



00362 2  
71.  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

INTERACCION DE IONES  
DE  $Kr^+$  EN HELIO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)  
P R E S E N T A  
JUAN MANUEL HERNANDEZ RODRIGUEZ

MEXICO, D. F..

1997

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 esta 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.

**Porque tu corazón ha sido mi escuela y siempre me has apoyado, me has enseñado a luchar con el corazón y a disfrutar de la vida, porque has confiado en mi y siempre he contado contigo en todos los aspectos, por la ternura que me inspiras, porque me has enseñado a amar y respetar, por el inmenso cariño que de tí recibo....para tí querida **Hilda**, mi amor, mi corazón y mis logros.**

**De todo corazón a la memoria de mi querida Madre y con mucho orgullo a mi adorable Padre, ya que su inmenso cariño, amor, apoyo y confianza me han permitido lograr esta meta.**

**A mis hermanos.**

## **AGRADECIMIENTOS**

**Mi sincero agradecimiento al Dr. Horacio Martínez Valencia, por su profesionalismo, por la gran calidad humana que lo caracteriza, por la dirección del presente trabajo y por ser un buen amigo.**

**M. en C. Beatriz Fuentes Madariaga, por sus importantes discusiones, sugerencias, así como por la revisión del trabajo.**

**Al Fis. Pedro G. Reyes Romero, por el apoyo técnico recibido en la realización de este trabajo.**

**Al técnico Anselmo González Trujillo, por la asesoría técnica.**

**A los miembros del honorable jurado examinador a quienes agradezco en todo lo que vale, el inmerecido honor que me confieren al examinarme.**

**Al Consejo Nacional de Ciencia Y Tecnología (CONACYT) por la beca de estudios de posgrado (No. de registro 90565).**

**A D.G.A.P.A. proyecto IN-109196.**

## INDICE

	página
INTRODUCCION.....	1
<b>CAPITULO I</b>	
I.1.- IMPORTANCIA DE ESTA INVESTIGACION.....	5
I.2.- CONCEPTO DE TRANSFERENCIA DE CARGA.....	8
I.3.- TRABAJOS PREVIOS DE $Kr^+$ EN GASES.....	10
I.4.- PROCESO DE CAPTURA DE CARGA.....	26
I.5.- BALANCE DETALLADO.....	40
I.6.- LEY DE ESCALAMIENTO.....	43
<b>CAPITULO II</b>	
II.- DESCRIPCION DEL APARATO.....	48
II.1.- FUENTE DE IONES:	
-Operación de la Fuente.....	49
II.2.- ACELERACION, ENFOQUE Y SELECCION DE IONES:	
-Lentes Einzel.....	52
-Filtro de Velocidades.....	55
II.3.- CELDA DE REACCION.....	64
II.4.- SISTEMA DE DETECCION	
-Caja de Faraday.....	66
-Analizador Parabólico.....	68
-Multiplicador de Electrones.....	70
<b>CAPITULO III</b>	
III.- DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO	
III.1.-CONCEPTO DE SECCION TRANSVERSAL.....	73
III.2.-CANTIDADES DIRECTAMENTE MEDIBLES.....	77
III.3.-ERRORES EXPERIMENTALES.....	81
<b>CAPITULO IV</b>	
RESULTADOS.....	85

<b>CAPITULO V</b>	
<b>CONCLUSIONES.....</b>	<b>98</b>
<b>EXPERIMENTOS FUTUROS.....</b>	<b>102</b>
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>104</b>
<b>APENDICE A.....</b>	<b>109</b>
<b>APENDICE B.....</b>	<b>113</b>
<b>APENDICE C.....</b>	<b>119</b>
<b>GLOSARIO.....</b>	<b>124</b>
<b>PUBLICACION.....</b>	<b>127</b>

## **I N T R O D U C C I O N**

En los pasados cinco años, las investigaciones realizadas en el Laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares del Instituto de Física, Laboratorio de Cuernavaca, han estado dirigidas al entendimiento de los mecanismos de captura simple y doble en interacciones de iones atómicos ( $\text{H}^+$ ,  $\text{He}^+$ ,  $\text{D}^+$ , etc.) con átomos ( $\text{H}_2$ ,  $\text{He}$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{Xe}$ ,  $\text{Ne}$ ) y moléculas ( $\text{SF}_6$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$ ). El propósito principal de estos estudios ha sido el medir secciones transversales diferenciales (en ángulo) y totales para procesos de interés en la física atmosférica y en la física de plasmas.

Durante muchos años ha sido estudiado el proceso de transferencia de carga entre iones y átomos; las teorías que se han desarrollado pretenden explicar los fenómenos observados. Sin embargo, los tratamientos deben ser más realistas para el caso de colisiones de iones atómicos y átomos neutros. Los trabajos más recientes indican que aún cuando las partículas colisionantes son monoatómicas, la teoría disponible no siempre describe adecuadamente la transferencia de electrones a baja energía, sólo se conoce la teoría de transferencia de carga para partículas monoatómicas y ésta no es la más adecuada para colisiones que involucran más de dos núcleos. Así, la transferencia electrónica entre iones y átomos tiene un lugar primordial en nuestro entendimiento del proceso.

Por ejemplo, iones rápidos de la magnetósfera son guiados hacia la atmósfera por el campo magnético, depositando su energía mediante una

serie de colisiones con constituyentes de la atmósfera. Si las secciones transversales para las reacciones de pérdida de energía en la atmósfera pueden ser medidas, esta información junto con un modelo apropiado pueden ser de gran utilidad para mejorar nuestro entendimiento de los procesos atmosféricos.

El entendimiento de una variedad de fenómenos físicos que ocurren en la atmósfera y en el medio interestelar requieren información de tales interacciones. Más claramente dicho, los datos de secciones transversales para una variedad de interacciones atómicas esenciales para caracterizar los procesos que ocurren en los mecanismos de pruebas de fusión termonuclear, han proporcionado información importante acerca del estado de los plasmas bajo confinamiento.

La finalidad de este trabajo es medir las secciones diferenciales en ángulo y totales debidas al impacto de iones positivos de **Kriptón** en **Helio** y examinar las interacciones que conducen a la formación de átomos de **Kriptón** en un intervalo de energías de 1.0 a 5.0 keV.

Este trabajo culminó con la publicación de los presentes resultados en *Chemical Physics*, **215**, p. 285-289, (1997).

El trabajo se encuentra distribuido de la siguiente forma:

En el capítulo **I** se presenta una introducción de algunas ideas básicas de experimentos de colisiones atómicas, el concepto de transferencia de carga de los distintos procesos que se pueden presentar en un proceso de colisión, una revisión de trabajos acerca del tema, así

cómo el modelo teórico de Landau-Zener que se utilizó para la discusión de los resultados experimentales.

En el capítulo **II** se describe a detalle el dispositivo experimental empleado para realizar las mediciones de las distribuciones angulares del proceso de captura electrónica.

En el capítulo **III** se describe la manera de cómo se efectuó el experimento, resaltando la teoría de medida con base en las cantidades medibles en el laboratorio.

En el capítulo **IV** se presentan los resultados obtenidos experimentalmente, así como los obtenidos al ser aplicado el modelo teórico descrito en el capítulo **I**, presentando además una comparación gráfica del proceso.

Finalmente en el capítulo **V** se presentan las conclusiones del trabajo.

## **CAPITULO I**

**I.1.- IMPORTANCIA DE ESTA INVESTIGACION.**

**I.2.- CONCEPTO DE TRANSFERENCIA DE CARGA.**

**I.3.- TRABAJOS PREVIOS DE  $Kr^+$  EN GASES.**

**I.4.- PROCESO DE CAPTURA DE CARGA.**

**I.5.- BALANCE DETALLADO.**

**I.6.- LEY DE ESCALAMIENTO.**

## **I.1.-IMPORTANCIA DE ESTA INVESTIGACION**

**El estudio de los procesos atómicos y moleculares ha jugado un papel importante en la historia de la Física. El desarrollo de la Electrodinámica Cuántica indica la importancia de medidas precisas de parámetros atómicos<sup>[1;2]</sup>. El descubrimiento de los máseres y la subsecuente aplicación de los principios físicos fundamentales a la producción de radiación óptica coherente trajo una revitalización de la espectroscopia<sup>[3]</sup> y el estudio de la interacción entre iones y átomos.**

**El interés por la Física Atómica realmente se debe al estudio de la física atmosférica<sup>[4]</sup>, la astrofísica<sup>[5]</sup> y la física de plasmas<sup>[6]</sup>.**

**Los primeros trabajos realizados en el programa de Energía Termonuclear Controlada, tuvieron como objetivo el determinar secciones transversales precisas que pudiesen describir la interacción de sistemas atómicos.**

**En las pasadas dos décadas diversos laboratorios han realizado mediciones de secciones transversales originadas por interacciones atómicas para un gran número de sistemas sobre un intervalo de energía del orden de algunos eV hasta varios miles de eV.**

**Por otro lado, se han desarrollado cálculos teóricos considerables haciendo uso de la Mecánica Cuántica para intentar describir la interacción entre los sistemas atómicos, pero a medida que éstos son más complejos, su aplicación es más limitada.**

**Conforme las computadoras llegaron a ser de mayor rapidez y**

capacidad, se observó que los cálculos teóricos fueron más aproximados.

Los experimentos realizados en numerosas disciplinas pueden también proveer comparaciones cuantitativas con predicciones teóricas.

Existe, por lo tanto, un propósito mutuo para realizar medidas precisas de procesos atómicos. Las secciones transversales son de importancia práctica y de la comparación de sus resultados con la teoría, se obtiene un entendimiento más completo de sistemas atómicos.

Se han llevado a cabo estudios de procesos de transferencia de carga como parte de un programa de investigaciones en colisiones atómicas, la información acerca de tales procesos es de importancia en el programa de Energía Termonuclear Controlada (dado que las partículas neutras no pueden ser confinadas), así como en estudios atmosféricos. Las investigaciones anteriores fueron encaminadas a determinar las fracciones de los diferentes estados de carga resultantes cuando los iones pasan a través de diversos gases utilizados como blanco. Una motivación adicional para entender reacciones ion-átomo en gases raros proviene de la importancia de tales reacciones en algunos proyectos de láser<sup>17; 81</sup>.

Algunos trabajos han determinado la probabilidad de intercambio de carga dentro de estados excitados en un intento por conocer el mecanismo de intercambio de carga, el presente experimento fue encaminado a medir la sección transversal de captura simple en la colisión de iones de Kriptón. Los resultados del presente experimento serán comparados con los valores obtenidos mediante aplicación del

modelo teórico de Landau-Zener<sup>[9;10]</sup>. Otros cálculos han sido realizados, los cuales se aplican para la captura simple de  $\text{He}^+$  en Kriptón, en donde es evidente que la combinación de modelos teóricos para el estudio de procesos de captura de protones en átomos, reproducen los resultados experimentales. El éxito de H. Martínez et al<sup>[11;12]</sup> en explicar los resultados experimentales de los sistemas  $\text{H}^+ + \text{SF}_6$  y  $\text{He}^+ + \text{SF}_6$  mediante modelos sencillos tiende a enfatizar la importancia de éstos.

Finalmente la falta de datos experimentales en el presente intervalo de energía del proceso de una justificación extra a este trabajo.

## I.2.- CONCEPTO DE TRANSFERENCIA DE CARGA

En un gas ionizado los átomos y las moléculas colisionan continuamente intercambiando electrones entre ellos, como consecuencia de esto cambia su estado de carga de acuerdo al número de electrones que pierdan o ganen en el proceso de transferencia.

Si se denotan como  $i$  y  $k$  al estado de carga de las partículas antes y después de sufrir el proceso de intercambio de carga, se tiene:



(1)

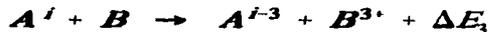
donde  $\Delta E$  es la diferencia de las energías de ionización de los átomos  $A$  y  $B$ . Los procesos así resumidos se pueden agrupar dependiendo del número de los electrones transferidos, esto es:



(2)



(3)



(4)

Cuando en el intercambio de carga ocurre que  $\Delta E = 0$ , se dice que

el proceso es "simétrico " y se denota por:



(5)

Esto ocurre entre iones y átomos del mismo elemento y durante el tiempo de colisión estas partículas se pueden tratar como una cuasi-molécula por lo que la transferencia de carga se entiende como una transición entre diferentes estados cuasi-moleculares. Los valores de la sección transversal del proceso simétrico son mayores que los de la sección transversal de transferencia de carga entre iones y átomos de distintos elementos. Experimentalmente se ha encontrado que la sección transversal del proceso simétrico es fuertemente dependiente del potencial de ionización.

### **I.3.- ANTECEDENTES DEL PROCESO DE COLISION DEL SISTEMA $Kr^+$ EN HELIO**

La determinación de secciones transversales diferenciales y totales ha proporcionado una gran cantidad de información acerca de la interacción entre los iones y átomos colisionantes. En esta sección se hace una revisión bibliográfica del tipo de proceso que se presenta en este sistema: la transferencia de electrones entre el blanco y el proyectil ( $\sigma_{10}, \sigma_{10^*}$ ), la emisión de electrones del blanco ó del proyectil ( $\sigma_{12}$ ) y el no menos importante proceso de excitación ( $\sigma_{11}$ ). El estudio de los procesos de colisión en los que se ha utilizado al sistema ( $Kr^+ + He$ ) datan desde los 60's.

Es importante hacer notar que se discuten trabajos del proceso inverso ( $He^+ + Kr$ ), ya que la falta de trabajos acerca de la reacción directa ( $Kr^+ + He$ ) ha sido uno de los motivos por el que nos inclinamos a realizar el presente trabajo.

En la tabla I se presenta de manera esquemática la información al respecto de dichos procesos, así como el tipo de estudio y a que tipo de proceso se refiere.

PROCESO	TIPO DE TRABAJO	ENERGIA	AUTORES
$Kr^+ + He^- \rightarrow Kr + He^+$	$\sigma_{10^*}$	0.5 a 3.0 keV (E)	HINONUYE [24]
	$\sigma_{10^*}$	300 k (E)	ZIKRATOV [28]
$He^+ + Kr \rightarrow He + Kr^+$	$\sigma_{10}$	100 A 4000 eV (T)	STEDFORD [13]
	$\sigma_{10}, \sigma_{12}$	320 a 1320 keV (E)	NIKOLAEV [14]
	$\sigma_{10}, \sigma_{12}$	200 a 1500 keV(E)	PIVOVAR [15]
	$\sigma_{10}$	10 a 500 eV (E)	LIPELES [16]
	$\sigma_{10}$	70 a 1050 eV (E)	KOOPMAN [17]
	$\sigma_{10^*}$	20 a 200 eV (E)	SCHLUMB. [18]
	$d\sigma_{10}/d\Omega$	500 a 3000 eV (E)	BAUDON [19]
	$d\sigma_{10}/d\Omega$	1.0 a 3.0 keV (E)	STEPHEN [20]
	$\sigma_{10}$	1.0 a 200 keV (E)	GILBODY [21]
	$\sigma_{10}$	0.5 a 100 eV (E)	MAIER II [22]
	$d\sigma_{10}/d\Omega$	0.8 a 3.0 keV (E)	BRENOT [23]
	$\sigma_{12}$	10 a 2000 keV (E)	RUDD [25]
	$\sigma_{10}$	15 a 2000 keV (E)	DUBOIS [26]
$d\sigma_{10}/d\Omega, \sigma_{10}$	0.5 a 5.0 keV (E)	JOHNSON [27]	
$\sigma_{12}$	1.0 a 4.0 keV (E)	SANTANNA [29]	
		E: EXP. ; T: TEO.	

TABLA I

De acuerdo al orden cronológico de las referencias que se presentaron en la tabla I, el primer estudio teórico del sistema ( $He^+ + Kr$ ) fué realizado por Stedeford et al<sup>[13]</sup> en 1955. Ellos realizaron cálculos de secciones transversales totales de transferencia de carga de la colisión de  $He^+$  en He, Ne, Ar, Kr y Xe en un intervalo de energías de 100 eV a 4000 eV. La sección transversal total para el sistema ( $He^+ + Kr$ ) tiene un

comportamiento monótono creciente a partir de los 100 eV hasta un valor máximo de  $8.91 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$  a una energía de 4000 eV.

Nikolaev et al<sup>[14]</sup> en 1961 estudiaron experimentalmente las secciones transversales totales de captura y pérdida electrónica simple de iones de  $\text{He}^+$  en He, Ar, Kr y Ne, en el intervalo de energía de 320 keV a 1320 keV. La técnica experimental que emplearon fue la de acelerar las partículas por medio de un ciclotrón. Los valores medidos de las secciones transversales totales para la producción de iones simplemente cargados en el sistema ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ) se presentan en la tabla II:

E(keV)	$\sigma (10^{-16} \text{ cm}^2)$
320	1.06
680	0.199
1320	0.0237

TABLA II

Pivovar et al<sup>[15]</sup> en 1962 realizó medidas de secciones transversales totales para el proceso de captura ( $\sigma_{10}$ ) y pérdida ( $\sigma_{12}$ ) electrónicas originadas por la colisión de iones de  $\text{He}^+$  en He, Ar y Kr, en el intervalo de energía de 200 a 1500 keV. Los resultados de la sección transversal total para el proceso de captura electrónica ( $\sigma_{10}$ ) del sistema ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ) muestra un comportamiento monótono decreciente a medida que aumenta la energía incidente, observando además que la sección carece de algún tipo de estructura; ésta tiene un valor de  $\sigma_{10} = 2.67 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$  a una

energía de 200 keV. Para el proceso de pérdida electrónica la sección transversal tiene un valor máximo  $\sigma_{12}=1.58 \times 10^{-16}$  cm<sup>2</sup> a una energía de 280 keV.

**Lipeles**<sup>[16]</sup> en 1965, midió secciones transversales totales por bombardeo de iones lentos de He<sup>+</sup> en blancos de gases nobles, en un intervalo de energía entre 10 eV y 500 eV, encontrando la presencia de estructuras en sus secciones totales para la producción de Ar<sup>+</sup>, Kr<sup>+</sup> y Xe<sup>+</sup>.

Los valores de las secciones transversales totales para la producción de Kr<sup>+</sup> y Xe<sup>+</sup> en colisiones de He<sup>+</sup> con Kr y Xe se presentan en la tabla III:

E(eV)	He <sup>+</sup> +Xe → He+Xe <sup>+</sup> σ(Å <sup>2</sup> )	He <sup>+</sup> +Xe → He+Xe <sup>+</sup> σ(Å <sup>2</sup> )
10	9.3	1.2
20	5.4	2.8
50	5.5	2.3
100	5.7	2.6

**TABLA III**

Posteriormente **Koopman**<sup>[17]</sup> en 1967, midió secciones transversales totales del intercambio de carga de los sistemas (H<sup>+</sup>+H<sub>2</sub>), (H<sub>2</sub><sup>+</sup>+H), (H<sup>+</sup>+Ar), (H<sup>+</sup>+Kr), (H<sub>2</sub><sup>+</sup>+Kr), (H<sup>+</sup>+Xe), (H<sub>2</sub><sup>+</sup>+Xe), (He<sup>+</sup>+Kr) y (He<sup>+</sup>+Xe), en el intervalo de energía 70 eV a 1050 eV. El método experimental consistió en la aplicación de campos eléctricos en una cámara de colisión para seleccionar de esta manera los iones lentos y electrones resultantes

de la colisión. Por otro lado, haciendo uso de la teoría adiabática propuesta por Massey, calcula la diferencia de energía ( $|\Delta E|$ ) despreciando la posibilidad de que existan estados excitados en los iones de los gases raros, encontrando que los máximos presentes en estos sistemas caen dentro del intervalo de energía de  $10^4$  a  $10^5$  eV. Para tener un conocimiento más exacto del comportamiento de las secciones transversales obtenidas experimentalmente, llevó a cabo una comparación de sus resultados con los reportados por Stedeford et al<sup>[13]</sup>, cuyos valores obtenidos para los procesos de intercambio de carga con Kriptón difieren significativamente. Esta sección transversal total presenta un comportamiento creciente a medida que aumenta la energía, presentando un máximo de  $\sigma \approx 5.06 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$  a una energía  $E \approx 940$  eV. Finalmente considera que el estudio de las secciones transversales totales son de gran importancia para determinar la composición y conducta de las interacciones atómicas.

**Schlumbohm<sup>[18]</sup>** en 1968, midió las secciones transversales para la producción de luz visible en colisiones de iones de gases raros con átomos de gases raros en un intervalo de energía de 20 eV a 200 eV, pero sólo proporciona información de la sección transversal para la producción de luz visible a  $E \approx 200$  eV. La sección transversal para la emisión de línea  $\text{Kr}_{II}$  producida por colisiones de  $\text{He}^+$  y  $\text{Ne}^+$  en Kr a 200 eV tiene un valor de 0.92 y 0.71  $\text{\AA}^2$ , respectivamente.

**Baudon et al<sup>[19]</sup>** en 1970, midieron las secciones transversales diferenciales elásticas e inelásticas en sistemas no-simétricos de iones de gases raros y átomos de gases raros, en un intervalo de energía entre los 500 eV y 3000 eV, en un intervalo angular en el sistema de laboratorio de  $0.5^\circ$  a  $13.0^\circ$ . Los sistemas estudiados fueron ( $\text{He}^+ + \text{Ne}$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{Kr}$  y  $\text{Xe}$ ) así como el sistema ( $\text{Ne}^+ + \text{He}$ ). Estudiaron tres tipos de procesos de colisión: elástico, excitación a estados discretos y excitación a niveles autoionizables. Los procesos de excitación involucrados en este trabajo son producidos por el cruzamiento de las curvas de potencial no-adiabáticas. La sección transversal diferencial reducida [ $\rho = \theta \sigma(\theta) \text{sen} \theta$ ] originada por la excitación del átomo a niveles autoionizables presenta generalmente un máximo a un cierto valor  $\tau(E_0\theta)$ , independiente de la energía incidente, lo que sugiere la intervención de un cruzamiento de curvas de potencial en los diferentes sistemas estudiados. Para el sistema ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ) presentan algunos espectros de energía de los iones dispersados, donde se muestra la presencia de niveles excitados del átomo de kriptón a un ángulo de  $1.2^\circ$  a 0.5 keV, a un ángulo de  $4^\circ$  a 0.83 keV y a un ángulo de  $2^\circ$  a 1.58 keV. La sección transversal diferencial elástica ( $\rho_e$ ), cuya representación está expresada en forma reducida, muestra que a valores de  $\tau$  mayores de 1 keV-deg el comportamiento es decreciente; por otro lado, a energías mayores de 600 eV, la sección transversal elástica muestra algunas perturbaciones originadas por los efectos de absorción en los canales elásticos presentes

en este intervalo de energía. Los resultados para la sección transversal inelástica muestran la presencia de dos picos los cuales corresponden a la excitación del átomo de kriptón al nivel electrónico ( $4p^5nl$ ) y a la excitación a niveles autoionizables. A una energía de impacto de 3.08 keV se observa que el pico originado por la excitación del átomo a niveles autoionizables tiene la misma magnitud que el originado por la excitación del kriptón al nivel electrónico ( $4p^5nl$ ) para un mismo valor  $\tau \approx 6$  keV-deg y ambas secciones transversales inelásticas llegan a ser tan grandes como las obtenidas para la sección transversal elástica a valores mayores de 4 keV-deg. Sus resultados muestran que el efecto de los procesos inelásticos son importantes a altas energías y los efectos de los procesos elásticos predominan a valores de  $\tau$  menores de 1 keV-deg.

**Stephen**<sup>[20]</sup> en 1971 estudió los sistemas  $He^+$  en He, Ne y Kr en un intervalo de energía de 1.0 a 3.0 keV, en un intervalo angular de  $0^\circ$  a  $3^\circ$ .

Para el caso simétrico ( $He^+ + He$ ), las posiciones que ocupan el máximo y el mínimo de la probabilidad de intercambio de carga  $P_o$ , concuerdan con los trabajos realizados previamente por ellos. Para el caso del sistema ( $He^+ + Ne$ ), la sección transversal diferencial de transferencia de carga aumenta a medida que se incrementa la energía, observándose que las localizaciones del máximo y del mínimo de  $P_o$  son generalmente independientes de la energía. Los resultados obtenidos para la probabilidad de intercambio de carga del sistema ( $He^+ + Kr$ ) muestra

un comportamiento monótono decreciente a medida que aumenta el ángulo de dispersión, que en contraste con los otros sistemas analizados en este trabajo, la falta de estructura en la probabilidad en este sistema resulta ser una característica notable, ya que el defecto de energía a una separación infinita entre los estados  $\text{He}^+(1s) + \text{Kr}(4s^2, 4p^6)$  y  $\text{He}(1s^2) + \text{Kr}^+(4s^2, 4p^6)$  es de 2.5 eV, esto hace suponer que existe un intercambio de carga entre estos estados y con ello la presencia de algún tipo de estructura resonante como la encontrada para el sistema ( $\text{He}^+ + \text{Ne}$ ).

Gilbody et al<sup>[21]</sup> también en 1971, midieron secciones transversales totales originadas por la captura electrónica de iones de  $\text{He}^+$  en H, Ne, Ar, Kr y N, mediante la técnica de atenuación del haz incidente. El intervalo de energía considerado en este trabajo es de 10 a 200 keV. Los valores encontrados para la sección transversal total originada por la captura electrónica en el sistema ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ), se presentan a continuación en la tabla IV:

E(keV)	$\sigma(10^{-16} \text{ cm}^2)$
60	6.30
80	5.43
100	4.60
125	3.90
150	3.44
175	2.96
200	2.54

TABLA IV

De la tabla anterior notamos que el valor máximo de la sección transversal total es  $\sigma = 6.30 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$  a una energía de 60 keV.

Maier II<sup>[22]</sup> en 1972, midió las secciones transversales totales para la producción de  $\text{Kr}^{++}$ ,  $\text{Kr}^+$ ,  $\text{Xe}^{++}$ ,  $\text{Xe}^+$ , originados en la colisión de iones de  $\text{H}^+$ ,  $\text{He}^+$  y  $\text{Ne}^+$  con Kr y Xe a un intervalo de energía entre 0.5 y 100 eV. Las secciones transversales obtenidas en este trabajo han sido multiplicadas por un factor de corrección ( $\alpha$ ) que depende de la presión.

El comportamiento de la sección transversal para el sistema ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ) presenta un máximo de  $\sigma = 3 \text{ \AA}^2$ , a una energía de 11.5 eV para después decrecer suavemente hasta presentar un comportamiento casi constante a medida que la energía aumenta, esto no permitió determinar los mecanismos presentes en este sistema de colisión.

Los valores encontrados por Maier II para las secciones transversales totales para la producción de iones simplemente cargados se presentan en la tabla V.a:

REACCION	E(70 eV) $\sigma(\text{\AA}^2)$	E(100 eV) $\sigma(\text{\AA}^2)$
$\text{H}^+ + \text{Xe} \rightarrow \text{H} + \text{Xe}^+$	25.0	22.0
$\text{H}^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{H} + \text{Kr}^+$	18.5	20.0

TABLA V.a

Los valores medidos por Maier II para las secciones transversales totales para la producción de  $\text{Kr}^+$  y  $\text{Xe}^+$  en colisiones de  $\text{He}^+$  en Kr y Xe

se presentan en la tabla V.b:

E(eV)	He <sup>+</sup> + Xe → He + Xe <sup>+</sup> σ(Å <sup>2</sup> )	H <sup>+</sup> + Kr → H + Kr <sup>+</sup> σ(Å <sup>2</sup> )
10	20.0	1.9
20	17.6	2.8
50	13.7	1.8
70	12.0	1.6
100	10.5	1.5

**TABLA V.b**

Los resultados de las secciones transversales para la emisión de luz del sistema (He<sup>+</sup>+ Kr), a E = 100 eV y 70 eV son 1.5 y 1.6 Å<sup>2</sup> respectivamente y estos valores son menores a los encontrados por Schlumbohm<sup>[18]</sup>.

**Brenot et al<sup>[23]</sup>** en 1975, realizaron investigaciones experimentales de las colisiones elásticas e inelásticas de los sistemas no-simétricos He<sup>+</sup>+X (X: Ne, Ar, Kr y Xe) a un intervalo de energía entre 0.8 a 3.0 keV. Su método experimental involucra mediciones de secciones transversales por excitación del átomo y por pérdida de energía de las partículas dispersadas por medio de la técnica de tiempo de vuelo y por un análisis de energía de los iones producidos en la colisión. En el análisis de las secciones transversales originadas por procesos inelásticos reportan la presencia de diversos picos. El pico principal lo atribuyen a una excitación electrónica del átomo de kriptón, el que a su vez muestra una doble estructura. Una la asocian a la excitación del Kr(4p<sup>5</sup>5s)

mientras que la segunda estructura se asocia a la excitación  $6s$  y  $4d$  del mismo átomo, cuyo valor es  $\sigma = 1.1 \text{ \AA}^2$  a una energía de  $1 \text{ keV}$  y  $\sigma = 1 \text{ \AA}^2$  a una energía de  $2 \text{ keV}$ . Para la excitación del blanco el conteo promedio de los  $\text{He}^+$  es muy bajo, por lo que obtuvieron un valor de  $\sigma \approx 10^{-3} \text{ \AA}^2$  a una energía de  $2 \text{ keV}$ . Por otro lado, para el caso de doble excitación, reportan que la estructura mostrada es originada por el átomo de kriptón; dicha estructura a su vez se subdivide, uno de los picos es atribuido al  $\text{Kr}^{**}[4p^4(^1D)5s^2]$  a una energía de  $10.5 \text{ eV}$ , mientras que la segunda estructura, no puede ser identificada fácilmente, aunque la atribuye al  $\text{Kr}^{**}(4p^4nln'l')$ . Los potenciales utilizados fueron:

$$V = 53.9316 e^{-2.0982R} , \quad 1.6 < R < 3.1 \text{ u.a.}$$

$$V = 29.7752 e^{-1.806R} , \quad R > 3.1 \text{ u.a.}$$

obtenidos de los potenciales empíricos para el  $\text{He}_2$  y para el  $\text{Kr}_2$  por Gaydaenko et al<sup>[30]</sup> usando un método propuesto por Smith<sup>[39]</sup>.

La sección transversal diferencial reducida, muestra un máximo a un valor de  $\tau \approx 2.5 \text{ keV-deg}$ .

Hinonuye et al<sup>[24]</sup> en 1982, midieron secciones transversales de dispersión elástica originadas en la colisión de iones de  $\text{Kr}^+$  y  $\text{Xe}^+$  con átomos de  $\text{He}$  a energías de  $0.5$  a  $3.0 \text{ keV}$ . Las mediciones se realizaron utilizando tres tipos de mezclas gases de  $\text{CO}(67\%)+\text{Kr}(33\%)$ ,

$H_2(90\%)+Kr(10\%)$  y Kriptón(100%). Las secciones transversales fueron promediadas con respecto a las distribuciones de población de los estados de energía  $^2P_{3/2}$  y  $^2P_{1/2}$  del kriptón. El comportamiento de las secciones transversales obtenidas para cada mezcla es similar, lo que hace pensar que las distribuciones poblacionales de los estados de energía  $^2P_{3/2}$  y  $^2P_{1/2}$  producidos en la fuente de iones es similar para cada mezcla. Los resultados obtenidos para el sistema ( $He^+ + Kr$ ) muestran un comportamiento decreciente de las secciones transversales de dispersión elásticas a partir de  $E \approx 0.5 \text{ keV}$  ( $\sim 12 \text{ \AA}^2$ ).

Rudd et al<sup>[25]</sup> en 1985, estudiaron la sección transversal para la producción de iones positivos( $\sigma_+$ ) y negativos( $\sigma_-$ ) de  $He^+$  en blancos de He, Ne, Ar, Kr, CO, O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> y CO<sub>2</sub>, en un intervalo de energía entre 5 a 2000 keV. La captura( $\sigma_{10}$ ) y pérdida( $\sigma_{12}$ ) electrónica de los iones de Helio incidiendo sobre los blancos moleculares antes mencionados fueron medidos, en un intervalo de energía entre los 10 y 350 keV. En base a los procesos inelásticos que se originan cuando un ión energético colisiona con un átomo, realizaron el estudio de los electrones producidos en la colisión entre el blanco y el proyectil, así como la transferencia de carga originada por este proceso. Los datos obtenidos fueron ajustados por medio del método de mínimos cuadrados, sus secciones transversales fueron determinadas utilizando la relación:

$$\sigma_+ - \sigma_- = \sigma_{10} - \sigma_{12}$$

Para el sistema ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ) encontraron los siguientes valores:

E(keV)	$\sigma_{\text{e}}(10^{-20} \text{ m}^2)$	$\sigma_{\text{a}}(10^{-20} \text{ m}^2)$	$\sigma_{10}(10^{-20} \text{ m}^2)$	$\sigma_{12}(10^{-20} \text{ m}^2)$
5	6.0			
7	6.8			
10	12	4.3	7.5	
14	13	5.1	8.2	
20	14	5.9	8.6	
30	16	6.8	8.9	0.0013
40	16	7.6	8.7	0.0028
60	17	8.7	8.0	0.0086
85	16	9.7	6.9	0.0022
120	16	11	5.4	0.05
170	15	12	3.9	0.11
250	14	12	2.2	23
350	14	13	1.1	0.43
500	12	13		
700	11	12		
1000	9.2	11		
1400	7.7	9.9		
2000	6.1	8.2		

**TABLA VI**

**Dubois et al<sup>[26]</sup>** en 1989, estudiaron experimentalmente las secciones transversales absolutas de ionización directa, captura y pérdida electrónica simple originadas por colisiones de iones de  $\text{He}^+$  en blancos de gases raros (He, Ar, Ne y Kr) en un intervalo de energía de 15 a 2000 keV. Este trabajo demostró la importancia que tiene la ionización en la producción de electrones libres, en donde la ionización directa es responsable de aproximadamente el 20% de la producción de electrones libres a energías por debajo de los 300 keV; a energías de impacto grandes la producción de electrones es debida a la ionización directa.

**Johnson et al<sup>[27]</sup>** en 1989, midieron secciones transversales diferenciales de dispersión directa y de transferencia de carga originadas en la colisión de iones de  $H^+$  y  $He^+$  en blancos de gases raros (Ne, Ar, Kr y Xe). Las secciones transversales diferenciales originadas en la dispersión directa son analizadas a una energía de 1.5 keV para colisiones de  $H^+$  y  $He^+$  con Ne, Ar, Kr y Xe a un intervalo angular de  $0.03^\circ$  a  $1.0^\circ$ . Por otro lado, las secciones transversales diferenciales originadas por la transferencia de carga son analizadas a ángulos menores que  $1.0^\circ$  a energías de 0.5, 1.5 y 5.0 keV para los sistemas ( $H^+$ + Ar, Kr), para los sistemas ( $H^+$ + Xe) a 5.0 keV y para ( $He^+$ + Ne) a 1.5 keV los resultados obtenidos muestran la presencia de estructuras en los sistemas considerados. Los valores encontrados para el sistema ( $He^+$ +Kr) muestran la presencia de dos máximos cuyos valores son los siguientes:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} (\theta=0.1^\circ) = 1.8 \times 10^5 \text{ \AA}^2 \quad \text{y} \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} (\theta=0.8^\circ) = 8.7 \times 10^2 \text{ \AA}^2$$

a una energía de 1.5 keV. Johnson et al integraron la sección transversal diferencial en ángulo sobre el intervalo angular  $0.04^\circ \leq \theta \leq 1.0^\circ$  a una energía de 1.5 keV para obtener la sección transversal total  $\sigma_{\text{total}}=9.5 \text{ \AA}^2$ .

**Zikratov et al<sup>[28]</sup>** en 1995 realizaron estudios experimentales de los estados de Kr( $5p'[3/2]_1$ ,  $[3/2]_2$ ,  $[1/2]_1$ ), Xe( $7p[3/2]_2$ ,  $[3/2]_1$ ,  $[5/2]_1$ ,  $[5/2]_3$ ) y el Xe( $6p'[3/2]_1$ ,  $[3/2]_2$ ,  $[1/2]_1$ ) en He y Ar. Las técnicas de excitación

utilizadas (Coherent Wavelength [CW] y Pulsos de Láser), permitieron obtener información de la sección transversal térmica al promediar las constantes de activación (temperatura, energía, velocidad incidente, etc) a 300 °K. Las colisiones con el blanco atómico He, llevaron a la formación de estados Xe\* y Kr\* con pequeños defectos de energía.

Debido al rápido acoplamiento colisional de la población en los niveles iso-energéticos, se observa un decaimiento exponencial en la constantes de activación en los estados inicialmente producidos.

Motivados por verificar la importancia que juegan los mecanismos que gobiernan el proceso de pérdida electrónica (modo de apantallamiento y anti-apantallamiento) producidos al colisionar iones de alta velocidad con blancos atómicos, Sant'Anna et al<sup>[29]</sup> en 1996, llevaron a cabo mediciones de secciones transversales totales originadas en la colisión de iones de He con blancos de gases raros (He, Ne, Ar, Kr y Xe) en un intervalo de energía de 1.0 a 4.0 MeV. Los datos experimentales obtenidos fueron representados en base a la sección transversal de pérdida electrónica v.s. el número atómico ( $Z_2$ ) de los blancos atómicos, observándose un comportamiento creciente en la sección transversal a medida que se incrementa el número atómico ( $Z_2$ ).

Para verificar sus resultados, comparan sus datos experimentales con aproximaciones a primer orden de las contribuciones de los modos de apantallamiento y anti-apantallamiento involucrados en el proceso; las

**contribuciones de los canales de anti-apantallamiento muestran un acuerdo cualitativo con los datos experimentales, cosa que no ocurre con el modo de apantallamiento, mostrando en sus resultados la presencia de los canales de anti-apantallamiento que actúan directamente como un agente inhibidor para el modo de apantallamiento.**

#### **I.4.- PROCESO DE CAPTURA ELECTRONICA**

Se considerarán las reacciones de transferencia de carga del tipo no resonante:



(6)

también llamado proceso de captura electrónica simple del ion  $A^+$  incidiendo sobre un blanco  $B$ . La teoría existente para la descripción de este tipo de procesos es limitada, debido a las ecuaciones diferenciales que es necesario resolver, y a las suposiciones que se realizan en los procedimientos que se emplean, para poder facilitar dichos cálculos.

Para encontrar las secciones totales de transferencia de carga correspondientes a este proceso, se cuenta con algunos procedimientos teóricos que nos permiten estimar dichas secciones. Esta situación será analizada a continuación.

Si durante un proceso de colisión la velocidad relativa de acercamiento de las partículas es lenta, el proceso en cuestión puede representarse a través de curvas de energía potencial cerca de la región del pseudocruce, permitiendo a los electrones tener tiempo de ajustar su configuración nuclear cuando se efectúa éste movimiento.

Por otro lado, si la velocidad relativa de acercamiento de las

partículas en la región del pseudocruce es muy rápida, la probabilidad de que se lleve a cabo una transición no-adiabática (moviéndose de una curva adiabática<sup>[31]</sup> a otra), es igual a uno, ésto hace que los electrones no tengan tiempo suficiente para ajustar su movimiento adiabático, y cambien rápidamente su configuración nuclear .

Finalmente, en el límite de la velocidad del movimiento anteriormente tratado, la representación adiabática puede no ser la más apropiada, por lo que un camino mas conveniente es el de hacer un cambio de representación en donde los acoplamientos no-adiabáticos sean mínimos. En ésta representación las transiciones son debidas principalmente a los términos de acoplamiento.

La representación que hace un acoplamiento no-adiabático mínimo, se conoce como representación diabática<sup>[32]</sup>.

En este trabajo se utiliza un modelo en el que se encuentran involucrados dos estados electrónicos.

El modelo de Landau-Zener<sup>[9:10]</sup> es un modelo semi-clásico, basado en una solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

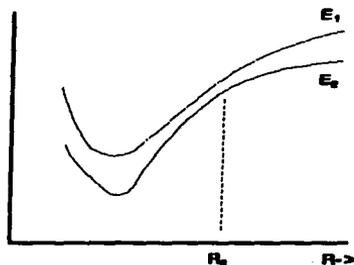
$$\left( H - i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(\mathbf{R}, t) = 0$$

(7)

Sea

$$\Psi(\mathbf{R}, t) = \psi_1(\mathbf{R}, t) + \psi_2(\mathbf{R}, t)$$

(8)



**Figura I.1: Estados polar-homopolar**

Donde  $\psi_1(\mathbf{R})$  y  $\psi_2(\mathbf{R})$  son dos eigenfunciones electrónicas de una molécula con núcleo estacionario tal y como se muestra en la figura I.1.

Estas eigenfunciones tienen la propiedad que para  $\mathbf{R} > \mathbf{R}_0$ ,  $\psi_1$  tiene característica polar y  $\psi_2$  homopolar; mientras que a  $\mathbf{R} < \mathbf{R}_0$ ,  $\psi_1$  tiene característica homopolar y  $\psi_2$  polar. En la región  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$  estas dos eigenfunciones pueden intercambiar sus características.

El teorema adiabático asume que si la molécula está inicialmente en el estado  $\psi_2$  y  $\mathbf{R}$  cambia lentamente de  $\mathbf{R} > \mathbf{R}_0$  a  $\mathbf{R} < \mathbf{R}_0$ , entonces la molécula puede permanecer en el estado  $\psi_2$ . No obstante, si  $\mathbf{R}$  cambia con una velocidad finita, el estado final  $\psi(\mathbf{R})$  puede transformarse por la combinación lineal:

$$\Psi(\mathbf{R}, t) = A_1(\mathbf{R}, t) \psi_1(\mathbf{R}, t) + A_2(\mathbf{R}, t) \psi_2(\mathbf{R}, t)$$

(9)

Se tomarán  $\phi_1$  y  $\phi_2$  como las combinaciones lineales de  $\psi_1$  y  $\psi_2$ , para todos los valores de  $\mathbf{R}$ , tal que  $\phi_1$  tiene características semejantes a las que  $\psi_1$  tiene a  $\mathbf{R} < \mathbf{R}_0$ , mientras que  $\phi_2$  tiene las mismas características que  $\psi_2$  tiene a  $\mathbf{R} > \mathbf{R}_0$ .  $\phi_1$  y  $\phi_2$  deben ser ortogonales entre sí y no satisfacen la ecuación de onda del núcleo fijo, a menos que:

$$H \phi_1 = \epsilon_1 \phi_1 + \epsilon_{12} \phi_2$$

(10)

$$H \phi_2 = \epsilon_{12} \phi_1 + \epsilon_2 \phi_2$$

Las aproximaciones que se deben realizar para obtener las funciones explícitas  $A_1$ ,  $A_2$  son las siguientes:

(a).-  $\epsilon_{12}(\mathbf{R}_0) <$  a la energía cinética relativa de los dos sistemas. Bajo esta condición el movimiento de los centros de gravedad de los dos átomos, ó en general de los dos sistemas, puede ser tratado como parámetro externo, ésto es, la variable  $\mathbf{R}$  se vuelve una función de tiempo conocida.

(b).- La región de transición es tan pequeña que podemos tratar  $(\epsilon_1 - \epsilon_2)$  como una función de tiempo lineal, y  $\epsilon_{12}(\mathbf{R})$ ,  $\phi_1(\mathbf{R})$ ,  $\phi_2(\mathbf{R})$  como

independientes del tiempo. Esta condición se satisface cuando  $\epsilon_{12}(\mathbf{R}_0)$  es suficientemente pequeña.

Como sólo las características originadas en la región de transición son de importancia, esta condición nos permite reemplazar el problema físico por un problema ideal en donde:

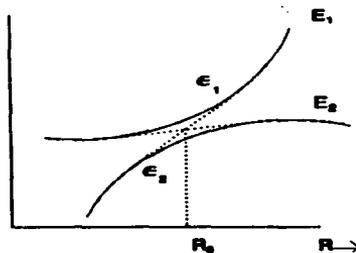
$$\frac{2\pi}{h} (\epsilon_1 - \epsilon_2) = \alpha t$$

(11)

$$\dot{\epsilon}_{12} = \dot{\phi}_1 = \dot{\phi}_2 = 0$$

(12)

Si la velocidad relativa de los átomos se mantiene constante, la aproximación (b) nos conduce a la relación mostrada en la figura I.2 entre  $\epsilon_1(\mathbf{R})$  y  $\epsilon_2(\mathbf{R})$ , y las curvas de potencial de  $\psi_1(\mathbf{R})$  y  $\psi_2(\mathbf{R})$  llamadas  $E_1(\mathbf{R})$  y  $E_2(\mathbf{R})$  respectivamente.



**Figura I.2: Cruzamiento de niveles de energía en el problema idealizado.**

Las hipérbolas  $E_1(\mathbf{R})$  y  $E_2(\mathbf{R})$  tienen como asíntotas a  $\epsilon_1(\mathbf{R})$  y  $\epsilon_2(\mathbf{R})$ . La distancia cercana entre  $E_1$  y  $E_2$ , esto es,  $E_1(\mathbf{R}_0) - E_2(\mathbf{R}_0)$  está dada por  $2\epsilon_{12}(\mathbf{R}_0)$ .

En el análisis fué conveniente el uso de las combinaciones lineales  $\phi_1$  y  $\phi_2$  de las soluciones exactas adiabáticas  $\psi_1$  y  $\psi_2$ . Por lo que sustituyendo:

$$\left( H - \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \right) [ C_1(t) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} \int \epsilon_1 dt} \phi_1(\mathbf{R}) + C_2(t) e^{\frac{2\pi i}{\hbar} \int \epsilon_2 dt} \phi_2(\mathbf{R}) ] = 0$$

(13)

utilizando además las relaciones (12) y (13), permite reducir esta ecuación de onda a dos ecuaciones diferenciales de primer orden simultáneas en los coeficientes  $C$ 's:

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial C_1}{\partial t} = \epsilon_{12} e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} C_2 \quad (14)$$

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial C_2}{\partial t} = \epsilon_{12} e^{-\frac{2\pi i}{\hbar} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} C_1$$

Las condiciones de frontera bajo las cuales estas ecuaciones se pueden resolver corresponden a que inicialmente el sistema está en el estado  $\psi_2$  ó  $\phi_2$  los cuales son equivalentes cuando  $R \gg R_0$ . Estas condiciones son:

$$C_1(-\infty) = 0 \quad (15)$$

$$|C_2(-\infty)| = 1 \quad (16)$$

Conociendo los valores asintóticos de las soluciones de (13), y eliminando  $C_2$  de ésta obtenemos la ecuación:

$$\frac{d^2 C_1}{dt^2} = \left[ \frac{2\pi j}{h} (\epsilon_1 - \epsilon_2) - \frac{\dot{\epsilon}_{12}}{\epsilon_{12}} \right] \frac{dC_1}{dt} + \left( \frac{2\pi\epsilon_{12}}{h} \right)^2 C_1 = 0 \quad (17)$$

♦ al sustituir la suposición (11), y

$$C_1 = e^{-\frac{\pi i}{h} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} U_1 \quad (18)$$

junto con la definición

$$f = \frac{2\pi \epsilon_{12}}{h} \quad (19)$$

la ecuación (17) se reduce a una ecuación de Weber<sup>(33)</sup>:

$$\frac{d^2 U_1}{dt^2} + \left( f^2 - \frac{i\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{4} t^2 \right) U_1 = 0 \quad (20)$$

cuya forma estándar es:

$$\frac{d^2 U_1}{dz^2} + \left( n + \frac{1}{2} - \frac{1}{4} z^2 \right) U_1 = 0$$

(21)

en donde:

$$z = \sqrt{\alpha} e^{-\frac{i\pi}{4}} t$$

(22)

$$n = \frac{if^2}{\alpha}$$

(23)

La función de Weber  $D_{-n-1}(iz)$  es una solución particular de la ecuación (21) la cual desaparece a un valor al infinito de  $z$  en la dirección  $\infty \exp[-3/4\pi i]$  y  $\infty \exp[-1/4\pi i]$ . Por lo tanto la solución:

$$U_1(z) = A_{\pm} D_{-n-1}(\mp iz) \quad , \quad \alpha \neq 0$$

(24)

satisface la condición de frontera (15).

Las constantes  $A_{\pm}$  se determinan de los valores asintóticos:

$$D_{-n-1}(iRe^{-\frac{3}{4}\pi i}) = e^{\frac{\pi}{4}(n+1)i} e^{\frac{iR^2}{4}} R^{-n-1} \quad , \quad R \rightarrow \infty$$

(25)

$$D_{-n-1}(iR e^{-\frac{1}{4}\pi j}) = e^{-\frac{\pi}{4}(n+1)j} e^{-\frac{iR^2}{4}} R^{-n-1}, \quad R \rightarrow \infty$$

(26)

Por medio de la segunda condición a la frontera (16), se encuentra:

$$|A_+| = |A_-| = \sqrt{v} e^{-\frac{\pi v}{4}}$$

(27)

donde

$$v = \frac{f^2}{|\alpha|} = \frac{2\pi \epsilon_{12}^2}{h \left| \frac{d}{dt} (\epsilon_1 - \epsilon_2) \right|}$$

(28)

donde los  $\epsilon_{12}$  son los elementos de transición y  $\left| \frac{d}{dt} (\epsilon_1 - \epsilon_2) \right|_{R=R_c}$  es la diferencia en derivadas de las curvas de potencial diabáticas en  $R_c$ .

Esto permite determinar el valor:

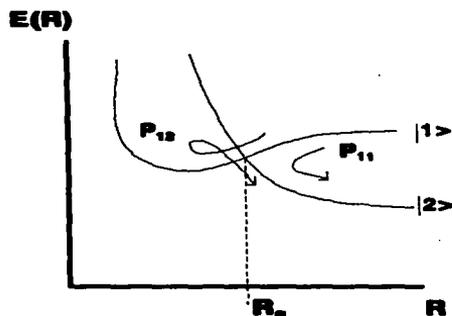
$$|C_1(\infty)|^2 = \frac{2\pi v e^{-\pi v}}{\Gamma(i v + 1) \Gamma(-i v + 1)} = 2e^{-\pi v} \sinh(\pi v)$$

(29)

$$|C_1(\infty)|^2 = 1 - e^{-2\pi\nu}$$

(30)

Para una colisión en donde el sistema (como en nuestro caso) pasa dos veces a través del punto de cruzamiento (fig. I.3):



**Figura I.3: Probabilidades de transición**

antes y después de que el punto de retorno  $R_c$  ha sido alcanzado, las

probabilidades de transición se denotan por  $p_{11}$  y  $p_{12}$ , esto es:

$$p_{11} = |C_2(\infty)|^2 = e^{-\nu} \quad (31)$$

$$p_{12} = |C_1(\infty)|^2 = 1 - e^{-\nu} \quad (32)$$

Estas probabilidades corresponden a las transiciones  $1 \rightarrow 1$  y  $1 \rightarrow 2$  entre dos estados electrónicos en un pseudocruzamiento correspondiente a una separación  $R_c$ .

Para el caso donde sólo dos estados electrónicos son considerados y se lleva a cabo un cruzamiento, la probabilidad total de transición después de pasar dos veces la región de cruzamiento es entonces el módulo al cuadrado de la suma de las amplitudes desarrolladas a lo largo de las trayectorias  $11$  y  $12$ ; esto es:

$$P = 4 p_{11} p_{12} \text{sen}^2(\Delta\theta) \quad (33)$$

$\Delta\theta$  es la diferencia de fases desarrollada durante las trayectorias  $11$  y  $12$ . Promediando esta fase, se encuentra que la probabilidad es:

$$P = 2 p_{11} p_{12} = 2 e^{-\nu} (1 - e^{-\nu}) \quad (34)$$

y la sección transversal total esta dada por<sup>[34]</sup>:

$$\sigma_{10}(v) = 2 \pi \int P(b, v) b db$$

(35)

Donde  $P(b, v)$  es la probabilidad de que el proceso (6) ocurra cuando la velocidad de acercamiento es  $v$  a un parámetro de impacto  $b$ .

Finalmente, después de varios pasos algebraicos<sup>[APENDICE A]</sup> la sección total puede ser representada por:

$$\sigma = 4 \pi R_c^2 \left[ 1 - \frac{\epsilon_{11}}{E} \right] G(v)$$

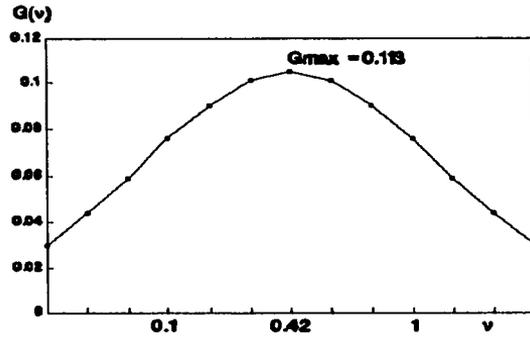
(36)

donde  $G(v)$  es una integral de exponentes tabulada<sup>[35]</sup>, dada por:

$$G(v) = \int_1^{\infty} e^{-vx} (1 - e^{-vx}) \frac{dx}{x}$$

(37)

cuya relación funcional entre  $G(v)$  y  $v$  es mostrada en la figura I.4:



**Figura I.4: Relación Funcional entre  $G(v)$  y  $v$**

### I.5.- BALANCE DETALLADO

Para las reacciones del tipo (6) existe un principio que relaciona las secciones transversales del proceso directo e inverso; éste es el **PRINCIPIO DE BALANCE DETALLADO**<sup>[36]</sup>, el cual se describe a continuación.

Cuando la reacción  $A^+ + B$  tiene lugar, se pueden formar varios estados electrónicos de ella, pero sólo una fracción de ellos conduce al proceso de transferencia de carga. Se denota como  $f$  a esta fracción y representa un factor de peso estadístico para la reacción; de la misma forma también se considera que la reacción inversa presenta el mismo caso.

El Principio de Balance Detallado relaciona a la probabilidad  $P_1(\mathbf{b}, \nu)$  del proceso directo y a la probabilidad  $P_2(\mathbf{b}, \nu)$  del un proceso inverso de la forma:

$$f_1 P_1(\mathbf{b}, \nu) = f_2 P_2(\mathbf{b}, \nu) \quad (38)$$

donde  $f_1$  y  $f_2$  son los factores estadísticos para dichas reacciones y son independientes de  $\mathbf{b}$  y  $\nu$ . En términos de la reacción directa ( $A^+ + B$ ) se tiene:

$$P_1(\mathbf{b}, \nu) = k P_2(\mathbf{b}, \nu) \quad (39)$$

donde

$$k = \frac{f_2}{f_1}$$

(40)

es la razón de los factores estadísticos  $f_1$  y  $f_2$  de la reacción directa e inversa de la ecuación (6).

Tomando la definición de la sección transversal en términos del parámetro de impacto (ec. 35), podemos expresar las secciones de la reacción directa e inversa como:

$$2\pi \int_0^{\infty} b \, db \, P_1(b, v) = 2\pi \int_0^{\infty} b \, db \, k \, P_2(b, v)$$

(41)

y ya que<sup>[34]</sup>:

$$\sigma_i = 2\pi \int_0^{\infty} P_i(b, v) \, b \, db$$

(42)

la ec. (42) se puede reescribir como:

$$\sigma_1 = k \sigma_2$$

(43)

**Esta ecuación relaciona las secciones transversales totales de la reacción directa e inversa y el factor  $k$  determina la razón del número de estados equivalentes (por ejemplo: estados electrónicos, spin) de los estados iniciales y finales.**

### I.6.- LEY DE ESCALAMIENTO

A fin de interpretar la información experimental disponible y entender las interacciones interatómicas responsables de la dispersión, se hace uso de un método de análisis basado en ideas semiclásicas.

En dispersiones a pequeños ángulos, que es usualmente la región más conveniente para llevar a cabo observaciones experimentales, es útil expresar a la energía y la dependencia angular de la sección transversal diferencial  $\sigma(E,\theta)$  en términos del ángulo de dispersión reducido:

$$\tau = E \theta$$

(44)

donde E es la energía cinética y  $\theta$  es el ángulo de dispersión. Esta variable es a primera aproximación, función del parámetro de impacto  $b^{1371}$  (excepto por pequeñas correcciones si  $\theta$  llega a ser grande), y de la sección transversal reducida:

$$\rho = \theta \operatorname{sen} \theta \sigma(E,\theta)$$

(45)

la cual mantiene de igual forma una dependencia con el parámetro de impacto  $b^{1381}$ .

Cabe hacer notar que esta representación reducida es útil en dispersiones simples, los cuales no se ven afectadas por patrones de interferencia cuánticos, de ahí su carácter semiclásico. Dicha

representación reducida de los datos experimentales, permite deducir al potencial responsable de la dispersión.

El *potencial apantallado de Coulomb*<sup>[39]</sup> es una de las más útiles aproximaciones de las interacciones en la dispersión ión-átomo, lo que permite obtener un único valor del parámetro de impacto **b** para cada valor del ángulo reducido  $\tau$ .

No obstante, en la mayoría de los casos, la dispersión no es tan sencilla, ya que los patrones que se presentan en las secciones diferenciales en ángulo, comúnmente muestran formas oscilantes de diversos tipos que comparten ciertas características de regularidad generales.

En general, ellas exhiben patrones de interferencia que pueden ser afines semiclásicamente a la existencia de dos o más trayectorias resultantes en la dispersión al mismo ángulo observado y a la misma velocidad final permitiéndonos ésto evaluar a qué distancia internuclear se lleva a cabo el proceso de transferencia de carga.

Las amplitudes de los patrones de oscilación asociados con el cruzamiento contienen información importante acerca de la energía asociada con el acoplamiento entre los estados electrónicos involucrados.

El *potencial apantallado de Coulomb* se escribe:

$$V(r) = \left(\frac{B}{r}\right) e^{-\frac{r}{c}}$$

(46)

Es conveniente expresar todos los parámetros y funciones de dispersión en forma adimensional:

$$\beta = \frac{b}{c} \quad y \quad \epsilon = \frac{B}{E}$$

(47)

expandiendo las variables  $\tau$  y  $\beta$ :

$$\tau = \frac{E\theta}{B} = \frac{\theta}{\epsilon} = \sum_n \epsilon^n \tau_n(\beta)$$

(48)

$$\beta = \sum_n \epsilon^n \tau_n(\tau)$$

(49)

$$\rho = \frac{\theta \operatorname{sen} \theta \sigma(E, \theta)}{c^2} = \rho(\epsilon, \tau) = \sum_n \epsilon^n \rho_n(\tau)$$

(50)

En resumen, se pueden encontrar expresiones válidas a valores pequeños y grandes de  $\tau$  utilizando las fórmulas de expansión de las funciones de Bessel. Cuando  $\beta$  es pequeña y  $\tau$  es grande, se obtiene:

$$\rho_0(\tau) = \tau^{-2} - \tau^{-4} [ 2 \ln(2\tau) - 0.6554 ] + \dots, \quad (51)$$

$$\beta_0(\tau) = \tau^{-1} - \tau^{-3} [ \frac{1}{2} \ln(2\tau) - 0.0386 ] + \dots, \quad (52)$$

El primer término de la ecuación  $\rho_0(\tau)$  muestra las características del comportamiento coulombiano de la sección transversal reducida, y los siguientes términos muestran la desviación que tiene el potencial apantallado.

Por otro lado, para valores grandes de  $\beta$ , donde  $\tau$  es pequeña, se pueden utilizar las expansiones asintóticas:

$$\rho_0(\beta) = \beta - \frac{1}{2} - \frac{53}{32\beta} \dots, \quad (53)$$

$$\tau_0(\beta) = \left(\frac{\pi}{2\beta}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\beta} \left[1 + \frac{3}{8\beta} - \frac{12}{128\beta^2} \dots\right] \quad (54)$$

## **CAPITULO II**

### **DESCRIPCION DEL APARATO.**

#### **II.1.- FUENTE DE IONES.**

**-OPERACION DE LA FUENTE**

#### **II.2.- ACELERACION, ENFOQUE Y SELECCION DE IONES.**

**-LENTES EINZEL**

**-FILTRO DE VELOCIDADES**

#### **II.3.- CELDA DE REACCION.**

#### **II.4.- SISTEMA DE DETECCION.**

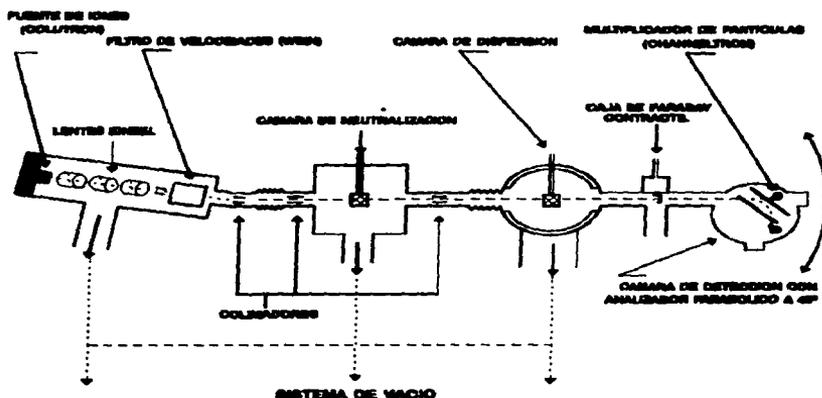
**-CAJA DE FARADAY**

**-ANALIZADOR PARABOLICO**

**-MULTIPLICADOR DE ELECTRONES**

## II.- DESCRIPCION DEL APARATO

El aparato empleado para llevar a cabo esta investigación fue el acelerador de baja energía(0.5-5 keV) del área de Colisiones, Laboratorio de Cuernavaca, del IFUNAM, cuyo esquema se presenta en la figura II.1:

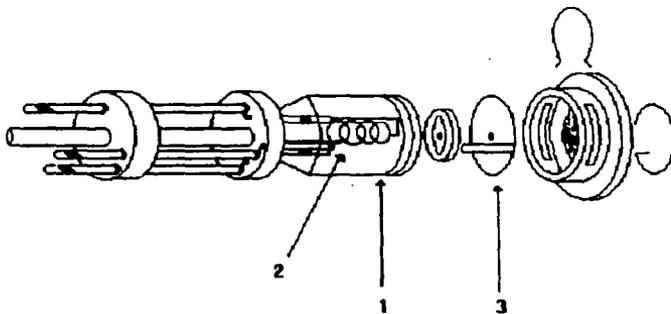


**Figura II.1: Aparato experimental**

A continuación se da una descripción de las partes principales del acelerador:

## II.1.- FUENTE DE IONES OPERACION DE LA FUENTE

La fuente es un elemento del acelerador que tiene gran importancia debido a que en este lugar es donde se admite el gas que se desea ionizar y, por medio de descarga en arco a bajas presiones del gas, se obtiene entre otros el ión con el que se trabaja. La fuente se muestra en la figura II.2:



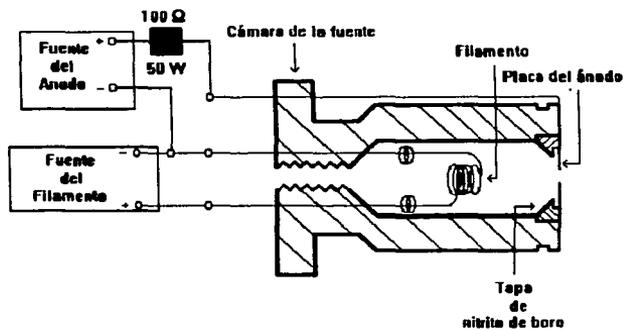
**Figura II.2: Fuente de Iones**

Los elementos principales de la fuente son:

**1.- CUERPO DE LA FUENTE(cámara):** es el recinto dentro del cual se admite el gas que se desea ionizar. Es de Nitruro de Boro que es un material de poca resistencia a los esfuerzos mecánicos pero que, en cambio, tiene la ventaja de soportar altas temperaturas por lo que puede funcionar como un horno, característica que nos permite obtener iones de materiales sólidos y gaseosos.

**2.- FILAMENTO:** se trata de un filamento de tungsteno que se conecta a una fuente de corriente para que por emisión termoiónica se obtengan los electrones responsables de la ionización. La corriente que se hace pasar por el filamento es tal que cuando se aplica una diferencia de potencial entre el filamento y el ánodo, se produce una descarga continua hacia el ánodo.

**3.- ANODO:** una vez que el filamento ha producido electrones y que el gas que se desea ionizar se encuentra dentro del cuerpo de la fuente, los electrones son acelerados aplicando un voltaje al ánodo. Este voltaje es tal que la energía que proporciona a los electrones es suficiente para que estos logren ionizar a los átomos ó moléculas del gas que se encuentran dentro de la fuente. En la figura II.3, se presenta el esquema eléctrico de la fuente de iones.



**Figura II.3: Esquema eléctrico de la fuente de iones**

## II.2.- ACELERACION, ENFOQUE Y SELECCION DE IONES

### LENTES DE EINZEL

Al igual que una lente óptica hace que los rayos luminosos que inciden en ella se concentren en un mismo punto, una lente electrostática puede enfocar un haz de partículas cargadas. Así como existen lentes "delgadas y gruesas" en óptica, de igual manera se tienen lentes electrostáticas "delgadas y gruesas". Las primeras constan de dos planos conductores paralelos sometidos a una diferencia de potencial, que por medio de una abertura circular en el centro curvan las líneas equipotenciales, como se muestra en la figura II.4:

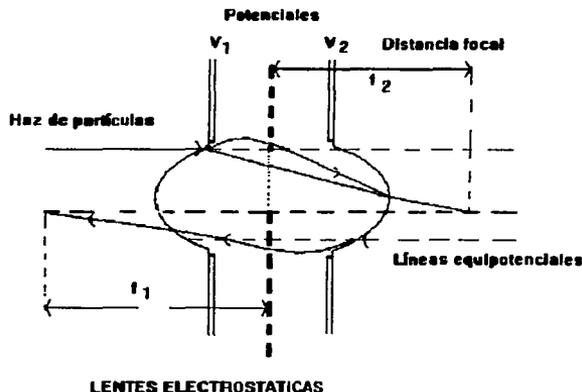


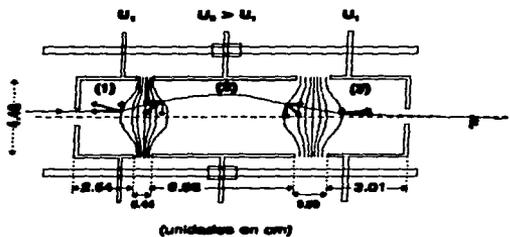
Figura II.4: Geometría de las Lentes delgadas

Las lentes electrostáticas "gruesas" están hechas de secciones de cilindro conductor hueco, la ventaja con respecto a las lentes "delgadas" es que éstas permiten modificar la distancia focal cambiando los potenciales de los electrodos, en vez de mover las lentes.

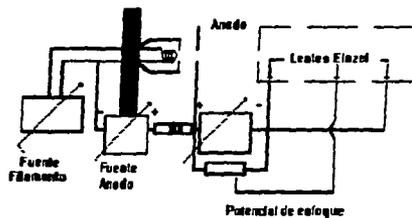
Las lentes utilizadas en este trabajo son de esta clase y son conocidas como **lentes Einzel**<sup>[40]</sup>. Estas constan de tres electrodos cilíndricos de igual diámetro alineados en un mismo eje, de tal manera que al aplicar el mismo potencial al primer y tercer electrodo, la energía de las partículas cargadas no se ve alterada. Es decir, "el índice de refracción" es el mismo al principio y al final de las lentes; éstos se mantienen a un potencial a tierra. El electrodo intermedio puede tener el potencial menor o mayor que el de los otros dos electrodos, modifica la trayectoria del haz, para obtener únicamente un efecto de enfoque; en este caso se mantiene a un potencial positivo.

La aceleración de los iones está dada por la diferencia de potencial que existe entre la fuente y las partes conectadas a tierra de las lentes Einzel.

La geometría de las lentes Einzel, así como el circuito eléctrico, se ilustran en las figuras II.5 y II.6 respectivamente.



**Figura II.5: Lentes Einzel "Gruesas"**



**Figura II.6: Circuito eléctrico de las lentes Einzel**

## FILTRO DE VELOCIDADES

Después de producir los iones y de que éstos han sido enfocados por medio de las lentes de Einzel, el siguiente paso es seleccionar el ión con el que se desea trabajar; por lo que se requiere de un selector de masas. En nuestro caso hacemos uso de un filtro de velocidades, conocido como "filtro de Wien"<sup>[41]</sup> que consiste de un electroimán (el cual proporciona un campo magnético) y un juego de placas deflectoras electrostáticas (las cuales proporcionan un campo eléctrico al aplicarles una diferencia de potencial), como se muestra en la figura II.7:

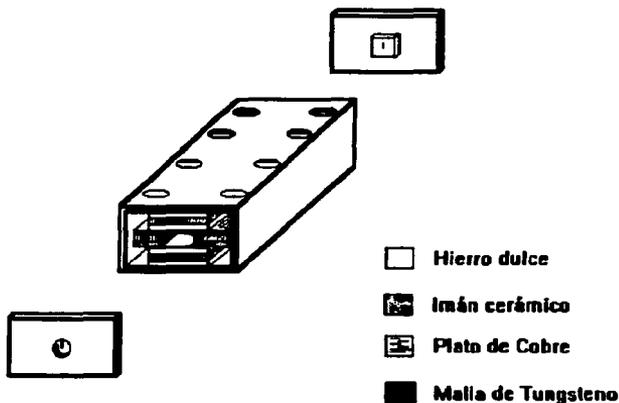


Figura II.7: Diagrama interior del Filtro

La manera en que funciona el filtro de Wien es la siguiente: se aplica un campo eléctrico y un campo magnético perpendiculares entre sí y a la dirección del haz incidente como se muestra en la figura II.8:

Esquema del Filtro de velocidades

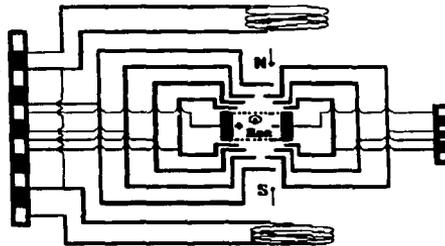


Figura II.8: Esquema del filtro de Wien

Cuando el haz de partículas cargadas pasa a través del filtro con una velocidad  $v_0$ , éste es deflektado por el campo electrostático en una dirección y por el campo magnético en otra. De acuerdo con la fuerza de Lorentz, la magnitud de esta fuerza se calcula de la siguiente manera:

**Fuerza electrostática**

$$F_E = e E$$

(55)

### Fuerza magnética

$$F_M = \frac{e}{c} ( v_0 \times B )$$

(56)

donde  $E$  es la intensidad del campo eléctrico,  $B$  es la intensidad del campo magnético y " $e$ " es la carga del electrón.

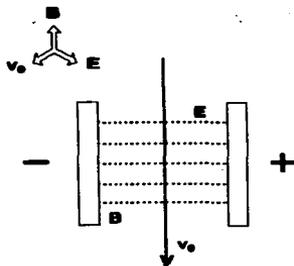
Cuando las dos fuerzas son iguales, las partículas cargadas con velocidad  $v_0$  pasan sin deflectarse a través del filtro. Las partículas con otras velocidades son deflectadas hacia uno u otro lado de la dirección de las partículas con velocidad  $v_0$ . La velocidad  $v_0$  de los iones que pasan sin sufrir ninguna desviación son aquellos que cumplen la relación:

$$v_0 = \sqrt{\frac{2 e V}{M_0}}$$

(57)

donde " $e$ " es la carga del electrón,  $V$  es el voltaje de aceleración y  $M_0$  su masa.

Un ión con velocidad  $v_0$  y masa  $M_0$  que se mueve a través del filtro como lo muestra la figura II.9:



**Figura II.9: Filtro de velocidades visto por arriba**  
no será deflectado si  $v_0 e B = e E$ , es decir:

$$B \sqrt{\frac{2 e V}{M_0}} = E$$

(58)

Las fuerzas magnéticas y eléctricas de los campos cruzados que actúan en el ión, se balancean una a otra en el filtro de velocidades y los iones de masa diferente  $M_x$  y velocidad  $v_x$ , experimentan una fuerza centrípeta equivalente a:

$$\frac{M_x v_x^2}{R} = e v_x B - e E$$

(59)

$$= e B \left[ \sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1 \right]$$

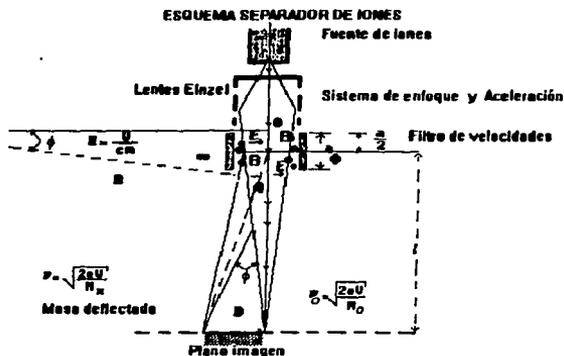
(60)

De esta ecuación se sigue que los iones de masa  $M_x$  son deflectados en una trayectoria circular con radio:

$$R = 2 \frac{V}{E \left[ \sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1 \right]}$$

(61)

El esquema de la figura II.10 ilustra como son separados los iones con masa  $M_x$  de los iones de masa  $M_0$  que pasan sin ser deflectados.



**Figura II.10: Esquema del separador de iones**

Puesto que el ángulo total de arco atravesado por el haz deflectado que entra en **O** y sale en **Q** es el mismo que el ángulo de deflexión  $\phi$ , entonces para ángulos pequeños se tiene de dicha figura que:

$$\tan\phi = \text{sen}\phi = \phi$$

(62)

Por lo tanto

$$\frac{D}{\ell} = \frac{a}{R}$$

(63)

de donde:

$$D = \ell \frac{a}{R}$$

(64)

y sustituyendo el valor de  $R$  obtenemos:

$$D = \ell \frac{a E \left[ \sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1 \right]}{2 V}$$

(65)

donde "a" es la longitud del filtro de velocidades y  $\ell$  la distancia de la imagen al punto P.

La dispersión  $D$  estará dada en centímetros si "a" y  $\ell$  lo están,  $V$  en volts y  $E$  en volt/cm.,  $M_0$  y  $M_x$  pueden estar en términos de masa.

La condición para que no haya deflexión de un número de masa elegido se obtiene a partir de la ecuación:

$$M_0 = 2 e V \left[ \frac{B}{E} \right]^2$$

(66)

El campo magnético para una bobina está dado por:

$$B = k I$$

(67)

donde  $I$  es la corriente de la bobina y  $k$  incluye el número de vueltas, la constante de permeabilidad  $\mu_0$  y las características geométricas de la bobina.

Entonces:

$$\frac{\sqrt{2eV} k \cdot I_0}{E} = \sqrt{M_0}$$

(68)

O bien, si:

$$a = \frac{E}{k \cdot \sqrt{2eV}} = cte.$$

(69)

Entonces

$$I_0 = a \cdot \sqrt{M_0}$$

(70)

Manteniendo fijo el campo eléctrico  $E$  y variando el campo magnético  $B$  mediante la corriente  $I$  se obtiene<sup>[Apéndice B]</sup>:

$$I_n = a \cdot \sqrt{M_n}$$

(71)

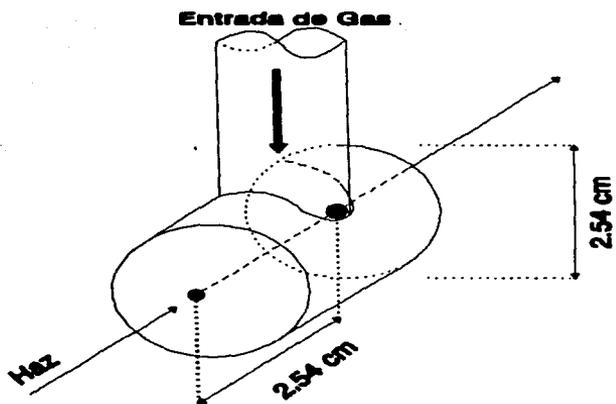
donde  $M_n$  es la masa del ion no deflectada para  $E$  e  $I$  dados.

Las partículas que componen el haz de iones se hacen incidir en una placa de cobre colocada a la salida del filtro de velocidades. Esta placa está conectada a un picoamperímetro, que mide la intensidad de la corriente del haz.

### **II.3.- CELDA DE REACCION**

Una vez que se tiene el haz de iones deseado, éste es conducido dentro del tubo del acelerador por medio de placas deflectoras curvas y placas paralelas planas haciéndolo pasar por la celda de reacción, lugar en donde se admite el gas que se usará como blanco.

La celda de reacción para gases consta de un tubo cilíndrico de acero inoxidable, cuyas dimensiones interiores son de 2.54 cm. de diámetro y 2.54 cm. de longitud. La celda de reacción tiene dos colimadores con bordes de navaja, uno a la entrada y otro a la salida con diámetros de 1 y 4 mm. respectivamente. En la figura II.11 se da un esquema de este elemento. Esta celda tiene como soporte un tubo de acero inoxidable de 3mm. de diámetro interior que conduce el gas (blanco) hacia el interior de la celda. La celda de reacción está situada en el centro de una cámara de dispersión que consta a su vez de tres partes, una fija a ella y las otras dos móviles, que rotan con respecto al centro de giro situado en la celda de reacción.



**Figura II.11: Celda de reacción**

#### II.4.- SISTEMAS DE DETECCION

La cantidad de partículas que inciden en el blanco es muy importante, ya que nos sirve para determinar qué fracción de partículas se obtienen de los distintos procesos que ocurren en la celda de reacción; por lo que es necesario contar con un sistema de detección de partículas.

En nuestro trabajo el sistema de detección está formado por una caja de Faraday y una cámara de detección en la que se encuentra un analizador parabólico a  $45^\circ$  y dos multiplicadores de electrones.

##### CAJA DE FARADAY

Se emplea para medir la corriente de partículas que se está haciendo incidir con el blanco. El esquema de la caja de Faraday<sup>[42]</sup> se da en la figura II.12:

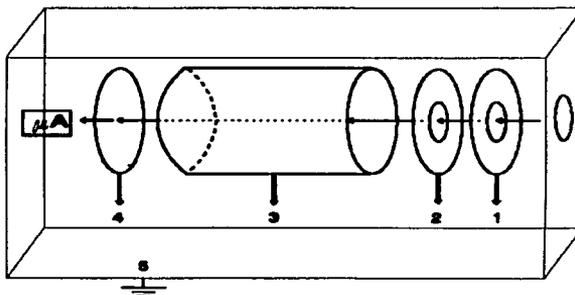


Figura II.12: Caja de Faraday

Como se puede apreciar, consta de 5 electrodos (de cobre) los cuales tienen las siguientes funciones:

El electrodo num. 1, al que se le aplica un voltaje positivo  $V_1$ , se encarga de repeler a los iones positivos del gas residual.

El electrodo num. 2, se encuentra a un potencial negativo  $V_2$  y su función es evitar que salgan los electrones secundarios producidos dentro de la caja.

El electrodo num. 3, es la placa colectora y se encuentra conectada a un electrómetro, en el que se mide la corriente de partículas que están incidiendo en el blanco.

El electrodo num. 4, es un electrodo cilíndrico al que se le aplica un potencial negativo a fin de regresar a la placa colectora los electrones que salen de la misma.

Finalmente el electrodo num. 5, es una caja protectora, que se conecta a tierra para cubrir las cuatro partes mencionadas de partículas cargadas existentes en el gas residual.

Para poder determinar el número  $N_i$  de partículas incidentes en un determinado tiempo  $t$ , se utilizó la relación:

$$\frac{N_i}{t} = \frac{I_0}{e}$$

(72)

siendo  $I_0$  la corriente incidente medida en la caja de Faraday, y "e" la

carga del electrón en valor absoluto.

### ANALIZADOR PARABOLICO

El analizador parabólico<sup>(43)</sup> consiste de dos placas conductoras paralelas que están a una distancia fija dada con un cierto potencial entre ellas. El analizador fundamentalmente separa las partículas cargadas del haz.

Dependiendo de la energía incidente y del estado de carga de las partículas, éstas serán dirigidas a un detector situado al lado opuesto, dejando pasar a las partículas neutras hacia un detector ubicado en la dirección del haz, como se muestra en la figura II.13:

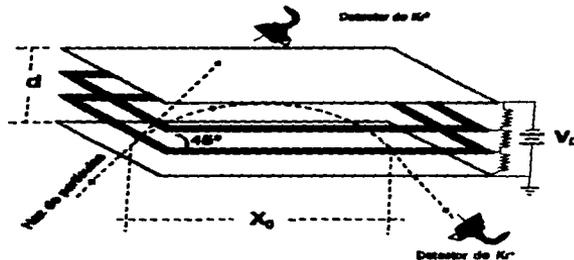


Figura II.13: Analizador parabólico

El analizador parabólico está construido de tal forma que la dirección de la entrada y la salida (respecto a las placas deflectoras) de los iones es de  $45^\circ$ , la separación entre las placas ya es fija y el voltaje aplicado a éstas, es determinado en función del voltaje de aceleración de las partículas.

La relación entre el voltaje aplicado a las placas  $V_d$  y el voltaje de aceleración  $V_0$  está dado por:

$$V_d \approx (0.6) V_0$$

(73)

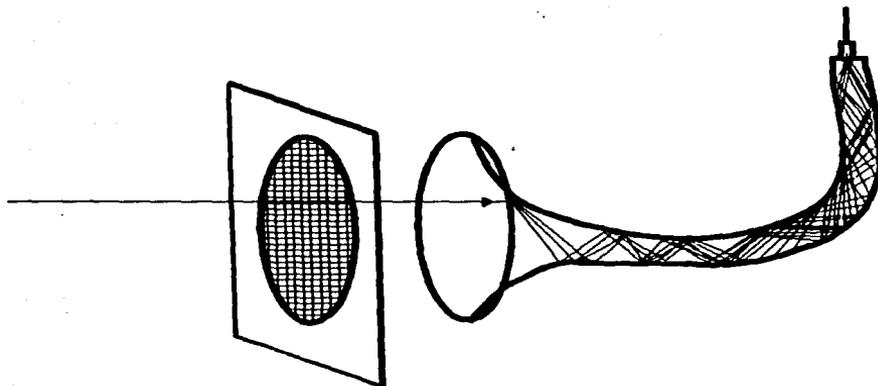
Esta relación fue determinada experimentalmente.

Para uniformizar el campo eléctrico entre las placas conductoras se intercalan dos rejillas a las cuales se les aplica un voltaje a través de unas resistencias de  $10 \text{ M}\Omega$ .

## **MULTIPLICADOR DE ELECTRONES**

La última componente importante del sistema de detección es el channeltron (CEM)<sup>[44]</sup>, que detecta los átomos de Kriptón.

El (CEM)<sup>[44]</sup> es un tubo de vidrio enroscado cuyo diámetro interior es de aproximadamente un décimo de milímetro. Además tiene una capa de material semiconductor, que posee características adecuadas de emisión de electrones secundarios para un proceso de multiplicación electrónica sobre el interior de la superficie del tubo. Cuando se aplica una diferencia de potencial entre los extremos del tubo, se crea un campo eléctrico axial a lo largo del mismo. Entonces, si un electrón es arrancado del interior de la superficie por emisión secundaria, éste será acelerado a través del tubo, y chocará con la superficie cilíndrica arrancando más electrones y así sucesivamente, como se muestra en la figura II.14. De esta manera un solo átomo de Kriptón que arranca al menos un electrón de la entrada del canal, genera una cascada de electrones en la salida del mismo.



**Figura II.14: Multiplicador de electrones**

## **CAPITULO III**

### **DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO.**

**III.1.- CONCEPTO DE SECCION TRANSVERSAL.**

**III.2.- CANTIDADES DIRECTAMENTE MEDIBLES.**

**III.3.- ERRORES EXPERIMENTALES.**

### III.- DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO

#### III.1.- CONCEPTO DE SECCION TRANSVERSAL

Antes de pasar a describir la forma de cómo se lleva a cabo el experimento para determinar las secciones totales de captura electrónica simple del ion  $\text{Kr}^+$  en Helio, es conveniente comentar cómo se define la sección transversal total para un proceso determinado y, posteriormente, relacionar ésta con los parámetros que uno puede controlar y medir en el laboratorio.

Se considera el siguiente proceso de intercambio de carga simple del tipo de la ecuación (6):



(74)

en el que un ión positivo del tipo  $A$ , incide con velocidad  $v$  sobre un blanco gaseoso formado por átomos ó moléculas del tipo  $B$  con una densidad de partículas  $\eta_B$ . Si un ión recorre dentro de este gas una distancia  $dx$ , la probabilidad  $P_i$  de que el intercambio de carga se lleve a cabo será proporcional al producto de la distancia recorrida dentro del gas, multiplicada por la densidad de partículas que hay en el blanco, lo que equivale a decir:

$$P_i = \sigma_{im} \eta_B dx$$

(75)

donde la constante de proporcionalidad  $\sigma_{nm}$  es la llamada **sección transversal del proceso**, donde la partícula incidente cambia su estado de carga inicial  $n$  a un estado final  $m$ . En el presente trabajo adoptaremos la conveniencia de denotar como  $\sigma_{10}$  a la sección transversal total del proceso (captura electrónica simple).

Si ahora en lugar de considerar un solo ión incidiendo sobre un blanco gaseoso, se piensa en un haz de iones positivos del tipo **A** con una densidad estable  $\eta_A$ , incidiendo todos con una velocidad  $v$ , entonces el número de partículas que intercambian su carga en la unidad de tiempo en un volumen dado  $dV = (dA)(dx)$  es:

$$dI = \sigma_{10} \eta_B L \int \eta_A v dA$$

(76)

Si se supone que las partículas sufren solo una colisión, es decir, si contamos con una presión y una densidad uniforme de partículas en el blanco, se tiene:

$$I_i = \sigma_{10} \eta_B L \int \eta_A v dA = \sigma_{10} \eta_B L I_A$$

(77)

por lo que:

$$I_i = \sigma_{10} \Pi I_A \quad (78)$$

y el valor de la sección transversal del proceso estará dada por:

$$\sigma_{10} = \frac{I_i}{\Pi I_A} \quad (79)$$

donde

$$\Pi = \eta_B L \quad (80)$$

es conocido como el "espesor del blanco".

De la expresión (79) es fácil ver que las unidades de  $\sigma_{10}$  son de [longitud]<sup>2</sup>.

En el caso de secciones diferenciales en ángulo sólido, la última expresión se puede escribir en términos de los parámetros medibles en el laboratorio como:

$$d\sigma_{10} = \frac{N^0(\theta)}{L \left(\frac{I_A}{c}\right) \left(\frac{P}{KT}\right) d\Omega} \quad t \text{ eff}$$

(81)

donde  $N^0(\theta)$  es el número de iones que se neutralizaron al capturar a un electrón y se dispersaron a un ángulo  $\theta$  después de la colisión;  $I_A$  es la corriente total de iones que se hace incidir sobre el blanco;  $e$  es la carga del electrón;  $P$  y  $T$  son la presión y temperatura del gas que se utiliza como blanco;  $d\Omega$  es la diferencial del ángulo sólido, determinada a partir de la geometría del sistema de detección;  $t$  es el tiempo durante el cual se registran las partículas que han intercambiado su carga y se han dispersado a un ángulo  $\theta$ ;  $eff$  es la eficiencia de los contadores de partículas, que está dada en función de la energía de las partículas detectadas.<sup>1451</sup>

La sección transversal total está dada entonces por:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta$$

(82)

Hasta aquí se ha considerado que el proceso estudiado es el de captura electrónica simple, pero si existe interés por conocer las secciones de doble captura electrónica, lo que se hace de acuerdo con la fórmula para la sección diferencial en ángulo sólido, es contar el número de iones que durante la colisión capturaron un par de electrones y se dispersaron a un ángulo  $\theta$ , es decir, contar  $N(\theta)$ .

### **III.2.- CANTIDADES DIRECTAMENTE MEDIBLES**

Al empezar el experimento, lo primero que se debe verificar es que el sistema de vacío se encuentre trabajando correctamente y que éste proporcione una presión adecuada para llevar a cabo la medición. Una vez que la presión dentro del tubo del acelerador ha llegado a un valor del orden de  $10^{-7}$  torr, se puede empezar a operar la fuente de iones.

Con la finalidad de trabajar con un haz de iones lo menos contaminado posible se procede a desgasificar la fuente. Esto se logra calentando el filamento de Tungsteno mediante el aumento gradual de la corriente que pasa a través del mismo, poniendo mucho cuidado que la presión en la fuente no aumente demasiado al estar desgasificando.

Cuando se ha llegado a una corriente de 15 a 16 amperios en el filamento y la presión en la fuente es menor que  $2 \times 10^{-3}$  torr ó  $3 \times 10^{-3}$  torr, se aplica una diferencia de potencial entre el ánodo y el cátodo de aproximadamente 50 volts, lo que equivale a una corriente de descarga en el ánodo de aproximadamente 0.1 amperios, suficiente para ionizar el gas que se está admitiendo en la fuente. En este caso se admitió un 100% de gas de **Kriptón**. El gas hace que la presión dentro de la fuente aumente hasta un valor de  $70 \times 10^{-3}$  torr aproximadamente.

Los electrones primarios producidos por el filamento y los electrones secundarios proporcionados por la ionización del gas, forman el gas de electrones que junto con los iones y las partículas neutras forman un sistema al que se le conoce como plasma de descarga en arco.

Al aplicar el voltaje de aceleración todos los iones positivos que se generan en la fuente son acelerados y enfocados por medio de las lentes Einzel (ver fig. II.5). En éstas, el primer y tercer electrodos se conectan a tierra y el segundo se mantiene a un potencial positivo menor que el voltaje de aceleración. Posteriormente, los iones entran en el filtro de velocidades, en este filtro el campo eléctrico se mantiene fijo aplicando una diferencia de potencial a las placas de aproximadamente 200 volts, la selección del ion se realiza variando la corriente que circula por las espiras del electroimán.

Como puede apreciarse en la figura II.1, el acelerador no está perfectamente alineado en un solo eje, esto obedece a que los multiplicadores de electrones son sensibles a la luz y si la fuente de iones estuviera alineada con el resto del acelerador, el detector podría contar los fotones que salen de aquella.

La fuente de iones, las lentes Einzel y el filtro de velocidades se encuentran alineados en un eje que forma un ángulo de  $10^\circ$  con respecto al resto del acelerador. Es por esto que se cuenta con unas placas deflectoras cilíndricas a las que se le aplica una diferencia de potencial de aproximadamente 150 volts por cada kilovolt de energía de aceleración para corregir la dirección del haz de iones. Con la ayuda de una placa de cobre que al girar se interpone al paso de el haz ó puede dejarlo pasar libremente, es posible optimizar la corriente del mismo. Esto se logra variando el potencial aplicado al

segundo electrodo de las lentes Einzel y cambiando la corriente en el electroimán del filtro.

El haz es dirigido a través del tubo del acelerador por medio de placas planas y paralelas que lo pueden desviar horizontal ó verticalmente para que de esta forma pueda pasar por el colimador que se encuentra a la entrada de la celda de reacción.

Antes de admitir el gas en la celda de reacción, se debe medir la corriente total de  $Kr^+$  que se está haciendo incidir en la misma para poder medir secciones absolutas. En algunas ocasiones la corriente tarda un poco en estabilizarse debido a que no hay un equilibrio entre el flujo de gas que se está admitiendo en la fuente de iones y el flujo de gas que se está desalojando en el sistema de vacío. Las corrientes típicas de  $Kr^+$  con las que se trabaja son del orden de  $10^{-10}$  amperios. Esto es con el objeto de evitar procesos de saturación en los detectores. Una vez que se estabiliza la corriente, se admite en la celda de reacción el gas que se utilizará como blanco. Para este trabajo se utilizó Helio a una presión en la celda de  $4 \times 10^{-4}$  torr, ya que a esta presión se garantiza que el proceso se encuentra dentro del régimen de colisión simple<sup>[APENDICE C]</sup>. La presión se mide con un barómetro capacitivo a través de la capacitancia que hay entre una placa conductora y un diafragma que se acerca o se separa de acuerdo a la presión ejercida sobre éste.

Se supone que la temperatura del gas es la temperatura ambiente a la que se encuentra el laboratorio y que se considera generalmente como

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

de 20° C con variaciones mínimas.

Las distribuciones angulares se realizaron con la ayuda de un motor de pasos que se encarga de mover el sistema de detección. Dado que los iones  $Kr^+$  que interaccionan con el Helio lo hacen a parámetros de impacto relativamente grandes, éstos conservan casi inalteradas su energía, por lo que los ángulos de dispersión son en general pequeños y es por esto que las distribuciones angulares casi nunca se hacen a ángulos mayores a  $\pm 5^\circ$  lo que equivale a  $\pm 675$  pasos del motor.

Con el analizador parabólico es posible hacer simultáneamente las distribuciones angulares para los procesos de captura electrónica y de dispersión, esto hace que ello no signifique un trabajo adicional.

Con los multiplicadores de electrones se cuenta el número de partículas neutras o cargadas que se dispersaron a un determinado ángulo.

Los detectores usados generan una cascada de aproximadamente  $10^8$  electrones por partícula. Con esta cascada se crea un pulso electrónico asociado al contador y éste consta de un preamplificador, un amplificador lineal, un escalador y un medidor de tiempo. Con este sistema uno puede contar el número de partículas dispersadas a un cierto ángulo durante un intervalo de tiempo predeterminado.

De este modo fué posible captar alteraciones bruscas en la intensidad total, procediendo a desecharlos cuando se presentaba esta situación. Se estima que los cambios en la intensidad total del haz para una misma medida fueron generalmente menores al 10%.

### III.3.-ERRORES EXPERIMENTALES

Las cantidades directamente medibles en el laboratorio y que juegan un papel importante en el cálculo de las secciones transversales totales son las siguientes:

- a).- **Corriente total de iones  $Kr^+$  ( $I_{Kr^+}$ ):** Por diversas razones, muchas veces la corriente de iones que incide en el blanco no permanece constante durante el tiempo en el que se hacen las distribuciones angulares. El criterio para asignar una incertidumbre a la corriente es el de desechar aquellos datos tomados cuando la corriente presenta una variación mayor al 10% de la lectura inicial.<sup>[46]</sup>
- b).- **Presión del gas (P):** Esta es medida en la celda de reacción y no varía significativamente mientras está corriendo el experimento, por lo que la incertidumbre porcentual se estima como del 0.1% dada por el fabricante<sup>[47]</sup> del barómetro capacitivo.
- c).- **Temperatura (T):** La temperatura también es estable, no hay variaciones en más del 1%.
- d).- **Longitud efectiva (L):** El error relativo asociado a la longitud efectiva de la celda de reacción es del 3%.
- e).- **Tiempo (t):** El error relativo asociado a los medidores del tiempo<sup>[48]</sup> (Timer) es del 0.1%.

Al sumar las incertidumbres porcentuales de todas las cantidades medibles se encuentra el error porcentual<sup>[49]</sup> asignado a la sección diferencial debido a las incertidumbres asociadas a los parámetros de las

ecuaciones (81) y (82). Partiendo de la expresión:

$$\sigma = \int \frac{d\tau}{d\Omega} = \int k \frac{I_{Kr^0}}{I_{Kr} \cdot \Pi t} \quad (83)$$

Si  $\eta_B$  se define a muy bajas presiones (gas ideal), de la ecuación de la Ley de los gases:

$$P V = N k T \quad (84)$$

entonces:

$$\Pi = \eta_B L = \frac{P L}{k T} \quad (85)$$

por lo tanto,

$$\sigma = F = \frac{P}{k t L} \ln \left[ 1 - \frac{I_{Kr^0}}{I_{Kr}} \right] \quad (86)$$

El error porcentual para la función "F" se obtiene de la relación:

$$100\% \left( \frac{dF}{F} \right) = \left( \frac{dT}{T} + \frac{dI_{Kr^0}}{I_{Kr^0}} + \frac{dt}{t} + \frac{dP}{P} + \frac{dL}{L} \right) 100\%$$

(87)

Las cantidades encerradas en los paréntesis de la relación anterior, son los errores relativos asignados a la ecuación (86).

Al sustituir los porcentajes dados en los incisos anteriores en la ecuación (87) encontramos que la precisión correspondiente a las secciones totales es aproximadamente del orden de:

$$\frac{d\sigma}{\sigma} \times 100 \approx 15\%$$

(88)

## **CAPITULO IV**

### **RESULTADOS**

## RESULTADOS

Las secciones diferenciales absolutas para captura electrónica simple se muestran en la figura IV.1. Estas fueron calculadas de la relación:

$$\frac{d\sigma_{10}}{d\Omega} = \frac{I_{Kr^0}}{\Pi \Delta\Omega I_{Kr}}$$

(89)

$I_{Kr^+}$  es el número de iones de **Kr** incidiendo por segundo en el blanco.  $I_{Kr^0}$  es el número de **Kr**<sup>0</sup> contados a un ángulo  $\theta$  con respecto a la dirección del haz incidente.

$\Pi$  (átomos/cm<sup>2</sup>) es el espesor del blanco (átomos de **He** por unidad de área).

$\Delta\Omega$  es el ángulo sólido subtendido por el sistema de detección.

Las distribuciones angulares son medidas en ambos lados de la dirección del haz incidente (-3° a 3°) para confirmar que las distribuciones angulares son simétricas.

De las curvas mostradas en la figura IV.1 se puede observar que el comportamiento de la sección transversal diferencial cuando se utiliza Helio como blanco es monótono decreciente a medida que se incrementa el ángulo de dispersión. Estas distribuciones muestran la presencia de algunas estructuras.

Para dar una mejor interpretación de los resultados experimentales obtenidos, estos datos experimentales son mostrados en la figura IV.2 en

términos del ángulo de dispersión reducido  $\tau$  ( $E\theta$ ) y la sección diferencial reducida:

$$\rho \left( \theta \operatorname{sen} (\theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)$$

(90)

En base a esta representación, la sección transversal diferencial reducida presenta las siguientes características:

- a).- La resolución angular y en energía a  $E = 1$  keV es adecuada para identificar estructuras a  $\tau > 0.5$  keV-deg.
- b).- El comportamiento de las curvas ( $\rho$  v.s.  $\tau$ ) muestra un patrón único tal y como lo predice la *ley de escalamiento*<sup>[50]</sup>.
- c).- Se observa la presencia de un máximo aproximadamente a  $\tau \approx 1.3$  keV-deg, el cual es independiente de la energía incidente para energías mayores de 3 keV.
- d).- Las curvas a energías de 1 keV y 2 keV presentan un comportamiento similar a las curvas a energías mayores de 3 keV, pero son de menor magnitud.
- e).- Las características cuyo valor de  $\tau$  es el mismo a diferentes energías indican que existe una región común de interacción, esto establece que la captura electrónica se lleva a cabo en una región común, donde el valor de  $\tau$  implica un valor del parámetro de impacto  $b$  al cual se produce el proceso de captura. En este caso en particular, el parámetro

de impacto  $b$  es estimado haciendo uso del *potencial coulombiano apantallado*.<sup>[39]</sup>

En el presente trabajo se encontraron un par de máximos, una de ellos se presenta a un valor alrededor de  $\tau \approx 0.25$  keV-deg correspondiéndole un parámetro de impacto  $b \approx 1.79 a_0$  a 1.0 keV, y el otro a un valor  $\tau \approx 1.3$  keV-deg correspondiéndole un valor del parámetro de impacto  $b \approx 1.36 a_0$  a  $\approx 3$  keV de energía.

El valor del parámetro de impacto estimado a través del *potencial coulombiano apantallado* resulta ser de una estimación razonable para el presente estudio.

A ángulos de dispersión reducidos mayores a  $\tau = 2$  keV-deg, las curvas muestran la presencia de oscilaciones, originadas por la interferencia de los procesos de captura (fig. IV.2).

Las secciones diferenciales medidas han sido integradas numéricamente sobre el intervalo angular observado para obtener la sección transversal total denotada por:

$$\sigma_{10} = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin(\theta) d\theta$$

(91)

y se muestran en la figura IV.3, las barras de error son una medida de la reproducibilidad de los datos obtenidos.

A modo de tener una estimación del comportamiento de la sección

transversal total, y considerando que el modelo de Landau-Zener es el más adecuado para poder describir transiciones que deben su origen al cruzamiento de curvas de energía potencial, se aproximó la sección transversal total por este método. Aunque el modelo presenta ciertas limitaciones, éste ha probado ser extremadamente útil en la estimación de secciones transversales asociadas a diversos procesos de colisión. Los cálculos de la sección transversal para la transferencia de carga por este modelo, fueron obtenidos de la siguiente forma:

1).- La distancia de cruzamiento de las curvas equipotenciales fue obtenido a partir de la sección transversal diferencial reducida experimental a altas energías utilizando el método de Smith<sup>[39]</sup> y tiene un valor estimado de  $R_c = 1.36 a_0$ .

2).- El elemento de matriz de acoplamiento  $\epsilon_{12}$  fue calculado a través de la expresión<sup>[51]</sup>:

$$\epsilon_{12} (R_c) = R^* e^{0.86 R^*} \quad (92)$$

donde

$$R^* = \frac{1}{2} (\alpha + \gamma) R_c \quad (93)$$

Se utilizó

$$\frac{1}{2} \alpha^2 = 24.586 \text{ eV}$$

(94)

como el potencial de ionización efectivo del blanco (Helio), y donde:

$$\frac{1}{2} \gamma^2 = 13.999 \text{ eV}$$

(95)

es la afinidad electrónica del  $\text{Kr}^+$  en el estado base<sup>[52]</sup>.

3).-  $d/dt (\epsilon_1 - \epsilon_2) = 8.29 \text{ u.a./ } a_0$ , la cual se ajustó hasta obtener el mismo valor de la sección transversal total experimental a una energía de 3 keV.

4).- Una vez que  $R_c$ ,  $\epsilon_{12}$  y  $d/dt (\epsilon_1 - \epsilon_2)$  son conocidos, la sección transversal  $\sigma_{10}$  se puede calcular a partir de la sección transversal reducida obtenida por el método de Olson<sup>[51]</sup> para diferentes velocidades incidentes de los iones.

Los resultados de este cálculo se muestran en la figura IV.3.

Aquí se puede observar que los cálculos y las medidas difieren significativamente en forma de la sección transversal total obtenida por el modelo teórico en el intervalo de energías considerado en el presente estudio. Estas discrepancias posiblemente son debidas a las múltiples simplificaciones hechas durante el tratamiento teórico.

En principio, sólo los estados base de los reactantes participan en la cálculo, mientras la sección transversal total experimentalmente obtenida no está representada por un sólo estado de energía sino que ésta es promediada con respecto a la distribución poblacional de los estados de energía involucrados en el proceso de colisión.

La forma constante que tiene la sección transversal total se debe probablemente a la presencia de los numerosos estados del átomo  $\text{Kr}^0$  que pueden ser producidos con un defecto de energía pequeño. Cada átomo en un estado final puede producir un máximo en la sección transversal que depende del defecto de energía. Como los defectos de energía para los producción de los diversos estados atómicos varían de un estado a otro, se especula que hay varios máximos en el intervalo considerado, por lo que observamos realmente un promedio de todos ellos, cuya superposición de la producción individual de la sección transversal  $\sigma_{10}$  muestra un comportamiento plano.

Es interesante comparar nuestro estudio con el sistema inverso ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ), debido particularmente a que los dos sistemas ( $\text{Kr}^+ + \text{He}$ ) y ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ) tienden a ser el átomo unido  $\text{Sr}^+$  cuando la distancia internuclear se aproxima a cero.

En la colisión  $\text{Kr}^+ - \text{He}$  el proyectil posee una masa mucho más grande que la del blanco, esta característica hace que el estudio diferencial de la colisión sea más difícil porque el intervalo angular  $\Delta\theta$  depende directamente de la razón de la masa del ion y la masa del

blanco, la cual es mucho más grande (420 veces) para el sistema  $(\text{Kr}^+ + \text{He})$  que para el sistema  $(\text{He}^+ + \text{Kr})$ .

Una comparación de la sección transversal total para las dos reacciones (directa e inversa) está representado en la figura (IV.4), en donde la sección total está en función de la energía en el centro de masas del sistema  $(\text{Kr} + \text{He}^+)$ . La gráfica muestra los datos obtenidos experimentalmente en este trabajo así como los obtenidos por Maier II<sup>[22]</sup>, Koopman<sup>[17]</sup> y Stedeford et al<sup>[13]</sup> para la reacción inversa. Como se puede ver, la sección transversal total para la formación de  $\text{Kr}^0$  en Helio muestra la misma forma que la mostrada para la reacción inversa, pero su magnitud es menor por un factor aproximado de 10. Con relación a dicho sistema, esto resulta razonable debido a que existe la presencia de diferentes canales de salida para la reacciones  $(\text{Kr}^+ + \text{He})$  y  $(\text{He}^+ + \text{Kr})$ .

Cabe hacer notar que no fue posible determinar los canales de salida, no obstante, algunos de estos canales de excitación del átomo de Kriptón fueron observados por Baudon et al<sup>[19]</sup> para el sistema inverso  $(\text{He}^+ + \text{Kr})$ , y algunos otros canales como por ejemplo para la reacción cuasi-resonante  $\text{He}^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{He} + (\text{Kr}^+)^*$  también han sido observados.

La sección decae rápidamente cuando  $E_{\text{cm}}$  decrece a energías por debajo de los 10 eV y tiene un valor máximo de  $\approx 3 \text{ \AA}^2$  a 120 eV, y decrece en forma suave a medida que  $E_{\text{cm}}$  se incrementa. También, aquí se puede notar que a energías por debajo de los 100 eV la sección transversal mostrada resulta en común acuerdo a las medidas presentadas

por Maier II<sup>[22]</sup> y Koopman<sup>[17]</sup>, pero existe una pequeña discrepancia con los datos obtenidos por Stedeford et al<sup>[13]</sup>. Finalmente se puede observar que los resultados obtenidos experimentalmente se ajustan razonablemente con las mediciones llevadas a cabo por Maier II<sup>[22]</sup> y Koopman<sup>[17]</sup>.

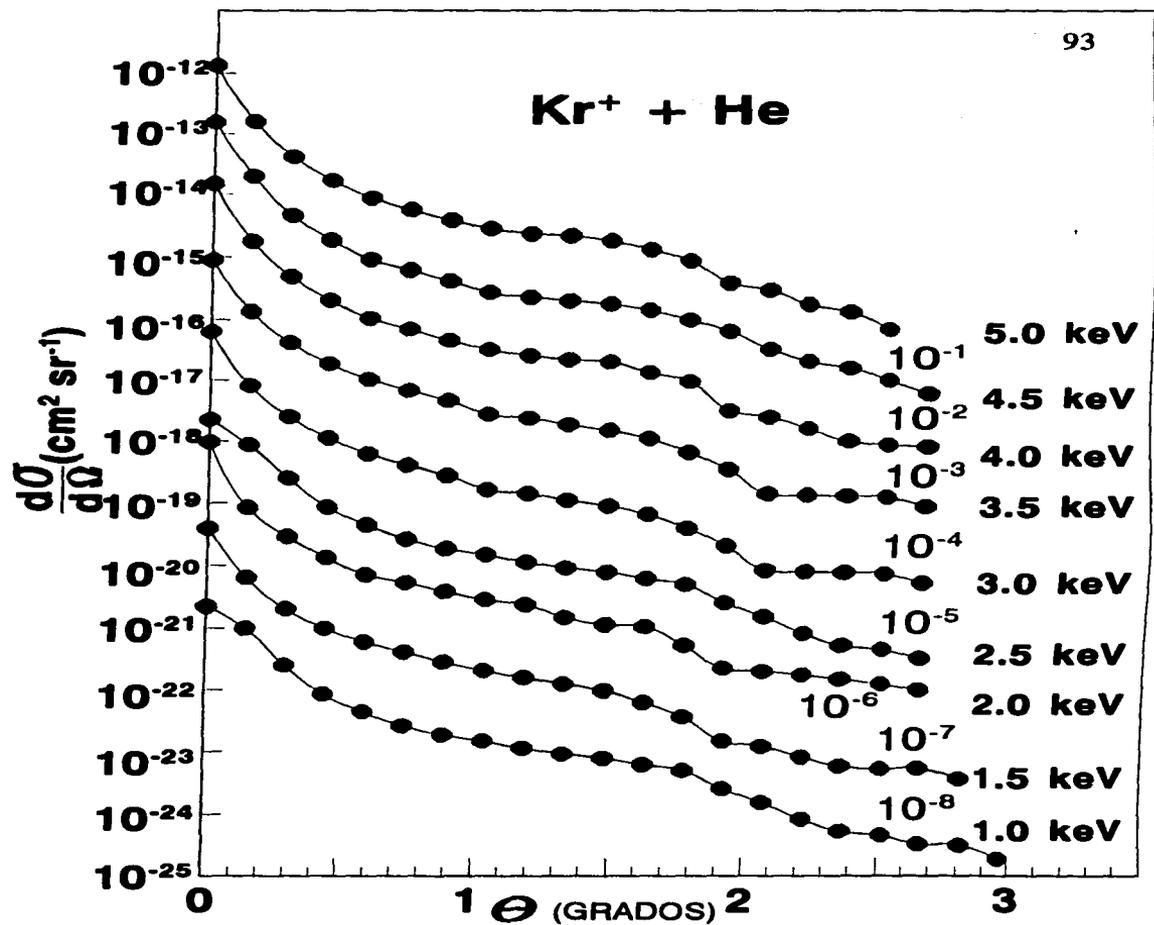


FIG.IV.1:SECCION TRANSV. DIFERENCIAL

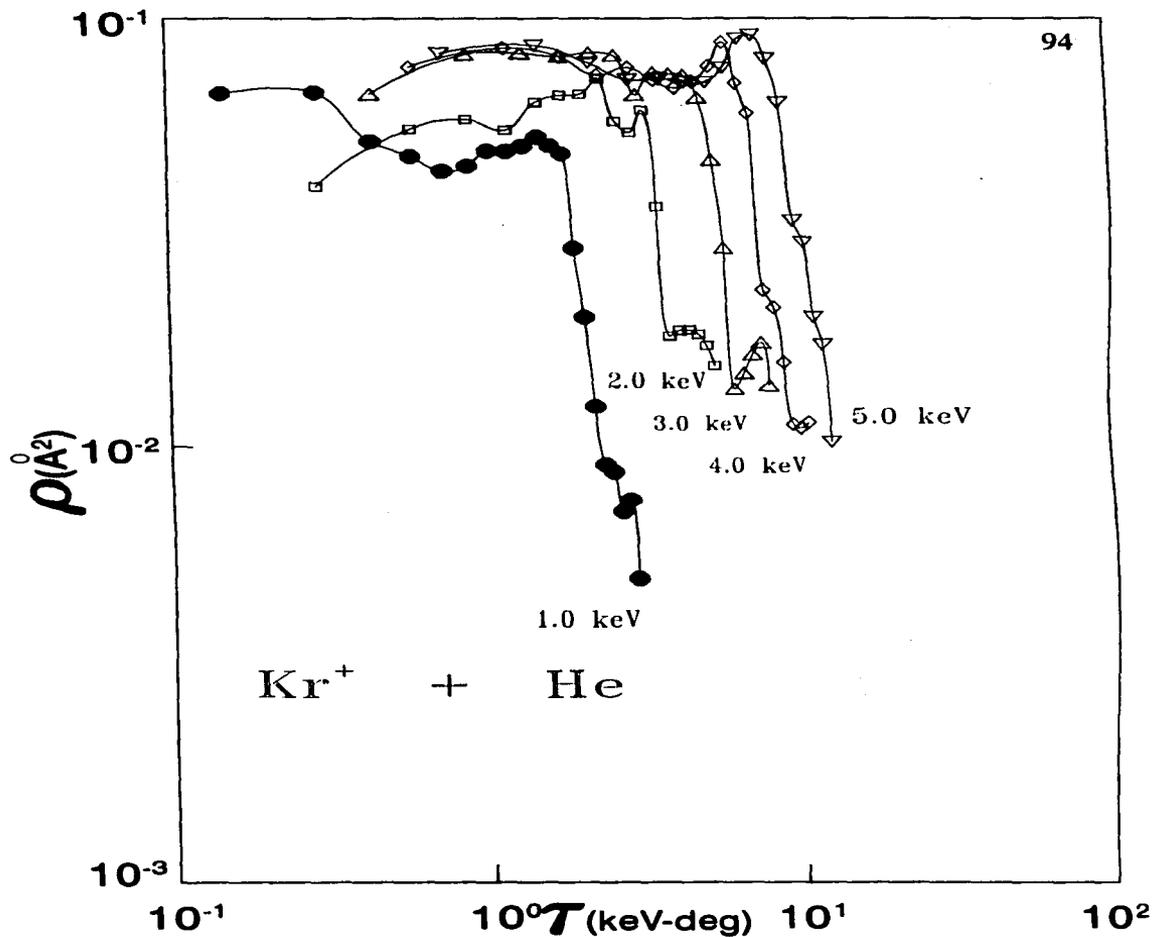


FIG.IV.2:SECC. TRANS. DIF. REDUCIDA

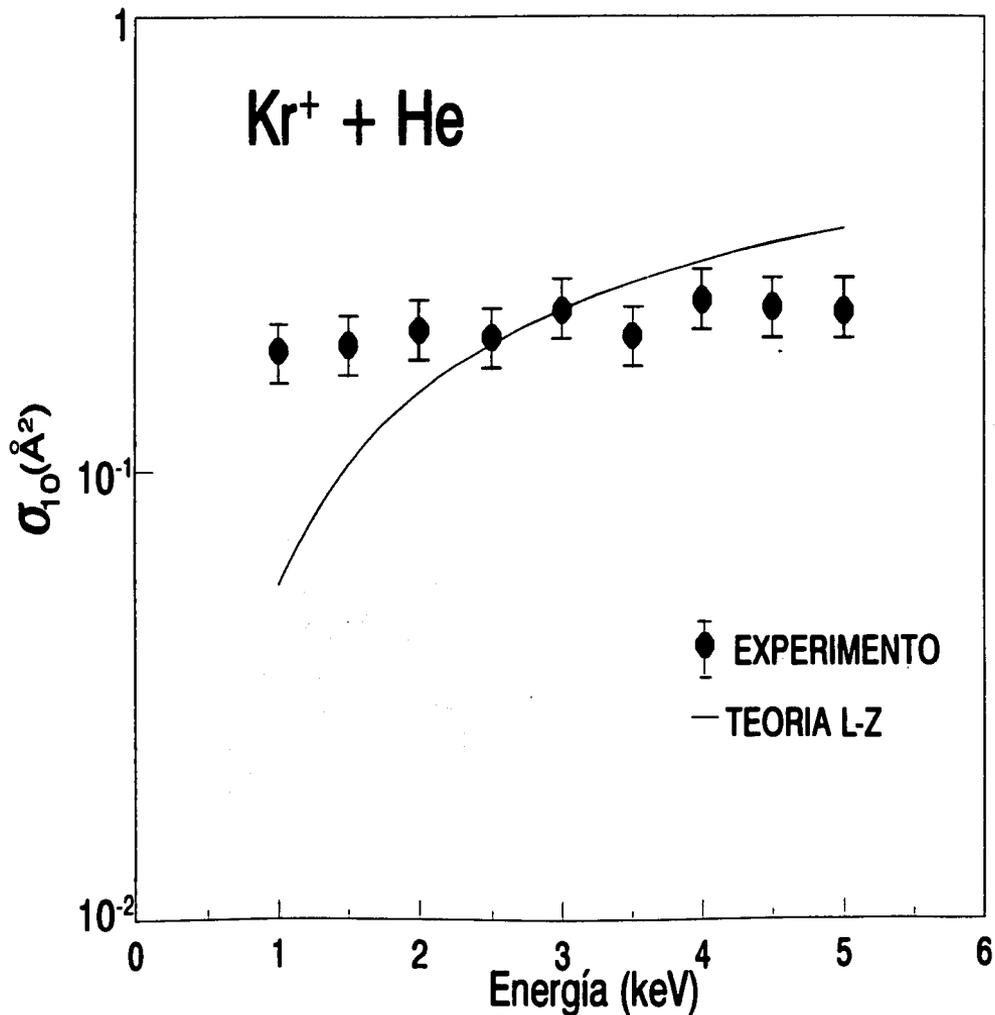


FIG.IV.3: SECCION TRANSVERSAL TOTAL

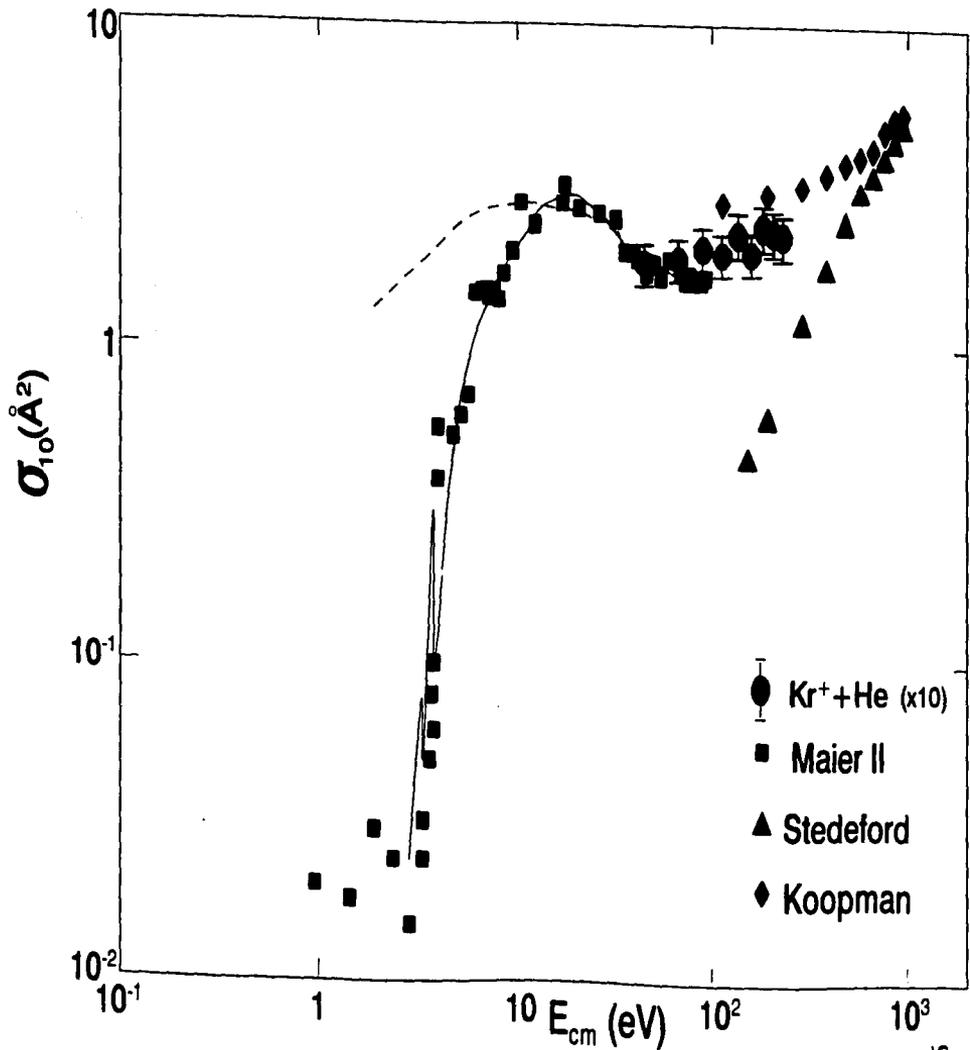


FIG.IV.4: SECCION TRANSVERSAL TOTAL

## CAPITULO V

### CONCLUSIONES

## CONCLUSIONES

Las conclusiones del presente trabajo se pueden resumir de la siguiente manera:

a).- Se presentan las mediciones de secciones transversales diferenciales absolutas de captura electrónica simple de  $\text{Kr}^+$  en Helio a un intervalo de energías de 1.0 a 5.0 keV y sobre intervalos angulares de laboratorio de  $-3^\circ$  a  $3^\circ$ .

b).- Del análisis de esta representación se reporta la presencia de estructuras y un comportamiento decreciente a medida que la energía incidente aumenta.

c).- Se hace una representación de estos valores experimentales en términos del ángulo de dispersión reducido ( $\tau$ ) y de la sección transversal diferencial experimental reducida ( $\rho$ ).

d).- Del resultado de esta representación, se observa la presencia de un máximo a un valor  $\tau \approx 1.3$  keV-deg independiente de la energía a altas energías en donde el proceso de captura se lleva a cabo.

e).- Se obtuvo el radio de cruce donde se lleva a cabo la captura electrónica  $R_c \approx 1.36 a_0$ .

f).- El comportamiento de la sección transversal total en función de la energía incidente muestra un comportamiento constante en el intervalo de energías considerado en el presente estudio.

Es importante hacer notar la existencia de diversos defectos de

energía lo que origina en promedio un comportamiento constante de la sección transversal total en función de la energía incidente.

**g).**- La sección transversal total experimental fué multiplicada por un factor de peso estadístico cuyo valor es de 10.

**h).**- El comportamiento de la sección transversal total experimental se compara con el modelo semiempírico de transferencia de carga cuasi-resonante de Olson<sup>[51]</sup>, y a pesar de las múltiples simplificaciones hechas durante el desarrollo es satisfactorio para energías mayores de 2.5 keV, mientras que a energías menores de 2.5 keV el comportamiento es diferente.

Los resultados experimentales obtenidos en este trabajo concuerdan razonablemente bien con las medidas realizadas por Maier II<sup>[22]</sup> y Koopman<sup>[17]</sup> para la reacción inversa ( $\text{He} + \text{Kr}^+$ ), pero existen discrepancias con las medidas obtenidas por Stedeford et al<sup>[13]</sup>.

De la comparación de la reacción ( $\text{Kr}^+ + \text{He}$ ) con la reacción inversa ( $\text{He}^+ + \text{Kr}$ ), los datos presentados sugieren que la transferencia de carga se lleva a cabo a los niveles excitados del  $\text{He}^+$  originados en la colisión, los cuales juegan un papel muy importante y que no son directamente observables en este experimento.

Los resultados no se pudieron comparar con otros trabajos previos ya que este es el primer reporte sobre secciones diferenciales y totales para el proceso de simple captura electrónica a partir de la colisión de  $\text{Kr}^+$  en Helio en el intervalo de energías considerado en el presente

trabajo.

Por último podemos concluir que el llevar a cabo trabajos en los que se pueda establecer una comparación entre la teoría y el experimento, son de vital importancia para el entendimiento de los procesos que ocurren en la naturaleza.

**EXPERIMENTOS FUTUROS**

**REFERENCIAS**

**APENDICE A**

**APENDICE B**

**APENDICE C**

**GLOSARIO**

## **EXPERIMENTOS FUTUROS**

Permanecen muchas investigaciones interesantes del comportamiento del proceso de captura de carga del sistema  $(\text{KrHe})^+$ .

La técnica de distribuciones angulares utilizada en este trabajo es uno de los más importantes métodos de estudio, ya que se puede extraer información del sistema en colisión, pero debido a su limitación, quedan muchas interrogantes, por lo que a continuación se enlistan los experimentos futuros:

- 1).- Realizar distribuciones de energía a ángulos para los cuáles exista un máximo en la representación reducida [ $\rho$  v.s.  $\tau$ ], tratando de inferir cuáles son los niveles de energía involucrados en el proceso de colisión.
- 2).- Acoplar un sistema de detección de fotones en la celda de reacción, ya que no se tiene información sobre lo que sucede con el átomo de He y los niveles de energía a los cuales se puede llevar a cabo la transferencia de carga. Esto será muy útil para tener una visión completa del fenómeno y poder identificar los procesos involucrados en la colisión.
- 3).- Calcular la función de deflexión a partir de potenciales teóricos para los estados disociativos del complejo molecular  $(\text{KrHe})^+$  y compararlos con las distribuciones angulares de las secciones diferenciales experimentales, al igual que los parámetros de impacto para

los cuales exista un máximo en las secciones diferenciales reducidas, así como los cruces de potencial teóricos.

4).- Ampliar ó reducir el intervalo de energía al cual el proyectil incide y así poder comprobar si el principio de Balance Detallado se sigue cumpliendo en todo el intervalo de energía, ó encontrar su intervalo de validez.

5).- Aumentar la intensidad del haz de Kr, para así poder medir otros procesos menos probables como lo son la doble pérdida o captura electrónica, estos estudios ya se han empezado a realizar y se han presentado resultados preliminares en diversos foros internacionales.

**REFERENCIAS**

- [1].- **A. Wada, C. Hirose.**  
Journal of Molecular Structure, 379, p.p. 205, ( 1996 ).
- [2].- **L. Brostrom, A. Kastberg, J. Lidberg, S. Mandervick.**  
Z. Phys. D, 36, p.p. 125, ( 1996 ).
- [3].- **A. Ehresmann, G. Mentzel, K-H Schartner.**  
Journal Phys. B (At. Mol. Opt. Phys.), 29, p.p. 991 ( 1996 ).
- [4].- **C. H. Lyu, F. C. Bruhweiler.**  
Astrophysical Journal, 459, p.p. 216, (1996 ).
- [5].- **D. A. Verner, G. J. Ferland.**  
Astrophysical Journal Supplement Series, 103, p.p. 467, ( 1996).
- [6].- **R. V. Chiflikyan.**  
Plasma Phys. Reports, 22, p.p. 66, ( 1996).
- [7].- **R. Slanki, E. L. Latush, D. C. Gerstenberger, W. M. Fairbank Jr. and G. J. Collins.**  
Appl. Phys. Lett., 35, p.p. 317, (1979).
- [8].- **M. Tsuji, N. Kaneko, M. Furusawa, T. Muraoka, and Y. Nishimura.**  
J. Chem. Phys., 98, p.p. 8565, (1993).  
J. Chem. Phys., 99, p.p. 4539, (1993).
- [9].- **C. Zener.**  
Proc. Roy. Soc. (London), A137, p.p. 696, (1932).
- [10].- **R. E. Olson.**

Phys. Rev., **A2**, p.p. 121, (1970).

[11].- **H. Martínez. et al;**

Chem. Phys., **190**, p.p. 139, (1995).

Chem. Phys., **193**, p.p. 193, (1995).

Phys. Letters, **A126**, p.p. 517, (1990).

Phys. Rev., **A38**, p. 5914, (1988).

Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, en impresión, (1997).

[12].- **Martínez, H.**

Nuclear Instruments and Meth. Phys. Res., **B82** , p.p. 389, (1993).

[13].- **Stedeford, J. B. H. and Hasted, J. B.**

Proc. R. Soc. London Ser., **A227** , p.p. 466, (1955).

[14].- **Nikolaev, V. S. et al.**

Soviet Physics JETP, **13** , p.p. 695, (1961).

[15].- **Pivovarov, L. C. et al.**

Soviet Physics JETP, **14** , p.p. 20, (1962).

[16].- **Lipeles, H., Novick, R. and Tolk, N.**

Physical Review Letters, **15** , p.p. 815, (1965).

[17].- **Koopman, D. W.**

Physical Review, **154** , p.p. 79, (1967).

[18].- **Schlumbohm, H.**

Z. Naturforsch, **239** , p.p. 970, (1968).

[19].- **Baudon J., Barat, M. and Abignoli, M.**

J. Physical B: Atom. Molec. Phys., **3**, p.p. 207, (1970).

- [20].- **Stephen, W.**  
Physical Review A: 3, p.p. 280, (1971).
- [21].- **Gilbody et al.**  
J. Physical B: 4 , p.p. 800, (1971).
- [22].- **Maier II**  
Physical Review A: 5 , p.p. 1256, (1972).
- [23].- **Brenot, J. et al.**  
Physical Review A, 11 , p.p. 1933, (1975).
- [24].- **Inouye H. and Tanji-Noda, K.**  
Journal Chemical Physics, 77 , p.p. 5990, (1982).
- [25].- **Rudd, M. E., Goffe, T. V., Iroh, A. and Dubois, D. R.**  
Physical Review A, 32 , p.p. 829, (1985).
- [26].- **Dubois, R. D.**  
Physical Review A: 39 , p.p. 4440, (1989).
- [27].- **Johnson, L. K.**  
Physical Review A: 40 , p.p. 4920, (1989).
- [28].- **Zikratov, G. and Setser, D. W.**  
Journal Chemical Physical, 104 , p.p. 2243, (1996).
- [29].- **Sant'Anna, N. M. et al.**  
Nuclear Instr. and Meth. in Physics Res. B: 99 , p.p. 46, (1996).
- [30].- **Gaydaenko, V.I. et al**  
Chem. Phys. Lett., 7 , p.p. 360, (1970).
- [31].- **Barat, M.**

**Atomic Processes in electron-ion and ion-ion collisions**

Nato ASI Series B, Physics, 145 , p.p. 285, (1986).

[32].- **Lichsten, B.**

Am. Phys. Soc., 13 , p.p. 596, (1968).

[33].- **Spiegel, M. R.**

Manual de Fórmulas y tablas matemáticas, Serie Schaum, McGraw Hill, p.p. 136, (1970).

[34].- **Johnson, R. E.**

Introduction to Atomic and Molecular Collisions, p.p. 30, Plenum Press., New York, (1982).

[35].- **Bates D. R. and Lewis, J. T.**

Proc. Phys. Soc. (London), A68 , p.p. 173, (1955).

[36].- **D. Rapp, W. E. Francis.**

Journal of Chemical Physics, 37, p. 2631, (1962).

[37].- **Lehmann, C. and G. Leibfried.**

Z. Physik, 172 , p.p. 465, (1962).

[38].- **Leibfried, G. and T. Plesser.**

Z. Physik, 187 , p.p. 411, (1965).

[39].- **Smith, F. T., Raymond, P., Marchi, P. and Debrick, K. G.**

Physical Review, 150 , p.p. 79, (1966).

[40].- **Wahlin, L.**

Nuclear Instrum. and Methods, 27 , p.p. 55, (1964).

[41].- **Martínez, H.**

**Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, (1981).**

[42].- **Ray, J. A. et al.**

**J. Appi. Phys., 42 , p.p. 3260, (1964).**

[43].- **Harrower, G. A.**

**The Review of Scientific Instruments, 46 , p.p. 850, (1975).**

[44].- **D. A. Crandall.**

**Rev. of Scientific Instruments, 46, 562, (1975).**

[45].- **Martínez, H.**

**Tesis Doctoral, Facultad de Ciencias, UNAM, (1987).**

[46].- **I. Dominguez.**

**Tesis Profesional, Facultad de Ciencias, U.N.A.M., (1988)**

[47].- **Manual MKS Baratron Electronic Pressure Meter type 114.**

[48].- **Manual Orter Timers, Modelo 719.**

[49].- **D. C. Baird.**

**Experimentación, Prentice Hall Hispanoamericana, S. A., 2<sup>DA</sup>  
Edición, México, D. F., (1981)**

[50].- **Olson, R. E. and Smith, F. T.**

**Physical Review A: 3 , p.p. 1607, (1971).**

[51].- **Olson, R. E., Smith, F. T. and Bauer, E.**

**Applied Optics, 10 , p.p. 1848, (1971).**

[52].- **McDaniel, E. W.**

**Atomic Collisions, (Wiley, New York), p.p. 652, (1989).**

## A P E N D I C E A

Como la sección transversal está dada por la ecuación:

$$\sigma_{LZ} = 2 \pi \int_0^{R_c} R(b) b db \quad (\text{A.1})$$

considerando que

$$R(b) = 2 e^{-v} (1 - e^{-v}) \quad (\text{A.2})$$

se tiene:

$$\sigma_{LZ} = 4 \pi \int_0^{R_c} e^{-v} (1 - e^{-v}) b db \quad (\text{A.3})$$

con

$$v = \frac{2 \pi \epsilon_{12}^2}{h v_r \alpha} \quad (\text{A.4})$$

y si la velocidad relativa inicial es:

$$v_r = V \sqrt{1 - \frac{\epsilon_1(R_0)}{E} - \frac{b^2}{R_c^2}}$$

(A.5)

desarrollando se tiene que:

$$v_r = V \sqrt{1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}} \sqrt{1 - \frac{b^2}{R_c^2 \left(1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}\right)}}$$

(A.6)

Sustituyendo en (A.4):

$$v = \frac{2 \pi \epsilon_{12}^2}{h \alpha V \sqrt{1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{R_c^2 \left(1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}\right)}}} = v_x$$

(A.7)

tomando

$$v = \frac{2 \pi \epsilon_{12}^2}{h V \sqrt{1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}}}$$

(A.8)

y

$$x = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{R_c^2 \left(1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}\right)}}$$

(A.9)

elevando al cuadrado la ecuación anterior,

$$x^2 \left(1 - \frac{b^2}{R_c^2 \left(1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}\right)}\right) = 1$$

(A.10)

despejando el parámetro de impacto,

$$b^2 = R_c^2 \left(1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}\right) \left(1 - \frac{1}{x^2}\right)$$

(A.11)

diferenciando esta ecuación:

$$2 b db = R_c^2 \left(1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E}\right) \left(\frac{2}{x^3} dx\right)$$

(A.12)

entonces

$$b \, db = R_c^2 \left( 1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E} \right) \frac{dx}{x^3}$$

(A.13)

sustituyendo (A.13) y (A.9) en la ecuación (A.3) se obtiene:

$$\sigma_{LZ} = 4 \pi R_c^2 \left( 1 - \frac{\epsilon_1(R_c)}{E} \right) G(v)$$

(A.14)

donde

$$G(v) = \int_1^\infty e^{-vx} \left( 1 - e^{-vx} \right) \frac{dx}{x^3}$$

(A.15)

## A P E N D I C E B

### FILTRO DE VELOCIDADES

El haz de partículas pasa a través del selector de masas con una energía:

$$E_c = \Delta V = V = \frac{1}{2}mv_o^2$$

(B.1)

$\Delta V$  es la diferencia de potencial aplicada para acelerar dicho haz, y  $m$  es la masa del haz de partículas.

El haz de partículas pasa a través del filtro con una velocidad  $v_o$  dada por:

$$v_o = \sqrt{\frac{2V}{m}}$$

(B.2)

Además, es deflektado por el campo electrostático en una dirección y por el campo magnético en otra, de acuerdo a la Fuerza de Lorentz, que conserva el movimiento de las partículas cargadas. Esta proporciona la fuerza activa que actúa sobre una carga puntual  $q$  en presencia de campos electromagnéticos.

Se identifica  $NAqv$  como la intensidad de la corriente en un conductor en el que el área de la sección transversal es  $A$ , con  $N$

portadores por unidad de volumen que se mueven con velocidad  $v_0$ .

**Fuerza Electrostática**

$$\overline{F}_E = q\overline{E}$$

(B.3)

**Fuerza Magnética**

$$\overline{F}_M = q\overline{v}_o \times \overline{B}$$

(B.4)

$$\overline{F} = q(\overline{E} - \overline{v}_o \times \overline{B}) = 0$$

(B.5)

Vemos que en (B.5) se define como la fuerza por unidad de corriente y unidad de longitud del conductor.

El ión con velocidad  $v_0$  y de masa  $m$  que se mueve a través del filtro, pasa sin deflectarse si:

$$\overline{E} - \overline{v}_o \times \overline{B} = 0$$

(B.6)

esto es si

$$\overline{E} \perp \overline{v}_o \quad \text{y} \quad \overline{B} \perp \overline{v}_o \quad \text{tenemos.}$$

(B.7)

$$|\overline{v}_o| = \frac{|\overline{E}|}{|\overline{B}|}$$

(B.8)

el campo magnético para una bobina está dado por:

$$|\overline{B}| = k |\overline{I}|$$

(B.9)

donde  $|\overline{I}|$  es la corriente de la bobina y  $k$  es una constante que incluye el número de vueltas, la constante de permeabilidad  $\mu_0$  y las características geométricas de la bobina.

$$|\overline{v}_o| = \frac{|\overline{E}|}{k|\overline{I}|}$$

(B.10)

$$|\overline{I}| = \frac{|\overline{E}|}{k|\overline{v}_o|} = \frac{|\overline{E}|}{k\sqrt{\frac{2V}{m}}}$$

(B.11)

entonces:

$$|\bar{I}| = \frac{|\bar{E}|}{k\sqrt{2V}} \sqrt{m}$$

(B.12)

pero si conocemos los parámetros  $|\bar{E}|$ ,  $k$  y  $V$ , entonces:

$$\alpha = \frac{|\bar{E}|}{k\sqrt{2V}} = \text{constante}$$

(B.13)

por lo que para un ión con corriente  $I_o$  tenemos:

$$I_o = \alpha \sqrt{m_o}$$

(B.14)

y para otro ión con  $I_1$  tenemos:

$$I_1 = \alpha \sqrt{m_1}$$

(B.15)

manteniendo fijo el campo eléctrico  $E$  y variando el campo magnético  $B$  mediante la corriente  $I$ :

$$|\bar{I}_n| = \alpha \sqrt{m_n}$$

(B.16)

Donde  $m_n$  es la masa del ión no defletrado para  $|\vec{E}|$  e  $|\vec{B}|$  dados.

Para los iones que no cumplen la condición marcada en la ecuación (B.6) se tiene lo siguiente: Las fuerzas magnéticas y eléctricas de los campos cruzados que actúan sobre el ion, se balancean una a otra en el filtro de velocidades por lo que experimentan una fuerza centrípeta equivalente a:

$$\vec{F} = m_x \vec{v}_0^2 = q[\vec{E} - \vec{v}_0 \times \vec{B}] \quad (\text{B.17})$$

pero si de (B.8) tenemos:

$$|\vec{E}| = |\vec{v}_0| |\vec{B}| \quad (\text{B.18})$$

entonces:

$$m_x \vec{v}_0^2 = q|\vec{E}| \left[1 - \sqrt{\frac{m_e}{m_x}}\right] \quad (\text{B.19})$$

Por lo que los iones de masa  $m_x$  son defletrados en una trayectoria circular con radio:

$$R = \frac{2V}{\bar{q} |\bar{E}| \left[ -\sqrt{\frac{m_o}{m_x} + 1} \right]}$$

(B.20)

y serán dispersados de la siguiente forma:

$$D = \ell \frac{\bar{q} a |\bar{E}| \left[ -\sqrt{\frac{m_o}{m_x} + 1} \right]}{2V}$$

(B.21)

a: es la longitud del filtro de velocidades

ℓ: es la distancia de la imagen al punto P.

## A P E N D I C E C

Para encontrar el intervalo de colisión simple hacemos uso de la ecuación de camino libre medio del haz:

$$\lambda = \frac{1}{(\eta \sigma)}$$

(C.1)

donde la densidad de partículas  $\eta$  se puede aproximar (a muy bajas presiones) por la Ley de los Gases Ideales:

$$P V = N k T$$

(C.2)

de aquí se tiene

$$\eta = \frac{N}{V} = \frac{P}{k T}$$

(C.3)

si

$$k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J}^\circ\text{K}$$

y la temperatura ambiente es:

$$T = 300^{\circ}K.$$

entonces

$$k T = 4.14 \times 10^{-21} \text{ J}$$

(C.4)

además se sabe que

$$1 \text{ torr} = 133.3 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$$

por lo que se obtiene:

$$\eta = \frac{133.3 \frac{\text{N}}{\text{m}^2} P_0}{4.14 \times 10^{-21} \text{ J}} = 3.22 \times 10^{22} \text{ m}^{-3} P_0$$

(tomando  $P_0$  en torr)

(C.5)

por otro lado, si

$$\sigma = \sigma_0 \text{ cm}^2 = \sigma_0 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$$

(C.6)

el camino libre medio está dado por:

$$\lambda = \frac{1}{\eta \sigma} = \frac{1}{(3.22 \times 10^{22}) (10^{-4}) \sigma_0 P_0}$$

$$\lambda = \frac{0.311 \times 10^{-18}}{\sigma_0 P_0} \text{ m}$$

(C.7)

Por ejemplo, si en la ecuación anterior (C.7) sustituimos el valor de la sección de dispersión del haz con el gas residual:

$$\sigma_0 \approx 10^{-13} \text{ [cm}^2\text{]}$$

y la presión de operación del sistema

$$P_0 \approx 10^{-7} \text{ torr}$$

obtenemos un camino libre medio de aproximadamente:

$$\lambda \approx \frac{0.311 \times 10^{-18}}{10^{-20}} \text{ m} = 31.1 \text{ m}$$

(C.8)

lo que nos garantiza que la distancia que recorre el haz es lo suficientemente grande comparado con el tamaño del acelerador (3.5 m. de largo).

Por otro lado, el camino libre medio que recorren las partículas en la celda de reacción es dado por la sección de dispersión de las partículas del gas residual:

$$\sigma_0 \approx 10^{-13}$$

y la presión en la celda es:

$$P_0 \approx 10^{-4} \text{ torr}$$

entonces

$$\lambda_{\text{celda}} \approx \frac{0.311 \times 10^{-18}}{10^{-17}} \approx 0.0311 \text{ m} \approx 3.11 \text{ cm.}$$

como la longitud de la celda de reacción es:

$$L = 2.54 \text{ cm.}$$

entonces

$$L < \lambda_{\text{celda}}$$

(C.10)

**lo que nos garantiza el régimen de colisión simple, esto es, cada partícula del haz incidente chocará con una y solo una partícula del gas del blanco.**

## G L O S A R I O

**ACELERADOR DE PARTICULAS:** Es un instrumento que cambia la velocidad de una partícula cargada, ya sea un ion ó un electrón.

**AFINIDAD ELECTRONICA:** Es la característica presentada por los elementos que tienen una especial inclinación por capturar un electrón.

**CAPTURA SIMPLE:** Es un proceso colisional de transferencia de carga, el electrón pasa de una partícula del blanco al proyectil.

**CAPTURA DOBLE:** De manera idéntica, es cuando dos electrones son transferidos de una partícula del blanco al proyectil.

**CONFIGURACION NUCLEAR:** Es la forma o manera en que se puede caracterizar a un átomo dependiendo del ordenamiento por energías de las subcapas ocupadas por electrones.

**DESCARGA EN ARCO:** Es la ionización que se logra con el bombardeo del gas por electrones emitidos de un filamento caliente, siendo acelerados por medio de una diferencia de potencial que se aplica entre el filamento y el ánodo de una fuente de iones.

**ELECTRON-VOLT:** Es una unidad de energía, que se define como la energía que adquiere una partícula con la carga de un electrón al moverse entre dos puntos cuya diferencia de potencial es de 1 voltio.

**ENERGIA TERMOIONICA:** Es la energía que tienen los electrones que escapan de un metal.

**ENERGIA DE IONIZACION:** Es la energía necesaria para alimentar a un átomo y así poder enviar a uno de los electrones del estado base a un estado de energía total igual a cero. Puesto que un electrón con energía total igual a cero ya no permanece ligado al átomo, esta energía es la que ioniza al átomo y de ahí su nombre.

**ESTADO CUASIMOLECULAR:** Es el estado originado cuando el ión y el blanco están presuntamente más cercanos, esto es, cuando son considerados como una cuasi-molécula, y se definen como estados cuasimoleculares debido al poco tiempo con el que se lleva a cabo, sin ser considerados como un estado cuasimolecular.

**FUSION TERMOLECULAR:** Cuando dos ó más núcleos con número atómico muy pequeño, se combinan para formar un núcleo más grande, que tendrá una energía de enlace promedio por nucleón mayor.

**IONIZACION:** Consiste en arrancar a uno o más electrones de las capas de un átomo ó molécula de que está constituido el gas considerado; puede ser efectuado por medio del bombardeo de electrones, de otros iones, de átomos neutros o de radiación (fotones).

**MASER:** Es acrónimo de la frase inglesa: Microwawe Amplification by Stimulated Emission of Radiation ( Amplificación de luz por radiación estimulada). En el sistema correspondiente que opera en la región de microondas del espectro electromagnético.

**PLASMA:** Gas completamente ionizado, que por contener en la misma proporción a partículas cargadas positiva y negativamente, es

**eléctricamente neutro, teniendo una densidad de  $10^{13}$  a  $10^{18}$  partículas por  $\text{cm}^3$ . Este elemento por tener a todos sus electrones libres del núcleo, se comporta como un gas conductor y que por su elevada temperatura tiene que ser confinado**



## Single electron capture in low-energy $\text{Kr}^+$ –He collisions

H. Martínez, J.M. Hernandez

*Instituto de Física, Laboratorio de Cuernavaca, UNAM, Apartado Postal 48-3, 62191 Cuernavaca, Morelos, México*

Received 8 July 1996

### Abstract

Absolute differential and total cross sections for electron capture have been measured for  $\text{Kr}^+$  incident on He at impact energies between 1.0 to 5.0 keV and over the laboratory angular range  $-3^\circ$  to  $3^\circ$ . The reduced differential cross sections present a maximum at a value of  $\tau = 1.3$  keV deg independent of energy. The behaviour of the measured cross sections is compared with a semi-empirical model for near-resonant charge transfer.

### 1. Introduction

Several studies of low-energy collisions of singly charged krypton ions with atomic and molecular targets have been performed to investigate the potentials of the quasi-molecular system formed in these collisions and to examine the curve-crossing mechanism which plays such an important role in the inelastic processes [1–3]. The charge changing cross sections involving He and H as target are of particular interest because they form dominant constituents of most laboratory and astrophysical plasmas. Also, there has been a continuous interest in energy-transfer reactions between rare-gas metastable atoms and rare-gas ions because of their application to the pumping of rare-gas ion lasers [4–6]. Experimentally, rare-gas atoms are one of the easiest atomic targets to obtain. Since it is also easy to obtain beams of rare-gas ions, it is natural to study electron transfer from rare-gas atoms to these ions. In addition, these processes often involve crossing of potential energy surfaces and thus give the opportunity to describe them using models such as the Olson model [7]. Although the charge-transfer cross sections obtained with this model are not very accurate, they

can be used for a preliminary understanding of the trend of the total cross sections. We report absolute measurements of the differential and total cross sections for single electron capture in  $\text{Kr}^+$  collisions with He atoms. We also present the results of a calculation based on the Olson [7] theoretical analyses for single electron capture. The energy range covered in the present study goes from 1.0 to 5.0 keV.

### 2. Experimental approach

Since the experimental apparatus and technique for measuring single electron capture cross sections are the same as those used in a previously published work, and the details of the apparatus and the procedures have been described there [8,9], only a brief description is given here. A schematic diagram of the apparatus is shown in Fig. 1. The apparatus consists basically of three parts: ion source, scattering chamber and detection system. The  $\text{Kr}^+$  ions formed in a Colutron ion source were accelerated to the desired energy, velocity selected by a Wien filter, and de-

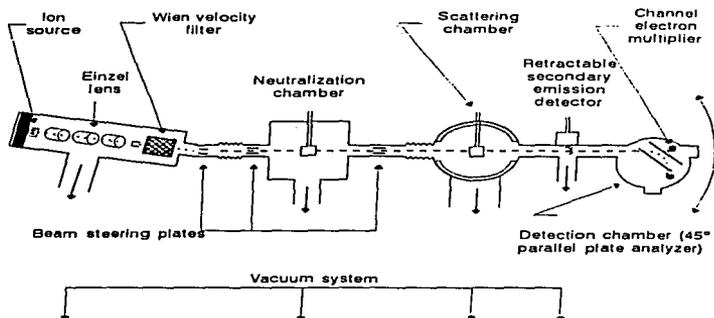


Fig. 1. A schematic diagram of the apparatus.

flected  $10^\circ$  by an electric field. The collimated  $\text{Kr}^+$  beam entered the gas target cell, which was a cylinder of 2.5 cm in length and diameter, with a 1 mm entrance aperture, and a 2 mm wide, 6 mm long exit aperture. All apertures and slits had knife edges. The target cell was located at the center of a rotatable, computer controlled vacuum chamber that moved the whole detector assembly which was located 47 cm away from the target cell. The detector assembly consisted of a Harrower-type parallel plate analyzer, with a channel electron multiplier (CEM) attached to its exit end, and with the beam entering the uniform electric field at an angle of  $45^\circ$ . To measure the angular distributions, a 0.36 mm diameter pinhole was located at the entrance of the analyzer and a 1 cm orifice was placed in front of the CEM. Path lengths and apertures gave an overall angular resolution of the system of  $0.1^\circ$ . The target thickness was  $\approx 10^{13}$  atoms/cm $^2$  in order to ensure a single collision regime. Absolute gas pressures in the cell were measured by a capacitance manometer. The absolute differential cross sections were calculated from the relation:

$$d\sigma_{10}/d\Omega = I(\theta)/\pi\Delta\Omega I_0, \quad (1)$$

where  $I_0$  is the number of  $\text{Kr}^+$  ions incident per second on the target,  $I(\theta)$  is the number of  $\text{Kr}^0$

counts at laboratory angle  $\theta$ ,  $\pi$  (atoms/cm $^2$ ) is the target thickness, and  $\Delta\Omega$  is the solid angle subtended by the detector system. Absolute total cross sections were derived by integrating the differential cross sections over the solid angle  $d\Omega$ :

$$\sigma_{10} = 2\pi \int_0^\pi (d\sigma_{10}/d\Omega) \sin(\theta) d\theta. \quad (2)$$

The  $\text{Kr}^+$  beam intensity was measured before and after each angular scan. Measurements not agreeing to within 5% were discarded. Angular distributions were measured on both sides of the forward direction to ensure they were symmetric. The estimated rms error is 15%, while the cross sections were reproducible to within 10% from day to day.

### 3. Results and discussion

Differential cross sections for single electron capture are shown in Fig. 2. All curves plotted in Fig. 2 show a monotonic decrease of the differential cross section with increasing angle. These distributions show some structures. In order to analyze these experimental results, some of the experimental data of Fig. 2 are plotted in Fig. 3 in terms of the reduced scattering angle  $\tau$  ( $E\theta$ ) and the reduced differential

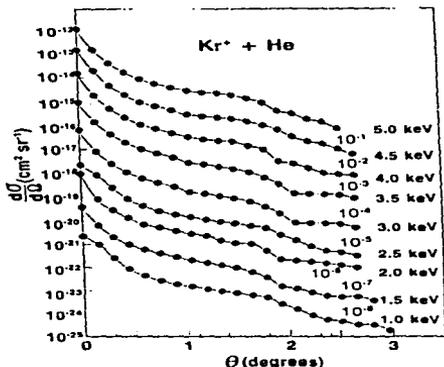


Fig. 2. Measured absolute differential cross sections for single electron capture.

cross sections  $\rho(\theta \sin\theta) d\sigma/d\Omega$ . Three features of the reduced cross section curves are worth remarking. First, the energy and angular resolutions at  $E = 1.0$  keV are sufficient to identify a distinct structure at  $\tau > 0.5$  keV deg. Second, the curves at high energy show a tendency to fall into a single pattern in accordance with the expectations arisen by the scaling law [10], and a maximum independent of energy at  $\tau \approx 1.3$  keV deg. Third, the curves show an oscillatory behaviour, which is strongly dependent upon energy. The features that occur at the same value of  $\tau$  for different energies indicate that they originate at a common region of the interaction potential, since constant  $\tau$  implies nearly constant impact parameter and distance of closest approach [10]. In this particular case, the impact parameters  $b$  were evaluated using an exponentially shielded Coulomb potential [10]. In the present case the experimental results show two features, one of them around  $\tau = 0.25$  keV deg (corresponding to impact parameter  $b = 1.79 a_0$ ) at 1.0 keV, and the other at  $\tau \approx 1.3$  keV deg ( $b = 1.36 a_0$ ) at high energies. The impact parameter estimated through the exponen-

tially shielded Coulomb potential is probably not accurate, but it is sufficiently accurate for the present purpose. It thus appeared desirable that a detailed theoretical analysis be carried out to confirm this critical transition region around  $R_c = 1.36 a_0$ .

The measured differential cross sections have been integrated over the observed angular range and are shown in Fig. 4. The error bars are a measure of the reproducibility of the data. In order to obtain a preliminary understanding of the trend of the total cross sections, the Olson model [7] represents perhaps the simplest means of describing nonadiabatic transitions at the crossing of potential energy surfaces. Although its limitations are well known, the model is still used for a rough estimate of cross sections associated with various collision processes [8,9]. The calculation using the Olson model charge-transfer cross section was carried out in the following steps:

- (1) The crossing distance  $R_c = 1.36 a_0$  was taken from the experimental reduced differential cross section at high energies.

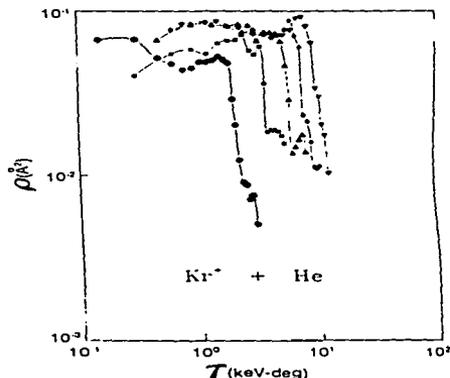


Fig. 3. Reduced differential cross sections,  $\rho = \theta \sin\theta d\sigma/d\Omega$  as a function of  $\tau = E\theta$ . (○) 1.0 keV; (●) 2.0 keV; (▲) 3.0 keV; (◊) 4.0 keV; (▽) 5.0 keV.

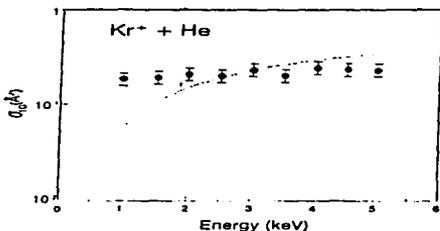


Fig. 4. Total single electron capture cross sections for  $\text{Kr}^+ - \text{He}$  collisions.  $\bullet$ , present results; —, semi-empirical calculation of Olson [7].

(2) The coupling matrix element  $H_{12}$  was calculated through the expression:  $H_{12}(R_c) = R^* \exp(0.86R^*)$ , where  $R^* = \frac{1}{2}(\alpha + \gamma)R_c$ . We used  $\frac{1}{2}\alpha^2 = 24,586$  eV as the effective ionization potential of the target and  $\frac{1}{2}\gamma^2 = 13,999$  eV as the  $\text{Kr}^+$  ground state electron affinity [11].

(3)  $\Delta V' = 8.29 \text{ au}/a_0$ , which was fitted until the same value of the experimental cross section at 3.0 keV was obtained.

(4) Once  $R_c$ ,  $H_{12}$  and  $\Delta V'$  are known, the cross section  $\sigma_{10}$  can easily be calculated from the universal reduced cross section of Olson [7] for different values of the ion velocity  $v$  (incident energy,  $E$ ).

The results of this calculation are shown in Fig. 4. Here it can be seen that the calculation and the present measurements differ significantly in the shape of the cross section in the energy range of the present study. This discrepancy might be due to various simplifications in the theoretical treatment. For instance, only the ground states of the atom and ion participate in the collision, while the cross sections experimentally obtained are not for an individual energy state but are averaged with respect to the population distribution of the energy states involved in the projectile ion beam and atom. The flat cross section over a wide energy range may be due to the large number of states into which  $\text{Kr}^0$  can be produced with a small energy defect. Each final atom state will have an associated production cross section that has a maximum at an energy which depends on

the energy defect. Since the energy defects for the production of the various final atomic states vary from state to state, we speculate that the maxima in the cross sections for the production of the various final states are spread out over a range of energies. Superposition of these individual production cross section might very well yield a total charge-exchange cross section  $\sigma_{10}$  whose energy dependence is rather flat. From this experiment, it was not possible to determine the outgoing channels. However, some of these channels such as excitations of the Kr atom were observed in Ref. [12], for the inverse system  $\text{He}^+ + \text{Kr}$ , and some others as, for instance, the nearly resonant charge exchange  $\text{He}^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{He} + (\text{Kr}^*)^+$ .

#### 4. Conclusions

We have presented measurements of absolute differential cross sections for single electron capture of  $\text{Kr}^+$  in He at impact energies between 1.0 and 5.0 keV and over the laboratory angular range  $-3^\circ$  to  $3^\circ$ . The reduced differential cross sections present a maximum at a value of  $\tau = 1.3$  keV deg independent of the energy at high energies, which suggests it was caused by a curve crossing at  $R_c = 1.36 a_0$ . It thus appeared desirable that a detailed theoretical analysis be carried out to confirm this critical transition region around  $R_c = 1.36 a_0$ .

The behaviour of the measured cross sections is compared with a semi-empirical model for near-resonant charge transfer that does not represent the experimental data very well. The present data suggest that the nearly resonant charge transfer  $\text{Kr}^+ + \text{He} \rightarrow \text{Kr} + (\text{He}^*)^+$  could play an important role, although they are not directly determined in the present experiment.

#### Acknowledgement

We are grateful to B.E. Fuentes for helpful suggestions and comments. The authors wish to thank Fis. P.G. Reyes for his technical assistance.

## References

- [1] M. Barat, J. Baudon, M. Abignoli and J.C. Houver, *J. Phys. B* 3 (1970) 230.
- [2] G. Gerber, A. Niehaus and B. Steffan, *J. Phys. B* 6 (1973) 1836.
- [3] V. Sidis, M. Barat and D. Dhucq, *J. Phys. B* 8 (1975) 474.
- [4] R. Solanki, E.L. Latush, D.C. Gerstenberger, W.M. Fairbank Jr. and G.J. Collins, *Appl. Phys. Lett.* 35 (1979) 317.
- [5] M. Tsuji, N. Kaneko, M. Furusawa, T. Muraoka and Y. Nishimura, *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 8565.
- [6] M. Tsuji, N. Kaneko and Y. Nishimura, *J. Chem. Phys.* 99 (1993) 4539.
- [7] R.E. Olson, *Phys. Rev. A* 2 (1970) 121.
- [8] H. Martínez, B.E. Fuentes, I. Alvarez, C. Cisneros and J. de Urquijo, *Chem. Phys.* 190 (1995) 139.
- [9] H. Martínez, I. Alvarez, C. Cisneros and J. de Urquijo, *Nucl. Instr. Methods B* 82 (1993) 389.
- [10] F.T. Smith, R.P. Marchi and K.G. Dudrick, *Phys. Rev.* 150 (1966) 79; F.T. Smith, R.P. Marchi, W. Aberth and D.C. Lorents, *Phys. Rev.* 161 (1967) 131.
- [11] E.W. McDaniel, *Atomic collisions* (Wiley, New York, 1989) p. 652.
- [12] J. Baudon, M. Barat and M. Abignoli, *J. Phys. B* 3 (1970) 207.