UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

"ESTUDIO DE LOS FRAGMENTOS DE DE DISOCIACION DEL H_2^+ EN SF_6 "

T E S S T para obtener el Titulo de Que F S T () Ρ ŧ e S e n а ALFREDO TEJEDA BUENOSAIRES Ciudad universitaria abril 1990





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 | 1 | | | |
|--|------------|--|--|--|
| I.1 DINAMICA DE LA DISOCIACION Y EXCITACION | | | | |
| ELECTRONICA | 4 | | | |
| I.2 FOBLACION VIBRACIONAL DEL ION H2 | 10 | | | |
| 1.3 DISOCIACION INDUCIDA POR COLISION | | | | |
| I.3.1 TRANSICIONES INDUCIDAS POR COLISION CON UN | | | | |
| ELECTRON | 11 | | | |
| I.3.2 DISOCIACION INDUCIDA POR COLISION CON UN | | | | |
| ATOMO | 13 | | | |
| I.4 DISTRIBUCION DE ENERGIA | 15 | | | |
| I.5 DISTRIBUCION ANGULAR | 16 | | | |
| I.6 LEY DE ESCALAMIENTO | 16 | | | |
| II.1 SISTEMA DE VACIO | 22 | | | |
| II.2 FUENTE DE IONES | 24 | | | |
| II.3 SELECCION Y ACELERACION | 25 | | | |
| II.4 CAMARA DE REACCION | 30 | | | |
| II.5 SISTEMA DE DETECCION | 31 | | | |
| II.5.1 CAJA DE FARADAY | 31 | | | |
| II.5.2 ANALIZADOR PARABOLICO | 32 | | | |
| II.5.3 MULTIPLICADOR DE ELECTRONES | . 34 | | | |
| III DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO | 35 | | | |
| III.1 CONCEPTO DE SECCION TRANSVERSAL | | | | |
| DIFERENCIAL Y TOTAL | <u></u> 35 | | | |
| III.2 PROCEDIMIENTO | 37 | | | |
| III.3 CALCULO DE LAS SECCIONES DIFERENCIALES | 40 | | | |
| III.4 ERRORES | 41 | | | |

IV.- RESULTADOS Y CONCLUSIONES BIBLIOGRAFIA.

INTRODUCCION.

Gran parte de los conocimientos que poseemos sobre sistemas microscópicos se han derivado del análisis de experimentos de colisiones, afirmación que es aplicable a varios campos de la física: nuclear, atómica, del estado sólido, de partículas, etc. Lo que varía de un área a otra es el tipo de partículas participantes en la colisión y las velocidades (o energías) de estos. Si bien, desde el punto de vista experimental las técnicas de aceleración de las partículas son muy diferentes en un caso u otro, debido a la gran variación de energías que se refieren (del orden de eV en el caso de colisiones entre moléculas y de GeV cuando se trata de partículas elementales), desde el punto de vista del análisis teórico existe una unidad mucho mayor en el tema, y es frecuente que métodos desarrollados en un área , digamos física nuclear, se apliquen después en otra, por ejemplo, física atómica.

Independientemente de las partículas y energías involucradas, se puede hacer una clasificación de las colisiones sobre la base del tipo de procesos que ocurren. En algunas colisiones sólamente cambia, del estado inicial al final, la velocidad relativa de los fragmentos resultantes, y estos se conocen como procesos elásticos. Este tipo de colisiones es de importancia cuando se trata de partículas sin estructura interna, o bien, con ella cuando la energía de la colisión no es suficiente para producir excitaciones internas. Un proceso de mayor complicación es aquel en el que los fragmentos tienen estructura y parte de la energía cinética inicial se convierte en energía interna de los fragmentos,

este tipo de proceso entre entre los que se conocen como inelásticos.

Finalmente una colisión entre dos particulas A+B puede producir fragmentos distintos A' + B', A' + B' +B'', o en alguna otra combinación. Esta categoria incluye los casos de reacción, disociación, ionización, etc.

En este trabajo nuestro interés se situa dentro del tema de las colisiones en física molecular. Este es un tema que está siendo activamente desarrollado, tanto en el aspecto teórico como en el experimental. El objetivo principal de la dinámica molecular es describir detalladamente como los sistemas moleculares se transforman de un estado a otro durante una colisión. Les colisiones con responsables de establecer el equilibrio térmico y producir la equipartición de la energía en un proceso físico, de tal manera que muchos efectos y propiedades de los gases, tales como conducción del calor y viscosidad no pueden ser entendidos desde el punto de vista molecular sin un estudio cuantitativo de las colisiones moleculares.

El objetivo de este trabajo es determinar las secciones diferenciales en ángulo y totales de los fragmentos H^+ y H^0 + H_2^0 , provenientes de la disociación molecular del ion H_2^+ en SF₆ (Hexafloruro de azufre) en un intervalo de energías de 1 a 5 keV; el proceso anterior está descrito por la reacción:

 $H_2^+ + SF_6 - - - \rightarrow H^+ + H^0 + ...$

Con el objeto de enmarcar el presente trabajo, se da en el primer capitulo, una discusión breve de la naturaleza del proceso de disosiación, así como de una ley de escalamiento.

En el capítulo dos, se presenta una descripción del dispositivo experimental.

En el capítulo tres, se discute el concepto de sección transversal y el procedimiento del experimento.

En el capítulo custro, se presentan los resultados y conclusiones de los datos obtenidos.

CAPITULO I.

I.1. DINAMICA DE LA DISOCIACION Y EXCITACION ELECTRONICA

El tipo de procesos que pueden ocurrir en una colisión es muy amplio y pueden esquematizarse como sigue:

| B ₂ + - | + M→ | $B_2^+ + M$ | (1) |
|--------------------|------|---------------------------------|-----|
| | | $(B_2^+)^* + M$ | (2) |
| | | $MB + B^+$ | (3) |
| | | $B^{\dagger} + B^{\dagger} + M$ | (4) |
| | | $B' + B' + M^+$ | (5) |
| | | $B^{0} + B^{-} + M^{++}$ | (6) |

En los procesos anteriores se hace incidir el ion molecular B_2^+ sobre un blanco⁽¹⁾ M. El proceso (1) es una colisión elástica, es decir, no hay perdida de energía, el proceso (2) es una colisión inelástica por medio de una excitación interna, el (3) es una reacción de recombinación, el proceso (4) describe el fenómeno de disociación que se estudia en este trabajo y los dos últimos procesos de disociación ocurren con captura electrónica simple y doble.

El proceso de disociación es la separación de los núcleos de una molecula por colisión con un átomo o molécula. Considerando la colisión disociativa:

 $AB + M \longrightarrow A + B + M$

Se necesita especificar el estado inicial del sistema. Aun cuando la energía de colisión es bien conocida y cuando AB y M están en el estado electrónico base, se desconoce la vibración y rotación de la molécula. Cuando la reacción ion-molécula toma lugar, el haz de iones puede contener iones moleculares con un alto grado de ambas excitaciones: rotacional y vibracional.

Como muestran Schottler y Toennies⁽²⁾ es posible investigar la disociación inducida por colisión por dos métodos distintos. En ambos casos se determina la distribución de momento de una de las tres partículas separadas. En el primer método, se mide la distribución de momento de uno de los fragmentos de la molécula disociada, mientras en el segundo método se mide la perdida de energía de los átomos incidentes junto con el ángulo de dispersión de la partícula. Los dos métodos producen información complementaria.

Cuando se emplea el segundo método, es posible medir la distribución de pérdida de energía de los átomos incidentes a un ángulo fijo de dispersión en el laboratorio por medio de la configuración de haces cruzados o de haz-gas. El ángulo de dispersión junto con la pérdida de energía determina el ángulo de retroceso y energía de la molécula por lo cual la energía transferida a la molécula puede exceder la energía de ligadura de la misma, con la condición de que no hayan ocurrido excitaciones electrónicas de los átomos separados. Estos átomos separados producen dobles secciones transversales diferenciales de disociación: diferencial con respecto a la pérdida de energía y diferencial con respecto a el ángulo de dispersión. Es claro que en este camino se integra sobre todas las posibles direcciones en las cuales los fragmentos de la molécula se separan. En otras palabras, no se obtiene

información sobre la probabilidad de disociación como una función de la orientación de la molécula al tiempo de la colisión.

Otros experimentos utilizan un haz primario de iones moleculares. Estos iones se hacen colisionar con otro haz cruzado o un blanco gaseoso, haciendo mediciones de la distribución de vectores de momento (ángulo y energía) de los fragmentos iónicos resultantes. Para obtener información significativa, se deben satisfacer dos condiciones: Una de las partículas separadas puede ser excitada electrónicamente, es decir, se puede obtener información adicional acerca de excitaciones electrónicas de cualquiera de los fragmentos o del blanco. En algunos casos esta información puede ser inferida de la distribución de momento de los fragmentos. La segunda condición concierne a la contribución de dispersión del centro de masa en el marco del laboratorio al incidir el ion molecular y fragmentarse. De estas contribuciones puede ser despreciable cualquiera o se pueden deducir de las medidas de distribución de momento. Si estas dos condiciones se cumplen, la distribución de momento en el sistema del laboratorio se puede transformar en una distribución de momento en el centro de masa de la molécula disociada. En este sentido las secciones transversales de disociación obtenidas son diferenciales con respecto a la energía traslacional de los fragmentos pero promediados sobre todos los ángulos de dispersión del centro de masa de la molécula incidente. En los procesos de disociación por impacto electrónico", ", el centro de masa de la molécula no se deflecta.

En la fig.1.1 se ilustra la disociación directa del H_2^+ resultado de una transición electrónica vertical desde el nivel vibracional $\nu=4$ del estado 1sog al primer estado excitado 2pou. De acuerdo al principio

elásico de Franck-Condon, una transición electrónica en una molécula requiere conservación de la posición relativa y momento del núcleo. Estos medios de transición son posibles si sus puntos finales están situados sobre la curva punteada; esta curva es una reflexión del potencial 15 σ g bajo ν =4 sobre la curva 2p σ u.

El principio de Franck-Condon predice fragmentos con una variable e_d; los extremos son la diferencia entre la asíntota de la curva potencial y los límites llamados A y B en la fig.1.1. Cuando la excitación ocurre por colisión con una partícula pesada la posibilidad de transferir una cantidad variable de energía y la probabilidad de variación de la excitación con la distancia internuclear favorecen la formación de fragmentos con energías de separación las cuales caen entre los mismos límites A y B. Este es el intervalo de valores e_u que predicen el modelo de reflexión, en el cual la función de onda del continuo se representa per una función delta de Dirac tridimensional. Este modelo limita el salto vertical a la curva de energía potencial del estado excitado y desprecia la conservación de momento requerida por el principio de Franck-Condon. Es aplicable sólo a especies diatómicas; en especies poliatómicas la energía de partición es mucho mas compleja. La disociación via el mecanismo de excitación electrónica vertical a un estado disociativo generalmente es importante en un intervalo de energías de 1 a 10 keV. La primera aproximación de Born se usa a menudo para describir los eventos de disociación alrededor de 10 keV. En este intervalo de energías la teoría clásica falla al no predecir la conducta de la sección transversal de disociación como una función de la velocidad de colisión. En la aproximación de Born los movimientos inicial y final de las partículas que colisionan son



aproximados por ondas planas, las cuales relacionan a la onda plana a lo largo del vector de transferencia de momento \overline{K} , donde \overline{K} es la diferencia entre los vectores de transferencia de momento inicial y final $\overline{K}=\overline{K}_{1}-\overline{K}_{f}$. Dunn⁶⁰ muestra que el sitema entero en este caso tiene uns simetría paralela al eje K, y que la simetría del estado inicial puede ser preservada en el estado final llevando a las reglas de selección angular. En el H_{2}^{+} por ejemplo, la transición desde el estado base 1sog al primer estado excitado $2p\sigma u$ es permitida si el eje internuclear está alineado con \overline{K} , pero prohibida si es perpendicular a \overline{K} . La transición $1s\sigma g \rightarrow 2s\sigma g$ se permite en ambas direcciones. Dunn proporciona en forma tabular las reglas de selección angular para ambas moléculas: homonuclear y heteronuclear. Cuando la energía de colisión no es bastante alta como para que sea válida la aproximación de Born, la onda saliente es esférics y no hay simetrías definidas para el sistema entero ni son evidentes⁽⁶⁾.

Los argumentos cualitativos de Dunn indican que la excitación es frecuentemente anisotrópica con respecto a \overline{K} . Si se acepta el modelo del eje de retroceso cuando la disociación toma lugar a lo largo de la orientación instantánea del eje molecular, los fragmentos resultantes son distribuidos anisotrópicamente con respecto a \overline{K} . Como \overline{K} en general no tiene una distribución isotrópica con respecto a la dirección del haz incidente, la distribución de momento es anisotrópica con respecto a la dirección del haz inicial. Una consecuencia, es la medición de la distribución angular de los fragmentos de disociación que se usa para establecer el estado molecular de los fragmentos observados.

I.2.- POBLACION VIBRACIONAL DEL ION H_2^+ .

Los procesos que conducen a la formación del ion H_2^+ son: una ionización directa del estado fundamental de la molécula, y una excitación electrónica o por autoionización. Suponiendo que la ionización directa es la unica via posible, varios autores ⁽⁷⁾, ⁽⁸⁾ han calculado la población de los niveles vibracionales del H_2^+ formados por impacto electrónico en hidrógeno. La probabilidad de transición es dominada por el elemento de matriz del momento dipolar eléctrico entre el estado inicial y final. Estos factores poblacionales se pueden escribir como:

$$P_{\nu} = \frac{\Theta_{\nu_0 \nu}}{\sum_{\nu} \Theta_{\nu_0 \nu}}^{2}$$

donde:

 $\begin{array}{l} \nu_0 = 0 & : \mbox{ es el nivel vibracional del estado inicial del hidrógeno (Σ_g^+). \\ \nu & : \mbox{ nivel vibracional del estado final (Σ_g^+). \\ \theta_{\nu_0\nu} & : \mbox{ Factor Franck-Condon correspondiente a la transición. } \end{array}$

El 2.9% de las reacciones conducen al continuo vibracional; la verdadera población de niveles vibracionales del H_2^+ está dada por:

$$f_{\nu} = \frac{P_{\nu}}{\frac{18}{\nu} P_{\nu}}$$

(D<v<18)

 f_{ν} es la fracción de reacciones que conducen al estado ν . Esta distribución de niveles vibracionales fue calculada por C. H. Dunn. En el caso de secciones transversales se utiliza la distribución estadistica de distancias internucleares del ion H_2^{+} ; esta se calcula a partir de la relación:

$$\frac{dP}{dR} = \sum_{\nu=0}^{18} f_{\nu} |\chi_{\nu}(R)|^{2}.$$
 (1.1)

con $\chi_{\nu}(R)$ la función de onda vibracional normalizada del nivel ν .

I.3.-DISOCIACION INDUCIDA POR COLISION.

Si la energía cinética del ion molecular incidente es suficientemente grande como para despreciar en primera aproximación la posibilidad de formar un complejo intermedio, existen dos tipos de reacciones que conducen a la molécula a un estado no ligado: Las excitaciones vibracionales y las transiciones electrónicas.

I.3.1.-TRANSICIONES INDUCIDAS POR COLISIONES CON UN ELECTRON.

La transición inducida por colisión de ion molecular comprende las excitaciones:

1.-Electrónicas : $n \rightarrow n'$

- 2.- Vibracionales : $\nu \longrightarrow \nu'$
- 3.- Rotacinales : L, $M \rightarrow L', M'$

La sección transversal diferencial de excitación de una molécula por

un electron está dada por:

$$\frac{d\sigma (n\nu m, n^{\prime}\nu^{\prime}l^{\prime}m^{\prime}, \theta^{\prime})}{dn} = \frac{4k_{n^{\prime}}}{k_{n}k^{4}} \int_{0}^{\alpha} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \epsilon(k, \delta, \eta, R) \theta_{lm}(\delta, \eta)$$
$$\Theta_{lm}^{*}(\delta, \eta) \chi(R)\chi_{\nu}(r) R^{2} \operatorname{sen} \delta d\delta d\eta dR$$

Esta relación fué determinada por Craggs y Massey⁽⁹⁾, utilizando el formalismo de la primera aproximación de Born y esta expresada en unidades atómicas.

- ----- Θ y x son las funciones de onda de vibración y de rotación, y por supuesto que los niveles de rotación y vibración electrónicos son separables.
 - define el cambio de cantidad de movimiento que sufre el ----- k electrón incidente.

 $\overline{\mathbf{k}}^2 = |\overline{\mathbf{k}}|^2 = \overline{\mathbf{k}}_{\mathrm{D}}^2 - \overline{\mathbf{k}}_{\mathrm{D}}^2 - 2\overline{\mathbf{k}}_{\mathrm{D}}^2 \overline{\mathbf{k}}_{\mathrm{D}}^2, \cos\theta$

con k_n y k_n, son las cantidades de movimineto del electrón, respectivamente antes y después de la colisión. Los ángulos δ y η fijan la orientación de la molécula en el espacio, δ es el ángulo entre R y \bar{k} , R es la distancia internuclear.

La cantidad ϵ es por definición el elemento de matriz.

 $\epsilon(\mathbf{k},\delta,\eta,\mathbf{R}) = \int \psi_n^*(\mathbf{r},\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r},\mathbf{R}) d\mathbf{r}.$

Con ψ la función de onda electrónica del ion molecular y \bar{r} el vector que va del centro de masa de los protones al electron. PARTES DE LA HIPOTESIS

1.- La dependencia de \bar{k} sobre l' m' es despreciable.

2.- El principio de Frank-Condon es aplicable a la función de onda

vibracional.

J. M. Peek integra sobre los estados de vibración del continuo que son compatibles con la conservacion de la energía y sobre todos los ángulos de dispersión y deduce la sección transversal total:

$$Q_{\nu} = \frac{8\pi}{k_{n}^{2}} \frac{1}{4\pi} \int_{0}^{00} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \frac{|\epsilon(k, \delta, \eta, R)|^{2}}{k^{3}} |\chi(R)|^{2} R^{2} \operatorname{send} d\delta d\eta dR dk$$

con $k_{1} = k_{n} + k_{n}^{2}, \quad k_{2} = k_{n} - k_{n}^{2},$

invirtiendo los ordenes de integración y considerando:

$$|\epsilon(\mathbf{k},\mathbf{R})| = \frac{1}{4\pi} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} |\epsilon(\mathbf{k},\delta,\eta,\mathbf{0})|^{2} \operatorname{send} d\delta d\eta$$

Junto con :

$$Q(R) = \frac{8\pi}{k_{\perp}^2} \frac{|\epsilon(k,R)|^2}{k^3} dk$$

 Q_{ν} queda expresada por:

$$Q_{\nu} = \int_{R} Q(R) ||\chi_{\nu}(R)||^{2} R^{2} dR$$

i.3.2.- DISOCIACION INDUCIDA POR COLISION CON UN ATOMO.

a) Transiciones electrónicas.

Una colisión atómica de un ion molecular con un átomo se puede escribir como: $H_2^+ + A(0) \longrightarrow H_2^+(n) + A(N)$

Los estados electronicos son indicados entre paréntesis; los ceros corresponden al estado fundamental. Para esta reacción la sección eficaz se puede escribir como:

$$dQ_{\nu} = \frac{1}{4\pi} \qquad |R_{\nu}(R)|^2 \sigma(R,\phi) \ d\Omega \ dR$$

Donde: $d\Omega$ es el elemento de ángulo solido dado por la dirección del eje del flujo de iones H_2^{\uparrow} al momento de la disociación.

Reemplazando la notación de la función de onda vibracional $\chi_{\nu}(R)$ por la forma equivalente

$$|R_{\mu}(R)| = R^2 |\chi(R)|^2$$

se encuentra que la sección transversal está dada por:

$$\sigma(\mathbf{r}, \phi) = \frac{4\mu^2}{k_0^2} \int_{k_1}^{k_2} d\mathbf{k} \, \mathbf{k}^{-3} |\epsilon_n(\mathbf{k}, \mathbf{R})|^2 |\epsilon_n(\mathbf{k})|^2$$

con μ la masa reducida del átomo y el ion molecular y $\overline{k_0}$ la cantidad de movimiento del ion incidente H_2^+ . ϵ_n se define para el caso de un átomo de He por :

$$|\epsilon_{n}(k)|^{2} = \sum_{m_{1}} |dr_{1} dr_{2} (\phi_{0} \phi_{n} \star \sum_{j=1}^{2} \exp(ik \cdot r_{j}) - 2\delta_{n,0})^{2}|$$

 ϕ_n son las funciones de onda del helio, r_j es el vector de coordenadas del electrón del helio, $\delta_{n,0}$ es el símbolo de la delta de Kronecker. La notación $\Sigma_{m,j}$ significa la sumatoria sobre todas las proyecciones del momento angular orbital del estado final.

Como el estado final del ion molecular está definido por una cantidad de movimiento \overline{K} , la cual depende inversamente de R y Ω , entonces la sección se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{\mathrm{d}Q_{\nu}}{\mathrm{d}\kappa \mathrm{d}\Omega_{k}} = \frac{1}{4\pi} \left(-\frac{\mathrm{d}R(k)}{\mathrm{d}k} \right) |R_{\nu}(R(k))|^{2} \sigma(R(k),\phi),$$

integrando la sección diferencial sobre k y Ω , se obtiene la sección total para un nivel vibracional determinado. (J. M. Peek⁽¹¹⁾).

Sustituyendo los factores de población dados por la ecuación 1.1 obtenemos:

$$\frac{dQ}{dkd\Omega_{k}} = \left(-\frac{dR(k)}{dk}\right) \frac{dP(R(k))}{dR} \frac{\sigma(R(k),\phi)}{4\pi}$$
(1.2)

1.4.- DISTRIBUCION DE ENERGIA.

La sección transversal por unidad de momento k se obtiene integrando la ecuación anterior sobre Ω .

$$\frac{dQ}{dk} = \left(-\frac{dR(k)}{dk}\right) \frac{dP(R(k))}{dR} \sigma(R) \qquad (1.3)$$

$$\sigma(R) = \frac{1}{-4\pi} \int_{0}^{\pi} \sin\phi \, d\phi \int_{0}^{2\pi} \sigma(R(k),\phi) \, d\theta.$$

Considerando el cambio de variable :

$$\frac{dP}{du} = \left(-\frac{dR(u)}{du}\right) \left(\frac{dP(R(u))}{dR}\right)$$

con u=k/m, velocidad de un protón después de la colisión en el sistema centro de masa del ion molecular.

Por lo tanto la distribución de energía de excitación está dada por :

$$\frac{dQ}{dE} = \frac{1}{u} \frac{dP}{du} \sigma(R)$$

con E=2 X (m $u^2/2$).

Siendo u y R los valores correspondientes a una transición electrónica; dP/du y $\sigma(R)$ son la distribución de velocidades y la sección transversal respectivamente.

I.S.- DISTRIBUCIONES ANGULARES

Dividiendo las ecuaciones 1.2 y 1.3 se obtiene :

$$Q(\mathbf{R}, \phi) = \frac{\sigma(\mathbf{R}(\mathbf{k}), \phi)}{\sigma(\mathbf{R})}$$

 $Q(\mathbf{R}, \phi)$ es la sección transversal relativa diferencial en ángulo de los protones a una energía de excitación.

I.6.- LEY DE ESCALAMIENTO.

Los resultados experimentales de las distribuciones angulares son convenientemente analizados por medio del uso de las variables reducidas introducidas por una ley de escalamiento.

El modelo de la distribución angular es una herramienta utilizada para analizar los datos obtenidos de la disociación de iones moleculares diatómicos, y nos permite dar una interpretación de los resultados obtenidos en el experimento. Este modelo se basa en las siguientes suposiciones:

- a.- Todas las crientaciones del ion H_2^+ son igualmente probables.
- b.- La velocidad de disociación es pequeña comparada con la velocidad del haz incidente.
- c.- Las energías de disociación son grandes comparadas con la energía rotacional, así que los productos resultantes de la disociación son emitidos en la dirección de la linea que une los dos protones al tiempo de la captura.
- d.- Los procesos electrónicos son rápidos comparados con los periodos vibracional y rotacional. La molécula puede considerarse con una orientación y una geometría fijas durante el proceso de excitación.
- e.- El centro de masa del ion molecular sufre una desviación despreciable durante la colisión.

El siguiente diagrama de Newton fig. 1.2 representa una disociación inducida por colisión, los fragmentos liberados poseen masa $m_1 y m_2$. Las velocidades de los fragmentos en los sistemas centro de masa y laboratorio se denotan respectivamente \bar{v}_d , $-\bar{v}_d y \bar{v}_1 y \bar{v}_2$. Los ángulos $\theta_1 y \theta_2$ son la dirección de las partículas disociadas con respecto a la dirección del haz incidente cuya velocidad se denota como \bar{v}_i , y medidos en el sistema del laboratorio $\phi_1 y \phi_2$ son los ángulos correspondientes que forman los vectores velocidad $\bar{v}_d y - \bar{v}_d$ con respecto



Fig.1.2. Diagrama de Newton representando una colisión que incluce disociación. a la dirección del haz incidente y son medidos en el sistema centro de masa.

Se considera ahora el siguiente conjunto de ecuaciones que se derivan de las relaciones trigonométricas ley de los senos y ley de los cosenos aplicado al diagrama de Newton anterior y considerando que la velocidad incidente \bar{v}_i es mucho mayor que la velocidad de disociación \bar{v}_d . La distancia interprotónica R forma un ángulo Θ con respecto al haz incidente (eje z) y un ángulo Φ con el plano x-y. Las velocidades \bar{v}_i y \bar{v}_2 y los ángulos θ y ϕ en términos de Θ y Φ , que se obtienen son:

$$\frac{\operatorname{sen} \theta_{1}}{\operatorname{v}_{d}} \stackrel{\operatorname{sen} \Theta}{=} \frac{\operatorname{sen} \Theta}{\operatorname{v}_{1}}$$

$$\frac{\operatorname{sen} \theta_{2}}{\operatorname{v}_{d}} \stackrel{\operatorname{sen} \Theta}{=} \frac{\operatorname{sen} \Theta}{\operatorname{v}_{2}}$$

$$(1.4)$$

$$v_{i} = (v_{i}^{2} + v_{d}^{2} - 2 v_{i}v_{d} \cos\Theta)^{\frac{1}{2}} \ll (v_{i} - v_{d} \cos\Theta) v_{i}$$
(1.6)
$$v_{2} = (v_{i}^{2} + v_{d}^{2} + 2 v_{i}v_{d} \cos\Theta)^{\frac{1}{2}} \ll (v_{i} + v_{d} \cos\Theta) v_{i}$$
(1.7)

por lo que:

sen
$$\theta_1 = \operatorname{sen} \theta_2 = \operatorname{v}_d / \operatorname{v}_i \operatorname{sen} \Theta = (\operatorname{E}_d / \operatorname{E}_i)^{\frac{1}{2}} \operatorname{sen} \Theta$$
 (1.8)

La relación entre las diferenciales de ángulo solido correspondientes a los dos sistemas se obtiene, suponiendo que los ángulos θ_1 y θ_2 son pequeños como se muestra a continuación:

$$\frac{\operatorname{sen}\Theta d\Theta d\Phi \alpha}{\cos \Theta} \frac{(E_i/E_d)\operatorname{sen}\theta_2 d\theta_2 d\phi_2}{\cos \Theta} \frac{\alpha}{\cos \Theta} \frac{(E_i/E_d) \operatorname{sen} \theta_2 d\theta_2 d\phi_2}{\cos \Theta}$$
(1.9)

 $\frac{\operatorname{sen}\Theta d\Theta d\Phi \alpha}{\left(1 - \theta^2 \operatorname{E}_i/\operatorname{E}_d\right)^{\frac{1}{2}}} \frac{d\theta_2 d\phi_2}{\left(1 - \operatorname{E}_i/\operatorname{E}_d\right)^{\frac{1}{2}}} \frac{\alpha}{\left(1 - \operatorname{E}_i/\operatorname{E}_d\theta^2\right)^{\frac{1}{2}}}$

Si N denota el número de partículas incidentes, N_t a los átomos presentes en el blanco, ambos por unidad de área, d $\omega_{\rm cm}$ el elemento de ángulo solido CM, y σ (R, Θ , Φ) la sección eficaz de excitación, entonces

$$dN = (N N_t / 4\pi) \sigma (R, \Theta, \Phi) d\Omega_{om}$$
(1.10)

La dependencia funcional de σ con R y Θ , proviene del hecho de que el valor de R en el momento de excitación determina la forma de la distribución angular. Estableciéndose que $E_d = E_d(R)$ y denotando por $\rho(R)dR$ a la probabilidad de que la molécula tenga una separación internuclear entre R y R + dR, la expresión que se tiene es

$$\begin{split} (\mathrm{d}^{2}\mathrm{N}/\mathrm{d}\mathrm{E}_{\mathrm{d}}\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{em}}) &= (\mathrm{N}\,\mathrm{N}_{\mathrm{t}}/4\pi)(\,\rho(\mathrm{R})\,\mathrm{d}\mathrm{R}/\mathrm{d}\mathrm{E}_{\mathrm{d}})\,\,\sigma(\mathrm{R},\Theta,\Phi) \\ \text{y de acuerdo con la ecuación de transformación 1.9,} \\ (\mathrm{d}^{2}\mathrm{N}/\mathrm{d}\mathrm{E}_{\mathrm{d}}\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{lat}}) &= (\mathrm{N}\,\mathrm{N}_{\mathrm{t}}/4\pi)(\rho(\mathrm{R})/\mathrm{d}\mathrm{E}_{\mathrm{d}}/\mathrm{d}\mathrm{R}) = \underbrace{\mathrm{E}_{\mathrm{0}}\,\,\sigma(\mathrm{R},\Theta,\Phi)}{\mathrm{E}_{\mathrm{d}}^{-2}\,\,(\mathrm{E}_{\mathrm{d}}-\mathrm{E}_{\mathrm{0}}\Theta^{2})^{\frac{1}{2}}} \end{split}$$

Por último se efectua una integración sobre la separación interprotónica R y como dE_d = (dE_d/dR) dR se obtiene:

$$1/E_{i}(dN/d\Omega) = (N N_{t}/4\pi) \int_{0}^{R_{d}} \frac{\sigma(R,\Theta,\Phi) \rho(R)}{E_{d}^{\frac{1}{2}}(E_{d} - E_{i}\theta^{2})^{\frac{1}{2}}}$$
(1.11)

donde R_d es la separación interprotónica para la cual $E_d = E_i \theta^2$. Se promedia la expresión 1.11 sobre todos los valores de Φ ya que este

ángulo no se observa en el experimento y la ecuación de la distribución angular de cualquiera de los productos de la disociación como función de los ángulos Θ y Φ , por lo que:

$$\frac{1/E_{i} d\sigma/d\Omega = 1/4\pi \int \sigma(R, \Theta, \Phi) dR}{[E_{d} (E_{d} - E_{i}\theta^{2})]^{\frac{1}{2}}}$$
(1.12)

La sección diferencial puede ser expresada como una función de las variables reducidas $E_{\tau}\theta^2$.

 $1/E_i d\sigma/d\Omega = f_{ab} (E_i \theta^2)$

resultando una curva para todas las energías.

La última expresion muestra el tipo de variables reducidas que deben introducirse en el experimento como el descrito aquí. De este modo al graficar $d\sigma/E_0 d\Omega_{\rm lab}$ vs. $E_1 \theta^2$, todos los datos de la sección eficaz deben caer en una curva universal (salvo posiblemente por un factor constante que puede eliminarse mediante un procedimiento de normalizacion) la cual debe interpretarse de acuerdo a un proceso físico. De esta manera, el fenómeno físico quedará descrito por medio de una interpretación.

Si la sección transversal de excitación depende de la energía de colisión, pero sólo por un factor multiplicativo ?;

$$\sigma_{ab}(R,\Theta,E_i) = g(R,\Theta) N(E_i)$$

entonces las distribuciones angulares escaladas seran idénticas en forma, diferenciándose sólo por un factor de normalización.

$$(1/E_i) (d\sigma/d\Omega) = N (E_i) f_{ab} (E_i \theta^2)$$

CAPITULO II

El dispositivo experimental utilizado para determinar las secciones diferenciales en ángulo, consta de una fuente de iones, un sistema de aceleración y enfoque, un sistema de análisis y separación de masas, la cámara de reacción y el sistema de detección. (fig.2.1).

II.1.- SISTEMA DE VACIO

En los experimentos de colisiones haz-gas, se tiene que garantizar que la identidad del haz se conserve, logrando con esto que no ocurran eventos no deseables los cuales registra el detector. Estos eventos pueden evitarse utilizando un buen sistema de vacío que en nuestro caso fue el orden de 10^{-7} torr, en todo el acelerador.

El sistema de vacío en_la parte de la fuente, lentes y filtro consiste de una bomba_turbomolecular que es un rotor de alta velocidad. Tiene unas aspas las_cuales aceleran a las partículas contaminantes por efecto centrifugo y las expulsan; se alcanzan presiones del orden de 10⁻⁹ torr ; en esta parte se necesita un buen vacío ya que existe una efusion de gas de la fuente de iones.

En las otras partes del acelerador el vacío se consigue con bombas difusoras apoyadas por bombas mecanicas. La acción de las difusoras se efectúa calentando aceite en el fondo de la bomba donde el vapor obtenido viaja hacia arriba a través de una chimenea central y se distribuye por medio de difusores. Al enfriarse los vapores con



nitrógeno líquido arrastran las moléculas que se encuentran a su paso y las empujan hacia la salida de la bomba alcanzando presiones del orden de 10⁻⁸ torr.

II.2.- FUENTE DE IONES

La fuente de iones utilizada en este experimento es del tipo de descarga de arco. Se introduce el gas por un tubo que va a una cámara de nitrito de Boro, donde se encuentra un filamento de tungsteno al que se le aplica una corriente de 15 a 17 amperes, la cual da una corriente electrónica cuya densidad se ajusta para que al introducir el gas que va a ionizarse se mantenga una descarga continua en el ánodo.

Para obtener el haz de iones moleculares H_2^+ se introduce un flujo constante y uniforme de gas de hidrógeno molecular. Además es necesario introducir un gas que favorezca la producción de iones; generalmente se usa un gas inerte como el argón. En el laboratorio se usa una mezcla de 75% de gas de hidrógeno y un 25% de gas de argón a una presión aproximada de 100 micrones.

El ion molecular H_2^+ es producido por diferentes procesos de ionización y recombinación que se llevan a cabo en la región de descarga.

Los iones son formados a través de colisiones simples del tipo:

$$H_2^0 + e - - - H_2^+ + 2e$$

Siendo el anterior un proceso de ionización, otra forma de producir iones H_2^+ es por el proceso de recombinación de la manera siguiente:

Por ultimo se debe senalar que, la composición de haces extraídos de una fuente del tipo de descarga, depende de algunos parámetros operacionales de la fuente como lo han mostrado algunos experimentos en los que las concentraciones de iones H_3^+ y H_3^+ varían apreciablemente con los valores de la presión en la fuente de iones y la corriente de descarga. Así la producción de iones H_3^+ domina a presiones de gas altas, H_2^+ a presiones más bajas y el porcentaje de iones H se puede variar con la corriente de descarga (fig. 2.2).

 $H + H^+ \longrightarrow H_2^+$

II.3.- SELECCION Y ACELERACION DE LOS IONES¹¹ H_2^+ .

Después de extraer los iones de la fuente, éstos son acelerados hasta la energía deseada pasando por un sistema de lentes donde el haz es enfocado, y a traves del filtro de velocidades que está situado a la salida de las lentes se efectua la selección de los iones H_2^+ .

El voltaje de aceleración se obtiene sislando la fuente de iones y sus fuentes de poder del resto del sistema.

El sistema de enfoque es a través de lentes electrostaticas cuyo objetivo es enfocar el haz de iones en el eje central del acelerador. Consta de tres elementos cilíndricos coaxiales de igual diámetro, colineales y cuyas líneas equipotenciales son equivalentes a las producidas por los electrodos con aberturas circulares como se muestra en la fig. 2.3. En esta figura se observa como será enfocado el haz de partículas a una cierta distancia del plano principal. En este sistema el primer y tercer electrodo están al mismo potencial para asegurar que el haz de iones no sufra variación en su energía dentro del



fig.2.2 Esquema electrico de la fuente de iones del tipo descarga de arco.



fig. 2.3 Esquema de las lentes donde se observa como será enfocado el haz de particulas a una distancia del plano principal.

sistema, y el electrodo de en medio está a un voltaje igual a dos tercios del voltaje de aceleración llamado voltaje de enfoque.

Aunque este voltaje de enfoque es menor que el voltaje de los electrodos extremos, su propiedad de enfoque no se pierde, ya que sólo modifica la trayectoria de la partícula dentro de los electrodos.

El filtro de velocidades consiste de un imán y un par de placas deflectoras electrostáticas de la misma longitud, las cuales se encuentran colocadas entre los polos de un electroimán para producir un campo eléctrico perpendicular al campo magnético Para asegurar que el campo eléctrico sea uniforme se coloca un conjunto de anillos a los cuales se les aplica un voltaje adecuado, evitando con esto el efecto de borde del campo (fig. 2.4).

Si un haz de iones acelerado a traves de una diferencia de potencial V pasa a través de un filtro, los iones con velocidad $v_0 = \sqrt{\frac{2eV}{M_0}}$ pasaran sin deflectarse, si las fuerzas debidas a los campos cruzados se anulan, es decir si:

En los iones con diferente masa y por lo tanto con velocidad diferente actua una fuerza centripeta dada por:

$$\frac{Mv}{R}^2 = e(vB-E)$$

Con este instrumento se analizan los iones de acuerdo a sus masas. En los experimentos donde se tiene una configuración haz-gas, este filtro es muy útil para seleccionar el haz de iones que se desea



fig. 2.4' Vista del filtro de velocidades por donde entra el haz.

estudiar. Sus principales caracteristicas son: sistema lineal, dispersión de masa ajustable, y selección de la velocidad para partículas positivas y negativas simultáneamente.

Para seleccionar el haz de iones H_2^+ se mantiene constante el campo eléctrico \overline{E} y se varía la corriente que produce el campo magnético; cada valor de la corriente del campo magnético que da un máximo, está relacionado con la raíz cuadrada del número de masa de cada componente del haz. Estos componentes son H, H_2^+ y H_3^+ .

II.4.- CAMARA DE REACCION

La cámara de reacción utilizada en el presente experimento para blancos gaseosos consiste de una estructura cilíndrica de acero inoxidable, cuyas dimensiones son de 2.54 cms. de diámetro y 2.54 cms de longitud. La celda de reacción tiene dos colimadores, con bordes de navaja para minimizar la dispersión del haz en las aberturas de la celda. El colimador situado a la entrada de la cámara es de 1 mm de diámetro y el otro, situado a la salida, es de 2 mm de ancho por 6 mm de largo. El gas SF₆ hexafloruro de azufre es introducido a esta cámara a traves de un tubo de 3 mm de diámetro interior que además sirve de soporte para la celda de reacción.

La celda de reacción está situada en el centro de una cámara que consta de tres partes, una fija a la celda y las dos otras móviles. Las dos partes móviles, que rotan con respecto al centro de giro situado en la celda de reacción, permiten efectuar las distribuciones angulares de los productos de reacción. El valor de la presión en la celda de reacción se obtiene con un barómetro capacitivo , que mide la presión por

medio de la capacitancia que hay entre una placa conductora y un diafragma, que se acerca o se separa de acuerdo a la presion ejercida sobre este.

La geometría de las aberturas de la salida de la celda permiten detectar los productos resultantes de la disociación a angulos de $\pm 7^{\circ}$ con respecto a la dirección del haz.

II.5.- SISTEMA DE DETECCION

El sistema de detección gira alrededor del centro geométrico de la cámara de reacción, así que las distribuciones angulares pueden obtenerse a los ángulos desesdos pasando desde luego por el centro. El aparato tiene una resolución angular de 0.1° .

El sistema de detección consta esencialmente de tres partes: una caja de Faraday, un analizador parabólico y un multiplicador de electrones.

II.5.1.- CAJA DE FARADAY

La caja de Faraday es un detector de emisión secundaria que es empleado para medir corrientes de partículas cargadas o neutras en investigaciones de colisiones atómicas. Consta de cinco partes la primera es una placa anular la cual se mantiene a un potencial positivo de 90 volts, para repelar los iones del gas residual; la segunda placa anular, se mantiene a un potencial negativo de 45 volts. con el fin de no dejar escapar los electrones secundarios producidos dentro de la caja; el siguiente elemento es una placa colectora conectada a un electrómetro

para medir la corriente incidente de iones positivos; el cuarto elemento es un electrodo cilíndrico al cual se le aplica un potencial negativo (-300 volts), para regresar a la placa colectora los electrones que salen de la misma; por último una caja protectora conectada a tierra, para cubrir las cuatro partes mencionadas anteriormente, de partículas cargadas existentes en el gas residual.

II.5.2.- ANALIZADOR PARABOLICO

El analizador parabólico consiste de 2 placas conductoras que están a una cierta diferencia de potencial, creandose así un campo eléctrico entre ellas. Dependiendo de la energía incidente y del estado de carga de las partículas, éstas serán dirigidas a un detector situado al lado opuesto, dejando pasar a las neutras a un detector colocado en la dirección del haz. (fig.2.5).

El analizador está construido de tal forma que la dirección de entrada y salida (respecto a las placas deflectoras) de los iones es de 45°, la separacion entre las placas y el voltaje aplicado a éstas, están en función del voltaje de aceleración de las partículas.

La relación entre el voltaje aplicado a las placas $V_{\rm d}$ y el voltaje de aceleración V_0 está dado:

 $V_{d} = (0.6) V_{0}$

Para uniformizar el campo eléctrico, entre las placas conductoras se intercalan dos placas a las cuales se les aplica voltaje a través de unas resistencias de 10 Ω .



fig. 2.5 Diagrama del analizador parabólico

II.5.3.- MULTIPLICADOR DE ELECTRONES

El multiplicador de electrones consiste en un tubo de vidrio semiconductor curvado de un diámetro interno de unos cuantos milímetros, la superficie interior se encuentra cubierta con un material semiconductor cuyo coeficiente de emisión secundaria es alto. Cuando se aplica un potencial de 3000 volts entre los extremos del tubo, éste actuá como un dinodo continuo. Un electrón o cualquier otra partícula que incide en la entrada del tubo genera electrones secundarios al chocar con la superficie interna del tubo. Estos electrones son acelerados y golpean otra vez la superficie generando así más electrones secundarios. Este proceso de multiplicación se repite hasta que se produce un gran número de electrones a la salida del tubo que aparece como un pulso y pasa por el sistema electrónico de conteo. Este multiplicador (fig. 2.6) responde a iones, partículas neutras, rayos X y otro tipo de radiación. Las ventajas que se tiene al trabajar con el multiplicador son: opera en modo de saturación de pulsos, tiene bajo fondo, y la ganancia no se reduce al exponerlo al ambiente.

Un factor muy importante propio del multiplicador de electrones que se debe tomar en cuenta en el conteo de los mismos, es la eficiencia que se define como la razón de de la corriente, como función del monto de las partículas contadas por el detector , a la corriente medida por una caja de Faraday.

III.- DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO.

III.1.- CONCEPTO DE SECCION TRANSVERSAL Y TOTAL.

La cantidad πD^2 que aparece en la expresión de camino libre medio molecular, $I = 1/n\pi D^2$, mide el área de la sección plana que una molecula ofrece como blanco a otra molécula. Esta area se llama sección transversal geometrica y se representa generalmente mediante la letra σ . La fórmula anterior da la relación existente entre esta sección transversal y el camino libre medio, donde hay n moléculas por centímetro cubico: $I = 1/n\sigma$.

La noción de sección transversal es muy importante importante en el estudio de las colisiones, no sólamente entre moléculas sino también entre corpúsculos como por ejemplo, electrones, rayos X, neutrones lentos, con moléculas (estudio de la estructura de moléculas); de neutrones y protones con núcleos atómicos, hiperones y mesones, etc. De ahí la necesidad de dar una definición general de la sección transversal.

Sea un haz de partículas A, monocineticas, es decir, todas con la misma velocidad v_a . Si n_a es el número de estas partículas por cm³, la densidad de corriente del haz la determina: $J_a = n v_a$, representa el numero de particulas A que pasan a través de la unidad de área de una superficie perpendicular a v_a , por segundo. Estas partículas se dirigen hacia un blanco constituido por una superficie B, de una masa muy superior a la de una partícula A de tal manera que se puede despreciar el retroceso de B en cada colisión. En tales condiciones, sólo las partículas A serán desviadas después de la cilisión con B, Partícula que está en reposo en el sistema de laboratorio.

Es interesante evaluar el numero de partículas que son desviadas, por segundo, hacia un ángulo solido d Ω definido por los ángulos polares θ , ϕ (figura 3.1).

Sea dN(θ , ϕ) el número de partículas que por segundo dan a la dirección de su velocidad un ángulo sólido d Ω . La sección transversal diferencial σ_{AR} d Ω está definida por la relación:

$$dN(\theta,\phi) = (J_A) \sigma_{AB}(\theta,\phi)d\Omega$$

 $\sigma_{AB}(\theta,\phi)$ tiene las dimensiones de una superficie. Es posible asociar intuitivamente una área ficticia, $\sigma_{AB}(\theta,\phi)d\Omega$ con cada dirección, de tal manera que el flujo de densidad de corriente J_A a través de esta superficie, dé el número de partículas que por segundo, son dispersadas hacia el ángulo sólido d Ω .

La sección transversal total es la suma, en todas las direcciones del espacio, de la sección transversal diferencial:

$$\sigma_{AB} = \sigma_{AB}(\theta, \phi) d\Omega = d\phi \sigma_{AB}(\theta, \phi) sen(\theta) d\theta$$

Experimentalmente se mide la sección transversal relativa a un haz de partículas A dirigido sobre un blanco que tiene n_B partículas B por cm³. En este caso el número de colisiones entre partículas A y B, por segundo y por cm³, será:

$$N = n_{B} + J_{A} \sigma_{AB} = n_{A} n_{B} \sigma_{A}$$

El número de partículas A desviadas, es igual al número de colisiones

experimentadas por el blanco si la densidad de éste es suficientemente baja para que una partícula A choque con una sóla partícula B y se desvíe. El resultado experimental no será correcto si las colisiones multiples predominan.



Figura 3.1.- Una fracción dN de partículas incidentes A, tienen después de la colisión, una velocidad comprendida en el ángulo sólido d Ω definido por θ y ϕ .

III.2.- PROCEDIMIENTO.

El experimento se realizó en el acelerador de partículas cargadas del grupo de Física Atómica, Molecular y Optica del instituto de Física, UNAM, laboratorio de Cuernavaca.

Una vez obtenido el vacío de 10⁻⁷ Torr. en todo el sistema del acelerador, se admitió una mezcla de gases de aproximadamente 30% argón y 70 % hidrógeno en la fuente de iones. El gas de argón se denomina de apoyo, ya que aporta electrones para favorecer la ionización del hidrógeno. La mezcla de gases hace que la presión dentro de la fuente sea de 90 micrones aproximadamente.

La ionización del gas se obtiene aplicando al filamento una corriente de 15 Amp. y un voltaje de 50 Volts; con estos valores la corriente de descarga en el ánodo es aproximadamente de 0.1 Amp. Los electrones primarios producidos por el filamento y los electrones secundarios proporcionados por la ionización del gas, forman un gas de electrones que junto con los iones y las partículas neutras, forman un sistema al que se le conoce como plasma de arco de descarga. Del plasma formado, los iones H⁺, H⁺₂ y H⁺₃ son extraídos y acelerados en un intervalo de energía de 0.5 a 5.0 keV. Estos al pasar por unas lentes Einzel son afocados y separados de acuerdo con su masa, por el filtro de velocidades.

Como se puede observar de la figura 2.1, el acelerador no está perfectamente alineado en un solo eje. Esto se debe a que los multiplicadores de electrones son sensibles a la luz y si la fuente de iones estuviera alineada con el resto del acelerdor, el detector podría contar los fotones que salen de ella.

La fuente de iones, las lentes Einzel y el filtro de velocidades se encuentran alineados con un eje que forma un ángulo de 10º con respecto al resto del acelerador. Por esta razón se cuenta con unas placas deflectoras cilíndricas a las que se aplica una diferencia de potencial de aproximadamente 150 Volts por cada kiloVolt de energía de aceleración

para corregir la dirección del haz de iones. Los iones después de ser desviados siguen la dirección del eje del acelerador, pasando por un sistema de colimadores dispuestos a lo largo de su trayectoria y por la celda de neutralización, que sólo se usa cuando se desea trabajar con componentes neutros. Estos iones al llegar a la celda de reacción, colisionan con las moléculas de SF₆ que ahi se encuentran a una presión de 4×10^{-4} mmHg, que es la presión adecuada para que las interacciones se realizen en la región de colisión simple.

Antes de introducir el gas de SF_6 a la celda de reacción, se mide la corriente de partículas incidentes por medio de una caja de Faraday, que se encuentra después de la celda de reacción.

Como las reacciones acurren a parametros de impacto relativamente grandes, la dirección y la velocidad de las partículas incidentes quedan, para propósitos prácticos, inalteradas después del choque y como consecuencia los productos se dispersaran a menos de 5º, disminuyendo uniformemente al alejarse del eje del acelerador.

Las distribuciones angulares se realizaron con la ayuda de un motor de pasos que se encarga de mover el sistema de detección en un intervalo angular de $\pm 5^{\circ}$ en incrementos de 0.1° .

Con el analizador parabólico es posible hacer simultáneamente las distribuciones angulares para los fragmentos de disociación H^{\dagger} y H^{0} sin que ello signifique un trabajo adicional.

Todo el sistema de detección se encuentra completamente automatizado por una computadora MincII.

III.3.- CALCULO DE LAS SECCIONES DIFERENCIALES.

La sección diferencial para la producción de cierto producto a un ángulo está definida por :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N(\theta)}{N_i N_t d\Omega}$$
(3.1)

donde:

- N(θ) .- es el número de partículas producto por unidad de ángulo sólido por segundo, detectadas a un ángulo θ. (partículas/seg).
- N_i número de partículas incidentes por unidad de tiempo. (partículas/seg). Como I = q/t = N_e/t = N_ie , entonces N_i = I/e; donde I es la corriente medida en la caja de Faraday.
- N_t .- número de partículas blanco por unidad de área (espesor del blanco, particulas cm²). Esto es $N_t = \rho l = P/KT$. Donde P es la presión en la celda de reacción (4.10⁻⁴ Torr) y T es la temperatura del sistema (= 300 °K).
- $d\Omega$.- ángulo sólido (sterads). El ángulo solido está dado por $d\Omega = (r^2/d^2) = 7.85 \cdot 10^{-7}$ sterads, donde d es la distancia del centro de la cámara de reacción al colimador colocado a la entrada del analizador parabólico y 'r' el radio del orificio del colimador.

Poniendo la ecuacion 3.1 en términos de las cantidades directamente medibles en el experimento, obtenemos:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N_{0,+}(\theta)}{PI} ; \text{ con } K=2.45 \cdot 10^{-30}$$

 $N_{0,+}$ es el numero de fragmentos positivos o neutros por unidad de ángulo sólido por segundo, detectados a un cierto ángulo θ , con respecto a la

dirección del haz incidente.

La sección de dispersión total se puede obtener integrando la ecuación anterior:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \sin(\theta) d\theta$$

Esta sección total de dispersión se calcula por integración numerica (regla de Simson).

III.4.- ERRORES

Para dar una estimación de la incertidumbre involucrada en nuestros resultados, se tomaron en cuenta las incertidumbres asociadas a las magnitudes directamente medibles que aparecen en la fórmula de la sección diferencial. Estas son:

1) La longitud efectiva del blanco (4%).

2) Medida de la corriente total del haz (partículas incidentes, 10%).

3) Calibración del detector (3%).

4) Medida de la presión y temperatura en la celda de reacción (2%).

5) Resolución angular (0.1°).

El error relativo asignado a la sección diferencial debido a las incertidumbres asociadas a los parámetros de la ecuación 3.1 y el error relativo estadístico de las mismas secciones diferenciales es de aproximadamente de 15%.

CAPITULOIV.

IV.1.- RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Las secciones transversales diferenciales en función de la posición para los fragmentos de disociación del ion H_2^+ al incidir sobre SF₆, se muestran en las figuras 3.1 y 3.2 respectivamente.

En estas graficas se puede observar el máximo en la posición cero, para los dos fragmentos de disociación indicando que la máxima producción de iones positivos y neutros se presenta predominantemente a un ángulo cero de dispersión y a medida que el angulo áumenta la sección transversal disminuye monotónicamente hasta un angulo aproximado de 4.5°, donde el número de cuentas tiende a cero.

Se escalaron los datos usando el modelo de distribución angular que está ampliamente discutido en las referencias 3 y 4. Básicamente se tiene que para cualquier fragmento que proviene de un proceso dependiente de la velocidad (1/E_i)(d σ /d Ω) escalan como una función universal de N (E_i) f(E_i θ^2) cuando se miden las distribuciones angulares a diferentes energías.

La fig 3.3 muestra la gráfica de $(1/E_i)(d\sigma/d\Omega)$ vs. $E_i \theta^2$, escalamiento del fragmento H⁺. Como se puede observar a bajas energías (1 a 2) keV las curvas se ordenan por energías, mientras a energias mayores (3 a 5) keV las curvas escalan razonablemente.

La fig. 3.4 presenta la grafica de la distribuciones angulares de los fragmentos neutros expresada en términos de las variables reducidas $(1/E_i)(d\sigma/d\Omega)$ vs. $E_i\theta^2$ y mostrando que las curvas no escalan, ni se ordenan por energías, pero tienen las misma forma y comportamiento.







· .



· 10²¹ $H_2^+ + SF_6 \longrightarrow H^o + H_2^o$ E(keV) <u> E dr (cm²/srad-kev)</u> 1.5 3 X fig34 17 19 19 E0 (kev-scard) ġ



Un factor constante multiplicado por cada una de estas curvas, conduce a que todas ellas se ajustan a una curva universal (fig. 3.5 y 3.6). Esto indica que la sección transversal de excitación directa $1\sigma_{g} \rightarrow 1\sigma_{u}$, tiene una dependencia en la energía incidente (esto es, la velocidad) del tipo:

$\sigma_{\rm ab} = (\,{\rm R},\,\Theta,\,{\rm E_i}\,) = {\rm g}\,(\,{\rm R},\,\Theta\,)\,{\rm N}\,(\,{\rm E_i}\,)$

Los recíprocos de las constantes de normalización dan la dependencia en la energía de la sección transversal de excitación y se muestran en las figuras 3.7 y 3.8 para H^+ y H^0 +... respectivamente. De las gráficas anteriores podemos observar que el comportamiento de la constante de normalización para los fragmentos es semejante, cualitativamente en ambos casos.

La sección transversal total se obtiene al integrar numéricamente las distribuciones mediante la regla de Simpson. Los valores obtenidos son:

| | $H_2^+ + SF_5 \rightarrow H^+$ | $H_2^{+} + SF_{\underline{5}} \rightarrow H^0 + \dots$ |
|---------------|----------------------------------|--|
| ENERGIA (keV) | $\sigma (10^{-10} \text{ cm}^2)$ | σ (10 ⁻¹⁵ cm ²) |
| 1 | 9.12 | 1.76 |
| 1.5 | 1.22 | 1.90 |
| 2 · · · · · | 1.65 | |
| 3 | 2.20 | 2.40 |
| 4 | 2.32 | 2.55 |
| 5 | 2.43 | 2.70 |

Las gráficas de las secciones transversales totales en función de la energía se muestran en la fig. 3.9 y son comparadas con las realizadas









(24)

(25)

por J. F. Williams " y K.K. Damodaran " para la disociación molecular del ion H_2^+ en diferentes blancos. Se observa que la sección transversal total tiene el mismo comportamiento monótono creciente como función de la energía en todas ellas y además, cuantitativamente, está en función de la masa del blanco.

Por último podemos concluir:

1) Las secciones transversales diferenciales de los fragmentos neutros fueron dos órdenes de magnitud mayores que la de los fragmentos cargados (H^+) teniendo ambos un máximo producido a cero grados. 2) Al renormalizar las distribuciones angulares ($1/E_i$)($d\sigma/d\Omega$) vs. $E_i\theta^2$ para su interpretación se encuentra que el proceso es dependiente de la energía de colisión (esto es, la velocidad).

3) La dependencia en la energía para los fragmentos cargados y neutros es semejante cualitativamente.

4) De la comparación de la sección transversal total con otros trabajos se encuentra que la sección total tiene el mismo comportamiento cualitativo cuando se utilizan diferentes blancos y se ordenan con respecto al número de masa.

BIBLIOGRAFIA

1.- G, W. McClure and J. M. Peek, Dissociation in Heavy Particle collisions, pag. 174, 1972.

J. Schottler and J. P. Toennies. Chem Phys. Lett. <u>12</u>,1615 (1972).
 G. W. McClure. Phys. Rev. <u>140</u>, A769 (1965).

4.- J. R. Peterson and J. K. Bae, Phys. Rev. A30, 2807 (1984).

5.- M. A. Morrison and T. L. Estle, Quantum States of Atoms, Molecules and Solid, Prentice Hall, N. Y. Cap. 12 (1976).

6.- G. H. Dunn, Phys. Rev. Lett. 8, 62 (1965).

7.- G. H. Dunn, J. Chem. Phys. 44, 2592 (1966).

8.- J. W. McGowan and L. Kerwin, Can. J. Phys. 42, 972 (1964)

9.- J. D. Craggs and H. S. W. Massey, Hand. Der Phys. 37 (1959).

10.- J. M. Peek, Phys. Rev. A877, 134 (1964).

11.- J. M. Peek, Phys. Rev. a11, 140 (1965).

12.- C. Cisneros, I. Alvarez, C. F. Barnett, J. A. Ray, and Russek, Phys. Rev. A 14, 88 (1976).

13.- I. Alvarez, C. Cisneros and Russek, Phys. Rev. A23, 2340 (1981)

 L. G. Carpenter, Vacuum Technology, Ed. American Elsevier Publishing Company, Inc. 1970.

15.- Valyi L. Atom and Ion Source.

- 16.- E. P. Zavala, Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, 1976.
- H. Martínez, Tesis de licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, 1981.
- 18.- Manual MKS, Baratron Electronic Pressure Meter Type 114.

- 19.- J. A. et al, Rev. Sci. Instrum. 46, 562 (1975).
- 20.- Harrower G. Rev. Sci. Instr. 26, 850 (1955).
 - 21.- G. E. Iglesias and J. D. McGarity, Rev. Sci. Instrum. <u>47</u>, 1728 (1971).
 - 22.- D. A. Crandall et al, Rev. Sci. Instrum. 46, 562 (1975).
 - 23.- H. Pacheco, Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, (1982).
 - 24.- J. F. Williams and D. N. F. Dumbar, Phys. Rev, 149, 62 (1966).
 - 25.- K. K. Damodaran, Proc. Roy. Soc. (London) A239, 382(1957).