



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**TRANSFERENCIA DE CARGA EN LA
COLISION DE IONES DE N^+ EN N_2**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A :

JAVIER LARA DE PAZ



**FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM**

DIRECTOR DE TESIS: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA

2005



**FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR**

m349204



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.



ORGANISMO NACIONAL
AUTÓNOMO DE
EVALUACIÓN DE LA
EDUCACIÓN SUPERIOR

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
 "Transferencia de carga en la colisión de iones de N+ en N2"

realizado por Lara de Paz Javier

con número de cuenta 97583200, quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
 Propietario

Dr. Horacio Martínez Valencia

Propietario

Dr. Eduardo Andrade Tbarra

Propietario

Dr. Ramiro García García

Suplente

Dr. Juan Carlos López Vieyra

Suplente

Dra. Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga

Consejo Departamental de Física

M. EN C. ALICIA ZARZOSA PÉREZ



Facultad de Ciencias
 Universidad Nacional Autónoma de México

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Faculta de Ciencias

Este trabajo se llevó a cabo en el Laboratorio de “*Colisiones Atómicas y Moleculares*” del Centro de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma de México ubicado en Cuernavaca, Morelos, gracias al apoyo del CONACYT mediante el proyecto No. 41072-F y a la DGAPA a través del proyecto IN-109103-3.

AGRADECIMIENTOS

MADRE:

TE DEDICO ESTE TRABAJO COMO UN PEQUEÑO PAGO POR TODO LO QUE NOS HAS DADO, POR TODOS TUS SACRIFICIOS PARA QUE LOGRARAMOS NUESTRAS METAS, POR TUS ENSEÑANZAS QUE HAN SERVIDO COMO GUÍA EN MI VIDA, POR LA FUERZA QUE NOS INCULCASTE Y SOBRE TODO, POR EL SIMPLE HECHO DE HABERME DADO LA VIDA. PORQUE QUE UNA VIDA NO ALCANZARÁ PARA AGRADECER TODO LO QUE HAS HECHO POR MI TE BRINDO ESTE ÉXITO Y LOS QUE VIENEN.

GRACIAS

A MI HERMANO HÉCTOR Y A SU FAMILIA:

POR SER ELMAYOR, APRENDÍ DE TI MUCHAS COSAS, QUE GRACIAS A MUCHAS DE ESAS, HE LOGRADO ESTO. HAS SIDO PARA MÍ MÁS QUE UN SIMPLE HERMANO Y AMIGO. ADEMÁS POR HABERME DADO TAN BONITA DICHA REPRESENTADA EN MIS SOBRINAS ANGÉLICA Y MARIANA QUE ME HAN DADO MOTIVOS PARA LOGRAR ESTA META, AHORA TE LO AGRADEZCO POR MEDIO DE ESTE ÉXITO.

A ANA LAURA:

POR SER MI COMPAÑERA DURANTE TODO ESTE TRAYECTO, POR SER MI AMIGA, PORQUE HEMOS COMPARTIDO TANTAS EXPERIENCIAS , AHORA QUIERO CONTIGO COMPARTIR ESTE TRIUNFO EN MI VIDA, PARA QUE SIEMPRE ESTEMOS UNIDOS POR MEDIO DE ESTE TRABAJO, Y POR EL AMOR QUE SIEMPRE TE TENDRÉ.

TE AMO

A LA UNAM:

MI *ALMA MATER*, QUE ME FORMÓ COMO PROFESIONISTA Y MEJOR SER HUMANO, POR PERMITIRME ADQUIRIR EL CONOCIMIENTO EN SUS APOSENTOS, POR TODO LO QUE ES Y QUE SIEMPRE SERÁ.

AL DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA, MI ASESOR:

POR SU INFINITA PACIENCIA, Y POR SU CALIDAD HUMANA. POR SU APOYO Y CONFIANZA Y POR LA AYUDA QUE LE DA A SUS ESTUDIANTES, QUE LOS COBIJA COMO SUS VERDADEROS AMIGOS Y PUPILOS. POR SU GRAN DEDICACIÓN A FAVOR A LA UNAM.

GRACIAS.

A MIS COMPAÑEROS:

QUE SIEMPRE ME HAN ACOMPAÑADO Y APOYADO EN ESTA TAVESÍA, Y POR SU AMISTAD QUE ME HAN BRINDADO INCONDICIONALMENTE. A TODOS ELLOS LES DOY LAS GRACIAS.

A TODAS ESAS PERSONAS QUE ME HAN ACOMPAÑADO A LO LARGO DE MI VIDA Y QUE GUARDO UN LUGAR MUY ESPECIAL PARA ELLOS EN MI CORAZÓN.

GRACIAS.

CONTENIDO

	Página
ÍNDICE	ii
CAPÍTULO I CONCEPTOS TEÓRICOS Y ANTECEDENTES	4
1.1 Procesos de transferencia de carga en colisiones Ión-Molécula	5
1.1.1 Introducción	5
1.1.2 Concepto de transferencia de carga	6
1.2 Modelos de transferencia de carga en colisiones Ión-Molécula	8
1.2.1 Criterio adiabático de Massey	9
1.2.2 Método de mecánica cuántica para bajas energías	11
1.2.3 Modelo clásico simple	13
1.2.4 Método clásico de Monte Carlo para trayectorias	14
1.3 Resumen de trabajos previos	15
CAPÍTULO II APARATO EXPERIMENTAL	23
2.1 Sistema de vacío	26
2.2 Fuente de iones	28
2.3 Enfoque, aceleración y selección de iones	30
2.3.1 Lentes Einzel	31
2.3.2 Filtro de velocidades	34
2.4 Celda de reacción	41
2.5 Sistema de detección	43

2.5.1	Caja de Faraday	43
2.5.2	Analizador Parabólico	46
2.5.3	Multiplicador de electrones	51
CAPÍTULO III DESARROLLO EXPERIMENTAL		53
3.1	Distribuciones angulares	54
3.2	Descripción del experimento	54
3.3	Cantidades directamente medibles y cálculo de las secciones totales	58
3.4	Errores experimentales	61
CAPÍTULO IV RESULTADOS Y DISCUSIÓN		63
4.1	Resultados experimentales. Cálculo de la sección transversal diferencial.	64
4.2	Sección transversal total.	66
4.3	Cálculo de la sección transversal total.	67
CAPÍTULO V CONCLUSIONES		72
REFERENCIAS		74

CAPÍTULO I

CONCEPTOS TEÓRICOS Y ANTECEDENTES

I. CONCEPTOS TEÓRICOS Y ANTECEDENTES

1.1 PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE CARGA EN COLISIONES IÓN-MOLÉCULA

1.1.1 INTRODUCCIÓN

De los estudios que se realizaron con los primeros tubos catódicos y con los rayos X a principios del siglo pasado, los científicos se dieron cuenta que un haz de iones podía quedar parcialmente neutralizado durante una colisión con moléculas del gas por el cual el haz atravesaba.

Además del interés intrínseco que tiene el proceso de transferencia de carga como un proceso fundamental en la física atómica, el conocimiento de sus sistemas y mecanismos es un prerrequisito para poder entender sistemas como los detectores de radiación, daños de la radiación a materiales biológicos, en los procesos de confinamiento magnético e inercial para los procesos de fusión termonuclear, procesos astrofísicos, descargas de gas, espectroscopia de masas, y en otros numerosos procesos y sistemas prácticos. Por ejemplo, en los aceleradores Tandem las partículas son aceleradas, y ya como iones negativos, dos ó más electrones son removidos en un procesos de transferencia de carga, y como iones positivos son acelerados nuevamente por el mismo potencial.

En el proceso de captura electrónica, una partícula incidente atrapa uno o más electrones del blanco, mientras que en el proceso de pérdida de electrones, la partícula incidente cede o pierde electrones. La pérdida electrónica de un ión negativo se le suele llamar "separación". La captura electrónica y la pérdida electrónica son dos tipos de transferencia de carga. Usualmente, solo interesa el estado de la carga del proyectil rápido.

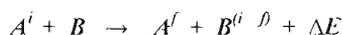
Los estudios cuantitativos de la transferencia de carga comenzaron alrededor de 1920 usando fuentes radioactivas naturales de partículas alfa. Después de los años 50's, estudios de transferencia de carga a altas energías fueron hechos gracias al desarrollo del ciclotrón y de otros aceleradores de altas energías que vinieron a sustituir los aceleradores de bajas energías tipo Cockroft-Walton que se usaban en la investigación de la física nuclear, aunque también ayudaron mucho a la investigación de la física atómica. El intenso esfuerzo hecho tanto en la parte experimental como en la teórica ha ido creciendo desde entonces hasta nuestros días. En los años 60's los aceleradores Tándem de Van de Graff se comenzaron a usar para acelerar iones pesados a altas energías. Recientemente, nuevas técnicas se han desarrollado para producir iones altamente cargados hasta llegar a los iones de uranio. Esto ha abierto nuevas oportunidades de estudio en los procesos de transferencia de carga, y en las pasadas tres décadas, el nivel de esfuerzo aumentó a tal grado que la transferencia de carga se ha convertido en uno de los procesos básicos más estudiados de las colisiones atómicas.

En las siguientes secciones del presente capítulo, se estudiará el proceso de la transferencia de carga en el caso de una colisión ión-molécula, que es el interés especial de este trabajo, y luego se revisarán los aspectos teóricos de este proceso; finalmente se revisarán los trabajos previos que se han hecho al respecto de este tema.

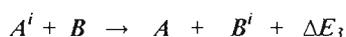
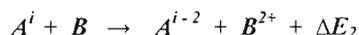
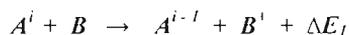
1.1.2 CONCEPTO DE TRANSFERENCIA DE CARGA

En un gas ionizado, tanto los átomos como las moléculas colisionan continuamente, provocando una transferencia de electrones entre ellos y dando como resultado que la carga inicial de ellos cambie según cuántos electrones hayan perdido o ganado durante el proceso de transferencia.

Esto se puede expresar esquemáticamente de la siguiente forma: Sean A y B iones o átomos y si se denota como i y f al estado de la carga de las partículas antes y después de sufrir el proceso de intercambio de carga, se obtiene:



Donde ΔE es la diferencia de las energías de ionización de los átomos A y B. Así, este tipo de procesos varían según el número de electrones que toman parte en la transferencia, y se pueden agrupar de la siguiente forma:

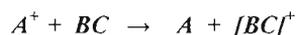


Otro proceso de transferencia de carga que puede ocurrir es cuando iones y átomos del mismo elemento interactúan. Se dice que el proceso fue por "resonancia en la transferencia de carga" y se denota por:

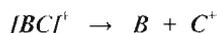


donde en este caso $\Delta E = 0$.

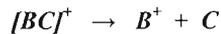
Ahora, cuando el blanco es una molécula, como es el caso que se estudiará en este trabajo, la posibilidad de que ocurra un rompimiento de la molécula durante o inmediatamente después de la captura es otra situación que suele pasar frecuentemente. A este tipo de transferencia se le llama "transferencia con disociación". Si BC es una molécula y A^1 es el ión incidente, el proceso se representa por la siguiente reacción:



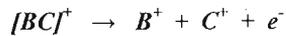
seguida, ya sea por:



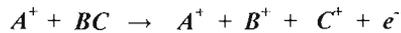
o por:



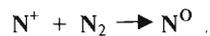
o por una combinación entre transferencia de carga disociativa y una ionización,



Estos procesos se relacionan con el proceso de disociación iónica simple:



El proceso de transferencia de carga con disociación simple se puede llevar a cabo si la energía de recombinación del ión incidente excede la suma del potencial de ionización más la energía de disociación de la molécula. En el presente trabajo, la reacción que se lleva a cabo es de un ion de N^+ en N_2 y es de la siguiente forma:



Frecuentemente, el objetivo del estudio de estos procesos está en la disociación misma, sin importar si la ionización o la transferencia de carga son las responsables del mecanismo. Una importante aplicación del proceso de disociación es en la producción de plasmas densos de altas temperaturas por medio de la inyección de moléculas de hidrógeno de altas energías. Para atraparlas y retenerlas dentro del campo magnético, el cociente carga-masa debe de ser cambiado, y una forma de que esto ocurra es por medio de la disociación de los iones moleculares a través de colisiones.

1.2 MODELOS DE TRANSFERENCIA DE CARGA EN COLISIONES ION-MOLÉCULA

La transferencia de carga es un proceso de colisión cuyo tratamiento teórico es complicado. Predicciones confiables de la sección transversal para cada proceso a cualquier energía dada y para un par de partículas que colisionan, todavía no son posibles, aunque ya se ha logrado un avance considerable. Debido a que la captura de un electrón

libre durante una colisión con un proyectil cargado violaría las leyes de conservación de la energía y de momentum, los modelos de colisiones binarias no son convenientes y si se quiere tomar en cuenta la transferencia de carga también se debe considerar la presencia de un ión residual. Otra situación que se debe tomar en cuenta es que durante la transición de una partícula a otra, ya sea que estas partículas sean átomos o moléculas, como en este caso, el electrón experimenta un repentino cambio en su momentum. En algunos modelos teóricos los factores de traslación que se deben considerar en la función de onda del electrón para este movimiento complican la resolución. Este cambio de momentum se minimiza cuando la velocidad del proyectil es igual a la velocidad orbital del electrón del blanco, y es en la mayoría de los casos que el máximo de probabilidad de transferencia de carga aparece cuando esto ocurre.

A continuación se discutirán distintos modelos para la transferencia de carga, en especial en la colisión ión-molécula, aunque los modelos que se tratarán se aplican para el caso atómico. son también aplicables al caso de interés, y en su momento se dará la conexión a esta situación. Primero se tratará la aplicación del criterio adiabático de Massey ^[2] a la estimación de la sección transversal en el proceso de transferencia de carga. También se tratará el método de mecánica cuántica a bajas energías. En el primero el potencial de interacción es el que se toma como la perturbación que causa la transición, mientras que en el último predominan efectos moleculares y el movimiento relativo entre las dos partículas es la perturbación. Finalmente se discutirán modelos semiclásicos para el tratamiento de la transferencia electrónica.

1.2.1 CRITERIO ADIABÁTICO DE MASSEY

En el criterio adiabático de Massey ^[2], para tratar con la transferencia de carga se considera que la transferencia de un electrón de un átomo 2 a un ión 1 involucra un cambio de energía interna $\Delta E = \chi_1 - \chi_2$, donde χ_1 y χ_2 son las energías de enlace del electrón en su átomo o molécula. Si $\Delta E > 0$, la reacción es exotérmica y la reacción se lleva a cabo sin necesidad de una fuente externa de energía. Para una reacción endotérmica, donde $\Delta E < 0$, la energía necesaria usualmente se toma de la energía

cinética del proyectil, poniendo así un límite para el rango de energía inicial, para el cual el proceso se pueda llevar a cabo.

Massey propuso esta hipótesis para proporcionar una forma de estimar la energía de impacto a la cual la sección transversal integral, σ_t , para un proceso de colisión no resonante consigue su valor máximo. Demostró que σ_t consigue un pico cuando

$$v \approx v^* \equiv \frac{a\Delta E}{h}$$

y σ_t va a ser muy pequeña si

$$v \ll \frac{a\Delta E}{h} \quad (\text{criterio adiabático})$$

aquí v es la velocidad relativa de impacto, a es el rango de interacción entre las partes colisionadoras, y ΔE es el llamado "defecto de energía" (ver figura 1). Massey procedió por analogía con un sistema clásico y usó el principio de correspondencia de Bohr de la siguiente forma.

Primero se considera al blanco clásicamente como un sistema mecánico en el cual las vibraciones fueron excitadas por una fuerza de perturbación. Para ser específico, supóngase que estas perturbaciones corresponden a una transición interna de la molécula blanco de su estado inicial i (con energía E_i) a un estado final f (con energía E_f). Esta transición puede ser rotacional, vibracional o electrónica. Sea ν la frecuencia natural del sistema mecánico. Expresemos la fuerza de perturbación como una integral de Fourier, en la cual solo las componentes de esta expansión cercanas a ν pueden producir una fuerza de oscilación. De esta manera, la excitación será máxima si la duración de la perturbación τ es igual a un periodo de la vibración natural. $1/\nu$. En el problema de la colisión el tiempo característico es $\tau \approx a/v$. Usando mecánica cuántica, se reemplaza ν por $\Delta E/h$, donde ΔE , el defecto de energía es :

$$\Delta E = E_f - E_i \quad (\text{para las transiciones vibracionales, rotacionales y electrónicas})$$

Así se espera para que σ_t tenga un máximo si $a/v \approx h/\Delta E$, es decir si $v \approx v^* \equiv \frac{a\Delta E}{h}$.

Se dice que la colisión es *no adiabática* a velocidades cerca de v^* debido a que el tiempo de la colisión es comparable al tiempo de transición $\hbar/\Delta E$.

Si $v \ll a\Delta E/\hbar$, v es pequeña comparada con la velocidad característica del blanco (rotacional, vibracional, o electrónica, depende de la transición que se trate). El blanco tendrá tiempo para ajustarse a la perturbación impuesta por la interacción sin que ocurra una transición electrónica, y la colisión será *adiabática**. Por tanto, a bajas velocidades de impacto, la sección σ_t debe decrecer al aumentar la energía de impacto. debido a que el tiempo de interacción finalmente se vuelve muy corto para que aparezca una transición.

La hipótesis adiabática se ha probado experimentalmente para secciones transversales de excitaciones de partículas pesadas. para ionización y en transferencia de carga en colisiones.

Para transferencias no resonantes donde un solo electrón de un ión neutro B a un ión cargado A^+ , el defecto de energía es,

$$\Delta E_{ct} = E_{ión}(A) - E_{ión}(B) \quad (\text{transferencia de carga simple}).$$

Es decir, la diferencia en la energía de ionización, $E_{ión}$, entre A y B.

Aunque se ha sugerido que se use un nivel de precisión tal que $\alpha_{ct} = 7 \hat{A} \cdot n$, donde n es el número de electrones transferidos durante la colisión, este criterio es generalmente usado únicamente como una guía cualitativa.

1.2.2 MÉTODO DE MECÁNICA CUÁNTICA PARA BAJAS ENERGÍAS

Un proceso de transferencia de carga que se lleve a cabo a bajas energías, generalmente implica la formación de un estado intermedio, es decir, una molécula inestable.

Un proceso típico puede ser descrito de la siguiente forma:



Un modelo analítico de orbitales moleculares (OM) se basa en el trabajo de Landau(1932), Zener(1932), y Stückelberg(1932) (LZS) trata las transiciones en las cuales hay un cruzamiento de dos estados moleculares a una distancia internuclear finita, R_c . Asumiendo que la transición ocurre sólo en el punto de cruce (donde la diferencia de energías es H_{12}), las ecuaciones diferenciales acopladas pueden ser resueltas de manera exacta, dando como resultado que la probabilidad de transición es una función de la velocidad relativa v , dada por la ecuación:

$$P_{LZS} = 4p(1-p)\sin^2\eta_{LZS},$$

donde,

$$p = \exp\left(-\frac{\pi H_{12}}{v\alpha}\right)$$

es la probabilidad de cruzamiento con

$$\alpha = \frac{dH_{11}}{dR} - \frac{dH_{22}}{dR}$$

Evaluada en R_c , y donde

$$\eta_{LZS} = \int (\Delta\varepsilon^2 + 4H_{12}^2)^{1/2} dt$$

Con $\Delta\varepsilon$ siendo la diferencia de la energía entre dos estados adiabáticos involucrados.

Las derivadas para α son las pendientes de las dos curvas de la energía potencial de cruzamiento como función de la separación internuclear R_c . El modelo LZS puede ser aplicado a varios tipos de transiciones, incluyendo la transferencia de carga. También este modelo asume que la energía de interacción es constante y se usan orbitales estacionarios, por lo cual no se toman en cuenta el movimiento del electrón como resultado del movimiento relativo del núcleo, tampoco contiene factores de traslación electrónica, por lo tanto se espera que funcione mejor para bajas velocidades de colisión.

1.2.3 MODELO CLÁSICO SIMPLE

Bell (1953) sugería que la captura electrónica por fragmentos fisionados se daba principalmente en niveles excitados altos, y debido a esta situación, una imagen clásica del proceso podría ser válida. En este modelo cuando un ión se aproxima a un átomo neutro, un electrón unido al átomo siente un aumento de atracción Coulombiana hacia el ión. Cuando esa fuerza excede la fuerza de unión del electrón al átomo, se lleva a cabo un proceso de captura. Usando un modelo de Fermi-Thomas para un gas atómico, el mismo Bell encontró por este medio la probabilidad de transferencia de carga como función de la velocidad del electrón y del ión. También se puede usar una versión simplificada del modelo de Bell, en donde la velocidad del ión es menor que la del electrón en el blanco. En este caso la sección transversal es independiente de la velocidad del ión. La distancia crítica de interacción para la captura esta dada por:

$$R_c = \frac{Z_2 e^2}{\chi_2}$$

donde: Z_2 es la carga nuclear y χ_2 es el potencial de ionización del átomo o molécula del blanco. La sección transversal total para la captura es entonces simplemente:

$$\sigma = \pi R_c^2 = \frac{\pi e^4 Z_2^2}{\chi_2^2}$$

Este modelo ha sido empleado en varios intervalos de energía desde 15 a 1600 keV, dando resultados que aproximadamente coinciden con las secciones transversales medidas.

1.2.4 MÉTODO CLÁSICO DE MONTE CARLO PARA TRAYECTORIAS

En este tratamiento el estado inicial del electrón en el átomo blanco está representado por distribuciones espaciales y de momentum obtenidas de la función de onda mecánica cuántica. El ión blanco residual es representado por un modelo potencial tal como el potencial Coulombiano apantallado. El parámetro de impacto se escoge de manera aleatoria y la posición inicial del electrón y el momentum son elegidos de las distribuciones también de forma aleatoria.

Este método reemplaza el problema de mecánica cuántica con un modelo clásico. Se comienza con el Hamiltoniano clásico para tres cuerpos (dos núcleos y un electrón), lo reduce a un Hamiltoniano para dos cuerpos trabajando sobre el centro de masa del sistema:

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{p^2}{2m} + V_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + V_n(\mathbf{R})$$

donde μ es la masa reducida de los núcleos, m es la masa del electrón. V_e , V_n , el potencial Coulombiano de interacción entre el electrón y el núcleo y entre el núcleo y $\{\mathbf{r}, \mathbf{p}\}$ (resp. $\{\mathbf{R}, \mathbf{P}\}$) se refiere a las coordenadas y momentum del electrón (respectivamente el núcleo) las ecuaciones de Hamilton fueron sacadas de la ecuación anterior y numéricamente integradas sobre el tiempo para determinar el destino de la colisión. Las condiciones iniciales del electrón son tomadas del ensemble estadístico que intenta acoplarse a la distribución de probabilidad mecánico cuántica la aproximación más usada es adoptar la distribución microcanónica:

$$P \propto \delta(E_n - E) \cdot \delta\left(E_n - \frac{p^2}{2m} - \frac{Z}{r}\right)$$

(En es el valor cuántico de la energía de enlace). Esta opción se conoce para dar la distribución mecánico cuántica correcta en el espacio del momentum, y de esta forma la sección transversal se calcula de la siguiente forma:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\infty} b f db$$

con f la fracción de las trayectorias con el parámetro de impacto b el cual conduce a la transferencia de carga. Numéricamente esta ecuación se reemplaza por una suma sobre un número finito de b 's. También en esta ecuación se considera un estado cuántico bien definido del proyectil en vez de una probabilidad total para la captura electrónica. Por tanto se puede calcular también secciones transversales parciales.

1.3 RESUMEN DE TRABAJOS PREVIOS

En esta sección se presentan de manera resumida los más importantes trabajos previamente realizados acerca del sistema $N^+ - N_2$, para poder corroborar los resultados obtenidos en este trabajo.

Stebbing et al^[4] realizaron experimentos con colisiones a bajas energías entre varios tipos de iones positivos, moléculas neutras presentes en la atmósfera alta y partículas cargadas. Las colisiones involucraban transferencia y reacomodos de cargas. La investigación se llevó a cabo con un experimento de haces cruzados en un rango de energía entre los 2 hasta los 200 eV. Los productos de las reacciones de cargas se identificaron con un espectrómetro de masas y así se obtuvieron las secciones transversales absolutas de estos productos. Con estos resultados, extrapolaron sus valores correspondientes para energías térmicas en experimentos subsecuentes obteniendo así información acerca de la variación de las secciones transversales en el intervalo de energía mencionado. También con esos experimentos pudieron analizar la influencia de los iones excitados.

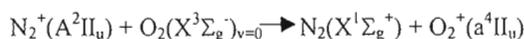
En especial estudiaron cuatro reacciones analizándolas en función de la energía de colisión y en función de la energía de ionización de los electrones de la fuente de iones. Sus datos experimentales les revelaron las siguientes conclusiones:

- a) Para la colisión $N^+ - O_2$ que produjo O_2^+ , el proceso



fue muy eficiente a energías iónicas por debajo de los 100 eV con una sección transversal, alrededor de un 15% más grande que para el N^+ producido a partir de N_2 con electrones a 50 eV.

- b) Para la colisión $N_2^+ - O_2$ que produce O_2^+ la sección transversal para el estado base de los iones N_2^+ es menor que la de otros estados excitados. El proceso



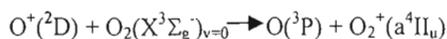
contribuyó de manera significativa en las observaciones

- c) Para la colisión $O^+ - N_2$ que produjo N_2^+ , el proceso



fue muy eficiente, con una sección transversal de más de 3 veces mayor para el haz de iones O^+ producido a partir de O_2 con electrones de 50 eV.

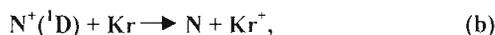
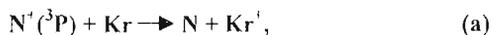
- d) La producción de O_2^+ por medio de la colisión $O^+ - O_2$ resultó ser más eficiente vía la reacción



cuya sección transversal fue por lo menos de un orden de magnitud mayor que para el estado base $O^+(^4S)$.

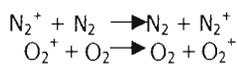
Rutherford et al^[5] reportaron las secciones transversales para procesos exotérmicos de transferencia de carga que involucraron iones en estado base y metaestables de N^+ , de Kr y de CO en el rango de energías de 1-500 eV. Para los iones que sirvieron de blanco, que fueron los de Kr y de CO, obtuvieron que sus secciones transversales fueron mayores para los iones en estado metaestable que para los que estaban en su estado base para las regiones de baja energía. Ellos explican que sus resultados se deben a la capacidad que

tienen los estados excitados de realizar las reacciones exotérmicas. Los procesos que emplearon para las determinaciones de las secciones transversales fueron los siguientes:



De las pasadas reacciones obtuvieron un incremento de las secciones transversales para los estados metaestables del N^+ a bajas energías, en comparación con su estado base, ya que en los estados base de estos iones, no hay electrones suficientes para absorber la energía en exceso. Así mismo, para las reacciones (c) y (d) se encontró que éstas fueron endotérmicas.

Potter^[6], realizó experimentos para medir las secciones transversales para la transferencia de carga en colisiones a bajas energías (9-250 eV) con iones de N_2^+ , O_2^+ , O^+ y N^+ , y con moléculas N_2 y O_2 . Sus resultados obtenidos los comparó con los trabajos reportados previamente por Hatsed^[7] y Wolf^[8]. Y basándose en consideraciones del espín, del principio Franck-Condon y de las condiciones adiabáticas para las interacciones, las reacciones se pudieron analizar en términos de los estados inicial y final de los reactantes. Las reacciones que llevó a cabo fueron las siguientes:



Obteniendo valores grandes de las secciones transversales para el caso $\text{N}_2^+ - \text{N}_2$, y valores más pequeños para de las secciones transversales para el O_2^+ en O_2 debido a que dicha reacción es endotérmica. Para las reacciones entre N^+ en O_2 , debido a la asimetría se obtienen secciones transversales pequeñas a bajas energías.

Lockwood ^[9] reportó medidas absolutas para las secciones transversales totales de transferencia de carga σ_{10} de colisiones entre iones de gases nobles de He^+ , Ne^+ , Ar^+ , Kr^+ y Xe^+ sobre iones de N_2 , en el rango de energías entre 10 a 100 keV. Las medidas las obtuvo con dos diferentes métodos de producción de iones, uno fue con una fuente de iones de radio frecuencia. rf, y el otro método fue con una fuente de iones de impactos electrónicos. Los resultados obtenidos para las secciones transversales con las dos fuentes fueron diferentes, excepto para el Ne^+ . Estas diferencias se atribuyen a que en la fuente de rf se consiguen iones metaestables. Y debido a que el Ne^+ no tiene estados metaestables, no se observaron diferencias en las secciones transversales. La mayor diferencia entre las medidas para las secciones transversales, las observaron en los iones de Xe^+ , donde el cociente entre las dos medidas fue de 1.5 a una velocidad de $2 \cdot 10^7$ cm/seg. Además un pico obtenido en la sección transversal del Xe^+ por medio de la fuente de rf no se presentó en los datos tomados con la fuente de impactos electrónicos. Esto puede ser debido a que el pico es causado por una resonancia cercana de la transferencia de carga, que podría ocurrir entre el Xe^+ metaestable y la ionización disociativa del N_2 causado por la excitación del N_2^+ al estado $\text{C}^2\Sigma_u^+$.

Hoffman et al ^[10] reportaron resultados obtenidos para las secciones transversales de transferencia de carga para captura electrónica simple, en colisiones entre iones en su estado base de C^+ , N^+ y O^+ , sobre N_2 y H_2 . Sus resultados los compararon con resultados de trabajos previos para C^+ y O^+ que obtuvieron con una fuente de haz de iones que contenía iones tanto en estados base como en estados metaestables (haz de estados mixtos), que indicaba que las secciones transversales para estas especies eran iguales a velocidades mayores de 5 cm/seg. Para velocidades menores a este valor, el proceso de transferencia de carga de resonancia cercana para los estados metaestables tienen una sección transversal mucho mayor, que la de los procesos de transferencia de carga para estados base. Pero, como no determinaron la composición de su haz mixto, no pudieron obtener secciones transversales para iones en estado metaestable. Aunque sus datos obtenidos para los estados base en los procesos de captura electrónica simple, para iones N^+ incidiendo en N_2 y en H_2 , estuvieron de acuerdo con sus trabajos previos. En ese caso, la

resonancia cercana de los estados metaestables no fue importante, debido a que la transferencia de carga no puede ocurrir para procesos de un electrón. Además, sus resultados estuvieron de acuerdo con los obtenidos previamente por Nutt et al^[11] excepto en el caso de las colisiones entre N^+ sobre H_2 , donde sus resultados discreparon en alrededor de 27% por arriba. Para los iones C^+ y O^+ en estado base incidiendo sobre H_2 , sus resultados concordaron muy bien con los datos reportados por Moran y Wilcox^[12, 13, 14] para un haz de iones en estado mixto.

Moran et al^[12] midieron las secciones transversales para la transferencia de carga total en las reacciones entre los iones de $N^+(^3P)$ y $N^+(^1D)$ con Ar, H_2 , N_2 , O_2 , CO y CO_2 en el rango de energía de 1 – 3 keV. Utilizando la técnica de tiempo de vuelo, midieron el producto de N neutro rápido de la reacción de transferencia de carga entre los iones N^+ , los cuales fueron producidos por medio de la ionización de impactos electrónicos en el nitrógeno. Así pudieron examinar las reacciones de transferencia de carga como función de la energía de los electrones usada para producir los iones reactantes de N^+ , de este modo pudieron determinar las secciones transversales para los estados base de los iones $N^+(^3P)$ y $N^+(^1D)$. Encontrando que las secciones transversales totales para estos iones en las reacciones con las moléculas diatómicas usadas, tratando los sistemas individualmente, fueron cualitativamente similares, ya que los defectos de energía resultantes fueron también similares en el proceso de neutralización de los iones $N^+(^1D)$ los cuales producían los átomos excitados de N.

En otro artículo, **Moran y Mathur**^[13], reportaron los efectos de los estados electrónicos de los iones reactantes en las secciones transversales de transferencia de carga para los iones C^+ , N^+ y O^+ con las moléculas de H_2 y N_2 , en el intervalo de energía de 0.6 a 3.0 keV. El propósito principal de este trabajo fue el de obtener las secciones transversales para los iones $C^+(^2P)$, $N^+(^3P)$ y $O^+(^4S)$ en sus estados base. Sus resultados obtenidos de las secciones transversales en este estado, fueron comparados con los reportados por Lockwood et al^[19], encontrando discrepancias para los intervalos de energías correspondientes, aún si se extrapolaban los datos, tanto los de Lockwood como los obtenidos por Moran. Sugieren

que estas discrepancias se deben a las diferencias que hay en la distribución que tiene el haz de iones reactantes.

En un artículo, **Moran y Wilox** ^[14] midieron las secciones transversales totales de transferencia de carga para las reacciones entre los iones $N^+(^3P)$ y $N^+(^1D)$ con Ar, H₂, N₂, O₂, CO, NO, y CO₂. usando técnicas de medición de tiempo de vuelo, se midieron los átomos rápidos de N neutro, productos de las reacciones de transferencia de carga de los iones N^+ , los cuales habían sido producidos mediante la ionización del nitrógeno por impacto electrónico. Las reacciones de transferencia de carga fueron examinadas como función de la energía electrónica usada para producir los iones reactantes de N^+ y las reacciones de las secciones transversales determinadas tanto para los iones en el estado base $N^+(^3P)$ como para los iones en estado $N^+(^1D)$. De esta manera obteniendo que las secciones transversales totales de transferencia de carga que involucran los iones $N^+(^3P)$ y los $N^+(^1D)$ en el intervalo de energías de 1-3 keV, son similares en magnitud. Esto como resultado de que los iones tanto en estado base como en estado excitado, tienen los mismos defectos de energía en las reacciones.

Balakrishnan et al ^[15], hicieron un estudio de las colisiones entre $N + N_2$ usando el método mecánico cuántico y el método semiclásico. Lo que investigaron fue la pérdida de energía de átomos rápidos de $N(^4S)$ en un baño de moléculas de gas de N₂ tomando en cuenta las colisiones elásticas e inelásticas y para obtener la sección transversal de dispersión elástica hicieron los cálculos usando mecánica cuántica, empleando una aproximación de acoplamiento cercano vibracional y rotacional. Para la sección transversal inelástica de las transiciones rotacionales y vibracionales de las moléculas emplearon una aproximación cuántica-clásica en la cual el movimiento vibracional de las moléculas es tratado por el método mecánico cuántico independiente del tiempo y los grados de libertad restantes fueron descritos por la mecánica clásica. De esta forma los ángulos y la energía de las secciones transversales calculadas por estos métodos fueron usados para construir el *kernel* de Boltzman para la relajación de la energía de los átomos rápidos de $N(^1S)$ de donde se pueden sacar los parámetros que gobiernan los procesos de termalización.

Freysinger et al ^{116]}, estudiaron la reacción de transferencia de carga de la reacción de iones en estado base de $N^+(^3P_1)$ con $N_2(^1\Sigma_g^+)$ desde el umbral de energía térmica hasta 40 y 100 eV desde el marco de referencia del centro de masa con el espectrómetro de masa de haz de iones dirigidos situado en la Universidad de Utah y con el experimento de haz de iones cruzados de la Universidad de Trento, para poder investigar la reacción desde dos canales diferentes, uno analizando la transferencia de carga y el otro analizando la absorción atómica. Motivados por la falta de información que hay para estos procesos de transferencia de carga y de absorción atómica en el umbral de bajas energías, ellos encontraron que la formación de $N^+_2(^X^2\Sigma_g^+)$ se da en una reacción endotérmica a 1.043 eV, pero el proceso de transferencia de carga que se observa para el ión N^+_2 no se lleva a cabo sino hasta los 2.8 eV. De igual manera, para el ión isótopo $^{15}N^+_2$ sus canales de transferencia electrónica y atómica comienzan a la misma energía y tienen la misma dependencia de energía solo hasta los 6 eV. Estos resultados implican que existe un N^+_3 transitorio, que es simétrico, pero acíclico. Usando diagramas de correlación de estados se observa que no hay una vía adiabática para la reacción de transferencia de carga, pero estos diagramas explican claramente la eficiencia del proceso de intercambio observada en la reacción



Finalmente sugieren que el fuerte acoplamiento no adiabático entre las superficies $^3\Pi$ repulsivas entre sí que se desarrollan en los reactantes en estado base con superficies 3Π situadas más arriba, que se correlacionan con los productos excitados en la transferencia de carga, es necesario para que ocurra dicha reacción.

Finalmente, se presenta el trabajo de **Phelps** ^{117]}, quien recopiló un grupo de datos tabulados y graficados de las secciones transversales de las colisiones elásticas, de excitación y de ionización entre los iones N^+ , N_2^+ , N , y N_2 con N_2 y también para los iones Ar^+ y Ar con Ar , en el rango de energías desde 0.1 eV hasta 10 keV. Donde los correspondientes parámetros de velocidades de deriva, y los coeficientes de reacción o de excitación se calcularon de sus respectivas secciones transversales, y además se recomendaron para usos en el análisis en varios experimentos, y para los de descarga eléctrica. En el caso de la

colisión de N^+ en N_2 , las secciones transversales de transferencia de momentum, la de transferencia de carga, la de excitación electrónica y la de producción electrónica son recomendadas para su estudio y poder formar un modelo adecuado para estos casos. En el caso del cálculo de las velocidades de deriva predicen una “fuga” de campo eléctrico para la colisión de N^+ en N_2 en un rango de densidad de gas E/n mayor a $4.3 \cdot 10^3$ Td, (donde 1 Td (townsend) = 10^{-21} Vm²). Para la colisión entre N_2^+ en N_2 , las secciones transversales incluyen aquellas donde se da la formación para N^+ y N_3^+ , las de excitación electrónica, y las de producción electrónica. En este caso, las velocidades de deriva y las secciones transversales en promedio, se calculan para un coeficiente de densidad de gas $E/n \geq 500$ Td. En el caso de las colisiones de N con N_2 , solo se recomiendan las secciones transversales para la transferencia de mometnum. Para el caso de las colisiones entre N_2 y N_2 , se recomiendan los datos recopilados para las secciones transversales de transferencia de momentum, de excitación electrónica y de producción electrónica, para la creación de un modelo teórico adecuado. Las colisiones entre estados electrónicos excitados con N_2 no son incluidas en este estudio.

Para las colisiones de Ar^+ en Ar, las secciones transversales de transferencia de carga, de excitación electrónica, y de producción electrónica son recomendadas. Para el caso de las colisiones entre Ar con Ar, las secciones transversales de transferencia de momentum, las de excitación electrónica y las de producción electrónica son recomendadas para tener un conjunto completo necesario para empezar a “modelar”.

CAPÍTULO II

EQUIPO EXPERIMENTAL

II. EQUIPO EXPERIMENTAL

Para desarrollar el presente trabajo se utilizó el acelerador de partículas de baja energía (1.0 – 5.0 keV), el cual se encuentra en el Laboratorio de Colisiones Atómicas, Moleculares y Óptica del Centro de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma de México, ubicado en la ciudad de Cuernavaca, Morelos.

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

Se cuenta también con un sistema de vacío, que se compone de tres bombas mecánicas y dos turbomoleculares, con el cual se alcanza una presión de vacío de 10^{-7} Torr en el acelerador.

Un esquema del acelerador se muestra en la figura 2.1 y una fotografía del mismo en la figura 2.2.

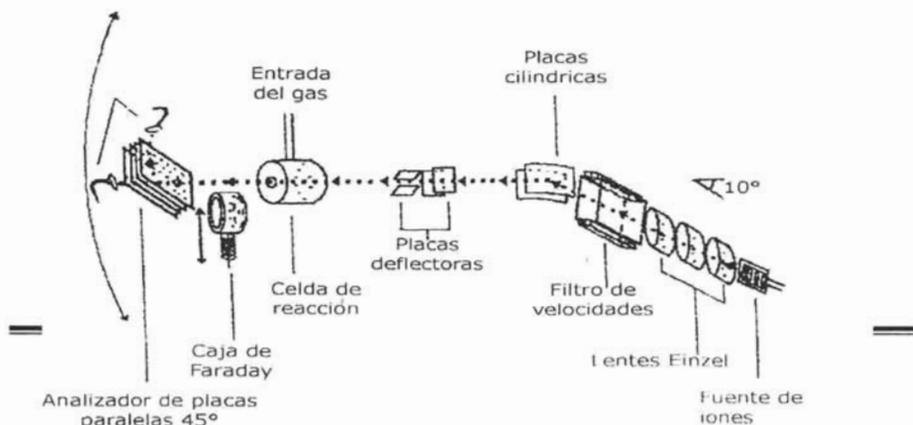


Figura 2.1 Esquema del acelerador de partículas de baja energía.

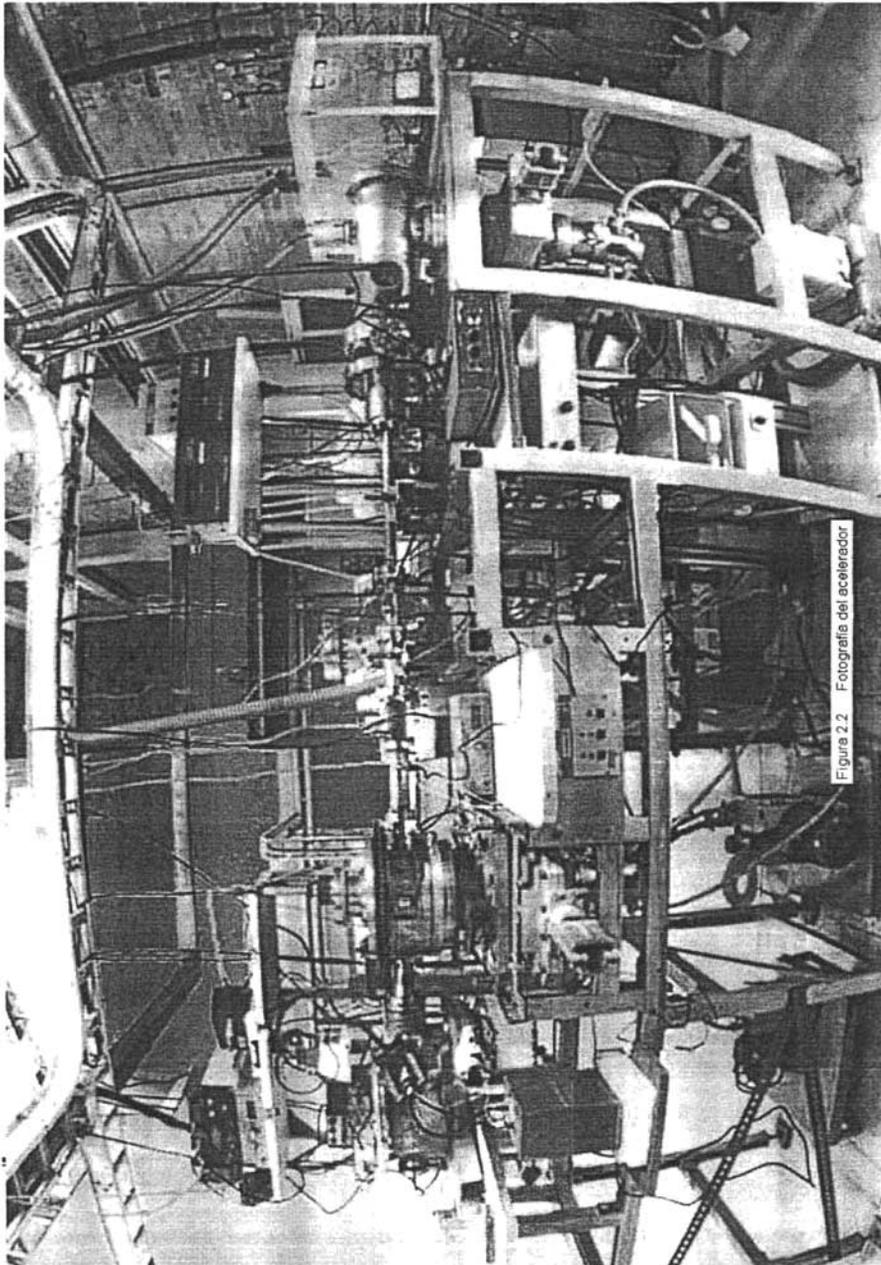


Figura 2.2 Fotografía del acelerador

2.1 SISTEMA DE VACÍO

Una cuestión fundamental en los experimentos de colisiones entre sistemas atómicos es el vacío o presión del gas residual a través del cual se desplazan el proyectil y los productos de la colisión. La idea básica de contar con un buen sistema de vacío es garantizar que el proyectil incidente mantenga su identidad desde que éste se produce en la fuente de iones hasta que llega a la celda de reacción, en donde se lleva a cabo la interacción con el blanco, y posteriormente, desde que se generan los productos hasta que estos son detectados en la cámara de detección. Para lograr esto, es necesario contar con un sistema de vacío que mantenga la presión en el interior del acelerador lo suficientemente baja, como para que el proyectil y los productos tengan un camino libre medio λ mucho mayor a la longitud que hay entre el lugar donde se producen los iones y el sistema de detección. Para determinar la presión de operación se hace uso de la ecuación del camino libre medio del haz

$$\lambda = (\sigma\eta)^{-1} \quad (2.1)$$

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

Dicho sistema está compuesto por tres bombas mecánicas y dos bombas turbomoleculares.

2.1.1 BOMBA MECÁNICA

Con una bomba mecánica se puede alcanzar una presión del orden de 10^{-1} a 10^{-3} Torr, con ello se apoya a una bomba turbomolecular, ya que ésta funciona a partir de un vacío de 10^{-3} Torr.

El vacío logrado por una bomba mecánica se produce con un rotor inmerso en un aceite especial; al girar atrapa los vapores de una región y los conduce a una salida, la cual se encuentra a presión atmosférica (ver figura 2.3).

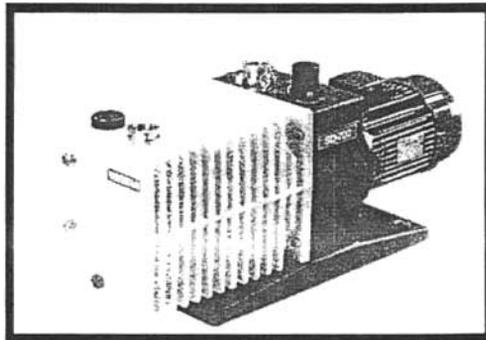


Figura 2.3 Fotografía de una bomba mecánica.

2.1.2 BOMBA TURBOMOLECULAR

Su funcionamiento es parecido al de una turbina y utiliza un sistema de enfriamiento por medio de un flujo de agua fría. En el interior se encuentra un rotor que gira a una velocidad de 36,000 rpm, el cual tiene sus extremos montados sobre baleros lubricados por aceite para reducir la fricción. Sobre éste se encuentran distribuidas una serie de aspas, separadas por una serie de discos, los cuales están fijos a la estructura de la bomba y perpendiculares al rotor. El vacío se logra debido a la diferencia de presiones creada al girar las aspas. El intervalo en el que operan eficientemente estas bombas va de 10^{-3}

a 10^{-9} Torr, por lo que, como ya se ha dicho, se necesita el apoyo forzoso de bombas mecánicas. Un esquema de una bomba turbomolecular se muestra en la figura 2.4.



Figura 2.4 Fotografía de una bomba turbomolecular.

2.2 FUENTE DE IONES

El haz incidente de iones de N^+ se produce por medio de una fuente de iones tipo *colutron*, de la cual se muestra una fotografía en la figura 2.5 y un esquema en la figura 2.6.

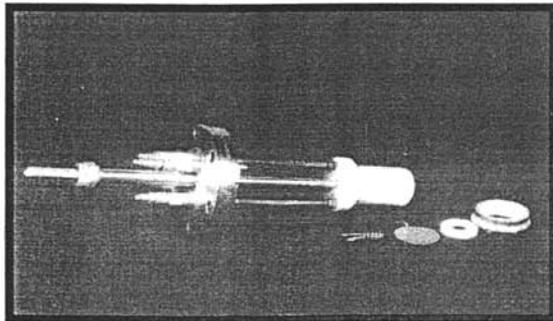


Figura 2.5 Fotografía de la fuente de iones.

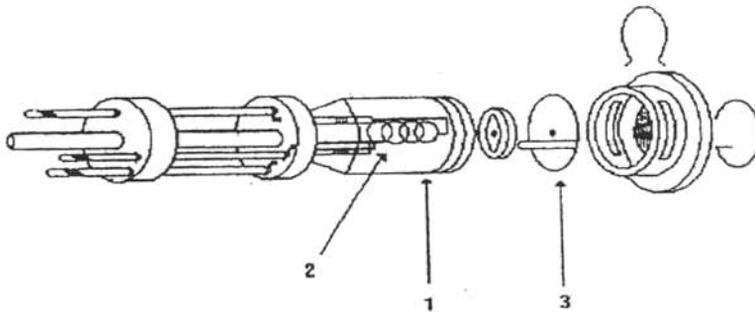


Figura 2.6 Esquema de la fuente de iones.

Las componentes principales de dicha fuente son:

1.- CUERPO DE LA FUENTE: Es el recinto donde se admite el gas que se desea ionizar. 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, 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 con la cual se provoca que éste se caliente, y así, por emisión termiónica, 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 se aceleran 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 $90 \mu\text{Hg}$. Además, para que la ionización se lleve a cabo se aplica al filamento de la fuente una corriente de 16 A, con esto se obtiene una descarga continua hacia el ánodo de aproximadamente 0.2 A.

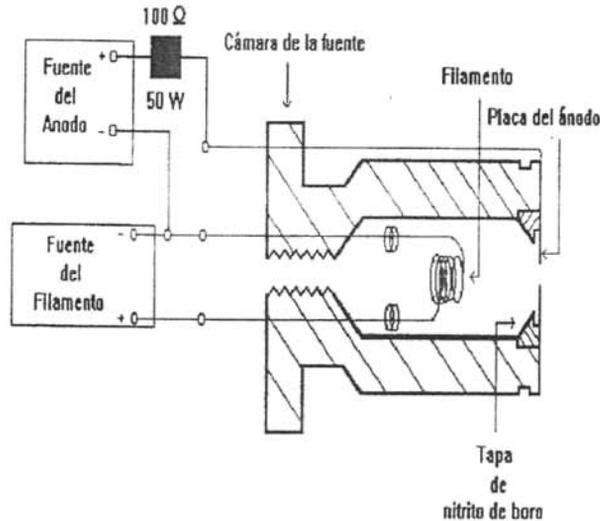


Figura 2.7 Electrónica de la fuente de iones.

2.3 SISTEMAS DE ENFOQUE, ACELERACIÓN Y SELECCIÓN DE IONES

En la fuente de iones no solo se producen iones de N^+ sino también otros iones, como N^{2+} los cuales no son útiles para nuestros propósitos. Todos los iones formados son acelerados y enfocados por medio de unas lentes electrostáticas (lentes Einzel), y posteriormente se usa un filtro de velocidades (filtro de Wien) con el propósito de seleccionar los iones que nos interesan.

2.3.1 LENTES EINZEL

Una lente óptica puede hacer que los rayos luminosos que inciden en ella se concentren 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”.

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 (figura 2.8).

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 (figura 2.9). En este trabajo se utilizan lentes de esta clase y son conocidas como Lentes Einzel. Estas lentes constan de tres electrodos cilíndricos de igual diámetro construidos de acero inoxidable que se encuentran 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. Por lo tanto, 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.

Dichas lentes y la electrónica asociada a ellas se muestran en las figuras 2.10 y 2.11 respectivamente.

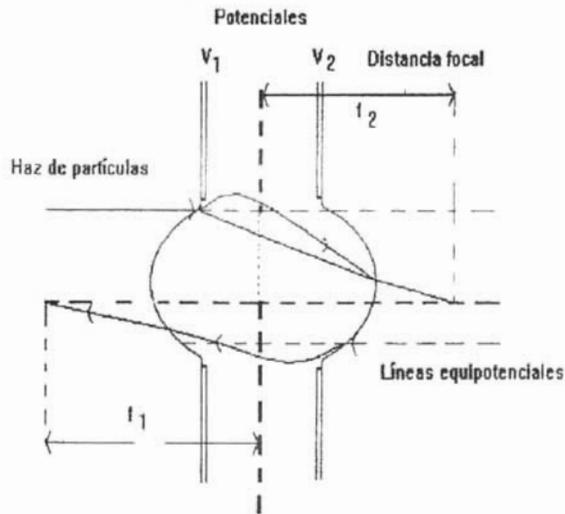


Figura 2.8 Lentes electrostáticas delgadas.

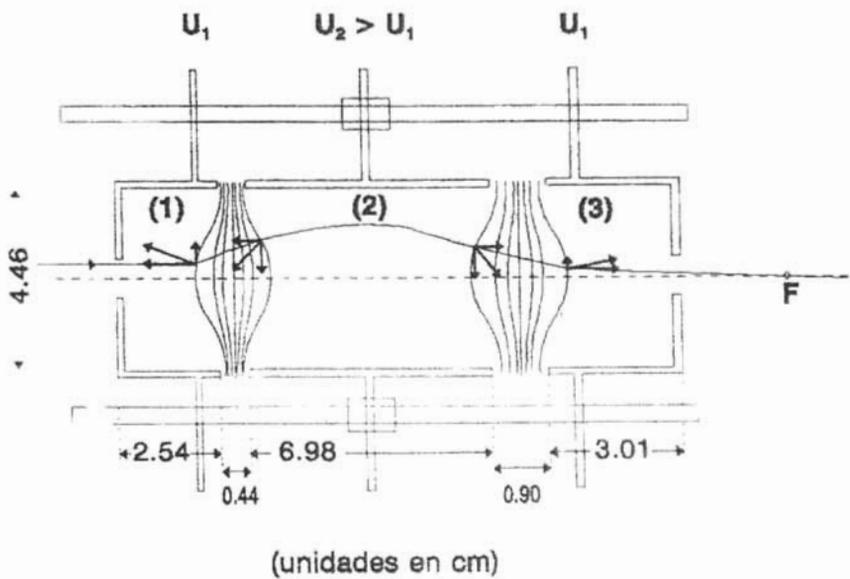


Figura 2.9 Lentes electrostáticas gruesas.

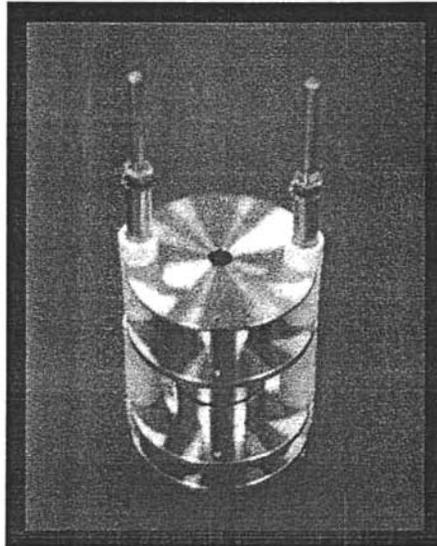


Figura 2.10 Fotografía de las lentes Einzel.

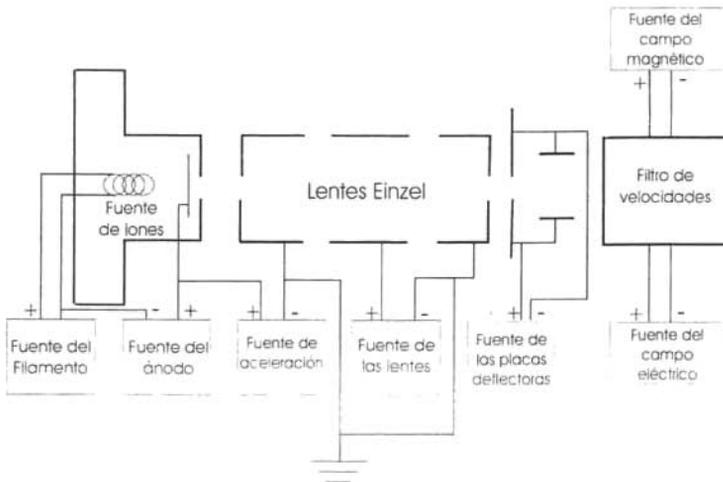


Figura 2.11 Electrónica de las lentes Einzel.

2.3.2 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 2.12).

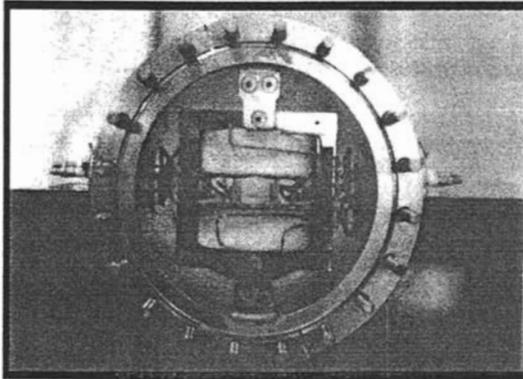


Figura 2.12 Fotografía del Filtro de Wien

Este filtro de velocidades se compone de un imán (para proporcionar el campo magnético) y un juego de placas deflectoras electrostáticas (que proporcionan un campo eléctrico cuando se les aplica una diferencia de potencial).

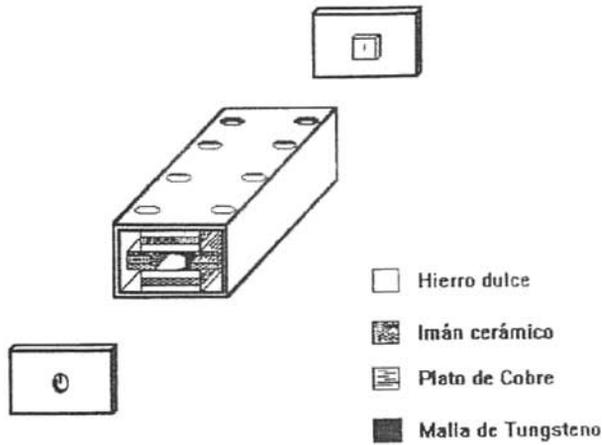


Figura 2.13 Diagrama del interior del Filtro de velocidades.

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:

$$\text{Fuerza electrostática} \quad F_E = eE \quad (2.2)$$

$$\text{Fuerza magnética} \quad F_M = v_0 eB \quad (2.3)$$

En 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 por lo tanto, los iones de velocidad v_0 que pasan sin sufrir ninguna desviación son aquellos que cumplen la relación:

$$v_0 = \frac{E}{B} \quad (2.4)$$

pero

$$v_0 = \sqrt{\frac{2qV}{M_0}} \quad (2.5)$$

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

Entonces, un ion con velocidad v_0 y de masa M_0 que se mueve a través del filtro no será deflectado si:

$$B \sqrt{\frac{2qV}{M_0}} = E \quad (2.6)$$

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 centripeta equivalente a:

$$F_c = \frac{M_x v_x^2}{R} = e v_x B - e E = e B v_0 \left[\sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1 \right] \quad (2.7)$$

Los iones de masa M_x se deflectan en una trayectoria circular de radio:

$$R = \frac{2V}{E \left[\sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1 \right]} \quad (2.8)$$

En la figura 2.14 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 ϕ , entonces para ángulos muy pequeños se tiene que:

$$\tan \phi \approx \text{sen} \theta \approx \phi \quad (2.9)$$

Por lo tanto:

$$\frac{D}{L} = \frac{a}{R} \quad (2.10)$$

$$D = \frac{La}{R} \quad (2.11)$$

Entonces de la ecuación (2.8) se obtiene:

$$D = LaE \frac{\left[\sqrt{\frac{M_0}{M_v}} - 1 \right]}{2V} \quad (2.12)$$

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 unidades de masa.

Por otro lado, a partir de la ecuación 2.6 que expresa la condición para que no haya deflexión se obtiene la siguiente condición para la masa:

$$M_0 = 2qV \left[\frac{B}{E} \right]^2 \quad (2.13)$$

Como el campo magnético para una bobina está dado por:

$$B = KI \quad (2.14)$$

Donde I es la corriente de la bobina y K es una constante que depende del número de vueltas, la constante de permeabilidad μ_0 y las características geométricas de la bobina.

Entonces:

$$\frac{\sqrt{2qV} KI}{E} = \sqrt{M_0} \quad (2.15)$$

Ahora, si el campo eléctrico E se mantiene constante, tenemos:

$$A = \frac{E}{K\sqrt{2qV}} = cte \quad (2.16)$$

Por lo tanto:

$$I = A\sqrt{M_0} \quad (2.17)$$

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

$$I_n = A\sqrt{M_n} \quad (2.18)$$

Donde M_n es la masa del ion 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.

También es importante mencionar que todo el sistema descrito, desde la fuente de iones hasta el filtro de Wien se encuentra desviado 10° 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 (dos multiplicadores de electrones que se encuentran en el sistema de detección), 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 uno horizontal.

El haz en su recorrido pasa a través de una serie de colimadores los cuales se encuentran a lo largo del acelerador de partículas.

2.4 CELDA DE REACCIÓN

El haz sigue su trayectoria y entra a la cámara de reacción, en donde se encuentra la celda de reacción (figuras 2.15 y 2.16); es aquí en donde se lleva a cabo el proceso de colisión.

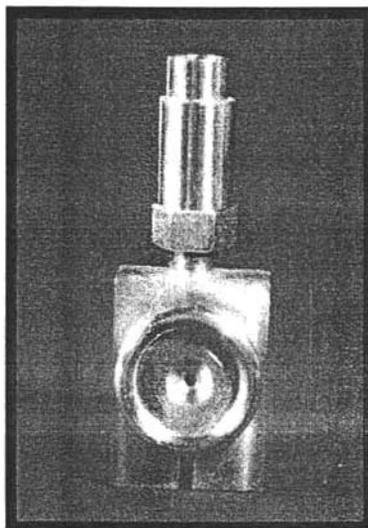


Figura 2.15 Fotografía de la celda de reacción.

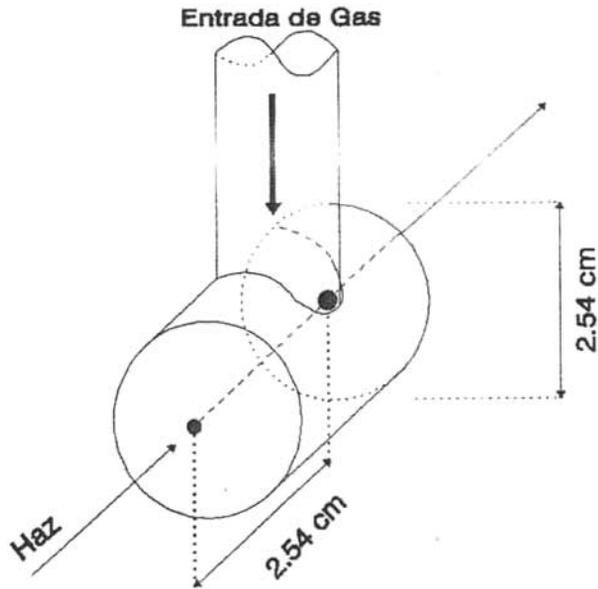


Figura 2.16 Diagrama de la celda de reacción.

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.

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.

En dicha celda se admite el gas que servirá de blanco al haz incidente a una presión de 4×10^{-4} Torr, lo cual es de suma importancia en virtud de que para los propósitos del experimento, se necesita que los iones incidentes colisionen una sola vez con cada átomo del gas blanco, lo cual se conoce como régimen de colisión simple. 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.

2.5 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 resultantes del proceso de interacción.

El sistema de detección está formado por una caja de Faraday y una cámara de detección. Dentro de la cámara de detección se encuentra un analizador parabólico a 45° y dos multiplicadores de electrones (CEM) situados uno en el eje del acelerador y otro al final del analizador.

2.5.1 CAJA DE FARADAY

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

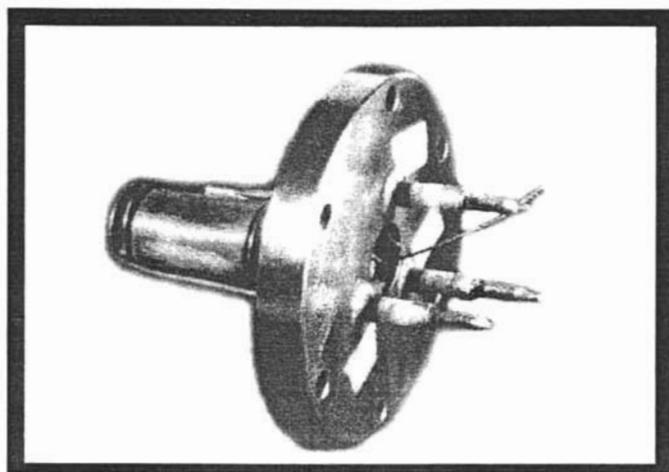


Figura 2.17 Fotografía de la caja de Faraday.

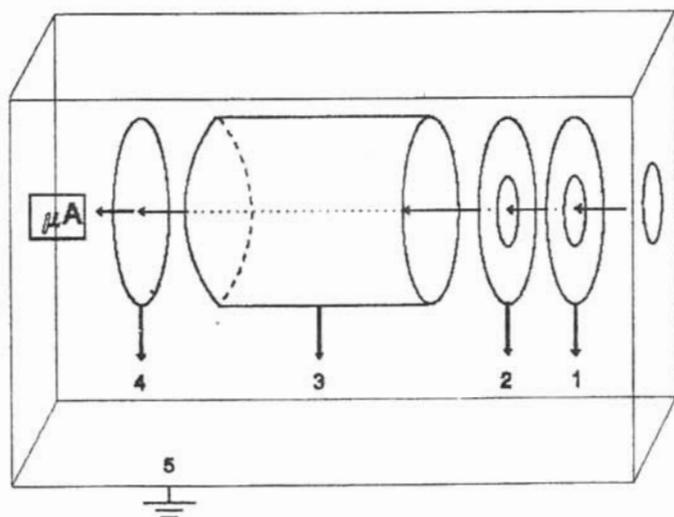


Figura 2.18 Diagrama de la caja de Faraday.

Como se muestra en las figuras 2.17 y 2.18, la caja de Faraday consta de 4 electrodos de cobre y una caja protectora. Los electrodos tienen las siguientes funciones:

El electrodo número 1; se encarga de repeler a los iones positivos provenientes del gas residual formado en la celda de reacción, por lo tanto se le aplica un voltaje positivo $V_1=50$ V.

El electrodo número 2; evita que salgan los electrones secundarios producidos dentro de la caja de Faraday. Se encuentra a un potencial negativo $V_2\sim 90$ V.

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 $V_3\sim 300$ V.

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 y está conectada a tierra.

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

$$\frac{N_i}{t} = \frac{I_0}{e} \quad (2.19)$$

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 analógico y es del orden de 10^{-10} A. 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.

Por otro lado 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° , disminuyendo el número de éstas conforme el ángulo de detección se aleja del eje del acelerador.

Las partículas cargadas y neutras se separan utilizando un analizador parabólico a 45° .

2.5.2 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 2.19.

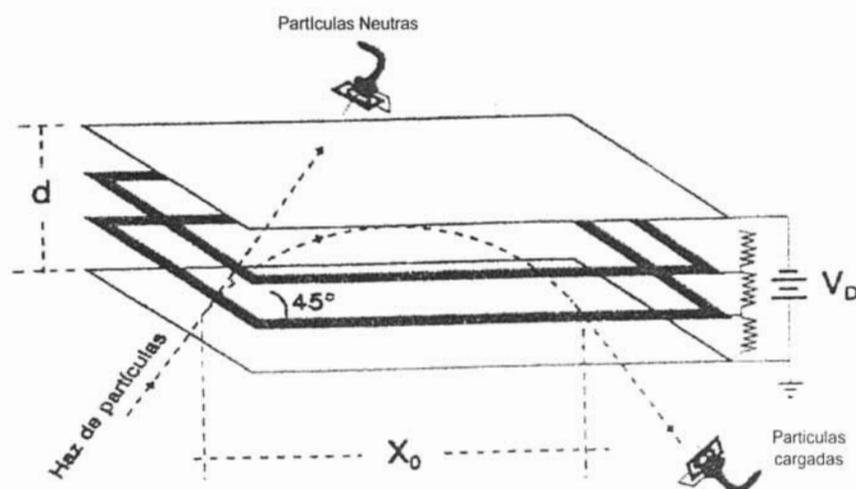


Figura 2.19 Analizador parabólico.

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° . 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:

$$V_D = (0.632)E_a \quad (2.20)$$

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 $10 \text{ M}\Omega$.

2.5.2.1 Calibración del analizador

Para calibrar el analizador, esto es, determinar experimentalmente la relación entre el voltaje de deflexión V_D aplicado al analizador y el voltaje de aceleración V_0 aplicado en la fuente de iones, se seleccionó al ion H^+ como partícula incidente en un intervalo de energías de entre 1 y 5 keV. Aquí se obtuvieron gráficas de corriente de iones en función del voltaje V_D (distribución de energía). La tabla 2.1 y la figura 2.20 muestran, como ejemplo, la distribución a una energía de aceleración de 3 keV.

V_D (volts)	# de Partículas
1600	20
1620	31
1640	26
1660	42
1680	45

1700	54
1720	69
1740	138
1760	306
1780	560
1800	780
1820	1027
1840	1875
1860	2020
1880	2305
1900	2086
1940	1798
1960	1033
1980	789
2000	571
2020	487
2040	127
2060	85
2080	49
2100	25
2120	21
2140	20

Tabla 2.1 Distribución de energía a 3 keV.

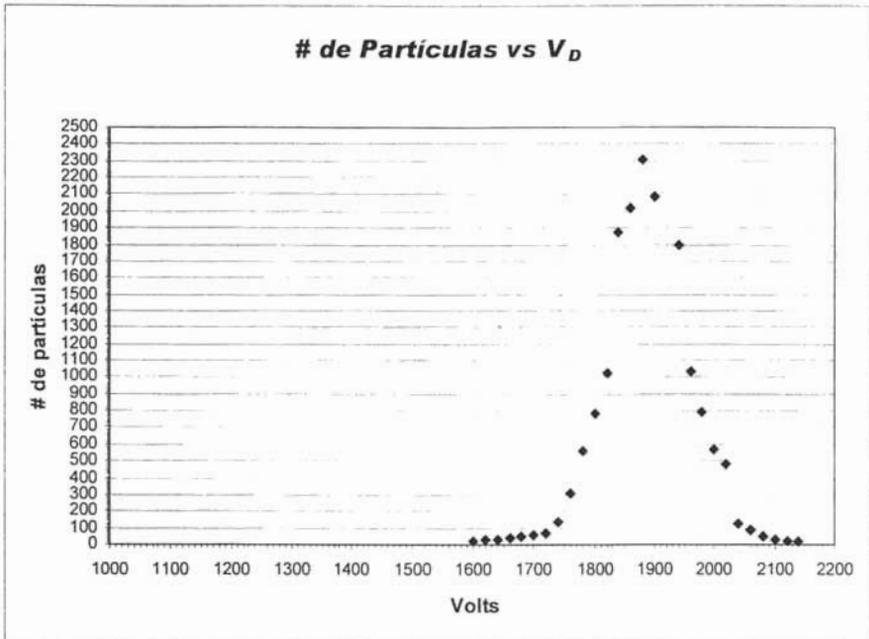


Figura 2.20 Corriente de iones en función del voltaje V_D (distribución de Energía)

Se calibró el analizador a partir de los valores del voltaje del analizador para los cuales el número de partículas fue máximo en las distribuciones anteriores. Estos valores se encuentran resumidos en la tabla 2.2 y se muestran en la figura 2.21.

Energía (eV)	Voltaje al máximo # de partículas (volts)
1000	630
1500	950
2000	1260
2500	1580
3000	1880
3500	2220

4000	2530
4500	2850
5000	3160

Tabla 2.2 Voltaje de deflexión (V_D), en función de la energía de las partículas incidentes (E_a).

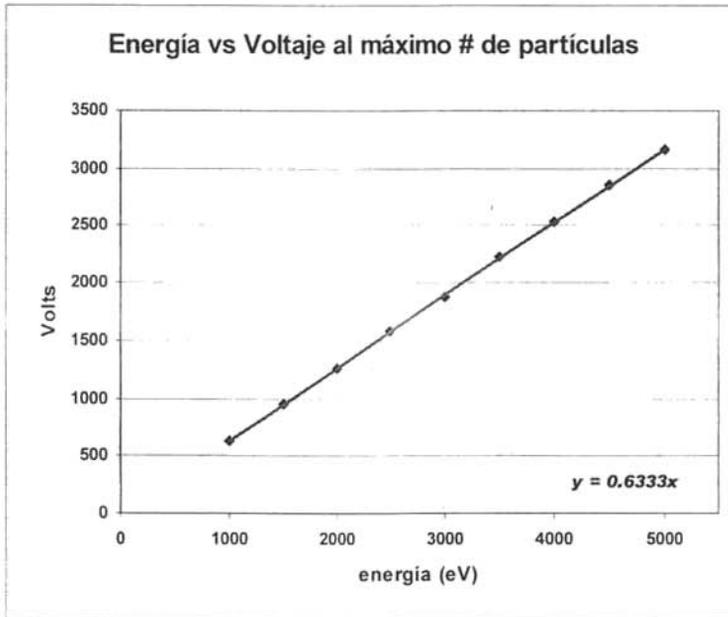


Figura 2.21 gráfica del ajuste de V_D vs E_a

Ajustando por mínimos cuadrados estos valores, se encuentra que la relación entre el voltaje del analizador (V_D) y la energía de las partículas (E_a) está dada por:

$$V_D = 0.632E_a \quad (2.21)$$

2.5.3 MULTIPLICADOR DE ELECTRONES

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 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 ó 6 mm construidos de un vidrio especial de plomo con silicio (figura 2.22). Tienen una capa de material semiconductor, sobre la superficie interior del tubo, que posee características de emisión de electrones secundarios.

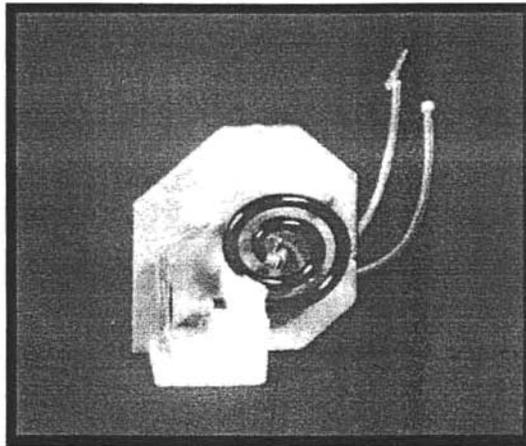


Figura 2.22 Fotografía del Channeltron.

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 se aceleran 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 2.23 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.

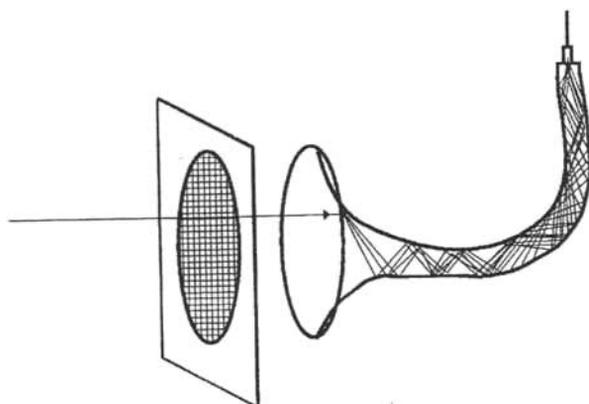


Figura 2.23 Diagrama del Channeltron.

CAPÍTULO III

DESARROLLO EXPERIMENTAL

III. DESARROLLO EXPERIMENTAL

3.1 DISTRIBUCIONES ANGULARES

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 se analizan por medio de variables introducidas que son directamente medibles para los procesos que están involucrados en la interacción entre los iones de N^+ y el gas N_2 .

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 $\pm 3^\circ$ respecto al eje principal del aparato, en incrementos angulares de 0.1° . 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 contadores de tiempo (timers).

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

3.2 DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO

Para poder realizar los experimentos planteados en este trabajo, que son procesos de pérdida electrónica, es necesario primero obtener una presión de vacío del orden de 10^{-7} Torr en todo el sistema experimental. Esta condición es con el propósito de garantizar que el camino libre medio dentro del acelerador sea lo suficientemente bueno para que las partículas incidentes producidas en la fuente de iones conserven sus propiedades físicas hasta llegar a la celda de reacción.

Una vez obtenido el vacío se prosigue a la formación de las partículas incidentes que para efectos de los experimentos son iones de N^+ . Estos iones se obtienen (ya que en la

naturaleza sólo se encuentra nitrógeno molecular) admitiendo gas de nitrógeno (N_2) de 99.999% de pureza dentro de la fuente de iones a una presión de $90 \mu\text{Hg}$; 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 N^+ , es necesario enfocarlo ya que éste no se encuentra colimado. Además, en esta situación no sólo se encuentran los iones de N^+ necesarios para el proceso, sino que también existen partículas de N^{2+} y N^0 lo que hace necesario también seleccionarlo. Para estos propósitos se hace uso de las lentes Einzel y del 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. Entonces, es necesario corregir la dirección del haz de iones. lo que lo se logra 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 adecúan los parámetros en el sistema de detección (analizador parabólico y Channeltron). Además, se admite el gas blanco (N_2) 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 blanco y para cada energía, lo que equivale a 45 distribuciones. Como se estudian 3 blancos entonces se tienen que realizar 135 corridas para completar los experimentos planteados en este trabajo. El tiempo dado en horas que se invierten para esto es de 75 horas efectivas 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.

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

Variable	Cantidad (unidades)
Presión de vacío en el aparato experimental	10^{-7} Torr
Presión del gas a ionizar (N_2) en la fuente de iones	90 μ Hg
Corriente del filamento de la fuente de iones	16 A

Potencial en el ánodo	80 V
Corriente de descarga en el ánodo de la fuente de iones	0.2 A
Voltaje de enfoque aplicado en la segunda Lente Einzel	860 V/keV
Voltaje aplicado para el campo eléctrico en el filtro de velocidades	150 V
Campo magnético que depende de la energía de aceleración	B
Voltaje en las placas paralelas cilíndricas para corregir la dirección del haz	150 V/keV
Voltajes aplicados a los electrodos de la caja de Faraday	50 V (electrodo 1) -90 V (electrodo 2) ~-300 V (electrodo 3)
Magnitud de la corriente del haz incidente (N^+)	10^{-10} A
Presión del gas blanco en la celda de reacción (N_2)	4×10^{-4} Torr
Voltaje aplicado en el analizador parabólico	315 V/keV
Voltaje en el Channeltron	3000 V
Movimiento del sistema de detección	$\pm 3^\circ$
Incremento angular	0.1°
Tiempo de acumulación	20 s

Tabla 3.1 Variables involucradas en el experimento

3.3 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 con el electrómetro, 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 (π) en la celda de colisión. Dicho espesor está dado por:

$$\pi = \frac{N_A L P}{RT} \quad (3.1)$$

en unidades de átomos/cm², 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 (6.02×10^{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 π es una función de la presión solamente. Es decir:

$$\pi = QP \left(\frac{\text{átomos}}{\text{cm}^2} \right) \quad (3.2)$$

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

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

$$Q = 8.17 \times 10^{20} \text{ átomos} \cdot \text{m}^{-2} = 8.17 \times 10^{16} \text{ átomos/cm}^2 \quad (3.3)$$

Entonces:

$$\pi = 8.17 \times 10^{16} P \text{ (átomos/cm}^2\text{)} \quad (3.4)$$

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

$$I(\theta) = \frac{N(\theta)}{t} \quad (3.5)$$

donde t es el tiempo de acumulación.

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

$$d\Omega = \left(\frac{r^2}{d^2} \right) 3.1416 \quad (3.6)$$

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:

$$d\Omega = 7.85 \times 10^{-7} \text{ [steradianes]} \quad (3.7)$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N(\theta)}{[N_i \pi d \Omega]} \quad (3.8)$$

donde

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

π es el número de moléculas blanco por unidad de área (espesor del blanco, partículas/cm²). Esto es $\pi = 8.17 \times 10^{16} P$, donde P es la presión en la celda de reacción (4×10^{-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 (3.8) las cantidades directamente medibles, se obtiene:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{RTeN(\theta)}{N_A L P I t d \Omega} \quad (3.9)$$

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:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = K \frac{N(\theta)}{P I t} \quad (3.10)$$

con $K = 2.62 \times 10^{-30}$.

La sección transversal total se obtiene integrando la ecuación (3.10). es decir, utilizando la relación:

$$\sigma = \int \left(\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \right) d\Omega = 2\pi \int \left(\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \right) \sin(\theta) d\theta \quad (3.11)$$

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

3.4 ERRORES EXPERIMENTALES

Durante el desarrollo del 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 los errores experimentales que dependen directamente de las cantidades físicas siguientes: corriente total de iones (N), 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 un error porcentual. La incertidumbre total asociada al experimento es la suma de todos estos errores.

1.- Corriente total de iones (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 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 0.1%.

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

4.- Longitud efectiva (L): El error porcentual asociado a la longitud efectiva de la celda de reacción es del 3.8%.

5.- Tiempo (t): El error relativo asociado a esta variable está dada por los medidores del tiempo (Timers), de acuerdo con el fabricante es del 0.1%.

6.- Número de partículas detectadas (N): El error relativo asociado al número de partículas detectadas en el multiplicador de electrones es proporcional a: $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Para $N > 16$ esta cantidad se hace despreciable, con respecto a los errores relativos asociados a las demás variables del experimento.

Sumando todas las incertidumbres asociadas a las variables ya mencionadas, encontramos que el error porcentual correspondiente a las secciones diferenciales es del 15%.

La reproducibilidad de las secciones transversales totales fue mayor al 85 %.

CAPÍTULO IV

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de las secciones transversales diferenciales y totales de captura electrónica en función de la energía de los iones incidentes de N^+ al colisionar con moléculas de N_2 . Además se mostrará cómo se realizan los cálculos, los cuales se compararán con los resultados experimentales obtenidos en este trabajo y en algunos casos con trabajos previamente realizados por otros autores.

4.1 RESULTADOS EXPERIMENTALES. CÁLCULO DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL DIFERENCIAL

La sección transversal diferencial y por tanto la sección transversal total que un blanco presenta ante el impacto de un ion incidente, está relacionada con los parámetros directamente medibles en el experimento de la siguiente manera:

Si se considera el proceso de captura electrónica, en el cual un ion positivo N^+ incide con velocidad v_0 sobre un blanco gaseoso formado por moléculas de N_2 con una densidad de partículas n_G ; y suponiendo que el ion recorre una distancia dx dentro del gas blanco, entonces la probabilidad de que ocurra una transferencia de carga será:

$$P_i = \sigma n_G dx \quad (4.1)$$

en donde la constante de proporcionalidad σ es la llamada sección transversal de la captura electrónica. En el caso del presente trabajo σ_{10} será la sección transversal total del proceso en el que el ion incidente, N^+ , gane un electrón en la interacción con el gas blanco, y por tanto tendremos como átomo resultante N^0 . Ahora bien, si se considera un haz

incidente de densidad constante n_N , de partículas N^+ con velocidad v_0 , entonces el número de éstas que intercambian su carga por unidad de tiempo en un volumen $dv = dAdx$ es:

$$dI = \sigma n_N n_G v_0 dAdx \tag{4.2}$$

Y como se han puesto las condiciones necesarias en el experimento para asegurar que los iones sólo sufren una colisión y que la densidad del gas blanco es uniforme, tenemos que:

$$I = \sigma n_G l \int n_N v_0 dA = \sigma n_G l I_N = \sigma \Pi I_N \tag{4.3}$$

donde Π es el espesor del gas blanco. Por lo tanto la sección transversal del proceso estará dada por:

$$\sigma = \frac{I}{\Pi I_N} \tag{4.4}$$

En el caso de secciones diferenciales en ángulo sólido, esta ecuación expresada en términos de los parámetros directamente medibles en el laboratorio es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N^{2+}(\theta)}{l \left(\frac{I_N}{e} \right) \left(\frac{P}{KT} \right)} d\Omega l C_{eff} \tag{4.5}$$

En donde:

- $N^0(\theta)$ es el número de átomos que ganaron un electrón y se dispersaron a un ángulo θ después de la colisión.
- I_N es la corriente total de iones incidentes en el blanco.
- e es la carga del electrón.
- P la presión del gas blanco.
- T la temperatura del gas blanco, considerándolo como un gas ideal.
- K la constante de Boltzmann.
- l la longitud efectiva del blanco.

- $d\Omega$ es la diferencial del ángulo sólido determinado a partir de la geometría del sistema de detección.
- θ el ángulo de dispersión.
- t el tiempo en el que se cuentan las partículas en cada ángulo θ .
- C_{eff} es la eficiencia de los contadores de partículas. la cual esta en función de la energía de las partículas incidentes.

Y por otro lado:

$$\frac{I d\Omega C_{eff}}{eKT} = 3.817 \times 10^{29} = cte. \quad (4.6)$$

De tal manera, la expresión para las secciones diferenciales queda de la siguiente manera:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2.62 \times 10^{-30} \frac{N(\theta)}{PI_N t} \quad (4.7)$$

Los datos de las secciones transversales diferenciales de captura electrónica de iones de N^+ en N_2 fueron obtenidos a ángulos entre -3.6 y 3.6 grados y en un intervalo de energía entre 0.5 y 5 keV. La figura 4.1 muestra las distribuciones angulares a diferentes energías de colisión. El comportamiento de distribuciones angulares es cualitativamente idéntico para todas las energías. Todas las curvas graficadas en la figura 4.1 muestran un comportamiento decreciente en la sección diferencial con respecto a un incremento en el ángulo, mostrando una ligera estructura que empieza a un ángulo de 2.6 grados, a todas las energías de colisión. Para mayor claridad la distribución de 0.5 keV fue omitida de la gráfica, dado que muestra el mismo comportamiento que la distribución a 1.0 keV:

4.2 SECCIÓN TRANSVERSAL TOTAL

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

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

con

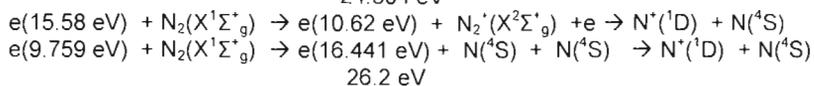
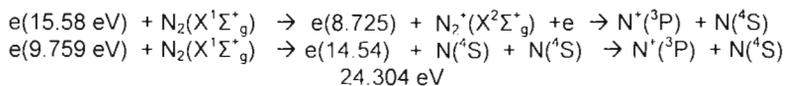
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I_{Kr^0}}{\pi d \Omega I_{Kr^0} C_{eff}} \quad (4.2)$$

Donde I_N^+ es el número de iones de N^+ incidiendo por segundo en el blanco, I_N^0 es el número de átomos contados a un ángulo θ con respecto a la dirección del haz incidente, π es el espesor del blanco (átomos por unidad de área), $d\Omega$ es el ángulo sólido sustentado por el sistema del detector y C_{eff} es la eficiencia del channeltron.

4.3 CÁLCULO DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL TOTAL

En la figura 4.2 se puede observar que las secciones medidas en este trabajo varían entre 1 y 10 \AA^2 . Las barras muestran una indicación de la máxima reproducibilidad de los datos. Es importante mencionar que hay información experimental [J.A. Rutherford, D.A. Vroom, J. Chem. Phys. 62, 1460 (1975)] que indica que solo hay un estado metaestable presente en el haz de iones de N^+ que se puede producir en colisiones e^- -molécula, para electrones con una energía desde hasta 100 eV. Para electrones con energía ionizante de 100 eV solo el estado metaestable mas bajo $N^+(^1D)$ está presente en el haz de partículas producido por ionización – fragmentación del N_2 y el estado metaestable tiene una abundancia relativa de 0.15 en el haz de iones [J.A. Rutherford, D.A. Vroom, J. Chem. Phys. 62, 1460 (1975)]. Esta distribución de estados se ha observado que es constante para energías de electrones mayores de 35 eV [J.A. Rutherford, D.A. Vroom, J. Chem. Phys. 62, 1460 (1975)].

N^+		N^0	
1D _____	- 27.704 eV	2P _____	-10.964 eV
	1.899 eV	2D _____	-12.146 eV
3P _____	- 29.605 eV	4S _____	-14.54 eV



$P=80\mu\text{Torr}$; $(70,90) \mu\text{Torr}$
 $P_{att}=1\text{-}1\text{mTorr}$; $P_{max}(1D)=10 \mu\text{Torr}$

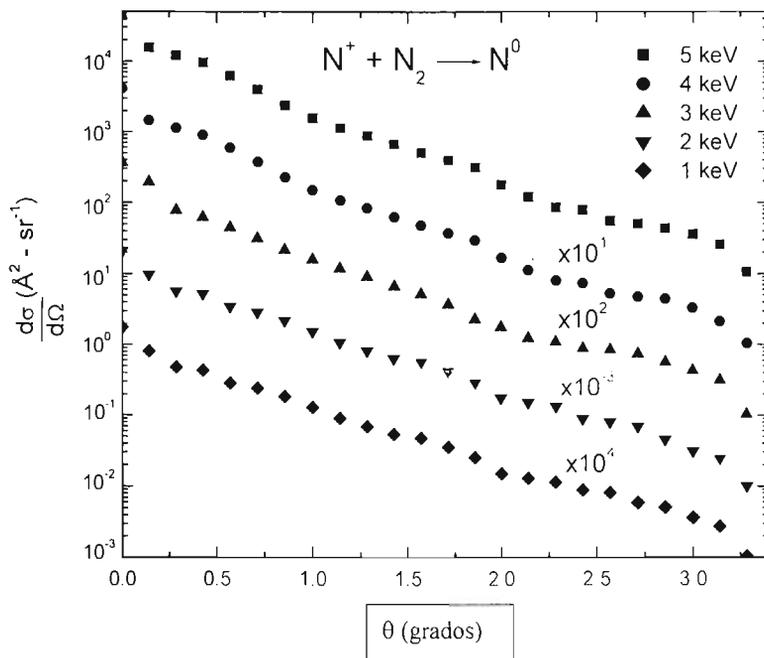


Figura 4.1.- Secciones transversales diferenciales en ángulo de captura electrónica de iones de N^+ en N_2 .

**ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA**

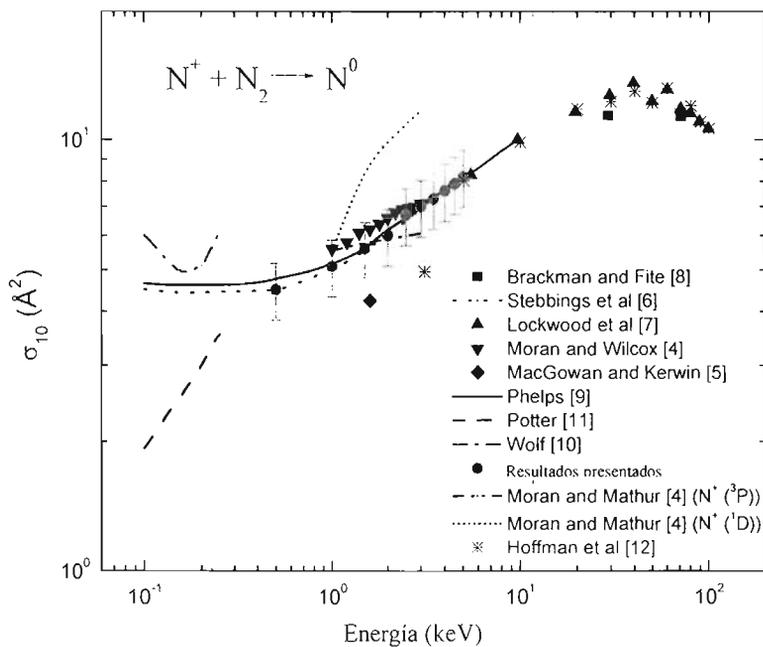


Figura 4.2. Secciones transversales totales de captura electrónica de iones de N^+ en N_2 .

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES

V. CONCLUSIONES

Para finalizar, en este capítulo se concluye acerca de los resultados más importantes del presente trabajo. Con esto se aporta una visión más amplia sobre el estudio del sistema N^+ en N_2 .

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

- a) Las mediciones de las secciones transversales diferenciales absolutas de captura electrónica de N^+ en N_2 , en un intervalo de energía de 1.0 a 5.0 keV muestran un comportamiento decreciente como función del ángulo a todas las energías de colisión estudiadas.
- b) La sección transversal total medida en función de la energía muestra un buen acuerdo con previas medidas experimentales. Este conjunto de medidas experimentales presentan un comportamiento monótono creciente mostrando un máximo en la sección total aproximadamente a 40 keV, el cual está de acuerdo con el análisis del modelo de Massey^[2].
- c) Los presentes resultados experimentales se conectan con los resultados a baja energía de Stebbings et al^[3]. Estos resultados dan un comportamiento general de la curva de sección transversal sobre un intervalo de energía (.1 – 200) keV.
- d) Los presentes resultados están de acuerdo con el criterio adiabático de Massey.

Finalmente, considerando las metas planteadas originalmente en este trabajo se lograron obtener resultados que permiten tener una idea más amplia del proceso de captura de carga de N^+ en N_2 .

REFERENCIAS

REFERENCIAS

- [1].- L. Landau, **Phys. Z Sov.** 246 : 4 (1932).
- [2].- E. W. Mc Daniel, **Atomic Collisions: Heavy Particle Projectiles**, John Wiley & Sons Inc., New York, (1993).
- [3].- H. Martínez, F. Castillo, P.G. Reyes, *Intrn. J. Of Mass Spectrometry* 218 (2002) 161
- [4].- R.F. Stebbing, B.R. Turner, A.C.H. Smith, *J. Chem Phys.* 38 (1963) 2277.
- [5].- J.A. Rutherford, D.A. Vroom, *J. Chem. Phys.* 62 (1975) 1460.
- [6].- R.F. Potter, *J. Chem. Phys* 22 (1954) 974.
- [7].- J.B. Hasted , *Proc. Roy. Soc. (London)* A212, 235 (1952).
- [8].- F. Wolf, *Ann. Phys.*, 30 (1937) 313.
- [9].- G.J. Lockwood, *Phys. Rev. A*, 2 (1970) 1406.
- [10].- J.M. Hoffman, G.H. Miller, G.J. Lockwood, *Phys. Rev.*, A 25 (1982) 1930.
- [11].- W.L. Nutt, R.W. McCullough, y H.B. Gilbody. *J. Phys.* B12, L157 (1979).
- [12].- T.F. Moran y J.B. Wilox, *J. Chem. Phys.* 69, 1397 (1978).
- [13].- T.F. Moran. B.P. Mathur, *Phys. Rev. A* 21 (1980) 1051.
- [14].- T.F. Moran. J.W. Wolix. *J. Chem. Phys.* 10 (1979) 1467.
- [15].- N. Balakrishnan, V. Kharchenko, y A. Dalgarno, *J. Chem. Phys.* 108(3) (1998) 943.
- [16].- W. Freysinger, F.A. Khan, y P.B. Armentrout, *J. Chem. Phys.* 101 (5) (1994) 3688.
- [17].- A.V. Phelps, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 20 (1991) 557.
- [18].- Técnicas de vacío, **Manual de Lab. II**. Fac. de Ciencias. UNAM.
- [19].- J.F. O'Hanlon, **A user Guide to Vacuum Technology**. John Wiley & Sons (1980).
- [20].- J.M. Hernández, **Tesis de Licenciatura**. Esc. de Ciencias, UAEM (1994).