

CLASIFICACION DE LAS RESONANCIAS

Hernán Estrada
Profesor Asociado
Departamento de Física
Universidad Nacional
Bogotá, Colombia

INTRODUCCION

En los últimos años se han hecho grandes progresos en la teoría de colisiones con el propósito de calcular de una manera precisa las secciones eficaces para la dispersión de electrones por átomos y moléculas. La observación de resonancias en las curvas de sección eficaz versus la energía es una tarea para los físicos de colisiones a bajas energías, físicos nucleares y físicos de partículas. El análisis de estas resonancias es la única manera de detectar estados cuánticos de corta duración.

Dada la importancia del tema, presento en este artículo algunos aspectos que deben ser tenidos en cuenta en el estudio de este fascinante tema

RESONANCIAS ELECTRON-MOLECULA

Para ciertas energías, el electrón incidente puede ser capturado temporalmente por el campo de la molécula blanco y se forma un ión negativo de corta duración, que corresponde a un estado intermedio del proceso de dispersión. Este tipo de dispersión es llamada resonante y el anión de corta vida es denominado resonancia. La resonancia da lugar a estructuras en la sección eficaz y pueden ser observadas como picos relativamente estrechos en las curvas de dependencia de las secciones eficaces con la energía del electrón incidente.

La formación y el decaimiento de la resonancia puede ser estudiado como un proceso de dos etapas, (indicado esquemáticamente en la figura 1). Se pueden definir las secciones eficaces de la captura y de los diferentes procesos del decaimiento.

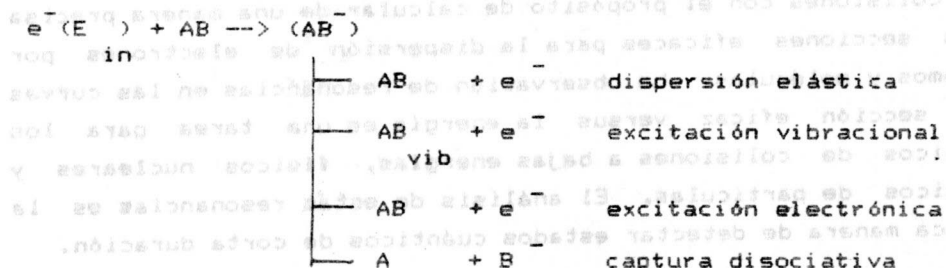


fig 1: esquema de la dispersión resonante de electrones como un proceso de dos etapas, con algunos canales posibles de decaimiento de la resonancia

CLASIFICACION DE LAS RESONANCIAS

Es de importancia para la clasificación de las resonancias el concepto de "estado electrónico padre". Este estado lo definimos como el estado de la molécula neutra que se obtiene por la remoción formal del electrón "extra" capturado. Una resonancia cuya configuración difiere de la configuración del blanco solamente por la adición de un electrón (en un estado virtual), es denominada resonancia de "una partícula" (1p), esta resonancia tiene el estado electrónico base como el estado padre. Las resonancias de "dos partículas-un hueco" (2p-1h) tienen un estado padre electrónicamente excitado, cuya configuración es obtenida a partir de la configuración del blanco pasando un electrón de un orbital ocupado a un orbital desocupado y capturando el electrón incidente en un orbital no ocupado (debe ser observada la analogía con los estados 1h ("Koopman") y 2p-1h ("no-Koopman") de los iones positivos). Una resonancia puede decaer en su estado padre por un proceso de un electrón, y el decaimiento de la resonancia en su estado padre es generalmente el canal de decaimiento preferido siempre y cuando este estado sea energéticamente posible.

Existen dos mecanismos de captura temporal del electrón por la molécula:

A) El electrón es atrapado por la "forma" del potencial, el cual debe tener una barrera centrífuga. Este caso es denominado "resonancia de forma". El momentum angular debe ser diferente de cero, esto es no hay resonancias de forma para dispersión de ondas s. Las resonancias de forma están energéticamente sobre su estado electrónico padre y a menudo decaen en el de una manera

muy eficiente dando lugar a estados de muy corta vida.

B) El electrón al chocar puede transferir suficiente energía a las partículas del blanco de tal manera que da lugar a una excitación del sistema, esta excitación lo atrapa de tal manera que el electrón no tiene suficiente energía para salir de nuevo. Si la resonancia está energéticamente por debajo de su estado padre es denominada "resonancia de Feshbach". El decaimiento de las resonancias de Feshbach requieren un cambio de la configuración electrónica del "core" debido a que el decaimiento en el estado padre no es energéticamente posible. A menudo estas resonancias son de larga duración.

El tiempo de vida de las resonancias, determinado por la eficiencia de la captura de electrones, puede ser obtenido indirectamente a partir del ensanchamiento en energía de las estructuras (picos) observadas. Estos tiempos están aproximadamente en el rango de 1 a 100 femto-segundos ($1 \text{ fseg} = 10e^{-13} \text{ seg}$) aunque se pueden encontrar vidas mayores para resonancias de Feshbach a bajas energías. Considerando el principio de incertidumbre, los tiempos de vida cortos dan lugar a anchos de energía de los decimos de eV a varios eV., que pueden ser detectados aún con espectrómetros de moderada resolución. Las resonancias de larga duración muestran típicamente estructuras bien definidas debido a los movimientos nucleares, mientras que en las que el electrón se separa en un corto tiempo comparado con el que es requerido para el movimiento de los núcleos son resonancias anchas y carecen de estructura.

Los tipos de resonancias que se encuentran más a menudo son:

A) La "simple" o también denominadas resonancia de forma $1p$, cuyo estado padre es el estado base de la molécula. La formación de las resonancias de forma $1p$ está caracterizada por grandes secciones eficaces de captura y por lo tanto por picos muy pronunciadas en los experimentos. El canal preferido de decaimiento es en general el formado por el estado electrónico padre acompañado de excitaciones vibracionales. La dependencia energética de la excitación de canales vibraciones es una segunda manera de observar tales resonancias. Las energías de las resonancias de forma $1p$ son interpretados en términos de las energías de los estados orbitales virtuales y del teorema de Koopman, dando así una valiosa información sobre los orbitales no-ocupados de la molécula.

B) Las resonancias de "core" excitado $2p-1h$ ocurren cuando la captura del electrón es acompañada por una excitación electrónica. El estado padre es en general un estado de valencia pero también puede ser un estado Rydberg excitado de la molécula. Estas resonancias se observan muy débilmente en un espectro de transmisión debido a que su formación a partir del estado electrónico base, siendo un proceso de dos electrones, es caracterizada por una sección eficaz de captura muy pequeña y afectan la sección eficaz sólo débilmente. Las resonancias de forma a menudo decaen en su estado padre electrónicamente excitado y pueden ser observados en las funciones de excitación de estos estados. La diferencia entre resonancias "simples" y de "core" excitado $2p-1h$ no es siempre posible debido a que los estados temporales de los iones negativos muestran las características de los dos tipos, indicando la mezcla de las configuraciones $1p$ y $2p-1h$.

C) Las resonancias nucleares excitadas de Feshbach ocurren a muy bajas energías y pueden ser importantes en la dispersión de ondas.

La clasificación de las resonancias esta indicada en la figura 2.

fig 2: clasificación de las resonancias

| configuración | energía respecto al estado padre | estado padre | nombre |
|---------------|----------------------------------|---|-----------------------|
| 1p | sobre | estado electr. base | simple forma |
| 2p-1h | sobre | estado excitado electrónicamente (a menudo de val.) | "core" excitado forma |
| 2p-1h | bajo | estado excitado electrónicamente (a menudo Rydberg) | Feshbach |

MECANISMOS DE CAPTURA EN LAS RESONANCIAS DE FORMA.

En esta sección se describe cualitativamente el mecanismo de captura del electrón en una resonancia de forma 1p con el ánimo de ilustrar la naturaleza de los estados electrónicos de autodisociación de los aniones. Una imagen conceptualmente útil ha sido desarrollada a partir de estudios en átomos y moléculas diatómicas.

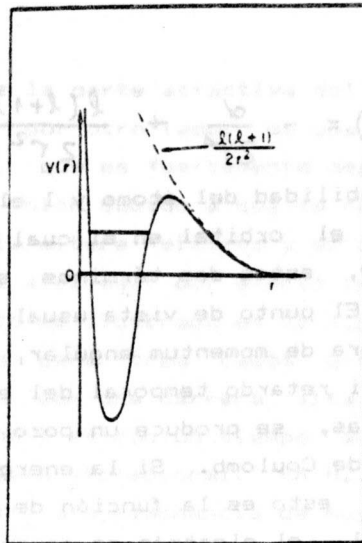


Fig 3: curva hipotética de potencial de un electrón con momentum angular l en el campo de un átomo como función de la distancia electrón-átomo.

Consideremos primero la dispersión electrónica por el campo esféricamente simétrico de un átomo. El haz incidente de electrones puede ser representado por una onda plana la cual contiene todas las componentes de momentum angular. Si el átomo tiene un orbital disponible no ocupado, caracterizado por un valor particular del momentum angular l , entonces el electrón incidente con esta simetría orbital apropiada puede ser temporalmente capturado. La figura 3 indica la forma cualitativa del potencial que encuentra el electrón incidente. Para grandes separaciones electrón-átomo, la interacción contiene dos términos importantes, un potencial de polarización atractivo y un potencial centrífugo repulsivo asociado con el momentum angular del electrón:

$$V(r) = -\frac{\alpha}{2r^4} + \frac{l(l+1)}{2r^2}$$

siendo α la polarizabilidad del átomo y l el momentum angular orbital asociado con el orbital en el cual el electrón es capturado. Cuando $l > 0$, estos dos términos se combinan para formar una barrera. El punto de vista usual es el que en la ausencia de la barrera de momentum angular, no hay captura temporal del electrón ni retardo temporal del electrón dispersado. A cortas distancias, se produce un pozo profundo por las fuerzas apantalladas de Coulomb. Si la energía del electrón incidente es apropiada, esto es la función de onda se "ajusta" en el pozo de potencial, el electrón se acumula en esta región formando el ión negativo temporal. La resonancia tiene una vida finita debido al efecto túnel del electrón cuando atraviesa la barrera del momentum angular. La denominación de resonancia de forma se refiere al hecho que el electrón es temporalmente acotado debido a la forma del campo de potencial que experimenta.

El término de "resonancias de forma" puede ser aplicado también al caso de moléculas, aunque la situación es más compleja debido al carácter no-central del potencial en que el electrón se mueve. Cuantitativamente los potenciales electrón-molécula son obtenidos mediante ciertos tratamientos teóricos. Puede ser visto en una imagen tridimensional que la anisotropía es muy débil para moléculas no-polares (y débilmente polares), y por ejemplo, la dispersión por H_2 , este no es más que un gran átomo desde el punto de vista del electrón incidente.

La energía del estado del anión es determinada principalmente

por la intensidad de la parte atractiva del potencial. El tiempo de vida del anión, por otro lado, es una función tanto de la forma de la barrera, que es fuertemente dependiente de l , como de la energía del anión debido a que la combinación de estos factores determina la altura relativa y el espesor de la barrera que el electrón debe atravesar por efecto túnel para poder salir de nuevo. Este punto es ilustrado en la figura 4, que muestra potenciales modelo para tres casos extremos de moléculas diatómicas. En N_2 , con una barrera alta, se encuentra una resonancia cerca de 2 eV con un tiempo suficientemente largo para mostrar estructura vibracional. En H_2 , con una barrera no muy alta, se encuentra una resonancia de muy corta vida, la cual no muestra estructura vibracional en la mayoría de los canales observables. En HCL no se presenta barrera y no se encuentran resonancias de forma en la región de bajas energías.

En las moléculas, cada orbital no-ocupado de la molécula blanco, tiene una distribución de carga característica cuya simetría determina los posibles componentes de momentum angular que pueden ser capturados. La contribución relativa de estas componentes será determinada por la forma detallada del potencial. Para moléculas con un grado alto de simetría, solamente las componentes más bajas permitidas serán necesarias para describir el comportamiento de la dispersión. Las componentes importantes del momentum angular son visualizadas cuando se desarrolla la distribución de carga en armónicos esféricos.

Se inicia una nueva etapa ya en forma adelantada. Es una etapa que tiene un carácter de investigación en el Departamento de Física impulsada por el profesor de la Misión Alemana.

Es esta actividad investigativa la que se debe a la colaboración de la Misión Alemana, la que nos brinda un nuevo espacio de trabajo en el campo de la física de nuevos fenómenos.

En estos últimos años se dedicó a preparar a un grupo de investigadores de la Misión Alemana. Se les capacita de generar nuevas investigaciones científicas. La inteligencia nacional, en otra medida concentrada en lo que a la Física se refiere en el Departamento de Física de la Universidad Nacional de Colombia, ha sido capaz de utilizar los saberes, los conocimientos, la experiencia y el espíritu de los

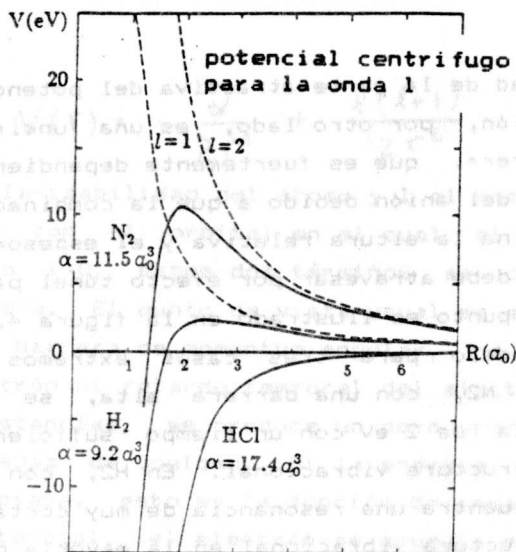


fig 4: curvas potenciales electrón molécula para H_2 ($l=1$), N_2 ($l=2$), y HCl ($l=0$). Las barreras son formadas por el potencial centrifugo repulsivo y el potencial de polarización atractivo de intensidad variable.

Por ejemplo, la resonancia de forma $^2\Pi_g$ de N_2 está bien descrita por la contribución de la onda d. Por otro lado, en la molécula CO son importantes las componentes p y d en su distribución angular, la primera se origina a partir de la forma diferente de los orbitales 2p en los átomos de oxígeno y de carbón. En moléculas tales como benceno y etileno la simetría es muy alta de tal manera que sus resonancias de forma están dominadas solamente por una componente simple de momentum angular.