomado en cuenta al incluir el término exponencial en las funciones de onda saliente.

ii) se usan sólo las formas asintóticas de las funciones de onda y no se toman en cuenta los detalles de su comportamiento para r pequeña. (aunque notamos que esto no debe ser significativo para n grande).

iii) se ha usado la aproximación repentina y por ende se prescinde de que el electrón eyectado tiene, de hecho, una velocidad finita; además de prescindir de los detalles de la interacción entre

los electrones.

iv) la sección transversal para el estado autoionizante se toma constante en el intervalo de energía estudiado (en ausencia del efecto "shake down"). Hay que notar que esta misma suposición se hace en el modelo de Barker y Berry y en el tratamiento de Nienhaus y Heideman.

v) No se toma en cuenta la interferencia con mecanismos directos y/o resonantes.

Aún con estas aproximaciones, el modelo llega a explicar de una forma aceptable, las observaciones experimentales; lo cual nos sugiere que el modelo es una buena primera aproximación al fenómeno.

El modelo también hace predicciones acerca de las amplitudes relativas de las conspicuidades. En general, su amplitud aumenta para valores grandes de E_1 a medida que τ aumenta. Lo cual es de esperarse debido a la presencia del término exponencial. No obstante, no se hacen comparaciones de amplitudes con el experimento, debido a que las amplitudes experimentales son muy sensibles a la resolución en energía del aparato y ya que el modelo no toma en cuenta la variación con la energía de la sección transversal parcial o total de excitación del estado autoionizante.

Además se espera que, como el trabajo se llevó a cabo en el intervalo de energías de 0.06 a 0.47 eV sobre el nivel de autoionización, la contribución dominante estará dada por funciones de onda del tipo S (para dispersión) y por esto se han tomado los cálculos para $l=0$.

Por último, el modelo también predice los cambios de energía en los electrones eyectados (Read 1977).

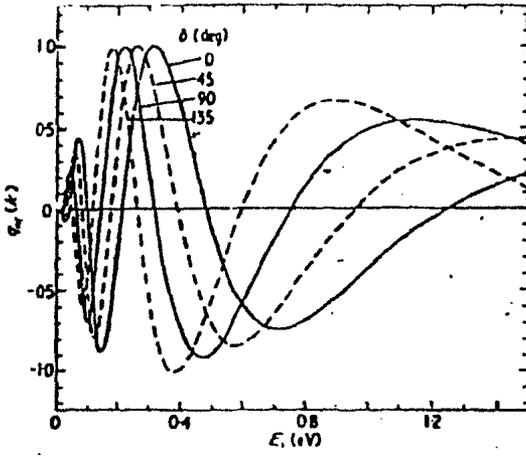


Fig. III.2

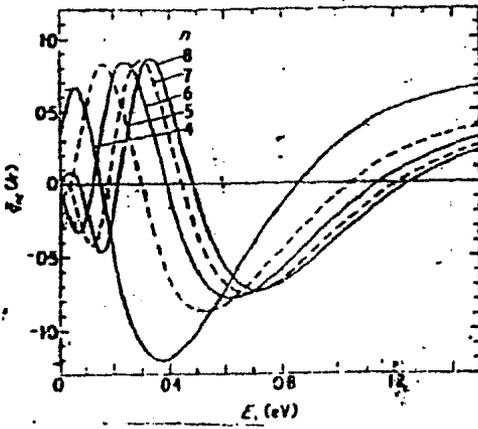
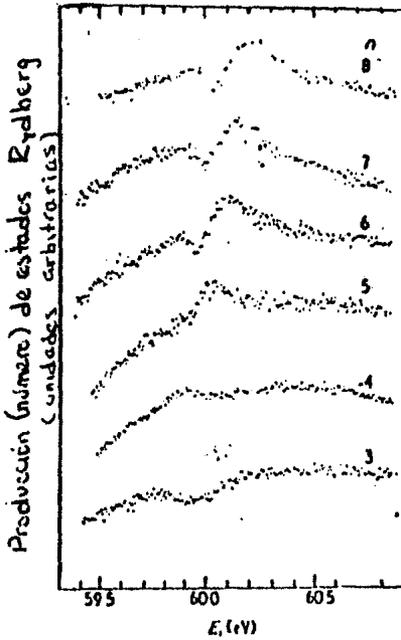


Fig. III.3



IV. INCLUSION DEL EFECTO DEL CAMPO ELECTRICO

SOBRE EL DECAIMIENTO DEL ESTADO AUTOIONIZANTE

Antes de empezar con la modificación que planteamos al modelo "Shake Down", resumamos un poco las ideas más importantes de los capítulos anteriores.

Primeramente, cuando uno efectúa experimentos en colisiones atómicas y trabaja en un intervalo de energía cercano a un nivel de autoionización del átomo blanco (pensando en la colisión $e^- + He$) se observa que:

i) Existen corrimientos en las energías de los electrones excitados y dispersados, respecto a las mediciones espectroscópicas. Esto se manifiesta en desplazamientos en el umbral del nivel autoionizante.

ii) Para energías de dispersión, E_1 , pequeñas, aparecen varias conspicuidades en la sección transversal para la producción de estados Rydberg.

iii) Los corrimientos en energía, ΔE , dependen de la energía E_1 del electrón dispersado. Y experimentalmente se encuentra que la forma de esta dependencia es

$$\Delta E = a E_1^m \dots\dots\dots(IV.1)$$

El modelo "Shake Down" se basa en las siguientes suposiciones:

iv) los corrimientos en energía son debidos a la interacción entre el electrón excitado por el átomo autoionizante y el electrón dispersado. Este es el fenómeno de Interacción Posterior a la Colisión.

v) Se toma la analogía del proceso "shake down" con el efecto Auger. Se usan las formas asintóticas de las funciones de onda y se ignoran los efectos para r pequeñas.

vi) Las funciones de onda se ven modificadas por un término exponencial para permitir el decaimiento del estado autoionizante.

Ahora bien, como se mencionó en el capítulo anterior, la aproximación más importante del modelo "Shake Down" es la mencionada en el inciso vi) en donde los detalles de la autoionización del átomo no se toman en cuenta. Es decir, se omite la interacción átomo-electrón dispersado.

También se ha mencionado que para el caso de producción de

estados Rydberg, el estado autoionizante decae en presencia del campo eléctrico del electrón dispersado que se encuentra muy cercano, y que esto afectará la forma del decaimiento del estado. Esta observación ya había sido resaltada desde los experimentos de Barker y Berry.

Nos pareció claro, entonces, que la insensibilidad del modelo "shake down" al tiempo de vida del estado autoionizante se debía a la forma en que éste era tomado en cuenta en el modelo. Sería extraño que la presencia del electrón dispersado no afectara a este tiempo de vida y, en consecuencia, proponemos que el modelo debe modificarse de la manera que se indica a continuación. Esquemáticamente tendremos a un estado que se autoioniza en presencia de un campo eléctrico que, a primera aproximación, es constante (mas no uniforme) ya que la velocidad (o energía) del electrón dispersado es pequeña y el tiempo de vida del estado autoionizante es corto.

Sabemos que si el estado autoionizante decae en el espacio libre, la forma del decaimiento será

$$e^{-t/\tau}$$

Entonces esperamos que en presencia del campo eléctrico esta forma se vea modificada. De hecho se observa experimentalmente que el tiempo de vida de un estado excitado, en general, disminuye con la magnitud del campo eléctrico, (Smirnov 1981). Es decir, el estado excitado decae más rápidamente en presencia del campo eléctrico.

Recordemos que la forma exponencial del decaimiento se obtiene suponiendo que la razón de decaimiento es proporcional al número de átomos presentes en el instante t . Es decir:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\lambda N(t) \quad \dots\dots\dots(IV.2)$$

donde $N(t)$ es el número de átomos al tiempo t que aún no decaen. Entonces si $N(0)=N_0$ y τ es el tiempo de vida del átomo, tendremos

$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau} \quad \dots\dots\dots(IV.3)$$

La relación de la constante de decaimiento y el tiempo de vida media τ se obtiene inmediatamente de la condición de que para $t = \tau$, $N = N_0/e$. De aquí que

$$N_0 e^{-1} = N_0 e^{-\lambda \tau}$$

así que

$$\lambda = 1/\tau$$

y como se ve, la constante λ de decaimiento está íntimamente ligada con el tiempo de vida del estado.

Con las ideas mencionadas anteriormente es obvio que la λ usada en el modelo "Shake Down" debe depender del campo provocado por el electrón dispersado.

Así pues, proponemos que

$$\lambda = \lambda(E) \quad \dots\dots\dots(\text{IV.4})$$

donde hemos denominado E como el campo eléctrico provocado por el electrón dispersado.

Ahora, la relación (IV.2) tendrá la forma

$$\frac{dN(t)}{dt} = \lambda(E)N(t) \quad \dots\dots\dots(\text{IV.5})$$

y procediendo análogamente al desarrollo anterior tenemos

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda(E)t} \quad \dots\dots\dots(\text{IV.6})$$

Ahora investigamos cuál será la forma funcional que tendrá $\lambda(E)$ y para esto recurrimos a las observaciones experimentales mencionadas en las cuales mientras mayor la magnitud del campo, menor será el tiempo de vida del estado en cuestión.

Por lo tanto proponemos que, en primera aproximación, tendremos

$$\lambda(E) = \lambda_0 + aE \quad \dots\dots\dots(\text{IV.7})$$

con a una constante positiva y

$$\lambda_0 = 1/\tau$$

en donde τ es el tiempo de vida del estado autoionizante, en ausencia del campo.

La forma de E se toma como la magnitud del campo provocado por el electrón dispersado en la posición del átomo doblemente excitado y será

$$E = \frac{1}{r^2} \dots\dots\dots(\text{IV.8})$$

en unidades atómicas.

Con estas ideas en mente, podemos incidir directamente en el término exponencial con el cual se modulan las funciones de onda ψ_{kl} y lo obtenemos ahora de la siguiente manera

$$e^{-\lambda(E)t} = e^{-(\lambda_0 + aE)t} = e^{-\left(\frac{1}{r} + aE\right)t} = e^{-\frac{t}{r} - aEt} \dots\dots(\text{IV.9})$$

tomando, como se desarrollo en el capítulo anterior, $r=vt$ y $v=k$ en unidades atómicas y usando la ecuación (IV.8) para E se obtiene

$$e^{-\lambda(E)t} = e^{-\frac{r}{2\epsilon k} - \frac{a r}{2k} \frac{1}{r^2}} = e^{-\frac{1}{2k} \left(\frac{r}{\epsilon} + \frac{a}{r} \right)} \dots\dots(\text{IV.10})$$

El primer sumando del exponente es simplemente el término original del modelo; mientras que el segundo sumando es precisamente el adreñado debido a la presencia del campo del electrón dispersado.

Como este término exponencial sólo afecta a las funciones de onda del electrón dispersado, podemos reconstruir el modelo incluyendo esta nueva exponencial, lo que nos resulta que (para $l=0, d=0$ y He)

$$Q_{+n0}(k) = - \left[\left(\frac{4}{n} \right)^3 \frac{(n-1)!}{2n (n!)^3} \right]^{1/2} \int L_n(\alpha r) \frac{\sin kr}{r} e^{-\frac{r}{2\epsilon k} - \frac{a}{2kr^2}} r^2 dr \dots\dots(\text{IV.11})$$

con $\alpha = \frac{2Z}{n}$ y $a \neq cte > 0$ en unidades atómicas.

y $L_n(\alpha r)$ el polinomio asociado de Laguerre.

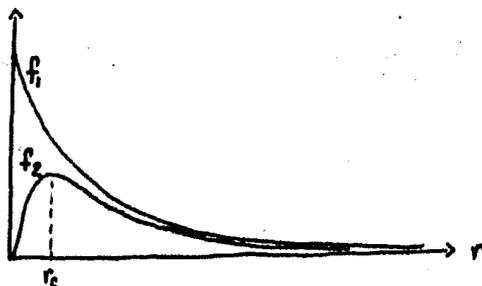
Es interesante hacer notar que esta forma exponencial adreñada, se asemeja a la forma obtenida en el tratamiento que hace Smirnov(1981) con estados Rydbers, cuando éstos se encuentran en

campos eléctricos constantes y uniformes. En su desarrollo, Smirnov obtiene que la frecuencia de decaimiento de los estados Rydberg, en presencia de un campo eléctrico uniforme, es proporcional a la exponencial de la magnitud del campo aplicado. No obstante estas similitudes, los tratamientos hechos aquí son completamente diferentes a los llevados a cabo por Smirnov.

Analicemos, ahora, cualitativamente la modificación recién propuesta. Se ve directamente de (IV.10) que el término exponencial será prácticamente igual al del modelo "Shake Down" para distancias grandes, es decir, el nuevo término sólo es importante para r pequeñas. Esto es de esperarse ya que para r pequeñas el electrón dispersado está cerca del estado autoionizante y el campo que este último presencia es relativamente grande. Mientras que para r grandes el campo sobre el estado autoionizante será mucho menor y, de hecho, no jugará un papel importante en el proceso. Todo esto está de acuerdo con lo esperado en el esquema físico planteado. Vemos que la modificación propuesta presenta aspectos más finos sobre la interacción que la que se presenta en el modelo original.

La constante a es la que toma el papel de indicar qué significa r grande o pequeña y se utiliza como un parámetro de ajuste.

Es obvio que si el efecto del campo es de segundo orden respecto a las consideraciones del modelo original, uno esperaría que la magnitud del término agregado sea menor a la del término original. Por ende, suponemos en este desarrollo que el término agregado presenta una corrección de, cuando menos, segundo orden. Encontramos que la exponencial decreciente que da la forma del decaimiento del estado autoionizante, f_1 , se ve modificada substancialmente para r pequeñas cuando uno incluye el término dependiente del campo, f_2 , como se muestra en la figura. Se observa que existe una r crítica a partir de la cual, las formas f_1 y f_2 difieren significativamente. Esta r crítica depende precisamente del parámetro a .



De un análisis directo se encuentra que

$$r_c = \sqrt{a\tau} \quad \dots\dots\dots(IV.12)$$

La dependencia con a era de esperarse, como se mencionó anteriormente, ya que la constante a refleja el límite de cuándo el

campo del electrón empieza a ser significativo en el proceso

Aunado a todo lo anterior, el término agregado modula las amplitudes de las crestas o valles en la integral de traslape q_{nl} y estas modulaciones dependen del valor del parámetro a . Esto es algo muy interesante ya que dentro de los resultados del modelo original, no se hacen suposiciones ni comparaciones con el experimento de las magnitudes de las conspicuidades, y se menciona que esto es algo que aun el modelo no ha podido explicar.

Aquí obtenemos que el término agregado contribuye, cuando menos parcialmente, a modular estas amplitudes mediante el parámetro a .

Esto se ve muy claramente en las gráficas mostradas en la figura IV.2 en donde hemos calculado $q_{60}(k)$ para $n=6$, $l=0$ y $d=0$. En el primer caso, $a=0$, se obtiene la curva del modelo original, mientras que en el segundo caso se calcula numéricamente la integral de traslape pero ahora incluyendo el nuevo término y donde hemos usado el valor de $a=4$ ya que éste es el que más se aproxima a los datos experimentales.

Nótese como la modulación de las amplitudes es mayor para energías pequeñas (p.ej. para la primera depresión) mientras que para energías mayores esta modulación es menos significativa. También se puede apreciar que las amplitudes relativas de las conspicuidades se ven afectadas de una manera que sigue más de cerca a los datos experimentales que en el modelo original (ver funciones de excitación cap. III)

Otra observación que se puede hacer es que las posiciones de las conspicuidades varían ligeramente al agregar el nuevo término, siendo la variación mayor para energías E_l pequeñas.

Para ver si existe algún comportamiento sistemático de la constante a , hemos graficado las curvas $q_{50}(k)$ y $q_{70}(k)$ las cuales se muestran en las figuras IV.3 y IV.4. De nuevo se pueden hacer las mismas consideraciones anteriores para estas gráficas pero lo que es más importante es que parece ser que mientras menor es la n del estado Rydberg, mayor debe ser la constante a que se utilice. Esto está de acuerdo con el esquema físico planteado donde mientras menor el número cuántico n , mayor la energía de amarre lo cual a su vez nos indica que el electrón dispersado tuvo poca energía E_l después de la excitación y estuvo muy cercano al átomo autoionizante. Entonces el efecto del campo eléctrico del electrón dispersado debe de ser mayor en este caso y esto es lo que se observa de las gráficas.

Hacemos notar que los valores de a son difíciles de definir ya que como se ve de los datos experimentales, la definición de las conspicuidades es bastante complicado (p.ej. para $n=3$ y 4.) y se ha tomado el valor entero de a sólo por comodidad. Por eso resaltamos que el análisis llevado a cabo aquí es sólo cualitativo y es evidente que se debe hacer un análisis más exacto a espera de mejores datos experimentales.

Es evidente entonces que la modificación al modelo contribuye de una manera muy significativa a explicar más en detalle el fenómeno que

se estudia y que el parámetro α juega un papel muy importante en esta modificación.

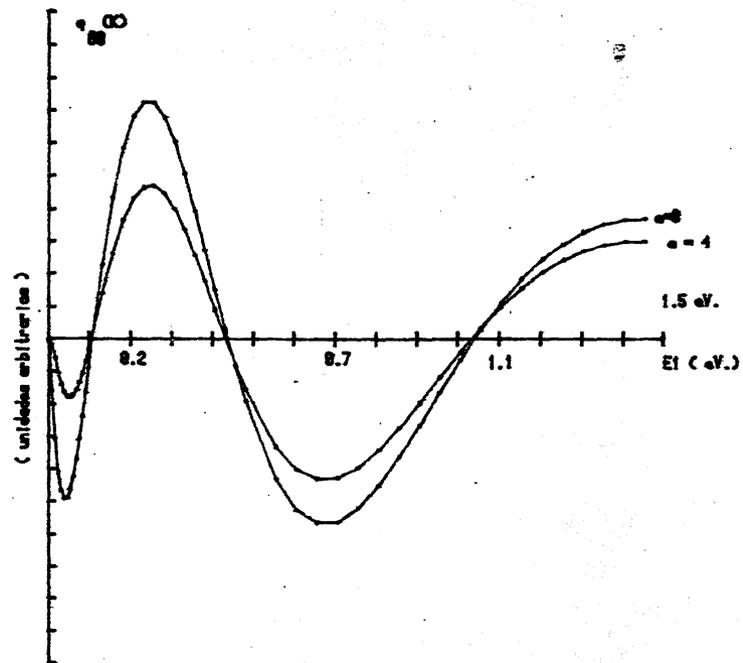


Fig. IV.2

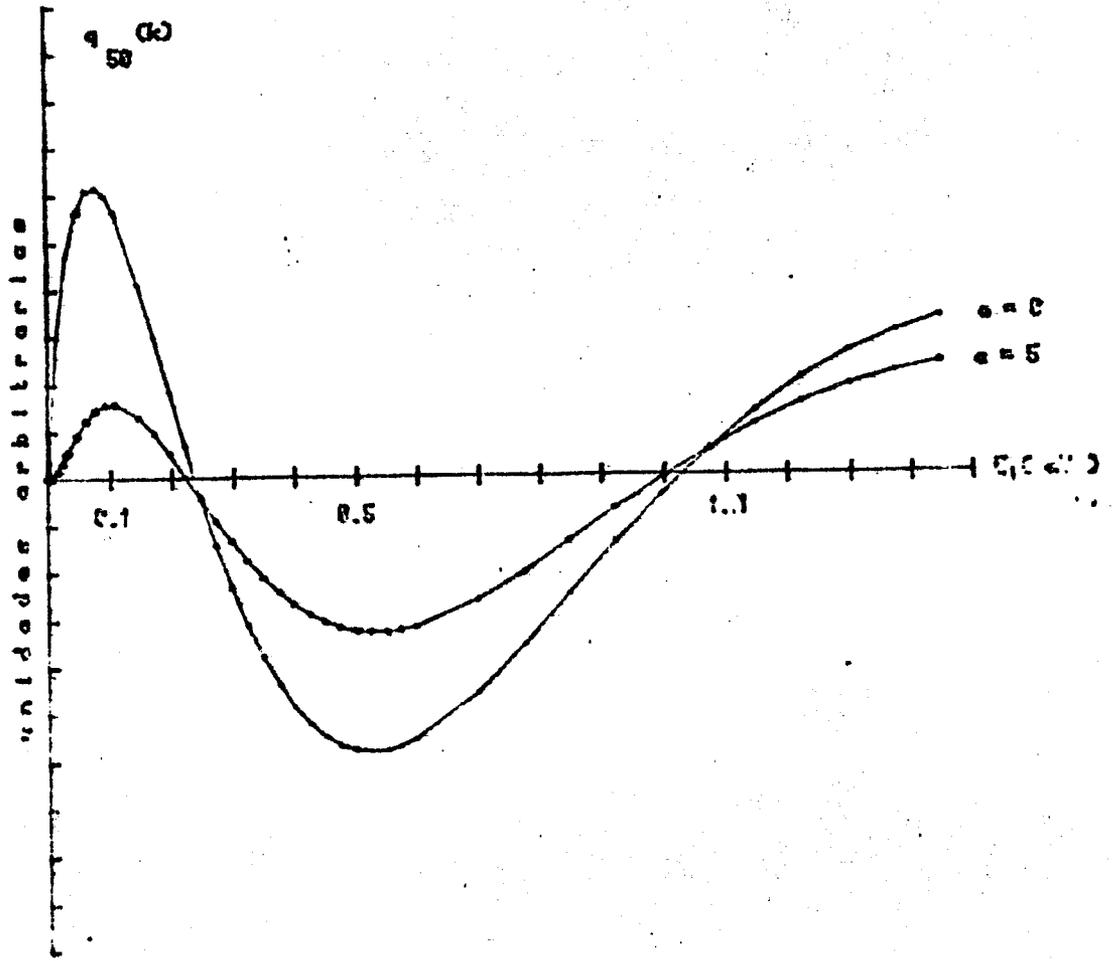


Fig. IV.3

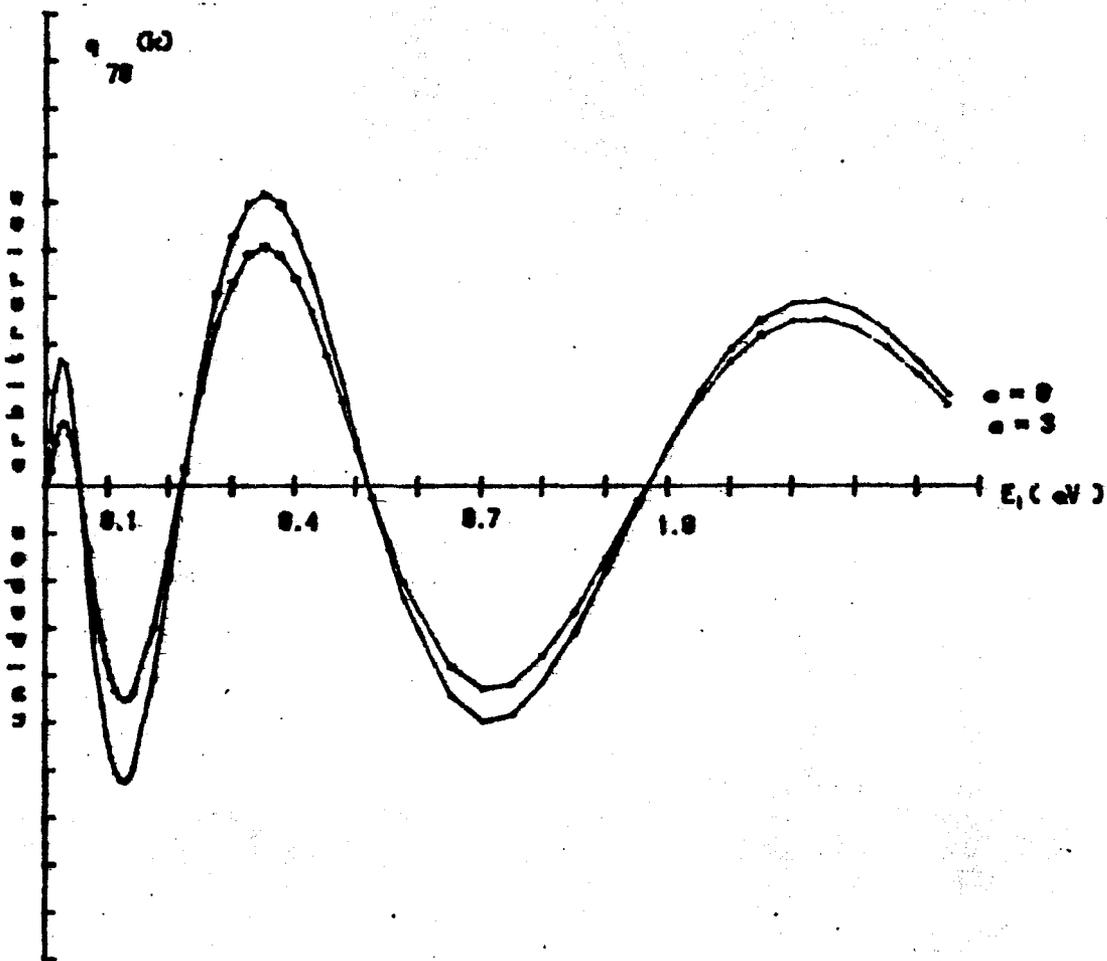


Fig. IV.4

CONCLUSIONES

Hemos un breve resumen de lo que se ha hecho hasta aquí. Primeramente sabemos que cuando uno efectúa experimentos de colisión de electrones con átomos de helio, estando la energía de los electrones incidentes muy cercana a la energía de un estado autoionizante del helio, tendremos que después de que se excita al átomo blanco a este nivel doblemente excitado el electrón incidente tendrá poca energía y estará relativamente cercano al átomo que está en proceso de autoionización. Al autoionizarse, el átomo eyectará a un electrón y entonces tendremos un sistema en el cual coexisten tres partículas cargadas (ión positivo He^+ residuo de la autoionización, electrón eyectado, electrón dispersado) y estas tendrán interacciones coulombianas entre ellas provocando intercambios en energía y posiblemente momento angular. Estas últimas interacciones o intercambios en energía entre dichas partículas, se mide experimentalmente de varias formas obteniéndose distintas conspicuidades como las que se han mencionado en el capítulo I (figs. 2 y 3). Esto es lo que se llama la Interacción Posterior a la Colisión (IPC) que por primera vez se observó por Barker y Berry (1966).

Se han hecho varios estudios tanto teóricos como experimentales y de los primeros tenemos distintos modelos que tratan de explicar tales conspicuidades.

Por un lado se ataca el problema de IPC estudiando ya sea a los electrones eyectados o a los electrones dispersados. Por otro lado se se estudia la producción de estados Rydbers mediante el proceso mostrado en la figura 1 del capítulo I. Esto último es debido a que experimentalmente se encuentran varias conspicuidades en la producción de estados Rydbers y esto se atribuye también a la IPC ya que en los intercambios de energía entre las tres partículas cargadas puede ocurrir que la energía del electrón dispersado sea tan pequeña que ceda más energía que la energía cinética que posee, de tal manera que puede ser capturado por el ión positivo residuo de la autoionización. Este es un efecto muy similar a lo que ocurre en espectroscopia Auger y precisamente en el modelo "Shake Down" se utilizan estos mismos conceptos para atacar el problema de IPC en el caso de producción de estados Rydbers.

Del desarrollado en el capítulo IV hemos comprobado que este modelo predice bastante bien a las curvas experimentales, no obstante se ha mencionado que el modelo conlleva varias aproximaciones. Hemos atacado la aproximación considerada una de las más importantes la cual supone que el átomo se autoioniza como si estuviera en el espacio vacío. Es decir se prescinde del efecto de la presencia del electrón dispersado sobre la forma del decaimiento del estado autoionizante, en especial sobre su tiempo de vida. Y esto es algo que lleva a ser muy importante ya que, como se mencionó en el capítulo I, el tiempo de vida de un átomo excitado tiende a disminuir cuando está en presencia de un campo eléctrico.

Para tomar en cuenta este efecto, primeramente se revisa la

manera de obtener la forma funcional del decaimiento del estado autoionizante y dentro de este análisis se plantea que la constante de decaimiento debe de depender del campo eléctrico provocado por el electrón dispersado que se encuentra en las vecindades del estado autoionizante. La dependencia se supone lineal a primera aproximación y esto conduce a una distinta forma funcional para el decaimiento del estado autoionizante. La diferencia se da sólo para cuando el electrón dispersado se encuentra cercano al átomo y se reduce a la forma del modelo original cuando el electrón se encuentra relativamente alejado del átomo.

En cuanto a la comparación con el experimento se muestra que se puede obtener una mejor concordancia con las amplitudes relativas de las conspicuidades experimentales y esto nos lleva a concluir que la corrección planteada debe de ser importante dentro del fenómeno que se estudia. Además se obtiene una característica sistemática en la constante de proporcionalidad que está de acuerdo con el esquema físico planteado. Esta característica es que se debe de incluir un mayor efecto del campo (mayor constante a) mientras menor sea el número n del estado Rydberg, ya que para estos casos el electrón dispersado estará mucho más cercano al átomo autoionizante.

Probablemente lo más importante que se puede mencionar aquí es que sólo se está corrigiendo una de las varias aproximaciones hechas en el modelo "Shake Down". No obstante, la corrección que se ataca en este trabajo es una de las más importantes de todas las mencionadas en el capítulo III. Precisamente por esta razón se tomó la iniciativa de tratar de modificar al modelo incluyendo esta corrección.

Al mismo tiempo hacemos notar que la observación hecha por King et al (1975) en la cual mencionan que las integrales de traslape $qnl(k)$ son prácticamente insensibles al tiempo de vida del estado autoionizante, ya no es válida al incluir la modificación propuesta en este trabajo. De hecho, no sólo se ve afectado el tiempo de vida del estado autoionizante, sino que la misma forma funcional del decaimiento del estado sufre una modificación muy notable, como se puede apreciar de la figura IV.1.

En sí, el modelo "Shake Down" puede predecir cualitativamente las formas de las curvas y las posiciones de las conspicuidades. Al adresar la modificación, se está dando más detalladamente las formas de estas curvas y se obtiene un mayor acuerdo con los datos experimentales. La importancia de esto sólo se puede juzgar al comparar los cálculos realizados en este trabajo, de una manera más amplia, a otros sistemas atómicos.

De hecho, el trabajo presentado aquí es sólo el principio de una investigación más amplia de este proceso en la que no sólo se incluye al Helio, sino al Neón y al Arsén, de los cuales también se han obtenido datos experimentales análogos a los mencionados para el Helio (King et al 1975, Spence 1978); siendo que en estos últimos es mucho más acertada la definición de las posiciones de las conspicuidades, que la que se puede lograr para las funciones de excitación de estados Rydberg para el He en el que las posiciones son muy difíciles de definir, como se pudo apreciar anteriormente.

Por último es interesante mencionar que la modificación planteada, difícilmente se podría extender para el caso cuando se efectuaran experimentos en los cuales se observan ya sea a los electrones eyectados o a los electrones dispersados. Esto se debe a que en estos casos las energías incidentes son mayores que las involucradas en la producción de estados Rydberg y por ende los electrones dispersados se encontrarán mucho más alejados del átomo autoionizante, lo que implicaría que la forma exponencial del decaimiento del estado no se vería afectada.

B I B L I O G R A F I A

- 1.- J.Franck, W.Grottrian, Z.Physik 4,89 (1921)
- 2.- U.Fano Phys. Rev. 124,1866 (1961)
- 3.- G.J.Schulz Phys. Rev. Lett. 10,104 (1963)
- 4.- N. Bohr Nature 137,351 (1936)
- 5.- H.Feshbach Ann.Phys. (N.Y.) 5,357(1958) y 19,287(1962)
- 6.- G.Gamow, Z.Phys. 51,204(1928)
- 7.- M.A.Biondi, A.Herzenbers y C.E.Kuyatt, Physics Today, 44-49, Oct. 1979.
- 8.- H.S.Taylor, Nazaroff y Grolebiebski, J.Chem.Phys. vol.45,8,2872-2888 (1966)
- 9.- Ohanian y Ginsburg, AJP, vol 42,310-315 (1974)
- 10.- G.Herzenbers, "Atomic Spectra and Atomic Structure" Dover 1937.
- 11.- R.D.Cowan, "The Theory of Atomic Structure and Spectra" Univ.Calif.Press, 1981.
- 12.- D.Spencer, Comments Atom.Mol.Phys.vol5,no.6,159-172(1976)
 - Phys.Rev.A 11,1539(1975).
 - Phys.Rev.A 12,2353(1975).
 - J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.vol.11,no.7 (1978)
 - J.Chem.Phys.,vol.68,no.6,2980 (1978)
- 13.- G.C.Kins, F.H.Read y R.C.Bradford, J.Phys.B:Atom.Molec.Phys. vol.8,no.13 (1975).
- 14.- P.J.Hicks, S.CveJanovic, J.Comer, F.H.Read, J.M.Sharp, Vacuum 24,573-580 (1974).
- 15.- R.K.Nesbet, Phys.Rev.A., vol.14,no.4,1326-1332 (1976)
- 16.- R.B.Barker y H.W.Berry, Phys.Rev. 151,14-19 (1966).
- 17.- G.Nienhuis y H.G.M.Heideman, J.Phys.B:Atom.Molec.Phys. vol.8,no.13 (1975).
- 18.- P.J.Hicks y J.Comer, J.Phys.B:Atom.Molec.Phys. 8,1866-79 (1975).
- 19.- P.Marchand y J.Cardinal, Can.J.Phys. 57,1624-1633 (1979)
- 20.- H.W.Dawson y R.Gomez, J.Phys.B:Atom.Molec.Phys. 16,1481-1501 (1983)
- 21.- F.H.Read, Radiat.Res. 64,23-36 (1975)
- 22.- L.Pauling e E.Bright, "Introduction to Quantum Mechanics" McGraw-Hill (1935)
- 23.- T.A.Carlson, Radiat.Res. 64,53-69 (1975)
- 24.- F.H.Read, J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.,vol.10,no.6(1977)
 - J.Phys.B:Atom.Molec.Phys. 8,1034-40 (1975)
 - Proc. 4th. Conf. on Atomic Physics, Heidelberg 1974.
- 25.- C.Bottcher, "Electron an Photon Interactions with Atoms" (New York:Plenum) 1975
- 26.- A.J.Smith, P.J.Hicks, F.H.Read, S.CveJanovic, G.C.M.Kins, J.Comer, J.M.Sharp, J.Phys.B:Atom.Molec.Phys. 7,L496-501 (1974)
- 27.- A.Ramos O., Tesis Fac Ciencias UNAM, 1984
- 28.- Z.Smirnov, Sov.Phys.Usp. 23(8),450-471, Aug.1981
- 29.- R.Bayfield, American Scientists, vol.71, Jul-Aug,375-383 (1983).
- 30.- J.M.Blatt y V.F.Weisskoff, "Theoretical Nuclear Physics" John Wiley & Sons, 1952.