



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

00382
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

1
24

FACULTAD DE CIENCIAS
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE H^- , H^0 Y H^+
A PARTIR DE LA COLISIÓN DE H^+ Y H_2^+ EN Kr.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE
DOCTORA EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A

BEATRIZ ELIZABETH FUENTES MADARIAGA

DIRECTOR DE TESIS: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA

CO-DIRECTORA: DRA. MARÍA DEL CARMEN CISNEROS GUDIÑO

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

266550 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 esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

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

Un sueño hecho realidad.
(Casi convertido en pesadilla)

Con todo mi amor a Mario,
Mario, Alejandro y Héctor.

A mis padres.

Agradecimientos.

A mis familiares, amigos y compañeros que de alguna manera contribuyeron a que concluyera este trabajo.

A los sinodales, Doctores Alejandro Amaya, Carlos Bunge, Carmen Cisneros, Ramiro García, Horacio Martínez, Alicia Oliver y José Recamier por sus valiosos comentarios y sugerencias al revisar la tesis. En particular a Carmelita, quien a lo largo de mis estudios de posgrado me alentó a continuarlos; por su apoyo y co-dirección. Muy especialmente al Oso, por invitarme a participar en sus proyectos y convencerme de realizar este trabajo; por su paciencia, apoyo y dirección; por su amistad.

"ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE H^- , H^0 Y H^+
A PARTIR DE LA COLISIÓN DE H^+ Y H_2^+ EN Kr"

TESIS DOCTORAL

BEATRIZ ELIZABETH FUENTES MADARIAGA

DIRECTOR: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA
CO-DIRECTORA: DRA. MARÍA DEL CARMEN CISNEROS GUDIÑO

Trabajo apoyado por DGAPA y CONACYT

RESUMEN DE LA TESIS DOCTORAL

TÍTULO: "ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE H^- , H^0 Y H^+ A PARTIR DE LA COLISIÓN DE H^+ Y H_2^+ EN Kr".

ESTUDIANTE: BEATRIZ ELIZABETH FUENTES MADARIAGA

DIRECTOR DE LA TESIS: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA

CO-DIRECTORA DE LA TESIS: DRA. MA. DEL CARMEN CISNEROS GUDIÑO

Los procesos de transferencia de carga son atractivos por el interés que existe en el desarrollo de la investigación básica y por la variedad de sus posibles aplicaciones en campos como la astrofísica, el desarrollo de aceleradores y la fusión. El estudio cuantitativo de las secciones transversales en la formación de iones negativos de hidrógeno atómico es necesario para todas las especies de gas atmosférico.

Entre las aplicaciones inmediatas de la transferencia de carga, el proceso de transferencia de electrones que involucren iones de átomos de hidrógeno juega un papel central en la investigación, pues la información obtenida en colisiones sobre la producción de hidrógeno neutro y de iones negativos de hidrógeno, es de interés para la inyección de haces neutros en dispositivos de fusión de plasma y en el desarrollo de fuentes de iones para aceleradores de altas energías y anillos de almacenaje.

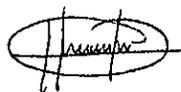
En el presente trabajo de tesis doctoral se reportan medidas absolutas de las secciones transversales diferencial y total de la captura electrónica simple y doble para colisiones de protones con átomos de kriptón⁽¹⁾. Adicionalmente se presentan los resultados de un cálculo basado en el análisis teórico de Olson⁽²⁾ para captura electrónica simple, así como un cálculo basado en el modelo de Pedersen⁽³⁾ para doble captura electrónica. El intervalo de energía estudiado es de 1 a 5 keV.

También en el presente trabajo, se reportan los resultados de las investigaciones sobre la disociación molecular del ion H_2^+ en átomos de kriptón⁽⁴⁾. Se sugiere que el mecanismo de producción de H^- es mediante un proceso de dos pasos, en el cual primero se forman átomos de H de los estados predisociativos de los productos de transferencia de carga de H_2 con el blanco, y después uno de estos átomos de H captura un electrón en una segunda colisión.

Se reportan las secciones diferenciales en el intervalo de energías de 1 a 5 keV para ángulos de dispersión entre -4° y 4° , así como los valores de las secciones totales. Los datos experimentales de kriptón siguen la ley de escalamiento $1/E$ ($d\sigma/d\Omega = f(E\theta^2)$), donde E es la energía y $d\sigma/d\Omega$ es la sección diferencial. Estos datos se graficaron junto con datos de Mg y Cs⁽⁵⁾. Se observa la formación de dos máximos que se explican utilizando los argumentos de Peterson y Bae⁽⁶⁾.

El estudio fue desarrollado en el Laboratorio de Cuernavaca del Instituto de Física de la U.N.A.M., en el grupo de Colisiones Atómicas y Moleculares. El grupo experimental ha estado activo en el estudio de las colisiones atómicas y moleculares y ha contribuido a la comprensión de los fenómenos físicos aportando con datos de utilidad a la comunidad científica.

- (1). H. Martínez et al. *Chem. Phys.* 190 (1995), 139.
- (2). R. E. Olson. *Phys. Rev.* A2 (1970), 121.
- (3). E. H. Pedersen et al. *Phys. Rev. Lett.* 41 (22) (1978), 1541.
- (4). B. E. Fuentes et al. *Nucl. Instrum. & Meth.* B95 (1995), 158.
- (5). C. Cisneros et al. *Nucl. Instrum. & Meth.* B56/57 (1991), 285; *Phys. Rev.* A14 (1976), 88.
- (6). J. R. Peterson, Y. K. Bae. *Phys. Rev.* A30 (1984), 2807.



Vo. Bo. Director de la tesis, Dr. Horacio Martínez Valencia

SUMMARY OF THE DOCTORAL THESIS

***TITLE: "STUDY OF THE FORMATION OF H^- , H^0 AND H^+
FROM THE COLLISION OF H^+ AND H_2^+ IN Kr".***

STUDENT: BEATRIZ ELIZABETH FUENTES MADARIAGA

DIRECTOR: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA

CO-DIRECTOR: DRA. MA. DEL CARMEN CISNEROS GUDIÑO

The processes of charge transfer are attractive for the interest that exists in the development of basic research and for the variety of its possible applications in fields like astrophysics, the development of accelerators and fusion. The qualitative study of the cross sections in the formation of negative hydrogen atoms is necessary for all the species of atmospheric gas.

Among the immediate applications of charge transfer, the process of electron transfer involving hydrogen ions plays a central role in research, because the information obtained from collisions about the production of neutral hydrogen and negative hydrogen atoms, is of interest for the injection of neutral beams in fusion plasma devices and in the development of ion sources for high energy accelerators and storage rings.

In the present work, absolute measurements of differential and total cross sections for simple and double electron capture of collisions of protons with krypton atoms⁽¹⁾ are reported. Also, a calculation based in the theoretical analysis of Olson⁽²⁾ for simple electron capture is presented, as well as a calculation based in Pedersen's model⁽³⁾ for double electron capture. The studied energy range is from 1 to 5 keV.

The results on the research of molecular dissociation of H_2^+ in Kr atoms⁽⁴⁾ is also presented. It is suggested that the mechanism responsible for the production of H^- is a two step process, where first H atoms are formed in the predissociative states of the products of charge transfer of H_2 with the target, and then, one of the H atoms captures an electron in a second collision.

Differential cross sections in the energy range from 1 to 5 keV for dispersion angles between -4° and 4° , as well as the values of the cross sections are reported. The experimental data for krypton follow the scaling law $1/E(d\sigma/d\Omega) = f(E\theta^2)$, where E is the energy and $d\sigma/d\Omega$ the differential cross section. These data were plotted with data of Mg and Cs⁽⁵⁾. All the present the formation of two maximum which were explained with the arguments of Peterson and Bae⁽⁶⁾.

The study was developed in the Laboratorio de Cuernavaca of the Instituto de Física of U.N.A.M., in the group of Atomic and Molecular Collisions. The experimental group has been active in the study of atomic and molecular collisions and has contributed to the comprehension of physical phenomena with useful data for the scientific community.

- (1). H. Martínez et al. *Chem. Phys.* 190 (1995), 139.
- (2). R. E. Olson. *Phys. Rev.* A2 (1970), 121.
- (3). E. H. Pedersen et al. *Phys. Rev. Lett.* 41 (22) (1978), 1541.
- (4). B. E. Fuentes et al. *Nucl. Instrum. & Meth.* B95 (1995), 158.
- (5). C. Cisneros et al. *Nucl. Instrum. & Meth.* B56/57 (1991), 285; *Phys. Rev.* A14 (1976), 88.
- (6). J. R. Peterson, Y. K. Bae. *Phys. Rev.* A30 (1984), 2807.



Vo. Bo. Thesis Director, Dr. Horacio Martínez Valencia

Contenido

Introducción 1
Capítulo I. Antecedentes	
I.1.- Importancia de la investigación 4
I.2.- Modelos teóricos 8
I.2.1. Captura electrónica simple 9
I.2.1.A.- Hipótesis adiabática de Massey 9
I.2.1.B.- Yu. N. Demkov; R. E. Olson 11
I.2.1.C.- C. Kubach y V. Sidis 15
I.2.1.D.- C. Benoit, C. Kubach, V. Sidis, J. Pommier, M. Barat 16
I.2.2. Captura electrónica doble 18
I.2.2.A.- Hipótesis adiabática de Massey 18
I.2.2.B.- E. H. Pedersen, J. V. Mikkelsen, J. Vaaben, K. Taulbjerg 19
I.2.3. Análisis de Distribuciones Angulares de productos de Disociación 21
I.3.- Experimentos previos 26
I.3.1.- J. B. H. Stedeford y J. B. Hasted 26
I.3.2.- Ia. M. Fogel', R. V. Mitin, V. F. Kozlov, N. D. Romashko 27
I.3.3.- V. F. Kozlov, Ia. M. Fogel', V. A. Stratienco 27
I.3.4.- J. F. Williams 28
I.3.5.- D. W. Koopman 29
I.3.6.- H. H. Fleischmann y R. A. Young 29
I.3.7.- M. Abignoli, M. Barat, J. Baudon, J. Fayeton, J. C. Houver 30
I.3.8.- B. M. Doughty, M. L. Goad, R. W. Cernosek 31
I.3.9.- L. K. Johnson, R. S. Gao, C. L. Hakes, K. A. Smith, R. F. Stebbings 32
Capítulo II. Arreglo Experimental 33
II.1- Fuente de iones 35
II.2.- Sistema de aceleración, enfoque y selección de iones 36
II.2.1.- Lentas Einzel 36
II.2.2.- Filtro de velocidades de Wien 38
II.3.- Celda de reacción 41
II.4.- Sistema de detección 42
II.4.1.- Caja de Faraday – deslizable 43

II.4.2.- Analizador de placas paralelas	. . .	44
II.4.3.- Detectores	. . .	45
II.5.- Sistema de vacío	. . .	47
Capítulo III. Desarrollo experimental	. . .	50
III.1.- Condiciones de operación del acelerador	. . .	50
III.2.- Incertidumbres	. . .	53
Capítulo IV. Resultados y discusión	. . .	56
IV.1.- Captura electrónica simple de H^+ en Kr.	. . .	56
IV.2.- Captura electrónica doble de H^+ en Kr.	. . .	63
IV.3.- Disociación molecular de H_2^+ en Kr.	. . .	73
IV.4.- El ion H^+	. . .	83
Capítulo V. Conclusiones	. . .	84
Referencias	. . .	88

Introducción

Tradicionalmente, la información cuantitativa acerca de las interacciones elásticas o inelásticas entre iones o moléculas se ha obtenido mediante el estudio de las propiedades de transporte o de equilibrio entre conjuntos grandes o agregados de materia. Los métodos "nuevos" y los que proporcionan una información básica sobre la dinámica que gobierna las colisiones moleculares, son sin duda los que utilizan la técnica de haces de iones atómicos y moleculares. Las técnicas consisten en medir las distribuciones angulares (método empleado en este trabajo) y las energías de los productos provenientes de una interacción elástica, inelástica o reactiva utilizando blancos gaseosos estáticos, o bien haciendo experimentos con haces cruzados o convergentes.

En esta clase de interacciones existen muchas preguntas que, a pesar de los avances realizados en este campo, se encuentran sin respuesta debido a la complejidad inherente a las interacciones de muchos cuerpos, como puede ser el caso de una simple interacción entre un ion y una molécula.

El estudio que aquí se presenta fue desarrollado en el Laboratorio de Cuernavaca del Instituto de Física de la U.N.A.M., en el Grupo de Colisiones Atómicas y Moleculares. El grupo experimental ha estado activo en el estudio de las colisiones atómicas y moleculares y ha contribuido a la comprensión de los fenómenos físicos aportando con datos de utilidad a la comunidad científica. Entre las principales aportaciones que se han hecho están: una ley de escalamiento cuando los procesos son independientes de la velocidad de las partículas, métodos para medir la energía de ligadura de una molécula y

técnicas para determinar los estados moleculares presentes en una disociación molecular.

En particular, en esta tesis doctoral se reportan medidas absolutas de las secciones transversales diferencial y total de la captura electrónica simple y doble para colisiones de protones con átomos de kriptón⁽¹⁾ en el intervalo de energías comprendido entre 1.0 y 5.0 keV. En el acelerador en el que efectuaron los experimentos es posible medir y controlar parámetros físicos de manera absoluta como son la presión y la corriente incidente, lo que permite a su vez obtener valores absolutos de las secciones diferenciales y totales. Con esta información se pueden comparar las teorías relacionadas con los procesos estudiados y con datos previos. En la mayoría de los trabajos previos se reportan medidas relativas; por ejemplo, para la captura electrónica simple sólo se encontraron valores absolutos de la sección diferencial⁽²⁾ a 0.5 , 1.0 y 5.0 keV. Hay más datos a energías cercanas al intervalo estudiado, como los de Abignoli⁽³⁾, pero se trata de medidas relativas.

Se presentan también los resultados de un cálculo para la captura electrónica simple basado en el modelo de Olson⁽⁴⁾, y los resultados de un cálculo para doble captura electrónica basado en el modelo de Pedersen⁽⁵⁾, y se comparan dichas predicciones con nuestros resultados experimentales.

Asimismo, se reportan los resultados de la disociación molecular del ion H_2^+ al incidir en átomos de kriptón⁽⁶⁾. Para esta reacción no hay datos en la literatura. De acuerdo con los resultados obtenidos se sugiere que un mecanismo de producción de H^- puede ser mediante un proceso de dos pasos, en el cual primero se forman átomos de H de los estados predissociativos de los productos de transferencia de carga de H_2 con el blanco, y después uno de estos átomos de H captura un electrón en una segunda colisión.

Se reportan las secciones diferenciales absolutas en el intervalo de energías de 1.0 a 5.0 keV para ángulos de dispersión entre -4.0° y 4.0° , así como los valores de las secciones totales. Se observa la formación de dos máximos que se explican utilizando los argumentos de Peterson y Bae⁽⁷⁾.

El contenido del trabajo está organizado de la siguiente manera:

En el *Capítulo I* se presenta un panorama general de los procesos de transferencia de carga con iones y átomos de hidrógeno, y se menciona la importancia de la investigación que se reporta. Asimismo, se presentan experimentos previos, realizados por numerosos investigadores a lo largo de

varias décadas sobre captura electrónica simple y doble de iones de H^+ , así como sobre disociación colisional de H_2^+ . También se incluyen algunas de las pocas teorías pertinentes a los procesos mencionados.

La descripción del arreglo experimental se presenta en el *Capítulo II* y se discute sobre el funcionamiento de cada una de sus partes.

En el *Capítulo III* se detalla el desarrollo experimental, discutiendo los parámetros y los errores que deben asociarse a las diferentes medidas.

En el *Capítulo IV* se presentan los datos obtenidos y se hacen una discusión y análisis de los mismos.

El *Capítulo V* se dedica a las conclusiones relevantes del trabajo, a la comparación con resultados previos, y se discuten las aportaciones novedosas.

Capítulo I

Antecedentes

I.1.- Importancia de la investigación

La importancia y el desarrollo de las investigaciones de los procesos de transferencia de carga se deben a la variedad de sus posibles aplicaciones en campos como la astrofísica, el desarrollo de aceleradores, la fusión y al interés que existe en el desarrollo de la investigación básica.

Los actuales trabajos teóricos y experimentales sobre iones y átomos de hidrógeno no se restringen al estudio de los procesos de transferencia de carga, se extienden a otros tipos de investigaciones, para así tener un conocimiento más amplio y general sobre su comportamiento. Entre dichos estudios están: determinación de los estados excitados de iones moleculares diatómicos^(8a) y moléculas neutras de hidrógeno^(8b), atrapamiento de iones de H en diferentes materiales^(8c), estudios de la energía potencial de H_2^+ ^(8d), cálculo de las secciones transversales diferenciales de ionización disociativa de H_2^+ ^(8e), funciones de distribución de energía de átomos de hidrógeno^(8f), desdoblamiento hiperfino de iones pesados tipo $H^{(8g)}$, y resonancias atómicas de H cerca de superficies^(8h).

Para entender en detalle las interacciones entre iones y especies neutras, es necesario conocer tanto los estados iniciales como los estados finales. El conocimiento de los estados de los productos de una reacción de transferencia de carga es frecuentemente tan importante como la magnitud o el comportamiento de las secciones transversales.

En este trabajo nos ocuparemos del estudio de las secciones diferenciales absolutas y de las secciones transversales en procesos de transferencia de carga⁽¹⁾. Entre las aplicaciones inmediatas de la transferencia de carga están los procesos de transferencia de electrones que involucran iones y átomos de hidrógeno. La información sobre la producción, por colisión de H neutro y de iones negativos de H es de interés para la inyección de haces neutros en dispositivos de fusión y en el desarrollo de fuentes de iones para aceleradores de altas energías y anillos de almacenaje⁽⁹⁾.

La mayoría de los experimentos relacionados con la medición de secciones transversales de captura electrónica simple para $H^{+(10,11,12)}$ se han desarrollado a energías por debajo de $350 eV$. Por otro lado, hay pocos datos sobre colisiones de H^+ en Kr en la región de pocos keV ^(2,3,13-16). En este intervalo de energías están por ejemplo, los trabajos de Johnson y sus colaboradores⁽²⁾ para 0.5 , 1.0 y $5.0 keV$, de Williams y Dunbar⁽¹⁴⁾ quienes reportan mediciones de la sección total de captura simple (σ_{I0}) entre 2 a $50 keV$, de Koopman⁽¹³⁾ entre 0.70 y $1.050 keV$ y de Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾ entre 0.100 y $4000 keV$. Los datos de Koopman y de Stedeford y Hasted no parecen acoplarse entre sí, ni con los de Williams y Dunbar que son a energías mayores. El intervalo de energías que podemos estudiar incluye información de los cuatro trabajos mencionados, además de una región no reportada previamente. Se decidió entonces explorar esta zona.

En cuanto a las secciones diferenciales de captura simple, a energías cercanas al intervalo estudiado están los datos de Abignoli y sus colaboradores⁽³⁾ y de Johnson y sus colaboradores⁽²⁾, y de éstos, sólo los de Johnson son absolutos. Con el presente estudio se está contribuyendo con valores absolutos de secciones diferenciales entre 3 y $5 keV$.

Con relación a la doble captura electrónica de protones colisionando con un blanco de Kr , Williams⁽¹⁶⁾ reportó mediciones de secciones totales ($\sigma_{I, j}$) en el intervalo de 2 a $50 keV$; entre 3 y $65 keV$ están los trabajos de Fogel' y sus colaboradores⁽¹⁷⁾ y entre 0.5 y $5.0 keV$ los de Kozlov y sus colaboradores⁽¹⁸⁾. Aunque hay datos a energías del intervalo que se reporta, la importancia de nuestras medidas radica en que aquéllas no son absolutas y las presentes sí. Esta característica permite evaluar mejor la diferencia entre las teorías y los datos experimentales previos. Además, con el presente estudio se está aportando información nueva en el intervalo entre 1 y $2 keV$.

Una descripción teórica detallada sobre la captura electrónica simple, cuando los sistemas son diferentes del hidrógeno, no existe; y mucho menos se sabe sobre los procesos de captura electrónica doble en una colisión simple, aun cuando hay un buen número de datos experimentales con varios blancos desde hace muchos años. Faltan teorías que describan adecuadamente dichos procesos.

Los presentes resultados además de ser medidas absolutas tienen la característica de haberse realizado con sistemas de vacío adecuados (10^{-8} torr) evitando con ello que las medidas de σ_{l-1} pudieran ser influidas por la destrucción de H^+ el cual fácilmente pierde un electrón en condiciones de vacío deficiente.

En la *tabla I.1* se resumen los trabajos teóricos y experimentales previos con los que se compararon o relacionaron los presentes datos, y se indica si la sección es total o diferencial, si es absoluta o no, así como el blanco empleado.

Tabla I.1
Resumen de la información de los trabajos teóricos y experimentales

TIPO (Exp/Teo)	autores	año	proyectil	blanco	medida	sección absoluta	intervalo de energía (keV)
Exp.	Stedeford y Hasted ⁽¹⁵⁾	55	H ⁺ , H ₂ ⁺ , He ⁺ , H ⁻	H, H ₂ , He, Ar, Ne, Kr, Xe	σ_{10} ; σ_{-10}	si	3 a 40, 0.100 a 4.000
Exp.	Fogel ⁽¹⁷⁾	59	H ⁺ , H ₂ ⁺ , He ⁺ , H ⁻	He, Ne, Ar, Kr, Xe, H ₂ , N ₂	σ_{1-1}	relativa	3 a 65
Exp.	Koslov ⁽¹⁸⁾	63	H ⁺ , H ₂ ⁺ , He ⁺ , H ⁻	H, Ar, Kr	σ_{1-1}	relativa	0.5 a 5
Exp.	Williams ^(14,16)	67	H ⁺ , H ₂ ⁺ , He ⁺ , H ⁻	He, Ne, Ar, Kr, Xe, H ₂ , N ₂	σ_{10} ; σ_{0-1} ; σ_{01}	relativa	2 a 50
Exp.	Koopman ⁽¹³⁾	67	H ⁺ , H ₂ ⁺ , He ⁺ , H ⁻	H ₂ , Ar, Kr, Xe	σ_{10}	relativa	0.70 a 1.050
Exp.	Fleischmann ⁽¹⁰⁾	67	H ⁺	Kr	$d\sigma_{10}/d\Omega$	relativa	0.70 a 0.200
Exp.	Abignoli ⁽⁹⁾	72	H ⁺ , H ₂ ⁺ , He ⁺ , H ⁻	He, Ne, Ar, Kr, Xe, H ₂ , N ₂	$d\sigma_{10}/d\Omega$, $d\sigma_{10}/d\Omega$, $d\sigma_{11}/dE$, $d\sigma_{10}/dE$; σ_{10}	relativa	0.500 a 3.000
Exp.	Doughly ⁽³²⁾	78	H ⁺	He, Ne, Ar, Kr, Xe	σ_{10}^*	si	10 a 50
Exp.	Johnson ⁽²⁾	89	H ⁺ , He ⁺	Ne, Ar, Kr, Xe	$d\sigma_{10}/d\Omega$, σ_{11} ; σ_{10}	si	0.5, 1.0 y 5.0
Teórico	Kubach ⁽²⁷⁾	76	H ⁺	Kr	curvas de potencial	relativa	
Exp./Teó.	Benoit ⁽¹¹⁾	77	H ⁺	Ar, Kr	sec. dif. reducidas transf. carga		0.100 a 0.350
Exp.	Cisneros ^(19,22)	76 91	D ⁺ , D ₂ ⁺ , H ₂ ⁺	Cs, Mg	σ_{dis} ; $d\sigma_{dis}/d\Omega$	si	0.5 a 5.0
Exp.	Peterson y Bae ⁽⁷⁾	84	D ₂ ⁺ , D ₃ ⁺	Cs	$d\sigma_{dis}/dE$	relativa	0.695, 1.03
Exp.	Bruijn ⁽²¹⁾	84	H ₂ ⁺	Ar, Mg, Na, Cs	$d\sigma/dE$, $d\sigma_{dis}/dE$, $d\sigma/d\Omega$	relativa	1.5, 4.2, 5.0, 6.5

En cuanto a la disociación del ion H_2^+ , el ion molecular más simple, se ha investigado durante mucho tiempo y se ha puesto poca atención en la formación del ion H como uno de sus productos (*ver tabla 1.1*). Cisneros y sus colaboradores^(19,20) estudiaron la distribución angular de productos negativos a partir de D_2^+ y D_3^+ y observaron transferencia de carga disociativa en Cs. Peterson y Bae⁽⁷⁾ midieron la distribución de energía cinética de D^- observada después de la disociación de D_2^+ en Cs. En la literatura^(21,22) se encuentran medidas de distribuciones de energía para el ion H provenientes de la interacción de H_2^+ con Ar, Mg, Na y Cs; en estas distribuciones se observan estructuras interesantes. En éstas la intensidad aparentemente se ordena de acuerdo al potencial de ionización del blanco. En la presente investigación se eligió Kr como blanco, el cual es un gas con un potencial de ionización entre Ar y los metales alcalinos, a fin de observar si en este caso se sigue la misma tendencia. Estos resultados son novedosos ya que no hay información de la disociación de H_2^+ en un blanco de Kr.

En la revisión bibliográfica que se hizo no se encontró alguna teoría que explique el comportamiento de las reacciones que se estudiaron en este trabajo, además hay pocas medidas; en todos los casos es difícil determinar el estado inicial del ion. Asimismo, no hay medidas absolutas en el intervalo de energía estudiado, y en algunos casos se miden sólo secciones totales y no diferenciales, de captura simple y captura doble.

1.2.- Modelos teóricos

Hasta ahora, un gran número de estudios de captura electrónica han estado relacionados con la dependencia en la energía de la sección transversal total. Para esta clase relativamente simple de experimentos es evidente el desacuerdo que existe tanto en las medidas experimentales de los diferentes laboratorios como en los resultados teóricos. Es deseable contar con modelos confiables que permitan una buena estimación de la sección transversal total, así como un mayor número de datos experimentales que cubran un amplio intervalo de energías y una amplia variedad de procesos.

A continuación se resumen las teorías consideradas en el análisis de los presentes resultados.

1.2.1. Captura electrónica simple

1.2.1.A.- Hipótesis adiabática de Massey⁽²³⁾

En este modelo se consideran reacciones de transferencia de carga del tipo asimétrico como la siguiente: $A^+ + B \rightarrow A + B^+$, en las que el ion A^+ incide sobre un blanco B . Para que este proceso de captura electrónica simple ocurra, es necesario que se disponga de cierta cantidad de energía ΔE proveniente de la diferencia entre la energía de ionización de la partícula A , (I_A), y la energía de ionización de la partícula B , (I_B); esto es, $\Delta E = I_A - I_B$. A la cantidad ΔE se le conoce como "*defecto de energía*" de la reacción, y representa el cambio de energía en la transición electrónica. 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 usa un argumento basado en el principio de correspondencia para mostrar que en general, la sección transversal de transferencia de carga será extremadamente pequeña a muy bajas velocidades relativas de acercamiento, a menos que ΔE sea pequeña. Bajo la suposición de que la velocidad de acercamiento de los dos sistemas atómicos es pequeña comparada con las velocidades de los electrones orbitales, la interacción entre A^+ y B será tan lenta, que los electrones tendrán tiempo de reajustarse a la perturbación producida por dicha interacción, sin que ocurra una transición electrónica. En este caso se dice que la colisión es adiabática. Massey describe clásicamente esta situación en términos de la vibración producida al aplicar una fuerza perturbativa a un oscilador cuya frecuencia natural es ν . Suponiendo que la perturbación varía con el tiempo de acuerdo a una función $F(t)$ y expandiendo esta función en una integral de Fourier, solamente las componentes de este desarrollo con frecuencias cercanas a ν podrán tener un efecto apreciable para la producción de una oscilación forzada. La duración τ de la colisión no debe ser grande comparada con el período de la vibración natural del oscilador; la excitación será débil si el producto $\tau\nu \gg 1$.

Si a representa el alcance de la interacción (parámetro de impacto) entre A^+ y B , y v es su velocidad relativa de acercamiento, entonces τ será del orden de $\frac{a}{v}$, y la condición para excitación débil queda como $\frac{av}{v} \gg 1$. Pero como

$\frac{\Delta E}{h} = \nu$, la probabilidad de que ocurra la transferencia de carga será pequeña

si: $\frac{a\Delta E}{h\nu} \gg 1$. Para un par de sistemas atómicos dado, a y ΔE son fijos aunque el parámetro adiabático a no está bien definido. Esto implica que la sección transversal debe ser pequeña si ν corresponde a la región adiabática de energía cinética, esto es, si $\nu \ll \frac{a\Delta E}{h}$.

En el caso en que ν se incremente a un valor

$$\nu^* \approx \frac{a\Delta E}{h} \quad \dots \quad (I.1)$$

la colisión deja de ser adiabática debido a que el tiempo de colisión se hace comparable con el tiempo de la transición $\frac{h}{\Delta E}$. En este caso, se espera que la sección transversal para la transferencia de carga no sea pequeña.

Se espera que la sección transversal llegue a su valor máximo a la energía de impacto correspondiente a la *condición I.1*. Esta energía se expresa en *electrón-volt* como

$$T_{(\text{máx})} = T^* = 36(\Delta E)^2 m a^2 \quad \dots \quad (I.2)$$

Donde la masa m de la partícula incidente está expresada en unidades atómicas, el defecto de energía ΔE en *electrón-volt*, y el alcance de la interacción a en unidades del radio de Bohr ($a_0 = 0.53 \times 10^{-8} \text{ cm}$).

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, llega a un máximo cuando se satisface la *condición I.2*, y después decrece rápidamente a energías más grandes.

Se han analizado exitosamente⁽²⁴⁾ datos experimentales en términos de la *expresión I.2*; se encontró que el producto del parámetro adiabático a , y el número de electrones transferidos es aproximadamente 7Å para muchos casos. Sin embargo, en otros casos hay discrepancias en la predicción de la energía correspondiente al máximo en la sección transversal. Algunas de estas

discrepancias se pueden atribuir a la indeterminación de los estados excitados de los reactantes o de los productos, por lo que el valor de ΔE es incierto. Otras discrepancias surgen del hecho de que el defecto de energía ΔE es una función de la distancia de separación entre las partículas que colisionan.

1.2.1.B.- Demkov⁽²⁶⁾; Olson^(4,25)

La dependencia en energía de la sección total inelástica de transferencia de carga en reacciones del tipo $A^+ + B \rightarrow A + B^+ + \Delta E$ se puede estudiar desde dos mecanismos diferentes. En el primero hay un cruzamiento en las curvas de energía potencial, y la transferencia de carga ocurre en el punto de cruce. Este tipo de mecanismo predomina en los casos en los que la separación en energía de los reactantes y los productos es grande a separaciones internucleares infinitas.

En el segundo, los sistemas tienen varias curvas de potencial cercanas unas de otras a grandes distancias. La transferencia ocurre porque el acoplamiento entre los estados es comparable, en magnitud, a la separación de la energía potencial. Este marco teórico fue estudiado por Demkov⁽²⁶⁾.

En su trabajo, Demkov considera que la velocidad de movimiento de los átomos es mucho menor que la velocidad de movimiento de los electrones externos, y sus energías cinéticas son mucho menores que las de los electrones. La sección transversal de transferencia de carga depende esencialmente del defecto resonante (diferencia entre las energías del electrón en los estados inicial y final), y aumenta considerablemente conforme esta cantidad tiende a cero (transferencia de carga resonante). Sólo considera defectos resonantes pequeños y estudia la transición del caso resonante al caso no-resonante. Estudió el caso de la captura electrónica simple. Supone que ésta ocurre en la región R_c (distancia internuclear donde ocurre la transferencia electrónica) donde el elemento de matriz de acoplamiento $H_{12}(R)$ es igual a un medio de la diferencia entre los potenciales internucleares, i.e.:

$$H_{12}(R_c) = \frac{1}{2} |V_1(R_c) - V_2(R_c)| = \frac{1}{2} \Delta V(R_c) \quad \dots \quad (I.3)$$

Considera que en la región de transferencia $R_c \pm \Delta R_c$,

$$H_{12}(R) = e^{-\lambda R} \quad . . . (I.4)$$

Donde λ es el parámetro de acoplamiento. Calcula la sección transversal total a partir de la probabilidad de transición y obtiene que para el límite de bajas energías:

$$\sigma = \frac{1}{2} \pi R_c^2 f(v) \quad . . . (I.5)$$

Donde $f(v)$ es una función que depende del parámetro de impacto, la velocidad de la partícula incidente, del parámetro de acoplamiento y de los potenciales internucleares.

Olson parte de la expresión para la probabilidad de transición como función del parámetro de impacto, y llega a una expresión diferente para la sección total. Utiliza cálculos numéricos de dos estados de canales acoplados para llegar a una curva de secciones totales reducidas como función de la velocidad reducida; este cálculo lo hace para el caso en el que las curvas de potencial son paralelas y donde hay un acoplamiento exponencial entre ellas. Esta curva se puede utilizar para estimar la dependencia en la energía de las secciones totales inelásticas de la transferencia de carga para transiciones que ocurren a distancias internucleares grandes debidas al acoplamiento entre los dos estados cercanos. Hace una comparación de los resultados obtenidos con las expresiones de la sección total de él y de Demkov. Las expresiones de la velocidad reducida (λ^{-1}) y de la sección reducida (σ^*) de Olson son:

$$\delta^{-1} = \frac{2 \hbar \lambda v_o}{\pi \Delta V(R_c)} \quad . . . (I.6)$$

donde v_o es la velocidad incidente correspondiente a una energía $E = \frac{1}{2} m_o v_o^2$, del proyectil de masa m_o , y

$$\sigma^* = \frac{\sigma}{\frac{1}{2} \pi R_c^2} \quad . . . (I.7)$$

En esta expresión,

$$\sigma = 4\pi R_c^2 \left[1 - \frac{V_1(R_c)}{E} \right] \int_1^\infty \frac{dx e^{-\delta x}}{x^3 (1 + e^{-\delta x})^2} \quad \dots (1.8)$$

con

$$\delta = \frac{\pi \Delta V(R_c)}{2\hbar\lambda v_o} \left[1 - \frac{V_1(R_c)}{E} \right]^{-1/2} .$$

Para el caso de la captura electrónica de un ion atómico, se puede considerar que $\left[1 - \frac{V_1(R_c)}{E} \right]^{-1/2} \cong 1$ ya que V_1 es del orden de eV y E de keV .

Olson estudió el comportamiento de las curvas reducidas σ^* en función de la velocidad reducida δ^{-1} para estimar la sección transversal total. También realizó variaciones en los parámetros $\Delta V(R_c)$, λ y R_c para observar si hay una curva general que pueda representar varias condiciones iniciales y así determinar la región de validez de la curva reducida del modelo. Los valores de las velocidades reducidas y las respectivas secciones reducidas calculadas por Olson, son:

Tabla I.2

δ^{-1}	σ^*
0.5	0.03
1.0	0.30
1.5	0.66
2.0	0.95
2.5	1.05
3.0	1.08
3.5	1.07
4.0	1.05
4.5	1.02
5.0	0.99

La diferencia entre los valores obtenidos con la fórmula de Demkov y el cálculo numérico de Olson, es grande; para $\delta^{-1} = 2.0$, la diferencia es casi un factor de 2. La razón de ello radica en el hecho de que Demkov no considera las transiciones que ocurren para parámetros de impacto $b \geq R_c$.

Para velocidades reducidas mayores a $\delta^{-1} = 5$, la colisión se comporta como si el sistema fuera resonante. Se debe considerar entonces, otro conjunto de parámetros que representen la colisión, y así obtener los valores de las secciones reducidas. En la siguiente gráfica se presentan los valores de la sección reducida para diferentes valores de λ .

Concluye Olson que la fórmula de Demkov subestima la sección total en la región umbral de energía porque no se acopla para grandes valores del parámetro de impacto.

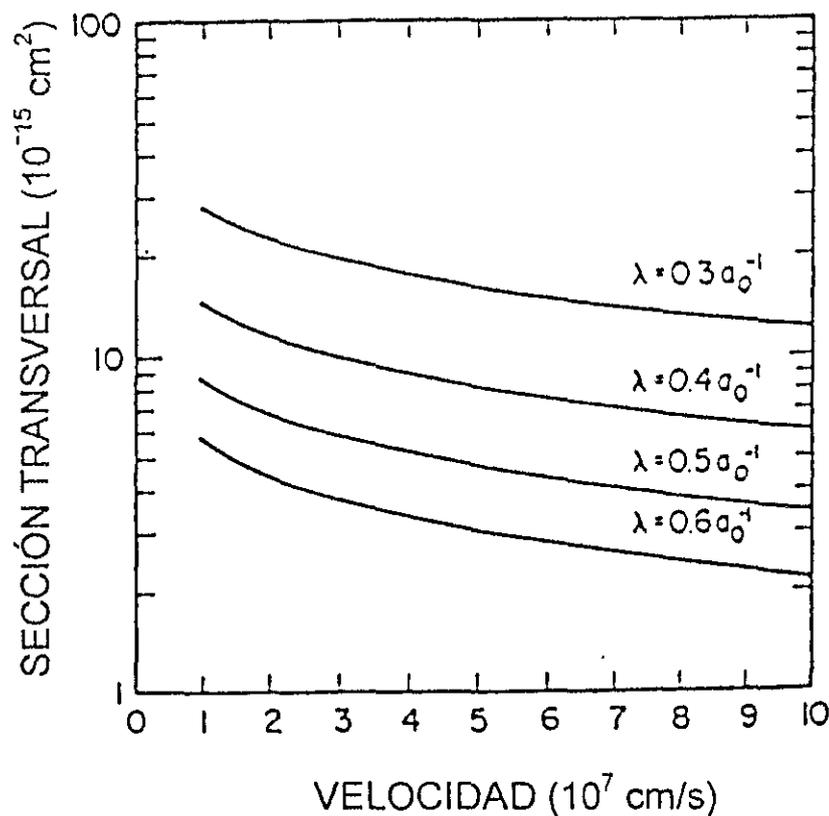


Figura 1.1 – Valores de la sección reducida para diferentes valores de λ ⁽²⁵⁾.

1.2.1.C.- Kubach y Sidis⁽²⁷⁾

Kubach y Sidis estudian el sistema $(H-Kr)^+$ desde dos puntos de vista. Uno de ellos está basado en los orbitales moleculares adiabáticos *LCAO-SCF* (Lineal Combination of Atomic Orbitals – Self Consistent Field), los cuales describen adecuadamente el sistema a distancias pequeñas. La siguiente gráfica muestra algunas curvas de energía potencial obtenidas con el método *SCF*.

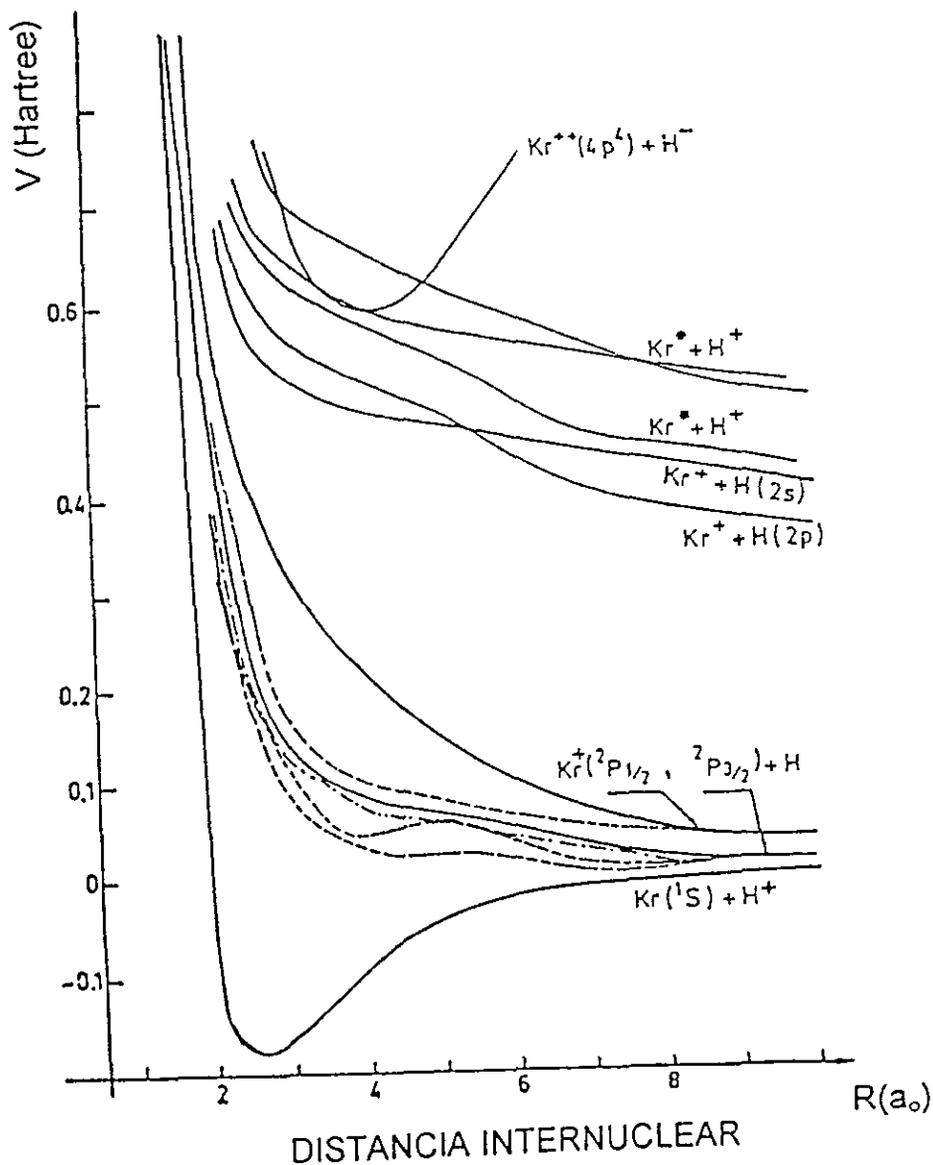


Figura 1.2 – Curvas de energía potencial obtenidas con el método SCF por Kubach y Sidis⁽²⁷⁾.

(1 Hartree = 27.211 eV)

El segundo método está basado en orbitales atómicos que permiten estudiar las secciones de intercambio de carga a distancias grandes.

También en ese trabajo se presenta un análisis con el método Projected Valence Bond (PVB) en el que se utilizan estados diabáticos formados a partir de orbitales atómicos de H y Kr . Con tales estados, el proceso de intercambio de carga se puede describir utilizando un acoplamiento exponencialmente decreciente entre las casi paralelas curvas de potencial. Los parámetros que reportan Kubach y Sidis para este proceso son los que se utilizaron en el cálculo de las secciones totales de captura simple que se presentan en el capítulo IV.

1.2.1.D.- Benoit et al⁽¹¹⁾

Benoit y sus colaboradores realizaron una investigación teórica acerca del efecto de resonancia en el proceso de transferencia de carga basada en las aproximaciones moleculares propuestas por Kubach y Sidis⁽²⁷⁾. El procedimiento que ahí se sugiere sobre los cálculos de acoplamiento cercano (close-coupling) en las secciones transversales tanto elástica como de transferencia de carga por resonancia del sistema, sigue los aspectos generales del modelo de Demkov⁽²⁶⁾.

El trabajo de Demkov, como ya se mencionó, se aboca al problema de captura electrónica simple a distancias (R) grandes entre dos estados. En esta descripción, se supone que los canales adiabático incidente y de intercambio de carga tienen curvas de potencial casi paralelas, en las que el elemento de matriz de acoplamiento, $H_{12}(R)$, tiene una dependencia exponencialmente decreciente en R . La transición entre los dos estados se presenta alrededor de la distancia R_c definida por $H_{12}(R_c) = \frac{\Delta E}{2}$, donde ΔE es el defecto de energía considerado por Massey.

La interacción de intercambio de carga es responsable (para R grande) del desdoblamiento $\Delta V(R)$ de los niveles de energía atómicos en los niveles moleculares adiabáticos. Benoit y sus colaboradores⁽¹¹⁾ verificaron que esta interacción se puede emplear para explicar el pozo de potencial del estado base del sistema $(H-RG)^+$ para R grande ($RG = \text{gas raro}$). Estas propiedades se utilizaron para determinar la interacción de intercambio de carga. Proponen una expresión general de la expresión 1.4 dada por $H_{12} = A \exp(-\lambda R)$. Si se conocen las curvas de energías adiabáticas, es posible calcular el factor A . Los

autores además llevaron a cabo mediciones de transferencia de carga en colisiones entre protones y átomos de *Kr* y *Ar*, utilizando una técnica de tiempo de vuelo (*TOF*) en un intervalo de energías de $100 \leq E \leq 350 \text{ eV}$.

En la siguiente tabla (*tabla I.3*) se resumen los trabajos teóricos descritos para captura simple.

Tabla I.3

Autores	descripción
Massey ⁽²³⁾	Predice el máximo en la sección transversal total a una velocidad $v = a\Delta E/h$.
Demkov ⁽²⁶⁾	Calcula la sección transversal total utilizando una representación atómica del tipo enlace de valencia, donde las curvas de energía potencial son casi paralelas e interactúan a través de un potencial de acoplamiento que decrece exponencialmente.
Olson ^(4,25)	Utilizando una teoría modificada de Landau-Zener ⁽²⁸⁾ explica cualitativamente varias secciones totales asimétricas-inelásticas. Derivó una fórmula sencilla que es útil para estimar la transición de probabilidad de curvas de potencial.
Kubach et al ⁽²⁷⁾	Estudian el sistema $(\text{H} - \text{Kr})^+$ utilizando orbitales adiabáticos LCAO-SCF.
Benoit et al ⁽¹¹⁾	Reportan los valores de los parámetros del modelo de Demkov para varios sistemas $(\text{H}^+ - \text{RG})$ obtenidos por varios autores, entre ellos los de Kubach.

Del análisis de todos estos modelos para captura electrónica simple se observa que son complementarios. El modelo que describe mejor los

resultados experimentales obtenidos en este trabajo es el de Olson, como se discutirá en la sección correspondiente. Se presentan también los valores obtenidos para la sección total a partir del modelo de Massey y la comparación con el máximo obtenido en este trabajo.

1.2.2. Captura electrónica doble

1.2.2.A.- Hipótesis adiabática de Massey⁽²³⁾

Si en los procesos de doble captura electrónica del tipo $A^+ + B \rightarrow A^- + B^{++}$ se desea aplicar la hipótesis adiabática, no se puede asegurar *a priori* que el valor del parámetro de impacto a sea el mismo que el correspondiente a los procesos de captura simple. En este caso, se recurre al resultado obtenido por Hasted⁽²⁴⁾ en el que se determina el valor de a en procesos de captura electrónica múltiple: cuando m electrones son capturados por el ion, $am = 7\text{Å}$; por lo tanto, para doble captura electrónica, $a = 3.5\text{Å}$.

Sin embargo, Fogel' y sus colaboradores⁽¹⁷⁾ determinaron experimentalmente el valor de a para una gran cantidad de procesos de doble captura electrónica. Cuando el blanco es un gas inerte, $a = 1.5\text{Å}$, y cuando el blanco es un gas molecular simple (H_2 , N_2), a varía desde 0.5Å hasta 2.3Å .

Utilizando la *expresión 1.2* se obtiene que el máximo en la sección tanto para $a = 1.5\text{Å}$ como para $a = 3.5\text{Å}$ está muy alejado de los valores que aquí se reportan (*figura IV.5*).

Debido entonces a que el valor de a depende del proceso, se acostumbra escribir una expresión más general para la sección transversal de captura electrónica cuando se aplica la hipótesis adiabática de Massey. Esta expresión es la siguiente: $\sigma(v) = A \exp\left(\frac{-Ba\Delta E}{hv}\right)$, donde ΔE es el defecto de energía correspondiente al proceso de que se trate, y A y B son constantes que se pueden determinar para cada pareja ion-átomo-molécula que colisiona.

1.2.2.B.- Pedersen et al(5)

Pedersen y sus colaboradores midieron las secciones de transferencia simple de carga σ_{10} y σ_{21} , así como la sección de transferencia doble σ_{20} del sistema del Mg para un amplio intervalo de velocidades de impacto. La figura 1.3 muestra sus resultados para σ_{20} . Se observa que la curva presenta una estructura muy pronunciada la cual fue interpretada en términos de las amplitudes de dos canales resonantes de intercambio de carga que interactúan.

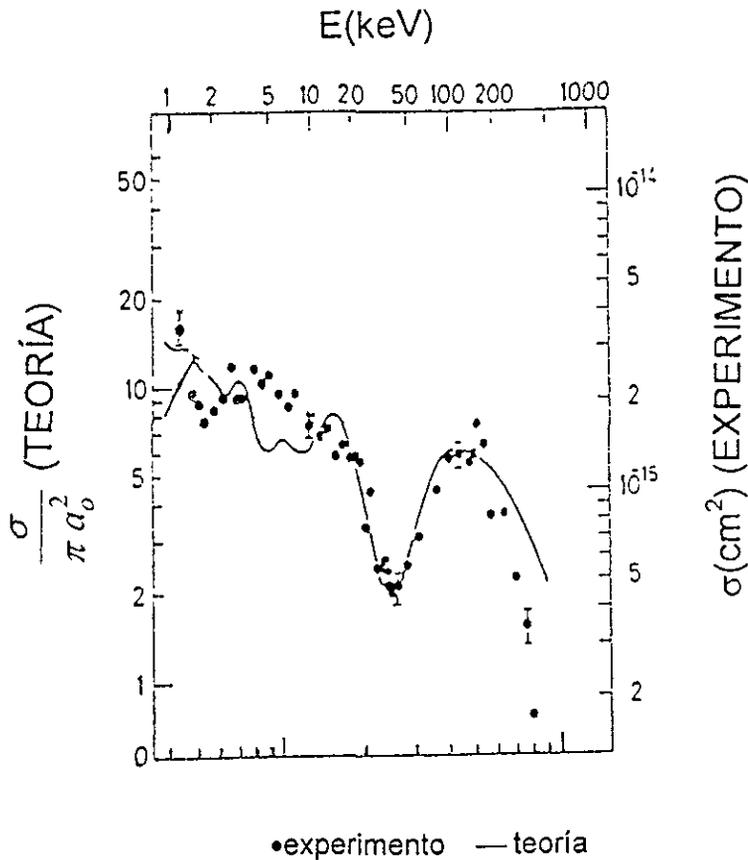


Figura 1.3 – σ_{20} vs energía

El modelo teórico desarrollado por Pedersen y sus colaboradores parte de la siguiente expresión para la probabilidad de transferencia de carga⁽⁴³⁾:

$$P(b) = \text{sen}^2 \Gamma(b) \quad \text{con} \quad \Gamma(b) = \frac{1}{\hbar v} \int_b^{\infty} \Delta E(R) \left[1 - \left(\frac{b}{R} \right)^2 \right]^{-1/2} dR$$

Donde b es el parámetro de impacto; v la velocidad de colisión y $\Delta E(R)$ es la diferencia de energía entre los estados moleculares simétrico y antisimétrico formados durante la colisión.

Considerando la interacción en el radio de cruce, llegan a una expresión para la probabilidad para el doble intercambio de carga resonante, que es función, entre otros parámetros, de $\Gamma(b)$ y de la fase relativa $\varphi(b)$ de las amplitudes. Suponiendo que $\varphi(b)$ varía lentamente sobre el intervalo

$\Delta b \approx \frac{1}{2} \left(\frac{2\sigma_{20}}{\pi} \right)^{1/2}$, esto es, considerando velocidades mayores a una cierta velocidad v_1 [definida por $\Delta\varphi(v_1) = \frac{1}{2} \pi$, siendo $\Delta\varphi$ la variación de φ sobre un intervalo Δb], obtienen la siguiente expresión para la sección total

$$\sigma_{20} = \sigma_S \text{sen}^2 \bar{\varphi} \quad . . . \quad (I.9)$$

donde $\bar{\varphi}$ es el valor representativo de $\varphi(b)$ para parámetros de impacto en Δb .

Eventualmente $\bar{\varphi}$ se aproxima a cero por lo que se espera una estructura regular con “ n ” oscilaciones a velocidades (v) más grandes, donde

$$n \approx \frac{\bar{\varphi}(v_1)}{\pi} \approx \frac{\bar{\varphi}(v_1)}{2\Delta\varphi(v_1)} \quad . . . \quad (I.10)$$

El éxito de este modelo en explicar los resultados experimentales de doble captura electrónica para el Mg mediante razonamientos simples, tiende a enfatizar la importancia de éstos. Además, los autores sugieren la aplicación de su modelo a otros procesos resonantes de transferencia de carga. Como los datos de doble captura electrónica de protones en Kr que se reportan muestran el mismo comportamiento de la sección en función de la energía, se analizaron utilizando la *ecuación I.9* junto con el modelo de Olson.

En la siguiente tabla (*tabla I.4*) se resumen los trabajos teóricos descritos.

Tabla I.4

Autores	descripción
Massey ⁽²³⁾	Predice el máximo en la sección transversal total a una velocidad $v = a\Delta E/\hbar$, donde a es el alcance de la interacción.
Pedersen et al ⁽⁵⁾	Desarrollan un modelo para dos canales resonantes de intercambio de carga que interactúan, para interpretar el comportamiento de la sección transversal total en términos de dos amplitudes resonantes de un proceso de doble transferencia de carga.

Sólo hay dos modelos aplicables al caso de procesos de captura doble de carga, cuyo comportamiento será análogo al que se reporta en el presente trabajo. Uno de ellos únicamente predice el máximo para la sección total; el modelo de Pedersen y sus colaboradores se aplicó debido a que sugieren que se puede emplear en otros procesos resonantes de transferencia de carga.

1.2.3. Análisis de distribuciones angulares de productos de disociación

Hay varias teorías y modelos para explicar procesos disociativos^(19,45). Sin embargo, se decidió utilizar el modelo desarrollado por Cisneros y sus colaboradores⁽¹⁹⁾ porque se ajusta bien a procesos similares al que aquí se presenta. El modelo fue desarrollado sobre las distribuciones angulares de los fragmentos de disociación que resultan de la captura electrónica, a estados disociativos, de sistemas de moléculas diatómicas. Predijeron y verificaron

experimentalmente que la distribución angular $\frac{d\sigma_f}{d\Omega}$, de cualquier fragmento f , debe escalar como:

$$\frac{1}{E_i} \frac{d\sigma_f}{d\Omega} = f(E_i \theta^2) \quad . . . (1.11)$$

Donde E_i es la energía incidente del ion molecular diatómico.

Este modelo parte de las siguientes suposiciones generales:

- a). El proceso de captura es rápido comparado con los movimientos vibracional y rotacional. Esta suposición se basa en el hecho de que para la menor energía incidente usada en este experimento, el tiempo de interacción es aproximadamente de $10^{-15} s$, mientras que los periodos vibracionales son del orden de $10^{-14} s$ y los periodos rotacionales son del orden de $10^{-12} s$. Por tanto se puede considerar que el ion molecular incidente tiene orientación y separación R fijas durante el proceso de captura electrónica.
- b). Las energías de disociación (que dan lugar a las componentes de la velocidad a lo largo del eje interprotónico) son grandes comparadas con las energías rotacionales, por lo que estas últimas pueden ser despreciadas; los productos de disociación serán emitidos en la dirección de la línea que une los dos protones al momento de la captura.
- c). Todas las orientaciones del H_2^+ son igualmente probables.
- d). Las velocidades de disociación son pequeñas comparadas con las velocidades del haz incidente. Ya que las energías de disociación son del orden de $5 eV$ y las energías del haz incidente son de $1 keV$, esta aproximación es adecuada.
- e). El centro de masa del ion molecular incidente sufre una deflexión despreciable debido al proceso de la colisión. La *figura I.4* ilustra el proceso de disociación.

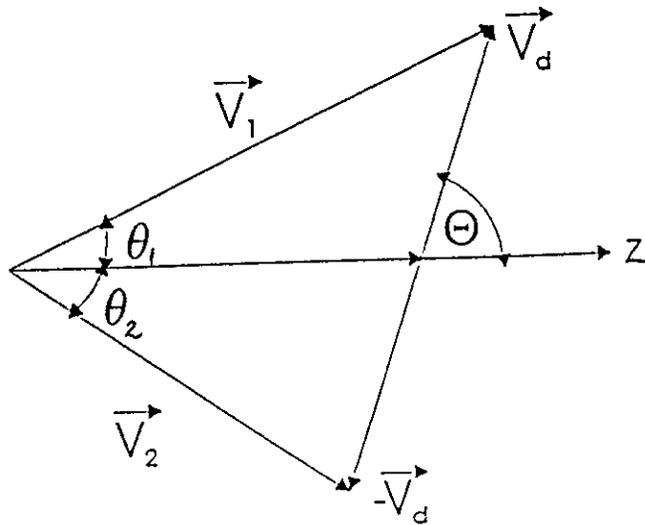


Figura I.4 - Geometría de la colisión por la cual un ion H_2^+ es disociado por un átomo de Kr.

El ion H_2^+ tiene una velocidad v_i y una energía E_i . Al disociarse, los fragmentos de disociación adquieren velocidades \overline{v}_d y $-\overline{v}_d$ en el sistema centro de masa de H_2 . \overline{v}_d es paralela al vector de separación interprotónico \overline{R} , en el momento de la captura. El vector \overline{R} hace un ángulo Θ respecto al eje z positivo, el cual coincide con la dirección del haz incidente, mientras que Φ es el ángulo azimutal en el plano x-y.

Si las medidas se realizan en el sistema de laboratorio, es necesario obtener las velocidades v_1 y v_2 y las direcciones θ y ϕ en este sistema, en términos de Θ y Φ .

Dado que la velocidad relativa de los sistemas de referencia es enteramente en dirección del eje z, se sigue que:

$$\phi_1 = \Phi, \quad \phi_2 = \pi + \Phi \quad \dots \quad (I.12)$$

Utilizando la ley de los senos y la ley de los cosenos, y considerando $v_d \ll v_i$, obtienen que

$$\frac{v_d}{v_i} = \left(\frac{E_d}{E_i} \right)^{1/2} = \frac{\left(\frac{2 \left(\frac{1}{2} E_d \right)}{M} \right)^{1/2}}{\left(\frac{2E_i}{2M} \right)^{1/2}} \quad \dots \quad (1.13)$$

En esta relación E_d es la energía de disociación, la cual es función de R , y E_i es la energía del haz incidente. La segunda igualdad se debe al hecho de que cada uno de los fragmentos se lleva la mitad de la masa y la mitad de la energía.

Cisneros y sus colaboradores proponen que en el sistema del laboratorio, la distribución direccional de los fragmentos de la disociación está expresada por:

$$\frac{1}{E_i} \frac{dN}{d\Omega} = \frac{NN_t}{4\pi} \int_0^{R_d} \frac{\sigma_c(R, \Theta, \Phi) \rho(R) dR}{E_d^{1/2} (E_d - E_i \theta^2)^{1/2}} \quad \dots \quad (1.14)$$

Donde N es el número de moléculas incidentes y N_t el número de átomos en el blanco por unidad de área, $\left(\frac{d\Omega}{4\pi} \right)$ es la fracción orientada dentro de $d\Omega$; $2dN$ es el número total de fragmentos de disociación en la dirección $d\Omega$; σ_c es la sección de captura doble, $\rho(R)dR$ es la probabilidad de que la molécula tenga una separación entre R y $R+dR$, y R_d es el valor de R para el cual $E_d = E_i \theta^2$, ($E_d = \infty$ para $R=0$). La dependencia de E_d con R se puede observar en la *figura 1.5* (curvas de potencial de H_2^+ , H_2^- y H_2).

Este resultado debe promediarse sobre todos los valores de Φ ya que éste no es observado en el experimento.

La dependencia funcional de la sección de captura σ_c con R , Θ , Φ es el punto en donde la teoría y el experimento coinciden. Los datos experimentales de $\frac{dN}{d\Omega}$ sugerirán la dependencia funcional de σ_c en R , Θ , Φ . Esto a su vez

debe dar información sobre el ion molecular triatómico $(KrH_2)^+$, tal como cruzamiento de niveles.

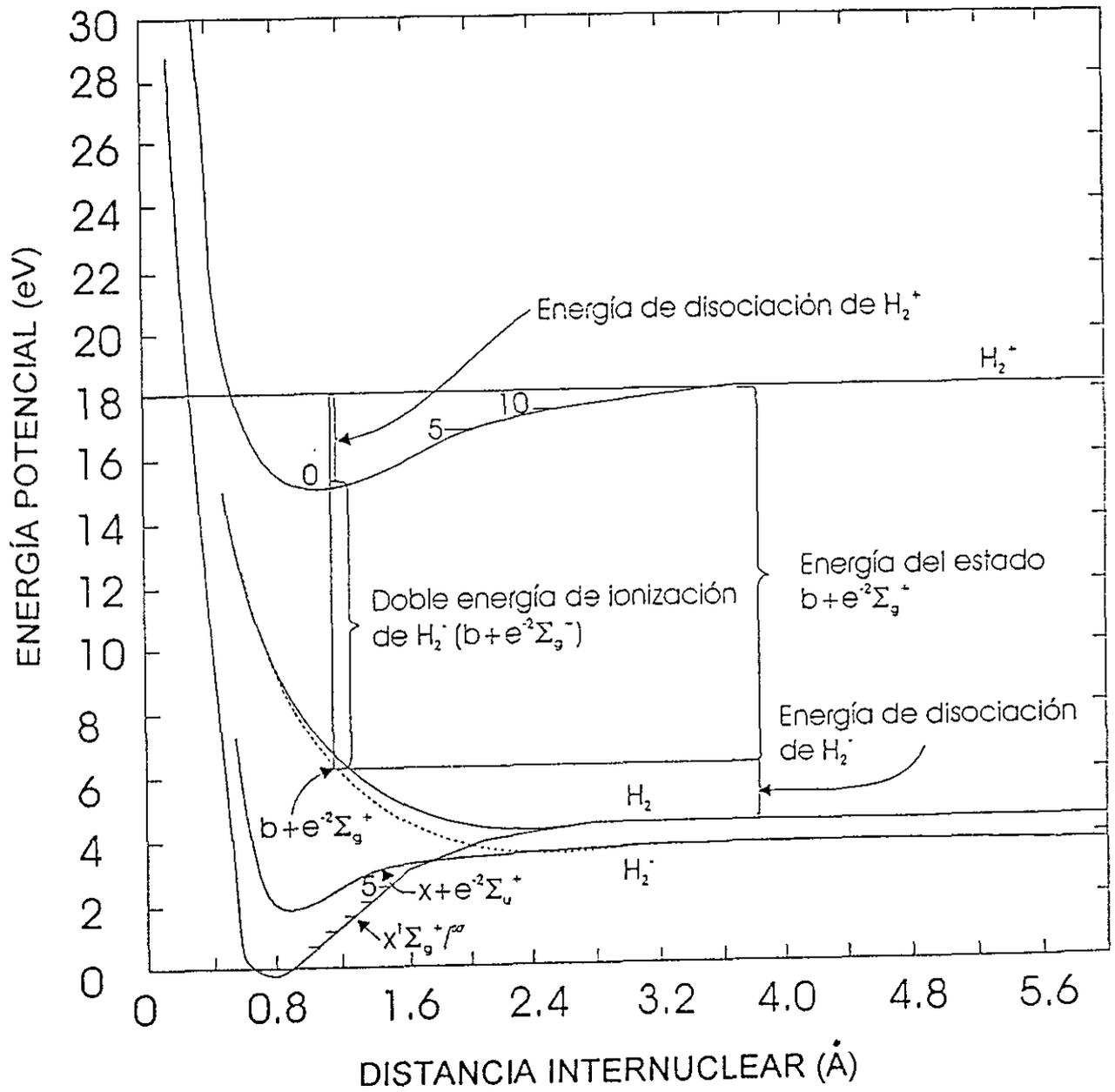


Figura I.5 – Curvas de potencial de H⁺, H₂⁻ y H₂⁰⁽²⁹⁾.

I.3.- Experimentos previos

A continuación se describen breve y cronológicamente los trabajos presentados en la *tabla I.1* en los que se estudia la interacción de iones de hidrógeno atómico o molecular con diferentes blancos, entre ellos el kriptón; algunos de esos datos se han graficado junto con los nuestros para poder comparar los diferentes conjuntos de datos. El estudio de este sistema, y otros similares, se ha desarrollado durante varias décadas. Sin embargo, faltan teorías que expliquen varios de los procesos que se llevan a cabo, y hay discrepancias entre los diferentes datos; su estudio sigue siendo de gran interés. Es importante realizar medidas absolutas como las presentes, pues se tendrá un conocimiento más real del comportamiento de los sistemas bajo estudio y motivarán el desarrollo de más trabajos teóricos.

I.3.1.- Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾

El trabajo está dividido en dos secciones cubriéndose en cada una, un diferente intervalo de energía. En la primera parte, Stedeford determina las secciones de transferencia de carga para protones, iones de hidrógeno molecular y iones de helio en H , He , Ar , Ne , Kr y Xe , así como las secciones de neutralización de iones negativos de hidrógeno atómico en He , Ne , Ar , Kr y Xe . Sus resultados concuerdan a bajas energías con trabajos previos con un error del 20%. En relación con el Kr , presenta datos de transferencia de carga para H^+ y H_2^+ , mismos que se utilizaron para comparar los resultados obtenidos en el presente estudio, ya que Stedeford trabajó en el intervalo de energías entre 3 y 40 keV .

La segunda parte de este artículo corresponde al trabajo de Hasted quien estudia las mismas reacciones pero en el intervalo de energías entre 100 y 4000 eV . Discute sus resultados en términos de la hipótesis adiabática de Massey. Hasted supuso que la distancia de interacción es constante para diferentes reacciones. Entonces, el valor de la energía $\sqrt{E_{\text{máx}}}$ al que ocurre el máximo en la sección depende de $\Delta E \sqrt{m}$, donde m es la masa del ion en cuestión; presenta la dependencia de $\Delta E \sqrt{m}$ con la energía para el máximo de la sección. Encontró que la hipótesis adiabática describe adecuadamente las reacciones de intercambio de carga en un amplio intervalo de energías del ion

incidente. Para la transferencia de carga entre protones y átomos de kriptón esta dependencia ya no se cumple; los datos están alejados de la recta.

1.3.2.- Fogel' et al(17)

En algunos procesos de colisiones se observa que los resultados experimentales de $\sigma(v)$ no concuerdan con la hipótesis adiabática. Este desacuerdo se presenta de dos maneras: 1) se observan dos o tres máximos en vez de uno solo, 2) los valores de las secciones transversales son anormalmente grandes para pequeñas velocidades. Resulta entonces muy importante determinar el intervalo de validez de la hipótesis adiabática para procesos del tipo $A^+ + B \rightarrow A^- + B^{++}$.

Fogel' y sus colaboradores motivados por lo anterior y por el hecho de que los datos experimentales disponibles correspondían a un intervalo pequeño de energías, midieron las secciones transversales de doble captura electrónica de protones en *He, Ne, Ar, Kr, Xe, H₂ y N₂* en el intervalo de energías entre 3 y 65 keV.

En sus resultados, sistemas como el $H^+ + Kr$ presentan dos máximos en la curva $\sigma(v)$. El primer máximo (presente a pequeñas velocidades) lo asocian con un intercambio doble de carga sin excitación del ion lento doblemente cargado (Kr^{++} en este caso). Para el segundo máximo consideran que sólo se puede asociar con el intercambio doble de carga en donde el ion lento doblemente cargado se produce en un estado excitado y posteriormente se ioniza. Usando el criterio adiabático los autores encontraron que la energía de este ion corresponde al valor del tercer potencial de ionización. Esto es, para el segundo máximo de $\sigma_{l-l}(v)$ suponen que éste es el resultado del proceso $H^+ + B \rightarrow H^- + B^{+++} + e^-$.

1.3.3.- Kozlov et al(18)

La forma en que la sección transversal, σ , depende de la velocidad, es difícil de obtener debido a la dificultad que existe en contar con un haz intenso de partículas a bajas energías, y a lo pequeñas que son las secciones transversales que se miden. Para realizar este trabajo, Kozlov y sus colaboradores consideran que el mejor proceso, en la región adiabática, para

estudiar la curva $\sigma(v)$, es a través de la captura electrónica doble por protones. Presentan los resultados obtenidos para las secciones $\sigma_{I-I}(v)$ de protones con energías entre 0.5 y 5.0 keV en blancos de H , Ar y Kr . Sus datos de σ_{I-I} fueron graficados junto con datos experimentales a energías mayores obtenidos en otros laboratorios y encontraron una buena concordancia entre los diferentes conjuntos de datos. El intervalo de energías estudiado está cerca de la energía correspondiente al máximo principal de la sección total para el Ar y el Kr . Observaron que las secciones totales disminuyan conforme disminuye la velocidad del haz incidente, que corresponde a la región no adiabática.

La gráfica con los diversos datos es de muy mala calidad, y el tamaño no permite sacar valores para compararlos con los presentes.

1.3.4.- Williams^(14,16,30)

Williams⁽¹⁴⁾ junto con Dunbar llevaron a cabo mediciones de secciones transversales de captura simple de H^+ , H_2^+ y H_3^+ incidiendo en gases inertes, en el intervalo de energías de 2 a 50 keV . Las medidas de σ_{I0} muestran que para todas las energías en el intervalo estudiado, la sección con blancos de gases raros disminuye conforme aumenta el número atómico. Los valores relativos de la sección total fueron estandarizados a 10 keV con los valores de Stier y Barnett⁽³¹⁾. Hay un acuerdo excelente entre estos valores y los de Williams en todos los casos, excepto en Kr en el que para protones de energías mayores de 8 keV , empiezan a ser mayores los valores de Williams llegando a una diferencia del 20% a 2 keV .

Los valores obtenidos por Williams y Dunbar para σ_{I0} con Kr como blanco se encuentran entre 2 y $3 \times 10^{-15} \frac{cm^2}{átomo}$ para energías del haz incidente entre 2 y 5 keV , siendo mayores que los reportados aquí. Esta diferencia puede deberse a que los datos de Williams fueron estandarizados y a que nuestro sistema de vacío es más limpio; las lecturas del vacío pueden diferir entre un 2% y un 15% con las nuestras.

Williams⁽¹⁶⁾ también midió las secciones σ_{I-I} para protones de 2 a 50 keV incidiendo en hidrógeno y gases raros. Para el Ar , Xe y Kr observa dos máximos, uno a una energía menor a 10 keV y otro a una energía mayor a 20

keV. Utiliza la hipótesis adiabática de Massey para explicar la posición de los máximos con $ma = 7\text{\AA}$ y $\Delta E = 36.3\text{ eV}$ para el *Kr*.

En otro trabajo, Williams⁽³⁰⁾ analiza el comportamiento de átomos de hidrógeno con energías entre 2 y 50 *keV* incidiendo sobre hidrógeno y gases nobles, y reporta las secciones $\sigma_{0.1}$ y σ_{0I} .

1.3.5.- Koopman⁽¹³⁾

En este trabajo se reportan las medidas de las secciones transversales originadas por el intercambio de carga en los sistemas: $H^+ + H_2$, $H_2^+ + H^+$, $H^+ + Ar$, $H_2^+ + Ar$, $H^+ + Kr$, $H_2^+ + Kr$, $H^+ + Xe$, $H_2^+ + Xe$, $He^+ + Ar$, $He^+ + Kr$ y $He^+ + Xe$ en el intervalo de energías de 70 a 1050 *eV*. Koopman emplea campos eléctricos en la cámara de colisión para recolectar los productos.

El autor considera que las secciones transversales son de importancia para determinar la composición y conducta de interacciones atómicas por medio de experimentos en laboratorio, apoyados por trabajos teóricos.

Los procesos analizados en el trabajo de Koopman son del tipo $A^+ + B \rightarrow A + B^+$. Compara sus resultados con los encontrados por Stedeford y sus colaboradores⁽¹⁵⁾ a energías mayores, quienes realizaron un estudio teórico haciendo uso de la hipótesis adiabática de Massey⁽²³⁾. Las secciones medidas que se presentan en ese trabajo son complementarias en un intervalo importante de energías con las realizadas en trabajos anteriores⁽¹⁵⁾.

Las secciones transversales de intercambio de carga medidas para H^+ y H_2^+ en *Kr* se comportan de manera similar a las obtenidas por Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾ excepto a energías menores de 300 *eV*. Para el haz de H^+ la sección transversal presenta un máximo de $3 \times 10^{-15}\text{ cm}^2$ alrededor de 300 *eV* y para H_2^+ no hay máximo; la curva permanece casi constante a partir de los 300 *eV*.

Estos datos con kriptón se presentan junto con los nuestros en las gráficas del *Capítulo III*.

1.3.6.- Fleischmann y Young⁽¹⁰⁾

Las distribuciones angulares de las partículas producidas por la dispersión en la transferencia de carga de H^+ en *Kr* fueron estudiadas por

primera vez por Fleischmann y sus colaboradores en 1967. En este estudio se miden las secciones diferenciales para la reacción no-resonante: $H^+ + Kr \rightarrow H^0 + Kr^+ - 0.4eV$ en el intervalo de energías entre 70 y 200 eV. Ellos encuentran oscilaciones que se interpretan como cruzamiento de curvas de potencial en los sistemas moleculares correspondientes. Observan que el comportamiento de sus resultados tiene mucha similitud con las distribuciones de las colisiones elásticas de He^+ en Ar y He^+ en Ne con el patrón regular de oscilaciones encontrado en la dispersión elástica del sistema $He^+ + He$.

La posición de los mínimos de las secciones diferenciales angulares es casi proporcional al inverso de la energía de la partícula. La sección transversal absoluta en la vecindad de este mínimo varía como el inverso de E^2 . Estas características corresponden a los requisitos necesarios para explicar el cruzamiento de niveles para las oscilaciones en las distribuciones de la dispersión elástica. Anomalías como ésta pueden deberse a que el cruzamiento se presenta a grandes distancias internucleares, o sea a pequeños valores de $E\theta$, debido a la baja energía de excitación (0.4 eV) del nivel $4p^5 \ ^2P (J=0)$ en el ion Kr^+ . Por ello, los autores suponen que las estructuras son ocasionadas por el cruzamiento de curvas del sistema $(H-Kr)^+$.

No reportan el estado de excitación resultante del átomo de hidrógeno.

1.3.7.- Abignoli et al(3)

En este artículo se reportan las secciones transversales diferenciales de colisiones de H^+ con gases raros (He, Ne, Ar, Kr y Xe) en el intervalo de energías de 500 a 3000 eV y ángulos entre 0.5° y 10.0° en los procesos: colisión elástica, intercambio de carga, excitación simple del átomo, excitación del átomo a niveles autoionizantes. Los iones son producidos en un cátodo caliente positivo de descarga, a baja presión y voltaje.

Para el caso de colisiones elásticas de H^+ en Kr , los autores encontraron que la principal característica de la sección transversal es que ésta decrece en la región de colisión para valores del ángulo reducido $\tau = E\theta$ mayores que 800 eV-grado debido a un rápido crecimiento de procesos de intercambio de carga, así como de procesos inelásticos. En el intervalo de 0.5 a 1.0 keV la sección transversal diferencial exhibe algunas "oscilaciones" que se van haciendo más suaves a medida que se incrementa la energía, hasta ser completamente

constante (cerca de los 2 keV) . Estas oscilaciones pueden estar relacionadas con el patrón de difracción producido en el canal elástico por el átomo que absorbe.

En el caso de intercambio de carga, Abignoli y sus colaboradores midieron las probabilidades P_e de intercambio de carga a varias energías de impacto (0.5 a 3.0 keV), en el intervalo angular $1^\circ \leq \theta \leq 4^\circ$. Dicha probabilidad P_e muestra en la colisión de $H^+ + Kr$ una fuerte dependencia angular a energías de aceleración menores a 700 eV, con un máximo muy marcado ($P_{e(máx)} = 0.85$) localizado a un valor de τ cercano a los 0.7 keV-grado, y otro máximo cercano a los 2 keV-grado. A energías más altas, dicha dependencia llega a ser menos marcada. Por ejemplo, para valores de la energía de impacto de $E_o = 3$ keV y $\tau > 3$ keV-grado, P_e es constante (aproximadamente 0.58). En ese artículo se dice que este comportamiento sugiere la existencia de una interacción localizada entre el estado base $X'\Sigma^+$ y un estado de intercambio como el $B'\Sigma^+$ del sistema $(H-Kr)^+$.

1.3.8.- Doughty et al(32)

En este artículo se reportan mediciones de secciones transversales para la formación de átomos de hidrógeno en el estado $4s$ por impacto de H^+ en gases nobles (He, Ne, Ar, Kr, Xe) en un intervalo de energías de 10 a 150 keV. Los autores no reportan la condición de los átomos del blanco después de la colisión. Los valores obtenidos para la sección transversal con He son menores que para los otros gases. Sin embargo, el valor de las secciones transversales no está ordenado de acuerdo al número atómico, excepto cerca de su respectivo máximo.

Doughty y sus colaboradores utilizaron la hipótesis adiabática de Massey⁽²³⁾ para calcular la posición de los máximos de las secciones transversales y compararlos con sus resultados experimentales. El análisis que hicieron concuerda bien con los datos de Kr y Xe . Para el He y el Ne , el análisis predice un valor de 1.5 veces mayor que el observado.

1.3.9.- Johnson et al(2)

Johnson y sus colaboradores reportan las medidas de la sección diferencial absoluta para dispersión total y transferencia de carga para H^+ y He^+ en gases raros. No hacen interpretaciones teóricas de los datos; hacen énfasis en los espectros de sus resultados experimentales. Para kriptón reportan las siguientes reacciones:

$H^+ + Kr$, dispersión total a 1.5 keV entre 0.03° y 1.0° ;

$H^+ + Kr$, transferencia de carga a $0.5, 1.5$ y 5.0 keV a ángulos menores que 1.0° .

La estructura que se observa en las secciones transversales del proceso de dispersión directa para $H^+ + Kr$ es debida a una contribución de eventos inelásticos y elásticos.

En las medidas de transferencia de carga para $H^+ - Kr$ también se observan oscilaciones regulares. Para 1.5 keV hay dos máximos, uno a 0.15°

con $\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \times 10^{-9} \frac{\text{cm}^2}{\text{sr}}$, $\tau = 225 \text{ eV-deg}$ y otro a 0.22° con $\frac{d\sigma}{d\Omega} = 8 \times 10^{-10}$

$\frac{\text{cm}^2}{\text{sr}}$, $\tau = 330 \text{ eV-deg}$. Para 5.0 keV sólo hay un máximo en 0.09° con $\frac{d\sigma}{d\Omega} =$

$2 \times 10^{-9} \frac{\text{cm}^2}{\text{sr}}$ similares a los de Fleischmann⁽¹⁰⁾. Las oscilaciones regulares

que se presentan en el trabajo de Johnson son consistentes con las oscilaciones en las secciones de transferencia de carga observadas por Abignoli⁽³⁾ y Fleischmann⁽¹⁰⁾.

Capítulo II

Arreglo experimental

El experimento se desarrolló utilizando un acelerador de bajas energías del Laboratorio de Cuernavaca, Instituto de Física de la U.N.A.M. (*figura II.1*). Las energías que se pueden alcanzar van desde 0.5 eV hasta 5.0 keV .

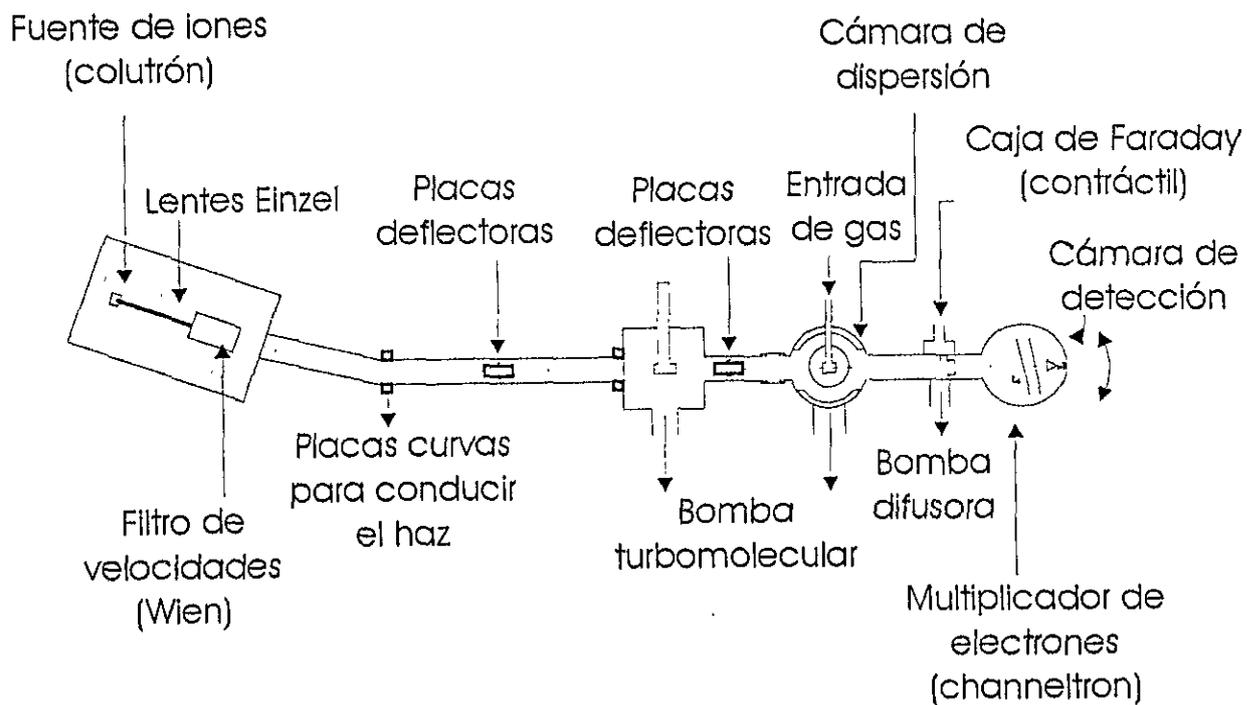


Figura II.1 Esquema del acelerador
Principales componentes del sistema.

A continuación se describen de manera general cada una de las partes del acelerador.

II.1.- Fuente de iones

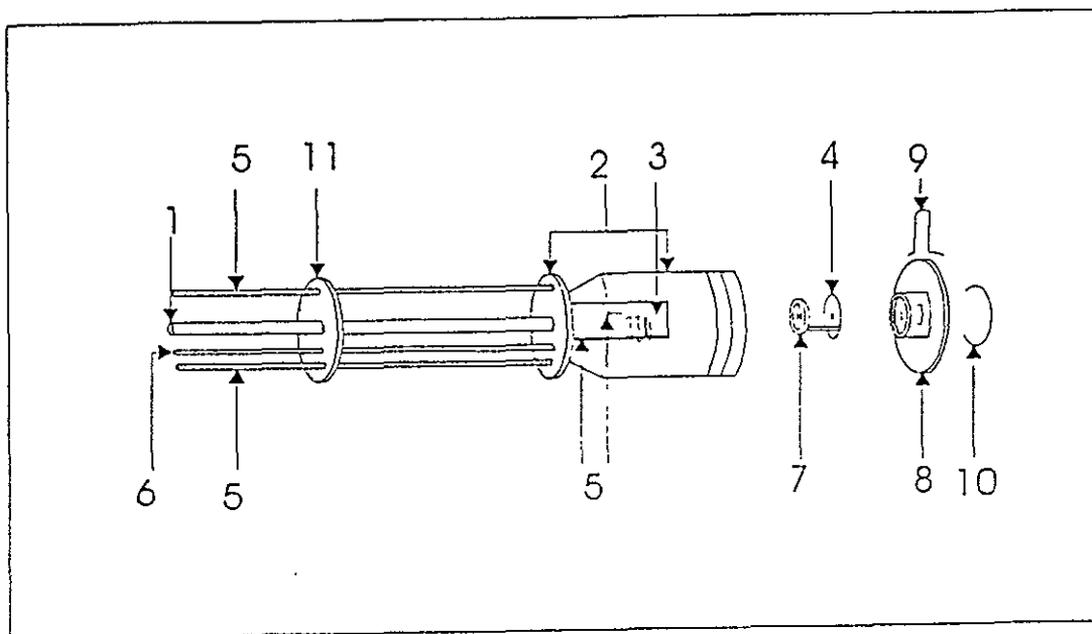


Figura II.2 - Fuente de iones.

La fuente de iones genera éstos por medio de una descarga de arco; la *figura II.2* muestra un esquema de ella. El cuerpo de la fuente (2) está hecho de nitruro de boro, que es un material con poca resistencia a los esfuerzos mecánicos. Sin embargo, tiene la característica de resistir altas temperaturas, lo que le permite funcionar como horno para la producción de iones de vapores metálicos, además de aquellos producidos a partir de elementos gaseosos.

En los experimentos que se describen en este trabajo, el gas que se ioniza es el hidrógeno, el cual entra en el recinto de la fuente a través del tubo marcado en la *figura II.2* con el N° 1.

La manera como funciona esta fuente de iones es la siguiente:

Al circular por el filamento de tungsteno (3) una corriente entre 15 y 16 A, éste se pone incandescente y emite una gran cantidad de electrones (emisión termoiónica). Al aplicar una diferencia de potencial entre el ánodo

(4) (a través del conector (6)) y el filamento (cátodo), los electrones adquieren la energía necesaria para ionizar y disociar las moléculas de hidrógeno, formándose un plasma que se denomina descarga en arco. La corriente que se aplica al filamento se proporciona a través de los conectores marcados con el número (5). El ánodo tiene un orificio de 0.5 mm de diámetro por el cual salen los iones que se producen en la fuente.

En la placa metálica, con atravesadores cerámicos (11), se aplica el voltaje al ánodo y la corriente al filamento. Es en este lugar en donde se aplica el voltaje acelerador V_a ; esta parte del acelerador se encuentra eléctricamente aislada del resto del acelerador.

Los elementos (7) y (8) son tapas de nitruro de boro que fijan la posición del ánodo, y que quedan sujetos al resto de la fuente de iones por medio de los seguros metálicos (9) y (10).

II.2.- Sistema de aceleración, enfoque y selección de iones

II.2.1.- Lentes Einzel

Al salir el haz de la fuente de iones presenta una dispersión espacial que va en aumento a medida que transcurren el tiempo y la distancia. Para reducir este efecto se emplea un sistema de lentes que sirve para enfocar o concentrar las partículas cargadas. Este sistema se conoce como lentes Einzel⁽³³⁾.

Las lentes Einzel empleadas en el desarrollo del presente trabajo tienen las siguientes características. Se trata de tres secciones de cilindro hueco de igual diámetro construidas en acero inoxidable, que se encuentran alineadas en un mismo eje. La distancia focal depende de la separación entre los cilindros y del voltaje aplicado a éstos. En este caso la separación entre los cilindros es fija, y por lo tanto la distancia focal sólo es función del voltaje aplicado a cada sección del cilindro.

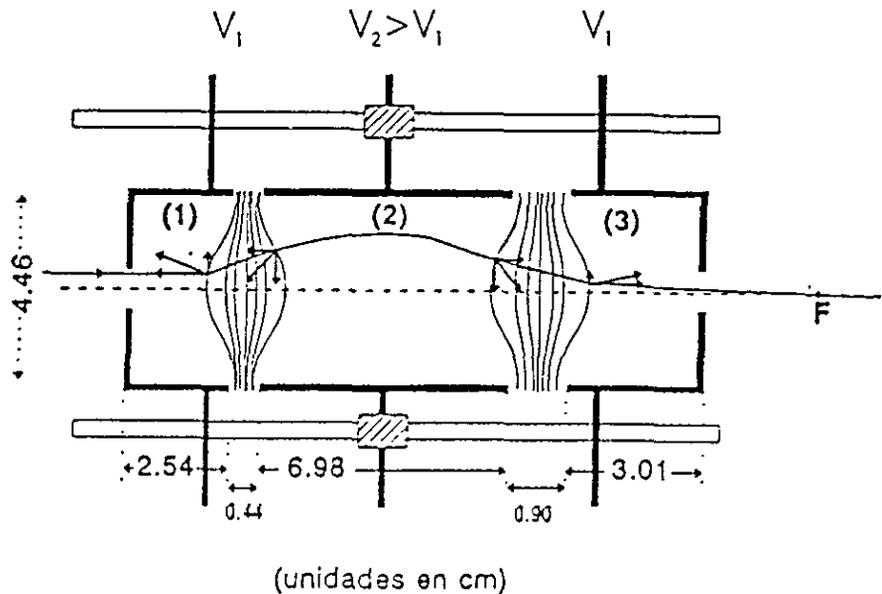


Figura II.3 - Lentes Einzel

En esta figura se ilustra la trayectoria que siguen las partículas cargadas debido al campo eléctrico producido en las lentes.

Al aplicar el mismo potencial al primer y tercer electrodos, la energía de las partículas cargadas que inciden no se ve alterada. Esto significa que el “índice de refracción” sea el mismo a la entrada y a la salida de las lentes. El electrodo intermedio puede tener un potencial mayor o menor que el de los otros dos, modificándose con ello la trayectoria del haz. Esto permite tener un efecto de enfoque.

En nuestro caso, el primer y tercer electrodos fueron conectados a tierra, por lo que las partículas cargadas que salen de la fuente adquieren la energía cinética en la región que se encuentra entre la salida de la fuente de iones y el primer electrodo cilíndrico de la lente Einzel.

A manera de ejemplo consideraremos un ion positivo que no incide en la dirección del eje de la lente Einzel. El primer y tercer electrodos se encuentran a un potencial V_1 y el electrodo central se encuentra a un potencial

V_2 , tal que $V_2 > V_1$. En la región 1 la componente radial de la fuerza que actúa sobre el ion lo aleja del eje de la lente Einzel. En la región 2, esta fuerza actúa en sentido opuesto, y como puede verse, el recorrido del ion en esta región es mayor que en las regiones 1 y 3. En esta última región (3), la fuerza radial nuevamente tiende a alejar al ion del eje. El ion está sometido más tiempo a la fuerza radial que se dirige hacia el eje, que a la fuerza radial que actúa en sentido inverso. La trayectoria del ion cruza el eje de la lente Einzel en el punto F .

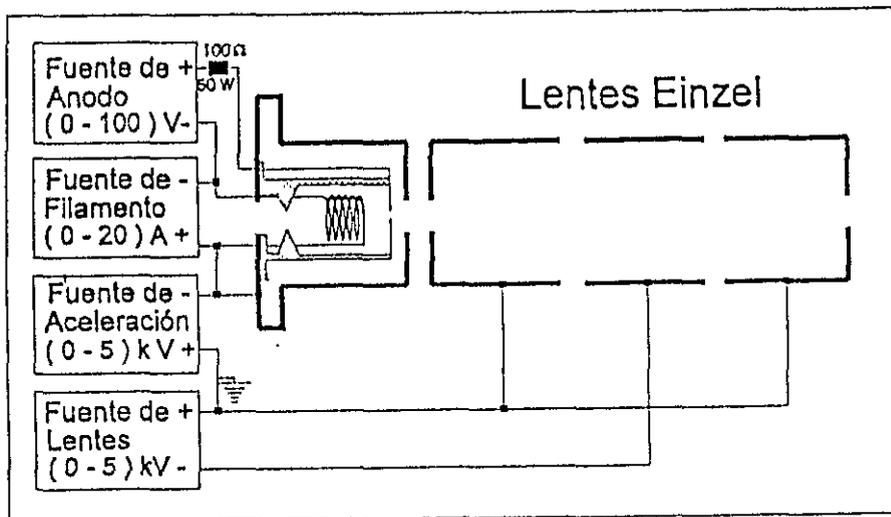


Figura II.4. Conexiones de la fuente de iones y de las lentes Einzel.

II.2.2.- Filtro de velocidades de Wien

Después de producir, acelerar y enfocar el haz de partículas cargadas, es necesario seleccionar el tipo de ion que se desea como proyectil. Esto se logra con un selector de masas que en nuestro caso es un "Filtro de Wien".

El Filtro de Wien⁽³⁴⁾ está formado por un imán y un juego de placas electrostáticas de deflexión. Las placas están montadas entre los polos del imán para producir un campo eléctrico E perpendicular al campo magnético B (campos E y B cruzados). Las figuras II.5a y b muestran una vista superior y una lateral del filtro.

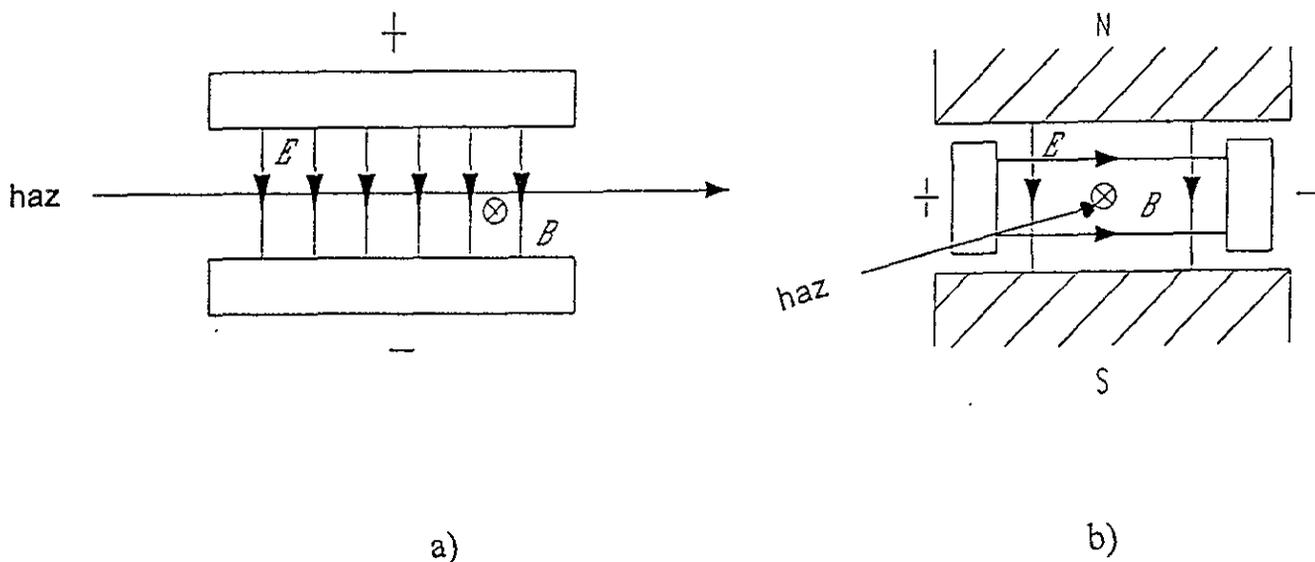


Figura 11.5. a). Vista superior del filtro b). Vista lateral del filtro

Quando un haz de partículas cargadas pasa por el filtro con una velocidad v , el haz se deflectará en una dirección por el campo electrostático y en otra por el campo magnético de acuerdo a la fuerza de Lorentz. La magnitud de estas deflexiones se calcula a partir de la fuerza magnética $F_B = Bqv$, y de la fuerza eléctrica $F_E = Eq$, donde B es la intensidad del campo magnético, E es la intensidad del campo eléctrico, q es la carga de la partícula y $v = \sqrt{\frac{2qV}{m}}$ es la velocidad del haz de partículas con m la masa de la partícula y V el voltaje de aceleración. Cuando las fuerzas eléctrica y magnética son iguales, esto es $Bqv = Eq$, las partículas cargadas con una cierta velocidad v_0 pasarán sin desviarse por el filtro. Las partículas con velocidades diferentes a v_0 son deflectadas y se dispersan.

Los iones con una masa diferente, M_X y una velocidad v_X , experimentan una fuerza centrípeta equivalente a:

$$\frac{M_X v_X^2}{R} = q(E - v_X \times B) = qB \left(\sqrt{\frac{m}{M_X}} - 1 \right).$$

De esta ecuación se sigue que los iones de masa M_x son deflectados en una trayectoria circular de radio $R = \frac{2V}{E\left(\frac{m}{M_x} - 1\right)}$. El siguiente esquema muestra

$$R = \frac{2V}{E\left(\frac{m}{M_x} - 1\right)}$$

cómo son separados los iones con masa M_x , de los iones de masa m que pasan sin ser deflectados.

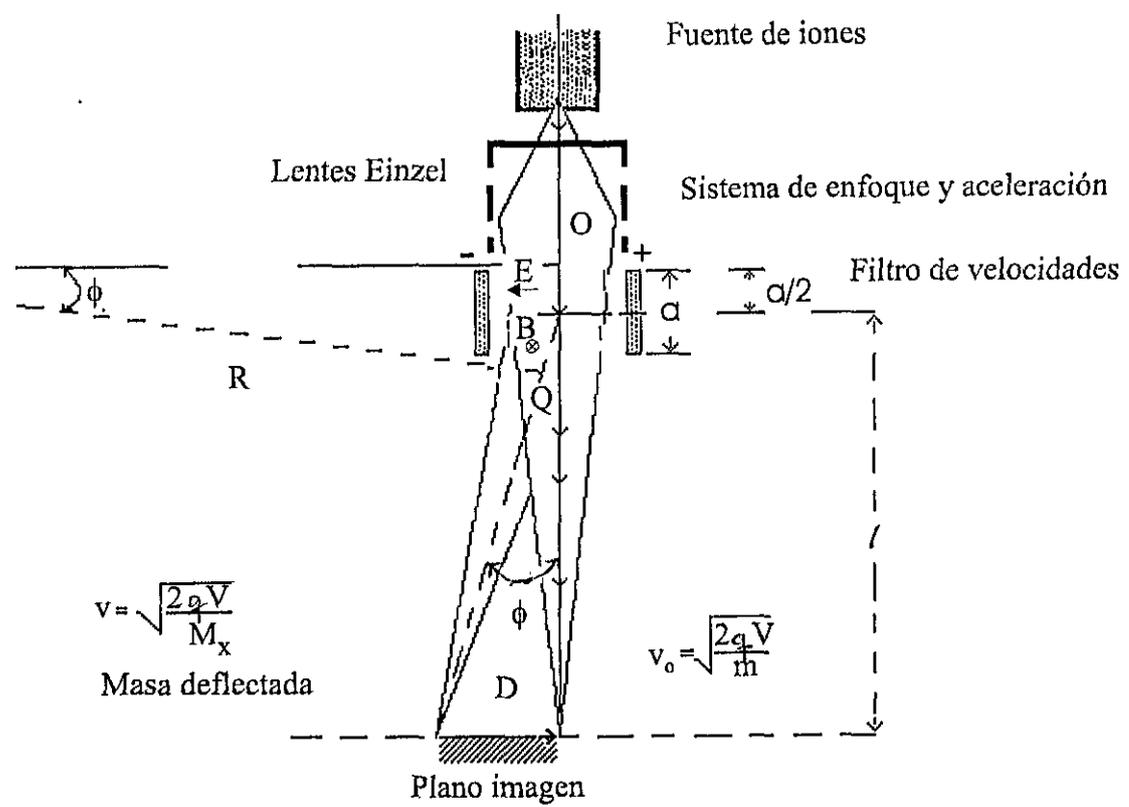


Figura II.6 – Separador de iones.

Considerando 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 , para ángulos pequeños se tiene que $\tan \phi \approx \sin \phi \approx \phi$. Por lo tanto $\frac{D}{l} = \frac{a}{R}$ y

$$D = l \frac{aE \sqrt{\frac{m}{M_X}} - 1}{2V}$$
, donde a es la longitud del filtro de velocidades y l es la distancia de la imagen al punto P .

La dispersión D está dada en *centímetros* si a y l lo están, V en *volt* y $|E|$ en $\frac{\text{volt}}{\text{cm}}$.

La condición para que no se defleccione la masa elegida está dada por la siguiente ecuación:
$$m = 2qV \left[\frac{|B|}{|E|} \right]^2$$
.

Considerando que el campo magnético para una bobina está dado por $|B| = k|I|$, donde $|I|$ es la corriente de la bobina y k es una constante que incluye el número de vueltas, la constante de permeabilidad μ_0 y las características geométricas de la bobina, se llega a la expresión

$$\frac{\sqrt{2qV}k|I_o|}{|E|} = \sqrt{m}$$
. Como la cantidad $a = \frac{|E|}{k\sqrt{2qV}}$ tiene un valor constante,

entonces $I_o = a\sqrt{m}$. Esta ecuación permite obtener una relación entre la masa del ion que no es deflecionado (m) y la corriente (I_n) aplicada a la bobina; i.e., $I_n = a\sqrt{m_n}$.

La intensidad del haz se mide en una placa de cobre colocada a la salida del filtro de velocidades.

El haz emergente del filtro de Wien se hace pasar a través de un conjunto de placas electrostáticas, desviando la trayectoria del haz por 10° . Esto se hace para evitar que los fotones producidos en la fuente de iones lleguen al sistema de detección.

II.3.- Celda de reacción

Después de que fue analizado y se conocen con exactitud la masa, la carga y la energía del haz, la trayectoria de éste es corregida por placas de deflexión horizontal y vertical que se muestran en la *figura II.1*. Antes de llegar a la celda de reacción, el haz cruza una celda de neutralización. La celda de neutralización no se utilizó en estos experimentos pero sirve para colimar el haz.

La celda de reacción (*figura II.7*) es el lugar donde interaccionan el haz y el blanco. Se trata de un tubo cilíndrico de acero inoxidable que tiene un diámetro y una longitud de *2.54 cm*. A la entrada se encuentra un colimador de *1 mm*, y a la salida otro de *4 mm*; ambos tienen bordes de navaja para evitar la dispersión del haz con estas superficies. El gas que se emplea como blanco es admitido a la celda a través de un tubo de acero inoxidable, el cual también sirve de soporte para la misma. La celda de reacción está situada en el centro de una cámara de dispersión que consta de tres partes, una fija a ella, y dos móviles que rotan con respecto al centro de giro situado en la celda de reacción.

La presión del gas en la celda se mide por medio de un barómetro capacitivo.

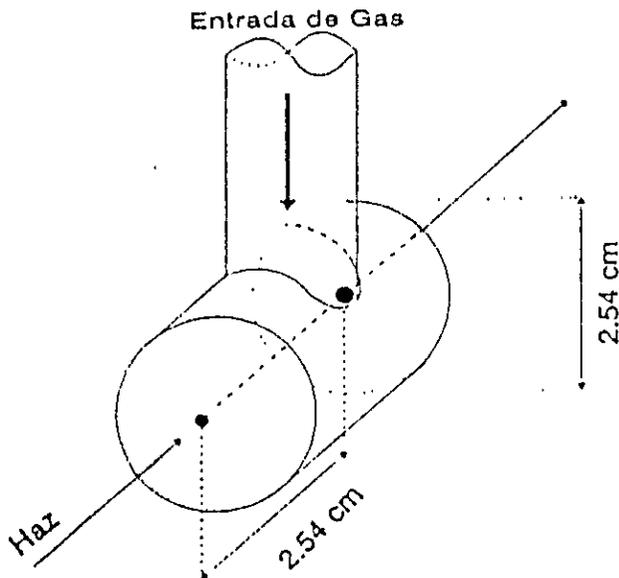


Figura II.7 - Diagrama de la celda de reacción.

II.4.- Sistema de detección

Después de efectuarse la colisión entre el haz incidente y el blanco, es necesario determinar el número de partículas del producto que se desea analizar. El sistema de detección consta de una caja de Faraday y una cámara

de detección. Dentro de la cámara de detección se encuentran un analizador parabólico a 45° y dos detectores.

II.4.1.- Caja de Faraday - deslizable

La caja de Faraday es deslizable y se utiliza para monitorear y optimizar la intensidad del haz de iones (*figura II.8*). Las medidas de corriente con este dispositivo se realizan con y sin gas en la celda de reacción. Este elemento es muy importante pues permite la medida de la corriente incidente.

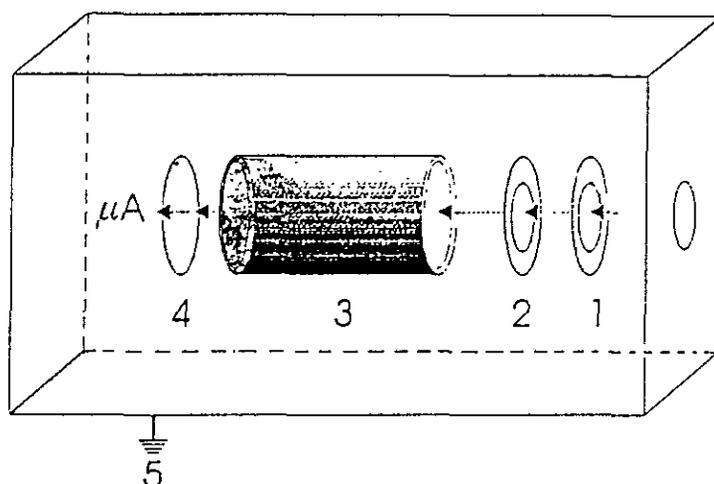


Figura II.8 - Caja de Faraday.

La caja de Faraday consta de cuatro electrodos de cobre (1 a 4) y una cubierta de acero inoxidable (5) conectada a tierra. La manera como funciona este dispositivo para detectar iones cargados es la siguiente. El electrodo (1), que está a un potencial positivo, repele los iones positivos lentos que forman parte del gas residual; el electrodo (2) se encuentra a un potencial negativo y tiene como función evitar que salgan los electrones secundarios producidos dentro de la caja. La placa colectora (4) se encuentra conectada a un electrómetro por medio del cual se mide la corriente de partículas incidentes (I_0). El electrodo cilíndrico (3) está a un potencial negativo y se emplea para

regresar los electrones secundarios a la placa colectora (4). Todos los potenciales mencionados en esta sección están referidos a tierra.

El número de partículas incidentes, N_i en el blanco en un determinado tiempo t se calcula de la siguiente relación: $\frac{N_i}{t} = \frac{I_o}{e}$, donde I_o es la corriente incidente, medida en la caja de Faraday, y e es la carga del electrón en valor absoluto. Las corrientes típicas en esta región son del orden de 10^{-10} a 10^{-8} ampere, es decir, se tienen $\approx 10^8$ a 10^{10} $\frac{\text{partículas}}{s}$.

La ventaja de determinar la corriente inicial de iones que inciden en la celda de reacción es uno de los elementos que permite reportar secciones absolutas.

II.4.2.- Analizador de placas paralelas

Una vez que el haz interacciona con el gas en la celda de reacción se producen nuevos tipos de iones y partículas neutras que llegan al analizador parabólico en donde se separan de acuerdo con su masa y carga.

La siguiente figura (figura II.9) muestra un esquema de este analizador de energía.

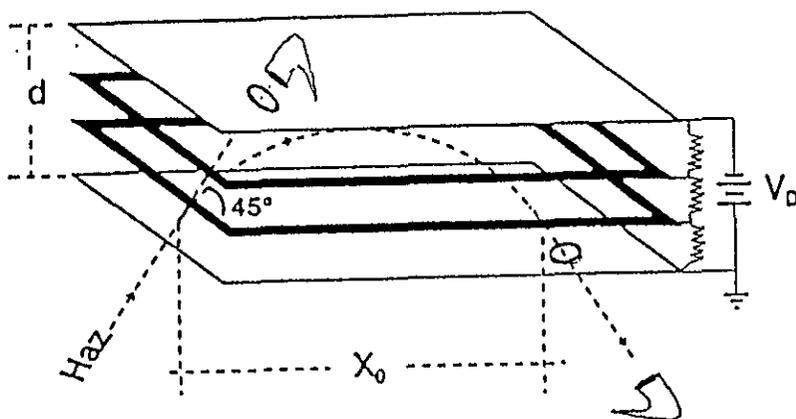


Figura II.9 - Analizador parabólico.

El principio de operación del analizador parabólico, está basado en el hecho de que la trayectoria de una partícula cargada en un campo eléctrico depende de la energía de ésta. Las partículas llegan al analizador a un ángulo θ y con un potencial acelerador V_a , describiendo trayectorias parabólicas dentro del analizador. Las partículas son reenfocadas para regresar a la placa inferior. La distancia que recorren está determinada por su energía cinética y el campo eléctrico aplicado. La altura máxima de las trayectorias que describen los iones debe ser menor a la distancia de separación entre las placas. El analizador tiene un par de placas intermedias cuya función es la de minimizar el efecto de borde y tener un campo eléctrico más uniforme entre las placas externas.

El analizador que se empleó⁽³⁵⁾ está construido de tal forma que la dirección de la entrada y la salida de los iones, respecto a las placas deflectoras, es de 45° . El voltaje de deflexión V_d , necesario para que los iones sean analizados se encuentra en función de la separación d entre las placas, la distancia x_o entre la entrada y la salida del analizador y el voltaje de aceleración V_a . Considerando este ángulo, Harrower⁽³⁵⁾ determinó que

$V_d = \left(\frac{2dV_a}{x_o} \right)$ y que la distancia de separación entre las placas paralelas es adecuada si $d = 0.3 x_o$. Con este valor se obtiene $V_d = 0.6 V_a$.

Los fragmentos de la disociación de H_2^+ llegan al analizador con la mitad de la energía del haz incidente, siendo que para el haz de H^+ , los H^- llegan con la misma energía del protón.

II.4.3.- Detectores

Se utilizaron detectores del tipo multiplicadores de electrones (CEM) de dinodo continuo. En la *figura II.10* se muestra un esquema de uno de tales detectores.

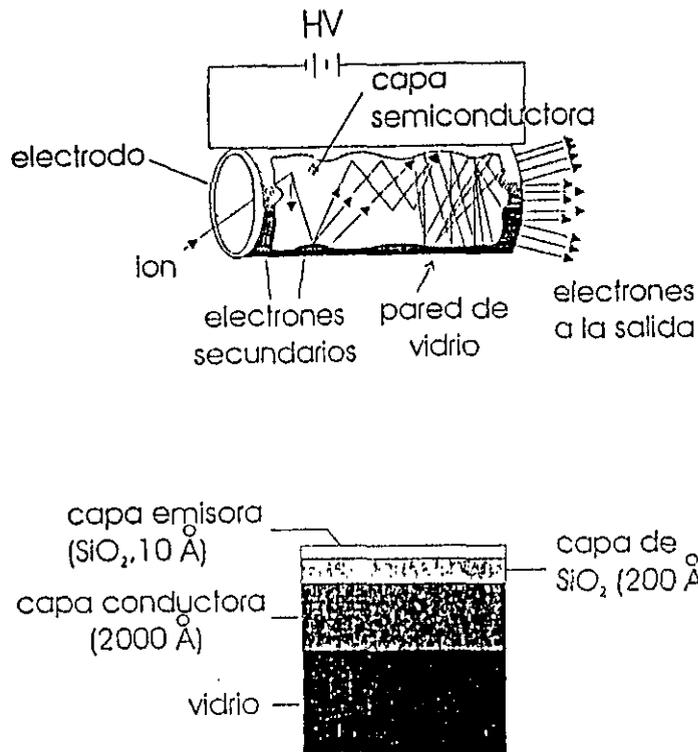


Figura II.10 - Multiplicador de electrones y corte transversal de la superficie activa.

Los CEM⁽³⁶⁾ son detectores eficientes de iones positivos y negativos, así como de electrones y fotones. Son tubos de vidrio enroscado con un diámetro interno de aproximadamente 1 mm y un diámetro externo de $2, 3$ o 6 mm contruidos de un vidrio especial de plomo con silicio. Cuando es procesado apropiadamente, este vidrio exhibe las propiedades de conductividad eléctrica y emisión secundaria.

El funcionamiento de los CEM es el siguiente. Cuando un ion incide en la cara de entrada se producen típicamente de 2 a 3 electrones secundarios. La emisión secundaria se lleva a cabo dentro de los primeros 200Å de la superficie. Estos electrones son acelerados a través del canal mediante un alto voltaje positivo. Los electrones golpean las paredes del canal produciendo

electrones adicionales (y así sucesivamente) hasta que a la salida emerge un pulso de 10^7 a 10^8 electrones. Para iones positivos la entrada está generalmente a un voltaje negativo de 1200 a 3000 volt, y la salida está a tierra. Para la detección de iones negativos la entrada está a tierra o a un potencial positivo, y la salida está a un voltaje positivo alto. Debajo de esta capa se encuentra una capa conductora de varios cientos a miles de angstroms de espesor. La eficiencia de este detector depende de la energía de los iones incidentes. El resultado final es una cascada de electrones que son registrados como un pulso de corriente, típicamente del orden de milivolts. Este pulso es muy chico, por lo que se hace pasar por un amplificador y después por un amplificador antes de que pueda ser registrado por el contador.

II.5.- Sistema de Vacío

Una parte fundamental de los experimentos de colisiones entre sistemas atómicos es el vacío a través del cual se desplazan el proyectil y los productos de la colisión.

Hay una gran variedad de bombas de vacío, cada una de las cuales tiene un intervalo de presiones en el que se trabaja óptimamente. Cada tipo de bomba evacua de manera distinta los diversos tipos de gases.

La idea básica de contar con un buen sistema de vacío es garantizar que el proyectil mantiene su identidad desde que es producido en la fuente de iones, hasta que llega a la región donde se lleva a cabo la interacción con el blanco, y posteriormente, desde que se generan los productos de la reacción hasta que éstos son registrados en la cámara de detección.

Para lograr nuestro objetivo es necesario mantener la presión en el interior del acelerador lo suficientemente baja como para que el proyectil y los productos de la reacción tengan un camino libre medio (l) mayor que la distancia que recorrerán antes de llegar al sistema de detección.

La expresión del camino libre medio en términos de la sección de dispersión $\sigma(\text{cm}^2)$ de las partículas en el gas residual y la densidad de éste $\eta\left(\frac{\text{partículas}}{\text{cm}^3}\right)$ en el acelerador es: $l = (\sigma \eta)^{-1}$. Esta expresión implica que para que el camino libre medio sea grande, es necesario disminuir la densidad

de partículas en el gas residual, considerando que la sección de dispersión de las partículas del blanco es aproximadamente constante.

En nuestro caso, el camino libre medio es del orden de 10 veces mayor que la longitud del acelerador cuando la presión del gas residual es de 1.0×10^{-7} torr.

Con las bombas mecánicas se pueden alcanzar presiones del orden de 10^{-2} a 10^{-3} torr. Comúnmente estas bombas sirven de apoyo a las bombas difusoras y turbomoleculares pues éstas funcionan mejor cuando la diferencia de presiones entre la entrada y la salida no es muy grande.

El vacío logrado por las bombas mecánicas se produce cuando al girar un rotor inmerso en un aceite especial, atrapa los vapores de una región y los saca a la atmósfera. Se utilizaron bombas mecánicas (una con cada uno de los otros sistemas) para lograr un vacío primario de 10^{-3} torr.

Las bombas difusoras no cuentan con partes móviles. El gas que se encuentra dentro del sistema es extraído por medio de flujos de vapor de aceite densos que se mueven a alta velocidad. Las paredes de la bomba son enfriadas por medio de un serpentín por el que circula agua fría; la bomba tiene además una trampa fría conectada al serpentín de un refrigerador comercial que conduce agua. Estas condiciones permiten que los vapores de aceite sean recuperados al condensarse en las paredes de la bomba. La trampa evita que los vapores de aceite contaminen el sistema. Con las bombas difusoras se pueden tener presiones de 10^{-7} torr.

Las bombas turbomoleculares cuentan con un rotor en el que se encuentran montadas una gran cantidad de aspas, separadas por una serie de discos, los cuales están fijos a la estructura de la bomba. Los extremos del rotor se encuentran montados sobre un par de baleros permanentemente lubricados. El vacío se logra debido a la diferencia de presiones creada cuando las aspas giran a una gran velocidad ($36\ 000$ r.p.m.). El intervalo de presiones en el que operan eficientemente estas bombas va de los 10^{-3} a los 10^{-10} torr.

El sistema de vacío que se empleó es:

- una bomba turbomolecular con una velocidad de bombeo de $300 \frac{l}{s}$ en la región donde se encuentran las lentes Einzel, logrando un vacío de 10^{-8} torr;

- una bomba turbomolecular con una velocidad de bombeo de $180 \frac{l}{s}$ en la región donde se encuentra la celda de reacción, logrando un vacío de 10^{-8} torr;

- una bomba difusora con una velocidad de bombeo de $75 \frac{l}{s}$ en la región de la cámara de detección. Aquí la presión es del orden de 10^{-7} torr.

Se utilizaron medidores ion gauge para medir la presión en la zona de las lentes Einzel y la cámara de detección. En la celda de reacción se utilizó un barómetro capacitivo.

Capítulo III

Desarrollo experimental

III.1.- Condiciones de operación del acelerador

Al comenzar el experimento, lo primero que se debe verificar es que el sistema de vacío esté proporcionando la presión adecuada para llevar a cabo la medición. Una vez que la presión en el tubo del acelerador es del orden de 10^{-7} torr, se opera la fuente de iones.

Con objeto de trabajar con un haz de iones lo menos contaminado posible, es necesario desgasificar la fuente. El proceso de desgasificación se realiza calentando el filamento de tungsteno mediante un aumento gradual de la corriente que pasa a través del mismo. Se debe cuidar que la presión en la fuente no aumente demasiado durante el proceso. Una vez desgasificada la fuente se aplica una diferencia de potencial entre el ánodo y el cátodo hasta que el filamento tiene una corriente de 15 a 16 ampere y la presión en la fuente es menor que 2×10^{-3} torr o 3×10^{-3} torr.

A continuación se introduce gas a la fuente de iones en la siguiente proporción: 25% de argón y 75% de hidrógeno molecular a una presión total de 100 μ Hg. La ionización del gas se obtuvo aplicando en promedio 15 ampere de corriente y 50 volt de voltaje al filamento. Con estos valores, la corriente de descarga en el ánodo es de aproximadamente 0.1 ampere.

En el presente trabajo los iones empleados como haz fueron H^+ y H_2^+ , mismos que fueron acelerados a energías entre 1.0 y 5.0 keV.

Los iones son extraídos de la fuente y enfocados por lentes tipo Einzel. La relación entre el voltaje aplicado al segundo electrodo V_2 y el voltaje de aceleración (ver secciones II.1 y II.2.1) V_a es $V_2 = 0.84 V_a$, lográndose con esto que las partículas sean enfocadas a una distancia de 30.0 cm del colimador de la placa del ánodo. A la salida de las lentes, los iones son dirigidos a un filtro de velocidades de Wien. Después de seleccionar la velocidad del haz de iones, éste fue hecho pasar a través de placas electrostáticas cilíndricas para dirigirlo; en este punto el haz es desviado 10° para evitar que los fotones producidos en la fuente de iones lleguen al sistema de detección.

Antes de admitir el blanco en la celda de reacción se debe medir la corriente total del haz que se está haciendo incidir en la misma para poder medir secciones absolutas. En ocasiones la corriente tarda un poco en estabilizarse debido a que no hay un equilibrio entre el flujo de gas que se está admitiendo en la fuente de iones y el flujo de gas que se está desalojando en el sistema de vacío. Las corrientes típicas de H^+ con las que se trabaja son del orden de 10^{-10} ampere; esto es con el objeto de evitar procesos de saturación en los detectores.

Una vez que se estabiliza la corriente, se admite en la celda de reacción el gas que se utilizará como blanco, Kr en nuestro caso. Aquí es donde se lleva a cabo la reacción escogida para su estudio: $H^+ + Kr$ y $H_2^+ + Kr$.

Un gas a bajas presiones puede ser considerado como un gas ideal. Para calcular el espesor (π) del blanco se multiplica la expresión para el gas ideal por la longitud efectiva l del blanco obteniéndose $\frac{Pl}{KT} = \frac{N}{V}l$. Teniendo en

cuenta que la densidad de partículas es $\frac{N}{V}$, se tiene que el espesor del blanco

es $\pi = \frac{Pl}{KT}$. Utilizando los valores presión $P = 4 \times 10^{-4}$ mm Hg, longitud efectiva del blanco $l = 2.54$ cm, temperatura $T = \text{ambiental} = 27^\circ C = 300$ K, se encuentra que el espesor del blanco es $\pi = 3.37 \times 10^{13}$ átomos/cm².

Las presiones absolutas en la celda de reacción fueron medidas con un barómetro capacitivo. La presión se mide a través de la capacitancia que hay entre una placa conductora y un diafragma que se acerca o se aleja en función de la presión.

La temperatura del gas es la temperatura ambiente del laboratorio, la cual en promedio es de 20°C.

Los electrodos de la caja de Faraday (movible) (ver sección II.4.1, figura II.8) se pusieron a los siguientes voltajes: electrodo N° 1 a (+)45 volts; electrodo N° 2 a (-)90 volts; electrodo N° 3 a (-)310 volts . La placa colectora (electrodo N° 4) se encuentra conectada a un electrómetro en el que se mide la corriente de partículas que inciden en la caja. La intensidad del haz incidente se midió antes y después de cada "corrida"; se descartaron las mediciones que discreparon en más de un 10%.

Los productos de la reacción llegan al analizador electrostático parabólico tipo Harrower⁽³⁵⁾ y son contados con un multiplicador de electrones (channel electron multiplier - CEM)⁽³⁶⁾ .

A la entrada del analizador se colocó un colimador de 0.36 mm de diámetro y a la entrada del CEM un colimador de 1 cm de diámetro. El sistema de detección puede rotar respecto al centro de la celda del blanco lo que permite obtener distribuciones angulares. El sistema puede rotar $\pm 7^\circ$, pero el intervalo medido fue $\pm 4^\circ$ en pasos de 0.15°, y ahí se miden los productos de la reacción específica que deseamos estudiar.

Las cantidades medidas fueron: I_0 , número de iones incidentes por unidad de área por segundo (caja de Faraday); n , el número de átomos de kriptón por unidad de volumen (celda de reacción); l , la longitud efectiva de la celda de reacción; e $I(\theta, \phi)$, el número de fragmentos por unidad de ángulo sólido ($d\Omega$) por segundo (analizador parabólico), detectados a los ángulos θ y ϕ con respecto a la dirección del haz incidente. Los ángulos θ y ϕ son los ángulos de las coordenadas polares; θ respecto al eje azimutal y ϕ es la proyección en el eje x-y. Se evaluó entonces la cantidad

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I(\theta, \phi) \varepsilon}{n l I_0} \quad . . . \quad (III.1)$$

que es la sección diferencial absoluta; ε ⁽³⁷⁾ es la eficiencia del CEM.

Para el proceso de disociación hay que hacer notar lo siguiente. La cantidad $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ no es una sección diferencial de dispersión, pues el fragmento detectado al ángulo θ no ha sido dispersado. El ángulo sustancial al cual un

fragmento llega al detector se debe a la componente transversal de la velocidad adquirida en el proceso de disociación.

Se midieron varias distribuciones angulares a ambos lados de la dirección incidente y a diferentes presiones del blanco; se determinó $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para cada corrida. Estas fueron comparadas para asegurar la simetría y para estimar la reproducibilidad de los resultados experimentales ya que la sección "diferencial" reportada es absoluta.

La sección transversal total se obtiene integrando la sección diferencial sobre el ángulo sólido $d\Omega$:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{2\pi} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \sin\theta \, d\theta \quad \dots \quad (III.2)$$

Como la expresión para la función $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ no se conoce, entonces la sección total de dispersión se calcula mediante una integración numérica:

$$\sigma = 2\pi \frac{h}{2} \left[f(0) + 2 \sum_{i=1}^{j-1} f(j) + f(j) \right], \text{ con } f(i) = \left(\frac{d\sigma_i}{d\Omega} \right) \sin\theta_i \text{ y } h = d\theta$$

III.2.- Incertidumbres

Las incertidumbres asociadas a las cantidades medidas son:

i). la longitud efectiva del blanco

Debido a que por los orificios de la celda de reacción hay un flujo de gas de Kr , de ésta al exterior de la misma, las longitudes efectiva y geométrica no coinciden.

La construcción de la celda de reacción es de tal forma que el error en la longitud efectiva del blanco no excede de $\pm 3\%$.

ii). la variación de la corriente durante el tiempo de conteo

Debido a la inestabilidad del haz hay variación en la corriente de partículas incidentes. Las distribuciones angulares que se consideraron en el presente trabajo son aquellas en las que la variación de la corriente es menor del 10% respecto a la magnitud medida inicialmente.

El error asignado al electrómetro, al leer la magnitud de la corriente es del 1% de la escala completa. Este error es muy pequeño comparado con el error del 10% de la variación de la corriente, y es por lo tanto despreciable.

iii). A la temperatura y la presión en la celda de reacción

El error relativo asociado a la temperatura es de 2.5% y se debe a los cambios atmosféricos en el medio ambiente del laboratorio.

La presión se mide en la celda de reacción y no varía significativamente mientras se está corriendo el experimento. Por tal motivo sólo se considera la incertidumbre estimada por el fabricante del barómetro capacitivo⁽³⁸⁾ (MKS modelo 270); en este caso es del 0.1%.

iv). el error relativo en el ángulo sólido

Este error se calculó de la precisión del tornillo micrométrico con el cual se hicieron las mediciones de la distancia del centro de la celda al colimador y del orificio del mismo. El error relativo calculado es del 0.1% .

v). el error relativo al tiempo inherente al reloj del contador

Este error es del 0.1% , según el fabricante⁽³⁹⁾ (timer Ortec modelo 719).

vi). el error en la resolución angular

Este error se debe a que el centro dispersor se considera como puntual, lo cual es inexacto. Se deben considerar las dimensiones del gas contenido en la celda de reacción, las dimensiones de los colimadores que están a la entrada y a la salida de la misma, y las dimensiones del colimador colocado a la entrada del analizador parabólico. La resolución angular del aparato es de 0.1°⁽²⁰⁾.

El número de partículas registradas (N) por el sistema de detección tiene asociado un error relativo que varía de acuerdo a la distribución de Poisson como $\Delta N = N^{1/2}$. Para $N > 16$ este error es muy pequeño; comúnmente el número de eventos registrados fue del orden de 10^3 a 10^5 , por lo que $N \approx 0$.

La expresión III.1 indica que la sección diferencial es función de I_0 , número de iones incidentes por unidad de área por segundo; n , el número de átomos de kriptón por unidad de volumen; l , la longitud efectiva de la celda de reacción; e $I(\theta, \phi)$, el número de fragmentos por unidad de ángulo sólido ($d\Omega$) por segundo. Considerando que nl es el espesor del blanco, y que a su vez éste es función de la presión, la temperatura y la longitud efectiva de la celda de reacción, se obtiene que $\frac{d\sigma}{d\Omega} = f(I, T, P, l, t, d\Omega)$. El error relativo de la función f se obtiene de la siguiente relación:

$$\frac{df}{f} = \frac{dl}{l} + \frac{dT}{T} + \frac{dP}{P} + \frac{dI}{I} + \frac{dt}{t} + \frac{d\Omega}{\Omega}$$

donde cada uno de los términos es el error relativo de las variables medidas.

El error porcentual es $\left(\frac{df}{f}\right)100\%$.

Un factor muy importante que hay que considerar es la eficiencia de los detectores la cual depende fuertemente de la energía; ésta ya se tomó en cuenta en la expresión III.1. El CEM empleado (modelo 4736, marca Galileo) tiene una eficiencia del 100% para iones^(36, 37) con energías dentro del intervalo considerado.

El error global que se tiene es del 15.9%.

Se pudieron medir fragmentos de la disociación hasta $\pm 4^\circ$ respecto a la dirección del haz incidente.

Las distribuciones angulares se tomaron a ambos lados respecto a la posición central, para asegurar la simetría del proceso.

Las secciones transversales fueron reproducibles hasta un 10% entre día y día.

Capítulo IV Resultados y discusión

IV.1.- Captura electrónica simple de H^+ en Kr

La *figura IV.1* muestra las distribuciones angulares obtenidas en este trabajo para la captura electrónica simple de protones en Kr, como función de la energía del proyectil. Se puede observar que las distribuciones muestran estructura. En las medidas de las secciones diferenciales angulares en gases raros reportadas por Johnson y sus colaboradores⁽²⁾ a las energías que ellos trabajaron (0.5, 1.5 y 5.0 keV) también es posible observar estas estructuras. Ambos experimentos miden secciones diferenciales absolutas.

En la *figura IV.2* se presentan las medidas obtenidas para la sección diferencial a 1.5 y 5.0 keV, junto a las medidas de Johnson⁽²⁾, para ángulos entre 0° y 1° . Se observa una concordancia muy aceptable en los valores absolutos de las secciones diferenciales dentro de los intervalos de incertidumbre.

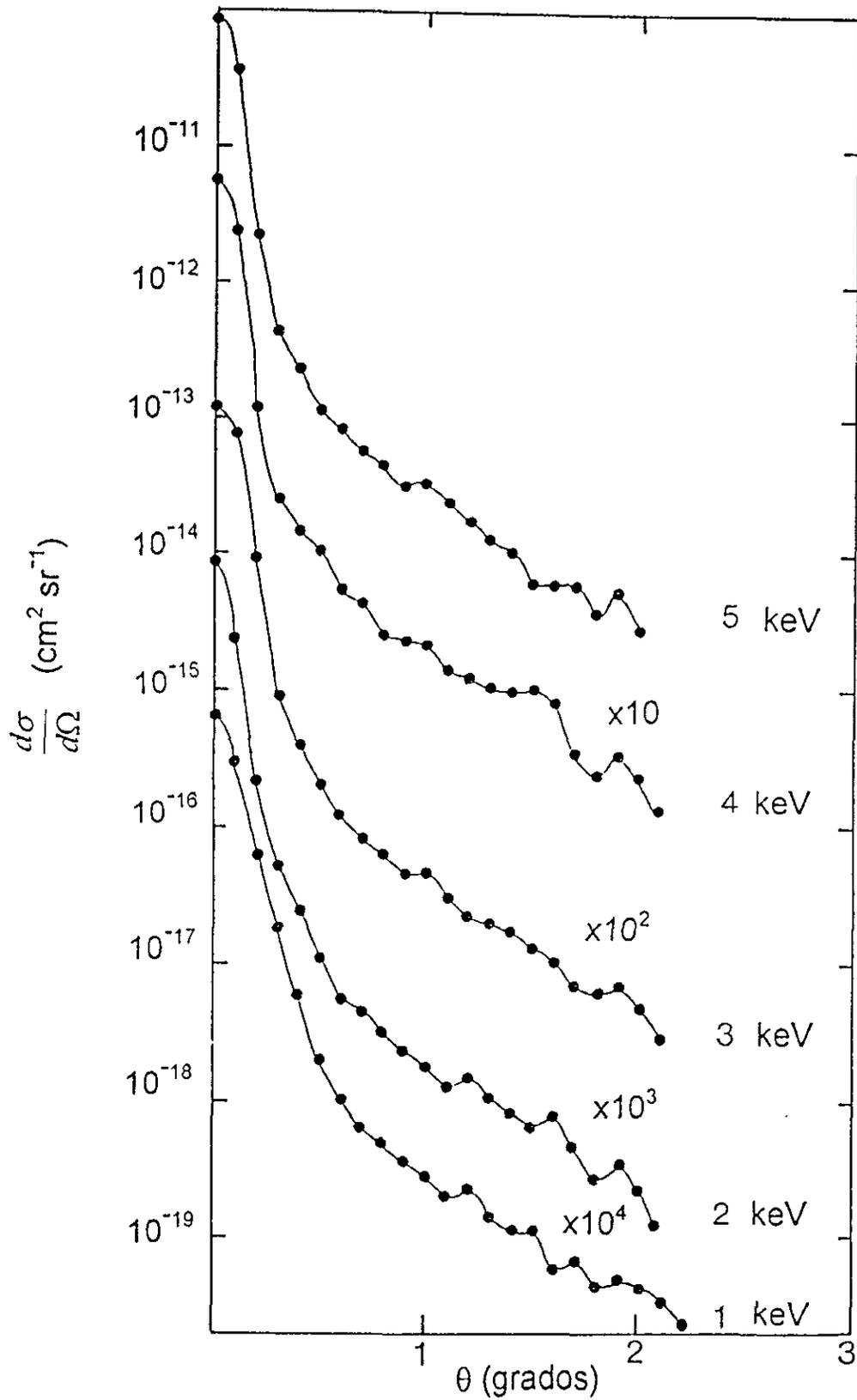


Figura IV.1 - Distribuciones angulares para captura electrónica simple de protones en Kr. Valores absolutos.

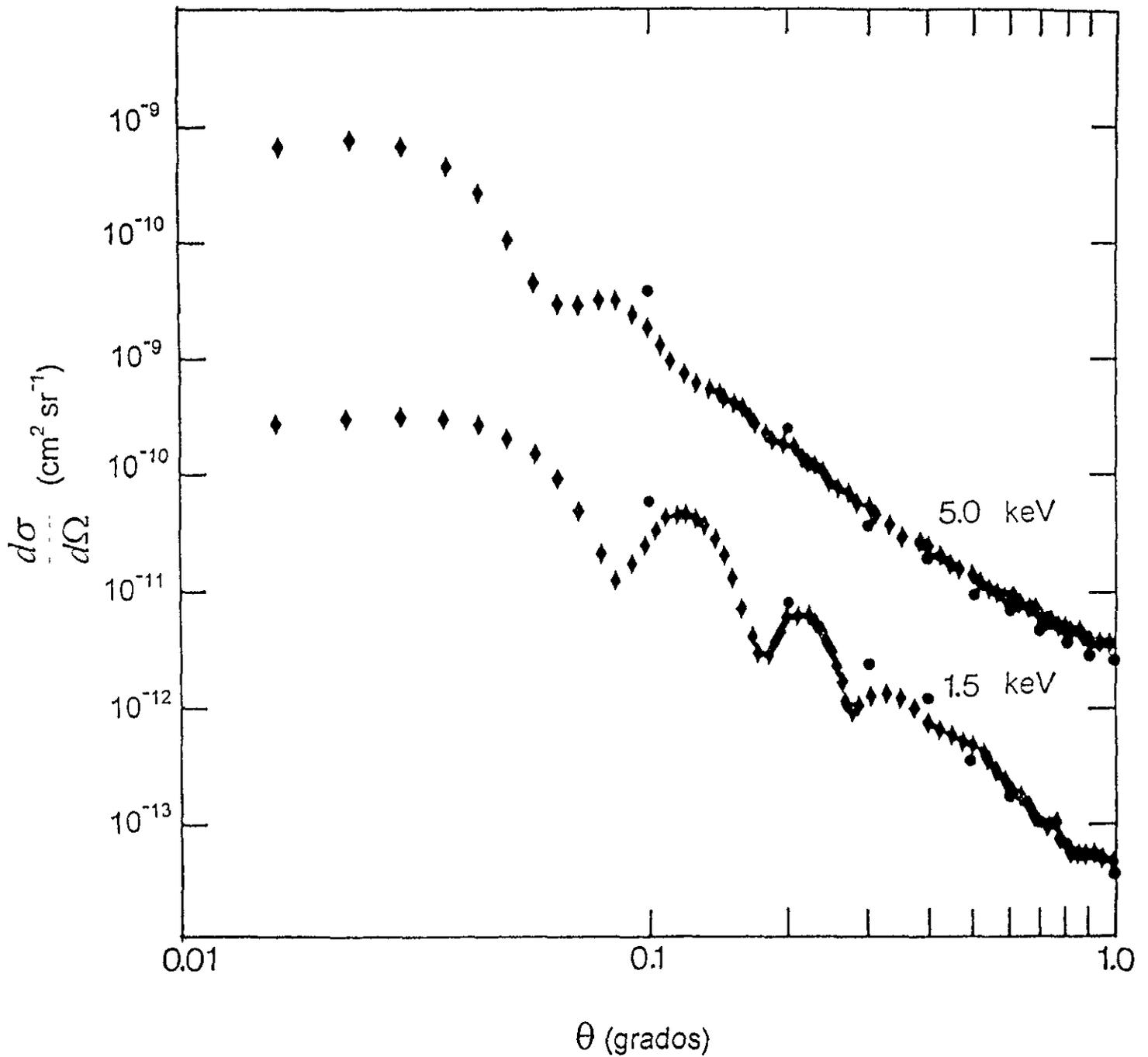


Figura IV.2 - Medidas de la sección diferencial a 1.5 y 5.0 keV para la captura electrónica simple de protones en Kr.

- ◆ medidas de Johnson y colaboradores⁽²⁾
- datos del presente trabajo

Para calcular las secciones totales se integraron las secciones diferenciales como se discutió en el *capítulo III, sección III.1*. En la *tabla IV.1* se muestran diferentes resultados obtenidos y se comparan con los obtenidos por Johnson.

Tabla IV.1 - Secciones totales para diversas reacciones.

REACCIÓN	ENERGÍA (keV)	$\sigma^{(2)}$ ($\times 10^{-16}$ cm ²)	σ ($\times 10^{-16}$ cm ²) (resultados obtenidos)
He ⁺ + Ne → He ⁰	1.5	1.8	2.10
H ⁺ + Kr → H ⁰	1.5	20.0	25.20
H ⁺ + Kr → H ⁰	5.0	15.6	15.30

Una de las motivaciones para estudiar la captura electrónica simple de protones incidiendo en un blanco de Kr, fue la profunda discrepancia entre los datos de Koopman⁽¹³⁾ y de Williams y Dunbar⁽¹⁴⁾. Se realizó el experimento en un intervalo de energía intermedio a los dos anteriores, que incluye, además, regiones que no se habían reportado antes. Como no hay teorías que expliquen completamente estos procesos, se decidió probar el modelo de Olson⁽⁴⁾. Para ello se realizó un cálculo cuyo resultado se presenta más adelante.

Los valores de las secciones totales para la captura electrónica simple del experimento que se reporta y el de otros grupos experimentales se muestran en la *tabla IV.2*. En la *figura IV.3* se presentan junto con nuestros datos, los datos experimentales de Koopman⁽¹³⁾, Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾, Johnson y sus colaboradores⁽²⁾ y de Williams y Dunbar⁽¹⁴⁾, así como el resultado del cálculo que se realizó utilizando el modelo de Olson⁽⁴⁾.

El cálculo que se hizo fue el siguiente. Benoit y sus colaboradores⁽¹¹⁾ reportan los valores de los parámetros del modelo de Demkov para varios sistemas ($H^+ - RG$), en particular para el sistema ($H^+ - Kr$). Los parámetros que ahí aparecen se utilizaron para calcular la matriz de acoplamiento $H_{12}(R)$.

El valor de la matriz de acoplamiento, a su vez, se utilizó junto con la sección reducida de Olson (discutida en la *sección I.2.1.B*) para calcular el

valor de las secciones totales de captura simple que se muestran en la *figura IV.3*. A continuación se ejemplifica el procedimiento seguido.

Los parámetros de Demkov obtenidos por Kubach y Sidis⁽²⁷⁾ y reportados por Benoit⁽¹¹⁾ son:

$$H_{12} = 0.0101 \text{ au} = 0.2748 \text{ eV}$$

$$R_c = 7.0 a_0 = 3.71 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\lambda = 0.633 a_0^{-1} = 1.196 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$\Delta V(\infty) = 0.4 \text{ eV} \quad [H^+ + Kr(4p^6 1s) \rightarrow H + Kr^+(4p^5 2p_{3/2})]$$

Se sustituye el valor de H_{12} en la *ecuación I.4*: $\Delta V(R_c) = 2H_{12}(R_c) = 0.5496 \text{ eV}$. Como $E = \frac{1}{2}mv_o^2$, entonces:

$$v_o = \sqrt{\frac{2E}{m}} = \sqrt{\frac{2 \times 1000 \text{ eV} \times 1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}}{1.6606 \times 10^{-27} \text{ kg}}} = (4.3927 \times 10^5 \frac{m}{s})\sqrt{\varepsilon},$$

y de la *ecuación I.6*, $\delta^{-1} = \frac{\sqrt{8} \hbar \lambda}{\pi \Delta V(R_c)} \sqrt{\frac{E}{m_o}}$ se obtiene para una energía de 1 keV , $\delta^{-1} = 4.005$; de la *tabla I.2*, $\sigma^* = 1.05$. Despejando σ de la *ecuación I.7* se obtiene $\sigma = \frac{1}{2} \pi R_c \sigma^* = \frac{1}{2} \pi (3.71 \times 10^{-8} \text{ cm})^2 (1.05) = 2.27 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$.

En el intervalo de energías medido, los valores experimentales de σ_{10} son mayores que los que se obtienen con el modelo de Olson. Los datos calculados utilizando el modelo de Olson no presentan un máximo bien definido. El máximo valor está entre 0.8 y 1.3 keV , donde el valor máximo de σ_{10} es $2.3 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$. Observando los presentes datos y los de Stedeford y Hasted⁽¹²⁾, se observa que ambos se ajustan bien y que el máximo en la sección está a una energía menor de 1 keV ; a 1.0 keV , $\sigma_{10} = 2.80 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$.

Los valores experimentales de este trabajo presentan el mismo comportamiento que los de Williams y Dunbar⁽¹⁴⁾. Los datos de σ_{10} de Koopman⁽¹³⁾ y de Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾ son a energías menores de 1 keV ; a 1

keV sus valores caen dentro de nuestra incertidumbre. Los valores para la sección obtenidos con el modelo de Olson están por debajo de los datos de Koopman y de Williams y Dunbar; sin embargo, hasta donde el modelo de Olson tiene validez, los presentes datos se ajustan.

De acuerdo la hipótesis adiabática de Massey, la ecuación 1.2 ($T_{(máx)} = T^* = 36(\Delta E)^2 ma^2$) indica la energía a la que habrá un máximo en la sección transversal. Considerando que $\Delta E = 0.4 eV$, $a = 7\text{Å}$ se encuentra que la energía a la que habría un máximo es $1.004 keV$. Como se observa de la gráfica IV.3, el máximo de Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾ está alrededor de los $0.6 keV$, cerca de la σ_{10} de Johnson⁽²⁾; todos estos resultados quedan por debajo del máximo esperado por la hipótesis adiabática de Massey.

La presencia de un máximo en la gráfica de la sección total como función de la energía ya se había obtenido con anterioridad^(3,11,13). El proceso inelástico dominante en este intervalo de energías es inducido por la captura electrónica simple al nivel ($4p^5 2p_{3/2}$) de $H + Kr^+$, el cual está a $0.4 eV$ por encima del estado base del nivel ($4p^6 1s$) de $H^+ + Kr$.

Tabla IV.2 - Valores de la sección transversal total para el proceso de captura electrónica simple de H^+ en Kr.

ENERGÍA (keV)	$\sigma_{10}(x10^{-15} \text{ cm}^2)$			
	(presentes)	(Johnson ⁽²⁾)	(Williams ⁽¹⁴⁾)	(Koopman ⁽¹³⁾)
1.0	2.80	-	-	2.3
1.5	2.52	2.0	-	-
2.0	2.25	-	3.1	-
2.5	2.08	-	-	-
3.0	1.90	-	2.8	-
3.5	1.80	-	-	-
4.0	1.71	-	2.5	-
4.5	1.62	-	-	-
5.0	1.53	1.56	2.2	-

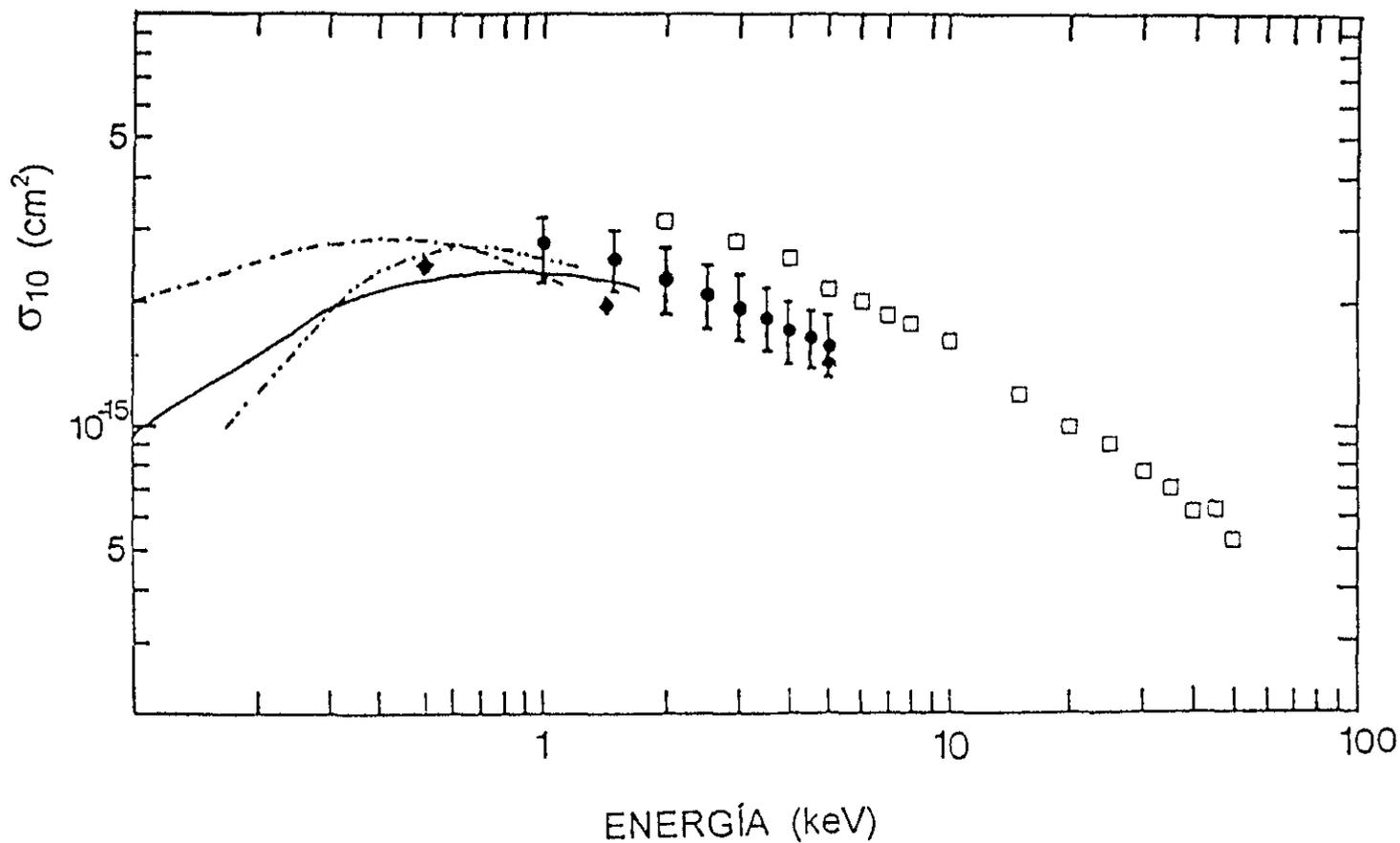


Figura IV.3 - Secciones totales para captura simple de protones en Kr.

- datos del presente trabajo
- .- Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾
- .- Koopman⁽¹³⁾
- Williams y Dunbar⁽¹⁴⁾
- cálculo basado en el modelo de Olson⁽⁴⁾
- ◆ Johnson et al⁽²⁾

IV.2.- Captura electrónica doble de H^+ en Kr

La *figura IV.4* muestra la sección diferencial absoluta para la doble captura electrónica del H^+ en Kr para energías entre 1.0 y 5.0 keV. Este estudio se realizó motivados, en parte, por el hecho de que no hay datos experimentales sobre secciones diferenciales absolutas para la doble captura electrónica de esta reacción a algunas energías de este intervalo; así como por la importancia que estos procesos tienen con el advenimiento de las fuentes de iones múltiplemente cargados, en donde la captura electrónica implica un número considerable de electrones. Es por tanto importante entender los procesos en donde se lleva a cabo la captura de dos electrones por átomos totalmente ionizados. Así mismo, como se vio en el *capítulo I*, las teorías son escasas y es importante contribuir con mas información.

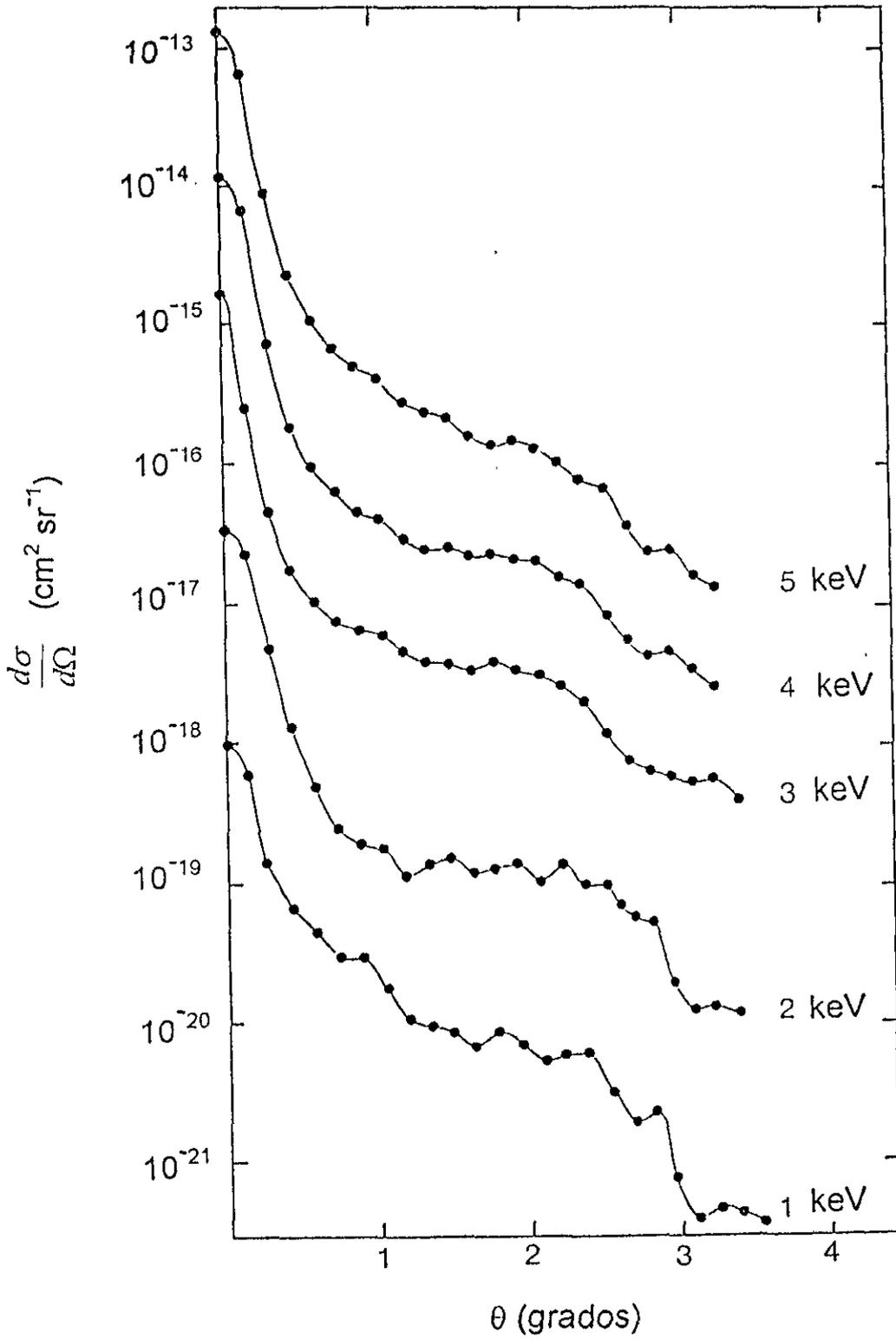


Figura IV.4 - Secciones diferenciales absolutas para captura electrónica doble de protones en Kr.

En el caso de las secciones σ_{I-1} a bajas energías el estudio fue motivado, en parte, por los resultados que se obtenían con gases de Xe y Ar ⁽⁴⁰⁾. En esos estudios se observan dos máximos muy pronunciados. Estudios previos a éstos por Fogel' y sus colaboradores⁽¹⁷⁾ ya habían reportado la existencia de estructura en σ_{I-1} para Xe , Kr y Ar , al igual que Williams⁽¹⁶⁾ y Kozlov⁽¹⁸⁾. Sin embargo, a excepción de los datos de Morgan, no son absolutos.

Los trabajos de Morgan⁽⁴⁰⁾, Williams⁽¹⁶⁾ y Fogel'⁽¹⁷⁾ para σ_{I-1} son a energías mayores a los 2 keV . Van Zyl y sus colaboradores⁽⁴¹⁾ estudiaron la reacción $H^+ + Kr$ a energías entre 0.5 y 2.0 keV , pero midieron la línea de emisión Balmer y la α -Lyman. Kozlov y sus colaboradores⁽¹⁸⁾ midieron entre 0.5 y 5.0 keV y además reportan datos de otros autores, cubriendo con ello hasta 60 keV . Sin embargo, la imprecisión de sus resultados hace difícil la comparación, de ahí la necesidad de continuar con el experimento; además, los datos ahí reportados no son medidas absolutas. Se decidió entonces explorar esta zona de energía, entre otros motivos, por la posibilidad de calcular la sección total a partir de la sección diferencial.

Utilizando la *expresión III.2* se calcularon las secciones totales para los presentes valores de la sección diferencial absoluta. Estos valores se muestran en la *figura IV.5* en donde se observa un máximo a 4.5 keV con un valor de $\sigma = 6.6 \times 10^{-18}\text{ cm}^2$. En la misma gráfica se encuentran los datos de Williams⁽¹⁶⁾; el máximo a bajas energías (interpolando sus resultados) también se encuentra en 4.5 keV con $\sigma = 4.3 \times 10^{-18}\text{ cm}^2$. En general, la diferencia entre los valores de Williams y los presentes es de un 32%.

La identidad del ion H^+ es difícil de mantener en sistemas con un mal vacío. Esto ocasiona tener valores imprecisos de σ_{I-1} , de ordinario menores como sucede en el caso de Williams. El sistema de vacío empleado en la presente investigación es limpio y se logró una presión de 10^{-8} torr , midiéndose además secciones diferenciales absolutas. Se empleó un barómetro capacitivo que permite tener valores un 9.5% más precisos que con un manómetro McLeod, como el utilizado por Williams.

En la *figura IV.6* también se presentan los resultados del cálculo semiempírico desarrollado en este trabajo utilizando los modelo de Pedersen⁽³⁾

y de Olson⁽⁴⁾, así como los resultados de Fogel' y sus colaboradores⁽¹⁷⁾. Pueden observarse dos máximos, uno a bajas energías y otro a altas energías. Los cálculos del modelo semiempírico tienen el orden de magnitud a bajas energías, pero están alejados de nuestros valores experimentales a energías mayores de 2.5 keV.

Por otro lado, con la hipótesis adiabática de Massey para un valor del parámetro de impacto $a = 1.5 \text{ \AA}^{(17)}$ y $\Delta E = 36.301 \text{ eV}^{(16)}$ se obtiene un máximo en 379.99 keV. Considerando que $a = 3.5 \text{ \AA}^{(24)}$, el máximo en la sección estará en 2 068.83 keV. Ambos valores están muy alejados de los valores medidos.

La presencia de dos máximos sugiere la existencia de dos importantes y distintos mecanismos presentes en el proceso de captura electrónica doble en Kr. Para tener una explicación completa de los dos mecanismos existentes en la formación de H^- , se requiere de un estudio cuidadoso de las curvas de la energía potencial molecular del sistema que colisiona, así como de una determinación del valor de los elementos de la matriz de acoplamiento durante la colisión.

El modelo de Pedersen y sus colaboradores⁽⁵⁾ (resumido en el Capítulo I) permite estudiar el comportamiento de las secciones totales en las regiones de energías intermedias y altas; este modelo se utilizó para estudiar nuestros resultados. En nuestro caso se utiliza en el intervalo de energías comprendido entre 2.5 y 5.0 keV. A continuación se ejemplifica el procedimiento seguido considerando una energía de 4 keV:

A partir de la ecuación 1.8 Olson⁽⁴⁾ encuentra que la sección tiene un valor máximo dado por $\sigma_{max} = \frac{1}{2} \pi R_x^2$ que para este ejemplo con un radio de cruce $R_c = 0.55 a_0 = 0.2911 \text{ \AA}$ tiene el valor de

$$\sigma_{max} = \frac{1}{2} \pi (0.55 a_0)^2 = 0.1331 \text{ \AA}^2$$

Por otro lado,

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = \sqrt{\frac{2 \times 1000 \times \varepsilon \times 1.6022 \times 10^{-19} \text{ J}}{1.6606 \times 10^{-27} \text{ kg}}} = (4.3927 \times 10^5 \frac{m}{s}) \sqrt{\varepsilon}$$

$$v = 8.301 \times 10^{15} \sqrt{\epsilon} \frac{a_0}{s} .$$

Como $\lambda = \frac{2\pi H_{12}^2}{\hbar \Delta V' v}$, usando los siguientes valores de los parámetros de ajuste:

$$H_{12} = 0.4 \text{ ua}^{(25)}, \quad \Delta V' = 60 \text{ eV/a}_0 = 1.134 \times 10^{12} \text{ eV/m},$$

se obtiene que $\lambda = \frac{2.27}{\sqrt{\epsilon}}$; que para una energía de 4 keV tiene el valor $\lambda =$

1.135. Olson además encontró que $\lambda = \left(\frac{2v_x}{v} \right) \left[1 - \frac{V(R_c)}{E} \right]^{-1/2}$, donde v_x es la velocidad característica relacionada con el potencial de interacción en el punto de cruce, y v es la velocidad del ion incidente. Para el caso de la captura

electrónica de un ion atómico, se puede considerar que $\left[1 - \frac{V_1(R_c)}{E} \right]^{-1/2} \cong 1$

ya que V_1 es del orden de eV y E de keV. Por lo tanto, $\frac{v}{v_x} = \frac{2}{\lambda} = 1.76$. De la

gráfica de la sección en función de λ obtenida por Olson⁽²⁵⁾ (figura IV.5), este valor de $\frac{v}{v_x}$ corresponde a un 55% de la sección máxima.

Por otro lado, de acuerdo al modelo de Pedersen⁽⁵⁾ el número de oscilaciones en la sección total está dado por la ecuación 1.10,

$n \approx \frac{\overline{\varphi}(v_1)}{\pi} \approx \frac{\overline{\varphi}(v_1)}{2\Delta\varphi(v_1)}$. Pero $\Delta\varphi \propto v^{-1(44)}$, y para la reacción que nos interesa,

$\varphi = \frac{101.691 \sqrt{\text{eV}}}{\sqrt{\epsilon}}$. Para una energía de 4 keV $\varphi = 92.125^\circ \Rightarrow \text{sen}^2 \varphi = 0.99863$.

De la ecuación 1.14, con una $\sigma \approx 55\% \sigma_{max}$, se obtiene que $\sigma_{20} = \sigma_s \text{sen}^2 \varphi = 7.98 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$.

Cabe mencionar, que el valor del radio de cruce dado por Olson, es mucho menor que el que se utilizó para calcular la posición del máximo en la sección total a partir de la hipótesis adiabática de Massey, y que como se observa, no concuerda con el nuestro.

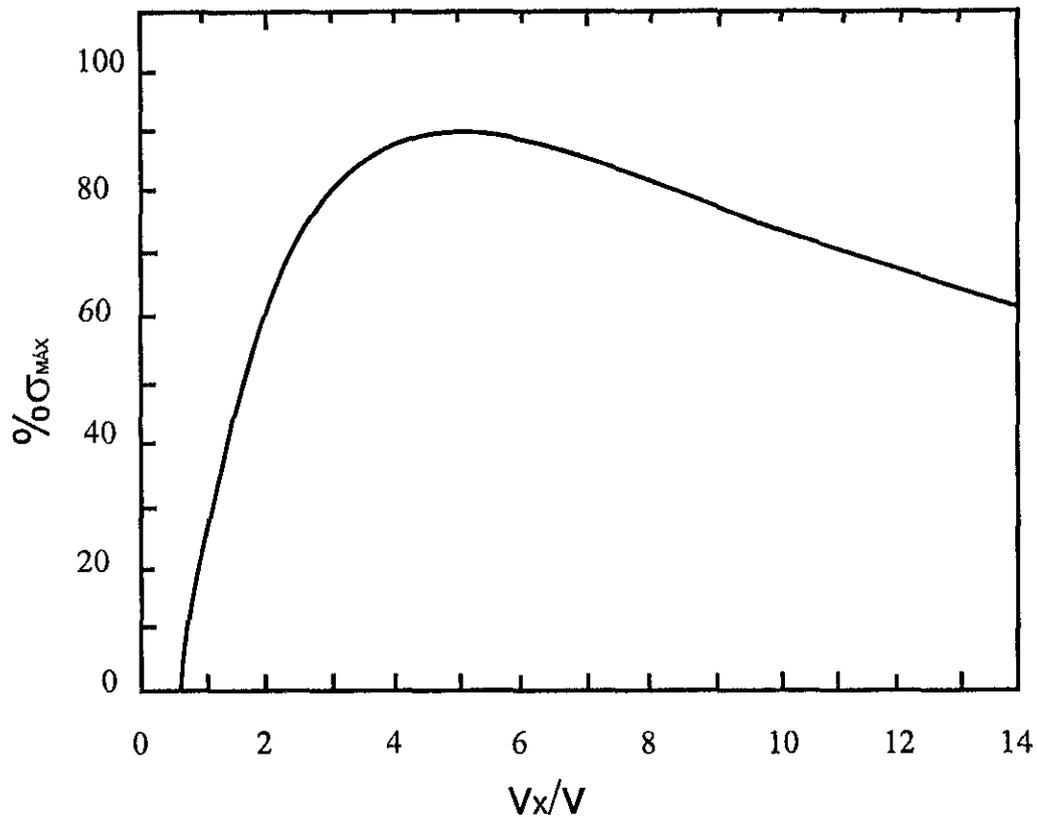


Figura IV.5 – Valores de la sección en función de $\frac{\lambda}{2} = \frac{v_x}{v}$ (4)

Tabla IV.3: Valores de la sección total absoluta del proceso de captura electrónica doble de H⁺ en Kr.

ENERGÍA (keV)	$\sigma_{1-1}(x10^{-18} \text{ cm}^2)$	$\sigma_{1-1}(x10^{-18} \text{ cm}^2)$ ⁽¹⁶⁾
1.0	0.70	--
1.5	1.32	--
2.0	1.92	1.1
2.5	3.33	--
2.7	--	3.2
3.0	4.41	--
3.3	--	3.9
3.5	5.42	--
4.0	6.01	--
4.2	6.25	--
4.4	6.28	--
4.5	6.32	--
4.6	6.51	--
4.7	--	4.0
4.8	6.25	--
5.0	5.81	--
5.5	--	3.4
9.0	--	2.2
10	--	3.4
17	--	9.0
20	--	10.3
25	--	10.1
28	--	10.0
32	--	8.5
35	--	7.8
40	--	6.5
45	--	5.8

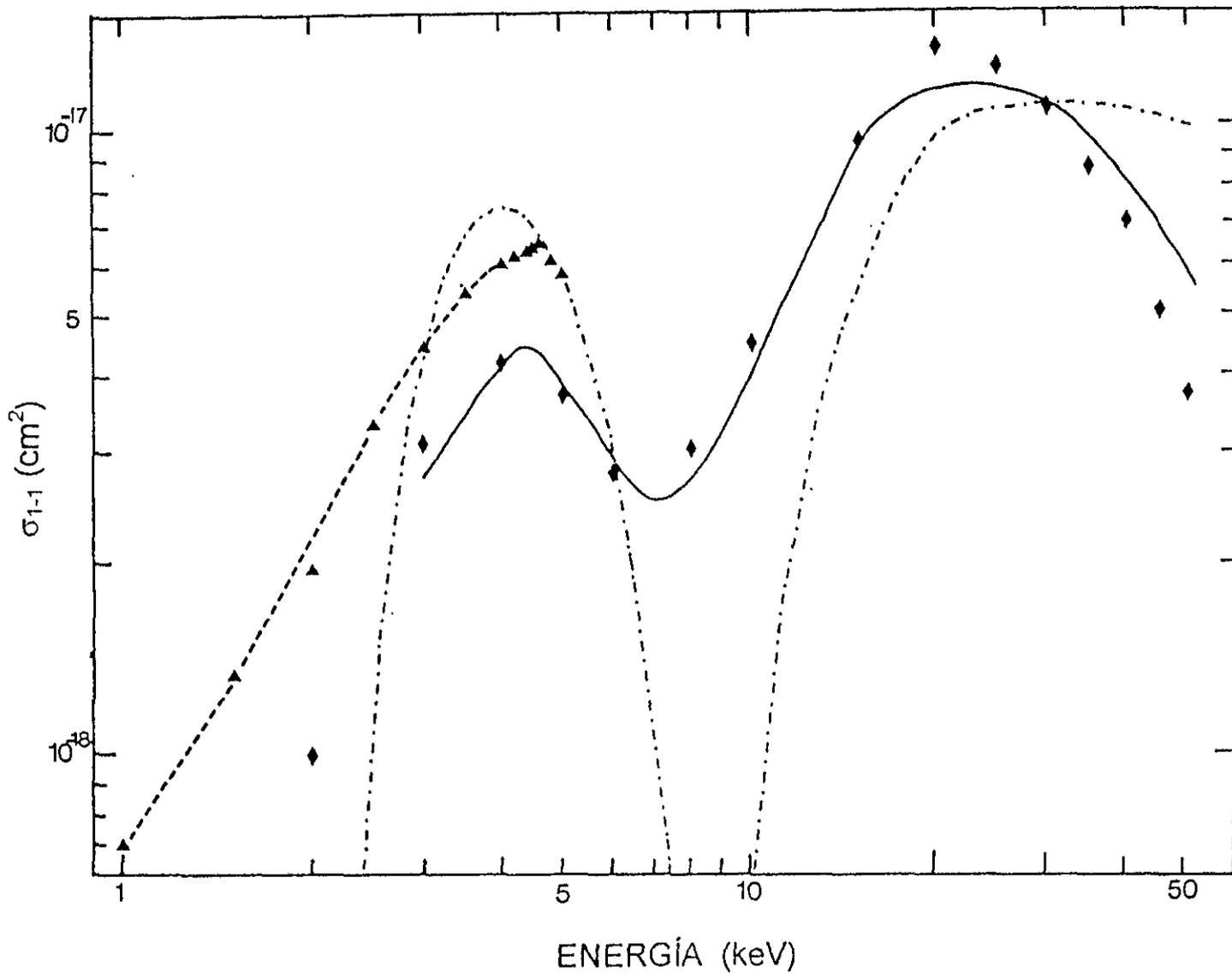


Figura IV.6 - Secciones totales para la captura electrónica doble de protones en Kr.

- ▲ nuestros datos
- ◆ Williams⁽¹⁶⁾
- Fogel' et al⁽¹⁷⁾
- .-.- cálculo usando el modelo de Pedersen et al⁽⁵⁾

En la *figura IV.7* se presentan los datos para $\sigma_{l=1}$ de Morgan⁽⁴⁰⁾ para *Ar* y *Xe*, Williams⁽¹⁶⁾ para *Ar*, *Xe* y *Kr* y los presentes⁽¹⁾ para *Kr*. La *tabla IV.4* resume la información para el primer máximo; las energías están dadas en *keV* y la sección se debe multiplicar por 10^{-18} cm^2 .

Tabla IV.4

	Xe		Kr		Ar	
	E	σ	E	σ	E	σ
Williams	2.5	7.4	4	4.2	5	2.5
Morgan	2.5	13	x	x	5	4.7
Presentes	x	x	4	6.2	x	x

Los potenciales de ionización de estos tres gases son: 12.13 eV (*Xe*), 13.999 eV (*Kr*) y 15.759 eV (*Ar*). Se observa que conforme aumenta el potencial de ionización, el valor de la sección total del primer máximo disminuye y la energía a la que se presenta aumenta, lo que está de acuerdo con el criterio de Massey.

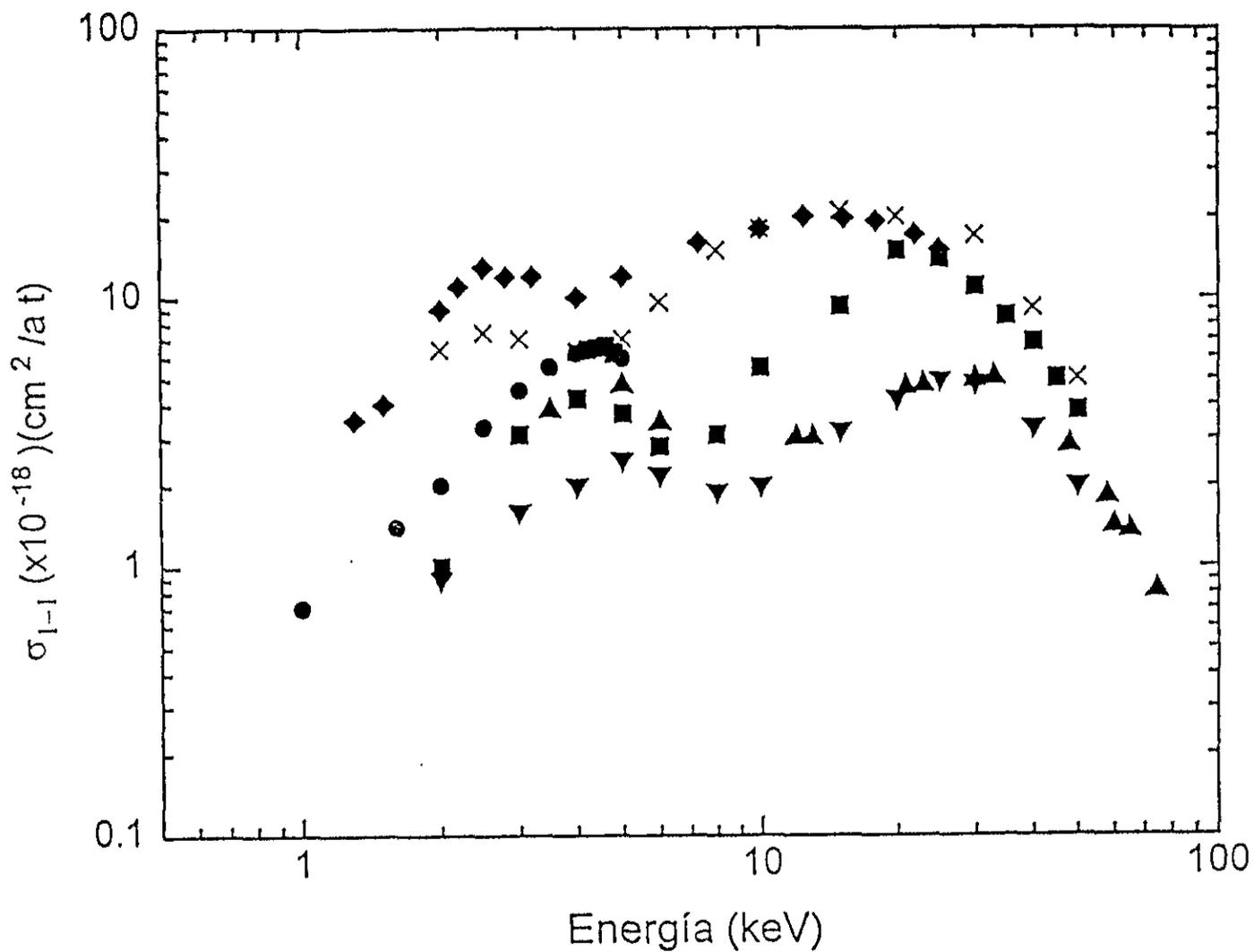


Figura IV.7 - σ_{l-1} para blanco de Xe^(16,40), Ar^(16,40) y Kr^(1,16).

- | | | |
|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|
| ▲ Ar (Morgan ⁽⁴⁰⁾) | ◆ Xe (Morgan ⁽⁴⁰⁾) | ■ Kr (Williams ⁽¹⁶⁾) |
| ▼ Ar (Williams ⁽¹⁶⁾) | x Xe (Williams ⁽¹⁶⁾) | ● Kr - presentes - |

IV.3.- Disociación molecular de H_2^+ en Kr

La disociación del ion molecular más simple, H_2^+ , se ha estudiado durante mucho tiempo. Sin embargo, sobre la formación de H^- hay poca información, y con un blanco de Kr no hay datos experimentales

En la *figura IV.8* se muestran las distribuciones angulares obtenidas del fragmento H^- para un haz de H_2^+ incidente sobre Kr en el presente estudio. Las energías de colisión están entre 1.0 y 5.0 keV. Puede observarse que el ion H^- se forma principalmente en la dirección del haz incidente, y que a otros ángulos diferentes de 0° se observa una estructura.

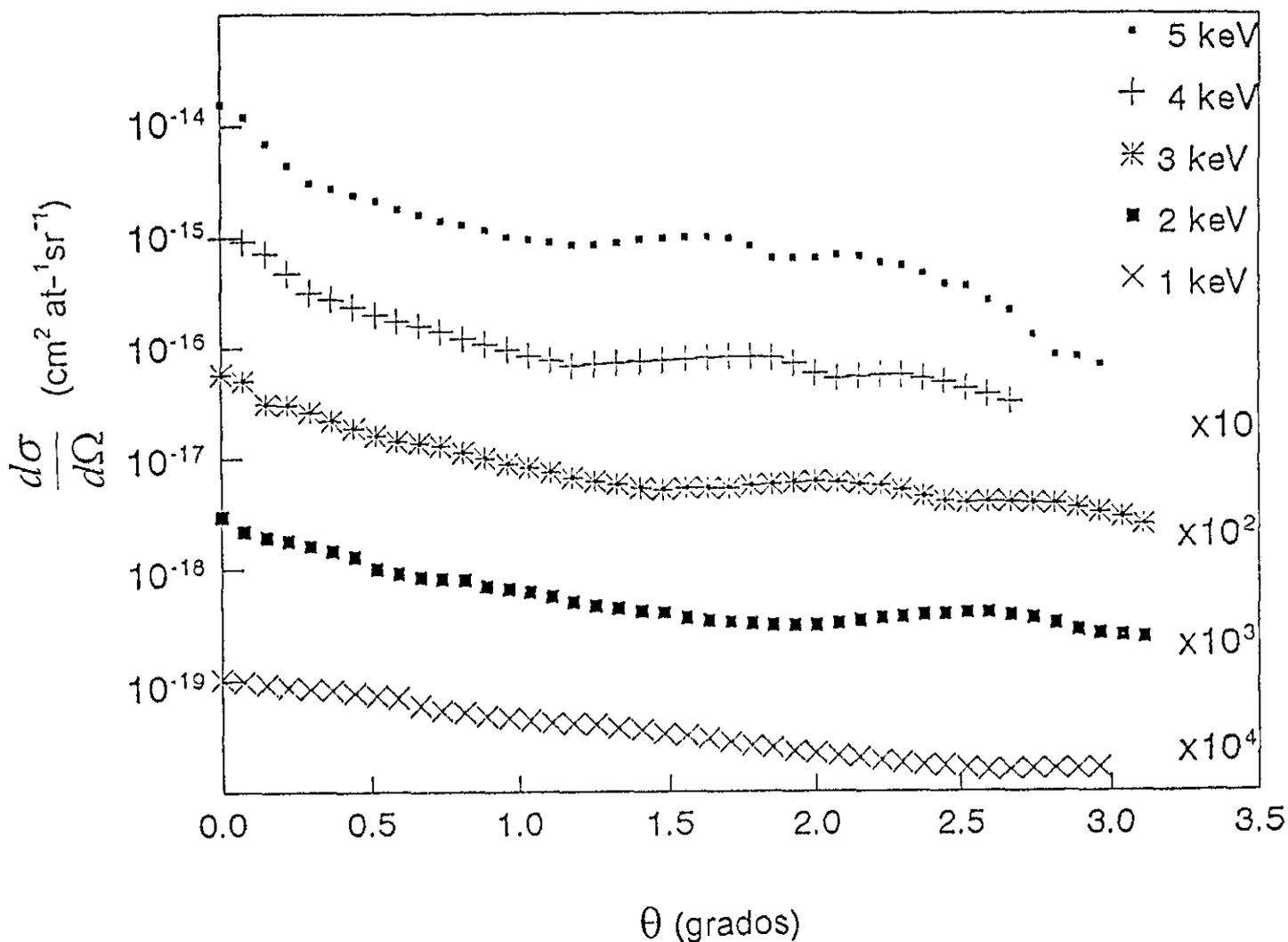


Figura IV.8 - Distribuciones angulares de los fragmentos H⁺ de la colisión de H₂⁺ en Kr a las energías 1, 2, 3, 4, y 5 keV .

Para obtener mayor información sobre las colisiones estudiadas en el presente trabajo y sobre algunos aspectos involucrados en la interacción atómica, se recurrió a la teoría sobre distribuciones angulares de fragmentos producidos por disociación molecular desarrollada por C. Cisneros y sus colaboradores⁽¹⁹⁾ (*capítulo I, sección I.2.C*). El resultado que obtuvieron lleva a la siguiente ley de escalamiento:

$$\frac{1}{E_i} \frac{d\sigma}{d\Omega} = f(E_i \theta^2) \quad \dots \quad (IV.1)$$

Donde $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ es la sección diferencial para encontrar un ion negativo a un ángulo θ dado en el laboratorio, y E_i es la energía incidente del ion.

Por otro lado, usando el hecho de que las velocidades del blanco son pequeñas comparadas con las velocidades incidentes del haz iónico molecular, se encuentra que la relación entre el ángulo sólido diferencial en el sistema CM y laboratorio está dada por:

$$d\Omega_{cm} = \frac{\left(\frac{E}{E_d}\right) d\Omega_L}{\frac{1 - E\theta^2}{E_d}} \quad \dots \quad (IV.2)$$

Usando la *ecuación (IV.2)* es posible determinar la energía de disociación E_d , a partir de la localización del máximo: $E_d = E\theta^2_{m\acute{a}x}$.

Utilizando la *ecuación IV.1* se graficaron los datos experimentales del presente estudio junto con datos de $Mg^{(22)}$ y de $Cs^{(19)}$ (*figura IV.9*).

Como puede verse en esta gráfica, los datos experimentales correspondientes al Kr siguen la ley de escalamiento (*ecuación IV.1*); las estructuras concuerdan muy bien para todos los valores de $E\theta^2$. Este resultado nos indica que los procesos responsables de la producción de H^- son independientes de la energía. Los resultados obtenidos también pueden explicarse como debidos a que el mismo tipo de interacciones están presentes en todo el intervalo de energías considerado.

Los máximos que se observan para el *Kr* en la *figura IV.9*, también se observan para el *Mg*, sólo que con diferentes intensidades; para el *Cs* sólo aparece el segundo máximo.

El primer máximo del *Kr* está a los 12 keV-grado^2 , lo que corresponde a $E_d = 3.7 \text{ eV}$; el segundo máximo está entre los 20 y los 27 keV-grado^2 ($6 \text{ eV} \leq E_d \leq 8 \text{ eV}$).

Cisneros⁽¹⁹⁾ y Peterson y Bae⁽⁷⁾ observaron entre 7.0 y 8.0 eV el mismo tipo de estructura en el sistema $D_2^+ + Cs$. Peterson y Bae suponen que el proceso se lleva a cabo mediante la captura electrónica de H_2^+ a un estado repulsivo H_2^0 el que se disocia; posteriormente H^0 captura un electrón formándose así H^- , dando lugar a las diferentes estructuras observadas. Concluyen que dichas estructuras se deben a la predisiociación del estado $c^3\pi_u$ que se acopla rotacionalmente al estado repulsivo $b^3\Sigma_u^+$. Sus resultados están basados en las investigaciones de Bruijn y sus colaboradores^(21,42) quienes emplearon diferentes blancos y estudiaron la disociación de H_2^+ en dos átomos de *H*. Ellos encontraron que la estructura entre 7.2 y 10.0 eV está siempre presente, con diferentes intensidades, de acuerdo a las características del blanco (*figura IV.10*).

Así mismo, la interpretación de Bruijn al máximo observado como el primer potencial del H_2 cerca de 8 eV es que se debe a la disociación directa al estado repulsivo $b^3\Sigma_u^+$, el cual produce dos átomos de *H* en el estado base (*figura IV.11*), los que comparten una energía cinética E_d hasta cerca de los 8 eV (*figura IV.10*).

Los datos de $Mg^{(22)}$ de la *figura IV.9* presentan tres estructuras en las distribuciones angulares de los fragmentos H^- producidos por la colisión de H_2^+ en *Mg* a energías entre 1.0 y 5.0 keV . Los máximos corresponden a energías de disociación de 4.0 , 7.2 y 12.1 eV (13 , 23.6 y 40 keV-deg^2). La estructura en 7.2 eV es interpretada por Cisneros y colaboradores en forma similar a los resultados con $D_2^+ + Cs$. Proponen que para el *Mg* existe un proceso en el que un electrón es transferido del átomo de *Mg* al ion molecular conduciendo a productos excitados que pueden capturar otro electrón en su trayectoria y así producirse el ion *H*.

Como el *Kr* tiene un comportamiento similar, sugerimos que el proceso que ocurre es análogo al que presentan el *Mg* y el *Cs*. Sin embargo, en la *figura 1.6* se observa que curvas de potencial de H_2^- y H_2 están cerca una de la otra, por lo que no se puede discernir sobre la manera en que interaccionarán el H_2 y el *Kr*. Una manera de hacerlo es realizar experimentos en coincidencia para detectar los productos provenientes de una misma reacción, o bien, contar con más curvas de potencial.

La *tabla IV.5* muestra un resumen de la posición de las estructuras para blancos de *Cs*, *Mg*, *Ar* y *Na*.

Tabla IV.5 Posición de las estructuras presentes en experimentos de H_2^+ y D_2^+ en *Cs*, *Mg*, *Kr*, *Ar* y *Na*.

autores	proyector	blanco	posición de las estructuras		
C. Cisneros ⁽¹⁹⁾	H_2^+	Cs	$\sim 23 \text{ keV-grado}^2$ = 7 eV	----	----
C. Cisneros ⁽²⁰⁾	H_2^+	Mg	$\sim 23 \text{ keV-grado}^2$ = 7 eV	$\sim 12 \text{ keV-grado}^2$ = 3.7 eV	--
presente trabajo ⁽⁶⁾	H_2^+	Kr	$\sim 23 \text{ keV-grado}^2$ = 7 eV	$\sim 12 \text{ keV-grado}^2$ = 3.7 eV	--
Bruijn ⁽²¹⁾	H_2^+	Ar	8 eV	----	0.6 eV
		Mg	8 eV	4 eV	----
		Na	8 eV	----	$\sim 1.5 \text{ eV}$
		Cs	8 eV	----	$\sim 1 \text{ eV}$
Peterson y Bae ⁽⁷⁾	D_2^+	Cs	$\sim 7.5 \text{ eV}$	----	----

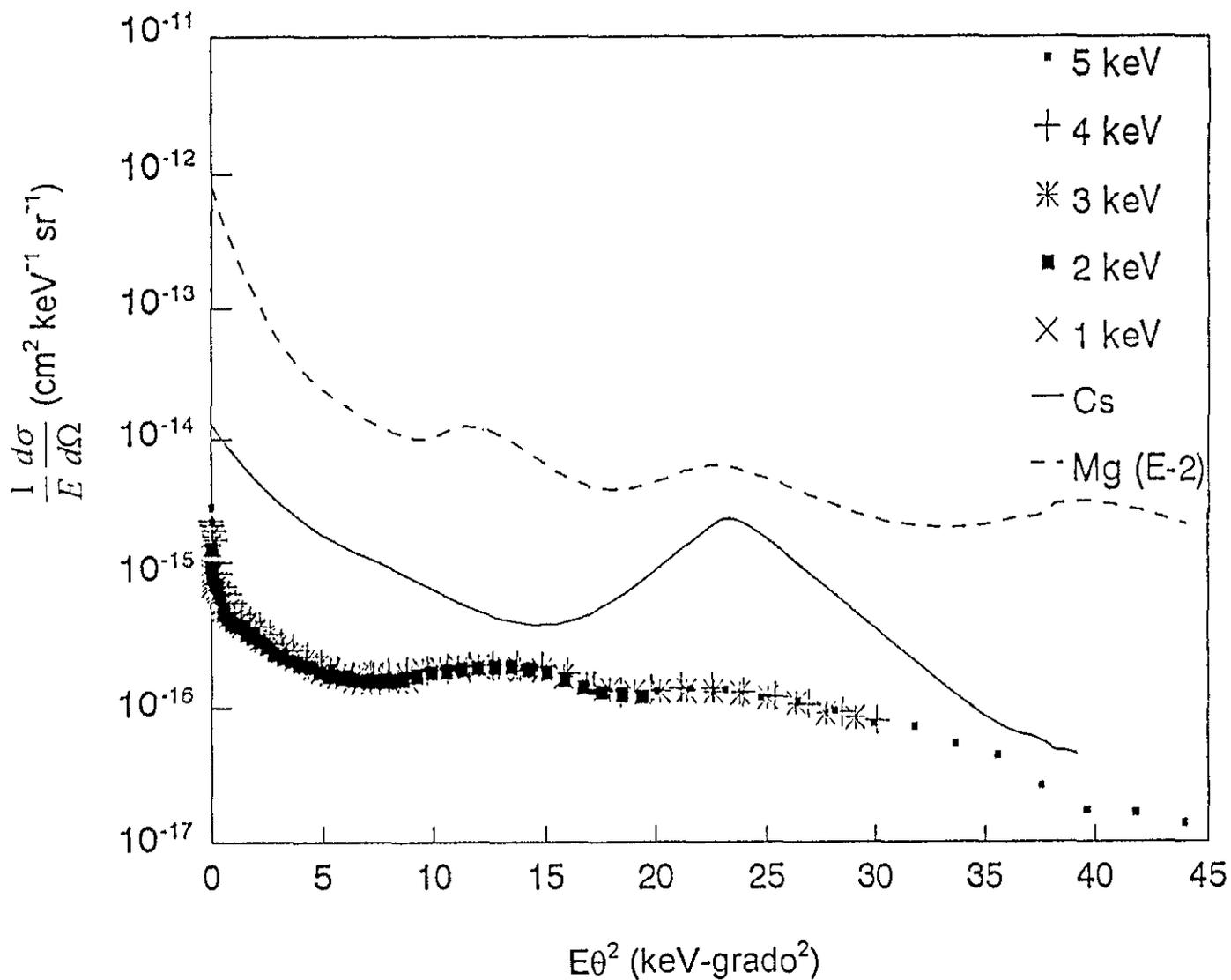


Figura IV.9 - Distribuciones angulares de la reacción $H_2^+ + Kr \rightarrow H$ graficadas en términos de las variables reducidas $(1/E)d\sigma/d\Omega$ y $E\theta^2$. Los datos de Cs y Mg son de Cisneros et al^(19,20).

La variación en la intensidad de los máximos para los diferentes blancos es apreciable. El ordenamiento (*Cs*, *Mg*, *Kr*) está de acuerdo al valor del potencial de ionización que tienen (*Cs*, 3.894 eV; *Mg*, 7.646 eV; *Kr*, 13.999 eV). Este mismo comportamiento se observa en el trabajo de Bruijn y sus colaboradores⁽²¹⁾ quienes presentan espectros de energía de la transferencia de carga de H_2^+ con *Ar*, *Mg*, *Na* y *Cs*. El potencial de ionización del *Ar* es de 15.759 eV. En la *figura IV.10* se presentan estos espectros para 5 keV.

En la gráfica de la *figura IV.11* se muestran las curvas de potencial de H_2 . Se han marcado los potenciales de ionización de varios elementos. Se observa que con blancos con un alto potencial de ionización como el *Kr*, se obtiene principalmente un intercambio al estado base (máximo poco definido), mientras que con bajos potenciales de ionización como el *Cs* se obtiene H_2^+ en los estados $a^3\Sigma_g^+$, $c^3\Pi_u$, $B'\Sigma_u^+$ y más intensos (máximo bien definido). Para blancos intermedios como el *Mg*, el canal más importante que se obtiene es el estado repulsivo $b^3\Sigma_u^+$ (máximos bien definidos pero anchos). Este análisis concuerda con trabajos anteriores^(21,42) sobre medidas para intercambio de carga.

Basados en las interpretaciones de Peterson y Bae⁽⁷⁾ para $D_2^+ + Cs$, como consecuencia de la correspondencia entre la energía cinética liberada y los valores de E_d encontrados, creemos factible el poder usar el hecho de que una pequeña fracción de los átomos que se obtienen de la disociación del producto excitado, pueden capturar un electrón en una segunda colisión con kriptón y convertirse en ion negativo antes de salir de la celda de reacción. Lo anterior implica poder tener $H_2^+ + Kr \rightarrow H + H + Kr^+$ seguido de $H + Kr \rightarrow H^-$.

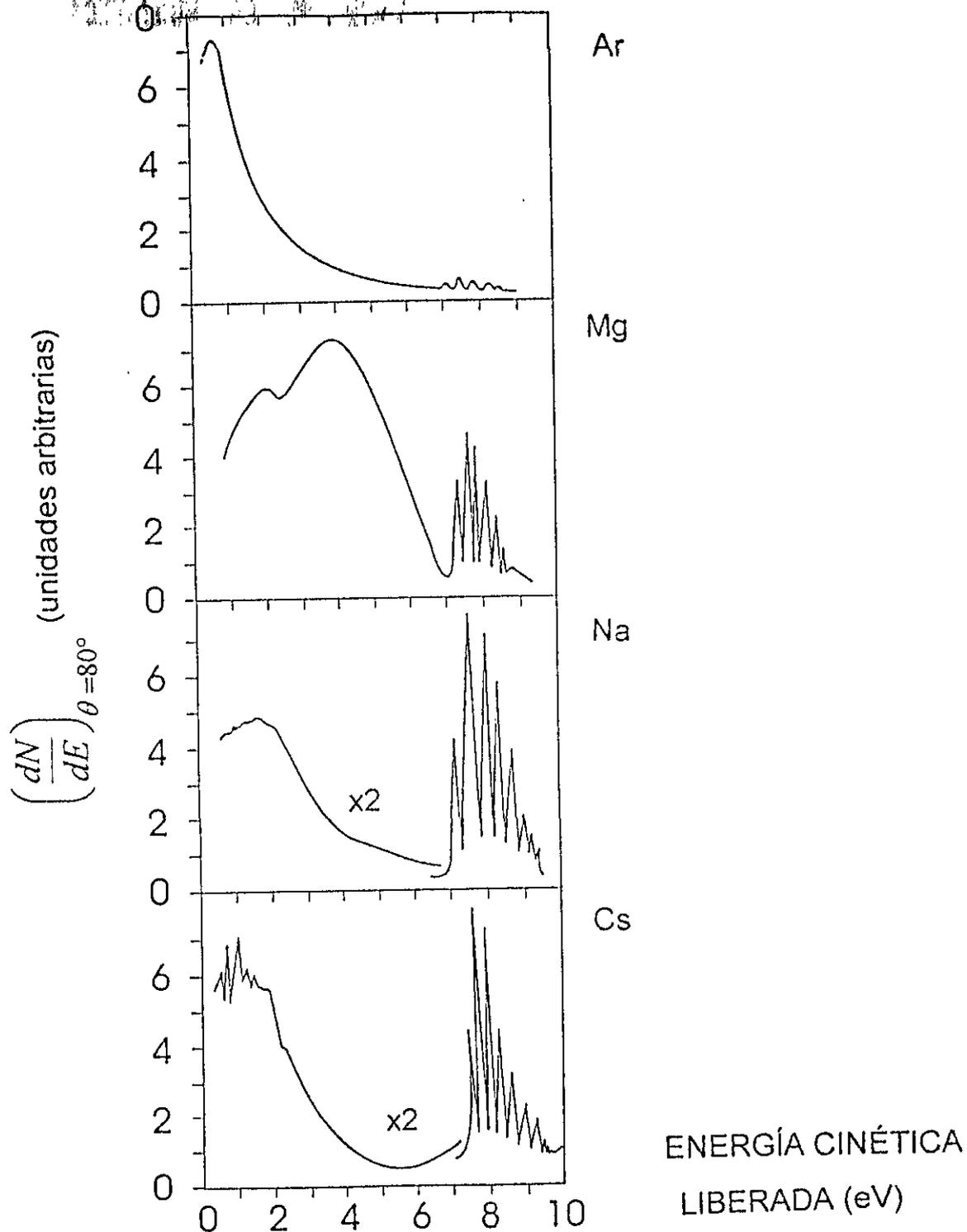


Figura IV.10 - Espectros de energía⁽²¹⁾ de H^0 de la transferencia de carga de H_2^+ con Ar, Mg, Na y Cs. El ángulo de dispersión con respecto al eje del haz en el C.M. se escogió a 80° y la energía de colisión es de 5 keV para todos los espectros.

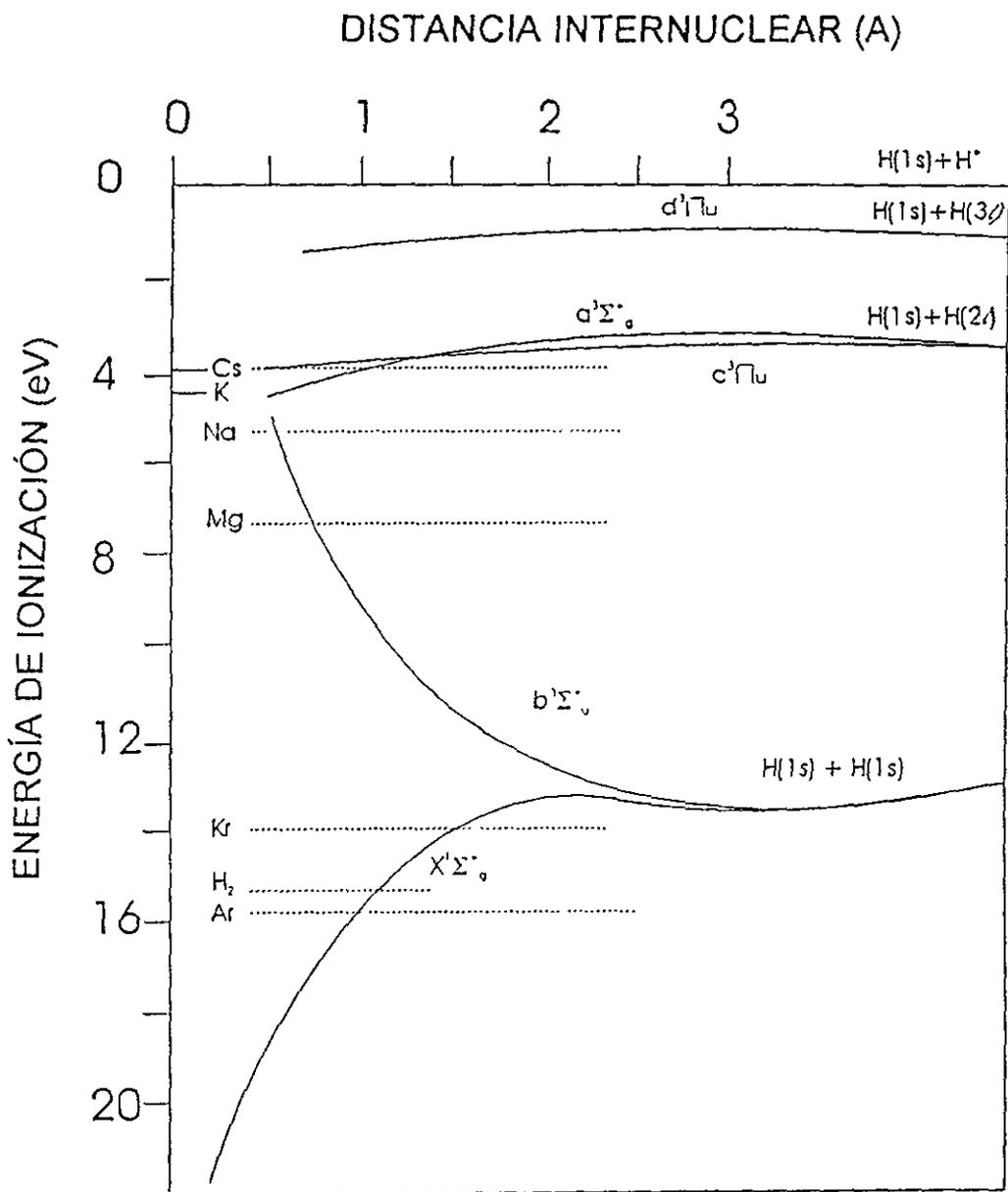


Figura IV.11 - Regiones cuasi-resonantes en la transferencia de carga de H_2^+ para varios blancos⁽²¹⁾. Las curvas de potencial de H_2 están dadas por la energía de ionización con respecto al estado base de H_2 . Las líneas punteadas son las energías de ionización con respecto al estado base del H_2 .

Los valores de la sección total para la formación de H^- a partir de la disociación de H_2^+ en Kr se presentan en la *tabla IV.6*, y están graficados en la *figura IV.12*.

Tabla IV.6: Valores de la sección total de la reacción $H_2^+ + Kr \rightarrow H^-$

ENERGÍA (keV)	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
$\sigma_{2-1}(\times 10^{-17} \text{cm}^2)$	0.31	0.64	1.10	1.95	2.50	3.00	3.45	3.80	4.25

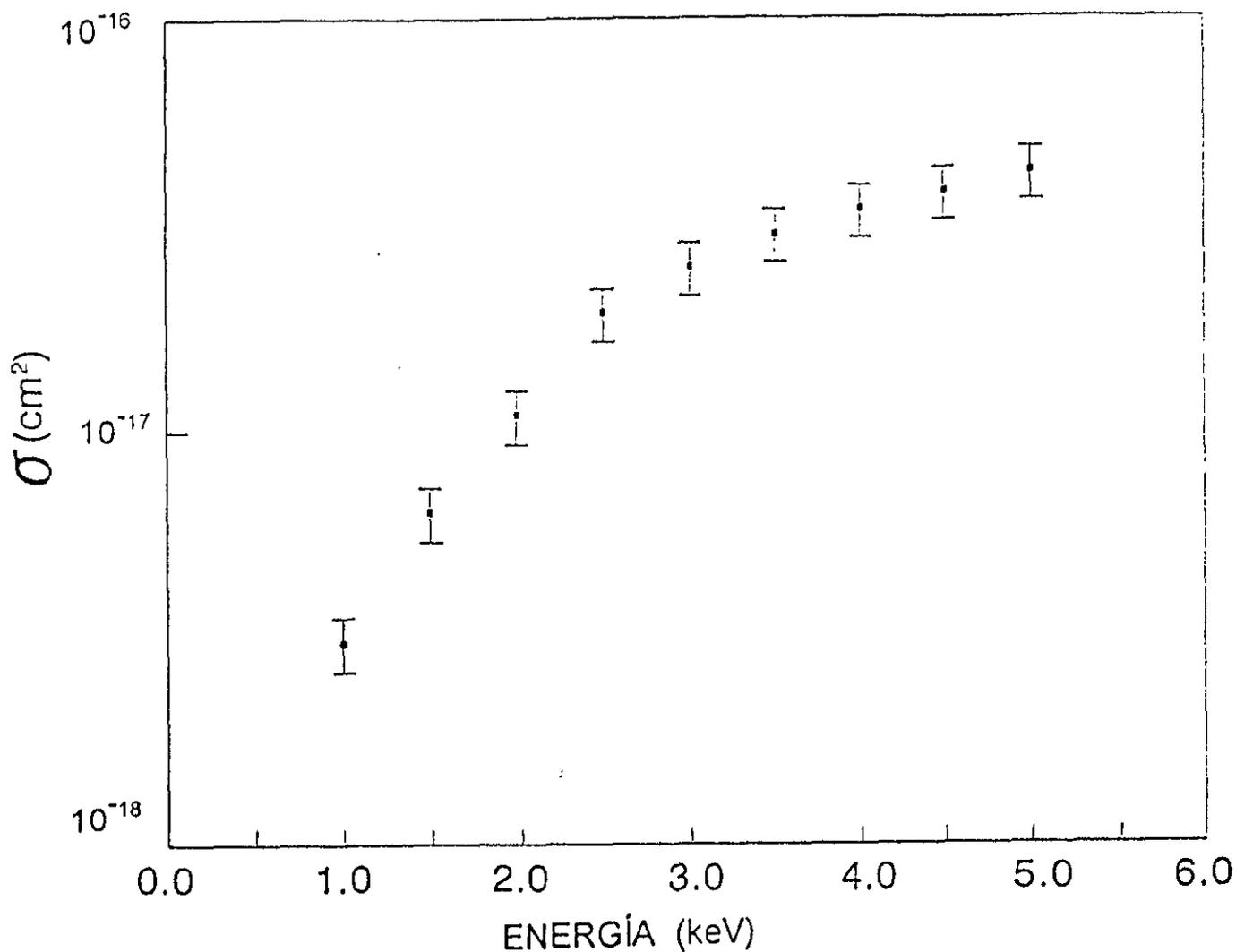


Figura IV.12 - Datos de las secciones transversales totales

IV.4.- El ion H^+

El ion H^+ se produce en las dos reacciones que se estudiaron. Sin embargo, no se hicieron medidas de ellos. Las razones son las siguientes:

1. cuando el haz es de protones, detectarlos únicamente nos permitiría obtener el potencial.
2. con el haz de H_2^+ , el ion H^+ puede provenir de varias reacciones como $H^+ + H + Kr$ o $H^+ + Kr^{++} + e$. En el estudio que se realizó no podemos distinguir la reacción de la que procede el protón, por lo que no se obtiene información relevante; haría falta desarrollar un experimento para medir en coincidencia varios productos de una reacción.

Capítulo V Conclusiones

En el presente trabajo se reportan las medidas absolutas de las secciones transversales diferencial y total de la captura electrónica simple y doble para colisiones de protones con átomos de kriptón. Asimismo se reportan las medidas de las secciones de la disociación molecular del ion H_2^+ en átomos de kriptón. Los estudios con ambos proyectiles se realizaron en el intervalo de energías de 1.0 a 5.0 keV y ángulos de dispersión entre -4° y 4° .

Con relación a la captura electrónica simple, con el presente estudio se contribuyó con valores absolutos de la sección diferencial en el intervalo de energía entre 1 y 2 keV . Otros valores de la sección diferencial para la captura electrónica simple de H^+ en Kr se encuentran en los trabajos de Abignoli y colaboradores⁽³⁾ y de Johnson y sus colaboradores⁽²⁾; sin embargo, no se cubre totalmente el intervalo de energías que el presente trabajo abarca. Además, sólo las secciones de Johnson son absolutas como las aquí reportadas. Se graficaron los datos obtenidos y se observan estructuras, comportamiento que también fue reportado por Johnson, quien sólo trabajó a 0.5 , 1.5 y 5.0 keV .

Se calcularon las secciones totales y se graficaron con varios trabajos experimentales previos^(7,13,14). Se observa que todos los conjuntos de datos presentan el mismo tipo de comportamiento con defasamientos respecto a la posición del máximo, aunque el valor máximo de σ_{10} de Johnson (0.5 keV) está cercano al máximo reportado por Koopman⁽¹³⁾. En la *gráfica IV.3* se observa que los presentes datos concuerdan bien con los de Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾ y los de Johnson; esto puede deberse a que sólo las medidas de Johnson, las de Stedeford y Hasted y las presentes, son absolutas. Los datos de

Koopman están por debajo de la incertidumbre y los de Williams por encima de la incertidumbre.

Se hizo un cálculo basado en el modelo semiempírico de Olson⁽⁴⁾ y se observa que el modelo tiene el mismo comportamiento que los datos, con un máximo cerca de 1 keV ; pasa por las barras de incertidumbre de los presentes datos.

Hasted⁽²⁴⁾ reporta que el parámetro adiabático para muchas reacciones donde se transfiere un electrón es 7\AA . Con este valor se calculó la energía a la que aparece el máximo en la sección total de acuerdo al criterio adiabático de Massey⁽²³⁾. Se encontró que este valor es 1 keV . A este valor se acercan los máximos de Stedeford y Hasted⁽¹⁵⁾, Koopman⁽¹³⁾ y el cálculo basado en el modelo de Olson⁽⁴⁾. En cuanto a los presentes datos, como la energía de colisión más baja es justamente 1 keV , es deseable poder realizar la reacción a más bajas energías para ver dónde queda realmente el máximo. Además, se podría estudiar si se siguen acoplando los datos con los de Stedeford y Hasted.

A partir de los cálculos de captura electrónica simple cuasi-resonante del sistema $H^+ + Kr$, varios autores^(3,11,13) infieren que este proceso está gobernado por la interacción entre los niveles $H + Kr^+ (4p^5 \text{ } ^2P_{3/2})$ y $H^+ + Kr (4p^6 \text{ } ^1S)$, en este intervalo de energías, lo cual se corrobora en el presente experimento.

Con relación a la doble captura electrónica de protones en kriptón se reporta lo siguiente:

Se decidió explorar una región de energía que antes no se había investigado; hay información a energías menores de 1 keV y mayores de 2 keV . Además, se investigó y se encontró que el Kr presenta el mismo comportamiento oscilatorio que presentan otros gases nobles, como se aprecia en la *figura IV.7*. Se graficó la sección total y se encontró un máximo entre 1 y 5 keV , junto con los datos de Williams⁽¹⁶⁾ y Fogel⁽¹⁷⁾; estos datos presentan dos máximos. Los presentes datos son mayores que los de Williams por más de un 30% . El sistema de vacío empleado en el presente estudio es superior al de Williams, así como el sistema de detección, lo que puede ser la causa de la diferencia en valores.

Se hizo un cálculo de $\sigma_{l,l}$ utilizando el modelo de Pedersen⁽⁵⁾ el cual predice un comportamiento oscilatorio y se observa que la curva no se ajusta a

los datos experimentales en el intervalo de energías considerado. Hace falta otra teoría para analizar los datos.

Al graficar las secciones $\sigma_{1,l}$ para Xe , Kr y Ar se observa que, con relación al primer máximo, a menor potencial de ionización corresponde un mayor valor de la sección total. Además, se observa que conforme aumenta el potencial de ionización, el máximo se presenta a mayor energía.

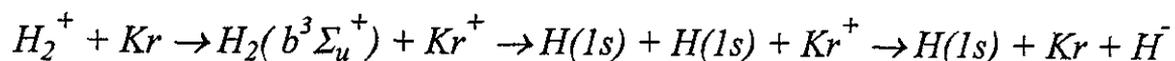
También se calculó el valor de la energía a la que debe aparecer al máximo de la sección, de acuerdo a la hipótesis adiabática de Massey. Se tomaron dos valores del parámetro de impacto, correspondientes a los trabajos de Fogel⁽¹⁷⁾ y de Hasted⁽²⁴⁾. En ambos casos el valor de la energía está muy por arriba del intervalo estudiado.

Para el proceso de disociación estudiado podemos concluir que:

Al graficar las distribuciones angulares para los fragmentos $H^{\bar{}}$ formados a partir de un haz de H_2^+ incidente sobre Kr , se observa que el ion $H^{\bar{}}$ aparece principalmente en la dirección del haz incidente y que a ángulos diferentes de cero; se encuentra una estructura.

Usando la ley de escalamiento desarrollada por Cisneros y sus colaboradores⁽¹⁹⁾ se observa que los resultados experimentales concuerdan bien para todos los valores de $E\theta^2$, lo cual indica que los procesos responsables de la producción de $H^{\bar{}}$ son independientes de la velocidad. Se reportan los datos para Kr , Mg y Cs , encontrando que los máximos para el Kr también se observan para el Mg pero menos pronunciados; en cambio el Cs sólo presenta un máximo.

En el presente trabajo se reporta una estructura entre los 7.0 y 8.0 eV. Para las reacciones $D_2^+ + Cs$ y $D_2^+ + Mg$, Peterson y Bae⁽⁷⁾ y Cisneros y sus colaboradores^(19,23) reportan la misma estructura. Considerando la correspondencia entre la energía cinética liberada y los valores de la energía de disociación, Bruijn y sus colaboradores⁽²¹⁾ atribuyen al máximo observado, a bajas energías ($E_d < 4$ eV), la disociación directa al estado repulsivo $b^3\Sigma_u^+$. De acuerdo a esto, el presente estudio sugiere que existe una predisociación a estados base de átomos de H , del estado $c^3\pi_u$ al estado repulsivo $b^3\Sigma_u^+$. La reacción que se tiene es:



Estos resultados indican que la formación de H^- se puede producir por dos colisiones y que se puede explicar la presencia de las estructuras a la misma energía de disociación debido al intercambio de carga. También se pueden explicar las diferencias en intensidades observadas para diferentes blancos, a las diferentes energías de ionización del mismo. Esta diferencia de intensidades se puede considerar como el mecanismo dominante en el intercambio de carga cerca de la resonancia, la cual induce transiciones verticales. Sin embargo, como hay una curva de potencial de H_2^- cerca del canal que produce $H + H$; no se puede discernir sobre la manera en que interaccionará el H_2^+ . Una manera de hacerlo es realizar experimentos en coincidencia para detectar los productos provenientes de una misma reacción.

La investigación que se realizó aporta información de los procesos de transferencia de carga. El conocimiento de procesos que involucren iones es indispensable para comprender procesos tales como los que se generan en la magnetósfera.

No existen teorías que reproduzcan bien el comportamiento cuantitativo reportado en el presente estudio; únicamente reproducen la forma. Es indispensable que se pueda establecer una comparación entre la teoría y el experimento para el entendimiento de los procesos que ocurren en la naturaleza. Recientes trabajos teóricos indican que aun cuando las partículas colisionantes son monoatómicas, no siempre se describe adecuadamente la transferencia de electrones a baja energía. Sólo se conoce la teoría de transferencia de carga para partículas monoatómicas, y ésta no es la más adecuada para colisiones que involucran más de dos núcleos y ocurren procesos de disociación.

Los experimentos que han realizado numerosos investigadores a lo largo de varios años abarcan un amplio intervalo de energías. Sin embargo, no siempre es posible ver que se complementan unos a otros. Es necesario realizar más experimentos a fin de aportar resultados que conduzcan a los teóricos a desarrollar alguna teoría en este campo de la investigación.

Referencias

1. H. Martínez, B.E. Fuentes, I. Álvarez, C. Cisneros, J. de Urquijo. *Chem. Phys.* 190 (1995), 139.
2. L. K. Johnson, R. S. Gao, C. L. Hakes, K. A. Smith, R. F. Stebbings. *Phys. Rev.* A40 (1989), 4920.
3. M. Abignoli, M. Barat, J. Baudon, J. Fayeton, J. C. Houver. *J. Phys.* B5 (1972), 1533.
4. R. E. Olson. *Phys. Rev.* A2 (1970), 121, *Phys. Rev.* A6 (1972), 1822.
5. E. H. Pedersen, J. V. Mikkelsen, J. Vaaben, K. Taulbjerg. *Phys. Rev. Lett.* 41 (1978), 1541.
6. B. E. Fuentes, H. Martínez, C. Cisneros, I. Álvarez, J. de Urquijo. *Nucl. Instr. & Meth.* B95 (1995), 158.
7. J. R. Peterson, Y. K. Bae. *Phys. Rev.* A30 (1984), 2807.
8. a. L. Wolniewicz. *Phys. Rev.* A53 (1996), 4609. C. Le Sech. *Phys. Rev.* A53 (1996), 4610.
b. T. Odagiri, N. Uemura, K. Koyama, M. Ukai, N. Kouchi, Y. Hatano. *J. Phys.* B29 (1996), 1829.
c. U.L. Arbuzov, V.B. Vykhodets, G.A. Raspopova. *J. Nucl. Materials* 233-237 (pta) (1996), 442.
d. U. Kappes, P. Schmelcher. *Phys. Rev.* A53 (1996), 3869.
e. J. Hanssen, B. Joulakian, R. D. Rivarola, R. J. Allan. *Physica Scripta* 53 (1996), 41.
f. F. A. Gianturco, S. Kumar. *Z. Phys.* D37 (1996), 155. B. P. Lavrov, A. S. Mel'nikov. *Opt. and Spectr.* 79 (1995), 842.

- g. S. A. Zapriagaev. *XVI International Conference on Atomic Physics*, Windsor, Ontario, Canadá, 1998.
- h. Stefan A. Deutscher, Joachim Burgdörfer, *Annual Meeting of the Division of Atomic, Molecular, and Optical Physics*, American Physical Society, Santa Fe, New Mexico, USA, 1998.
9. A. A. Korotkov, A. Gondhalekar, A. J. Stuart. *Nuclear Fusion* 37 (1997), 35; J. Roth, C. García-Rosales. *Nuclear Fusion* 37 (1997), 897; B. V. Mech, A. A. Haasz, J. W. Davis. *J. Nucl. Materials* 241-243 (1997), 1147.
10. H. H. Fleischmann, R. A. Young. *Phys. Rev. Lett.* 19 (1967), 941.
11. C. Benoit, C. Kubach, V. Sidis, J. Pommier, M. Barat. *J. Phys.* B10 (1977), 1661.
12. M. Baer, R. Düren, B. Friedrich, G. Niedner, M. Noll, J. P. Toennies. *Phys. Rev.* A36 (1987), 1063.
13. D. W. Koopman. *Phys. Rev.* 154, (1967) 79.
14. J. F. Williams, D. N. F. Dunbar. *Phys. Rev.* 149 (1966), 62.
15. J. B. H. Stedeford, J. B. Hasted. *Proc. Roy. Soc.* A227 (1955), 466.
16. J. F. Williams. *Phys. Rev.* 150 (1966), 7.
17. Ia. M. Fogel', R. V. Mitin, V. F. Kozlov, N. D. Romashko. *Soviet Phys., JETP* 35 (1959), 390.
18. V. F. Kozlov, Ya. M. Fogel', V. A. Stratienco. *Soviet Phys. JETP* 17 (1963), 1226.
19. C. Cisneros, I. Álvarez, C. F. Barnett, J. A. Ray, A. Russek. *Phys. Rev.* A14 (1976), 88.
20. C. Cisneros, I. Álvarez, R. García, C. F. Barnett, J. A. Ray, A. Russek. *Phys. Rev.* A19 (1979), 631.
21. D. P. de Bruijn, J. Neuteboom, V. Sidis, J. Los. *Chem. Phys.* 85 (1984), 215.
22. C. Cisneros, I. Álvarez, H. Martínez, J. de Urquijo. *Nucl. Instr. & Meth.* B56/57 (1991), 285.
23. E.W. Mc Daniel, *Collision Phenomena in Ionized Gases*, John Wiley & Sons Inc., London-New York-Sidney, 1964, pp. 238-277.
24. J. B. Hasted. *Phys. of Atomic Collisions*, Butterwoth, London, 1972.
25. R. E. Olson, F. T. Smith, E. Bauer. *Appl. Opt.* 10 (1971), 1848.
26. Yu. N. Demkov. *Soviet Phys. JETP* 18 (1964), 138.
27. C. Kubach, V. Sidis. *Phys. Rev.* A14 (1976), 152.

28. Landau, *J. Phys.(USSR)* 2 (1932), 46. C. Zener. *Proc. Roy. Soc.* A137, (1932), 696.
29. T. E. Sharp, *At. Data* 2 (1971), 119.
30. J. F. Williams. *Phys. Rev.* 153, (1967), 116.
31. P. M. Stier, C. F. Barnett. *Phys. Rev.* 103 (1956), 896.
32. B. M. Doughty, M. L. Goad, R. W. Cernosek. *Phys. Rev.* A18 (1978), 29.
33. Manual de las Lentes Einzel, Instituto de Física, U.N.A.M., 1976.
34. L. Wahlin. *Nucl. Instr. & Meth.* 27 (1964), 55. Manual Colutron Research Corporation (1995).
35. G. A. Harrower. *Rev. Sci. Instrum.* 26 (1955), 850.
36. Channeltron Electron Multiplier. Handbook for mass spectrometry applications. Galileo Electro-Optics Corporation 1991.
37. D. N. Crandall, J. A. Ray, C. Cisneros. *Rev. Sci. Instrum.* 46 (1975), 5.
38. N.G. Utterback, T. Griffith Jr. *Rev. Sci. Instrum.* 37 (1966), 866.
39. Manual Timer Ortec modelo 719.
40. T. J. Morgan, K. H. Berkner, W. G. Graham, R. V. Pyle, J. W. Stearns. *Phys. Rev.* A14 (1976), 664. T. J. Morgan, F. J. Eriksen. *Phys. Rev.* A19 (1979), 1448.
41. B. Van Zyl, M. W. Gealy, H. Neumann. *Phys. Rev.* A33 (1986), 2333; B. Van Zyl, M. W. Gealy, H. Neumann. *Phys. Rev.* A35 (1987), 4551.
42. V. Sidis, D.P. de Bruijn. *Chem. Phys.* 85 (1984), 201.
43. D. P. Hodgkinson, J. S. Briggs. *J. Phys.* B9 (1976), 255.
44. V. A. Ankudinov, S. V. Nobashev, V. I. Perel. *Sov. Phys. JETP* 33 (1971), 490.
45. Gordon W. McClure. *Dissociation in Heavy Particle Collisions*. John Wiley and Sons, Inc., 1972. Dik de Bruijn. *Dissociative Charge Exchange of H_2^+* . Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam, Holanda, 1983.