REVISTA DE INVESTIGACIÓN DE FÍSICA, Vol. 3, Nros. 1,2:07-09. NOVIEMBRE 2000
Facultad de Ciencias Físicas, UNMSM, Lima – Perú.

FOTOIONIZACIÓN DE METALES

Oscar S. Monroy Cárdenas

Instituto de Investigación, Facultad de Ciencias Físicas,
Universidad Nacional Mayor de San Marcos,
Apartado 14-0149 Lima 14 - Perú

ABSTRACT: The interaction of metallic solids with two simultaneous radiation fields, X-ray and laser, is investigated using non conventional theoretical techniques. The gauge independent photo-ionization probability per unit time has been calculated for a valence band electron in a metal induced by X-rays and a circularly polarized laser beam of arbitrary intensity.

Keywords: photoionization, metallic solids, simultaneous interaction, X-rays, laser

SUMILLA.- La interacción de sólidos metálicos con dos campos de radiación, rayos X y láser, en forma simultánea es investigada utilizando técnicas teóricas no convencionales. Se deduce una fórmula para la probabilidad de fotoionización por unidad de tiempo, independiente del "gauge", de un electrón en la banda de valencia de un metal, inducida por rayos X y por un láser con polarización circular y de intensidad arbitraria.

Palabras Claves: fotoionización, sólidos metálicos, interacción simultánea, rayos X, láser.

1. INTRODUCCIÓN

Los efectos de las radiaciones X y láser en metales han sido investigados teóricamente para excitar un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción del metal [1]. El propósito de este trabajo es investigar la fotoionización por rayos X desde una superficie metálica asistido por la absorción multifotónica de un láser con polarización circular. Se supone un proceso de primer orden en la aproximación de Born en el cual los electrones son extraídos desde la banda de valencia del metal. Se aplica la aproximación de Volkov[3], para el estado final del electrón y también la aproximación dipolar eléctrica para los campos de radiación externos.

En la sección II se usa el formalismo de la matriz de transición S para deducir la probabilidad de fotoionización por unidad de tiempo. Se tiene en cuenta los requerimientos de invariancia en "gauge" para el operador $-e\vec{r}\cdot\vec{E}$, en el cálculo de los elementos de matriz. Se obtiene resultados analíticos de forma cerrada para valores arbitrarios de la intensidad de la radiación láser.

2. PROBABILIDAD DE FOTOIONIZACIÓN

El elemento de matriz S_{fi}, que describe una transición entre estados inicial (i) y final (f) bajo la acción de un campo electromagnético externo está dado por

$$S_{fi} = -\left(\frac{i}{\hbar}\right) \int \langle \Psi_f(t) | H'(t) | \Psi_i(t) \rangle \, dt, \tag{1}$$

donde $|\Psi_i(t)\rangle$ es el estado inicial del electrón ligado al metal, $|\Psi_f(t)\rangle$ es el estado final del electrón libre, y

$$H'(t) = -e\,\vec{r}\cdot\vec{E}_x(\vec{0},t) = -e\,\vec{r}\cdot\vec{E}_{ox}\,\mathrm{sen}\,\omega_x t, \tag{2}$$

es el hamiltoniano para la interacción dipolar eléctrica independiente de la elección de "gauge", el cual involucra a la amplitud del campo eléctrico $\vec{E}_x$, con frecuencia ω_x.

La función de onda para el electrón de valencia está dada por la función de Bloch:

$$\Psi_i(\vec{r},t) = u(\vec{r}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{r} - E't\right)\right], \tag{3}$$

donde $\vec{p}$ es el momento del electrón de valencia, $u(\vec{r})$ la amplitud modulante en la red cristalina y

$$E' = -\frac{p'^2}{2m^*} - E_o, \tag{4}$$

es su energía en la aproximación de la masa efectiva con una banda esférica. Las cantidades m* y E_0 representan la masa efectiva y la energía del vacío respectivamente.

Para el estado final se utiliza la función de onda de Volkov:

$$\Psi_f(\vec{r},t)=\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(p\cdot r-\int_0^t dt\,\frac{[p-e\vec{A}_L(\vec{0},t)]^2}{2m}\right)\right\}, \qquad (5)$$

donde $\vec{p}$ es el momento del electrón libre. El potencial vectorial $\vec{A}_L$ de la radiación láser con polarización circular izquierda o derecha puede ser escrito como [(6)]:

$$\vec{A}_L(\vec{0},t)=\frac{A_{0L}}{\sqrt{2}}(\hat{x}\cos\omega_L t\mp\hat{y}\ \mathrm{sen}\ \omega_L t), \qquad (6)$$

siendo $\hat{x}=(1,0,0)$ e $\hat{y}=(0,1,0)$, y ω_L la frecuencia del láser. Cuando se reemplaza la Ec.(6) en la Ec.(5) la función de onda $\Psi_f(\vec{r},t)$ se reescribe en la forma:

$$\Psi_f(\vec{r},t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}J_n(w)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\cdot\vec{r}-\left(\frac{p^2}{2m}+E_P-n\hbar\omega_L\right)t\pm n\hbar\delta\right]\right\}, \qquad (7)$$

donde $J_n(w)$ es la función de Bessel de orden n, y además:

$$w=s^{1/2}\gamma, \qquad \gamma=\left(\frac{2}{m\hbar\omega_L}\right)^{1/2}p\ \mathrm{sen}\ \theta,$$

$$s=\frac{E_P}{\hbar\omega_L}, \qquad (8)$$

y

$$E_P=\frac{eA_{0L}^2}{4mc^2}, \quad \delta=\mathrm{tg}^{-1}\frac{p_y}{p_x},$$

$$p_x=\vec{p}\cdot\hat{x}, \qquad p_y=\vec{p}\cdot\hat{y}, \qquad (9)$$

La cantidad s, en la Ec.(8), es el parámetro de intensidad del láser y E_P, en la Ec.(9), es la energía ponderomotriz del mismo.

Al sustituir las Ecs.(2), (3) y (7) en la Ec.(1), la integración temporal en el elemento de matriz nos conduce al resultado siguiente:

$$S_{fi}=\left(\frac{e}{2\hbar}\right)\varphi(\vec{p}-\vec{p}\,')\sum_n J_n^2(w)\times\left[\frac{\mathrm{sen}(\alpha_n t/2)}{\alpha_n/2}\right]\exp[i(\alpha_n t/2\mp n\delta], \qquad (10)$$

donde:

$$\varphi(\vec{p}-\vec{p}\,')=\int d^3r\,(\vec{E}_{ox}\cdot\vec{r})\,u(\vec{r})\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}\,')\cdot\vec{r}\right], \qquad (11)$$

y $p'=(m/m^*)(\hbar\pi/a)(n_1,n_2,n_3)$; es el momento del electrón dentro de la red cúbica de parámetro "a", (n_1, n_2, n_3: 1, 2, ...); además,

$$\alpha_n=\frac{E_n-E'-\hbar\omega_x}{\hbar} \quad \text{y} \qquad (12)$$

$$E_n=\frac{p^2}{2m}-E_P-n\hbar\omega_L. \qquad (13)$$

Por tanto, a partir de la Ec.(10) se deduce la probabilidad de fotoionización por unidad de tiempo:

$$\lim_{t\to\infty}\frac{|S_{fi}(t)|^2}{t}=\left(\frac{\pi e^2}{2\hbar}\right)|\varphi(\vec{p}-\vec{p}\,')|^2\sum_{n=-\infty}^{\infty}J_n^2(w)\times\delta\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{p'^2}{2m^*}+E_P-E_0-n\hbar\omega_L-\hbar\omega_x\right). \qquad (14)$$

3. DISCUSIÓN DEL RESULTADO

El argumento de la función δ en la Ec.(14) satisface el requerimiento de la conservación de la energía en el sistema: metal, rayos X y láser; esto es:

$$\frac{p^2}{2m}=\hbar\omega_x+n\hbar\omega_L-\left(\frac{p'^2}{2m^*}-E_0+E_P\right). \qquad (15)$$

En consecuencia, el electrón para quedar libre no sólo necesita vencer la "energía efectiva" E′ de la banda de valencia sino también la energía ponderomotriz E_P.

Si la ionización del metal es producida por los rayos X, la fórmula (14) predice que los electrones podrían tener un gran momento transferido por los fotones de rayos X debido al hecho de que las funciones de Bessel J_n^2, tendrían valores grandes.

4. CONCLUSIONES

La probabilidad de fotoionización por unidad de tiempo para un electrón en la banda de valencia del metal fue obtenida en forma analítica suponiendo un proceso de primer orden y utilizando la aproximación de Volkov.

La fórmula dada por la Ec. (14) se utilizará para calcular la sección eficaz de fotoionización de metales, como por ejemplo: Li, Na, K, (u otros metales como Au, Ag, Cu), por rayos X en la banda de energías de los keV y un láser polarizado circularmente de intensidad moderadamente alta, es decir,

$$10^{10}\ W/cm^2 \leq I_L \leq 10^{13}\ W/cm^2.$$

5. REFERENCIAS

1. **O. S. Monroy C.** "Efecto de las radiaciones X y láser en metales". Informe presentado al C.S.I. de la UNMSM (1999).
2. **H. Ibach y H. Luth.** Solid State Physics. Springer-Verlag (1995).
3. **H. Luth.** Surfaces and Interfaces of Solids. Springer-Verlag, 3rd de., (1995).
4. **U. Kreibig y M.Vollmer.** Optical properties of metal clusters. Springer Series in Materials Science, Vol 25 (1995).
5. **D. P. Landau, K. K. Mon y H. B. Shuttler** (eds). Computer Simulation Studies in Condensed-Matter. Physics VII. Springer Proceedings in Physics, Vol 78, (1994).
6. **H. Friedrich.** Theoretical Atomic Physics. Springer-Verlag, Berlin Heiderberg (1990).