

00362

FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE M. en C. (FÍSICA)

"ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE ÁTOMOS DE KRIPTÓN A PARTIR
DE LA COLISIÓN DE Kr^+ EN Xe^0 "

ERIC RAÚL MARQUINA CRUZ

MARZO, 1998.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO I.- ANTECEDENTES.

I.1.- IMPORTANCIA DE LA INVESTIGACIÓN. LA APLICABILIDAD DE LA FÍSICA DE COLISIONES ATÓMICAS.

I.2.- REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA DEL SISTEMA Kr^+-Xe .

I.3.- MODELOS TEÓRICOS PARA PROCESOS DE CAPTURA ELECTRÓNICA DE CARGA.

I.3.1.- CRITERIO ADIABÁTICO DE MASSEY.

I.3.2.- MODELO DE RAPP Y FRANCIS PARA PROCESOS DE INTERCAMBIO DE CARGA ENTRE IONES Y ATOMOS.

- PROCESOS RESONANTES SIMÉTRICOS.

- PROCESOS NO-RESONANTES ASIMÉTRICOS.

CAPÍTULO II.- EXPERIMENTO.

II.1.- DESCRIPCIÓN DEL APARATO.

II.1.1.- SISTEMAS DE BOMBEO.

- BOMBAS MECÁNICAS

- BOMBAS DIFUSORAS

- BOMBAS TURBOMOLECULARES

II.1.2.- FUENTE DE IONES

- OPERACIÓN DE LA FUENTE

II.1.3.- ACELERACIÓN, ENFOQUE Y SELECCIÓN DE IONES.

- LENTES EINZEL

- FILTRO DE VELOCIDADES

II.1.4.- CELDA DE REACCIÓN.

II.1.5.- SISTEMA DE DETECCIÓN.

- CAJA DE FARADAY

- ANALIZADOR PARABÓLICO

- MULTIPLICADOR DE ELECTRONES

II.2.- DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO.

II.2.1.- CONCEPTO DE SECCIÓN TRANSVERSAL. SECCIONES TRANSVERSALES DE CAPTURA ELECTRÓNICA DIFERENCIALES EN ÁNGULO SÓLIDO Y TOTALES.

II.2.2.- CANTIDADES DIRECTAMENTE MEDIBLES. DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO.

II.2.3.- CÁLCULO DE SECCIONES TRANSVERSALES DIFERENCIALES EN ÁNGULO SÓLIDO Y TOTALES. ERRORES EXPERIMENTALES.

CAPÍTULO III.- DISCUSIÓN Y RESULTADOS.

CAPÍTULO IV.- CONCLUSIONES.

REFERENCIAS.

INTRODUCCIÓN.

El proceso de captura electrónica originado en la colisión de iones positivos con diversos blancos ha sido uno de los objetos de estudio más importantes desde la década de los 30's. Desde un punto de vista teórico, la captura electrónica se puede ver como un problema acoplado de tres cuerpos: al menos dos núcleos y un electrón activo ligado a ellos. El interés práctico de la captura electrónica debe su origen a una variedad de campos de la ciencia y tecnología aplicadas, en Aeronomía y en Astrofísica [1]. Por ejemplo, el proceso de captura electrónica juega un papel importante en el equilibrio de diversas especies iónicas y atómicas. Más recientemente se ha retomado un interés en la física de la fusión termonuclear [2], en donde se ha demostrado que la captura por impurezas de iones múltiplemente cargados juega un papel muy importante en dispositivos de Tokamak. Por todas estas razones, existen gran número de experimentos y revisiones, incluyendo lecturas en congresos, y un buen número de mediciones experimentales realizadas por diversos laboratorios que se han llevado a cabo recientemente.

En los últimos años las investigaciones realizadas en el Laboratorio de Colisiones Atómicas y Moléculares del Laboratorio de Cuernavaca del Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) han estado dirigidas al entendimiento de los mecanismos de captura electrónica simple y doble de colisiones de iones atómicos (H^+ , He^+ , D^+ , etc.) con especies atómicas neutras

(H₂, He, Ar, Kr, Xe, Ne, etc.) [3,11], y moléculas (SF₆, N₂, etc.) [4]. El propósito principal de este estudio a ha sido medir secciones transversales diferenciales y totales que son de interés en la física de plasmas [5], física atmosférica [6], y otros campos de investigación de la ciencia y la tecnología aplicadas [7]. Puesto que la transferencia electrónica entre iones y especies neutras se ha estudiado por muchos años, se han desarrollado teorías simples que explican el fenómeno; estos tratamientos de aproximación se aplican, en principio a colisiones entre iones atómicos y átomos neutros. Sin embargo, trabajos recientes indican que aún si las partículas que colisionan son átomos, los modelos disponibles no siempre describen adecuadamente el proceso a bajas energías [8], por lo que hasta que las colisiones entre partículas atómicas sean comprendidas, es probable que la teoría de transferencia de carga se aplique a colisiones que involucren más de dos núcleos. Así, la transferencia electrónica entre iones atómicos y átomos neutros puede ser el inicio de estudios más completos para la comprensión de procesos más complejos.

Experimentalmente, los átomos de gases son los blancos más fáciles de obtener. Puesto que además también son fáciles de obtener haces de iones de gases raros sin excitarlos, lo natural es estudiar la transferencia electrónica originada por su interacción. Un motivo adicional para el estudio de la reacción se origina en su importancia en dispositivos láser de bombeo de iones de gases raros [9,16,17,18].

El propósito del trabajo es presentar datos de secciones

transversales diferenciales y totales para la formación de átomos de Kr^0 , en la colisión de Kr^+ con Xe. Como ya se mencionó, el proceso de captura electrónica simple del ion Kr^+ en colisión con Xe es de gran importancia en los campos de la astrofísica [1], fusión termonuclear y física de plasmas [15]. Aunque recientemente ha habido un continuo interés en esta reacción de transferencia de energía entre Kr^+ y Xe debido a su aplicación a la comprensión del mecanismo de bombeo en láseres de iones de gases raros [16,17,18], se han llevado a cabo muy pocos experimentos referentes a la medición de secciones transversales de captura electrónica simple del Kr^+ . Esto ha motivado el presente trabajo. Otra motivación es el hecho de que no hay un conjunto de mediciones arriba de 1.0 KeV. Las secciones transversales diferenciales en ángulo y totales que se reportan se comparan con los pocos datos experimentales disponibles en la literatura. Se presentan los resultados de un cálculo basado en el análisis teórico realizado por R. Olson para captura electrónica simple [10]. El intervalo de energía del presente estudio es de 1.0 a 5.0 KeV. La colisión se lleva a cabo en la región de bajas energías [11], por lo que se considera apropiada una imagen cuasi-molecular de la colisión, así como la región en donde los niveles moléculares de cruzamiento asociados con la evolución de los estados de potencial del sistema en colisión juegan una parte crítica en la dinámica de la colisión.

El trabajo se encuentra distribuido de la siguiente manera:

En el capítulo I se presentan los antecedentes del sistema Kr^+ en Xe, así como la importancia de la investigación del sistema en

un esquema más general de la aplicabilidad de la física atómica en distintas áreas de la ciencia y la tecnología. Se presenta además, una revisión de trabajos de investigación previos del sistema Kr^+-Xe , así como aspectos teóricos del proceso de transferencia de carga, considerando el criterio adiabático de Massey [12], la transferencia de carga resonante y cuasi-resonante simétrica y la asimétrica no-resonante basados en un modelo de dos estados para energías intermedias [13].

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 simple, así como la manera en que se efectuó el experimento, resaltando la teoría de medida en base a las cantidades directamente medibles en el laboratorio.

En el capítulo III se presentan los resultados obtenidos experimentalmente, así como los que se obtienen al ser aplicado el modelo teórico descrito en el capítulo I, presentando además una comparación gráfica del proceso con tal modelo y con mediciones experimentales previas. Se discute el sistema de variables reducidas para la obtención de información experimental del proceso [14]. Finalmente en el capítulo IV se presentan las conclusiones y aportaciones del trabajo. Las referencias para cada capítulo se presentan por separado.

I.- ANTECEDENTES.

I.1.- IMPORTANCIA DE LA INVESTIGACIÓN. LA APLICABILIDAD DE LA FÍSICA DE LAS COLISIONES ATÓMICAS.

El reciente avance en el conocimiento de la física de colisiones atómicas ha permitido el desarrollo de los campos de la ciencia y la tecnología aplicada. En física nuclear, por ejemplo, existe la necesidad de información sobre el poder de frenado, así como el conocimiento a detalle que guardan los estados energéticos de los iones que penetran a blancos sólidos y gaseosos [1]. En la física de materia condensada [2], la aplicación es muy variada ya que, por ejemplo, incluye la caracterización de superficies y la modificación de materiales. El intervalo de energías de estudio de la física atómica es muy amplio. Este intervalo es una característica esencial de la física de las colisiones atómicas y de hecho, excede a cualquier otro encontrado en cualquier área o campo de la ciencia aplicada. En la figura I.1 se muestra la relación de la física de las colisiones atómicas con algunas ramas de la ciencia y la tecnología aplicada en función de la energía; este intervalo cubre 16 órdenes de magnitud.

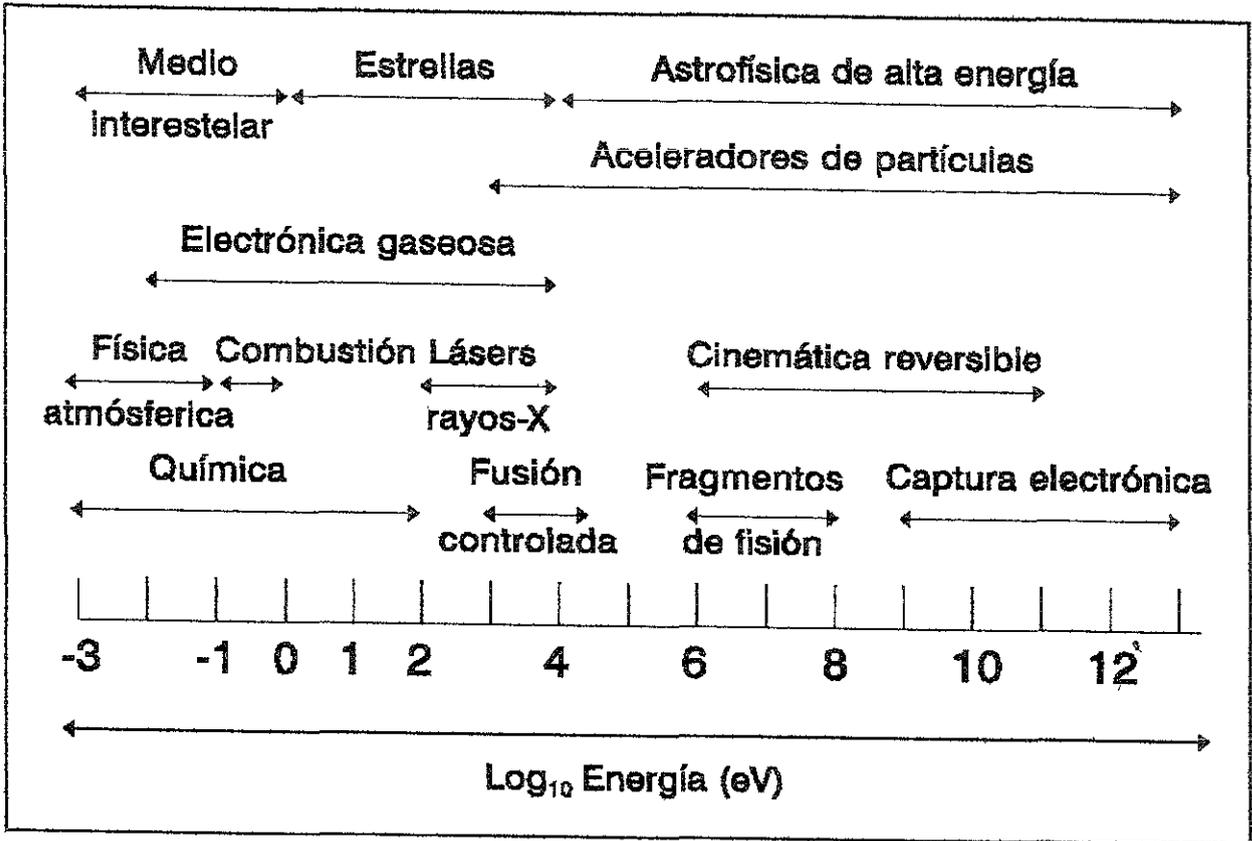


Figura I.1 Algunas de las ramas de la ciencia y la tecnología que requieren de la física de las colisiones atómicas en función del intervalo de energía relevante.

Como se observa, el intervalo de energía involucrado en colisiones atómicas en astrofísica [3], cubre totalmente la extensión mostrada en la figura I.1. Los procesos de colisiones atómicas que controlan la composición de la alta y baja atmósfera [4], se encuentran en un intervalo muy corto de energía. Respecto a los fragmentos de fisión y poder de frenado [1], la comprensión de la interacción de iones muy energéticos y los materiales es muy compleja, sobre todo aquellos en los cuales los fragmentos de fisión retroceden, así como cuando se tiene el caso de partículas pesadas. Estudios recientes por Schmidt-Böcking y colaboradores [5]

sobre los detalles de la inelásticidad y producción de iones secundarios en tales colisiones, apuntan a ser entendidos también sobre una base atómica.

La aplicación de la física de las colisiones atómicas a la tecnología de los aceleradores [6], actualmente comienza con las fuentes de iones, muchas de las cuales están propiamente en el dominio de la electrónica gaseosa.

La producción de iones negativos es importante para los aceleradores Van de Graaff [7], como lo es la producción de iones multicargados para los aceleradores de partículas pesadas. En este contexto, un buen número de esas fuentes de iones multiplementecargados, tales como las fuentes de iones por resonancia ciclotrónica (ECR), las fuentes de iones por haces electrónicos (EBIS) y los nuevamente desarrollados haces de iones por trampa de iones (EBIT) son construidos por sí mismos para su aplicación a la física de las colisiones atómicas. El conocimiento de los procesos de captura electrónica, pérdida y equilibrio de estados de carga es importante para la designación de parámetros de esos sistemas [8], especialmente en los sincrotrones, en donde los iones viajan grandes distancias en las cuales, durante la fase de aceleración, las partículas pueden perder electrones a causa de la ionización o captura de carga con el gas residual. De ahí que también los requisitos de vacío y los costos asociados sean determinantes en el conocimiento de las secciones transversales de transferencia de carga.

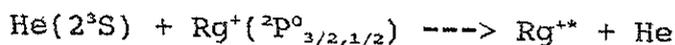
A energías intermedias del intervalo mostrado en la figura I.1

se encuentra la región de plasmas ionizados y por lo tanto de la electrónica gaseosa. Esta es una área de enorme y amplia utilidad que va desde los casos más mundanos como las lámparas de descarga de gases de las avenidas de la ciudad, hasta los más actuales y novedosos láseres. Como es el caso con un laser de gas normal, los fotones se originan de la estimulación de transiciones de los electrones de la capa más externa para generar la inversión de población [9]. Puesto que los niveles de energía de especies altamente ionizadas están muy separados, los fotones producidos están en la región de rayos X y la inversión de población requiere de un bombeo; además de que a causa de los cortos tiempos de vida radiativos involucrados, éstos crean problemas especiales. En general, el esquema de los láseres de rayos X utiliza procesos de colisión atómica para generar la inversión de población. Los dos esquemas de inversión utilizados actualmente usan la recombinación para invertir estados electrónicos en un plasma frío y el bombeo colisional de electrones libres.

Recientemente ha surgido un continuo interés en las reacciones de transferencia de carga entre iones de gases raros y átomos de gases raros metaestables debido a su aplicación en láseres por bombeo de iones de gases raros [10,11]. Para un láser de iones se requiere de más energía de entrada que para un láser de gases de átomos neutros, tal y como en el láser de He-Ne. Comúnmente se utilizan iones de gases raros tales como Ne^+ , Ar^+ , Kr^+ y Xe^+ [12]. De éstos, los más utilizados son los láseres de Kr^+ y Xe^+ por tener el menor potencial de ionización ($\text{Ar} \rightarrow 15.76$ y $\text{Kr} \rightarrow 14.00$ eV), así

se debe suministrar energía extra para ionizar al átomo hasta los dos niveles de energía involucrados en la acción láser. En el Ar^+ se estima que se requieren dos colisiones para la combinación de los procesos de ionización y excitación. A causa de la mucha potencia que se suministra existe un problema serio de disipación de calor. Éste es resuelto usando un tubo de plasma de BeO , que es un eficiente conductor de calor, además de un enfriador de H_2O . Los primeros láseres fueron pulsados con una frecuencia mayor a 2 KHz para la periodicidad de descargas eléctricas en el gas a una presión de unos cuantos mTorr. Actualmente la mayoría de los láseres son excitados a voltajes bajos y a corrientes altas de descarga. A corrientes altas I , la potencia de salida es proporcional a I^2 con una presión de gas en el tubo de plasma de 0.5 Torr, obteniendo una potencia de salida de hasta 40 W. La espectroscopía por láseres de iones es generalmente menos comprendida que la de los láseres de átomos neutros, debido a la falta de un conocimiento detallado de los esquemas de niveles de energía del ion. De hecho, dentro de un contexto histórico, éstos se produjeron accidentalmente, aunque no se ha dado una interpretación completa de las diferentes transiciones. La configuración del estado base del Ar^+ es $\text{KL3s}^2\text{3p}^5$, originando un multiplete $^2\text{P}_{3/2}$, $^2\text{P}_{1/2}$. Los estados excitados involucrados en el láser se originan de la excitación de un electrón del orbital 3p a los orbitales excitados 4s, 5s, 4p, 5p, 3d y 4d. Análogamente, los estados excitados del Kr^+ se originan de la excitación de un electrón del orbital 4p. En el Ar^+ , el estado $\text{KL3s}^2\text{3p}^4$ da origen a

los estados 1S , 3P , 1D . Otras transiciones involucran al núcleo en el estado 3P y a el electrón en el orbital $4p$, [13]. El láser de Ar^+ puede producir aproximadamente 10 líneas en la región 454-529 nm, siendo las más intensas las de 488 y 514.5 nm [12]. El láser de Kr^+ produce aproximadamente nueve líneas en la región de 476-800 nm, siendo la de 647.1 nm la más intensa [12]. Puesto que los láseres más representativos de bombeo de iones son de Ar^+ y Kr^+ , y la aplicabilidad que pueden tener en la ciencia y en la tecnología aplicada es inmensa [9], cabe resaltar la importancia del estudio del sistema Kr^+-Xe , el cual puede contribuir al entendimiento de las reacciones de transferencia de energía entre átomos de gases raros y iones de gases raros. Desde las primeras observaciones de oscilaciones en las descargas eléctricas en el sistema He-Ar o mezclas de Ar y Kr, se han llevado a cabo una gran cantidad de experimentos de descarga para clarificar el mecanismo de bombeo. Se cree que la transferencia y excitación cuasi-resonante del $He(2^3S)$ a los iones de gases raros en el estado base es el principal mecanismo para la inversión de población debido a la alta selectividad de este tipo de colisiones.



(Rg= Ar o Kr)

Sin embargo, debido a la posibilidad de otros procesos de colisión, tales como $He^+ + Rg(^3P^{\circ}_{2,0})$, y a que diversas especies activas están involucradas en la descarga eléctrica, el proceso de transferencia

de carga no se ha podido excluir totalmente del mecanismo de bombeo [14]. Recientemente se ha aplicado el método de tubo de descarga (flowing-afterglow) para estudiar el mecanismo de bombeo de los láseres de iones de gases raros [15]. Masaharu Tsuji et al. [10] han reportado el mecanismo de excitación del Ar^{++} y del Kr^{++} , además de Bochkova et. al. para este último [11,16]. Al reportar datos experimentales de secciones transversales de transferencia de carga, queda de manifiesto que además de la aportación de la física atómica y molecular, se requiere de un estudio espectroscópico óptico más completo respecto al efecto espín-órbita de los reactivos para la comprensión de las reacciones de transferencia y excitación de iones átomos metaestables de gases raros.

I.2.- REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA DEL SISTEMA Kr^+-Xe .

Los estudios de captura electrónica simple en los que ha utilizado el ion Kr^+ son vastos. Hay un buen número de reportes en la literatura respecto a sistemas de colisión Kr^+ -átomos neutros de gases raros [17], pero el sistema Kr^+-Xe ha sido estudiado muy poco tanto experimental como teóricamente. En esta sección se presenta de manera resumida la información al respecto.

William B. Maier II de los Alamos Scientific Laboratory de la Universidad de California, en Los Alamos, Nuevo México, USA [18] ha sido el único en reportar mediciones experimentales de secciones transversales por transferencia electrónica de Kr^+ a átomos de gases raros, entre ellos el Xe. Maier II midió secciones transversales de captura electrónica simple a energías menores de los 350 eV; sus datos se presentan en la tabla I a los cuales se sustrajo un valor de 0.0301 Å debido a una corrección de fondo. Maier II concluyó que el umbral de energía aparente para la transferencia electrónica entre los iones y átomos de gases raros depende sistemáticamente de la identidad del proyectil y del blanco. Hace notar que esta dependencia se puede explicar en términos del cruzamiento de curvas si se dispusiera de las curvas de potencial exactas. No hay otros reportes de mediciones experimentales del sistema y este hecho motivó el estudio del sistema Kr^+-Xe .

E(eV)	$\sigma(\text{Å})$
11.31	0.00963
11.31	0.01398
11.50	0.02196
11.69	0.04378
11.87	0.07601
12.06	0.1270
12.25	0.1857
12.25	0.1814
12.75	0.3610
13.25	0.5027
14.25	0.7164
15.25	0.8315
16.25	0.9482
17.25	1.018
18.25	1.068
19.25	1.092
20.25	1.086
21.25	1.070
22.25	1.134
22.98	1.162
23.98	1.127
24.98	1.111
25.98	1.091
26.98	1.066
28.98	1.023
31.98	0.7946
36.98	0.5634
41.98	0.4586
45.70	0.4817
51.98	0.3270
55.70	0.3653
61.98	0.2696
65.70	0.2830
71.98	0.2136

Tabla I.1.- Secciones transversales experimentales obtenidas por W. B. Maier II [18].

En cuanto a las teorías, hasta ahora no se han publicado potenciales del sistema Kr^+ en Xe, aunque hay un estudio teórico-experimental realizado por Ali A. Antar y Quentin C. Kessel del Instituto de Ciencia de Materiales de la Universidad de Connecticut en Storrs, USA, [19]. Ellos midieron los estados de carga final del ion dispersado y la pérdida de energía inelástica para la colisión simple del sistema Kr^+ -Xe a energías de incidencia del ion de 0.25 a 3.00 MeV. Los estados de carga del ion dispersado se midieron en función del ángulo de dispersión (de 0.8° a 45°) y de la energía del ion incidente. La pérdida de energía total se midió usando una técnica de coincidencia dispersión-retroceso de una partícula, para energías de 0.4 a 1.4 MeV. Sus resultados muestran que la dependencia de las excitaciones en las capas internas, respecto, al parámetro de impacto, confirman la naturaleza cuasi-molecular de la colisión Kr^+ -Xe dentro del sistema del marco de referencia del modelo de Fano-Lichten, [20]. Su análisis, dentro del mismo modelo, confirma la validez de la descripción de excitaciones de las capas internas en las colisiones iones pesados-átomos neutros a energías de MeV. Observan excitaciones para distancias de acercamiento (R_0) de 0.28, 0.18 y 0.09 Å. Los datos muestran una concordancia con los cálculos de potenciales moleculares de Eichler y colaboradores, [21].

El estudio teórico-experimental de Ali A. Antar et. al., [19] proporciona información sobre el número de excitaciones en las capas internas a través de las observaciones de los estados de ionización de los proyectiles dispersados y la pérdida de energía

asociada; estas capas son M y L para el kriptón y M para el Xe en el sistema Kr^+-Xe . Sin embargo, no proporcionan potenciales teóricos del sistema, ni se trata de experimentos de transferencia de carga, por lo que la información disponible de interés respecto al sistema Kr^+-Xe se reduce aún más de la que se dispone. Parece deseable llevar a cabo un análisis teórico detallado para confirmar y aprender más de su comportamiento.

I.3.- MODELOS TEÓRICOS PARA PROCESOS DE CAPTURA ELECTRÓNICA DE CARGA.

El estudio experimental de las colisiones entre partículas atómicas y subatómicas se inicia inmediatamente después del descubrimiento del electrón con los experimentos elásticos de dispersión de partículas alfa por hojas metálicas delgadas. En aquella época, debido a la existencia de problemas a los que las teorías existentes no daban una solución satisfactoria, surge la mecánica cuántica y con ello se dispuso de una poderosa herramienta para dar solución a una gran cantidad de problemas. Entre éstos se encuentran aquellos en los que ocurre una colisión entre una partícula ionizada y una partícula neutra, ya sea átomo o molécula. Cuando ocurre uno de estos procesos, existen una gran diversidad de situaciones a estudiar, siendo dos de las más importantes aquellas en las que hay intercambio de carga entre las partículas que colisionan, y aquellas en las que hay fragmentación de alguna de las partículas. A continuación se abordan los procesos del primer tipo.

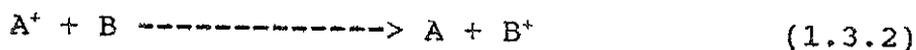
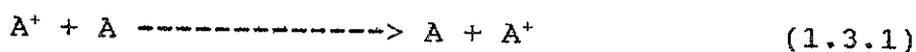
Los procesos de transferencia de carga han resultado ser no sólo de gran importancia en la física básica, sino que actualmente son de gran interés por sus aplicaciones en la química, la biología, la astronomía, la ciencia aplicada e ingeniería.

Dentro de esta última, una de las aplicaciones principales es el buen entendimiento de los procesos de transferencia de carga que encamine a resolver el problema del calentamiento de un plasma para

la obtención de energía por fusión nuclear lo que se lograría mediante la inyección de haces de partículas neutras a energías de keV.

Los procesos de transferencia de carga que son de interés general, son aquellos en los que el proyectil o el blanco tienen una gran afinidad electrónica, un potencial de ionización pequeño ó ambos tienen el mismo potencial de ionización. En cualquiera de estos casos las secciones transversales del proceso son generalmente grandes.

Los modelos teóricos que se describen brevemente a continuación tienen por objeto estudiar el intercambio de carga entre iones y átomos gaseosos en reacciones del tipo



A los procesos del tipo (1.3.1) se les conoce como procesos resonantes simétricos y a los del tipo (1.3.2) como procesos no-resonantes asimétricos. A este último pertenece el sistema de estudio de este trabajo.

Los procesos de intercambio de carga, al igual que otros muchos procesos, no pueden ser descritos de manera general, por lo que es necesario restringir el fenómeno en un marco cada vez más pequeño a fin de validar las suposiciones que muchas veces se hacen

al plantear la solución del problema. En el presente caso, el problema consiste en encontrar expresiones analíticas para las secciones transversales totales de intercambio de carga entre iones y blancos gaseosos, considerando que se tienen iones y blancos atómicos y un intervalo de velocidades relativas de colisión.

1.3.1.- CRITERIO ADIABÁTICO DE MASSEY.

CAPTURA ELECTRÓNICA SIMPLE: Este criterio considera reacciones de transferencia de carga del tipo asimétrico (1.3.2) [22,23], también llamado proceso de captura electrónica simple del ion A^+ incidiendo sobre el blanco B. Para que este proceso se lleve a cabo es necesario disponer de una cierta cantidad de energía que se encuentra dada por la diferencia entre la energía liberada al neutralizar a la partícula A y la energía necesaria para ionizar a la partícula B, es decir:

$$\Delta E = I_A - I_B \quad (1.3.3)$$

en donde I_i es el potencial de ionización de la partícula i. ΔE representa el cambio en energía en la transición electrónica del proceso y se le conoce como "defecto de energía". Cuando $\Delta E > 0$, se dice que se trata de un proceso exotérmico y cuando $\Delta E < 0$, al proceso se le llama endotérmico.

Massey [23] usa un argumento basado en el principio de correspondencia para mostrar que, en general, las secciones

transversales de transferencia de carga a muy bajas velocidades relativas de acercamiento serán pequeñas a menos que ΔE sea pequeña. Si se supone que la velocidad de acercamiento de los dos sistemas atómicos es despreciable comparada con las velocidades de los electrones orbitales, entonces la interacción entre A^+ y B cambiará tan lentamente, que los electrones tendrán tiempo para irse reajustando a la perturbación producida sin que ocurra una transición electrónica. En este caso se dice que la colisión es adiabática [24]. Massey describe ésta situación clásica en términos de la vibración de un oscilador producida por una fuerza perturbativa, cuya frecuencia natural es ν . Supone que la perturbación varía con el tiempo de acuerdo a una función $F(t)$ y desarrolla esa función en una integral de Fourier. Sólomente las componentes de este desarrollo con frecuencias cercanas a ν pueden tener un efecto apreciable en la producción de una oscilación forzada. Por lo tanto la duración de una colisión τ no debe de ser grande comparada con un período de vibración natural del oscilador. La excitación será débil si el producto $\tau\nu \gg 1$. Si "a" representa el alcance de la interacción entre A^+ y B y v es la velocidad relativa de acercamiento, entonces τ será del orden a/v y la condición para excitación débil queda como $av/\nu \gg 1$. En mecánica cuántica se reemplaza a la frecuencia por $\Delta E/\hbar$, con \hbar la constante de Planck. Así la probabilidad de que ocurra la transferencia de carga entre el ion y el átomo será pequeña si:

$$a|\Delta E|/v \gg 1 \quad (1.3.4)$$

Para un par de sistemas atómicos dados, "a" y ΔE son fijos aunque el parámetro adiabático "a" no está bien definido.

Todo lo anterior indica que la sección será pequeña si v corresponde a la región adiabática, esto es:

$$v \ll a |\Delta E| / \hbar \quad (1.3.5)$$

Si v se incrementa a un valor:

$$v^* \approx a |\Delta E| / \hbar \quad (1.3.6)$$

la colisión no es adiabática ya que el tiempo de colisión se hace comparable con el tiempo de transición $\hbar/\Delta E$. Se espera entonces que la sección transversal tenga un valor pico (el cual puede ser bastante grande) a una energía de impacto correspondiente a (1.3.5).

De este modo, en general, el modelo de Massey predice que la sección de transferencia de carga para un proceso no resonante es muy pequeña a bajas energías de impacto, sube a un máximo en el que la expresión (1.3.6) se cumple y entonces decrece rápidamente a energías más grandes.

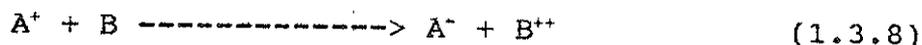
En la región adiabática la sección varía aproximadamente como, [25,26]:

$$\sigma = K \exp[-a |\Delta E| / 4\hbar v] \quad (1.3.7)$$

con K una constante que depende del proceso considerado. Esta expresión queda en términos del parámetro adiabático al que experimentalmente, [26,27] se ha encontrado le corresponde un valor

de 7\AA para una gran cantidad de procesos de captura electrónica simple en reacciones asimétricas.

-CAPTURA ELECTRÓNICA DOBLE: Si ahora se desea estudiar a los procesos de doble captura electrónica del tipo:



y se quiere aplicar el criterio adiabático, no se puede asegurar a priori que el valor del parámetro "a" sea el mismo que el correspondiente a los procesos de captura simple. Existe en la literatura [27] una forma muy sencilla para determinar el valor de "a" en procesos de captura electrónica múltiple: sea m el número de electrones capturados por el ion, entonces $a_m = 7\text{\AA}$ por lo que $a = 7\text{\AA}$ para captura simple, $a = 3.5\text{\AA}$ para captura doble, etc.

También se ha determinado experimentalmente el valor de "a" para una gran cantidad de procesos de doble captura electrónica y se encuentra que $a=1.5\text{\AA}$ cuando el blanco son gases inertes y que "a" varía desde 0.5 hasta 2.3\AA cuando el blanco son gases moleculares simples (H_2 y N_2) [28]. Debido entonces a que el valor de "a" muestra una dependencia del proceso, se acostumbra escribir una expresión más general para la sección transversal de captura electrónica cuando se aplica el criterio adiabático de Massey [24], ésta es:

$$\sigma(v) = A \exp[-Ba | \Delta E | / \hbar v] \quad (1.3.9)$$

ΔE es el defecto de energía correspondiente al proceso de que se trate. A y B son constantes que se pueden determinar para cada proceso de la siguiente manera: definiendo $K = a|\Delta E|/\hbar v$, entonces $\sigma(v) = A \exp[-KB]$ y suponiendo que experimentalmente se han determinado σ_1 y σ_2 , entonces se tiene que:

$$\sigma_1 = A \exp[-K_1 B] \quad (1.3.10a)$$

$$\sigma_2 = A \exp[-K_2 B] \quad (1.3.10b)$$

De (1.3.10a) y (1.3.10b), se tiene:

$$A = \sigma_2 \exp[K_2 B] \quad (1.3.11a)$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 \exp[B(K_2 - K_1)] \quad (1.3.11b)$$

con lo que:

$$A = \sigma_2 [\sigma_1 / \sigma_2]^{K_2 / (K_2 - K_1)} \quad (1.3.12a)$$

$$B = \ln(\sigma_1 / \sigma_2) / [K_2 - K_1] \quad (1.3.12b)$$

De acuerdo con Drukarev, [29], el parámetro adiabático "a" está relacionado con el momento más probable transferido al blanco de la siguiente manera: sean P_0 y P el momento de la partícula antes y después de la colisión, entonces:

$$\Delta E = [P_0^2 - P^2] / 2m \quad (1.3.13)$$

De esta manera, el momento transferido es:

$$q(\theta) = |P_0 - P| = [(\Delta E \gamma v)^2 + 4P_0^2 \text{sen}^2(\theta/2)]^{1/2} \quad (1.3.14)$$

Para ángulos de dispersión pequeños ($\theta \approx 0$) se tiene que:

$$q(\theta) = |\Delta E| / v$$

Ahora, de la condición (1.3.6):

$$a = \hbar v_m / \Delta E$$

con $v=v_m$ la velocidad a la que ocurre el máximo de la sección transversal, se obtiene que:

$$a = \hbar / q_m \quad (1.3.15)$$

o sea que el parámetro adiabático "a" es inversamente proporcional al momento más probable transferido en la dirección de la dispersión.

El hecho de que "a" sea más pequeña para procesos de doble captura que para los procesos de captura simple, es obvio ya que la cantidad de momento transferido en doble captura es mayor que en captura simple.

I.3.2.- MODELO DE RAPP Y FRANCIS PARA PROCESOS DE INTERCAMBIO DE CARGA ENTRE IONES Y ÁTOMOS.

Hay varios modelos que explican los procesos de intercambio de carga resonante simétricos [30,31,32], pero en general sólo se han podido hacer cálculos cuantitativos de mecánica ondulatoria fundamental para sistemas en colisión relativamente simples, tales como $H^+ + H$ y $He^+ + He$; la complicación de los cálculos se incrementa tan rápido como cuanto más complejos son los reactivos. Por esta razón, es muy importante desarrollar métodos de aproximación para la estimación de las secciones transversales [33,35]. Rapp y Francis [32], demuestran que las secciones transversales de procesos de transferencia de carga resonante simétrica se pueden calcular en un amplio intervalo de velocidades del ion incidente con el sólo conocimiento del potencial de ionización I . En el caso de los procesos de transferencia de carga no-resonantes asimétricos la situación es distinta ya que la teoría existente es limitada, y por el tipo de ecuaciones diferenciales que es necesario resolver, se deben hacer muchas suposiciones para facilitar los cálculos.

Para calcular las secciones totales de intercambio de carga se cuenta básicamente con tres procedimientos generales. El primero es el tratamiento más riguroso y formal con el que se deben resolver este tipo de problemas, conocido como el método de dispersión de ondas y es puramente cuántico [37]. El segundo método es conocido como el método del parámetro de impacto [32]; se trata de un método

semi-clásico en el que se supone que el movimiento relativo de las partículas que colisionan es regido por las leyes de la mecánica clásica y se aplica la teoría cuántica de perturbaciones para determinar la probabilidad de transición electrónica de un estado a otro. Por último, existen también métodos puramente clásicos como el de Grizinsky [36]. Sin embargo la elección del método a usar está en función de las características del proceso que se pretende estudiar, así como de la complejidad de las ecuaciones que deban de resolverse. Por otro lado, el método que es más conveniente para un proceso que ocurre a una cierta velocidad de acercamiento, no lo será para el mismo proceso ocurriendo a otra velocidad relativa. Es por esto que los procesos (1.3.1) y (1.3.2) sólo se estudian en ciertos intervalos de velocidad; por ejemplo a velocidades relativas de acercamiento "altas" el método que se emplea es el de dispersión de ondas [37]. Una complicación que hay en esta región de velocidades, es que no se puede usar la aproximación de Born-Oppenheimer debido a que la velocidad relativa de acercamiento es comparable con la velocidad de los electrones en los átomos. A velocidades "intermedias", el método que se usa más frecuentemente es el del parámetro de impacto [38], ya que en esta región las colisiones involucran parámetros de impacto relativamente grandes y esto es de gran utilidad para simplificar los cálculos; en esta región de velocidades también se puede aplicar el método de dispersión de ondas y es posible demostrar la equivalencia entre ambos métodos [37]. A velocidades "bajas" puede emplearse cualquier método semi-clásico siempre y cuando se tome en cuenta que las

trayectorias ya no se pueden considerar rectilíneas. Se consideran velocidades "intermedias" a aquellas que están en el intervalo $10^5/\mu^{1/2}$ cm/s $\leq v \leq 10^8$ cm/s, donde μ es la masa reducida del par que colisiona, expresada en una. Se consideran velocidades "altas" a aquellas que son mayores que 10^8 cm/s y las velocidades "bajas" son las menores a $10^5/\mu^{1/2}$ cm/s. Rapp y Francis estudian los procesos (1.3.1) y (1.3.2) en la región de velocidades "intermedias" [32].

- PROCESOS RESONANTES SIMÉTRICOS.

Consideremos en primer lugar a los procesos del tipo (1.3.1.1). De acuerdo a Gurnee y Magee [39], quienes hacen uso de la aproximación de dos estados, A puede ser considerada como una molécula a cuyo estado inicial se le asocia una función de onda Ψ_i y al estado final una función de onda Ψ_f , correspondiendo estos estados al lado derecho y al lado izquierdo de la ecuación (1.3.1) respectivamente, con la molécula y el ion separados a una distancia infinita. Al hacer una aproximación a orden cero en la función de onda total, y una aproximación a primer orden en la energía de interacción, se puede escribir la función de onda como:

$$\Psi = [C_i(t)\Psi_i + C_f(t)\Psi_f] \exp(-iEt/\hbar) \quad (1.3.16)$$

donde $C_i(t)$ y $C_f(t)$ son funciones del tiempo que en general pueden tomar valores complejos; E es la energía total del sistema sin tomar en cuenta el movimiento relativo entre la molécula y el ion.

Las funciones Ψ_i y Ψ_f se escriben como el producto de funciones de onda internas y electrónicas. El hamiltoniano total es:

$$H = H_{\text{int}}(\text{ion}) + H_{\text{int}}(\text{mol}) + H_{\text{el}}(\text{ion}) + H_{\text{el}}(\text{mol}) + H' \quad (1.3.17)$$

en donde "int" se refiere a energías internas y "el" se refiere a energías electrónicas. H' es la parte del Hamiltoniano que representa la interacción entre el ion y la molécula: Si sustituimos las ecuaciones (1.3.16) y (1.3.17) en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se obtiene:

$$C_i H' \Psi_i + C_f H' \Psi_f = i\hbar \left(\frac{dC_i}{dt} \Psi_i + \frac{dC_f}{dt} \Psi_f \right) \quad (1.3.18)$$

Multiplicando la ecuación (1.3.18) por Ψ_i^* e integrando sobre todo el espacio se obtiene:

$$C_i H'_{ii} + C_f H'_{if} = i\hbar \left(\frac{dC_i}{dt} + \frac{dC_f}{dt} F \right) \quad (1.3.19)$$

Realizando la misma operación, pero ahora multiplicando por Ψ_f^* e integrando nuevamente sobre todo el espacio se obtiene:

$$C_i H'_{ti} + C_f H'_{tf} = i\hbar \left(\frac{dC_i}{dt} F + \frac{dC_f}{dt} \right)$$

(1.3.20)

Así las ecuaciones (1.3.19) y (1.3.20) forman un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, en donde:

$$H'_{mm} = \int \psi_m^* H' \psi_n d\tau$$

(1.3.21a)

$$F = \int \psi_i^* \psi_f d\tau = \int \psi_f^* \psi_i d\tau$$

(1.3.1.21b)

El modelo que se usa para calcular la sección transversal se muestra en la siguiente figura:

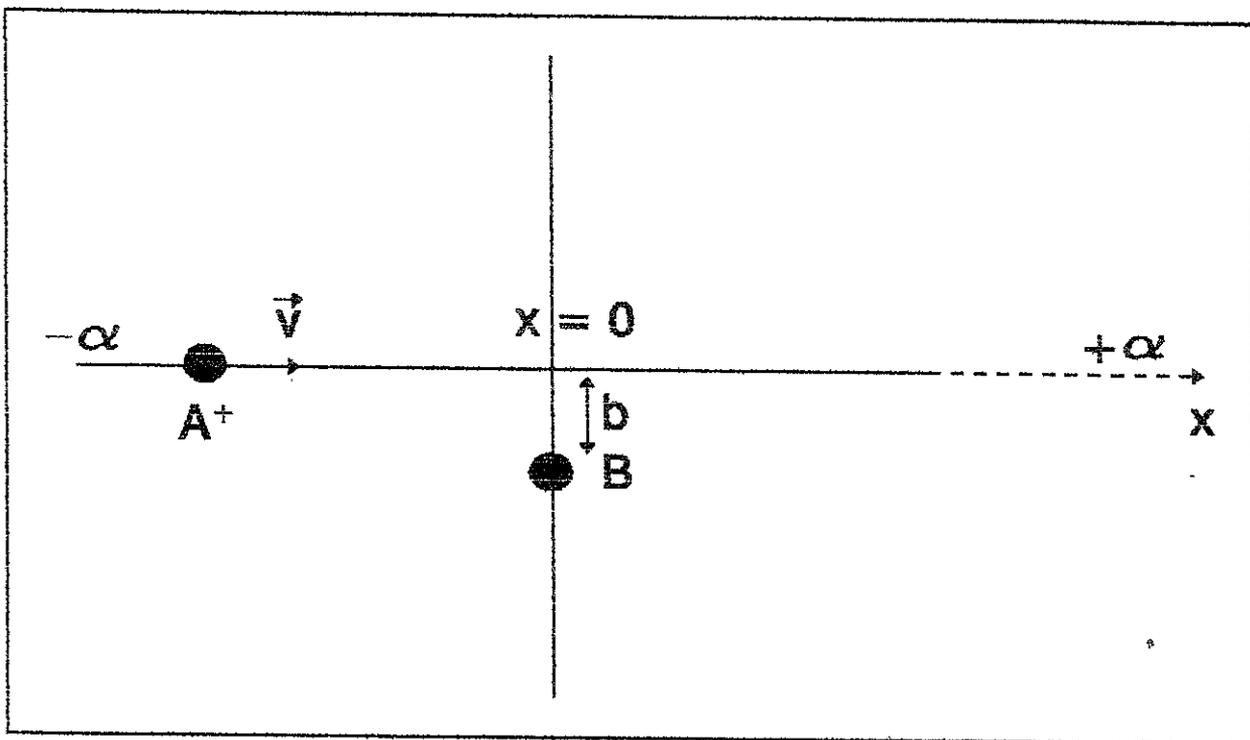


Figura I.2

La molécula B se localiza a una distancia fija b del eje "X" y el ion, que se considera inicialmente en $X = -\infty$, se mueve a lo largo del eje "X", se desprecia la desviación del movimiento rectilíneo uniforme que pudiera tener en $X \approx 0$.

Si denotamos por $P(b, v)$ a la probabilidad de que ocurra la transferencia de carga, entonces la sección transversal total está dada por

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

(1.3.22)

en donde el valor $P(b,v)$ está dado por el vector coeficiente $|C_f(+\infty)|^2 = C_f^* C_f$, que proporciona esta probabilidad de encontrar al sistema en el estado final f . C_f se obtiene resolviendo las ecuaciones (1.3.19) y (1.3.20). Puesto que los coeficientes C 's son números complejos, entonces podemos escribir:

$$C_i = \rho \exp i\omega \tag{1.3.22a}$$

$$C_f = \rho' \exp i\omega' \tag{1.3.22b}$$

en donde ρ es la amplitud y ω es la fase y ambas son funciones del tiempo. Se puede demostrar que el coeficiente C_f y el coeficiente C_i siempre están fuera de fase por un factor $\pi/2$ [32], por lo que se tiene:

$$C_i = \rho \exp i\omega$$

$$C_f = i(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}} \exp i\omega \tag{1.3.1.23}$$

Si sustituimos esto en (1.3.19) o en (1.3.20) y separamos la parte real de la parte imaginaria, se obtiene:

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{F \frac{d\rho}{dt}}{(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}}} - \frac{H'_{ii}}{\hbar}$$

(1.3.24a)

$$\frac{H'_{if}}{\hbar} + F \frac{d\omega}{dt} = \frac{\frac{d\rho}{dt}}{(1-\rho^2)^{\frac{1}{2}}}$$

(1.3.24b)

y puesto que $v = dx/dt$, integrando las dos últimas ecuaciones, se obtiene para $P(b,v)$:

$$P(v,b) = C_f^* C_f(+\infty) = \sin^2 \int \frac{1}{\hbar v} \frac{H'_{fi} - FH'_{ii}}{1-F^2} dx$$

(1.3.25a)

$$\frac{2(H'_{fi} - FH'_{ii})}{1-F^2} = E_a - E_s$$

(1.3.25b)

donde E_a y E_s representan las energías correspondientes a estados simétricos y antisimétricos de la función Ψ . H'_{ff} , H'_{ii} y F son conocidas como integrales de traslape. Si escribimos la ecuación (1.3.25a) en términos de la ecuación (1.3.25b), se tiene,

[30,33,39,42]:

$$P(b, V) = \sin^2 \int \frac{1}{2\hbar V} (E_a - E_s) dx$$

(1.3.26)

Si ahora suponemos que A es un átomo y se considera al ion A^+ como un centro puntual de carga positiva, entonces el problema es análogo al caso en que se está considerando a la molécula H_2^+ que es la molécula más simple que se puede tener. Por ello resulta natural proponer un orbital semi-empírico para el átomo A de la siguiente forma:

$$\psi(r) = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{I}{13.6}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left[-\left(\frac{I}{13.6}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0}\right]$$

(1.3.27)

donde a_0 es el radio de Bohr, I es el potencial de ionización de A en eV y r es la separación entre A^+ y e^- . Al evaluar $E_a - E_s$ de la ecuación (1.3.27), para $R/a_0 \gg 1$ se obtiene:

$$(E_a - E_s) = \frac{2IR}{a_0} \exp\left[-\left(\frac{I}{13.6}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{R}{a_0}\right]$$

(1.3.28)

lo que se reduce a la forma conocida para el caso de H_2^+ calculado con el método LCAO (Linear Combination Atomic Orbitals) [33,35]:

$$(E_a - E_g) = 27.2 \frac{R}{a_0} \exp\left(-\frac{R}{a_0}\right) \text{ eV}$$

(1.3.29)

Sustituyendo la ecuación (1.3.28) en la ecuación (1.3.26) se obtiene una integral en el argumento del Sen^2 ; la integral ha sido evaluada por Dalgarno [40], quien obtuvo la expresión:

$$P(b, \nu) = \sin^2 \int \frac{I}{a_0 \hbar \nu} (x^2 + b^2)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\left(\frac{I}{13.6}\right)^{\frac{1}{2}} (x^2 + b^2)^{\frac{1}{2}} / a_0\right] dx$$

$$= \sin^2 \left[\frac{2Ib^2}{a_0 \hbar \nu} \left[K_0\left(\gamma \frac{b}{a_0}\right) + \frac{K_1\left(\gamma b/a_0\right)}{\left(\gamma b/a_0\right)} \right] \right]$$

(1.3.30)

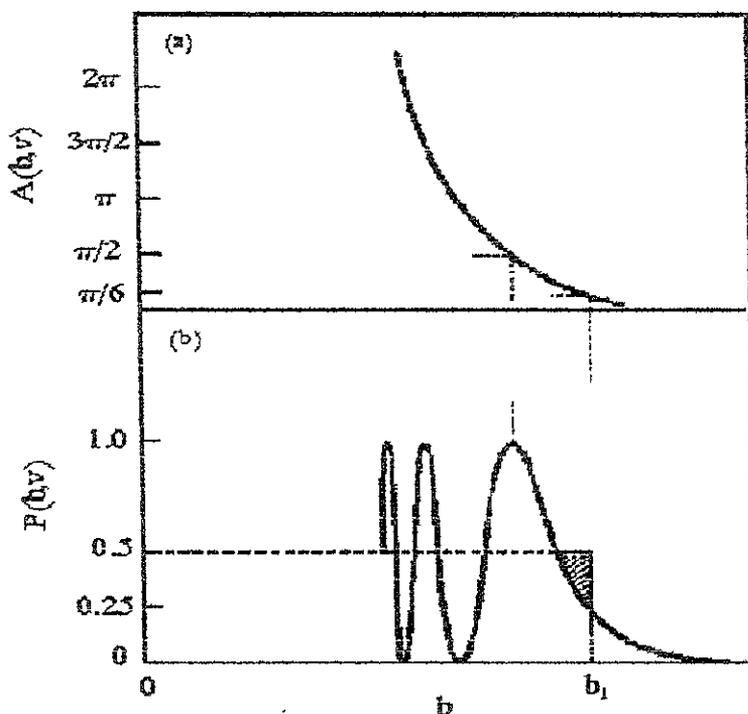
con $\gamma = [I/13.6]^{1/2}$; K_0 y K_1 las funciones Bessel de segundo tipo para cero y primer orden respectivamente [41]. Puesto que se ha hecho la aproximación $R/a_0 \gg 1$, se puede suponer que $\gamma R/a_0 \gg 1$ y usando además las formas asintóticas para las funciones Bessel, se obtiene que:

$$P(b, v) = \sin^2 \left[\left(\frac{2\pi}{\gamma a_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{I}{\hbar v} \right) b^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{a_0}{\gamma b} \right) \exp(-\gamma b/a_0) \right]$$

$$= \sin^2 [A(b, v)]$$

(1.3.31)

La gráfica de la función $A(b, v)$ para alguna velocidad v tiene la forma que se muestra en la Fig. I.3a. La probabilidad de transferencia de carga $P(b, v) = \sin^2[A(b, v)]$ se muestra en la Figura I.3b. Gurnee y Magee [39] muestran en su trabajo que al utilizar el método de dispersión de ondas, la gráfica para este factor de probabilidad también es una función que tiende a cero para b grandes, pero de forma oscilante, tal y como se muestra en la Figura I.3b.



Figs. 3a y 3b

En general, $P(b, v)$ es una función que oscila entre cero y uno para b pequeños y deja de oscilar para b grandes, mostrando una tendencia a cero (Fig. I.3b).

Para calcular la sección transversal de intercambio de carga se necesita evaluar la integral de la ecuación (1.3.22), pero dada la complejidad de su argumento, dentro de la misma aproximación se hace una estimación a un valor constante de 0.5 para $0 \leq b \leq b_1$ tal que $P(b, v) = 0.25$. La elección de este punto b_1 es arbitraria y la línea discontinua que se muestra en la figura (I.3b) representa la suposición hecha, además es equivalente en área a la contenida por la cola del factor decayente de $P(b, v)$. Así la sección transversal

para intercambio de carga es simplemente:

$$\sigma = 2\pi \int \frac{1}{2} b db = \frac{1}{2} \pi b_1^2 \quad (1.3.32)$$

en donde para encontrar b_1 , se usa la igualdad:

$$A(b, \nu) = \left[\left(\frac{2\pi}{\gamma a_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{I}{\hbar \nu} \right) b_1^{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{a_0}{\gamma b_1} \right) \exp\left(-\frac{\gamma b_1}{a_0}\right) \right] = \frac{\pi}{6} \quad (1.3.33)$$

En esta ecuación, para $(\gamma b_1/a_0) \gg 1$, la variación del término $\exp(-\gamma b_1/a_0)$ respecto de b_1 es mucho más grande que las variaciones del término pre-exponencial. Así, para obtener la dependencia de b_1 sobre ν para un cierto intervalo de ν , se pueden cambiar los factores pre-exponenciales de b_1 y sólo considerar la variación debido a la exponencial. Reacomodando los términos, se obtiene:

$$\begin{aligned} \sigma^{\frac{1}{2}} &= \left(\frac{1}{2} \pi \right)^{\frac{1}{2}} b_1 \\ &= - \left(\frac{1}{2} \pi \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{a_0}{\gamma} \right) \ln \nu + \left(\frac{1}{2} \pi \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{a_0}{2\gamma} \right) \ln \left[\frac{72 b_1^3}{\pi \gamma a_0} \left(\frac{I}{\hbar} \right)^2 \left(1 + \frac{a_0}{\gamma b_1} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (1.3.34)$$

Este resultado tiene la forma bien conocida [35,40]:

$$\sigma^{\frac{1}{2}} = -K_1 \ln v + K_2$$

(1.3.35)

la cual ha sido usada para extrapolar datos de transferencia de carga a otros intervalos de velocidad [40]. Es notable que en un amplio intervalo de v , b_1 varía significativamente y no se puede considerar un valor promedio de b_1 para los términos pre-exponenciales, y por lo tanto la expresión simple dada en la ecuación (1.3.35) no se satisface. Para un amplio intervalo de velocidades se puede calcular σ vs. v para un átomo con el solo conocimiento de su potencial de ionización y resolviendo para b_1 con la ecuación (1.3.34). La aplicación de estos cálculos se han llevado a cabo para varios átomos [32].

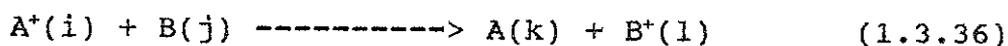
- PROCESOS NO-RESONANTES ASIMÉTRICOS.

Para encontrar la sección transversal de transferencia de carga en los procesos no-resonantes asimétricos, se procede en forma análoga al tratamiento que se emplea en el caso de los procesos resonantes simétricos. En este caso se utiliza también un tratamiento semi-clásico en el intervalo de velocidades intermedias usando una aproximación de dos estados [39,41,42].

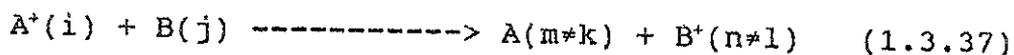
Sin embargo, la teoría no es completa y se requiere de más consideraciones antes de suponer un cálculo cuantitativo. En

procesos de transferencia de carga asimétrica, además de consideraciones estadísticas, para los orbitales moleculares se requiere una aproximación mediante el desarrollo de la función de onda total en términos de orbitales moleculares, en lugar de orbitales atómicos. También se debe considerar la relación de la teoría con los requerimientos del balance detallado [17].

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

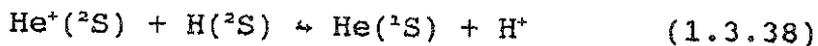


donde i, j, k y l representan los estados más bajos de los iones y átomos. El lado derecho y el lado izquierdo de la ecuación (1.3.36) representan dos estados asintóticos diferentes de la molécula AB^+ y la transferencia de carga ocurre cuando hay una transición electrónica de un estado a otro. Puesto que las colisiones de transferencia de carga en la región de velocidades intermedias involucra parámetros de impacto relativamente grandes, se puede suponer que el spin y el momento angular probablemente se conservan en la reacción. Así, sólo se consideran transiciones entre estados de AB^+ de simetría idéntica, por lo que se necesitan considerar únicamente dos estados electrónicos de AB^+ que tengan a (A^+B) y $(A+B^+)$ como formas asintóticas. Con ello se supone que se desprecian aquellas reacciones permitidas análogas a la ecuación (1.3.36), pero con productos en estados excitados, tales como



y que tiene grandes valores de $|\Delta E|$. Se entiende por una aproximación de dos estados, cuando un nivel de energía de $\{A(m) + B^+(n)\}$ se encuentra por "encima" de $\{A(k) + B^+(l)\}$ de tal manera que se espera que los estados de AB^+ , para los cuales ellos son asintóticos, se encuentren lo suficientemente distantes en energía potencial como para que no haya una interacción apreciable.

Cuando colisionan $A^+(i) + B(j)$ se forman varios estados de AB^+ . La probabilidad de que se forme un estado es proporcional a su peso estadístico. Solo aquellos estados de simetría idéntica con $\{A(k) + B^+(l)\}$ pueden producir transferencia de carga de acuerdo a la reacción (1.3.36); así, por consideraciones de simetría, esta reacción está prohibida para una cierta fracción de las colisiones. Denotemos por f , al factor de peso estadístico, la fracción de colisiones que producen estados AB^+ , los cuales permiten transferencia de carga. Así, la razón f_1/f_2 para la reacción directa e inversa, respectivamente, en la ecuación (1.3.36) es el factor pre-exponencial de la constante de equilibrio de las reacciones [44]. En general, cuando se comparan secciones transversales teóricas con mediciones experimentales, las secciones transversales calculadas bajo una aproximación de dos estados se deben multiplicar por f antes de ser comparadas con las experimentales. Un ejemplo de una aplicación breve de estos principios de simetría está dada por las reacciones de transferencia de carga de N^+ y O^+ con H [33]. Un ejemplo más simple lo constituyen las reacciones



en el que se tienen dos estados de HeH^+ , los cuales se van asintóticamente a $\{\text{He}^+(^2\text{S}) + \text{H}(^2\text{S})\}$ con simetrías $^3\Sigma$ y $^1\Sigma$ y un estado $^1\Sigma$ que se va a $\{\text{He}(^1\text{S}) + \text{H}^+\}$. Si ahora se considera la reacción inversa, la colisión sólo puede producir un estado transitorio de HeH^+ y por lo tanto la transferencia de carga sólo ocurre en el estado $^1\Sigma$ de HeH^+ , el cual se va asintóticamente a $\{\text{He}^+(^2\text{S}) + \text{H}(^2\text{S})\}$. Sin embargo, el factor estadístico f_2 para la reacción inversa es igual a uno, porque todas las colisiones producen reacción. En la reacción directa, un 25% de las colisiones entre $\text{He}^+(^1\text{S})$ y $\text{H}(^2\text{S})$ producen estados $^1\Sigma$ lo que nos produce transferencia de carga, mientras que el 75% de las colisiones producen estados $^3\Sigma$ que no producen transferencia de carga. Así f_1 para la reacción directa es $1/4$.

Bates y Lynn [45] sugieren que hay dos formas de realizar una "aproximación de 2-estados", involucrando para la función de onda total, un desarrollo en términos de orbitales atómicos o bien orbitales moleculares. En cada caso, el desarrollo mantiene dos términos correspondiendo a reactivos y productos, respectivamente. Los correspondientes coeficientes dependientes del tiempo determinan la probabilidad de encontrar al sistema en cada estado. Puesto que el proceso comienza con los reactivos, las condiciones iniciales son que un coeficiente vale uno y el otro cero en $t = -\infty$, antes de la colisión. El problema es entonces calcular de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo el coeficiente

correspondiente después de la colisión, en $t=+\infty$.

En el caso de transferencia de carga resonante simétrica también se realizaron desarrollos similares. La diferencia entre ambos procesos de transferencia de carga es la conexión entre las aproximaciones realizadas por funciones atómicas y moleculares; en el caso de resonancia simétrica se puede demostrar [30,33,46], que el uso de funciones de onda moleculares permite obtener una probabilidad de transferencia de carga dada por la ecuación (1.3.26), mientras que los orbitales atómicos dan el mismo resultado con $(E_a - E_s)$ obtenido de la aproximación LCAO (Linear Combination Atomic Orbitals). En el caso de transferencia de carga asimétrica la conexión entre las aproximaciones por orbitales moleculares y atómicos no es tan fácil de obtener.

La aproximación consiste en escribir la función de onda total como una combinación lineal de orbitales moleculares de AB^+ formados en la colisión de A^+ con B:

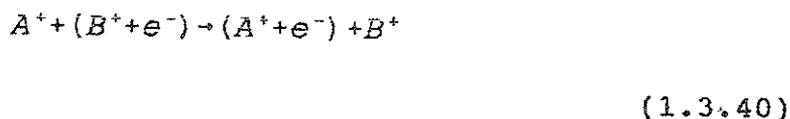
$$\Psi = C_A(t) \Phi_A^{(AB^+)} \exp\left[\frac{-iE_A^{(AB^+)}(R)t}{\hbar}\right] +$$

$$+ C_B(t) \Phi_B^{(AB^+)}(R) \exp\left[\frac{-iE_B^{(AB^+)}(R)t}{\hbar}\right]$$

(1.3.39)

donde $\Phi_1^{(AB^+)}(R)$ es el orbital molecular de AB^+ el cual tiende a ϕ_1 en $R \rightarrow \infty$, y $E_1^{(AB^+)}(R)$ es la energía de este estado (la cual tiende a ϵ_1

con $R \rightarrow \infty$). Puesto que la ecuación (1.3.39) lleva a ecuaciones diferenciales difíciles de resolver, Gurnee y Magee [39] sugieren la idea de tomar la aproximación a orden cero y reemplazar a la función de onda molecular y la energía por orbitales y energía atómicos. Esta aproximación es razonable a separaciones internucleares grandes. Así, la ecuación (1.3.36) del proceso de transferencia de carga asimétrica se escribe como:



En este modelo simple se tiene sólo un electrón de valencia el cual puede estar ligado a cualquier núcleo A^+ o B^+ . La función de onda total para el electrón en el sistema combinado de A^+ y B^+ se escribe como:

$$\Psi = C_A(t) \phi_A(r_A) \exp(-i\omega_A t) + C_B(t) \phi_B(r_B) \exp(-i\omega_B t) \quad (1.3.41)$$

en donde las C 's son los coeficientes del desarrollo dependientes del tiempo; ϕ_A y ϕ_B son los orbitales atómicos para el electrón en el núcleo A^+ y B^+ ; r_A y r_B son los vectores de posición del electrón respecto a A^+ y B^+ ; $\omega = \epsilon/\hbar$, ϵ_A y ϵ_B son las energías de A y B en los estados ϕ_A y ϕ_B , respectivamente (potenciales de ionización). Estos estados son:

$$\left[\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e} \right) \nabla^2 + V_j(r_j) \right] \Phi_j = \epsilon_j \Phi_j$$

las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger atómicas en las cuales j puede ser A ó B, y $V_A(r_A)$ es el potencial efectivo de enlace de e^- a A^+ . Así, la ecuación de onda dependiente del tiempo para el electrón en presencia de A^+ y B^+ es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_A(r_A) + V_B(r_B) \right] \Psi = i\hbar \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)$$

(1.3.43)

Si se toma un sistema de coordenadas similar al que se utilizó en la discusión de transferencia de carga simétrica, entonces la trayectoria clásica $x=vt$ relaciona el movimiento relativo de A^+ y B^+ y por lo tanto para algún valor de $x=(R^2-b^2)^{1/2}$, r_A y r_B no son independientes. Si sustituimos la ecuación (1.3.41) para $\bar{\Psi}$ en la ecuación (1.3.43) se obtiene una ecuación para C_A , dC_A/dt , C_B y dC_B/dt . Esta ecuación relaciona los coeficientes C_A y C_B durante la colisión bajo la presencia de la perturbación V_A (suponiendo que el electrón se encontraba inicialmente en B^+). Cuando esta ecuación se multiplica alternativamente por Φ_A y Φ_B y se integra sobre todo el espacio, se obtienen dos ecuaciones diferenciales acopladas para C_A y C_B con respecto al tiempo:

$$\left[\frac{(V_B)_{AA}}{\hbar} \right] C_A + \left[\frac{(V_A)_{AB}}{\hbar} \right] \exp(-i\omega t) C_B = i \left[\frac{dC_A}{dt} + F \exp(-i\omega t) \frac{dC_B}{dt} \right]$$

(1.3.44a)

$$\left[\frac{(V_B)_{BA}}{\hbar} \right] \exp(i\omega t) C_A + \left[\frac{(V_A)_{BB}}{\hbar} \right] C_B = i \left[F \exp(i\omega t) \frac{dC_A}{dt} + \frac{dC_B}{dt} \right]$$

(1.3.44b)

con $\omega = \omega_B - \omega_A$, y

$$(V_j)_{mn} = \int \phi_m V_j(r_j) \phi_n d\tau$$

(1.3.45a)

$$F = \int \phi_A \phi_B d\tau$$

(1.3.45b)

en donde las integrales son funciones únicamente de R (la separación internuclear entre A^+ y B^+), y del tiempo (dependen de la trayectoria clásica de la colisión). Puesto que las probabilidades de localizar al electrón en el núcleo A^+ y B^+ son $|c_A|^2$ y $|c_B|^2$, respectivamente, entonces las condiciones iniciales son:

$$C_A(-\infty) = 0 \quad (1.3.46a)$$

$$C_B(-\infty) = 1 \quad (1.3.46b)$$

las cuales permiten localizar al electrón en el núcleo B⁺ antes de la colisión. La probabilidad de encontrar al electrón en el núcleo A⁺ después de la colisión es $|C_A(+\infty)|^2$. La probabilidad de transferencia de carga P(b,v) en una colisión de velocidad relativa v y parámetro de impacto b es esta probabilidad multiplicada por el factor de peso estadístico f. Así, las ecuaciones (1.3.44a) y (1.3.44b) se transforman en:

$$i \frac{dC_B}{dt} = K_1(t) \exp(i\omega t) C_A + \eta_1(t) C_B \quad (1.3.47a)$$

$$i \frac{dC_A}{dt} = \eta_2(t) C_A + K_2(t) \exp(-i\omega t) C_B \quad (1.3.47b)$$

en donde las K's y η's son agrupaciones de las integrales de perturbación divididas por ħ:

$$K_1 = \left[\frac{(V_B)_{BA} - F(V_B)_{AA}}{(1-F^2)\hbar} \right] \quad (1.3.48a)$$

$$K_2 = \left[\frac{(V_A)_{AB} - F(V_A)_{BB}}{(1-F^2)\hbar} \right] \quad (1.3.48b)$$

$$\eta_1 = \left[\frac{(V_A)_{BB} - F(V_A)_{AB}}{(1-F^2)\hbar} \right] \quad (1.3.48c)$$

$$\eta_2 = \left[\frac{(V_B)_{AA} - F(V_B)_{AA}}{(1-F^2)\hbar} \right] \quad (1.3.48d)$$

Si ahora definimos los coeficientes a_B y a_B , tal que

$$C_A = a_A \exp(-i \int \eta_2 dt') \quad (1.3.49a)$$

$$C_B = a_B \exp(-i \int \eta_1 dt') \quad (1.3.49b)$$

entonces, las ecuaciones (1.3.47a) y (1.3.47b) se simplifican y obtenemos:

$$i \frac{da_B}{dt} = K_1(t) \exp(i\Omega t) a_A \quad (1.3.50a)$$

$$i \frac{da_A}{dt} = K_2(t) \exp(-i\Omega t) a_B$$

(1.3.50b)

en donde,

$$\Omega t = \omega t + \int (\eta_1 - \eta_2) dt'$$

(1.3.51)

Puesto que $|a_\lambda|^2 = |c_\lambda|^2$, la probabilidad de transferencia de carga es $|a_\lambda(+\infty)|^2$.

La relación entre las cantidades K_1 , K_2 , Ω y las curvas de energía potencial de los estados moleculares AB^+ (que son asintóticos a los reactantes y productos) es muy compleja. En procesos de transferencia de carga simétrica-resonante con la aproximación por orbitales atómicos se obtienen ecuaciones de la forma (1.3.50a) y (1.3.50b), excepto que $\omega = \eta_1 - \eta_2 = 0$ y $K_1 = K_2 = (E_a - E_b)$ [33]. Las ecuaciones se pueden resolver exactamente [39] para obtener la ecuación (1.3.26), con $P(b, v) = |a_\lambda(+\infty)|^2$, y $t = x/v$. En el caso de procesos asimétricos se requiere de un análisis crítico para encontrar tan sólo alguna de tales relaciones. En este caso, para nuestro propósito de cálculo de secciones transversales solo se necesitan calcular las integrales K_1 , K_2 y Ω sin considerar su relación con las curvas de energía potencial. Puesto que la ecuación (1.3.41) es válida para parámetros de impacto grandes, se

usa la aproximación por orbitales atómicos para ϕ_A y ϕ_B , dados por la ecuación (1.3.27) y se puede demostrar para el caso resonante que si $\phi_A = \phi_B$, se obtienen resultados que a R/a_0 grandes, tales orbitales atómicos conducen a integrales del tipo $(V_A)_{JK}$ proporcionales a $R \exp(-\gamma R/a_0)$ e integrales del tipo $(V_A)_{JJ}$ proporcionales a $\exp(-2\gamma R/a_0)$, además de que F es proporcional a $R^2 \exp(-\gamma R/a_0)$. En este caso de no-resonancia el uso de la ecuación (1.3.27) para valores diferentes de I involucran un mayor número de integrales. Algunas suposiciones permiten concluir que $K_2 \approx (V_A)_{AB}$, $K_1 \approx (V_B)_{BA}$, y que $K \gg \eta$. No obstante $K_1(t)$ y $K_2(t)$ tienen un comportamiento similar al caso resonante. Se puede demostrar que el uso de orbitales atómicos en la ecuación (1.3.27) permite concluir que para procesos cuasi-resonantes en los cuales $|\omega_1 - \omega_2| \ll (\omega_1 \text{ ó } \omega_2)$, $|\eta_1 - \eta_2|$ es pequeño [47]. En tal aproximación $|\eta_1 - \eta_2| \ll \omega$ si $R/a_0 \gg 1$ y por lo tanto $\Omega \approx \omega$, lo que justifica la aproximación del presente cálculo [48].

Hay una cuestión adicional que se debe considerar antes de tratar de resolver las ecuaciones (1.3.50a) y (1.3.50b) respecto a una suposición que ya se mencionó en el párrafo anterior. Ya que el principio de balance detallado requiere que en la reacción (1.3.36), para una b y v dadas, tanto $P_1(b,v)$ para la reacción directa, como $P_2(b,v)$ para la reacción inversa estén relacionadas por

$$\frac{P_1(b, v)}{P_2(b, v)} = \frac{f_1}{f_2}$$

(1.3.52)

además de que f_1 y f_2 entran en los cálculos debido a consideraciones estadísticas (es decir, $P_1(b, v) = f_1 |a_A(\infty)|^2$). Entonces se concluye que si iniciamos con $(A^+ + B)$ [es decir, $a_A(-\infty)=0$, $a_B(-\infty)=1$], $|a_A(\infty)|^2$ para la transferencia de carga debe ser igual $|a_B(\infty)|^2$ para el proceso inverso [es decir, $a_A(-\infty)=1$, $a_B(-\infty)=0$]. Las ecuaciones (1.3.50a) y (1.3.50b) no satisfacen esta condición, a menos que $K_1=K_2$. En el presente tratamiento $K_1=K_2$, ya que $(V_B)_{AB} - (V_A)_{BA} = (\epsilon_A - \epsilon_B)F$ [33], lo que muestra el hecho de que la ecuación (1.3.41) sólo es una buena aproximación a la verdadera función de onda total. La elección particular que se tomó en la ecuación (1.3.41) no es adecuada para no-resonancia ó $(\epsilon_A - \epsilon_B)$ grandes. La razón de esto es que realmente se debe usar la ecuación (1.3.39) para la función de onda de la colisión compleja AB^+ . Puesto que $\Phi_A^{(AB^+)}(R)$ y $\Phi_B^{(AB^+)}(R)$ son mutuamente ortogonales y son además, eigen-funciones del Hamiltoniano total [lado izquierdo de la ecuación (1.3.43)]. La elección de la ecuación (1.3.39) en términos de orbitales moleculares da un sistema de ecuaciones diferenciales las cuales satisfacen el principio del balance detallado. La ecuación (1.3.41) es una aproximación a "orden cero" en la que se usa a las formas asintóticas de Φ y E para R 's finitas. Las funciones Φ_A y Φ_B son no-ortogonales, excepto en $R \approx \infty$ y es esta ortogonalidad la que conduce a $K_1 \neq K_2$. La credibilidad que

se le puede dar a una teoría que no satisface el principio del balance detallado está en el comportamiento de $\phi_i^{(AB+)}(R)$, ($i=A, B$). A grandes R 's el uso de ϕ_i en lugar de ψ_i es una buena aproximación y por lo tanto de acuerdo a la ecuación $(V_B)_{AB} - (V_A)_{BA} = (\epsilon_A - \epsilon_B) F$ es pequeña y así la discrepancia entre K_1 y K_2 también es pequeña, lo que asegura que $P(b,v)$ tiene un valor razonable a grandes b 's. Sin embargo, puesto que se debe utilizar la ecuación (1.3.22) para calcular a σ , nos interesa calcular $P(b,v)$ para b 's pequeñas.

Cuando la contribución del integrando de la ecuación (1.3.22) es relativamente pequeño para b 's pequeñas, la teoría es más adecuada y funciona mejor para σ 's grandes. En los cálculos que se realizaron se utilizaron las ecuaciones (1.3.41), (1.3.50a) y (1.3.50b) usando un valor de K promedio apropiada tanto para K_1 como para K_2 . En algunos cálculos el intervalo importante de b en la ecuación (1.3.22) es lo bastante pequeño como para que el tratamiento presente no se aplique estrictamente [49]. Sin embargo, en esta aproximación simple, el comportamiento cualitativo importante está de acuerdo con el experimento.

Retomamos la discusión central usando las ecuaciones modificadas:

$$iv \left(\frac{da_B}{dx} \right) = \bar{K}(x/v) \exp(i\omega t/v) a_A$$

(1.3.53a)

$$iv \left(\frac{da_A}{dx} \right) = \bar{K}(x/v) \exp(-i\omega t/v) a_B$$

(1.3.53b)

con K un promedio apropiado para K_1 y K_2 , $a_A(-\infty)=0$, $a_B(-\infty)=1$ y $P(b,v) = \int |a_A(+\infty)|^2$.

Antes de intentar un cálculo cuantitativo, se puede discutir brevemente de manera cualitativa las ecuaciones (1.3.53a) y (1.3.53b) y de ahí a $P(b,v)$ y a σ . La función $[K(x/v)/v]$ es justamente el término correspondiente a la transferencia de carga simétrica resonante (es decir, el integrando de la ecuación (1.3.30), con I sustituido por el promedio apropiado de I_A e I_B . Parece que este proceso de promediar no es tan importante como el valor de ω , así que es independiente del uso de I_A , I_B o algún valor promedio; la dependencia de σ sobre v está significativamente determinada por ω , excepto a no-resonancias grandes.

Un hecho importante es que $K(x/v)$ es una curva "bien comportada" con un máximo finito en $x=0$ y que tiende exponencialmente a cero en $X=\pm\infty$; físicamente es la interacción que causa la transferencia de carga. Para valores muy pequeños de ω/v , los términos imaginarios de la exponencial de las ecuaciones (1.3.53a) y (1.3.53b) permanecen constantes e iguales a uno en un amplio intervalo de valores de x para los cuales K es apreciable. Bajo tal condición, los términos exponenciales se pueden suponer iguales a uno y por lo tanto las ecuaciones (1.3.53a) y (1.3.53b) son iguales a las que se obtienen en el caso de simetría resonante.

La solución está dada por la ecuación (1.3.26) con $(E_a - E_b)$ sustituida por K . Para una ω dada y v muy grande, $(\omega x/v) \ll 1$, es pequeña y el comportamiento de $\sigma(v)$ es similar al que se obtuvo para transferencia de carga en simetría resonante con un potencial de ionización efectivo entre I_A y I_B , comúnmente la ecuación (1.3.34). En este intervalo de velocidades, σ se incrementa a medida que v decrece a causa de que se tiene mayor tiempo disponible en la colisión para que ocurra una transición y $\omega x/v \ll 1$, es lo bastante pequeña, y por lo tanto la transición se lleva a cabo más fácilmente en proporción a la interacción K .

A bajas velocidades la situación es algo diferente. Para ello consideremos el caso de un parámetro de impacto muy grande tal que la interacción K es muy débil y la probabilidad de transición es pequeña. Entonces podemos escribir $a_p(x) \approx 1$ para toda x y calcular la perturbación aproximada

$$|a_A(\infty)|^2 \approx \left| \frac{1}{v} \int K\left(\frac{x}{v}\right) \cos\left(\frac{\omega x}{v}\right) dx \right|^2 \quad (1.3.54)$$

en la cual $\exp(-i\omega x/v)$ se ha reemplazado por $\cos(\omega x/v)$ puesto que K es una función par de x . La función K tiene un ancho efectivo en x del orden de varias dimensiones atómicas (es decir, valores del radio de Bohr). Supongamos que " a " sea una dimensión que caracteriza el intervalo de K en x [50], entonces como la velocidad del ion se reduce en el punto en donde $(\omega a/v) \approx 1$, las oscilaciones

de $\cos(\omega x/v)$ también se reducen severamente a pesar del factor pre-integral de $1/v$ que actúa muy débilmente en la dirección opuesta. A bajas velocidades en donde $\omega a/v \gg 1$, $|a_\lambda(\infty)|^2$ decae rápidamente conforme decrece v . Así, entre estos valores de la velocidad y a una velocidad muy cercana a la que puede ocurrir una oscilación entre $x=-a$ y $x=+a$, se obtiene la probabilidad máxima de transferencia de carga a un parámetro de impacto grande, $b \gg 1$. Esto determina la condición de que el valor máximo de la sección transversal se obtenga si se cumple:

$$\omega a/v = a|\Delta E|/\hbar v \approx 1$$

(1.3.55)

la cual está de acuerdo con la teoría "cualitativa" adiabática propuesta por Massey, [24].

II.1.- DESCRIPCION DEL APARATO.

El aparato empleado para llevar a cabo esta investigación fue el acelerador de bajas energías (0.5-5.0 keV) del laboratorio de colisiones del Instituto de Física de la UNAM, ubicado en el laboratorio de Cuernavaca y cuyo esquema se muestra en la figura II.1.

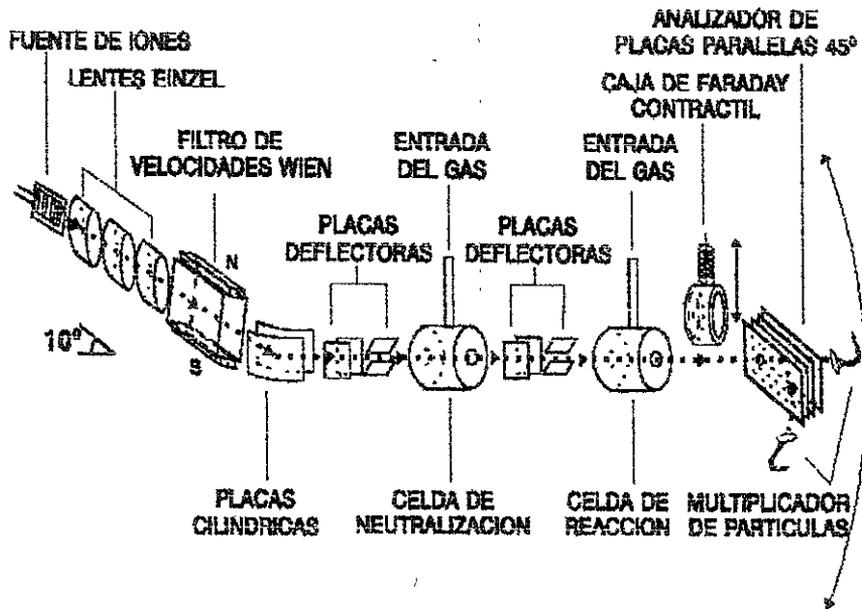


Figura II.1.- Esquema del Acelerador.

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

II.1.1.- SISTEMA DE VACÍO.

Una cuestión fundamental en los experimentos de colisiones entre sistemas atómicos es el vacío ó presión del gas residual a través del cual se desplazan el proyectil y los productos de la colisión. La idea básica de contar con un buen sistema de vacío es garantizar que el proyectil incidente mantenga su identidad desde que éste se produce en la fuente de iones hasta que llega a la celda de reacción, en donde se lleva a cabo la interacción con el blanco, y, posteriormente, desde que se generan los productos hasta que éstos son detectados en la cámara de detección. Para lograr esto es necesario contar con un sistema de vacío que mantenga la presión en el interior del acelerador lo suficientemente baja, como para que el proyectil y los productos tengan un camino libre medio $\langle l \rangle$ mucho mayor a la longitud que hay entre el lugar donde se producen los iones y el sistema de detección; además ayuda a reducir eventos no-deseables que se registran en los detectores. Para encontrar la presión de operación se hace uso de la ecuación de camino libre medio del haz:

$$l = (\sigma\eta)^{-1} \quad (2.1.1)$$

con η el número de partículas por unidad de volumen del gas residual y σ la sección transversal de colisión del proyectil con dicho gas. Típicamente estas secciones son del orden de 10^{-16} a 10^{-15} cm^2 y el camino libre medio es del orden de 10 veces mayor a las dimensiones del acelerador cuando la presión del gas residual es de 1.0×10^{-7} Torr [1]. Esta presión es fácilmente

alcanzada con el sistema que se cuenta en el laboratorio, por lo que se garantiza la idea básica de contar con un buen sistema de vacío. Para lograr esto se utilizan tres tipos diferentes de bombas de vacío: mecánicas, difusoras y turbomoleculares. A continuación se describen brevemente las características de estas bombas:

BOMBA MECÁNICA: Con una bomba mecánica se pueden alcanzar presiones del orden 10^{-3} a 10^{-4} Torr [2], que se considera un vacío burdo, pero que sirve de apoyo a una bomba difusora o a una bomba turbomolecular, ya que éstas funcionan mejor cuando la diferencia de presiones entre entrada y salida no es muy grande; el vacío logrado por una bomba mecánica se produce con un rotor inmerso en un aceite especial. Al girar atrapa los vapores de una región y los conduce a una salida, la cual se encuentra a presión atmosférica.

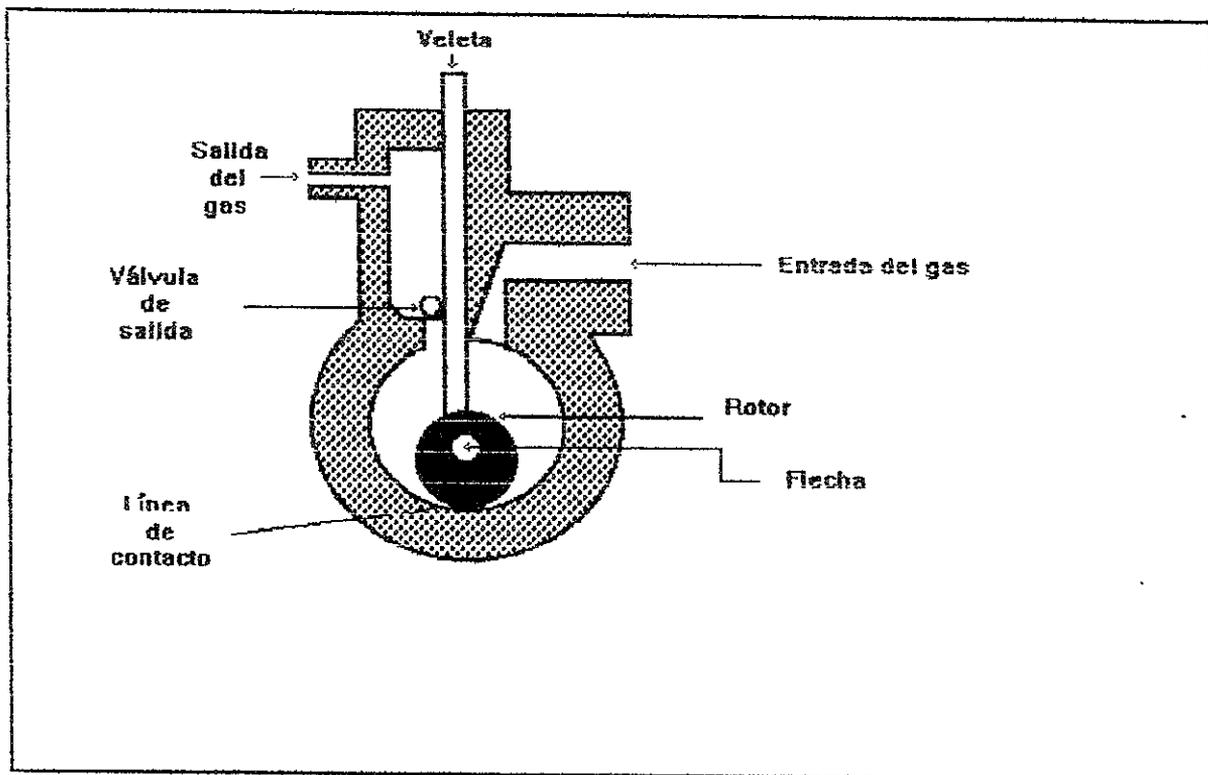


Figura. II.2.- Bomba Mecánica.

BOMBA DIFUSORA: Este tipo de bomba no tiene partes móviles; el gas que se encuentra en el sistema es extraído por medio de flujos de vapor de aceite muy densos que se mueven a alta velocidad, producidos al ser calentado el aceite por medio de una resistencia situada en la parte inferior de la bomba. Dichos vapores se mueven a alta velocidad hacia la salida de la bomba y son condensados en las paredes de la bomba, las cuales son enfriadas por medio de un sistema de agua fría recirculada y una trampa fría. La trampa fría evita la contaminación del sistema al capturar partículas más pesadas que el gas a evacuar, además mejora la velocidad de evacuación. El aceite empleado en la bomba es Corning 750 ó Santovac. Se muestra un esquema en la figura II.3.

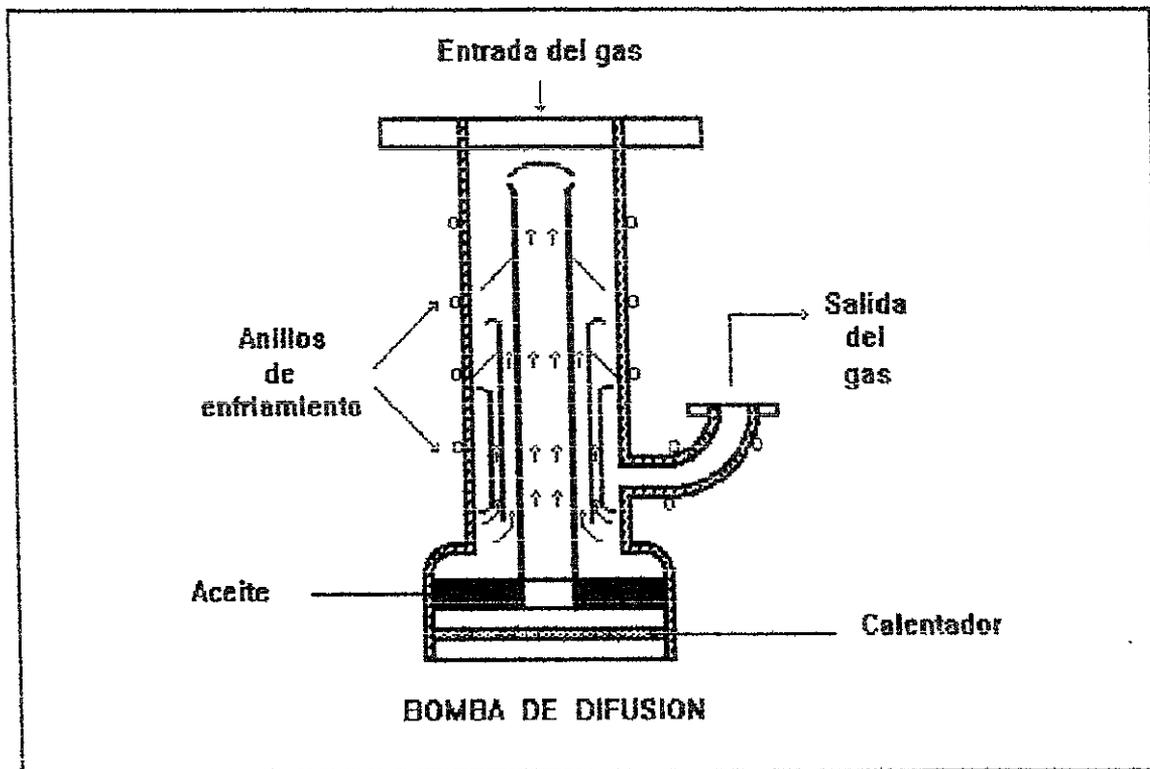


Figura II.3.- Bomba Difusora.

BOMBA TURBOMOLECULAR: Su funcionamiento es parecido al de una turbina y utiliza un sistema de enfriamiento por medio de un flujo de agua fría. En el interior se encuentra un rotor que gira a una velocidad de 36000 rpm [3], el cual tiene sus extremos montados sobre baleros lubricados por aceite para reducir la fricción. Sobre éste se encuentran distribuidas una gran cantidad de aspas, separadas por una serie de discos, los cuales están fijos a la estructura de la bomba y perpendiculares al rotor. El vacío se logra debido a la diferencia de presiones creada al girar las aspas. El intervalo de presiones en el que operan eficientemente estas bombas va de 10^{-3} a 10^{-10} Torr y su funcionamiento no requiere del apoyo de sistemas que puedan contaminar el sistema a evacuar. Se muestra un esquema en la

figura II.4.

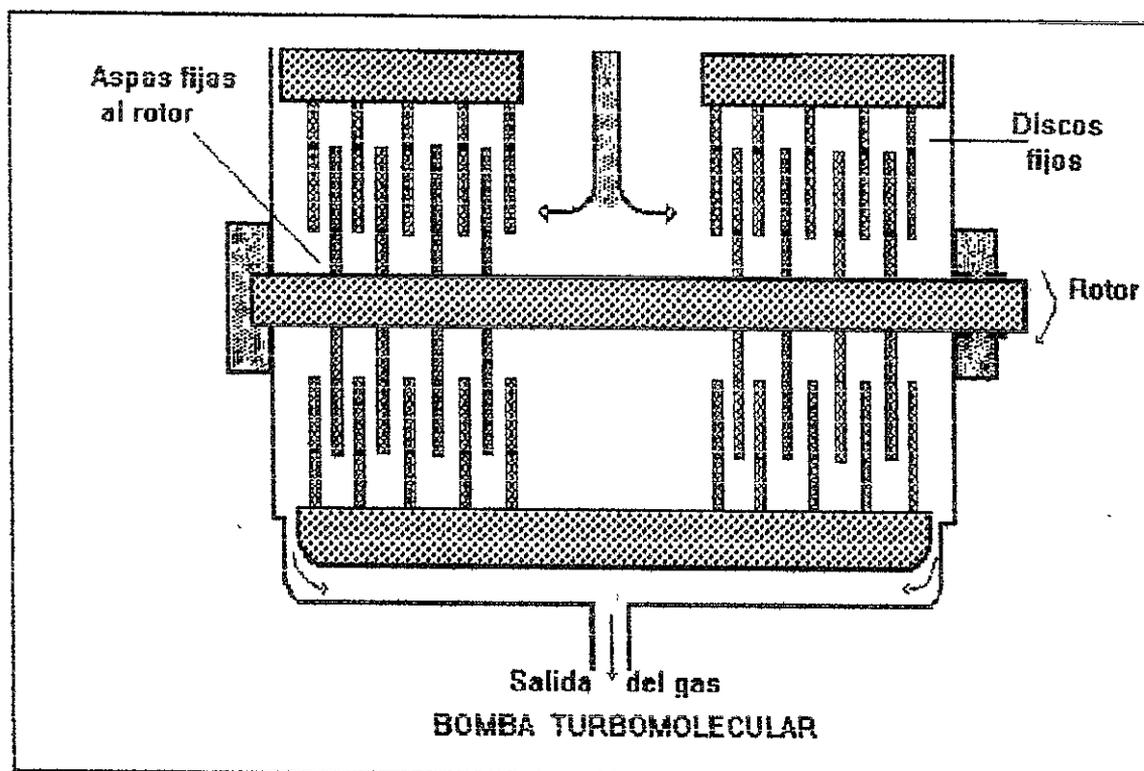


Figura II.4.- Bomba Turbomolecular.

La medición de la presión en las diferentes cámaras del acelerador se llevó a cabo con tres ION GAUGE y sus controladores RG-1000 (ionization gauge) [4], cuyo intervalo de medida es de 2×10^{-3} a 2×10^{-9} torr.

II.1.2.- FUENTE DE IONES.

OPERACIÓN DE LA FUENTE: Otro elemento que forma parte del acelerador y que es de gran importancia es la FUENTE DE IONES debido a que en este lugar es en donde se admite el gas que se desea ionizar. Los diferentes tipos de iones que se generan lo

hacen por medio de una descarga en arco a bajas presiones. La fuente que se empleó en este experimento es una fuente de iones de descarga en arco que se muestra en la figura II.5.

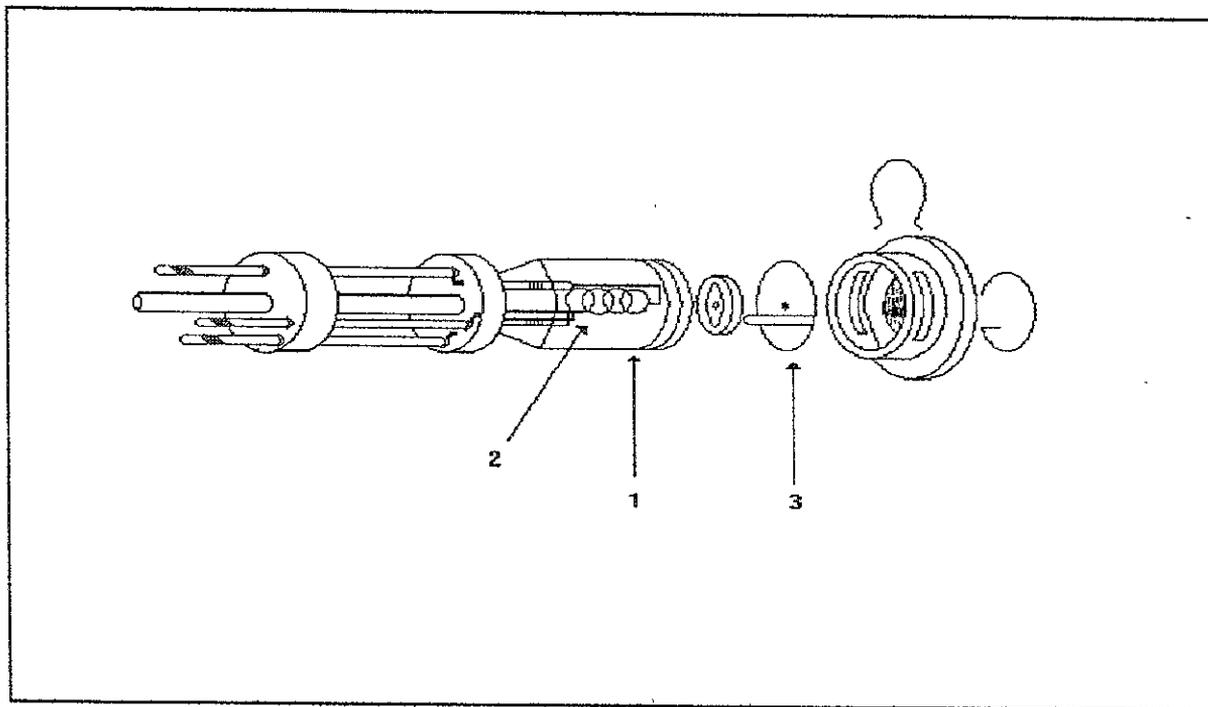


Figura II.5

Los elementos principales de la fuente son:

1.- El cuerpo de la fuente (2), también denominado cámara es el recinto dentro del cual se admite el gas que se desea ionizar. Está hecho de un material higroscópico (nitrito de Boro) de poca resistencia a esfuerzos mecánicos, pero con la característica de resistir altas temperaturas, lo que le permite funcionar como horno para la producción de iones de vapores metálicos, además de producir también iones a partir de elementos gaseosos.

2.- El filamento, es de tungsteno y se conecta a una fuente de corriente para que por emisión termoiónica se obtengan los

electrones responsables de la ionización.

3.- Anodo. 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. Este voltaje es tal que la energía que proporciona a los electrones es suficiente para que éstos logren ionizar a los átomos ó moléculas del gas que se encuentra dentro de la fuente. En la figura II.6 se encuentra el esquema eléctrico de la fuente de iones.

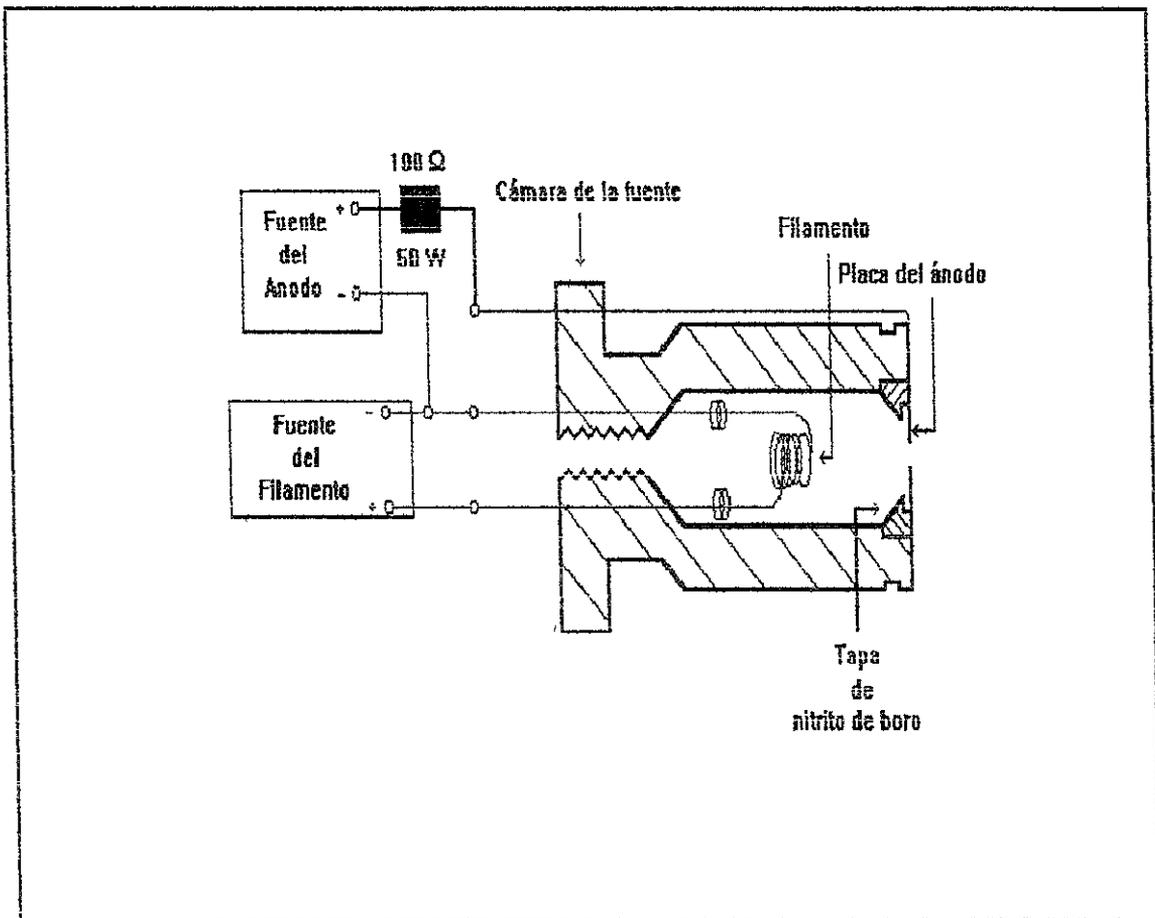


Figura II.6. Esquema eléctrico de la fuente de iones.

La manera como funciona esta fuente es la siguiente: el gas admitido dentro de la misma se ioniza cuando el filamento de tungsteno (3) se le hace pasar una corriente de aproximadamente 15-16 A; esto hace que el filamento se ponga incandescente y emita una gran cantidad de electrones (emisión termoiónica). Cuando se aplica una diferencia de potencial entre ánodo (4) y filamento (cátodo), los electrones adquieren la energía necesaria para ionizar los átomos de Kr. Cuando esto ocurre, se forma un plasma de descarga; es en estas condiciones en las que se produce el ion Kr^+ .

II.1.3.- ACELERACIÓN, ENFOQUE Y SELECCIÓN DE IONES.

- LENTES EINZEL.

De la misma manera que una lente óptica puede hacer que los rayos luminosos que inciden en ella convergan en un punto, una lente electrostática puede enfocar un haz de partículas cargadas. Así como en la óptica existen lentes delgadas y gruesas, de igual forma existen lentes electrostáticas "delgadas" y "gruesas", correspondiendo las primeras a planos conductores paralelos con una abertura circular en el centro (por donde pasan las partículas cargadas). Aplicando a los planos conductores una diferencia de potencial, de tal manera que en el centro, se curven las líneas equipotenciales, tal y como se muestra en la figura II.7.

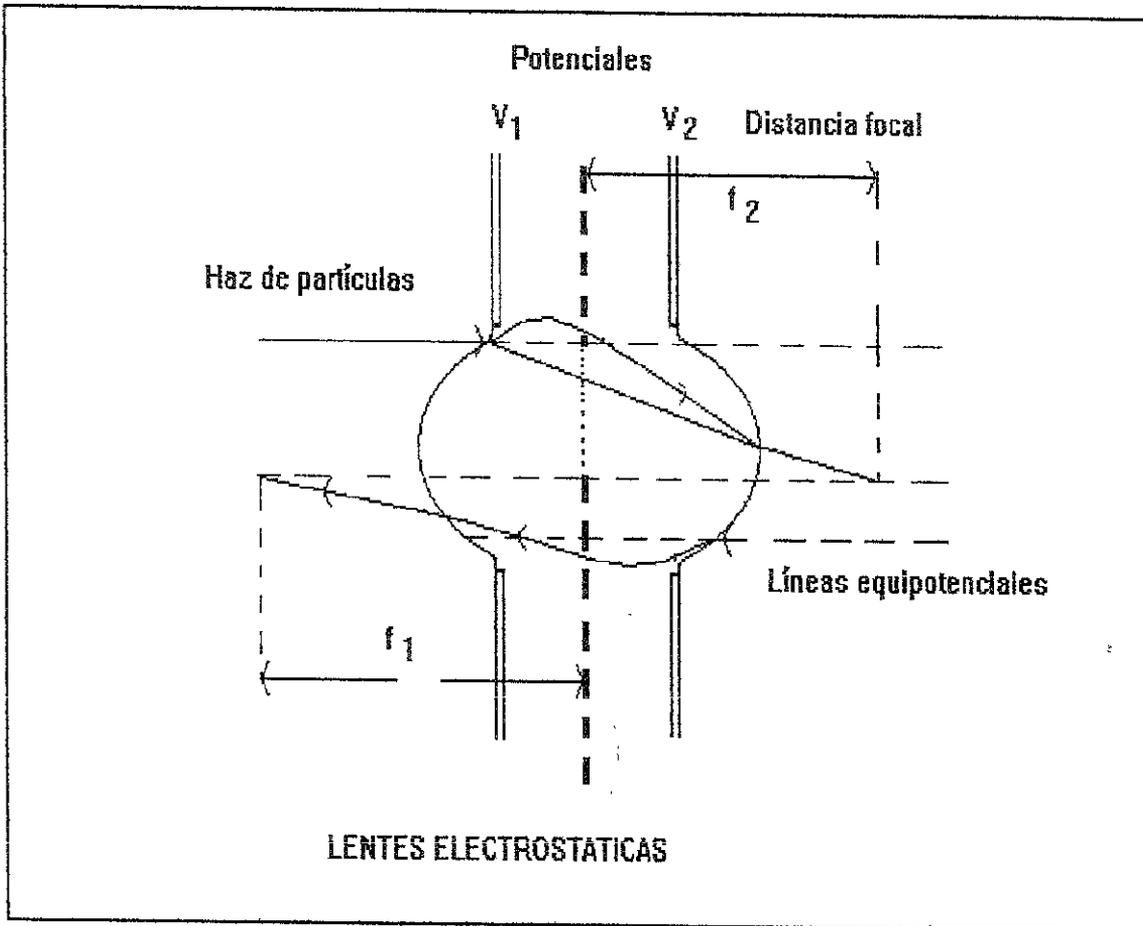


Figura II.7. Geometría de las lentes delgadas.

Las lentes electrostáticas "gruesas" están hechas de secciones de cilindro conductor hueco; la ventaja con respecto a las lentes "delgadas" es que permiten modificar la distancia focal cambiando los potenciales de los electrodos, en vez de mover las lentes. En general, cuando los iones que se forman en la fuente son extraídos de ésta, salen con una componente de velocidad perpendicular al eje del acelerador, lo que ocasiona que el haz presente una dispersión espacial, que en la medida que transcurra el tiempo, también irá en aumento. Con el fin de reducir este efecto, se emplea un sistema que sirve para enfocar o concentrar a las partículas cargadas; éste sistema se conoce

como Lentes Einzel [5] y es de la clase de lente electrostática "gruesa". En la figura II.8 se muestra un esquema de la misma.

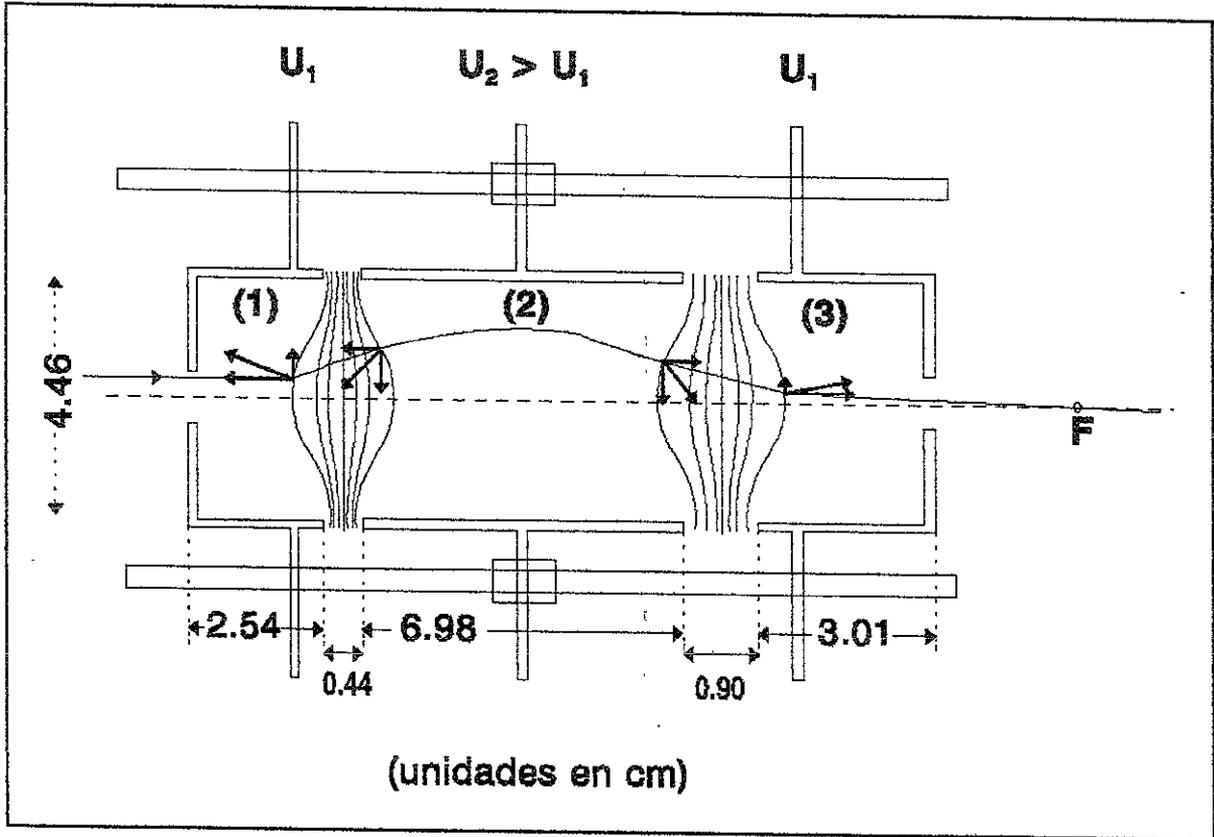


Figura II.8.- Esquema de las lentes Einzel

Se trata de tres secciones de cilindro hueco de igual diámetro, contruidos en acero inoxidable, que se encuentran alineadas sobre un mismo eje. La distancia focal depende de la separación y del voltaje aplicado a éstos. En el presente trabajo, se fijó la separación entre los cilindros, y por lo tanto la distancia focal se puede obtener únicamente en función del voltaje aplicado a cada sección del cilindro. Como se desea no alterar la energía de las partículas al ser enfocadas, el primer y tercer electrodos están al mismo potencial. Esto quiere decir que la distancia focal se determina con el voltaje aplicado al electrodo central,

que puede ser mayor ó menor que el de los otros dos electrodos, modificando la trayectoria del haz para obtener únicamente un efecto de enfoque. En este caso el potencial del electrodo central es positivo y el primer y tercer electrodos fueron conectados a tierra, por lo que las partículas cargadas que salen de la fuente adquieren la energía cinética en la región que se encuentra entre la salida de la fuente de iones y el primer electrodo cilíndrico de las lentes Einzel. La relación entre el voltaje aplicado al segundo electrodo U_e y el voltaje de aceleración U_a es:

$$U_e = 0.84U_a \quad (2.1.2)$$

lográndose con esto que las partículas sean enfocadas a una distancia de 30.0 cm del colimador de la placa del ánodo. El circuito asociado a la lente Einzel se ilustra en la figura II.9.

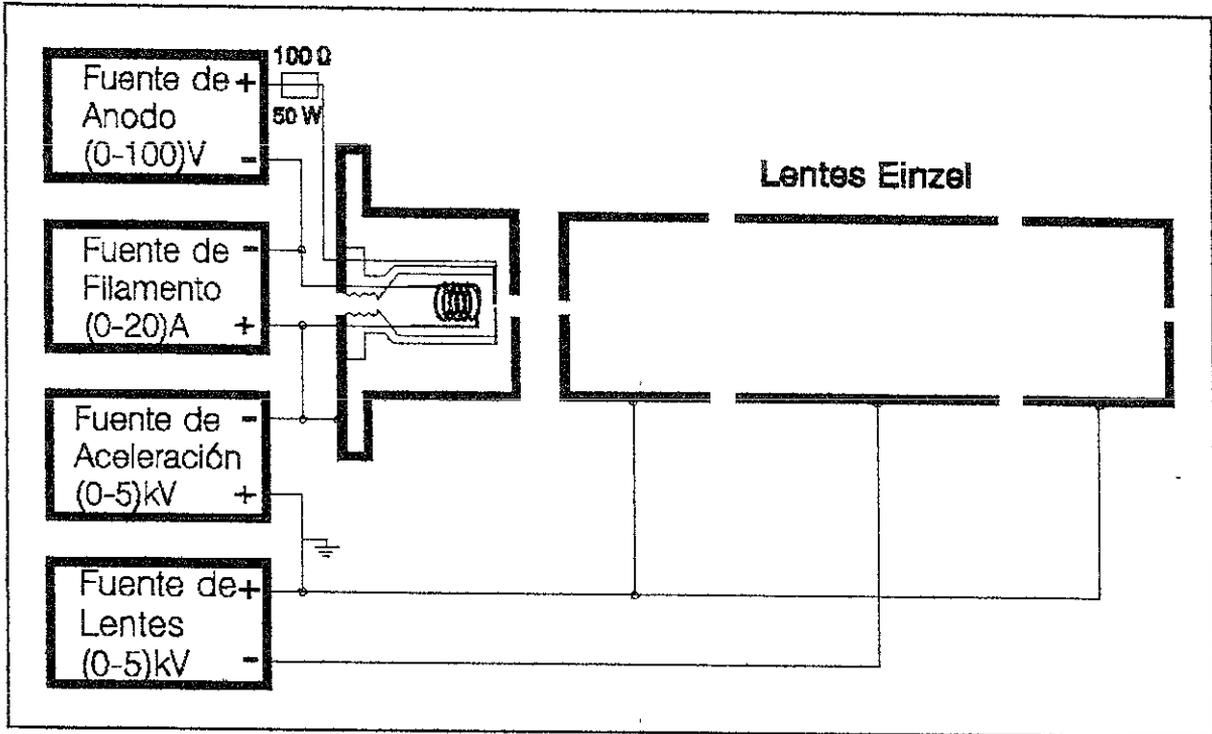


Figura II.9.- Esquema de la lente Einzel y sus conexiones eléctricas.

- FILTRO DE VELOCIDADES.

Después de producir, acelerar y enfocar el haz de partículas cargadas por medio de las lentes Einzel, es necesario seleccionar el tipo de ion que se desea como proyectil, por lo que se requiere de un selector de masas. Esta es la función del espectrómetro de masas; en nuestro caso se hace uso de un filtro de velocidades, conocido como "Filtro de Wien", del cual se proporciona un diagrama interno en la figura II.10, [6].

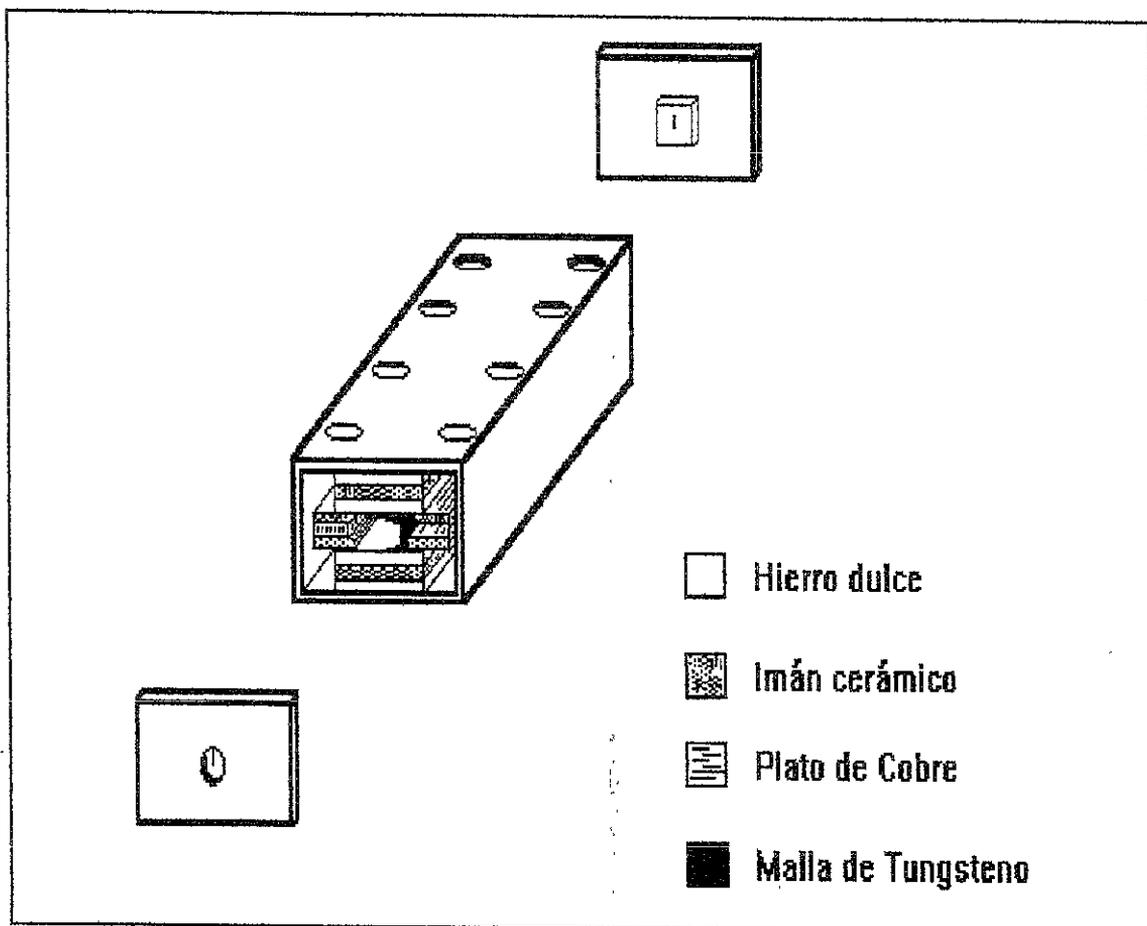


Fig. II.10.- Diagrama del interior del Filtro de Wien.

El Filtro de Wien consiste de un electroimán (el cual proporciona el campo magnético) y un juego de placas deflectoras electrostáticas (las cuales proporcionan un campo eléctrico al aplicarles una diferencia de potencial). La manera como funciona este filtro es la siguiente: se aplica un campo eléctrico y una magnético perpendiculares entre sí y a la dirección del haz incidente como se muestra en la figura II.11.

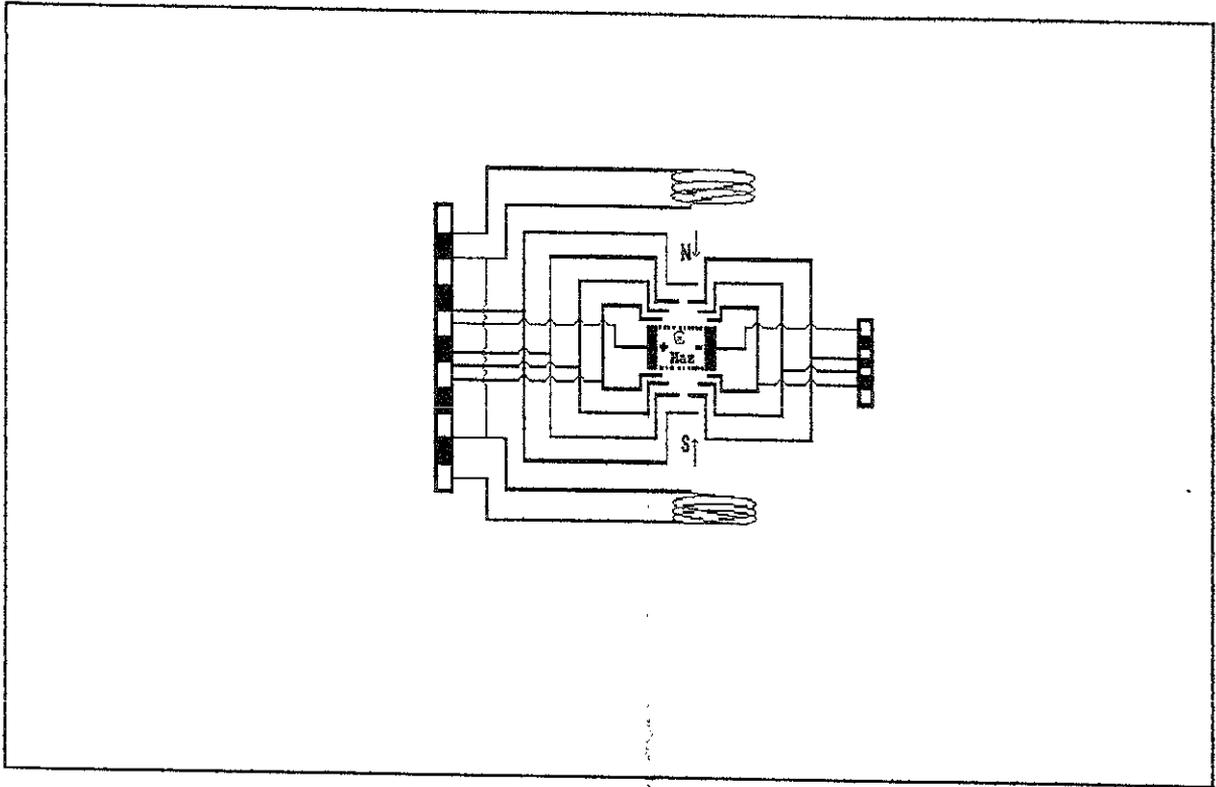


Fig. II.11.- Esquema del Filtro de Wien.

Como es bien sabido, la fuerza que actua sobre una partícula con carga ne^- y que se mueve con velocidad V_0 y que se encuentra bajo la influencia de un campo eléctrico E y uno magnético B , está dada por la fuerza de Lorentz:

$$F = ne^-(E + V_0 \times B), \quad (2.1.3)$$

Es decir, cuando el haz de partículas cargadas pasa a través del filtro con una velocidad V_0 , éste es deflectado por el campo electrostático en una dirección y por el campo magnético en otra. La magnitud de esta fuerza se calcula de la siguiente manera:

Fuerza electrostática

$$F_E = eE$$

(2.1.4)

Fuerza magnética

$$F_M = e(V_0 \times B)$$

(2.1.5)

en 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 (ver fig. II.12). 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:

$$V_0 = \sqrt{\frac{2eV}{M_0}}$$

(2.1.6)

donde V es el voltaje de aceleración y M_0 la masa del proyectil.

Un ion con velocidad y masa V_0 y M_0 , respectivamente, que se mueve a través del filtro como lo muestra la figura II.12, no será deflectado si $V_0 e B = eE$, es decir:

$$B\sqrt{\frac{2eV}{M_0}} = E$$

(2.1.7)

Las fuerzas magnéticas y eléctricas de los campos cruzados que actúan en el ion se equilibran 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:

$$\frac{M_x V_x^2}{R} = e(E - V_x \times B) = eB \left[\sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1 \right]$$

(2.1.8)

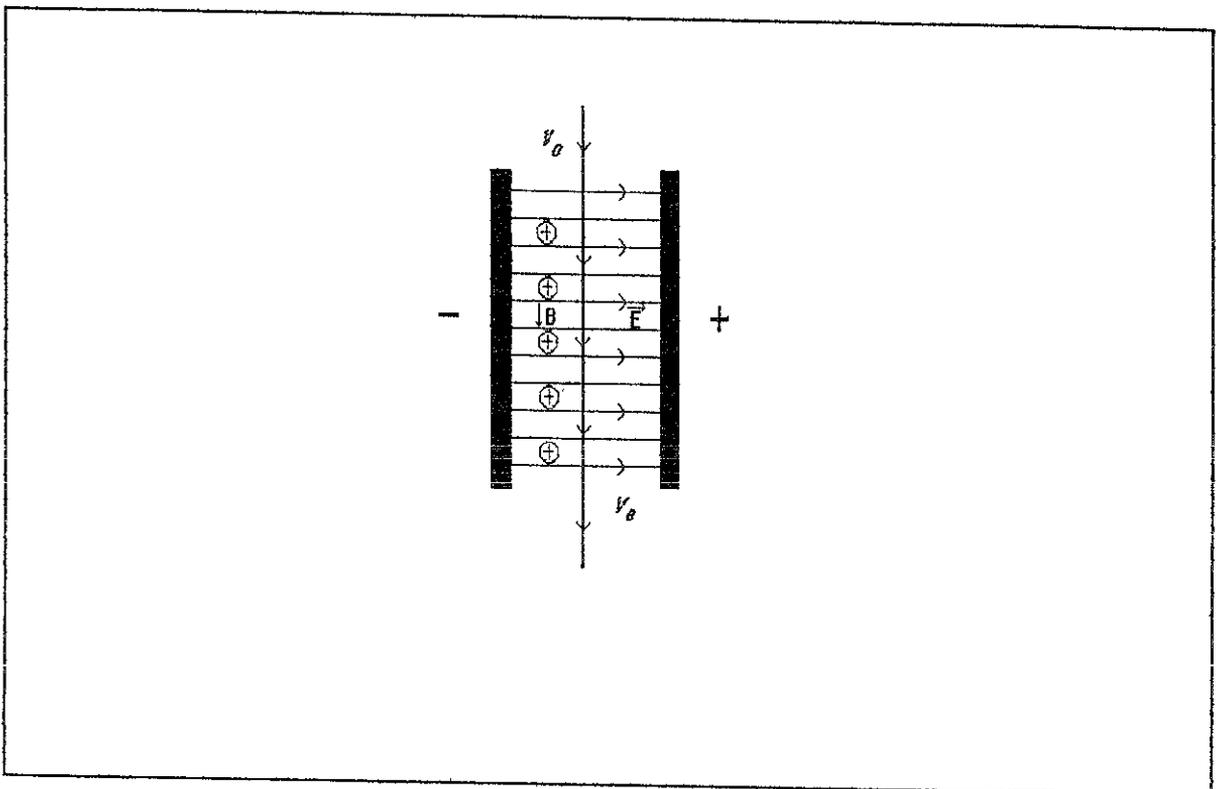


Figura II.12.- Filtro de velocidades visto por arriba.

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

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

(2.1.9)

El esquema de la figura II.13 muestra cómo son separados los iones con masa M_x de los de masa M_0 , que pasan sin ser deflectados.

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 ϕ , entonces para ángulos pequeños se tiene de dicha figura que:

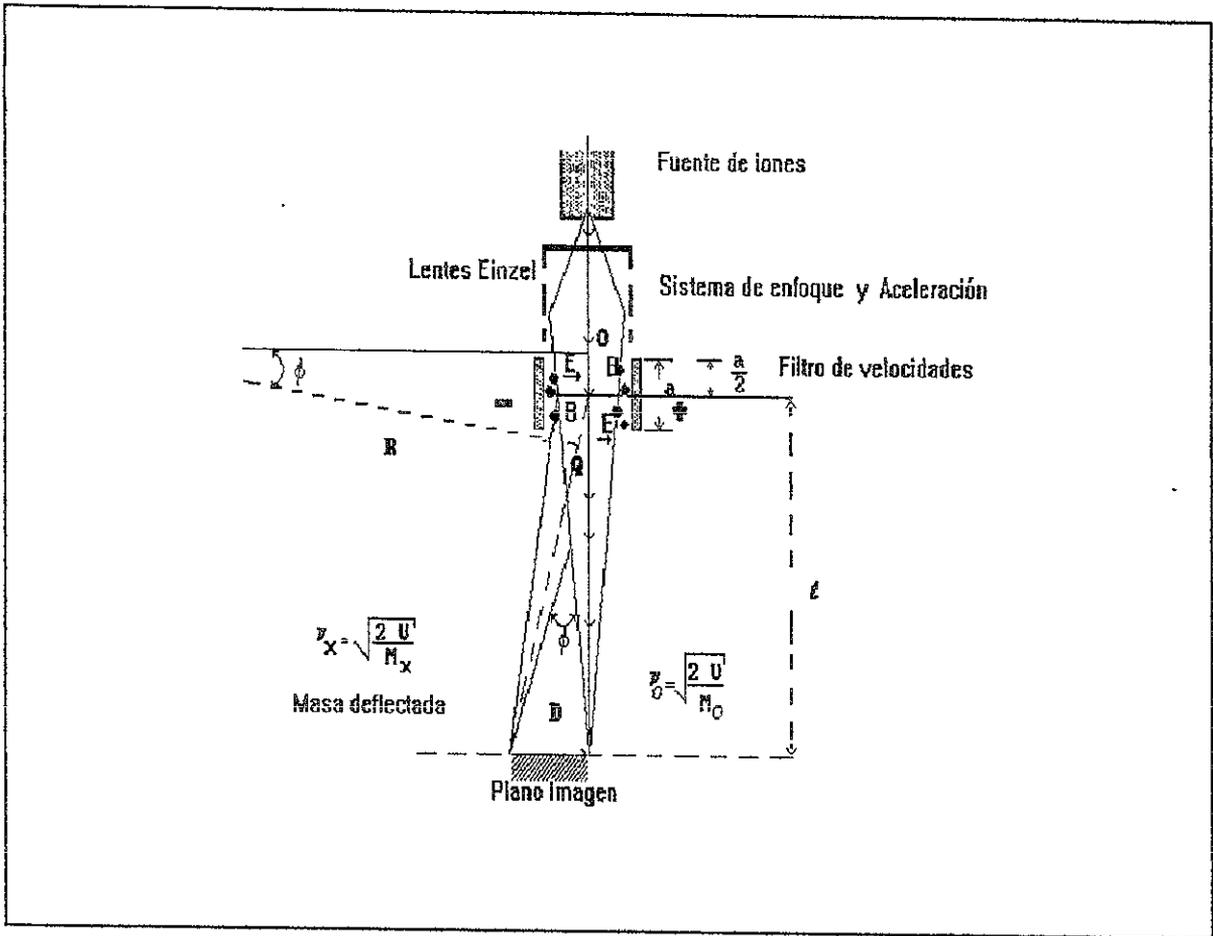


Figura II.13.- Esquema del separador de iones.

$$\text{tang}\phi \approx \text{sen}\phi \approx \phi$$

(2.1.10)

por lo tanto

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

(2.1.11)

de donde se obtiene

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

(2.1.12)

Donde a es la longitud del filtro de velocidades y l la distancia de la imagen al punto P.

La dispersión D está dada en centímetros si a y l lo están, V en volts y $|E|$ en volts/cm, M_0 y M_x pueden estar en unidades de masa.

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

$$M_0 = 2eV \left[\frac{|B|}{|E|} \right]^2$$

(2.1.13)

El campo magnético para una bobina está dado por:

$$|B| = kI$$

(2.1.14)

donde $|I|$ es la corriente de la bobina y k una constante que incluye el número de vueltas, la constante de permeabilidad μ_0 y las características geométricas de la bobina. Por lo que

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

(2.1.15)

o bien si usamos

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

(2.1.16)

entonces

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

(2.1.17)

Manteniendo fijo el campo eléctrico $|E|$ y variando el campo magnético $|B|$ mediante la corriente $|I|$ se obtiene [7]:

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

(2.1.18)

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

Las partículas que componen el haz de iones se recogen en una placa de cobre colocada a la salida del filtro de velocidades. Esta placa está conectada a un picoamperímetro KEITHLEY/ modelo 481 que mide la intensidad de la corriente del haz.

II.1.4.- CELDA DE REACCIÓN.

Después de seleccionar el haz de iones deseado, éste se dirige hacia el lugar en el que se lleva a cabo la interacción con el blanco; este lugar se conoce como CELDA DE REACCIÓN. El haz es conducido dentro del tubo del acelerador por medio de placas deflectoras curvas y placas planas paralelas a fin de hacer alguna corrección en la trayectoria del haz. Como se puede ver en la figura II.14, la celda de reacción para gases es 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, para evitar la dispersión del haz con estas superficies. El colimador de la entrada tiene diámetro de 1 mm y el de la salida tiene un diámetro de 4 mm. El tubo por medio del cual se admite el gas que sirve de blanco también es de acero inoxidable de 3 mm de diámetro interior y sirve a la vez de soporte a la celda de reacción. 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.

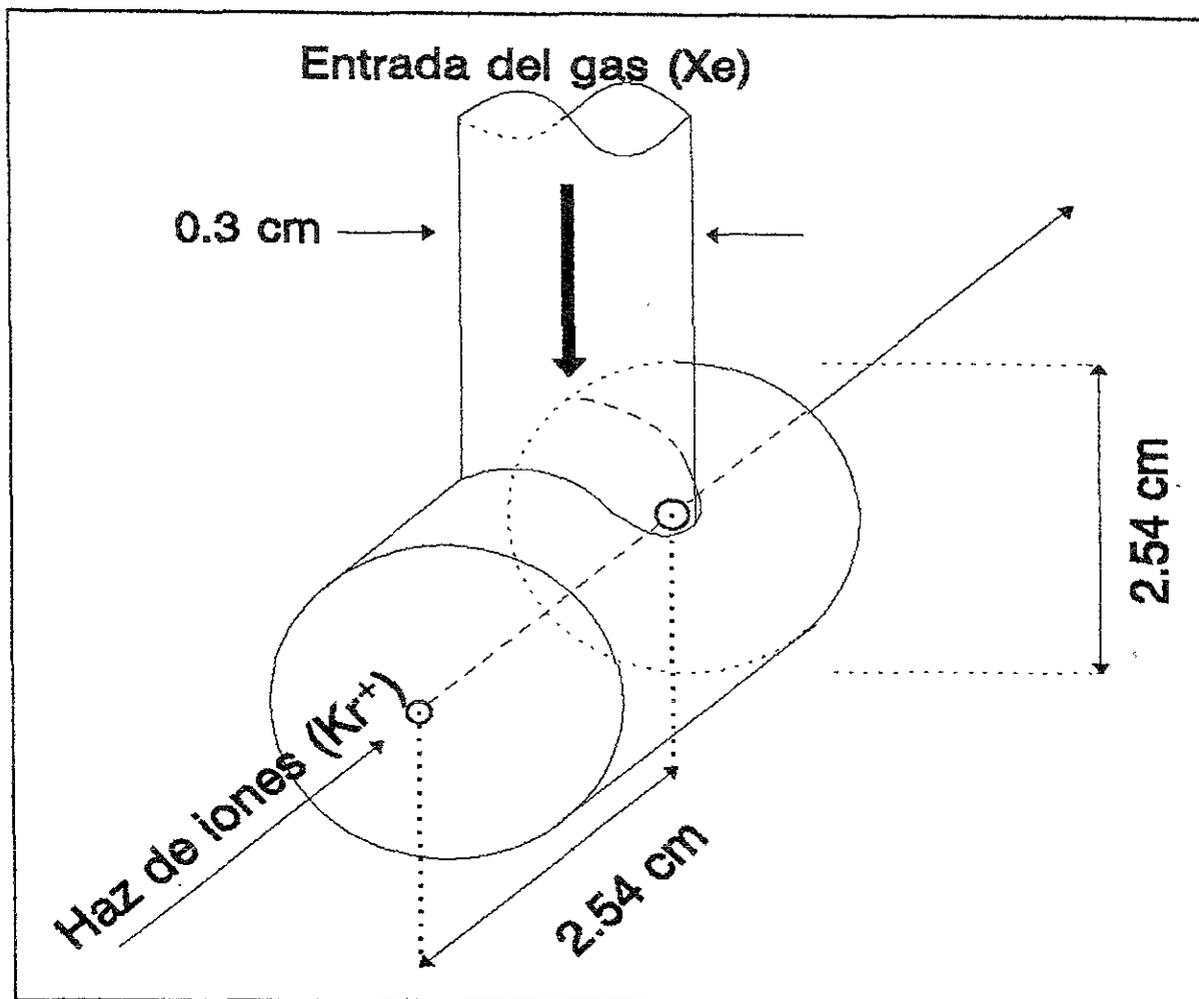


Figura II.14.- Esquema de la celda de reacción.

ESTA VES AL DEL
SALIR DE LA BARRERA

II.1.5.- SISTEMA DE DETECCIÓN.

Después de efectuarse la colisión entre proyectil y blanco, es necesario determinar el número de partículas que perdieron un electrón, así como también el número de partículas que ganaron un electrón después de la colisión. La cantidad de partículas que inciden en el blanco es muy importante, ya que nos permite determinar las distintas fracciones de partículas que se obtienen de los distintos procesos que ocurren en la celda de reacción; por ello es necesario contar con un buen sistema de detección de partículas. En este experimento 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° y dos multiplicadores de electrones.

- CAJA DE FARADAY.

Con el fin de monitorear y optimizar la intensidad del haz de iones, y así medir la corriente de partículas que están incidiendo en el blanco, se cuenta con una caja de Faraday, cuyo esquema se muestra en la figura II.15 [7].

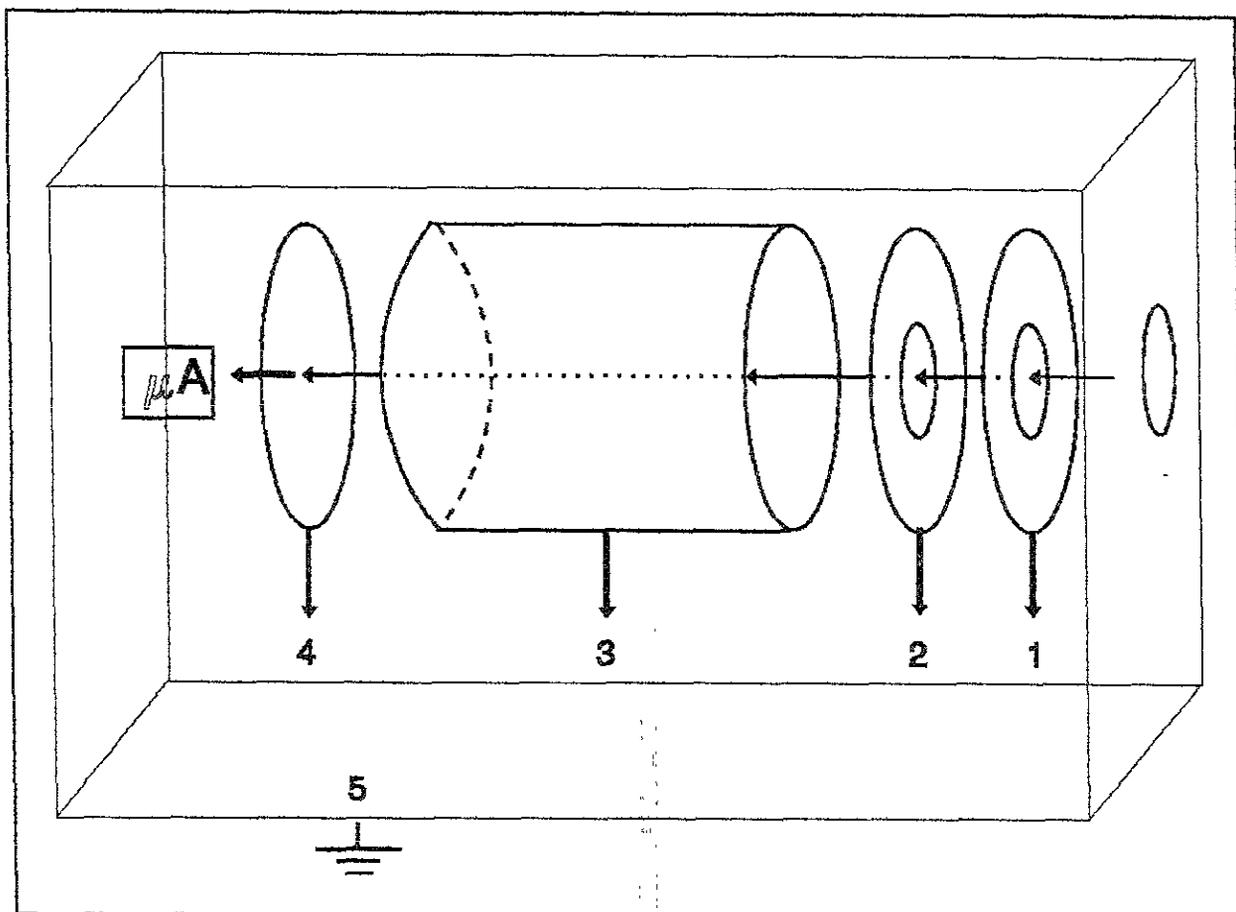


Figura II.15. Esquema de la caja de Faraday.

La caja de Faraday consta de cuatro electrodos de cobre (1-4) y una cubierta protectora de acero inoxidable (5) en forma de caja rectangular conectada a tierra para electrodos de partículas cargadas existentes en el gas residual. La función del electrodo (1) es repeler los iones positivos lentos que forman parte del gas residual, y tiene aplicado un potencial de +45 Volts. El electrodo (2) se encuentra a un potencial de -90 Volts, y su función es evitar que salgan los electrones secundarios producidos dentro de la caja. El electrodo (3) tiene forma cilíndrica y se le aplica un

potencial negativo, en este caso de -310 Volts y su función es regresar a los electrones secundarios que salen de la misma a la placa colectora (4). El electrodo número (4) es la placa colectora que se encuentra conectada a un electrómetro, con el que se mide la corriente de partículas que están incidiendo en el blanco. Las corrientes típicas en esta región son del orden de 10^{-10} a 10^{-8} Amperes. Todos los potenciales mencionados en las líneas anteriores están referidos a tierra. Para determinar el número N_i de partículas incidentes en un determinado tiempo t se utiliza la relación:

$$N_i/t = I_o/e \quad (2.1.19)$$

con I_o la corriente incidente medida en la caja de Faraday, y e la carga del electrón en valor absoluto.

-ANALIZADOR PARABOLICO.

Como se puede ver en la figura II.1 del esquema del acelerador de partículas, a la salida de la caja de Faraday (contráctil) y cuando el haz de partículas llega a la cámara de detección, éste pasa a través de un conjunto de placas paralelas, cuya entrada presenta un ángulo de 45° con respecto a la dirección de incidencia del haz; éste es el Analizador Parabólico. Las dos placas son conductoras, están separadas y se aplica un cierto potencial entre ellas. El analizador fundamentalmente separa las partículas

cargadas del haz y por lo tanto las separa en energía. Así, dependiendo de la energía incidente y del estado de carga las partículas seleccionadas son dirigidas a un detector situado a 90° con respecto a la dirección del haz incidente, dejando pasar a las partículas neutras hacia un detector ubicado en la dirección del haz, como se muestra en la figura II.16.

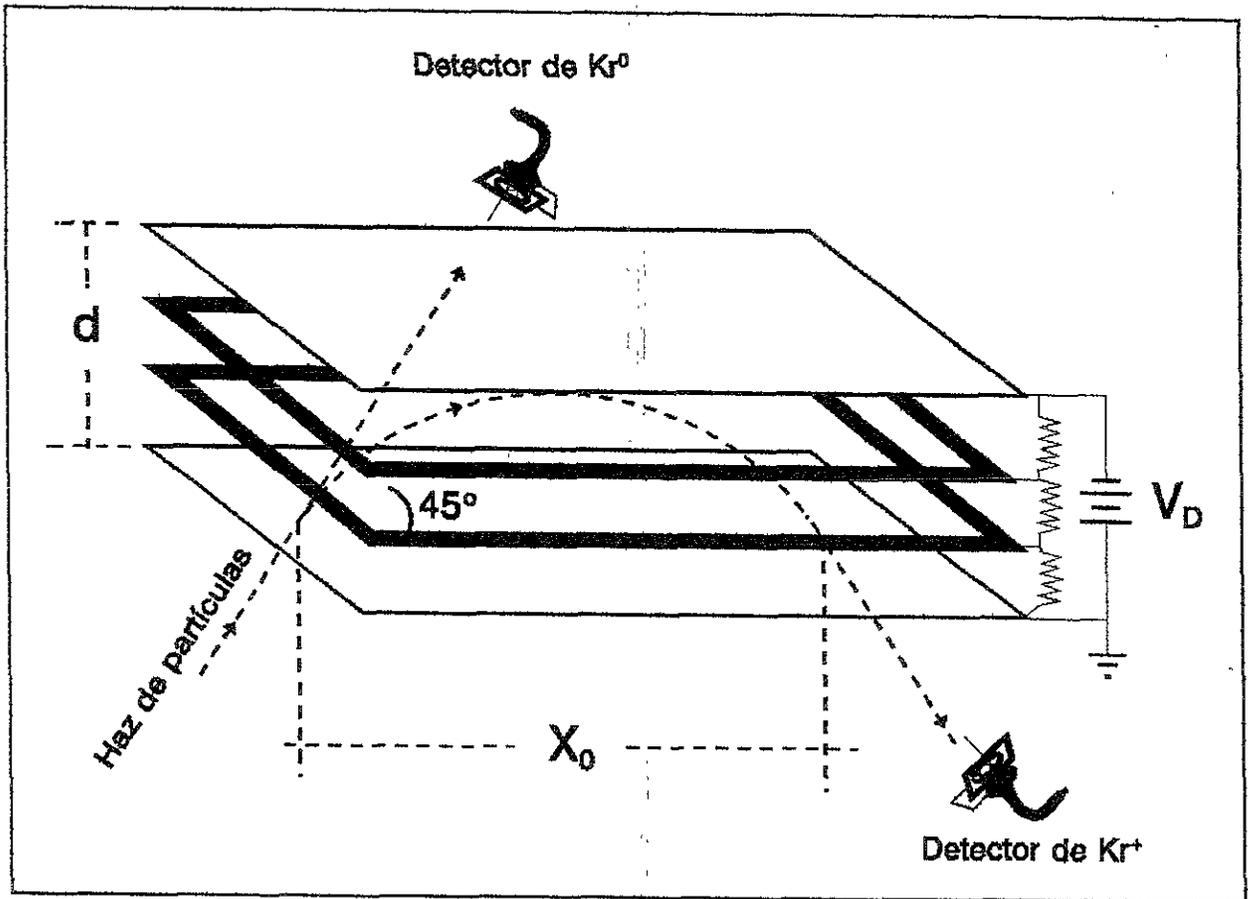


Figura II.16. Analizador Parabólico.

En otro esquema del analizador parabólico, que se muestra en la figura II.17, se puede ver que cuando se aplica una diferencia

de potencial entre las dos placas metálicas, una partícula con carga eléctrica que entra en esta región a un ángulo θ , describe una trayectoria parabólica. Para uniformar más el campo eléctrico entre las placas conductoras y a fin de minimizar el efecto de borde, se intercalan dos placas conductoras intermedias a las cuales se les aplica voltaje a través de una resistencia de 10 M Ω .

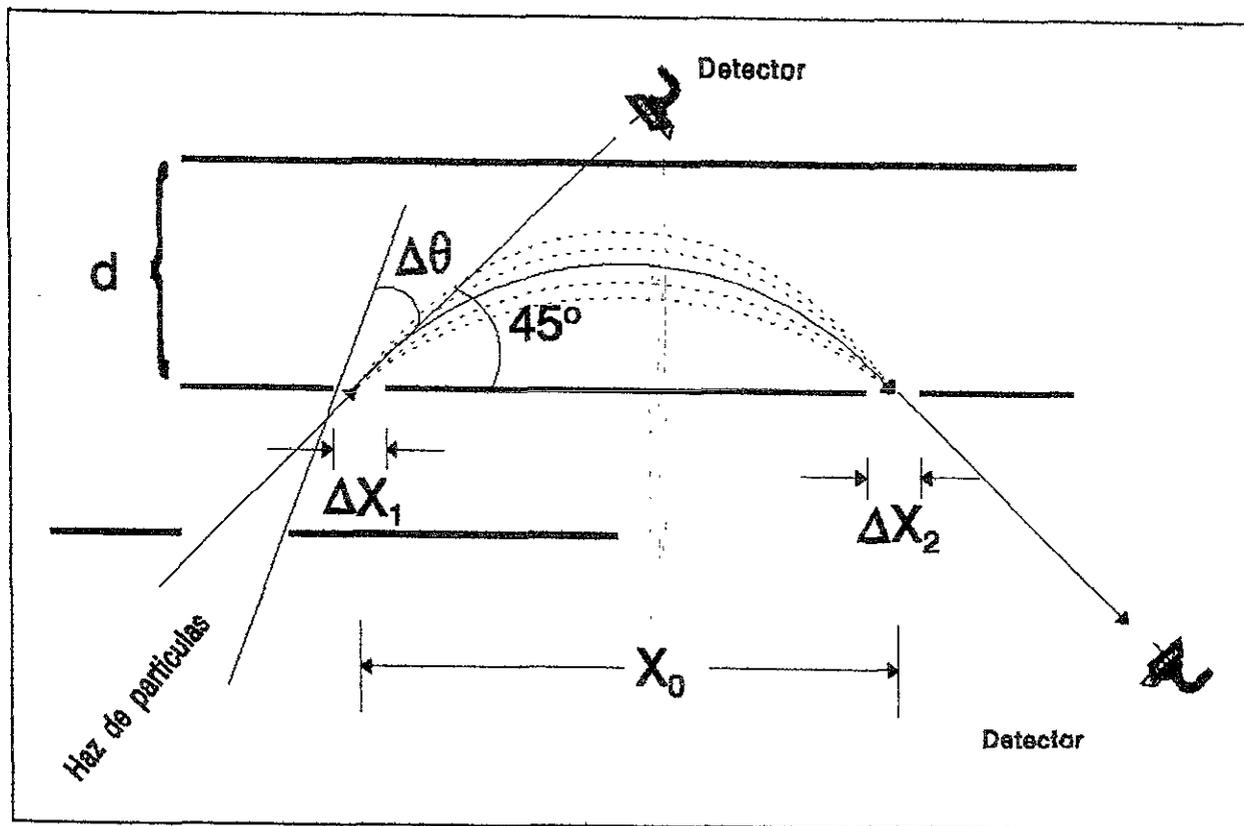


Fig. II.17.- Esquema del analizador de energía de placas paralelas.

Como lo muestra H. G. Harrower en su trabajo [8], este dispositivo tiene la propiedad de enfocar a la salida del analizador a todas aquellas partículas que ingresan con ángulos

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

$$V_D = 2 \frac{d}{X_0} V_a$$

(2.1.20)

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

$$V_D = 0.6 V_a$$

(2.1.21)

Nuestra relación calculada experimentalmente en el laboratorio resultó ser $V_D = 0.632 V_a$ (ver Figura II.18).

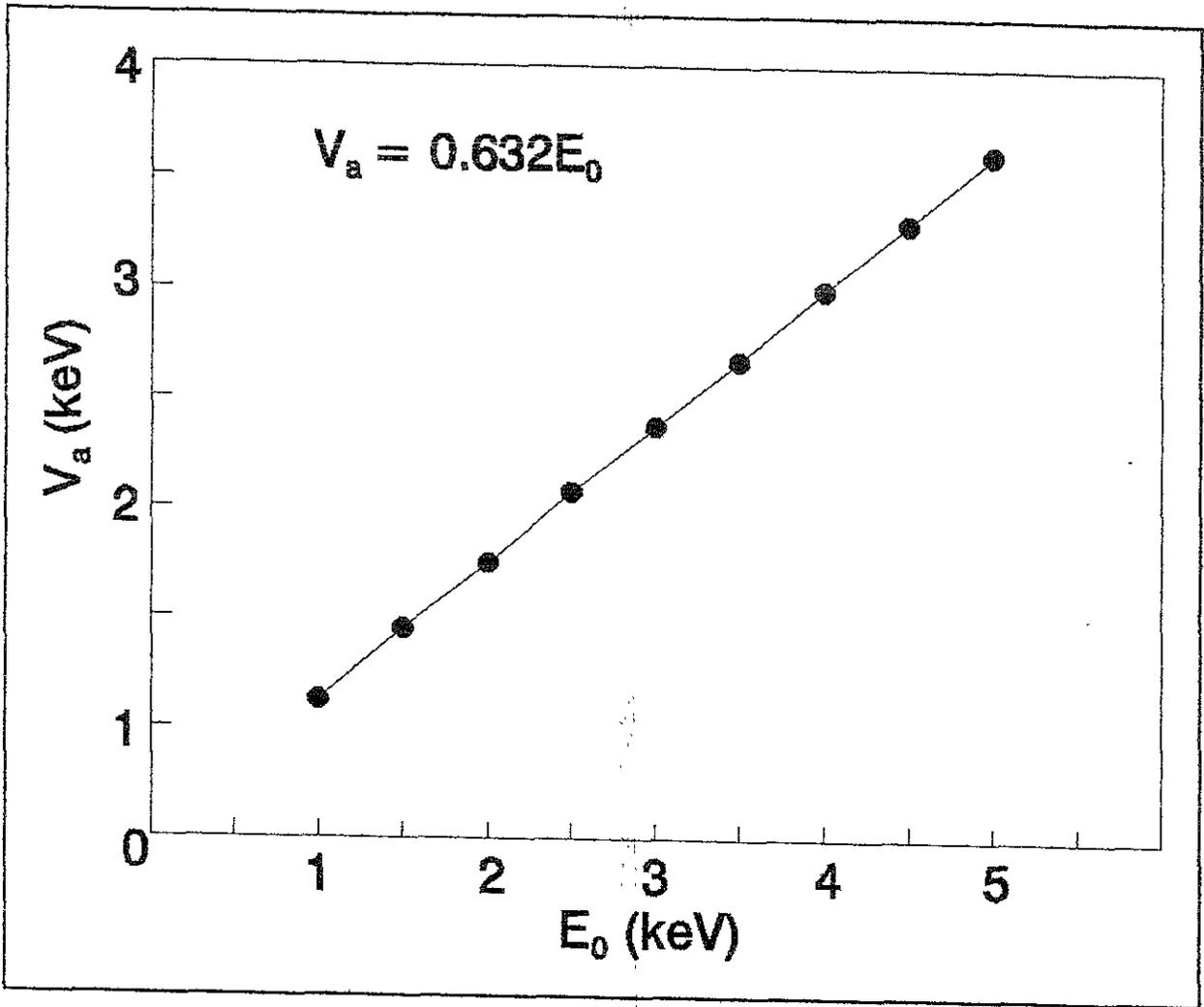


Figura II.18. Recta de calibración de las placas paralelas (separador de productos).

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

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

(2.1.22)

En la figura II.17 se muestran gráficamente las cantidades ΔX_1 , ΔX_2 , X_0 y $\Delta\theta$.

Este analizador también fue calibrado, determinándose experimentalmente la relación entre el voltaje de deflexión V_D aplicado al analizador y el voltaje de aceleración V_a aplicado en la fuente de iones. En este caso se trabajó con el ion Kr^+ en un intervalo de energías entre 1 y 5 keV. Aquí también se obtuvieron gráficas de corriente de iones en función del voltaje V_D . A partir del máximo de estas distribuciones, se construyó la recta de calibración que se muestra en la figura II.18. Al calcular el ancho a la altura media de las distribuciones mencionadas anteriormente, se determinó que la resolución promedio en energía de este analizador es de 4.5%. Esto no quiere decir que se tenga una dispersión tan grande en energía en el haz de iones; el significado de este número es que con las dimensiones de entrada y salida en el analizador, no se puede tener una mejor resolución.

- MULTIPLICADOR DE ELECTRONES.

Dentro del sistema de detección, la última componente importante es el Channeltron (CEM) ó multiplicador de electrones de dinodo continuo. En la figura II.19 se muestra un esquema de uno de ellos, así como la electrónica asociada a su funcionamiento óptimo.

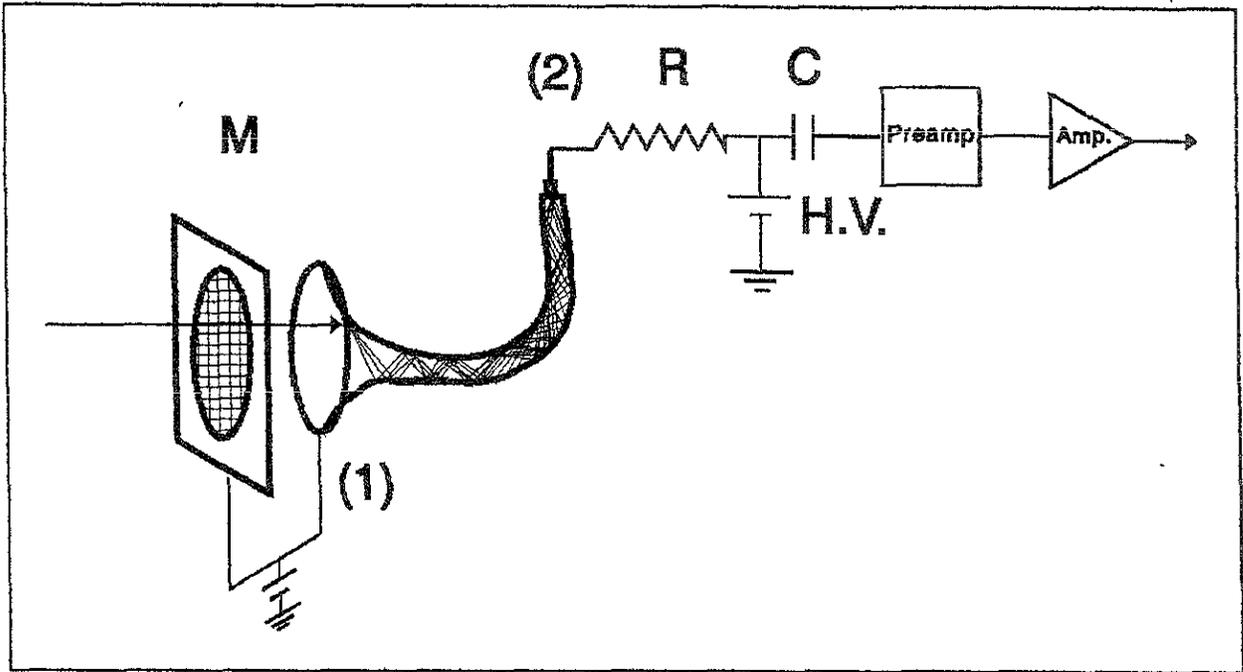


Figura II.19.- Esquema del detector y la electrónica asociada a éste.

La malla M es una fina red metálica con un factor de transmisión cercano al 100%. A esta malla se aplica un pequeño potencial positivo que se encarga de repeler iones lentos que no formen parte del haz, para que únicamente las partículas seleccionadas por las placas deflectoras lleguen a los detectores. El Channeltron [9], 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 una partícula de cierta energía toca la superficie del detector, el recubrimiento semiconductor de éste desprende

electrones secundarios los cuales son acelerados hacia el extremo opuesto del detector debido a la diferencia de potencial existente entre los puntos (1) y (2). El voltaje de operación de estos detectores es de 3000 volts. En su movimiento, los electrones secundarios chocan con la superficie interna del detector arrancando más electrones secundarios; el resultado final es una cascada de electrones que son registrados como un pulso de corriente en el punto (2). Este pulso, es del orden de milivólts, por lo que debe de pasar por una etapa de preamplificación y otra de amplificación, antes de que pueda ser registrado por el contador. Los detectores usados tienen una razón de conteo máxima de 10^5 partículas por segundo.

II.2.- DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO.

II.2.1.- CONCEPTO DE SECCIÓN TRANSVERSAL. SECCIONES TRANSVERSALES DE CAPTURA ELECTRÓNICA DIFERENCIALES EN ÁNGULO SÓLIDO Y TOTALES.

Antes de describir la manera en que se llevó a cabo el experimento, para determinar las secciones transversales diferenciales en ángulo sólido y totales de captura electrónica simple del ion Kr^+ en Xe, se definirán los conceptos de sección transversal diferencial en ángulo sólido y total para un proceso determinado. A continuación se relacionará ésta con los parámetros del sistema controlables y medibles en el laboratorio.

Consideremos el siguiente proceso de intercambio de carga simple:



En él, un ion 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 η_B . Si el ion recorre dentro de este gas una distancia dx , entonces la probabilidad de que ocurra el intercambio de carga será proporcional al producto de la distancia recorrida dentro del gas, multiplicada por la densidad de partículas que hay en el blanco; esto es:

$$P_1 = \sigma \eta_B dx \quad (2.1.24)$$

donde la constante de proporcionalidad σ es la llamada sección transversal del proceso (captura electrónica simple). En el presente trabajo se adopta la convención de que σ_{nm} es la sección transversal total del proceso que hace que la partícula incidente cambie su estado de carga inicial n a un estado de carga final m . Si se considera ahora un haz de iones positivos del tipo A, con una densidad estable n_A incidiendo en el blanco gaseoso, todas con una velocidad v , entonces el número de partículas que intercambian su carga en la unidad de tiempo en un volumen $dV = dA dx$ es:

$$dI_i = \sigma \eta_A \eta_B v dA dx$$

(2.1.25)

Si se supone que las partículas sufren sólo una colisión, es decir, una presión muy baja y una densidad uniforme en el blanco, entonces se tiene:

$$I_i = \sigma \eta_B l \int \eta_A v dA = \sigma \eta_B l I_A = \sigma \bar{\Pi} I_A$$

(2.1.26)

pues $\bar{\Pi} = n_B l$ es el espesor del "blanco". Así, de la expresión (2.1.26) es fácil ver que el valor de la sección transversal del proceso está dada por:

$$\sigma = \frac{I_i}{II I_A}$$

(2.1.27)

la cual tiene unidades de [longitud]².

En el caso de secciones diferenciales en ángulo sólido, la última expresión escrita en términos de los parámetros medibles en el laboratorio es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N^\circ(\theta)}{l \left(\frac{I_A}{e} \right) \left(\frac{P}{KT} \right) d\Omega t C_{eff}}$$

(2.1.28)

donde $N^\circ(\theta)$ es el número de iones que se neutralizaron al capturar a un electrón y se dispersaron a un ángulo θ 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 usa como blanco considerándolo como un gas ideal, con K la constante de Boltzmann; l es la longitud efectiva del blanco; $d\Omega$ es la diferencial del ángulo sólido determinado 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 en un ángulo θ ; C_{eff} es la eficiencia de los contadores de partículas, que es función de la energía de las partículas detectadas, [10].

La sección transversal total está dada por:

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

(2.1.29)

Hasta aquí se ha considerado que el proceso estudiado es el de captura electrónica simple. Si existe interés en conocer las secciones de doble captura electrónica, de acuerdo con la expresión para la sección diferencial, se debe contar el número de iones que durante la colisión capturaron un par de electrones y se dispersaron a un ángulo θ para ser considerados en el cálculo de la sección.

II.2.2.- CANTIDADES DIRECTAMENTE MEDIBLES. DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO.

Antes de empezar a hacer el experimento, se debe asegurar que el sistema de vacío se encuentre trabajando correctamente y que éste proporcione una presión adecuada para llevar a cabo las mediciones. 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 obtener un haz de iones lo menos contaminado posible se desgasifica a la fuente; esto se logra calentando el filamento de Tungsteno mediante el aumento gradual de la corriente que pasa a través del mismo, cuidando siempre que al estar desgasificando, la presión en la fuente no aumente demasiado. Cuando se ha llegado a una corriente de 15 ó 16 Ampers en el filamento y la presión en la fuente es menor a 5 ó 10 μ Torr, se aplica una diferencia de potencial entre el ánodo y el cátodo de aproximadamente 50 Volts. Esto equivale a una corriente de descarga en el ánodo de aproximadamente 0.1 Ampers, suficiente para proporcionar a los electrones la energía necesaria para ionizar el gas que se está admitiendo en la fuente. En este caso particular, se admitió un 100% de gas de Kriptón. El gas hace que la presión en el interior de la fuente aumente hasta un valor de aproximadamente 70 μ Torr

El plasma de arco de descarga es el sistema formado por el gas de electrones (electrones primarios producidos por el filamento y electrones secundarios proporcionados por la ionización del gas),

los iones y las partículas neutras. Al aplicar el voltaje de aceleración, todos los iones positivos que se generaron en la fuente son acelerados y enfocados por medio de las lentes Einzel (ver Fig. II.8). En éstas, el primer y el 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 si el campo eléctrico se mantiene constante (por ejemplo, al aplicar una diferencia de potencial a las placas de aproximadamente 200 Volts), entonces, la selección del ion se realiza variando la corriente que circula por las espiras del electroimán.

Como se puede apreciar en la figura II.1 del esquema del acelerador, éste no está perfectamente alineado en un sólo 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 ella. La fuente de iones, las lentes Einzel y el filtro de velocidades se encuentran alineados a un ángulo que forma 10° con respecto al resto del acelerador. Para corregir la dirección del haz de iones se cuenta con unas placas deflectoras cilíndricas a las que se les aplica una diferencia de potencial de aproximadamente 150 Volts por cada Kilovolt de energía de aceleración. Para optimizar la corriente se cuenta con la ayuda de una placa de cobre que al girar se interpone al paso del haz, o simplemente puede dejarlo pasar libremente. Esto se logra variando el potencial aplicado al segundo electrodo de los lentes Einzel y

cambiando la corriente en el electroimán del filtro. Así, el haz es dirigido a través del tubo del acelerador por medio de placas planas y paralelas que lo desvían horizontal ó verticalmente para que de esta manera, pase por el colimador que se localiza a la entrada de la celda de reacción.

Antes de admitir el blanco en la celda de reacción, se debe de medir la corriente total del Kr^+ que se está haciendo incidir en la misma para poder medir secciones absolutas. La corriente tarda, en algunas ocasiones, en estabilizarse un poco debido a que no hay equilibrio entre el flujo de gas que se está admitiendo en la fuente de iones y el flujo de gas que es desalojado por el sistema de vacío. Las corrientes típicas de Kr^+ con las que se trabaja son del orden de 10^{-10} Amperes 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 usará como blanco. Para este trabajo se empleó Xe a una presión en la celda de 4×10^{-4} Torr ya que a esta presión se garantiza que el proceso se encuentra dentro del régimen de colisión simple [11]. La presión se mide con un barómetro capacitivo que mide la presión a través de la capacitancia que hay entre una placa conductora y un diafragma que se acerca ó 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 de $20^\circ C$ con variaciones mínimas.

Las distribuciones angulares se realizan con la ayuda de un motor de pasos que se encarga de mover al sistema de detección. Los

ángulos de dispersión son en general pequeños y por tanto las distribuciones angulares casi nunca se hacen a ángulos mayores a ± 675 pasos del motor ($\pm 7^\circ$), ya que los iones de Kr^+ que interaccionan con Xe lo hacen a parámetros de impacto relativamente grandes, por lo que estos conservan casi inalterados su energía.

Con el analizador parabólico es posible hacer simultáneamente las distribuciones angulares para los procesos de captura electrónica simple y doble sin algún esfuerzo adicional.

El número de partículas neutras o cargadas dispersadas a un ángulo determinado se cuentan con los multiplicadores de electrones. Los detectores usados generan una cascada de aproximadamente 10^8 electrones por partícula. Con esta cascada se crea un pulso eléctrico a la salida del detector, el cual es registrado por el sistema electrónico asociado al contador. Dicho sistema consta de un preamplificador, un amplificador lineal, un escalador y un medidor de tiempo. Con este dispositivo se cuenta el número de partículas dispersadas a un cierto ángulo durante un intervalo de tiempo predeterminado.

En el proceso de medición se pueden presentar alteraciones bruscas en la intensidad total que se proceden a desecharlas. Se estima que los cambios en la intensidad total del haz para una misma medida son generalmente menores al 10%.

II.2.3.- CÁLCULO DE SECCIONES TRANSVERSALES DIFERENCIALES EN ÁNGULO Y TOTALES. ERRORES EXPERIMENTALES.

Las cantidades directamente medibles en el laboratorio y que juegan un papel importante en el cálculo de las secciones transversales diferenciales y totales son las siguientes: la corriente total de iones Kr^+ que se hace incidir sobre el blanco (I_A); la presión del gas que se usa como blanco, medida en la celda de reacción (P); la temperatura del gas que se usa como blanco (T); la longitud efectiva de la celda (l); el diferencial de ángulo sólido ($d\Omega$); el tiempo durante el cual se registran los productos(t) y el número de productos registrados (N). En el caso del número de iones Kr^+ que inciden en el blanco (I_A), éste presenta variaciones en su intensidad durante el tiempo en que se hacen las mediciones de las distribuciones angulares. Las variaciones se deben a la cantidad de parámetros involucrados en su obtención y el tiempo empleado para la toma de una serie de datos de intensidad vs. ángulo. Este tiempo es de aproximadamente 30 a 80 minutos, por lo que al terminar la toma de datos y medir nuevamente el número de iones Kr^+ que inciden en el blanco, se obtiene en general un valor distinto al que se tenía al inicio. Cuando el número de iones Kr^+ registrado al final de la toma de datos difiere en más del 10% del valor inicial los datos son analizados, o éstos se deshechan, lo que constituye el criterio de asignación de incertidumbre a la corriente I_A [11].

Aun cuando el control electrónico del barómetro capacitivo presenta la lectura de presión con 4 dígitos, el último de ellos es

inestable durante el intervalo de tiempo en el que se registran los productos en la cámara de detección. Aunque generalmente la presión no varía significativamente mientras está corriendo el experimento, únicamente se consideran significativos los tres primeros dígitos. La resolución de una parte en 10^3 que corresponde con el máximo error relativo garantizado por el fabricante es lo que se considera como error asociado a la lectura de presión de la celda de reacción, es decir, 0.1% [12].

Para el cálculo de secciones transversales interviene la temperatura T del gas en la celda de reacción. Se supone que éste se encuentra a la temperatura ambiente, la cual es bastante estable ya que la construcción del laboratorio no permite variaciones mayores al 2% [13].

La magnitud l es la longitud recorrida por el proyectil a través del blanco; para calcular las secciones transversales se reemplaza por la longitud geométrica de la celda de reacción (2.54 cm). Esta aproximación involucra la introducción de un error sistemático menor al 4% [13].

El error relativo estimado para la diferencial de ángulo sólido es del 0.1% y el asociado a los medidores de tiempo (timer) es aproximadamente del mismo orden [14].

El número de partículas registradas por el sistema de detección tiene asociado un error relativo que varía de acuerdo a la distribución estadística de Poisson como $\Delta N = N^{-1/2}$, la cual, para $N > 16$ se hace despreciable junto a la suma de errores relativos debido a todas las demás mediciones. Comúnmente los eventos

registrados fueron del orden de 10^3 a 10^5 lo que hace que este error sea considerablemente pequeño.

Al sumar las incertidumbres porcentuales de todas las cantidades medibles, se encuentra el error porcentual asignado a la sección diferencial debido a las incertidumbres asociadas a los parámetros de las ecuaciones (2.1.28) y (2.1.29) [15]; este error es:

$$\left(\frac{d\sigma}{\sigma}\right) \times 100\% = \left(\frac{dI_A}{I_A} + \frac{dI_i}{I_i} + \frac{dt}{t} + \frac{dP}{P} + \frac{dl}{l}\right) \times 100\%$$

(2.1.30)

en donde las cantidades encerradas en el paréntesis de la relación anterior son los errores relativos asignados a la ecuación (2.1.28). Si se sustituyen los porcentajes dados en la discusión anterior en la ecuación (2.1.30), se encuentra que la precisión correspondiente a las secciones totales es aproximadamente del orden de

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

(2.1.31)

III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

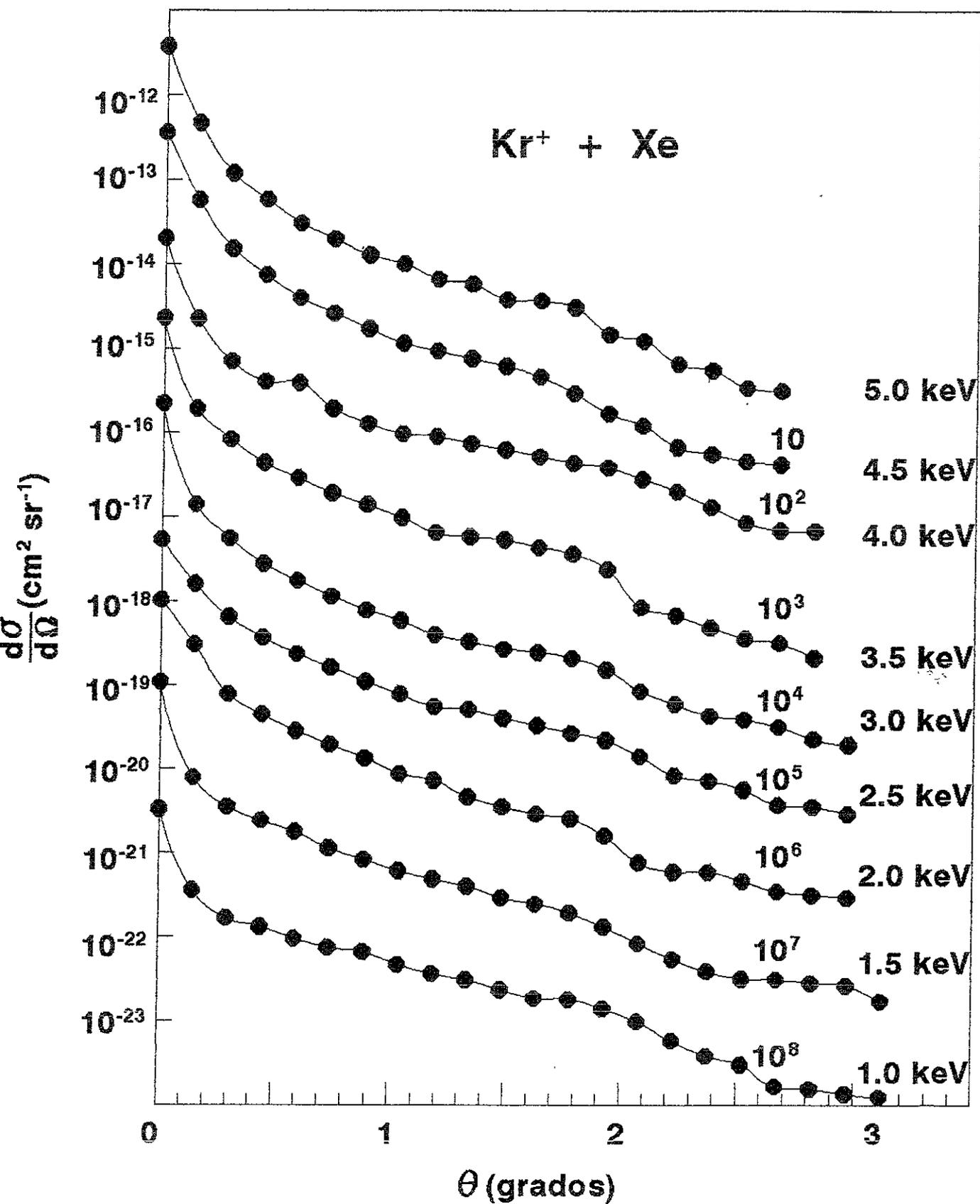
Las secciones transversales diferenciales absolutas se calcularon de la relación:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I(\theta)}{nLI_0}$$

(III.1)

en donde I_0 es el número de iones de Kr^+ que inciden por segundo sobre el blanco; n el número de átomos de Xe por unidad de volumen; L la longitud efectiva de la cámara de dispersión e $I(\theta)$, el número de átomos de Kr por unidad de ángulo sólido por segundo que se detectan a un ángulo de laboratorio θ con respecto a la dirección del haz incidente. Las distribuciones angulares de captura electrónica simple de Kr^+ en Xe se muestran en la figura III.1 en función de la energía del proyectil.

Las distribuciones angulares se midieron en ambos lados de la dirección del haz incidente para confirmar que las distribuciones angulares son simétricas. De las curvas mostradas en la gráfica III.1, se observa que el comportamiento de la sección transversal diferencial es monótona decreciente a medida que se incrementa el ángulo de dispersión, además de hacer notar la presencia de ciertas estructuras.



Gráfica III.1

A manera de entender la información experimental y comprender las interacciones interatómicas responsables de la dispersión, se hace uso de un método de análisis que se basa en ideas semiclásicas. Este consiste en que a dispersiones y ángulos pequeños donde es usualmente la región más conveniente para llevar a cabo observaciones experimentales, es más sencilla la presentación y el análisis de los datos experimentales si se expresa a la energía y a la dependencia angular de la sección transversal diferencial $\sigma(E, \theta)$, en términos de un ángulo de dispersión reducido [1]:

$$\tau = E\theta \quad (\text{III.2})$$

Este a su vez depende del parámetro de impacto b (excepto pequeñas correcciones adicionales si θ es grande), y de la sección transversal reducida:

$$\rho = \theta \text{sen}\theta \sigma(E, \theta) \quad (\text{III.3})$$

que también depende del parámetro de impacto b . Esta representación reducida es útil en procesos de dispersión simple en donde no se ve afectada por patrones de interferencia cuánticos, de ahí su carácter semiclásico. Además, permite deducir el potencial responsable de la dispersión a partir de los datos experimentales.

En el intervalo de energía apropiado a la teoría de dispersión atómica clásica y semiclásica, los datos experimentales de

secciones transversales diferenciales $\sigma(\theta, E)$ y los patrones de interferencia, se analizan convenientemente a través de tales variables reducidas. En la dispersión frontal, el parámetro reducido ρ es el primer término de un desarrollo del tipo $\rho(\tau, E) = \sum E^{-n} \rho_n(\tau)$ en donde las $\rho_n(\tau)$ se obtienen por la eliminación del parámetro de impacto b del desarrollo de la función de dispersión clásica $\tau(b, E) = \sum_n E^{-n} \tau_n(b)$ [3]. Los datos experimentales de colisión de retroceso se analizan a través de desarrollos tales como $\sigma(\theta, E) = \sum_n (\pi - \theta)^{2n} \sigma_n(E)$, derivadas por la eliminación del parámetro de impacto b de desarrollos del tipo $\pi - \theta = \phi(b, E) = \sum_n b^{2n+1} \phi_n(E)$ [3]. Si la dispersión se origina de un potencial $V(r)$, los coeficientes $\tau_n(b)$, $\phi_n(E)$ se expresan en términos de integrales sobre los potenciales que se originan de procedimientos de inversión similares a los de Firsov [4]; por lo que se puede obtener el punto mínimo del potencial a partir de los datos experimentales de dispersión. En conclusión, la derivación de estos desarrollos y su "prueba" sobre varios potenciales de interacción permite describir cómo las variables reducidas se pueden aplicar al análisis y presentación de datos experimentales.

Comunmente se encuentra que el potencial apantallado de Coulomb [3] es la forma analítica adecuada que se puede utilizar para representar una gran variedad de sistemas en colisión. La sección transversal reducida se reproduce en forma en un intervalo amplio de ángulo reducido, de tal manera que permite obtener un valor del parámetro de impacto b para cada valor del ángulo reducido τ . No obstante, en la mayoría de los casos, la dispersión

no es tan sencilla ya que el patrón de comportamiento que se presenta en las secciones transversales diferenciales en ángulo muestra formas oscilantes de diversos tipos que reproducen ciertas características de regularidad generales.

En general, se exhiben patrones de interferencia que pueden ser afines semiclásicamente a la existencia de dos ó más trayectorias resultantes en la dispersión al mismo ángulo observado, y a la misma velocidad final, permitiendo evaluar a qué distancia internuclear se lleva a cabo el proceso de transferencia de carga. Así, el potencial de apantallamiento de Coulomb es una de las aproximaciones más usadas en la interacción ion-átomo [3,4]. Usando este potencial, los parámetros asociados a éste ya fueron deducidos por Lane y Everhart [2], de una serie de experimentos sobre varios sistemas en dispersión, y las secciones transversales clásicas, así como las secciones transversales reducidas ya se han calculado [3,4]. Lehmann y Leibfried [3] han dado los primeros términos del desarrollo en la colisión frontal para el ángulo de dispersión. Los resultados se pueden complementar con los términos iniciales del desarrollo para la acción y la sección transversal reducidas.

El potencial de apantallamiento de Coulomb está dado por

$$V(r) = (BC/r) \exp(-r/c)$$

(III.4)

Si se expresan todos los parámetros de dispersión y funciones en

forma adimensional, se tiene que:

$$\beta = b/c = \sum_n \epsilon^n \beta_n(\tau)$$

(III.5)

$$\epsilon = B/E$$

(III.6)

$$\tau = E\theta/B = \theta/\epsilon = \sum_n \epsilon^n \tau_n(\beta)$$

(III.7)

$$\alpha = \left(\frac{E}{2\mu}\right)^{1/2} \frac{A(E, b)}{BC} = \alpha(\epsilon, \beta) = a(\epsilon, \tau) = \sum_n \epsilon^n a_n(\tau)$$

(III.8)

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

(III.9)

Los tres primeros términos de (III.7) son:

$$\tau_0(\beta) = K_1(\beta)$$

$$\tau_1(\beta) = -K_1(2\beta),$$

$$\tau_2(\beta) = \frac{9}{8} \left\{ \left[1 - \frac{2}{9\beta^2} \right] K_1(3\beta) - \frac{1}{\beta} K_0(3\beta) \right\}$$

(III.7a)

El primer término del desarrollo de $B(\tau, \epsilon)$ es idéntico al inverso de $\tau_0(\beta)$, es decir, la función $B_0(\tau)$ satisface la ecuación $\tau = K_1(\beta_0)$. La función $B_1(\tau)$ es:

$$\beta_1(\tau) = \frac{-\beta_0 K_1(2\beta_0)}{\beta_0 K_0(\beta_0) + K_1(\beta_0)}$$

(III.10)

Los dos primeros términos de (III.9) están dados por:

$$\rho_0(\tau) = \frac{\beta_0^2 K_1(\beta_0)}{\beta_0 K_0(\beta_0) + K_1(\beta_0)}$$

(III.11)

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \psi_1(\tau) = \left[\frac{1}{\beta_0 K_0(\beta_0) + K_1(\beta_0)} \right] \times$$

$$\times \left[(2\beta_0 K_0(2\beta_0) - K_1(2\beta_0) [1 + (1 + \beta_0^{-2}) \rho_0(\tau)]) \right]$$

(III.12)

Para expresar la acción reducida se obtienen primero las funciones:

$$\begin{aligned}\alpha_0(\beta) &= -[K_0(\beta) + \beta K_1(\beta)], \\ \alpha_1(\beta) &= (1/2)[K_0(2\beta) + 2\beta K_1(2\beta)],\end{aligned}\tag{III.13}$$

y entonces el resultado final es:

$$a_0(\tau) = -[K_0(\beta_0) + \beta_0 K_1(\beta_0)],\tag{III.14}$$

$$a_1(\tau) = (1/2)K_0(2\beta_0).\tag{III.15}$$

En conclusión, se pueden encontrar expresiones límites válidas a pequeños y grandes valores de τ usando los desarrollos asintóticos de las funciones Bessel. Cuando β es pequeña y τ es grande, se encuentra que:

$$\rho_0(\tau) = \tau^{-2} - \tau^{-4} [2 \ln(2\tau) - 0.6554] + \dots,\tag{III.16}$$

$$\beta_0(\tau) = \tau^{-1} - \tau^{-3} \left[\frac{1}{2} \ln(2\tau) - 0.0386 \right] + \dots,\tag{III.17}$$

El primer término de (III.16) muestra el comportamiento Coulombiano característico de la sección transversal reducida, y los términos

a mayor orden muestran la desviación debido al apantallamiento exponencial. Cuando β es grande y τ es pequeño, se pueden usar los desarrollos asintóticos de las funciones Bessel para obtener las ecuaciones:

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

(III.18)

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

(III.19)

las cuales se pueden invertir para obtener las expresiones:

$$\beta_0(\rho) = \rho + \frac{1}{2} + \frac{53}{32\rho} \dots,$$

(III.20)

$$\tau_0(\rho) = e^{-\rho} \left(\frac{\pi}{2e\rho}\right)^{1/2} \left[1 - \frac{49}{32\rho} - \frac{2545}{2048\rho^2} \dots\right],$$

(III.21)

F. T. Smith et. al. [1] han calculado y resumido una tabla de resultados de una evaluación de las funciones $\tau = K_1(\beta_0)$, (III.14), (III.11) y (III.12). Ellos han incluido una cantidad adicional, la

cual ha probado ser de gran utilidad en las aplicaciones. Este es un parámetro sin dimensiones que caracteriza el movimiento en τ dependiendo de la energía, de tal forma que el punto importante r_0 permanece constante. Si se define:

$$Z(\epsilon, r_0) = r^{-2} \left(\frac{\partial r}{\partial \epsilon} \right)_{r_0} \quad (\text{III.22})$$

y si se desarrolla en potencias de ϵ , el primer término es:

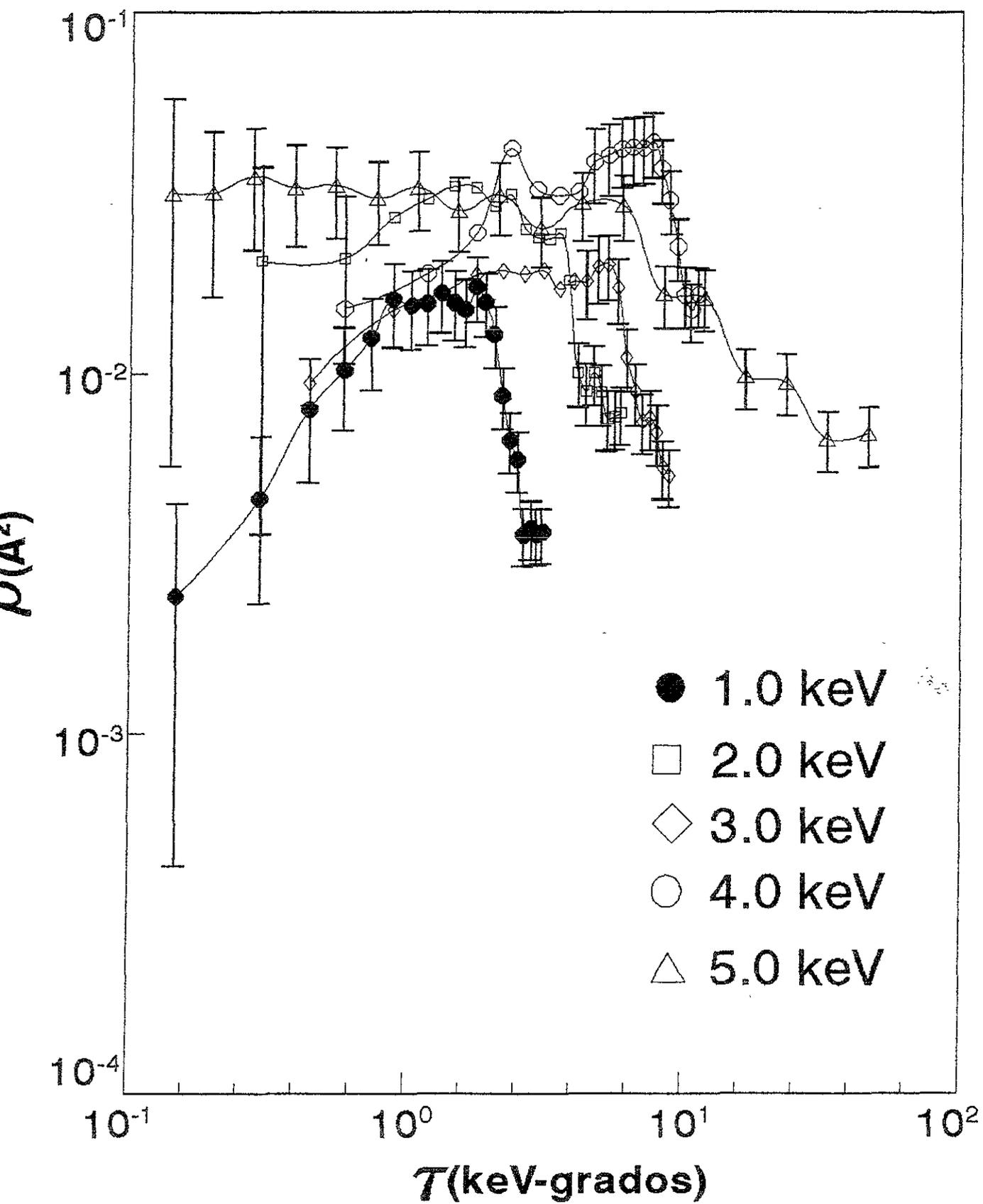
$$Z_0(\beta) = \tau_0^{-2}(\beta) \left[\tau_1(\beta) - \frac{1}{2} \beta \frac{V(\beta)}{B} \frac{d\tau_0(\beta)}{d\beta} \right], \quad (\text{III.23})$$

en donde se tomó $\beta = r_0/c$. Este parámetro que se introduce está en conexión con el estudio detallado de la perturbación en el punto de cruzamiento [4]. La tabla mostrada por F. T. Smith et. al., [1] se puede utilizar para construir el desarrollo en dos términos de $\rho(\epsilon, \tau)$, ec. (III.12), para varios valores de ϵ . Estos autores han llevado a cabo esta evaluación en un número de casos para los cuales se tienen los resultados exactos de Everhart, Stone y Carbone, [5]. Cualitativamente sus resultados son similares a las predicciones de (III.11) y los cálculos muestran que la corrección $\rho_1(\tau) = \rho_0(\tau)\psi_1(\tau)$ es positiva si $\tau \approx 0$ y negativa si $\tau \gg 0$. A causa de la dificultad de la inversión de series que se involucran en los

cálculos, es muy difícil obtener criterios de convergencia para las series (III.8) y (III.9). Sin embargo, Leibfried y Plesser [3] han desarrollado un criterio para el desarrollo frontal y de retroceso para la función $\tau(\rho, \beta)$ y dan una gráfica demostrativa del dominio de convergencia para los dos desarrollos en el plano (ρ, β) . F. T. Smith et. al. [1], usando una integración exacta, han mapeado esos dominios en el plano (ρ, τ) .

En nuestro análisis de datos experimentales, se sabe que en la representación gráfica reducida de éstos, la misma τ_{max} que se observa en las curvas y que se puede determinar experimentalmente, coincide con $\tau_0(\beta)$ dado por (III.19). Se puede entonces calcular β hasta un orden del desarrollo, y por lo tanto del parámetro de impacto, pues $\beta = b/c$ con c del potencial de apantallamiento de Coulomb. Finalmente, $b_0 \approx R_0$, de donde se puede estimar a qué distancia internuclear se lleva a cabo el proceso de transferencia de carga.

En base a esta representación reducida y para obtener una mejor comparación directa de los datos obtenidos experimentalmente a valores diferentes de la energía, se calcularon las secciones transversales reducidas para la captura electrónica simple de iones de Kr^+ en Xe. Estas se presentan en la gráfica III.2, en donde E_0 es la energía de impacto, θ el ángulo de dispersión, y la sección transversal reducida es la cantidad dada por la ecuación (III.3). Para hacer clara la gráfica III.2, las barras de error se trazaron sólo en algunos datos.



Gráfica III.2

Las secciones transversales diferenciales reducidas presentan varias características observadas, las cuales son importantes hacer notar:

a) $\rho(\tau)$ tiene un comportamiento análogo a todas las energías, dentro de la incertidumbre experimental.

b) Se incrementan rápidamente con τ hasta llegar a un máximo, el cual se localiza aproximadamente en $\tau \approx 1.5$ keV-deg.

Este máximo es más pronunciado conforme la energía decrece y es seguido, en algunos casos, por oscilaciones muy ligeras que confirman la existencia de un cruzamiento de curvas, para enseguida decrecer uniformemente. Un valor aproximado de la distancia internuclear R_c es $R_c \approx 1.6a_0$, el cual corresponde a este cruzamiento, determinado a partir del análisis descrito usando un potencial de apantallamiento de Coulomb [1].

c) La cola de las curvas a energías intermedias muestra una tendencia de "caída" a un cierto patrón simple de descenso, mientras que a altas energías los datos claramente decaen aproximándose a otra curva.

d) Finalmente, se observa, del lado derecho de la gráfica de las secciones transversales diferenciales reducidas, que en todos los casos se exhibe un descenso extremo y muy pronunciado el que se atribuye a otro conjunto de procesos inelásticos involucrados que pueden ionizar a los átomos de Kr; aunque ellos no se puedan observar directamente. Esta suposición surge del hecho de que las caídas en $\rho(\tau)$ deben de estar relacionadas con un crecimiento de otros procesos inelásticos los cuales pueden producir la

destrucción de átomos de Kr. Para verificar si este comportamiento está realmente sucediendo, y determinar así mismo el buen funcionamiento del aparato de mediciones del laboratorio, se procedió a usar proyectiles de H^+ como un caso prueba y medir las secciones transversales diferenciales del sistema $H^+ + Kr$ [6]. Los valores obtenidos en este trabajo en el intervalo angular de $0^\circ-0.1^\circ$ a energías de 1.5 a 5.0 keV están en acuerdo con valores reportados por L. K. Johnson et. al. [7] para la misma reacción.

Todos los datos representan los promedios de al menos diez "corridas" del experimento, realizados en no menos de cinco ocasiones durante un período de varios meses, lo que da en cierta forma la confiabilidad del sistema. Además, este comportamiento se ha observado previamente para secciones transversales diferenciales elásticas e inelásticas en otros sistemas [8,9]. Aunque desde luego, un estudio detallado de los procesos inelásticos involucrados en la formación y destrucción de átomos de Kr, requiere un estudio cuidadoso de las curvas de energía potencial moleculares del sistema en colisión, y de los elementos de matriz de acoplamiento asociados con el cruzamiento eludido de los estados moleculares durante la colisión.

Las secciones transversales totales se calcularon mediante la integración numérica de las secciones transversales diferenciales sobre el intervalo angular observado ($\pm 7^\circ$), usando

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

(III.24)

Estas se muestran en la gráfica III.3, en donde las barras de error son una medida de la reproducibilidad de los datos obtenidos.

Para obtener una comprensión preliminar de la tendencia de las secciones transversales totales, y a modo de realizar una comparación cualitativa entre datos experimentales y aproximaciones teóricas, considerando además el hecho de que el modelo de Landau-Zener es el más adecuado para describir transiciones debidas a curvas de energía potencial, se aproximó la sección transversal total de transferencia de carga por una extensión de este modelo, aplicado a transferencia de carga cuasi-resonante [10]. Aunque el modelo presenta ciertas limitaciones, éste ha probado ser útil en la estimación de las secciones transversales asociadas a la transferencia de carga. Los cálculos de la sección transversal de captura electrónica simple por este modelo, requieren del conocimiento de los siguientes parámetros: la distancia de cruzamiento de las curvas de potencial, $R_c \approx 1.6a_0$, la cual se calcula a partir de las secciones transversales diferenciales reducidas; el elemento de matriz de acoplamiento, $H_{12} \approx 0.007$ u.a., que se calcula a partir de la expresión [10]:

$$H_{12}(R_c) = R^* \exp(0.86R^*)$$

(III.25)

en donde

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

(III.26)

y para los cuales se usa

$$\frac{\alpha^2}{2} = 12.127 \text{ eV}$$

(III.27)

como el potencial de ionización efectivo del blanco y

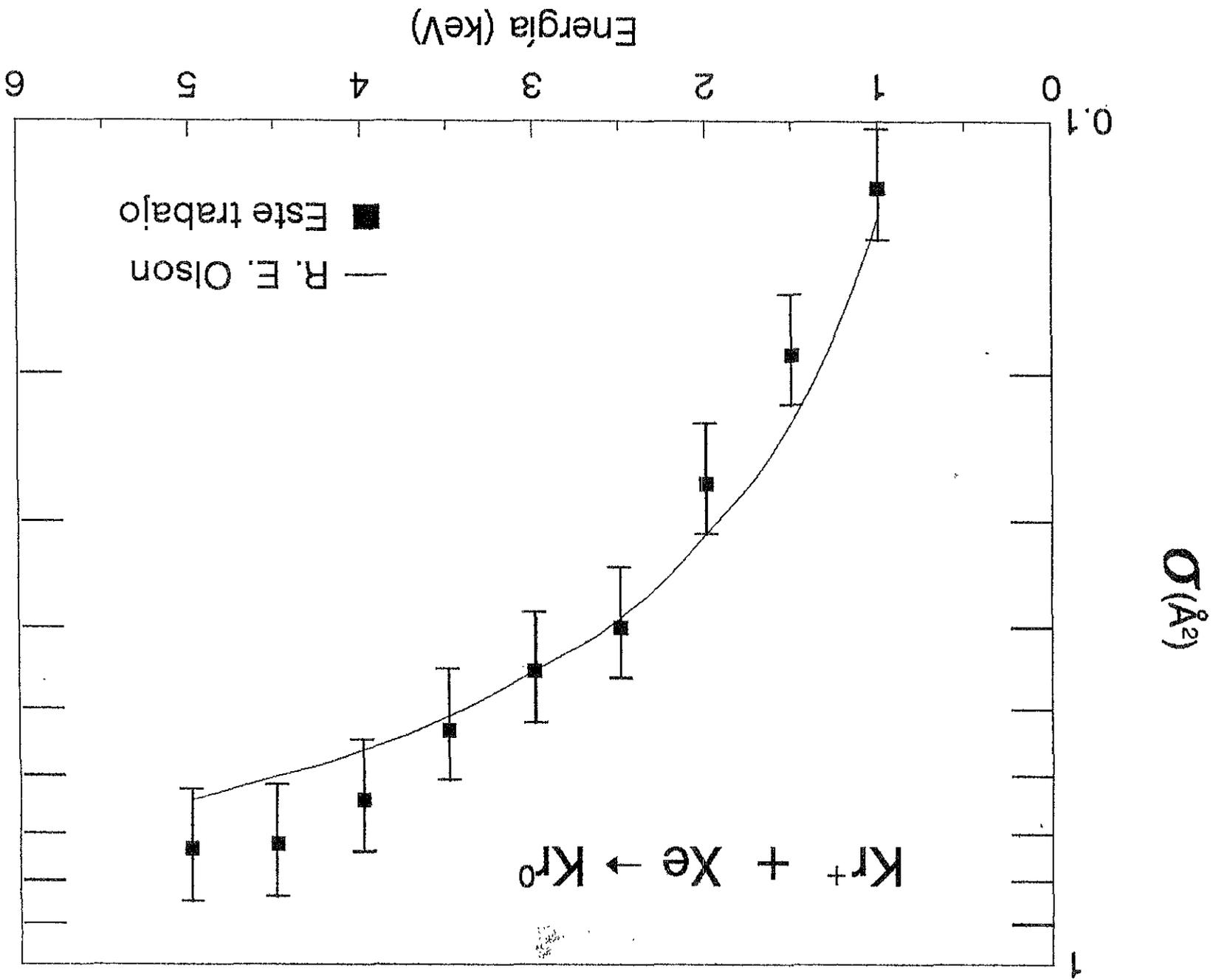
$$\frac{\gamma^2}{2} = 13.996 \text{ eV}$$

(III.28)

como la afinidad electrónica del estado base [11]. Finalmente $|\Delta V'| = (4.26/a_0)$ u.a., la cual se ajusta hasta obtener la misma sección transversal experimental a una energía de 3.0 keV. Conocidos R_c , $H_{1,2}$ y $|\Delta V'|$, la sección transversal $\sigma(b, v)$ se calcula a partir de la sección transversal reducida del modelo de Olson [10], para diferentes velocidades de incidencia. La comparación de las secciones transversales totales experimentales y las predichas por el modelo de Olson para la captura electrónica simple de iones

de Kr^+ en Xe se muestran en la gráfica III.3.

Aunque los cálculos con el modelo de Olson, [10], no son realmente exactos, cualitativamente se observa que están en acuerdo en magnitud y en forma con las mediciones realizadas en el intervalo de energía considerado en este trabajo.

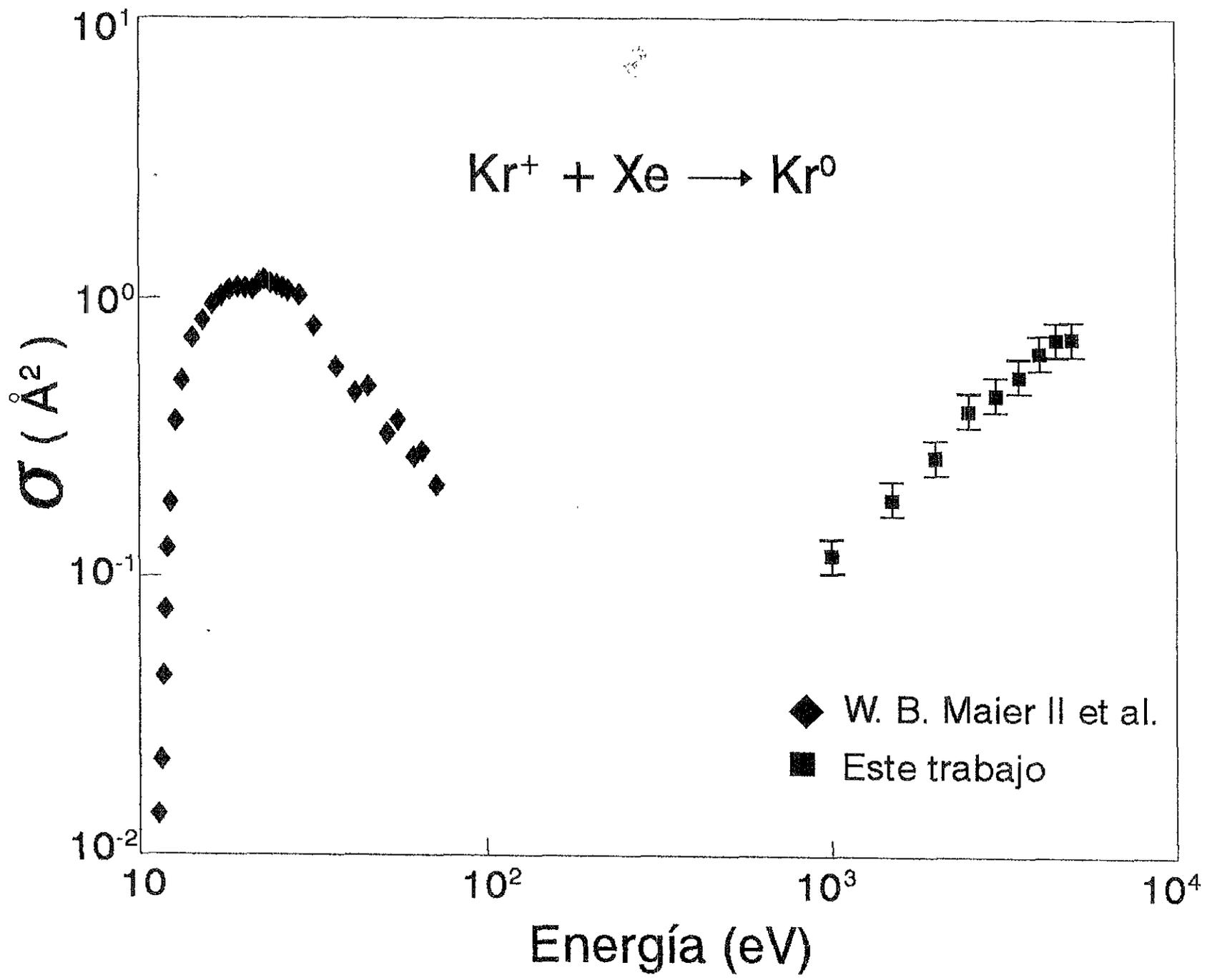


Gráfica III.3

Una comparación de las mediciones de secciones transversales totales con otros datos experimentales reportados en la literatura se muestran en la gráfica III.4. Como ya se mencionó, el sistema en colisión Kr^+ en Xe ha sido estudiado muy poco, tanto experimental como teóricamente. Experimentalmente sólo ha sido estudiado a bajas energías por W. B. Maier [12], en los Alamos Scientific Laboratory de la Universidad de California. De la comparación se observa que, el incremento en las secciones transversales totales a energías de keV seguidas por una estructura en ellas a bajas energías, sugiere que existen distintos mecanismos muy importantes involucrados en la determinación del proceso de captura electrónica simple por parte del Xe. Así mismo, es interesante observar la presencia de un mínimo en la sección transversal entre 100 y 1000 eV. Se ha llevado a cabo una aproximación burda de la situación sobre la figura para obtener el mecanismo responsable que produce el máximo a una energía dada a bajas energías para las secciones transversales ($E_m = MV_m^2/2$). La sección transversal máxima y los parámetros asociados a la colisión, se comportan según lo predicho por el criterio adiabático de Massey [15]. Si se toma $a=7a_0$ y $E_{max}=23$ eV (máximo a bajas energías) se puede predecir que el valor del defecto de energía $|\Delta E|$ responsable de este máximo es 4.29×10^{-2} eV. De este resultado se puede inferir que la única posibilidad de tener este defecto de energía, es que los reactantes estén en estados excitados, lo que estaría de acuerdo con los resultados de Maier, [12]. El próximo proceso más simple es el de considerar únicamente los estados base del ion y del blanco que participan en

la colisión, esto significa que $|\Delta E| = 1.87$ eV. Nuevamente, si se toma $a=7a_0$ y aplicando el principio adiabático de Massey se predice que la reacción ocurre únicamente en los estados base de los reactantes para energías del Kr^+ cercanas a 43.8 keV, lo que está en acuerdo con el comportamiento observado en el resultado experimental de este trabajo.

Gráfica III.4



En general, se considera de prioridad un análisis tanto teórico como experimental detallado del sistema Kr^+-Xe para seguir obteniendo más información acerca de su comportamiento. En relación a la parte experimental, los procesos de captura electrónica simple de iones de Kr^+ colisionando con Xe, son de gran importancia en los campos de fusión termonuclear controlada y astrofísica, aunque recientemente el interés principal es en la aplicación a la comprensión de las reacciones de transferencia entre átomos metaestables e iones de gases raros, debido a su aplicación en la fabricación de láseres por bombeo de iones de este tipo de gases [16]. Los únicos experimentos reportados sobre este sistema son de W. B. Maier II de los Alamos Scientific Laboratory de la Universidad de California [12] quien ha realizado mediciones de captura electrónica simple a energías abajo de los 350 eV y las presentes [13]. Se espera estimular a la comunidad científica a seguir estudiando experimentalmente al sistema para tener un banco de datos más completo y tener un mejor conocimiento de los procesos atómicos involucrados en la reacción, la cual también ha sido estudiada muy poco teóricamente. El único estudio teórico previo del sistema ha sido realizado por A. A. Antar et. al. [14], quienes no reportan potenciales teóricos del sistema Kr^+-Xe .

IV.- CONCLUSIONES Y APORTACIONES.

Los resultados del presente trabajo se pueden resumir como sigue:

1.- Se reportan mediciones de secciones transversales diferenciales y totales de la captura electrónica simple de Kr^+ en Xe.

2.- Las secciones transversales diferenciales reducidas presentan un máximo en $r \approx 1.5$ keV-deg, lo que sugiere la intervención de un radio de cruzamiento en $R_c = 1.6a_0$. Esto estimula a realizar un análisis teórico detallado para confirmar esta región de transición crítica alrededor de $R_c = 1.6a_0$.

3.- Se presenta un comportamiento interesante en las secciones transversales diferenciales reducidas; todos los casos exhiben un decrecimiento extremo muy pronunciado, el cual se atribuye a otro conjunto de procesos inelásticos involucrados.

4.- Se muestra una estructura en las secciones transversales totales para captura electrónica simple a bajas energías, las que son seguidas por un incremento a energías de keV.

5.- La forma y magnitud de las secciones transversales totales que se presentan están en acuerdo con el modelo semi-empírico de Olson (Ref. [10], Cap. III) en el intervalo de energía considerado en este trabajo.

6.- Del principio adiabático de Massey se puede deducir que el máximo a bajas energías en las secciones transversales ocurre

cuando el reactante y el producto de la reacción están excitados. Mientras que el incremento en las secciones transversales a energías de keV es causada cuando la reacción se lleva a cabo en el estado base de ambos participantes de la colisión.

REFERENCIAS.

INTRODUCCIÓN.

[1].- J. Dubau, "Electron-ion and ion-ion Collisions in Astrophysics", Atomic Processes in Electron-ion and ion-ion Collisions, F. Brouillard ed., Plenum Press, New York, 1986, p. 403.

[2].- M. F. A. Harrison, "The Role of Electronic and Ionic Collisions in Tokamak devices", Ref. [1], p. 421.

[3].- Deng F., Renwick, Martínez H., Morgan T. J., Phys. Rev. A 52,, 3833-3835 (1995).

- J. De Urquijo, I. Alvarez, C. Cisneros and H. Martínez, Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc. 154, 25-33 (1996).

- C. Cisneros, H. Martínez, B. E. Fuentes, I. Alvarez, J. De Urquijo and I. Domínguez, Nuclear Instrum. and Methods B117, 1-4 (1996).

- H. Martínez and J. M. Hernández, Chem. Phys. 215, 285-289 (1997).

[4].- H. Martínez and T. J. Morgan, Chem. Phys. 193, 193-198 (1995).

- Cisneros C., De Urquijo J., Alvarez I., Aguilar A., Juárez A. M. and Martínez H., Nuclear Fusion 6, 247-261 (1995).

- I. Domínguez, J. De Urquijo, C. Cisneros, H. Martínez and I. Alvarez, Phys. Rev. A54, 506-509 (1996).

- H. Martínez and A. Amaya-Tapia, Chem. Phys. 211, 299 (1996).

- Martínez H. and Reyes P. G., "International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes", (1997). Por publicarse.

[5].- Y. Hahn, "Radiative Capture Processes in hot Plasmas", Ref. [1], p. 23.

[6].- D. R. Bates, "Airglow and Auroras", Applied Atomic Collision Physics", H. S. W. Massey, E. W. McDaniel, and B. Bederso, eds., Academic Press 1, 152-200 (1982).

[7].- Sheldon Datz, "On the utility and ubiquity of atomic collision physics", The Physics of Electronic and Atomic Collisions, XVI International Conference, New York, N.Y., 1989, A. Dalgarno, R. S. Freund, P. M. Kock, M. S. Lubell y T. B. Lucaturto eds., p. 2 (1989).

[8].- R. K. Janev, "Theory of charge exchange and ionization in ion-atom and ion-ion collisions", Ref. [1], p. 271.

[9].- J. Michael Hollas, High Resolution Spectroscopy (Láser and Láser Spectroscopy), first ed., 1982.

[10].- R. E. Olson, Phys. Rev. A 2(1970) 121.

[11].- H. Martínez, J. M. Hernández, P. G. Reyes, E. R. Marquina and C. Cisneros, Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res., B124, 464-468 (1997).

[12].- H. S. W. Massey, Rept. Progr. Phys. 12, 248 (1949).

[13].- D. Rapp y W. E. Francis, J. Chem. Phys., 37, 2631 (1962).

[14].- F. T. Smith, R. P. Marchi y K. G. Dedrick, Phys. Rev.-150, 79 (1966).

[15].- H. Schmoranzner et. al., J. of Phys. B, 30, 4463-4480,

(1997).

[16].- M. Ahmed, M. A. Zia, M. A. Baig and B. Suleman, J. of Phys. B, 30, 2155-2165, (1997).

[17].- Y. Vitel, L. G. D'yachkov and Yu K. Kurilenkov, J. of Phys. B, 30, 2021-2031, (1997).

[18].- A. McPherson, J. Cobble, A. B. Barusov, B. D. Thompson, F. Omenetto, K. Boyer and C. K. Rhodes, J. of Phys. B, 30, L767-L775, (1997).

CAPÍTULO I: ANTECEDENTES.

[1].- Ver, por ejemplo, Atomic Physics in Nuclear Experimentation in Annals of the Israel Physical Society 1, B. Rosner y R. Kalish, eds., 1977.

[2].- Applied Atomic Collision, H. S. W. Massey, E. W. McDaniel y B. Bederson eds., vol 4 Condensed Matter, S. Datz, ed., Academic Press, New York, 1983.

[3].- A. Dalgarno, "Applications of Atomic Collision Physics to Astrophysics" in Physics of Electronic and Atomic Collisions, S. Datz, ed., North-Holland Press (1981), pp. 320.

[4].- Ver, por ejemplo, D. R. Bates, "Airglow and Auroras" in Applied Atomic Collision Physics, H. S. W. Massey, E. W. McDaniel, and B. Bederson, eds., Academic Press 1, 152-200 (1982).

[5].- U. Ramm, S. Schmidt, H. Schmidt-Böcking, G. Kraft, y R. E. Olson, GSI Scientific Report No. ISSN 0174-0184, p. 205 (1988).

[6].- Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 40/41, (1989).

[7].- G. D. Alton, c. f. Ref. [2], p. 44-171.

- [8].- H. D. Betz, c. f. Ref. [2], p. 2-43.
- [9].- Ver, por ejemplo, P. Jaeglé, J. Physique, 48, C9 (1987); Y. Vitel, L. G. D'yachkov and Yu K. Kurilenkov, J. of Phys. B, 2021-2031, (1997).
- [10].- M. Tsuji, N. Kaneko, M. Furusawa, T. Muraoka y Y. Nishimura, J. Chem. Phys. 98, 8565 (1993).
- [11].- M. Tsuji, N. Kaneko y Y. Nishimura, J. Chem. Phys. 99, 4539 (1993).
- [12].- J. Michael Hollas, High Resolution Spectroscopy (Láser and Láser Spectroscopy), first ed., 1982; M Ahmed, M. A. Zia, M A. Baig and B. Suleman, J. of Phys. B, 30, 2155-2165, (1997).
- [13].- Ver W. B. Bridges y A. N. Chester, IEEE J. Quant Electron, QE-1, 66 (1965) para la tabulación y asignación de líneas=láser de iones; H. Schmoranzler et. al., J. of Phys. B, 30, 4463-4480, (1997); A. McPherson et. al., J. of Phys. B, 30, L767-L775, (1997).
- [14].- A. Dalgarno, R. S. Freund, P. M. Kock, M. S. Lubell y T. B. Lucaturto, Electronic and Atomic Collisions, XVI International Conference, New York, N. Y., 1989.
- [15].- M. Tsuji, M. Furusawa y Y. Nishimura, Chem. Phys. Lett. 166, 363 (1990).
- [16].- O. P. Bochkova, I. A. Zubkova y S. E. Frish, Opt. Spectrosc. (USSR) 36, 16 (1974). En la tabla II de este artículo, estos autores reportan las transiciones $6S^4P_{3/2} \rightarrow 5P^4P^{\circ}_{3/2}$ a 431.8 nm y $5P^4D^{\circ}_{3/2} \rightarrow 5S^4P_{3/2}$ a 429.3 nm con energías de excitación de 19.47 y 17.16 eV, respectivamente para el sistema He-Xe. Aunque esas

transiciones se atribuyen al Xe^{**} , se deben de incluir con el Kr^{**} para el sistema He-Kr.

[17].- Un resumen sobre trabajos previos de Kr^+ en gases se puede encontrar en: J. M. Hernández, Tesis profesional de Maestría, Fac. de Ciencias, UNAM (1997).

[18].- W. B. Maier II, J. Chem. Phys., 69, 3077 (1978).

[19].- A. A. Antar y Q. C. Kessel, Phys. Rev. A, 1070 (1984).

[20].- U. Fano y W. Lichten, Phys. Rev. Lett., 14, 627 (1965).

- W. Lichten, Phys. Rev. 164, 131 (1967); J. Phys. Chem. 84, 2102 (1984).

- M. Barat y W. Lichten, Phys. Rev A, 6, 211 (1972).

[21].- J. Eichler, U. Wille, B. Fastrup y K. Taulbjerg, Phys. Rev. A, 14, 707 (1976).

[22].- ~~J. B. Hasted, Proc. Roy. Soc. (London) A212, 235~~
(1952).

[23].- E. W. McDaniel, Collision Phenomena in ionized gases, John Wiley and Sons Inc., London, New York, Sidney, 1964, p. 240-242.

[24].- H. S. W. Massey, Rept. Progr. Phys. 12, 248 (1949).

[25].- J. B. Hasted, Phys. of Atomic Collisions, Butterwoth, London, 1972.

[26].- Una revisión sobre secciones transversales de intercambio de carga de iones pesados a energías abajo de 100 keV se encuentra en E. Salzborn, IEEE Transactions on nuclear science, NS-23, 2 (1976), en donde particularmente se enfatiza en la captura de uno ó más electrones en colisiones simples de iones

múltiplemente cargados con átomos. Se estudia en detalle el sistema de iones de gases raros en gases raros. Se da atención a la influencia de iones metaestables en las secciones transversales.

[27].- J. B. Hasted, Proc. Roy. Soc., A-227, 466 (1955).

[28].- Ia. M. Fogel, Soviet Phys. JETP 35, 390 (1959).

[29].- C. F. Drukarev, Soviet Phys. JETP 10, 603 (1960).

[30].- D. R. Bates, M. S. W. Massey y A. C. Stewart, Proc. Roy. Soc. A216, 437 (1953).

[31].- O. B. Firsov, Zh. Eksper. Teor. Fiz., 21, 1001 (1951).

[32].- D. Rapp y W. E. Francis, J. Chem. Phys., 37, 2631 (1962).

[33].- D. Rapp y I. B. Ortenburger, J. Chem. Phys., 33, 1230 (1960).

~~[34].- A. Dalgarno, Phil. Trans. Roy. Soc., A250, 426 (1958).~~

[35].- I. Popescu Iovitsu y Ionescu-Pallas, Sov. Phys. Tech. Phys., 4, 781 (1960).

[36].- M. Grizinski, Phys. Rev. 115, 374 (1959).

[37].- D. R. Bates y McCarrol, Proc. Roy. Soc. (London), A-245, 175 (1958).

[38].- A. Messiah, Quantum Mechanics, Interscience, New York, 1961, Vol. I: Chapter X, 1-7; vol II, chapter XIX, 1-7.

[39].- E. F. Gurnee y J. L. Magee, J. Chem. Phys., 26, 1237 (1957).

[40].- A. Dalgarno, Phil. Trans. Roy. Soc. A250, 426 (1958).

[41].- K. Takayanagi, Repts. Progr. Suitama Univ. AII, 33 (1955).

[42].- W. H. Cramer, J. Chem. Phys, 28, 688 (1958).

[43].- G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists, chapter 11, Academic Press. Inc., 1985.

[44].- La constante de equilibrio para la reacción (1.3.37) es $(f_1/f_2)\exp(-\Delta E/RT)$, en donde en términos más usuales $f_1/f_2 = (g_A g_B^+ / g_A^+ g_B)$ y las g 's son los pesos estadísticos de los átomos.

[45].- D. R. Bates y N. Lynn, Proc. Roy. Soc. (London) A253, 141 (1959).

[46].- T. Holstein, J. Phys. Chem., 56, 832 (1952).

[47].- En el límite $\omega_1 = \omega_2$, por esta suposición se obtiene $\eta_1 - \eta_2 = 0$. Sin embargo, el uso de orbitales más realistas nos daría $\eta_1 - \eta_2 \neq 0$ cuando A y B son diferentes e igualmente en $\omega_1 = \omega_2$. Este caso de "resonancia accidental" es muy importante en las reacciones para las cuales $\omega_1 - \omega_2 \ll 1$.

[48].- Bates y Lynn [32] han señalado que en procesos del tipo $A^+ + B^+ \rightarrow A^{2+} + B$, $\eta_1 - \eta_2$ puede ser muy grande comparada a ω , concluyendo que $\Omega \neq \omega$. En este trabajo no se consideran tales procesos.

[49].- En general, lo mejor de esta teoría sería tener la más pequeña de las no-resonancias y la más alta de las velocidades del ion.

[50].- Un análisis reciente de los datos disponibles en referencia a esta conclusión ha dado un mejor valor de a , de aproximadamente 7\AA .

CAPÍTULO II: EXPERIMENTO.

[1].- C. Cisneros, Revista Mexicana de Física, 27, 2 (1981).

[2].- Técnicas de vacío, Manual de Lab. II, Fac. de Ciencias, UNAM.

[3].- J. F. O'hanlon, A user guide to vacuum technology, John Wiley and Sons (1980).

[4].- Operation and Maintenance Manual, VEECO INSTRUMENT INC.

[5].- L. Gutiérrez, Tesis de Licenciatura, Fac. de Ciencias, UNAM (1987).

[6].- L. Wahlin, Nucl. Inst. and Meth. 55, 27 (1969).

[7].- H. Martínez, Tesis de Licenciatura, Fac. de Ciencias, UNAM (1981).

[8].- G. Harrower, Rev. Sci. Inst. 26, 850 (1971).

~~[9].- G. E. Iglesias y T. D. McGarity, Rev. Sci. Inst., 47,~~
1728 (1971).

[10].- D. A. Crandall et. al., Rev. of Scientific Instruments, 46, 562 (1975).

[11].- H. Martínez, Tesis Doctoral, Fac. de Ciencias, UNAM (1987).

[12].- Manual MKS Baratron Electronic Pressure Meter Type 114.

[13].- L. M. León Rossano, Tesis de Licenciatura, Fac. de Ciencias, UNAM (1982).

[14].- Manual Ortec Timers Mod. 719.

[15].- D. C. Baird, Experimentación, Prentice Hall, Hispanoamérica, S. A., 2da. ed., México D. F., México (1991)

CAPÍTULO III: DISCUSIÓN Y RESULTADOS.

- [1].- F. T. Smith, R. P. Marchi y K. G. Dedrick, *Phys. Rev.*, 150, 79 (1966).
- [2].- G. H. Lane y E. Everhart, *Phys. Rev.*, 120, 2064 (1960).
- [3].- (a) C. Lehmann y G. Leibfried, *Z. Physik*, 172, 465 (1962); (b) G. Leibfried y T. Plessner, *ibid*, 187, 411 (1965); (c) G. Leibfried, *Bestrahlungseffekte in Festkörpern* (Teubner, Stuttgart, Germany, 1965), p. 37.
- [4].- F. T. Smith, D. C. Lorentz, W. Alberth, y R. P. Marchi, *Phys. Rev. Letters* 15, 742 (1965).
- [5].- E. Everhart, Stone, y J. Carbone, *Phys. Rev.* 99, 1287 (1955).
- [6].- H. Martínez, B. E. Fuentes, I. Alvarez, C. Cisneros y J. de Urquijo, *Chem. Phys.* 190, 139 (1995).
- [7].- L. K. Johnson, R.S. Gao, C. L. Hanes, K. A. Smith y R. F. Stebbings, *Phys. Rev. A* 40, 4920 (1989).
- [8].- J. Baudon, M. Barat y M. Abignoli, *J. Phys. B*, 3 (1970) 207.
- [9].- M. Barat, J. Baudon, M. Abignoli y J. C. Houver, *J. Phys. B*, 3 (1970) 230.
- [10].- R. E. Olson, *Phys. Rev. A* 2 (1970) 121.
- [11].- E. W. McDaniel, *Atomic Collisions* (Wiley, New York, 1989) p. 656.
- [12].- W. B. Maier II, *J. Chem. Phys.* 69 (1978) 3077.
- [13].- H. Martínez, J. M. Hernández, P. G. Reyes, E. R. Marquina and C. Cisneros, *Nucl. Inst. and Meth in Phys. Res.*, B124

(1997) 464-468.

[14].- A. A. Antar y Q. C. Kessel, Phys. Rev. A 29 (1984)
1070.

[15].- L. Valvi, Atom and ion source, John Wiley and Sons
(1977), p. 59-60.

[16].- J. Michael Hollas, High Resolution Spectroscopy (Láser
and Láser Spectroscopy), first ed. 1982.