

00323



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

43

FACULTAD DE CIENCIAS

**ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LA TRANSFERENCIA  
DE CARGA PARA LAS REACCIONES ASIMÉTRICAS**

**$N^+ + (Ne, Kr \text{ y } Xe)$**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**F Í S I C O**

P R E S E N T A :

**JAIME MELÉNDEZ MARTÍNEZ**

DIRECTOR DE TESIS: DR. PEDRO GUILLERMO REYES ROMERO



FACULTAD DE CIENCIAS  
U.N.A.M.

2003



FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR



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.

PAGINACIÓN

DISCONTINUA



UNIVERSIDAD NACIONAL  
SISTEMA DE  
MEXICO

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo intelectual.

NOMBRE: Jaime Meléndez Martínez

FECHA: 07/Abril/2003

FIRMA: Jaime

**DRA. MARÍA DE LOURDES ESTEVA PERALTA**  
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito: "Estudio experimental de la transferencia de carga para las reacciones asimétricas  $N^+ + (Ne, Kr \text{ y } Xe)$ "

realizado por Jaime Meléndez Martínez

con número de cuenta 9850561-2, quien cubrió los créditos de la carrera de Física

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis  
Propietario

Dr. Pedro Guillermo Reyes Romero

Propietario

Dr. Fermín Castillo Mejía

Propietario

Dr. Guillermo Guadalupe Hinojosa Aguirre

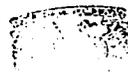
Suplente

Dr. Pablo de la Mora y Palomar Askinasy

Suplente

Dr. Horacio Martínez Valencia

Consejo Departamental de Física



**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

**DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE**  
Coordinadora de Licenciatura

## AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer a mis padres Jaime y Lourdes por el apoyo fundamental que me han brindado durante todos estos años. Ya vez mamá, si se pudo.

A mis hermanos Harold Hiaslieth, Hans Yusseff y Eurídice por haberme apoyado de una u otra manera durante todo este tiempo.

A mi abuelita Juanita Martínez I.\* por ayudarme siempre y principalmente durante mi primer año en la Universidad. Mil Gracias.

A mi Tío Martín Vilchis U. también gracias de veras por haberme acompañado a realizar los trámites para ingresar a la Universidad.

A mis cuates de la prepa: Karla Guzmán, Sergio Camacho "surfito, checo o chanita", Gaby García, Getzemaní López "mani", Urias García, Roberto Carlos Álvarez "cepi", Fadul Carbajal "falopio", Cesar A. Álvarez "capu", José A. Fuentes C. "lobo", Pepe Toledo, Ana Luz Regalado, Dulce Flor Zárate y a muchos cuates más. Gracias a todos por su amistad.

También a mi cuate Pedro Cervera Gómora por sus consejos y por levantarme el ánimo en los momentos más complejos y difíciles.

Quiero agradecer tanto al Dr. Horacio Martínez Valencia como al Dr. Pedro Guillermo Reyes Romero su valiosísima ayuda, sin la cual no hubiera sido posible la realización de este trabajo. Gracias por tenerme paciencia y por estar siempre en la mejor disposición de atender mis dudas. Gracias por sus consejos.

Agradezco también las valiosas sugerencias de las siguientes personas, las cuales contribuyeron al mejoramiento de este proyecto: Dr. Fermín Castillo Mejía, Dr. Guillermo Guadalupe Hinojosa Aguirre y Dr. Pablo de la Mora y Palomar Askínasy.

*A las siguientes personas su apoyo técnico: Sr. Anselmo Trujillo, Ing. Armando Bustos Gómez y al Sr. José Rangel (ICN-UNAM) quienes siempre estuvieron en la mejor disposición de colaborar en la parte experimental. Gracias*

*En estas líneas agradezco a mi cuate el Fis. Eduardo Salguero Hernández y al Sr. Pedro Javier Vargas Palma su interés porque este trabajo contribuyera a mi formación académica, y presentarme ante un grupo de trabajo de gran nivel académico.*

*Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología CONACYT proyecto 41072-F y a la Dirección General de Apoyo para el personal Académico (UNAM) DGAPA proyecto IN-100392 por los apoyos económicos.*

*Al Centro de Ciencias Físicas CCF-UNAM por permitirme realizar este trabajo.*

*A la Universidad Nacional Autónoma de México UNAM y a la Facultad de Ciencias FC por brindarme una educación integral y de calidad.*

## Índice

Introducción.....	(1)
-------------------	-----

### Capítulo 1

1.-Antecedentes.....	(4)
1.1.- Importancia del trabajo.....	(4)
1.2.- Sección transversal total.....	(8)

### Capítulo 2

2.- Procesos físicos.....	(12)
2.1.- Procesos de transferencia de carga.....	(12)
2.2.- Modelos de transferencia de carga.....	(13)
2.2.1.- Modelo de Rapp-Francis.....	(13)
2.2.1.1.- Procesos resonantes asimétricos.....	(15)

### Capítulo 3

3.- Aparato experimental.....	(30)
3.1.- Fuente de iones.....	(32)
3.2.- Sistema de enfoque, aceleración y selección de iones.....	(33)
3.2.1.- Lentes Einzel.....	(33)
3.2.2.- Filtro de velocidades.....	(35)
3.3.- Celda de reacción.....	(41)
3.4.- Sistema de detección.....	(42)
3.4.1.- Caja de Faraday.....	(43)
3.4.2.- Analizador parabólico.....	(45)
3.4.3.- Multiplicador de electrones.....	(46)
3.5.- Sistema de vacío.....	(47)
3.6.- Distribuciones angulares.....	(49)
3.7.- Desarrollo experimental.....	(49)
3.8.- Cantidades directamente medibles y cálculos de las secciones totales.....	(52)
3.9.- Incertidumbres de las variables del experimento.....	(55)

## Capítulo 4

4.- Resultados y discusión.....	(58)
4.1.- Resultados experimentales.....	(58)
4.2.- Sección transversal diferencial.....	(58)
4.3.- Secciones transversales totales.....	(61)
4.3.1.- Sistema $N^+ + Ne$ .....	(61)
4.3.2.- Sistema $N^+ + Kr$ .....	(64)
4.3.3.- Sistema $N^+ + Xe$ .....	(67)
 Conclusiones.....	 (70)
Referencias.....	(72)

## INTRODUCCIÓN

Desde comienzos del siglo pasado cuando se comenzó a estudiar a los átomos y sus efectos al colisionar con otros átomos y moléculas, surgieron un sin número de interrogantes que en ese momento la teoría no era capaz de explicar; conforme la tecnología fue avanzando los resultados experimentales fueron contestando una a una estas dudas. Al mismo tiempo se fueron desarrollando teorías nuevas que en conjunto formaron a la Mecánica Cuántica, que ayuda a interpretar una gran cantidad de problemas, entre los que se encuentran algunos de los que ocurren precisamente en el tema de estudio de este trabajo; colisiones entre partículas que pueden ser neutras o ionizadas con átomos, moléculas ó electrones. Pero aún así, teóricamente es bastante difícil explicar lo que sucede en algunas reacciones, ya que en las colisiones entre iones con átomos o moléculas, las interacciones pueden provocar, por ejemplo, excitación, disociación, ionización e intercambio de carga entre las partículas; cada uno de estos fenómenos compiten entre sí simultáneamente, de tal manera que puede haber diferentes canales para una misma reacción.

En este trabajo nos ocuparemos del intercambio de carga del ion  $N^+$  con  $Ne$ ,  $Kr$  y  $Xe$ , sin tomar en cuenta la excitación del proyectil ni del blanco. Por lo tanto, lo que experimentalmente se hace es: se identifica un proceso determinado y se aísla, para luego compararlo con algún modelo de manera que sea posible interpretarlo. Una de las principales razones para llevar a cabo estos estudios es que a través de medidas experimentales confiables tales como las secciones diferenciales y totales de captura electrónica se podrán hacer modelos teóricos más reales de los fenómenos que ocurren, y lograr una mejor comprensión del mundo físico y un desarrollo de una teoría cuántica cuyas aplicaciones sean muy variadas. Cabe decir que uno de los motivos que nos llevó a escoger el ion  $N^+$  como proyectil es que se puede aproximar a un sistema de dos electrones, además de contribuir con resultados aplicables a sistemas atómico sencillos de varios electrones.

## INTRODUCCIÓN

Actualmente este tipo de colisiones son fundamentales por sus aplicaciones no sólo en la física básica [1,2,3], sino también en la biofísica [4], la química [5], la astronomía e ingeniería [6].

Dentro de esta última, por ejemplo, una de las principales aplicaciones de los procesos de intercambio de carga esta encaminado a resolver el problema del calentamiento de un plasma para la obtención de energía por fusión nuclear.

En este trabajo se estudia la captura electrónica del ion  $N^+$  en  $Ne$ ,  $Kr$  y  $Xe$ , en un intervalo de energía de 1.0 a 5.0 keV y los objetivos son:

- 1) Medir las secciones eficaces totales debidas al impacto de iones positivos de  $N$  en  $Ne$ ,  $Kr$  y  $Xe$ .
- 2) Investigar los procesos que conducen a la formación de átomos de Nitrógeno en un intervalo de energía de 1.0 a 5.0 keV.
- 3) Comparar los resultados experimentales con los valores obtenidos mediante la aplicación de modelos semiempíricos.

# CAPÍTULO 1

## Antecedentes

En este capítulo se resumen trabajos acerca del proceso de captura electrónica entre iones de  $N^+$  en  $Ne$ ,  $Kr$ , y  $Xe$  a diferentes intervalos de energía. Estos trabajos han sido realizados por diferentes grupos de investigación. También se explica el concepto de sección transversal total; cantidad física importante para el desarrollo de éste trabajo, así como la importancia de la realización de este estudio y su contribución a la comunidad científica.

## 1.- ANTECEDENTES

### 1.1 IMPORTANCIA DEL TRABAJO

El estudio de los procesos atómicos y moleculares han jugado un papel importante en la historia de la física. El desarrollo de la electrodinámica cuántica indica la importancia de medidas precisas de parámetros atómicos [7,8] como lo son las secciones transversales. El descubrimiento del láser y la subsecuente aplicación de los principios físicos fundamentales a la producción de radiación óptica trajo una revitalización de la espectroscopía [9] y el estudio de la interacción entre iones y átomos. Asimismo, el entendimiento de las reacciones ion-átomo también tiene gran importancia en algunos proyectos de láser [10,11], los cuales son importantes por su aplicación en la investigación científica [12] y la industria [13].

Otras áreas del conocimiento en las que estos estudios tienen impacto es la física atmosférica [14, 15], la astrofísica [16, 17, 18], la física de plasmas [19, 20] y recientemente la medicina (Radioterapia e investigaciones en radiación) [21].

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

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

Conforme las computadoras llegaron a ser de mayor rapidez y capacidad, se observó que los cálculos teóricos fueron más aproximados. Los experimentos realizados en numerosas disciplinas pueden también proveer comparaciones cuantitativas con predicciones teóricas. Existe, por lo tanto, un propósito mutuo para realizar medidas precisas de procesos atómicos.

Las secciones transversales son de importancia práctica y de la comparación de sus resultados con la teoría, se obtiene un entendimiento más completo de sistemas atómicos.

El proceso de intercambio de carga fue descubierto por Henderson [22] en 1903 durante una serie de experimentos, en los cuales un haz de partículas alfa se hizo incidir sobre pantallas de mica. A la salida de las partículas se observaron iones simplemente cargados y átomos neutros de *He*, los cuales se atribuyeron a la captura electrónica por parte de las partículas alfa, pero fue hasta la década de 1950 que se empezaron a realizar medidas sistemáticas de las secciones totales en un amplio intervalo de energías y utilizando diferentes haces de proyectiles y blancos. La mayor parte de los trabajos utilizan  $H^+$  y  $He^+$  como proyectil en diferentes blancos. Sin embargo, uno de los pioneros en realizar medidas de secciones transversales de captura electrónica con gases raros fue Hasted [23] en 1951 quien midió la sección de intercambio de carga de iones de  $Ar^+$ ,  $He^+$ ,  $O^+$ ,  $H^+$  y  $C^+$  en un intervalo de energía de 25 a 900 eV. Dos años después Zeigler [24] midió esta sección de intercambio de carga a una energía de 1 eV para la reacción  $Ar^+$  en *Ar* y encontró un valor de  $54.76 \text{ \AA}^2$ . En 1954 Fedorenko [25] midió la sección de intercambio de carga de 5 a 30 keV utilizando como partícula incidente al  $Ar^+$  y como blanco a átomos de *Ar* y *Kr*, obteniendo valores de entre 0.2 y  $19.0 \text{ \AA}^2$ .

En un intento por conocer el mecanismo de intercambio de carga en las colisiones de iones con átomos, el presente experimento fue encaminado a medir la sección transversal de captura en la colisión de  $N^+$  con  $Ne$ ,  $Kr$  y  $Xe$ . Los resultados del presente experimento serán comparados con los valores obtenidos mediante la aplicación de modelos semiempíricos.

Considerando al  $N^+$  como partícula incidente, la historia reportada a la fecha no ha sido tan productiva, pero no por ello es menos importante. En 1966 L. I. Pivovarov, M. T. Novikov y A. S. Dolgov [26] reportan un trabajo en donde miden las secciones transversales diferenciales y totales del proceso de captura y pérdida electrónica de  $N^+$ , y  $Ar^+$  al colisionar con blancos de  $Ne$ ,  $Kr$ , y  $Xe$  a intervalos angulares entre  $1-2^\circ$  y entre  $1-3^\circ$  a energías de incidencia de entre 250 y 1800 keV.

Posteriormente H. H. Lo y W. L. Fite [27] en 1970, reportan una recopilación de datos experimentales de procesos atómicos de captura y pérdida electrónica de varios iones incidentes con blancos tanto gaseosos como metálicos, en donde se incluye al  $N^+$  como ion incidente y al nitrógeno, neón, argón como blanco, en un intervalo de energía de 30 eV hasta 40 MeV.

M. Vujovic, M. Matic, B. Cobic y P. Hvelplund [28] realizan un estudio experimental en donde hacen colisionar iones de  $N^+$  en gases inertes en un intervalo de energía de 2-30 keV para el estado base y de 5-20 keV para estados metaestables del ion. Este trabajo es reportado en 1977, en donde los blancos utilizados fueron  $Ne$ ,  $Ar$ ,  $Kr$ , y  $Xe$ , midiendo la sección de captura y pérdida electrónica de estos sistemas.

Después de varios años, en 1980 nuevamente M. Matic, V. Sidis, M. Vujovic y B. Cobic [29] estudian la interacción entre el  $N^+$  y gases inertes, en esta ocasión hacen un análisis tanto teórico como experimental para el proceso de captura y pérdida electrónica, encontrando un buen acuerdo entre la teoría y el experimento.

Como se puede ver, existen pocos trabajos reportados sobre este sistema atómico, y menos aún en el intervalo de energía del presente trabajo, por lo cual es relevante realizar estas medidas experimentales.

Durante el análisis de los resultados, en particular del sistema  $N^+ + Ne$ , se verá que los datos reportados en el proceso de captura electrónica contribuyen a corroborar lo medido por Vujovic *et al* [28], acerca del comportamiento de la sección transversal total, con lo que se realiza una interesante contribución al entendimiento de estos procesos.

Autor	Año	Ion	Blanco	Intervalo de Energía	Medida realizada
Pivovar <i>et al</i>	1966	$N^+$	<i>Ne, Ar, Kr, Xe</i>	250-1800 keV	$\frac{d\sigma_{10}}{d\Omega}, \sigma_{10}$
H. H. Lo y W. L. Fite	1970	$N^+$	Gases raros	30 eV a 4 MeV	$\sigma_{10}$
M. Vujovic <i>et al</i>	1977	$N^+$	Gases raros	2-30 keV	$\sigma_{10}$
M. Matic <i>et al</i> (teórico)	1980	$N^+$	Gases raros	2-30 keV	$\sigma_{10}$

Tabla 1.1 Resumen de trabajos considerando al  $N^+$  como ion incidente.

## 1.2.- SECCIÓN TRANSVERSAL TOTAL

Clásicamente, la sección transversal total, es el área que ofrece el gas blanco al haz incidente para la colisión. Puesto que el objetivo de este trabajo es medir las secciones transversales de captura electrónica en la interacción de  $N^+$  con  $Ne$ ,  $Kr$  y  $Xe$  se discutirá en términos generales el concepto de sección transversal.

El camino libre medio define la distancia que recorrerá la partícula dentro del aparato experimental, sin perder sus condiciones iniciales, esta cantidad está dada por  $L = \frac{1}{\eta\pi D^2}$ ; donde  $\pi D^2$  mide el área de la sección plana que una molécula ofrece como blanco a otra molécula. Esta área se llama sección transversal geométrica y se representa generalmente mediante la letra  $\sigma$ . La fórmula anterior da la relación existente entre esta sección transversal y el camino libre medio, donde hay  $\eta$  moléculas por centímetro cúbico:  $L = \frac{1}{\eta\sigma}$ .

Sea un haz de partículas  $A$ , monocinéticas, con velocidad  $v_A$ . Si  $n_A$  es el número de estas partículas por  $\text{cm}^3$ , la densidad de corriente del haz:  $J_A = n_A v_A$  representa el número de partículas  $A$  que pasan a través de la unidad de área de una superficie perpendicular a  $v_A$ , por segundo. Estas partículas se dirigen hacia un blanco constituido por una superficie  $B$ , de una masa muy superior a la de una partícula  $A$  de tal manera que se puede despreciar el retroceso de  $B$  en cada colisión. Sólo las partículas  $A$  serán desviadas después de la colisión con  $B$ , la partícula  $B$  está en reposo en el sistema del laboratorio.

Sea  $dN(\theta, \phi)$  el número de partículas que son desviadas, por segundo, hacia un ángulo  $d\Omega$  definido por los ángulos polares  $\theta$  y  $\phi$ , figura 1.1.

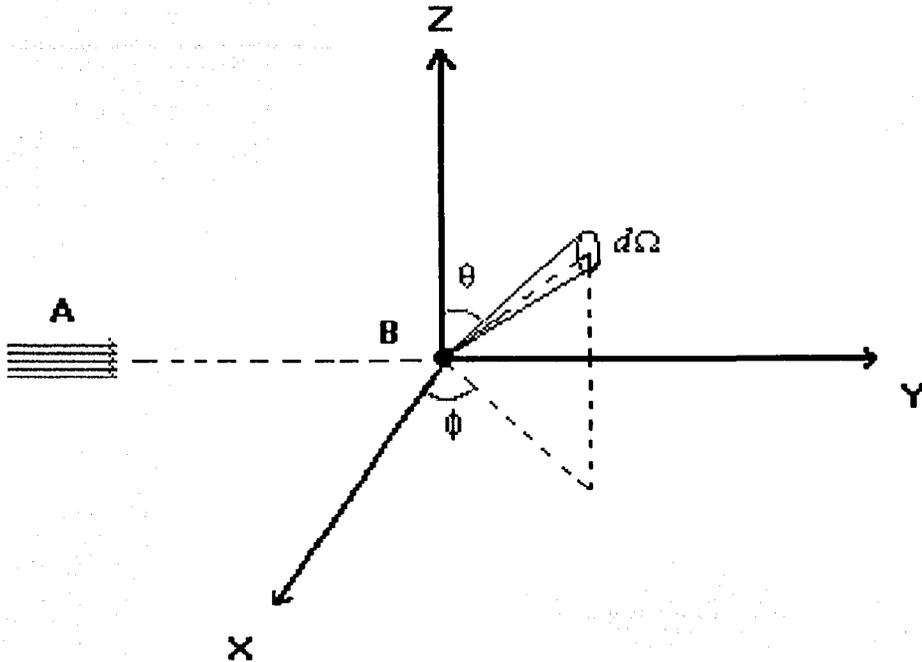


FIGURA 1.1 Dispersión de partículas

La sección transversal diferencial  $\frac{d\sigma_{AB}}{d\Omega}$  está definida por la relación

$$\frac{dN(\theta, \phi)}{d\Omega} = J_A \frac{d\sigma_{AB}}{d\Omega} \quad (1.1)$$

La sección transversal total es la suma, en todas las direcciones del espacio, de la sección transversal diferencial y está dada por la siguiente ecuación

$$\sigma_{AB} = \int \frac{d\sigma_{AB}(\theta, \phi)}{d\Omega} d\Omega = \int d\phi \frac{d\sigma_{AB}(\theta, \phi)}{d\Omega} \sin(\theta) d\theta \quad (1.2)$$

Experimentalmente se mide la sección transversal diferencial absoluta a un gas blanco que tiene  $n_B$  partículas  $B$  por  $\text{cm}^3$ , sobre el cual se dirige un haz de partículas  $A$ . En este caso el número de colisiones entre partículas  $A$  y  $B$ , por segundo y por  $\text{cm}^3$ , será

$$N = n_B |J_A| \sigma_{AB} = n_A n_B |v_A| \sigma_{AB} \quad (1.3)$$

Si la densidad del blanco es lo suficientemente baja como para que una partícula  $A$  choque con una partícula  $B$  y se desvíe, entonces el número de partículas  $A$  que son desviadas es igual al número de colisiones experimentales en el blanco.

## CAPÍTULO 2

### Procesos físicos

En este capítulo se describe el modelo para explicar los procesos físicos involucrados en las colisiones. El proceso atómico que se estudia experimentalmente en este trabajo se explica teóricamente utilizando el Modelo de Rapp-Francis, para sistemas resonantes, esto con el propósito comparar la teoría con el experimento.

## 2.- PROCESOS FÍSICOS

### 2.1.- PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE CARGA

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

Si se denota por  $i$  y  $j$  al estado de carga de las partículas antes y después de ocurrir el proceso de intercambio de carga, se tiene



Donde  $\Delta E$  es la diferencia entre la afinidad electrónica de  $A$  y el potencial de ionización de  $B$ . Los procesos se pueden agrupar dependiendo del número de electrones transferidos, como:

Captura Electrónica



Captura Electrónica Doble



Pérdida Electrónica



Cuando en el intercambio de carga ocurre que  $\Delta E = 0$ , se dice el proceso es resonante. El proceso de captura electrónica es el tema de estudio de este trabajo, y se puede dividir en los siguientes procesos:

Proceso resonante simétrico



Proceso resonante asimétrico



## 2.2.- MODELO DE TRANSFERENCIA DE CARGA

### 2.2.1.- MODELO DE RAPP Y FRANCIS PARA PROCESOS DE INTERCAMBIO DE CARGA ENTRE IONES Y ÁTOMOS

El modelo desarrollado por Rapp y Francis [30], analiza el intercambio de carga entre iones y átomos para el proceso resonante.

Hay varios modelos que explican este proceso [30, 31, 32], pero en general sólo se han podido hacer cálculos cuantitativos de mecánica ondulatoria fundamental para sistemas en colisiones relativamente simples, tales como  $H^+ + H$  y  $He^+ + He$ ; los cálculos se complican mientras más complejos son los reactivos, por esta razón es muy importante desarrollar métodos de aproximación para la estimación de las secciones transversales [33,34], por lo cual Rapp y Francis [30], demuestran, usando un modelo de dos estados, que las secciones transversales de procesos de transferencia de carga resonante simétrica se pueden calcular en un amplio intervalo de velocidades del ion incidente conociendo sólo el potencial de ionización  $P_i$ . En el caso del proceso (2.6),

la situación es distinta ya que la teoría existente es limitada y por el tipo de ecuaciones diferenciales que es necesario resolver, se deben hacer muchas suposiciones para facilitar los cálculos.

Para calcular las secciones totales de intercambio de carga correspondientes a los procesos (2.5) y (2.6) hay tres métodos generales. El primero es el Método de Dispersión de Ondas, puramente cuántico [35] es muy riguroso y formal. El segundo es el Método del Parámetro de Impacto [30]; es un método semi-clásico, en él se supone que el movimiento relativo de las partículas que colisionan es regido por las leyes de la mecánica clásica y se aplica la teoría cuántica de perturbaciones para determinar la probabilidad de transición electrónica de un estado a otro. por último, existen también métodos puramente clásicos como el Método de Grizinsky [36]. La elección del método a usar está en función de las características del proceso que se pretende estudiar, por ejemplo, la velocidad del ion incidente y la complejidad de las ecuaciones a resolver. El método más conveniente para estudiar los procesos (2.5) y (2.6) a velocidades relativas de acercamiento "altas" es el método de dispersión de ondas [35]. Una complicación que hay en este intervalo de velocidades, es que no se puede usar la aproximación de Born-Oppenheimer debido a que la velocidad relativa de acercamiento es comparable con la velocidad de los electrones en los átomos. A velocidades "intermedias", el método que se usa frecuentemente es el del parámetro de impacto [37], ya que en este intervalo las colisiones involucran parámetros de impacto relativamente grandes y esto simplifica los cálculos. En este intervalo de velocidades también se puede aplicar el método de dispersión de ondas y es posible demostrar la equivalencia entre ambos métodos [35]. A velocidades "bajas" puede emplearse cualquier método semi-clásico siempre y cuando se tome en cuenta que las trayectorias ya no se pueden considerar rectilíneas.

Se consideran velocidades intermedias a las que están en el intervalo

$$\left( \frac{10^5}{\mu^{1/2}} \right) \frac{cm}{s} \leq v \leq 10^8 \frac{cm}{s}$$

Donde  $\mu$  es la masa reducida del par que colisiona, expresada en *uma* y  $v$  la velocidad del haz incidente, la velocidad promedio de las partículas en el experimento es  $v = 1.968 \times 10^7$  cm/s. Se consideran velocidades altas a las que son mayores que  $10^8$  cm/s. Velocidades bajas a las menores que  $(10^5/\mu^{1/2})$  cm/s.

Rapp y Francis estudian los procesos (2.5) y (2.6) en el intervalo de velocidades intermedias [30]. Las masas reducidas de los pares que colisionan son las siguientes

$$\mu_{N-Ne} = 8.267951 \text{ uma}$$

$$\mu_{N-Kr} = 12.00086 \text{ uma}$$

$$\mu_{N-Xe} = 12.65648 \text{ uma}$$

### 2.2.1.1.- PROCESOS RESONANTES ASIMÉTRICOS

Para encontrar la sección transversal de transferencia de carga en los procesos resonantes asimétricos se utiliza un método semi-clásico en el intervalo de velocidades intermedias usando una aproximación de dos estados, el inicial antes de la colisión y el final después de la colisión [38, 39, 40].

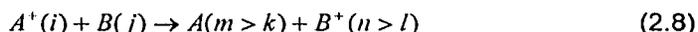
Sin embargo la teoría no es completa y se requieren más consideraciones antes de suponer un cálculo cuantitativo, aquí se consideran tres aspectos básicos de la teoría de transferencia de carga asimétrica; consideraciones estadísticas, la aproximación de la función de onda total de los orbitales atómicos en términos de orbitales moleculares y la relación de la teoría con los requerimientos del Principio de Balance Detallado, el cual relaciona las secciones

transversales del proceso directo e inverso de la reacción, situación que no se presenta en el caso de transferencia de carga simétrica [41].

La reacción resonante entre dos estados electrónicos particulares puede escribirse como



Donde  $i$ ,  $j$ ,  $k$  y  $l$  representan los estados base de los iones y átomos respectivamente. El lado derecho y el izquierdo de la ecuación (2.7) representan dos estados asintóticos diferentes de la molécula  $AB^+$  y la transferencia de carga ocurre cuando hay una transición electrónica de un estado a otro. Puesto que las colisiones de transferencia de carga en la región de velocidades intermedias involucran parámetros de impacto relativamente grandes se puede suponer que el espín y el momento angular se conservan en la reacción. Así sólo se consideran transiciones entre estados de  $AB^+$  de simetría idéntica que tengan a  $(A^+ + B)$  y  $(A + B^+)$  como formas asintóticas. Con ello se supone que se desprecian aquellas reacciones análogas a la ecuación (2.7), pero con productos en estados excitados, tales como

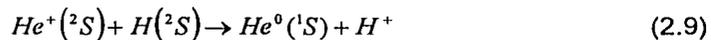


Se entiende por una aproximación de dos estados cuando un nivel de energía de  $\{A(m) + B^+(n)\}$  se encuentra por "encima del nivel"  $\{A(k) + B^+(l)\}$  de tal manera que se espera que los estados de  $AB^+$ , para los cuales ellos son asintóticos se encuentren lo suficientemente distantes en energía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

Cuando colisionan  $A^+(i) + B(j)$  se forman varios estados de  $AB^+$ . La probabilidad de que se forme un estado es proporcional a su peso estadístico. Sólo aquellos estados de simetría idéntica con  $\{A(k) + B^+(l)\}$  pueden producir transferencia de carga de acuerdo con la reacción (2.7), así por consideraciones de simetría esta reacción esta prohibida para una cierta fracción de colisiones. Denotamos por  $f$ , el factor de peso estadístico, a la fracción de colisiones que

producen estados  $AB^+$ , los cuales permiten la transferencia de carga. Así la razón  $\frac{f_1}{f_2}$  para la reacción directa e inversa, respectivamente, en la ecuación (2.7)

es el factor pre-exponencial de la constante de equilibrio de las reacciones. <sup>I</sup> En general, cuando se comparan secciones transversales teóricas con mediciones experimentales, las secciones transversales calculadas bajo una aproximación de dos estados se deben multiplicar por  $f$  antes de ser comparadas con las experimentales. Un ejemplo de una aplicación de estos principios de simetría está dada por las reacciones de transferencia de carga de  $N^+$  y  $O^+$  con  $H$  [33]. Un ejemplo más simple lo constituyen las reacciones



En el que se tienen dos estados de  $HeH^+$ , los cuales se van asintóticamente a  $\{He^+(^2S) + H(^2S)\}$  con simetrías  $^3\Sigma$  y  $^1\Sigma$  y un estado  $^1\Sigma$  que se va a  $\{He^0(^1S) + H^+\}$ . Si ahora se considera la reacción inversa, la colisión entre  $He^0(^1S)$  y  $H^+$  sólo puede producir un estado transitorio de  $HeH^+$  y por lo tanto la transferencia de carga sólo ocurre en el estado  $^1\Sigma$ , de  $HeH^+$ , el cual se va asintóticamente a  $\{He^+(^2S) + H(^2S)\}$ . Sin embargo el factor estadístico  $f_2$  para la reacción inversa es igual a uno, porque todas las colisiones producen reacción. En la reacción directa, un 25% de las colisiones entre  $He^+(^2S)$  y  $H(^2S)$  produce estados  $^1\Sigma$  lo que produce transferencia de carga, mientras que el 75% de las colisiones producen estados  $^3\Sigma$  que no producen transferencia de carga. Así  $f_1$  para la reacción directa es  $\frac{1}{4}$ .

(1) La constante de equilibrio para la reacción (2.7) es  $\left(\frac{f_1}{f_2}\right) \exp\left(-\frac{\Delta E}{RT}\right)$ , en donde en términos más usuales  $\left(\frac{f_1}{f_2}\right) = \left(\frac{g_A g_B^+}{g_A^+ g_B}\right)$  y las  $g$ 's son los pesos estadísticos de los átomos.

Bates y Lynn [42] sugieren que hay dos formas de realizar una "aproximación de dos estados", involucrando para la función de onda total un desarrollo en términos de orbitales atómicos o bien orbitales moleculares. En cada caso el desarrollo mantiene dos términos correspondientes a reactivos y productos, respectivamente. Los correspondientes coeficientes dependientes del tiempo determinan la probabilidad de encontrar al sistema en cada estado. Puesto que el proceso comienza con los reactivos, las condiciones iniciales son que un coeficiente valga uno y el otro cero en  $t = -\infty$ , antes de la colisión, es decir

$$C_i(-\infty) = 1$$

$$C_f(-\infty) = 0$$

Así, el problema es calcular de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, los coeficientes para después de la colisión, en  $t = +\infty$ . Para el caso de transferencia de carga resonante simétrica también se realizan desarrollos similares. La diferencia entre ambos procesos de transferencia de carga es la conexión entre las aproximaciones realizadas por funciones atómicas y moleculares; en el caso resonante simétrico se puede demostrar [31, 33, 43], que el uso de funciones de onda moleculares da una probabilidad de transferencia de carga dada por la ecuación

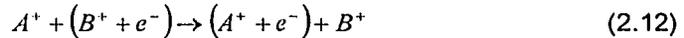
$$P(b, \nu) = \text{sen}^2 \int_0^{\infty} \frac{1}{2\hbar\nu} (E_a - E_s) dx \quad (2.10)$$

(el significado de  $b$  y  $\nu$  se discutirá más adelante) mientras que los orbitales atómicos dan el mismo resultado con  $(E_a - E_s)$  dado por la aproximación LCAO (Linear Combination of Atomical Orbitals). En el caso de transferencia de carga asimétrica la conexión entre las aproximaciones de orbitales moleculares y atómicos no es tan fácil de obtener.

La aproximación que se hace, consiste en escribir la función de onda total del sistema como una combinación lineal de orbitales moleculares  $\phi_A(R)$  y  $\phi_B(R)$  de la cuasi-molécula  $AB^+$  formados en la colisión del ion  $A^+$  en el blanco  $B$

$$\psi = C_A(t)\phi_A^{(AB^+)}(R)\exp\left[\frac{-iE_A^{(AB^+)}(R)t}{\hbar}\right] + C_B(t)\phi_B^{(AB^+)}(R)\exp\left[\frac{-iE_B^{(AB^+)}(R)t}{\hbar}\right] \quad (2.11)$$

Con  $\phi_i^{(AB^+)}(R)$  el orbital molecular de  $AB^+$  que tiende a  $\phi_i$  en  $R \rightarrow \infty$  y  $E_i^{(AB^+)}(R)$  la energía de este estado la cual tiende a  $\epsilon_i$ . Puesto que la ecuación (2.11) lleva a ecuaciones diferenciales difíciles de resolver, Gurnee y Magee [38] utilizan la aproximación de orden cero reemplazando la función de onda molecular y la energía, por orbitales y energías atómicas. Esta aproximación es razonable a separaciones internucleares grandes. Así la ecuación (2.7) del proceso de transferencia de carga asimétrica se escribe como



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

$$\psi = C_A(t)\phi_A(r_A)\exp(-i\omega_A t) + C_B(t)\phi_B(r_B)\exp(-i\omega_B t) \quad (2.13)$$

En donde las  $C$ 's son los coeficientes del desarrollo dependientes del tiempo;  $\phi_A$  y  $\phi_B$  son los orbitales atómicos para el electrón en el núcleo  $A^+$  y  $B^+$ ;  $r_A$ , y  $r_B$ , son los vectores de posición del electrón a  $A^+$  y  $B^+$ , respectivamente;  $\omega = \frac{\epsilon}{\hbar}$ ,  $\epsilon_A$  y  $\epsilon_B$  son las energías de  $A$  y  $B$  (potenciales de ionización) en los estados  $\phi_A$  y  $\phi_B$  respectivamente. Estos estados son

$$\left[ \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \right) \nabla^2 + V_j(r_j) \right] \phi_j = \varepsilon_j \phi_j \quad (2.14)$$

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

$$\left[ \left( \frac{-\hbar^2}{2m_e} \right) \nabla^2 + V_A(r_A) + V_B(r_B) \right] \psi = i\hbar \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \quad (2.15)$$

Si se toma el sistema de coordenadas de la figura 2.1, entonces la trayectoria clásica  $x=vt$  relaciona el movimiento relativo de  $A^+$  y  $B^+$  y por lo tanto para algún valor de  $x$ ,  $x = (R^2 - b^2)^{\frac{1}{2}}$ ,  $r_A$  y  $r_B$  no son independientes.

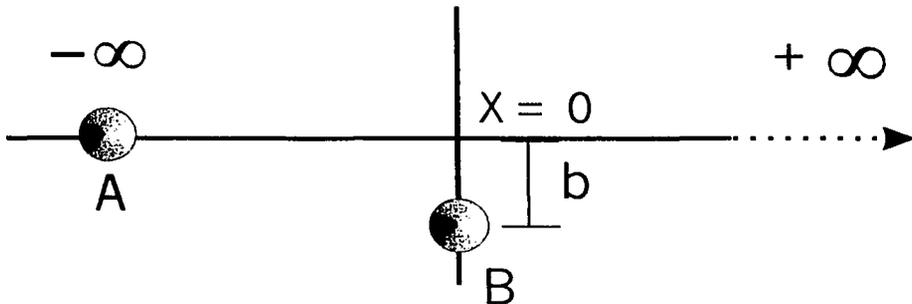


FIGURA 2.1 Parámetro de impacto

Sustituyendo la función  $\psi$ , ecuación (2.13) en la ecuación (2.15) se obtienen dos ecuaciones, una para  $C_A$  y otra para  $C_B$ , durante la colisión bajo la presencia de la perturbación  $V_A$ . (suponiendo que el electrón se encontraba inicialmente en  $B^+$ ). Cuando esta ecuación se multiplica alternativamente por los orbitales atómicos,  $\phi_A$  y  $\phi_B$ , y se integra sobre todo el espacio, se obtienen dos

ecuaciones diferenciales acopladas para los coeficientes  $C_A$  y  $C_B$ , con respecto al tiempo

$$\left[ \frac{(V_B)_{AA}}{\hbar} \right] C_A + \left[ \frac{(V_A)_{AB}}{\hbar} \right] \exp(-i\omega t) C_B = i \left[ \dot{C}_A + F \exp(-i\omega t) \dot{C}_B \right] \quad (2.16)$$

$$\left[ \frac{(V_B)_{BA}}{\hbar} \right] \exp(i\omega t) C_A + \left[ \frac{(V_A)_{BB}}{\hbar} \right] C_B = i \left[ F \exp(-i\omega t) \dot{C}_A + \dot{C}_B \right] \quad (2.17)$$

Con  $\omega = \omega_B - \omega_A$ , y las integrales son definidas como

$$(V_j)_{mn} = \int \phi_m V_j(r_j) \phi_n d\tau \quad (2.18)$$

$$F = \int \phi_A \phi_B d\tau \quad (2.19)$$

En donde las integrales son funciones únicamente de  $R$  (la separación internuclear entre  $A^+$  y  $B^+$ ), y del tiempo  $t$  (que dependen de la trayectoria clásica de la colisión). Puesto que las probabilidades de localizar el electrón en el núcleo  $A^+$  y  $B^+$  son  $|C_A(-\infty)|^2$  y  $|C_B(-\infty)|^2$ , respectivamente, entonces las condiciones iniciales son

$$C_A(-\infty) = 0 \quad (2.20)$$

$$C_B(-\infty) = 1 \quad (2.21)$$

Las cuales localizan al electrón en el núcleo  $B^+$  antes de la colisión. La probabilidad de encontrar al electrón en el núcleo  $A^+$  después de la colisión es  $|C_A(+\infty)|^2$ .

Denotando a  $P(b, v)$  como la probabilidad de que ocurra la transferencia de carga, para un parámetro de impacto  $b$  y una velocidad  $v$  ( se ejemplifica la colisión en la Figura 2. 1), entonces la sección transversal está dada por

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^{\infty} P(b, v) b db \quad (2.22)$$

En el caso del proceso de transferencia de carga resonante asimétrico la probabilidad de transferencia de carga  $P(b, v)$  es la probabilidad multiplicada por el factor de peso estadístico  $f$ . Así las ecuaciones (2.16) y (2.17) se reducen a

$$i\dot{C}_B = \eta_1(t)C_B + K_1(t)\exp(i\omega t)C_A \quad (2.23)$$

$$i\dot{C}_A = \eta_2(t)C_A + K_2(t)\exp(i\omega t)C_B \quad (2.24)$$

Donde las  $K$ 's y las  $\eta$ 's son agrupaciones de las integrales de perturbación divididas por  $\hbar$

$$K_1 = \left[ \frac{(V_B)_{BA} - F(V_B)_{AA}}{(1 - F^2)\hbar} \right] \quad (2.25)$$

$$K_2 = \left[ \frac{(V_A)_{AB} - F(V_A)_{BB}}{(1 - F^2)\hbar} \right] \quad (2.26)$$

$$\eta_1 = \left[ \frac{(V_A)_{BB} - F(V_A)_{AB}}{(1 - F^2)\hbar} \right] \quad (2.27)$$

$$\eta_2 = \left[ \frac{(V_B)_{AA} - F(V_B)_{BA}}{(1 - F^2)\hbar} \right] \quad (2.28)$$

Definiendo los coeficientes  $C_A$  y  $C_B$  para cualquier  $t$  como

$$C_A = a_A \exp\left(-i \int_{-\infty}^t \eta_2 dt'\right) \quad (2.29)$$

$$C_B = a_B \exp\left(-i \int_{-\infty}^t \eta_1 dt'\right) \quad (2.30)$$

Entonces las ecuaciones (2.23) y (2.24) se reducen a

$$i \dot{a}_B = K_1(t) \exp(-i\Omega t) a_A \quad (2.31)$$

$$i \dot{a}_A = K_2(t) \exp(-i\Omega t) a_B \quad (2.32)$$

En donde

$$\Omega t = \omega t + \int_{-\infty}^t (\eta_1 - \eta_2) dt' \quad (2.33)$$

Puesto que  $|a_A|^2 = |C_A|^2$ , la probabilidad de transferencia de carga es  $f|a_A(+\infty)|^2$ .

La relación entre las cantidades  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $\Omega$  y las curvas de energía potencial de los estados moleculares  $AB^+$  (que son asintóticos a los reactivos y productos) es muy compleja. En procesos de transferencia de carga resonante simétrica con la aproximación por orbitales atómicos se obtienen ecuaciones de la forma (2.31) y (2.32), excepto que  $\omega = \eta_1 - \eta_2 = 0$  y  $K_1 = K_2 = (E_a - E_s)$  [33] y las ecuaciones se pueden resolver exactamente [38] para obtener la ecuación (2.10), con

$P(b, v) = |a_A(+\infty)|^2$  y  $t = \frac{x}{v}$ . En el caso de procesos asimétricos se requiere de

un análisis crítico para encontrar tan sólo alguna de tales relaciones. En este caso para nuestro propósito de cálculo de secciones transversales sólo es

necesario calcular las integrales  $K_1$ ,  $K_2$  y  $\Omega$  sin considerar su relación con las curvas de energía potencial.

Puesto que la ecuación (2.13) es válida para parámetros de impacto grandes, se usa la aproximación por orbitales atómicos para  $\Phi_A$  y  $\Phi_B$ , dados por la ecuación

$$\psi(r) = (\pi a_0^3) \left( \frac{P_I}{13.6} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left[ - \left( \frac{P_I}{13.6} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \right] \quad (2.34)$$

y se puede demostrar para el caso resonante que si  $\Phi_A = \Phi_B$ , se obtienen resultados que a  $\frac{R}{a_0}$  grandes, tales orbitales atómicos conducen a integrales del

tipo  $(V_I)_{jk}$  proporcionales a  $\exp\left(\frac{-2\gamma R}{a_0}\right)$  y  $F$  es proporcional a  $\exp\left(\frac{-\gamma R}{a_0}\right)$ . En el

caso no resonante el uso de la ecuación (2.34) para valores diferentes de  $P_I$  involucran un mayor número de integrales. Algunas suposiciones permiten concluir que  $K_2 \approx (V_A)_{AB}$ ,  $K_1 \approx (V_B)_{BA}$ , y  $K \gg \eta$ . No obstante  $K_1$  y  $K_2$  tienen un comportamiento similar al caso resonante. Se puede demostrar que el uso de orbitales atómicos en la ecuación (2.34) permite concluir que para procesos cuasi-resonantes en los cuales  $|\omega_1 - \omega_2| \ll (\omega_1, \omega_2)$ ,  $|\eta_1 - \eta_2|$  es pequeño. <sup>II</sup>

(II) El límite de  $\omega_1 = \omega_2$ , por esta suposición se obtiene  $\eta_1 - \eta_2 = 0$ . El uso de orbitales más realistas darían  $\eta_1 - \eta_2 \neq 0$  cuando  $A$  y  $B$  son diferentes e igualmente en  $\omega_1 = \omega_2$ . Este caso de " resonancia accidental " es muy importante en reacciones para las cuales  $\omega_1 - \omega_2 \ll 1$ .

En tal aproximación  $|\eta_1 - \eta_2| \ll \omega$  si  $\frac{R}{a_0} \gg 1$  y por lo tanto  $\Omega \approx \omega$ , lo que justifica la aproximación del presente cálculo [44]. Ya que el principio de balance detallado requiere que en la reacción (2.7) tanto  $P_1(b, \nu)$  para la reacción directa como  $P_2(b, \nu)$  para la reacción inversa para una  $b$  y  $\nu$  dadas estén relacionadas por

$$\frac{P_1(b, \nu)}{P_2(b, \nu)} = \frac{f_1}{f_2} \quad (2.35)$$

Además de que  $f_1$  y  $f_2$  entran en los cálculos debido a consideraciones estadísticas es decir,  $P_1(b, \nu) = f_1 |a_A(\infty)|^2$ , entonces se concluye que si iniciamos con  $\{A^+ + B\}$  (es decir,  $a_A(-\infty) = 0$ ,  $a_B(-\infty) = 1$ ), por lo tanto, para la transferencia de carga debe ser igual para el proceso inverso (es decir,  $a_A(-\infty) = 1$ ,  $a_B(-\infty) = 0$ ). Las ecuaciones (2.31) y (2.32) no satisfacen esta condición, a menos que  $K_1 = K_2$ .

En el presente tratamiento  $K_1 = K_2$  ya que  $(V_B)_{AB} - (V_A)_{BA} = (\varepsilon_A - \varepsilon_B)F$  [33], lo que muestra el hecho de que la ecuación (2.13) es una buena aproximación a la verdadera función de onda total. La elección particular que se tomó en la ecuación (2.13) no es adecuada para el caso no resonante ó  $(\varepsilon_A - \varepsilon_B)$  grandes.

Cuando la contribución del integrando de la ecuación (2.22) es relativamente pequeño para  $b$ 's pequeñas, la teoría es más adecuada y funciona mejor para  $\sigma$ 's grandes. Los cálculos se realizaron usando las ecuaciones (2.13), (2.31) y (2.32), considerando un valor de  $K$  promedio apropiado tanto para  $K_1$  como para  $K_2$ . En algunos cálculos el intervalo importante de  $b$  en la ecuación

(2.22) es tan pequeño que el presente tratamiento no lo explica estrictamente.

Sin embargo, en esta aproximación simple el comportamiento cualitativo importante esta de acuerdo con el experimento.

Retomando la discusión central y usando las ecuaciones modificadas

$$iv \frac{da_B}{dx} = \bar{k} \left( \frac{x}{v} \right) \exp \left( \frac{i\omega x}{v} \right) a_A \quad (2.36)$$

$$iv \frac{da_A}{dx} = \bar{k} \left( \frac{x}{v} \right) \exp \left( \frac{i\omega x}{v} \right) a_B \quad (2.37)$$

Donde  $\bar{k}$  es un promedio apropiado para  $K_1$  y  $K_2$ ,  $a_A(-\infty) = 0$ ,  $a_B(-\infty) = 1$  y  $P(b, v) = f |a_A(+\infty)|^2$ . Antes de intentar un cálculo cuantitativo, se puede discutir brevemente de manera cualitativa a las ecuaciones (2.36) y (2.37) y de ahí a  $P(b, v)$  y a  $\sigma$ .

La función  $\bar{k} \left( \frac{x}{v} \right)$  es una curva "bien comportada" con un máximo finito en  $x = 0$  y que se va exponencialmente a cero en  $x = \pm\infty$ , físicamente es la interacción que causa la transferencia de carga. Para valores pequeños de  $\left( \frac{\omega}{v} \right)$  los términos imaginarios de las exponenciales de las ecuaciones (2.36) y (2.37) permanecen constantes e iguales a uno en un amplio intervalo de  $x$  para el cual  $\bar{k}$  es apreciable.

(III) *Lo mejor de esta teoría sería tener la más pequeña de las no – resonancias y la más alta de las velocidades del ion.*

Bajo tal condición los términos exponenciales se pueden suponer iguales a uno y por lo tanto las ecuaciones (2.36) y (2.37) son iguales a las que obtienen en el caso de simetría resonante y la solución está dada por la ecuación (2.10) con  $(E_a - E_d)$  sustituida por  $\bar{k}$ .

Para una  $\omega$  dada y  $v$  muy grande,  $\frac{\omega x}{v} \ll 1$ , es pequeña y el comportamiento de  $\sigma(v)$  es similar al que se obtiene para transferencia de carga en simetría resonante con un potencial de ionización efectivo entre  $P_{IA}$  y  $P_{IB}$ .

En este intervalo de velocidad,  $\sigma$  se incrementa a medida que  $v$  decrece a causa de que se tiene mayor tiempo disponible en la colisión para que ocurra una transición y  $\frac{\omega x}{v} \ll 1$ , es lo bastante pequeño, y por lo tanto la transición se lleva a cabo más fácilmente en proporción a la interacción  $\bar{k}$ .

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

$$|a_A(\infty)|^2 \cong \left| \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{k} \left( \frac{x}{v} \right) \cos \left( \frac{\omega x}{v} \right) dx \right|^2 \quad (2.38)$$

Donde la  $\exp\left(\frac{-i\omega x}{v}\right)$  se ha reemplazado por  $\cos\left(\frac{\omega x}{v}\right)$  puesto que  $\bar{k}$  es una función par de  $x$ . La función  $\bar{k}$  tiene un ancho efectivo en  $x$  del orden de varias dimensiones atómicas (es decir, valores del radio de Bohr).

Suponiendo que "a" sea una dimensión que caracteriza el intervalo de  $\bar{k}$  en  $x$ , entonces como la velocidad del ion se reduce en el punto en donde  $\frac{\omega a}{v} \approx 1$ , entonces las oscilaciones de  $\cos\left(\frac{\omega x}{v}\right)$ , también se reducen severamente a pesar del factor pre-integral de  $\frac{1}{v}$  que actúa muy débilmente en la dirección opuesta. A bajas velocidades en donde  $\frac{\omega a}{v} \gg 1$ ,  $|a_1(\infty)|^2$  decae rápidamente conforme  $v$  decrece.

Así, entre estas velocidades extremas y a una velocidad cercana a donde puede ocurrir una oscilación entre  $x = -a$  y  $x = +a$  se obtiene la probabilidad máxima de transferencia de carga a un parámetro de impacto grande,  $b \gg 1$ . Esto determina la condición de que el valor máximo de la sección transversal se obtenga si se cumple

$$\frac{\omega a}{v} = \frac{a|\Delta E|}{\hbar v} \approx 1 \quad (2.39)$$

Por lo tanto, la Sección Total se puede expresar como [45]

$$\sigma^{1/2} = S_1 - S_2 \ln(E) \quad (2.40)$$

donde  $\sigma$  está expresada en  $\text{Å}^2$ ,  $E$  es la energía de los iones en keV y  $S_1$  y  $S_2$  son constantes, las cuales son determinadas principalmente por el potencial de ionización de los átomos involucrados en la colisión.

(IV) *Un análisis reciente de los datos disponibles en términos de esta conclusión ha dado un mejor valor de  $a$ , de aproximadamente 7Å.*

## CAPÍTULO 3

### Aparato experimental

En este capítulo se da una descripción del equipo experimental que se utilizó para la obtención de los datos experimentales. Se describen las partes principales del acelerador de partículas de baja energía. Se explica como se realizó el experimento, las variables físicas involucradas, así como las incertidumbres experimentales.

### 3.- APARATO EXPERIMENTAL

Los aceleradores de partículas son fundamentales en la investigación científica ya que permiten extraer información de la estructura atómica al hacer posible colisionar, a distintos intervalos de energía, partículas con átomos y moléculas. Esta información es importante tanto por su valor científico como por sus posibles aplicaciones tecnológicas.

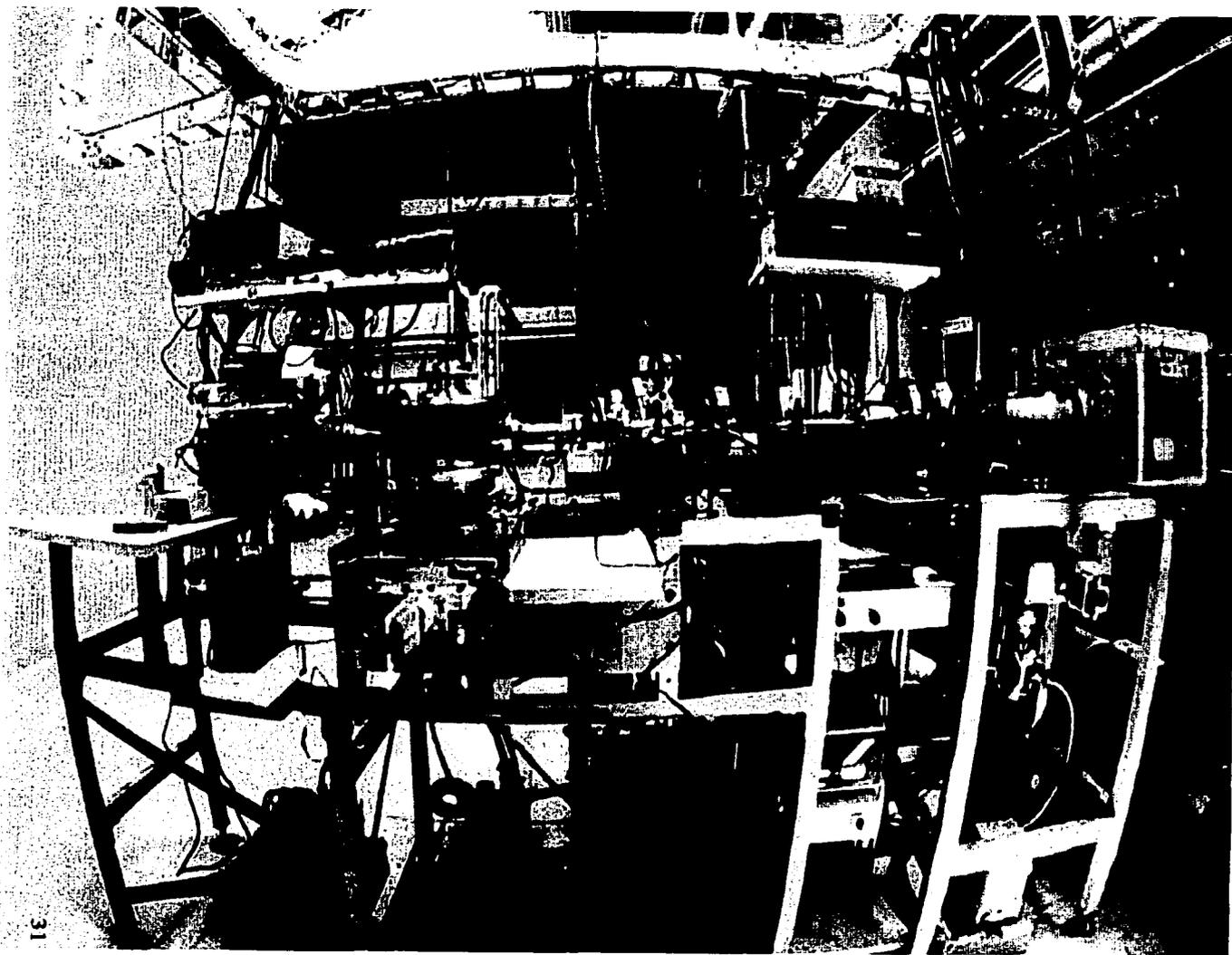
Para realizar el presente trabajo se utilizó como aparato experimental el acelerador de partículas de baja energía (1.0 – 5.0 keV) Figura 3.1, que se encuentra en el Laboratorio de Física Atómica y Molecular del Medio Ionizado del Centro de Ciencias Físicas en Cuernavaca, Morelos [46] de la Universidad Nacional Autónoma de México.

El acelerador esta formado principalmente por: la fuente de iones; el sistema de enfoque, aceleración y selección de iones; la cámara de reacción donde se encuentra la celda de reacción; y el sistema de detección formado por una caja de Faraday, un analizador parabólico y dos multiplicadores de electrones.

Se cuenta con un sistema de vacío que se compone de dos bombas mecánicas y dos turbo-moleculares, con el cual se alcanza una presión de vacío de  $10^{-7}$  Torr.

Para obtener los datos se midieron distribuciones angulares a partir de cantidades directamente medibles como lo son: la corriente del haz incidente, la presión del gas en la celda de reacción, el número de partículas dispersadas a un ángulo  $\theta$  y el ángulo sólido sustentado por el sistema del detector.

Enseguida se da una descripción de cada una de las partes mencionadas.



31

31

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

Figura 3.1 Sistema Experimental

### 3.1.- FUENTE DE IONES

El haz incidente de iones  $N^+$  se produce por medio de una fuente de descarga en arco [47] la cual se muestra en la figura 3.2. Las componentes principales de la fuente son

1.- CUERPO DE LA FUENTE: Es el recinto donde se admite el gas que se desea ionizar, cuya forma es un cilindro hueco. Está construida de Nitruro de Boro que es un material de poca resistencia a los esfuerzos mecánicos pero que tiene la ventaja de soportar altas temperaturas ( $2300^{\circ}\text{C}$ ), característica que permite obtener iones tanto de elementos gaseosos como sólidos.

2.- FILAMENTO: Se trata de un filamento de Tungsteno que se conecta a una fuente de corriente. Se hace pasar una corriente por el filamento provocando que éste se caliente. Así, por emisión termoiónica se producen los electrones necesarios para ionizar el gas contenido en el cuerpo de la fuente.

3.- ÁNODO: Una vez que el filamento ha producido electrones y que el gas a ionizar se encuentra dentro del cuerpo de la fuente, los electrones son acelerados aplicando una diferencia de potencial entre el filamento y el ánodo, tal que la energía que proporcione a los electrones sea suficiente para que estos ionicen a los átomos o moléculas del gas.

Para poder obtener el haz de iones  $N^+$  se admite dentro de la fuente de iones gas de Nitrógeno a una presión de  $120\ \mu\text{Hg}$ . Además, para que la ionización se lleve a cabo se aplica al filamento de la fuente una corriente de 18 Amp, con esto se obtiene una descarga continua hacia el ánodo de la fuente de 0.2 Amp. aproximadamente.

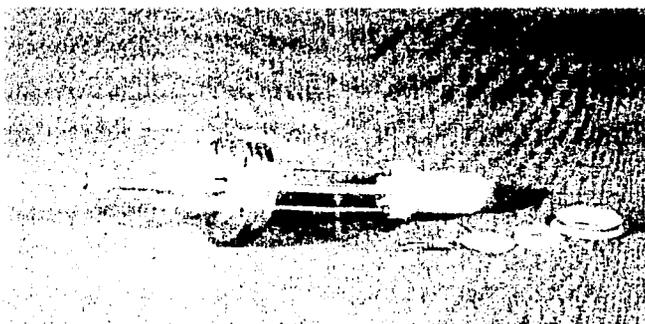


FIGURA 3.2 Fuente de iones

### 3.2.-SISTEMA DE ENFOQUE, ACELERACIÓN Y SELECCIÓN DE IONES

En la fuente de iones no solo se producen iones  $N^+$  de sino también otros iones, como  $N^{2+}$ . Todos los iones formados son acelerados y enfocados para luego ser seleccionados. Para este propósito se utilizan unas lentes electrostáticas, llamadas Lentes Einzel [41] que se utilizan para enfocar el haz de partículas y un filtro de velocidades en donde se selecciona a las partículas con las que se desea trabajar, conocido como Filtro de Wien [48].

#### 3.2.1.- LENTES EINZEL

Una lente óptica puede hacer que los rayos luminosos que inciden en ella se concentran en un mismo punto, de la misma manera una lente electrostática puede enfocar un haz de partículas. Así como existen lentes "delgadas y gruesas" en óptica, de igual manera se tienen lentes electrostáticas "delgadas y gruesas".

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Las lentes electrostáticas "delgadas" constan de dos planos conductores y paralelos sometidos a una diferencia de potencial que por medio de una abertura circular en el centro, curva las líneas equipotenciales.

Las lentes electrostáticas "gruesas" están hechas de secciones de cilindro conductor hueco. La ventaja con respecto a las lentes "delgadas" es que se puede modificar la distancia focal cambiando los potenciales de los electrodos, en vez de mover las lentes. En este trabajo se utilizan lentes electrostáticas gruesas y son conocidas como Lentes Einzel. Estas lentes constan de tres electrodos cilíndricos de igual diámetro alineados en un mismo eje, de tal manera que al aplicar el mismo potencial al primer y tercer electrodos, la energía de las partículas no se ve alterada. Estos dos electrodos se mantienen a un potencial a tierra. El electrodo intermedio puede tener un potencial menor o mayor que el de los otros dos, modifica la trayectoria del haz, para obtener únicamente un efecto de enfoque.

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

Las lentes Einzel y la electrónica asociada a estas lentes y a la fuente se muestran en las figuras 3.3 y 3.4 respectivamente.



FIGURA 3.3 Lentes Einzel

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

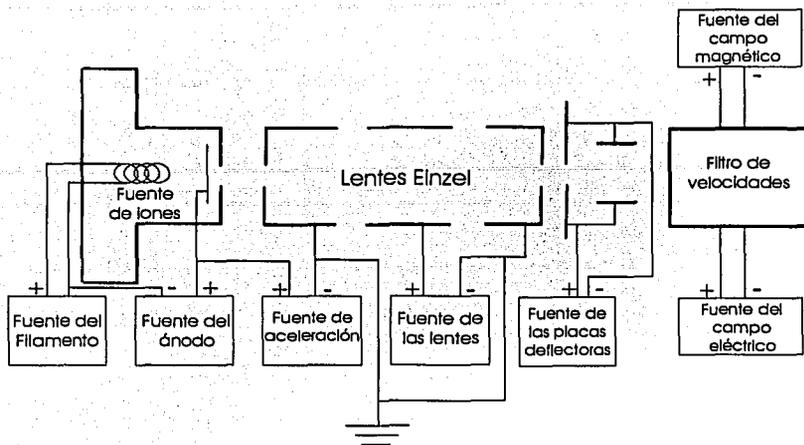


FIGURA 3.4 Electrónica asociada a las lentes y a la fuente

### 3.2.2.- FILTRO DE VELOCIDADES

Después de enfocar los iones, se hace pasar el haz a través de un filtro de velocidades, en donde se seleccionan los iones con los cuales se desea trabajar. Este filtro es un selector de velocidades y es conocido como "Filtro de Wien" ( ver figura 3.5 ).



FIGURA 3.5 Filtro de Wien

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Este filtro de velocidades se compone de un imán ( para proporcionar el campo magnético ) y un juego de placas deflectoras electrostáticas ( para proporcionar el campo eléctrico al aplicarles una diferencia de potencial ). Funciona de la siguiente manera: se aplica un campo magnético y uno eléctrico perpendiculares entre sí y a la dirección del haz incidente. Cuando el haz de partículas cargadas pasa a través del filtro con una velocidad  $v_0$ , éste es desviado por el campo eléctrico en una dirección y por el campo magnético en otra, de acuerdo con la fuerza de Lorentz. La magnitud de esta fuerza se calcula de la siguiente manera

*Fuerza electrostática*

$$F_E = eE \quad (3.1)$$

*Fuerza magnética*

$$F_M = v_0 e B \quad (3.2)$$

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

Cuando  $F_E = F_M$ , las partículas cargadas con velocidad  $v_0$  pasan sin deflectarse a través del filtro. Las partículas con otras velocidades son deflectadas hacia uno u otro lado de la dirección de las partículas con velocidad  $v_0$ . Así, en el caso de los iones que no son deflectados se tiene que

$$eE = v_0 e B \quad (3.3)$$

Consecuentemente,

$$v_0 = \frac{E}{B} \quad (3.4)$$

La velocidad definida por la ecuación 3.4 se llama velocidad de deriva del plasma o velocidad de deriva eléctrica.

Luego, la energía cinética de un ion acelerado es

$$K = qV = \frac{1}{2}M_0v_0^2 \quad (3.5)$$

de esta manera,

$$v_0 = \sqrt{\frac{2qV}{M_0}} \quad (3.6)$$

Donde  $q$  es la carga de ion,  $M_0$  es su masa y  $V$  es el voltaje de aceleración.

Combinando las ecuaciones 3.4 y 3.5 es posible encontrar una expresión para la cual un ion con velocidad  $v_0$  y masa  $M_0$  que se mueve a través del filtro de velocidades no será deflelado, esto es

$$B\sqrt{\frac{2qV}{M_0}} = E \quad (3.7)$$

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

$$F_C = \frac{M_x v_x^2}{R} = ev_x B - eE = eBv_0 \left[ \sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1 \right] \quad (3.8)$$

Los iones de masa  $M_x$  son deflelados en una trayectoria circular de radio

$$R = \frac{2V}{E \left[ \sqrt{\frac{M_0}{M_x} - 1} \right]} \quad (3.9)$$

En la figura 3.6 se ilustra como son separados los iones de masa  $M_x$  de los de masa  $M_0$ . El ángulo total de arco atravesado por el haz deflectado que entra en O y sale en Q es el mismo que el ángulo de deflexión  $\phi$ , entonces para ángulos pequeños se tiene que

$$\tan \phi \approx \sin \phi \approx \phi \quad (3.10)$$

Por lo tanto

$$\frac{D}{L} = \frac{a}{R} \quad (3.11)$$

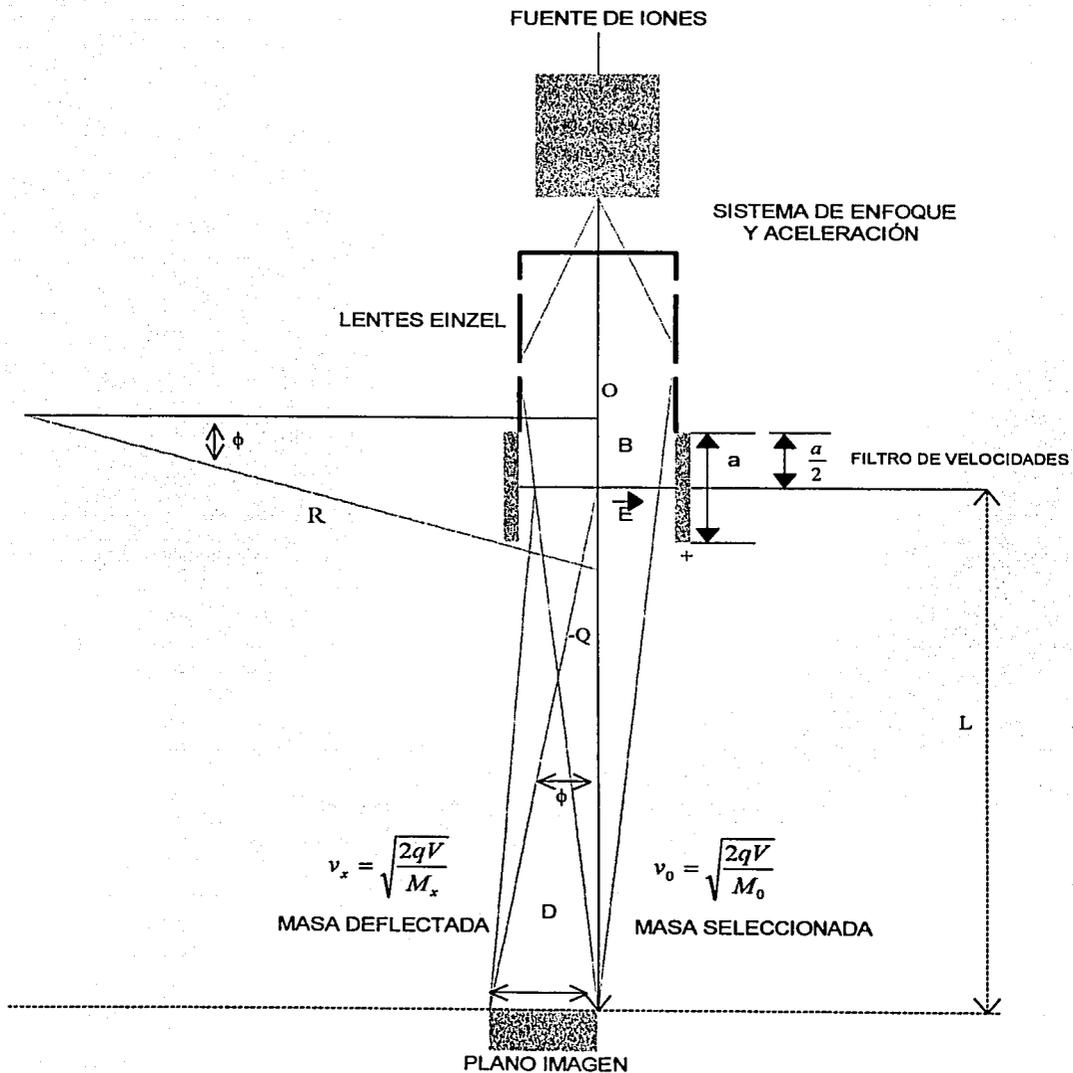
$$R = \frac{D a}{L} \quad (3.12)$$

Igualando las ecuaciones 3.9 y 3.12 y despejando  $D$  se obtiene

$$D = LaE \frac{\left[ \sqrt{\frac{M_0}{M_x} - 1} \right]}{2V} \quad (3.13)$$

Donde  $a$  es la longitud del filtro de velocidades y  $L$  es la distancia de la imagen al punto P. La dispersión  $D$  estará dada en centímetros si  $a$  y  $L$  lo están,  $V$  en volts y  $E$  en volt/cm,  $M_0$  y  $M_x$  en términos de masa.

FIGURA 3.6 Separación de iones



A partir de las ecuaciones 3.4 y 3.5, donde la ecuación 3.4 expresa la condición para que no haya deflexión, se obtiene la siguiente ecuación

$$M_0 = 2qV \left[ \frac{B}{E} \right]^2 \quad (3.14)$$

Si el campo magnético para una bobina está dado por

$$B = KI \quad (3.15)$$

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

Entonces

$$\frac{\sqrt{2qV}KI}{E} = \sqrt{M_0} \quad (3.16)$$

Ahora, si el campo eléctrico  $E$  se mantiene constante

$$A = \frac{E}{K\sqrt{2qV}} = \text{cte} \quad (3.17)$$

Por lo tanto

$$I = A\sqrt{M_0} \quad (3.18)$$

Variando el campo magnético  $B$  mediante la corriente  $I$  se obtiene

$$I_n = A\sqrt{M_n} \quad (3.19)$$

Donde  $M_n$  es la masa del ión no deflectado para  $E$  e  $I_n$  dados.

Las partículas que componen el haz de iones se miden en una placa de cobre colocada a la salida del filtro de velocidades. La placa está conectada a un pico amperímetro que mide la intensidad de la corriente del haz.

Es importante mencionar que todo el sistema descrito, desde como se producen hasta como se selecciona el haz de iones  $N^+$  se encuentra desviado  $10^\circ$  con respecto al eje del acelerador, esto se debe a que en la fuente de iones también se producen fotones, los cuales pudieran ser detectados por los channeltrones, y dar como resultado una medida incorrecta de la corriente de los iones seleccionados.

Debido a esto es necesario corregir la dirección del haz. Esto se hace con un juego de placas cilíndricas que se colocan paralelamente al final del filtro de velocidades. Con estas placas se corrige la dirección del haz aplicando un potencial de aproximadamente 150 volts por cada kiloelectronvolt de energía de aceleración del haz de iones.

Una vez corregida la dirección del haz, éste es conducido dentro del acelerador mediante un juego de placas planas paralelas llamadas placas deflectoras en donde se aplica un potencial vertical y horizontal para conducir el haz de partículas. El haz en su recorrido pasa a través de una serie de colimadores los cuales se encuentran a lo largo del acelerador de partículas.

### 3.3.- CELDA DE REACCIÓN

El haz sigue su trayectoria y entra a la cámara de reacción, en donde se encuentra la celda de reacción; es aquí en donde se lleva a cabo el proceso de colisión.

La celda de reacción es un tubo cilíndrico de acero inoxidable, cuyas dimensiones interiores son de 2.54 cm de diámetro y 2.54 cm de longitud. Tiene dos colimadores con bordes de navaja, uno a la entrada y otro a la salida con diámetros de 1 mm y 4 mm respectivamente.

Esta celda tiene como soporte un tubo de acero inoxidable de 3 mm de diámetro interior que conduce el gas blanco hacia el interior de la celda. En la figura 3.7 se muestra la celda. La celda de reacción está situada en el centro de una cámara de dispersión que consta a su vez de tres partes, una fija a ella y las otras dos móviles, que rotan con respecto al centro de giro situado en el centro de la celda de reacción.



FIGURA 3.7 Celda de reacción

En la celda de reacción se admite el gas que servirá de blanco al haz incidente a una presión de  $4 \times 10^{-4}$  Torr, esta presión se mide con un barómetro capacitivo, con el cual se garantiza que la variación de la presión es menor al 0.1% durante el experimento. Este hecho es importante dado que para los propósitos del experimento, se necesita que los iones incidentes colisionen una vez con cada átomo del gas blanco; a estas condiciones se le conocen como, régimen de colisión simple [49].

### 3.4.- SISTEMA DE DETECCIÓN

La cantidad de partículas que se verán involucradas en los distintos procesos que ocurren en la celda de reacción depende de la cantidad de partículas que inciden en el blanco.

Por ello, es necesario contar con un sistema de detección de partículas.

El sistema de detección esta formado por una caja de Faraday [48] y una cámara de detección. Dentro de la cámara de detección se encuentra un analizador parabólico a  $45^\circ$  y dos multiplicadores de electrones (CEM) situados uno en el eje del acelerador y otro al final del analizador.

### 3.4.1- CAJA DE FARADAY

La caja de Faraday se emplea para medir la corriente de partículas que va ha incidir en el blanco. La caja es contráctil, es decir, se puede mover hacia dentro y hacia fuera respecto al eje del acelerador.

Como se muestra en la figura 3.8, la caja de Faraday consta de 4 electrodos (de cobre) y una caja protectora. Los electrodos tienen las siguientes funciones:

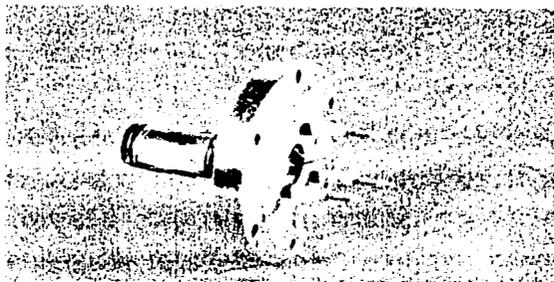


FIGURA 3.8 Caja de Faraday

El electrodo número 1; se encarga de repeler a los iones positivos provenientes del gas residual formado en la celda de reacción. Se le aplica un voltaje positivo  $V_1$ .

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

El electrodo número 2; su función es evitar que salgan los electrones secundarios producidos dentro de la caja de Faraday. Se encuentra a un potencial negativo  $V_2$ .

El electrodo número 3; es un electrodo cilíndrico, tiene como fin regresar a la placa colectora los electrones que salen de la misma. Se le aplica un potencial negativo  $V_3$ .

El electrodo número 4; es la placa colectora que se encuentra conectada a un electrómetro, con el que se mide la corriente de partículas que está incidiendo en el blanco.

La caja protectora; cubre las cuatro partes mencionadas de partículas cargadas existentes en el gas residual; está conectada a tierra.

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

$$\frac{N_i}{t} = \frac{I_0}{e} \quad (3.20)$$

Donde  $I_0$  es la corriente incidente medida en la caja de Faraday, y  $e$  es la carga del electrón en valor absoluto. La corriente que se obtiene se mide en un electrómetro y es del orden de  $10^{-10}$  Amp. Esta corriente se toma antes de admitir el gas blanco en la celda de reacción; una vez medida la corriente se admite el gas en la celda. Como los procesos físicos que tienen lugar ocurren a parámetros de impacto relativamente grandes, la dirección y velocidad de las partículas incidentes quedan prácticamente inalteradas después del choque. Como consecuencia, los productos se dispersarán a menos de  $5^\circ$ , disminuyendo el número de éstas conforme el ángulo de detección se aleja del eje del acelerador.

Las partículas dispersadas se analizan en un analizador parabólico a  $45^\circ$ .

### 3.4.2.- ANALIZADOR PARABÓLICO

El analizador parabólico consiste de dos placas conductoras paralelas que están a una distancia determinada, con un cierto potencial entre ellas. El analizador, separa las partículas cargadas provenientes del proceso de colisión dependiendo de la energía incidente y del estado de carga de las partículas. Las partículas cargadas serán dirigidas al detector situado al lado opuesto del analizador, dejando pasar a las partículas neutras hacia el detector ubicado en la dirección del eje del acelerador, como se muestra en la figura 3.9.

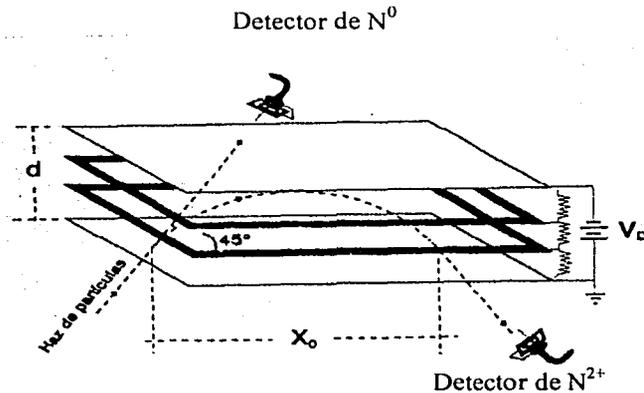


FIGURA 3.9 Analizador parabólico

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

La relación entre el voltaje aplicado a las placas  $V_D$  y la energía de aceleración  $E_a$  fue determinada experimentalmente y está dada por

$$V_D = (0.632)E_a \quad (3.21)$$

Para que el campo eléctrico sea uniforme entre las placas conductoras se intercalan dos rejillas a las cuáles se les aplica un voltaje a través de resistencias de 10 MΩ.

### 3.4.3.- MULTIPLICADOR DE ELECTRONES (CHANNELTRON)

Las partículas resultantes de las colisiones se detectan con la última componente del sistema de detección que es el multiplicador de electrones o Channeltron (CEM).

Los CEM [50] 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 construidos de un vidrio especial de plomo con silicio (figura 3.10). Tiene una capa de material semiconductor, que posee características de emisión de electrones secundarios, sobre la superficie interior del tubo.



FIGURA 3.10 Channeltron

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Un CEM funciona de la siguiente manera: Cuando una partícula incide en la cara de entrada se producen típicamente de 2 a 3 electrones secundarios. 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. De esta forma, un solo ion que arranca al menos un electrón de la entrada del Channeltron, genera una cascada de electrones en la salida del mismo. Para lograr este efecto se aplica una diferencia de potencial entre el inicio y la parte final del Channeltron.

Como se observa en la figura 3.10 se coloca una rejilla a la entrada del CEM, esta rejilla sirve para repeler las partículas residuales que se forman dentro del sistema de detección.

### 3.5.- SISTEMA DE VACÍO

En este experimento se alcanza un vacío del orden de  $10^{-7}$  Torr, con este vacío se garantiza que las partículas que se producen en la fuente de iones no interactúan con otras del medio antes de llegar a la celda de reacción. Es decir, el camino libre medio de los iones es mucho mayor que la distancia que hay entre el lugar donde se producen y la celda.

El sistema de vacío esta compuesto por tres bombas mecánicas y tres bombas turbomoleculares.

Las bombas mecánicas son llamadas también bombas de pre-vacío, con éstas se alcanza un vacío del orden de  $10^{-2}$  y  $10^{-3}$  Torr [51]. Sirven de apoyo a las bombas turbomoleculares que resultan más eficientes cuando la diferencia de presiones entre la entrada y la salida no es muy grande; esto es, del orden de  $10^{-2}$  y  $10^{-3}$  Torr. Con la bomba mecánica se desalojan los gases del sistema por medio de un rotor, cuyo eje se encuentra sumergido en aceite lubricante. En el espacio limitado por el rotor se encierra un volumen de gas que al comprimirse por la acción de rotación abre la válvula de salida y se expulsa a la atmósfera.

La figura 3.11 muestra una bomba mecánica.

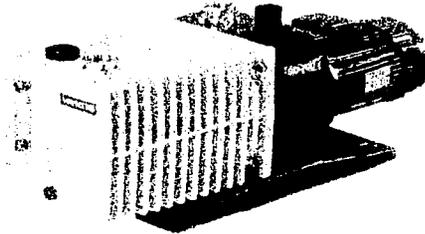


FIGURA 3.11 Bomba Mecánica

Las bombas turbomoleculares, llamadas también de alto vacío, cuentan con un sistema de enfriamiento por medio de un flujo de agua fría recirculada. En el interior se encuentra un rotor que gira a una velocidad de 3600 rpm [52], el cual tiene baleros perfectamente lubricados para reducir la fricción, y sobre el cual están montadas una gran cantidad de aspas separadas por una serie de discos que se encuentran fijos a la estructura de la bomba y perpendiculares al rotor. El vacío se logra debido a la diferencia de presiones creada al girar las aspas. Este tipo de bombas son muy eficientes ya que no producen contaminantes. Su intervalo de operación está entre  $10^{-4}$  y  $10^{-8}$  Torr. En la figura 3.12 se muestra una bomba turbomolecular.



FIGURA 3.12 Bomba turbomolecular

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

### 3.6- DISTRIBUCIONES ANGULARES

Para encontrar las secciones transversales diferenciales se utilizó el método de las distribuciones angulares, en el cual se requiere conocer el número de partículas que son desviadas, así como los procesos que están involucrados en la interacción entre el ion  $N^+$  y los gases  $Ne$ ,  $Kr$  y  $Xe$ . En el método de análisis de las distribuciones angulares se observan los ángulos a los que los productos, originados después de la colisión, son emitidos. Los resultados experimentales de las distribuciones angulares son analizados por medio de variables introducidas que son directamente medibles.

El aparato experimental cuenta con un sistema de detección, controlado por un motor de pasos, el cual se encarga de mover al sistema de detección en un intervalo angular de  $\pm 7^\circ$  respecto al eje principal del aparato, en incrementos angulares de  $0.1^\circ$ . El equipo está automatizado de manera que el sistema de detección permanece un determinado tiempo en cada posición. En este tiempo los Channeltrones cuentan las partículas deflectadas a un cierto ángulo; el tiempo es controlado por los timers.

El acelerador es controlado por medio de una computadora PC, con la cual se controlan las variables físicas del experimento y también se registran los datos experimentales obtenidos.

### 3.7.- DESARROLLO EXPERIMENTAL

Para llevar a cabo el experimento planteado en este trabajo es necesario primero alcanzar una presión de vacío del orden de  $10^{-7}$  Torr en todo el sistema experimental. Una vez obtenido este vacío se producen los iones de  $N^+$ , para esto se admite gas de  $N_2$  (99.99% de pureza) dentro de la fuente de iones a una presión de  $120 \mu\text{Hg}$ , aplicando una corriente en el filamento de 18 Amp, y un

potencial en el ánodo de 90 V, con estos valores la corriente de descarga en el ánodo es de 0.2 Amp. Después de producir los iones de  $N^+$  se prosigue a enfocar el haz de iones, para esto se utilizan las lentes Einzel. Para enfocar el haz se aplica un potencial a la segunda lente de 860 V por cada kiloelectronvolt (keV) de aceleración. Posteriormente, mediante el filtro de velocidades se selecciona la partícula con la que se desea trabajar, aquí se aplica un campo eléctrico constante producido por un voltaje de 150 V y un campo magnético producido por un imán y un devanado donde la corriente que se aplica depende de la energía de aceleración. La fuente de iones, las lentes Einzel y el filtro de velocidades se encuentran alineados en un eje que se encuentra desviado  $10^\circ$  con respecto al eje principal del acelerador, por esta razón es necesario corregir la dirección del haz de iones, para corregir la dirección del haz se cuenta con un juego de placas paralelas cilíndricas a las que se les aplica un voltaje de 150 V por cada keV de aceleración, el haz sigue su trayectoria pasando por varios colimadores situados a lo largo del acelerador. Antes de admitir el gas en la celda de reacción, se mide la corriente en la caja de Faraday, la magnitud de la corriente es del orden de  $10^{-10}$  Amp.

Una vez que se logra obtener una corriente del haz de iones ( $N^+$ ) lo más intensa posible se adecuan los parámetros al sistema de detección (analizador parabólico y Channeltron), además se admite gas blanco a la celda de reacción a una presión de  $4 \times 10^{-4}$  Torr, esta presión se mide con un Barómetro Capacitivo (Baratrón); al analizador parabólico se le aplica un voltaje de 860 V por cada keV de aceleración y al Channeltron un voltaje de 3000 V para producir el efecto de cascada.

El sistema de detección se mueve respecto al eje principal del acelerador  $\pm 7^\circ$ , pero para este experimento el sistema de detección se movió  $\pm 4^\circ$  con un incremento angular de  $0.1^\circ$  y un tiempo de acumulación de 20 s, tiempo en el que el contador de partículas permanece en ese ángulo contando las partículas provenientes del proceso de interacción.

Todo el sistema experimental y todas las variables que intervienen en el experimento, se controlan y almacenan en una computadora PC.

En la tabla 3.1 se resumen las variables involucradas en el experimento

CANTIDAD (unidades)	VARIABLE
$10^{-7}$ Torr	Presión de vacío en el aparato experimental
120 $\mu$ Hg	Presión del gas a ionizar ( $N_2$ ) en la fuente de iones
18 Amp	Corriente del filamento de la fuente de iones
90 V	Potencial en el ánodo
0.2 Amp	Corriente de descarga en el ánodo de la fuente de iones
860 V/keV	Voltaje de enfoque aplicado en la segunda Lente Einzel
150 V	Voltaje aplicado para el campo eléctrico en el filtro de velocidades
B	Campo magnético que depende de la energía de aceleración
150 V/keV	Voltaje en las placas paralelas cilíndricas para corregir la dirección del haz
90 V (electrodo 1)	Voltajes aplicados a los electrodos de la caja de faraday.
-45 V (electrodo 2)	
-300 V (electrodo 3)	
$10^{-10}$ Amp	Magnitud de la corriente del haz incidente ( $N^+$ )
$4 \times 10^{-4}$ Torr	Presión del gas blanco en la celda de reacción
860 V/keV	Voltaje aplicado en el analizador parabólico
3000 V	Voltaje en el Channeltron
$\pm 4^\circ$	Movimiento del sistema de detección
$0.1^\circ$	Incremento angular
20 s	Tiempo de acumulación

Tabla 3.1 Variables involucradas en el experimento

### 3.8.- CANTIDADES DIRECTAMENTE MEDIBLES Y CÁLCULO DE LAS SECCIONES TOTALES

La sección transversal diferencial está dada en función de los siguientes parámetros directamente medibles en el experimento.

1.- La corriente del haz incidente ( $I_0$ ) que se mide en la caja de Faraday se asocia a la cantidad de partículas incidentes por unidad de tiempo  $N_i = \frac{I_0}{e}$ .

2.- La presión, que está implícita en el espesor del blanco,  $\pi$ , (átomos blanco por unidad de área). El espesor del gas en la celda de colisión ( $\pi$ ) está dado por

$$\pi = \frac{N_A LP}{RT} \quad (3.20)$$

en unidades de átomos/cm<sup>2</sup>, donde

$P$  es la presión del gas, cuyas unidades están dadas en Torr;

$L$  es la longitud de la trayectoria a través del gas utilizado como blanco;

$T$  es la temperatura absoluta del gas;

$N_A$  es el número de Avogadro ( $6.02 \times 10^{23}$  /mol) y

$R$  es la constante universal de los gases ( $8.31$  J/mol°K )

Se observa que para una celda de dimensiones dadas y a temperatura

ambiente,  $Q = \frac{N_A L}{RT}$  es una constante y  $\pi$  es una función de la presión solamente.

Es decir

$$\pi = QP \left( \frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2} \right) \quad (3.21)$$

Si  $L = 2.54$ cm,  $T = 300^\circ\text{K}$  y  $P$  está en Torr se tiene que

$$Q = [(6.02 \times 10^{23} / \text{mol})(0.0254 \text{m})(133.3 \text{ N/m}^2)] / [(8.31 \text{ J/mol}^\circ\text{K})(300^\circ\text{K})]$$

$$Q = 8.17 \times 10^{20} \text{ átomos/m}^2 = 8.17 \times 10^{16} \text{ átomos/cm}^2 \quad (3.22)$$

Entonces

$$\pi = 8.17 \times 10^{16} P \text{ (átomos/cm}^2\text{)} \quad (3.23)$$

3.-El número de partículas  $N^0$  dispersadas a un ángulo  $\theta$  que se registra en el detector, se relaciona con la intensidad del haz dispersado ( $I_{N^0}(\theta)$ ) por medio de la relación

$$I_{N^0}(\theta) = \frac{N_{N^0}(\theta) e}{t} \quad (3.24)$$

4.- El valor del ángulo sólido sustentado por el detector se calculó con la siguiente relación

$$d\Omega = \left( \frac{r^2}{d^2} \right) 3.1416 \quad (3.25)$$

donde  $d$  es la distancia del centro de la cámara de reacción al colimador colocado a la entrada del analizador parabólico y  $r$  es el radio del orificio del colimador.

Para valores de  $d$  y  $r$  de 20" y 0.01" respectivamente se tiene

$$d\Omega = 7.85 \times 10^{-7} \text{ [steradianes]} \quad (3.26)$$

Con las relaciones anteriores se puede obtener la sección transversal diferencial, para la producción de  $N^0$  a un ángulo dado, mediante la relación

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N(\theta)}{[N_i \pi d\Omega]} \quad (3.27)$$

donde  $N(\theta)$  es el número de partículas producto por unidad de ángulo sólido por segundo, detectadas a un ángulo  $\theta$  (partículas/s).

$N_i$  es el número de partículas incidentes por unidad de tiempo (partículas/s). Como

$\frac{N_i}{t} = \frac{I}{e}$ , entonces  $N_i = \frac{It}{e}$ ; donde  $I$  es la corriente medida en la caja de Faraday.

$\pi$  es el número de moléculas blanco por unidad de área (espesor del blanco, partículas/cm<sup>2</sup>). Esto es  $\pi = 8.17 \times 10^{16} P$ , donde  $P$  es la presión en la celda de reacción ( $4 \times 10^{-4}$  Torr).

$d\Omega$  es el ángulo sólido sustentado por el detector (steradianes). El ángulo sólido

está dado por  $d\Omega = \frac{r^2}{d^2} = 7.85 \times 10^{-7}$  (steradianes).

Sustituyendo en la ecuación (3.27) las cantidades directamente medibles, se obtiene

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{RTeN(\theta)}{N_A L P I t d\Omega} \quad (3.28)$$

Considerando que  $K = \frac{RTe}{N_A L d\Omega}$  es constante para  $T$  y  $L$  dados, la sección transversal diferencial se puede expresar como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = K \frac{N(\theta)}{P I t} \quad (3.29)$$

con  $K = 3.32 \times 10^{-32}$ .

La sección transversal total se obtiene integrando la ecuación (3.29), utilizando la siguiente relación

$$\sigma = \int \left( \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \right) d\Omega = 2\pi \int \left( \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \right) \sin(\theta) d\theta \quad (3.30)$$

Esta integral se calcula por integración numérica (por la regla de Simpson).

### 3.9.- INCERTIDUMBRES DE LAS VARIABLES DEL EXPERIMENTO

Durante el desarrollo de cualquier experimento no se puede tener un control absoluto sobre las cantidades que son directamente medibles en el laboratorio. Debido a esto, se tiene que la reproducibilidad del experimento está en función de las incertidumbres experimentales que dependen directamente de las cantidades físicas siguientes: corriente total de iones  $N^+$  ( $I_i$ ), presión del gas ( $P$ ), temperatura ( $T$ ), longitud efectiva ( $L$ ), tiempo de acumulación ( $t$ ), número de partículas detectadas a un ángulo  $\theta$  ( $N(\theta)$ ). A cada una de estas cantidades se le asocia una incertidumbre porcentual. La incertidumbre total asociada al experimento es la suma de todos estas incertidumbres.

1.- Corriente total de iones  $N^+$  ( $I_i$ ): Por diversas razones, muchas veces la corriente de iones que incide en el blanco no permanece constante durante el tiempo en que se realizan las distribuciones angulares. El criterio para asignar una incertidumbre a la corriente es el de desechar aquellos datos tomados cuando la corriente presenta una variación mayor al  $\pm 10\%$  de la lectura inicial.

2.- Presión del gas ( $P$ ): La presión que se mide en la celda de reacción no varía significativamente mientras está corriendo el experimento. La presión se mide con un barómetro capacitivo por lo que la incertidumbre porcentual asociada de acuerdo al fabricante es del orden del  $\pm 0.1\%$ .

3.- Temperatura (  $T$  ): La temperatura es estable, ya que, la construcción misma del laboratorio no permite variaciones de más del  $\pm 1\%$ .

4.- Longitud efectiva (  $L$  ): La incertidumbre relativa asociada a la longitud efectiva de la celda de reacción es del  $\pm 3.8\%$ .

5.- Tiempo (  $t$  ): La incertidumbre relativa asociada a esta variable está dada por los medidores del tiempo (Timers), de acuerdo con el fabricante es del  $\pm 0.1\%$ .

6.- Número de partículas detectadas (  $N$  ): La incertidumbre relativa asociada al número de partículas detectadas en el multiplicador de electrones es

$$\delta N = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (3.31)$$

Para  $N > 16$  esta cantidad se hace despreciable, con respecto a las incertidumbres relativas asociadas a las demás variables del experimento.

Tomando en cuenta a todas las incertidumbres asociadas a las variables ya mencionadas, encontramos que el error porcentual correspondiente a las secciones diferenciales es del  $\pm 15\%$ .

## **CAPÍTULO 4**

### **Resultados y discusión**

En el presente capítulo se presentan los resultados obtenidos de las secciones transversales totales de captura electrónica en función de la energía incidente del proyectil, para los diferentes sistemas estudiados en este trabajo. Además se muestra la comparación con los modelos teóricos y otros trabajos reportados en la literatura.

## 4.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### Captura electrónica (sistema $N^+$ en gases)

#### 4.1.- RESULTADOS EXPERIMENTALES

Las secciones transversales absolutas de captura electrónica se obtienen mediante integración numérica sobre el intervalo angular observado dado por

$$\sigma_{10} = 2\pi \int_0^{\theta_{\max}} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \text{sen}(\theta) d\theta \quad (4.1)$$

con

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I_{N^0}}{\pi d \Omega I_{N^+} \text{eff}} \quad (4.2)$$

Donde  $I_{N^+}$  es la intensidad del número de iones de  $N^+$  incidiendo por segundo en el blanco,  $I_{N^0}$  es la intensidad del haz de átomos de Nitrógeno contados a un ángulo  $\theta$  con respecto a la dirección del haz incidente,  $\pi$  es el espesor del blanco,  $d\Omega$  es el ángulo sólido sustentado por el sistema del detector y *eff* es la eficiencia del detector de partículas (channeltron).

#### 4.2 SECCIÓN TRANSVERSAL DIFERENCIAL

Para poder determinar los valores de las secciones transversales totales para el proceso de captura de  $N^+$  en gases, se midieron las distribuciones angulares diferenciales para este proceso en todo el intervalo de energía del presente trabajo; un ejemplo de esto se puede ver en la figura 4.1 en donde únicamente se encuentran graficados los datos experimentales para todos los blancos a una

energía incidente de 3 keV. Todas las gráficas muestran un comportamiento decreciente de la sección transversal diferencial con respecto al incremento del ángulo.

Las secciones diferenciales utilizando al  $Kr$  como blanco son aproximadamente un orden de magnitud inferiores a la sección diferencial utilizando a  $Ne$  como blanco y estas a su vez son aproximadamente un orden de magnitud inferiores que la sección diferencial utilizando a  $Xe$  como blanco.

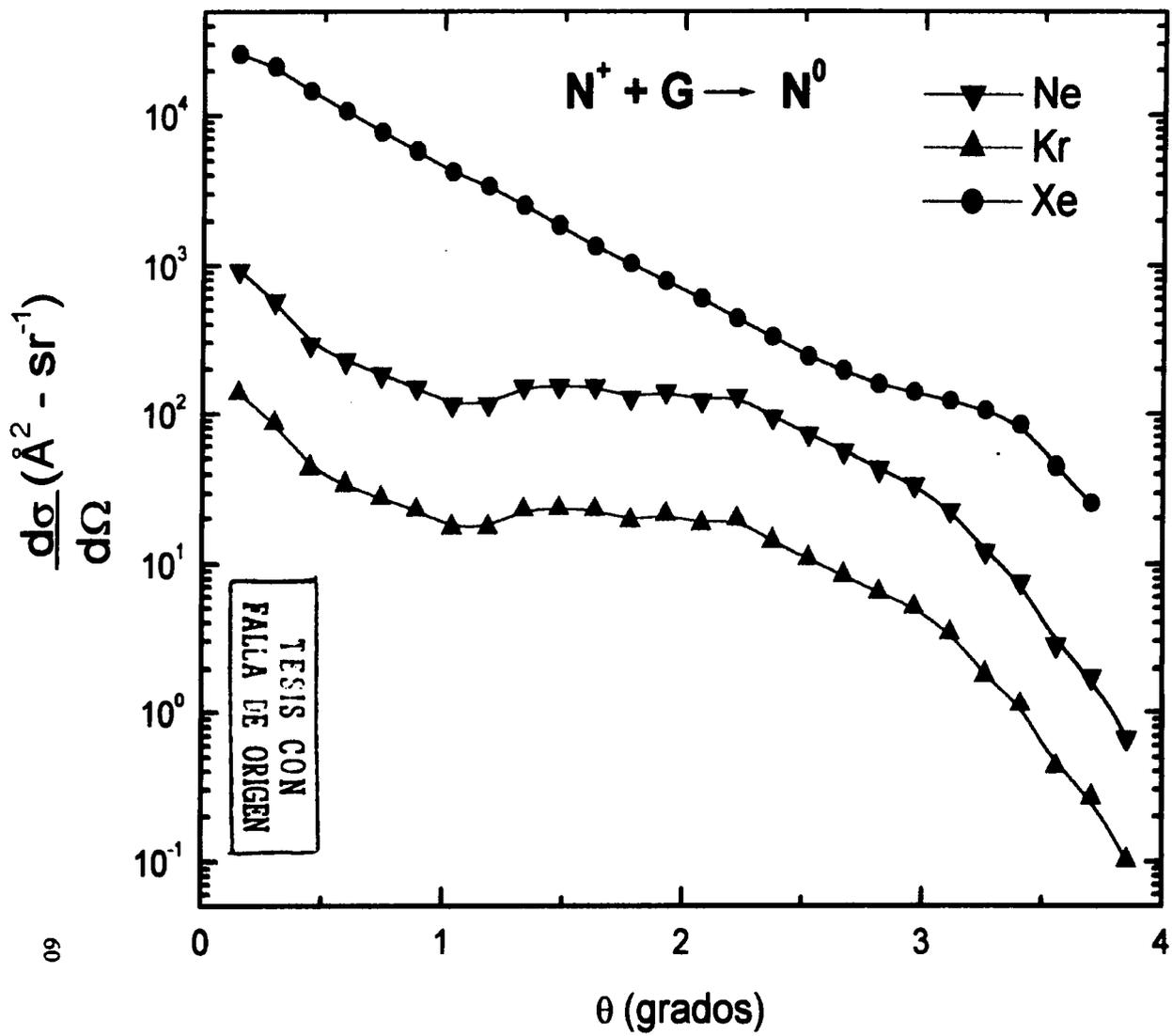


Figura 4.1 Distribuciones angulares de  $N^0$  en diferentes blancos a 3 keV

### 4.3.- SECCIONES TRANSVERSALES TOTALES

#### 4.3.1.- SISTEMA $N^+ + Ne$

Las secciones transversales de captura de carga del ion  $N^+$  en  $Ne$  se muestran en la Figura 4.2 y se presentan en forma tabular en la Tabla 4.1 (todos los datos que se muestran en la Tabla 4.1 corresponden a resultados experimentales).

Los presentes resultados muestran un comportamiento monótono decreciente con respecto al incremento de la energía incidente, además de que se comparan con los resultados de otros autores a diferentes energías. Como se puede observar, la sección transversal total se comporta en forma oscilante teniendo un mínimo y un máximo en la sección total, los cuales se encuentran a 10 keV y 150 keV, respectivamente.

Se puede observar también que existe un traslape entre los resultados de Vujovic *et al* [28] a energías de 1 y 5 keV respectivamente y los del presente trabajo, lo cual viene a confirmar el comportamiento oscilante observado por primera vez por Vujovic *et al* [28].

Este comportamiento se puede interpretar como el resultado del cruzamiento de las curvas de potencial del sistema proyectil -blanco.

Energía (keV)	Lo y Fite (A <sup>2</sup> )	Vujovic et al (A <sup>2</sup> )	Este trabajo (A <sup>2</sup> )	Pivovar et al (A <sup>2</sup> )
1			2.1	
1.5			1.81	
2			1.52	
2.5			1.35	
3			1.2	
3.5			1.05	
4			0.96	
4.5			0.89	
5				
30	2.4			
90	4.2			
150	4.3			
200	4.05			
300	3			
350	3.1			
400	3.2			
450	2			
600	1.8			
800	1.7			
1000	0.9			
1200	0.82			
1400	0.62			
3		1		
5		0.74		
7.5		0.6		
10		0.52		
12.5		0.58		
15		0.68		
20		1.1		
25		1.6		
30		2.2		
300				3.5
400				3
500				2.5
600				2.5
800				1.6
1000				1
1200				0.8
1400				0.6

Tabla 4.1 Secciones totales del Sistema N<sup>+</sup> + Ne

$\sigma_{10} \text{ (}\text{\AA}^2\text{)}$

TEJIS CON  
FALTA DE ORIGEN

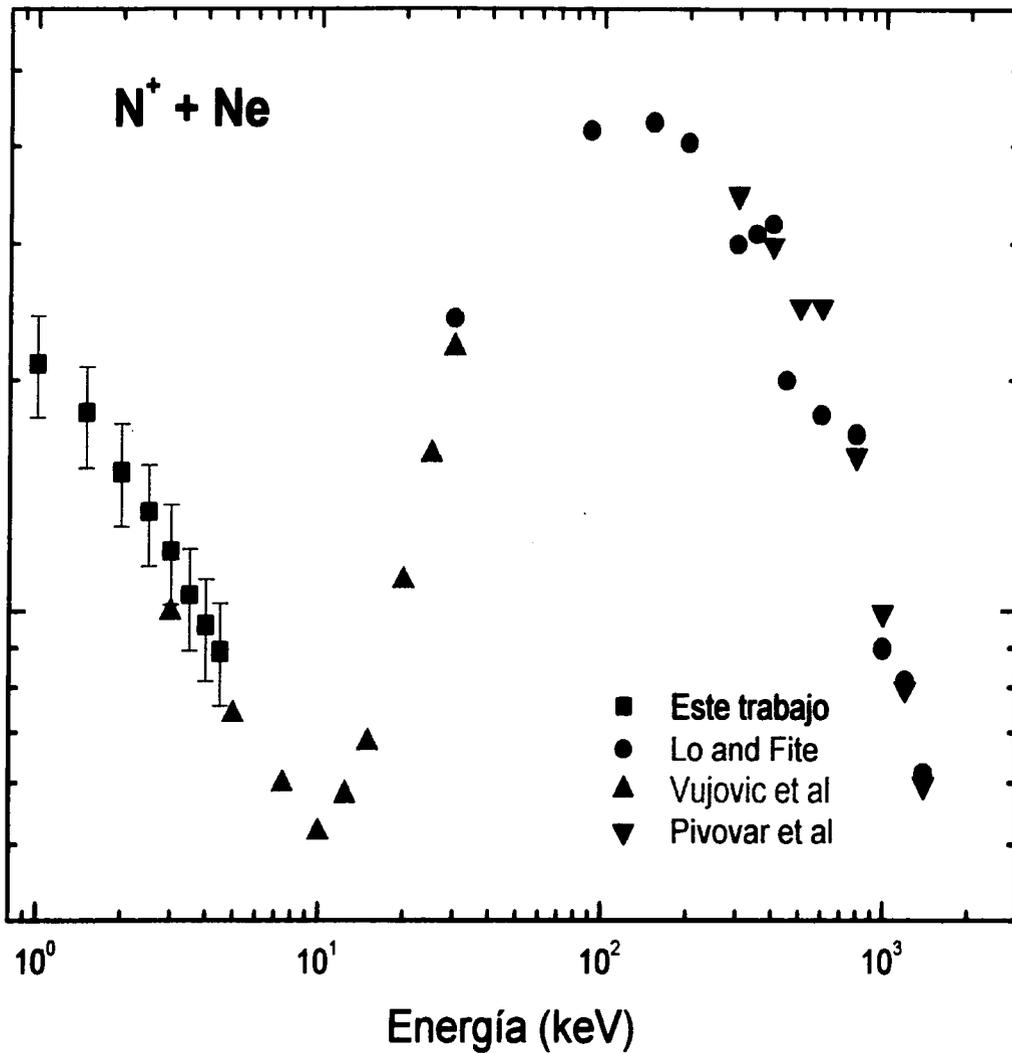


Figura 4.2 Secciones transversales totales para el sistema N<sup>+</sup> + Ne

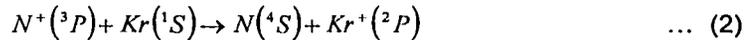
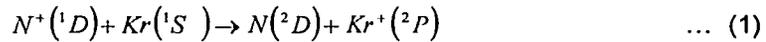
### 4.3.2.- SISTEMA N<sup>+</sup> + Kr

En la Tabla 4.2 y en la Figura 4.3 se encuentran los valores de las secciones transversales totales en un amplio espectro de energía, así como también los trabajos realizados por otros autores, tanto teóricos (Matic [24]) como experimentales (Vujovic *et al* [28], Fedorenko *et al* [53], Pivovar *et al* [26] y este trabajo).

Para los datos reportados en este trabajo se puede observar que la sección transversal total tiene un comportamiento casi plano en función de la energía incidente del ion. Además de que existe un traslape entre los datos de este trabajo y los realizados por Vujovic *et al* [28].

Estos resultados concuerdan en valor absoluto dentro del error experimental con los datos de Vujovic *et al* [28] en un intervalo de energía de 3.0 a 5.0 keV. Mientras que los resultados de Fedorenko [25] a 5 keV se encuentran por arriba del presente valor por un valor de aproximadamente de 1.6.

De los cálculos teóricos reportados por Matic [24] para los procesos



se puede decir que se comportan razonablemente bien a bajas energías con los presentes datos, los de Vujovic *et al* [28] y los de Fedorenko *et al* [53], aunque para el caso del proceso 1, se puede observar un excelente acuerdo con los resultados de Vujovic *et al* [28] en todo su intervalo de energía, así mismo también existe un buen acuerdo con los de Fedorenko *et al* [53] a algunas energías.

Los resultados de Pivovar *et al* [26] presentan un comportamiento cualitativo similar al que muestra la curva del proceso 2 para altas energías, mostrando un traslape con los datos de este proceso a energías de 300 y 400 keV

A continuación, en la Tabla 4.2 y Figura 4.3, se presentan los datos de los trabajos involucrados.

Energía (keV)	Este trabajo (A <sup>2</sup> )	Fedorenko (A <sup>2</sup> )	Vujovic et al (A <sup>2</sup> )	Pivovar et al (A <sup>2</sup> )	Matic (2) (A <sup>2</sup> )	Matic (2) (A <sup>2</sup> )
3.0	21.78		24		21	24.8
3.5	21.42					
4.0	21.15				20.5	24.6
4.5	20.61					
5.0	21.43				20	24
5		28	22.1			
6					19.8	23.6
8					19.4	23
10		23	22		19	22.5
15		23.5	22.1			
20		22.1	21.9		17.5	22
25		21.8	21.5			
30		21.5	20.8		16	21
40					15	20
50					14.5	19.5
60					14	19
70					13.5	18.5
80					13	18
90					12.5	17.5
100					12	17
200					9.8	14
300				9	8.5	12
400				7	7.4	10
500				5.5	6.8	9
600				4.5	6	8.2
700				3	5.5	7.5
800				2.5	5	6.8
900					4.8	6.2
1000				2	4.4	5.8
1200				1.3		
1400				0.8		

Tabla 4.2 Secciones totales del Sistema N<sup>+</sup> + Kr

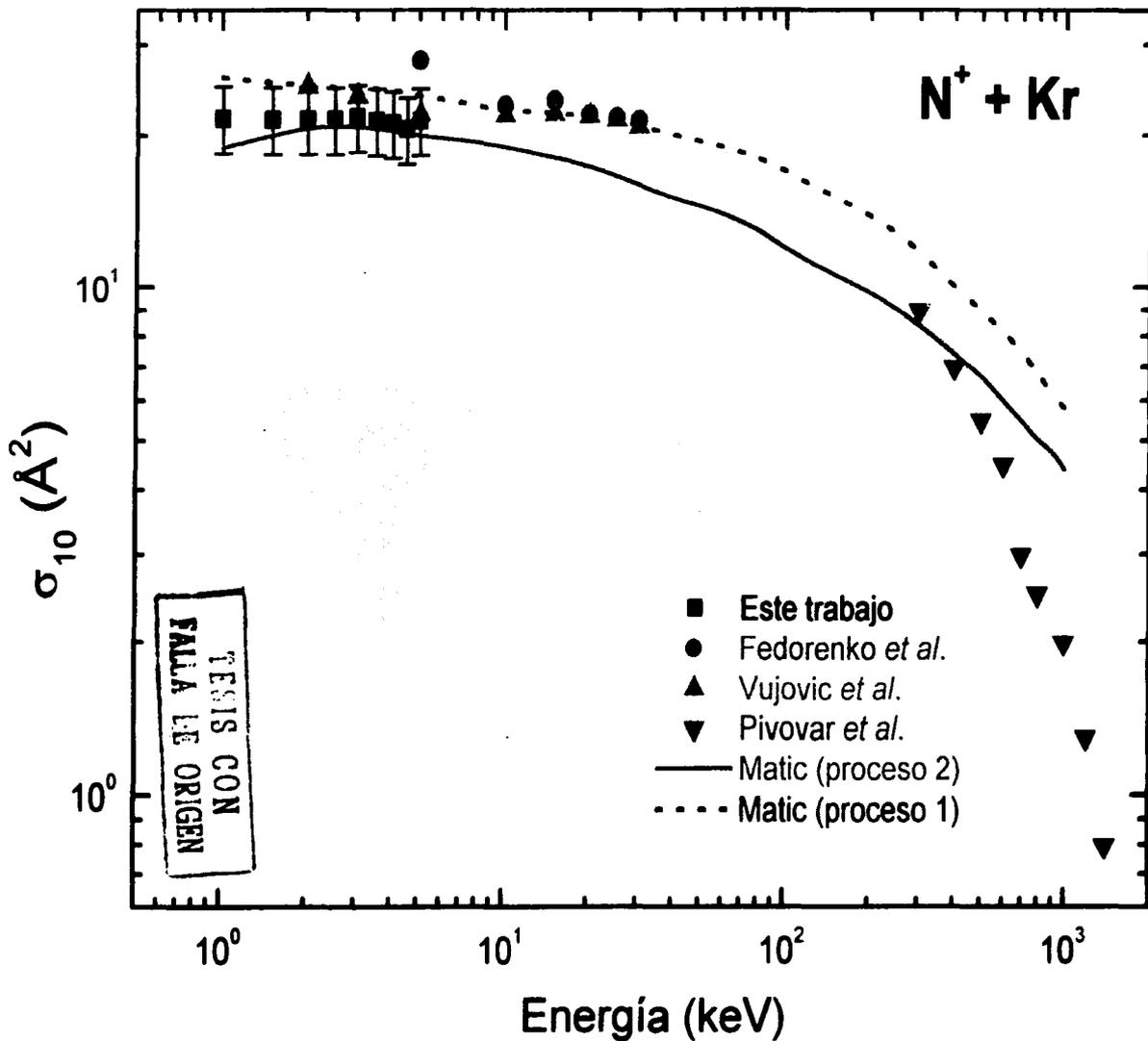


Figura 4.3 Secciones transversales totales para el sistema N<sup>+</sup> + Kr

### 4.3.3.- SISTEMA $N^+ + Xe$

Las secciones transversales totales para este sistema se muestran en la Figura 4.4 y se presentan en la Tabla 4.3. Los resultados experimentales

Como se observa en la figura 4.4 los resultados experimentales reportados por Vujovic *et al* [28] presentan un comportamiento decreciente. Sus resultados a 2, 3 y 5 keV, concuerdan razonablemente bien con los obtenidos en este trabajo, dentro de la incertidumbre asociada a los datos experimentales, de la misma manera que lo hacen los resultados teóricos de Matic *et al* [29], pero estos en el intervalo que va de los 3 a los 5 keV, quien utilizó la aproximación de dos estados considerando el proceso  $N^+(^3P) + Xe(^1S) \rightarrow N^0(^4S) + Xe^+(^2P)$ .

Así mismo los resultados de este trabajo muestran un decremento de la sección transversal como función de la energía de colisión. Se puede observar que la forma cualitativa de la sección transversal en función de la energía es la misma que obtiene Vujovic [28] y Matic [29], pero los resultados de Vujovic [28] se encuentran en un factor de 1.5 mas grande que los de Matic [29].

Los resultados teóricos calculados por Matic [29] se muestran en la Figura 4.4 como una curva continua.

<b>Energía</b>	<b>Este trabajo</b>	<b>Vujovic et al</b>	<b>Matic et al</b>
<b>keV</b>	<b>(A<sup>2</sup>)</b>	<b>(A<sup>2</sup>)</b>	<b>(A<sup>2</sup>)</b>
1.0	35		28
1.5	33.3		
2.0	32.8	38	27
2.5	31.9		
3.0	31.1	35	
3.5	30.5		
4.0	29.8		26
4.5	29.2		
5.0	29.1	32	
6			24.5
8			23.5
10			
15		29	
20		28	21.5
25		27	20.5
30		26	
40			19.8
50			19

Tabla 4.3 Secciones totales del Sistema N<sup>+</sup> + Xe

COPIA DE ESTA TESIS NO SALE DE LA BIBLIOTECA

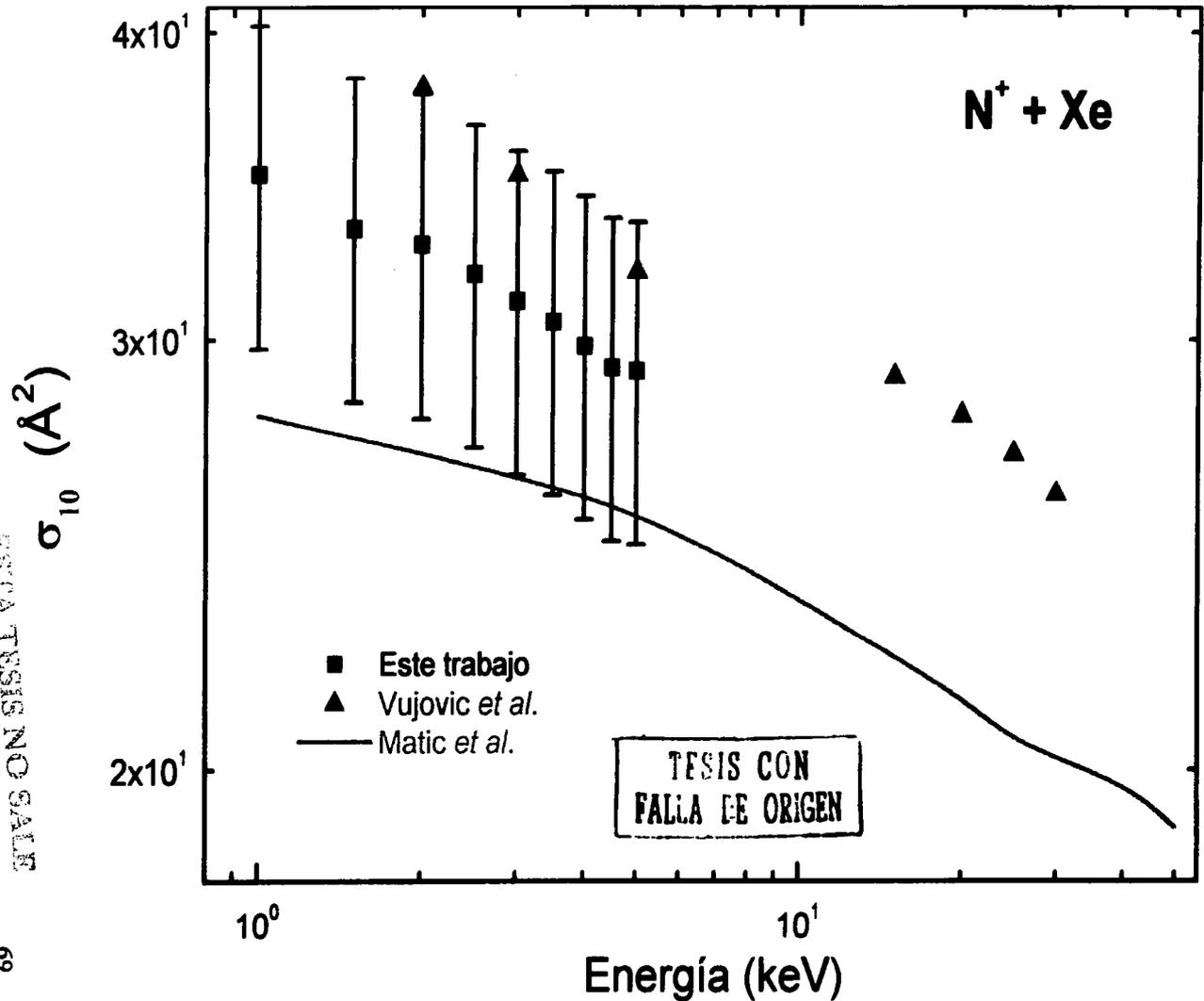


Figura 4.4 Secciones transversales totales para el sistema  $N^+ + Xe$

## Conclusiones

### sistema $N^+$ en gases (captura electrónica)

Las conclusiones del presente trabajo para los procesos de captura electrónica se pueden enumerar de la siguiente manera:

- Se presentan las mediciones de las secciones transversales totales absolutas de la captura electrónica de  $N^+$  en  $Ne$ ,  $Kr$  y  $Xe$ , en un intervalo de energía de 1.0 a 5.0 keV, las cuales muestran un comportamiento monótono decreciente conforme aumenta la energía de colisión.
- Para el caso del sistema de  $N^+ + Ne$ , se presenta el comportamiento de la curva de sección transversal de captura en un intervalo muy amplio de energía (1.5 – 1400 keV), además de confirmar el comportamiento observado por Vujovic *et al* [28] a bajas energías.
- Para el sistema  $N^+ + Kr$  se muestra el comportamiento de la sección transversal total en función de las energías mostrando un comportamiento decreciente con respecto al incremento de la energía incidente. Los presentes resultados experimentales concuerdan razonablemente con la aproximación semiempírica de Matic [24] ( para el proceso 1).
- Sistema  $N^+ + Xe$ , las secciones transversales totales de captura presentan un comportamiento decreciente como función de la energía de colisión. A bajas energías concuerdan dentro del error experimental con los datos de Vujovic *et al* [28] y Matic [29]. Los datos obtenidos en este trabajo concuerdan de manera cualitativa con la aproximación teórica utilizado por Matic [29] ( para el proceso  $N^+(^3P) + Xe(^1S) \rightarrow N^0(^4S) + Xe^+(^2P)$  ).

Finalmente, considerando las metas planteadas originalmente en este trabajo, se lograron obtener resultados experimentales que permiten tener una idea más amplia del proceso de captura de carga de iones de  $N^+$  en gases raros.

## Referencias

- [1] S.Datz, G.W.F. Drake, T.F. Gallager, H Kieninpoppen and G. Zu Putiiz. *Rev. Mod. Phys.* 71, 5223 (1999).
- [2] R. K. Javev, *Atomic and Molecular Processes in Fusion Edge Plasma* (New York: Plenum), 1995.
- [3] L. Gulyás and P.O. Fainstein, *Phys B* 31, 3297 (1998).
- [4] G. Martínez, K. Langanice and D.J. Dean, *Astrophysical Journal Supplement Series*, 126, 493 (2000).
- [5] D. Hersch Bach, *Rev. Mod. Phys.* 71, 5411 (1999).
- [6] W. Möller, *Final Programme and Abstracts of the 14<sup>th</sup>, Int. Conf. On Ion Beam Analysis And 6<sup>th</sup> European Conf. On Accelerators in Applied Research and Technology*, 1999.
- [7] A. Wada, C. Hirose. *J. of Molecular Structure* 379, 205 (1996).
- [8] L. Brostrom, A. Kastberg, J. Lidberg, S. Mandervik, *Z. Phys. D* 36, 125 (1996).
- [9] A. Ehresmonn, G. Menteel, K.H. Schartner. *J. of Phys. B*; 29, 99, (1996)
- [10] R. Slanki, E. L. Latush, D. C. Gerstenberger W. M. Fairbonk Jr. and G. J. Collins. *Appl. Phys. Letts.* 35, 317 (1979).
- [11] M. Tsuji, N. Kaneko, M. Furusawa, T. Muraoka, and Y. Nishimura. *J. Chem. Phys.* 98, 8565 (1993). *J. Chem Phys.* 99, 4539 (1993).
- [12] R. V. Janev, *Reviews of Modern Physics in Fusion Edge Plasmas*, Plenum, New York, 1995.
- [13] Müller A. Klinger, Salzborn E. 1976 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 9 291-3.
- [14] C.H. Lyu, F.C Bruhweiler *Astrophysical Journal* 459, 216 (1996)
- [15] J. Semaniak, A. Larson *et al*, *Astrophysical Journal* 498, 886 (1998)
- [16] D.A. Verner, G.J. Ferland *Astrophysical Journal Supplement Series* 103, 467 (1996)
- [17] F. W. Bliev *et al*, *Phys. Rev.* A57, 221-226, (1998)
- [18] Kamber *et al*, *Phys. Rev.* A54, 1452-1458, (1996)
- [19] R. V. Chiflikyan *Plasma Phys. Reports* 22, 66 (1996)
- [20] Z. Fang *et al*, *Phys. Rev.* A55, 440-443, (1997)
- [21] Hirao Y., Ogawa H., *et al*. *Heavy Ion Synchrotron for Medical Use. Nuclear Physics*, A538, 541c-550c (1992).
- [22] G. H. Henderson, *Proc. Roy. Soc. A*102, 496 (1923)
- [23] J. B. Hasted, *Proc. Roy. Soc. A*207, 421 (1951)
- [24] B. Zeigler, *Z. Phys.* 136, 108 (1953)
- [25] N. V. Fedorenko, *J. Tech. Phys.* 24, 2113 (1954)
- [26] L. I. Pivovar, M. T. Novikov y A. S. Dolgov., *Sov. Phys. JETP* 23-3, 357-362, (1966).
- [27] H. H. Lo y W. L. Fite, *Atomic Data* 1, 305-328, 1970).
- [28] M. Vujovic, M. Matic, B. Cobic y P. Hvelplund, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* 10-18, 3699-3713, 1977.
- [29] M. Matic, V. Sidis, M. Vujovic y B. Cobic, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys* 10-18, 3665-3676, 1980.

## REFERENCIAS

- [30] D. Rapp y W. E. Francis, *J. Chem. Phys.*, 37 , 2631 (1962).
- [31] D.R. Bates, M. S. W. Massey y A. C. Stewart, *Proc., Roy. Soc.* A216, 437 (1953).
- [32] O. B. Firsov, *Zh. Eksper. Teor. Fiz.*, 21, 1001 (1951).
- [33] D. Rapp y W. E. I. B. Ortenburger, *J. Chem. Phys.*, 33, 1230 (1960).
- [34] I. Popescu Iovitsu y N. Ionescu-Pallas, *Soviet Phys. Tech. Phys.* 4, 781 (1960).
- [35] D. R. Bates y McCarrol, *Proc. Roy. Soc. (London)*, A245, 175 (1958).
- [36] M. Grizinski, *Phys. Rev.* 115, 374 (1959).
- [37] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Interscience, New York, 1961, Vol.I, Chapter X, 1-7; Vol. II, Chapter XIX, 1-7.
- [38] E. F. Gurnee y J.L. Magee, *J. Chem. Phys.*, 26, 1237 (1957).
- [39] W. H. Cramer, *J. Chem. Phys.*, 28, 688 (1958).
- [40] K. Takayanagi, *Repts. Progr. Suitama Univ. All*, 33 (1955).
- [41] J.M. Hernández, Tesis profesional de Maestría, Fac. Ciencias, UNAM (1997).
- [42] D. R. Bates y N. Lynn, *Proc. Roy. Soc. (London)* A253, 141 (1959).
- [43] T. Holstein, *J. Phys. Chem.*, 56, 832 (1952).
- [44] P. Mahadevan y D. Magnuson, *Phys. Rev.* 171, 103 (1968).
- [45] S. Sinha and J. N. Bardsley. *Phys. Rev.* A14 104 (1976)
- [46] H. Martínez, *Journal of Physics* B32, 189 (1999).
- [47] Pedro G. Reyes R., Tesis Doctoral, 2002
- [48] H. Martínez, Tesis Profesional, FC-UNAM, 1981.
- [49] R. E. Olson *J. Chem. Phys.* 56, 2979 (1972).
- [50] G. E. Iglesias y T. D. McGarity, *Rev. Sci. Inst.* , 47, 1728 (1971).
- [51] Técnicas de Vacío, Manual de Laboratorio II, FC-UNAM.
- [52] J. F. O'hanlon, *A user guide to vaccum technology*, John Wiley & sons (1980)
- [53] N. V. Fedorenko, V. V. Afrosimov y D. M. Kaminker, *Sov. Phys. (Tech. Phys.)* 1, 1861 (1957).