

00362  
rej.  
3

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO  
FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DE RESONANCIAS EN  
Ne, Ar y Kr POR MEDIO DE  
ESPECTROSCOPIA ELECTRONICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)  
PRESENTA

VIVIANNE MARQUINA FABREGA

MEXICO D.F.

1983

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



## **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.

## INTRODUCCION

Desde hace algunos años ha habido mucho interés en el estudio de "resonancias" en sistemas atómicos y en la última década se ha realizado una gran cantidad de trabajo teórico y experimental en este tema. Sin embargo, poco se ha hecho en la región energética correspondiente a los estados doblemente excitados o de excitación de electrones de la "coraza interna". El propósito de este trabajo es el de estudiar precisamente los estados resonantes observados en esta región energética en los gases Ne, Ar y Kr.

Para poder hacer una interpretación de los datos experimentales existentes, se requiere de un conocimiento de la teoría de dispersión y de las energías de los estados excitados mencionados. En consecuencia, en los dos primeros capítulos de esta tesis se hace una revisión de la teoría de dispersión, haciendo énfasis en los fenómenos de resonancia. El material que se expone fue producto de una recopilación bibliográfica y la intención que se persigue es evitar que las personas interesadas ten

gan que "rastrear" en varios textos la información de importancia. Mas aún, existe un tratamiento alternativo del problema de las resonancias, desarrollado por U. Fano en 1961, que normalmente no aparece en los textos, cuyos resultados son ampliamente utilizados en la literatura de este tema. Parte del capítulo II se emplea en exponer este planteamiento. Desde luego, las personas familiarizadas con la teoría de dispersión y el fenómeno de resonancias pueden omitir la lectura de este material.

La información existente en relación a las energías de los estados excitados proviene principalmente de datos espectroscópicos muy precisos. Desgraciadamente, la información existente en relación a la excitación de electrones de la "coraza interna" es muy escasa, y prácticamente no hay información para doble excitación. Esto hace que, en muchos casos, la interpretación de las resonancias tenga que hacerse sin este conocimiento (es decir, sin el conocimiento de la energía del estado "padre"; ver capítulo III).

El tercer capítulo constituye la parte principal de este trabajo. En la primera sección de este

se hace una breve explicación del dispositivo experimental utilizado, cuyo objetivo no es entrar en el detalle de la instrumentación, sino más bien de aclarar, que es lo que se está "midiendo".

A continuación se discuten los mecanismos físicos que pueden intervenir en la región energética considerada, así como el efecto de la interacción posterior a la colisión, que puede afectar la interpretación de los espectros obtenidos. En particular, se exponen las razones que condujeron a desechar, en estos experimentos, la posibilidad de que las conspicuidades\* observadas fueren debidas al decaimiento de estados doblemente excitados autoionizantes. Por último, se hace una clasificación de los estados asociados con las conspicuidades observadas, basándose en los resultados de la teoría de dispersión, indicando, además, que existen otros procedimientos de clasificación que no se utilizaron por considerarlos inadecuados o desligados del tratamiento de este trabajo.

\* Se utiliza conspicuidad como traducción de feature

# CAPITULO I

## Teoría de Dispersión en Colisiones Elásticas

### Introducción

En experimentos de dispersión de un haz de partículas, la situación física a estudiar es la siguiente: se lanza un haz de partículas con ímpetu y energía controlados (proyectiles) contra un blanco (cuya estructura se conoce). Debido a las colisiones, (que dan lugar a diferentes procesos, dependiendo si la colisión es elástica o inelástica), los proyectiles son dispersados y salen del blanco en diferentes direcciones.

Independientemente del tipo de proceso, las partículas que emergen como resultado de la interacción, pueden ser registradas por detectores adecuados colocados muy lejos de la región donde ocurre el proceso (a la cual se le llama región asintótica). La información que se obtiene del experimento es el número de partículas dispersadas que llegan por unidad de tiempo a un área  $dS$  colocada a una distancia  $r$  de las partículas blanco. Con estos datos, los que constituyen el material para iniciar el análisis teórico del problema.

## §1 Teoría de dispersión de un haz de partículas por un centro de fuerza

Para propósitos de cálculo se supondrá que solo hay un tipo de centro dispersor. El número de partículas que inciden en  $dS$  es proporcional al área de detección, o sea a  $dS$ , e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia  $r$ ; es decir, proporcional al ángulo sólido  $d\Omega$  subtendido por  $dS$ . Por otra parte, el número de partículas dispersadas en el ángulo sólido  $d\Omega$ , es proporcional a la corriente por unidad de área del haz incidente. Supóngase que en el haz incidente cruzan  $N$  partículas por unidad de área y por unidad de tiempo; el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo, a un ángulo con respecto al haz incidente, en el ángulo sólido  $d\Omega$ , será:

$$n = NI(\theta)d\Omega. \quad (I.1.1)$$

De la relación (I.1.1) es claro, con un simple análisis dimensional, que  $I(\theta)d\Omega$  tiene dimensiones de área; esta cantidad se conoce como sección transversal efectiva de dispersión en el ángulo sólido  $d\Omega$ , ó sección transversal diferencial.

Supóngase que el átomo\* se encuentra en el origen de coordenadas, y que el potencial  $V(r)$  que siente un electrón a una distancia  $r$  del átomo tiende a cero más rápido que  $1/r$  (es decir se excluye el caso coulombiano). Las coordenadas cartesianas del electrón se denotarán con  $(x, y, z)$ , donde el eje  $z$  se elige como referencia para medir  $\theta$ .

Un haz electrónico que se mueve de izquierda a derecha a lo largo del eje  $z$ , con una velocidad  $v$ , se puede representar mediante la onda plana

$$\psi_i = \exp(i k z), \quad (\text{I.1.2})$$

en donde  $k$  es el número de onda, y se expresa como

$$k = \frac{p}{\hbar}. \quad (\text{I.1.3})$$

Cuando los electrones llegan al átomo, sufren una dispersión. Se propone que la amplitud de la onda

\* De aquí en adelante, se considerará que las partículas cargadas que inciden en el blanco son electrones y que estas son dispersadas por un potencial esféricamente simétrico. A la región donde este potencial es diferente de cero, se le denominará átomo



dispersada en el punto  $(r, \theta, \varphi)$  sea:

$$\psi_d \approx f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{I.1.4})$$

y el problema será determinar  $f(\theta)$ . Puesto que el número de partículas dispersadas es  $|\psi_d|^2$ , el número de partículas que llegan al detector en el tiempo  $dt$ , será

$$|\psi_d|^2 r^2 d\Omega v dt = |f(\theta)|^2 v d\Omega \quad (\text{I.1.5})$$

donde se hizo uso de la ecuación (I.1.4). Si se supone que el haz incidente es tal que solo llega una partícula por unidad de área por unidad de tiempo, entonces el flujo incidente es

$$\bar{J}_{inc} = \rho_{inc} \bar{v} = \bar{v} \quad (\text{I.1.6}) ..$$

de donde se concluye que, en la unidad de tiempo, la fracción promedio de partículas que inciden sobre un detector de abertura  $d\Omega$ , por cada partícula que incide sobre la unidad de área del blanco (es decir el número de partículas que llegan al detector por unidad de tiempo por unidad de flujo incidente), es:

$$\frac{|f(\theta)|^2 v}{\hbar^2} d\Omega = |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (\text{I.1.7})$$

y, comparando (I.1.7) con (I.1.4), se tiene:

$$I(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (\text{I.1.8})$$

El problema ahora, es encontrar una solución  $\Psi$  de la ecuación de Schrödinger que represente la onda incidente y la dispersada a grandes distancias del átomo. Como solución se propone

$$\Psi \approx e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta), \quad (\text{I.1.9})$$

que debe cumplir con la ecuación

$$\nabla^2 \Psi + [k^2 - U(r)] \Psi = 0 \quad (\text{I.1.10})$$

en donde

$$k = \frac{mv}{\hbar} \quad \text{y} \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r).$$

Como el problema tiene simetría axial, la solución

de (I.1.10) es de la forma

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) L_l(r) \quad (\text{I.1.11})$$

en donde  $L_l(r)$  debe cumplir la ecuación de onda radial

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dL_l(r)}{dr} \right) + \left( k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) L_l(r) = 0. \quad (\text{I.1.12})$$

Tomando

$$L_l(r) = r^{-1} G_l(r) \quad (\text{I.1.13})$$

(para quitar las discontinuidades esenciales en el origen) la ecuación (I.1.12) se reduce a:

$$\frac{d^2 G_l(r)}{dr^2} + \left[ k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] G_l(r) = 0. \quad (\text{I.1.14})$$

Como lo que interesa es la solución asintótica, se resolverá la ecuación (I.1.14) para  $r$  grande. Cuando  $r \rightarrow \infty$  los dos últimos términos de la ecuación (I.1.14) tienden a cero (ya que el potencial  $U(r)$  es de corto alcance)

y la solución asintótica de (I.1.14) tendrá la forma

$$C_2 \sim A \sin(kr + \epsilon). \quad (\text{I.1.15})$$

Así que la solución asintótica de (I.1.12), escrita en términos de una amplitud  $C_2$  y un corrimiento de fase  $\delta_2$ , será:

$$L_2(r) = \frac{C_2}{kr} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_2) \quad (\text{I.1.16})$$

y por tanto la solución asintótica de (I.1.10) es

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{kr} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) P_l(\cos\theta). \quad (\text{I.1.17})$$

Iguando (I.1.17) con la forma propuesta para la función de onda asintótica (I.1.9) y despegando  $f(\theta)$ , se tiene:

$$f(\theta) = -r e^{ik(z-r)} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{k} e^{-ikr} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) P_l(\cos\theta). \quad (\text{I.1.18})$$

Puesto que la amplitud de dispersión solo depende de  $\theta$ , hay que determinar los coeficientes  $C_l$  para que el miembro derecho de (I.1.18) no dependa de  $r$ . Para esto es necesario introducir el desarrollo en armónicos

en función de  $e^{ikz}$ :

$$e^{ikz} = e^{-kr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\text{sen}(kr - l\pi/2)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (\text{I.1.19})$$

que substituido en (I.1.18) conduce a:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (C_l e^{i\delta_l} - i^l (2l+1)) e^{-inl/2} P_l(\cos \theta) \\ &- \frac{1}{2ik} e^{-2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (C_l e^{-i\delta_l} - i^l (2l+1)) e^{inl/2} P_l(\cos \theta). \quad (\text{I.1.20}) \end{aligned}$$

Para que esta expresión no dependa de  $r$ , es necesario que se anule el segundo término del miembro derecho lo cual se logra escogiendo

$$C_l = i^l (2l+1) e^{i\delta_l} \quad (\text{I.1.21})$$

así que

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (\text{I.1.22})$$

la cual se puede escribir como

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta). \quad (\text{I.1.23})$$

Estas expresiones dan la amplitud de la onda dispersada; a  $f(\theta)$ , como se mencionó anteriormente, se le da el nombre de amplitud de dispersión. Partiendo de la expresión (I.1.23) y utilizando la ecuación (I.1.8), se obtiene la sección transversal de dispersión  $I(\theta)$ ; es decir

$$I(\theta) \equiv \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = A^2 + B^2$$

en donde

$$A = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cos(2\delta_l - 1) P_l(\cos \theta)$$

(I.1.24)

$$B = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin 2\delta_l P_l(\cos \theta).$$

Ahora bien, la sección transversal elástica total  $\sigma_{el}$  será:

$$\sigma_{el} = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (\text{I.1.25})$$

12. Cálculo de corrimientos de fase y secciones transversales.

Para propósitos de cálculo, considérese que el potencial dispersor tiene un alcance "a" finito. En este caso es posible dividir el problema en dos regiones; para  $r \leq a$  donde  $V(r) \neq 0$ , que es la región interna, y para  $r > a$  donde  $V(r) = 0$ , que es la región externa.

La solución exacta en la región externa es:

$$R_{lk}^{ex}(r) = j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l, \quad (\text{I.2.1})$$

la cual debe unirse suavemente con la solución interna, así como la derivada logarítmica de la solución interna y de la externa en  $r=a$ ; es conveniente introducir en esta derivada logarítmica la constante  $a$  y definir una cantidad adimensional  $\beta_l^{(k)}$  de la siguiente manera:

$$\beta_l^{(k)} = \left( \frac{a}{R_{lk}^{in}} \frac{dR_{lk}^{in}}{dr} \right)_{r=a} = \left( \frac{a}{R_{lk}^{ex}} \frac{dR_{lk}^{ex}}{dr} \right)_{r=a} \quad (\text{I.2.2})$$

donde se está suponiendo que la solución interna es conocida. Sustituyendo (I.2.1) en (I.2.2), se obtiene

$$\beta_2^{(k)} = ka \frac{j_2'(ka) \cos \delta_2 - n_2'(ka) \sin \delta_2}{j_2(ka) \cos \delta_2 - n_2(ka) \sin \delta_2} \quad (\text{I.2.3})$$

despejando  $\delta_2$  resulta

$$\text{tg } \delta_2(k) = \frac{ka j_2'(ka) - \beta_2 j_2'(ka)}{ka n_2'(ka) - \beta_2 n_2'(ka)} \quad (\text{I.2.4})$$

Se puede obtener una forma más simple de la solución introduciendo las funciones de Hankel

$$h_2^{(1)} = j_2 + i n_2$$

$$h_2^{(2)} = j_2 - i n_2$$

lo cual conduce a

$$e^{2i\delta_2} = - \frac{h_2^{(1)}}{h_2^{(2)}} \left\{ 1 + ka \frac{h_2^{(1)} h_2^{(2)'} - h_2^{(1)'} h_2^{(2)}}{\beta_2 h_2^{(1)} h_2^{(2)'} - ka h_2^{(1)'} h_2^{(2)}} \right\} \quad (\text{I.2.5})$$

El cálculo se simplifica, definiendo  $\gamma_2 \in \mathbb{R}$  como

$$e^{2i\delta_2} = - \frac{h_2^{(2)}(ka)}{h_2^{(1)}(ka)} \quad (\text{I.2.6})$$



y los parámetros reales  $A_2$  y  $\delta_2$

$$A_2 \equiv \operatorname{Re} \left( ka \frac{h_2^{(1)}(ka)}{h_2^{(2)}(ka)} \right) \quad (\text{I.2.7}) \quad \delta_2 \equiv \operatorname{Im} \left( ka \frac{h_2^{(1)}(ka)}{h_2^{(2)}(ka)} \right) \quad (\text{I.2.8})$$

con lo cual (I.2.5) se transforma en

$$e^{z_2 i \delta_2} = \frac{\beta_2 - A_2 + i \delta_2}{\beta_2 - A_2 - i \delta_2} e^{z_2 i \alpha_2} \quad (\text{I.2.9})$$

que se puede reescribir en la forma

$$e^{i \delta_2} \operatorname{sen} \delta_2 = e^{z_2 i \alpha_2} \left\{ \frac{\delta_2}{\beta_2 - A_2 - i \delta_2} + e^{-i \alpha_2} \operatorname{sen} \alpha_2 \right\}. \quad (\text{I.2.10})$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (I.1.23) se obtiene la amplitud de dispersión, la cual vendrá dada por:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{z_2 i \alpha_2} \left\{ \frac{\delta_2}{\beta_2 - A_2 - i \delta_2} + e^{-i \alpha_2} \operatorname{sen} \alpha_2 \right\} P_l(\cos \theta). \quad (\text{I.2.11})$$

Es importante hacer notar el significado físico de  $\alpha_2$ . De la ecuación (I.2.10) es claro que si  $\beta_2 \rightarrow \infty$ ,  $\alpha_2 = \delta_2$ ; ahora bien, las derivadas logarítmicas en  $r=a$  tienden

a infinito cuando el potencial en la región interna es infinitamente grande, ó mas precisamente cuando la región es impenetrable; lo cual significa que  $\zeta_2$  representa los comentarios de fase debidos a una dispersión en esfera dura. Tomando el límite de la ecuación (1.2.4) cuando  $\beta_2 \rightarrow \infty$ , se tiene:

$$\text{tg } \delta_2 = \text{tg } \zeta_2 = \frac{j_2(ka)}{n_2(ka)} \quad ; \quad \zeta_2 = \text{tg}^{-1} \frac{j_2(ka)}{n_2(ka)} \quad (1.2.12)$$

### § 3. Resonancias

Introducción: En general, los comentarios de fase y las secciones transversales son funciones que varían lentamente con la energía y que tienden a disminuir cuando aumenta esta y el momento cinético. Pero ocasionalmente una de las fases tiene una rápida variación en cierto intervalo de energía, pasando a través del valor  $\pi/2$ , lo cual causa un pico mas ó menos definido en la sección transversal correspondiente a esa fase. En este caso se habla de una resonancia.

, Aunque el tratamiento hecho hasta ahora se refiere solo a la dispersión elástica, las resonancias se presentan

también en la dispersión inelástica, y es ahí donde más interés existe en su estudio debido a la información que proporcionan sobre los estados excitados. Por tal motivo se introducirá desde ahora una nomenclatura común para la clasificación de las resonancias que se producen en colisiones inelásticas y se conoce como la "genealogía" de las resonancias (Schultz 1973):

A un ión positivo con una configuración electrónica particular se le conoce como el "abuelo" de la resonancia; si un electrón se liga al ión positivo, dando un estado Rydberg del átomo neutro, se obtiene el "padre"; y añadiendo un electrón al "padre" se tiene la resonancia correspondiente.

Las resonancias que caen energéticamente por debajo del estado del cual derivan (i.e. abajo del padre) son llamadas resonancias en "canal cerrado", de "Feshbach" o de "tipo I" (Taylor et al, 1966, Taylor 1970), y se producen cuando el potencial de interacción entre la partícula incidente y el estado excitado del átomo blanco tiene una intensidad suficiente como para formar un estado ligado. Las resonancias que caen arriba de sus padres reciben el nombre de "forma", de "canal abierto" o de "tipo II" (Taylor et al, 1966). En este caso, el potencial produce una barrera centrífuga

penetrable (debida al momento cinético del electrón) que atrapa a la partícula incidente.

Una resonancia particular puede decaer por emisión de un electrón a varios estados finales. Entonces se habla de canales de decaimiento.

Con las bases teóricas desarrolladas en las secciones 1 y 2, ya es posible interpretar técnicamente este fenómeno; hecho al que se asociarán las siguientes secciones.

### 3.1 Cálculo de resonancias.

Si se observa la ecuación (1.2.9), es claro que un cambio rápido en los comentarios de fase, puede ser causado por una variación brusca de  $\zeta_e$ ,  $A_e$ ,  $s_e$ , o  $B_e$ . Pero puesto que  $\zeta_e$ ,  $A_e$  y  $s_e$  están definidas en términos de las funciones de Hankel y tanto estas como sus derivadas se comportan suavemente, un cambio violento en los comentarios de fase, es generalmente causado por la derivada logarítmica  $B_e$ . Si, como usualmente ocurre, este cambio rápido se produce en un intervalo de energía muy pequeño, la derivada logarítmica puede remplazarse por su tangente en este intervalo; es decir:

$$\beta_2(E) = A + BE. \quad (\text{I.3.1})$$

Introduciendo la notación

$$E_r \equiv \frac{A_2 - A}{B} \quad (\text{I.3.2})$$

$$\frac{\Gamma}{2} \equiv -\frac{\beta_2}{B} \quad (\text{I.3.3})$$

y sustituyendo (I.3.2), (I.3.3), en (I.2.9), se obtiene

$$e^{2i(\delta_2 - \gamma_2)} = \frac{E - E_r - i\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2} \quad (\text{I.3.4})$$

de donde se sigue que:

$$\text{tg}(\delta_2 - \gamma_2) = \frac{\Gamma}{2(E_r - E)}. \quad (\text{I.3.5})$$

Suponiendo que se cumple la aproximación lineal en un intervalo de energías  $\Delta E$ , el cual es grande comparado con  $\Gamma$ , (esto es  $\Delta E \gg \Gamma$ ), la ecuación (I.3.5) muestra que  $\delta_2 - \gamma_2$  experimenta un cambio rápido en la región cerci- derada; es mas, pasa del valor  $n\pi$  al valor  $(n+1)\pi$ . Ade- más, puesto que  $\gamma_2$  es una función que varía lentamente, es el corrimiento de fase  $\delta_2$  el que experimenta la rápi- da variación de  $n\pi$  a  $(n+1)\pi$ , tomando el valor  $(2n+1)\pi/2$

en  $E = E_r$

Para analizar con más detalle la situación, haciendo uso de las ecuaciones (I.2.10) y (I.3.4), se tiene que:

$$e^{i\delta_e} \sin \delta_e = e^{z_1 \eta_e} \left\{ \frac{\pi/2}{E_r - E - i\pi/2} + e^{-i\eta_e} \sin \eta_e \right\} \quad (\text{I.3.6})$$

y la correspondiente amplitud de dispersión parcial es

$$f_e = \frac{2l+1}{k} e^{z_1 \eta_e} \left\{ \frac{\pi/2}{E_r - E - i\pi/2} + e^{-i\eta_e} \sin \eta_e \right\} P_l(\cos \theta) \quad (\text{I.3.7})$$

que es el término dominante en la sección transversal total en la vecindad de la resonancia. Esta sección transversal parcial dominante, se puede agrupar en tres términos; el primero independiente de  $\eta_e$ , el segundo dependiente de  $E$  a través de  $\eta_e$ , y los dos últimos que representan una interferencia y se agrupan en uno solo; es decir

$$\sigma_e = |f_e|^2 = \frac{(2l+1)^2}{k^2} \left\{ \frac{\pi^2/4}{(E - E_r)^2 + \pi^2/4} + \sin^2 \eta_e + \left( \frac{\pi/2}{E - E_r - i\pi/2} e^{i\eta_e} \sin \eta_e + \frac{\pi/2}{E - E_r + i\pi/2} e^{-i\eta_e} \sin \eta_e \right) \right\} |P_l(\cos \theta)|^2 \quad (\text{I.3.8})$$

El término que únicamente depende de  $\eta_e$ , es precisamente la dis

perción en esfera dura y el independiente de  $z_e$  es el de resonancia pura. En muchos casos, y en especial para bajas energías ó momento cinético grande, la dispersión en esfera dura es despreciable ( $|z_e| \ll 1$ ). En este caso podemos ignorar los términos dependientes de  $z_e$  y obtener la sección transversal diferencial de resonancia pura

$$\frac{d\sigma_e(\theta)}{d\Omega} = \frac{(2l+1)^2}{k^2} \frac{\Gamma^2}{4(E-E_r)^2 + \Gamma^2} |P_l(\cos\theta)|^2. \quad (I.3.9)$$

La máxima dispersión (para cualquier ángulo) se presenta en  $E = E_r$  y a  $E_r$  se le llama energía de resonancia.

Puede ocurrir que el corrimiento de fase de esfera dura no sea despreciable; más aún, puede tomar el valor  $(2n+1)\pi/2$  cerca de la resonancia. En este caso sucede, como lo demuestra la ecuación (I.3.7) que la sección transversal diferencial parcial se va a cero en  $E = E_r$  (ya que  $f_e$  se hace cero). Esto implica que no siempre es posible detectar una resonancia por métodos directos.

Regresando al análisis de la ecuación (I.3.9), se observa que la magnitud de  $\Gamma$  caracteriza el ancho de la resonancia. También es claro de la ecuación (I.3.7)

que si  $\Gamma$  es pequeño la dispersión por esfera dura pre-  
 domina no muy lejos del pico de resonancia. Esto quiere  
 decir que no muy lejos de un pico de resonancia an-  
 gulo, el dispersor se comporta como si fuera una es-  
 fera dura y la onda incidente difícilmente penetra,  
 en contraste con lo que ocurre en las vecindades in-  
 mediatas de un pico de resonancia, en las que la  
 onda incidente tiende a concentrarse dentro de la  
 región de dispersión. Obviamente la forma de la línea  
 de resonancia depende del valor de  $\zeta_e$ , como se puede  
 observar en la figura 1.

Integrando (1.3.9) sobre los ángulos, se obtiene la  
 sección transversal resonante total

$$\sigma_e = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{\Gamma^2}{4(E-E_r)^2 + \Gamma^2} \quad (1.3.10)$$

que es la llamada fórmula de Breit-Wigner.

Hasta aquí se ha visto la parte matemática de las  
 resonancias. Ahora se discutirá el sentido físico que hay  
 detrás de una resonancia.

Una resonancia se puede "visualizar" como una gran  
 fracción de la onda incidente que penetra profundamen-  
 te en la región de dispersión y se concentra ahí. Como



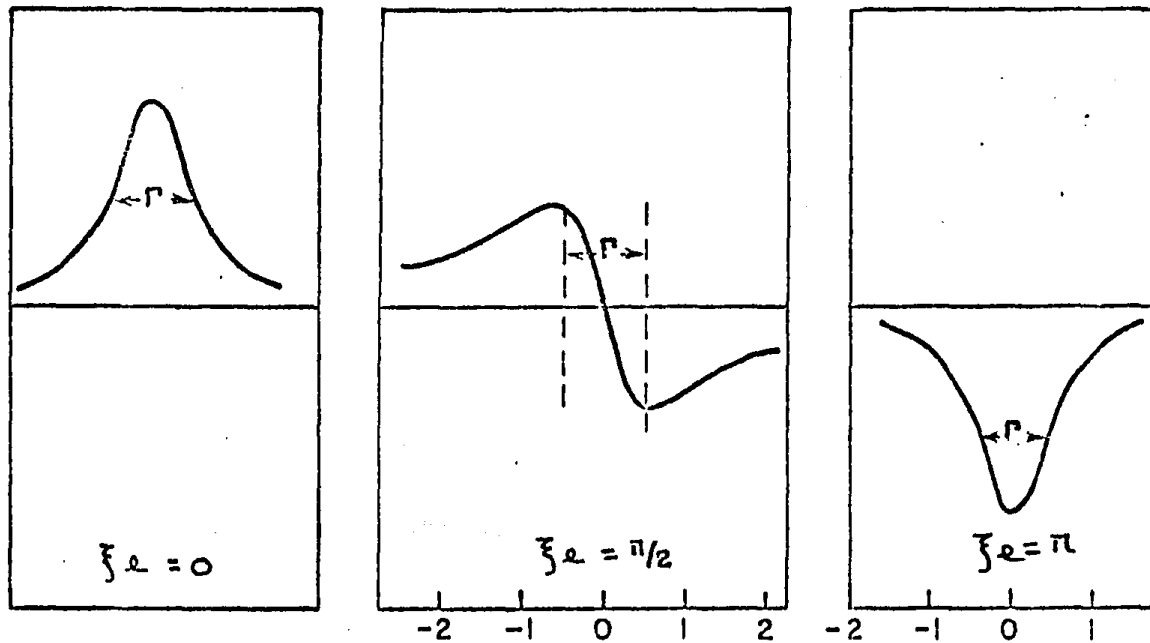


Fig. I

consecuencia de esta gran concentración en las vecindades inmediatas del centro dispersor, la onda se distorsiona y esto es lo que produce un pico en la sección transversal.

Puesto que los estados resonantes tienen una energía más o menos bien definida pueden parecerse mucho a estados ligados; pero ya que estos estados no son estables se les llama meta estables.

El tiempo de vida de estos estados, de acuerdo con la relación de indeterminación de Heisenberg es

$$\delta \approx \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (\text{I.3.11})$$

ya que  $\Delta E \sim \Gamma$ . Los resonancias cuyo ancho de línea es pequeño (esto es picos muy angostos) se parecen mucho a estados ligados ya que permanecen un tiempo considerable en la región de dispersión.

Considérese un pozo de potencial atractivo que cambia en forma abrupta cerca de la región donde el potencial se hace cero (fig II). Si una partícula atraviesa la región de dispersión con energía positiva, no puede quedar ligada; pero si su energía es muy pequeña, la función de onda de la partícula se concentra en la región de dispersión, puesto que el potencial tiene varios niveles

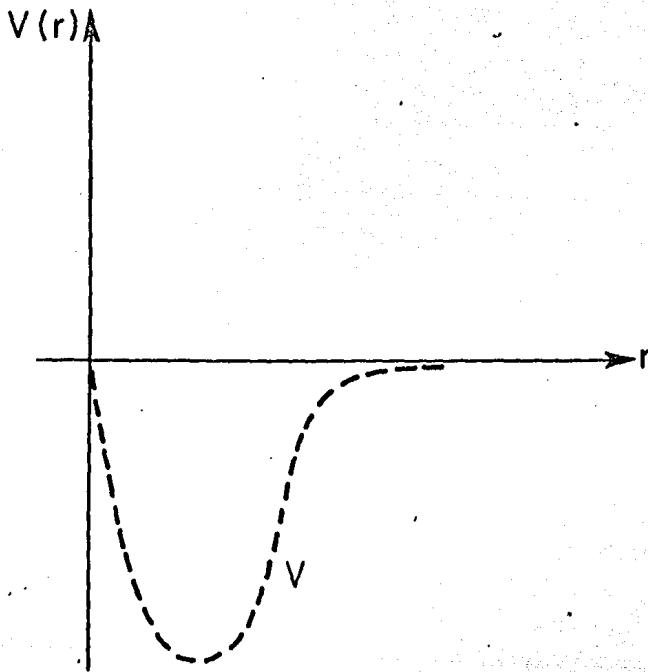


Fig. II

energéticos cerca del cero de energía, y se produce la resonancia. Tales resonancias de "energía cero" ocurren para todos los valores de  $l$  en los cuales el potencial es capaz de producir un estado ligado cerca del cero de energía.

También pueden ocurrir resonancias de "baja energía" para valores de  $l$  diferentes de cero, aunque no existan núcleos energéticos con ese momento cinético cerca del cero de energía. Lo que causa este fenómeno es que el potencial que siente la partícula es la suma del potencial real y el término centrífugo; esto es:

$$U_{ef} = U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (I.3.12)$$

Este potencial efectivo (fig. III) es capaz de formar un estado virtual con una energía positiva pequeña. Es decir la barrera centrífuga impide que escape la partícula, causando una concentración de la función de onda en la región de dispersión, produciéndose una "resonancia de baja energía".

#### § 4. Matrices de dispersión

Introducción: Para poder hacer una discusión general del problema de colisiones (en particular de las resonancias)

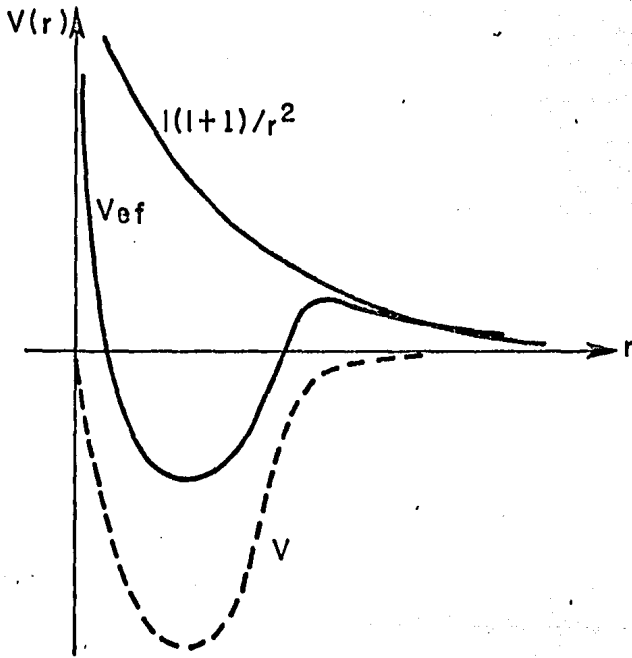


Fig. III

conviene introducir las llamadas matrices de dispersión.

La esencia del análisis por medio de la matriz de dispersión, es considerar el proceso físico como una transformación que convierte los estados entrantes en estados salientes; es decir la interacción es una "caja negra" que se describe matemáticamente por un operador de transformación que se conoce como "matriz de dispersión" o "matriz  $S$ ".

4.1. Definición de matriz  $S$ : Considérese la función de onda de un término particular de la sumatoria de la ecuación (I.4.11), cuya forma asintótica se puede escribir como

$$\Psi_e \sim \frac{1}{2kr} (2l+1)!^{1/2} \left[ e^{-i(kr - l\pi/2)} - S_l(k) e^{i(kr - l\pi/2)} \right] P_l(\cos\theta). \quad (\text{I.4.1})$$

La función  $S_l(k)$ , que representa la razón de la amplitud de la onda saliente a la onda entrante, es la matriz  $S$ , que en este caso es una matriz de  $1 \times 1$ , o sea simplemente una función de  $k$ . Como se verá más adelante, en el caso de dispersión inelástica hay varios canales de excitación interna y  $S$  resulta ser una matriz que

por lo general no es cuadrada.

Substituyendo (I.1.19) y (I.1.22) en (I.1.9) y comparando el resultado con (I.4.1) se obtiene, para el caso de dispersión en campo central,

$$S_2(k) = e^{i\delta_2} \quad (\text{I.4.2})$$

Si no existe el potencial dispersor, la función de ondas se reduce a la onda plana incidente, lo cual se traduce en que  $S_2(k) \rightarrow 1$ ; o sea  $S_2$  representa la modificación a la amplitud de la onda saliente debida al potencial.

La amplitud de dispersión en términos de la matriz  $S$  se obtiene substituyendo (I.4.2) en (I.1.22)

$$f(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - S_2) P_l(\cos \theta) \quad (\text{I.4.3})$$

y la sección transversal clásica total resulta ser

$$\sigma_{cl} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - S_2|^2 \quad (\text{I.4.4})$$

A la matriz  $1 - S_2$ , en donde  $U$  es la matriz unitaria

se la llama "matriz de transición" ó "matriz T". Se verá más adelante que es ésta la que describe la región de transición para dispersión en varios canales.

4.2. Propiedades de simetría y unicidad de la matriz S. Considerese la parte radial de la ecuación de Schrödinger para una onda parcial determinada

$$\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} + \left\{ k^2 - U(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} u_\ell = 0. \quad (\text{I.4.5})$$

Supóngese que se encuentran dos soluciones linealmente independientes  $f_\ell(k, r)$  y  $f_\ell(-k, r)$ , las cuales se comportan asintóticamente como

$$f_\ell(\pm k, r) \sim e^{-i(\pm kr - \ell\pi/2)} \quad (\text{I.4.6})$$

con  $k \in \mathbb{C}$ . La solución física de (I.4.5) será una combinación de las dos soluciones

$$u_\ell = (\text{cte}) [ f_\ell(k, r) + (-1)^{\ell+1} S_\ell(k) f_\ell(-k, r) ]. \quad (\text{I.4.7})$$

Por lo general, las funciones que tienen un comportamiento asintótico del tipo de la ecuación (I.4.6) divergen en el



origen como  $r^{-l}$ , y puesto que se debe exigir que  $u_2(0) = 0$  se definen las funciones de Post

$$f_2(\pm k) = [1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2l-1)]^{-1} \lim_{r \rightarrow 0} (kr)^l f_2(\pm k, r), \quad (\text{I.4.8})$$

que son regulares en el origen. De la ecuación (I.4.7) resulta

$$f_2(k) + (-1)^{2+l} S_2(k) f_2(-k) = 0. \quad (\text{I.4.9})$$

De la expresión anterior se obtiene una definición alternativa de la matriz  $S$

$$S_2(k) = (-1)^l \frac{f_2(k)}{f_2(-k)}. \quad (\text{I.4.10})$$

Del comportamiento asintótico de  $f_2(\pm k, r)$  (eq. I.4.6) se obtiene que cuando  $r \rightarrow \infty$

$$(-1)^l f_2(-k, r) = f_2^*(k, r) \quad (\text{I.4.11})$$

en donde la conjugación de  $f_2$  es sólo en su forma funcional y no en los argumentos. Las ecuaciones diferenciales que satisfacen estas funciones serán, respectivamente:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] (-1)^l f_l(-k, r) = 0 \quad (\text{I.4.12})$$

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] f_l^*(k, r) = 0 \quad (\text{I.4.13})$$

Ahora bien, de las ecuaciones anteriores es claro que  $(-1)^l f_l(-k, r)$  y  $f_l^*(k, r)$  satisfacen la misma ecuación diferencial y, puesto que tienen el mismo comportamiento asintótico (siempre y cuando  $k \in \mathbb{R}$ ), deben ser iguales para toda  $r$ . Tomando el límite cuando  $r \rightarrow 0$

$$(-1)^l f_l(-k) = f_l^*(k) \quad \text{con } k \in \mathbb{R} \quad (\text{I.4.14})$$

De aquí se obtiene otra definición de matriz  $S$

$$S_l(k) = \frac{f_l(k)}{f_l^*(k)} \quad k \in \mathbb{R} \quad (\text{I.4.15})$$

De las ecuaciones (I.4.10) y (I.4.15) se obtienen dos propiedades muy importantes para la matriz  $S$

$$\text{Simetría: } S_l(k) S_l(-k) = \frac{f_l(k)}{f_l^*(k)} \frac{f_l(-k)}{f_l^*(-k)} = 1 \quad \text{para toda } k \quad (\text{I.4.16})$$

$$\text{Unicidad: } S_2(k) S_2^*(k) = \frac{f_2(k)}{f_2(-k)} \frac{f_2^*(-k)}{f_2^*(k)} = 1 \quad k \in \mathbb{R} \quad (\text{I.4.17})$$

4.3 Propiedades analíticas de La matriz  $S$ . El objetivo de entender los valores de  $k$  a los complejos, es el de estudiar la repercusión de los ceros y los polos de la matriz  $S$  en el sistema físico. Se definen los siguientes tipos de estados en los cuales  $f_2(k)$  se hace cero,

Estado ligado  $f_2(-ik) = 0$  con  $k > 0$

Estado virtual  $f_2(i\gamma) = 0$  con  $\gamma > 0$

Estado resonante  $f_2(i\beta + i\gamma) = 0$  con  $\beta, \gamma > 0$

Cabe hacer notar que la localización de tales ceros en el plano  $k$ -complejo depende de las soluciones de la ecuación de onda radial, para el potencial particular que se esté estudiando, así que la discusión siguiente no intenta obtener soluciones específicas, sino sólo describir las consecuencias físicas de los ceros y polos de la matriz de dispersión

Estados Ligados: Das soluciones radiales  $u_2$  de la ecuación

(I.4.5) pueden representar un estado ligado estacionario de la partícula incidente, en el campo del centro de potencial, sólo si  $u_2$  se comporta asintóticamente como  $e^{-kr}$  ( $k > 0$ ) lo cual se logra si el primero o el segundo término de (I.4.7) se va a cero, ya que si uno tiende a  $e^{-kr}$ , el otro tiende a  $e^{kr}$ , lo cual es físicamente inaceptable para un estado ligado. Esta eliminación se lleva a cabo si  $S_2(k) = 0$ . Entonces se dice que se presenta un estado ligado en  $k = -iK_n$  ( $K_n > 0$ ), siempre y cuando  $S_2(-iK_n) = 0$ . En este punto del plano  $k$ -complejo la energía es negativa, como era de esperarse

y

$$u_2 \rightarrow (cte) e^{-K_n r} \quad r \rightarrow \infty$$

De la ecuación (I.4.10), se tiene

$$S_2(-iK_n) = (-1)^l \frac{f_2(-iK_n)}{f_2(iK_n)} \quad (I.4.18)$$

y puesto que  $S_2(-iK_n) = 0$ , o bien  $f_2(-iK_n) = 0$  o  $|f_2(iK_n)| \rightarrow \infty$

Una investigación de las propiedades analíticas de las funciones de Jost y su dependencia con la función potencial demuestra que si  $\int_0^\infty dr r U(r)$  es

finita, entonces  $f_2(k)$ :

- 1) es regular en la parte inferior del plano  $k$
- 2) es continua en el eje real
- 3) puede tener singularidades en la parte superior del plano  $k$ .

Si  $f_2(k)$  tiene ceros en  $k=0$  o en  $k=-ik_n$ , estos corresponden a estados ligados verdaderos del sistema; las singularidades de  $f_2(k)$  en el eje imaginario positivo  $k=i\alpha_n$  ( $\alpha_n > 0$ ), también dan lugar a una matriz  $S$  nula, pero se encuentra que no corresponden a estados ligados verdaderos del sistema. Estos son llamados los ceros redundantes de la matriz  $S$  y corresponden a funciones de onda idénticamente nulas.

De la discusión anterior se concluye que los estados ligados verdaderos del sistema caen en el eje negativo imaginario del plano  $k$  y su posición en este eje depende del potencial en cuestión.

Estados virtuales: Los estados virtuales son tales que  $f_2(i\gamma) = 0$  con  $\gamma > 0$ , y no pueden considerarse como ligados ya que la forma asintótica de la solución de la parte radial de la ecuación.

de ondas

$$u_{\pm} \rightarrow (\text{cte}) e^{\mp r} \\ r \rightarrow \infty$$

no representa físicamente ningún estado, puesto que crece exponencialmente para grandes valores de  $r$ . Sin embargo su descripción matemática es muy útil en el estudio de la dispersión en ciertas regiones de energía.

Si  $\gamma$  es pequeña e  $i\gamma$  cae en la región en la cual  $f_{\pm}(k)$  es analítica, se puede hacer un desarrollo en serie de Taylor alrededor del eje real, esto es:

$$f_{\pm}(k) = f_{\pm}(i\gamma) + C_1(k-i\gamma) + C_2(k-i\gamma)^2 + \dots \quad (I.4.19)$$

Ahora bien, debido a la hipótesis de existencia de un estado virtual  $f_{\pm}(i\gamma) = 0$  y suponiendo que  $|k-i\gamma|$  es pequeño se puede ignorar el término cuadrático de la expresión anterior y la matriz  $S$  correspondiente queda:

$$S_{\pm}(k) \approx (-i)^{\pm} \begin{pmatrix} k-i\gamma \\ -k-i\gamma \end{pmatrix} \quad (I.4.20)$$

Utilizando la ecuación (I.4.4), la sección transversal parcial de dispersión resulta

$$\sigma_l \approx \frac{4\pi(2l+1)}{k^2 + \gamma^2} \quad (\text{I.4.21})$$

Estados resonantes: La tercera clase de estados que se discutirán son los estados resonantes, para los cuales  $f_l(\pm\beta + i\gamma) = 0$  con  $\beta, \gamma > 0$ . La forma asintótica de  $u_l(r)$  para este valor complejo de  $k$  es:

$$u_l(r) \rightarrow (\text{cte}) e^{i\beta r + \gamma r} \quad (\text{I.4.22})$$

Esta representa la onda saliente (estados que decaen) y la entrante (estados capturados). Analizando la función de onda dependiente del tiempo para una "l" dada (esto es  $\psi_l(r) e^{-i(E/\hbar)t}$ , con  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ ) se obtiene una representación gráfica de estos estados. Puesto que  $k = \pm\beta + i\gamma$ , resulta

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} [\beta^2 - \gamma^2 \pm 2i\beta\gamma] = E_r \pm i\Gamma/2 \quad (\text{I.4.23})$$

que es una cantidad compleja. La densidad de probabilidad correspondiente  $|\psi_l(r)|^2 e^{-i(E/\hbar)t}$  demuestra explícitamente el comportamiento no estacionario de las resonancias.

La captura y decaimiento de los estados resonantes se produce en pares; esto se sigue, ampliando el intervalo de validez de (I.4.15) de  $k \in \mathbb{R}$ , a cualquier región  $\mathcal{R}$  conec

tada con el eje real, en la que  $f_2(k)$  sea analítica.  
En esta región se tendrá:

$$(-1)^l f_2(-k^*) = f_2^*(k) \quad (\text{I.4.24})$$

y

$$S_2 = \frac{f_2(k)}{f_2^*(k^*)} \quad (\text{I.4.25})$$

Aplicando (I.4.24) a estados resonantes se tiene:

$$f_2(-\beta + i\gamma) = f_2^*(\beta + i\gamma) = f_2(\beta + i\gamma) = 0 \quad (\text{I.4.26})$$

lo cual implica que la captura y decaimiento de estado resonantes están simétricamente localizados con respecto al eje imaginario positivo.

Ahora se analizará el comportamiento de la matriz de dispersión para la región de la energía que corresponde a valores en el eje  $k$ -real que se encuentran cerca de los estados resonantes; para esto, se hará un desarrollo en serie de Taylor alrededor de  $k = \pm \beta + i\gamma$ , suponiendo que sólo hay un estado resonante cercano a la región de interés del eje  $k$ -real.



Así, considerando sólo el término lineal en la expansión, se tiene que<sup>\*</sup>

$$f_2(k) = C_1(k - \beta - i\gamma) \quad (1.4.27)$$

De acuerdo con la definición de la matriz  $S$  de la ecuación (1.4.10), sería ahora necesario hacer la expansión para  $f_2(-k)$ , pero ya que  $-k$  (con  $k > 0$ ) está muy alejado del estado resonante  $\beta + i\gamma$ , la aproximación lineal no es válida<sup>\*\*</sup>. Entonces será más conveniente utilizar la definición (1.4.25) de la matriz  $S$ , en la cual  $f_2^*(k^*)$  aparece en el denominador, obteniéndose

$$S_2(k) \approx \frac{(-1)^2 C_1(k - \beta - i\gamma)}{C_1^*(k - \beta + i\gamma)} \quad (1.4.28)$$

Ahora bien, si  $C_1$  es constante, esta expresión no satis

\* Puesto que se espera el mismo resultado físico para el eje  $k$ -real positivo que para el negativo, el desarrollo se restringirá a valores del eje  $k$ -real positivo.

\*\* Este problema no se presenta en el caso de los estados virtuales, ya que  $+k$  y  $-k$  (reales), equidistan de cualquier punto del eje imaginario.

face la relación de simetría (I.4.16). Si se supone que  $C_1$  tiene una dependencia lenta con  $k$ , de la forma

$$C_1 = e^{i(\gamma_2(k) - \pi/2)} (k + k_r^*) \quad (\text{I.4.29})$$

donde  $k_r = \beta + i\gamma$ , se tiene que la matriz  $S$

$$S_2(k) = e^{2i\gamma_2} \frac{(k + k_r^*)(k - k_r)}{(k + k_r)(k - k_r^*)} \quad (\text{I.4.30})$$

cumple con la condición de simetría.

Recordando que  $S_2 = e^{2i\delta_2}$ , la expresión anterior se reduce a:

$$e^{2i(\delta_2 - \gamma_2)} = \frac{E - E_r - i\pi/2}{E - E_r + i\pi/2} \quad (\text{I.4.31})$$

donde  $E_r = \frac{\hbar^2}{2m} (\beta^2 - \gamma^2)$  y  $\pi/2 = \frac{\hbar^2}{m} \gamma k$ . De aquí

$$\delta_2 = \gamma_2 - \text{tg}^{-1} \left( \frac{\pi(E)}{2(E - E_r)} \right) \quad (\text{I.4.32})$$

que es lo que se obtuvo en la ecuación (I.3.5).

## CAPITULO II

### Teoría General de Colisiones Inelásticas

#### Introducción

En el caso de partículas con estructura, es necesario extender la teoría para que tome en cuenta los posibles cambios en los estados internos del sistema.

El primer paso es escribir las ecuaciones de movimiento relativo, suponiendo que se conocen un conjunto  $\phi_i(\rho)$  de estados internos del sistema, (en donde, por lo general  $\phi_i(\rho)$  representa el producto de funciones de onda rotacionales-vibracionales, para dos átomos o moléculas que chocan, evaluadas a una separación infinita), y el potencial de interacción  $V(r, \rho)$ .

1. Ecuaciones de movimiento relativo.

Escribiendo el hamiltoniano del sistema en la forma

$$H = H_{int}(\rho) + \hbar^2/2m \nabla_r^2 + V(r, \rho), \quad (II.1.1)$$

\* Aquí se ha hecho la distinción entre el vector de posición,  $\vec{r}$ , relativo al blanco y al proyectil, y los restantes  $3N-3$  grados de libertad  $\rho$ , del sistema.

en donde  $m$  es la masa reducida de las partículas que van a chocar y  $V(r, e)$  es el potencial de interacción, (definido de tal forma que  $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r, e) = 0$ ), se tiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$H \Phi(r, e) = E \Phi(r, e). \quad (\text{II.1.2})$$

En el esquema de potencial de acoplamiento, la función de onda completa se desarrolla en términos de eigenfunciones ortogonales,  $\phi_j(e)$ , de  $H_{int}$

$$H_{int}(e) \phi_j(e) = E_j \phi_j(e), \quad (\text{II.1.3})$$

en otras palabras, la función de onda completa se escribe en términos de

$$\bar{\Phi}(r, e) = \sum_j \Psi_j(r) \phi_j(e). \quad (\text{II.1.4})$$

Substituyendo (II.1.4) en (II.1.2), multiplicándolo por  $\phi_i^*(e)$  e integrando sobre las variables internas, se tiene que  $\Psi_j(r)$  debe ser solución de

$$(\nabla_r^2 + k_i^2) \Psi_j(r) = \sum_j U_{ij}(r) \Psi_j(r) \quad (\text{II.1.5})$$

donde se definió

$$h_i^2 = 2m(E - E_i) / \hbar^2 \quad (\text{II.1.6}) \quad \text{y} \quad U_{ij}(\mathbf{r}) = \int \phi_i^*(\rho) V(\mathbf{r}, \rho) \phi_j(\rho) d\rho. \quad (\text{II.1.6})$$

La ecuación (II.1.5) representa la formulación diabática del sistema. Físicamente los términos  $U_{ij}(\mathbf{r})$  en (II.1.5) son los que contribuyen directamente a la dispersión elástica. Los términos fuera de la diagonal  $U_{ij}(\mathbf{r})$ , los cuales se acoplan en diferentes "canales", son responsables de cualquier proceso inelástico.

En problemas como el de la excitación electrónica, en los que la relajación del movimiento interno es rápida comparada con la velocidad relativa, es preferible plantear el problema en una formulación adiabática. Esto significa que se reemplaza (II.1.4) por un desarrollo en términos de los estados adiabáticos internos  $\chi(\mathbf{r}; \rho)$ , los cuales son eigenfunciones ortogonales de la parte interna completa del hamiltoniano en un punto  $\mathbf{r}$ , esto es:

$$[H_{int}(\rho) + V(\mathbf{r}, \rho)] \chi_j(\mathbf{r}, \rho) = W_j(\mathbf{r}) \chi_j(\mathbf{r}, \rho) \quad (\text{II.1.7})$$

en donde  $\chi_j(\mathbf{r}; \rho)$  y  $W_j(\mathbf{r})$  dependen paramétricamente

de  $r$ . Como  $V(r, e)$  se hace cero en infinito, se tiene que:

$$\chi_j(r; e) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \phi_j(e) \quad (\text{II.1.8})$$

$$W_j(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} E_j \quad (\text{II.1.9})$$

Desarrollando la función de onda completa en términos de  $\chi_j(r; e)$ :

$$\Phi(r, e) = \sum_j \hat{\Psi}_j(r) \chi_j(r; e) \quad (\text{II.1.10})$$

y sustituyendo en (II.1.2), se obtiene:

$$\left[ H_{int}(e) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(r, e) \right] \sum_j \hat{\Psi}_j \chi_j(r; e) = E \sum_j \hat{\Psi}_j(r) \chi_j(r; e). \quad (\text{II.1.11})$$

Multiplicando por  $\chi_i^*(r; e)$  e integrando sobre las variables internas, se llega a las siguientes ecuaciones para  $\hat{\Psi}_i(r)$

$$[\nabla_r^2 + k_i^2(r)] \hat{\Psi}_i(r) = \sum_j [\chi_{ij}(r) \cdot \nabla_r + Y_{ij}(r)] \hat{\Psi}_j(r), \quad (\text{II.1.12})$$

en donde

$$k_i^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - W(r)], \quad (\text{II.1.13})$$

$$\chi_{ij} = -2 \int \chi_i^*(r; e) \nabla_r \chi_j(r; e), \quad (\text{II.1.14})$$

$$Y_{ij} = - \int \chi_i^*(r; e) \nabla_r^2 \chi_j(r; e) de. \quad (\text{II.1.15})$$

Este es el esquema adiabático, cinético ó de acoplamiento.

Ya sea en una ú otra representación, no se puede afectar el problema físico y en un sistema de ejes fijos en el espacio la solución será (por los argumentos dados en el capítulo anterior), en el canal de entrada, una onda plana junto con un término de salida y ondas salientes en los demás canales, esto es:

$$\Psi_i(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ik_i r} + f_{ij}(\theta, \varphi) e^{ik_j r} / r \quad (\text{II.1.16})$$

$$\Psi_j(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} f_{ij}(\theta, \varphi) e^{ik_j r} / r, \quad (\text{II.1.17})$$

en donde  $f_{ij}(\theta, \varphi)$  representa la amplitud de probabilidad para la dispersión de un canal "i" a uno "j"

La sección transversal inelástica total que se obtiene es:

$$\sigma_{ij} = (k_i/k_j) \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |f_{ij}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (\text{II.1.18})$$

## 2 Matrices de dispersión

Introducción. El siguiente paso es obtener expresiones para  $f_{ij}(\theta, \varphi)$ , análogas a la amplitud de dispersión elástica de la ecuación (I.1.22). Para lograr esto, es conveniente definir la matriz de dispersión  $S$ , la cual toma el lugar del coeficiente de fase, en el caso de la dispersión inelástica

2.1. Definición y propiedades de la matriz  $S$ . Para introducir las matrices de dispersión en el caso de que el proceso sea inelástico, se considerará un problema unidimensional de potencial de acoplamiento en dos canales,  $\psi_0(r)$  y  $\psi_1(r)$ , en resonancia exacta (en el sentido de que  $k_0^2 - U_{00}(r) = k_1^2 - U_{11}(r) = k^2 - U(r)$ ).



Las ecuaciones, correspondientes a este problema resultan ser a partir de (II.1.5)

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k_0^2 - U_{00}(r) \right] \Psi_0(r) = U_{01}(r) \Psi_1(r) \quad (\text{II.2.1})$$

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k_1^2 - U_{11}(r) \right] \Psi_1(r) = U_{10}(r) \Psi_0(r) \quad (\text{II.2.2})$$

que son ecuaciones desacopladas. Si los estados internos se escogen de tal manera que  $U_{01}$  y  $U_{10}$  sean reales, y por tanto iguales, y se hace la definición siguiente

$$\Psi_{\pm}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_0(r) \pm \Psi_1(r) \} \quad (\text{II.2.3})$$

se obtienen las ecuaciones

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - U_{\pm}(r) \right] \Psi_{\pm}(r) = 0 \quad (\text{II.2.4})$$

en donde  $U_{\pm}(r) = U(r) \pm U_{01}(r)$ . Estas ecuaciones son idénticas a las de dispersión clásica, y correspondientemente la forma asintótica de las soluciones será:

$$\Psi_{\pm}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C_{\pm} \text{sen}(kr - l\pi/2 + \delta_{\pm}). \quad (\text{II.2.5})$$

Puesto que se quieren determinar las amplitudes de las ondas salientes de la solución, y estas corresponden a una amplitud incidente unitaria en un canal particular, es necesario escoger las constantes  $C_{\pm}$  de tal manera que se anule el término de entrada en el otro canal. Si se escoge

$$C_{\pm} = -\sqrt{2} i e^{i\delta_{\pm}} \quad (\text{II.2.6})$$

se obtiene la solución  $\Psi^{(0)}(r)$  con la onda entrante en el canal cero, y cuyas componentes tienen la forma asintótica

$$\Psi_0^{(0)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-ikr + i2l\pi/2} - S_{00} e^{ikr - i2l\pi/2} \quad (\text{II.2.7})$$

$$\Psi_1^{(0)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -S_{01} e^{ikr - i2l\pi/2} \quad (\text{II.2.8})$$

Ahora bien, si se toma

$$C_{\pm} = \sqrt{2} i \delta_{\pm} \quad (\text{II.2.9})$$

se obtiene la solución  $\Psi^{(0)}(r)$  con la onda entrante en el canal uno, y las componentes son:

$$\Psi_0^{(0)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} S_{00} e^{i k r - i 2 \pi / z} \quad (\text{II.2.10})$$

$$\Psi_1^{(0)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-i k r + i 2 \pi / z} - S_{11} e^{i k r - i 2 \pi / z} \quad (\text{II.2.11})$$

en donde

$$S = \begin{pmatrix} S_{00} & S_{01} \\ S_{10} & S_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(\delta_+ + \delta_-)} \cos(\delta_+ - \delta_-) & i e^{i(\delta_+ + \delta_-)} \sin(\delta_+ - \delta_-) \\ i e^{i(\delta_+ + \delta_-)} \sin(\delta_+ - \delta_-) & e^{i(\delta_+ + \delta_-)} \cos(\delta_+ - \delta_-) \end{pmatrix} \quad (\text{II.2.12})$$

es la matriz de dispersión de este problema. Nótese que (II.3.12) cumple las propiedades (I.4.6) y (I.4.7) de simetría y unitariedad.

Ahora se indicarán las propiedades generales de la matriz  $S$ . Supóngase que se hace una reducción de las ecuaciones (II.1.5) mediante una expansión en funciones angulares apropiadas en un conjunto de  $N$  ecuaciones radiales

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k_i^2 \right] \Psi_i(r) = \sum_j U_{ij}(r) \Psi_j(r). \quad (\text{II.2.13})$$

Generalizando las ecuaciones (II.2.7), (II.2.8), (II.2.10), (II.2.11) se define la matriz  $S$  en términos de las  $N$  soluciones independientes  $\Psi^{(i)}(r)$ , cuyas componentes tienen las formas asintóticas

$$\Psi_i^{(i)}(r) \sim f_{i-}(r) - S_{ii} f_{i+}(r) \quad (\text{II.2.14})$$

$$\Psi_j^{(i)}(r) \sim -S_{ij} f_{j+}(r)$$

en donde

$$f_{\pm}(r) = k_i^{-1/2} \exp(\pm i k_i r \pm i l_i \pi/2). \quad (\text{II.2.15})$$

Para poder establecer la simetría y unicidad de  $S$  es conveniente escribir (II.2.13) en forma matricial

$$\Psi'' = (U - k^2) \Psi. \quad (\text{II.2.16})$$

en donde  $k^2$  es una matriz diagonal con elementos  $k_i^2$ , y  $\Psi$  está sujeto a las condiciones de frontera

$$\Psi(0) = 0 \quad (\text{II.2.17})$$

$$\Psi(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} f_-(r) - S f_+(r)$$

en donde  $f_i$  son matrices diagonales. La unicidad de  $S$  se sigue del carácter hermitiano de  $(U - k^2)$ . En consecuencia, a partir de (II.2.16),

$$\Psi^* \Psi'' - \Psi''^* \Psi = \Psi^* (U - k^2) \Psi - \Psi^* (U - k^2) \Psi = 0 \quad (\text{II.2.18})$$

Integrando por partes la expresión anterior y utilizando (II.2.17), se obtiene

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} (\Psi^* \Psi'' - \Psi''^* \Psi) dr &= \Psi^*(\infty) \Psi'(\infty) - \Psi'^*(\infty) \Psi(\infty) \\ &= (f_i^* - f_i^* S^*)(f_i' - S f_i') - (f_i'^* - f_i'^* S^*)(f_i - S f_i) \\ &= 0. \quad (\text{II.2.19}) \end{aligned}$$

Tomando en cuenta, de (II.2.15), que  $f_i^* = f_i$  y  $f_i'^* = f_i'$ , se tiene que (II.2.19) es cero si

$$S S^* = I \quad (\text{II.2.20})$$

lo cual significa que:

$$\sum_j S_{ij} S_{ji}^* = \sum_j |S_{ij}|^2 = 1,$$

que en términos físicos quiere decir que los flujos asociados con las ondas entrantes y salientes son iguales. Es por tanto la unicidad de  $S$  la que asegura que el número de partículas del sistema se conserva.

La simetría de  $S$  se obtiene, con argumentos similares, de la identidad

$$\tilde{\Psi} \Psi^* - \tilde{\Psi}^* \Psi = 0 \quad (\text{II.2.21})$$

(en donde  $\tilde{\Psi}$  es la traspuesta de  $\Psi$ ), que se cumple cuando  $U$  es real y en consecuencia simétrica. Que  $U$  sea real implica que los estados internos  $\phi_i(\rho)$  son reales y por tanto invariantes ante una inversión en el tiempo; así la simetría de  $S$  asegura que el flujo dispersado del canal  $i$  al  $j$ , es igual al dispersado en el sentido inverso.

Para obtener las amplitudes de dispersión  $f_{ij}(\theta, \varphi)$  es conveniente reemplazar a  $S$  por la correspondiente matriz de transición  $T$ , que se define como:

$$S = I - iT \quad (\text{II.2.22})$$

que al sustituirse en (II.2.14) conduce a

$$\Psi_i^{(1)}(r) \sim k_i^{-1/2} [\sin(k_i r - \ln/2) - 1/2 T_{ii} \exp(i k_i r - i \ln/2)]$$

(II.2.23)

$$\Psi_j^{(1)}(r) \sim -1/2 k_j^{-1/2} T_{ij} \exp(i k_j r - i \ln/2).$$

Muchas veces es preferible utilizar la matriz de reactiva  $R$  definida como

$$S = (I - iR)^{-1} (I + iR) \quad (\text{II.2.24})$$

ya que se puede demostrar, que si  $U$  es real, los elementos  $R_{ij}$  son reales y que  $R$  es simétrica, lo cual simplifica los cálculos.

Una vez dadas las propiedades de las matrices de dispersión, se pasará a encontrar la relación entre estas y la amplitud de dispersión, la cual se sigue de la generalización del análisis en ondas parciales del capítulo anterior.

1.2 Dispersión en campo central. Descomponiendo en ondas parciales

$$\Psi_j(r) = 1/r \sum_{l=0}^{\infty} A_l \Psi_{j,l}(r) P_l(\cos \theta) \quad (\text{II.2.25})$$

se obtienen las ecuaciones para las funciones radiales  $\Psi_{j,l}(r)$

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k_i^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \Psi_{i,l}(r) = \sum_j U_{ij}(r) \Psi_{j,l}(r). \quad (\text{II.2.26})$$

De la ecuación anterior se observa, que cada número cuántico  $l$  da un conjunto de ecuaciones acopladas y, por tanto, una matriz  $S$  ( $S^{(l)}$ ) correspondiente.

Puesto que las condiciones en la frontera requieren una onda plana en el canal  $i$ , junto con términos salientes, la solución de (II.2.26) se escoge de acuerdo a (II.2.23), de la forma

$$\begin{aligned} \Psi_{i,l}^{(i)}(r) &\sim \sin(k_i r - l\pi/2) - 1/2 T_{ii}^{(l)} e^{ik_i r - il\pi/2} \\ \Psi_{j,l}^{(i)}(r) &\sim -1/2 (k_i/k_j)^{1/2} T_{ij}^{(l)} e^{ik_j r - il\pi/2}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.27})$$

Escogiendo los coeficientes  $A_{\pm}^{(i)}$  de (II.2.25) como

$$A_{\pm}^{(i)} = (2l+1) \pm l / k_i \quad (\text{II.2.28})$$

para que la parte entrante de  $\Psi_i(r)$  se comporte como



una onda plana entrante, las ecuaciones (II.2.25) toman la forma asintótica

$$\Psi_j(r) \sim \delta_{ij} e^{ik_j z} + f_{ij}(\theta) \frac{e^{ik_j r}}{r} \dots \text{(II.2.29)}$$

y comparando (II.2.29) con (II.2.27), la amplitud de dispersión

$$f_{ij}(\theta) = -\frac{1}{2[k_i k_j]^{1/2}} \sum_l (2l+1) T_{ij}^{(l)} P_l(\cos \theta) \dots \text{(II.2.30)}$$

ó bien, en términos de la matriz  $S$ , (ecuación (II.2.22)),

$$f_{ij}(\theta) = \frac{1}{2[k_i k_j]^{1/2}} \sum_l (2l+1) (S_{ij}^{(l)} - \delta_{ij}) P_l(\cos \theta) \quad \text{(II.2.31)}$$

de donde

$$\frac{d\sigma_{ij}}{d\Omega} = \frac{k_j}{k_i} |f_{ij}|^2 = \frac{1}{4k_i^2} \left| \sum_l (2l+1) T_{ij}^{(l)} P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad \text{(II.2.32)}$$

e integrando

$$\sigma_{ij} = \frac{k_j}{k_i} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |f_{ij}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_l (2l+1) |T_{ij}^{(l)}|^2 \quad \text{(II.2.33)}$$

Para determinar la relación entre la sección transversal de dispersión elástica y la total es conveniente expresar la diagonal de la matriz  $S$  (que es la que está relacionada con la dispersión elástica) en términos de un coeficiente de fase complejo

$$S_{ii}^{(l)} = \exp(2i(\lambda_l + i\gamma_l)) \quad (\text{II.234})$$

con  $\gamma_l > 0$ , ya que  $|S_{ii}^{(l)}|^2 < 1$ , entonces, la parte imaginaria del paréntesis central toma en cuenta el decremento en el canal de entrada.

La amplitud de dispersión elástica, será:

$$f_{ii}(\theta) = \frac{1}{2ik_i} \sum_l (2l+1) \{ \exp[2i(\lambda_l + i\gamma_l)] - 1 \} P_l(\cos\theta) \quad (\text{II.235})$$

y la sección transversal elástica total resulta ser

$$\begin{aligned} \sigma_{el} = \sigma_{ii} &= \frac{\pi}{k_i^2} \sum_l (2l+1) \{ |S_{ii}^{(l)}|^2 + 1 - 2 \operatorname{Re} S_{ii}^{(l)} \} \\ &= \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_l (2l+1) e^{-2\gamma_l} [\cosh 2\gamma_l - \cos 2\lambda_l]. \quad (\text{II.236}) \end{aligned}$$

La sección inelástica total se obtiene sumando sobre todos los estados finales; esto es

$$\sigma_{in} = \sum_{j \neq i} \sigma_{ij} = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) \sum_{j \neq i} |S_{ij}^{(\ell)}|^2 \quad (\text{II.2.37})$$

y tomando en cuenta el teorema de conservación  $\sum_j |S_{ij}^{(\ell)}|^2 = 1$ ,

$$\sigma_{in} = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) (1 - |S_{ii}^{(\ell)}|^2) = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) (1 - e^{-4\eta_{\ell}}). \quad (\text{II.2.38})$$

De esta última expresión es claro que si  $\eta_{\ell} = 0$ , no hay dispersión inelástica.

Ahora bien, la sección transversal total será:

$$\begin{aligned} \sigma_{Tot} &= \sigma_{el} + \sigma_{in} = \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) (1 - \text{Re } S_{ii}^{(\ell)}) \\ &= \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) (1 - e^{-2\eta_{\ell}} \cos 2\lambda_{\ell}). \quad (\text{II.2.39}) \end{aligned}$$

Comparando (II.2.36) con (II.2.39) se obtiene la generalización del teorema óptico

$$\sigma_{Tot} = \frac{4\pi}{k_i^2} \text{Im } f_{ii}(0). \quad (\text{II.2.40})$$

Finalmente hay que hacer notar que todos los tér

mínimas de las ecuaciones (II.2.36), (II.2.38) y (II.2.39), tienen una cota superior;

$$\sigma_{el}^{(2)} \leq 4\pi(2l+1)/k_i^2, \quad (\text{II.2.41})$$

$$\sigma_{in}^{(2)} \leq \pi(2l+1)/k_i^2, \quad (\text{II.2.42})$$

$$\sigma_{tot}^{(2)} \leq 4\pi(2l+1)/k_i^2. \quad (\text{II.2.43})$$

Las igualdades en las ecuaciones (II.2.31) y (II.2.33) se producen siempre y cuando  $\eta_2 = 0$ , en cuyo caso  $\sigma_{in}^{(2)} = 0$  y el proceso es puramente elástico. La igualdad en (II.2.32) requiere  $\eta_2 \rightarrow \infty$  y en este caso la sección transversal elástica toma el valor  $\sigma_{el}^{(2)} = \pi(2l+1)/k_i^2$  (ecuación (II.2.26)). Es interesante notar que no solamente no puede haber dispersión inelástica sin que se efectúe el proceso elástico, sino que el máximo de los procesos inelásticos ocurre cuando las secciones transversales elástica e inelástica son iguales.

2.3. Resonancias de Feshbach. Como se mencionó en el capítulo I, las resonancias de Feshbach se producen cuando el potencial de interacción entre la partícula incidente y un estado excitado del átomo blanco

es lo suficientemente fuerte como para mantener un estado ligado. Si este estado ligado cae energéticamente arriba del estado básico del blanco e interactúa con el continuo, éste decaerá con la emisión de la partícula incidente. La presencia de este estado intermedio es lo que causa la resonancia (Burke (1968)).

Feshbach (1958) desarrolla un formalismo para explicar este fenómeno utilizando la técnica de operadores de proyección. Otra forma de atacar este problema es resolver las ecuaciones para los elementos de matriz de  $S$  y  $T$  y así determinar las probabilidades de transición, haciendo uso de las relaciones entre las matrices  $S$  y  $T$  y las amplitudes y secciones transversales de dispersión correspondientes encontradas en la sección anterior. (Child (1974)). Sin embargo, en muchas ocasiones, es preferible obtener los perfiles de las líneas de resonancia, lo cual es particularmente útil en la interpretación de los espectros en la región de ionización; este tratamiento alternativo fue desarrollado por U. Fano (1961) y se bosquejará a continuación.

### 3 Efectos de la interacción de configuración

Introducción. El trabajo de Fano (1961) consiste en

explicar los picos asimétricos que aparecen en un espectro de absorción óptica y que el autor atribuye a una interacción de configuración, cuyos efectos son particularmente notables en los niveles energéticos que se encuentran por encima del menor umbral de ionización, para los cuales coinciden las energías de algunos estados de configuraciones diferentes, ya que cuando menos uno de ellos pertenece al espectro continuo. Esta mezcla de una configuración que pertenece al espectro discreto con el continuo da lugar a la autoionización, la cual se manifiesta como picos asimétricos, ya que al mezclarse las configuraciones para formar un estado estacionario de energía  $E$ , los coeficientes varían muy rápidamente al pasar a través de un nivel autoionizante.

Este tratamiento está conectado con la teoría de dispersión en la vecindad de una resonancia, ya que la ecuación que se obtiene para la sección transversal total es también válida para estados de ión negativo, solo que, en estos estados, la interacción de configuración conduce a la autoionización, en vez de producir la autoionización, como en el caso de los estados neutros.

3.1 Perfiles de Fano. Fano considera un sistema cuántico (átomo, ión, o molécula) con varios estados discretos no degenerados, uno de los cuales ( $\varphi$ ) cae a su vez en el continuo de estados  $\Psi_{E'}$ . El problema consiste en diagonalizar la porción de los elementos de matriz del hamiltoniano entre este subconjunto de estados  $\varphi, \Psi_{E'}$ , los cuales constituyen una submatriz cuadrada; a saber:

$$\langle \varphi | H | \varphi \rangle = E_{\varphi} \quad (\text{II.3.1 a})$$

$$\langle \Psi_{E'} | H | \varphi \rangle = V_{E'} \quad (\text{II.3.1 b})$$

$$\langle \Psi_{E''} | H | \Psi_{E'} \rangle = E' \delta(E'' - E'). \quad (\text{II.3.1 c})$$

Es de entenderse que el nivel discreto de energía  $E_{\varphi}$  cae dentro del intervalo de valores continuo de  $E'$  y que cada valor de la energía que cae en el intervalo de  $E'$ , es un eigenvalor de la matriz (II.3.1)

El eigenvector a determinar es una superposición del tipo

$$\Psi_E = a\varphi + \int dE' b_{E'} \Psi_{E'} \dots (\text{II.3.2})$$

donde  $a$  y  $b_{E'}$  son funciones que varían con la energía y que se determinan por medio del conjunto de ecuaciones

$$\langle \varphi | H | \Psi_E \rangle = a E_\varphi + \int dE' V_{E'}^* b_{E'} = E a \quad (\text{II.3.3.a})$$

$$\langle \Psi_{E'} | H | \Psi_E \rangle = a V_{E'} + E' b_{E'} = E b_{E'} \quad (\text{II.3.3.b})$$

(donde se consideró que  $H\Psi_E = E\Psi_E$ ). Para resolver este sistema, es necesario expresar  $b_{E'}$  en términos de  $a$ , ó sea

$$b_{E'} = \frac{V_{E'} a}{E - E'} \quad (\text{II.3.4})$$

pero ya que  $E$  puede ser igual a  $E'$ , es necesario introducir la solución formal de Dirac

$$b_{E'} = \left[ \frac{1}{E - E'} + z(E) \delta(E - E') \right] V_{E'} a; \quad (\text{II.3.5})$$

en el entendimiento de que al sustituir la ecuación anterior en (II.3.3a), se tomará la parte principal



de la integral sobre  $(E - E')^{-1}$  y se determinará  $z(E)$  a posteriori. En este tratamiento se supondrá que  $z(E)$  es real.

Ahora bien, si los estados  $\Psi_{E'}$  tienen un comportamiento asintótico proporcional a  $\sin(k(E')r + \delta)$ , la ecuación (II.3.5), multiplicada por  $\Psi_{E'}$  e integrada sobre la energía, se transforma a

$$\int dE' b_{E'} \Psi_{E'} \propto \sin(k(E')r + \delta + \Delta); \quad (\text{II.3.6})$$

en donde

$$\Delta = -tg^{-1} [\pi / z(E)] \quad (\text{II.3.7})$$

representa el corrimiento de fase debido a la interacción de configuración. El valor de  $z(E)$  se obtiene sustituyendo (II.3.5) en (II.3.3a), lo cual da

$$z(E) = \frac{E - E_{\varphi} - F(E)}{|V_E|^2} \quad (\text{II.3.8})$$

en donde

$$F(E) = P \int dE' \frac{|V_{E1}|^2}{E - E'} \quad (\text{II.3.9})$$

y  $P$  indica "la parte principal de". Nótese que  $|V_{E1}|^2$  es un índice de la intensidad de la interacción de configuración.

De la ecuación (II.3.7) es claro que el corrimiento de fase  $A$  varía bruscamente cuando  $z(E) = 0$ , esto es, en  $E = E_\psi + F$ , por lo que  $F$  representa un corrimiento con respecto a  $E_\psi$  en la posición de la resonancia, debido a la interacción de configuración.

El coeficiente  $a$  se obtiene de laortonormalización de  $\Psi_E$ . Utilizando (II.3.2), (II.3.5) y (II.3.8), se tiene que

$$|a(E)|^2 = \frac{|V_{E1}|^2}{[E - E_\psi - F(E)]^2 + \pi^2 |V_{E1}|^4} \quad (\text{II.3.10})$$

Este resultado demuestra que la interacción de configuración diluye al estado  $\psi$  en una banda de estados estacionarios, cuyos perfiles están representados por una curva de resonancia con un ancho de línea  $\Gamma = \pi |V_{E1}|^2$ ; es decir, si se preparara al sistema en el estado  $\psi$ , éste

se autoionizará con una vida media  $\hbar/2\pi|V_E|^2$ .

Ahora bien, puesto que

$$A = -\text{tg}^{-1}(\pi|z(E)|) = -\text{tg}^{-1} \frac{\pi|V_E|^2}{E - E_0 - F(E)}$$

se obtiene que

$$a = \text{sen} \frac{A}{\pi V_E} \quad (\text{II.3.11a})$$

$$b_{E'} = \frac{V_{E'}}{\pi V_E} \frac{\text{sen} A}{E - E'} - \cos A \delta(E - E'). \quad (\text{II.3.11b})$$

El propósito de este desarrollo no es tanto estudiar  $\Psi_E$  como función de  $E$ , sino más bien, el de estudiar la variación de la probabilidad de excitación de este estado. Puesto que es un mecanismo de excitación, esta probabilidad puede representarse como un elemento de matriz de un operador de transición adecuado entre un estado inicial  $i$  y el estado  $\Psi_E$ . Por otra parte este elemento de matriz se puede expresar en términos del parámetro de fase  $A$ , en virtud de las ecuaciones (II.3.2) y (II.3.11),

$$\langle \Psi_E | T | \varphi \rangle = \langle a \varphi + \int dE' b_{E'} \Psi_{E'} | T | \varphi \rangle$$

$$= \frac{1}{\pi V_E^*} \langle \varphi | T | \varphi \rangle \sin \Delta + \frac{1}{\pi V_E^*} P \int V_{E'}^* \frac{\langle \Psi_{E'} | T | \varphi \rangle \sin \Delta dE' - \langle \Psi_E | T | \varphi \rangle \cos \Delta}{E - E'}$$

$$= \frac{1}{\pi V_E^*} \langle \Phi | T | \varphi \rangle \sin \Delta - \langle \Psi_E | T | \varphi \rangle \cos \Delta \quad (\text{II.3.12})$$

en donde

$$\Phi = \varphi + P \int dE' \frac{V_{E'} \Psi_{E'}}{E - E'}, \quad (\text{II.3.13})$$

lo cual indica que el estado  $\varphi$  se modifica por una mezcla de estados del continuo.

La rápida variación de  $A$  cuando  $E$  pasa a través de la resonancia (esto es, cuando  $E = E_0 + F$ ) causa una rápida variación en  $\langle \Psi_E | T | \varphi \rangle$ . Es más, como  $\sin \Delta$  es una función par de  $E - E_0 - F$  y  $\cos \Delta$  es una función impar de esta misma variable, las contribuciones de  $\langle \Phi | T | \varphi \rangle$  y  $\langle \Psi_E | T | \varphi \rangle$  a  $\langle \Psi_E | T | \varphi \rangle$  interfieren con fases opuestas. En particular la probabilidad de transición se hace cero en  $\Delta = \Delta_0$  (esto es, en  $E = E_0$ ), en donde

$$\text{tg } A_0 = - \frac{E_0 - E_\varphi - F(E_0)}{\pi |V_{E_0}|^2} = \frac{\pi V_{E_0}^* \langle \Psi_{E_0} | T | \varphi \rangle}{\langle \Phi | T | \varphi \rangle} \quad (\text{II.3.14})$$

La razón de la probabilidad de transición  $\langle \Psi_E | T | \varphi \rangle$  a la probabilidad de transición del continuo puede representarse por una familia de curvas, las cuales son función de la energía reducida  $\varepsilon$ ,

$$\varepsilon = - \text{ctg } A = \frac{E - E_\varphi - F(E)}{\pi |V_E|^2} = \frac{E - E_\varphi - F}{\pi |V_E|^2} \quad (\text{II.3.15})$$

(en donde  $\pi = 2\pi |V_E|^2$  indica el ancho espectral del estado autoionizante) y del parámetro  $q$

$$q = \frac{\langle \Phi | T | \varphi \rangle}{\pi V_E^* \langle \Psi_E | T | \varphi \rangle} = \frac{\langle \Psi | T | \varphi \rangle + P \int dE' \langle \Psi | H | \Psi_{E'} \rangle \langle \Psi_{E'} | T | \varphi \rangle / (E - E')}{\pi \langle \Psi | H | \Psi_E \rangle \langle \Psi_E | T | \varphi \rangle} \quad (\text{II.3.16})$$

el cual coincide con  $\text{ctg } A_0$  en  $E = E_0$ , y es independiente de la normalización. Esta familia de curvas queda descrita por

$$\frac{|\langle \Psi_E | T | \varphi \rangle|^2}{|\langle \Psi_E | T | \varphi \rangle|^2} = \frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2} = 1 + \frac{q^2 - 1 + 2q\varepsilon}{1 + \varepsilon^2} \quad (\text{II.3.17})$$

y se muestra en la figura IV para varios valores del parámetro  $q$ , el cual se considera constante en el intervalo de interés.

Si se divide la sección transversal total en dos términos  $\sigma_a$  y  $\sigma_b$ , que corresponden, respectivamente, a transiciones a estados del continuo por interacción con el estado discreto autoexcitante y a transiciones a estados del continuo que no interactúan con el estado discreto (Fano (1965)), se tiene que

$$|\langle \Psi_\epsilon | T | \epsilon \rangle|^2 = \sigma(\epsilon) - \sigma_b \quad (\text{II.3.18})$$

en donde  $\sigma(\epsilon)$  representa la sección transversal total para que ocurra el proceso.

Ahora bien, de (II.3.17), la ecuación (II.3.18) se puede reescribir como

$$\sigma(\epsilon) = \frac{(q + \epsilon)^2}{1 + \epsilon^2} |\langle \Psi_\epsilon | T | \epsilon \rangle|^2 + \sigma_b \quad (\text{II.3.19})$$

pero  $|\langle \Psi_\epsilon | T | \epsilon \rangle|^2$  está relacionada directamente con la sección transversal correspondiente a las transiciones a estados del continuo que interactúan con el estado discreto autoexcitante (es decir con  $\sigma_a$ ), así que:

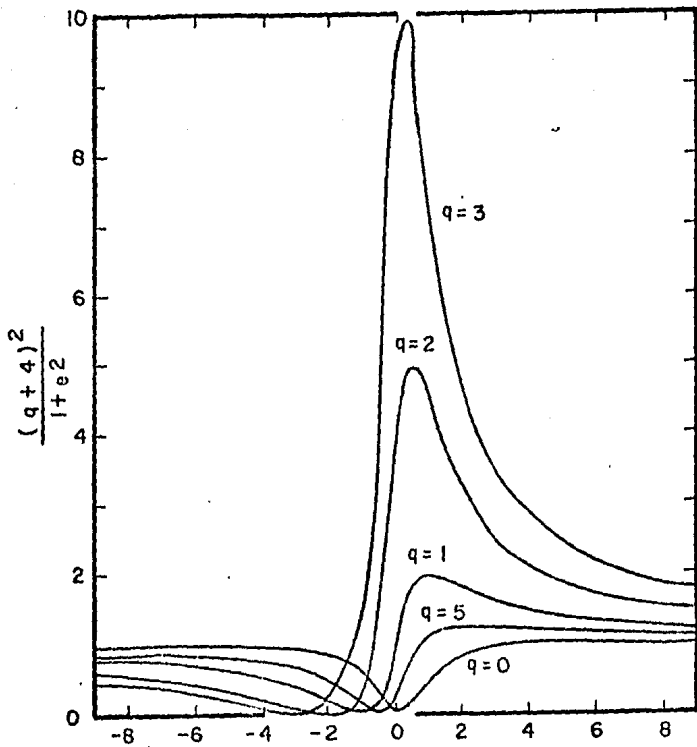


Fig. IV

$$\sigma(E) = \frac{(\Gamma + E)^2}{1 + E^2} \sigma_a + \sigma_b \quad (\text{II.3.20})$$

Esta última expresión se conoce como la ecuación o perfil de Fano, y determina entonces la forma en que varía la sección transversal de excitación, y es formalmente equivalente al resultado que se obtiene al aplicar la teoría de la dispersión.



## CAPÍTULO III

### Estudio de Resonancias por Excitación de Metaestables

#### Introducción.

Existen varias técnicas experimentales para estudiar estados excitados arriba del umbral de ionización, algunas de las cuales consisten en excitar al átomo por impacto electrónico a bajas energías. Estos estudios incluyen mediciones de los electrones dispersados (Crissom et. al. 1969); de electrones eyectados (Sharp et. al. 1970, Wilden et. al. 1975); el análisis de las estructuras que aparecen en la sección transversal de producción de iones positivos, llamadas curvas de electroionización (Bolduc et. al. 1972, Bolduc y Marmet 1973); detección de estados metaestables (Huard et. al. 1978, Dassen et. al. 1981).

A diferencia de los espectros de excitación fotónica (Lodling et. al. 1967) en los cuales los rasgos característicos del espectro electrónico solo pueden deberse al decaimiento de estados autoionizantes neutros, los espectros obtenidos por impacto electrónico presentan estructuras adicionales causadas por el decaimiento

de iones negativos temporales (resonancias de Feshbach) cuyos perfiles son descritos por la ecuación de Fano (ec. II. 3. 20) como se discutió en la sección tres del capítulo anterior.

Una complicación adicional en los estudios realizados por medio de excitación electrónica (de baja energía) cerca del umbral de ionización es la interacción posterior a la colisión (Barker y Berry 1966, Reed 1975), que se denotará por las siglas I.P.C. y que se discutirá en detalle en la sección 4 de este capítulo.

Debido a la gran variedad de procesos físicos que se producen en la región de ionización, cuando el estudio se realiza por impacto electrónico (ver sección 4 del presente capítulo), la clasificación de las conspicuidades de la curva en este intervalo de energía es muy compleja. Para poder simplificar esta situación, en el presente trabajo se ha elegido como metodología la detección de metaestables, que presenta algunas ventajas sobre otras técnicas experimentales, entre las cuales se encuentra que las conspicuidades solo se deben al decaimiento de iones negativos temporales, como se discute en la sección 5 del presente capítulo.

## 1.1 Dispositivo experimental.

Para obtener un espectro de resonancias con gran resolución (Schultz 1973) hay que tomar en cuenta el hecho de que esto se puede lograr si el haz electrónico incidente ó el dispersado tienen una buena discriminación energética. En el caso de experimentos de gran resolución, como los que involucran excitación de metaestables (Brunt et al 1976, 1977) es necesario que el haz incidente tenga una dispersión energética muy baja.

El aparato utilizado en este trabajo, es un espectrómetro de impacto electrónico que consta de una fuente de electrones, un monocromador y un detector de metaestables (figura I). La fuente de electrones es un triodo cuyo cátodo es un alambre de tungsteno. El monocromador es un selector electrostático hemisférico de aproximadamente 5 cm. de radio, que desvía  $180^\circ$  al haz electrónico. Antes y después del monocromador, se tiene un sistema de lentes que permite enfocar al haz electrónico sobre el blanco. La energía del haz electrónico puede ser ajustada de 5 a 60 eV con una dispersión energética de aproximadamente 20 meV.

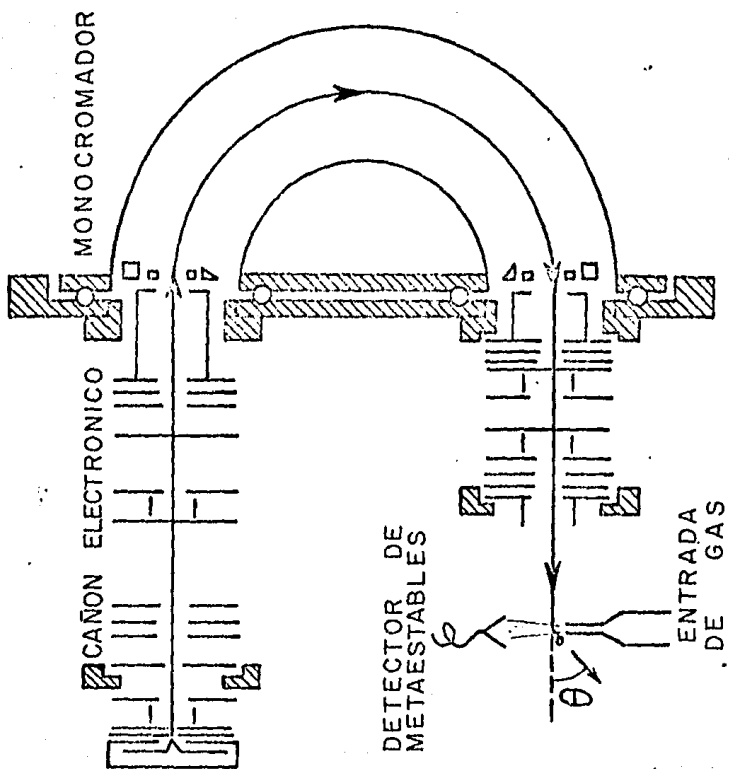


Fig. V

El gas bajo estudio se introduce a la región de colisión a través de un tubo capilar de iridio-platino cuyo diámetro interno es de 0.5 mm. El tubo se coloca perpendicular al haz electrónico con objeto de reducir el ensanchamiento Doppler.

El detector de metaestables consiste de un multiplicador electrónico continuo (channeltron), cuyo diámetro de entrada es de 1 cm. y que se coloca a una distancia de 2 cm. de la salida del gas.

Las funciones de excitación de metaestables se obtienen midiendo la producción de metaestables detectados como función de la energía incidente. En la práctica, a la energía del haz electrónico se superpone un voltaje de rampa, sincronizado con el barrido de los canales de un multiescalador.

El tiempo de tránsito de los átomos del gas desde la región de interacción hasta el detector es del orden de  $10^{-4}$  s. Por razones de eficiencia en la detección, cualquier estado que tenga vida media mayor que  $10^{-6}$  s (es decir mayor que el tiempo de decaimiento de transiciones dipolares eléctricas permitidas, que es del orden de  $10^{-7}$  s.) se con-

sidera como metaestable.

El detector de metaestables es también susceptible a electrones, iones positivos y fotones u.v. La contribución de estos últimos es muy baja, ya que el ángulo sólido subtendido por el detector en la región de interacción es muy pequeño, y se considerará despreciable. Para eliminar a las partículas cargadas, se antepone un voltaje negativo (respecto de tierra) y una diferencia de potencial cuyo objeto es de repeler a los electrones y desviar a los iones, respectivamente.

Los pulsos que llegan al detector son amplificadas y la señal pasa a un multiescalador. Después de un "número suficiente" de repeticiones se obtiene un espectro de intensidad como función de la energía. El "número suficiente" de repeticiones queda condicionado por la estadística que se quiere lograr; es decir por el hecho de que la relación señal a ruido sea lo suficientemente grande como para permitir un análisis seguro de los datos.

## 1.2 Calibración de la energía electrónica incidente.

La validez de cualquier conjunto de datos experimentales que se obtenga depende de la calibración de la energía de los electrones proyectiles. Esta calibración no es trivial y se han escrito una gran cantidad de artículos al respecto en estos últimos diez años.

En general la calibración inicial se hace por medio de un potencial de ionización conocido ó bien por un potencial de excitación; muchas resonancias importantes (p.ej. la resonancia  $(1s\ 2s^2)^2\ S$  en el He) se calibran con estos estándares y estas, a su vez pueden ser usadas como puntos de calibración para la escala de la energía electrónica (siempre y cuando el ancho natural de estas sea estrecho comparado con la dispersión energética electrónica). Tales calibraciones se han llevado a cabo con una aproximación de  $\pm 0.03$  a  $\pm 0.05$  eV (Schultz 1973).

En el presente trabajo la escala de la energía electrónica incidente se calibró en base a las posiciones de producción de estados metaestables, cuyas energías son conocidas con mucha precisión tanto

teórica como experimentalmente (Brunt et. al 1976).

En la figura VI se muestra el espectro usado para la calibración del Ne; en los demás gases estudiados, se tiene un espectro semejante y el procedimiento de calibración es el mismo que se describe a continuación.

Este espectro se obtiene "barriendo" la energía de los electrones proyectiles en un intervalo que va de aproximadamente 0.5 eV por debajo del primer estado excitado del blanco hasta la energía del primer potencial de ionización ( $\Delta E \sim 5 \text{ eV}$ ) con el procedimiento descrito en la sección 4 de este capítulo.

De esta manera, con un canal o grupo de canales se puede asociar la energía del umbral para la producción de metaestables y, con ello, se hace una comparación con una escala predeterminada. En caso de existir alguna diferencia, es esta última la que se corrige por un factor constante (la diferencia en cuestión). Una vez hecho esto, a cada canal del multicanal le corresponde una energía específica (o mejor aún, un intervalo pequeño de energía  $\Delta E/N$ ) y, entonces el aparato queda calibrado.

Por ejemplo en el caso del Ne (figura II) el número



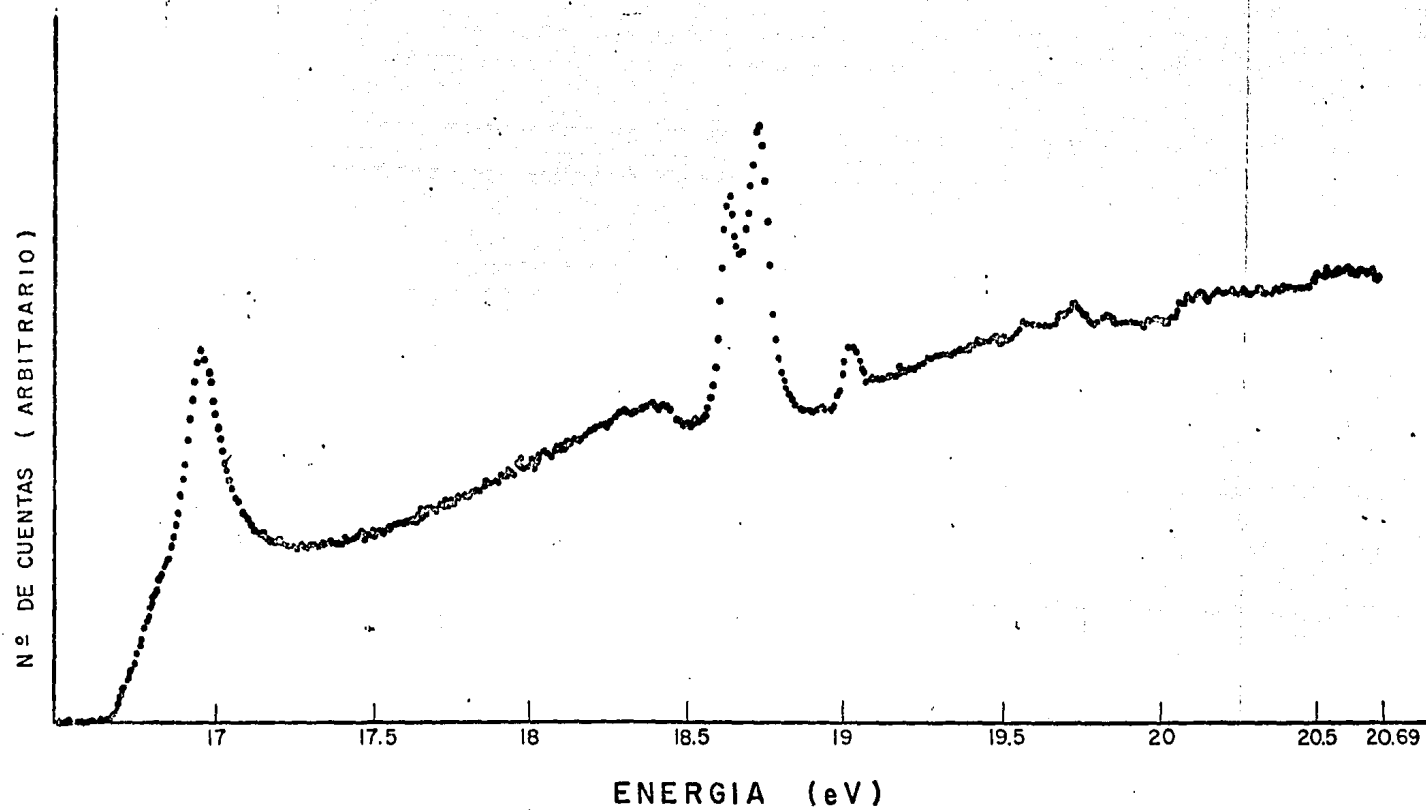


Figura VI

ESPECTRO DE CALIBRACION DEL NE

ro de canales involucrados en el umbral de metaestables (es decir, el número de canales entre la parte horizontal de ruido y la parte lineal del espectro) es cuatro. Esto corresponde a una indeterminación energética de  $\pm 0.03$  eV, al segundo de los cuatro canales en cuestión. Cabe mencionar que esta calibración permite adicionalmente, estimar la dispersión energética del haz electrónico.

### 3. Resultados experimentales.

En las figuras VII a, VII b, VIII y IX, se muestran los espectros\* de estados metaestables para el Ne, Ar y Kr, en los intervalos de energía electrónica incidente de 41.5-51 eV, de 24-33 eV y de 22.5-32 eV respectivamente, lo cual corresponde, en cada caso, a energías arriba del primer umbral de ionización.

Cabe señalar, que en cada uno de los espectros se realizó un "alisamiento" para sustraer el "ruido de fondo", superpuesto al cual aparecen las conspicuidades.

En el caso del Ne se utilizaron dos diferentes m<sub>í</sub>

\* Los espectros fueron obtenidos por el M.en C. R. Gómez con el espectrómetro electrónico de la U. de Windsor (Canada)

todos de "alisamiento", en la figura VII. b se utilizó la técnica descrita por Carboneau et al. (1973), que es un método que permite la detección de estructuras superpuestas a un continuo, actuando como un filtro ajustable de frecuencias, en el sentido de que selecciona estas de acuerdo a su ancho natural sin introducir estructuras espurias.

Cabe mencionar que los únicos trabajos existentes en la bibliografía que utilizan detección de estados metaestables en la región energética en la que se realizó el presente estudio (i.e. arriba del primer umbral de ionización) es el de Huard et. al. (1978) en el Ne y el de Marchand y Cardinal (1979) en el Ar. (en la figura VII c. se muestra el espectro obtenido por Huard et. al. (1978) en el Ne), los cuales tienen una resolución de 70 meV. Sin embargo, resulta bastante dudoso que hayan trabajado con esta resolución; al comparar su espectro (fig VII c), con el del presente trabajo (figs. VII a y VII b), se nota que hay una gran diferencia en el número de conspicuidades entre ambos. Si ellos hubieran trabajado con la resolución que mencionan, debieron haber encontrado muchas más conspicuidades de las que aparecen en su espectro, ya que, como se

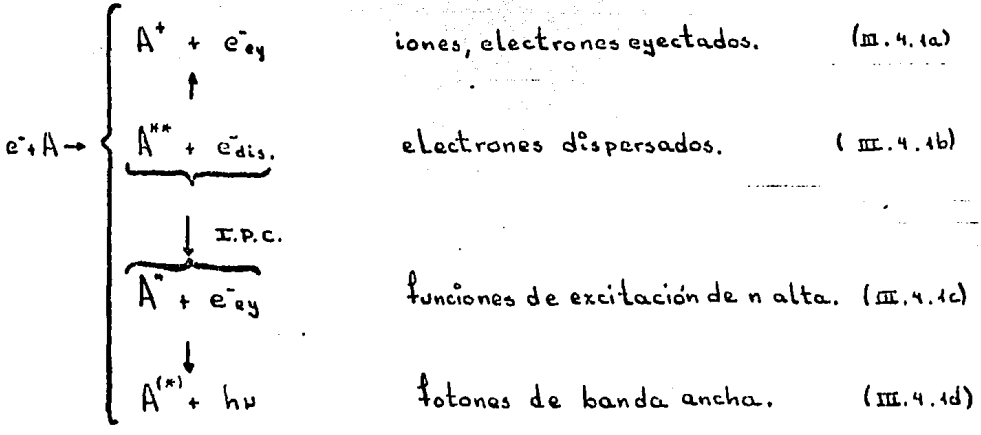
puede notar, en el espectro del presente trabajo, estas tienen anchos del orden de 300 meV. (10 canales).

Antes de intentar dar una clasificación a las conspicuidades que aparecen en los espectros de las figuras VII, VIII y IX, es necesario estudiar cuáles son los procesos físicos involucrados, en esta región energética, en una colisión electrón-átomo y a este estudio se asociará la siguiente sección.

### § 4. Mecanismos físicos.

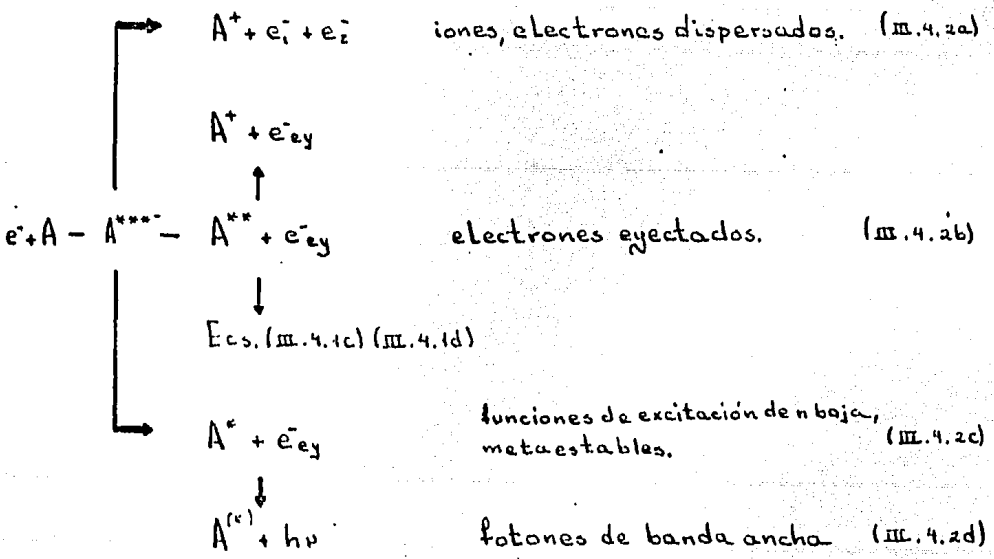
Al analizar los resultados experimentales, es difícil determinar que conspicuidades son debidas a estados autoionizantes y cuáles a estados de ión negativo y estos problemas aumentan por las complicaciones introducidas por la interacción posterior a la colisión.

En la región energética arriba del primer potencial de ionización, los mecanismos relevantes de excitación por impacto electrónico y de decaimiento de los estados neutros autoionizantes, es tan representados por las ecuaciones siguientes:



donde la columna del lado derecho indica los canales en los cuales se observa el proceso.

Los procesos relevantes para la formación de iones negativos son:



Como se observa en la ecuación (III.4.1) en el paso (III.4.1b) → (III.4.1c) interviene el efecto posterior a la colisión que se discutirá ampliamente, pues es motivo de muchas controversias en la interpretación y obviamente en la clasificación de los resultados experimentales.

En el caso de las ecuaciones (III.4.2) el ión negativo  $A^{***-}$  puede decaer por la eyección de dos electrones (ecuación (III.4.2a)), por la eyección de un electrón (III.4.2b), en el conjunto de ecuaciones (III.4.1), o por la eyección de un electrón (III.4.2c) en un estado excitado una vez.

De todos estos procesos físicos, el único que da lugar a estados metaestables (que son los estados que se estudian en el presente trabajo) es el que se describe en la ecuación (III.4.2c). Aunque pudiera parecer que el proceso (III.4.2b) seguido del (III.4.1c) o directamente este último proceso, dieran lugar a estados metaestables, esto es muy improbable como se discute en la sección 5 de este capítulo. Esta discusión, se basa en algunas consideraciones sobre la interacción posterior a la colisión, que se expone a continuación por su importancia para la interpretación.

#### 4.1 Interacción posterior a la colisión. En 1966

Barker y Berry proponen un modelo de interacción posterior a la colisión, para explicar los intercambios energéticos de las partículas salientes de una colisión (electrón-átomo ó ión-átomo), cuando la energía total del sistema es ligeramente mayor que la de alguno de los estados autoionizantes del átomo.

El experimento de Barker y Berry (1966) consistió en excitar los estados autoionizantes del He por impacto con iones He<sup>+</sup>, y estudiaban la distribución de los electrones eyectados después de la colisión.

Aproximadamente a 36 eV. observaron un pico de perfil asimétrico que variaba de posición y ancho al variar la energía de los iones incidentes.

Para explicar estos comiientos de energía proponen que al decaer el estado autoionizante, el átomo se encuentra en el campo coulombiano del ión He<sup>+</sup> reculante y, consecuentemente la energía final del electrón eyectado se reduce por la energía coulombiana negativa.

Claramente este modelo no es válido para grandes comiientos de energía AE, pero en el caso de que AE sea pequeño, da una probabilidad de distribución la cual está directamente relacionada con la probabilidad de decaimiento del estado autoionizante.

De aquí Barker y Berry encuentran que los corrimientos en la energía y el ancho del pico son proporcionales a  $E^{-1/2}$ , donde  $E$  es la energía de los iones incidentes, lo cual se ajusta bien a lo observado experimentalmente, para la posición del pico, pero discrepa bastante para el ancho de la línea.

Este modelo proporciona una explicación posible para los cambios energéticos de los electrones eyectados cuando los átomos son excitados por partículas cargadas lentas.

Por otra parte, Hicks et. al. (1974), también excitan los estados autoionizantes del He, sólo que los proyectiles son electrones con energía cercana al umbral de estos estados.

En este caso también debe existir I.P.C., ya que el electrón dispersado crea un potencial coulombiano en el átomo autoionizado.

Los valores de  $\Delta E$  observados para los primeros cuatro estados autoionizantes del He fueron ajustados a la ecuación obtenida por Barker y Berry, agregando una constante adicional, esto es:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \frac{e^2 \Gamma}{4\pi\epsilon_0 \hbar (2mE_i)^{1/2}} - E_c = \frac{\Gamma}{2} \left( \frac{I}{E_i} \right)^{1/2} - E_c \quad (\text{III.3.1})$$

donde  $\Gamma$  es el ancho efectivo del estado,  $I$  la energía

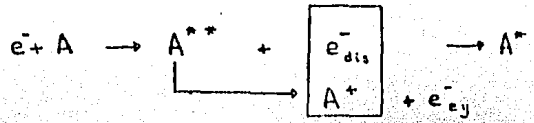


de ionización del H atómico,  $E_c$  una constante empírica y  $E_1$  la energía que debería tener el electrón dispersado en ausencia de la I.P.C, esto es:

$$E_1 = E_i - E_{ex} \quad (\text{III.3.2})$$

donde  $E_i$  es la energía incidente y  $E_{ex}$  la energía de excitación del estado autoionizado.

En este caso el aumento en la energía del electrón excitado se ve contrarrestada, obviamente, por una disminución equivalente en la energía del electrón dispersado. Esta pérdida energética  $\Delta E$  del electrón dispersado puede ser igual a  $E_1$  (la cual debería tener en ausencia de la I.P.C). Mas aún, puede exceder a esta energía, lo cual querría decir que el electrón quedó atrapado en el campo del átomo ionizado, formando un estado con energía negativa  $E_1 - \Delta E$ ; esto es:



Esto constituye un mecanismo extra para la formación de estados excitados y evidencia un intercambio

energético entre el electrón eyectado y el dispersado.

Existen varias dificultades para deducir  $\Delta E$  del experimento. Read (1975) ha encontrado que para el estado  $(2s^2)^1S$  del He la dependencia de  $\Delta E$  con  $E_1$  es de la forma

$$\Delta E = 0.57 E_1^{-1.2} \quad (\text{III. 4.1.3})$$

### 1's Interpretación de los datos experimentales.

Como se mencionó en la sección cuatro del presente capítulo, la interpretación de los rasgos característicos (conspicuidades) en esta región energética es muy compleja, debido a la gran variedad de fenómenos competitivos que intervienen en la desexcitación del sistema físico.

Existe en la literatura una controversia fuerte en la interpretación de los datos experimentales y que da lugar a dos corrientes; por un lado se encuentran los seguidores de la Universidad Laval, que aseguran

ran que la mayoría de las conspicuidades son debidas a estados neutros simple y doblemente excitados autoionizantes del tipo  $[nsnp^2]^*(n+1)l$  y  $[no^2np^2]^*(n+1)l(n+1)l'$ . Por otro lado, la U. de Manchester, asegura que los rasgos característicos en los espectros son debidos a la formación de iones negativos temporales (resonancias de Feshbach), los cuales se forman cuando el electrón incidente queda temporalmente atrapado en el estado neutro excitado, como se vió en los capítulos anteriores.

La argumentación de los seguidores de la U. de Manchester en contra de la interpretación de la U. de Saval es discutida ampliamente en el trabajo de Wilden et. al. (1977). En este, se estudia el espectro de electrones excitados en el Ne en el intervalo de energía 41-46 eV y se compara con los resultados e interpretación de Bolduc et. al. (1972) y de Bolduc y Harnet (1973) (Universidad Saval). En este trabajo Wilden afirma: "... Se encuentran serias dificultades al tratar de comparar nuestros datos de ión negativo con los de Bolduc. Ellos asignan la mayoría de las conspicuidades de su espectro a estados autoionizantes y alguna de ellas a estados de ión negativo. Un examen cuidadoso de sus datos muestra que ellos observan es

estructuras cercanas a todas las energías de resonancias que nosotros determinamos, con excepción de una conspicuidad a 48 eV. Esto da la posibilidad, de que todos los rasgos característicos en el Ne sean debidos a resonancias y la autoionización no juegue un rol importante, en la producción de estructuras observables.

Veillette et. al. (1976) han observado estructuras muy similares a las de Bolduc et. al (1972), en el Ne con espectroscopía de fotones de banda ancha. Sería sorprendente, asegura Wilder, que estas conspicuidades fueran debidas a la emisión directa de un fotón de los estados autoionizantes, ya que sus tiempos de vida son del orden de  $10^{-14}$  s. y tal proceso es extremadamente débil. Es más no hay estados excitados del  $Ne^{**}$  que puedan ser poblados por autoionización y produzcan fotones por transiciones permitidas. Es mucho más probable que sean resonancias de ión negativo las que estén involucradas con emisión de fotones, ya que pueden decaer por la emisión de un electrón a estados excitados del  $Ne^*$  que a su vez se desexcitan por emisión fotónica.

Harchand et. al. (1979) estudiando la producción

de metaestables en el Ar de 23-37 eV, dan la contra argumentación a Wilden. Ellos están de acuerdo en que las transiciones radiativas no son muy probables, pero no aceptan la conclusión de Wilden, ya que si bien coinciden en que el proceso es extremadamente débil, la probabilidad de que ocurran tales transiciones no es cero y pueden dar lugar a estructuras observables en el espectro. Es más, afirman, el modelo de I.P.C. provee un mecanismo por el cual los estados neutros altamente excitados pueden poblar los estados Rydberg de n-baja, ya que cuando se produce un estado altamente excitado, por medio de excitación electrónica, el electrón incidente todavía se encuentra presente cuando el átomo se auto ioniza y el electrón eyectado es "empujado hacia atrás" (shake down) para ser recapturado en un estado Rydberg de n-baja. Con lo cual concluyen que las estructuras observadas son debidas, en su mayoría, a estados doblemente excitados.

De la discusión anterior, es claro, que la interpretación de los espectros implica tomar una decisión con respecto a las dos posiciones y así optar por una de ellas.

Spence (1980) afirma, sin argumentación alguna y en contraposición a Marchand et al. (1979), que los estados neutros autoionizantes del átomo doblemente excitado pueden decaer, en efecto, a un estado Rydberg vía el mecanismo de I.P.C., pero que este estado corresponde a una  $n$ -alta. En el caso de que la afirmación de Spence fuera cierta, es altamente improbable que su posterior decaimiento fuera a un estado metaestable, ya que si el estado Rydberg es de  $n$  alta existen muchos canales de desexcitación posibles, por lo cual sería improbable que en el presente trabajo, alguna de las conspicuidades se deba a estados doblemente excitados, ya que, como se dijo con anterioridad, lo que detectamos es la producción de átomos metaestables.

Nesbet (1976), demuestra que en, el caso del He, la desexcitación del estado  $(2s^2)^1S$  vía I.P.C. es a un estado Rydberg  $15n1$  del He con  $n$ -alta. El argumento de Nesbet es el siguiente; de acuerdo con el modelo de I.P.C., Read (1975) ha encontrado que para el estado  $(2s^2)^1S$  del He la dependencia de  $\Delta E$  con  $E_1$  es de la forma (ecuación (III.3.3))

$$\Delta E = 0.57 E_1^{-1.2} \quad (\text{III.3.3})$$

donde, como se mencionó en la sección tres de este capítulo,  $E_1$  es la energía final del electrón proyectil y  $\Delta E$  es la energía cedida por el electrón (proyectil) al electrón eyectado en la autoionización. De esta ecuación (empírica), si  $E_1$  es menor que el valor crítico  $0.77 \text{ eV}$ , entonces  $E_1 < \Delta E$  y el proyectil queda con energía ( $E_1 - \Delta E < 0$ ) negativa; es decir, queda capturado por el ión positivo, formando un átomo neutro. La energía de amarré del electrón Rydberg será  $E_1 - \Delta E(E_1)$ , lo cual corresponde en el caso del He a estados Rydberg con  $n = 4, \dots, 8$ . Por tanto para el estado  $(2s^2) ^1S$  del He la desexcitación vía I.P.C. es a un estado Rydberg con  $n$  alta.

El mecanismo de I.P.C. implica una relación característica entre  $\Delta E$  y  $E_1$  para cada estado autoionizante en particular. Se deben esperar ecuaciones similares para los estados  $(2p^2) ^1D$  y  $(2s2p) ^1P$  del  $\text{He}^{**}$ , pero no han sido determinadas experimentalmente. Pero ya que los anchos de las líneas son menores (en los dos casos) que el ancho del estado  $(2s^2) ^1S$ , se esperaría que el valor crítico de  $E_1$

en estos dos estados sea menor que  $0.77 \text{ eV}$ , para que el electrón sea recapturado, puesto que, como los estados tienen un tiempo de vida mayor, si  $E_1$  sobrepasa el valor de  $0.77 \text{ eV}$ , es muy probable que el electrón dispersado este fuera de la región de interacción cuando ocurra la autoionización.

Se han encontrado ecuaciones similares a (III.3.3) para el estado  $2s2p^63s(1^1S)$  del Ne (Wilden et. al. (1977)) y para el  $3s3p^64p(3^1P)$  del Ar (Fryar et. al. (1976)), lo cual, a decir de Wilden, puede significar que la relación empírica representada por la ecuación (III.3.3) sea mas universal de lo que se creía. Desgraciadamente estas relaciones no han sido determinadas para ninguno de los estados doblemente excitados del resto de gases nobles (Ne, Ar, Kr, Xe), pero es de esperarse que sean del tipo (III.3.3), y por tanto que la desexcitación de los estados doblemente excitados a un estado Rydberg mediante el mecanismo de I.P.C en Ne, Ar, Kr, sea al igual que en el He; es decir, a un estado Rydberg de  $n$ -alta.

Spence (1980) desarrolla una técnica para espectroscopía de electrones dispersados que le permite separar energéticamente las estructuras debi-



das a los estados autoionizantes y a las resonancias. Si se comparan los datos del presente trabajo en el Ne con los de Spence (1980), se observa una correspondencia entre las conspicuidades que aparecen en el espectro de la fig. VII y las que asigna Spence a iones negativos.

Este último hecho, aunado a la discusión anterior permite asegurar que las conspicuidades en el espectro de metaestables en el Ne (fig. VII) son debidas a resonancias de ión negativo y que la autoionización no juega un papel importante en la producción de estructuras observables en el espectro de metaestables, y se supondrá que lo mismo ocurre en Ar y Kr.

5.1. Clasificación de las resonancias. Existen varios métodos que se pueden seguir para clasificar a las resonancias, entre los cuales se encuentran:

i) Aplicar el método gráfico de Spence (1979), desarrollado para estados simplemente excitados a la región de producción de estados doblemente excitados (Dassen et. al (1982)).

ii) Calculando la energía de las resonancias mediante una fórmula Rydberg modificada (Read (1977))

iii) Asignar la configuración a la resonancia a partir del estado neutro excitado ("padre") más cercano energéticamente a la resonancia (Spence (1975))

A continuación se discutirán cada uno de ellos.

En 1977, Spence encuentra para las resonancias en Ne, Ar, Kr y Xe abajo del primer potencial de ionización, que si se grafica las energías de resonancia contra las correspondientes energías de ionización, las resonancias que tienen configuraciones similares, para cada uno de los gases, caen en una línea recta.

Este método trabaja muy bien en esta región energética debido a la gran cantidad de trabajo experimental y teórico que se ha realizado (Brunt et al. (1976), Sanche et al. (1972)). De aproximadamente 50-55 resonancias clasificadas en Ne, Ar, Kr y Xe sin ambigüedad, Spence verifica su método con 46 de ellas. En la región energética del presente estudio, tan solo hay unas cuantas clasificadas sin ambigüedad, puesto que hay muy poco trabajo experimen

tal realizado en esta región energética. Es más, el análisis se complica en esta región debido a que es posible la excitación de estados asociados a las corazas iónicas simple y doblemente excitadas, esto es a la  $[nsnp^6]^+$  ( $^2S_{1/2}$ ) y a la  $[ns^2np^4]^{++}$  ( $^3P_{2,1,0}$ ,  $^1D_2$  ó  $^1S_0$ ), mientras que en el trabajo de Spence solo es posible la excitación de esta los asociados a la coraza iónica simplemente excitada  $[ns^2np^5]^+$  ( $^2P_{3/2, 1/2}$ )<sup>\*</sup>. En estas condiciones es muy aventurado establecer la validez del método gráfico en esta región energética como proponen Dassen et. al. (1982).

La utilización de una fórmula Rydberg modificada requiere del conocimiento de algunos parámetros, como son los defectos cuánticos y las constantes de apantallamiento para cada uno de los gases bajo estudio, y estas no han sido evaluadas en los gases nobles para energías que caen arriba del primer potencial de ionización.

\* En el presente trabajo no se consideran estados asociados a esta coraza, pues el límite de ionización de estas series cae por debajo del intervalo de energía considerado.

Es por las razones anteriores que en el presente trabajo se hará la clasificación a partir del estado neutro excitado "padre" (Spence 1975).

Spence obtiene varias conclusiones a cerca de la energía de amarré de un electrón Rydberg, al estado Rydberg "padre", estas son:

a) La probabilidad de que pares de electrones Rydberg formen un estado resonante es muy grande, cuando ambos electrones tienen el mismo número cuántico principal.

b) La afinidad electrónica de un estado Rydberg es mayor para un electrón cuyo momento angular sea el mismo que el del electrón Rydberg inicial.

c) Las afinidades electrónicas de estados Rydberg para configuraciones  $s^2$ ,  $p^2$  y  $sp$  son aproximadamente del orden de 0.5 eV, 0.01-0.10 eV y 0.01 eV respectivamente.

Con estas consideraciones que obviamente se obtienen a través de la teoría de la dispersión,

y tomando en cuenta que experimentalmente en el Ne (Spence (1980)) se observa que las resonancias asociadas a estados simplemente excitados caen energéticamente por abajo del "padre" y en el caso de que se asocian a estados doblemente excitados caen energéticamente muy cercanas o ligeramente arriba, del estado neutro "padre", ya es posible hacer una clasificación de las conspicuidades en los espectros, donde se supondrá que lo encontrado por Spence en el Ne, también se cumple en el Ar y en el Kr.

Esta clasificación se muestra en las figuras I, II y III para el Ne, Ar y Kr respectivamente. En la columna izquierda de estas figuras se muestra las configuraciones de los estados "padre" y en la derecha las conspicuidades que aparecen en los espectros del presente trabajo; las líneas centrales indican a que estado padre esta asociada la resonancia en cuestión. Para esta asociación se tomó en cuenta las consideraciones de Spence.

Para poder hacer una comparación de los resultados del presente trabajo, con los de otros autores, a continuación se estudia cada gas por separado.

### 5.1 Neón (configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^6$ )

En la figura VII. a y VII. b se muestran dos espectros de producción de metaestables, en los cuales se utilizan dos diferentes métodos de "alioamiento" (en la figura VII. b se utilizó la técnica descrita por Carbonneau et. al. (1973)). Como se puede ver de las figuras, se perdió bastante definición en la figura VII. b, así que se interpretará el espectro VII. a, tomando tan solo algunas comparaciones con el espectro de la figura VII. b.

En la columna izquierda de la figura I, se muestra las configuraciones de los estados neutros excitados ("padre") y en la columna derecha las resonancias asociadas a estos estados. Las energías de los estados "padre" han sido tomadas de los trabajos de Codling et. al (1967) (fotoabsorción), Edwards et. al. (1967) (excitación de estados autoionizantes en el Ne por iones de 150-250 keV) y de Boshken, Stoner (1975)

Las asignaciones de las resonancias se obtienen del análisis de la figura I y se comparan con los datos de Spence (1980), en la tabla I.

Cabe señalar que el único trabajo anterior a este que utiliza detección de metaestables en el Ne es el

de Huard et al. (1978) en el cual la resolución es muy pobre comparada con la del presente estudio, (fig VII c.)

La clasificación de las conspicuidades del espectro VII. a esta de acuerdo con la de Spence (1980), como se muestra en la tabla I, con excepción de algunos puntos finos que se discuten a continuación. Spence hace notar una anomalía relacionada con la energía del estado  $2s^2 2p^4 ({}^3P) 3s 3p^2$ , pues este resulta en su trabajo, 0.43 eV por "debajo" del estado neutro mas cercano a la resonancia, que es el  $2s^2 2p^4 ({}^3P) 3s 3p$ ; ya que como se dijo anteriormente, las resonancias asociadas a estados doblemente excitados caen muy cercanas o ligeramente arriba del estado neutro "padre".

En los dos espectros del Ne (fig VII a y VII. b) de este trabajo se puede notar la presencia de un mínimo pronunciado ( $\dagger$ ) en 44.43 eV precedido y seguido por dos conspicuidades ( $\epsilon$ ) la cual es mas notable en la figura VII (b) y (g) la cual es mas notable en VII. a. localizadas respectivamente en 44.27 y 44.78 eV.

De los trabajos en Ne (Sanche y Schultz (1972), Bolduc et al. (1972), Roy et al. (1975), Veillette et al. (1976) Welden (1977), Spence (1980) ninguno presenta una conspicuidad tan notable como la que aparece en este tra-

logio. Esto puede significar que las dos conspicuidades pequeñas ( $e$  y  $g$ ) no sean notables por las técnicas de detección utilizadas por estos autores.

Con los valores obtenidos en este trabajo, resulta claro que la asignación más viable de estas conspicuidades es  $2s^2 2p^4 (^3P_{2,1,0}) 3s 3p^2 (^3P)$  y las tres conspicuidades sean debidas a los tres valores posibles del momento angular " $J$ " de la coreza iónica  $(2, 1, 0)$ , como se observa que ocurre a menor energía con las resonancias asociadas a la coreza  $[2s 2p^5] (^2P_{3/2, 1/2})$  (Spence (1975)). Con esto resulta que no existe la anomalía que reporta Spence, y que, también en este caso la resonancia asociada con el estado doblemente excitado  $2s^2 2p^4 (^3P) 3s 3p$  tiene una energía "muy cercana" y "ligeramente mayor" que la de este estado. Cabe mencionar que esta es la primera vez que se reportan estas tres conspicuidades asociadas con la resonancia en cuestión.

Spence (1980), menciona que en su trabajo existen conspicuidades asociadas con todos los estados simplemente excitados de configuración  $2s 2p^6 (^2S) ns (^1S)$  y  $2s 2p^6 (^2S) np (^1P)$  excepto para el nivel  $5s$ , y que la razón de que esta resonancia no aparezca puede



ser debido a que la resonancia  $2s2p^6(^2S)5s5p$  oculta a la resonancia  $2s2p^6(^2S)5s^2$ . En el espectro de la figura VII. a. se observa una conspicuidad (l) en  $47.43\text{ eV}$ , mucho mas débil que la resonancia asignada a la conspicuidad (m), que se clasificó de acuerdo a Spence como  $2s2p^6(^2S)5s5p$ , en  $47.64\text{ eV}$ . Así que es posible que la conspicuidad (l), que no es notable en el trabajo de Spence, sea  $2s2p^6(^2S)5s^2$ .

### 5.3 Argón (configuración electrónica $1s^22s^22p^63s^23p^6$ )

En la figura VIII se muestra el espectro de producción de metaestables en el Ar. El espectro es esencialmente el mismo que el de Marchand et. al. (1979) y las diferencias se atribuyen a una mejor resolución energética en el presente experimento. Marchand et. al. atribuyen la mayoría de las conspicuidades a estados simple y doblemente excitados neutros. De los resultados en el Ne y la estructura similar de los dos espectros en el presente trabajo se interpretaron las conspicuidades como resonancias, como se mencionó anteriormente.

La clasificación de las resonancias, se hace como

en el Ne asignando la configuración a partir del estado neutro "padre", esto se muestra en la figura II y las clasificaciones se dan en la tabla II en la que se comparan con otros autores, los datos de los estados neutros excitados del Ar fueron obtenidos de los trabajos de Madden y Codling (1962) (fotoabsorción); Samson (1963) (fotoabsorción); Tweed (1976) (electrones dispersados); Bashken y Stoner (1975) (diagramas Grotianos). Desgraciadamente hay muy pocos datos espectroscópicos de los estados doblemente excitados, y en estos casos la energía de estos estados se extrapola, de los estados doblemente excitados lo calizados espectroscópicamente. Esta extrapolación se hace suponiendo una interacción muy pequeña entre la carga iónica y los dos electrones externos, lo cual ocurre en el Ne, y se examinara para el Ar. Tomando los datos espectroscópicos del Ar III, obtenidos del espectro atómico (Moore (1949)), las diferencias energéticas entre los estados correspondientes a las tres posibles configuraciones de la carga Ar III  $3s^2 3p^4$  ( $^3P$ ,  $^1D$ , ó,  $^1S$ ) son  $E(^1D) - E(^3P) = 1.74 \text{ eV}$  y  $E(^1S) - E(^1D) = 2.39$ . Ahora analizando los términos de Ar II, se observa que si se agrega un electrón  $4s$  a la carga, las diferencias de ener

gía no varió esto es Ar II  $[(^1D)4s(^2D_{3/2}) - (^3P)4s(^4P_{5/2})] = 1.79$  eV y  $[(^1S)4s(^2S) - (^1D)4s(^2D_{3/2})] = 2.31$  eV. Así que estas diferencias de energía se espera que no cambien con la adición de un segundo electrón 4s ó 4p. Esto también es válido en Ne.

Estos datos se ilustran en la figura XI. Cabe hacer notar que para la asignación se siguió la misma metodología que en el Ne (Spence (1980)) y que se describió anteriormente; y que siguiendo este criterio, la conspicuidad más prominente en el Ar (k) se asocia al estado  $3s^2 3p^4 (^3P) 4s 4p (^1P)$  y la más prominente en el Ne (f) se asoció al estado doblemente excitado  $2s^2 2p^4 (^3P) 3s 3p$ .

#### 5.4. Kriptón (configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4 3d^{10} 4s^2 4p^4$ )

El espectro de producción de metaestables en el Kr se muestra en la figura X. De los resultados en Ne y Ar, se interpretarán las conspicuidades como resonancias de ión negativo. Desafortunadamente en Kr existen muchos menos datos espectroscópicos que en el Ar, y prácticamente nada de experimentos en esta región energética. Los datos que se obtuvieron de los estados excitados "padre" son de

los trabajos de Samson (1963), Tweed et. al. (1976), Codling y Madden (1971), y se muestran en la figura XI.

La clasificación se da en base a esta figura y debe ser tomada como tentativa debido a la poca información que existe sobre el Kr. En la tabla III, se compara esta clasificación con otros autores, (Dassen et. al (1982)). Varias de las líneas del espectro IX, se deben asociar a resonancias de estados doblemente excitados, pero debido a que no se conocen las energías espectroscópicas de estos estados en el presente trabajo no se intenta dar una clasificación de estas.

Nº DE CUENTAS (ARBITRARIO)

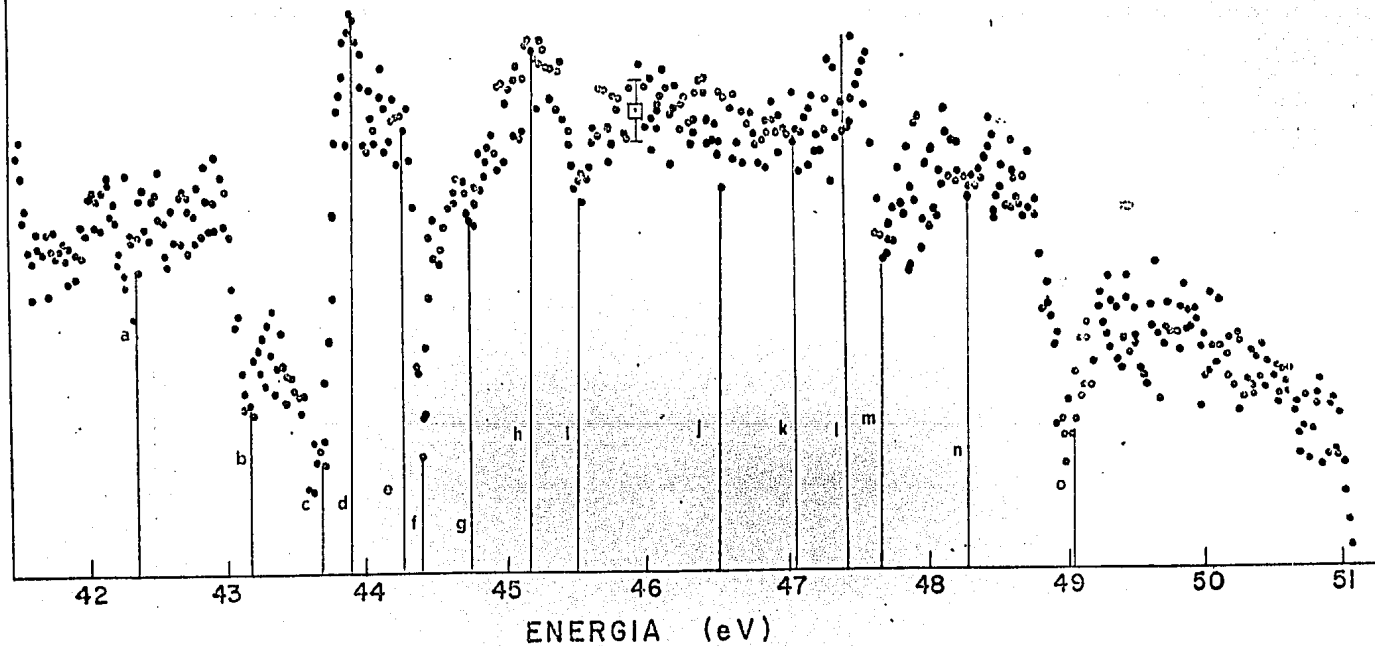


FIGURA VII.ª

ESPECTRO DE ESTADOS METAESTABLES EN LA CURVA  
DE IONIZACION DEL Ne

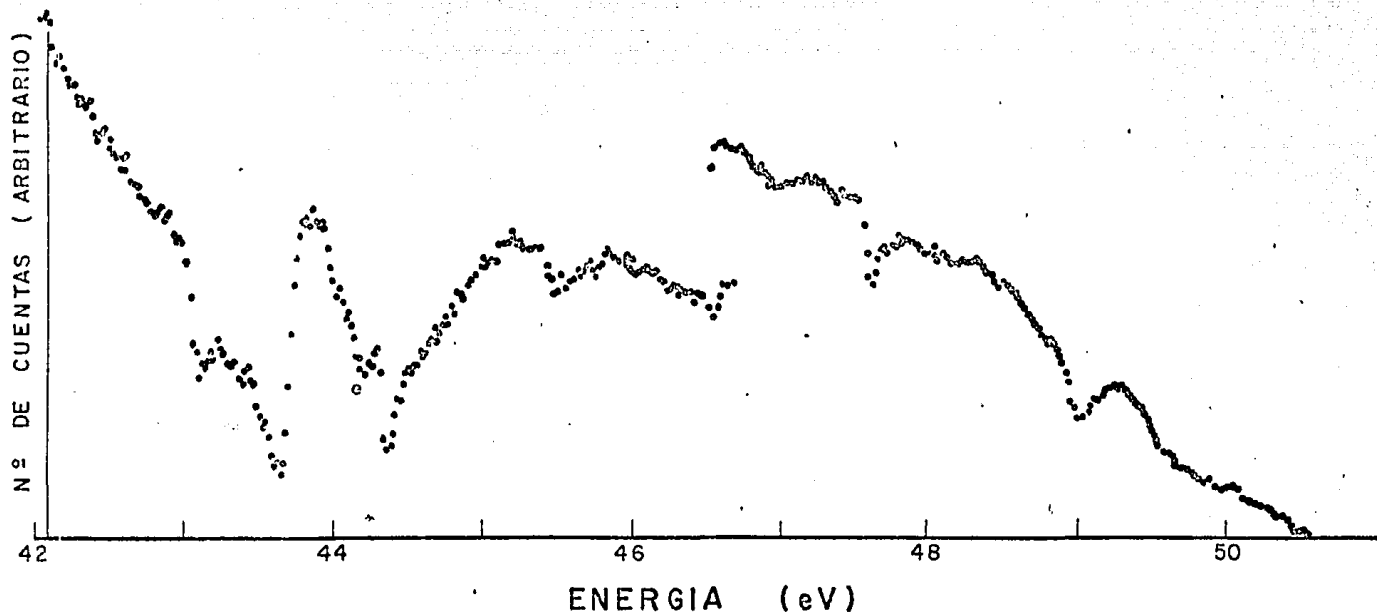


Figura VII. b

ESPECTRO DE ESTADOS METAESTABES EN LA CURVA DE IONIZACION  
DEL NE

HUARD ET AL.

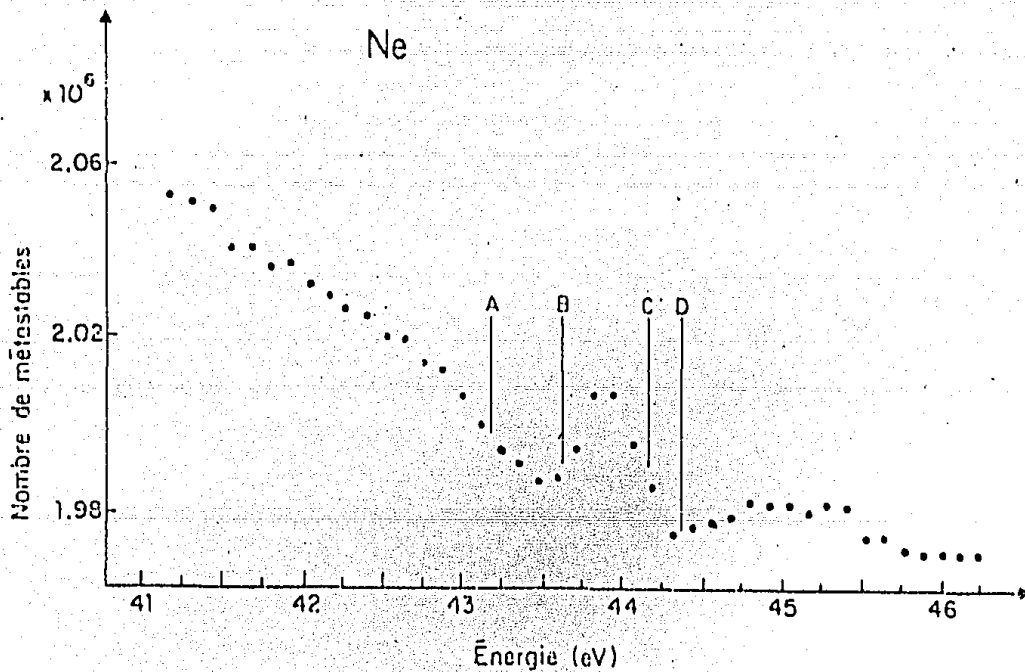


FIGURA VII c

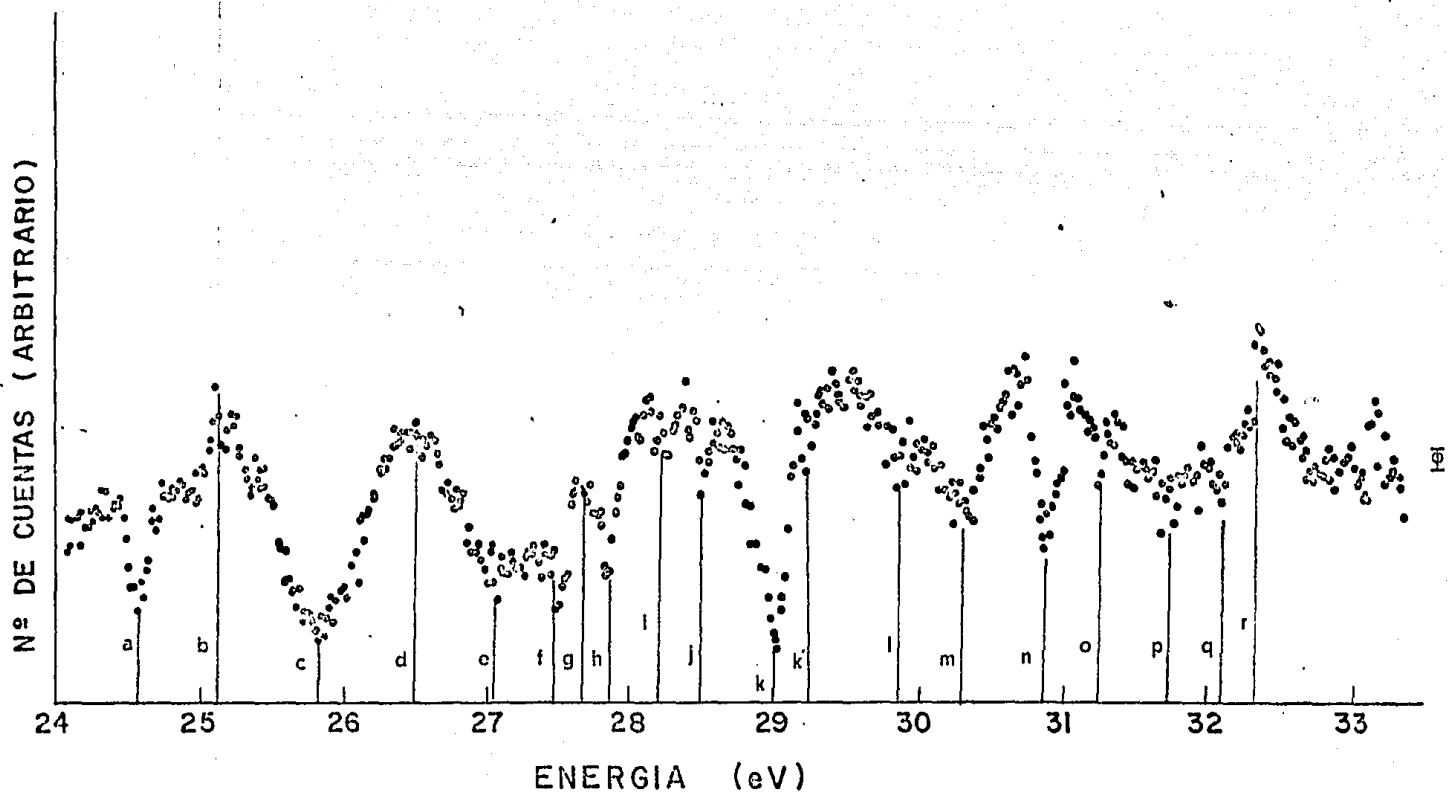


FIGURA VIII

ESPECTRO DE ESTADOS METAESTABLES EN LA CURVA  
DE IONIZACION DEL Ar.



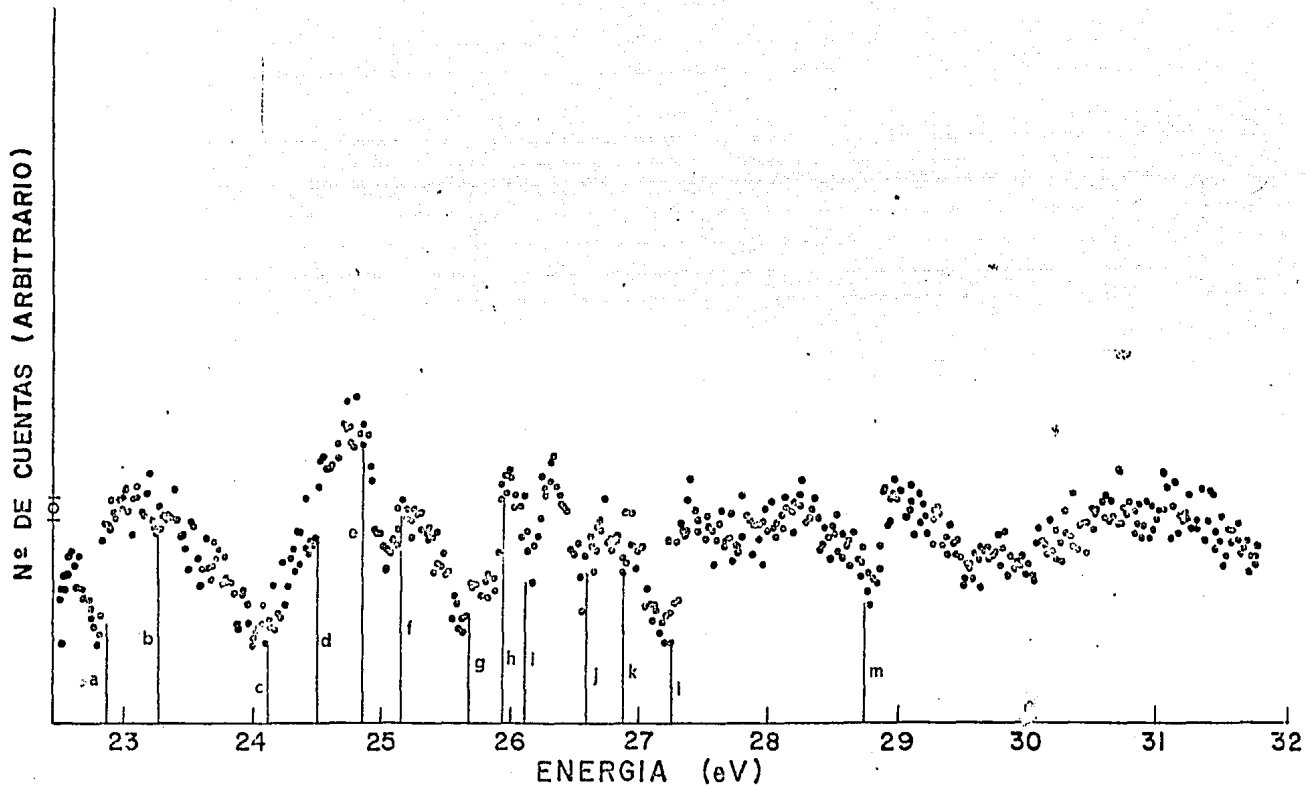


FIGURA IX

ESPECTRO DE ESTADOS METAESTABLES EN LA CURVA  
DE IONIZACION DEL Kr.

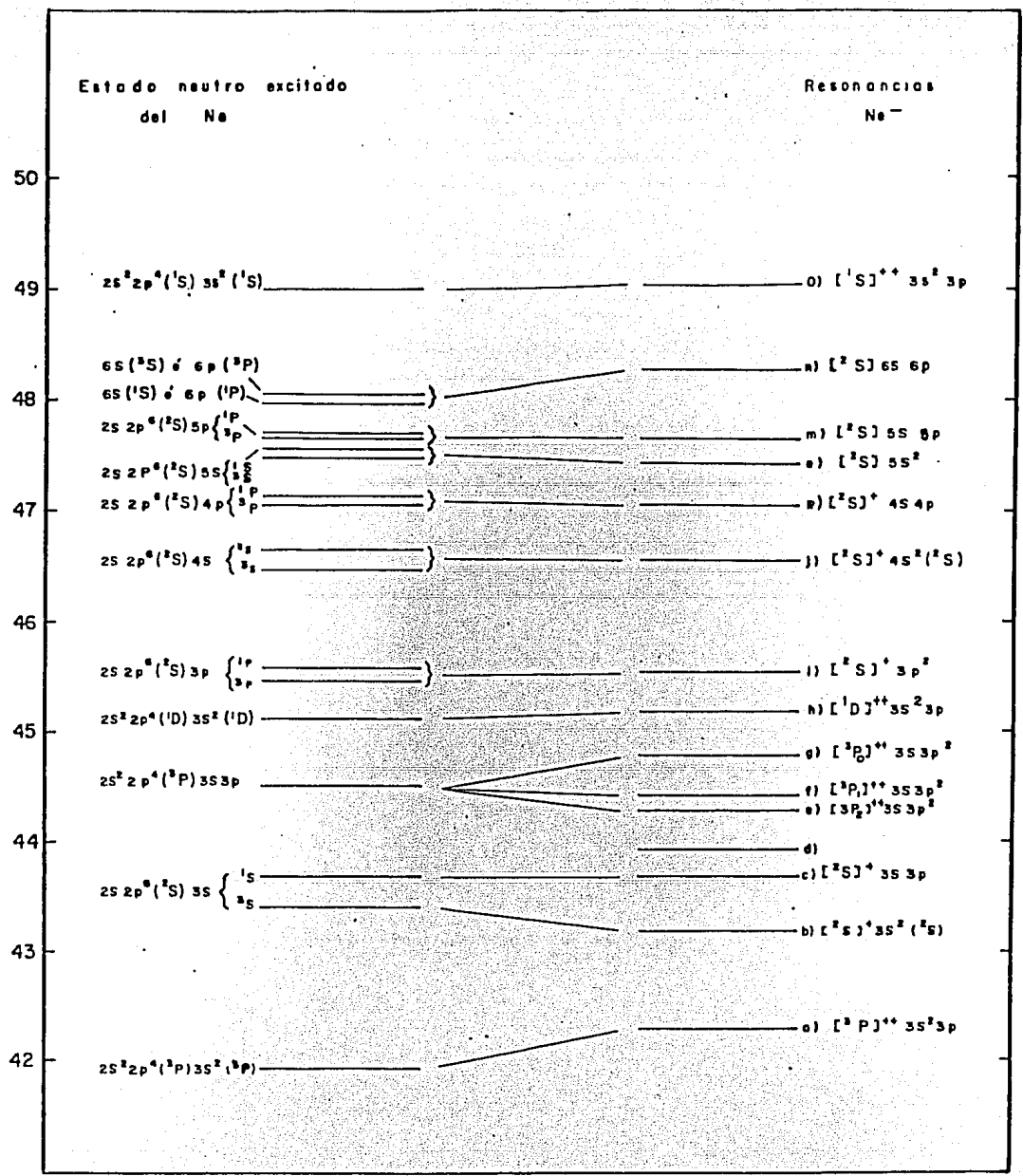


FIGURA X

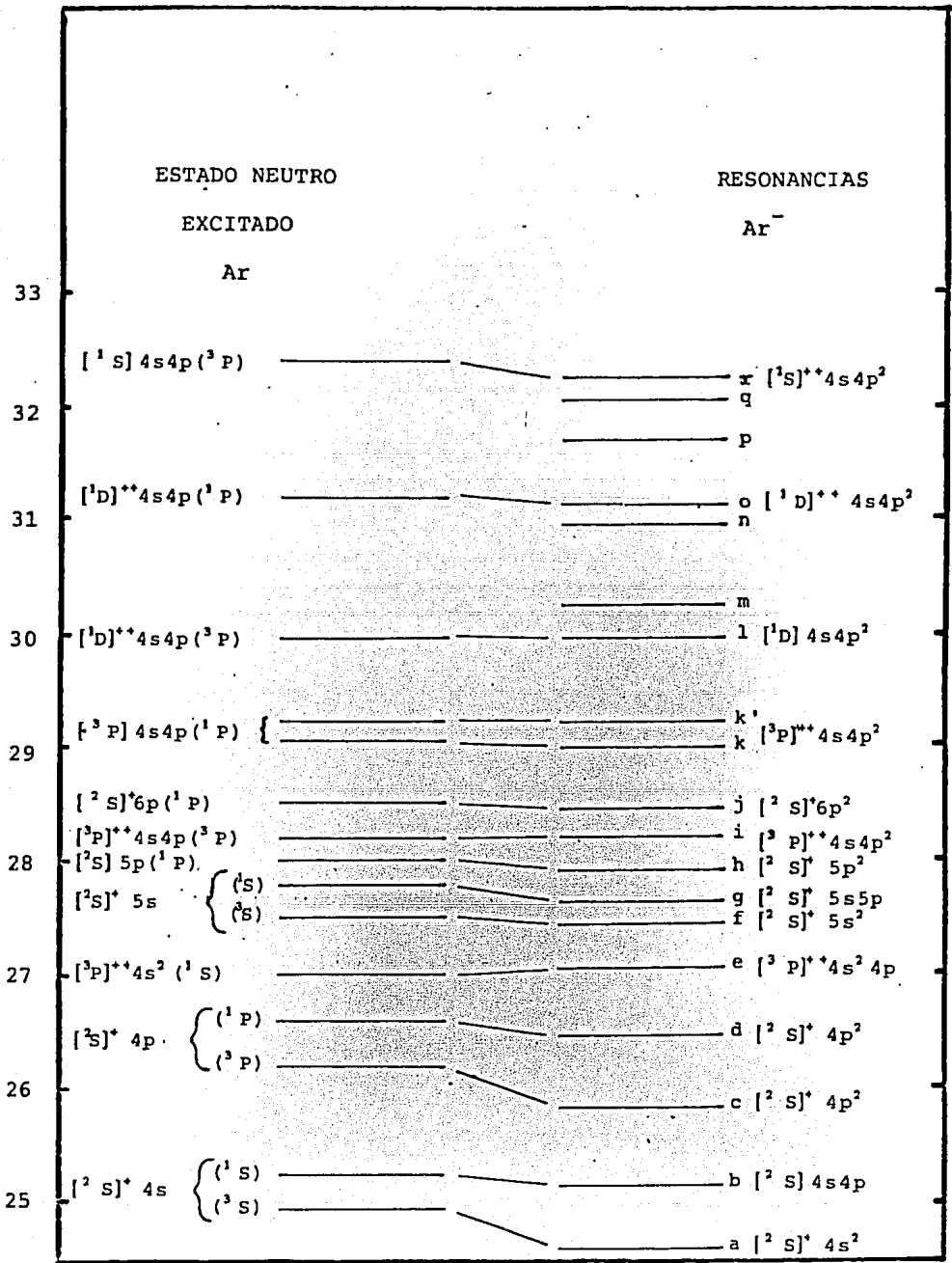


FIGURA XI

ESTADOS NEUTROS

RESONANCIAS

EXCITADOS Kr

Kr<sup>-</sup>

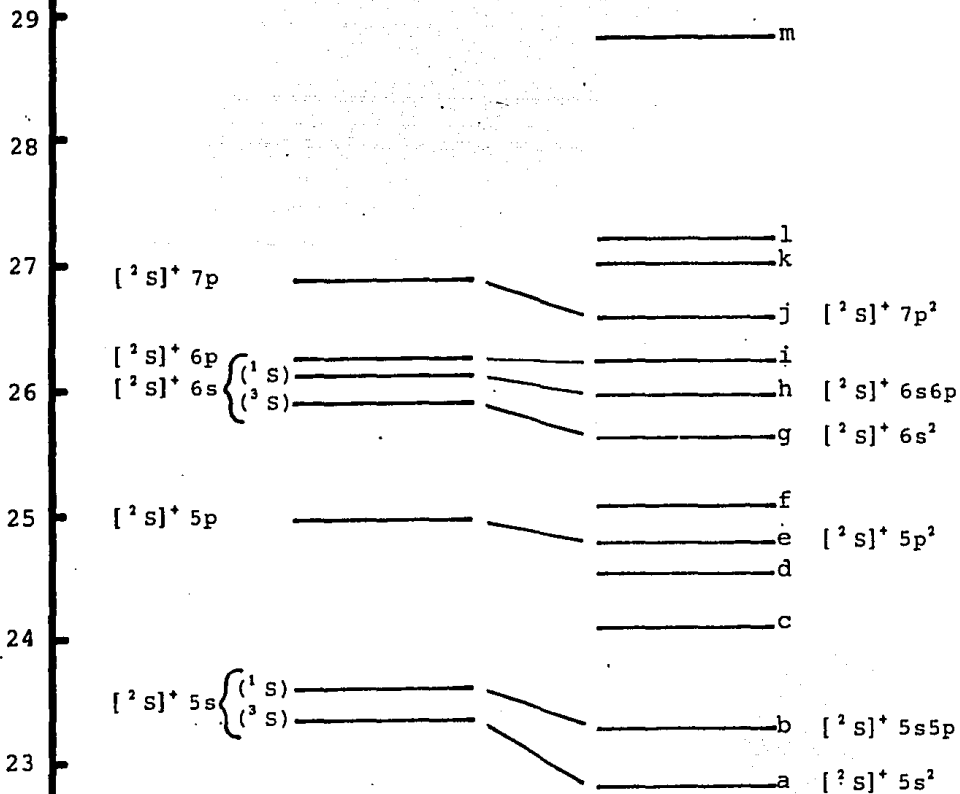


FIGURA XII

PRESENTE TRABAJO				
CONSPICUIDAD	ENERGIA (eV)	CLASIFICACION	SPENCE (1980)	COMENTARIOS
d	42.39	$25^2 2p^4 [^3P]^{*+} 3s^2 3p$	42.08	
b	43.49	$25^2 2p^4 [^2S]^+ 3s^2 (^2S)$	43.06	
c	43.68	$25^2 2p^4 [^2S]^+ 3s 3p$	43.69	
d	43.92		-	Este aumento agudo puede asociarse con el umbral de producción del estado $[^2S]^+ 3s (^2S)$ en 43.66eV
e	44.27	$25^2 2p^4 [^3P_1]^{*+} 3s 3p^2$	44.05	
f	44.43	$25^2 2p^4 [^3P_1]^{*+} 3s 3p^2$	44.37	
g	44.78	$25^2 2p^4 [^3P_0]^{*+} 3s 3p^2$	-	
h	45.18	$25^2 2p^4 [^1D]^{*+} 3s^2 3p$	45.17	
i	45.53	$25^2 2p^4 [^2S]^+ 3p^2$	45.42	
j	46.54	$25^2 2p^4 [^2S]^+ 4s^2 (^2S)$	46.52	
k	47.06	$25^2 2p^4 [^2S]^+ 4s 4p$	46.88	
l	47.43	$25^2 2p^4 [^2S]^+ 5s^2$	-	Dasson et al. (1982) clasifican estos conceptos (l) y (m) como $[^1D]^{*+} 3s 3p^2$
m	47.66	$25^2 2p^4 [^2S] 5s 3p$	47.60	
n	48.23	$25^2 2p^4 [^2S] 6s 6p$	48.00	
o	49.03	$25^2 2p^4 [^1S]^{*+} 3s^2 3p$	49.04	

TABLA I (No)

PRESENTE TRABAJO CONSPICUIDAD	ENERGIA (eV)	CLASIFICACION	SANCHE Y SCHULZ (1952)	MARCHAND ET. AL. (1954)	VEZLETTE ET. AL. (1954), (1956)
a	24.96	$3s^2 p^6 [^1S]^+ 4s^2$	24.48-24.65	24.95	24.45
b	25.15	$3s^2 sp^4 [^1S]^+ 4s^2 4p$	25.03	[24.95-25.20]	[25.02-25.26]
c	25.83	$3s^2 3p^4 [^1S]^+ 4p^2$	-	-	-
d	26.48	$3s^2 3p^4 [^1S]^+ 4p^2$	26.55	[26.65]	[26.58]
e	27.04	$3s^2 3p^4 [^1P]^+ 4s^2 4p$	26.84-26.90	26.92-27.15	[26.92]
f	27.42	$3s^2 3p^4 [^1S]^+ 5s^2$	27.40	[27.65]	[27.63]
g	27.63	$3s^2 3p^4 [^1S]^+ 5s^2 5p$	-	-	-
h	27.88	$3s^2 3p^4 [^1S]^+ 5p^2$	27.95-28.02	[28.95]	[26.92]
i	28.17	$3s^2 3p^4 [^1P]^+ 4s^2 4p^2$	-	[28.25-28.40]	-
j	28.46	$3s^2 3p^4 [^1S]^+ 6p^2$	-	-	-
k	29.00	$3s^2 3p^4 [^1P]^+ 4s^2 4p^2$	28.82-28.98	-	-
k'	29.22	$3s^2 3p^4 [^1P]^+ 4s^2 4p^2$	29.36	-	-
l	29.83	$3s^2 3p^4 [^1D]^+ 4s^2 4p^2$	29.82	[30.00]	[29.95]
m	30.25	?	30.00-30.20	30.20-30.45	30.35
n	30.83	?	30.13-30.86	30.40	-
o	31.24	$3s^2 3p^4 [^1D]^+ 4s^2 4p^2$	31.20-31.40	[31.40]	[31.40]
p	31.34	?	-	31.35	31.35
q	32.06	!	-	-	-
r	32.29	$3s^2 3p^4 [^1S]^+ 4s^2 4p^2$	-	32.25	-

Los paréntesis indican que los autores dieron una clasificación diferente.  
 Sanche y Schulz 1952 no clasifican las conspicuidades de su espectro.

TABLA II (Ar)

CONSECUCION	PRESENTE TRABAJO		DASSEN ET. AL. 1982	
	ENERGIA (eV)	CLASIFICACION	ENERGIA	CLASIFICACION
a	22.39	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 5s <sup>2</sup>	22.39	[4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 5s <sup>2</sup>
b	23.37	4s 4p <sup>6</sup> [2S] 5s 5p	23.37	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 5s 5p
c	24.08		24.08	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [1P] <sup>++</sup> 5s 6p <sup>2</sup>
d	24.51		24.51	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [3P] <sup>++</sup> 5s 5p <sup>1</sup>
e	24.74	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 5p <sup>2</sup>	24.74	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 5p <sup>2</sup>
f	25.04		25.04	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [1D] <sup>++</sup> 5s <sup>2</sup> 5p
g	25.59	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 6s <sup>2</sup>	25.59	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [1D] <sup>++</sup> 5s 5p <sup>2</sup>
h	25.92	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 6s 6p	25.92	4s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup> [1D] <sup>++</sup> 5s 5p <sup>2</sup>
i	26.20	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 6p <sup>2</sup>	26.20	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [1D] <sup>++</sup> 5s 5p <sup>2</sup>
j	26.55	4s 4p <sup>6</sup> [2S] <sup>+</sup> 7p <sup>2</sup>	26.55	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [1D] <sup>++</sup> 5s 5p <sup>2</sup>
k	26.89	-	26.89	-
l	27.19		27.19	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [3S] <sup>++</sup> 5s <sup>2</sup> 5p
m	28.80		28.80	4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> [3S] <sup>++</sup> 5s 5p <sup>1</sup>

TABLA III (Kr)

## CONCLUSIONES

Se ha utilizado la técnica de excitación de estados metaestables ya que en ella se manifiesta de manera bastante pronunciada la presencia de estados de ión negativo asociados con estados doblemente excitados. Los resultados demuestran un comportamiento uniforme en relación a las energías de las resonancias asociadas con estados de la serie  $nsnp^2 ml$  y con los estados doblemente excitados del tipo  $ns^2 np^4 ml ml'$ . En particular, se han detectado y clasificado, por primera vez, los estados  $[^3P] 3s 3p^2$  del Ne y  $[^3P] 4s 4p^2$  del Ar. La falta de información espectroscópica en Kr (y en el Xe) sugiere que se continúen estudiando estos gases incluyendo otras técnicas complementarias, como fotoabsorción, electrones eyectados, etc, con objeto de determinar si las características comunes encontradas en Ne y Ar también lo son en Kr y Xe.



## BIBLIOGRAFIA

En los capítulos I y II, se utilizaron los siguientes textos, para la revisión bibliográfica de resonancias, algunos de los cuales no se citan explícitamente en el trabajo.

- BURKE P. G., 1968. *Advances in Atomic and Molecular Physics* Vol. 4. Edited by Bates D. R. Academic Press. New York London.
- CHILD H. D., 1974. *Molecular Collision Theory*. Academic Press. New York London.
- GELTMAN S., . *Topics in Atomic Collision Theory*. Academic Press. New York London.
- MOTT N. F. AND MASSEY H. S. W., 1971. *The Theory of Atomic Collisions*. Third edition. Oxford University Press.
- ROMAN P., 1965. *Advanced Quantum Theory*. Addison-Wesley.

## REFERENCIAS

- BARKER R. B. AND BERRY H. W., 1966. Phys. Rev. 151, 14.
- BASHKEN S. AND STONER J., 1975. Atomic Energy Levels and Grotian Diagrams. North-Holland.
- BOLDUC E. AND MARNET P., 1973. Can. J. Phys. 51, 2408
- BOLDUC E, QUEMENER J. J., MARNET P., 1972. J. Chem. Phys 57, 1957.
- BURKE P., 1968. Advances in Atomic and Molecular Physics 4, 173. Edited by Bates D. R. Academic Press New York London.
- BRUNT J. N. H., KING G. C., READ F. H., 1976. J. Phys. B 9, 2195.
- BRUNT J. N. H., KING G. C., READ F. H., 1977. J. Phys. B 10, 433.
- CARBONNEAU R., BOLDUC E, MARNET. P., 1973. Can. J. Phys. 51, 505.
- COOLING K., MADDEN R. P. EDERER D. L., 1967. Phys. Rev. A 155, 26.
- COOLING K., MADDEN R. P., 1971. Phys. Rev. A 4, 2261.
- CHILD M. S., 1974. Molecular Collision Theory Academic Press. New York London.

DASSEN H.W., Mc. CONKEY J.W., KING G.C., GÓMEZ R.,  
1984, Abstracts, XIII ICPEAC, Gatlinburg,  
1, 196.

DASSEN H.W., GÓMEZ R., KING G.C., Mc. CONKEY J.W.  
1982. Por publicarse en J. Phys. B.

EDWARDS A.K. AND RUDD M.E., 1968. Phys. Rev. A 170, 140.

FANO U., 1961. Phys. Rev. 126, 1866.

FANO U., COOPER J.W., 1965. Phys. Rev. A 137, 1364.

FESHBACH H., 1958. Ann Phys 5, 357.

FRYAR J. AND Mc. CONKEY J.W., 1976. J. Phys. B 9, 619.

GRISSOM J.J., GARRETT W.R., COMPTON R.N., 1969. Phys.  
Rev. Lett. 23, 1044.

HICKS P.J., CVEJANOVIC S., COMER J., READ F.H.,  
SHARP J.M., 1974. Vacuum 24, 573.

HUARD D., MARHET P., BOLDWIC E., 1978. Can. J. Phys.  
56, 82.

MADDEN R.P., CODLING K., 1963. Phys. Rev. Lett. 10  
516.

MARCHAND P., AND CARDINAL J. 1979. Can. J. Phys. 57,  
1624.

MOORE C.E., 1949. N. B. S. (U.S.) Circ. n° 467.

NESBET R.K., 1976. Phys. Rev. A 14, 1326.

READ F.H., 1975. Radiation Research 64, 23.

- READ F. H., 1977, J. Phys. B 10, 449.  
 ROY D., DELAGE A., CARETTE J. D., 1975, Phys. Rev. 42, 45.  
 ROY D., DELAGE A., CARETTE J. D., 1976, J. Phys. B. 9, 1923.  
 SAMSON A. R. I., 1963, Phys. Rev. 132, 2122.  
 SANCHE L. AND SCHULZ L. G., 1972, Phys. Rev. A 5, 1672.  
 SCHULZ G. J., 1973, Rev. Mod. Phys. 45, 378.  
 SHARP J. M., COMER J., HICKS P. J., 1975, J. Phys. B 8, 2512.  
 SPENCE D., 1975, Invited papers, IX ICPAC, Seattle, 241.  
 SPENCE D., 1977, Phys. Rev. A 15, 883.  
 SPENCE D., 1980, J. Phys. B. 13, 1611.  
 SPENCE D. AND NOGUCHI T., 1975, J. Chem. Phys. 63, 505.  
 TAYLOR H. S., NAZAROFF G. V., GOLEBIEWSKI A., 1966, J. Chem. Phys. 45, 2872.  
 TAYLOR H. S., 1970, Adv. Chem. Phys. 18, 91.  
 TWEED R. J., GLEIBART F., PERESSE J., 1976, J. Phys. B 9, 2643.  
 VEILLETTE P. AND MARCHAND P., 1974, Can. J. Phys. 52, 930.  
 VEILLETTE P. AND MARCHAND P., 1975, Int. J. Mass Spectros. and Ion Phys. 18, 161.  
 VEILLETTE P. AND MARCHAND P., 1976, Can. J. Phys. 54, 1208.

WILDEN D. G., HICKS P. J., COMER J., 1977. J. Phys B

10, 1477.