



00382

3  
2ej.

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS  
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

PROCESOS FISICOS IMPORTANTES  
EN SISTEMAS HIDROGENICOS  
DE DOS ELECTRONES ( $H^-$ ,  $H_3^+$ ).

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE  
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)  
P R E S E N T A  
IVAN DOMINGUEZ LOPEZ

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

1994

DIRECTOR DE TESIS: Dr. IGNACIO ALVAREZ TORRES

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**Dedico este trabajo....**

**A mi familia**

**A mis amigos**

**Este trabajo se realizó con el apoyo de la U.N.A.M por medio del proyecto DGAPA IN104391 y del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, CONACYT.**

# AGRADECIMIENTOS

En estas líneas deseo manifestar mi sincero agradecimiento a todas las personas que de manera directa ó indirecta me ayudaron en este trabajo, no es posible escribir ó recordar en este momento a todos los que me brindaron su ayuda, sin embargo, mi deuda es grande con todos ellos, muy especialmente con:

El Dr. Ignacio Alvarez T., por haberme sugerido los temas de investigación y por depositar en mi su confianza al hacerse cargo de la dirección de este trabajo. Por el gran apoyo que siempre me ha brindado.

La Dra. Carmen Cisneros G., por la confianza y el gran apoyo brindados en todo momento durante la realización de este trabajo. Por la revisión del mismo.

El Dr. Jaime de Urquijo C., por su apoyo e interés con que siempre favoreció mi desempeño dentro del laboratorio. Por el diseño y construcción de un buen número de apartos electrónicos (fuentes de voltaje, preamplificadores, contadores, circuitos de coincidencias, etc.) en los que su participación directa ó indirecta fué de gran importancia. Por la revisión y corrección de este trabajo.

El Dr. Horacio Martínez V., quien además de brindarme su amistad, ha sido un gran apoyo en todo momento. Sus consejos y ayuda han sido algo invaluable para la realización de este trabajo.

Los miembros del jurado: Dr. Salvador A. Cruz J., Dr. Rolando C. Castillo C., Dr. Jorge Rickards C. y Dr. Hector O. Murrieta S., quienes aceptaron revisar y corregir este trabajo, gracias por sus sugerencias y comentarios a todos ellos.

El técnico Samuel Pérez M., encargado de armar y reparar los aparatos electrónicos en el Laboratorio de Colisiones del IFUNAM-Cuernavaca.

El técnico Anselmo Gonzalez T., quien, entre otras cosas me brindó su ayuda en la construcción y reparación de diversas piezas en el taller mecánico.

El Sr. Jesus Nieto N., por el gran apoyo técnico para poner en funcionamiento el acelerador en el que se llevó a cabo este trabajo.

Reiterando mi agradecimiento, a todos ellos...

**GRACIAS.**

# INDICE

	Pag.
INTRODUCCION	1
PARTE 1	
Despojo Electrónico Simple y Doble de H <sup>-</sup> en SF <sub>6</sub> , CO y CH <sub>4</sub>	
CAPITULO I	
I.1.- Antecedentes del Despojo Electrónico de H <sup>-</sup> en Diversos Gases	11
I.2.- Características del Proyectoil y Blancos	20
I.3.- Modelo de Rapp-Francis	24
I.4.- Modelo de Colisión Libre	30
CAPITULO II	
II.1.- Principio de la Medida	51
II.2.- Descripción del Aparato Experimental	56
II.3.- Descripción del Experimento	88
II.4.- Errores	95
II.5.- Resultados	101
II.6.- Discusión y Conclusiones	120
PARTE 2	
Estudio de la Disociación Polar del Ion H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	
CAPITULO III	
III.1.- Antecedentes	124
CAPITULO IV	
IV.1.- Modificaciones Realizadas al Aparato Experimental para este Estudio. Circuito de Coincidencias	137
IV.2.- Descripción del Experimento	141
IV.3.- Resultados	145
Espectro de Energías del Fragmento H <sup>-</sup>	145
Espectro de Energías del Fragmento H <sup>+</sup>	150
IV.4.- Discusión y Conclusiones	163
APENDICE "A"	168
Programa para la Captura y el Análisis de Datos de los Experimentos de Despojo Electrónico Simple y Doble	
APENDICE "B"	178
Programa para la Captura y Análisis de los Datos de los Experimentos de Disociación en Tres Cuerpos de H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	
APENDICE "C"	191
Transformación de los Espectros de Energía del Sistema de Laboratorio al Centro de Masa.	

# INTRODUCCION

Los sistemas hidrogenoides  $H^-$  y  $H_3^+$ , son, cada uno en su tipo, sistemas especiales: en el caso de  $H^-$ , este es el ion negativo más simple en tanto,  $H_3^+$  es el ion molecular triatómico más simple. Estos dos sistemas juegan un papel importante en procesos astrofísicos. Recientemente fué descubierto el ion  $H_3^+$  en la atmósfera de Jupiter<sup>(1)</sup> y las imágenes de las emisiones de radiación en el infrarrojo de este ion, han dado información de la actividad y acumulación de energía en la atmósfera de este planeta. La producción y destrucción del ion  $H^-$  son procesos que siguen siendo estudiados a fin de contribuir al entendimiento de reacciones que ocurren tanto en nubes estelares densas como en descargas de hidrógeno en el laboratorio.

Otra característica común en los iones  $H^-$  y  $H_3^+$ , es que ambos son sistemas atómicos con dos electrones en los que se ha estudiado lo que se conoce como rompimiento coulombiano en tres cuerpos.

Dentro del estudio de las colisiones entre iones atómicos o moleculares con blancos gaseosos existen dos procesos de gran importancia: aquellos en los que el estado de carga del proyectil y/o el blanco se modifican y aquellos en los que el proyectil es un ion molecular que aumenta su energía interna al chocar con el blanco, hasta alcanzar un estado disociativo. El objetivo principal de este trabajo es estudiar experimentalmente un aspecto de estos

7

dos tipos de procesos. En la primera serie de experimentos se trabajó con el ion negativo del átomo más simple: el hidrógeno. Este ion negativo, precisamente por ser el más sencillo, ha sido objeto de numerosos estudios teóricos y experimentales; la variedad de sus aplicaciones, así como las discusiones sobre su estructura pueden encontrarse en las referencias [2-7]. La idea de estudiar el despojo electrónico simple y doble del ion  $H^-$  surge del hecho que la afinidad electrónica del átomo de hidrógeno es muy pequeña (0.75 eV), lo que hace suponer que el proceso en cuestión ocurre con bastante eficiencia; si a esto se agrega que uno de los gases que se emplearon como blanco es el  $SF_6$ , que tiene una sección eficaz de captura muy alta para electrones lentos, entonces se espera que el proceso de pérdida electrónica del ion  $H^-$  al chocar con  $SF_6$  tenga secciones transversales grandes. Uno de los valores más recientemente reportados para la afinidad electrónica del  $SF_6$  es de  $1.0 \pm 0.2$  eV<sup>(8)</sup>. Los otros gases que se emplearon como blanco, el monóxido de carbono (CO) y el metano ( $CH_4$ ), tienen la característica de que además de ser gases moleculares bastante comunes en la atmósfera, existe muy poca información respecto a la formación de iones negativos de estos gases, y la que hay muestra que la probabilidad de formación de  $CO^-$  y  $CH_4^-$  es muy baja aún en el caso de colisiones electrón- molécula, esto hace suponer que en estos casos el proceso de despojo electrónico de  $H^-$  ocurre por un mecanismo diferente al que se tiene con el  $SF_6$ .

El despojo electrónico doble del ion  $H^-$  ha sido poco estudiado a energías de keV y la información de que se dispone muestra que

los blancos que se han usado para estudiar este proceso han sido generalmente gases atómicos. En este trabajo también se reportan las secciones transversales de doble despojo electrónico del ion  $H^+$  al colisionar con  $SF_6$ ,  $CO$  y  $CH_4$  en un intervalo de energías de colisión de 1 a 5 keV en todos los casos.

Como se mencionó en las primeras líneas de esta introducción, otro proceso que puede ocurrir durante la colisión de un par de sistemas atómicos es la disociación molecular. En este trabajo se estudia la disociación inducida por colisión del ion  $H_3^+$  al chocar con un blanco gaseoso formado por átomos de helio a una energía de colisión de 4800 eV. Se sabe que el ion  $H_3^+$  puede romperse de distintas maneras, las cuales pueden dar como resultado dos, tres ó más fragmentos; de estos canales de disociación, el que dá como resultado dos fragmentos ha sido ampliamente estudiado; sin embargo, esto no se puede decir cuando la disociación produce tres fragmentos y menos aún el caso de disociación polar que es el que aquí se estudiará con detalle. El entendimiento del problema de tres cuerpos resulta de interés para todas las áreas de la física. En el caso de la disociación polar de  $H_3^+$  los tres cuerpos son  $H^+ + H + H^+$ , es decir, en este caso los tres cuerpos tienen carga eléctrica, lo que hace que la interacción entre las partículas esté dominada por un potencial Coulombiano. Previamente se han reportado estudios teóricos respecto al problema de Coulomb de tres cuerpos. A partir de la teoría clásica de Wannier<sup>(9)</sup>, se ha reformulado el problema<sup>(10)</sup>, se han usado métodos semiclásicos en la solución del mismo<sup>(11)</sup>, se ha hecho la descripción del sistema en distintos tipos

de coordenadas<sup>(12)</sup>, así como distintas suposiciones respecto al momento angular total del sistema<sup>(13)</sup>. La técnica de Wannier se ha usado para calcular la manera en que se distribuye la energía cinética entre los fragmentos, así como el ángulo de correlación entre las partículas que poseen carga eléctrica del mismo signo. En varios trabajos experimentales las dos partículas con igual carga han sido electrones y el fragmento con carga opuesta es algún ion atómico. La teoría de Wannier para la distribución del ángulo de correlación fué verificada recientemente por J. Mazeau y sus colaboradores<sup>(14)</sup>, realizando experimentos de doble fotoionización. Recientemente se han realizado experimentos en los cuales las masas de los fragmentos son comparables. El ion  $H_3^+$  al romperse en tres cuerpos:  $H^+ + H + H^+$  se encuentra en este caso. Los trabajos de Montgomery y Jaecks<sup>(15)</sup> así como I. Alvarez y colaboradores<sup>(16, 17)</sup> iniciaron el estudio experimental de este canal de disociación midiendo las distribuciones angulares en sistema de laboratorio para el fragmento  $H$ , en estos estudios no se determinó el ángulo de correlación entre los dos protones, el cual, de acuerdo con Klar<sup>(12)</sup> y Feagin<sup>(13)</sup> es  $180^\circ$ . En los experimentos más recientes<sup>(18 y 19)</sup> realizados a energías de keV, se han usado técnicas de coincidencias en el registro de los fragmentos positivos y negativos a fin de obtener información respecto a la distribución de energía del fragmento  $H^+$  en coincidencia con  $H$ , ya que existen canales de disociación de  $H_3^+$  en dos cuerpos, diferentes a la disociación polar que producen este fragmento. La idea de este trabajo es conocer las distribuciones de energía de los fragmentos

H<sup>-</sup>, y H<sup>+</sup> registrados en coincidencia con H<sup>+</sup> y H<sup>-</sup> respectivamente, a fin de saber cómo se distribuye la energía cinética entre los tres fragmentos, y también el ángulo de correlación al que preferentemente salen los protones en el sistema del centro de masa de H<sub>3</sub><sup>+</sup>. Los resultados obtenidos hasta la fecha no son concluyentes, y es por esta razón que dentro del presente trabajo se incluye el estudio experimental, usando un método de coincidencias, del canal de disociación de H<sub>3</sub><sup>+</sup> que produce H<sup>+</sup> + H<sup>-</sup> + H<sup>+</sup>.

En resumen, el trabajo que se aquí se presenta, se encuentra dividido en dos partes. En la primera parte se describe todo lo relacionado con el proceso de despojo electrónico simple y doble del ion H<sup>-</sup> en SF<sub>6</sub>, CO, y CH<sub>4</sub> en el intervalo de energías de 1 a 5 keV, y en la segunda parte se presenta el estudio de la disociación inducida por colisión en He del ion H<sub>3</sub><sup>+</sup> en tres cuerpos a una energía de colisión de 4800 eV.

La primera parte se presenta en los capítulos I y II. En el capítulo I se presentan los antecedentes teóricos y experimentales respecto al despojo electrónico de H<sup>-</sup> en distintos gases, describiéndose de manera general algunos modelos que permiten calcular las secciones transversales totales para procesos de intercambio de carga y de despojo electrónico. En el capítulo II se dan las ideas básicas sobre un experimento de colisiones entre sistemas atómicos. En la sección II.1 se presenta el principio de la medida, esto es, se describe la manera en que uno puede obtener experimentalmente las secciones transversales totales y absolutas del despojo electrónico simple y doble de un ion negativo. ( $\sigma_{.10}$  y

7

$\sigma_{.11}$ ). En las secciones II.2 y II.3 se describen cada una de las partes principales del aparato experimental y la manera en que se realizó el experimento respectivamente. En este punto es importante mencionar que el acelerador empleado en este trabajo fué modificado en algunos de sus elementos respecto al diseño original, debido a la necesidad de mejorar las condiciones de vacío, una cámara de reacción, y, el sistema de detección y la electrónica asociada a éste para el registro de los productos. También fué necesario elaborar programas de cómputo para la adquisición y el análisis de datos. En la sección II.4 se hace un análisis de los errores asociados a las variables que se midieron en laboratorio, y por medio de las cuales se obtuvieron las secciones de despojo electrónico simple y doble de H<sup>+</sup> en los distintos gases empleados como blanco. En la sección II.5 se presentan los resultados obtenidos y su comparación con lo que predicen los modelos descritos en el capítulo I. En la sección II.6 se presentan las conclusiones de esta primera parte del trabajo.

La segunda parte de este trabajo, corresponde al estudio de la reacción  $H_3^+ + He \longrightarrow H^+ + H + H^+$ , a una energía de colisión de 4800 eV. Este estudio se describe en los capítulos III y IV.

En el capítulo III se presentan los antecedentes del problema a estudiar, mencionándose los trabajos de tipo teórico y experimental relacionados con la disociación polar del ion  $H_3^+$ .

En el capítulo IV se proporciona una descripción detallada del experimento. En la sección IV.1 se describen las modificaciones hechas al acelerador para la realización de este experimento,

esencialmente en la celda de reacción y en el sistema de detección, en éste último se empleó un circuito de coincidencias diseñado y construido en el laboratorio especialmente para la realización de este experimento<sup>(20)</sup>. En la sección IV.2 se describe la forma en que se realizó el experimento, se presentan los resultados obtenidos, así como los errores asociados a las mediciones.

En la sección IV.3 se presentan las conclusiones respecto a la disociación polar de  $H_3^+$ .

Al final de cada capítulo se ha agregado la lista de referencias citadas en el mismo, y como parte final, se encuentra en los apéndices un listado de los programas en lenguaje QBASIC, elaborados para llevar a cabo el experimento, así como para el análisis de datos:

En el apéndice A se encuentra un listado del programa por medio del cual se realizaron los experimentos de despojo electrónico de  $H^-$  en varios gases.

En el apéndice B se presenta el programa con el que se tomaron los datos de la disociación polar de  $H_3^+$  en He a 4.8 keV.

En el apéndice C se encuentra un listado del programa por medio del cual se hace la transformación del espectro de energías en laboratorio de algún fragmento ( $H^+$  ó  $H^-$ ) al sistema del centro de masa de  $H_3^+$ .

- 7
- El circuito de coincidencias y su aplicación fué aprobado para su publicación en Rev. Sci. Instrum.
  - Los resultados de la disociación polar de  $H_3^+$  en helio se enviaron para su publicación en la revista Phys. Rev. A y actualmente ha sido aceptado.
  - Los resultados del estudio experimental del despojo electrónico simple y doble de  $H^+$  en  $SF_6$ ,  $CO$ , y  $CH_4$  serán enviados para su publicación en Phys. Rev. A.

## REFERENCIAS

- 1.- Dalgarno, A. Nature **353**, 502 (1991).
- 2.- Massey H. S. W., "Negative Ions", tercera ed., Cambridge Univ. Press, New York, (1976).
- 3.- Fournier P. G., Phys. Rev. **34**, 3743 (1986)
- 4.- Ho Y. K., Phys Rev. **34**, 130 (1986)
- 5.- Duncan M. M., Phys. Rev. **34**, 4657 (1986)
- 6.- Comtet G., Phys. Rev. **35**, 1547 (1987)
- 7.- Esaulov, V. A., Phys. Rev. **35**, 2470 (1987)
- 8.- G. E. Streit J. Chem. Phys. **77**, 826 (1982)
- 9.- G. H. Wannier, Phys. Rev. **90**, 817 (1953)
- 10.- R. Peterkop, J. Phys. B **4**, 513 (1971)
- 11.- A. R. P. Rau, Phys. Rev. A **4**, 207 (1971)
- 12.- H. Klar, Z. Phys. A **307**, 75 (1982)
- 13.- J. M. Feagin, J. Phys. B **17**, 2433 (1984)
- 14.- J. Mazeau, P. Selles, D. Waymel and A. Huetz, Phys. Rev. Lett. **67**, 890 (1991)
- 15.- Montgomery and Jaecks, Phys. Rev. Lett. **51**, 1862 (1983)
- 16.- I. Alvarez, C. Cisneros, J. de Urquijo and T. J. Morgan, Phys. Rev. Lett. **53**, 740 (1984)
- 17.- Alvarez, I., Martínez, H., Cisneros, C., Morales, A. and De Urquijo, J., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **40/41**, 245 (1989)
- 18.- N. V. de Castro Faria, W. Wolff, L. F. S. Coelho, and H. E. Wolf, Phys. Rev. A **45**, 2957 (1992)

- 19.- O. Yenen, D. Calabrese, L. M. Wiese, D. H. Jaecks and Gordon  
A. Gallup, Phys. Rev. A **47**, 1059 (1993)
- 20.- de Urquijo, J., Alvarez, I., Domínguez, I., Cisneros, C. and  
Martínez, H., Rev. Sci. Instrum. (Aceptado para su  
publicación)

# CAPITULO I

## I.1.- ANTECEDENTES DEL DESPOJO ELECTRONICO

### DE H<sup>+</sup> EN DIVERSOS GASES

Los estudios de intercambio de carga y despojo electrónico en los que ha participado el ion H<sup>+</sup> que se encuentran en la bibliografía, fueron realizados a partir de la década de 1950 y desde entonces, hasta la actualidad, este proceso sigue siendo objeto de interés tanto teórico como experimental. En esta sección se presenta de manera resumida la información a este respecto.

#### REVISION DE ESTUDIOS ANTERIORES DEL DESPOJO ELECTRONICO SIMPLE DEL ION H<sup>+</sup> EN DIVERSOS GASES.

En las siguientes líneas se presenta de manera esquemática la información respecto a los procesos de intercambio de carga y despojo electrónico simple en los que ha participado el ion H<sup>+</sup>

TABLA TI.3

PROCESO	TIPO DE TRABAJO	AUTORES [REF.]
$H^+ + H \longrightarrow H + H + e$	T T T E	Bates, [14] Mc. Dowell, [15] Bardsley [16] Hummer, [17]
$H^+ + H \longrightarrow H + H^+$	T T E	Dalgarno, [18] Bardsley [16] Keever, [19]

$H^+ + X \longrightarrow H + X^+$ $X = O_2, NO \text{ y } CO$ $X = O, O_2 \text{ y } NO_2$ $X = O_2$	E E E	Pilipenko, [27] Snow, [12] Bailey, [20]
$H^+ + X \longrightarrow H + X + e$ $X = He, Ne, Ar, Kr \text{ y } Xe$  $X = He, Ne, Ar, Kr, Xe$ $Y H_2$ $X = He$ $X = H, He, Ne, Ar$	E E E E E T T	Hasted, [36] Stedeford, [21] Stier, [22] Bydin [23]  Williams [35] Sida [24] Bates, [14]
$H^+ + X \longrightarrow H(2s) + e + ..$ $H(2p) + e + ..$ $X = He, Ne, Ar, Kr \text{ y } Xe$	E	Andreev, [25]
$H^+ + X \longrightarrow H + e + ..$ $X = H_2$	E E E T T	Stier, [22] Whittier [26] Hasted, [37] Bates, [14] Mc. Dowell, [15]
$H^+ + X \longrightarrow H + ...$ $X = He, Ne, Ar, Kr \text{ y } Xe$	E	Dewangan, [28]
$H^+ + X \longrightarrow H + ...$ $X = N_2, CO, O_2, CO_2 \text{ y } CH_4$	E	Huq, [39]
$H^+ + X \longrightarrow H + ...$ $X = He, Ar,$ $H_2, N_2, O_2 \text{ y } CO_2$	E	Esaulov, [29]
$H^+ + X \longrightarrow H + ...$ $X = N_2, O_2, CO, D_2 \text{ y } CO_2$	E	Tuan, [30]
$H^+ + X \longrightarrow H + e + ..$ $X = He, Ne, Ar \text{ y } Xe$	T	Meron, [13]
$H^+ + X \longrightarrow H + e + ..$ $X = H \text{ y } H_2$	E	Gealy, [31]

De acuerdo al orden cronológico de las referencias que se mencionan en la tabla TI.3, el primer estudio de la pérdida de un electrón del ion  $H^+$  al chocar con blancos gaseosos fué realizado por Hasted<sup>(36)</sup> en 1952. En sus experimentos, él determinó las secciones transversales de despojo electrónico de  $H^+$  al incidir en blancos de

He, Ne, Ar, Kr y Xe en el intervalo de energías de 25 a 4000 eV, encontrando en todos los casos que las secciones transversales aumentan monótonamente con la energía de colisión. Posteriormente, en 1955 Stedeford y Hasted<sup>(21)</sup> estudiaron el mismo proceso pero en el intervalo de energías de 3 a 40 keV, encontrando un buen acuerdo con las mediciones realizadas por Hasted<sup>(36)</sup>, ellos hicieron una comparación cuando se usó helio como blanco, con el estudio teórico de Sida<sup>(24)</sup> en el que se predice un máximo en la sección transversal de despojo electrónico a una energía cercana a 10 keV. En los cálculos desarrollados por Sida<sup>(24)</sup>, se emplea la primera aproximación de Born en el intervalo de energías de 100 a 20000 eV, y existe acuerdo cualitativo con el experimento, aunque las secciones calculadas son aproximadamente la mitad de las medidas.

En 1956, Hasted y Smith<sup>(37)</sup> estudiaron el despojo electrónico de H<sup>+</sup> en H<sub>2</sub>. Por primera vez se trabaja con un blanco molecular en el estudio del despojo electrónico de H<sup>+</sup>. En este caso, el intervalo de energías fué de 10 a 2500 eV, y en su trabajo se distingue entre los procesos de despojo electrónico y de intercambio de carga, encontrando que la sección para éste último es muy pequeña. Las secciones transversales del proceso fueron del orden de 10<sup>-16</sup> cm<sup>2</sup> aún para energías de colisión de 10 eV. Stier y Barnett<sup>(22)</sup> también usaron blancos moleculares (H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>) además de blancos atómicos (He, Ne y Ar). El intervalo de energías en este caso fué de 3 a 200 keV, y el orden de magnitud de las secciones estuvo cercano a 10<sup>-15</sup> cm<sup>2</sup>.

La descripción teórica del proceso de despojo electrónico de

H<sup>+</sup> en distintos gases también ha tenido algunos avances. Los resultados obtenidos por McDowell y Peach<sup>(15)</sup> son un ejemplo: ellos utilizan la aproximación de Born para calcular las secciones transversales del proceso:  $H(1s) + H(1s^2) \longrightarrow H(1s \text{ ó } 2p) + H(1s \text{ ó } 2p) + e$  a energías de impacto entre 2.5 keV y 10 MeV. Posteriormente, Bates y Walker<sup>(14)</sup> utilizaron un método semiclásico para calcular las secciones de despojo electrónico entre iones negativos de Hidrógeno y átomos ó moléculas (H, He, Ne, Ar, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>). Este método se aplicó en el intervalo de energía entre 5 y 100 keV. Bardsley<sup>(16)</sup> calculó las secciones transversales para el despojo electrónico y el intercambio de carga en la colisión H-H<sup>+</sup> a energías desde 50 hasta 10000 eV y encontró que ambas secciones son funciones monótonas decrecientes de la energía de colisión. En todos los casos se ha hecho la comparación con los resultados experimentales disponibles, encontrándose en general un buen acuerdo; específicamente, la comparación con los resultados de Hummer<sup>(17)</sup> ha mostrado que el acuerdo puede ser bueno cuando se considera que únicamente ocurre intercambio de carga en un intervalo de energías, mientras que el acuerdo es mejor en otro intervalo de energía al considerar que solamente ocurre el despojo electrónico en la colisión.

Bydin<sup>(23)</sup> midió las secciones transversales del despojo electrónico de H<sup>+</sup> en gases nobles en el intervalo de energías de 200 a 7000 eV, que corresponde al traslape en los estudios realizados por Hasted<sup>(36)</sup> y por Stedeford y Hasted<sup>(21)</sup>. El acuerdo con estos autores no fué bueno; el orden de magnitud de las secciones es el

mismo pero el comportamiento cualitativo es diferente.

En 1966 Pilipenko, Gusev y Fogel<sup>(27)</sup> midieron las secciones transversales para el despojo electrónico simple y la formación de iones negativos lentos durante la colisión de iones  $H^+$  con  $O_2$ ,  $NO$  y  $CO$  en el intervalo de energías de 3 a 30 keV. Ellos encontraron que no ocurre la transferencia de un electrón de  $H^+$  al blanco formado por  $CO$  en este intervalo de energías, en tanto que las secciones de despojo electrónico simple son prácticamente constantes cuando el blanco es  $NO$  y  $O_2$ , sin embargo, se tiene un comportamiento diferente cuando se trabaja con  $CO$  como blanco. En este caso, los autores encontraron que las secciones transversales del proceso son grandes ( $\approx 3.75 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ ) para energías cercanas a 3 keV, posteriormente decrecen con la energía en el intervalo de 5 a 8 keV, y a energías mayores se tienen algunas estructuras, una de ellas a 23 keV. Los autores la explican por medio del criterio adiabático de Massey<sup>(38)</sup> suponiendo la formación de  $(CO)^+ \longrightarrow C^+ + O^+ + e$ , a partir de este máximo calcularon un parámetro adiabático<sup>(38)</sup> de 2.5 Å.

Snow, Rundel y Geballe<sup>(12)</sup> midieron las secciones transversales de transferencia de carga entre iones negativos y blancos atómicos y moleculares, haciendo incidir  $H^+$  en blancos de  $O$ ,  $O_2$  y  $NO_2$ ;  $O^-$  en  $H$ ,  $O$ ,  $H_2$ ,  $O_2$  y  $NO_2$ ; y  $C^-$  en  $H$  y  $O$  en un intervalo de energías de 0.5 a 4 keV, compararon sus resultados con lo que predice la teoría desarrollada por Rapp y Francis. Como se verá más adelante, existe un buen acuerdo en el caso de las reacciones (1.21), (1.22), (1.23), y (1.24), página 30.

Hug, Doverspike y Champion<sup>(39)</sup> midieron las secciones

transversales absolutas del despojo electrónico en la colisión de iones H<sup>+</sup> y D<sup>+</sup> con N<sub>2</sub>, CO, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub> desde energías térmicas, hasta cientos de electrón-volts. Encontraron que el despojo electrónico es el proceso dominante en todos los blancos moleculares, excepto con O<sub>2</sub>, en este caso el proceso de transferencia de carga predomina. También encontraron que las secciones transversales del proceso de transferencia de carga disociativa son pequeñas con todos los blancos, excepto con O<sub>2</sub>.

Dewangan y Walters<sup>(28)</sup> estudiaron en 1978 la pérdida electrónica de H<sup>+</sup> al pasar a través de He, Ne, Ar, Kr y Xe. En este caso las energías de colisión estuvieron entre 10 keV y 10<sup>4</sup> keV. Ellos aplicaron el modelo de colisión libre, encontrando un excelente acuerdo, especialmente cuando los blancos fueron He y Ar.

En 1984 Esaulov et al<sup>(29)</sup> reportaron mediciones del espectro de energía del electrón despojado de H<sup>+</sup> al colisionar éste con blancos de He, Ar, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> en el intervalo de energías de 4.5 eV a 4 keV. Este trabajo permitió, en particular, el estudio de la dinámica del intercambio de carga a formas de resonancias en las colisiones de H<sup>+</sup> con N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>; esto quiere decir que el blanco captura un electrón del proyectil, quedando en un estado que decae liberando posteriormente al electrón. En sus resultados no se observó este tipo de intercambio con H<sub>2</sub>. En 1984 Tuan, Esaulov, Gauyacq y Herzenberg<sup>(30)</sup> estudiaron el despojo electrónico de H<sup>+</sup> en blancos moleculares (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CO, D<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>) a energías de keV. De sus resultados concluyen que el despojo ocurre por tres mecanismos: despojo directo, intercambio de carga a formas de resonancias (como

se mencionó en las líneas anteriores), y la captura acompañada por excitación del blanco, únicamente en el caso de  $D_2$  no se encontró evidencia del proceso de intercambio de carga a estados resonantes, en tanto que para los otros blancos se concluye que este es un canal importante en la destrucción de  $H^+$  en el intervalo de energías de keV.

Finalmente, los trabajos más recientes en los que se estudia el despojo electrónico de  $H^+$  son los realizados por Gealy y Van Zyl<sup>(31)</sup> y por Meron y Johnson<sup>(33)</sup>, éste último será descrito con más detalle mas adelante por lo cual únicamente se describirá el trabajo de Gealy y Van Zyl, quienes midieron las secciones transversales relativas de captura electrónica de  $H^+$  en blancos de  $H$  y  $H_2$ , y las secciones transversales relativas de pérdida electrónica del ion  $H^+$  en los mismos blancos. El intervalo de energía en este caso fué de 63 eV a 2000 eV. Las secciones transversales relativas para los procesos antes mencionados se ajustaron, utilizando datos existentes con fines de normalización, y su comportamiento cualitativo en función de la energía resultó semejante al que se había reportado previamente. Los errores asociados a las mediciones se encuentran entre 10% y 29%.

#### REVISION DE ESTUDIOS ANTERIORES DEL DESPOJO ELECTRONICO DOBLE DEL ION $H^+$ EN DIVERSOS GASES.

Las primeras mediciones de secciones transversales de doble despojo electrónico fueron realizadas por Dukel'skii y Fedorenko<sup>(32)</sup>

en 1956, quienes trabajaron con iones negativos pesados como  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ ,  $\text{Na}^-$ ,  $\text{Sb}^-$ ,  $\text{Bi}^-$  y  $\text{Sb}_2^-$ , con energías cinéticas entre 5 y 17.5 keV en blancos de He, Ar,  $\text{H}_2$ , y  $\text{N}_2$ . Las secciones transversales obtenidas fueron del orden de  $10^{-17}$  a  $10^{-16}$   $\text{cm}^2$ . Un poco después, en 1957, Fogel, Ankudinov y Slabospitskii<sup>(33)</sup> realizaron las primeras medidas de doble despojo electrónico de  $\text{H}^-$  en blancos atómicos de He, Ne, Ar, Kr y Xe, y en blancos moleculares de  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$  y  $\text{O}_2$ , en un intervalo de energías entre 5 y 40 keV. En todos los casos las secciones transversales totales fueron inferiores a  $2.0 \times 10^{-16}$   $\text{cm}^2$ .

Tisone y Branscomb<sup>(34)</sup> midieron en 1964 las secciones relativas de doble despojo electrónico de  $\text{H}^-$  en  $\text{H}_2$  a energías de colisión de 0.5 a 4 keV.

En 1967, Williams<sup>(35)</sup> estudió el despojo electrónico simple y doble del ion  $\text{H}^-$  al incidir en moléculas de hidrógeno, así como también en blancos de He, Ne, Ar, Kr y Xe, en un intervalo de energías entre 2 y 50 keV.

Keever et al<sup>(19)</sup> determinaron en 1968 la variación de la probabilidad de transferencia de carga y la probabilidad de producción de iones  $\text{H}^+$  en colisiones  $\text{H}^- - \text{H}$  en función de la energía de impacto. Sus resultados muestran que la probabilidad para los procesos:



aumentan monótonamente con la energía, aún cuando esta es de 50 keV.

Recientemente M. W. Gealy y B. Van Zyl<sup>(31)</sup> midieron, entre

7

otras, las secciones transversales totales de despojo electrónico doble de  $H^+$  en blancos de  $H$  y  $H_2$ . El intervalo de energías de estudio fué de 63 a 2000 eV y usaron la técnica de haces cruzados. Sus resultados presentan un buen acuerdo cualitativo con aquellos que se han reportado con anterioridad.

## I. 2.- CARACTERISTICAS DEL PROYECTIL Y LOS BLANCOS

Los procesos de intercambio de carga y de despojo electrónico en los que interviene el ion  $H^+$  han resultado de gran interés debido fundamentalmente a que el electrón en este sistema se encuentra muy débilmente ligado, por lo cual es fácilmente removido del átomo de hidrógeno. La afinidad electrónica del átomo de hidrógeno ha sido calculada por varios autores usando métodos variacionales. Los primeros cálculos a este respecto fueron desarrollados por Hylleras<sup>(1)</sup> en 1930. Según sus cálculos, mostró que el campo del átomo de hidrógeno no es suficientemente intenso para producir un ion negativo estable. Después, con cálculos más elaborados, Pequeris<sup>(2)</sup> mostró que el ion  $H^+$  es estable y que su afinidad electrónica es  $E_A = 0.755428353$  eV. Posteriormente<sup>(3)</sup>, al introducir refinamientos adicionales en sus cálculos, Pequeris llegó a obtener  $E_A = 0.754$  eV. Este valor se verificó experimentalmente por Khovstenco y Dukel'skii<sup>(4)</sup>, quienes obtuvieron un valor de  $E_A = 0.8 \pm 0.1$  eV.

Es claro que en el proceso de intercambio de carga ó de despojo electrónico interviene también un blanco, y por lo tanto, también dependerá de éste que el proceso ocurra con probabilidades diferentes dependiendo del blanco. En el presente caso se usaron los siguientes gases para este fin: hexafloruro de azufre ( $SF_6$ ), monóxido de carbono (CO) y metano ( $CH_4$ ). Las características más relevantes de cada uno de estos frente al proceso de intercambio de

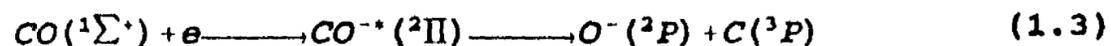
carga se mencionan a continuación.

El SF<sub>6</sub> es un gas que desde hace algún tiempo se ha usado como un buen aislante en cables coaxiales, así como en interruptores y generadores de alto voltaje. Desde que se descubrió la capacidad de este gas para atrapar electrones lentos, ha sido objeto de diversos estudios, tanto teóricos como experimentales. En 1960, [Referencia (5)] se determinaron algunas características básicas de la molécula de SF<sub>6</sub> tales como su geometría. La molécula SF<sub>6</sub> es un octaedro regular con el átomo de azufre en el centro y los átomos de fluor situados en las esquinas, todos alejados a una distancia de 1.54 Å del átomo de azufre y ligados principalmente por enlaces covalentes. El diámetro de la molécula se determinó como 4.77 Å. Otras características importantes, como son los potenciales de ionización, la afinidad electrónica y la energía de ligadura se determinaron posteriormente. Los potenciales de ionización para uno y dos electrones fueron medidos por Sell y Kuppermann<sup>(6)</sup>, encontrando valores de 15.7 eV y 17.0 eV respectivamente. Los cálculos realizados por Tang y Callaway<sup>(7)</sup> han proporcionado un valor de 1.19 eV para la afinidad electrónica del SF<sub>6</sub>, el cual es bastante cercano al valor recomendado por Streit<sup>(8)</sup> de 1.0 ± 0.2 eV quien hace referencia, entre otras reacciones, a la transferencia de carga en el proceso  $H + SF_6 \longrightarrow H + SF_6^-$  a energías térmicas. En otros estudios<sup>(9)</sup>, se ha mostrado que existen diversos mecanismos mediante los cuales SF<sub>6</sub> captura electrones lentos. Todos estos procesos tienen secciones transversales entre 10<sup>-15</sup> y 10<sup>-16</sup> cm<sup>2</sup>.

Algunos modelos que estudian la transformación del ion H<sup>+</sup> en

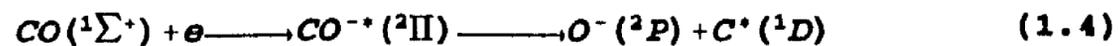
H<sup>0</sup> al chocar con algún blanco gaseoso suponen que el electrón simplemente es liberado del ion negativo, es decir, que durante la colisión el electrón es enviado al continuo de energía. En este tipo de modelos no se necesita conocer características como la afinidad electrónica del blanco, o la estructura del mismo. Sin embargo, en otros modelos el proceso mediante el cual el ion negativo pierde al electrón, implica necesariamente la ionización del blanco; esto significa, en realidad, un proceso de intercambio de carga entre proyectil y blanco, y en general es necesario saber cuál es la capacidad de éste último para atrapar un electrón y transformarse en un ion negativo. A este aspecto se refiere la información que se encuentra en la bibliografía para los gases CO y CH<sub>4</sub>.

En 1970, Christophorou<sup>(9)</sup> resumió la información existente hasta esa fecha respecto a la captura electrónica disociativa de algunas moléculas. Para el caso del monóxido de carbono se observan tres procesos en los cuales CO captura un electrón lento (pocos eV) y posteriormente se disocia en dos canales que producen O<sup>·</sup>, y uno que conduce a la formación de C. El proceso dominante que lleva a la formación de O<sup>·</sup> es:



donde los productos O<sup>·</sup> y C están respectivamente en sus estados base. La sección transversal de captura disociativa  $\sigma_{DA}(\epsilon)$  tiene un pico cercano a  $\epsilon = 9.62$  eV y su valor en ese máximo es de aproximadamente  $2 \times 10^{-19}$  cm<sup>2</sup>.

El segundo proceso que conduce a la formación de  $O^-$  es:



En este caso la sección  $\sigma_{DA}(\epsilon)$  alcanza su valor máximo de  $9.5 \times 10^{-21} \text{cm}^2$  cuando  $\epsilon \approx 10.88 \text{ eV}$ .

El tercer proceso de captura electrónica conduce a la formación de  $C^*$ , y tiene una sección  $\sigma_{DA}(\epsilon)$  aproximadamente dos ordenes de magnitud más pequeña que el proceso anterior a una energía  $\epsilon \approx 10 \text{ eV}$ . No se encontró en la bibliografía un valor para la afinidad electrónica de la molécula CO.

Los procesos mediante los cuales el metano atrapa electrones lentos se discuten en la referencia (10), donde se mencionan dos canales de captura disociativa:



los cuales ocurren en un intervalo de energía entre 5 y 19 eV, y tienen secciones transversales máximas del orden de  $10^{-19} \text{cm}^2$ . En la bibliografía no se encontró ningún valor correspondiente a la afinidad electrónica de  $CH_4$ .

Como puede verse de las líneas anteriores, existe una gran diferencia (3 a 4 ordenes de magnitud) en las secciones transversales de los procesos de captura electrónica para el  $SF_6$  con respecto al monóxido de carbono y al metano. Por supuesto, este comportamiento ocurre a energías térmicas, en colisiones de electrones con estos gases. En el presente estudio la colisión

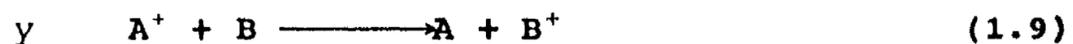
ocurre con iones H<sup>+</sup>, a energías de keV, los mecanismos mediante los cuales el SF<sub>6</sub>, CO y CH<sub>4</sub> capturen al electrón del H<sup>+</sup>, si acaso esto ocurre, pueden ser completamente diferentes; sin embargo, es necesario conocer las características de los estados de ion negativo SF<sub>6</sub><sup>-</sup>, CO<sup>-</sup> y CH<sub>4</sub><sup>-</sup> involucrados si se pretende aplicar algún modelo para procesos de intercambio de carga del tipo:



Los resultados experimentales serán comparados con la teoría que se presenta a continuación. En primer lugar se describe el modelo de transferencia de carga desarrollado por Rapp-Francis<sup>(1)</sup> y posteriormente el modelo de colisión libre aplicado por Meron-Johnson<sup>(13)</sup> específicamente al despojo electrónico de H<sup>+</sup> y H<sup>0</sup> en gases nobles.

### I.3.- MODELO DE RAPP-FRANCIS.

La teoría desarrollada por Rapp y Francis<sup>(1)</sup> que se describe brevemente a continuación tiene por objeto estudiar el intercambio de carga entre iones y átomos gaseosos en reacciones del tipo



A los procesos del tipo (1.8) se les conoce como procesos resonantes simétricos y a los del tipo (1.9) como procesos no

resonantes asimétricos. De éste último se dará enseguida una breve descripción.

Los procesos de intercambio de carga, al igual que muchos otros procesos, no pueden ser descritos de manera general; es necesario restringir el fenómeno en un marco cada vez más pequeño a fin de conseguir la validez de las suposiciones que muchas veces se hacen al plantear la solución del problema.

En el presente caso, el problema consiste en encontrar expresiones analíticas para las secciones transversales totales de intercambio de carga entre iones y blancos gaseosos, bajo las restricciones de tener que considerar iones y blancos atómicos y también considerar un intervalo de velocidades relativas de colisión definido por la condición  $10^5/\mu^{1/2} \leq v \leq 10^8$  cm/s, donde  $\mu$  es la masa reducida del par que colisiona, expresada en amu, este intervalo es conocido como el de velocidades "intermedias".

Rapp y Francis (R-F) emplean el método del parámetro de impacto, según el cual la sección transversal del proceso se encuentra en términos de la ecuación

$$\sigma(v) = 2\pi \int P(b, v) b db \quad (1.10)$$

donde  $P(b, v)$  denota la probabilidad de que el proceso (1.9) ocurra cuando la velocidad relativa de colisión es  $v$  a un parámetro de impacto  $b$ . En la figura I.1 se muestra un esquema de la colisión. El átomo B se localiza a una distancia fija  $b$  del eje  $x$ , y el ion  $A^+$  que se considera inicialmente en  $x = -\infty$  se mueve a lo largo del

eje  $x$  y se desprecia la desviación del movimiento rectilíneo uniforme que pudiera tener para  $x \sim 0$ .

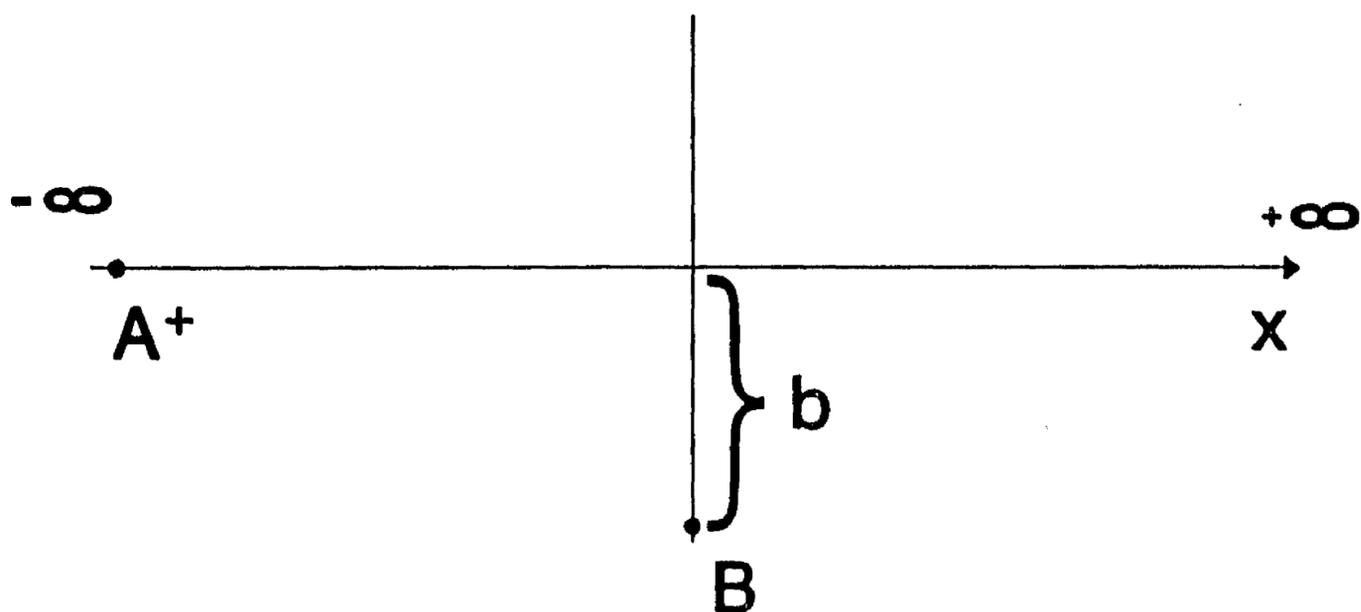


Fig. I.1

En esta figura se muestra la colisión de un ion  $A^+$  incidiendo sobre el blanco  $B$ . La colisión ocurre a un parámetro de impacto  $b$ .

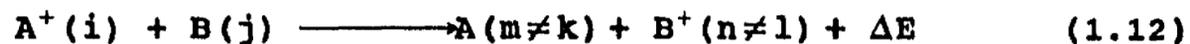
La reacción no resonante entre dos estados electrónicos particulares puede escribirse como:



donde  $i, l, j, k$  representan los estados electrónicos más bajos de los iones y átomos, respectivamente y  $\Delta E$  es el cambio en energía interna necesario para que ocurra la transferencia de carga.

Los lados derecho e izquierdo de la reacción (1.11) representan dos estados asintóticos diferentes de la molécula  $AB^+$ , y la transferencia de carga ocurre cuando hay una transición electrónica de un estado a otro. Si se considera que el espín y el momento angular se conservan después de la transición, entonces las

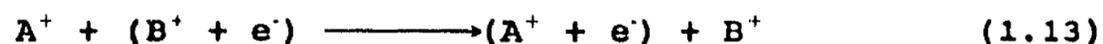
formas asintóticas  $(A^+ + B)$  y  $(A + B^+)$  deben tener simetría idéntica. Aún con estas suposiciones se permiten reacciones del tipo:



donde los productos se encuentran en estados excitados; pero se requiere un valor de  $\Delta E$  más grande para que la reacción (1.12) ocurra, esto implica que la probabilidad con que ocurre este canal es más pequeña que para el proceso (1.9).

Cuando la colisión entre  $A^+(i)$  y  $B(j)$  toma lugar, se pueden formar varios estados electrónicos de  $AB^+$ , pero sólo una fracción de ellos conduce al proceso de transferencia de carga. Se denota por  $f$  a esta fracción, y esta representa un factor de peso estadístico para la reacción. Es importante tomar en cuenta este factor, especialmente cuando se desea hacer alguna comparación con resultados experimentales.

El proceso de intercambio de carga de la reacción (1.9) se puede escribir como



Es decir, se tiene un solo electrón de valencia que puede ser atrapado por cualquiera de los núcleos  $A^+$  ó  $B^+$ . La función de onda total para el electrón en el campo combinado de  $A^+$  y  $B^+$  se puede escribir como

$$\Psi = C_A(t) \phi_A(r_A) \text{Exp}(-i\omega_A t) + C_B(t) \phi_B(r_B) \text{Exp}(-i\omega_B t) \quad (1.14)$$

donde  $C_A$  y  $C_B$  son los coeficientes dependientes del tiempo en

términos de los cuales se encuentra la probabilidad de que el electrón sea transferido.  $\phi_A$  y  $\phi_B$  son orbitales atómicos para el electrón en el núcleo de  $A^+$  y  $B^+$ , respectivamente;  $r_A$ ,  $r_B$  son las distancias del electrón a los núcleos  $A^+$  y  $B^+$ ;  $\omega = \mathcal{E}/\hbar$ ;  $\mathcal{E}_A$  y  $\mathcal{E}_B$  son las energías (potenciales de ionización) correspondientes a A y B, respectivamente.

Con la ayuda de la ecuación de Schrödinger se encuentra un par de ecuaciones diferenciales acopladas para los coeficientes  $C_A$  y  $C_B$ . Al considerar que el electrón se encuentra inicialmente en B, se tienen las condiciones iniciales

$$C_A(-\infty) = 0 \text{ y } C_B(-\infty) = 1 \quad (1.15)$$

La probabilidad de encontrar al electrón orbitando en torno al núcleo  $A^+$  después de la colisión es  $|C_A(+\infty)|^2$  multiplicado por el factor de peso estadístico  $f$ , representa la probabilidad de transferencia de carga.

R-F trabajan en sus cálculos con orbitales atómicos semiempíricos del tipo

$$\phi_i(r) = (\pi a_0)^{-3/2} (I_i/13.6)^{3/2} \text{Exp}[-(I_i/13.6)^{1/2} r_i/a_0] \quad (1.16)$$

donde  $a_0$  es el radio de Bohr,  $I_i$  es el potencial de ionización del átomo de tipo  $i$  en eV, y  $r_i$  es la distancia del electrón al núcleo del átomo  $i$ .

La expresión final para la probabilidad de intercambio de carga esta dada por:

$$P_{\omega}(b, v) = f P_0(b, v) \operatorname{sech}^2[(\omega/v) (a_0 \pi b / 2\gamma)^{1/2}] \quad (1.17)$$

donde  $\gamma = (I/13.6)^{1/2}$  y

$$P_0(b, v) = \operatorname{sen}^2[(2\pi/\gamma a_0)^{1/2} (I/\hbar v) b^{3/2} (1 + a_0/\gamma b) \operatorname{Exp}(-\gamma b/a_0)] \quad (1.18)$$

Para velocidades "intermedias",  $P_0(b, v)$  se puede reemplazar por el valor 1/2 para  $0 < b < b_1$  y por el valor 0 para  $b > b_1$ , la elección del parámetro de impacto  $b_1$  se hace de acuerdo con la condición:

$$\operatorname{sech}^2[(\omega/v) (a_0 \pi b_1 / 2\gamma)^{1/2}] = 4 P_0(b_1, v) \quad (1.19)$$

y la sección transversal es entonces

$$\sigma(v) = \frac{1}{2} f \int_0^{b_1} \operatorname{sech}^2[(\omega/v) (a_0 \pi b / 2\gamma)^{1/2}] 2\pi b db \quad (1.20)$$

La aproximación de dos estados usada por R-F para calcular la sección transversal total de intercambio de carga entre iones positivos y átomos ha dado resultados que se encuentran en buen acuerdo con datos experimentales. Algunas de las suposiciones son tales que la teoría podría dar mejores resultados cuando todas las partículas se encuentren en estados  $s$  y  $\Delta E$  sea pequeña. Esta última condición se satisface mejor en reacciones de iones negativos que en aquellas que involucran iones positivos. Snow, Rundel y Geballe<sup>(12)</sup> aplicaron con éxito la teoría de intercambio de carga

descrita anteriormente a los procesos:



En el presente caso, únicamente se hace la comparación con la teoría de R-F cuando el blanco es SF<sub>6</sub> ya que se en este caso se conoce la afinidad electrónica de este gas<sup>(8)</sup>; este dato se desconoce para CO y CH<sub>4</sub>.

#### I.4.- MODELO DE COLISION LIBRE

Cuando se estudia únicamente el cambio en el estado de carga del proyectil, y no se tiene ninguna información con respecto a lo que sucede con el blanco, es decir, no se sabe si éste capturó ó perdió electrones, si se disoció ó no, si se excitó ó no y si esto ocurrió, cuales fueron los niveles de excitación que estuvieron involucrados. Resulta razonable usar alguna teoría, quizá menos elaborada que la anterior, en la que el proceso de pérdida electrónica de A' no implique necesariamente que el blanco B se transforme en B' y que se requiera de mínima información respecto al blanco. En esta categoría entran los cálculos para la sección transversal de pérdida electrónica desarrollados recientemente por M. Meron y B. M. Johnson<sup>(13)</sup> específicamente para el despojo

electrónico de iones negativos y de átomos de hidrógeno.

Meron y Johnson<sup>(13)</sup> toman como base lo que se conoce como el modelo de colisión libre, que ha sido aplicado en colisiones que ocurren a energías de MeV. En las siguientes líneas se describe la idea desarrollada por estos autores.

Se sabe que hasta la fecha no hay una teoría capaz de predecir las secciones de pérdida electrónica de  $H^0$  ó  $H^-$  interactuando con un gas noble en un intervalo de energías grande. Cuando las velocidades de colisión son grandes, tales que  $v_p \gg v_e$ , donde  $v_p$  es la velocidad del proyectil y  $v_e$  es la velocidad del electrón ligado correspondiente a la energía de ionización, se usa la primera aproximación de Born, ya que como se sabe, las hipótesis básicas en esta aproximación son colisiones entre partículas energéticas, ó bien potencial de interacción débil. En el caso contrario, cuando  $v_p \ll v_e$  la colisión se describe mejor en términos de formación y disociación de estados moleculares, y se necesita un tratamiento especial para cada combinación proyectil-blanco. Entre estos dos extremos, se encuentra un régimen de velocidades conocido como "velocidades intermedias", donde  $v_p \approx v_e$  en el cual ninguna de las dos aproximaciones mencionadas anteriormente es aplicable. Ciertamente, lo ideal sería crear una teoría válida en un intervalo de energías grande, y capaz de considerar distintos sistemas atómicos, pero indudablemente la complejidad de los cálculos ocasionaría un uso muy limitado del modelo. En contraste con esto, un modelo semiempírico capaz de proporcionar secciones de pérdida electrónica por ejemplo de  $H^-$  y  $H^0$  en diversos blancos atómicos,

podría ser de mayor utilidad en algunas áreas de la física.

El modelo de colisión libre, se ha usado anteriormente para calcular secciones transversales de ionización y está basado en que la ionización del proyectil puede ser considerada como la dispersión de un electrón del proyectil por un potencial de Coulomb con apantallamiento originado por el blanco. En otras palabras, el electrón que viaja con el núcleo del proyectil se puede considerar esencialmente libre en tanto la energía proporcionada por el proceso de dispersión exceda la energía de ligadura.

Cuando se usan unidades atómicas, la sección transversal diferencial de dispersión se escribe en términos del momento transferido como

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{8\pi}{v^2} \frac{[Z - F(q)]^2}{q^3} \quad (1.25)$$

donde  $Z$  es el número atómico del blanco,  $v$  es la velocidad de colisión y  $F(q)$  es el factor de forma atómico correspondiente al blanco. El momento transferido,  $q$ , está dado por:

$$q = 2v \text{Sen}(\theta/2) \quad (1.26)$$

donde  $\theta$  es el ángulo de dispersión. Para obtener la sección transversal de ionización se integra la ecuación (1.25) sobre el intervalo de momento transferido  $q_{\min}=v_i$ , que corresponde a la energía de ionización, hasta  $q_{\max}=2v$  que, se obtiene a partir de consideraciones cinemáticas, y corresponde a un ángulo de dispersión  $\theta=\pi$ .

Como puede verse de la ecuación (1.25), es necesario conocer

el factor de forma  $F(q)$  del blanco. Esta función puede ser calculada numéricamente para muchos átomos, pero lleva como consecuencia a un cálculo numérico de las secciones transversales; es decir, este método no sería fácil de aplicar en situaciones prácticas. La razón para introducir algunas correcciones semiempíricas en este modelo es precisamente obtener expresiones analíticas para las secciones de pérdida electrónica de  $H^+$  y  $H^0$  en varios gases. De acuerdo con los datos reportados por distintos laboratorios, estas secciones presentan una dependencia funcional de la energía que varía de manera suave, y el comportamiento cualitativo es a groso modo similar cuando se han usado blancos como He, Ne, Ar y Xe.

La sección transversal de la ecuación (1.25) se puede escribir en la forma:

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{8\pi Z^2}{v^2} \frac{[1-f(q)]^2}{q^3} \quad (1.27)$$

donde  $f(q)$  es el factor de forma normalizado, expresado en términos de la densidad radial del electrón  $\rho(r)$  como:

$$f(q) = \int_0^\infty r \rho(r) \frac{\text{Sen}(qr)}{q} dr \quad (1.28)$$

donde  $\rho(r)$  satisface

$$\int_0^\infty r^2 \rho(r) dr = 1 \quad (1.29)$$

En las ecuaciones (1.27) y (1.28) se ha hecho la suposición de tener densidades electrónicas de simetría esférica. Aunque esta suposición es válida únicamente para átomos de capa cerrada, se puede justificar por el hecho de que en el proceso de colisión el blanco está orientado al azar. Entonces, a menos que se polarize el blanco, las secciones transversales se miden promediando sobre todas las orientaciones posibles del blanco.

La sección transversal es entonces

$$\sigma = \frac{8\pi Z^2}{v^2} \int_{v_1}^{2v} \frac{[1-f(q)]^2}{q^3} dq \quad (1.30)$$

Esta expresión implica una variación súbita justo en  $v_1$ , contraria a lo que se observa en los resultados experimentales. La propuesta semiempírica de Meron-Johnson, en la cual la ecuación (1.30) es sólo un caso particular y que puede ser más razonable considerar, ya que no se tiene esta variación abrupta en la sección transversal, es la siguiente:

$$\sigma = \frac{8\pi Z^2}{v^2} \int_0^{2v} \frac{[1-f(q)]^2 P(q, v_1)}{q^3} dq \quad (1.31)$$

donde  $P(q, v_1)$  es la probabilidad de ionización, aún por determinar.

Mediante un cambio de variable, ó un cambio de escala en la variable  $r$ , se puede simplificar la expresión de  $f(q)$  de la siguiente manera:

$$\rho(r) = \frac{1}{R^3} \tilde{\rho}(r/R) \quad (1.32)$$

donde  $\tilde{\rho}$  es una función universal y  $R$  un radio que depende de  $Z$

Un ejemplo de este tipo de densidad electrónica se conoce como la distribución de Thomas-Fermi. Sustituyendo (1.32)' en (1.28) se obtiene

$$f(q) = \int_0^{\infty} t \tilde{\rho}(t) \frac{\text{Sen}(st)}{s} dt = \tilde{f}(s) \quad (1.33)$$

donde  $s = qR$ , y  $\tilde{f}(s)$  también es una función universal

Usando estas nuevas variables, se puede reescribir la ecuación (1.31) de la siguiente manera:

$$\sigma = \frac{8\pi Z^2 R^2}{v^2} \int_0^{2vR} \frac{[1 - \tilde{f}(s)]^2 \tilde{P}(s, v_1 R)}{s^3} ds \quad (1.34)$$

Para encontrar una expresión para  $\sigma$ , se tiene que determinar la función  $\tilde{f}(s)$  y  $\tilde{P}(s, v_1 R)$ . En primer lugar se muestra la manera de obtener  $\tilde{f}(s)$ . Para esto se parte de la ecuación (1.33) en la que se cumple la condición:

$$\int_0^{\infty} t^2 \tilde{\rho}(t) dt = 1 \quad (1.35)$$

Como puede verse de la ecuación (1.33),  $\tilde{f}(s)$  es función par de  $s$  y no diverge para valores reales de  $s$ . Más aún, se pueden determinar las propiedades asintóticas de esta función para valores grandes y pequeños de  $s$ .

Para  $s \ll 1$ , se desarrolla el integrando en serie de Taylor, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\tilde{f}(s) &\approx \int_0^{\infty} t\tilde{\rho}(t) \left[ t - \frac{t^3 s^2}{6} \right] dt \\
&= 1 - \frac{s^2}{6} \langle t^2 \rangle \\
&= 1 - O(s^2)
\end{aligned}
\tag{1.36}$$

Para  $s \gg 1$ , se puede obtener la representación asintótica de  $f(s)$  integrando por partes la ecuación (1.33)

$$\tilde{f}(s) \approx \frac{1}{s^2} t\tilde{\rho}(t) \Big|_{t=0} - \frac{1}{s^4} (t\tilde{\rho}(t))' \Big|_{t=0} + \dots
\tag{1.37}$$

Así, si  $\rho$  es regular en el origen, entonces  $f(s)$  se comporta asintóticamente como  $1/s^4$ . Por otro lado, si  $\rho$  tiene una singularidad en el origen, entonces  $f(s)$  es de orden  $1/s^2$  para valores grandes de  $s$ . La función más simple cuyo comportamiento para valores pequeños de  $s$  sea el de la ecuación (1.36), y el comportamiento asintótico para  $s$  grande corresponda a un caso de  $\rho$  singular es:

$$\tilde{f}(s) = \frac{a^2}{s^2 + a^2}
\tag{1.38}$$

donde  $a$  es un parámetro arbitrario.

Si  $\rho$  no es aceptable, entonces la función más simple será.

$$\tilde{f}(s) = \frac{a^2 b^2}{(s^2 + a^2)(s^2 + b^2)}
\tag{1.39}$$

donde ahora la función contiene dos parámetros  $(a, b)$ . En la ecuación (1.38) se elige el parámetro  $a$  de tal manera que para la formulación singular se tiene

$$\tilde{f}(s) = \frac{1}{s^2+1} \quad (1.40)$$

y el resultado para la formulación regular de la ecuación (1.39) es

$$\tilde{f}(s) = \frac{1}{(s^2+\gamma)(s^2+\gamma^{-1})} \quad (1.41)$$

donde  $\gamma$  es una constante aún por determinar.

Es importante mencionar que los factores de forma se obtienen comunmente a partir de la manera funcional específica de la densidad electrónica aplicando a ésta la transformada de Fourier. En el presente caso se puede hacer el proceso contrario, esto significa que por medio de la transformada inversa de Fourier del factor de forma se pueden obtener las densidades electrónicas ó equivalentemente, los potenciales dispersores. En el caso del factor de forma de la ecuación (1.40), Meron y Johnson muestran que éste proviene de un potencial de Coulomb con apantallamiento exponencial, en tanto que el factor de forma de la ecuación (1.41) corresponde a un potencial que varía como  $1/r$  a distancias  $r$  pequeñas y decrece de manera exponencial a grandes distancias del origen.

Ahora se necesita una expresión para la probabilidad de ionización  $P(s, v; R)$ . En general  $P(s, v; R) \longrightarrow 0$  cuando  $s \longrightarrow 0$  y se espera que  $P(s, v; R)$  se aproxime a la unidad o al menos a alguna constante cuando  $s \longrightarrow \infty$ . Como ya se hizo la suposición que  $\rho$  es esféricamente simétrica, entonces la probabilidad de ionización tampoco puede depender de la dirección del momento transferido. Se proponen dos casos simples para  $P(s, v; R)$ : uno de variación súbita

con  $s$ .

$$\begin{aligned} \tilde{P}_1(s, v_1 R) &= 0 && \text{para } s < v_1 R \\ &= 1 && \text{para } s \geq v_1 R \end{aligned} \quad (1.42)$$

y otro en el que  $P(s, v_1 R)$  varía de manera gradual, como.

$$\tilde{P}_2(s, v_1 R) = \frac{s^2}{s^2 + (v_1 R)^2} \quad (1.43)$$

Con las suposiciones anteriores es posible calcular una expresión para  $\sigma$  considerando cada uno de los siguientes casos:

**FORMULACION S<sub>1</sub>:** Se emplea el factor de forma de la ecuación (1.40) que corresponde a una  $\rho$  singular y una probabilidad de ionización que varía de acuerdo a la ecuación (1.42).

**FORMULACION S<sub>2</sub>:** Se realizan los cálculos suponiendo el mismo factor de forma de la ecuación (1.40), pero en este caso la probabilidad de ionización varía ,gradualmente, de acuerdo a la ecuación (1.43).

**FORMULACION R<sub>1</sub>:** En este caso se considera el factor de forma que corresponde a una  $\rho$  con un comportamiento regular en el origen, correspondiente a la ecuación (1.41), y una probabilidad de ionización con variación súbita como en la ecuación (1.42).

**FORMULACION R<sub>2</sub>:** En esta formulación se supone un factor de forma que corresponde a una  $\rho$  regular y la probabilidad de ionización con variación gradual, mencionadas en las formulaciones anteriores.

Las expresiones analíticas que se obtienen en cada uno de estos casos para la sección transversal de despojo electrónico son las siguientes:

FORMULACION S<sub>1</sub>:

$$\sigma = \kappa \frac{(\beta - \alpha)}{(\alpha + 1)(\beta + 1)} \quad (1.44)$$

FORMULACION S<sub>2</sub>:

$$\sigma = \kappa \frac{\beta}{(\beta - 1)^2} \left[ \frac{(\beta - 1)}{(\alpha + 1)} - \ln \frac{(\alpha + \beta)}{(\alpha + 1)} \right] \quad (1.45)$$

FORMULACION R<sub>1</sub>:

$$\sigma = \kappa \frac{1}{(\gamma - \gamma^{-1})^2} \left[ (\beta - \alpha) \left( \frac{\gamma^4}{(\alpha + \gamma)(\beta + \gamma)} + \frac{\gamma^{-4}}{(\alpha + \gamma^{-1})(\beta + \gamma^{-1})} \right) - \frac{2}{\gamma - \gamma^{-1}} \ln \frac{(\alpha + \gamma)(\beta + \gamma^{-1})}{(\beta + \gamma)(\alpha + \gamma^{-1})} \right] \quad (1.46)$$

FORMULACION R<sub>2</sub>:

$$\sigma = \kappa \frac{\beta}{(\gamma - \gamma^{-1})^2 (\beta - \gamma)^2 (\beta - \gamma^{-1})^2} \times \left[ \frac{\gamma^4 (\beta - \gamma) (\beta - \gamma^{-1})^2}{\alpha + \gamma} + \frac{\gamma^{-4} (\beta - \gamma^{-1}) (\beta - \gamma)^2}{\alpha + \gamma^{-1}} - (\gamma^4 - 2 \frac{\beta - \gamma}{\gamma - \gamma^{-1}}) (\beta - \gamma^{-1})^2 \ln \frac{\alpha + \beta}{\alpha + \gamma} - (\gamma^{-4} + 2 \frac{\beta - \gamma^{-1}}{\gamma - \gamma^{-1}}) (\beta - \gamma)^2 \ln \frac{\alpha + \beta}{\alpha + \gamma^{-1}} \right] \quad (1.47)$$

donde

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{1}{(2vR)^2} \\ \beta &= \frac{1}{(v_i R)^2} \\ \kappa &= \frac{4\pi Z^2 R^2}{v^2}\end{aligned}\tag{1.48}$$

Hasta aquí, el factor de forma  $f(q)$  únicamente incluye la parte elástica del factor de forma atómico. Con el fin de conservar la simplicidad de los resultados anteriores, se incluye la parte inelástica como una cantidad  $Q$  dependiente de  $Z$  que multiplica a los resultados (1.44) a (1.47). Estas cuatro ecuaciones contienen las cantidades desconocidas  $v_i$ ,  $R$  y  $\gamma$ . Como se apuntó arriba, la corrección inelástica agrega una incógnita más. La incógnita  $v_i$  es una propiedad del proyectil, en tanto, las otras tres se supone que dependen del blanco y que la dependencia es del tipo:

$$R=R_0 Z^{C_R}, \quad \gamma=\gamma_0 Z^{C_\gamma} \quad \text{y} \quad Q=Q_0 Z^{C_Q}\tag{1.49}$$

donde las constantes se determinaron ajustando las expresiones (1.44) a (1.47), a resultados experimentales para el despojo de  $H^-$  y  $H^0$  en He, Ne, Ar y Xe (figuras I.2 y I.3) para un intervalo de energías de 2 a 14000 keV.

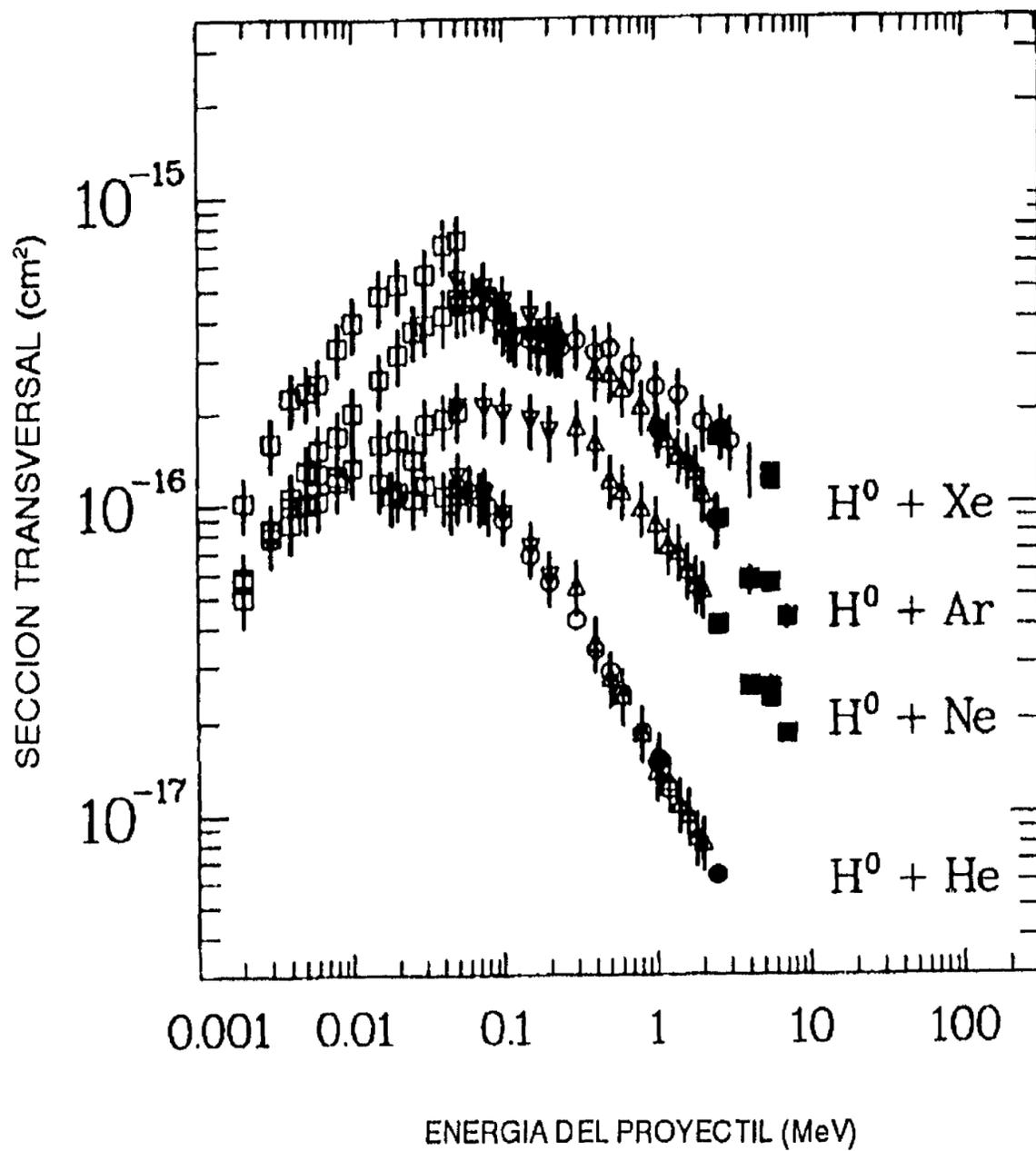


Fig. I.2

En esta gráfica se presentan los datos experimentales del despojo electrónico de  $H^0$  en He, Ne, Ar, y Xe, a los que Meron y Johnson ajustaron su modelo, las referencias de las que se tomaron estos datos se encuentran en el trabajo de Meron-Johnson. Estos mismos datos se encuentran graficados en las figuras I.4 (a-d), empleando un mismo símbolo para cada blanco..

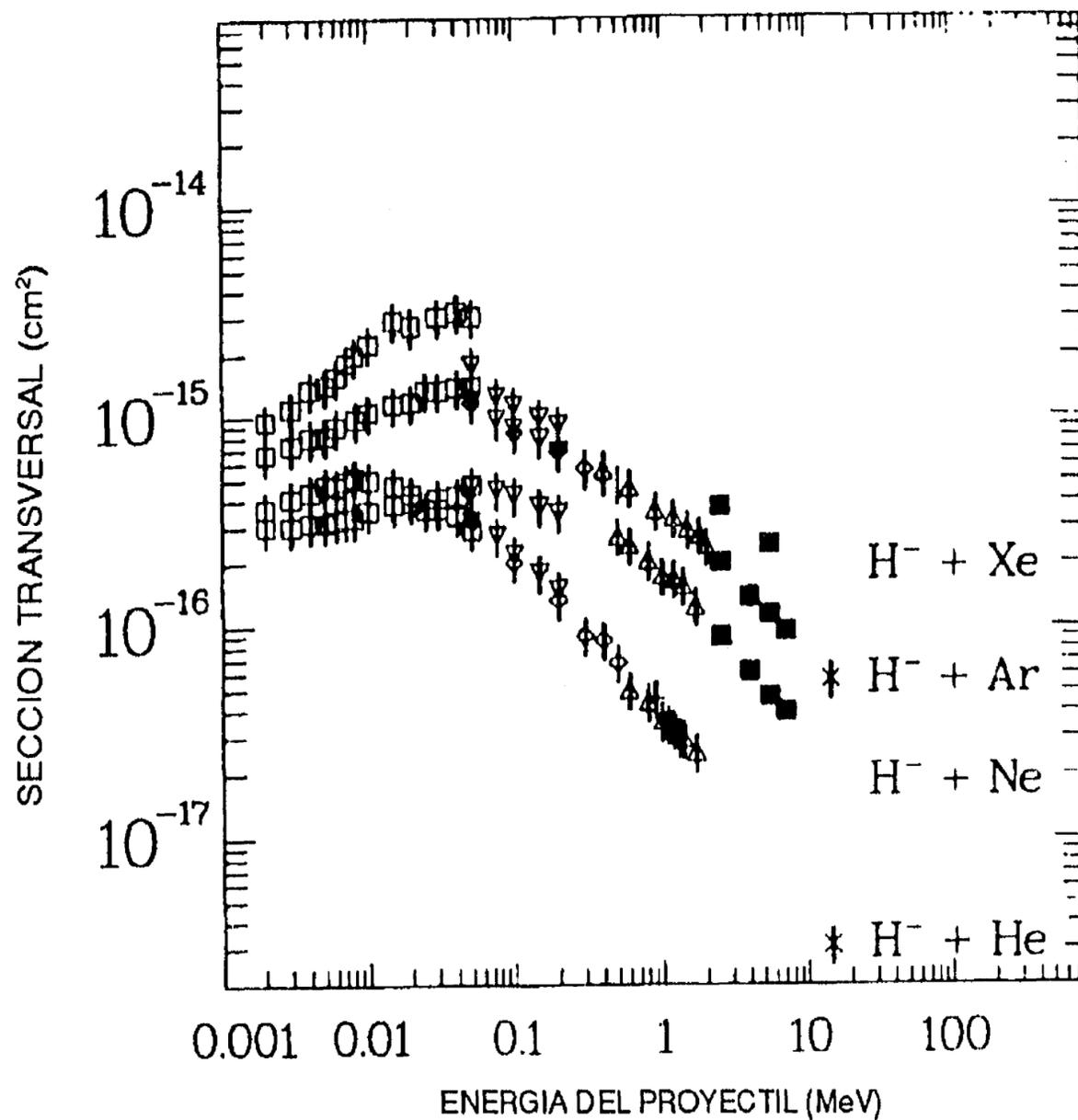


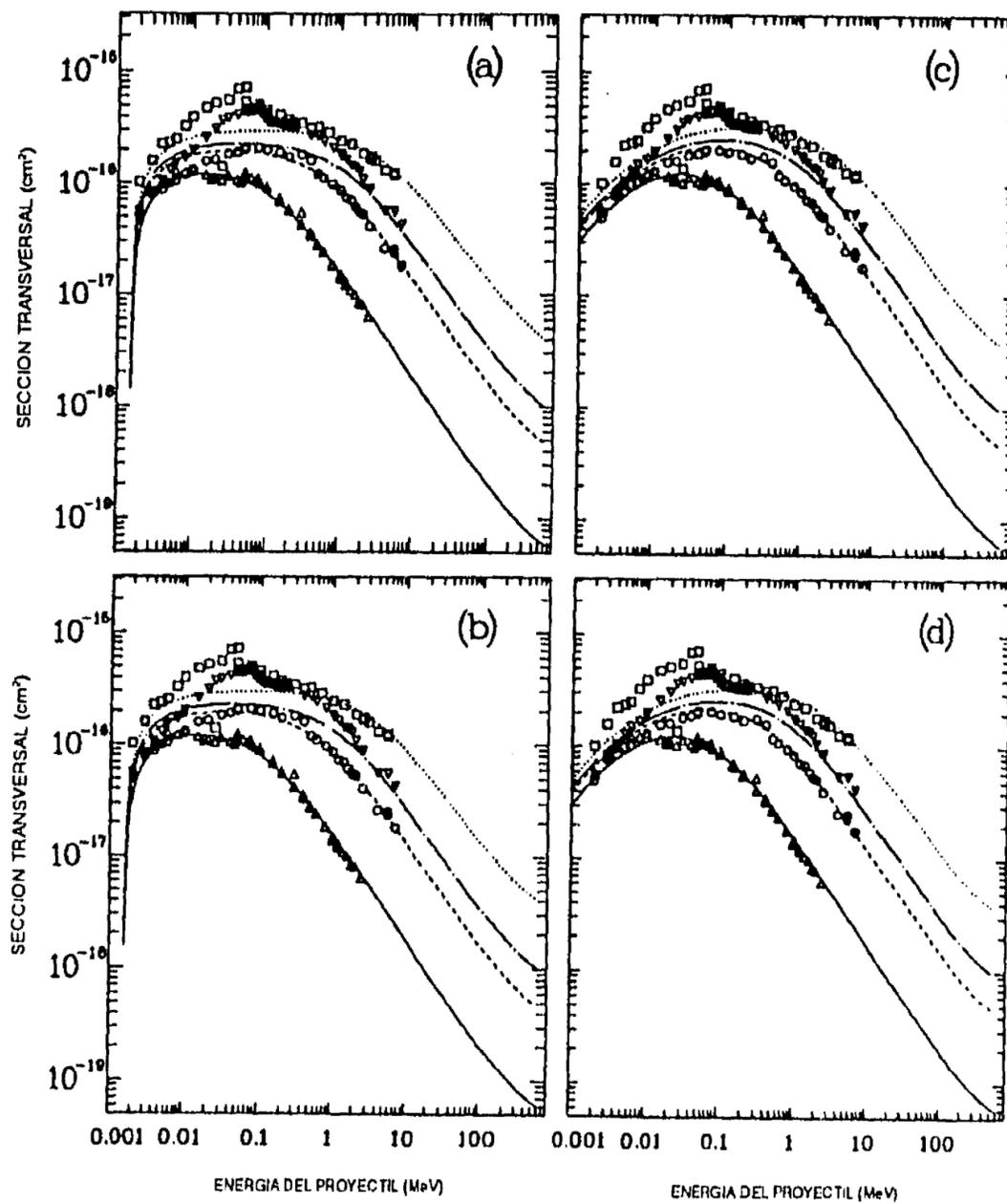
Fig. I.3

En esta gráfica se presentan los datos experimentales del despojo electrónico de H<sup>-</sup> en He, Ne, Ar, y Xe, a los que Meron y Johnson ajustaron su modelo, las referencias de las que se tomaron estos datos se encuentran en el trabajo de Meron-Johnson. Estos mismos datos se encuentran graficados en las figuras I.5 (a-d), empleando un mismo símbolo para cada blanco..

En las figuras I.4 (a-d) se muestran los resultados de las cuatro formulaciones para  $\sigma_{01}$ , como puede verse en el caso de las formulaciones  $S_1$  y  $R_1$ , las secciones aumentan rápidamente con la energía cuando ésta es de unos cuantos keV, después mantienen un valor casi constante y finalmente decrecen a energías de MeV.

Las formulaciones  $S_2$  y  $R_2$  tienen un comportamiento muy semejante entre sí, y diferente al de  $S_1$  y  $R_1$  a bajas energías, mientras que a altas energías las cuatro formulaciones tienen prácticamente el mismo comportamiento. Se puede ver que existe un buen acuerdo, especialmente con las formulaciones  $S_2$  y  $R_2$  y en particular, el acuerdo es mejor cuando se tiene He y Ne como blancos.

En las figuras I.5 (a-d), se muestran los resultados obtenidos al aplicar las cuatro formulaciones a la pérdida electrónica de  $H^+$  y se compara con los resultados experimentales disponibles. Se puede ver que las secciones transversales de despojo electrónico de  $H^+$ ,  $\sigma_{.10}$ , son en general mayores que las secciones de despojo electrónico de  $H^0$ ,  $\sigma_{01}$ , y que la comparación cualitativa del ajuste es similar al caso de  $\sigma_{01}$ . Se puede argumentar que el modelo de colisión libre es un formalismo aplicable a un sólo electrón y que no se justifica aplicarlo a un ion como  $H^+$  con dos electrones; sin embargo, la evidencia muestra que  $\sigma_{.10}$  escala con la energía y la  $Z$  del blanco de la misma manera que  $\sigma_{01}$ , por lo que es razonable esperar que el mismo formalismo se ajuste a ambos procesos.



**Fig. I.4 (a-d)**

Resultados obtenidos del ajuste de las cuatro formulaciones (a)  $S_1$ , (b)  $R_1$ , (c)  $S_2$  y (d)  $R_2$  a los datos experimentales del despojo electrónico de  $H^0$  en He (triángulos y línea continua), Ne (círculos y línea a trazos), Ar (triángulos invertidos y línea-puntos) y Xe (cuadros y línea punteada).

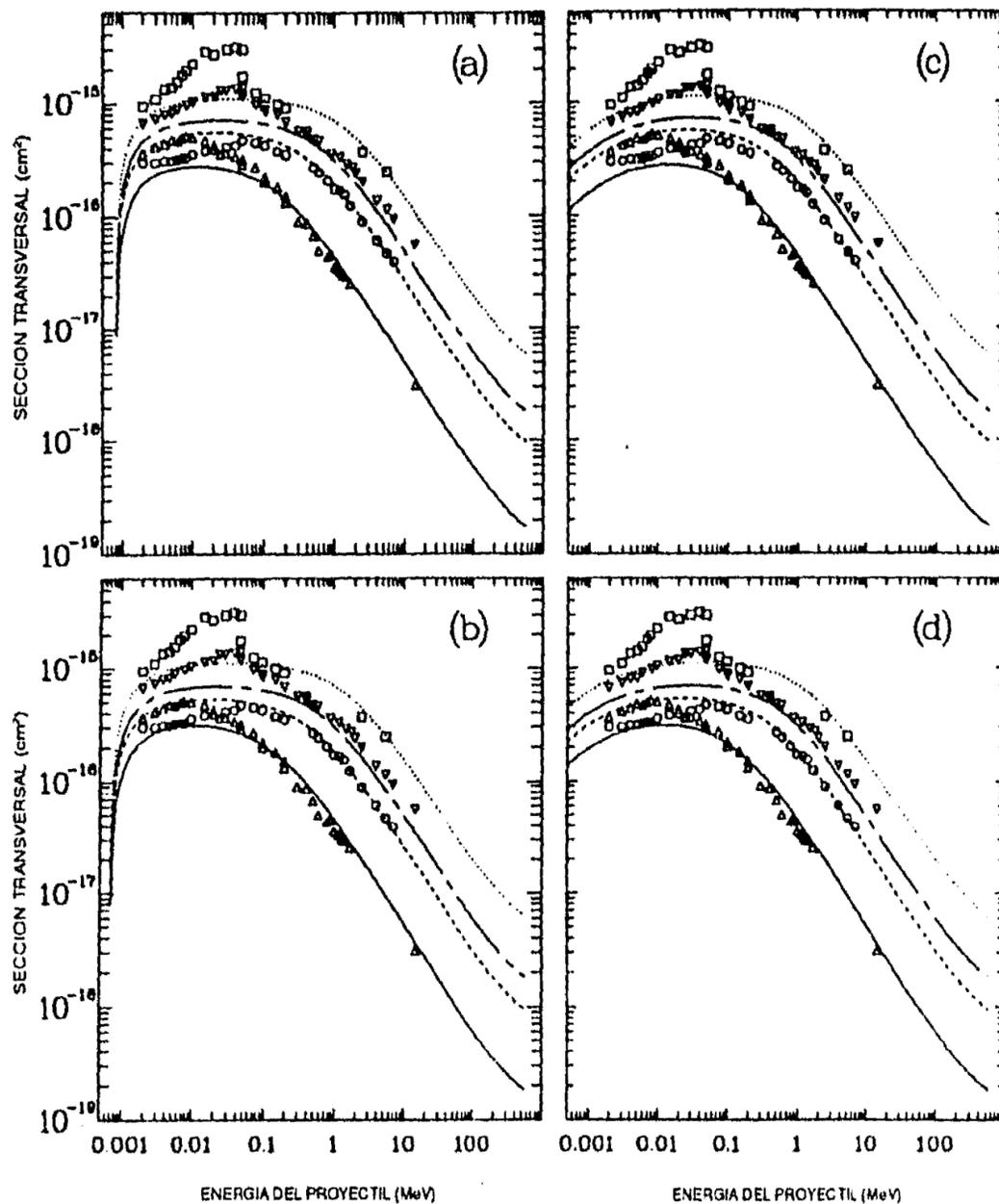


Fig. I.5 (a-d)

Resultados obtenidos del ajuste de las cuatro formulaciones (a)  $S_1$ , (b)  $R_1$ , (c)  $S_2$  y (d)  $R_2$  a los datos experimentales del despojo electrónico de H en He (triángulos y línea continua), Ne (círculos y línea a trazos), Ar (triángulos invertidos y línea-puntos) y Xe (cuadros y línea punteada).

Finalmente, las tablas TI.1 y TI.2 resumen los parámetros necesarios para calcular  $\sigma_{01}$  y  $\sigma_{10}$  para colisiones de  $H^0$  y H con un blanco de número atómico Z.

TABLA TI.1

PARAMETRO	S <sub>1</sub>	S <sub>2</sub>	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>
v <sub>i</sub>	0.50	0.70	0.50	0.70
R <sub>0</sub>	0.34	0.40	0.11	0.11
C <sub>R</sub>	-0.53	-0.54	-0.73	-0.73
Q <sub>0</sub>	7.39	5.85	7.30	5.81
C <sub>Q</sub>	0.35	0.29	0.35	0.29
γ <sub>0</sub>	----	----	10.1	14.0
C <sub>γ</sub>	----	----	0.39	0.38

Parámetros usados para calcular  $\sigma_{01}$ .

TABLA TI.2

PARAMETRO	S <sub>1</sub>	S <sub>2</sub>	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>
v <sub>i</sub>	0.35	0.28	0.33	0.25
R <sub>0</sub>	0.26	0.26	0.24	0.23
C <sub>R</sub>	-0.34	-0.34	-1.03	-0.95
Q <sub>0</sub>	41.6	39.2	34.8	32.4
C <sub>Q</sub>	-0.25	-0.26	-0.18	-0.18
γ <sub>0</sub>	----	----	1.22	1.43
C <sub>γ</sub>	----	----	1.37	1.20

Parámetros usados para calcular  $\sigma_{10}$ .

7

A partir de lo expuesto en este capítulo, se puede concluir que hasta la fecha no se han medido las secciones de despojo electrónico simple y doble de  $H^-$  en  $SF_6$  a energías de keV.

Las mediciones que se han hecho con respecto al despojo electrónico simple de  $H^-$  en CO a bajas energías<sup>(39)</sup>, aparentemente no tienden a formar una curva suave con los resultados obtenidos en el intervalo de 3 a 30 keV<sup>(27)</sup>. Es necesario realizar mediciones de  $\sigma_{.10}$  en el intervalo de energías de 300 eV a 3000 eV ya que no existen datos de este proceso en este intervalo de energías. Por otro lado, tampoco existen datos de las secciones  $\sigma_{.11}$  para esta reacción.

El estudio experimental de las secciones de despojo electrónico simple de  $H^-$  en  $CH_4$  se ha restringido a bajas energías<sup>(39)</sup>, por lo que también es necesario extender este estudio a energías del orden de keV. En este caso tampoco se ha estudiado el proceso de doble despojo electrónico.

Las observaciones anteriores han motivado a la realización del presente trabajo en el que se determinarán las secciones transversales totales de despojo electrónico simple y doble de  $H^-$  al incidir en blancos de  $SF_6$ , CO y  $CH_4$  en el intervalo de energías de 1 a 5 keV.

## BIBLIOGRAFIA

- 1.- Hylleras E. A., Z. Phys. **60**, 624 (1930)
- 2.- Pequeris C. L., Phys. Rev. **112**, 1649 (1958)
- 3.- Pequeris C. L., Phys. Rev. **126**, 1470 (1962)
- 4.- Khovstenco, V. I. y Dukelskii, V. M., Sov. Phys. JETP **10**, 465 (1960)
- 5.- H. Cady G., In Advan. Inorg. Chem. Radiochem. **2**, 105 (1960)
- 6.- Sell J. A. y Kuppermann A., Chem. Phys. **33**, 379 (1978)
- 7.- Tang R. y Callaway J., J. Chem. Phys. **84**, 6854 (1986)
- 8.- Streit, G. E., J. Chem. Phys. **77**, 826 (1982)
- 9.- Christophorou, L. G., "Atomic and Molecular Radiation Physics", J. W. & Sons. (1970), p.480
- 10.- Christophorou, L. G., "Electron-Molecule Interactions and Their Applications" Vol. I, Acad. Press Inc. (1984)
- 11.- Rapp, D. y Francis, W. E., J. Chem. Phys. **37**, 11 (1962)
- 12.- Snow, W. R., Rundel, R. D. y Geballe, R., Phys. Rev. **178**, 228 (1969)
- 13.- Meron, M. y Johnson, B. M., Phys. Rev. A **41**, 1365 (1990)
- 14.- Bates, D. R. and Walker, J. C. G., Proc. Phys. Soc. **91**, 300 (1967).
- 15.- McDowell, M. R. C. and Peach, G., Proc. Phys. Soc. **74**, 463 (1959).
- 16.- Bardsley, J. N., Proc. Phys. Soc. **91**, 300 (1967).
- 17.- Hummer, D. G., Stebbings, R. F., Fite, W. L. and Branscomb, L. M., Phys. Rev. **119**, 668 (1960).

- 18.- Dalgarno, A. and McDowell, M. R. C., Proc. Phys. Soc. **A69**, 615 (1956).
- 19.- Keever, W. C., Lockwood, G. J., Helbig, F. H. and Everhart, E., Phys. Rev. **166**, 68 (1968).
- 20.- Bailey, T. L. and Mahadevan, P., J. Chem. Phys. **52**, 179 (1970).
- 21.- Stedeford, J. B. H. and Hasted, J. B., Proc. Roy. Soc. **A227**, 466 (1955).
- 22.- Stier, P. M. and Barnett, C. F., Phys. Rev. **103**, 896 (1956).
- 23.- Bydin, Yu. F., Sov. Phys. JETP **22**, 762 (1966).
- 24.- Sida, D. W., Proc. Phys. Soc. **A68**, 240 (1955).
- 25.- Andreev, E. P., Ankudinov, V. A., Dukel'skii, V. M. and Orbeli, A. L., Proc. 6th Int. Conf. Phys. of Electronic and Atomic Collisions, Cambridge, Mass., Abstracts, p. 800.
- 26.- Whittier, A. C., Can. J. Phys. **32**, 275 (1954).
- 27.- Pilipenko, D. V., Gusev, V. A. and Fogel, Ya. M., Sov. Phys. JETP **22**, 965 (1966).
- 28.- Dewangan, D. P. and Walters, H. R. J., J. Phys. B: At. Mol. Phys. **11**, 3983 (1978).
- 29.- Esaulov, V. A., Grouard, J. P., Hall, R. I., Landau, M., Montmagnon, J. L., Pichou, F. and Schermann, C., J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, 1855 (1984).
- 30.- Tuan, V. N., Esaulov, V. A., Gauyacq, J. P., and Herzenberg, A., J. Phys. B: At. Mol. Phys. **18**, 721 (1985).
- 31.- Gealy, M. W. y Van Zyl, B., Phys. Rev. **36**, 3091 (1987)
- 32.- Dukel'skii, V. M. and Fedorenko, N. V., Sov. Phys. JETP **2**, 307

- (1956).
- 33.- Fogel, A. M., Ankudinov, V. A. and Slabospitskii, R. E., Sov. Phys. JETP 5, 382 (1957).
- 34.- Tisone, G. C. and Branscomb, L. M., J. I. L. A. Rept. Boulder, Colorado, No. 2 (1964).
- 35.- Williams, J. F. Phys. Rev. 154, 9 (1967).
- 36.- Hasted, J. B., Proc. Roy. Soc. A212, 235 (1952).
- 37.- Hasted, J. B. y Smith, R. A., Proc. Roy. Soc. A235, 349 (1956).
- 38.- McDaniel, E. W., "Collision Phenomena in Ionized Gases", John Wiley & Sons, (1964) p. 240-242.
- 39.- Huq, M. S., Doverspike, L. D., and Champion, R. L., Phys. Rev. A 27, 785 (1983).

## CAPITULO II

### DESPOJO ELECTRONICO SIMPLE Y DOBLE DE H<sup>-</sup>

#### II.1 PRINCIPIO DE LA MEDIDA

Cuando se hace pasar un haz de partículas a través de un gas con densidad  $n$ , y recorre dentro del mismo una distancia  $l$ , la composición del haz ó la variación del estado de carga del haz de partículas al pasar por el blanco gaseoso se describe mediante ecuaciones diferenciales del tipo

$$\frac{df_m}{d\Pi} = \sum_j [f_j \sigma_{jm} - f_m \sigma_{mj}] \quad (2.1)$$

donde  $f_m$  es la fracción de haz formado por partículas con estado de carga  $m$ ; por ejemplo, si  $m = -1$ ,  $f_{-1}$  es la fracción de haz formado por partículas con carga neta  $-e$ , donde  $e$  es la carga del electrón.  $\Pi = n l$ , es conocido como "espesor del blanco", en unidades de número de partículas/unidad de área.  $\sigma_{jm}$  = sección transversal total para el proceso en el cual una partícula con estado de carga  $j$  cambia a un estado de carga  $m$ .

La ecuación (2.1) representa la conservación de la carga eléctrica, esto significa que el cambio neto en la fracción de partículas con estado de carga  $m$  que recorrieron un espesor  $d\Pi$  del blanco, se debe a que hubo una fracción del haz que se encontraba en estado de carga  $j$  y después de recorrer el espesor  $d\Pi$  cambió a

un estado de carga  $m$ ; a esta cantidad se debe restar la fracción de haz compuesto por partículas con estado de carga  $m$  que después de recorrer el espesor  $d\Pi$  cambiaron a cualquier estado de carga  $j$ .

El sistema de ecuaciones diferenciales acopladas que se representa en la ecuación (2.1) se encuentra sujeto a la condición:

$$\sum_i f_i = 1 \quad (2.2)$$

Para un sistema con tres componentes, tal como  $H^-$ ,  $H^+$  y  $H^0$ , se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned} \frac{df_1}{d\Pi} &= -f_1(\sigma_{1-1} + \sigma_{10}) + f_0\sigma_{01} + f_{-1}\sigma_{-11} \\ \frac{df_0}{d\Pi} &= f_1\sigma_{10} - f_0(\sigma_{0-1} + \sigma_{01}) + f_{-1}\sigma_{-10} \\ \frac{df_{-1}}{d\Pi} &= f_1\sigma_{1-1} + f_0\sigma_{0-1} + f_{-1}(\sigma_{-10} + \sigma_{-11}) \end{aligned} \quad (2.3)$$

y la condición:

$$f_1 + f_0 + f_{-1} = 1 \quad (2.4)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales acopladas se resuelve de la siguiente manera. Sea

$$D = \frac{d}{d\Pi}, \quad \bar{F} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \\ f_{-1} \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} -(\sigma_{1-1} + \sigma_{10}) & \sigma_{01} & \sigma_{-11} \\ \sigma_{10} & -(\sigma_{0-1} + \sigma_{01}) & \sigma_{-10} \\ \sigma_{1-1} & \sigma_{0-1} & -(\sigma_{-10} + \sigma_{-11}) \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Entonces el sistema de ecuaciones se representa por

$$D \bar{F} = M \bar{F} \quad (2.6)$$

Los valores propios de la matriz  $M$  se encuentran resolviendo la ecuación:

$$\lambda[\lambda^2 + 2p\lambda + p^2 - q^2] = 0 \quad (2.7)$$

encontrándose que las raíces de esta ecuación son:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0 \\ \lambda_2 &= q-p \\ \lambda_3 &= -q-p \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde

$$p = \frac{1}{2}(\sigma_{1-1} + \sigma_{10} + \sigma_{01} + \sigma_{0-1} + \sigma_{-11} + \sigma_{-10}) \quad (2.9)$$

$$q^2 = p^2 - \gamma \quad (2.10)$$

$$\gamma = (\sigma_{1-1} + \sigma_{10})(\sigma_{0-1} + \sigma_{-10}) + \sigma_{01}(\sigma_{1-1} + \sigma_{-10} + \sigma_{-11}) + \sigma_{-11}(\sigma_{10} + \sigma_{0-1}) \quad (2.11)$$

Una vez conocidos los valores propios, se determinan los correspondientes vectores propios de la matriz  $M$ . De este modo se encuentra que las fracciones de corriente son

$$\bar{F}(\Pi) = C_1 \bar{A} + C_2 \bar{B} e^{(q-p)\Pi} + C_3 \bar{C} e^{(-p-q)\Pi} \quad (2.12)$$

donde  $A$ ,  $B$  y  $C$  son los vectores propios de la matriz  $M$  para  $\lambda=0$ ,  $\lambda=q-p$  y  $\lambda=-q-p$  respectivamente.

Por último se determinan las constantes  $C_1$ ,  $C_2$  y  $C_3$  con las

condiciones iniciales

$$\bar{F}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Esto significa que cuando la presión en el blanco es cero, todo el haz está compuesto por H. De esta manera se obtienen las fracciones de corriente del haz de iones.

$$\begin{aligned} f_1 &= a_0 + a_1 e^{-r\Pi} + a_2 e^{-s\Pi} \\ f_0 &= b_0 + b_1 e^{-r\Pi} + b_2 e^{-s\Pi} \\ f_{-1} &= c_0 + c_1 e^{-r\Pi} + c_2 e^{-s\Pi} \end{aligned} \quad (2.14)$$

donde las cantidades  $r$ ,  $s$ ,  $a_0$ ,  $a_1$ , ... etc. dependen de las seis secciones totales que aparecen en la matriz  $M$ .

Cuando un ion pasa a través de un blanco gaseoso el estado de carga cambia continuamente, de tal manera que después de varias colisiones se alcanza una distribución estacionaria de estados de carga; esta distribución es independiente del estado de carga de las partículas incidentes y se determina únicamente por las secciones transversales involucradas para el cambio de un estado de carga  $m$  a uno  $j$ . Experimentalmente, esta condición se satisface cuando la densidad de partículas en el gas blanco se incrementa hasta un valor en el cual la fracción  $f_m$  no cambia aún cuando la densidad en blanco siga aumentando, esto es  $df_m/d\Pi = 0$ , esto se puede ver claramente a partir de las ecuaciones (2.14), donde las

fracciones  $f_1$ ,  $f_0$  y  $f_1$  son prácticamente constantes cuando el espesor  $\Pi$  es grande.

En el caso particular de "blanco delgado", ( $\Pi$  pequeño), es posible desarrollar las exponenciales de la ecuación (2.14) en serie de potencias de  $\Pi$ , de esta manera las fracciones  $f_0$  y  $f_1$  se expresan como sigue

$$f_0(\Pi) = \sigma_{.10} \Pi + d_1 \Pi^2 + \dots \quad (2.15)$$

$$f_1(\Pi) = \sigma_{.11} \Pi + d_2 \Pi^2 + \dots \quad (2.16)$$

Como se puede ver de la ecuación (2.15), si se desea determinar experimentalmente la sección transversal total para el despojo electrónico simple de  $H^+$  al pasar éste por un blanco gaseoso, se puede considerar el caso en que la presión es lo suficientemente pequeña, para que se pueda desprestigiar el término  $\Pi^2$  (régimen de colisión simple), y entonces la sección deseada se puede determinar midiendo el haz total inicial de  $H^+$  y después ir incrementando el valor de  $\Pi$  en el blanco. Para cada valor de  $\Pi$  se determina la fracción de corriente formada por iones que perdieron un electrón, es decir, la corriente de átomos  $H^0$ . Manteniendo siempre válida la condición de  $\Pi$  pequeño, el intervalo de presiones en el cual esta condición es válida se puede determinar experimentalmente a partir de la gráfica de la fracción de corriente de  $H^0$  contra el espesor  $\Pi$ . La región en la que la dependencia de  $f_0$  vs.  $\Pi$  es aproximadamente lineal, garantiza la condición anterior. La pendiente de la recta en esta gráfica proporciona la sección transversal de despojo electrónico simple de  $H^+$  al colisionar con el blanco gaseoso.

7

A partir de la ecuación (2.16) se pueden determinar las secciones de doble despojo electrónico. Siguiendo un razonamiento análogo al descrito en las líneas anteriores, sólo que en este caso lo que se tiene que medir, además de la corriente inicial de  $H^-$ , es la fracción de partículas que después de cruzar la región donde se encuentra el blanco pierden dos electrones, es decir,  $H^-$  se transforma en  $H^+$ . Nuevamente, si se trabaja en la región en la que la dependencia de la fracción de corriente de  $H^+$  con respecto a  $\Pi$  es lineal, se desprecia el término cuadrático en el desarrollo de la exponencial, y la pendiente de la recta en la gráfica  $f_1$  con  $\Pi$  proporciona la sección transversal de doble despojo electrónico.

## II. 2 DESCRIPCION DEL APARATO EXPERIMENTAL

Para llevar a cabo las mediciones de despojo electrónico simple y doble del ion  $H^-$  en  $SF_6$ ,  $CO$  y  $CH_4$  fué necesario hacer algunas modificaciones (mejoras y adiciones) a un acelerador de iones del Laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares del IFUNAM-Cuernavaca. Este aparato se usó anteriormente con el fin de estudiar las características y producción del ion  $H^-$  [Ref. 1], en el intervalo de energías de 1 a 5 keV. Antes de realizar los presentes experimentos, no se contaba con la región de interacción del proyectil con el blanco, así como la región de detección de

productos y la electrónica asociada a la detección, por lo cual estas partes tuvieron que ser acopladas.

En la figura II.1 se presenta un esquema del aparato experimental donde se señalan las partes principales del mismo. A continuación se describe cada una de estas partes.

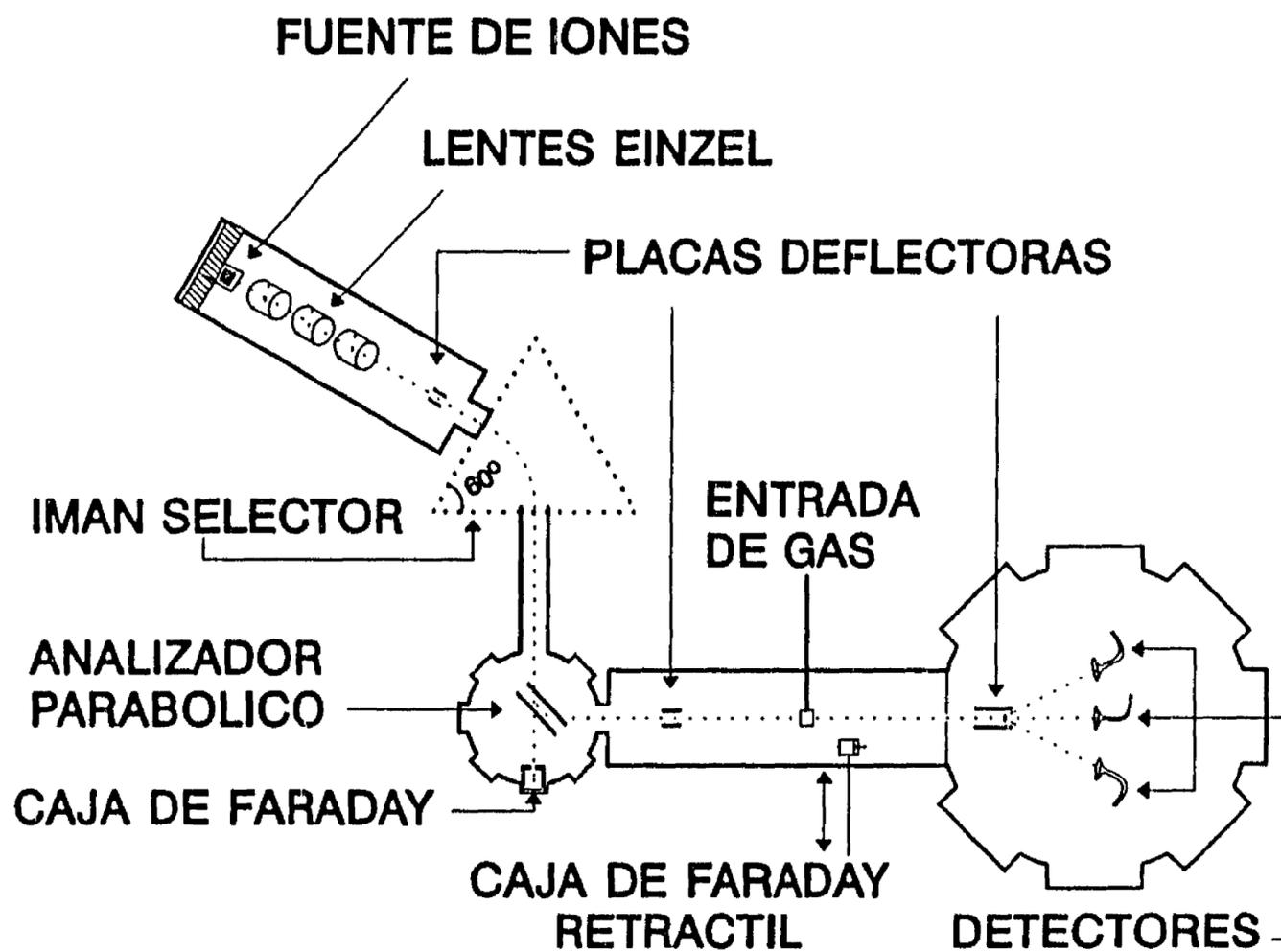


Fig. II.1

En esta figura se muestra un esquema del aparato empleado para el estudio experimental del despojo electrónico simple y doble de  $H^+$  en  $SF_6$ ,  $CO$  y  $CH_4$ .

## FUENTE DE IONES

El lugar en que se producen, entre otros, los iones H<sup>+</sup>, se muestra esquemáticamente en la siguiente figura

### FUENTE DE IONES

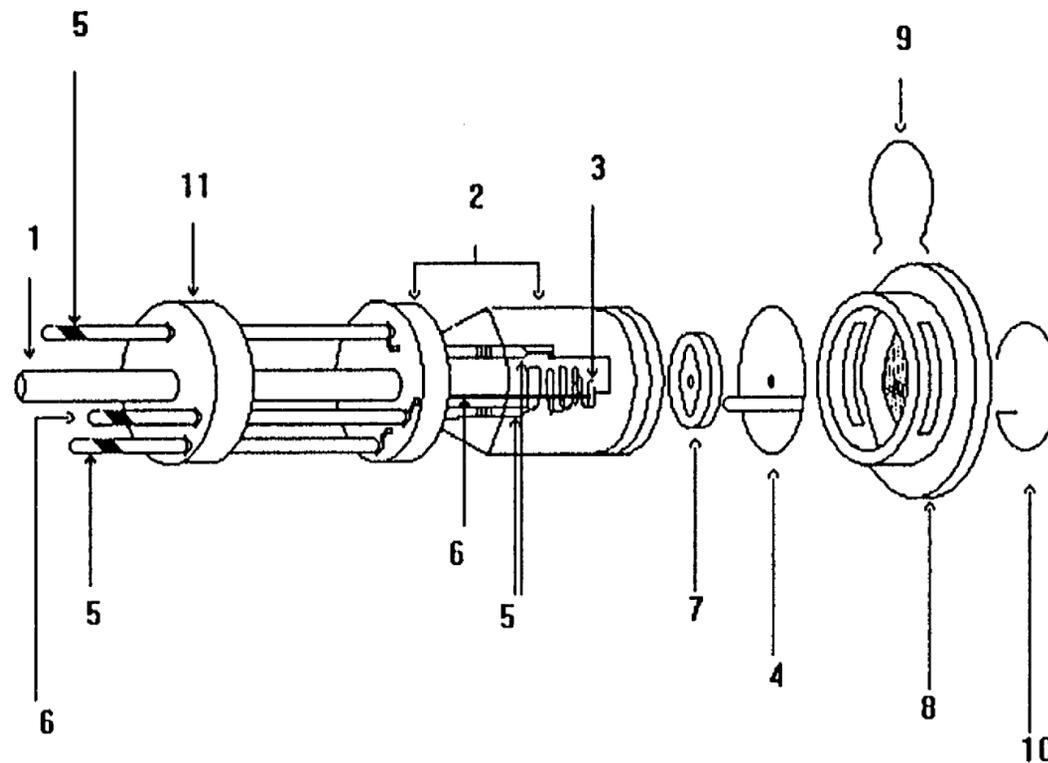


Fig. II.2

En esta figura se presenta un esquema de la fuente de iones. Las partes principales se encuentran numeradas de acuerdo a la descripción que se da en el texto.

Este dispositivo se conoce como fuente de iones y es del tipo que los genera por medio de una descarga de arco. El cuerpo de la fuente (2), está hecho de un material higroscópico, de poca resistencia a esfuerzos mecánicos, pero con la característica de resistir altas temperaturas, lo que le permite funcionar como horno para la producción de iones de vapores metálicos, además de

7

aquellos producidos a partir de elementos gaseosos. En este caso, el gas a ionizar es hidrógeno, el cual entra en el recinto de la fuente a través del tubo (1). La manera como funciona esta fuente es la siguiente: El gas admitido dentro de la misma se ioniza cuando al filamento de Tungsteno (3) se le hace pasar una corriente de aproximadamente 15-16 A., esto hace que el filamento se ponga incandescente y emita una gran cantidad de electrones (emisión termoiónica). Cuando se aplica una diferencia de potencial entre ánodo (4) y filamento (cátodo), los electrones adquieren la energía necesaria para ionizar y romper las moléculas del hidrógeno ( $H_2$ ), resultando ionizados también los fragmentos del  $H_2$ . Cuando esto ocurre, se forma un plasma de descarga, es en estas condiciones en las que se produce el ion  $H^+$ . Las partes que se señalan en la figura con el número (5), son los conectores mediante los cuales se suministra la corriente al filamento; el conector (6) se usa para aplicar voltaje al ánodo (voltaje de extracción), el cual tiene un orificio de 0.5 mm de diámetro por el que salen los iones producidos aquí; con el número (11) se identifica a la placa metálica con atravesadores cerámicos donde se aplica el voltaje al ánodo y la corriente al filamento; en este lugar se aplica el voltaje de aceleración  $V_a$ , que, como puede verse en la figura II.1, se encuentra eléctricamente aislada del resto del acelerador. Los elementos (7) y (8) son tapas de nitruro de boro que fijan la posición del ánodo, estos elementos quedan sujetos al resto de la fuente de iones por medio de los seguros metálicos (9) y (10). En la figura II.3 se muestra la conexión de las fuentes de corriente

del filamento y voltaje del ánodo, estas se encuentran "flotadas" al potencial de aceleración  $V_a$ .

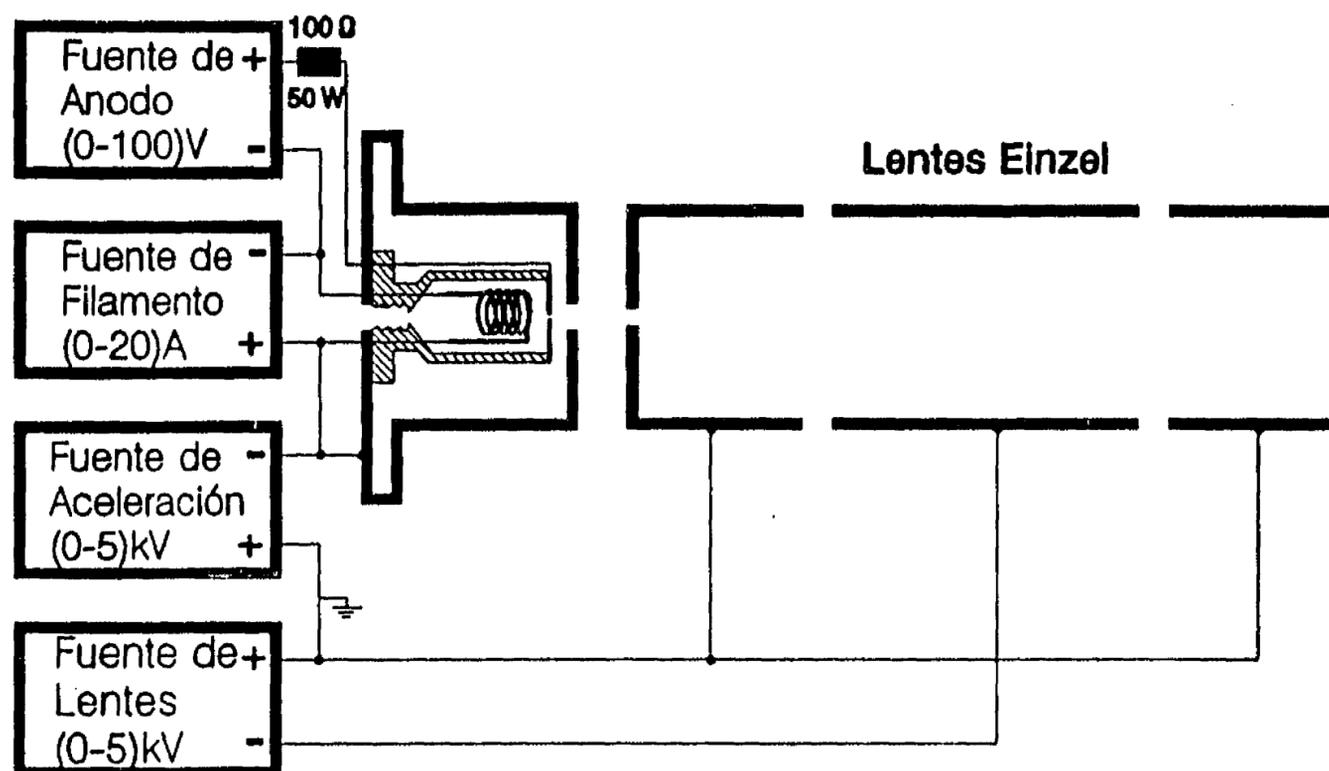


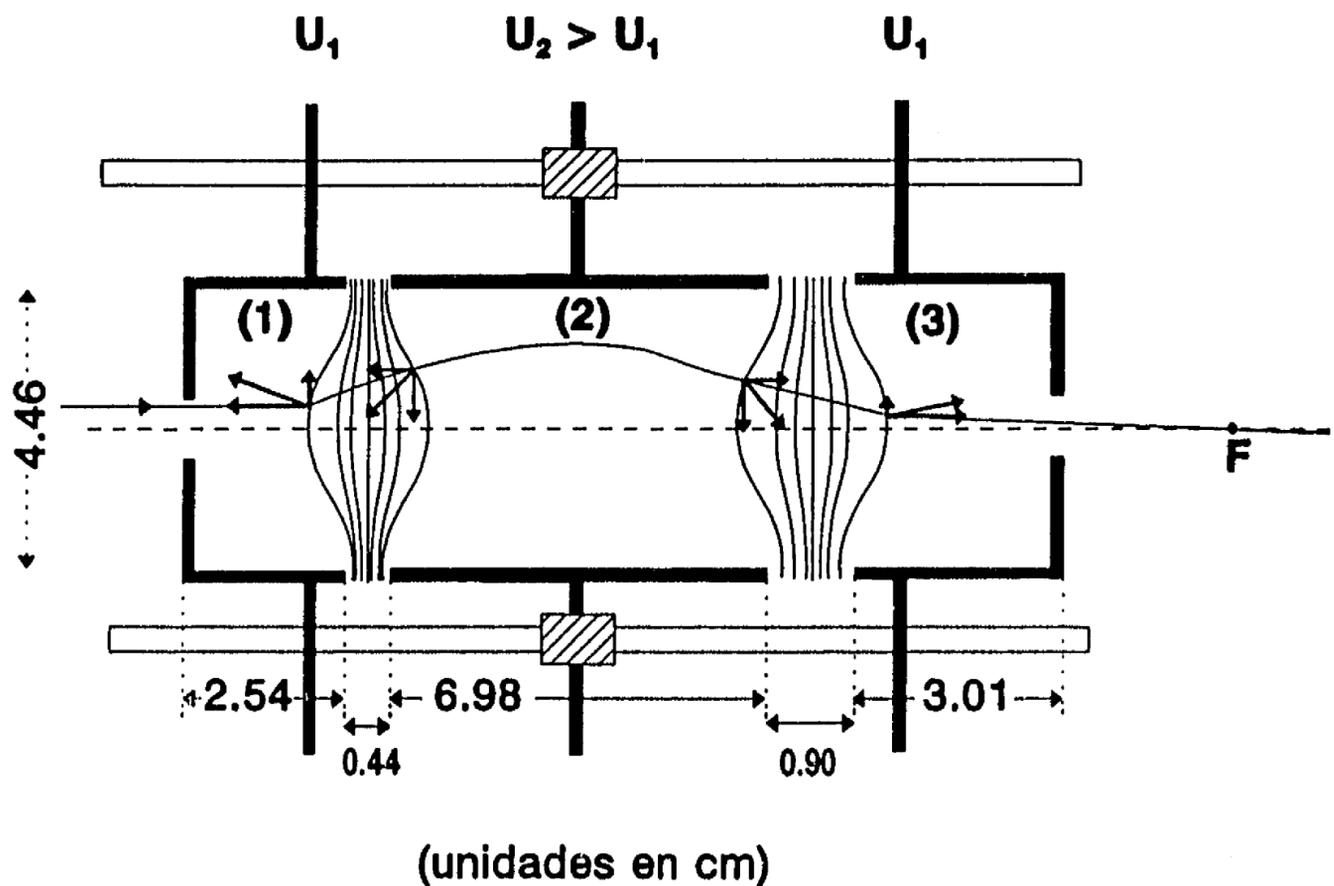
Fig. II.3

Esquema de la Lente Einzel y sus conexiones eléctricas. En esta figura también se puede apreciar la fuente de iones la cual se encuentra en un recinto permanentemente enfriado por un sistema de agua recirculada.

## LENTES EINZEL

En general, cuando los iones que se forman en la fuente son extraídos de ésta, éstos salen con una componente de velocidad perpendicular al eje del acelerador, lo que ocasiona que el haz presente una dispersión espacial, que en la medida en que transcurra el tiempo, también irá en aumento. Con el fin de reducir este efecto, se emplea un sistema que sirve para enfocar o

concentrar a las partículas cargadas; este sistema se conoce como **Lente Einzel**, y en la figura II.4 se muestra un esquema de la misma y se ilustra el principio de su funcionamiento.



**Fig. II.4**

Esquema de la lente Einzel por medio de la cual se logra el enfoque del haz.

En la figura II.4 se considera un ion positivo que no incide en la dirección del eje de la lente Einzel, en esta, el primer y tercer electrodos se encuentran a un potencial  $U_1$  y el electrodo central a un potencial  $U_2$ , tal que  $U_2 > U_1$ . En la región (1) la componente radial de la fuerza que actúa sobre el ion lo aleja del eje de la lente Einzel, en la región (2) esta fuerza actúa en

sentido opuesto, y, como se puede ver el recorrido del ion en esta región es mayor que en las regiones (1) y (3), en ésta última, la fuerza radial nuevamente tiende a alejar al ion del eje. Es claro que el ion se encuentra sometido a la fuerza radial que se dirige hacia el eje un tiempo mayor, que el tiempo durante el cual actúa la fuerza radial en sentido inverso. Por lo tanto, la trayectoria del ion cruza el eje de la lente Einzel en el punto F.

Las características de la lente Einzel empleada en el presente trabajo son las siguientes. Se trata de tres secciones de cilindro hueco de igual diámetro, construidas en acero inoxidable cédula 304, que se encuentran alineados en un mismo eje. La distancia focal depende de la separación entre los cilindros y del voltaje aplicado a estos. En el presente caso, se fijó la separación entre los cilindros, y por lo tanto la distancia focal se puede obtener únicamente en función del voltaje aplicado a cada sección de cilindro. Cuando se desea que no se altere la energía de las partículas a ser enfocadas, el primer y tercer electrodos deben estar al mismo potencial, es decir, que la distancia focal se determina con el voltaje aplicado al electrodo central, como se puede apreciar en la figura II.3; el primer y tercer electrodos fueron conectados a tierra, por lo que las partículas cargadas que salen de la fuente adquieren la energía cinética en la región que se encuentra entre la salida de la fuente de iones y el primer electrodo cilíndrico de la lente Einzel. La relación entre el voltaje aplicado al segundo electrodo  $V_2$  y el voltaje de aceleración  $V_a$  es:

$$V_c = 0.84 V_a \quad (2.17)$$

lográndose con esto que las partículas sean enfocadas a una distancia de 30.0 cm del colimador de la placa de ánodo.

## ESPECTROMETRO DE MASAS

Después de producir, acelerar y enfocar el haz de partículas cargadas, es necesario seleccionar el tipo de ion que se desea como proyectil. Esta es la función del espectrómetro de masas, del cual se proporciona un esquema en la figura II.5, donde se pueden ver las características geométricas mas relevantes para su funcionamiento.

Se trata de un electroimán por medio del cual se genera un campo magnético uniforme  $B$  en la región por la que pasan las partículas cargadas. Las direcciones de entrada y salida forman un ángulo de  $60^\circ$  y el vértice de estas líneas se encuentra a una distancia de 23.7 cm.

Antes de que los iones entren en la región del electroimán, éstos empiezan a ser deflectados por el campo magnético debido al "efecto de borde". Como puede apreciarse en la figura II.1, se cuenta con un juego de placas deflectoras (verticales y horizontales) a fin de corregir este efecto de manera que la trayectoria de los iones sea perpendicular al campo en el interior de las superficies polares.

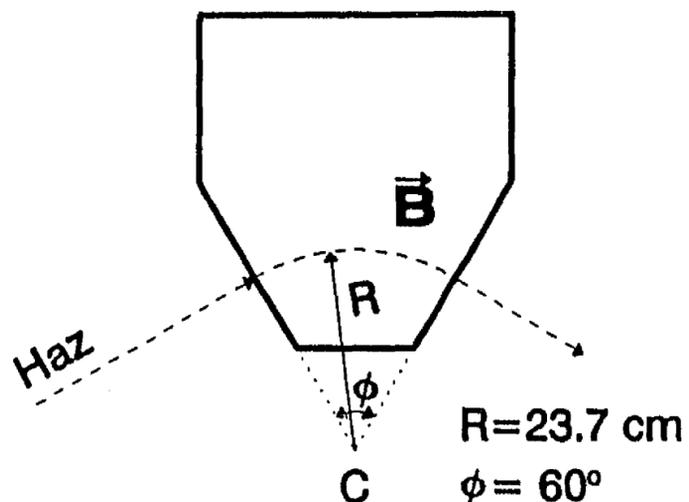


Fig. II.5  
Características geométricas del espectrómetro de masas.

Si una partícula de carga eléctrica " $-ne$ " y masa " $m$ " entra en la región donde actúa el campo magnético  $B$ , actuará sobre ésta la fuerza de Lorentz  $F$ , dada por

$$F = (-ne) v \times B \quad (2.18)$$

donde  $v$  es la velocidad del ion.

Si se considera que la inducción magnética es constante tanto en magnitud como en dirección, se puede escribir:  $B = -B\hat{y}$  en toda la superficie polar  $0 \leq \theta \leq 60^\circ$ ; también se elige un sistema de referencia en el que la velocidad del ion sea paralela al eje  $z$ ,  $v = v\hat{z}$ . Entonces la fuerza que actúa sobre el ion será:

$$F = -nevB(\hat{z} \times (-\hat{y})) \quad (2.19)$$

$$F = nevB(\hat{z} \times \hat{y}) = -nevB\hat{x}$$

esta fuerza actúa en el plano  $X-Z$ , y es perpendicular a la

velocidad, por lo que el ion se deflecta continuamente hacia el centro C del sector circular. El movimiento del ion se describe por medio de la ecuación

$$\frac{mv^2}{R} = nevB \quad (2.20)$$

ó bien

$$B = \frac{mv}{neR} \quad (2.21)$$

en esta última ecuación se muestra claramente que el electroimán funciona como un selector de cantidad de movimiento, ya que al aplicar un campo magnético de intensidad B, todos los iones con cantidad de movimiento  $p = m v$ , y carga  $-ne$  se mueven a lo largo de un arco de circunferencia de radio R.

La energía cinética del ion depende del voltaje aplicado en la región de aceleración de la siguiente manera

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = \sqrt{\frac{2nev_a}{m}} \quad (2.22)$$

Al sustituir esta expresión para la rapidez del ion en la ecuación (2.21) se obtiene:

$$B = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{2mV_a}{ne}} \quad (2.23)$$

Cuando se conoce el campo magnético  $B_1$ , necesario para deflectar iones de masa  $m_1$  y carga  $ne$  a una determinada energía,

entonces el campo magnético  $B_2$ , necesario para seleccionar iones de masa  $m_2$ , de igual carga eléctrica y energía que  $m_1$ , se puede determinar con la siguiente ecuación:

$$B_2 = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} B_1 \quad (2.24)$$

En la figura II.6 se representa gráficamente lo que se conoce como la Ley de Barber<sup>(2)</sup> que se refiere a la "óptica" de un haz de partículas cargadas que pasa por una región en la que actúa un campo magnético uniforme  $B$ . Esta ley dice que el objeto  $P$ , vértice  $C$  e imagen  $Q$  se encuentran sobre una línea recta, es decir  $\phi_P + \phi + \phi_Q = \pi$ .

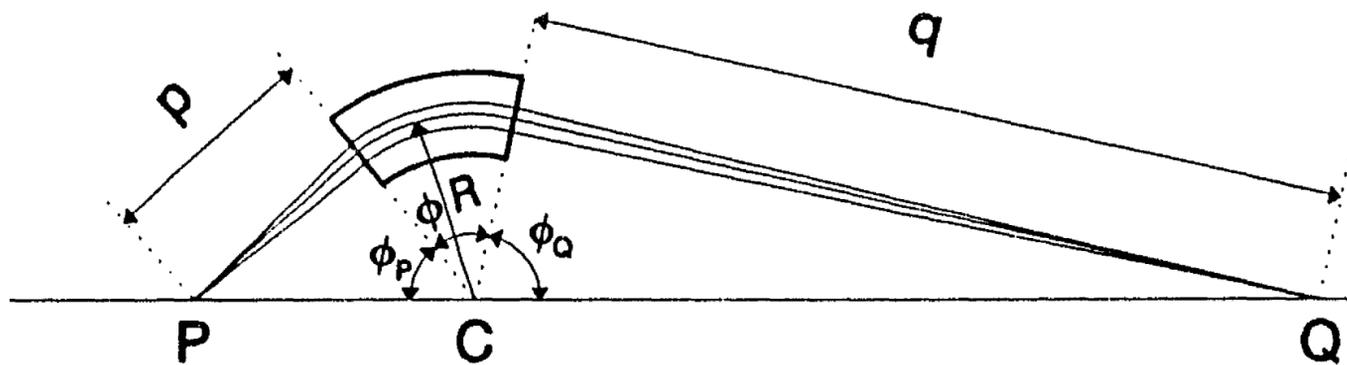


Fig. II.6  
Representación gráfica de la ley de Barber.

En el aparato experimental mostrado en la figura II.1, en la posición correspondiente al punto  $Q$  se encuentra una caja de Faraday a 61.0 cm de la salida del imán selector, por lo que el punto  $P$  se encuentra a 25.1 cm de la entrada del imán, como se muestra en la figura II.7.

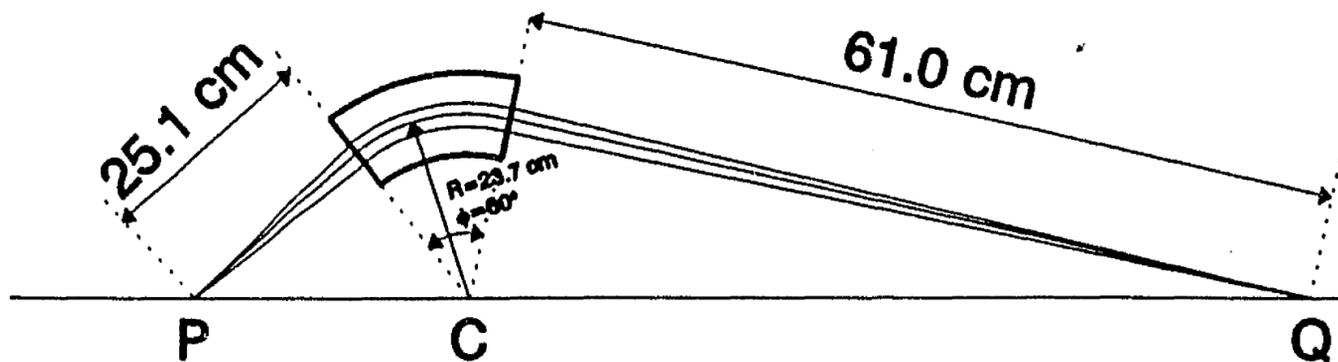


Fig. II.7

Representación gráfica de la ley de Barber en el aparato experimental.

Cuando se tiene un espectrómetro de masas como el que se ha descrito aquí, y se considera la posibilidad de tener iones del tipo  $X$ ,  $X_2$  y  $X^2$  a los que se aplica un voltaje de aceleración  $V_a$ , entonces el ion  $X^2$  describirá una trayectoria circular de radio  $R_1$ , de acuerdo con la siguiente ecuación

$$R_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{neB} = \frac{\sqrt{2m(2eV_a)}}{2eB} \quad (2.25)$$

$$R_1 = \frac{1}{B} \sqrt{m \left( \frac{V_a}{e} \right)}$$

mientras que un ion  $X$ , proveniente de la disociación de  $X_2$ , después de salir de la fuente de iones describirá una trayectoria circular de radio  $R_2$ , de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$R_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{neB} = \frac{\sqrt{2m\left(\frac{1}{2}eV_s\right)}}{eB} \quad (2.26)$$

$$R_2 = \frac{1}{B} \sqrt{m\left(\frac{V_s}{e}\right)}$$

por lo tanto,  $R_1 = R_2$  (2.27)

Esto quiere decir que existe la posibilidad de que iones distintos describan la misma trayectoria al pasar por el imán selector. Para eliminar esta posibilidad, se dispone de un analizador de energía a la salida del imán el cual, se describirá mas adelante.

Finalmente, se presentan en la figura II.8 las curvas de calibración para el espectrómetro de masas. Estas curvas se obtuvieron admitiendo inicialmente sólo hidrógeno en la fuente de iones, y registrando los iones  $H^+$ ,  $H_2^+$  y  $H_3^+$ , posteriormente se admitió aire en la fuente de iones y se registraron diversas masas, llegando hasta masa atómica 44. Se obtuvieron gráficas de corriente de iones vs. campo magnético y a partir de éstas los valores que se encuentran graficados en la figura II.8. Los resultados obtenidos son consistentes con los que se reportaron previamente<sup>(1)</sup>. La resolución media del espectrómetro se determinó de 0.5% a partir del ancho a la altura media de los picos de las gráficas de intensidad en función de la inducción.

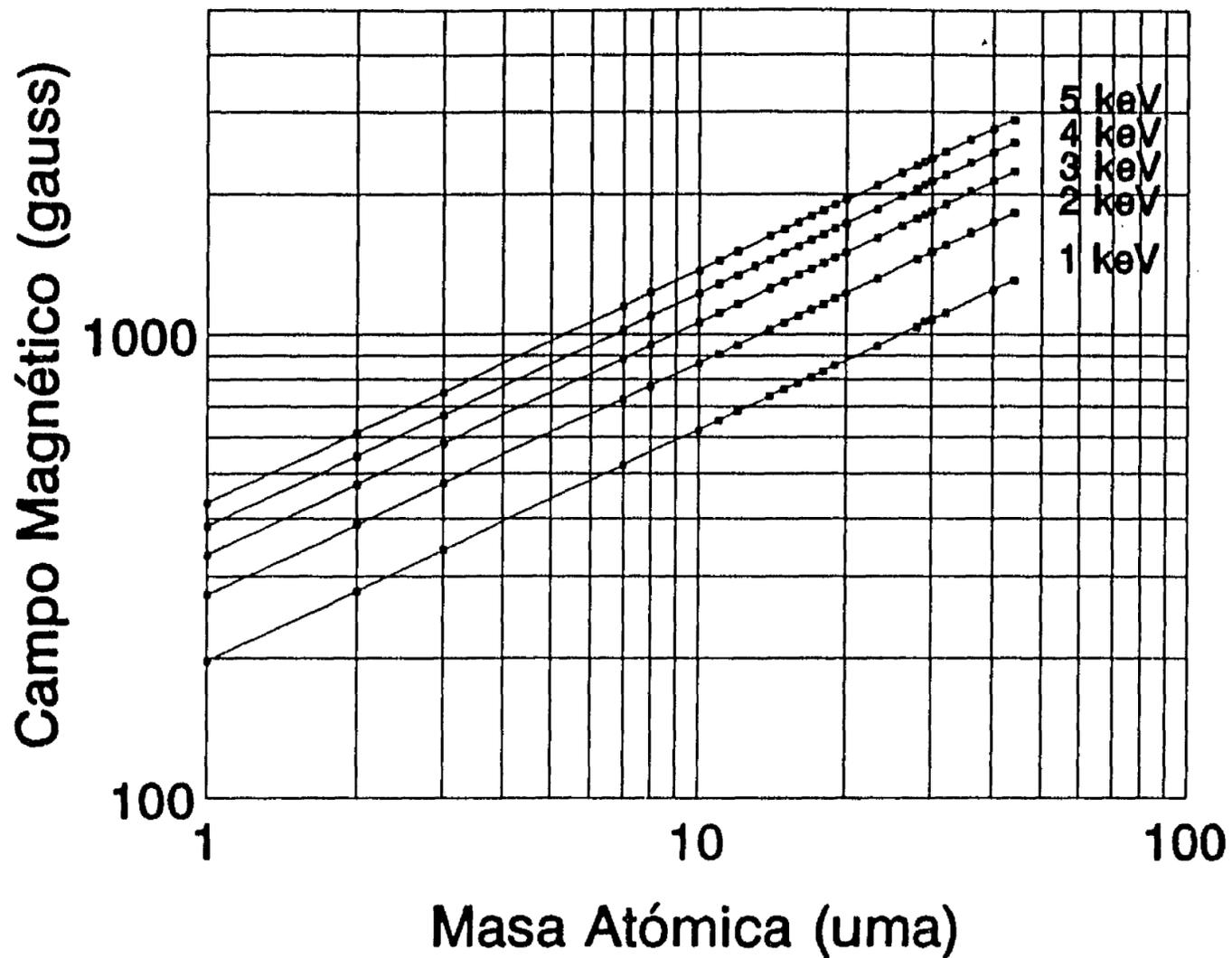


Fig. II.8  
Curvas de calibración para el espectrómetro de masas.

### ANALIZADOR DE PLACAS PARALELAS

Como se puede ver en la figura II.1, a la salida del imán y antes de que el haz llegue a la caja de Faraday, éste pasa a través de un conjunto de placas paralelas cuya entrada presenta un ángulo de  $45^\circ$  con respecto a la dirección de incidencia del haz. Este dispositivo selecciona a los iones de acuerdo con su energía. Aquellos que son seleccionados salen a un ángulo de  $90^\circ$  con respecto

a la dirección de entrada, y se dirigen hacia la celda de reacción. Cuando no se aplica el voltaje de deflexión  $V_D$  al analizador, el haz de partículas es registrado por medio de la caja de Faraday que se mencionó anteriormente.

En la figura II.9 se muestra un esquema del analizador de energía.

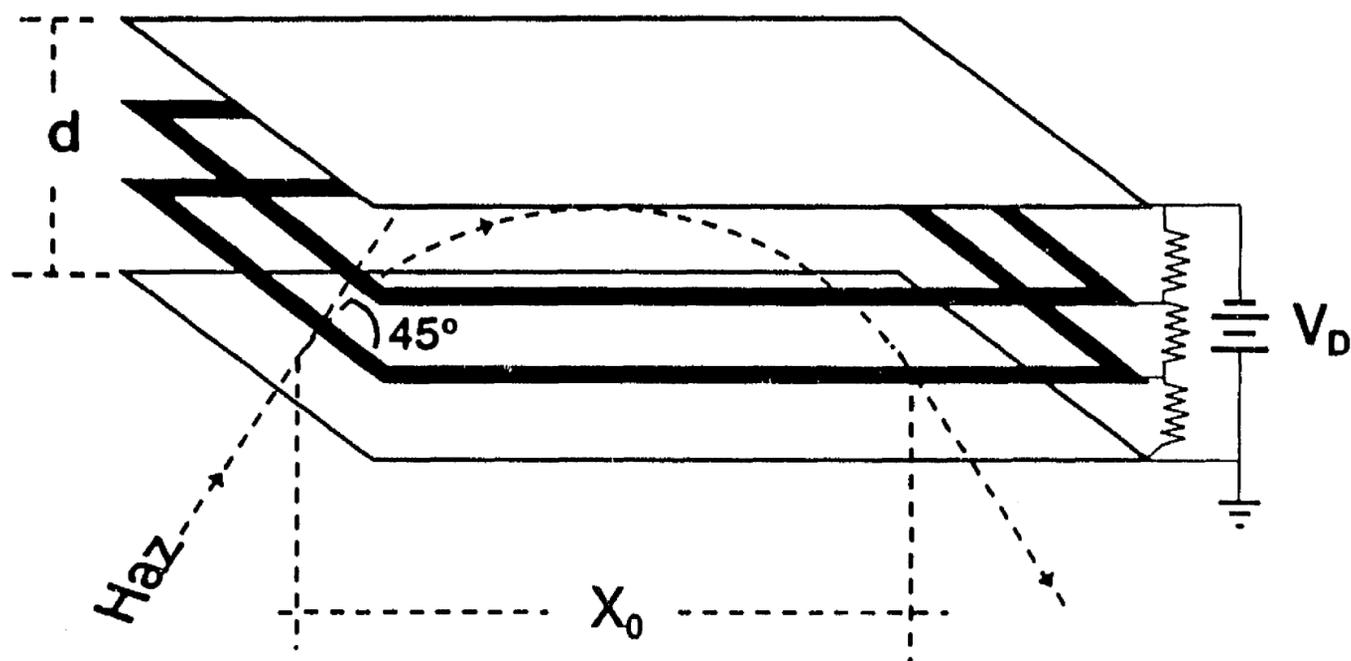


Fig. II.9

Esquema del analizador de energía de placas paralelas.

En la figura anterior se puede ver que se aplica una diferencia de potencial entre 2 placas metálicas, de tal manera que cuando una partícula con carga eléctrica entra en esta región a un ángulo  $\theta$ , describe una trayectoria parabólica. Las placas intermedias se utilizan a fin de minimizar el efecto de borde, y tener un campo eléctrico más uniforme entre las placas.

Como lo muestra G. A. Harrower<sup>(3)</sup> en su trabajo, este dispositivo tiene la propiedad de enfocar a la salida del

analizador a todas aquellas partículas que ingresan con ángulos cercanos a  $45^\circ$ . El voltaje de deflexión  $V_D$  necesario para que los iones sean analizados se encuentra en función de la separación entre las placas  $d$ , la distancia entre la entrada y salida del analizador  $X_0$  y el voltaje de aceleración  $V_a$  de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$V_D = 2 \frac{d}{X_0} V_a \quad (2.28)$$

Si las características geométricas del analizador son tales que  $d = 0.3 X_0$ , entonces

$$V_D = 0.6 V_a \quad (2.29)$$

La resolución en energía para un analizador de este tipo se determina por medio de la siguiente fórmula

$$\frac{\Delta V}{V_a} = \frac{\Delta E}{E} = \left[ \frac{\Delta X_1 + \Delta X_2}{2X_0} \right] (1 + \text{Sec}2\Delta\theta) - (1 - \text{Sec}2\Delta\theta) \quad (2.30)$$

En la figura II.10 se muestran gráficamente las cantidades  $\Delta X_1$ ,  $\Delta X_2$ ,  $X_0$  y  $\Delta\theta$ .

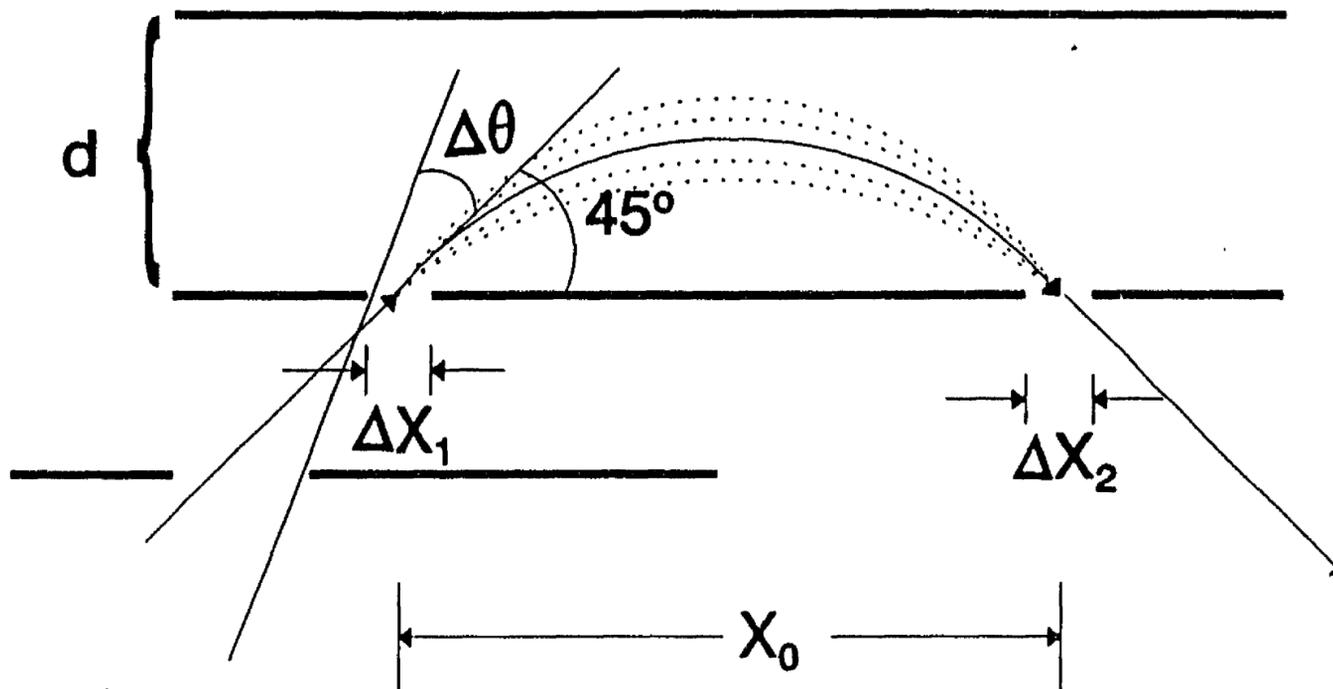


Fig. II.10

Esquema del analizador de energía de placas paralelas en el que se muestran las magnitudes que determinan su resolución.

Este analizador también fué calibrado, determinandose experimentalmente la relación entre el voltaje de deflexión  $V_D$  aplicado al analizador y el voltaje de aceleración  $V_a$  aplicado en la fuente de iones. En este caso se trabajó con el ion  $H^+$  en un intervalo de energías entre 1 y 5 keV. Aquí también se obtuvieron gráficas de corriente de iones en función del voltaje  $V_D$ . A partir del máximo de estas distribuciones, se construyó la recta de calibración que se muestra en la figura II.11. Al calcular el ancho a la altura media de las distribuciones mencionadas anteriormente, se determinó la resolución en energía de este analizador cuyo valor promedio fué de 7.4%. Esto no quiere decir que se tenga una dispersión tan grande en energía en el haz de iones; el significado

de este número es que con las dimensiones de entrada y salida en el analizador, no se puede tener una mejor resolución, lo cual se pudo comprobar más adelante al efectuar la calibración de un analizador de este tipo situado en la cámara de detección para el estudio de la disociación de  $H_3^+$ . Más adelante se discutirá este punto.

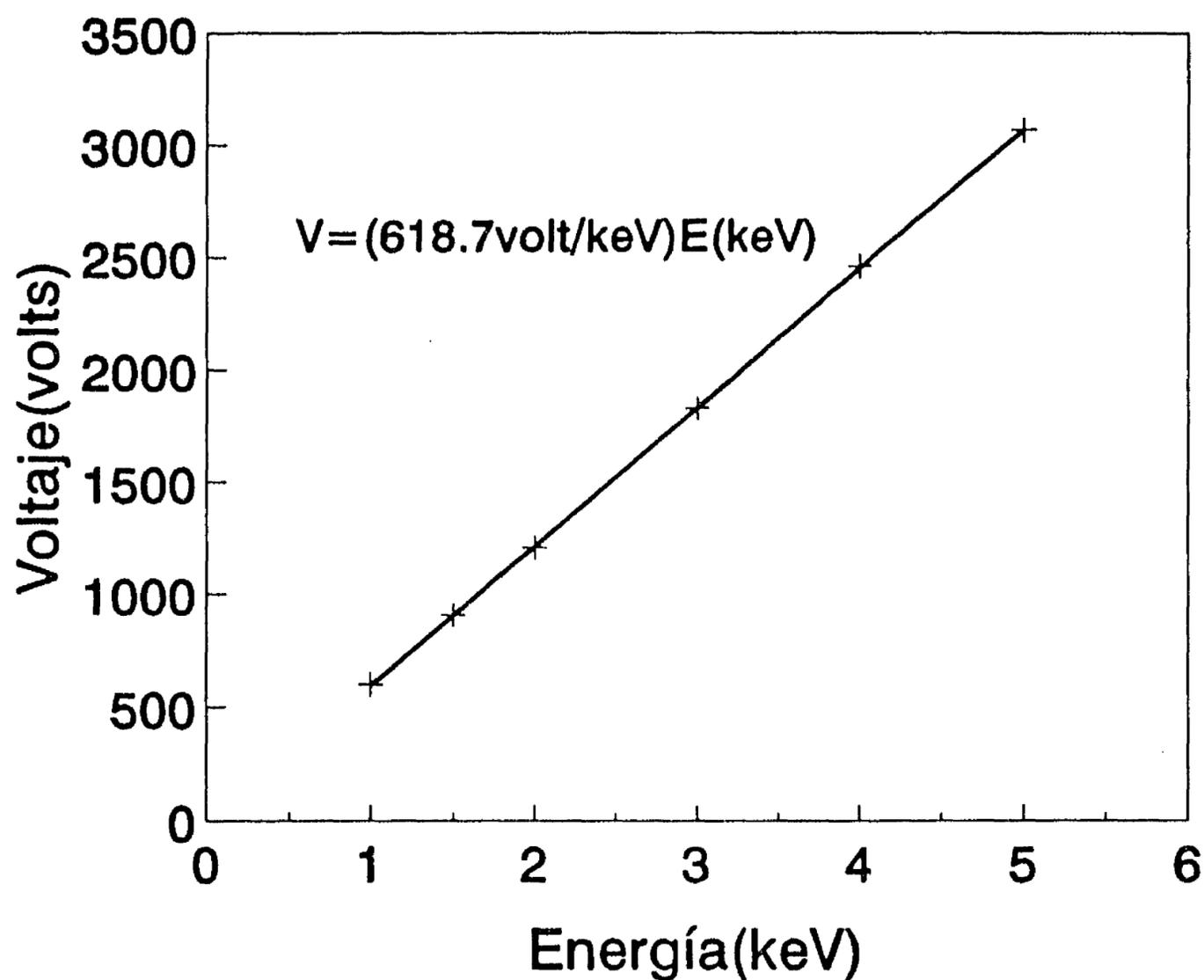


Fig. II.11

Recta de calibración del analizador de energía que se encuentra a la salida del espectrómetro de masas.

## CAJA DE FARADAY

Con el fin de monitorear y optimizar la intensidad del haz de iones, se cuenta con una caja de Faraday cuyo esquema se muestra en la figura II.12.

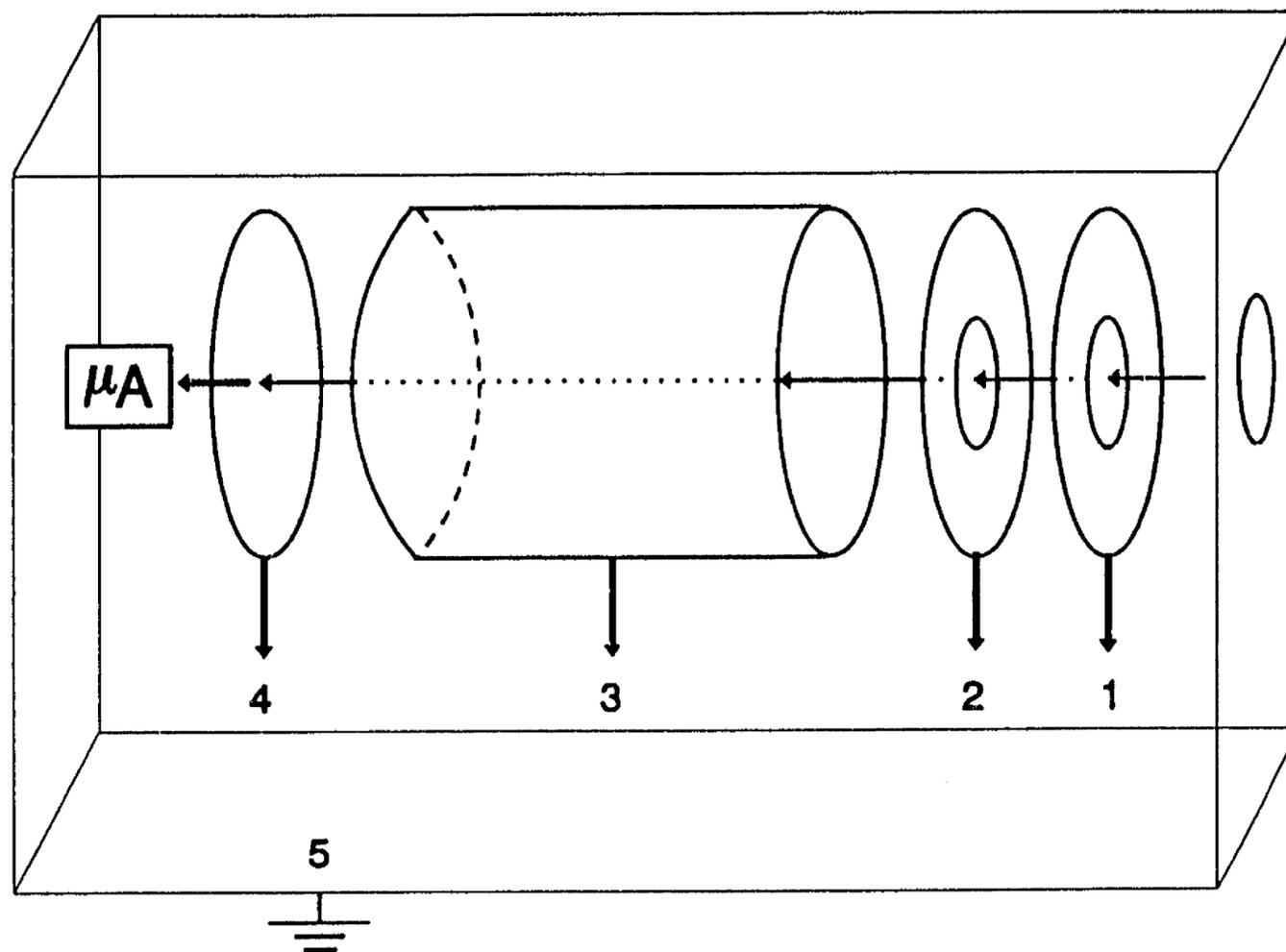


Fig. II.12  
Esquema de la caja de Faraday.

La caja de Faraday consta de 4 electrodos de cobre (1-4) y una cubierta de acero inoxidable (5) conectada a tierra. La función del electrodo (1) es repeler los iones positivos lentos que forman parte del gas residual, y tiene aplicado un potencial de +45 volts. El electrodo (2) se encuentra a un potencial de -90 volts, y su

función es evitar que salgan los electrones secundarios producidos dentro de la caja. Al electrodo (3) se le aplica un voltaje de -310, volts y su función es regresar los electrones secundarios a la placa colectora (4). Todos los potenciales mencionados en las líneas anteriores están referidos a tierra.

La placa colectora (4) se encuentra conectada a un electrómetro por medio del cual se mide la corriente de partículas que inciden en la caja. Las corrientes típicas en esta región son del orden de  $10^{-10}$  a  $10^{-8}$  amperes.

## CELDA DE REACCION

Después de ser analizado en energía el haz de iones, éste se dirige hacia el lugar en el que se lleva a cabo la interacción con el blanco; este lugar se conoce como celda de reacción. A fin de hacer alguna corrección en la trayectoria del haz, se cuenta con un juego de placas de deflexión horizontal y vertical. Como se puede ver en la figura II.13, la celda de reacción es un tubo cilíndrico de acero inoxidable que mide 2.54 cm de longitud de diámetro. A la entrada se encuentra un colimador de  $0.47 \pm .005$  mm, y a la salida otro de  $2.06 \pm .005$  mm ambos con bordes de navaja para evitar la dispersión del haz con estas superficies. El tubo por medio del cual se admite el gas que sirve como blanco también es de acero inoxidable y sirve a la vez de soporte para la celda de reacción.

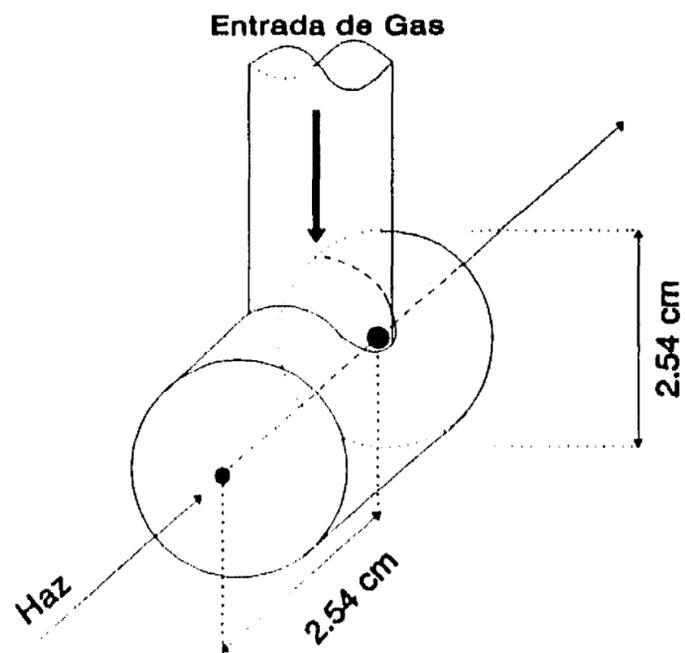


Fig. II.13  
Esquema de la celda de reacción.

## CAJA DE FARADAY MOVIL

Al salir de la celda de reacción el haz puede ser monitoreado y optimizado nuevamente con la ayuda de una caja de Faraday móvil, cuyo funcionamiento es idéntico al descrito anteriormente, sólo que en este caso la caja de Faraday puede ser desplazada para permitir el paso del haz hacia la cámara de detección.

El hecho de determinar la corriente inicial de iones que inciden en la celda de reacción permite reportar secciones transversales totales absolutas del proceso en estudio.

## SISTEMA DE DETECCION

A continuación se describe el sistema de detección empleado para el estudio del despojo electrónico simple y doble del ion H<sup>+</sup> en SF<sub>6</sub>, CH<sub>4</sub> y CO. Más adelante se especifican las modificaciones hechas a este sistema para el estudio de la disociación polar de H<sub>3</sub><sup>+</sup>.

Después de efectuarse la colisión entre proyectil y blanco, es necesario determinar el número de partículas que perdieron un electrón, es decir, el número de iones H<sup>+</sup> que se transformaron en átomos de hidrógeno neutro, así como también el número de iones H<sup>+</sup> que perdieron dos electrones después de la colisión, quedando como protones. El sistema de detección se muestra en la figura II.14.

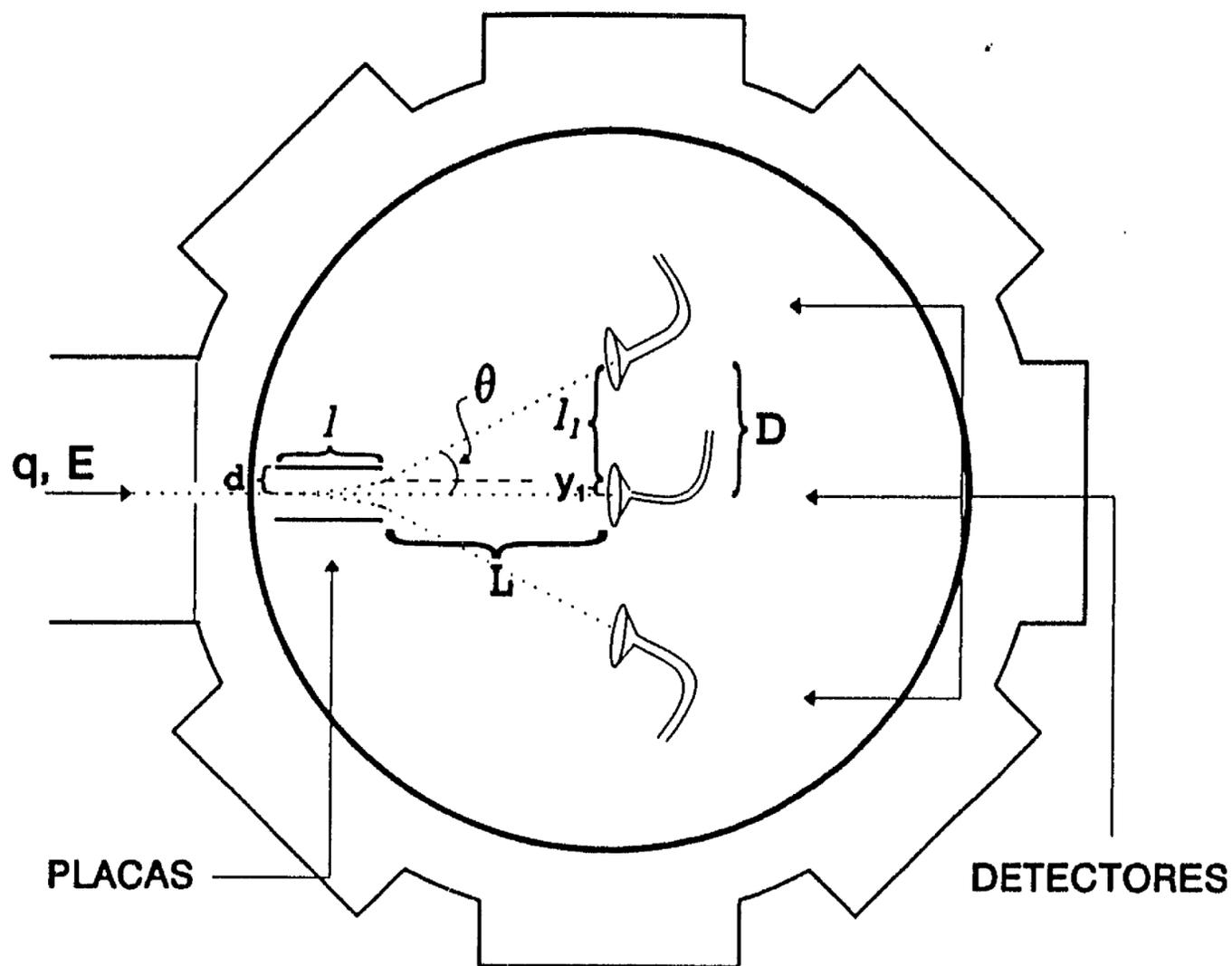


Fig. II.14

Geometría del sistema de detección para el estudio del despojo electrónico simple y doble de  $H^+$  en  $SF_6$ ,  $CO$ , y  $CH_4$ .

### PLACAS PARALELAS (SEPARADOR DE PRODUCTOS)

Con el fin de separar los productos de acuerdo con su estado de carga, se utiliza un juego de placas metálicas de 5.08 cm de ancho ( $A$ ) y 7.62 cm de largo ( $l$ ), separadas por una distancia ( $2d$ ) de 2.54 cm; se aplica una diferencia de potencial  $V_p$  entre las mismas, consiguiendo con esto la deflexión de partículas con carga positiva a un lado, partículas con carga negativa al lado opuesto

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

y las partículas eléctricamente neutras continúan su trayectoria sin deflexión. Se puede mostrar fácilmente que cuándo un haz de partículas cargadas pasa a través de un arreglo de este tipo, el ángulo de deflexión  $\theta$  esta dado por la fórmula:

$$\theta = \text{Arctg}\left(\frac{qV_p l}{4dE}\right) \quad (2.31)$$

donde "q" es la carga eléctrica de la partícula que incide entre las placas con una energía "E".

Como se puede ver de la figura II.14, se tienen tres detectores localizados sobre una línea, a una distancia  $L = 17.37$  cm de la salida de las placas deflectoras; uno de ellos se encuentra en la dirección que siguen las partículas neutras, y los otros dos están colocados simétricamente a una distancia  $D = 3.56$  cm del detector central, por lo que la relación entre el voltaje aplicado a las placas  $V_p$  y el voltaje de aceleración aplicado a las partículas en la fuente de iones,  $V_a$ , se puede encontrar de la siguiente manera:

De la figura II.14

$$\begin{aligned} D &= y_1 + l_1 = \frac{1}{2} \text{Tg}\theta + L \text{Tg}\theta \\ &= \left(L + \frac{1}{2}\right) \frac{qV_p l}{4dE} \\ &= \left(L + \frac{1}{2}\right) \frac{V_p l}{4dV_a} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Despejando  $V_p$  y sustituyendo los valores de  $L$ ,  $l$ ,  $D$  y  $d$ , se encuentra que:

$$V_p = 0.112 V_a \quad (2.33)$$

La relación entre  $V_p$  y  $V_a$  fué verificada experimentalmente acelerando iones  $H^+$  en un intervalo de energías de 1 a 5 keV, y para cada energía se envió el haz al detector central, se optimizó la corriente, teniendo especial cuidado en centrar correctamente el haz en este detector, posteriormente se aplicó voltaje a las placas deflectoras y se hicieron gráficas de intensidad en función del voltaje de placas  $V_p$ .

En la figura II.15 se muestra un perfil típico del haz en el detector lateral. Como se puede ver, se tiene un intervalo de voltaje en el cual el haz entra al detector, la intensidad aumenta rápidamente. Mientras el haz se mantiene dentro del detector, la intensidad es prácticamente constante en este intervalo de voltaje y al final la intensidad cae rápidamente.

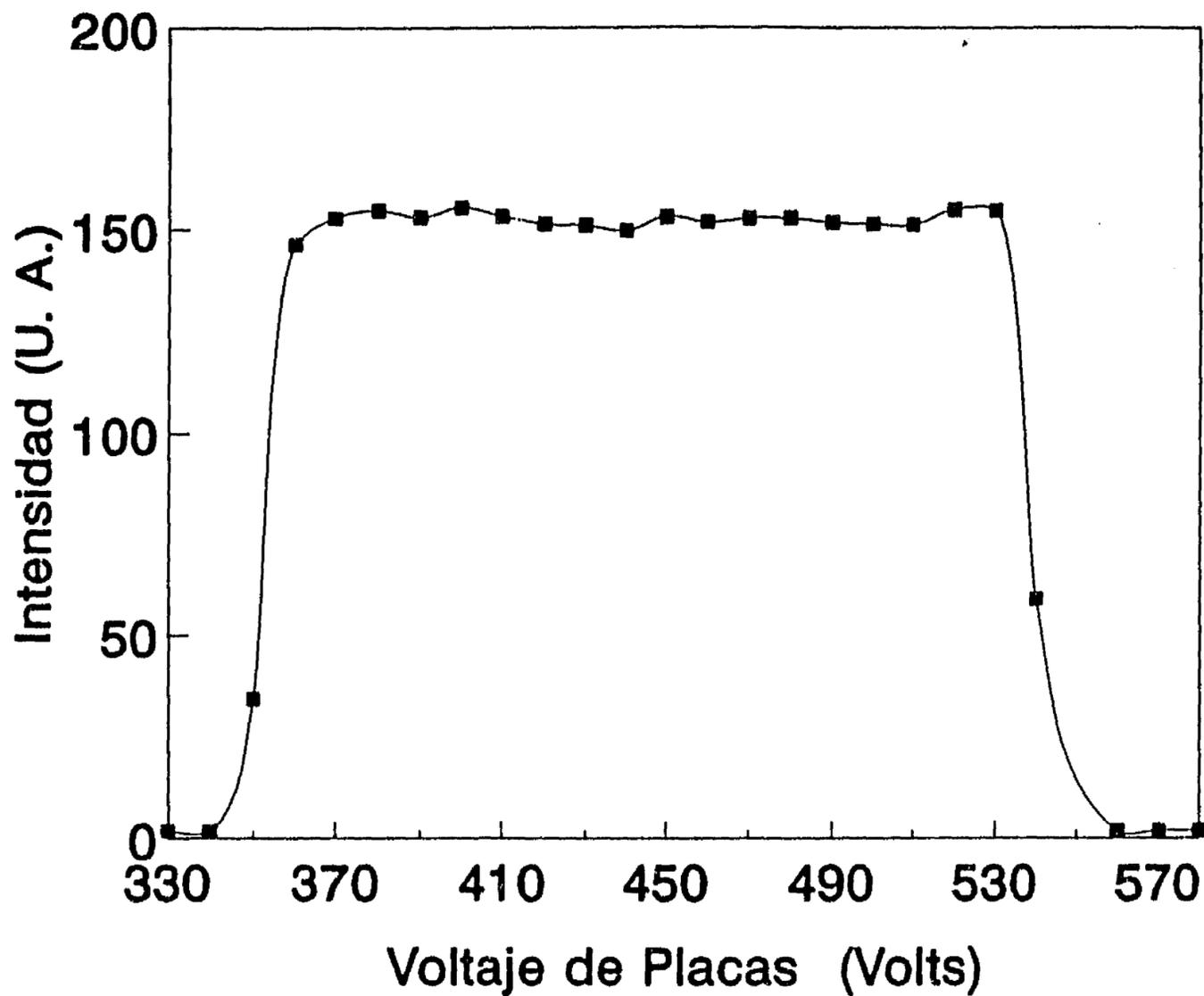


Fig. II.15

Respuesta de uno de los detectores laterales al hacer un barrido horizontal del haz sobre la superficie del detector. En este caso se trabajó con un haz de protones a 5 keV.

La recta de calibración que se muestra en la figura II.16 se construyó tomando los voltajes  $V_p$  en el centro de la meseta de la figura II.15 para cada voltaje de aceleración  $V_a$ . Se puede notar que el factor que se obtiene experimentalmente (.092) difiere del esperado (.112), esto se debe principalmente al efecto de borde, ya que el campo eléctrico actuó en una longitud efectiva mayor a la

longitud geométrica de las placas.

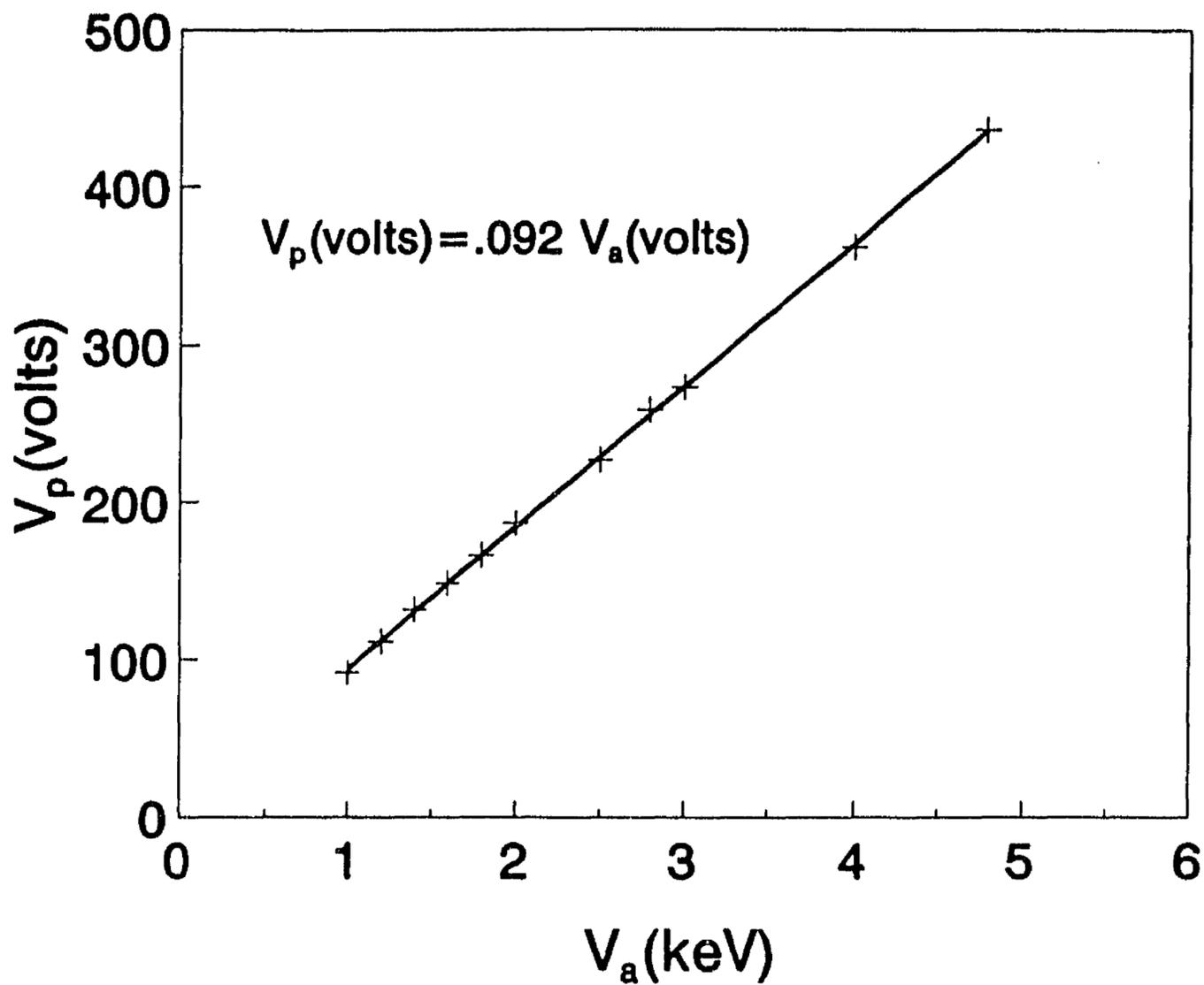


Fig. II.16

Recta de calibración de las placas paralelas (separador de productos).

## DETECTORES

Los detectores que se utilizaron en este trabajo son del tipo multiplicadores de electrones de dinodo continuo. En la figura

II.17 se muestra un esquema de uno de ellos, así como la electrónica asociada a su funcionamiento óptimo.

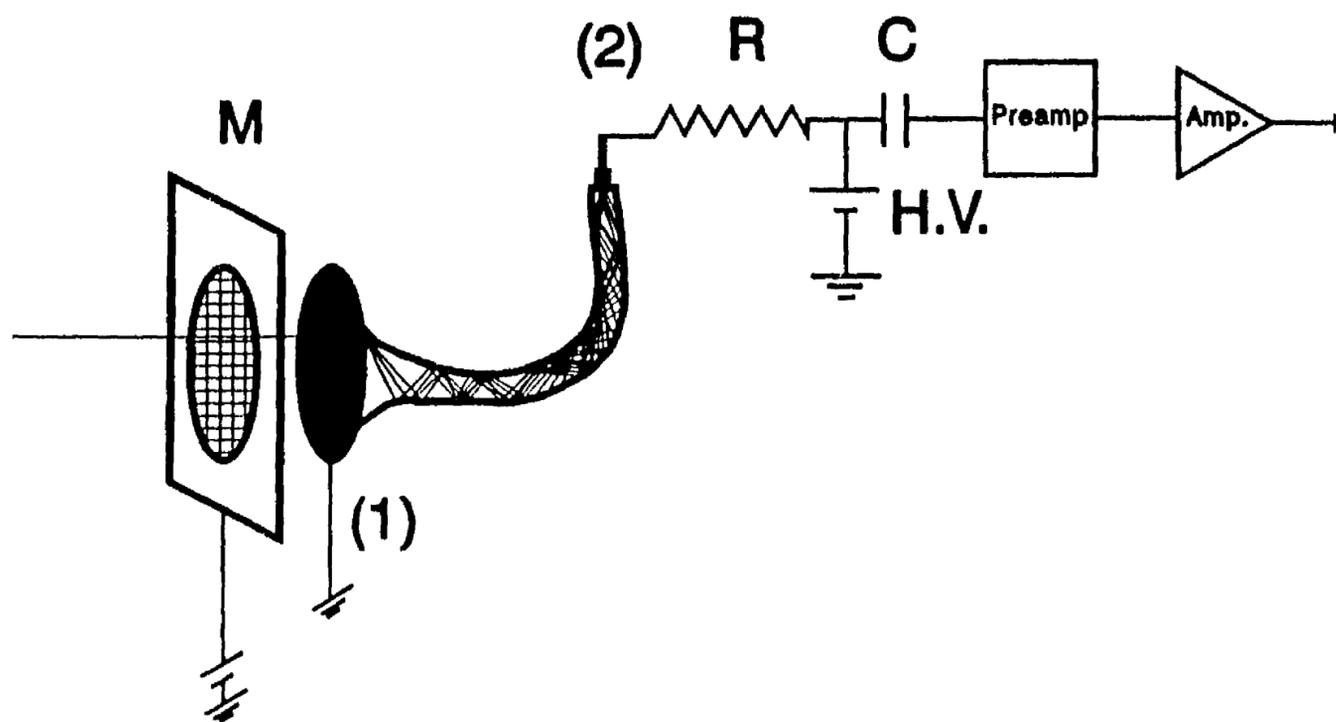


Fig. II.17

Esquema del detector y la electrónica asociada a éste.

La malla M es una fina red metálica con un factor de transmisión cercano al 100%. A esta malla se aplica un pequeño potencial positivo que se encarga de repeler iones lentos que no formen parte del haz, para que únicamente las partículas seleccionadas por las placas deflectoras lleguen a los detectores. Cuando una partícula de cierta energía toca la superficie del detector, el recubrimiento semiconductor de éste desprende electrones secundarios, éstos son acelerados hacia el extremo opuesto del detector debido a la diferencia de potencial existente entre los puntos (1) y (2). El voltaje de operación de estos detectores es de 3000 volts. En su movimiento, los electrones

7

secundarios chocan con la superficie interna del detector, arrancando más electrones secundarios; el resultado final es una cascada de electrones que son registrados como un pulso de corriente en el punto (2). Este pulso, es del orden de milivolts, por lo que debe pasar por una etapa de preamplificación y otra de amplificación, antes de que pueda ser registrado por el contador.

Los detectores usados tienen una razón de conteo máxima de  $10^5$  partículas/s. Todo el sistema de detección (Placas deflectoras y detectores) están colocados sobre una mesa óptica de acero inoxidable de 6.35 mm de espesor, 50 cm de diámetro y perforaciones circulares de 6.35 mm cada 2.54 cm, lo que permite un fácil y preciso montaje de cada una de las partes del sistema.

## SISTEMA DE VACIO

Una parte fundamental en los experimentos de colisiones entre sistemas atómicos es el vacío o presión del gas residual a través del cual se desplaza el proyectil y los productos de la colisión.

En la actualidad se cuenta con una gran variedad de bombas de vacío, y cada una de ellas tiene un intervalo de presiones en el que trabaja óptimamente, así como también diversas características para evacuar determinados tipos de gases.

La idea básica de contar con un buen sistema de vacío es garantizar que el proyectil mantenga su identidad desde que éste es producido en la fuente de iones, hasta que llega a la región donde

se lleva a cabo la interacción con el blanco y, posteriormente, desde que se generan los productos de la reacción, hasta que éstos son registrados en la cámara de detección. Para lograr esto es necesario mantener la presión en el interior del acelerador suficientemente baja, tanto, que el proyectil y los productos tengan un camino libre medio  $\langle l \rangle$  mucho mayor a la longitud del acelerador. Se puede hacer una estimación del camino libre medio a partir de la expresión:  $\langle l \rangle = (n \sigma)^{-1}$  donde  $n$  es el número de partículas por unidad de volumen del gas residual y  $\sigma$  es la sección transversal de colisión del proyectil con ese gas. Típicamente estas secciones son del orden de  $10^{-16} \text{ cm}^2$  a  $10^{-15} \text{ cm}^2$ , sin embargo, aún cuando llegaran a ser del orden de  $10^{-13} \text{ cm}^2$ , el camino libre medio es del orden de 10 veces mayor a las dimensiones del acelerador cuando la presión del gas residual es de  $1.0 \times 10^{-7}$  Torr. Esta presión es fácilmente alcanzada con el sistema que se describe a continuación.

El sistema de vacío está formado por una bomba turbomolecular con una velocidad de bombeo de 230 l/s en la región donde se encuentra la lente Einzel, otra bomba turbomolecular de 170 l/s en la cámara donde se encuentra el analizador parabólico de placas paralelas y la caja de Faraday, una bomba difusora en la región de la celda de reacción y una bomba turbomolecular de 500 l/s en la cámara de detección; cada una de estas bombas cuenta con sus respectivas bombas de apoyo mecánicas, con esto se logra una presión media del gas residual de  $1.0 \times 10^{-7}$  Torr y del orden de  $10^{-8}$  Torr en la cámara de detección ya, que en este lugar se necesita

eliminar al máximo la posibilidad de tener cuentas espurias en los detectores.

A continuación se describen brevemente las características de estas bombas.

Como se sabe, con las bombas mecánicas se pueden alcanzar presiones del orden de  $10^{-3}$  a  $10^{-4}$  Torr, y comunmente sirven de apoyo a las bombas difusoras y turbomoleculares ya que estas funcionan mejor cuando la diferencia de presiones entre entrada y salida no es muy grande; el vacío logrado por las bombas mecánicas se produce cuando un rotor inmerso en un aceite especial, al girar atrapa los vapores de una región y los conduce a una salida, comunmente a presión atmosférica.

Las bombas difusoras no cuentan con partes móviles; el gas que se encuentra en el sistema es extraído por medio de flujos de vapor de aceite que se mueven a alta velocidad y que son muy densos. Los vapores de aceite son recuperados al condensarse en las paredes de la bomba, ya que éstas son enfriadas por medio de un serpentín por el que circula agua fría, además de contar con una trampa de nitrógeno líquido en la parte superior de la bomba a fin de evitar que los vapores de aceite contaminen el sistema. En el presente caso se conectó la trampa fría a un serpentín que conduce freón de un refrigerador comercial, lográndose el mismo efecto que se tenía al usar nitrógeno líquido, pero a un costo considerablemente menor.

Las bombas turbomoleculares cuentan con un rotor en el que se encuentran montadas una gran cantidad de aspas, separadas éstas por una serie de discos los cuales están fijos a la estructura de la

bomba. Los extremos del rotor se encuentran montados sobre un par de baleros permanentemente lubricados. El vacío se logra debido a la diferencia de presiones creada cuando las aspas giran a una gran velocidad (36,000 rpm)<sup>(4)</sup>; el intervalo de presiones en el que operan eficientemente estas bombas va de  $10^{-3}$  a  $10^{-10}$  Torr.

## CALIBRACION DEL ACELERADOR

Como se mencionó anteriormente, se hicieron las calibraciones de distintas partes del acelerador, como son: imán selector, analizador de energía de placas paralelas y placas deflectoras para separar los productos. Cada una de estas calibraciones permite seleccionar un determinado tipo de ion de cierta energía; sin embargo es necesario llevar a cabo una calibración integral del acelerador a fin de saber si cada una de las partes que lo componen funciona correctamente. Esta prueba definitiva se llevó a cabo realizando el estudio de la reacción



la cual ha sido ampliamente estudiada, y las secciones transversales totales de este proceso han sido medidas por diversos autores en el intervalo de energías de 1 a 5 keV, los valores con los que se compararon los resultados experimentales obtenidos en esta prueba se encuentran en la referencia (5). En la tabla TII.1 se muestran los resultados obtenidos junto con los encontrados en la referencia mencionada.

Tabla TII.1

E(keV)	$\sigma_{\text{recomendada}} \times 10^{-16} \text{cm}^2$	$\sigma_{\text{obtenida}} \times 10^{-16} \text{cm}^2$
1	4.26	4.07
2	6.88	6.51
3	$\approx 8.11$	8.54
4	9.33	10.5
5	$\approx 9.41$	10.7

Estos resultados son el promedio de una serie de mediciones realizadas a cada energía, y la incertidumbre asociada a estas mediciones es de 15.2% como se mostrará mas adelante.

### II.3 DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO

**Secciones Transversales Totales de Despojo Electrónico Simple y Doble del Ion H<sup>+</sup> al Colisionar con SF<sub>6</sub>, CO y CH<sub>4</sub> en el Intervalo de Energías de 1 a 5 keV.**

Una de las condiciones que se requieren antes de iniciar un experimento de colisiones entre sistemas atómicos, es una presión dentro del acelerador suficientemente baja. Como ya se mencionó anteriormente, el sistema de vacío permite trabajar con presiones

del orden de  $10^{-7}$  a  $10^{-8}$  Torr.

El método de trabajo es el siguiente: una vez que la presión en la mayor parte del acelerador es del orden de  $10^{-7}$  Torr, se procede a hacer circular una corriente de 3 a 5 amperes en el filamento de la fuente de iones, consiguiéndose un calentamiento en el cuerpo de la misma que ayuda a eliminar los vapores absorbidos por el nitruro de boro. En pocos segundos, la presión empieza a aumentar, siendo importante que ésta no exceda .1 Torr ya que fuera de la fuente, la región de la lente Einzel se encuentra a una presión que es varios órdenes de magnitud inferior a aquella, y una diferencia de presiones mayor puede ocasionar algún daño a la fuente de iones o incluso al sistema de vacío. Después del aumento en la presión, ésta se estabiliza, y transcurridos algunos minutos empieza a disminuir. Cuando esto sucede, se procede a incrementar la corriente que circula en el filamento en 1 ó 2 A más, nuevamente la presión aumenta, se estabiliza y disminuye como se describió en las líneas anteriores. El proceso se repite hasta llegar a una corriente de 15 a 17 A. Cuando se tiene esta corriente en el filamento y la presión en la fuente ha disminuido hasta .003 Torr ó menos, la fuente está lista para que el gas a ionizar sea admitido. Se ha visto que en este tipo de fuentes de descarga en arco la ionización se favorece cuando se admite un porcentaje de Argón; la mezcla de gases con que se trabaja comunmente es de 75% a 80% de hidrógeno y el resto de Argón, sin que el total exceda .1 Torr. Después de admitir la mezcla de gases, se aplica voltaje al ánodo; normalmente se consigue la corriente de descarga con una

7

diferencia de potencial entre filamento y ánodo entre 80 y 100 volts, posteriormente se aplica el voltaje de aceleración, este puede variar entre 0 y  $\pm 5000$  volts. Las características del acelerador (tipo de aislantes, fuentes de voltaje, etc) restringen cualquier estudio a este intervalo. En el caso presente la polaridad es negativa, ya que se desea acelerar iones  $H^-$ . Todas las partículas de carga negativa producidas en la fuente son aceleradas y posteriormente enfocadas por medio de la lente Einzel. En ésta, el primer y tercer electrodo están conectados a tierra, y el segundo se mantiene a un potencial negativo que coincide de manera aproximada con la ecuación (2.17). Las condiciones en que se produce el haz en la fuente cambian de un día a otro, por lo que el voltaje de enfoque también cambia. Experimentalmente se encontró un acuerdo con la ecuación (2.17) dentro de un 10%. Al salir de la lente Einzel el haz se dirige a la entrada del espectrómetro de masas, cualquier desviación horizontal ó vertical en la trayectoria puede ser corregida por medio de un juego de placas deflectoras. Cuando el haz de partículas de carga negativa entra en la región de las superficies polares del electroimán, se procede a seleccionar al ion que se desea como proyectil, en este caso  $H^-$ , y de acuerdo con las curvas de calibración de la figura (II.8), se aplica el campo magnético adecuado. Una vez seleccionado el  $H^-$ , éste se dirige hacia la caja de Faraday donde se optimiza la corriente de iones, variando principalmente el voltaje de la lente Einzel, la dirección horizontal y vertical, y el campo magnético. Si con esto no se consigue un haz suficientemente intenso ( $10^{-9}$  a  $10^{-10}$  amperes), se

pueden variar las condiciones en la fuente de iones: la mezcla de gases, la corriente en el filamento ó el voltaje en el ánodo. Las corrientes más grandes de H<sup>+</sup> obtenidas en este punto fueron del orden de 10<sup>-8</sup> amperes cuando el voltaje de aceleración fué mayor a 2000 volts. Para voltajes menores la dispersión del haz ocasiona que la corriente disminuya uno ó dos ordenes de magnitud. La corriente se mide con un electrómetro digital *Keithley modelo 616*.

Después de seleccionado y optimizado el proyectil, éste es dirigido hacia la región de interacción con el blanco. Para esto se aplica el potencial adecuado al analizador de placas paralelas de acuerdo con la recta de calibración de la figura (II.11). Antes de llegar a la celda de reacción los iones H<sup>+</sup> pasan por un conjunto de placas paralelas similares a las que se encuentran antes de la entrada al espectrómetro de masas, y también son para corregir la trayectoria del haz y lograr que éste pase a través de los colimadores de la celda de reacción. Antes de admitir el gas que se empleará como blanco, se debe medir la corriente total de H<sup>+</sup> que están incidiendo en la celda. En algunas ocasiones la corriente tarda algunos minutos en estabilizarse debido a la cantidad de parámetros involucrados en la producción y selección de los iones. Normalmente es necesario optimizar la corriente a la salida de la celda por medio de la caja de Faraday móvil; si la intensidad del haz es tal que no sature a los detectores (10<sup>5</sup> part./s), la corriente inicial de H<sup>+</sup> se determina permitiendo el paso del haz hasta la cámara de detección; sin aplicar voltaje a las placas separadoras de productos cargados, se optimiza el haz en el

7

detector central, teniendo cuidado que el haz incida justamente al centro del detector. Posteriormente se aplica voltaje a las placas separadoras de productos cargados de acuerdo con la recta de calibración de la figura (II.16), consiguiéndose con esto que el haz de  $H^+$  incida al centro de uno de los detectores laterales. Al enviar el haz al detector lateral se observa que el número de cuentas registrado en este punto es, dentro de las variaciones típicas del haz (1 a 3 en  $10^3$ ), el mismo número que se registra en el detector central; esto quiere decir que la eficiencia de los detectores es la misma dentro de este margen de error. Otro hecho que se observa al enviar el haz de  $H^+$  al detector lateral es que permanece un pequeño número de cuentas en el detector central. Aún cuando no se tenga gas en la celda de reacción se registran algunas partículas neutras. Este fondo se atribuye a la neutralización de algunos iones  $H^+$  al chocar con los bordes de los colimadores de la celda. Este fondo, para un haz de intensidad constante, se mantiene también constante y normalmente menor al 1% del haz total, por lo que puede ser sustraído antes del análisis de los datos.

A continuación se empieza a abrir la válvula que permite la entrada del gas al interior de la celda de reacción. Como se vió en la deducción de las ecuaciones (2.15) y (2.16), para determinar las secciones de despojo electrónico simple y doble de  $H^+$ , es necesario conocer la cantidad de  $H^+$  que después de la colisión perdieron uno ó dos electrones en función del espesor  $\Pi$  del blanco en el régimen de colisión simple; ya que la longitud recorrida por el proyectil es en primera aproximación la longitud geométrica de la celda de

7

reacción, siempre que la presión en el interior de la misma sea grande comparada con la presión en el resto del acelerador<sup>(6)</sup>, entonces el espesor del blanco queda únicamente en términos de la presión en el interior de la celda. Para determinar ésta presión se utiliza un barómetro capacitivo, el cual mide la presión a través de la capacitancia que hay entre una placa conductora y un diafragma que se acerca ó separa de acuerdo a la presión ejercida sobre éste. Las especificaciones del fabricante indican que el error asociado a la lectura de la presión es menor al 0.1%.

Al abrir la válvula que permite el paso del gas blanco a la celda de reacción, es necesario esperar aproximadamente 1 minuto, tiempo en el que se establece un equilibrio entre el flujo de gas que pasa por la válvula y el evacuado por el sistema de vacío. Después de transcurrido este tiempo se obtiene una presión uniforme en la celda, lo que conduce a una lectura más confiable de la misma. Comunmente la presión mínima en el blanco fué de aproximadamente  $1 \times 10^{-5}$  Torr. Una vez que la lectura de presión en el control del barómetro se estabiliza en algún valor, se proporciona este dato manualmente a una computadora, la cual, mediante un puerto de comunicaciones en el que se tiene instalado el sistema de adquisición de datos *Keithley modelo 570*, acciona un control de tiempo en el que se ha seleccionado previamente un intervalo de tiempo. De acuerdo a las condiciones de estabilidad en el haz, se trabaja en un intervalo que puede ir de 10 a 80 segundos. El timer envía una señal de inicio a los contadores y al finalizar el intervalo éstos dejan de registrar la llegada de pulsos; el número

7

de partículas registrado por cada contador, así como la presión en la celda de reacción, se envían automáticamente a un archivo de datos para su análisis posterior. En el apéndice "A" se proporciona un listado del programa escrito en language QBASIC por medio del cual se tomaron y analizaron los datos del despojo electrónico simple y doble del ion H<sup>+</sup> en los diferentes gases empleados como blanco.

El proceso descrito en el párrafo anterior se repite, después se abre un poco más la válvula, incrementando la presión en la celda, se espera a que la presión se estabilice y se introduce este dato en el programa. Nuevamente se inicia el registro de las partículas neutras y cargadas, etc.. La presión se incrementa hasta un valor de  $9 \times 10^{-4}$  Torr a fin de determinar el intervalo de presiones en el cual el régimen de colisión simple es válido. En lo sucesivo se restringe la toma de datos a este intervalo.

Finalmente los datos se representan en una gráfica de la razón de las intensidades de H<sup>0</sup> ó H<sup>+</sup> con respecto al haz incidente de H<sup>+</sup> en función de la presión, ( $I_{0,+}/I$  en función de p). A éstos se ajusta una recta por el método de mínimos cuadrados, y a partir de la pendiente de ésta se determina la sección transversal total del proceso correspondiente a ésta energía. Los resultados que se reportan en la sección II.5 son el promedio de una serie de mediciones a cada energía de los diferentes procesos estudiados en el intervalo de 1 a 5 keV. Los errores asociados a estas mediciones se discuten en la siguiente sección.

## II.4 ERRORES

Como se vió anteriormente, en el régimen de colisión simple, las secciones transversales totales de despojo electrónico simple y doble del ion H<sup>+</sup>, se calculan a partir de las ecuaciones:

$$f_0(\Pi) = \sigma_{.10} \Pi \quad (2.35)$$

$$f_1(\Pi) = \sigma_{.11} \Pi \quad (2.36)$$

ó en forma equivalente

$$\frac{N_0(\Pi)}{N_-(0)} = \Pi \sigma_{.10} \quad (2.37)$$

$$\frac{N_+(\Pi)}{N_-(0)} = \Pi \sigma_{.11} \quad (2.38)$$

donde  $N_0(\Pi)$  es el número de iones H<sup>+</sup> que pierden un electrón al interaccionar con el blanco cuando el espesor es  $\Pi$ ,  $N_+(\Pi)$  es el número de iones H<sup>+</sup> que pierden dos electrones bajo la condición anterior y  $N_-(0)$  es el número de iones H<sup>+</sup> que inciden sobre el blanco.

Recordando que  $\Pi = n\ell$  y suponiendo que el blanco se comporta como un gas ideal,  $n = P/kT$ , con P y T la presión y temperatura del blanco respectivamente y k la constante de Boltzmann, entonces se pueden reescribir las ecuaciones anteriores en la forma

$$\frac{N_0(P)}{N_-(0)} = \left( \frac{\ell \sigma_{-10}}{kT} \right) P \quad (2.39)$$

$$\frac{N_+(P)}{N_-(0)} = \left( \frac{\ell \sigma_{-11}}{kT} \right) P \quad (2.40)$$

al graficar la fracción  $N_0(P)/N_-(0)$  ó  $N_+(P)/N_-(0)$  en función de la presión  $P$ , se obtiene una línea recta cuya pendiente es:

$$\text{Pendiente} = \frac{\ell \sigma_{-1i}}{kT} \quad i = 0, 1 \quad (2.41)$$

La sección transversal se despojo electrónico simple ó doble es entonces:

$$\sigma_{-1i} = \left( \frac{kT}{\ell} \right) \times \text{Pendiente} \quad i = 0, 1 \quad (2.42)$$

las cantidades involucradas en la determinación de las secciones transversales totales  $\sigma_{-1i}$ ,  $i = 0, 1$ . son: número de partículas neutras ó cargadas que llegan a los detectores ( $N_0(P)$ ,  $N_+(P)$ ), número de iones  $H^+$  que inciden sobre el blanco ( $N_-(0)$ ), longitud efectiva ( $\ell$ ), temperatura ( $T$ ) y presión ( $P$ ) del blanco.

El número de partículas registrado por el sistema de detección tiene asociado un error relativo que varía de acuerdo a una distribución estadística de Poisson como  $N^{-1/2}$ . Comunmente las cuentas registradas fueron del orden de  $10^3$  a  $10^5$  lo que hace que este error sea considerablemente pequeño.

En el caso del número de iones  $H^+$  que inciden en el blanco ( $N_-(0)$ ) el error se asocia de manera distinta. Como se mencionó anteriormente, el haz presenta variaciones en su intensidad debido

7

a la cantidad de parámetros involucrados en su obtención, y el tiempo empleado para la toma de una serie de datos de intensidad vs. presión es aproximadamente de 30 a 80 minutos, por lo que al terminar la toma de datos y medir nuevamente el número de iones H<sup>+</sup> que inciden en el blanco se obtiene en general un valor distinto al que se tenía al inicio; cuando el número de iones H<sup>+</sup> registrado al final de la toma de datos no difiere en más del 10% del valor inicial, los datos son analizados, en caso contrario éstos se deshechan.

Aún cuando el control electrónico del barómetro capacitivo presenta la lectura de presión con 4 dígitos, el último de ellos es inestable durante el intervalo de tiempo en el que se registran los productos en la cámara de detección, por lo cual únicamente se consideran significativos los tres primeros. La resolución de una parte en 10<sup>3</sup> que corresponde con el máximo error relativo garantizado por el fabricante es lo que se considera como error asociado a la lectura de presión de la celda de reacción, es decir 0.1%.

Para el cálculo de las secciones transversales interviene la temperatura T del gas en la celda de reacción, se supone que este se encuentra a la temperatura ambiente la cual es bastante estable ya que la construcción del laboratorio no permite variaciones mayores al 2%.

En la ecuación (2.42) la magnitud  $l$  es la longitud recorrida por el proyectil a través del blanco; para calcular las secciones transversales se reemplaza por la longitud geométrica de la celda

de reacción (2.54 cm). Esta aproximación involucra la introducción de un error sistemático menor al 4% <sup>(6)</sup>.

Cuando se hace la suposición de una densidad de partículas en el blanco pequeña, y se desprecian los términos de orden mayor o igual a 2 en el desarrollo de las exponenciales de las ecuaciones (2.35) y (2.36), esta aproximación involucra un error sistemático en la determinación de las secciones transversales; la posibilidad de que ocurran colisiones múltiples en el blanco se refleja en un comportamiento no lineal en la dependencia de las fracciones  $N_0(P)/N(0)$  y  $N_+(P)/N(0)$  en función de  $P$ , éste y otros factores como son variaciones aleatorias en la intensidad del haz y en la presión del blanco pueden ser evaluados mejor al determinar la incertidumbre en la pendiente de la recta ajustada por mínimos cuadrados; el error relativo asociado a esta cantidad fué menor al 9.2% en todos los casos.

De lo anterior, el error relativo correspondiente a las secciones transversales de despojo electrónico simple y doble es:

$$I_r(\sigma_{-1f}) = I_r(T) + I_r(l) + I_r(Pendiente)$$

Un aspecto importante en la determinación de las secciones transversales totales de despojo electrónico simple y doble del ion  $H^+$  en los distintos blancos empleados es la medición de las intensidades totales  $N_0(P)$ ,  $N_+(P)$  y  $N(0)$ . La cantidad total de iones negativos  $N(0)$  que inciden sobre el blanco, como se mencionó anteriormente, se mide en el detector central, y al desviar el haz hacia el detector lateral, el número de cuentas es, dentro de las

variaciones típicas del haz, el mismo. Del perfil del haz de la figura (II.15), puede verse que el "ancho" de éste, es aproximadamente 10 veces menor que el diámetro del detector; esto garantiza que en realidad se registra la llegada de todos los iones  $H^+$  que inciden en el blanco. Con respecto al número de iones  $H^+$  que después de la colisión pierden uno ó dos electrones, una gráfica típica donde se muestran las cantidades  $N_-(P)$ ,  $N_0(P)$ ,  $N_+(P)$  así como la suma  $N_-(P) + N_0(P) + N_+(P)$  en función de  $P$  se da en la figura (II.18), donde se puede ver que la suma de partículas registradas negativas, neutras y positivas es aproximadamente constante e igual al número de iones  $H^+$  que inciden en el blanco. Esto significa que el número de partículas que, debido a la dispersión con el blanco no llegan a los detectores, es pequeño.

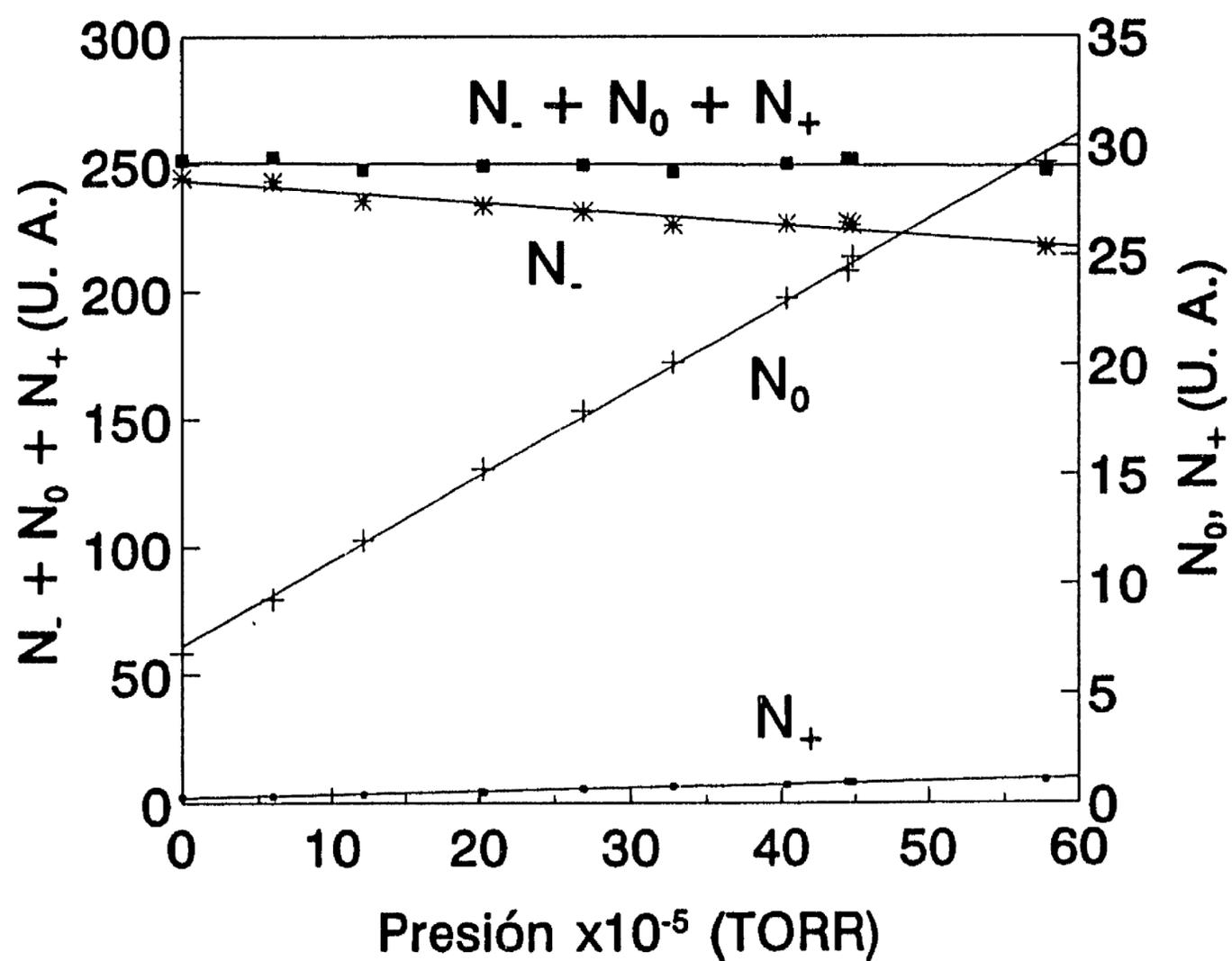
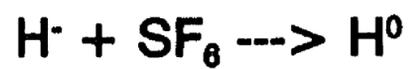


Fig. II.18

Cantidades totales de particulas negativas, neutras, y positivas,  $N(P)$ ,  $N_0(P)$ , y  $N_+(P)$ , respectivamente, así como la suma de estas  $N(P) + N_0(P) + N_+(P)$

## II.5 RESULTADOS

Como se mencionó anteriormente, el método para obtener las secciones de despojo electrónico simple y doble de H<sup>+</sup> en los distintos gases, fué trabajando en el régimen de colisión simple, por lo que el primer paso es determinar experimentalmente el intervalo de presiones en el cual esta condición es válida. En la figura II.19 se muestra un ejemplo de cómo se determinó el régimen de colisión simple cuando se trabajó con SF<sub>6</sub> en la celda de reacción. Se puede ver que para presiones mayores ó iguales a 8x10<sup>-4</sup> Torr, el crecimiento de la fracción f<sub>0</sub> del haz que se neutraliza ya no es lineal, y por esta razón se decidió trabajar en el intervalo de 0 a 6x10<sup>-4</sup> Torr. Cuando se empleó CO ó CH<sub>4</sub> como blanco, se incrementó la presión del blanco hasta 9x10<sup>-4</sup> Torr sin observar un cambio en el comportamiento lineal de las fracciones f<sub>0</sub>; de cualquier forma, a fin de que la longitud geométrica y efectiva de la celda de reacción no difieran más de lo establecido en la sección anterior, se decidió trabajar en el intervalo de 0 a ≈4x10<sup>-4</sup> Torr.

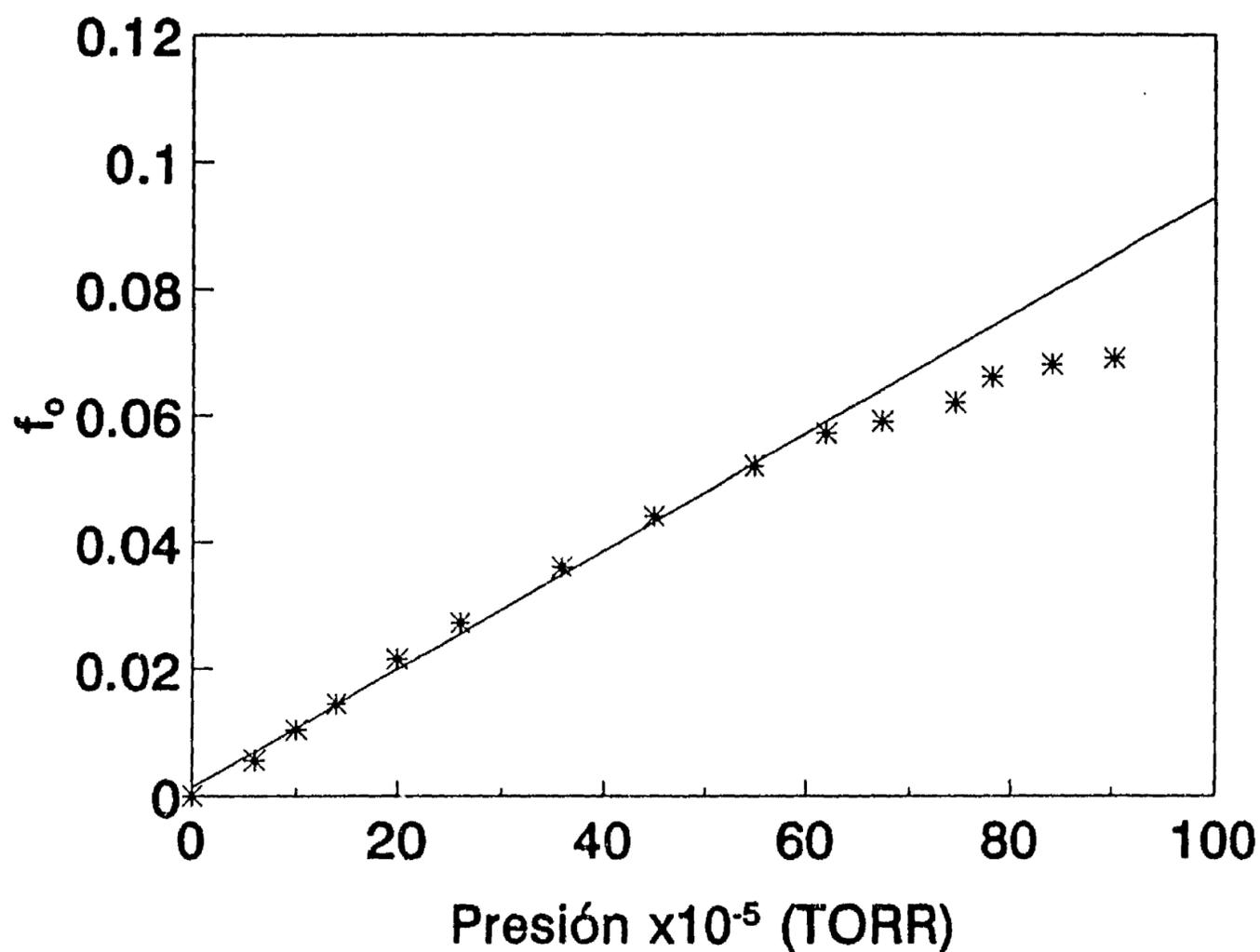


Fig. II.19

Determinación del régimen de colisión simple para  $\text{H}^-$  incidiendo en  $\text{SF}_6$ .

En la figura II.20(a), se muestra un ejemplo de las gráficas de las fracciones  $f_0$  del haz que se neutraliza, en función de la presión en el blanco cuando éste fué  $\text{SF}_6$ . A partir de las pendientes de estas rectas se calcularon las secciones totales de despojo electrónico simple. En la figura II.20(b), las secciones totales  $\sigma_{10}$  obtenidas se muestran en función de la energía de colisión. En esta

misma gráfica se presentan los resultados obtenidos al aplicar los modelos de Rapp-Francis y Meron-Johnson descritos en las secciones I.3 y I.4 del capítulo I, respectivamente. Los datos de esta gráfica se encuentran en las tablas TII.2, TII.3 y TII.6.

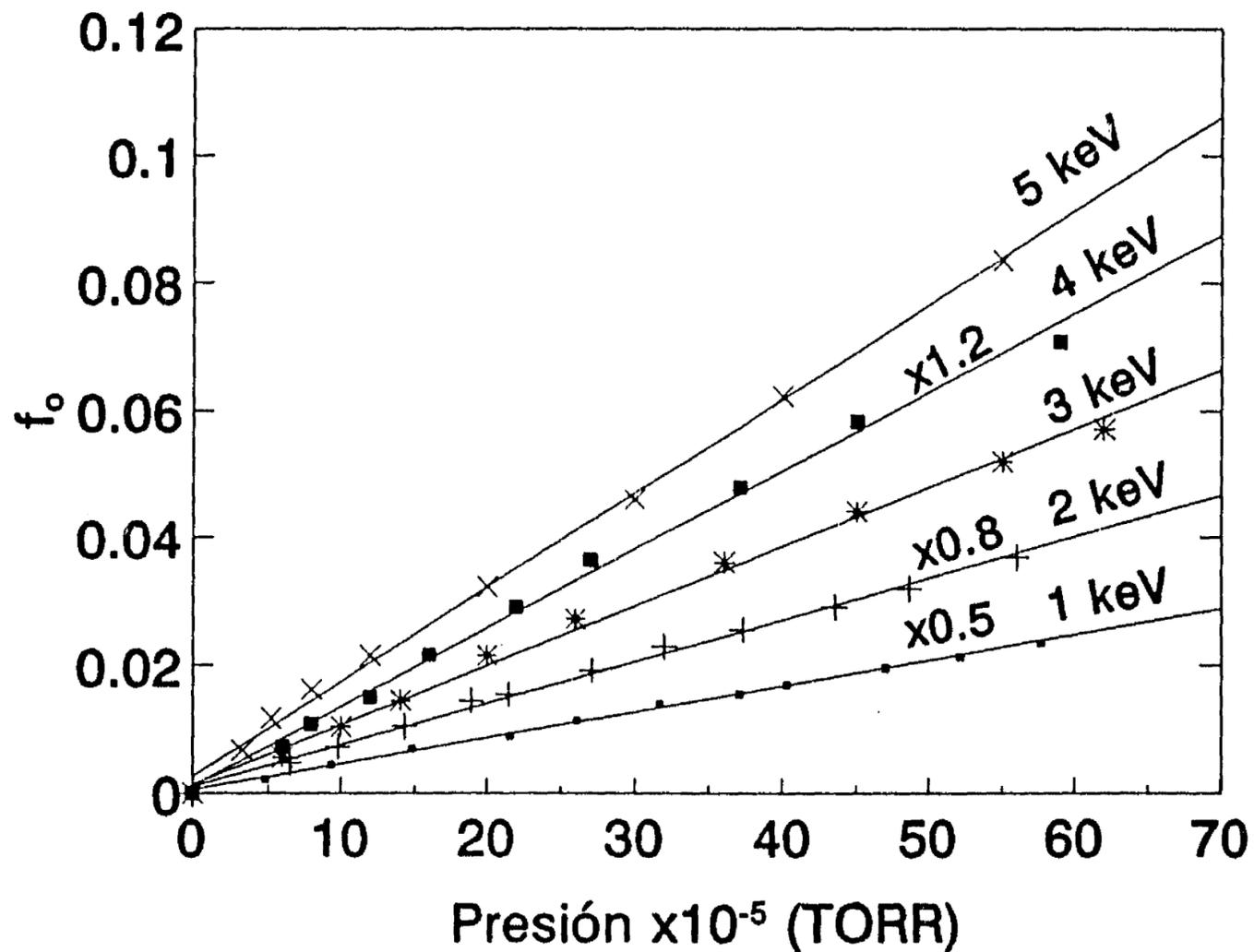
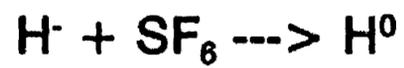


Fig. II.20(a)

Gráfica de la fracción de partículas  $\text{H}^+$  que pierde un electrón al pasar por un blanco formado por  $\text{SF}_6$ , en función de la presión de este gas.

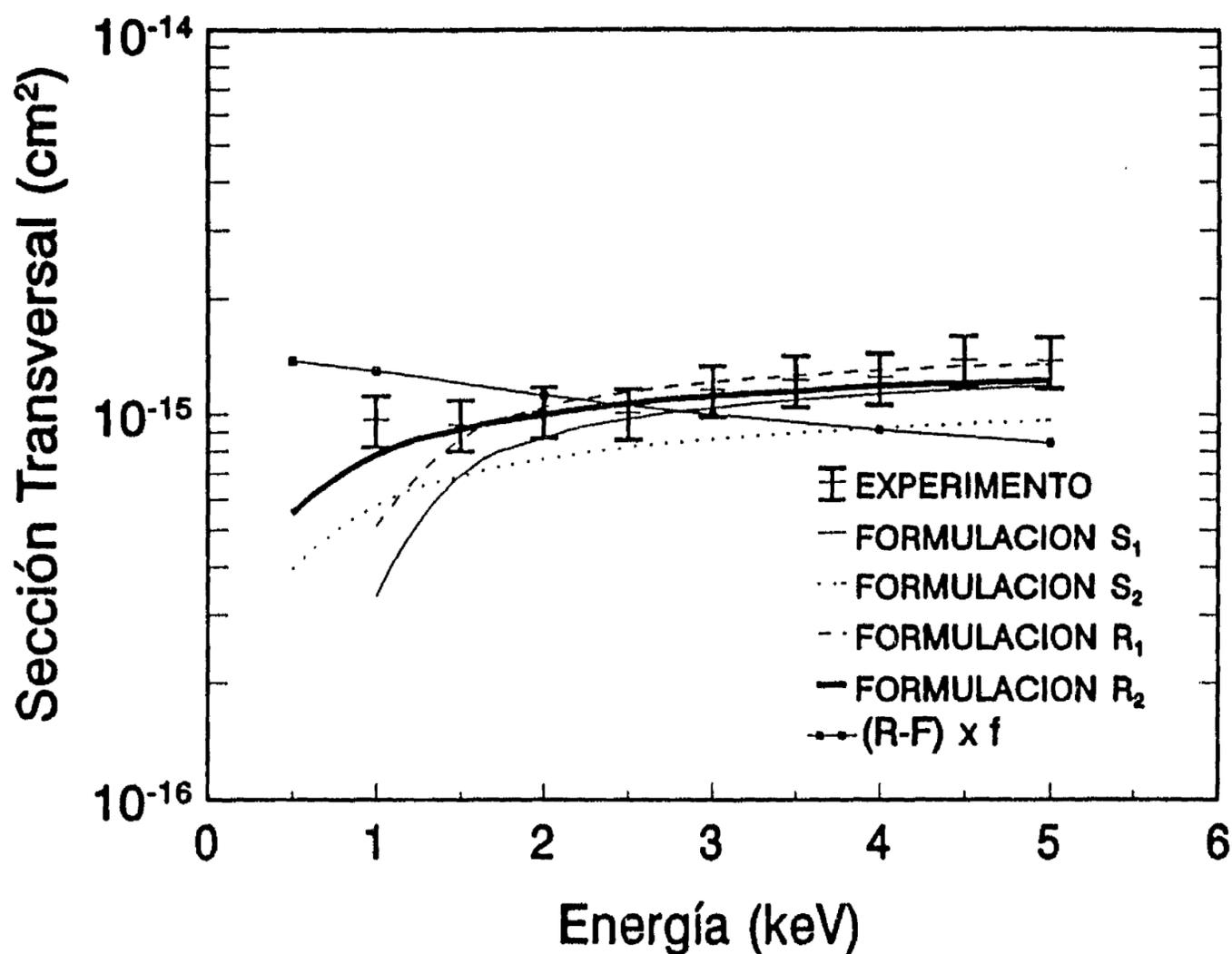
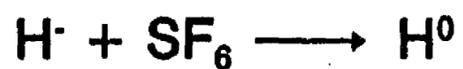


Fig. II.20(b)

Secciones transversales totales de despojo electrónico simple de  $\text{H}^+$  en  $\text{SF}_6$  en función de la energía de colisión. En esta gráfica se muestran los resultados experimentales (con barras de incertidumbre), así como los obtenidos al aplicar los modelos de Meron-Johnson, y de Rapp-Francis.

En las figuras II.21(a) y II.21(b) se muestran los resultados correspondientes cuando se empleó CO como blanco. En la figura II.21(b) se presentan los resultados obtenidos y se comparan con lo que se obtiene al aplicar el modelo de colisión libre en las cuatro formulaciones de Meron-Johnson ( $S_1$ ,  $S_2$ ,  $R_1$  y  $R_2$ ). En este caso no se

aplicó el modelo de Rapp-Francis ya que se desconoce la afinidad electrónica de CO. Los datos de esta gráfica se encuentran en las tablas TII.2 y TII.4.

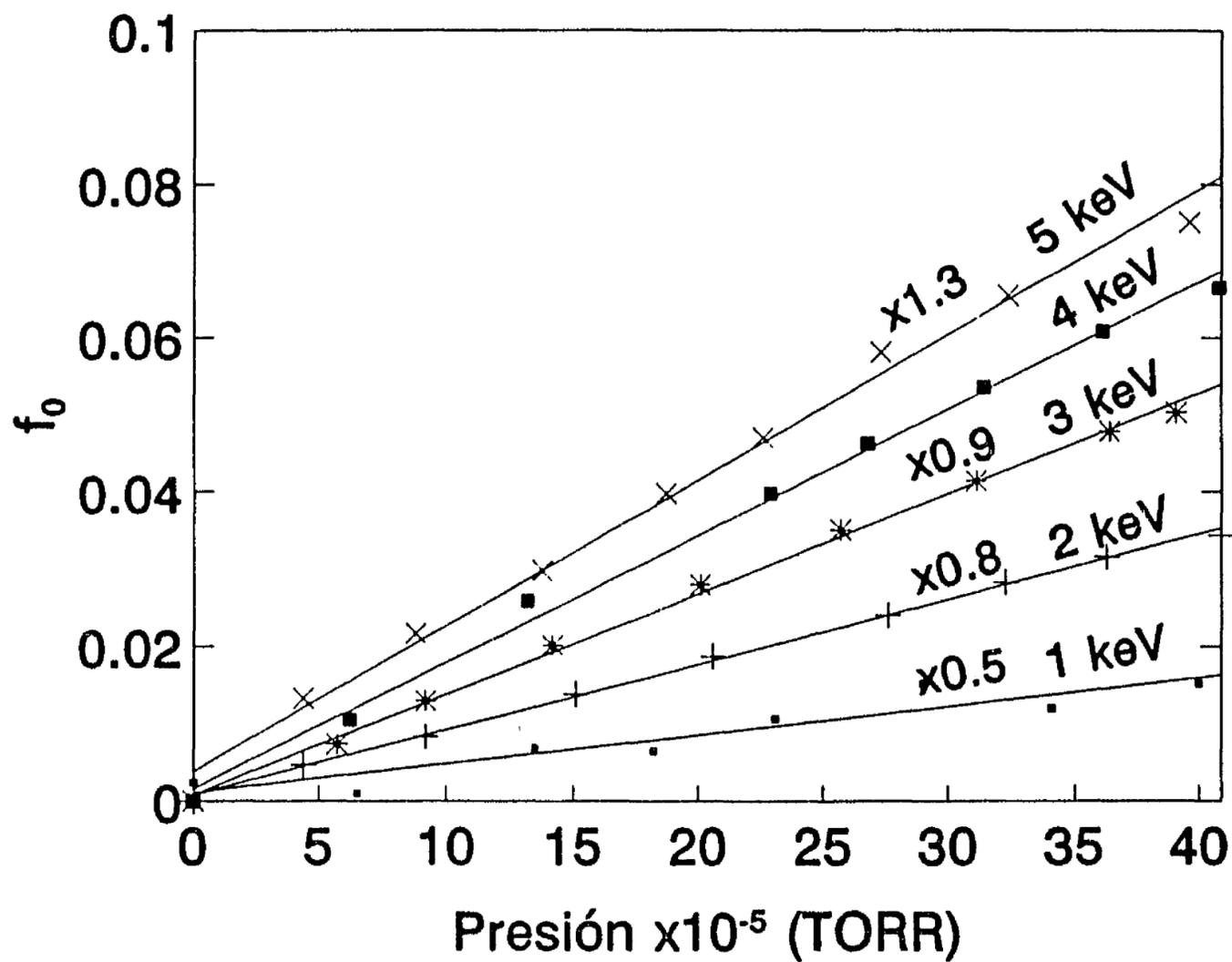


Fig. II.21(a)

Gráfica de la fracción de partículas  $\text{H}^-$  que pierde un electrón al pasar por un blanco formado por CO, en función de la presión de este gas.

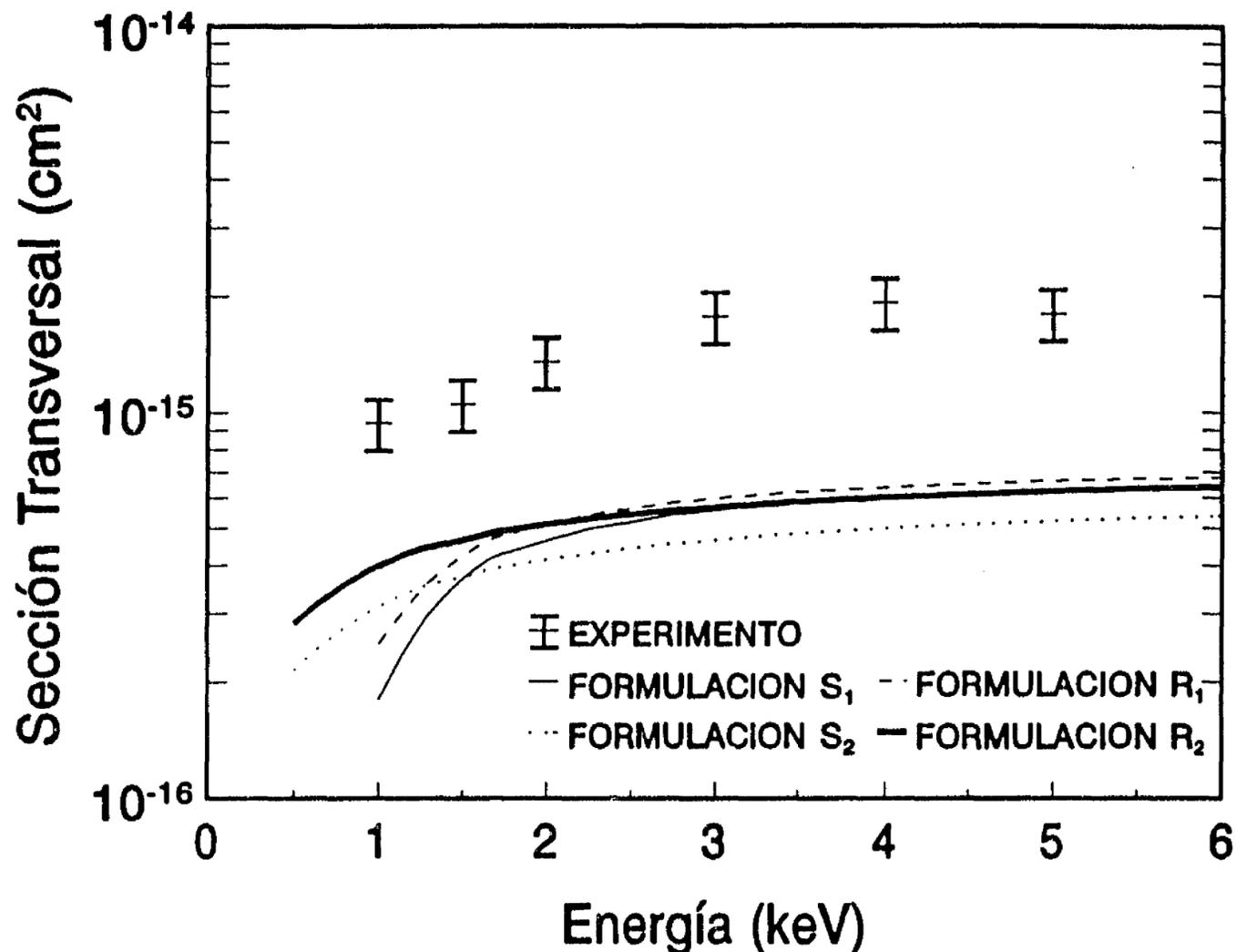
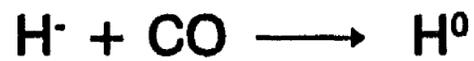


Fig. II.21(b)

Secciones transversales totales de despojo electrónico simple de  $\text{H}^+$  en  $\text{CO}$  en función de la energía de colisión. En esta gráfica se muestran los resultados experimentales (con barras de incertidumbre), así como los obtenidos al aplicar el modelo de Meron-Johnson.

De manera análoga se obtuvieron las gráficas de las figuras II.22(a) y II.22(b) cuando se trabajó con  $\text{CH}_4$  como blanco. Igual que en el caso de  $\text{CO}$ , tampoco se conoce la afinidad electrónica de  $\text{CH}_4$ , por lo que únicamente se comparan los resultados con lo que predice el modelo de colisión libre en las formulaciones  $\text{S}_1$ ,  $\text{S}_2$ ,  $\text{R}_1$  y  $\text{R}_2$ . Los

datos de la gráfica de la figura II.22(b) se encuentran en las tablas TII.2 y TII.5.

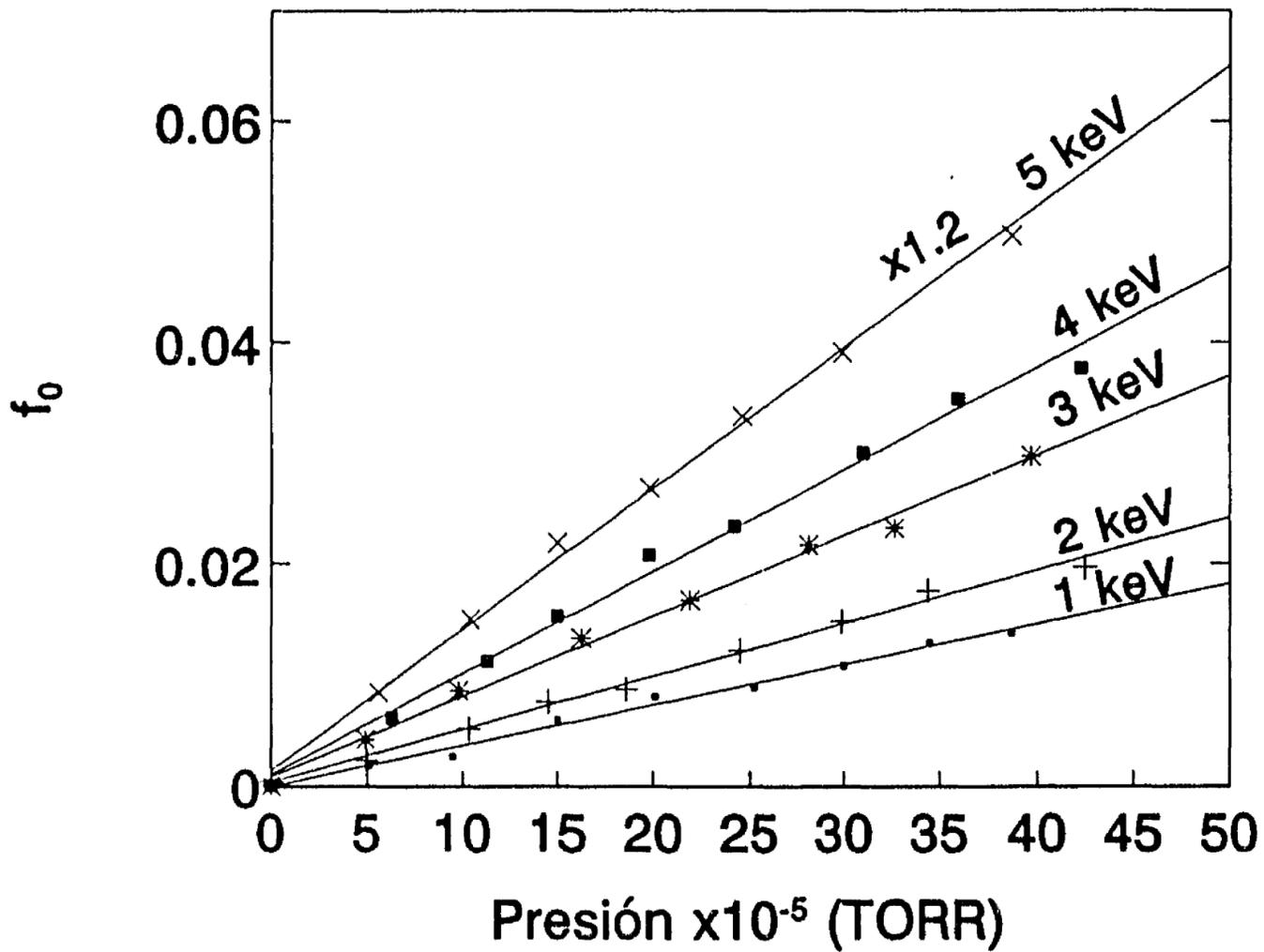
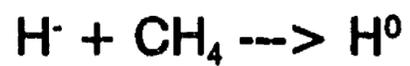


Fig. II.22(a)

Gráfica de la fracción de partículas  $\text{H}^+$  que pierde un electrón al pasar por un blanco formado por  $\text{CH}_4$ , en función de la presión de este gas.

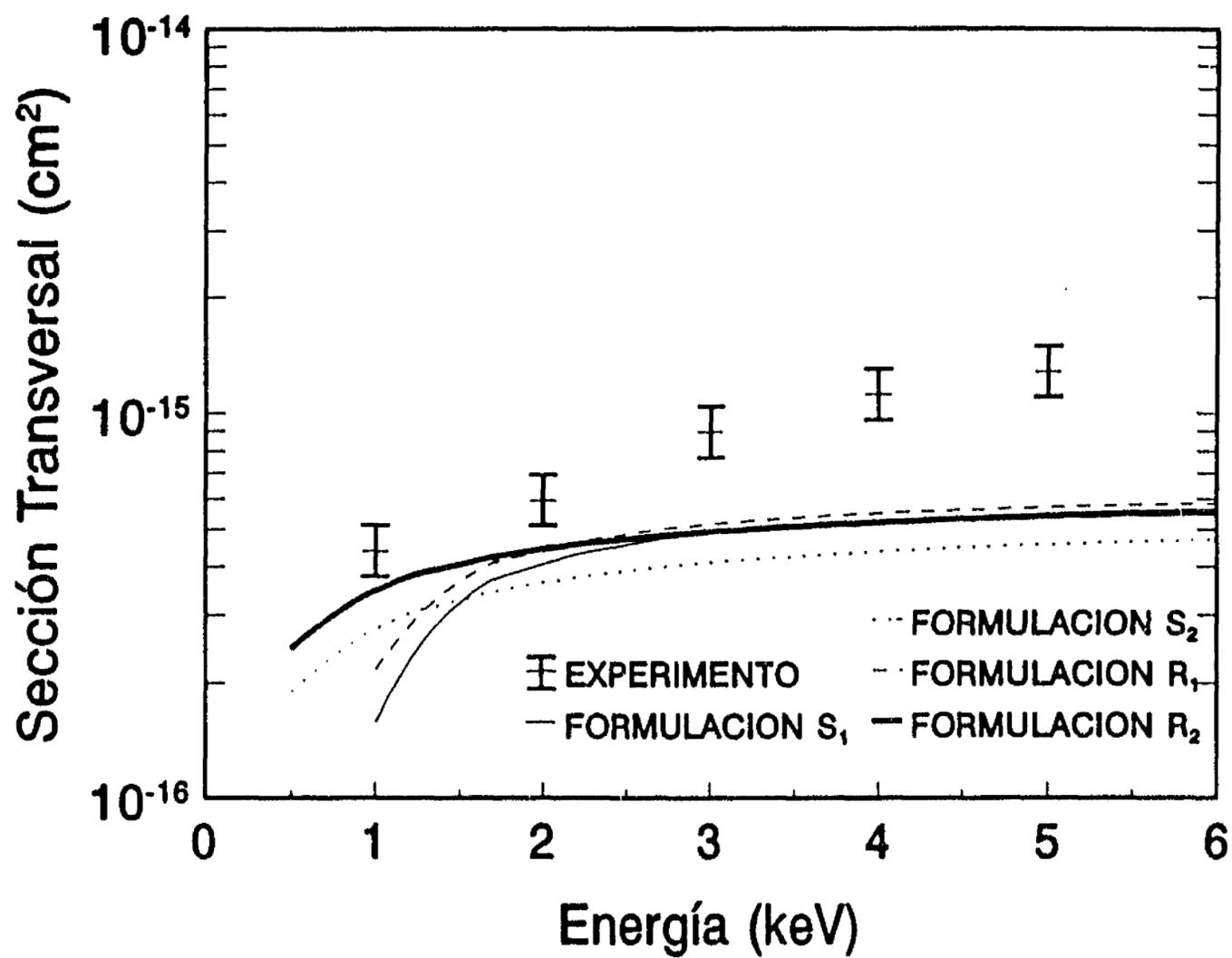
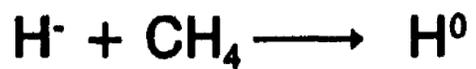


Fig. II.22(b)

Secciones transversales totales de despojo electrónico simple de  $\text{H}^+$  en  $\text{CH}_4$  en función de la energía de colisión. En esta gráfica se muestran los resultados experimentales (con barras de incertidumbre), así como los obtenidos al aplicar el modelo de Meron-Johnson.

Los resultados obtenidos para el doble despojo de  $H^-$  en  $SF_6$  se muestran en las figuras II.23(a) y II.23(b).

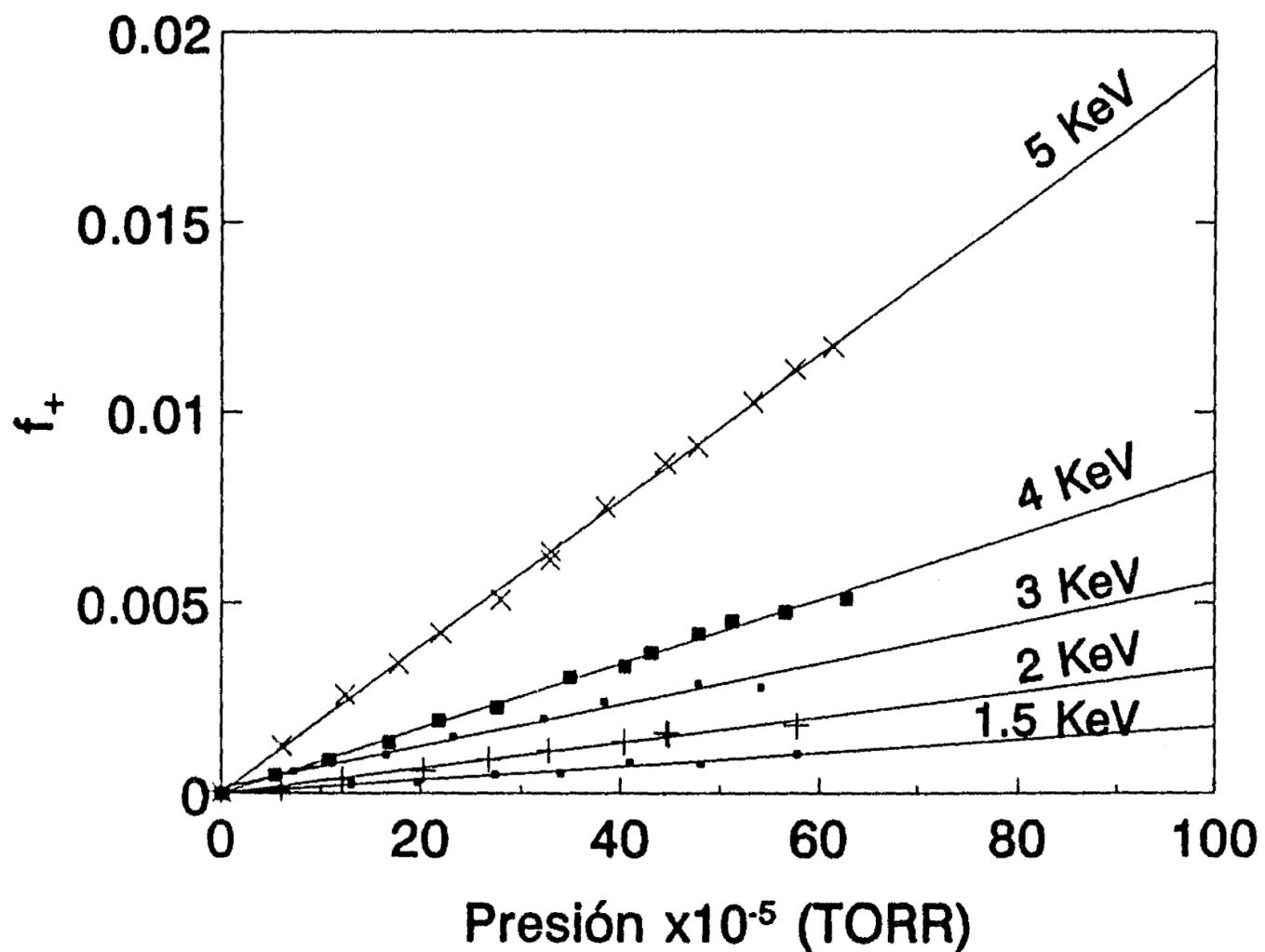
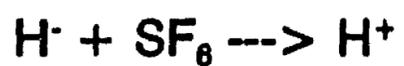


Fig. II.23(a)

Gráfica de la fracción de partículas  $H^-$  que pierde dos electrones al pasar por un blanco formado por  $SF_6$ , en función de la presión de este gas.

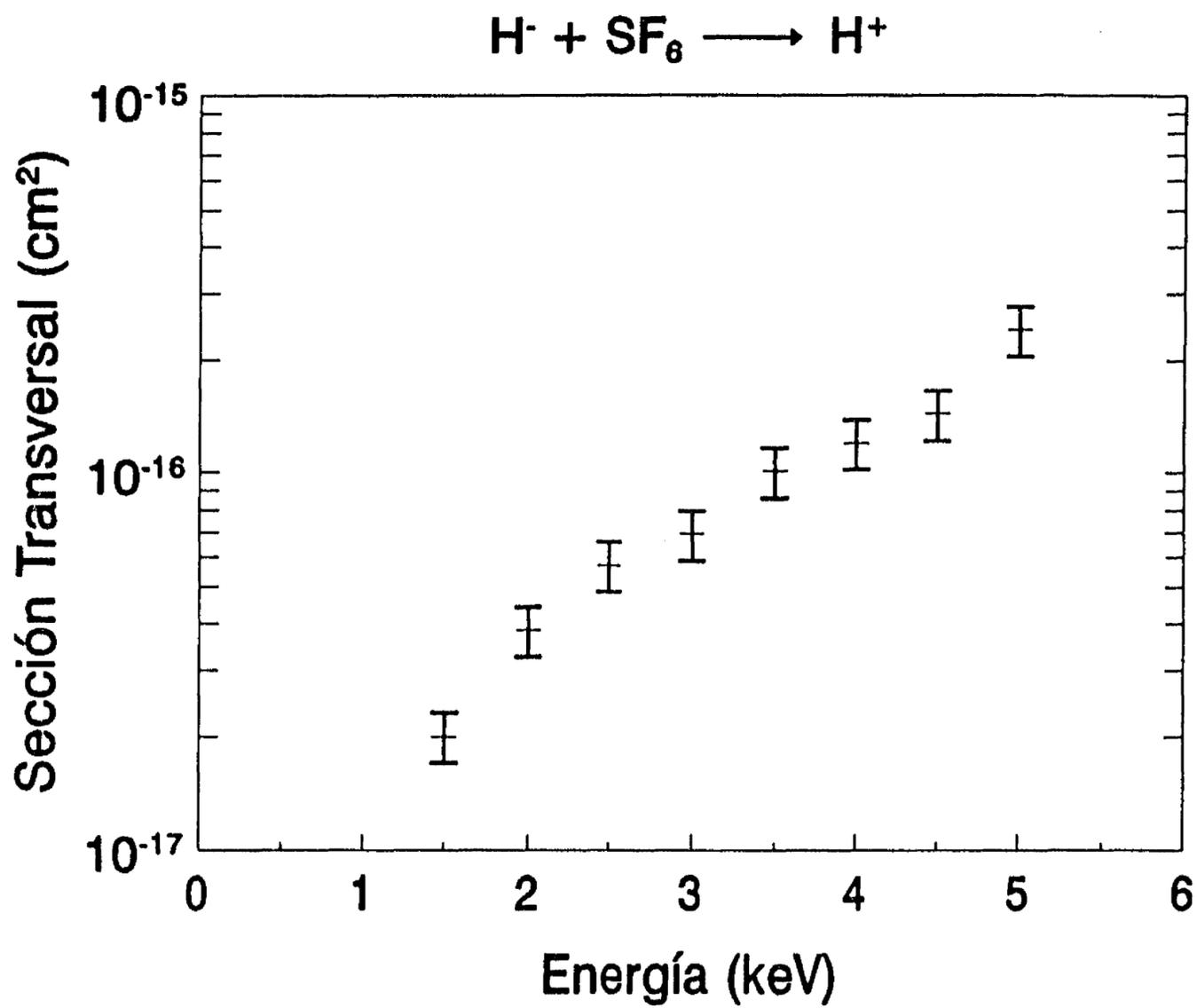


Fig. II.23(b)  
Secciones transversales totales de despojo electrónico doble de  $H^-$  en  $SF_6$ , en función de la energía de colisión.

Cuando se trabajó con CO como blanco se obtuvieron los resultados de las figuras II.24(a) y II.24(b).

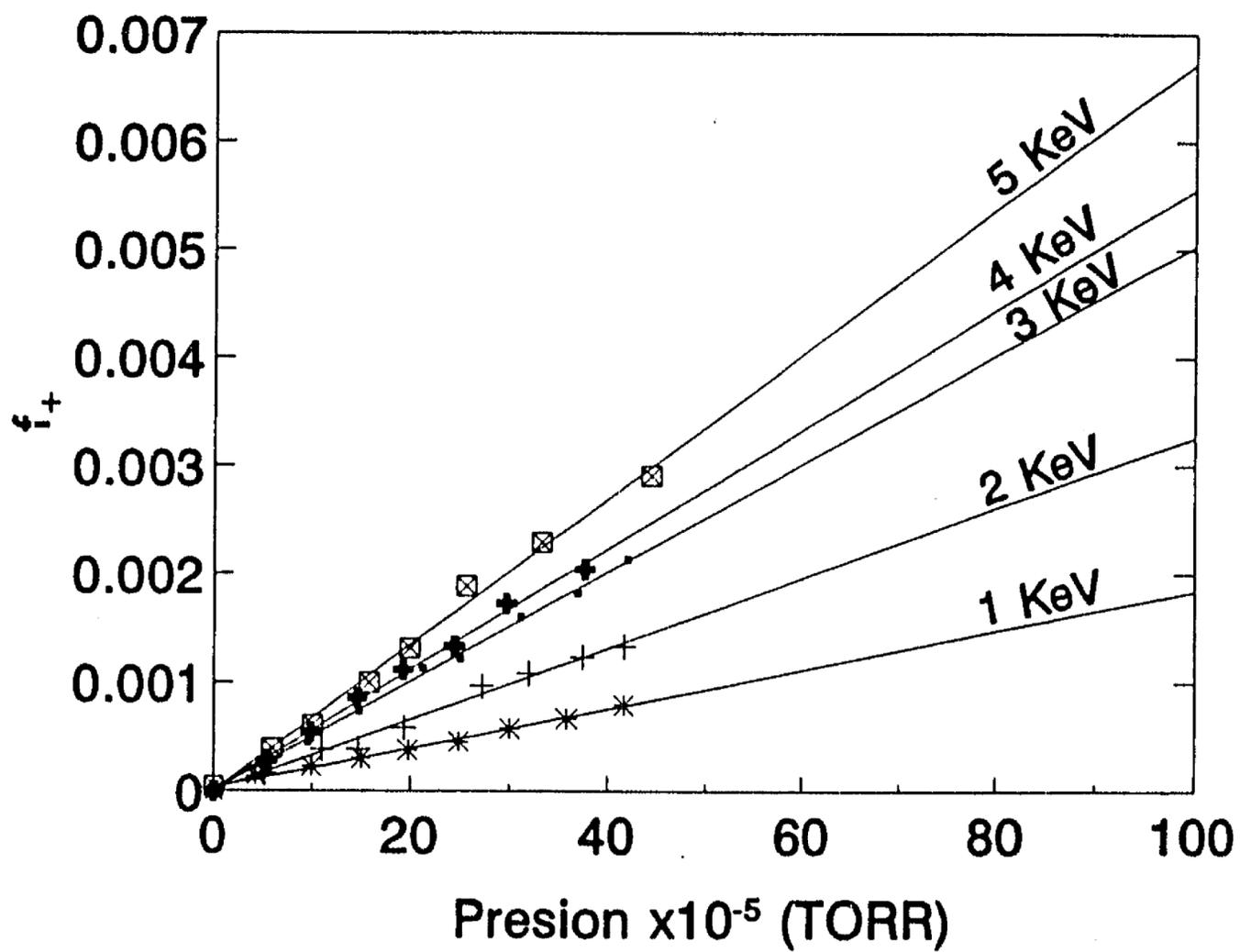


Fig. II.24(a)

Gráfica de la fracción de partículas  $\text{H}^-$  que pierde dos electrones al pasar por un blanco formado por CO, en función de la presión de este gas.

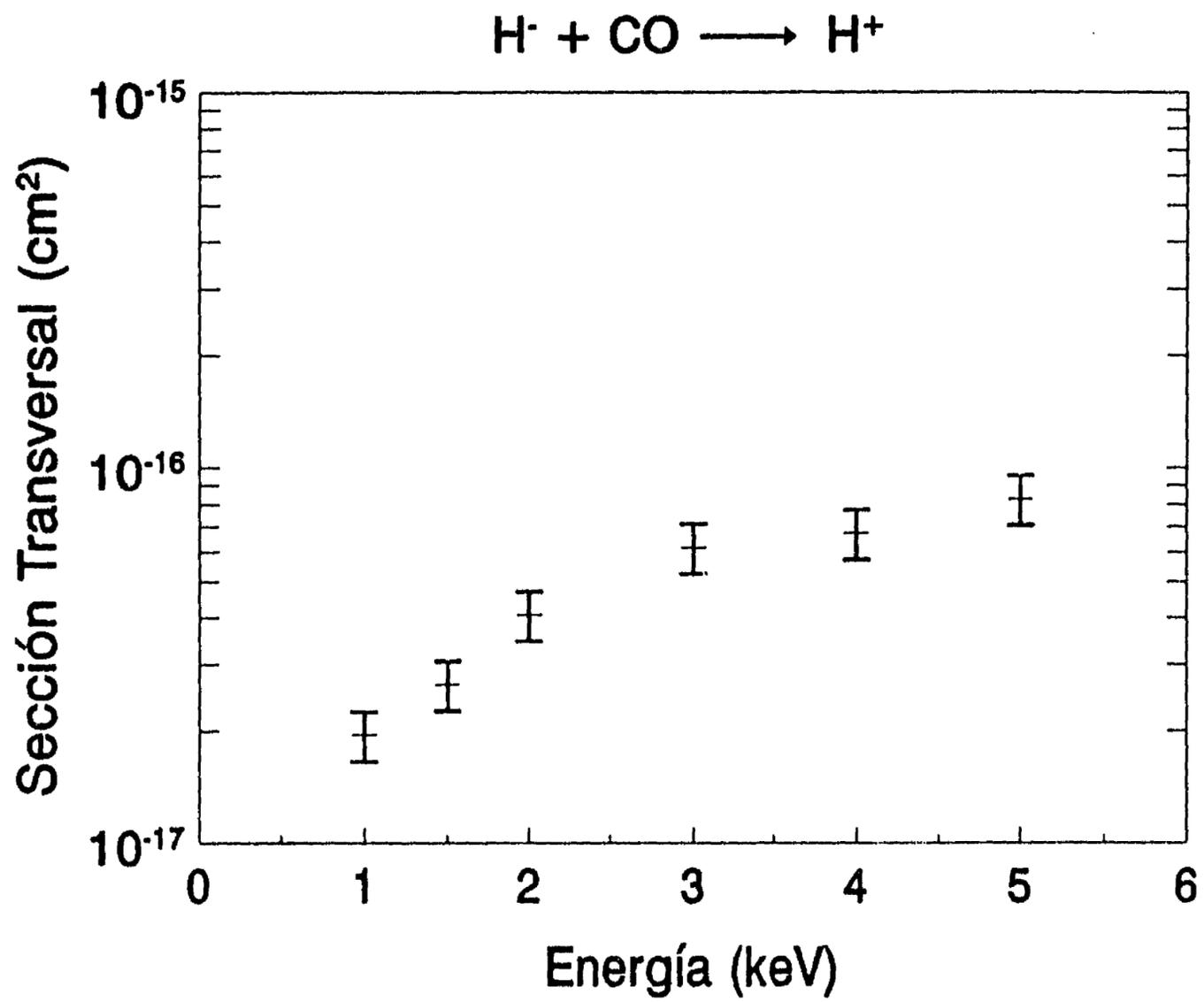


Fig. II.24(b)  
 Secciones transversales totales de despojo electrónico doble de  $H^-$  en CO, en función de la energía de colisión.

Al admitir  $\text{CH}_4$  en la celda de reacción se obtuvo lo que se muestra en las figuras II.25(a) y II.25(b). Los datos del proceso de doble despojo electrónico de  $\text{H}^-$  en  $\text{SF}_6$ ,  $\text{CO}$ , y  $\text{CH}_4$ , se encuentran en la tabla TII.7.

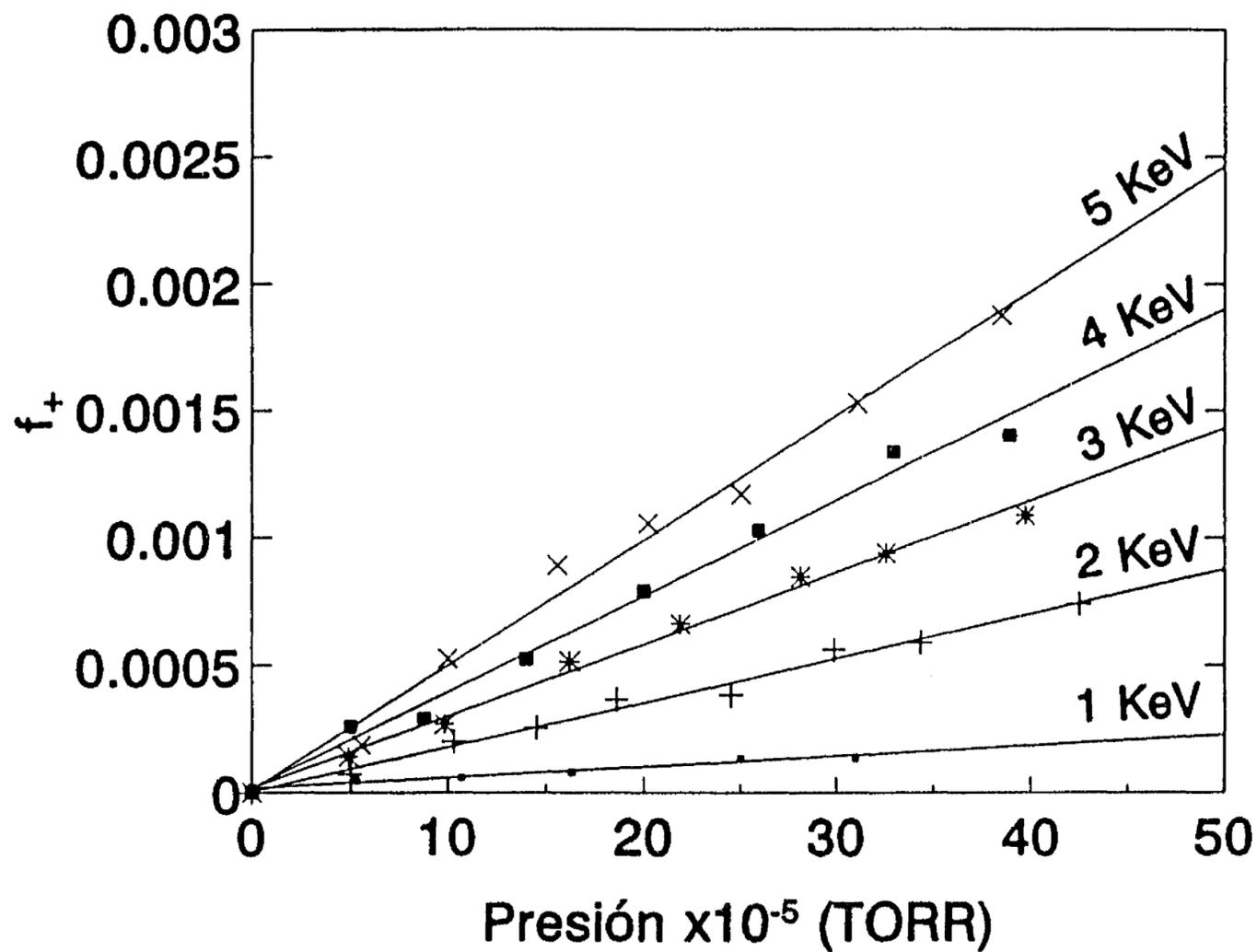
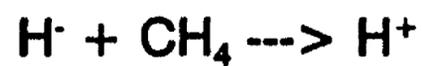


Fig. II.25(a)

Gráfica de la fracción de partículas  $\text{H}^-$  que pierde dos electrones al pasar por un blanco formado por  $\text{CH}_4$ , en función de la presión de este gas.

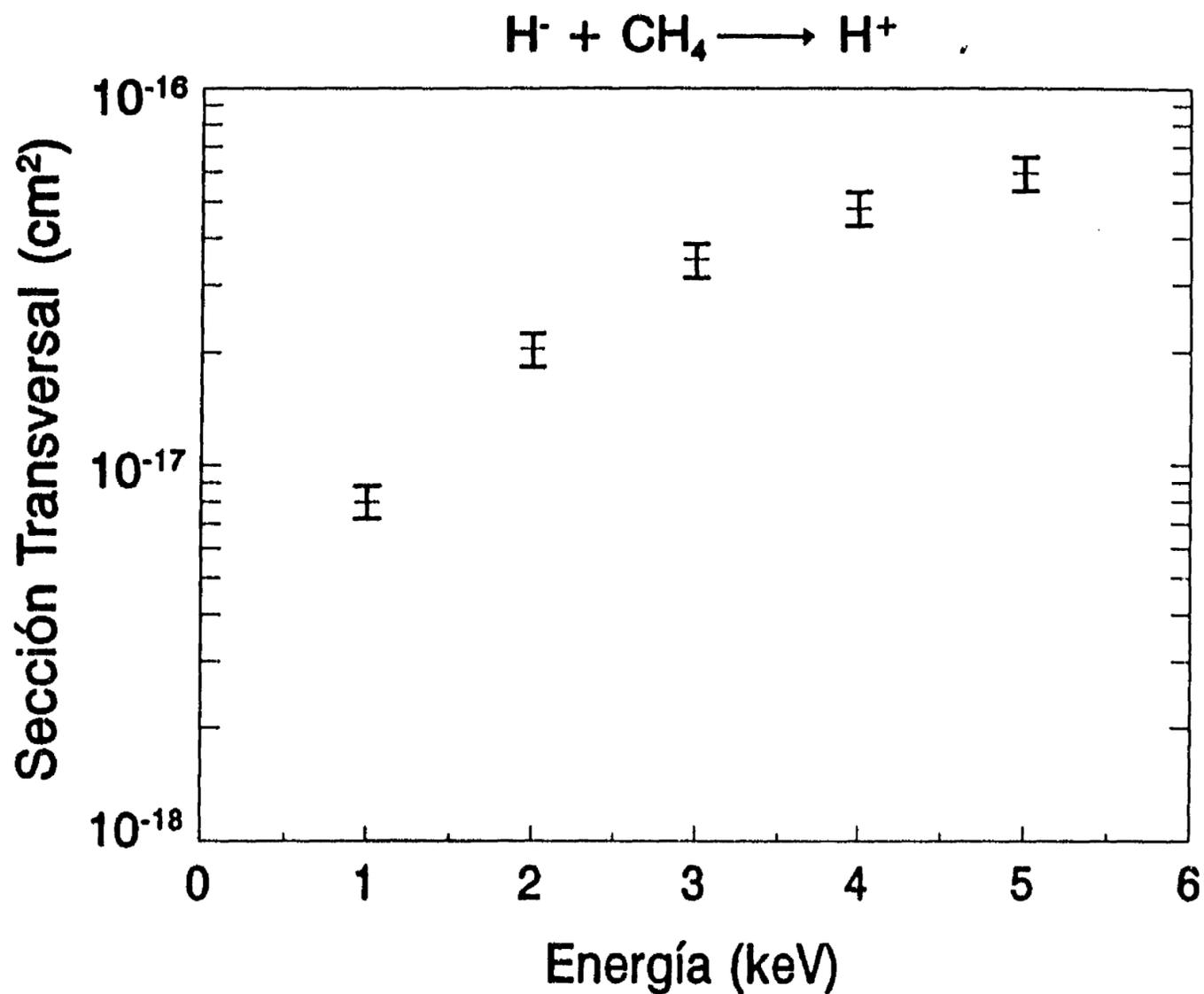


Fig. II.25(b)  
Secciones transversales totales de despojo electrónico doble de  $H^-$  en  $CH_4$ , en función de la energía de colisión.

Finalmente, en la figura II.26 se presentan las secciones transversales totales del despojo electrónico simple de  $H^-$  en CO en el intervalo de 1000 a 5000 eV obtenidas en este trabajo junto con los datos reportados por Huq et al (referencia 39 del capítulo I),

los cuales se encuentran en el intervalo de energías que va de pocos electrón-volts, hasta 300 eV, y los reportados por Pilipenko et al (referencia 27 del capítulo I) para energías de 3000 a 30000 eV.

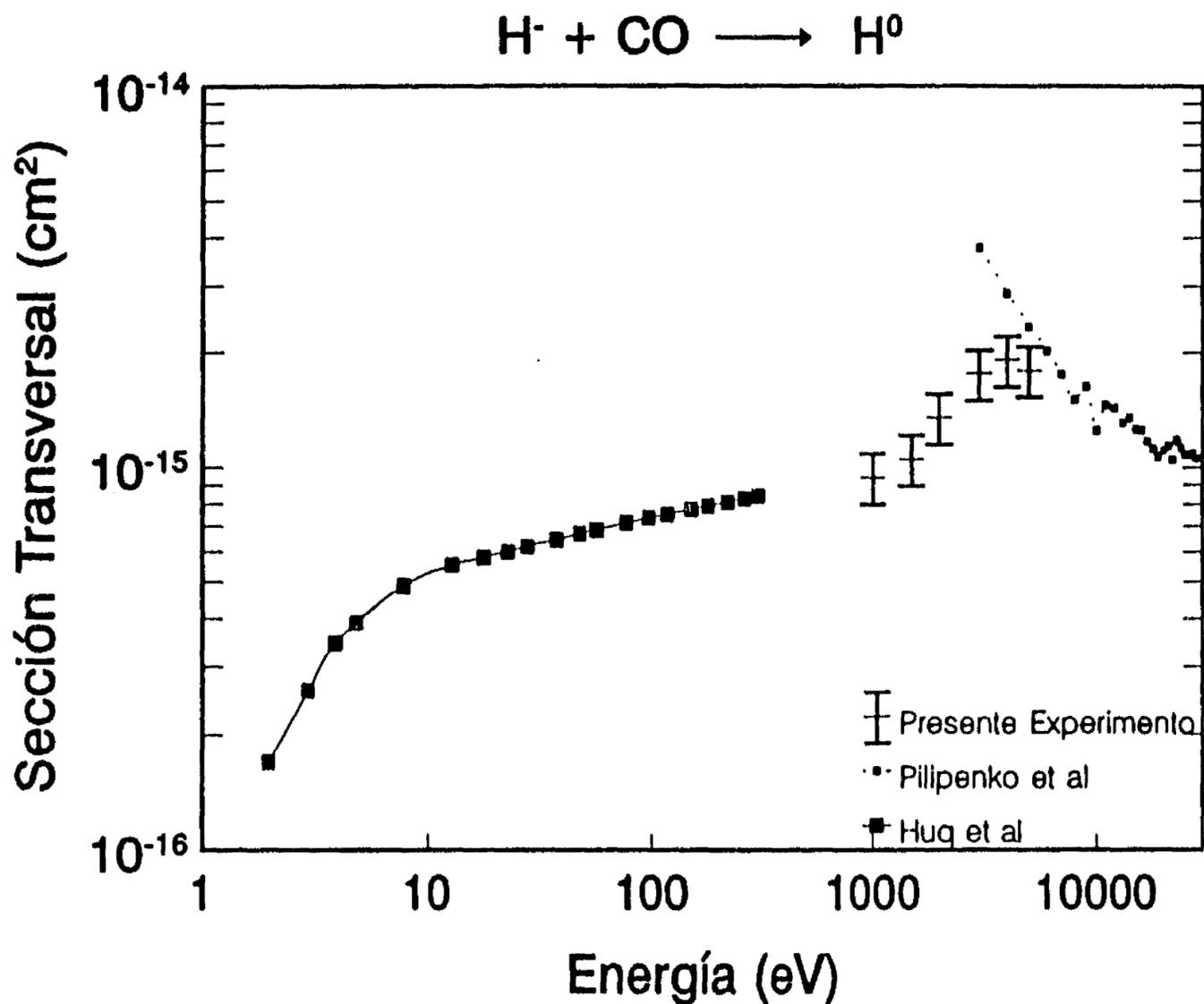


Fig. II.26

En esta gráfica se muestran los resultados obtenidos en este trabajo junto con los reportados por Hug et al a bajas energías y los de Pilipenko et al a energías entre 3000 y 30000 eV.

En la referencia (39) del capítulo I también se encontraron datos del despojo electrónico simple de  $H^+$  en  $CH_4$ , estos se encuentran en el intervalo de energías que va de pocos electronvolts hasta 300 eV y se muestran en la figura II.27 junto con los que aquí se obtuvieron.

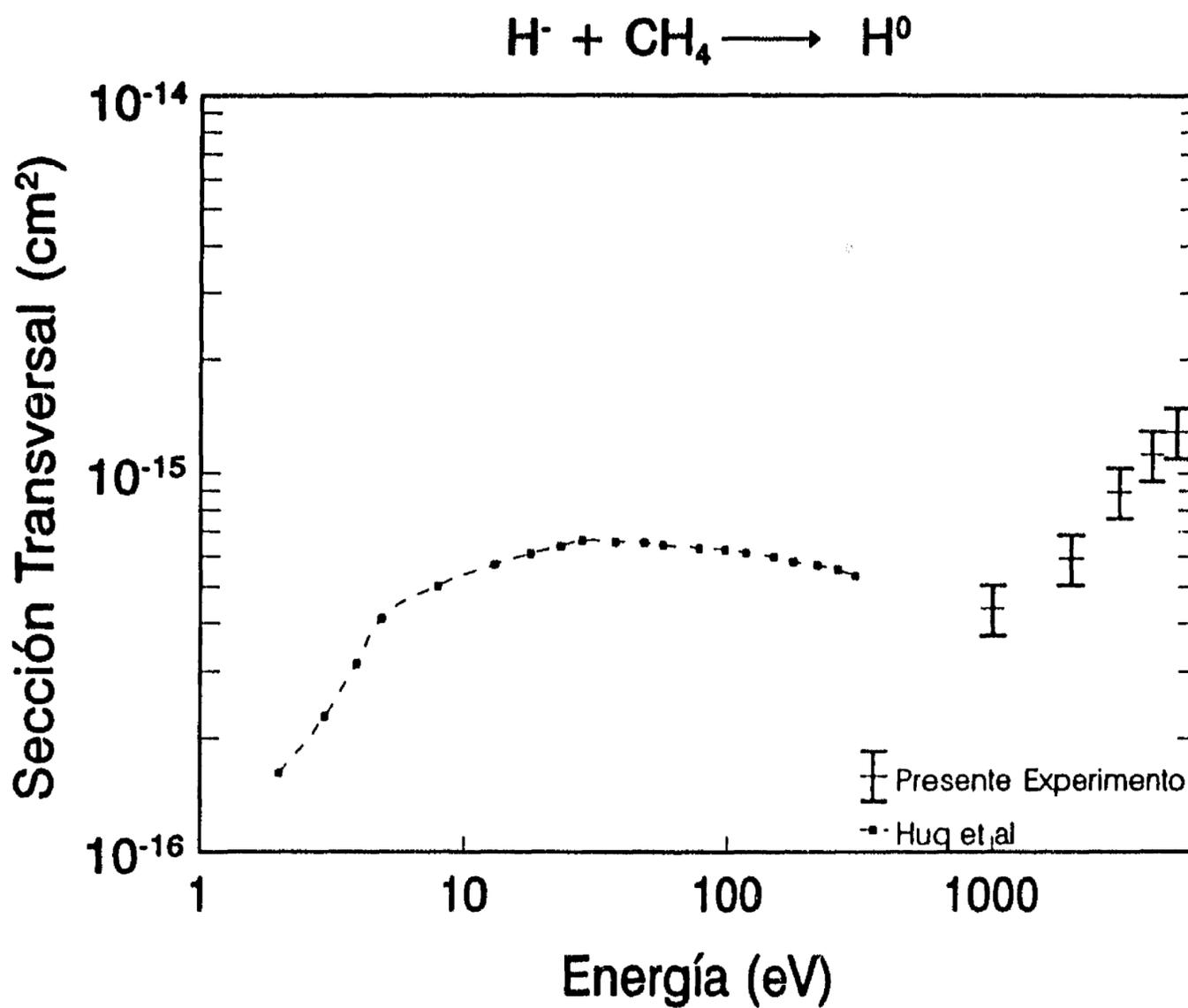


Fig. II.27

En esta gráfica se presentan los resultados obtenidos en este trabajo junto con lo reportado por Hug et al a bajas energías.

Tabla TII.2 Secciones de despojo electrónico simple del ion H<sup>-</sup> en diferentes blancos (Experimento).

E (keV)	H <sup>-</sup> + SF <sub>6</sub> $\sigma_{.10}(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	H <sup>-</sup> + CO $\sigma_{.10}(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	H <sup>-</sup> + CH <sub>4</sub> $\sigma_{.10}(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$
1	0.97	0.94	0.44
2	1.02	1.35	0.59
3	1.16	1.77	0.89
4	1.25	1.92	1.12
5	1.38	1.80	1.29

Tabla TII.3 Secciones de despojo electrónico simple del ion H<sup>-</sup> en SF<sub>6</sub> (Modelo de Colisión Libre).

E (keV)	S <sub>1</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	S <sub>2</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	R <sub>1</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	R <sub>2</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$
1	.336	.578	.508	.785
2	.868	.763	1.04	1.00
3	1.04	.860	1.21	1.12
4	1.13	.922	1.30	1.19
5	1.19	.965	1.35	1.23

Tabla TII.4 Secciones de despojo electrónico simple del ion H<sup>+</sup> en CO (Modelo de Colisión Libre).

E(keV)	S <sub>1</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	S <sub>2</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	R <sub>1</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	R <sub>2</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$
1	.179	.313	.250	.399
2	.462	.413	.510	.511
3	.555	.465	.595	.566
4	.601	.498	.637	.601
5	.629	.520	.662	.624

Tabla TII.5 Secciones de despojo electrónico simple del ion H<sup>+</sup> en CH<sub>4</sub> (Modelo de Colisión Libre).

E(keV)	S <sub>1</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	S <sub>2</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	R <sub>1</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$	R <sub>2</sub> $\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$
1	.157	.275	.216	.347
2	.405	.363	.440	.444
3	.486	.409	.513	.492
4	.526	.437	.549	.521
5	.550	.456	.570	.541

Tabla TII.6 Secciones de despojo electrónico simple del ion H<sup>+</sup> en SF<sub>6</sub> (Modelo de Rapp-Francis).

E (keV)	$\sigma$ (cm <sup>2</sup> ) x 10 <sup>-15</sup>
0.5	17.25
1	16.25
2	14.04
3	12.53
4	11.43
5	10.58

Tabla TII.7 Secciones de despojo electrónico doble del ion H<sup>+</sup> en diferentes blancos (Experimento).

E (keV)	H <sup>+</sup> + SF <sub>6</sub> $\sigma_{.10}$ (cm <sup>2</sup> ) x 10 <sup>-17</sup>	H <sup>+</sup> + CO $\sigma_{.10}$ (cm <sup>2</sup> ) x 10 <sup>-17</sup>	H <sup>+</sup> + CH <sub>4</sub> $\sigma_{.10}$ (cm <sup>2</sup> ) x 10 <sup>-17</sup>
1		1.94	0.80
2	3.83	4.05	2.04
3	6.90	6.12	3.50
4	12.0	6.70	4.78
5	24.1	8.27	5.94

## II.6 DISCUSION Y CONCLUSIONES

De la figura II.20(b) se puede ver que las secciones transversales de despojo electrónico simple cuando se trabajó con SF<sub>6</sub> como blanco tienen un valor casi constante, cercano a 10<sup>-15</sup> cm<sup>2</sup>, en el intervalo de energías de estudio. En esta gráfica se puede notar que el modelo de colisión libre en sus cuatro formulaciones predice secciones transversales cuyo comportamiento cualitativo es similar al que se obtiene en el experimento, más aún, la que presenta un acuerdo más cercano es la formulación R, que corresponde a una distribución de carga no singular, y una probabilidad de "ionización" que varía de manera gradual. En esta misma figura se presentan los resultados obtenidos al aplicar la teoría de intercambio de carga de Rapp-Francis, el factor estadístico  $f$  por el que se multiplican las secciones es de 8/100. Sin embargo el comportamiento cualitativo es diferente al que se obtiene en el experimento. El modelo de R-F es aplicable a procesos de intercambio de carga entre iones positivos y blancos atómicos, en el presente caso se ha aplicado el modelo haciendo una suposición bastante burda en la que se considera a la molécula SF<sub>6</sub> como un "átomo grande", y la colisión ocurre con un ion negativo (H<sup>-</sup>). El hecho de no existir acuerdo con el modelo de R-F con este tipo de procesos también puede ser indicio, simplemente de que el proceso de intercambio de carga no ocurre en el presente caso, y esto aparentemente es lo que indica el buen acuerdo con el modelo de

colisión libre de Meron-Johnson.

Para el doble despojo electrónico de  $H^+$  en  $SF_6$  (Fig. II.23(b)) se observa que las secciones transversales aumentan con la energía en un orden de magnitud dentro del intervalo de estudio. No se aplica ninguna teoría para el doble despojo electrónico, ni aún cuando se suponga que la formación de  $H^+$  ocurre mediante un proceso de doble intercambio ya que, se desconoce cualquier estado de  $SF_6^{2-}$ .

Cuando se tiene como blanco monóxido de carbono se puede ver que las secciones transversales de despojo electrónico de  $H^+$ , aunque varían muy poco con la energía de colisión, presentan un valor máximo de  $1.92 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$  a 4 keV. La comparación con el modelo de colisión libre que se presenta en la figura II.21(b) muestra que la teoría predice secciones transversales menores a las obtenidas experimentalmente por un factor entre 3 y 4. La comparación del comportamiento cualitativo que se muestra en la figura II.26 de las secciones de despojo electrónico simple con los datos de Hug et al (ref. 39 del capítulo I), obtenidos para energías de colisión de pocos electrón-volts a 300 eV muestra una tendencia similar, esto quiere decir que sería posible interpolar una curva suave en el intervalo de 300 eV a 1000 eV. Al comparar los resultados obtenidos con aquellos reportados por Pilipenko et al, se puede ver que no existe acuerdo cualitativo ya que el máximo debería estar a energías de colisión menores aún a 3 keV y el valor de la sección a esta energía es de aproximadamente  $2.87 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ , esto es, un factor de 1.5 veces mayor a lo obtenido en el presente experimento.

Las secciones de doble despojo electrónico en CO muestran un

comportamiento creciente con la energía, en este caso, las secciones transversales no crecen tanto como en el caso de SF<sub>6</sub>, solamente se tiene un incremento de un factor de aproximadamente 4.3 en el intervalo de estudio.

En la figura II.22(b) se puede ver que el comportamiento de  $\sigma_{.10}$  cuando se trabaja con CH<sub>4</sub> como blanco presenta un comportamiento monótono creciente con la energía de colisión en el intervalo de energías que aquí se estudia. En este caso también las secciones transversales calculadas con el modelo de colisión libre se encuentran por debajo de los valores experimentales, aunque en este caso la diferencia es de aproximadamente un factor de 1.7.

En la gráfica de la figura II.27 se puede ver, a partir del comportamiento cualitativo de las secciones de despojo electrónico simple entre los datos de Hug et al y los presentes datos, que la dependencia de  $\sigma_{.10}$  con la energía en el intervalo de 0.3 a 1 keV debe cambiar de decreciente a creciente, esto significa que en este intervalo el proceso ó mecanismo mediante el cual ocurre el despojo es diferente.

Finalmente, es importante mencionar que en el presente experimento, las secciones de despojo electrónico simple y doble que se han medido son un gran total de todos los posibles procesos que pueden dar origen a que H<sup>+</sup> pierda uno ó dos electrones, esto significa que no es posible diferenciar, entre otros, a los procesos de despojo colisional de los de intercambio de carga.

## BIBLIOGRAFIA.

- 1.- Ramírez H. "Características y producción del ion H" , Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM (1989)
- 2.- Septier, A., "Focusing of Charged Particles" Vol. II, Academic Press (1967).
- 3.- Harrower, G. A., Rev. of Scientific Inst. 26, 850 (1955)
- 4.- O'Hanlon, J. F. "A Users Guide to Vacuum Technology" J. W. & Sons (1980)
- 5.- Atomic Data Center (datos de la reacción  $H^+ + H_2 \rightarrow H^0$ )
- 6.- Rossano L. M. "Producción de iones negativos H<sup>-</sup> a bajas energías a partir de la reacción  $H^+ + Ar$  " Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM (1982).

# CAPITULO III

## DISOCIACION EN TRES CUERPOS DEL ION $H_3^+$

### III.1 ANTECEDENTES

En 1987 Martínez<sup>(1)</sup>, dentro del estudio de diferentes canales de disociación de iones hidrógenicos, realizó una revisión de los trabajos de tipo teórico y experimental en los que ha participado el ion molecular  $H_3^+$ . En este trabajo se hace referencia a los últimos cálculos que sobre el estado base del ion  $H_3^+$  se han realizado<sup>(2)</sup>, en los que se obtiene una energía de -1.334 hartree para una longitud de ligadura de 1.654 bohr, correspondiente al estado base de  $H_3^+$  en una configuración de triangulo equilátero, lo cual está en buen acuerdo con lo reportado por Goh y Swan<sup>(3)</sup>, quienes obtuvieron experimentalmente un valor de -1.33 hartree. Otros estudios<sup>(4)</sup> han mostrado que los modos normales de vibración para la molécula  $H_3^+$  en la configuración mencionada son: vibración totalmente simétrica ( $^1A'$ ) y la vibración doblemente degenerada ( $^1E'$ ) como se ilustra en la figura III.1

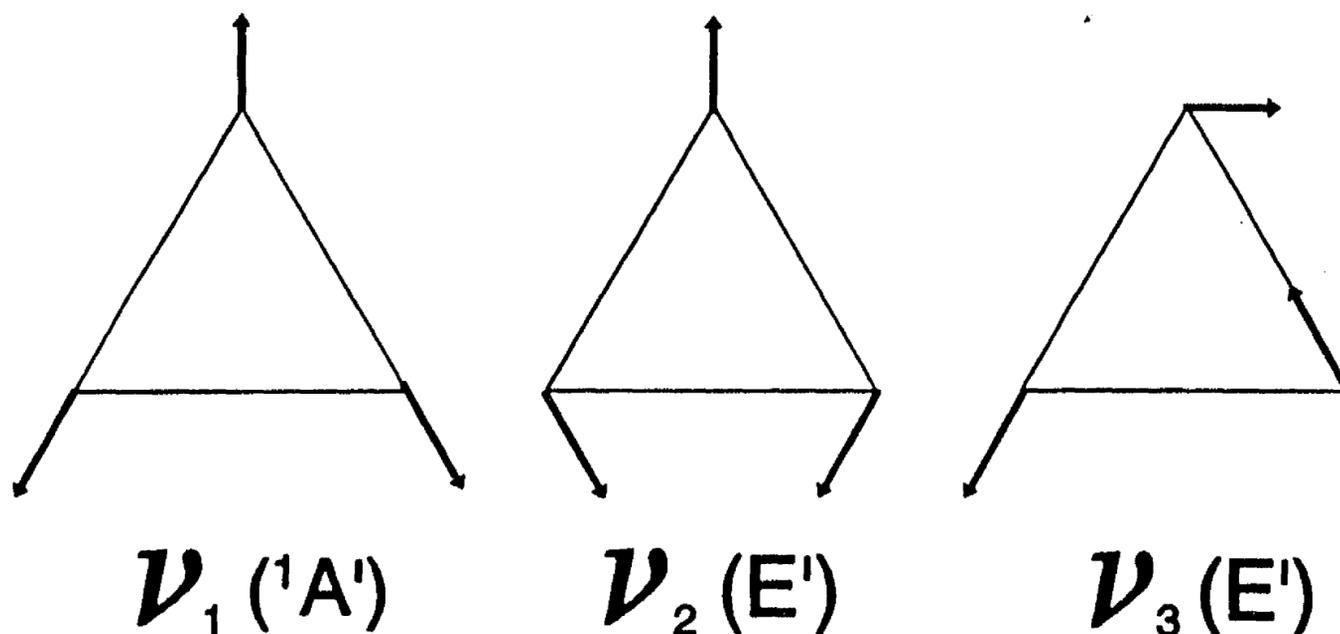
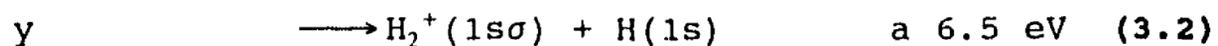


Fig. III.1

Modos normales de vibración de la molécula  $H_3^+$  en geometría triangular.

También se han calculado estados electrónicos excitados de este ion. Por ejemplo: Schaad y Hicks<sup>(6)</sup>, encontraron que la producción de  $H^+$  a partir de la disociación de  $H_3^+$  puede provenir de la excitación electrónica del estado  ${}^1A_1'$  al estado  ${}^1E'$ , ya que éste se disocia de las siguientes formas:



Por otro lado, Kawaoka y Borkman<sup>(6)</sup> encontraron que también puede producirse el fragmento  $H^+$  a partir de la excitación de  $H_3^+$  en el nivel  ${}^1A_1'$  al estado  ${}^1A_2''$ , con la subsecuente disociación; en este canal, los fragmentos  $H^+$  disponen de mayor energía cinética en el rompimiento, lo que explica las estructuras que forman las alas del espectro de energías de este fragmento cuando  $H_3^+$  colisiona con

helio.

Para el caso del canal de disociación en el que se producen dos protones y un H, hay que hacer las siguientes consideraciones. El escape de dos electrones de un átomo después del impacto de éste con un electrón cerca del umbral de ionización, el fotodespojo de dos electrones de un ion negativo, ó el rompimiento de un ion molecular en tres fragmentos, donde uno de ellos tiene carga opuesta a la de los otros dos, son ejemplos de lo que se conoce como el problema de Coulomb de tres cuerpos.

Antes de 1953, el problema de la ionización de un átomo por impacto electrónico a energías un poco mayores al umbral de ionización había sido resuelto por Bates, Fundaminsky, Massey y Leech<sup>(7)</sup>; ellos obtuvieron una "Ley de Umbral", es decir, la dependencia del proceso de ionización en función del exceso de energía de colisión del umbral de ionización  $W$ , que variaba de manera lineal con esta energía cuando ésta se encontraba cerca del umbral de ionización.

Wannier<sup>(8)</sup> mostró que los cálculos desarrollados anteriormente no conducen al resultado correcto. Sus resultados indican que la dependencia es  $W^{1.127}$  para átomos, y el exponente se encuentra entre este valor y la unidad para iones. En su estudio, Wannier muestra que el doble escape de electrones ocurre preferentemente cuando éstos salen en direcciones opuestas y las energías adquiridas por éstos son aproximadamente iguales.

En 1971 el problema de ionización por colisión electrón-átomo fué resuelto por Peterkop<sup>(9)</sup>, quien usó la aproximación WKB. Sus

resultados confirman la ley de umbral obtenida por Wannier<sup>(8)</sup>. Casi simultáneamente con Peterkop, Rau<sup>(10)</sup> también estudió el problema de Coulomb de tres cuerpos. En su trabajo, Rau hace énfasis en la importancia del apantallamiento ejercido entre los electrones, y en el papel que éste juega en la división ó reparto de energía disponible entre ellos. En el umbral, al igual que Peterkop, se predice que el escape de dos electrones ocurre con un ángulo  $\theta_{12}$  entre ellos de  $180^\circ$  y la misma dependencia del proceso con la energía de umbral  $W$  obtenida por Wannier.

Klar<sup>(11)</sup>, empleó coordenadas hiperesféricas y amplió la teoría para incluir sistemas de tres cuerpos con masa arbitraria y momento angular total  $L = 0$ . Posteriormente, Feagin<sup>(12)</sup> desarrolló la teoría dentro de la aproximación WKB. En su trabajo consideró, además de sistemas de masa arbitraria, también un momento angular total  $L > 0$ , y obtuvo una ley de umbral que coincide con la encontrada previamente<sup>(8-11)</sup>. En su trabajo considera además el caso especial de la disociación de  $H_3^+$  en tres cuerpos:  $H^+ + H + H^+$ . El muestra que la ley de umbral para este proceso varía de acuerdo a  $W^{1.886}$  y establece un límite superior para su validez. Según sus cálculos, el exceso de energía de umbral  $W$  en este caso no debe ser mayor a aproximadamente 1.6 eV para que la teoría sea válida. Tanto Klar<sup>(11)</sup> como Feagin<sup>(12)</sup> predicen un valor del ángulo de correlación  $\theta_{12}$  de  $180^\circ$ .

Los primeros estudios experimentales en los que fué probada la validez de la ley de umbral para la ionización por impacto electrónico de átomos de helio, fueron llevados a cabo por Cvejanovic y Read<sup>(13)</sup> en 1974 y por Pichou<sup>(14)</sup> y sus colaboradores en

1978. Cvejjanovic y Read realizaron su estudio para eventos en los que la diferencia de energía  $W$  entre la energía total y la energía de ionización estuvo en el intervalo de 0.2 a 3 eV. Sus resultados son consistentes con la teoría de Wannier<sup>(8)</sup>, ellos obtuvieron una dependencia de  $W^n$  con  $n = 1.131 \pm 0.019$ , para  $W$  entre 0.2 y 1.7 eV. Pichou et al<sup>(14)</sup> verificaron las predicciones de la teoría de Wannier dentro de un margen de error del 20% para energías entre 3 y 6 eV arriba del umbral.

La mayoría de los estudios experimentales en los que se ha verificado la teoría de Wannier se han concentrado en el estudio de sistemas donde dos electrones escapan de un núcleo masivo. En ellos se ha comprobado la validez de la ley de umbral para las secciones transversales del proceso en función del exceso de energía de umbral  $W$ . En estudios mas recientes<sup>(15, 16)</sup>, se han verificado también las predicciones de la teoría de Wannier para la distribución de los valores del ángulo de correlación  $\theta_{12}$  entre los dos electrones en procesos de doble fotoionización. Para someter a prueba a la teoría, es necesario trabajar con sistemas en los cuales las partículas de igual carga no sean electrones. La disociación del ion  $H_3^+$  en el canal  $H^+ + H^- + H^+$  resulta de gran interés debido a que los tres fragmentos tienen practicamente igual masa. Este proceso recientemente ha sido objeto de varios estudios experimentales.

Montgomery y Jaecks<sup>(17)</sup>, encontraron secciones transversales anormalmente grandes para la producción del ion  $H^-$  a partir de la disociación de  $H_3^+$  al chocar con átomos de helio a energías de colisión de pocos keV. Se supone que el único canal que produce  $H^-$

es la disociación en tres cuerpos  $H^+ + H^- + H^+$ , ya que la captura electrónica es poco probable cuando se tiene He como blanco. Posteriormente Alvarez et al<sup>(18)</sup>, al estudiar la disociación en tres cuerpos de iones hidrogénicos triatómicos, encontraron, por integración numérica de las secciones transversales diferenciales en ángulo sólido, las correspondientes secciones transversales totales absolutas para la producción de (a)  $H^-$  a partir de la disociación de  $H_3^+$ , (b)  $H^-$  a partir de la disociación de  $HD_2^+$  y (c)  $D^-$  a partir de la disociación de  $D_3^+$ . En todos los casos se empleó He como blanco y el intervalo de energías de estudio fué de .33 a 1.61 keV/uma. Sus resultados muestran que las secciones transversales para el caso (a), estudiado por Montgomery y Jaecks<sup>(17)</sup>, no son anormalmente grandes, presentando éstos un comportamiento monótono creciente con la energía de colisión, siendo el valor más grande de las secciones transversales a 1.61 keV/uma cercano a  $7 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$ .

En 1989, O. Yenen et al<sup>(19)</sup>, obtuvieron la distribución de energías en sistema de laboratorio (SL) del fragmento  $H^-$  proveniente de la disociación inducida por colisión (DIC) del ion  $H_3^+$  al chocar con He en un intervalo de energías de 2.417 a 7 keV.

A partir del espectro de energías en SL obtuvieron la distribución de energías en el sistema del centro de masa (CM) del proyectil, encontrando que la energía más probable adquirida por  $H^-$  en CM es de 0.75 eV, y calcularon una energía de excitación del ion  $H_3^+$  de  $Q = 60 \pm 12 \text{ eV}$ , así como un límite inferior de  $163^\circ$  para el ángulo de correlación  $\theta_{12}$  entre los protones en CM de  $H_3^+$ . Estos

autores concluyen que  $H^-$  es producido por la excitación electrónica de  $H_3^+$  con la subsecuente disociación en  $H^+ + H^- + H^+$ . En su análisis emplean un modelo que no depende del tipo de rompimiento (2 ó 3 cuerpos).

Nuevamente, en 1989 el grupo de Alvarez et al<sup>(20)</sup>, estudió la formación de  $H^-$  a partir de la DIC de  $H_3^+$  con helio a energías de keV. Ellos obtuvieron las distribuciones angulares y de energía del fragmento  $H^-$ , y a partir de éstas, bajo la suposición de que el ion negativo proviene de un rompimiento en dos cuerpos de  $H_3^+$ , estiman que el límite de este canal de disociación se encuentra a  $E = 22 \pm 6$  eV, y la energía cinética  $W$  adquirida por los fragmentos tiene un valor de  $4.5 \pm 0.4$  eV. En la figura III.2 se muestra gráficamente la relación entre las energías  $Q$ ,  $E$  y  $W$ .

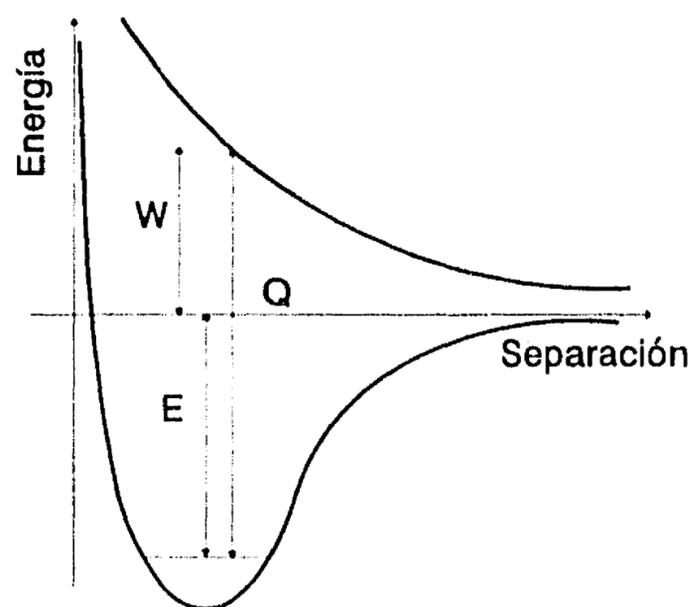


Fig. III.2  
Relación entre las energías  $Q$ ,  $E$ , y  $W$ .

La formación del ion  $H^-$  a partir de la DIC del ion  $H_3^+$  también ha sido investigada empleando distintos blancos atómicos. En 1990, Alvarez et al<sup>(21)</sup> obtuvieron las distribuciones de energía del fragmento  $H^-$  a partir de la DIC de  $H_3^+$  con He, Ne y Ar a energías de keV, encontrando un valor de  $Q = 22 \pm 6$  eV, que corresponde dentro del error experimental a lo reportado previamente<sup>(20)</sup>. Se encontró el mismo valor de  $Q$  cuando se emplearon los tres diferentes blancos. En este trabajo también se presentó la distribución de energías de  $H^-$  en el CM del proyectil. La transformación se hizo empleando el modelo independiente del rompimiento<sup>(19)</sup>. Cuando se empleó helio como blanco, la distribución muestra un solo máximo, mientras que en los otros dos (Ne y Ar) se presentan algunas estructuras ó máximos secundarios que se asocian a canales de disociación que producen  $H^-$  distintos a la disociación en tres fragmentos del  $H_3^+$ . El caso particular de la distribución de energías de  $H^-$  en el sistema del CM del  $H_3^+$  cuando se empleó helio como blanco, muestra que la energía mas probable adquirida por este fragmento es de 0.5 eV, y que puede alcanzar valores máximos entre 2.5 y 3 eV; los autores concluyen que la aplicación del modelo de disociación binaria empleada anteriormente<sup>(21)</sup> es una buena aproximación.

Además de emplear blancos distintos a helio, la DIC de  $H_3^+$  ha sido estudiada a energías de colisión del orden de MeV. Castro Faria et al<sup>(22)</sup>, realizaron un estudio de las distribuciones de energía de los fragmentos  $H^+$  y  $H^-$  provenientes del rompimiento en tres cuerpos de  $H_3^+$  al chocar con átomos de argón, empleando una técnica de coincidencias para la detección de la llegada de  $H^+$  con

H<sup>-</sup>, ya que existen diferentes canales que producen H<sup>+</sup> sin que se produzca H<sup>-</sup>. Para la detección de H<sup>-</sup> no usaron la técnica de coincidencias, ya que en el régimen de altas energías este ion solamente se produce a partir de H<sub>3</sub><sup>+</sup> mediante el rompimiento de éste en tres cuerpos: H<sup>+</sup> + H<sup>-</sup> + H<sup>+</sup> cuando se tiene argón como blanco. Castro Faria et al<sup>(22)</sup> hicieron la transformación de los espectros de energía en SL al sistema de CM del proyectil para ambos fragmentos: H<sup>+</sup> coincidente con H<sup>-</sup>, y H<sup>-</sup>. A partir de las distribuciones de energía en CM ellos encuentran que la energía más probable adquirida por el fragmento negativo es 0.21 eV, y para el ion H<sup>+</sup> registrado en coincidencia con H<sup>-</sup> la energía más probable es 0.89 eV. Esto quiere decir que los fragmentos positivos adquieren aproximadamente 4 veces la energía cinética adquirida por el fragmento negativo. Al hacer un análisis estadístico de las distribuciones de energía, éstos autores encuentran que el promedio de la energía cinética total  $\langle W \rangle$  adquirida por los fragmentos es de  $3.4 \pm 1.3$  eV y el promedio del ángulo de correlación  $\langle \theta_{12} \rangle$  entre los protones es de  $141^\circ \pm 23^\circ$ .

Recientemente Yenen et al<sup>(23)</sup> y Jaecks et al<sup>(24)</sup> estudiaron la disociación en tres cuerpos de H<sub>3</sub><sup>+</sup> al chocar con helio a una energía de colisión de 4.0 keV, usando una técnica de coincidencias para la detección de H<sup>+</sup>-H<sup>-</sup>. En este trabajo se reportó la distribución de energías del fragmento H<sup>+</sup> registrado en coincidencia con H<sup>-</sup> en SL, y a partir de ésta se hizo la transformación del espectro al sistema CM de H<sub>3</sub><sup>+</sup>. Los resultados muestran que hay una probabilidad muy baja de encontrar iones H<sup>+</sup> con energías cercanas a cero ( $< 0.5$

eV), y que la distribución alcanza su valor más grande entre 0.75 y 4 eV. Jaecks et al hacen una estimación del intervalo en el cual puede variar la energía cinética total  $W$  a ser repartida entre los tres fragmentos, encontrándose éste entre 1.5 y 18 eV. En este trabajo se reporta una energía absorbida por la molécula  $H_3^+$  de  $Q = 40$  eV, la cual es 20 eV menor a la que habían reportado anteriormente, debido a algún error en la calibración de su analizador de energía. En esta referencia se presentan también algunos cálculos desarrollados con el fin de identificar los niveles de excitación de la molécula  $H_3^+$  que conducen al rompimiento de la misma en tres cuerpos. Estos autores calculan las energías, en la aproximación de Born-Oppenheimer, del ion  $H_3^+$  usando el método de interacción de configuraciones y suponiendo geometrías de triángulo equilátero (simetría  $D_{3h}$ ) ó triángulo isóceles (simetría  $C_{2v}$ ). Los estados que conducen al límite asintótico  $H^+ + H + H^+$  fueron identificados mediante el cálculo del inverso del valor esperado del término de repulsión electrón-electrón ( $\langle 1/r_{12} \rangle^{-1}$ ), y tienen energías asociadas entre 40 y 45 eV arriba del estado base de  $H_3^+$  a la separación de equilibrio.

A partir de las líneas anteriores uno puede ver que hasta este momento no ha sido obtenido, en base a un análisis estadístico de las distribuciones de energía en C. M. de los fragmentos, el valor medio del ángulo de correlación  $\langle \theta_{12} \rangle$  entre los dos protones, así como el valor medio de la energía cinética total disponible  $\langle W \rangle$  en una colisión de  $H_3^+$  con helio a energías de keV.

El propósito de esta segunda investigación es obtener las

distribuciones de energía en laboratorio de los fragmentos  $H^-$  y  $H^+$  coincidente con  $H^-$ , generados a partir de la disociación inducida por colisión del ion molecular  $H_3^+$  con un blanco de helio.

A partir de estas distribuciones, se obtienen las correspondientes en el sistema C. M. de  $H_3^+$  para poder establecer, en base a un análisis estadístico de los datos, un valor para el ángulo de correlación entre los dos protones,  $\theta_{12}$ , así como para la energía cinética total  $W$  de los tres fragmentos.

## REFERENCIAS

- 1.- Martínez, H. "Estudio de Diferentes Canales de Disociación de Iones Hidrogénicos en He". Tesis Doctoral, Fac. Ciencias U.N.A.M. (1987)
- 2.- Preiskorn A. and Woznicki W. Chem. Phys. Lett. **86**, 369 (1982)
- 3.- Goh, S. C. and Swan, J. B. Phys. Rev. A **24**, 1624 (1981)
- 4.- Nussbaum, A. "Applied Group Theory for Chemist, Physicist and Engineers" 2.8, p.105. Prentice-Hall Inc. Englewood Cliffs, New Jersey (1971)
- 5.- Schaad, L. J. and Hicks, W. V. J. Chem. Phys., **61**, 1934 (1974)
- 6.- Kawaoka, K. and Borkman, R. F., J. Chem. Phys., **54**, 4234 (1971)
- 7.- Bates, Massey and Leech, Trans. Roy. Soc. (London) **243**, 93 (1950)
- 8.- Wannier, G. H., Phys. Rev. **90**, 817 (1953)
- 9.- Peterkop, R., J. Phys. B **4**, 513 (1971)
- 10.- Rau, A. R. P. Phys. Rev. A **4**, 207 (1971)
- 11.- Klar, H., Z. Phys. A **307**, 75 (1982)
- 12.- Feagin, J. M., J. Phys. B **17**, 2433 (1984)
- 13.- Cvejanovic, S. and Read, F. H., J. Phys. B **7**, 1841 (1974)
- 14.- Pichou, F., Huetz, A., Joyez, G., and Landau, M., J. Phys. B **11**, 3683 (1978)
- 15.- Mazeau, J., Huetz, A. and Selles, P., in Electronic and Atomic Collisions: Invited Papers of the 14th ICPEAC, 1985, edited

by D. C. Lotents, W. E. Meyerhof, and J. R. Peterson  
(North-Holland, Amsterdam, 1986), p. 141.

- 16.- Mazeau, J., Selles, P., Waymel, D. and Huetz, A., Phys. Rev. Lett. **67**, 820 (1991)
- 17.- Montgomery, D. L. and Jaecks, D. H., Phys. Rev. Lett. **51**, 1862 (1983)
- 18.- Alvarez I., Cisneros C., De Urquijo J. y Morgan T. J., Phys. Rev. Lett. **53**, 740 (1984)
- 19.- Yenen, O., Jaecks, D. H., and Wiese, L. M. Phys. Rev. A **39**, 1767 (1989)
- 20.- Alvarez, I., Martínez, H., Cisneros, C., Morales, A. and De Urquijo, J., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **40/41**, 245 (1989)
- 21.- Alvarez, I., Martinez, H., Cisneros, C., Morales, A and De Urquijo, J. Production and Neutralization of Negative Ions and Beams, Fifth International Symposium, Brookhaven N. Y. (1990), Editor Ady Herscovitch, APS.
- 22.- De Castro Faria, N. V., Wolff, W., Coelho, L. F. S., and Wolf, H. E. Phys. Rev. A **45**, 2957 (1992)
- 23.- Yenen, O., Calabrese, D., Wiese, L. M., and Jaecks, D. H. Phys. Rev. A **47**, 1059 (1993)
- 24.- Jaecks, D. H., Yenen, O., Calabrese, D. and Wiese L. "In Atomic and Molecular Physics", Third US-México Symposium, World Scientific, 49 (1991).

## CAPITULO IV

### IV.1 MODIFICACIONES REALIZADAS AL ACELERADOR PARA EL ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LA DISOCIACION DEL ION $H_3^+$ .

Para el estudio de la disociación polar del ion  $H_3^+$  al colisionar con helio a 4800 eV, fué necesario realizar algunos cambios al aparato mostrado en la figura II.1 del capítulo II.

Se trata de acelerar en este caso un ion positivo ( $H_3^+$ ), por lo que es necesario cambiar la polaridad de las fuentes de aceleración y enfoque (lente Einzel). También se requiere invertir el sentido de la corriente que circula por las espiras del electroimán, e invertir la polaridad de la fuente de voltaje del analizador de placas paralelas que se encuentra a la salida del imán. Se cambiaron los colimadores de entrada y salida de la celda de reacción: en este caso se tiene a la entrada uno de  $1.70 \pm .005$  mm y el de salida de  $2.06 \pm .005$  mm de diámetro. El sistema de detección también fué modificado, ya que en el presente caso, además de separar los productos positivos, negativos y neutros, se requiere analizar la energía de los fragmentos cargados. Estas

modificaciones se muestran en la figura IV.1.

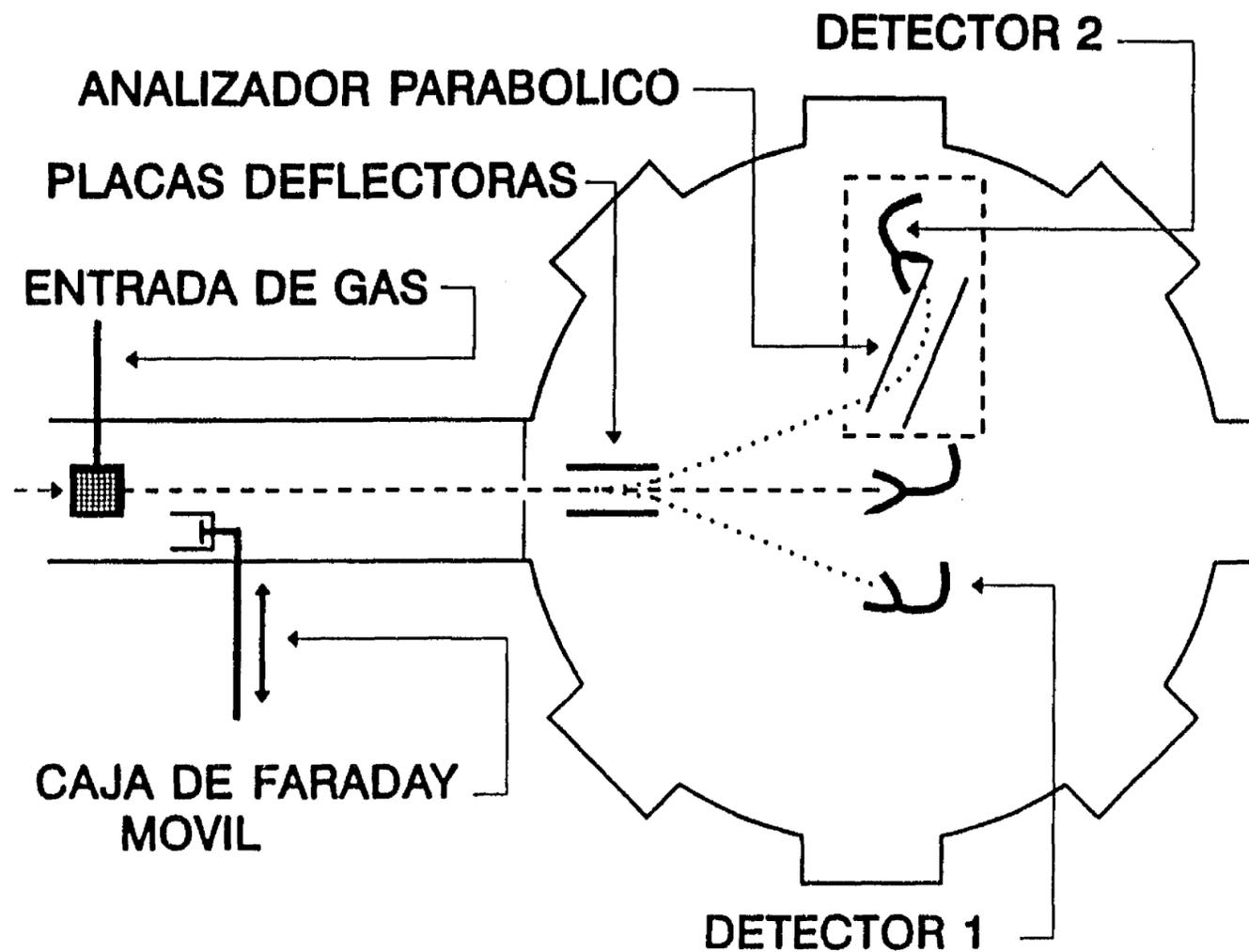


Fig. IV.1

Arreglo del sistema de detección para el estudio de la disociación polar de  $H_3^+$  en He.

En el lugar donde se encontraba uno de los detectores laterales ahora se tiene la entrada de un analizador de placas paralelas semejante al que se tiene en la cámara que se encuentra a la salida del imán selector. En este experimento juega un papel importante la resolución en energía del analizador, la que depende de la geometría del mismo, y particularmente de los colimadores de entrada y salida, que en este caso fueron de 2.38 mm a la entrada,

y a la salida una ranura de 0.31 mm de ancho por 1 cm de largo.

El objetivo principal de este experimento es el estudio de la DIC de  $H_3^+$  en helio en el canal que produce los fragmentos  $H^+ + H^- + H^+$ . Una parte de este estudio consiste en determinar las distribuciones de energía de los fragmentos  $H^+$  y  $H^-$ . Como ya se mencionó, el proceso más probable para la producción de  $H^-$  es la disociación en tres cuerpos de  $H_3^+$ , ya que el proceso de captura electrónica es poco probable cuando se tiene helio como blanco, por lo que el espectro de energías de este fragmento no presenta ninguna dificultad, exceptuando que las secciones transversales totales para este proceso son del orden de  $10^{-19}$  cm<sup>2</sup> a energías de pocos keV.<sup>(1)</sup>

Respecto al fragmento  $H^+$ , la existencia de diferentes mecanismos de producción de este fragmento, que no necesariamente producen  $H^-$ , lleva a la necesidad de emplear una técnica de coincidencias en el registro de los fragmentos  $H^+-H^-$ , y para ello se empleó el arreglo que se muestra en la figura IV.2.

La señal registrada por el detector 1 ( $H^-/H^+$ ) abre una compuerta ó "ventana de tiempo" durante un intervalo  $\Delta t$ . Si en este intervalo se registra la llegada de una partícula en el detector 2 ( $H^+/H^-$ ), se produce un pulso a la salida del circuito de coincidencias; este pulso de coincidencia es enviado directamente a un contador. En el circuito de coincidencias es posible modificar el intervalo de tiempo  $\Delta t$ , durante el cual la señal en el detector 2 se puede considerar coincidente con la producida en el detector 1, este intervalo puede ir de 54 a 2594 ns en pasos de  $10 \pm 2$  ns<sup>(2)</sup>.

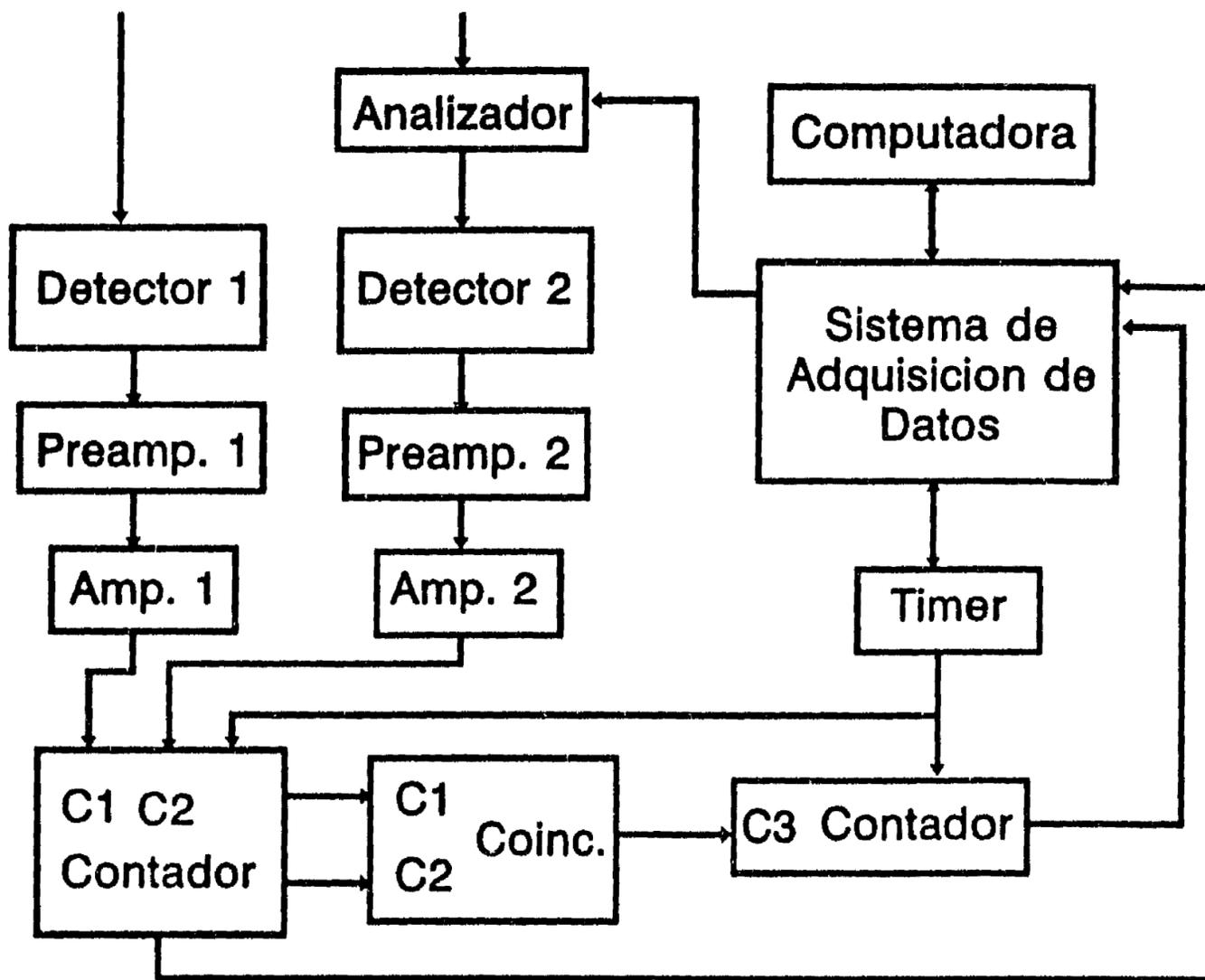


Fig. IV.2  
 Diagrama de bloques de la electrónica asociada al sistema de detección para el estudio de la disociación polar de  $H_3^+$  en He.

## IV.2 DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO

El procedimiento para obtener el haz de iones  $H_3^+$  es análogo al que se describió en el capítulo II para obtener los iones  $H^+$ . La relación entre el voltaje de enfoque  $V_f$ , aplicado al segundo electrodo de las lente Einzel y el voltaje de aceleración  $V_a$ , de la ecuación (2.15) sigue siendo válida. Se emplearon las mismas curvas de calibración para el espectrómetro de masas (figura II.8), y para el analizador de energía de placas paralelas (figura II.11), excepto que la polaridad es ahora inversa en ambos casos. Se optimizó el haz de  $H_3^+$  en la caja de Faraday a la salida del electroimán y posteriormente se envió hacia la celda de reacción en la que se admite helio a una presión del orden de  $10^{-4}$  torr, de tal manera que el proceso ocurre dentro del régimen de colisión simple; nuevamente, la presión en la celda de reacción se mide por medio de un barómetro capacitivo. Después de efectuada la colisión con el blanco, los fragmentos  $H^+$  y  $H^-$  son deflectados por las placas separadoras de productos cargados, uno de los fragmentos es dirigido hacia un detector que presenta un diámetro de entrada de 1.32 cm (detector 1), mientras que el fragmento de carga opuesta es analizado de acuerdo a su energía con el analizador tipo Harrower descrito en líneas anteriores (ver figura II.18). Al salir del analizador, el fragmento es registrado por el detector 2, el fragmento de carga opuesta que llega al detector 1 abre la "ventana de tiempo" en el circuito de coincidencias durante un intervalo  $\Delta t$ , y si el fragmento que pasa por el analizador llega al detector

dentro de este intervalo, el circuito de coincidencias envía un pulso al contador.

Una parte fundamental en el estudio de la disociación molecular mediante los espectros de energía de los fragmentos es la calibración del analizador de energía; esto es, determinar la resolución del analizador,  $\Delta V_D/V_D = \Delta E/E$ , así como la relación entre el voltaje aplicado al analizador  $V_D$  y la energía  $E$  de la partícula a ser analizada.

Experimentalmente, la resolución del analizador se encuentra a partir de las distribuciones de energía de  $H^+$  a distintas energías. El proceso es el mismo que se describió en el capítulo II para el analizador de placas paralelas que se encuentra a la salida del espectrómetro de masas. Se envía un haz de protones hacia el analizador y se obtiene la gráfica de intensidad o número de partículas en función del voltaje de analizador. En la figura IV.3 se muestra un ejemplo de estas distribuciones.

Para este analizador la resolución encontrada fué  $\Delta V_D/V_D = \Delta E/E = 1.0 \times 10^{-2}$ , y como puede verse, este tiene aproximadamente 7 veces mejor resolución que el analizador que se encuentra a la salida del espectrómetro de masas. Con los voltajes correspondientes a los máximos de los espectros mencionados anteriormente se construye la gráfica de voltaje de analizador ( $V_D$ ) en función del voltaje de aceleración ( $V_a$ ). La gráfica es una línea recta, (figura IV.4), cuya pendiente proporciona la constante del analizador, y por medio de esta constante se transforma la escala horizontal de voltaje de analizador a energía del fragmento en sistema de laboratorio.

Espectro de H<sup>+</sup>  
Energía = 1.2 KeV

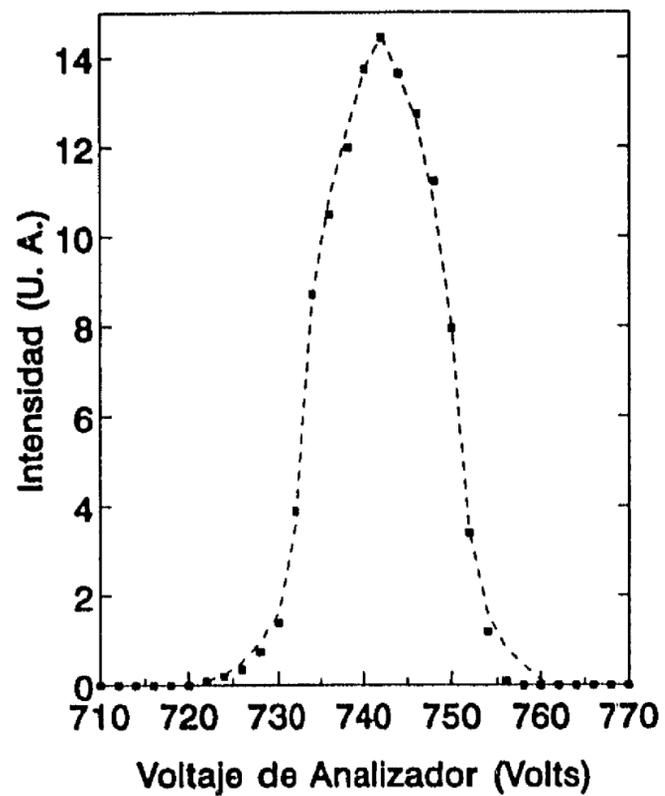


Fig. IV.3

Ejemplo de una gráfica de intensidad en función del voltaje de analizador para realizar la calibración del analizador de energía utilizado en el estudio de la disociación polar de H<sub>3</sub><sup>+</sup> en He.

En realidad, en la gráfica de la figura IV.4, en el eje horizontal el voltaje no es únicamente el de aceleración aplicado en la fuente de iones; también se incluye el voltaje de ánodo, aplicado entre filamento y ánodo, así como el voltaje aplicado a las placas separadoras de los productos cargados que se encuentran en la cámara de detección, ya que estos hacen que la energía de la partícula sea mayor a la proporcionada únicamente por el voltaje de aceleración en la fuente de iones.

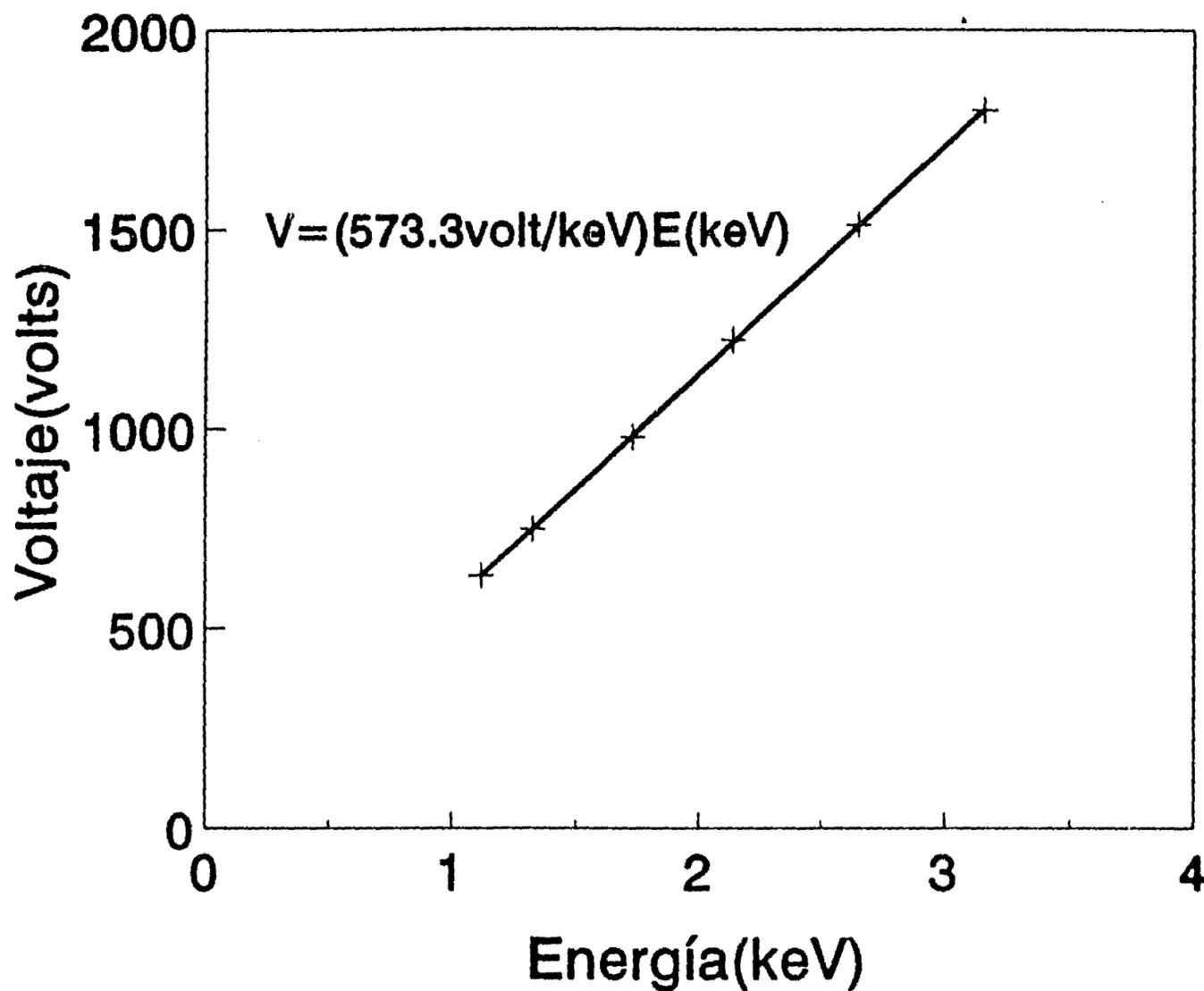


Fig. IV.4

Recta de calibración del analizador de energías utilizado en el sistema de detección.

Como se mencionó anteriormente, al conocer la constante del analizador, es posible saber la energía del fragmento que es analizado. En el caso de la disociación en tres cuerpos de  $H_3^+$ , éste primero se excita por el proceso de colisión con helio, y posteriormente se disocia, lo que significa que parte de la energía cinética se transforma en energía interna de  $H_3^+$  (denotada por  $Q$  en

el capítulo anterior); de ésta, una parte es la necesaria para que la disociación ocurra ( $E$ ), y el exceso de este umbral se transforma en energía cinética de los fragmentos ( $W$ ).

Las energías  $Q$ ,  $E$ , y  $W$ , no toman un sólo valor cada una, sino que en realidad tiene una distribución, ya que la transición puede ocurrir a diferentes separaciones internucleares de la molécula.

## IV.3 RESULTADOS

### ESPECTRO DE ENERGÍAS DEL FRAGMENTO $H^+$

Primeramente se envió el fragmento  $H^+$  hacia el analizador de energía; en tanto, el fragmento  $H^+$  fué registrado en el detector 1. Como primera prueba se trabajó sin emplear el sistema de coincidencias. La manera de obtener el espectro de  $H^+$  en este caso es la siguiente: se establecen los límites superior e inferior entre los cuales se encontrará el voltaje del analizador parabólico, así como los incrementos mediante los cuales se cubrirá el intervalo de voltajes seleccionado. De acuerdo con las condiciones de estabilidad en el haz, se elige el intervalo de tiempo durante el cual la computadora mantendrá en un valor constante el voltaje de analizador; transcurrido este tiempo, la computadora, mediante el puerto de comunicaciones en el que se tiene instalada la tarjeta del sistema de adquisición de datos

Keithley modelo 570, ajusta el voltaje de analizador a un nuevo valor, de acuerdo al incremento previamente seleccionado. En cada valor de voltaje se registra el número de iones H<sup>+</sup> que llegan al detector 2 y este número es almacenado en un archivo de datos para su análisis posterior. Cuando la computadora ha cubierto el intervalo de voltajes de analizador previamente seleccionados, nuevamente ajusta el voltaje en el límite inferior y comienza un nuevo "ciclo". El programa mediante el cual se adquirieron los datos de este experimento está hecho de tal forma que al finalizar la corrida, es decir, después de haber realizado un cierto número de ciclos (comunmente de 20 a 40), los números de cuentas registrados en un mismo valor de voltaje de analizador son sumados. De esta manera, aunque la corrida pudiera tardar tres horas ó más; y que durante este tiempo las condiciones del haz hayan cambiado, las condiciones de éste no cambian significativamente durante cada ciclo; así, el resultado final es equivalente a tener un haz constante durante el tiempo en el cual fueron tomados los datos. Este método permite incluso optimizar el haz al término de algún ciclo y posteriormente continuar con la corrida. En el Apéndice "B" se proporciona un listado del programa mediante el cual se tomaron los datos de este experimento.

Los resultados obtenidos se muestran en la figura IV.5, donde se ha multiplicado la escala horizontal por la constante del analizador, de tal manera que en este eje se tiene representada la energía cinética del fragmento H<sup>+</sup>.

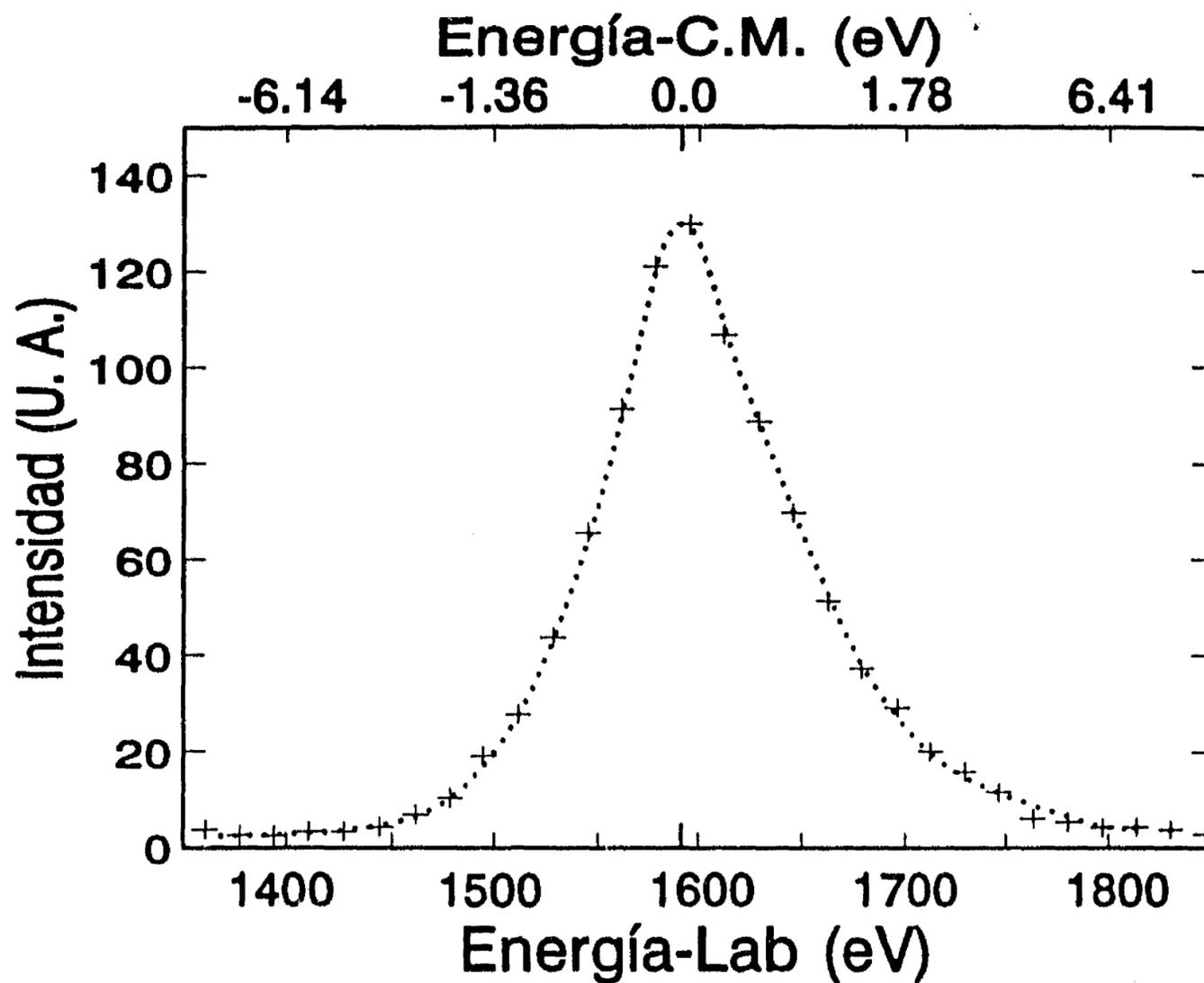


Fig. IV.5

Espectro de energías del fragmento  $H^+$  proveniente de la disociación de  $H_3^+$  en He, registrado sin emplear el sistema de coincidencias.

Una inspección más cuidadosa de esta gráfica muestra que el máximo del espectro se encuentra ligeramente desplazado hacia la izquierda del valor que corresponde a  $Q = 0$ , esto es, un tercio de la energía cinética del ion incidente  $H_3^+$ . Este corrimiento del máximo se debe a la energía perdida por el proyectil durante la

colisión, la cual es una medida del incremento en la energía interna de la molécula. De acuerdo con la calibración del analizador y realizando el ajuste de un polinomio de segundo grado en el máximo de la distribución, se encuentra un valor de  $Q = 25 \pm 5$  eV para la energía absorbida por la molécula previo a la disociación; la incertidumbre se asignó como una desviación estándar de la media.

Como siguiente paso y prueba de consistencia del experimento, se puso en operación el sistema de coincidencias descrito en líneas anteriores. Se ajustó la ventana de tiempo en 224 ns. El ion  $H^+$  que llega al detector 1 abre la ventana de tiempo; si el ion  $H^+$ , analizado en energía, es registrado por el detector 2 dentro del intervalo de tiempo de 224 ns, se producirá un pulso TTL ( $\approx 5$  volts) a la salida del circuito de coincidencias. En este caso el conteo se reduce considerablemente, pero como puede verse en la figura IV.6, el espectro de energía del fragmento  $H^+$  registrado en coincidencia con  $H^+$  tiene la misma forma que el espectro de  $H^+$  no coincidente, lo cual significa que el canal que produce  $H^+$  es la disociación de  $H_3^+$  en los fragmentos  $H^+ + H^+ + H^+$ , y que cualquier otro canal que pudiera estar presente, ocurre con una probabilidad muy pequeña. En la figura IV.7 se muestran los espectros de  $H^+$  no coincidente y  $H^+$  coincidente con  $H^+$ , ambos normalizados a igual número de cuentas en el máximo de la distribución. Los dos espectros muestran el mismo corrimiento hacia la izquierda, correspondiente a  $Q = 25 \pm 5$  eV.

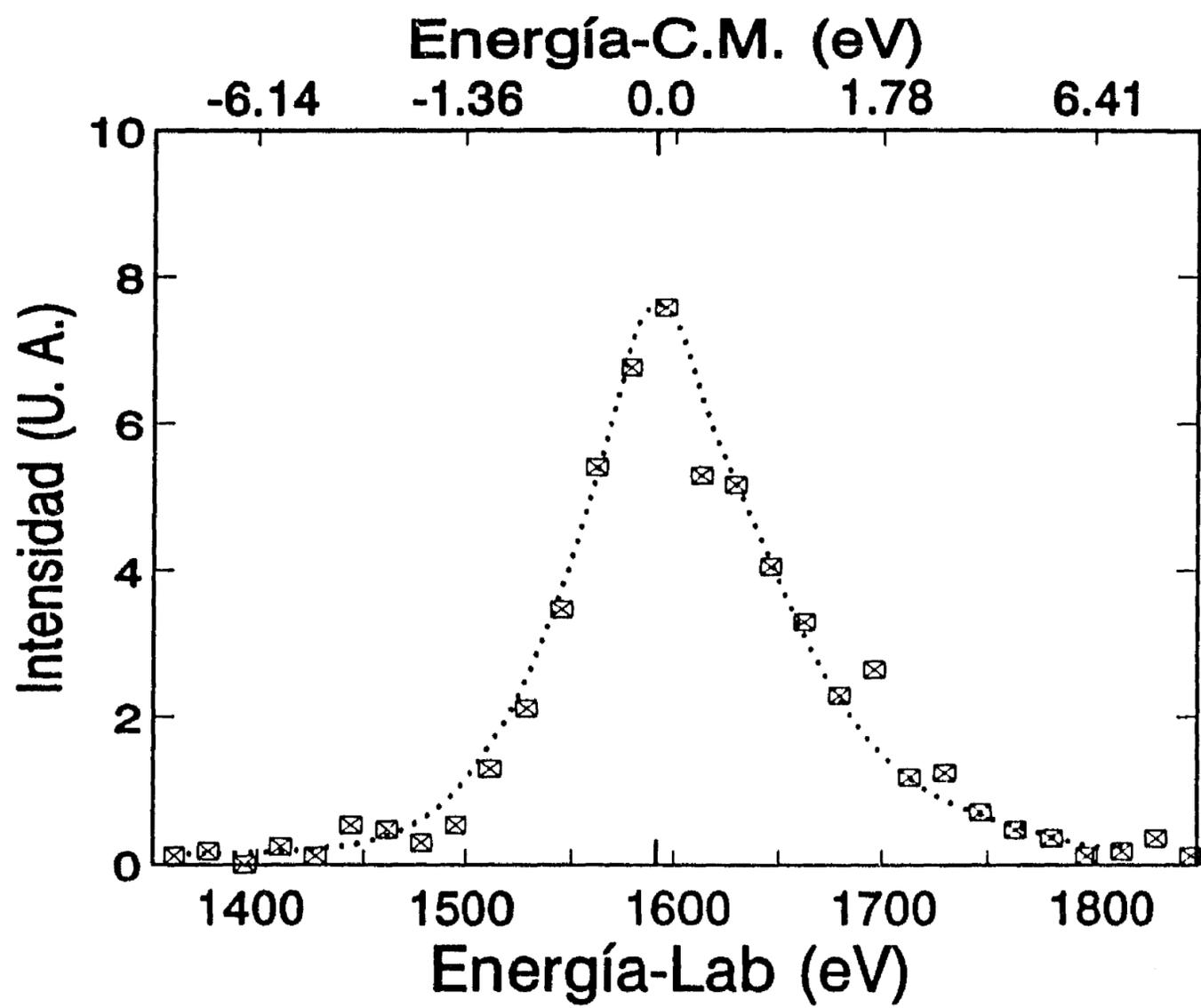


Fig. IV.6

Espectro de energías del fragmento H' proveniente de la disociación de  $H_3^+$  en He, registrado en coincidencia con el fragmento  $H^+$ .

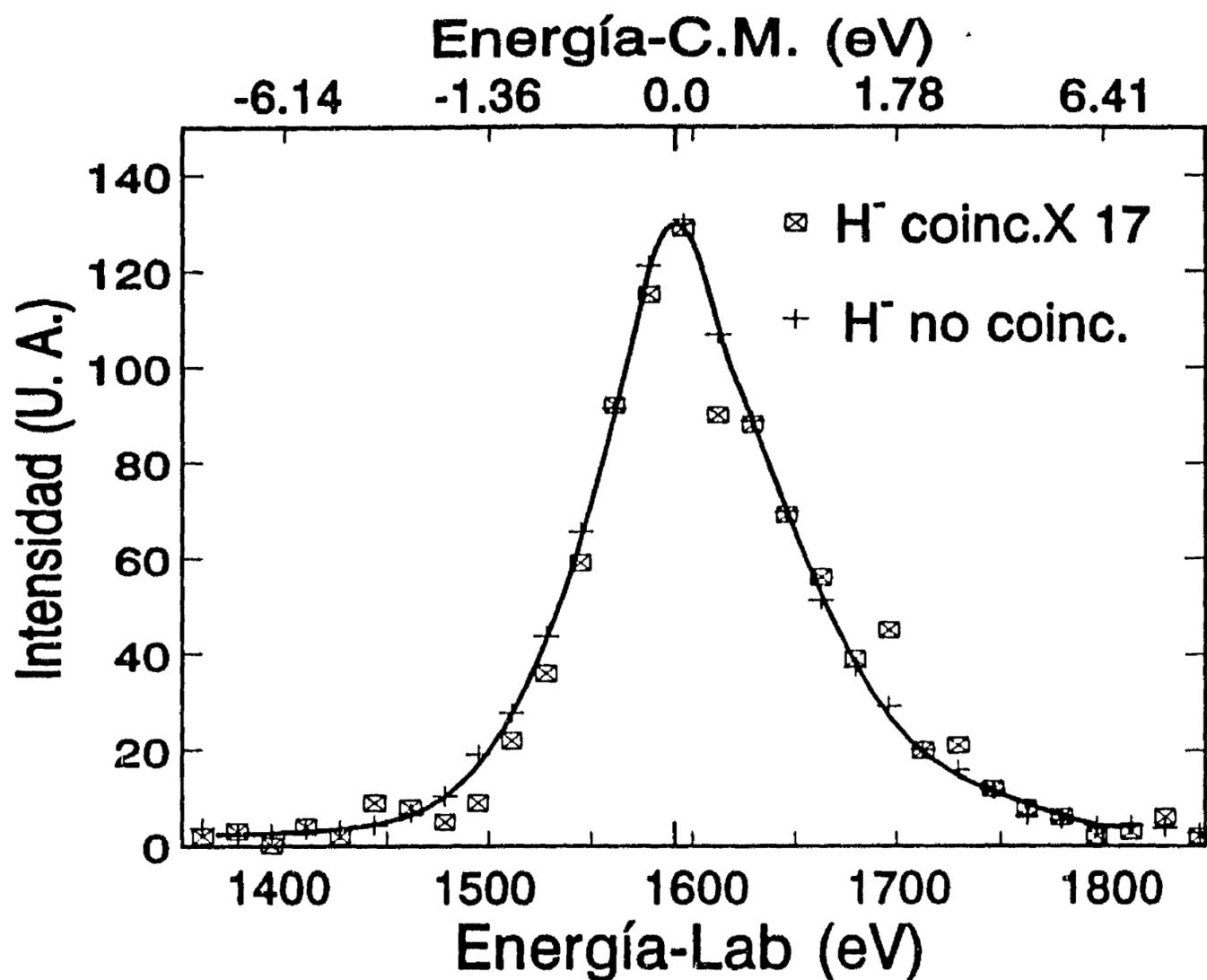


Fig. IV.7

Comparación entre los espectros de energía de los fragmentos H<sup>-</sup> no coincidente con el fragmento H<sup>+</sup>, (registrado sin emplear el circuito de coincidencias, cruces) y, H<sup>-</sup> coincidente con H<sup>+</sup> (cuadros), provenientes de la disociación polar de H<sub>2</sub><sup>+</sup> en He. La línea continúa es el ajuste de un polinomio al espectro de energías de H<sup>-</sup> no coincidente.

### ESPECTRO DE ENERGÍAS DEL FRAGMENTO H<sup>+</sup>

Se envió el fragmento H<sup>-</sup> al detector 1, en tanto que el fragmento H<sup>+</sup> fué analizado en energía y registrado por el detector

2. El ion H<sup>+</sup> registrado en el detector 1 abrió la compuerta en el circuito de coincidencia, durante un intervalo de tiempo previamente seleccionado; si un ion H<sup>+</sup> llega al detector 2 durante este intervalo de tiempo, el circuito de coincidencias envía un pulso de aproximadamente 5 volts el cual es registrado por un contador.

En la figura IV.8 se muestra la distribución de energías del ion H<sup>+</sup> registrado por el detector 2, este espectro esta formado por todos los iones H<sup>+</sup> provenientes de cualquier canal.

$$I = I' + I'' + \dots + I(2H^+ + H)$$

Donde I', I'', etc. provienen de canales de disociación diferentes a la disociación polar. Como ya se mencionó en el capítulo anterior, uno de los más notables es producido por la excitación electrónica del estado 'A<sub>1</sub>' al nivel de energía 'E'; la producción de protones en este canal involucra una energía de 9.3 eV.

Otro mecanismo de disociación que puede producir H<sup>+</sup> es la excitación electrónica de 'A<sub>1</sub>' a 'A''<sub>2</sub>'; este proceso proporciona protones principalmente en las alas del espectro.

Por otro lado, el pico central es inconsistente con el proceso de excitación electrónica, ya que es posible observar protones con energía cinética cercana a cero en posiciones del espectro que corresponden a Q ≈ 0 eV en el sistema de referencia de C.M. . Esto es interpretado como una consecuencia de la excitación vibracional de la molécula, con la subsecuente disociación.

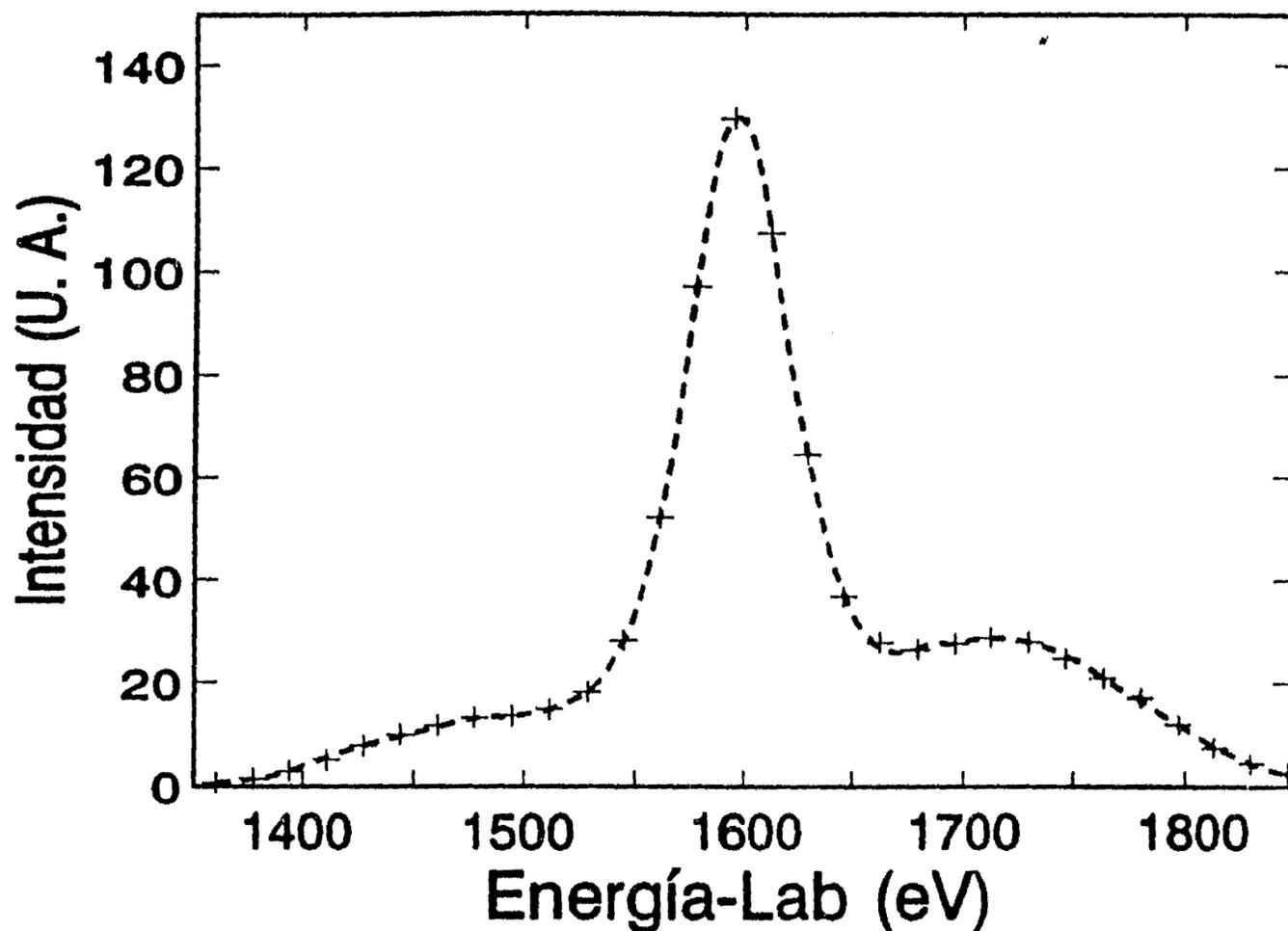


Fig. IV.8

Espectro de energías del fragmento  $H^+$  proveniente de la disociación de  $H^{3+}$  en He. En este caso no se empleó el circuito de coincidencias. La línea a trazos representa el ajuste de un polinomio a los puntos experimentales.

En la figura IV.9 se muestra el espectro de energías de los iones  $H^+$  cuando se empleó el circuito de coincidencias. En este caso, se da preferencia a los iones  $H^+$  provenientes del canal que produce  $2H^+ + H$ . Sin embargo, debido a que existe una distribución de energías para este ion, así como para los iones  $H^+$  provenientes de otros canales y al hecho de que los otros canales, ocurren con probabilidades mayores a la que tiene el canal de disociación

polar, la distribución de energías de éste, aparece superpuesta a la distribución de energías del fragmento  $H^+$  proveniente de todos los demás canales.

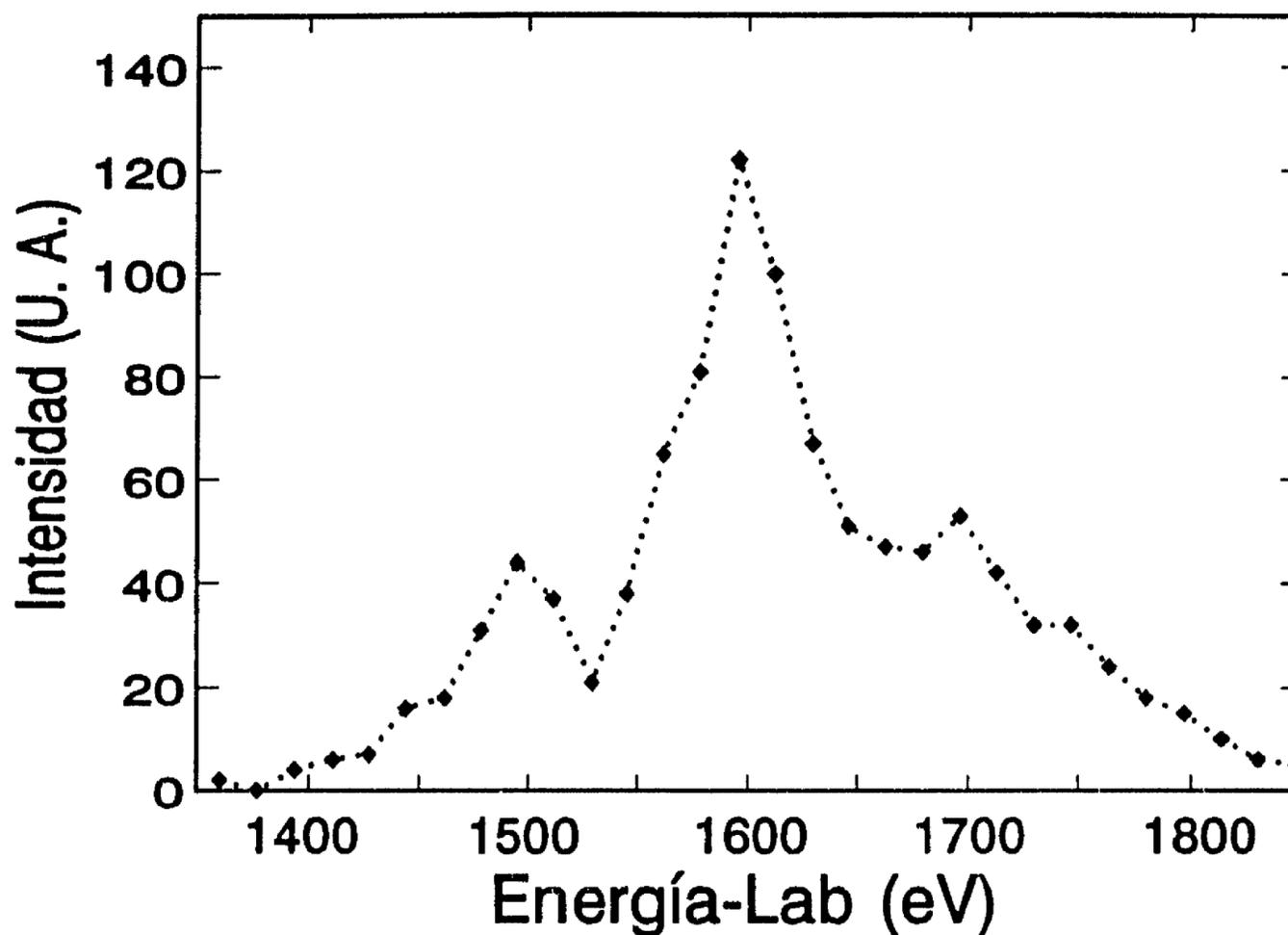


Fig. IV.9

Espectro de energías del fragmento  $H^+$  proveniente de la disociación de  $H_3^+$  en He. En este caso se empleó el circuito de coincidencias para el registro de los fragmentos  $H^+-H^+$ .

Cuando se normalizan al mismo número de cuentas en el pico central los espectros de las figuras IV.8 y IV.9, es posible substraer ese fondo, quedando únicamente el espectro de los iones  $H^+$  provenientes del canal que produce  $2H^+ + H$ ; éste se encuentra representado en la figura IV.10. La línea continua es el ajuste de

un polinomio por el método de mínimos cuadrados. El mínimo de esta curva se encuentra a un valor correspondiente a  $Q = 23$  eV, lo cual es bastante cercano al corrimiento de 25 eV encontrado en el espectro del energías de ion  $H^+$ .

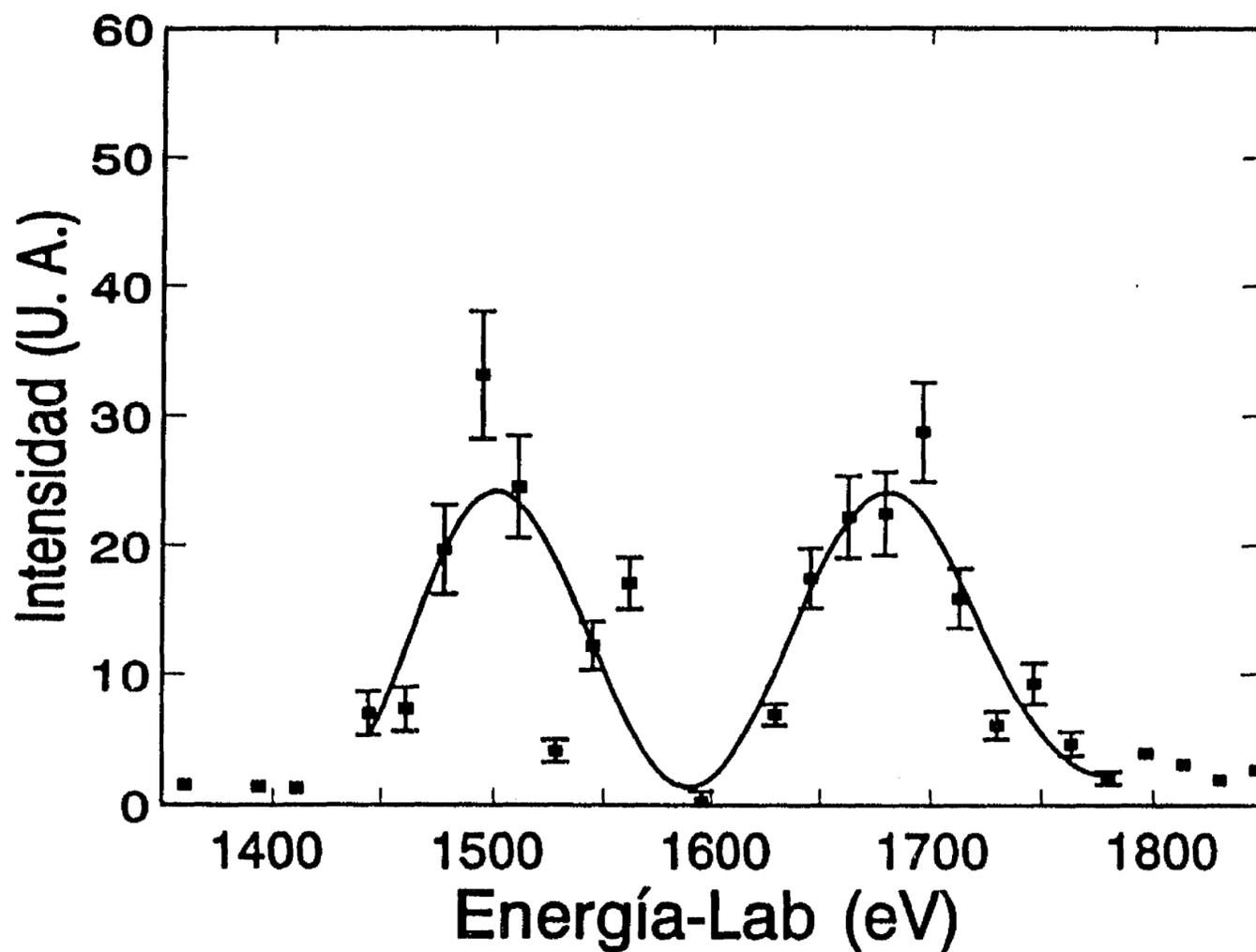


Fig. IV.10

Después de la normalización al mismo número de cuentas en el máximo de los espectros mostrados en las figuras IV.8 y IV.9, y posteriormente la sustracción de estos, se obtiene el espectro de energías del fragmento  $H^+$  coincidente con  $H^+$ , ambos provenientes de la disociación polar de  $H_3^+$  en He. El resultado de esta diferencia se representa con barras de incertidumbre. La línea continua es el ajuste de un polinomio a los datos experimentales.

En un proceso de disociación en dos cuerpos, las leyes de conservación de energía y momentum determinan de manera única la división ó reparto del exceso del umbral de energía que se transforma en energía cinética ( $W$ ) de los fragmentos. Para la disociación en tres cuerpos, estas leyes de conservación no son suficientes para determinar toda la cinemática del proceso.

Sin embargo, es posible obtener alguna información a partir de las distribuciones de energías en sistema de laboratorio de los fragmentos  $H^-$  y  $H^+$  registrado en coincidencia con  $H^-$  provenientes de la DIC de  $H_3^+$ .

En la figura IV.11 se muestra el diagrama de Newton de un ion  $H_3^+$  excitado y disociándose en  $H^- + H^- + H^+$ .

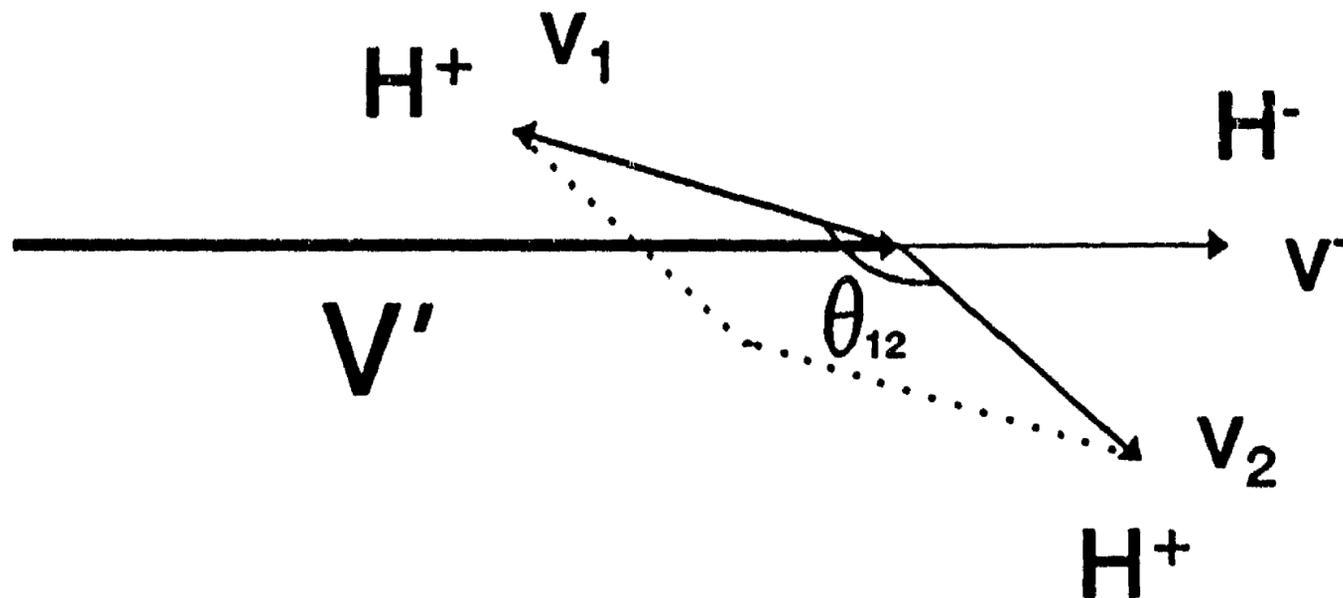


Fig. IV.11

Diagrama de Newton del ion  $H_3^+$  excitado y disociándose en  $H^- + H^- + H^+$ .

Para un ángulo de dispersión en laboratorio igual a  $0^\circ$ , la velocidad del fragmento H en el C.M. de  $H_3^+$  puede agregarse ó restarse de la velocidad en sistema de laboratorio de  $H_3^+$  para dar una componente rápida ó lenta. La energía en laboratorio de H está relacionada con la energía del haz incidente  $E_0$ ; la energía  $Q$ , absorbida por la molécula, y la energía  $\epsilon'$ , de H en el C.M. del proyectil através de la relación:

$$E_{lab} = \frac{1}{2}m (V' \pm v)^2 \quad (4.1)$$

donde  $m$  es la masa del proton,  $V'$  es la velocidad del C.M. de  $H_3^+$  justo después de la colisión y  $v$  es la velocidad del ion H en el C.M. de  $H_3^+$ .

ó bien, en términos de las energías involucradas:

$$E_{Lab} = \frac{(E_0 - Q)}{3} + \epsilon' \pm 2\sqrt{\frac{(E_0 - Q)\epsilon'}{3}} \quad (4.2)$$

Es posible obtener una aproximación de la distribución de energía en el sistema de C.M. del proyectil. Para ello, se supone que en este sistema de referencia se tiene una distribución isotrópica de iones H, se desprecia el efecto del ancho finito del haz, así como su divergencia angular. Es claro que los iones H con energías mayores a cero son detectados con menor eficiencia debido a la apertura finita en el detector. La eficiencia en el conteo disminuye cuando la energía adquirida por el fragmento aumenta. En el Apéndice "C" se describe el método mediante el cual se realizó la transformación del espectro de energías del sistema de

7

referencia de laboratorio al de C.M. del proyectil. Este proceso se encuentra integrado en el programa del Apéndice "B".

El método de transformación empleado fué comparado con el método del Jacobiano<sup>(3)</sup>, el cual está basado en el principio de que el número de iones H<sup>-</sup> que alcanzan el detector es independiente del sistema de referencia en el cual éste sea expresado; este número es proporcional al ángulo sólido cuyo ángulo medio en el sistema de referencia del proyectil está relacionado con el ángulo medio en el sistema de referencia del laboratorio a través de la transformación de velocidades Galileana, esto es, a través del Jacobiano de la transformación de velocidades. Los resultados obtenidos con ambos métodos son similares.

El método de transformación puede ser aplicado también al espectro de energías de H<sup>+</sup> coincidente con H<sup>-</sup> mostrado en la figura IV.10.

Las distribuciones de energía de los fragmentos H<sup>-</sup> y H<sup>+</sup> coincidente con H<sup>-</sup> en el sistema de C.M. del proyectil se muestran en las figuras IV.12 y IV.13, respectivamente. Las curvas continuas son el resultado del ajuste por el método de mínimos cuadrados al promedio de las ramas izquierda y derecha de ambos espectros. La curva de regresión es del tipo:

$$\rho(\epsilon_q) = \alpha \epsilon_q^\beta \exp(-\gamma \epsilon_q^\delta) \quad (4.3)$$

y los parámetros  $\alpha, \beta, \gamma$  y  $\delta$  se ajustan de tal forma que el error sea mínimo.

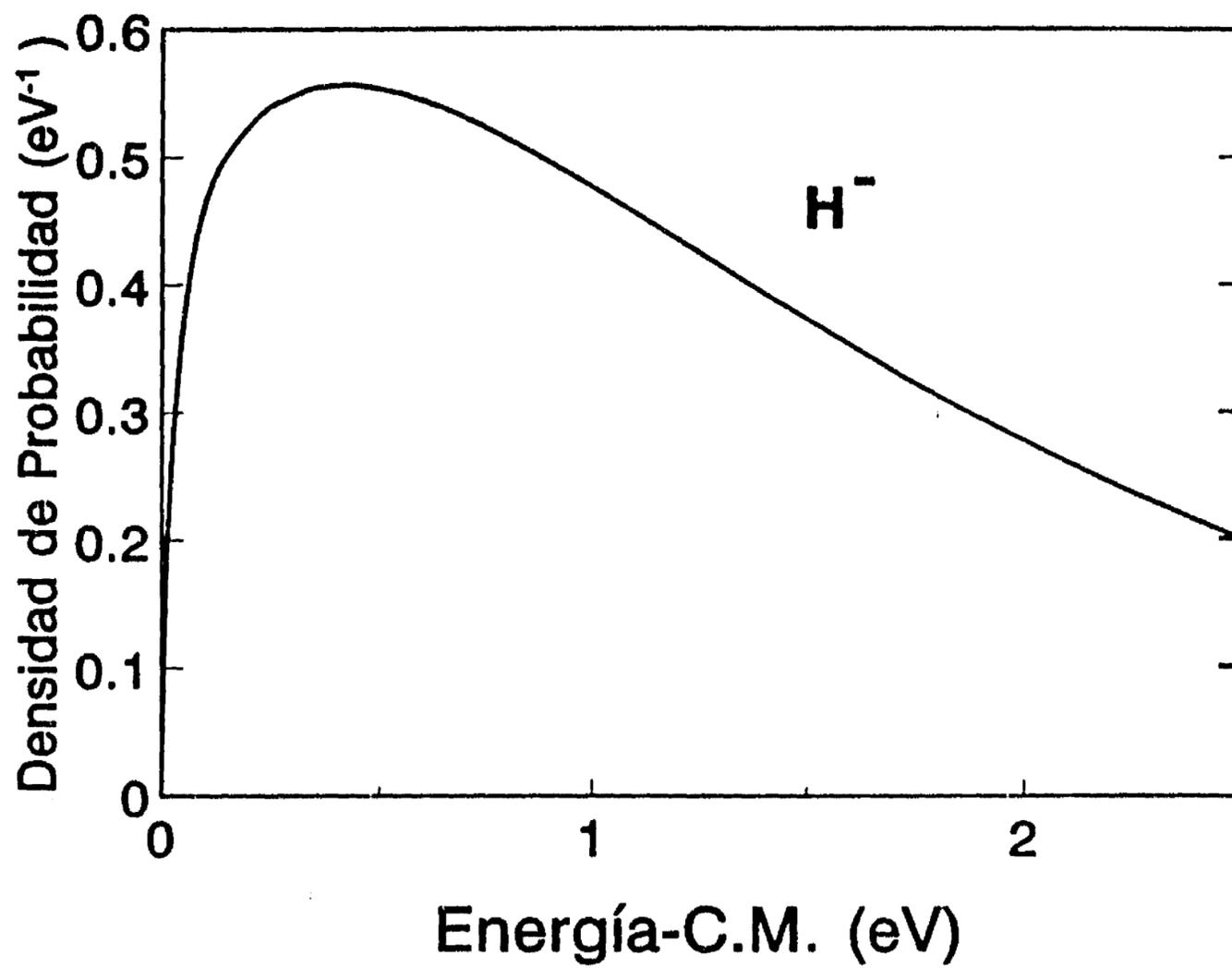


Fig. IV.12  
Distribución de energías en el sistema CM de  $\text{H}_3^+$  del fragmento  $\text{H}^-$ . En esta gráfica se ha normalizado el área a la unidad

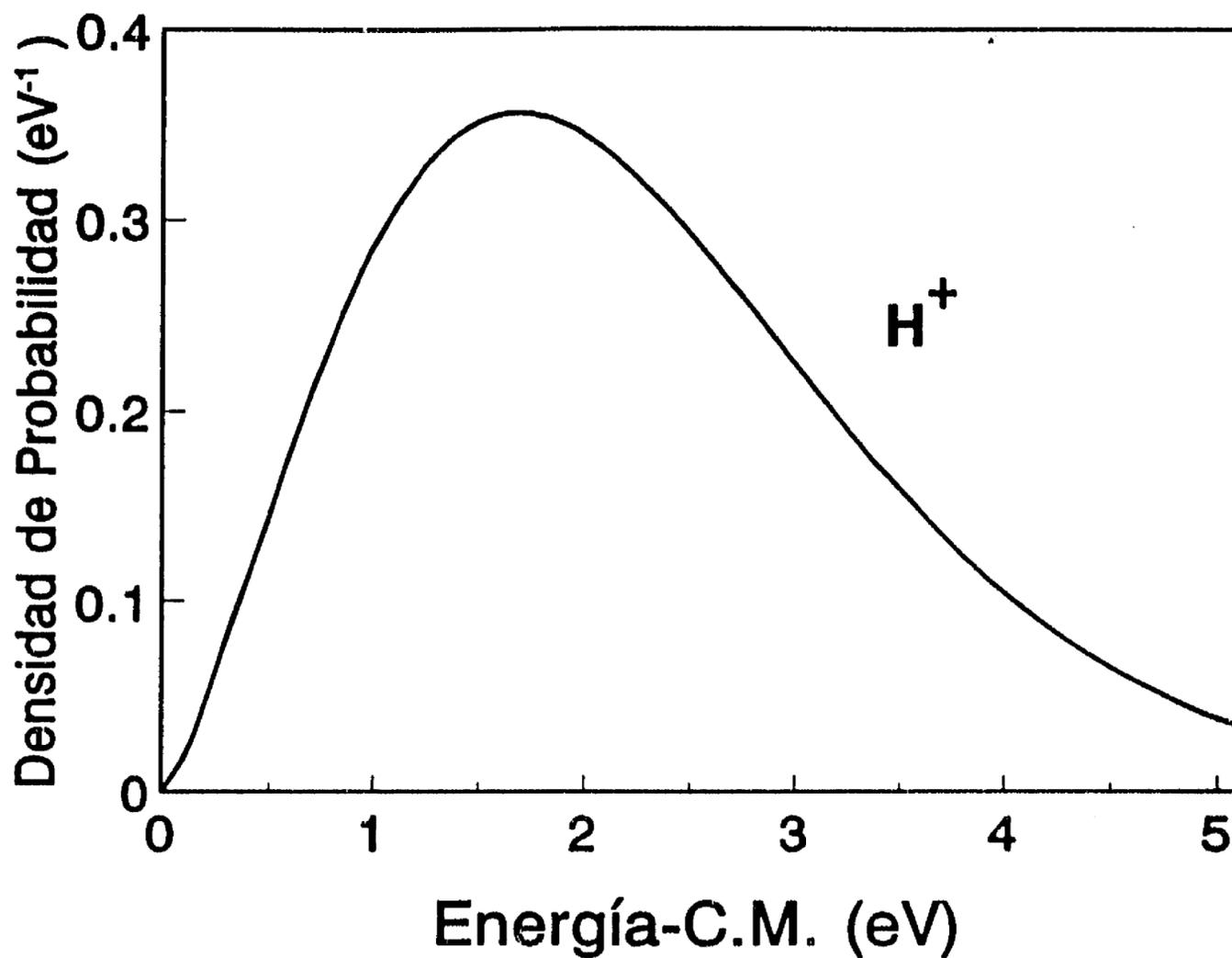


Fig. IV.13

Espectro de energías del fragmento H<sup>+</sup> proveniente de la disociación polar de H<sub>3</sub><sup>+</sup> en el sistema CM.

De hecho, las curvas representadas en las figuras IV.12 y IV.13 representan las densidades de probabilidad ( $\rho^+$  y  $\rho^-$ ) de encontrar a un fragmento con una energía dada  $\epsilon^+$  ó  $\epsilon^-$  en el C.M.. Con estas distribuciones de probabilidad, es posible calcular el valor promedio para el ángulo  $\langle \theta_{12} \rangle$  al que salen los protones en el C.M. de H<sub>3</sub><sup>+</sup>.

$$\langle \theta_{12} \rangle = \iiint \rho^+(e_1^+) \rho^+(e_2^+) \rho^-(e^-) \text{ArcCos} \left( \frac{e^- + e_1^+ + e_2^+}{2\sqrt{e_1^+ e_2^+}} \right) de_1^+ de_2^+ de^- \quad (4.4)$$

de manera análoga se calcula el valor promedio de la energía cinética total liberada en el proceso de disociación ( $\langle W_T \rangle$ ):

$$\langle W_T \rangle = \iiint \rho^+(e_1^+) \rho^+(e_2^+) \rho^-(e^-) (e_1^+ + e_2^+ + e^-) de_1^+ de_2^+ de^- \quad (4.5)$$

Los límites de integración inferior y superior para las variables  $e_1^+$  y  $e_2^+$  son cero y 5.1 eV. respectivamente, en tanto que para  $e^-$ , estos son cero y 2.5 eV.

El límite superior de  $e_1^+$  y  $e_2^+$  se eligió como el valor al cual la distribución de la figura IV.10 se reduce al 1% del valor del máximo, en tanto que el criterio para elegir el límite superior de  $e^-$  fué por la extrapolación de una línea recta en el comportamiento de la distribución mostrada en la figura IV.5.

Con estos parámetros se calculan las integrales de las ecuaciones (4.4) y (4.5). La región de integración se encuentra sujeta a la restricción:

$$-1 \leq \text{ArcCos} \left( \frac{e^- + e_1^+ + e_2^+}{2\sqrt{e_1^+ e_2^+}} \right) \leq 1 \quad (4.6)$$

El error asociado a las cantidades  $\langle \theta_{12} \rangle$  y  $\langle W_T \rangle$  se obtiene de la manera usual, como una desviación estándar, y se calcula a partir de las distribuciones de energía en C.M. de las gráficas IV.12 y IV.13 de la siguiente manera:

$$\sigma_{W_T} = \left( \langle W_T^2 \rangle - \langle W_T \rangle^2 \right)^{1/2} \quad (4.7)$$

y

$$\sigma_{\theta_{12}} = \left( \langle \theta_{12}^2 \rangle - \langle \theta_{12} \rangle^2 \right)^{1/2} \quad (4.8)$$

Los resultados que se obtienen son los siguientes:

En el caso de la distribución de energías de los fragmentos H de la figura IV.12, ésta presenta un máximo correspondiente a 0.42 eV. Este es el valor de la energía que con mayor probabilidad adquiere el fragmento H al disociarse H<sub>3</sub><sup>+</sup>. La contribución más importante al espectro se debe a los iones H con energías entre 0 y 2.5 eV.

La distribución de energías de los fragmentos H<sup>+</sup> registrados en coincidencia con H de la figura IV.3 muestra que estos iones adquieren con mayor probabilidad una energía de 1.68 eV, y la contribución más importante al espectro se debe a aquellos iones con energías entre 0 y 5.1 eV.

Al realizar las integrales de las ecuaciones (4.4) y (4.5) se encuentra que el valor medio del ángulo  $\theta_{12}$  al que salen los protones en el C. M. es de  $140^\circ \pm 19^\circ$ , en tanto que el valor medio de la energía cinética total adquirida por los tres fragmentos es de  $5.5 \pm 1.7$  eV.

En la Tabla TIV.1 se resumen los datos existentes respecto a:

- a) El incremento en energía interna Q del ion H<sub>3</sub><sup>+</sup> antes de que este se disocie en los fragmentos 2H<sup>+</sup> + H.
- b) El valor más probable de la energía cinética adquirida por H

- (W).
- c) El valor de la energía máxima adquirida por este fragmento ( $W_{max}$ ).
- d) El valor mas probable de la energía cinética adquirida por  $H^+$  ( $W^+$ ).
- e) La energía cinética máxima adquirida por este fragmento ( $W^+_{max}$ ).
- f) El valor medio de la energía cinética total  $\langle W_T \rangle$ .
- g) El valor medio del angulo entre los fragmentos  $H^+$  ( $\langle \theta_{12} \rangle$ ).

Tabla TIV.1

Refs/--->	16, 18 y 22	19 y 20	21	Res.Actual
Q(eV)	60±12, 40	22 ± 6	-----	25 ± 5
W(eV)	0.75	0.5	0.21	0.42
$W_{max}$ (eV)	2.5-3	2.6-3	1.72	2.5
$W^+$ (eV)	0.75-4	-----	0.89	1.68
$W^+_{max}$ (eV)	≈ 9	-----	4.1	5.1
$W_T$ (eV)	≈ [18]	-----	3.4 ± 1.3	5.5 ± 1.7
$\theta_{12}$ (grados)	≈ [163]	-----	141 ± 23	140 ± 19

[ ] ---> Estimaciones que se hicieron asignando la energía mas probable al fragmento  $H^+$  sin base a un análisis estadístico de las distribuciones de energía de los dos fragmentos. Los números de las referencias corresponden al capítulo anterior.

#### IV.4 DISCUSION Y CONCLUSIONES.

Fué posible obtener los espectros de energía de los fragmentos  $H^+$  y  $H^-$  provenientes de la disociación polar del ion  $H_3^+$  al colisionar con helio a una energía de colisión de 4800 eV, utilizando una técnica de coincidencias.

De los espectros de energías del fragmento  $H^-$  registrado sin emplear el circuito de coincidencias (Fig. IV.5), y al utilizar éste (Fig. IV.6), se puede confirmar que solamente se tiene un canal importante en la producción de este fragmento.

Con respecto al fragmento  $H^+$ , se observó que los espectros obtenidos con y sin el empleo del circuito de coincidencias son muy diferentes (Figuras IV.8 y IV.9), y que aún al emplear el circuito de coincidencias, el espectro de energías del fragmento  $H^+$  proveniente de la disociación polar de  $H_3^+$ , aparece superpuesto al espectro de energías de fragmentos  $H^+$  provenientes de otros canales diferentes a la disociación en tres cuerpos. Después de la normalización y substracción de este "fondo", se identificó claramente el espectro de energías de  $H^+$  proveniente de la reacción de interés.

Las distribuciones de energía de ambos fragmentos  $H^-$  y  $H^+$  fueron transformadas al sistema de C. M. de  $H_3^+$ . A partir del análisis estadístico de estas distribuciones se obtuvieron  $W$ ,  $W^+$ ,  $\langle W_T \rangle$  y  $\langle \theta_{12} \rangle$ , las cuales ayudan a un mejor entendimiento de la

7

cinemática del rompimiento en tres cuerpos.

De la Tabla TIV.1 se puede ver que los resultados obtenidos en el presente experimento se encuentran en buen acuerdo con los obtenidos en este mismo laboratorio empleando otro aparato experimental y un modelo de disociación diferente. La comparación con lo reportado por otros autores debe hacerse con cierta precaución, ya que se debe tener en mente el hecho de que el estado inicial o la distribución de estados iniciales del proyectil son completamente desconocidos. Por otro lado, en la tabla TIV.1 se presentan los resultados de De Castro Faria et al (referencia 21 del Capítulo III), los cuales se obtuvieron empleando un blanco diferente (Ar) y a energías de colisión de MeV. En este caso, aunque los valores obtenidos para las cantidades  $W^+$ ,  $W^+_{max}$  y  $\langle W_T \rangle$  son diferentes, la cinemática del rompimiento resulta similar a la que se tiene en el presente experimento, es decir, el fragmento  $H^+$  adquiere aproximadamente 4 veces la energía adquirida por  $H^+$ , y el ángulo entre los protones resulta diferente tan solo por  $1^\circ$ .

Con respecto a los resultados reportados en la referencia 22 del Capítulo III, la energía absorbida  $Q$  por el ion  $H_3^+$  difiere en 15 eV de lo que aquí se presenta. La distribución de energías de  $H^+$  en el C.M. se encuentra aproximadamente dentro de los límites establecidos en este trabajo, aunque el máximo de la distribución se encuentra a una energía mayor. El espectro de energía en C.M. del fragmento  $H^+$  registrado en coincidencia con  $H^+$ , de acuerdo con estos autores, alcanza su valor máximo entre 0.75 y 4 eV. Sin embargo la localización exacta no es clara. En el presente trabajo

se encontró el máximo de la distribución en 1.68 eV, y ésta se extiende hasta 5.1 eV a diferencia de lo que se reportó en la referencia 22 del cap. III, donde la energía adquirida por este fragmento alcanza valores de aproximadamente 9 eV.

Como se puede ver, los resultados muestran que en el rompimiento coulombiano del ion  $H_3^+$ , el ángulo al que salen los protones se encuentra aproximadamente entre  $140^\circ$  y  $160^\circ$ , y no existe un completo acuerdo con lo reportado por otros autores por lo que aún se debe seguir estudiando este proceso. Los efectos dependientes de la masa de los fragmentos deberán ser estudiados a fin de verificar la teoría. A este respecto, se ha propuesto llevar a cabo en este laboratorio el estudio experimental de la disociación en tres cuerpos del ion  $H_3^+$  a otras energías de colisión, así como el estudio de este mismo proceso, pero usando como proyectiles  $HD_2^+$  y  $D_3^+$ , incidiendo sobre blancos de helio, a energías de colisión de KeV.

Debido a la importancia que tiene el ion  $H_3^+$  en procesos de Astrofísica<sup>(4,5,6)</sup>, otros autores han propuesto recientemente nuevas técnicas experimentales para el estudio de la disociación polar de  $H_3^+$ . La idea es utilizar fotones para excitar al ion triatómico. Una ventaja del proceso de fotoexcitación sobre la excitación inducida por colisión es que en el primer caso se tiene el conocimiento adicional de la energía de excitación; de esta manera, la distribución de energías de los fragmentos solamente depende de la distribución de estados excitados con que se produce  $H_3^+$  en la fuente de iones. En el caso de fuentes de iones de radiofrecuencia,

7

se ha reportado<sup>(7)</sup> la producción de  $H_3^+$  preferentemente en su estado base.

## REFERENCIAS

1. - Alvarez, I., Cisneros, C., De Urquijo, J. and Morgan, T. J.,  
Phys. Rev Lett. **53**, 740, 1984
- 2.- de Urquijo, J., Alvarez, I., Domínguez, I., Cisneros, C. and  
Martínez, H., Rev. Sci. Instrum. (Aceptado para su  
publicación)
- 3.- Los, J., y Gobers, T. R., "In Collision Spectroscopy", Editor  
R. G. Cooks, Plenum Press, New York 1978, Cap. 6
- 4.- Dalgarno, A., Nature **353**, 502 (1991).
- 5.- Oka, T., Rev. Mod. Phys. **64**, 1141 (1992)
- 6.- Suzuki, H. Prog. Theor. Phys., **62**, 936 (1979)
- 7.- Sen, A. and Mitchell, J. B. A., J. Phys. B. **19**, L545, (1986)

## APENDICE A

En las siguientes líneas se presenta el listado del programa en lenguaje QBASIC mediante el cual se realizaron las mediciones del despojo electrónico del ion H<sup>+</sup> al incidir en diversos blancos gaseosos.

Este programa crea un archivo de datos del tipo: Presion(i), Cuenta1(i), Cuenta2(i), etc., la entrada de presión es manual. La computadora "lee" las cuentas almacenadas en cada uno de los dos contadores dobles. Se representa en una gráfica la presión vs. razón de No. de cuentas en c/u de los contadores con respecto al haz incidente y se aplica una regresión lineal para obtener las secciones transversales totales de despojo electrónico simple y doble.

'DEFINICION DE CADA UNA DE LAS SUBRUTINAS

'SUBRUTINAS PARA ENTRADAS Y SALIDAS DE TIPO ANALOGICO:

DECLARE SUB entana (canal, voltaje, ganancia)

DECLARE SUB salana (canal, voltaje)

'SUBRUTINAS PARA ENTRADAS Y SALIDAS DE TIPO DIGITAL:

DECLARE SUB entdig (puerto, dato)

DECLARE SUB saldig (puerto, dato)

'SUBRUTINA PARA ENTRADA DE PARAMETROS DEL EXPERIMENTO

DECLARE SUB entdat (dat\$)

'SUBRUTINA QUE "LEE" LOS DOS CONTADORES DOBLES

DECLARE SUB pachecon (cuenta1, cuenta2, cuenta3, cuenta4)

'SUBRUTINAS PARA REPRESENTAR GRAFICAMENTE LOS DATOS DE CADA CONTADOR

'EN EL LISTADO SOLAMENTE SE PRESENTA LA SUBRUTINA grafica1 (arh\$,fes) YA QUE LAS OTRAS TRES SON SIMILARES A ESTA

DECLARE SUB grafica1 (arh\$, fes)

DECLARE SUB grafica2 (arh\$, fes)

DECLARE SUB grafica3 (arh\$, fes)

DECLARE SUB grafica4 (arh\$, fes)

'DIMENSIONES DE LAS VARIABLES

DIM SHARED presion(100), cuenta1(100), cuenta2(100), cuenta3(100), cuenta4(100)

DIM SHARED p(100), c1(100), c2(100), c3(100), c4(100)

DIM SHARED xy(100), xx(100), c1c1(100), c2c2(100), c3c3(100), c4c4(100)

DIM SHARED X(100), y(100), y1(100), y2(100), y3(100), y4(100)

'PROGRAMA PRINCIPAL

COLOR 14, 9

CLS

KEY OFF

LINE INPUT "DAME EL NOMBRE DEL ARCHIVO DE SALIDA ", arh1\$

INPUT "DAME EL NUMERO DE CONTADORES ", NC

INPUT "DAME EL FACTOR DE ESCALA PARA LA PRESION ", fes

PRINT : PRINT

A\$ = ".dat"

B\$ = ".par"

dat\$ = arh1\$ + B\$

'Archivo de parametros del experimento

arh\$ = arh1\$ + A\$

'Archivo de datos del experimento

OPEN arh\$ FOR OUTPUT AS #1

IF NC = 1 THEN : PRINT "", "presion", "contador 1"

IF NC = 2 THEN : PRINT "", "presion", "contador 1", "contador 2"

IF NC = 3 THEN : PRINT "", "presion", "contador1", "contador2", "contador3"

IF NC = 4 THEN

PRINT "", "presion", "contador1", "contador2", "contador3", "contador4"

END IF

DO

INPUT "Presion = ", presion

IF presion >= 0 THEN

CALL saldig(0, 1)

'Pone en ceros al contador

CALL saldig(0, 2)

'Inicia TIMER

CALL saldig(0, 0)

'Pone todas las salidas en 0

FOR i = 1 TO 150: NEXT i

DO

CALL entdig(1, dato)

'Lee interval del TIMER

dato = dato AND &H1

LOOP WHILE (dato <> 0)

CALL pachecon(cuenta1, cuenta2, cuenta3, cuenta4)

IF NC = 1 THEN : PRINT , presion, cuenta1

IF NC = 2 THEN : PRINT , presion, cuenta1, cuenta2

IF NC = 3 THEN : PRINT , presion, cuenta1, cuenta2, cuenta3

IF NC = 4 THEN : PRINT , presion, cuenta1, cuenta2, cuenta3, cuenta4

PRINT #1, presion, cuenta1, cuenta2, cuenta3, cuenta4

END IF

LOOP UNTIL presion < 0

CLOSE #1

LOCATE 25, 1

INPUT "CUAL CONTADOR QUIERES GRAFICAR? 1, 2, 3, 4, any key(1 y 2) ", op1\$

IF op1\$ = "1" THEN : CALL grafica1(arh\$, fes)

IF op1\$ = "2" THEN : CALL grafica2(arh\$, fes)

IF op1\$ = "3" THEN : CALL grafica3(arh\$, fes)

IF op1\$ = "4" THEN : CALL grafica4(arh\$, fes)

CLS

CALL entdat(dat\$)

END

## SUBROUTINAS

```
SUB entana (canal, voltaje, ganancia)
DEF SEG = &HCFF0
IF (canal < 0 OR canal > 31) THEN
  PRINT "Error: canal no disponible"
  EXIT SUB
END IF
IF (ganancia < 0 OR ganancia > 3) THEN
  PRINT "Error: ganancia no disponible"
  EXIT SUB
END IF
POKE &H81, 6
POKE &H9A, ganancia
POKE &H8A, canal
POKE &H98, 0
volt1 = PEEK(&H82)
volt2 = PEEK(&H83)
parc1 = 256 * (volt2 - 240)
parc2 = parc1 + volt1
voltaje = (parc2 * .004882) - 10!
END SUB
```

'Entradas analógicas  
'Define dirección de inicio  
'Verifica canal de entrada  
  
'Verifica la ganancia de entrada  
  
'Selecciona el "slot"  
'Selecciona ganancia de entrada  
'Selecciona canal de salida  
'Comienza la conversión A/D  
'Lee el byte bajo de la conv. A/D  
'Lee el byte alto de la conv. A/D  
  
'Obtiene el voltaje de entrada

---

SUB entdat (dat\$)

OPEN "entdat.dat" FOR INPUT AS #2

DIM experi\$(20)

experi\$(1) = "1.- Reaccion = "  
experi\$(2) = "2.- Energia = "  
experi\$(3) = "3.- V. Lentas = "  
experi\$(4) = "4.- V. Horizontal = "  
experi\$(5) = "5.- V. Vertical = "  
experi\$(6) = "6.- Campo Magnetico = "  
experi\$(7) = "7.- V. Analizador = "  
experi\$(8) = "8.- V. Placas = "

INPUT #2, experi\$(9)

INPUT #2, experi\$(10)

INPUT #2, experi\$(11)

INPUT #2, experi\$(12)

INPUT #2, experi\$(13)

INPUT #2, experi\$(14)

INPUT #2, experi\$(15)

INPUT #2, experi\$(16)

```

CLOSE (2)

FOR i = 1 TO 8
  PRINT experi$(i), experi$(i + 8)
NEXT i

PRINT
DO
  INPUT "Deseas modificar algun dato S/N ", op$
  IF (op$ = "s") OR (op$ = "S") THEN
    INPUT "Cual es el numero del dato a modificar ", num
    PRINT
    PRINT experi$(num);
    INPUT experi$(num + 8)
    PRINT
  END IF
LOOP UNTIL (op$ = "n") OR (op$ = "N")

OPEN dat$ FOR OUTPUT AS #2
FOR i = 9 TO 16
  PRINT #2, experi$(i)
NEXT i
CLOSE #2

OPEN "entdat.dat" FOR OUTPUT AS #5
FOR i = 9 TO 16
  PRINT #5, experi$(i)
NEXT i
CLOSE #5

FOR i = 1 TO 8
  PRINT experi$(i), experi$(i + 8)
NEXT i

END SUB

```

---

```

SUB entdig (puerto, dato)                                'Entradas Digitales

  DEF SEG = &HCFF0                                        'Define dirección de inicio

  IF (puerto < 0 OR puerto > 1) THEN                    'Verifica puerto de entrada
    PRINT "Error: puerto no disponible"
    EXIT SUB
  END IF

  puerto = puerto + &H86                                  'Selecciona puerto de entrada
  dato = PEEK(puerto)                                     'Lee el puerto de entrada

END SUB

```

---

SUB grafica1 (arh\$, fes)  
SCREEN 2: CLS : KEY OFF: WINDOW (0, 0)-(639, 199)

OPEN arh\$ FOR INPUT AS #1

i = 0  
DO WHILE NOT EOF(1)  
i = i + 1  
INPUT #1, presion(i), cuenta1(i), cuenta2(i), cuenta3(i), cuenta4(i)  
LOOP

CLOSE #1

N = i

FOR i = 1 TO N  
p(i) = presion(i)  
c1(i) = (cuenta1(i) - cuenta1(0))/cuenta2(0)      'se resta el fondo y se divide entre la corriente inicial de H  
NEXT i

altop = p(1)  
FOR k = 2 TO N  
IF p(k) > altop THEN altop = p(k)  
NEXT k

bajop = p(1)  
FOR k = 2 TO N  
IF p(k) < bajop THEN bajop = p(k)  
NEXT k

altoc1 = c1(1)  
FOR k = 2 TO N  
IF c1(k) > altoc1 THEN altoc1 = c1(k)  
NEXT k

bajoc1 = c1(1)  
FOR k = 2 TO N  
IF c1(k) < bajoc1 THEN bajoc1 = c1(k)  
NEXT k

IF altoc1 = bajoc1 THEN  
WHILE INKEY\$ < > CHR\$(27)  
PRINT "todas las cuentas en el contador 1 son iguales a"; altoc1  
WEND  
END IF

'Aplica regresión lineal a los datos de Presión vs. Fracción de cuentas en el Contador 1

```
sump = 0
DO
FOR i = 1 TO N
sump = sump + p(i)
NEXT i
LOOP WHILE i <= N
pm = sump / N
```

```
sumc1 = 0
DO
FOR i = 1 TO N
sumc1 = sumc1 + c1(i)
NEXT i
LOOP WHILE i <= N
c1m = sumc1 / N
```

```
FOR i = 1 TO N
xy(i) = p(i) * c1(i)
NEXT i
```

```
sumxy = 0
DO
FOR i = 1 TO N
sumxy = sumxy + xy(i)
NEXT i
LOOP WHILE i <= N
FOR i = 1 TO N
xx(i) = p(i) * p(i)
NEXT i
```

```
sumxx = 0
DO
FOR i = 1 TO N
sumxx = sumxx + xx(i)
NEXT i
LOOP WHILE i <= N
```

```
FOR i = 1 TO N
c1c1(i) = c1(i) * c1(i)
NEXT i
```

```
sumc1c1 = 0
DO
FOR i = 1 TO N
sumc1c1 = sumc1c1 + c1c1(i)
NEXT i
LOOP WHILE i <= N
```

```
d0 = sumxy - N * pm * c1m
d1 = sumxx - N * pm * pm
```

```
d2 = sumc1c1 - N * c1m * c1m
d3 = SQR(dato1 * dato2)
```

```
'ESPECIFICAR PENDIENTE Y ORDENADA
```

```
pend = (N * sumxy - sump * sumc1) / (N * sumxx - sump * sump)
ord = (sumxx * sumc1 - sump * sumxy) / (N * sumxx - sump * sump)
seccion = pend * (1.22245E-17 / fes)
```

```
PRINT "la pendiente, la ordenada y r son respectivamente"; pend, ord, r
WHILE INKEY$ <> CHR$(27)
WEND
```

```
FOR i = 1 TO N
y(i) = pend * (p(i)) + ord
NEXT i
```

```
altoy = y(1)
FOR k = 2 TO N
IF y(k) > altoy THEN altoy = y(k)
NEXT k
```

```
bajoy = y(1)
FOR k = 2 TO N
IF y(k) < bajoy THEN bajoy = y(k)
NEXT k
```

```
IF bajoc1 <= bajoy THEN bajoc = bajoc1
IF bajoc1 > bajoy THEN bajoc = bajoy
```

```
PRINT "este es el valor mas bajo de cuenta1 y y", bajoc
```

```
IF altoc1 >= altoy THEN altoc = altoc1
IF altoc1 < altoy THEN altoc = altoy
```

```
FOR i = 1 TO N
X(i) = ((p(i) - bajop) / (altop - bajop)) * 565 + 65
y(i) = ((y(i) - bajoc) / (altoc - bajoc)) * 170 + 18
y1(i) = ((c1(i) - bajoc) / (altoc - bajoc)) * 170 + 18
NEXT i
```

```
'Presenta la gráfica
```

```
CLS
```

```
LINE (65, 10)-(630, 182), , B
```

```
LINE (65, 53)-(70, 53)
```

```
LINE (625, 53)-(630, 53)
```

```
LINE (65, 96)-(70, 96)
```

```
LINE (625, 96)-(630, 96)
```

```
LINE (65, 139)-(70, 139)
```

```
LINE (625, 139)-(630, 139)
```

FOR i = 1 TO N  
LINE (X(i), 10)-(X(i), 13)  
LINE (X(i), 179)-(X(i), 182)  
NEXT i

LOCATE 13, 1  
PRINT FIX((altoc + bajoc) / 2)  
LOCATE 8, 1  
PRINT FIX((altoc + (altoc + bajoc) / 2) / 2)  
LOCATE 19, 1  
PRINT FIX((bajoc + (altoc + bajoc) / 2) / 2)

LOCATE 3, 1  
PRINT FIX(altoc)  
LOCATE 25, 6  
PRINT "; bajop, "  
LOCATE 1, 10: PRINT "; arh\$; "  
WHILE INKEY\$ <> CHR\$(27)  
FOR i = 1 TO N  
PSET (X(i), y1(i))  
CIRCLE (X(i), y1(i)), 5  
NEXT i  
FOR i = 1 TO N - 1  
LINE (X(i), y(i))-(X(i + 1), y(i + 1))  
LOCATE 19, 40: PRINT "pendiente=", pend  
LOCATE 20, 40: PRINT "ordenada=", ord  
NEXT i  
WEND

"; altop  
CONTADOR 1"

END SUB

---

SUB pachecon (cuenta1, cuenta2, cuenta3, cuenta4)

'Esta subrutina captura las señales del contador  
'de pulsos y las convierte en un número decimal

CALL saldig(0, 0) 'Inicializa el puerto A  
CALL saldig(0, &H20) 'Habilita Module Finish  
CALL saldig(0, &H28) 'Habilita Print Command  
CALL saldig(0, &H38) 'Habilita AL Print Listo

cuantos = 0

DO

tot = 0

tot2 = 0

digit = 7

DO

CALL entdig(0, dato)

dato2 = dato

'Lee digito del puerto A

```

dato = dato AND &HF
dato2 = (dato2 AND &HF0) / 16
expo = 10 ^ (digit - 1)
tot = tot + dato * expo
tot2 = tot2 + dato2 * expo
digit = digit - 1
CALL saldig(0, &H28)
CALL saldig(0, &H38)
LOOP WHILE (digit > 0)
cuantos = cuantos + 1
IF cuantos = 1 THEN
cuenta1 = tot
cuenta3 = tot2
END IF
IF cuantos = 2 THEN
cuenta2 = tot
cuenta4 = tot2
END IF
LOOP WHILE (cuantos < 2)
CALL saldig(0, &H18)
CALL saldig(0, &H10)
END SUB

```

'Obtiene el valor del dígito

'Calcula el exponente

'Obtiene la cuenta del contador

'Obtiene la cuenta del comtador2

---

```

SUB salana (canal, voltaje)
DEF SEG = &HCFF0
IF canal < 0 OR canal > 1 THEN
PRINT "Error: canal no disponible"
EXIT SUB
END IF
IF (voltaje < -10 OR voltaje > 10) THEN
PRINT "Error: voltaje fuera de rango"
EXIT SUB
END IF
POKE &H9D, &H40
volts = INT(voltaje / .004882) + 2048
lsb = volts AND &HFF
msb = (volts AND &HFF00) / &HFF
POKE &H84, (2 * canal)
POKE &H85, lsb
POKE &H84, ((2 * canal) + 1)
POKE &H85, msb
POKE &H9D, 1
END SUB

```

'Salidas Analógicas

'Define dirección de inicio

'Verifica canal de salida

'Verifica voltaje de salida

'Inhabilita conversion D/A

'Calula el voltaje de salida

'Byte bajo de voltaje salida

'Byte alto de voltaje salida

'Selecciona canal de salida

'Escribe byte bajo voltaje sal.

'Selecciona canal de salida

'Escribe byte alto voltaje sal.

'Habilita conversión D/A

```
SUB saldig (puerto, dato)
  DEF SEG = &HCFF0
  IF (puerto < 0 OR puerto > 1) THEN
    PRINT "Error: puerto no disponible"
    EXIT SUB
  END IF
  IF (dato < 0 OR dato > 255) THEN
    PRINT "Error: dato fuera de rango"
    EXIT SUB
  END IF
  puerto = puerto + &H88
  POKE puerto, dato
END SUB
```

```
'Salidas Digitales
'Define dirección de inicio
'Verifica puerto de salida

'Verifica dato de salida

'Selecciona puerto de salida
'Escribe dato en puerto salida
```

## APENDICE B

En las siguientes líneas se presenta el listado del programa en lenguaje QBASIC mediante el cual se realizaron las mediciones de la disociación polar del ion  $H_3^+$  al incidir en un blanco formado por átomos de He.

En este programa se trabaja con las subrutinas: entana (canal, voltaje, ganancia) y salana (canal, voltaje), para entradas y salidas analógicas; entdig (puerto, dato) y saldig (puerto, dato), para entradas y salidas digitales; pachecon (CUENTA1, CUENTA2, CUENTA3, CUENTA4), para "leer" los contadores y endato (dat\$) para almacenar los parámetros más importantes del experimento. De cada una de ellas se encuentra un listado en el APENDICE A, por lo que aquí, además del programa principal, se dará el listado de la subrutina gráfica (arh\$, suma\$, c) con la que se grafican y analizan las distribuciones de energía. En esta subrutina se presentan únicamente las líneas del programa con las que se hace el análisis de los datos registrados por el "contador 2" que recibe la señal del detector que se encuentra a la salida del analizador de energía de la cámara de detección. Las gráficas y análisis de los datos registrados por los otros contadores es similar al que se describe en esta sección.

' Programa principal  
' este programa controla la fuente de voltaje del analizador de placas paralelas localizado en la cámara de detección,  
' activa un TIMER y lee dos contadores dobles, con los datos registrados muestra el espectro de energías en S.L.,  
' realiza la transformación al sistema C.M. y crea un archivo de datos de intensidad en C.M., energía en C.M.

DECLARE SUB entana (canal, VOLTAJE, ganancia)  
DECLARE SUB salana (canal, voltaje)  
DECLARE SUB entdig (puerto, dato)  
DECLARE SUB saldig (puerto, dato)  
DECLARE SUB pachecon (CUENTA1, CUENTA2, CUENTA3, CUENTA4)  
DECLARE SUB endato (dat\$)  
DECLARE SUB gráfica (arh\$, suma\$, c)

COLOR 14, 9  
CLS  
KEY OFF

DIM SHARED voltaje(150), CUENTA1(150), CUENTA2(150), CUENTA3(150), CUENTA4(150)  
DIM SHARED voltaje(150), c1(150), c2(150), c3(150), c4(150)  
DIM SHARED x(150), y1(150), y2(150), y3(150), y4(150), E#(150), Ecm#(150)  
DIM SHARED E1#(150), vol1#(150), Ecm1#(150)  
DIM SHARED E2#(150), vol2#(150), Ecm2#(150), a(150), P(150), P1(150)  
DIM SHARED Ecinf1#(150), Ecsup1#(150)  
DIM SHARED Ecinf2#(150), Ecsup2#(150)  
DIM SHARED Ecinf3#(150), Ecsup3#(150), delectm#(150)  
DIM SHARED incre1#(150), incre2#(150), incre3#(150), incre4#(150), incre5#(150)  
DIM SHARED sumf1#(150), sumf2#(150), sumf3#(150)  
DIM SHARED volu1#(150), volu2#(150), volu3#(150)  
DIM SHARED volut#(150), vc#(150), fef#(150)  
DIM SHARED intcm(150)

LINE INPUT "DAME EL NOMBRE DEL ARCHIVO", n\$

INPUT "DAME EL NUMERO DE CONTADORES", NC

a\$ = ".dat"  
B\$ = ".par"  
c\$ = ".sum"  
arh\$ = n\$ + a\$  
dat\$ = n\$ + B\$  
suma\$ = n\$ + c\$

PRINT : PRINT

INPUT "DAME EL voltaje INICIAL", vi

INPUT "DAME EL voltaje FINAL", vf

INPUT "DAME EL INCREMENTO DE voltaje", iv

INPUT "DAME EL NUMERO DE CICLOS QUE QUIERES", c

```

volt = iv
volt1 = vi
VOLT2 = vi
voltf = vf
vi = (vi * 9) / 2000
vf = (vf * 9) / 2000
iv = (iv * 9) / 2000

OPEN arh$ FOR OUTPUT AS #1

xx = 0

DO

xx = xx + 1

IF xx <= c THEN

CALL salana(0, vi)

PRINT "          AJUSTANDO VOLTAJE INICIAL"
PRINT "          EN 30 SEGUNDOS INICIA CORRIDA"
FOR i = 1 TO 5000: NEXT i

vt = vi

CLS

PRINT
LOCATE 25, 1: PRINT n$
LOCATE 25, 20: PRINT DATE$, TIME$
LOCATE 25, 68: PRINT xx; "DE"; c
LOCATE 1, 1
PRINT

IF NC = 2 THEN PRINT "voltaje", "CONTADOR1", "CONTADOR2"

IF NC = 3 THEN PRINT "voltaje", "CONTADOR1", "CONTADOR2", "CONTADOR3"

IF NC = 4 THEN
PRINT "voltaje", "CONTADOR1", "CONTADOR2", "CONTADOR3", "CONTADOR4"
END IF

VOLT2 = volt1

DO

CALL salana(0, vt)

FOR i = 1 TO 1500: NEXT i

voltt = voltf - VOLT2

```

```

tr = vf - vt
IF volt >= 0 THEN
    CALL saldig(0, 1)           'Pone en ceros al contador
    CALL saldig(0, 2)         'Inicia TIMER
    CALL saldig(0, 0)         'Pone todas las salidas en 0
    DO
        CALL entdig(1, dato)   'Lee interval del TIMER
        dato = dato AND &H1
    LOOP WHILE (dato <> 0)
    CALL pachecon(CUENTA1, CUENTA2, CUENTA3, CUENTA4)
    voltaje = vt * 2000 / 9
    IF NC = 2 THEN PRINT VOLT2, CUENTA1, CUENTA2
    IF NC = 3 THEN PRINT VOLT2, CUENTA1, CUENTA2, CUENTA3
    IF NC = 4 THEN PRINT VOLT2, CUENTA1, CUENTA2, CUENTA3, CUENTA4
    PRINT #1, VOLT2, CUENTA1, CUENTA2, CUENTA3, CUENTA4

    END IF
    vt = vt + iv
    VOLT2 = VOLT2 + volt
    LOOP UNTIL volt < 0

    END IF

    LOOP UNTIL xx > c
    CLOSE #1
    CALL endato(dat$)
    CALL grafica(arh$, suma$, c)
    END

```

## SUBROUTINA

SUB gráfica (arh\$, suma\$, c)

SCREEN 2: CLS : KEY OFF: WINDOW (0, 0)-(639, 199)

OPEN arh\$ FOR INPUT AS #2

i = 0

DO WHILE NOT EOF(2)

i = i + 1

INPUT #2, voltaje(i), CUENTA1(i), CUENTA2(i), CUENTA3(i), CUENTA4(i)

LOOP

CLOSE #2

N = i

altov! = voltaje(1)

FOR k = 2 TO N

IF voltaje(k) > altov! THEN altov! = voltaje(k)

NEXT k

bajov! = voltaje(1)

FOR k = 2 TO N

IF voltaje(k) < bajov! THEN bajov! = voltaje(k)

NEXT k

OPEN suma\$ FOR OUTPUT AS #4

FOR i = 1 TO N / c

FOR r = 1 TO c - 1

s = N / c

CUENTA1(i) = CUENTA1(i) + CUENTA1(i + r \* s)

CUENTA2(i) = CUENTA2(i) + CUENTA2(i + r \* s)

CUENTA3(i) = CUENTA3(i) + CUENTA3(i + r \* s)

CUENTA4(i) = CUENTA4(i) + CUENTA4(i + r \* s)

NEXT r

PRINT #4, voltaje(i), CUENTA1(i), CUENTA2(i), CUENTA3(i), CUENTA4(i)

c1(i) = CUENTA1(i)

c2(i) = CUENTA2(i)

c3(i) = CUENTA3(i)

c4(i) = CUENTA4(i)

NEXT i

CLOSE #4

N = N / c

```
altoc1! = c1(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c1(k) > altoc1! THEN altoc1! = c1(k)
NEXT k
```

```
bajoc1! = c1(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c1(k) < bajoc1! THEN bajoc1! = c1(k)
NEXT k
```

```
altoc2! = c2(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c2(k) > altoc2! THEN altoc2! = c2(k)
NEXT k
```

```
bajoc2! = c2(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c2(k) < bajoc2! THEN bajoc2! = c2(k)
NEXT k
```

```
altoc3! = c3(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c3(k) > altoc3! THEN altoc3! = c3(k)
NEXT k
```

```
bajoc3! = c3(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c3(k) < bajoc3! THEN bajoc3! = c3(k)
NEXT k
```

```
altoc4! = c4(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c4(k) > altoc4! THEN altoc4! = c4(k)
NEXT k
```

```
bajoc4! = c4(1)
FOR k = 2 TO N
  IF c4(k) < bajoc4! THEN bajoc4! = c4(k)
NEXT k
```

```
IF bajoc1! <= bajoc2! THEN bajoc! = bajoc1!
IF bajoc1! > bajoc2! THEN bajoc! = bajoc2!
```

```
IF altoc1! >= altoc2! THEN altoc! = altoc1!  
IF altoc2! < altoc2! THEN altoc! = altoc2!
```

```
IF altoc1! = bajoc1 THEN  
WHILE INKEY$ = ""  
LOCATE 13, 20: PRINT "Todos los valores del contador 1 son iguales"  
FOR i = 1 TO 500: NEXT i  
CLS  
WEND  
END IF
```

```
IF altoc2! = bajoc2! THEN  
WHILE INKEY$ = ""  
LOCATE 18, 20: PRINT "Todos los valores del contador 2 son iguales"  
FOR i = 1 TO 500: NEXT i  
CLS  
WEND  
END IF
```

```
IF altoc3! = bajoc3! THEN  
WHILE INKEY$ = ""  
LOCATE 18, 20: PRINT "Todos los valores del contador 3 son iguales"  
FOR i = 1 TO 500: NEXT i  
CLS  
WEND  
END IF
```

```
IF altoc4! = bajoc4! THEN  
WHILE INKEY$ = ""  
LOCATE 18, 20: PRINT "Todos los valores del contador 4 son iguales"  
FOR i = 1 TO 500: NEXT i  
CLS  
WEND  
END IF
```

```
abc1! = (altoc1! + bajoc1!) / 2  
abc2! = (altoc2! + bajoc2!) / 2  
abc3! = (altoc3! + bajoc3!) / 2  
abc4! = (altoc4! + bajoc4!) / 2
```

```
f1 = altoc1!  
f2 = FIX((altoc1! + abc1!) / 2)  
f3 = FIX(abc1!)  
f4 = FIX((bajoc1! + abc1!) / 2)
```

```
f5 = altoc2!  
f6 = FIX((altoc2! + abc2!) / 2)  
f7 = FIX(abc2!)  
f8 = FIX((bajoc2! + abc2!) / 2)
```

```
f9 = altoc3!
```

```
f10 = FIX((altoc3! + abc3!) / 2)
f11 = FIX(abc3!)
f12 = FIX((bajoc3! + abc3!) / 2)
```

```
f13 = altoc4!
f14 = FIX((altoc4! + abc4!) / 2)
f15 = FIX(abc4!)
f16 = FIX((bajoc4! + abc4!) / 2)
```

```
FOR i = 1 TO N
x(i) = ((voltaje(i) - bajov!) / (altov! - bajov!)) * 565 + 65
y1(i) = ((c1(i) - bajoc1!) / (altoc1! - bajoc1!)) * 170 + 18
y2(i) = ((c2(i) - bajoc2!) / (altoc2! - bajoc2!)) * 170 + 18
y3(i) = ((c3(i) - bajoc3!) / (altoc3! - bajoc3!)) * 170 + 18
y4(i) = ((c4(i) - bajoc4!) / (altoc4! - bajoc4!)) * 170 + 18
NEXT i
```

```
LOCATE 25, 1
```

```
INPUT "CUAL CONTADOR QUIERES GRAFICAR? 1, 2, 3, 4, ANY KEY (1 y 2) ", op$
```

```
IF op$ = "2" THEN
```

```
'Se elije al "contador 2" para graficar y analizar los datos
```

```
CLS
```

```
LOCATE 1, 10: PRINT " "; suma$; "
```

```
CONTADOR 2"
```

```
LINE (65, 10)-(630, 182), , B
```

```
LINE (65, 53)-(70, 53)
```

```
LINE (625, 53)-(630, 53)
```

```
LINE (65, 96)-(70, 96)
```

```
LINE (625, 96)-(630, 96)
```

```
LINE (65, 139)-(70, 139)
```

```
LINE (625, 139)-(630, 139)
```

```
FOR i = 1 TO N
```

```
LINE (x(i), 10)-(x(i), 13)
```

```
LINE (x(i), 179)-(x(i), 182)
```

```
NEXT i
```

```
LOCATE 3, 1: PRINT f5
```

```
LOCATE 8, 1: PRINT f6
```

```
LOCATE 13, 1: PRINT f7
```

```
LOCATE 19, 1: PRINT f8
```

```
LOCATE 25, 6
```

```
PRINT " "; bajov!, "
```

```
"; FIX(altov!)
```

```
WHILE INKEY$ <> CHR$(27)
```

```
FOR i = 1 TO N
```

```
PSET (x(i), y2(i)), 6
```

```
CIRCLE (x(i), y2(i)), 2
```

```
NEXT i
```

```
WEND
```

```

FOR i = 1 TO N                                'resta el fondo
c2(i) = c2(i) - bajoc2!
NEXT i
altoc2! = altoc2! - bajoc2!
bajoc2! = 0

FOR i = 1 TO N
X(i) = ((voltaje(i) - bajov!) / (altov! - bajov!)) * 565 + 65
y2(i) = ((c2(i) - bajoc2!) / (altoc2! - bajoc2!)) * 170 + 18
NEXT i

'muestra la gráfica de voltaje(i) vs. No. de cuentas en el "contador 2"
CLS
LINE (65, 10)-(630, 182), , B
LINE (65, 53)-(70, 53)
LINE (625, 53)-(630, 53)
LINE (65, 96)-(70, 96)
LINE (625, 96)-(630, 96)
LINE (65, 139)-(70, 139)
LINE (625, 139)-(630, 139)
FOR i = 1 TO N
LINE (X(i), 10)-(X(i), 13)
LINE (X(i), 179)-(X(i), 182)
NEXT i

LOCATE 13, 1
PRINT FIX((altoc2! + bajoc2!) / 2)
LOCATE 8, 1
PRINT FIX((altoc2! + (altoc2! + bajoc2!) / 2) / 2)
LOCATE 19, 1
PRINT FIX((bajoc2! + (altoc2! + bajoc2!) / 2) / 2)
LOCATE 3, 1
PRINT altoc2!
LOCATE 25, 6
PRINT " "; bajov!, "                                "; FIX(altov!)
LOCATE 1, 10: PRINT " "; gra$, "                                CONTADOR 2"

WHILE INKEY$ <> CHR$(27)
FOR i = 1 TO N
PSET (X(i), y2(i)), 6
CIRCLE (X(i), y2(i)), 2
NEXT i
WEND

CLS
INPUT "¿DESEAS AJUSTAR UNA PARABOLA EN EL MAXIMO DE LA DISTRIBUCION? S/N "; R$

IF R$ = "n" OR R$ = "N" THEN END

IF R$ = "s" OR R$ = "S" THEN

```

```

FOR k = 1 TO N
  IF c2(k) = altoc2! THEN
    x1 = voltaje(k - 1)
    x2 = voltaje(k)
    x3 = voltaje(k + 1)
    y1 = c2(k - 1)
    y2 = c2(k)
    y3 = c2(k + 1)
    m = k
  END IF
NEXT k
a2# = ((y3 - y2) / (x3 - x2) - (y2 - y1) / (x2 - x1)) / (x3 - x1)
A1# = ((y2 - y1) / (x2 - x1)) - a2# * (x2 + x1)
maximo# = (-A1# / (2 * a2#))
LOCATE 12, 1
PRINT "EL voltaje CORRESPONDIENTE AL MAXIMO ES: ", maximo#
E0 = 4800
cte# = 1.679354129#
Q# = E0 - 3 * cte# * maximo#
LOCATE 15, 1: PRINT "EL VALOR DE Q ES          ", Q#
EI# = (E0 - Q#) / 3
PRINT "ENERGIA EN LABORATORIO CORRESPONDIENTE AL MAXIMO", EI#
WHILE INKEY$ <> CHR$(27)
WEND

```

```

'Transforma la escala de voltaje de analizador a energía en S.L. y calcula las correspondientes energías en C.M.
FOR i = 1 TO N
  E#(i) = cte# * voltaje(i)
  Ecm#(i) = EI# + E#(i) - 2 * SQR(EI# * E#(i))
NEXT i

```

```

  Ecmmin = Ecm#(1)
  FOR k = 2 TO N
    IF Ecm#(k) < Ecmmin THEN Ecmmin = Ecm#(k)
  NEXT k

```

```

  Ecmmax = Ecm#(1)
  FOR k = 2 TO N
    IF Ecm#(k) > Ecmmax THEN Ecmmax = Ecm#(k)
  NEXT k

```

```

' Realiza el cálculo del factor de eficiencia del detector

```

```

CLS
delv# = (voltaje(2) - voltaje(1)) / 2
alfa# = .0019482622#
cosa# = COS(alfa#)
sena# = SIN(alfa#)

```

```

FOR i = 1 TO N
  vol1#(i) = voltaje(i)
  vol2#(i) = voltaje(i) + delv#

```

```

E1#(i) = cte# * vol1#(i)
E2#(i) = cte# * vol2#(i)
Ecm1#(i) = E1# + E1#(i) - 2 * SQR(E1# * E1#(i))
Ecm2#(i) = E1# + E2#(i) - 2 * SQR(E1# * E2#(i))

```

```

dele# = (E2#(1) - E#(1))

```

'Definición de los limites de integración

```

Ecinfl#(i) = E1# + E#(i) - dele# - 2 * SQR(E1# * (E#(i) - dele#))
Ecsup1#(i) = E1# + E#(i) - dele# - 2 * SQR(E1# * (E#(i) - dele#)) * cosa#

```

```

Ecinf2#(i) = Ecsup1#(i)
Ecsup2#(i) = E1# + E#(i) + dele# - 2 * SQR(E1# * (E#(i) + dele#)) * cosa#

```

```

Ecinf3#(i) = Ecsup2#(i)
Ecsup3#(i) = E1# + E#(i) + dele# - 2 * SQR(E1# * (E#(i) + dele#))

```

```

delecm#(i) = Ecsup3#(i) - Ecinfl#(i)

```

```

incre1#(i) = (Ecsup1#(i) - Ecinfl#(i)) / 1000
incre2#(i) = (Ecsup2#(i) - Ecinf2#(i)) / 1000
incre3#(i) = (Ecsup3#(i) - Ecinf3#(i)) / 1000
incre4#(i) = (Ecsup2#(i) - Ecsup3#(i)) / 1000
incre5#(i) = (Ecsup1#(i) - Ecsup2#(i)) / 1000

```

```

NEXT i

```

'Calcula integrales para los puntos que se encuentran antes del máximo de la distribución

```

FOR i = 2 TO m - 1

```

```

sumf1#(i) = 0
DO
FOR j# = Ecsup3#(i) TO Ecsup2#(i) STEP incre4#(i)
f1#(j#) = (j#) ^ (.5) - (E#(i) + dele# - j# - E1#) * (1 / (2 * SQR(E1#)))
sumf1#(i) = sumf1#(i) + f1#(j#)
NEXT j#
LOOP WHILE j# <= Ecsup2#(i)
volu1#(i) = sumf1#(i) * incre4#(i) - (incre4#(i) / 2) * (f1#(Ecsup3#(i)) + f1#(Ecsup2#(i)))

```

```

sumf2#(i) = 0
DO
FOR j# = Ecsup2#(i) TO Ecsup1#(i) STEP incre5#(i)
f2#(j#) = (j#) ^ (.5) + ((E1#) ^ (.5)) * (sena#) ^ (2) - (((j# - E1# * (sena#) ^ (2))) ^ (.5)) * cosa#
sumf2#(i) = sumf2#(i) + f2#(j#)
NEXT j#
LOOP WHILE j# <= Ecsup1#(i)
volu2#(i) = sumf2#(i) * incre5#(i) - (incre5#(i) / 2) * (f2#(Ecsup2#(i)) + f2#(Ecsup1#(i)))

```

```

sumf3#(i) = 0
DO
FOR j# = Ecinfl#(i) TO Ecsup1#(i) STEP incre1#(i)
f3#(j#) = (j#) ^ (.5) - (E#(i) - dele# - j# - El#) * (1 / (2 * SQR(El#)))
sumf3#(i) = sumf3#(i) + f3#(j#)
NEXT j#
LOOP WHILE j# <= Ecsup1#(i)
volu3#(i) = ABS(sumf3#(i) * incre1#(i) - (incre1#(i) / 2) * (f3#(Ecinfl#(i)) + f3#(Ecsup1#(i))))

volut#(i) = volu1#(i) + volu2#(i) + volu3#(i)
'PRINT "el volumen total es:", volut#(i)
vc#(i) = 6 * ((Ecm#(i)) ^ (.5)) * ABS(delecm#(i)) + (ABS(delecm#(i)) ^ (3)) / (8 * (Ecm#(i)) ^ (1.5))
'PRINT "el volumen del cascaron es", vc#(i)
fef#(i) = volut#(i) / vc#(i)
PRINT "el factor de eficiencia es", fef#(i)

```

NEXT i

```

FOR i = 2 TO m - 1
intcm(i) = c2(i) / fef#(i)
PRINT i, Ecm#(i), intcm(i)
NEXT i

```

'Calcula integrales para los puntos que se encuentran a partir del máximo de la distribución

FOR i = m TO N

```

sumf1#(i) = 0
DO
FOR j# = Ecinfl#(i) TO Ecsup1#(i) STEP incre1#(i)
f1#(j#) = (j#) ^ (.5) - (E#(i) - dele# - j# - El#) * (1 / (2 * SQR(El#)))
sumf1#(i) = sumf1#(i) + f1#(j#)
NEXT j#
LOOP WHILE j# <= Ecsup1#(i)
volu1#(i) = sumf1#(i) * incre1#(i) - (incre1#(i) / 2) * (f1#(Ecinfl#(i)) + f1#(Ecsup1#(i)))

```

```

sumf2#(i) = 0
DO
FOR j# = Ecinfl2#(i) TO Ecsup2#(i) STEP incre2#(i)
f2#(j#) = (j#) ^ (.5) + ((El#) ^ (.5)) * (sena#) ^ (2) - (((j# - El# * (sena#) ^ (2))) ^ (.5)) * cosa#
sumf2#(i) = sumf2#(i) + f2#(j#)
NEXT j#
LOOP WHILE j# <= Ecsup2#(i)
volu2#(i) = sumf2#(i) * incre2#(i) - (incre2#(i) / 2) * (f2#(Ecinfl2#(i)) + f2#(Ecsup2#(i)))

```

```

sumf3#(i) = 0
DO
FOR j# = Ecinfl3#(i) TO Ecsup3#(i) STEP incre3#(i)
f3#(j#) = (j#) ^ (.5) - (E#(i) + dele# - j# - El#) * (1 / (2 * SQR(El#)))

```

```

sumf3#(i) = sumf3#(i) + f3#(j#)
NEXT j#
LOOP WHILE j# >= Ecinf3#(i)
volu3#(i) = ABS(sumf3#(i) * incre3#(i) - (incre3#(i) / 2) * (f3#(Ecinf3#(i)) + f3#(Ecsup3#(i))))

volut#(i) = volu1#(i) + volu2#(i) + volu3#(i)
vc#(i) = 6 * (Ecm#(i)) ^ (.5) * delectm#(i) + ((delectm#(i)) ^ (3)) / (8 * (Ecm#(i)) ^ (1.5))
fef#(i) = volut#(i) / vc#(i)
PRINT "el factor de eficiencia es", i, fef#(i)

NEXT i

FOR i = m TO N
intcm(i) = c2(i) / fef#(i)
PRINT i, Ecm#(i), intcm(i)
NEXT i

'Crea el archivo de datos de la distribución de energías en el sistema de C.M.

INPUT "Dame el nombre del archivo para los datos de la distribución en C.M.      ", arh1$

OPEN arh1$ FOR OUTPUT AS #2
FOR i = 2 TO N
intcm(i) = c2(i) / fef#(i)
PRINT #2, Ecm#(i), intcm(i)
NEXT i
CLOSE #2

END IF

      END IF

END SUB

```

## APENDICE C

En la figura C.1 se muestra la relación entre las velocidades de un fragmento de la disociación de  $H_3^+$ . La velocidad  $V'$  es la del ion molecular incidente después de la colisión y justo antes de disociarse,  $V$  es la velocidad adquirida por el fragmento ( $H^+$  ó  $H^-$ ) en S.L. y  $v$  es la velocidad del mismo fragmento referida al C.M. de la molécula.

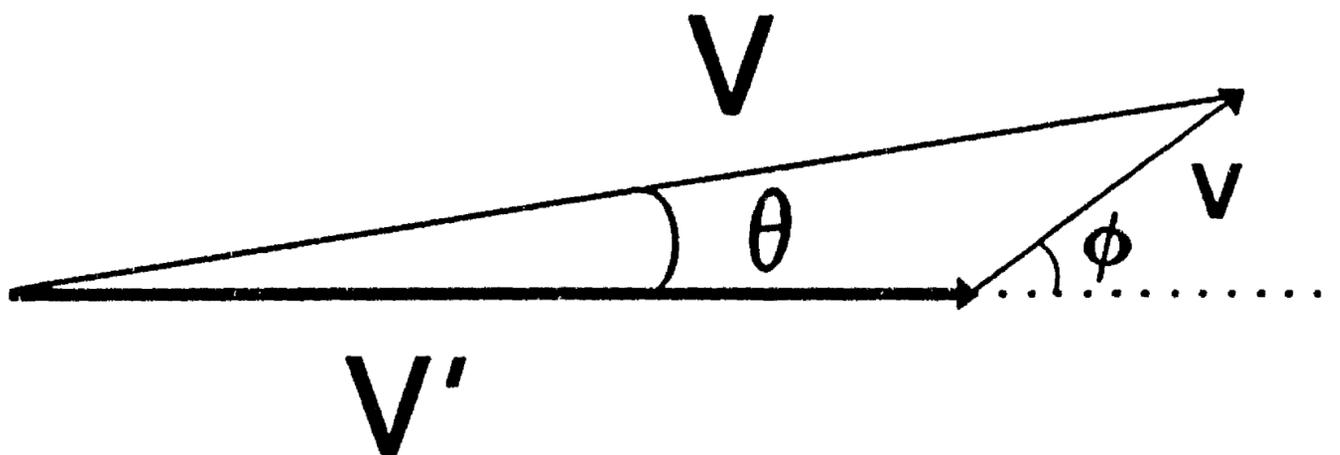


Fig. C.1

Relación entre las velocidades de un fragmento ( $H^+$ ,  $H^-$ ) proveniente de la disociación de  $H_3^+$ , en los sistemas de referencia de laboratorio (S.L.) y de centro de masa de  $H_3^+$  (C.M.)

De la figura C.1 se tiene la relación vectorial:

$$\vec{V} = \vec{V}' + \vec{v} \quad (1C)$$

ó bien

$$V = [V'^2 + v^2 + 2V'v\cos\phi]^{1/2} \quad (2C)$$

Debido a la resolución finita del analizador de energía, los

iones seleccionados con un voltaje fijo en el analizador no tienen una sola energía, en realidad llegan al detector los iones cuya energía se encuentre dentro del intervalo definido por la resolución del analizador, correspondiente a este intervalo de energías se tiene un intervalo de velocidades conocido como ventana cinemática. En la figura C.2 se muestra la relación entre las ventanas cinemáticas en los sistemas de referencia de laboratorio y el centro de masa de la molécula.

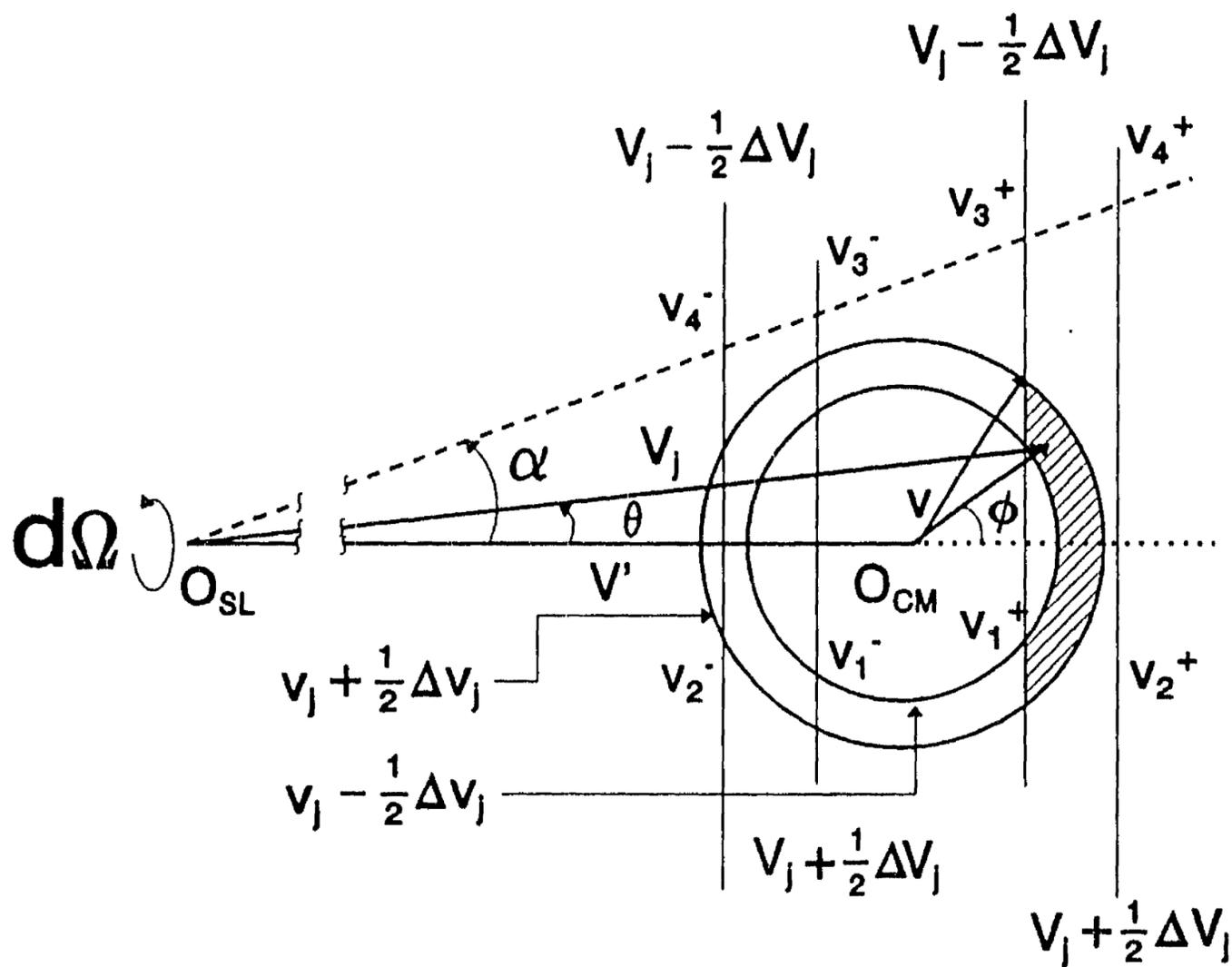


Fig. C.2

Relación entre las ventanas cinemáticas medidas en los sistemas de referencia C.M. y S.L.

En esta figura  $v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j$  y  $v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j$  son superficies esféricas de velocidades constantes en S.L. centradas en  $O_{SL}$  (origen en S.L.). Las velocidades en C.M.  $v_1^+$ ,  $v_2^+$ ,  $v_3^+$  y  $v_4^+$  referidas al origen  $O_{CM}$  (origen en C.M.) definen el j-esimo intervalo de la ventana cinemática en la dirección de movimiento, la cual corresponde a un intervalo de velocidad  $\Delta v_j$  y un ángulo sólido de aceptación  $d\Omega$  en S.L. formado por la rotación de  $2\pi$  radianes del ángulo  $\alpha$  definido por el colimador situado a la entrada del analizador, alrededor del eje  $O_{SL}-O_{CM}$ .

La apertura finita del detector, así como la resolución de energía del analizador hacen que los fragmentos se detecten con distinta eficiencia en S.L.. Cuando las superficies esféricas definidas por  $v_j \pm \frac{1}{2}\Delta v_j$  se aproximan por superficies planas, el factor de eficiencia en el conteo, correspondiente a la j-esima ventana cinemática está dado por<sup>(1)</sup>:

$$\epsilon_{fj} = \frac{\int_{\Delta v_j} 2\pi(1 - \cos\phi) v^2 dv}{\frac{4}{3}\pi \left[ \left( v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j \right)^3 - \left( v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j \right)^3 \right]} \quad (3C)$$

en esta ecuación  $\phi$  es el ángulo entre  $v$  y el eje  $OSL-OCM$ , cuando  $v$  se encuentra sobre el límite del cascarón de volumen que define la j-esima ventana cinemática. Este ángulo puede tener tres expresiones  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ , y  $\phi_3$  dependiendo si  $v$  se encuentra sobre la superficie  $v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j$ , entre las superficies  $v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j$  y  $v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j$ , a un ángulo  $\alpha$ , ó sobre la superficie  $v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j$ .

De acuerdo con la figura C.2 y aplicando la ley de los

cosenos, se obtienen las siguientes expresiones para  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ , y  $\phi_3$ :

$$\cos\phi_1 = \left[ \frac{2U_j - \Delta U_j}{2m_1} - \frac{1}{2}(v^2 + v'^2) \right] \frac{1}{v v'} \quad (4C)$$

ó bien en términos de las energías

$$\cos\phi_1 = \frac{\left[ U_j - \frac{\Delta U_j}{2} - e - \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) \right]}{2 \sqrt{\left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) e}} \quad (5C)$$

De igual forma, a partir de la figura C.2 se obtienen expresiones para  $\cos\phi_2$  y  $\cos\phi_3$ :

$$\begin{aligned} \cos\phi_2 &= -\frac{v'}{v} \operatorname{sen}^2 \alpha + \left[ 1 - \left( \frac{v'}{v} \right)^2 \operatorname{sen}^2 \alpha \right]^{1/2} \cos \alpha \\ &= -\sqrt{\frac{(E_0 - Q)}{3e}} \operatorname{sen}^2 \alpha + \left[ 1 - \left( \frac{E_0 - Q}{3e} \right) \operatorname{sen}^2 \alpha \right]^{1/2} \cos \alpha \end{aligned} \quad (6C)$$

y

$$\cos\phi_3 = \frac{\left[ U_j + \frac{\Delta U_j}{2} - e - \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) \right]}{2 \sqrt{\left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) e}} \quad (7C)$$

donde  $U_j$  es la energía del fragmento de masa  $m$  y velocidad  $v_j$  medida

en en S.L.,  $\Delta U_j$  es la resolución en energía del analizador,  $\epsilon$  es la energía del fragmento medida en C.M.,  $E_0$  es la energía con la que incide el ion  $H_3^+$  sobre el blanco,  $Q$  es la energía absorbida por la molécula.

El factor de eficiencia en el conteo definido por la ecuación (3C), puede también ser expresado en términos de las energías de la siguiente manera:

$$\epsilon_{f_j} = \frac{3 \int_{\Delta e_j} (1 - \cos\phi) \epsilon^{1/2} d\epsilon}{6\epsilon_j^{1/2}\Delta e_j + \frac{(\Delta e_j)^3}{8\epsilon_j^{3/2}}} \quad (8C)$$

donde los límites de energías  $\epsilon_1^+$ ,  $\epsilon_2^+$ ,  $\epsilon_3^+$  y  $\epsilon_4^+$ , que corresponden a las velocidades  $v_1^+$ ,  $v_2^+$ ,  $v_3^+$  y  $v_4^+$ , hacia adelante en CM, se encuentran de la siguiente manera:

Para  $v_1^+$  se tiene (para un ángulo de dispersión  $\theta = 0$  en SL).

$$v_1^+ = v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j - v' \quad (9C)$$

ó bien, en términos de las energías.

$$\epsilon_1^+ = \left( U_j - \frac{\Delta U_j}{2} \right) + \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) - 2 \sqrt{\left( U_j - \frac{\Delta U_j}{2} \right) \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right)} \quad (10C)$$

análogamente se encuentra  $v_2^+$ , solo que en este caso se trabaja con la superficie  $v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j$ , por lo que se tiene:

$$v_2^+ = v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j - v' \quad (11C)$$

y en términos de las energías se obtiene:

$$e_2^+ = \left( U_j + \frac{\Delta U_j}{2} \right) + \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) - 2 \sqrt{\left( U_j + \frac{\Delta U_j}{2} \right) \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right)} \quad (12C)$$

para calcular  $v_3^+$ , se debe considerar la superficie  $v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j$  y el ángulo  $\alpha$  que subtiende el colimador de entrada del analizador al centro de la celda de reacción, el resultado es el siguiente:

$$(v_3^+)^2 = (v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j)^2 + v'^2 - 2(v_j - \frac{1}{2}\Delta v_j)v' \cos \alpha \quad (13C)$$

ó su equivalente en energía:

$$e_3^+ = \left( U_j - \frac{\Delta U_j}{2} \right) + \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) - 2 \sqrt{\left( U_j - \frac{\Delta U_j}{2} \right) \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right)} \cos \alpha \quad (14C)$$

análogamente se encuentran las siguientes expresiones para  $v_4^+$  y  $e_4^+$ :

$$(v_4^+)^2 = (v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j)^2 + v'^2 - 2(v_j + \frac{1}{2}\Delta v_j)v' \cos \alpha \quad (15C)$$

$$e_4^+ = \left( U_j + \frac{\Delta U_j}{2} \right) + \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right) - 2 \sqrt{\left( U_j + \frac{\Delta U_j}{2} \right) \left( \frac{E_0 - Q}{3} \right)} \cos \alpha \quad (16C)$$

Con estas variables como límites de integración se calcula la integral definida en la ecuación (9C), este procedimiento debe realizarse para cada punto del espectro.

## REFERENCIAS

- 1.- Martínez, H. "Estudio de Diferentes Canales de Disociación de Iones Hidrogénicos en He". Tesis Doctoral, Fac. Ciencias U.N.A.M. (1987), Pag. 26