

00323

54



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS



ENERGIA POTENCIAL DEL SISTEMA ION-ATOMO OBTENIDA A PARTIR DE DATOS EXPERIMENTALES

TESIS
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
FISICO
PRESENTA:

ROBERTO PEREZ MARTINEZ



FACULTAD DE CIENCIAS UNAM

Director de Tesis:
DR. HORACIO MARTINEZ VALENCIA

FACULTAD DE CIENCIAS 2003
SECRETARIA GENERAL

TESIS CON FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.



UNIVERSIDAD DE VALPARAISO

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:
"Energía potencial del sistema ión-átomo obtenida a partir de datos experimentales"

realizado por Pérez Martínez Roberto

con número de cuenta 9333640-6 , quién cubrió los créditos de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis.
Propietario

Propietario

Dr. Horacio Martínez Valencia

Propietario

Dr. Guillermo Espinosa García

Suplente

Dr. Fermín Castillo Mejía

Suplente

Dr. Edmundo Moreno Díaz

Fís. Héctor de Jesús Cruz-Manjarrez Flores-Alonso

Consejo Departamental de Física

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura

**Dedico este trabajo a mis padres:
Emma Martínez Balcázar y Guillermo Pérez Jerónimo
por su apoyo constante.**

**A mi queridísima Valentina Jerónimo Castellanos,
siempre estarás junto a mi.**

**A Verónica Eslava, siempre encuentro en ti una
motivación para seguir adelante.**

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Horacio Martínez Valencia por la supervisión de mi trabajo y por el apoyo que me concedió para que este trabajo fuera posible.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por su apoyo financiero (41072-F), también a DGAPA por el financiamiento al proyecto DGAPA IN-109203.

A los sinodales: Dr. Guillermo Espinosa García, Dr. Fermín Castillo Mejía, Dr. Edmundo Moreno Díaz, Fís. Héctor de Jesús Cruz-Manjarrez Flores-Alonso, que con su revisión del manuscrito lo enriquecieron en múltiples aspectos.

Al M. en C. Guillermo Gómez Alcaraz por su amistad y valiosas opiniones sobre el trabajo escrito.

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO I

- 1.- DISPERSIÓN ELÁSTICA DE IONES POR ÁTOMOS**
- 1.1.- SISTEMA DE REFERENCIA DE LABORATORIO Y CENTRO DE MASA.**
- 1.2.- POTENCIAL DE INTERACCIÓN ENTRE SISTEMAS ATÓMICOS**
- 1.3.- APROXIMACIÓN CLÁSICA**
- 1.4.- TRAYECTORIA CLÁSICA Y FUNCIÓN DE DEFLEXIÓN**
- 1.5.- SECCIÓN EFICAZ**
- 1.6.- APROXIMACIÓN SEMICLÁSICA**

CAPÍTULO II

- 2.- PROBLEMA DE INVERSIÓN**
- 2.1.- TEORÍA DEL PROCESO DE INVERSIÓN**
- 2.2.- PROCEDIMIENTO**
- 2.2.1.- DETERMINACIÓN DEL PARÁMETRO DE IMPACTO**
- 2.2.2.- DETERMINACIÓN DE $V(r)$**

CAPÍTULO III

- 3.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN**
- 3.1.- RESULTADOS EXPERIMENTALES**
- 3.2.- CÁLCULO DEL PARÁMETRO DE IMPACTO**
- 3.3.- CÁLCULO DEL POTENCIAL $V(R)$**

CONCLUSIONES

APÉNDICE A

APÉNDICE B

REFERENCIAS

*Ese largo e inveterado temor,
vuelto al fin sutil, clerical,
espiritual- se llama hoy ciencia.*

Nietzsche

INTRODUCCIÓN

El estudio de los efectos de las colisiones de partículas atómicas y los experimentos de dispersión de partículas alfa a través de hojas de oro delgadas, se inició poco después del descubrimiento del electrón. En esa época, 1910-1930, debido a la existencia de problemas a los que las teorías convencionales no daban soluciones satisfactorias (el efecto fotoeléctrico, el espectro del hidrógeno, la radiación de cuerpo negro, etc.), surge la llamada "mecánica cuántica". Con esta nueva y poderosa herramienta se interpretan una gran cantidad de problemas, entre los que se encuentran algunos de los que ocurren en una colisión entre partículas ionizadas y partículas neutras, ya sean átomos o moléculas. 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 compete entre sí simultáneamente, de tal manera que pueden haber diferentes canales para una misma reacción.

En este trabajo sólo nos ocuparemos de la dispersión elástica del ion de Ar^+ con Ar, 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 de dispersión elástica, se podrán hacer modelos teóricos más acabados de los fenómenos que ocurren, y lograr

una mejor comprensión del mundo físico y un desarrollo de una teoría cuántica completa cuyas aplicaciones sean muy variadas. Cabe decir que uno de los motivos que nos llevó a escoger el ion de Ar^+ como proyectil siendo un sistema de seis electrones en su última capa, es el de contribuir con resultados aplicables a sistemas atómicos más complejos. Además, actualmente este tipo de colisiones son fundamentales por sus aplicaciones no sólo en la física básica [1,2], sino también en la aeronomía [3], la física atmosférica [4] y la astrofísica [5, 6].

Dentro de esta última, por ejemplo, una de las principales aplicaciones de los procesos de dispersión elástica está encaminada a determinar potenciales de interacción de las partículas que colisionan. .

En este trabajo se estudia la dispersión elástica del ion Ar^+ en Ar , a energías de colisión de 3.0 a 4.0 keV y los objetivos son:

- 1) Proponer un método de inversión con el cual, a partir de los resultados experimentales de secciones eficaces de dispersión elástica se pueda obtener el potencial de interacción de las partículas que colisionan.
- 2) Aplicar el modelo antes desarrollado al sistema Ar^+ en Ar . A energías de colisión de 3.0 y 4.0 keV.
- 3) Comparar los resultados obtenidos con cálculos teóricos de curvas de energía potencial de los estados más bajos del ion molecular Ar_2^+ reportados en la literatura.

Para cumplir con estos objetivos, este trabajo se encuentra distribuido de la forma siguiente:

En el Capítulo I se plantean las bases teóricas de las aproximaciones clásicas y semi-clásicas de la teoría de dispersión. En el Capítulo II se presenta el método de inversión, con el que a partir de las secciones eficaces diferenciales de dispersión elástica en función del ángulo se puede obtener el potencial de interacción del sistema ion-átomo. En el Capítulo III, se aplica este método a los datos experimentales obtenidos en el Centro de Ciencias Físicas de la UNAM, para el sistema Ar^+ en Ar a las energías de colisión de 3.0 y 4.0 keV, así como su comparación con los cálculos teóricos de curvas de energía potencial de los estados más bajos del ion molecular Ar_2^+ .

Finalmente, se presentan las conclusiones de este trabajo.

- [1] S. Datz et al, Rev. Mod. Phys. 71, s223 (1999).
- [2] R.K. Janev, et al, Atomic and molecular processes in fusion edge plasma, New York, Plenum 1995.
- [3] G. Siscoe, Rev. Geophys. 33, 519 (1995).
- [4] E. Ehresmonn et al , J. Phys. B 29, 216 (1996).
- [5] J.S. Kaastra, Hot Universe, 188, 43 (1998).
- [6] C. Uberoi, Pramana-J. Phys. 55, 645 (2000)

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

CAPÍTULO I.- DISPERSIÓN ELÁSTICA DE IONES POR ÁTOMOS

En este capítulo se explorará la teoría de dispersión elástica de iones por átomos. Esta explicación será dada tomando en cuenta que la interacción entre dos átomos (o iones) A y B, que puede ser representada por un potencial central $W(R)$, donde $\mathbf{R} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$ es la posición del átomo A relativa a B. Este modelo puede ser aplicado para describir el movimiento relativo de A y B aproximadamente, incluso si la colisión es inelástica (captura, excitación, o ionización), dado que la energía de impacto es mayor en comparación con los cambios en la energía electrónica interna de los átomos. Este es el caso usual cuando la energía de impacto es del orden de o mayor que 100 eV.

1.1.- SISTEMAS DE REFERENCIA DE LABORATORIO Y CENTRO DE MASA.

Se puede definir el sistema de referencia del laboratorio, donde el átomo blanco B esta inicialmente en reposo y el proyectil A se mueve en la dirección paralela al eje Z con velocidad v_0 . En el sistema de referencia del laboratorio, el centro de masa de A y B se mueve con velocidad constante

$$V = \frac{M_A v_0}{M_A + M_B}, \quad (1.1)$$

Donde M_A y M_B son las masas de los iones A y B, respectivamente. La dinámica de la colisión entre A y B se expresa mejor (o más convenientemente), en el sistema de referencia del centro de masa, el sistema de referencia en el cual el centro de masa está en reposo. En el sistema de referencia del centro de masa el movimiento relativo de A y B puede ser descrito por un sistema equivalente de una partícula de masa μ , donde

$$\mu = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B}, \quad (1.2)$$

la cual es dispersada por el potencial $W(R)$. La masa μ se conoce como la masa reducida de A y B.

Para una colisión elástica los ángulos de dispersión θ en el sistema de centro de masa y θ_L en el sistema de laboratorio están relacionados cinemáticamente por la siguiente expresión:

$$\tan(\theta_L) = \frac{\text{sen}(\theta)}{\cos(\theta) + \tau} \quad (1.3)$$

$$\text{donde: } \tau = \frac{M_A}{M_B}$$

1.2.- POTENCIAL DE INTERACCIÓN ENTRE SISTEMAS ATÓMICOS.

La forma típica del potencial se muestra en la Fig. 1.1, para la interacción entre dos átomos esféricos simétricos en el estado base. A pequeñas distancias el potencial es fuertemente repulsivo, debido a la repulsión de Coulomb entre los núcleos. A grandes

distancias la interacción es atractiva y es debida a los momentos multipolares inducidos en cada átomo (o ion) por cada uno de los demás.

La barrera del pozo de potencial formada por la repulsión interna y la atracción externa varía grandemente entre diferentes sistemas atómicos, pero típicamente se encuentra entre 10^{-3} y 5 eV. La posición del punto mínimo del pozo también varía, pero no mucho, los valores típicos fluctúan entre 1 y 10 a.u.

La parte del potencial de largo alcance se calcula directamente de la teoría de perturbación a segundo orden [11].

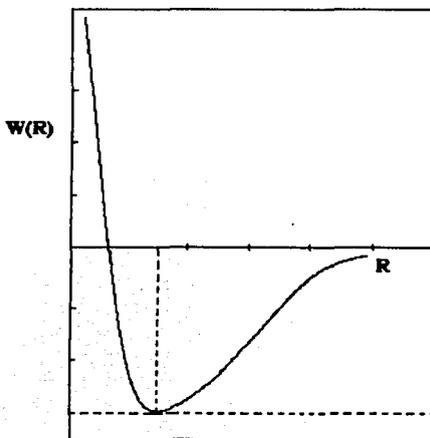


Fig. 1.1 Forma típica del potencial ion-átomo $W(R)$ [11]

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Los términos principales son de la forma:

(1) A y B átomos neutros

$$W(R) \sim -\frac{C_{vw}}{R^6} \quad (1.4)$$

(2) A un átomo y B un ion con carga q_B :

$$W(R) \sim -\frac{\alpha_A q_B^2}{R^4} \quad (1.5)$$

(3) A y B iones con cargas q_A y q_B respectivamente:

$$W(R) \sim \frac{\alpha_A q_B}{R} \quad (1.6)$$

Aquí C_{vw} es el coeficiente de Van der Waals y α_A es la polarización dipolar del átomo A. Ambos coeficientes pueden ser calculados o estimados.

Una forma semiempírica del potencial para la interacción entre dos átomos neutros incluyendo la atracción correcta de largo alcance es:

$$W(R) = f(R) e^{(-\beta R)} - \frac{C_{vw}}{R^6} \quad (1.7)$$

Donde β es una constante. La función $f(R)$ se escoge de tal manera que, para un radio pequeño R , $W(R) \approx \epsilon + Z_A Z_B / R$, donde ϵ es la energía apropiada del estado de átomo unido y $Z_A Z_B / R$ es la repulsión Coulombiana entre los núcleos.

Otra forma de potencial que ha sido empleada ampliamente es la del potencial de Lennard-Jones (n, m), definido como:

$$W(R) = \left[\frac{m \epsilon}{n - m} \right] \left[\left(\frac{R_0}{R} \right)^n - \frac{n \left(\frac{R_0}{R} \right)^m}{m} \right] \quad (1.8)$$

Donde $m = 6$ para sistemas átomo-átomo ó $m = 4$ para un sistema ion-átomo. Un valor típico para n es $n = 12$. Los parámetros ϵ y R_0 son la profundidad del pozo y la posición del mínimo, respectivamente.

Otro potencial utilizado es el de Buckingham para dos átomos neutros:

$$W(R) = \begin{cases} \infty & R < R_0 \\ \left[\frac{\epsilon}{B} \right] \left[\frac{6A e^{\left(-\frac{\gamma R}{R_0} \right)}}{\gamma} - \frac{R_0^6}{R^6} \right] & R > R_0 \end{cases} \quad (1.9)$$

Donde $A = e^\gamma$, $B = 1 - 6/\gamma$, y R_A es tal que $\max_{R > R_0} W(R) = W(R_0)$.

Estos potenciales son los que se usan con más frecuencia, muchos otros han sido propuestos y una lista de ellos ha sido reportada por Pauly [12].

1.3.- APROXIMACIÓN CLÁSICA.

La teoría cuántica es aplicable sobre un amplio intervalo de energía, donde es posible describir las colisiones elásticas de una colisión átomo-átomo por medio de la mecánica clásica, donde necesariamente se toman en cuenta efectos de interferencia cuántica.

Esto se obtiene debido a que, excepto en muy bajas energías, la longitud de onda λ asociada con el movimiento de los dos átomos es muy pequeña comparada con el tamaño de la región de interacción. En términos de la velocidad de incidencia, tenemos que (en unidades atómicas)

$$\lambda = \frac{2\pi}{\mu v_0} \quad (1.10)$$

La interacción entre los átomos, $W(R)$, varía ligeramente y sólo cambia a distancias del orden a_0 ($a_0 = 1$ a.u.). Se sigue que si $\lambda < l$ un paquete de ondas puede ser formado, el centro del cual seguirá una trayectoria clásica en el potencial $W(R)$. Debido a que el átomo más ligero es el hidrógeno, y la masa de un protón es $M_p = 1,836$ unidades atómicas, la masa reducida más pequeña es $\mu = 918$.

Tenemos que $\lambda < 1$ para velocidades mayores que $2\pi / 918$ a.u., que corresponde a $v_0 = 4.4 \times 10^{-6}$ m s⁻¹, ó una energía de 1.2 eV. Entonces se esperan condiciones clásicas aplicables a un sistema de masa reducida μ , cuando la energía E cumple la siguiente condición: $E \geq 1.2(M_p / 2\mu)$ eV.

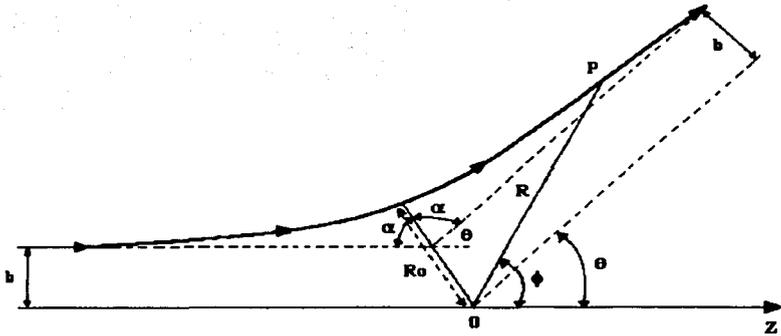


Fig. 1.2 La dispersión de una partícula en el campo de un potencial central cuyo origen es O , para el caso de una repulsión.

Para condiciones más lejanas, las cuales deben satisfacerse si la mecánica clásica se mantiene, la incertidumbre en el ángulo dentro del cual el átomo dispersado se deflecta, puede ser pequeña comparado con el ángulo de dispersión. Una trayectoria clásica particular definida por la velocidad inicial v_0 y un parámetro de impacto b , donde b es la distancia perpendicular entre el eje Z y una trayectoria recta, se ilustra en la Fig. 1.2, donde el origen de coordenadas O se toma como el centro de fuerza. Debido a que el potencial $W(R)$ es central, el momento angular L , donde $L = b\mu v_0$, se conserva y el movimiento es confinado a un plano, éste es el plano XZ .

Bajo las condiciones clásicas, la función de onda de la partícula dispersada se representa por un estrecho paquete de ondas de ancho Δx en la dirección X . La

correspondiente incertidumbre en la componente x del momento p_x es, debido al principio de incertidumbre de Heisenberg (en unidades atómicas)

$$\Delta x \Delta p_x \geq 1 \quad (1.11)$$

La incertidumbre Δb en el parámetro de impacto b debe ser del mismo orden que Δx , entonces:

$$\Delta b \approx 1 / \Delta p_x \quad (1.12)$$

La incertidumbre Δp_x en el momento transversal corresponde a una incertidumbre $\Delta \phi$ en la coordenada angular ϕ de la partícula, tal que

$$\Delta \phi \approx \Delta p_x / p = \frac{1}{p \Delta b} \quad (1.13)$$

donde $p = \mu v_0$. El ángulo de dispersión θ debe también ser incierto por $\Delta \phi$, y para θ se tiene la condición

$$\theta \gg \Delta \phi \quad (1.14)$$

la cual deberá satisfacerse. Debido a que se debe estar seguro que $b \gg \Delta b$, se tiene de (1.13) y (1.14) que

$$\theta \gg 1 / (p \Delta b) \gg \frac{1}{p b} \quad (1.15)$$

Se sigue que las condiciones clásicas se aplicarán cuando θ es mayor que un ángulo crítico θ_c donde

$$\theta_c = 1 / L, \quad (1.16)$$

aquí, L es el momento angular clásico, $L = b \mu v_0 = b p$.

De igual manera a velocidades térmicas ($v_0 \approx 10^5$ cm/s), los valores importantes de L pueden ser mayores que 10^3 a.u., correspondientes a un ángulo crítico del orden de

unos cuantos miliradianes. La fracción de partículas dispersadas dentro de los ángulos mayores a θ_c puede ser muy pequeña, debido a que a lo más, todas las dispersiones elásticas son confinadas en un cono estrecho sobre la dirección de incidencia para todas las energías mayores que la térmica.

De cualquier manera, en los experimentos actuales, las mediciones son usualmente confinadas a la región $\theta > \theta_c$, para las cuales una descripción clásica tiene buenas bases. Casos excepcionales se obtienen cuando más de una trayectoria clásica corresponde a un ángulo de dispersión.

Cuando esto sucede, una teoría semi-clásica puede ser desarrollada para permitir los efectos de interferencias cuánticas que ocurren.

1.4.- TRAYECTORIA CLÁSICA Y FUNCIÓN DE DEFLEXIÓN.

Para determinar la trayectoria clásica en el potencial central $W(R)$, se introducen las coordenadas polares (R, ϕ)

$$R^2 = X^2 + Z^2 \quad (1.17)$$

$$\cos(\phi) = Z / R,$$

Como se muestra en la Fig. 1.2. La componente de la velocidad del átomo perpendicular a \mathbf{R} es $R(d\phi/dt)$ entonces el momento angular con respecto a la fuerza central es:

$$L = \mu R^2(d\phi/dt), \quad (1.18)$$

la cual es constante a lo largo de una trayectoria dada. Entonces

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi = \frac{L}{\mu R^2} = \frac{v_0 b}{R^2} \quad (1.19)$$

La energía total del sistema E , es la suma de la energía cinética y potencial y también es constante, siendo igual a $\mu v_0^2/2$: $E = \frac{1}{2} \mu v_0^2$

$$\begin{aligned} E = \mu v_0^2/2 &= \frac{1}{2} \mu \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} R \right)^2 + R^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} \phi \right)^2 \right) + W(R) \\ &= \frac{1}{2} \mu \left(\left(\frac{\partial}{\partial t} R \right)^2 + \frac{v_0^2 b^2}{R^2} \right) + W(R) \end{aligned} \quad (1.20)$$

Esta relación da una expresión para la velocidad radial,

$$\frac{\partial}{\partial t} R = \pm \sqrt{\left[\frac{2 \{E - W(R)\}}{\mu} - \frac{v_0^2 b^2}{R^2} \right]}, \quad (1.21)$$

para la cual la ecuación de la trayectoria puede encontrarse:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial R} \phi = \frac{\frac{\partial}{\partial t} \phi}{\frac{\partial}{\partial t} R} &= \pm \frac{v_0 b}{R^2 \sqrt{\left[\frac{2 \{E - W(R)\}}{\mu} - \frac{v_0^2 b^2}{R^2} \right]}} = \\ &\pm \frac{b}{R^2 \sqrt{\left[1 - \frac{W(R)}{E} - \frac{b^2}{R^2} \right]}} \end{aligned} \quad (1.22)$$

En el punto R_0 de mayor aproximación $\frac{\partial}{\partial t} R = 0$; entonces, para (1.21), R_0 es la raíz positiva de la ecuación

$$f(R) = 0 \quad (1.23)$$

donde

$$f(R) = \sqrt{\left[1 - \frac{W(R)}{E} - \frac{b^2}{R^2}\right]}. \quad (1.24)$$

La trayectoria es claramente simétrica respecto al punto de mayor aproximación. Entonces 2α es el cambio total en el ángulo ϕ durante de colisión. α puede ser obtenido al integrar (1.22) a lo largo de la trayectoria desde $R = R_0$ a $R = \infty$ entonces:

$$\alpha = b \int_{R_0}^{\infty} \frac{1}{[R^2 f(R)]} dR. \quad (1.25)$$

La función clásica de deflexión θ se define como

$$\theta = \pi - 2\alpha \quad (1.26)$$

para una energía E dada hay un valor de θ para cada valor de b , esto es:

$$\theta = \theta(b, E) \quad (1.27)$$

De la relación inversa, pueden haber varios valores de b que corresponden a un valor dado de θ .

1.5.- SECCIÓN EFICAZ

Si se considera la dispersión de un haz uniforme de átomos por un centro de fuerza, la intensidad del haz de dispersión será simétricamente axial con respecto al eje Z y dependerá sólo del ángulo de dispersión θ , que se define también para $0 \leq \theta \leq \pi$. Para obtener θ de la función de deflexión, primero se tiene la cantidad:

$$\beta = |\Theta| - 2\pi n, \quad (1.28)$$

De la ecuación (1.27), átomos de energía E con parámetros de impacto entre b y $b + db$ son dispersados entre los ángulos θ y $\theta + d\theta$. La sección eficaz diferencial $\sigma(\theta)$ se define como el número de átomos dispersados en la dirección θ entre un elemento de ángulo sólido $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, por unidad de tiempo, por unidad de flujo incidente.

Si el flujo incidente es F , el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo que tienen parámetros de impacto entre b y $b + db$ es $F(2\pi b db)$, y si solamente un valor de b corresponde al ángulo de dispersión θ , se sigue que:

$$\sigma(\theta) = \left| \frac{F(2\pi b db)}{F d\Omega} \right| = \frac{b \left(\frac{\partial}{\partial \theta} b \right)}{\sin(\theta)} \quad (1.29)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Para varios valores de b , tales como b_1, b_2, b_3, \dots , correspondientes al ángulo de dispersión θ , la sección eficaz diferencial es la suma de las contribuciones para cada una de las trayectorias:

$$\sigma(\theta) = \sum_i \frac{b_i \left(\frac{\partial}{\partial \Theta} b_i \right)}{\text{sen}(\theta)} \quad (1.30)$$

En general un potencial repulsivo monótono produce una función de deflexión positiva Θ decreciendo desde $\Theta = \pi$ en $b = 0$ a $\Theta = 0$ en el límite $b \rightarrow \infty$. Un potencial atractivo monótono tiene una función de deflexión negativa para $\Theta = 0$ en $b = 0$ y $\Theta \rightarrow 0$ cuando $b \rightarrow \infty$.

1.6.- APROXIMACIÓN SEMICLÁSICA.

Un tratamiento completo de mecánica cuántica sobre la dispersión elástica en un potencial central $W(R)$ inicia desde la ecuación independiente del tiempo de Schrödinger (en el sistema coordenado del centro de masa)

$$\left[-\nabla_{\mathbf{R}}^2 / 2\mu + W(\mathbf{R}) - E \right] \Psi(\mathbf{R}) = 0, \quad (1.31)$$

la cual tiene que resolverse con la condición de frontera

$$\Psi(R)_{R \rightarrow \infty} \sim e^{(ikz)} + \frac{f(\theta) e^{(ikR)}}{R} \quad (1.32)$$

donde $E = \mu v_0^2 / 2$ y $k = \mu v_0$.

$$E = \frac{1}{2} \mu v_0^2$$

El primer término en (1.32) representa una onda plana incidente paralela al eje Z y el segundo representa las ondas dispersadas hacia afuera. La amplitud de la onda de dispersión, $f(\theta)$, determina la sección eficaz diferencial con la relación:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (1.33)$$

II PROBLEMA DE INVERSIÓN

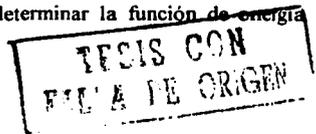
Las funciones de energía potencial entre iones y átomos a energías de colisión del orden de kiloVolts son de interés básico, debido a que ésta determina su dispersión. La fuerza de repulsión de Coulomb entre los núcleos es modificada por un factor debido al apantallamiento electrónico del núcleo. Varias funciones han sido propuestas para esta energía potencial, incluyendo un apantallamiento exponencial [1] de la función de Coulomb y una función derivada por Firsov [2] utilizando un modelo estadístico.

La función de energía potencial puede ser determinada de los datos experimentales de varias maneras:

(1) Los valores medidos de la sección eficaz diferencial pueden ser comparados directamente con valores calculados de funciones de energía potencial consideradas como arbitrarias. Por ejemplo, Fuls et al [3] compararon sus datos experimentales de sección eficaz diferencial para la colisión ion-átomo de gases nobles con los cálculos de Everhart et al[4], quienes consideraron un apantallamiento exponencial de energía potencial de Coulomb. La comparación fue buena, pero no exacta.

(2) El parámetro de impacto puede ser determinado para ángulos seleccionados y para varias energías usando métodos desarrollados por Amdur [5] y Cramer [6]. Ellos consideran una ley de potencias de la energía potencial y el correspondiente parámetro de impacto depende del ajuste de ese potencial a los datos. El intervalo de energía estudiado por Amdur [5] y Cramer [6] en su trabajo experimental fue de 4 eV a 2000 eV, el cual corresponde a separaciones interatómicas grandes.

(3) En este trabajo se aplicará un método que es semejante al método inverso de la parte (1). Los datos de dispersión son usados para determinar la función de energía



potencial. El primer paso es usar los datos de la sección eficaz diferencial para encontrar la dependencia angular con el parámetro de impacto. El segundo paso es encontrar la energía potencial como una función de la distancia de separación. Este segundo paso es por mucho el más difícil. Fórmulas desarrolladas por Hoyt [7] requieren usar datos tomados a varias energías de colisión para determinar la función de energía potencial deseada. Firsov [8] desarrolló un método que determina la función de energía potencial únicamente de datos tomados a una energía de colisión incidente.

Recientemente experimentos desarrollados en el Centro de Ciencias Físicas de la UNAM, han acumulado datos absolutos de sección eficaz diferencial de dispersión de iones por átomos, a los cuales se puede aplicar este método. La energía potencial para iones incidentes de Ar^+ en átomos de Ar es determinada en este trabajo para datos tomados a las energías de colisión de 3 y 4 keV en el sistema de laboratorio.

2.1.- TEORÍA DEL PROCESO DE INVERSIÓN.

La sección eficaz diferencial $\sigma(\theta)$ y el ángulo de dispersión θ , ambos en el sistema de centro de masa, son obtenidos transformando los valores experimentales $\sigma(\theta)$ y θ , dados en el sistema de laboratorio. El parámetro de impacto b se relaciona a $\sigma(\theta)$ y θ , utilizando la ecuación (1.24):

$$2 \pi \sigma(\theta) \sin \theta d\theta = -2 \pi b db, \quad (2.1)$$

y este es integrado para obtener

$$b^2 = 2 \int_{\theta_1}^{\pi} \sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta \quad (2.2)$$

De la teoría clásica de dispersión, la cual es válida para el presente problema, el ángulo θ se relaciona con el parámetro de impacto b y la función de energía potencial de interacción $V(r)$ por medio de la ecuación:

$$\theta = \pi - \int_{r_0}^{\infty} \frac{2b}{r \sqrt{\left[\left(1 - \frac{V(r)}{E} \right) r^2 - b^2 \right]}} dr \quad (2.3)$$

donde E es la energía cinética de colisión en el sistema de centro de masa y r_0 es la distancia de máxima aproximación. Esta integración no puede llevarse a cabo directamente debido al desconocimiento de la cantidad $V(r)$ que está en el integrando.

Considerando

$$\psi = \left[1 - \frac{V(r)}{E} \right] r^2 \quad (2.4)$$

la Ecuación (2.3) se puede escribir como:

$$\theta = \pi - \int_{b^2}^{\infty} \frac{2b \left(\frac{\partial}{\partial \psi} \ln(r) \right)}{\sqrt{\psi - b^2}} d\psi \quad (2.5)$$

donde b^2 es el valor de ψ en $r = r_0$. Dado que

$$\int_{b^2}^{\infty} \frac{b \left(\frac{d}{d\psi} \ln(\psi) \right)}{\sqrt{\psi - b^2}} d\psi = \pi \quad (2.6)$$

es posible reorganizar la ecuación (2.5) en la forma:

$$\theta(b) = \int_{b^2}^{\infty} \frac{b \left(\frac{\partial}{\partial \psi_1} \ln \left(\frac{\psi_1}{r^2} \right) \right)}{\sqrt{\psi_1 - b^2}} d\psi_1 \quad (2.7)$$

El símbolo ψ_1 es usado aquí en lugar de ψ para distinguirlo de ψ , el cual aparece en el límite de integración en la siguiente ecuación. La ecuación (2.7) es multiplicada por $db/(b^2 - \psi)^{1/2}$ y la integral sobre b desde $\sqrt{\psi}$ a ∞ :

$$\int_{\sqrt{\psi}}^{\infty} \frac{\theta(b)}{\sqrt{b^2 - \psi}} db = \int_{\sqrt{\psi}}^{\infty} b db \int_{b^2}^{\psi_1} \frac{\frac{\partial}{\partial \psi_1} \ln\left(\frac{\psi_1}{r^2}\right)}{[\sqrt{b^2 - \psi} \sqrt{\psi_1 - b^2}]} d\psi_1 \quad (2.8)$$

La integral en la parte derecha es transformada y escrita como:

$$\int_{\sqrt{\psi}}^{\infty} \frac{\theta(b)}{\sqrt{b^2 - \psi}} db = \frac{1}{2} \int_{\psi}^{\psi_1} \frac{\partial}{\partial \psi_1} \ln\left(\frac{\psi_1}{r^2}\right) d\psi_1 \int_{\psi}^{\psi_1} \frac{1}{[\sqrt{q - \psi} \sqrt{\psi_1 - q}]} dq = \frac{1}{2} \pi \ln\left(\frac{r^2}{\psi}\right) \quad (2.9)$$

con $q = b^2$,

Cuando esta integral se resuelve para r , resulta que:

$$r(\psi) = \sqrt{\psi} e^{\left(\frac{1}{\pi} \int_{\sqrt{\psi}}^{\infty} \frac{\theta(b)}{\sqrt{b^2 - \psi}} db\right)} \quad (2.10)$$

Conociendo $r(\psi)$ y usando la Ecuación (2.4) es posible determinar $V(r)$. Se probó la viabilidad de este método aplicándolo a la *sección eficaz diferencial de Rutherford*, para la cual se obtuvo como resultado la función de energía potencial de Coulomb. Usando este procedimiento también se probó que insertando los valores numéricos de la sección eficaz diferencial de Firsov de la referencia [2], nos lleva hacia la correspondiente función de energía potencial de apantallamiento de Coulomb.

2.2.- PROCEDIMIENTO.

Como ejemplo del procedimiento, vamos a considerar el caso de Ar^+ en Ar a 25 kev. La Fig. 2.1(a) muestra la sección eficaz diferencial en función del ángulo de dispersión en el sistema de laboratorio tomada de la Fig. 15 de la referencia [3] y la Fig. 7(d) de la referencia [10]. Las líneas sólidas en la Fig. 2.1(b) muestran estos mismos datos transformados al sistema del centro de masa y multiplicados por el factor $\text{sen}(\theta)$.

2.2.1.- DETERMINACIÓN DEL PARÁMETRO DE IMPACTO.

La integración numérica de la curva en la Fig. 2.1(b) puede llevarse a cabo como se indica en la Ecuación (2.2). Esta integral tiene un límite superior de 180° como se indica en la línea punteada. El área sombreada a la derecha de cualquier ángulo particular θ_i , es igual a $b^2/2$. Una porción de esta área cae sobre la línea punteada de la curva sólida obtenida de los datos. Cuando θ_i es un ángulo pequeño, esta área indeterminada es muy pequeña como se observa en las curvas $\times 1$ y $\times 10$, y la determinación de b es adecuada. Sin embargo, cuando θ_i es un ángulo moderadamente grande, como en el caso mostrado, el área indeterminada puede llegar a ser una importante fracción del total.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

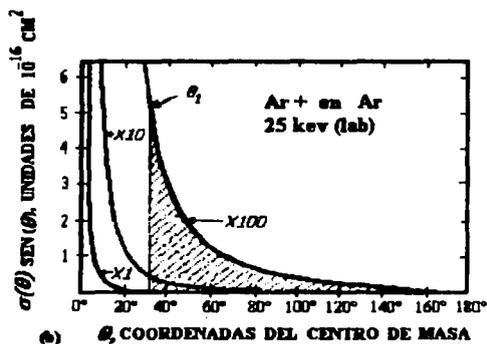
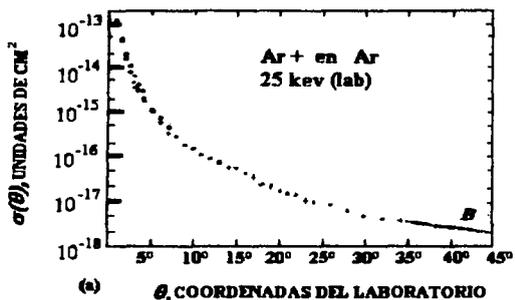


Fig. 2.1. (a) Datos de la sección eficaz diferencial en coordenadas del laboratorio para colisiones de 25 kev de Ar^+ sobre Ar; (b) Los datos de arriba están graficados en las coordenadas del centro de masa, multiplicando cada sección eficaz por el seno del ángulo. El área sombreada a la derecha de cada ángulo particular θ_i es igual a la mitad del cuadrado del parámetro de impacto correspondiente.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

El resultado de esta integración se muestra como la línea sólida en la Fig. 2.2(a) la cual grafica θ en función de b . Es interesante comparar este resultado con el cálculo de Firsov (línea punteada).

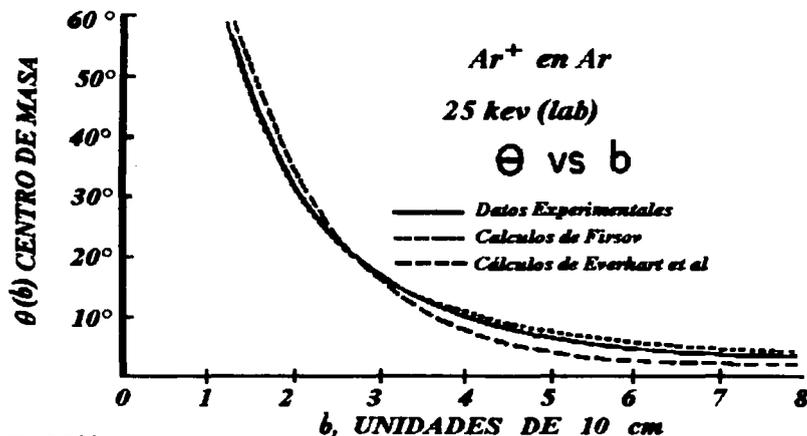


Fig. 2.2 (a)

Fig. 2.2(a). Se grafica el ángulo de dispersión en función del parámetro de impacto para datos de 25-keV de Ar⁺ sobre Ar (línea sólida), (línea punteada) cálculos de Firsov, y cálculos de Everhart *et al.* [9] (línea sombreada).

2.2.2.- DETERMINACIÓN DE $V(r)$.

Para poder realizar la integración de la ecuación 2.10 a partir de los datos de las curvas experimentales de la gráfica 2.2(a), se requiere definir las siguientes cantidades adimensionales:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$u = a/b \quad \text{y} \quad s = a/\sqrt{u} \quad (2.11)$$

donde la longitud a es igual a $Z_1 Z_2 e^2 / E$, $Z_1 e$ y $Z_2 e$ son las cargas nucleares de los iones y átomos involucrados en la colisión.

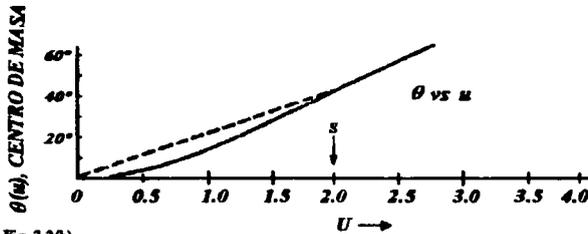


Fig. 2.2(b)

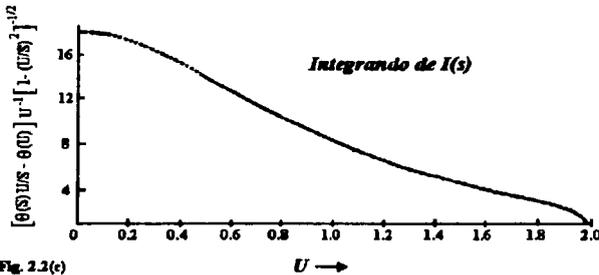


Fig. 2.2(c)

Fig. 2.2(b) Se grafica el ángulo de dispersión θ en función de u la cual es recíproca al parámetro de impacto (línea sólida). La línea sombreada recta se dibuja para $\theta(s)$ donde s es un valor particular de u ; **Fig. 2.2(c)** el integrando de $I_1(s)$ en la Ecuación (2.13) es graficada en función de u .

Por lo que la ecuación (2.10) se convierte en:

$$\frac{r}{a} = \frac{e^{\left(\frac{I}{\pi}\right)}}{s}$$

donde

$$I = \int_0^r \frac{\theta(u)}{u \sqrt{1 - \frac{u^2}{s^2}}} du \quad (2.12)$$

y escribiendo la ecuación (2.12) en la forma:

$$I = \int_0^r \frac{\theta(s)}{s \sqrt{1 - \frac{u^2}{s^2}}} du - \int_0^r \frac{\left[\frac{\theta(s)u}{s} - \theta(u) \right]}{u \sqrt{1 - \frac{u^2}{s^2}}} du = \frac{1}{2} \theta(s) \pi - I_1(s) \quad (2.13)$$

por lo que el siguiente paso es graficar θ en función de u como se observa en la línea sólida de la Fig. 2.2(b). Esto se hace para realizar la integral (2.13) ya que u es recíproca a a . Es necesario extender la curva hasta $u = 0$ como se indica en la línea punteada en la Fig. 2.2(b). Esto corresponde a la ausencia de datos experimentales de la sección eficaz diferencial entre 0° y 1° (en el sistema de laboratorio), y esto conducirá a que las curvas $rV(r)$ obtenidas no son muy precisas. Se escoge una curva particular u , tal como s , entonces se dibuja la línea recta $\theta(s)(u/s)$ como se muestra en la línea de guiones de la Fig. 2.2(b). La diferencia entre esta línea y la curva es el numerador del integrando de $I_1(s)$.

El integrando total de $I_1(s)$ (para un valor particular escogido de s) se muestra en la Fig. 2.2(c). Cerca de $u = 0$ la cantidad $\theta(u)$ se aproxima a cero y es mucho menor que $\theta(s)/(u \cdot s)$ que también se aproxima a cero. El integrando $I_1(s)$ en la Ecuación (2.13) se iguala a $\theta(s)/s$ en $u = 0$. En el límite superior el integrando es cero. Una curva similar a la de la Fig. 2.2(c) es integrada numéricamente para cada uno de los diferentes valores de s . Los valores resultantes de $I_1(s)$ son substituidos en las ecuaciones (2.13) y (2.12) para determinar r/a para cada valor de s .

Valores correspondientes de r/a y s se substituyen entonces en:

$$V(r) = E[1 - (1/s)^2(a/r)^2], \quad (2.14)$$

la cual se obtiene por combinación de las ecuaciones (2.4) y (2.11). Por lo que el resultado de V es obtenido como una función de r .

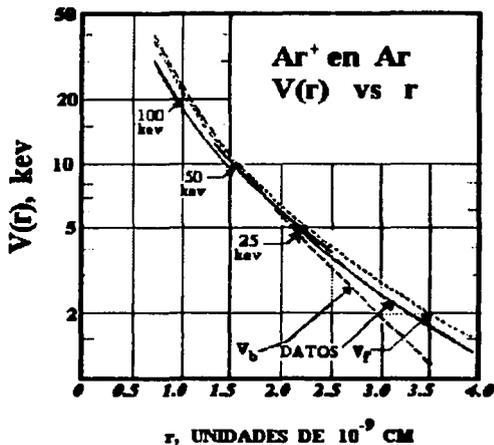


Fig. 2.3 La energía potencial $V(r)$ es dibujada como una función de la separación entre el ion Ar^+ y el átomo Ar . Las tres líneas sólidas son calculadas de los datos experimentales tomados a las energías de colisión de 100, 50, y 25 keV. La línea punteada es la función de energía potencial derivada por Firsov basada en un modelo estadístico, y la línea de guiones es la función de energía potencial de apantallamiento exponencial de Coulomb.

III.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

Las figuras 3.1.a y 3.1.b muestran las distribuciones angulares en función del ángulo de dispersión en el sistema de coordenadas del sistema del centro de masa (CM) a energías de colisión de 3.0 y 4.0 keV, tomados de los datos experimentales de *Martínez et al* [20].

3.1.- CÁLCULO DEL PARÁMETRO DE IMPACTO.

La evaluación del parámetro de impacto (b) se realiza por medio de la ecuación (2.2) definida en el capítulo II, esto es:

$$b^2 = 2 \int_{\theta_1}^{\pi} \sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta \quad (3.1)$$

Esta integral tiene un límite superior de 180° y por eso es necesario hacer una extensión razonable de los datos a 180° . El área sombreada a la derecha de cualquier ángulo particular θ_1 , es igual a $b^2/2$. Una porción de esta área cae bajo la línea punteada mas allá de la curva sólida obtenida de los datos experimentales. Cuando θ_1 es un ángulo muy pequeño, este error en el área es muy pequeño, se encontró que esta contribución es menor que el 5%.

La extensión fue realizada ajustando por mínimos cuadrados los datos experimentales a la función c/X .

Los resultados de esta integración se muestran en la Fig. 3.2 en la cual se grafica el ángulo de dispersión (Θ) como función del parámetro de impacto (b).

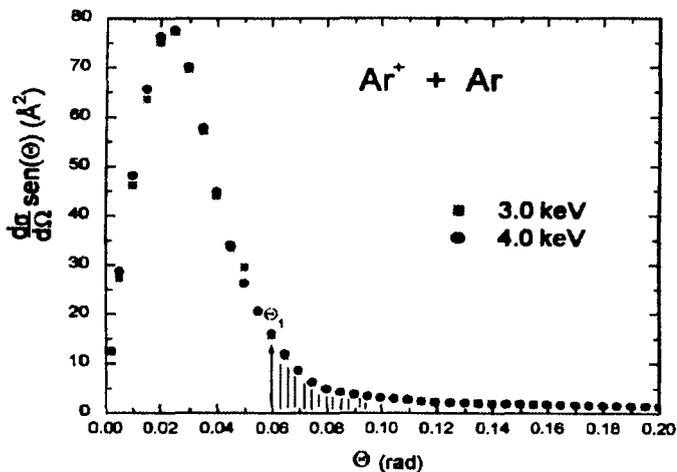


Fig. 3.1. Sección eficaz diferencial en el sistema Centro de Masa para iones de Ar^+ a energías de 3.0 y 4.0 keV en átomos de Ar. Cada sección eficaz diferencial fue multiplicada por el seno del ángulo de dispersión.

3.2.- INTRODUCCIÓN DE VARIABLES ADIMENSIONALES.

Introduciendo la cantidad adimensional

$$u = \frac{Z_i Z_p}{Eb} \quad (3.2)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

donde Z_t y Z_p son los números atómicos del blanco y proyectil respectivamente, y E es la energía de impacto en el CM.

La Fig. 3.3 muestra la gráfica del ángulo de dispersión (Θ) en función de la variable (u).

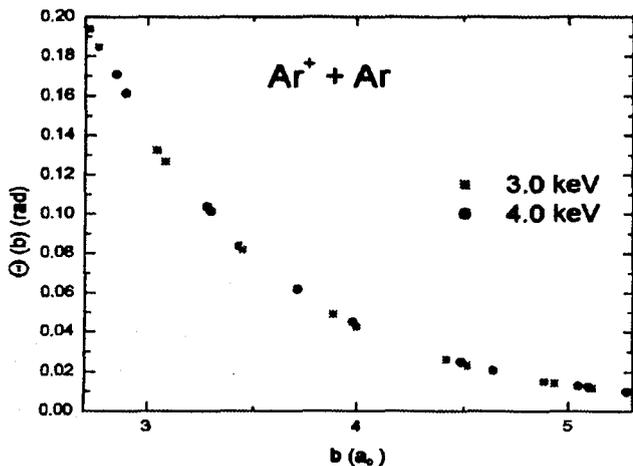


Fig. 3.2. El ángulo de dispersión (Θ), en función del parámetro de impacto " b ".

Para un valor particular de " u ", tal como " s ", se puede calcular la separación internuclear " r ", por medio de la ecuación

$$\frac{r}{a} = \frac{e \left(\frac{1}{\pi}\right)}{s} \quad (3.3)$$

con

$$I = \int_0^s \frac{\theta(u)}{u \sqrt{1 - \frac{u^2}{s^2}}} du \quad (3.4)$$

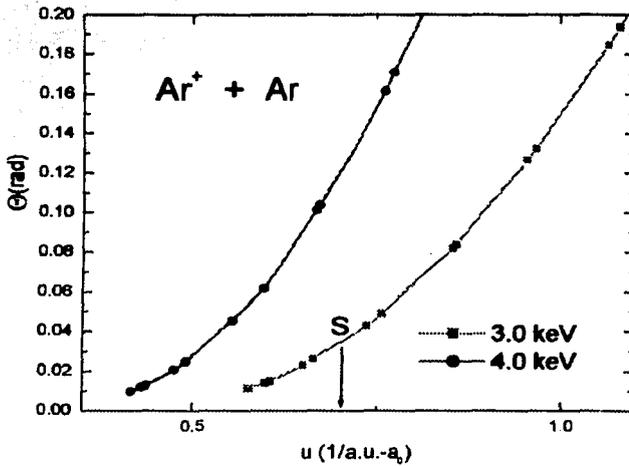


Fig. 3.3.- El ángulo de dispersión (Θ) como función de la variable adimensional " u ".

3.3.- CÁLCULO DEL POTENCIAL V(R)

Para cada valor de "s", se encuentra "r" por integración numérica de la ecuación anterior, determinándose así, los valores de "s" y "r". Por lo que la energía potencial se puede calcular usando

$$V(r) = E[1 - (1/s)^2(\alpha/r)^2], \quad (3.5)$$

Antes de mostrar y comparar los resultados obtenidos, es importante mencionar que una determinación precisa de las curvas de energía potencial de iones moleculares de gases raros es importante por varias razones. Primero, esta determinación puede ayudar a asignar el espectro de Rydberg y así, contribuir a un mejor entendimiento de las transiciones observadas en los láseres [M. Krauss and F.H. Mies, en Excimer lasers, Topics in Applied Physics, Ed. By Ch. K. Rhodes (Springer, Berlin, 1984), Vol. 30]. Segundo, los iones de moléculas de gases raros representan sistemas modelo para estudiar interacciones ion-átomo. Curvas de energía potencial detalladas pueden ser usadas, por ejemplo, para analizar procesos de colisión ion-átomo [E. J. Mansky and M.J. Flannery, *J. Chem. Phys.* 99, 1962 (1993)]. Finalmente, las curvas de potencial de moléculas de gases raros, y en particular la del estado base del estado $A^2\Sigma^+_{1/2u}$, son usadas frecuentemente para predecir el comportamiento de clusters muy grandes ionizados.

Varios cálculos han sido desarrollados para estudiar las curvas de energía potencial de los estados más bajos del ion molecular Ar_2^+ . Por ejemplo, Gianturco y Lara-Castells utilizando los modelos de funcionales de densidad investigaron la estructura y anisotropía de los clusters iónicos de argón. Chen et al [28] caracterizaron los iones

biatómicos homo-nucleares de gases raros por medio de curvas de energía potencial de Morse semi-empíricas calculadas sobre una base de datos experimentales.

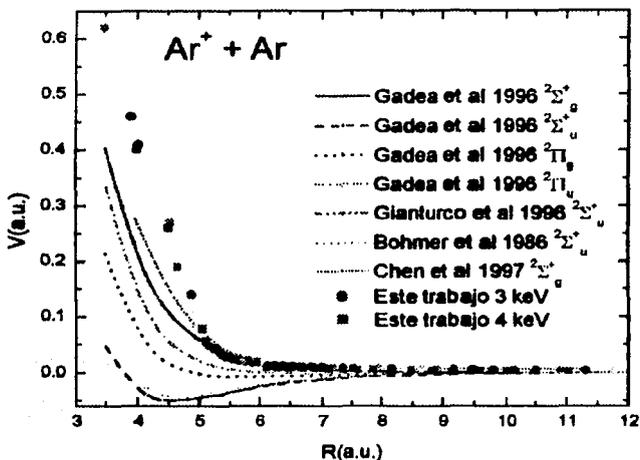


Fig. 3.4. Curvas de energía potencial de los estados más bajos del sistema Ar_2^+ .

Mientras que Bohmer et al, aplicando un extenso cálculo de interacción de configuraciones obtienen las curvas de potencial de los estados más bajos del ion molecular Ar_2^+ . Posteriormente, Gadea y Paidarova desarrollaron un cálculo ab-initio de los iones moleculares Ar_2^+ , He_2^+ y He_3^+ , tomando en cuenta un número de configuraciones muy grande. Con ello calculan varios estados electrónicos y momentos de transición para estudios espectroscópicos y para la modelación de clusters muy grandes de gases raros.

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

Estos clusters de iones de gases raros son de particular interés dado que pueden ser fácilmente producidos, seleccionados, excitados y analizados. Sus propiedades dinámicas y electrónicas pueden así ser probadas no sólo para el estado base, sino también para los estados excitados.

Debido a la necesidad de descripciones precisas de sus propiedades electrónicas: estructura, superficies de energía potencial y propiedades espectroscópicas, este problema se plantea y se presenta en este trabajo.

La Fig. 3.4 muestra las curvas de energía potencial a energías de colisión de 3.0 y 4.0 keV, junto con cálculos teóricos previos de los estados más bajos del sistema Ar_2^+ .

Se puede observar en la Figura 3.4 los cálculos del estado base $^2\Sigma_u^+$ y los estados excitados $^2\Sigma_g^+$, $^2\Pi_g$ y $^2\Pi_u$ más bajos del ion molecular Ar_2^+ , realizados por diferentes autores. Se aprecia que las diferentes aproximaciones teóricas del estado base presentan un buen acuerdo entre ellas en casi todo el intervalo de valores de separaciones inter-nucleares, sólo en el intervalo donde se encuentra el pozo de potencial se puede observar una ligera diferencias entre ellos. Para los estados excitados $^2\Pi_g$ y $^2\Pi_u$ del ion molecular Ar_2^+ , sólo Gadea et al [26] han realizado aproximaciones de ellos y se puede observar que son estados puramente repulsivos. Finalmente el estado excitado $^2\Sigma_g^+$ ha sido estudiado por Gadea et al [26] y Chen et al [28], mostrando un excelente acuerdo para $r > 7$ a.u., mientras que para $r < 7$ u.a. los dos cálculos empiezan a tener serias discrepancias entre ellos, este estado es completamente repulsivo en todo el intervalo de separaciones inter-nucleares, siendo la curva de potencial de los cálculos de Chen et al la más repulsiva de las dos.

Como se mencionó anteriormente, los iones de moléculas de gases raros representan sistemas modelo para estudiar interacciones ion-átomo y al revés, el análisis de procesos de colisión ion-átomo, puede llevar a obtener curvas de energía potencial detalladas que pueden ser usadas para probar nuevas y más sofisticadas aproximaciones. Como prueba de ello, la Figura 3.4 muestra la comparación de la curva de energía potencial obtenida en este trabajo con las diferentes aproximaciones encontradas en la literatura del cálculo de la curva de energía potencial del ion molecular Ar_2^+ . Se encuentra que los presentes resultados de la energía potencial de interacción del sistema de colisión $Ar^+ + Ar$, tiene un buen acuerdo con los cálculos a $R > 5 a_0$ con los cálculos de Gadea et al [26], mientras que para $R < 5 a_0$ la diferencia entre ellos empieza a ser más grande conforme “R” decrece. El acuerdo entre los presentes resultados y los de Chen et al [28] también es excelente para $R > 6 a.u.$, aunque para $5 < R < 6 a.u.$ los presentes resultados se encuentran por debajo de sus cálculos y para $R < 5 a.u.$ las diferencias empiezan a ser considerables.

Aunque la diferencia existe, la presente curva de energía potencial es cercana a la curva de Gadea et al [26] y Chen et al [28] para el estado $^2\Sigma_g^+$.

El desacuerdo de los presentes resultados con las aproximaciones teóricas se pueden deber a dos tipos de errores experimentales:

1. Un error llamado “factor de escala” el cual esta involucrado en la determinación de las secciones eficaces diferenciales absolutas. Este error es en la determinación de la medida de la presión del gas blanco, energía del haz incidente, sensibilidad del detector y las dimensiones del ángulo sólido afectarán todos los puntos de los datos experimentales. La importancia de este factor de escala puede verse del

siguiente ejemplo particular: un incremento arbitrario del 14% en los datos de la sección eficaz diferencial es suficiente para incrementar la curva de energía potencial en un 30%. Tal error debido al “factor de escala” está dentro del posible error experimental.

2. Un segundo error experimental podría ser debido a que como la corriente de partículas dispersadas es extremadamente pequeña y difícil de medir a ángulos grandes, esto se ve reflejado en la dispersión de los datos a distancias inter-nucleares pequeñas y esto puede explicar las diferencias entre las curvas de energía potencial del presente trabajo y las diferentes aproximaciones teóricas.

Por otro lado, los errores debidos a las diferentes aproximaciones realizadas en el modelo, pueden ser las siguientes:

1. Un error es que dado que el intervalo angular observado es pequeño, fue necesario realizar una extensión razonable de los datos a 180° . Aunque la extrapolación usada fue razonable y suave, tal vez no fue lo suficientemente buena. Con lo que es deseable que un mejor método experimental y teórico sean llevados a cabo, para un mejor entendimiento de las curvas de energía potencial.
2. Otra extrapolación fue necesaria para determinar el potencial, debido a la ausencia de datos experimentales entre 0° y 1° . Aunque esta aproximación sólo afecta los resultados un 5%, pero sumado a todos los anteriores puede ser significativo.

CONCLUSIONES

Analizando los datos obtenidos en el Centro de Ciencias Físicas (UNAM) se concluye lo siguiente:

- a) A partir de datos experimentales, fue posible evaluar la curva de energía potencial del sistema Ar^+ en Ar.
- b) La forma de la curva de energía potencial calculada está en un buen acuerdo con cálculos teóricos de curvas de energía potencial de los estados más bajos del ion molecular Ar_2^+ , en particular se encontró un buen acuerdo con los datos de Gadea *et al* [26] y Chen *et al* [28] para el estado $^2\Sigma_g^+$.
- c) A $r < 6.5a_0$ los presentes resultados muestran discrepancias con los cálculos teóricos. Las posibles razones de estas discrepancias pueden ser las siguientes:

(1) La energía potencial puede ser dependiente de la velocidad para algún intervalo de la separación internuclear. En este intervalo de energía la velocidad del ion incidente es comparable a la velocidad de los electrones emitidos por cada átomo. Los electrones tienen más tiempo para ajustarse ellos mismos cuasi-adiabáticamente en las colisiones de 4 keV de lo que ellos lo hacen, por ejemplo, en las colisiones de 25 keV, por lo que la energía potencial puede ser diferente en estos dos casos a la misma distancia interatómica.

(2) La teoría clásica usada en este trabajo para obtener $V(r)$ de $\sigma(\theta)$, supone colisiones elásticas, y es válida en un intervalo en que la energía inelástica transferida en el proceso de colisión es muy pequeña en comparación con la energía cinética incidente. Tales efectos inelásticos podrían causar desacuerdos entre las curvas tomadas a diferentes energías.

Se encuentra que los presentes resultados de la energía potencial de interacción del sistema de colisión $Ar^+ + Ar$, tiene un excelente acuerdo con los cálculos a $R > 5a_0$, mientras que para $R < 5a_0$ la diferencia entre ellos empieza a ser mas grande conforme "R" decrece. Aunque la diferencia existe, la presente curva de energía potencial es cercana a la curva de Gadea et al [26] y Chen et al [28] para el estado $^2\Sigma_g^+$.

APÉNDICE A

En el Capítulo 1, se consideró la dispersión elástica de un átomo A de masa M_A , por un átomo blanco B de masa M_B . El *sistema de laboratorio* es el marco de referencia en el cual el átomo blanco B está en reposo *antes* de la colisión, mientras el *sistema de centro de masa* es el marco de referencia en el cual el centro de masa de A y B está en reposo durante la colisión.

En el sistema del centro de masa, el proyectil A y el blanco B se mueven con respecto al centro de masa con momento igual y opuesto, $P_A = -P_B = P$, donde P es el momento relativo el cual, antes de la colisión, será tomado paralelo al eje Z, si R_A y R_B son los vectores de posición de A y B con respecto al centro de masa como origen, y R es el vector de posición de A con respecto de B, $R = R_A - R_B$, y se tiene

$$R_A = \frac{M_B R}{M_A + M_B} \qquad R_B = \frac{M_A R}{M_A + M_B} \qquad (\text{A.1})$$

Dado que:

$$P_A = M_A \left(\frac{\partial}{\partial t} R_A \right) \qquad P_B = M_B \left(\frac{\partial}{\partial t} R_B \right) \qquad (\text{A.2})$$

se tiene:

$$P = P_A = -P_B = \mu \left(\frac{\partial}{\partial t} R \right) \qquad (\text{A.3})$$

donde μ es la masa reducida del sistema A y B,

$$\mu = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B} \quad (\text{A.4})$$

Si $W(R)$ es el potencial de interacción entre A y B, el Hamiltoniano del sistema es:

$$\begin{aligned} H = T + V &= \frac{1}{2} \frac{P_A^2}{M_A} + \frac{1}{2} \frac{P_B^2}{M_B} + W(R) \\ &= \frac{P^2}{2\mu} + W(R) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Se sigue que las ecuaciones clásicas de movimiento (y la ecuación de Schrödinger) para el sistema en el marco de referencia del centro de masa son las mismas que para una partícula de masa μ con un vector de posición R con respecto a un centro de fuerza fijo.

Antes de la colisión

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} = \mu \mathbf{v}_0 \quad (\text{A.6})$$

donde v_0 es la velocidad relativa de A con respecto a B, y la energía cinética es

$$T = \frac{1}{2} \mu v_0^2 .$$

Después de la colisión los dos átomos A y B emergen en el sistema de referencia del centro de masa con momento igual y opuesto $\mathbf{p}'_A = -\mathbf{p}'_B = \mathbf{p}'$.

Debido a que se está considerando colisiones elásticas, en la cual la energía interna de A y B no cambia, las magnitudes de \mathbf{p} y \mathbf{p}' deben ser las mismas: $p = p'$. La dirección de \mathbf{p}' puede ser descrita por los ángulos polares (θ, ϕ) , tomando la dirección incidente \mathbf{v}_0 la del

eje polar, esto es el eje Z. El ángulo θ es el ángulo de dispersión en el sistema del centro de masa.

TRANSFORMACIÓN DEL SISTEMA DE LABORATORIO AL SISTEMA CENTRO DE MASA

En el sistema de coordenadas de laboratorio, en donde la posición B se considera como origen, el centro de masa se mueve con velocidad constante v_c , donde

$$v_c = \frac{v_0 M_A}{M_A + M_B} \quad (\text{A.7})$$

Sea v_A la velocidad final de A en el sistema del centro de masa y v'_A es la misma cantidad en el sistema de laboratorio. Entonces v_A y v'_A están relacionadas por

$$v_A = v'_A - v_c \quad (\text{A.8})$$

El ángulo entre la dirección incidente v_0 y v_A es el ángulo de dispersión, θ , en el sistema del centro de masa, el ángulo entre v_0 y v'_A es el ángulo de dispersión, θ_L , en el sistema de laboratorio. Tomando componentes en ángulos perpendiculares y paralelos a v_0 se obtiene

$$v_A \cos \theta = v'_A \cos \theta_L - v_c$$

$$v_A \sin \theta = v'_A \sin \theta_L \quad (\text{A.9})$$

de donde:

$$\tan(\theta_L) = \frac{\text{sen}(\theta)}{\cos(\theta) + \tau} \quad (\text{A.10})$$

como

$$\tau = \frac{v_c}{v_A}$$

entonces:

$$v_A = \frac{P_A}{M_A} = \frac{M_B v_0}{M_A + M_B}$$

El plano de dispersión es el mismo en ambos sistemas de coordenadas. El ángulo azimutal, ϕ , es el mismo al transformarlo del centro de masa al sistema del laboratorio ($\phi_L = \phi$).

SECCIONES EFICACES

La probabilidad de que ésta dispersión ocurra no puede depender del marco de coordenadas de donde se esté viendo el evento, entonces la sección eficaz total σ debe ser la misma en todos los sistemas de coordenadas. Se sigue que:

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(\theta, \phi) \quad \text{y} \quad \frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(\theta_L, \phi)$$

son las secciones eficaces en los sistemas del centro de masa y de laboratorio respectivamente, entonces

$$\left(\sigma = \int_0^{2\pi} \phi \, d\phi \int_{-1}^1 \frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(\theta, \phi) \, du_1 \right) = \int_0^{2\pi} \phi \, d\phi \int_{-1}^1 \frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(\theta, \phi) \, du \quad (\text{A.12})$$

Con $u_1 = \cos(\theta)$ y $u_2 = \cos(\theta_L)$

De donde se obtiene la relación:

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma_L(\theta_L, \phi) = \left(\frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(\theta, \phi) \right) \left| \frac{d(\cos(\theta))}{d(\cos(\theta_L))} \right| \quad (\text{A.13})$$

Evaluando $\left| \frac{d(\cos(\theta))}{d(\cos(\theta_L))} \right|$ con la ayuda de (A.10) se encuentra:

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(\theta_L, \phi) = \frac{(1 + \tau^2 + 2\tau \cos(\theta))^{(3/2)} \left(\frac{\partial}{\partial \Omega} \sigma(\theta, \phi) \right)}{|1 + \tau \cos(\theta)|} \quad , \quad \tau = \frac{M_A}{M_B} \quad (\text{A.14})$$

Aunque muchos experimentos se llevan a cabo mediante la dispersión de un haz de partículas por un blanco estacionario, en otros experimentos la dispersión de un haz de partículas por otro haz es estudiado. Estos experimentos en donde 2 haces, inclinados a un cierto ángulo, interactúan en ambos marcos de referencia tanto en el de laboratorio como en el del centro de masa, siguiendo argumentos similares a los expuestos con anterioridad, las cantidades medidas pueden transformarse en el sistema del centro de masa para permitir su comparación con los resultados teóricos.

APÉNDICE B

Experimento

La formación de las partículas incidentes que para efectos de los experimentos son iones de Ar^+ , los cuales se obtiene admitiendo gas de argón (Ar) de 99.999% de pureza dentro de la fuente de iones a una presión de 90 μHg ; posteriormente es necesario aplicar una corriente en el filamento de 16 A., y un potencial en el ánodo de 80 V, con estos valores la corriente de descarga que se obtiene en el ánodo es de aproximadamente 0.2 A.

Después de haber producido el haz de iones de Ar^+ , es necesario enfocarlos ya que estos no se encuentran colimados. Además, en éste no sólo se encuentran los iones de Ar^+ , necesarios para el proceso, sino que también existen partículas de Ar^+ y Ar_2^+ , lo que hace necesario también seleccionarlos. Para estos propósitos se hace uso de lentes Einzel y de un filtro de velocidades.

Para enfocar el haz se aplica un potencial al segundo electrodo de las lentes Einzel de aproximadamente de 860 V por cada kiloelectronvolt (keV) de aceleración del haz. 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° con respecto al eje principal del acelerador, por esta razón es necesario corregir la dirección del haz de iones, para ello 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 blanco en la celda de reacción para que se lleve a cabo el proceso de interacción, se mide la corriente del haz en la caja de Faraday contráctil, la magnitud de la corriente es del orden de 10^{-10} A. Esta corriente se mide en un electrómetro analógico Keithely Modelo 610C.

Una vez que se logra obtener una corriente del haz de iones lo más intensa posible se adecuan los parámetros en el sistema de detección (analizador parabólico y Channeltron), además de que se admite el gas blanco (Ar) en la celda de reacción a una presión de 4×10^{-4} Torr, esta presión se mide con un barómetro capacitivo (Baratrón); al analizador parabólico se le aplica un voltaje de 315 V por cada keV de aceleración de las partículas y al Channeltron un voltaje de 3000 V, con el cual se produce el efecto de cascada.

El sistema de detección se mueve con respecto al eje principal del acelerador $\pm 3^\circ$ con un incremento angular de 0.1° y un tiempo de acumulación de 20 s, este es el tiempo en el que el contador de partículas permanece en cada ángulo contando las partículas provenientes de la interacción. El motor a pasos permite el movimiento de sistema de detección y es controlado por una PC.

El experimento se realiza en un tiempo aproximado de 25 minutos por distribución. Cada distribución se realiza 5 veces en diferentes días y condiciones, para cada energía, lo que equivale a 10 distribuciones. El tiempo dado en horas que se invierten para esto es de 250 minutos efectivos de mediciones.

Estos experimentos se repiten al menos dos veces con diferencia de un mes para probar los resultados obtenidos.

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

REFERENCIAS

[1] H. Martínez et al.

Experimental and theoretical investigations of single-electron capture and loss in He⁺ - Ar collisions. JOURNAL OF PHYSICS

Volume B, Number 34 (2001), 2001

[2] O.B. FIRSOV.

Scattering of ions by atoms. SOVIET PHYSICS JETP Volume 34(7), NUMBER 2, 195.

[3] E.N. Fuls, P.R. Jones, F.P. Ziemba, and E. Everhart, Phys. Rev. 107, 704 (1957).

[4] E. Everhart, G. Stone, and R.J. Carbone. Phys. Rev. 99, 1287 (1955).

[5] I. Amdur and E. A. Mason. J. Chem. Phys. 25, 624(1956).

[6] W.H. Cramer and J. H. Simons. J. Chem. Phys. 26, 1272 (1957).

[7] F.C. Hoyt, Phys. Rev. 55, 664 (1939).

[8] O.B. Firsov, J. Expl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) 24, 279 (1953).

[9] G.H. LANE AND E.EVERHART. PHYSICAL REVIEW, (1960), 120

[10] P.R. Jones, F.P. Ziemba, H.A. Moses, and E. Everhart, *Phys. Rev.* 113, 182 (1959).

[11] Bransden, B. H. and Joachain, C. J. (1983). *Physics of atoms and molecules*. Longman, London.

[12] Pauly, H. (1979). In *Atom-molecule collisions – a guide for the experimentalist* (ed. R. B. Bernstein). P. 111. Plenum Press, New York and London.

[13] [14] Ford, K. W. and Wheeler, J. A. (1959). *Ann. Phys. (N.Y.)*, 7, 259, 287.

[14] Berry, M. V. and Mount, K. E. (1972). *Rep. Prog. Phys.*, 35, 315.

[14] Child, M. S. (1971). *Mol. Phys.*, 20, 171.

[15] Berry, M.V. (1966). *Proc. Phys. Soc.*, 89, 479.

[16] Bransden, B.H. and Joachain, C.J. (1989). *Introduction to quantum mechanics*. Longman, London and Wiley, New York.

[17] [19] McDowell, M.R.C. and Coleman, J.P. (1970). *Introduction to the theory of ion-atom collisions*. North-Holland, Amsterdam.

[18] Byron, F. W. and Joachain, C. J. (1977). *Phys. Rept.*, 34C, 233.

- [19] H. Martínez *et al* Phys. Rev. A 62 052718-5, 2000
- [20] H. Martínez 1998 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 31 1553-62
- [21] H. Martínez *et al* Nucl. Instrum. Methods B 124 464-8
- [22] E. T. Whittaker and G. N. Watson, Modern Analysis (Cambridge University Press, Cambridge, 1927), 4th ed.
- [23] Nikolaev V S, Dimitriev I S, Faateva L N and Teplova Ya A 1961 Sov. Phys. -JETP 14 20-4.
- [24] Tsuji M, Kaneko N, Furusawa M, Muraoka T and Nishimura Y 1993 J. Chem. Phys. 98 8565-71
- [25] H. S. W. Massey and E. H. S. Burhop, Electronic and Ionic Impact Phenomena (Oxford University Press, New York, 1952), p. 373.
- [26] F. X. Gadea and I. Paidarová, Chem. Phys. 209, 281 (1996).
- [27] F. A. Gianturco and M. P. de Lara-Castells, Chem. Phys. 208, 25 (1996).
- [28] E. C. M. Chen and J. G. Dojahn, W. E. Wentworth, J. Phys. Chem. A101, 3088 (1997).
- [29] H. V. Böhmer and S. D. Peyerimhoff, Z. Physik D3, 195 (1986).