

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

SECCIONES EFICACES ABSOLUTAS DÈ LA CAPTURA DISOCIATIVA DEL ION MOLECULAR ${{H_2}^+}$ EN Ar

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A FIDEL BENJAMÍN ALARCÓN HERNÁNDEZ

DIRECTOR DE TESIS: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA CO DIRECTOR: DR. FAROOK BASHIR YOUSIF J.

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DRA. BEATRIZ ELIZABETH FUENTES MADARIAGA MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. FAROOK BASHIR YOUSIF J.



México D.F 2006



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.

AGRADECIMIENTOS:

Al Centro de Ciencias Físicas de la UNAM y a la Universidad Nacional Autónoma de México.

A los técnicos académicos :

Anselmo Gonzáles Trujillo por su colaboración en sistemas de vacio. José Rangel por su apoyo en la elaboración de piezas del aparto experimental. Armando Bustos por su apoyo en la electronica del dispositivo experimental

A los Doctores: Dr. Farook Bashir Yousif, Dra. Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga y Dr. Horacio Martínez Valencia, por darse tiempo y ser parte de mi comité tutoral durante el posgrado

A los compañeros y amigos que de alguna manera contribuyeron a que concluyera este posgrado.

A los sinodales por aceptar ser parte del jurado y por los comentarios y sugerencias hechos a este trabajo de tesis.

- Dr. Horacio Martínez Valencia.
- Dr. Eduardo Andrade Ibarra.
- Dr. Ramiro García García.
- Dr. Fermín Castillo Mejía.
- Dr. Farook Bashir Yousif.

A los proyectos: DGAPA IN109103-3 y CONACyT 41072-F por el apoyo.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difuedir an formato electrónico e impreso el contenido. mi trabajo recepcional. de NOMBRE: 1 FECHA: 200 FIRMA:

Agradezco de manera particular y muy especialmente a:

Dr. Horacio Martínez Valencia.

Por el apoyo y ánimos que siempre me dio en todos los aspectos.

Por su paciencia, comprensión y confianza.

Y sobre todo, por su amistad.

Finalmente expreso mi agradecimiento a:

Mis padres (Honorato y Susana)

Mis hermanas (Yesenia, Xochitl, Janet, y Miriam) Mis hermanos (Salomón, Andrés, Isaac y Gamaliel).

A Félix mi esposa, así como a Benjamín, Miriam y Alan mis hijos.

Por toda la ayuda y todo el apoyo Y principalmente por la comprensión.

Índice General

Introducción 2 Capítulo 2 4 Antecedentes y Teoría de la Investigación 4 2.1 Procesos de Disociación Molecular en Colisiones Ión Molecular – Átomo. 4 2.1 Modelo de Captura Electrónica. 5 2.3 Modelo de Disociación Molecular. 7 2.4 Resumen de Trabajos Previos. 13 Capítulo 3 15 5 Aparato Experimental 15 3.1 Sistema de Vacio. 17 3.1.2 Bomba Turbomolecular. 18 3.2 Fuente de Iones. 20 3.3 Sistema de Detección. 21 3.4 Celda de Reacción. 29 3.5 Sistema de Detección. 31 3.5.1 Cajida de Braday. 33 3.5.2 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 Descripción del Experimento. 40 4.1 Distribuciones Angulares. 43 4.2 Paradolico. 38 4.3	Capítulo 1		2
Capítulo 2 4 Antecedentes y Teoria de la Investigación 4 2.1 Procesos de Disociación Molecular en Colisiones Ión Molecular – Átomo. 4 2.1 Procesos de Disociación Molecular en Colisiones Ión Molecular – Átomo. 4 2.1 Modelo de Captura Electrónica. 5 2.3 Modelo de Disociación Molecular. 7 2.4 Resumen de Trabajos Previos. 13 Capítulo 3 15 5 Aparato Experimental 15 3.1. Sistema de Vacio. 17 3.1. Sistema de Vacio. 17 3.1. Bomba Turbomolecular. 18 3.2. Fuente de Iones. 19 3.3. Sistema de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Enfoque. 21 3.4 Celda de Reacción. 21 3.5.1 Cajita de Branday. 31 3.5.1 Cajita de Parabolico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 33 3.5.2.1 Calibración del Experimento. 40 Descorollo Experimental. 40	Introducci	ión	2
Antecedentes y Teoría de la Investigación 4 2.1. Processos de Disociación Molecular en Colisiones Ión Molecular – Átomo. 4 2.2. Modelo de Disociación Molecular. 7 2.3. Modelo de Disociación Molecular. 7 2.4. Resumen de Trabajos Previos. 13 Capítulo 3 Internetial 15 Aparato Experimental 15 3.1. Sistema de Vacio. 17 3.1. Sistema de Caclone. 19 13. 3.3. Sistema de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 21 3.3. Sistema de Detección. 29 24 3.4 Celda de Reacción. 29 3.4. Celda de Reacción. 29 3.5 Sistema de Detección. 31 35.1 Caja de Faraday. 31 3.5.1. Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3. Multiplicador de Electrones. 38 38 4.1. Distribuciones Angulares. 40 4.1. Distr	Capítulo 2	, ,	4
2.1. Processos de Disociación Molecular en Colisiones Ión Molecular – Átomo. 4 2.2. Modelo de Captura Electrónica. 5 2.3. Modelo de Disociación Molecular. 7 2.4. Resumen de Trabajos Previos. 13 Capítulo 3 15 Aparato Experimental 15 3.1. Sistema de Vacío. 17 3.1.2 Bomba Turbomolecular. 18 3.2. Fuente de Iones. 19 3.3. Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.2.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4. Celda de Reacción. 29 3.5. Sistema de Dirección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2.1 Calitración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 36 Capítulo 4	Anteceden	tes y Teoría de la Investigación	
2.2. Modelo de Captura Electrónica	2,1.	Procesos de Disociación Molecular en Colisiones Ión Molecular – Átomo.	
2.3. Modelo de Disociación Molecular	2,2,	Modelo de Captura Electrónica	5
2.4. Resumen de Trabajos Previos. 13 Capítulo 3	2.3.	Modelo de Disociación Molecular	7
Capítulo 3 15 Aparato Experimental 15 3.1. Sistema de Vacío. 17 3.1.2 Bomba Turbomolecular. 18 3.2. Fuente de Iones. 19 3.3. Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4 Celda de Reacción 29 3.5 Sistema de Detección 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 Desarrollo Experimental. 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2 Descripción del Experimento. 40 4.3 Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4 Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 <td>2.4.</td> <td>Resumen de Trabajos Previos</td> <td></td>	2.4.	Resumen de Trabajos Previos	
Aparato Experimental 15 3.1. Sistema de Vacio. 17 3.1.2. Bomba Turbomolecular 18 3.2. Fuente de Iones. 19 3.3. Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4 Celda de Reacción. 29 3.5. Sistema de Detección. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 Desarrollo Experimental. 40 4.1. Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 5.3 Sección Transversal Diferencial. 47 5.3 Sección Transversal Diferencial. 55 58 Capítulo 6.	Capítulo 3	3	15
3.1. Sistema de Vacio. 17 3.1.2. Bomba Turbomolecular. 18 3.2. Fuente de Iones. 19 3.3. Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4. Celda de Reacción. 29 3.5. Sistema de Detección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.3.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 7.1. Sección Transversal Diferencial. 47 5.3 Sección Transversal Diferencial. 47 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 58	Aparato E	xperimental	
3.1.2 Bomba Turbomolecular. 18 3.2. Fuente de Iones. 19 3.3. Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4. Celda de Reacción 29 3.5. Sistema de Detección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 <i>Desarrollo Experimental</i> 40 4.1. Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 <i>Resultados y Discusión</i> 47 5.3 Sección Transversal Diferencial. 47 5.3 Sección Transversal Total 55 Capítulo	3.1.	Sistema de Vacío.	
3.2. Fuente de Iones. 19 3.3. Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4 Celda de Reacción. 29 3.5. Sistema de Detección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 <i>Desarrollo Experimental</i> 40 4.1. Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49	3.1.2	Bomba Turbomolecular.	
3.3. Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones. 20 3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4 Celda de Reacción. 29 3.5. Sistema de Detección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.3.1 Multiplicador del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2 Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4 Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Diferencial. 55 Capítulo 6. 58 58 Referencias 60	3.2.	Fuente de Iones	
3.3.1 Lentes Einzel. 21 3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4 Celda de Reacción. 29 3.5. Sistema de Detección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 40 <i>Desarrollo Experimental.</i> 40 4.1. Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 <i>Resultados y Discusión</i> . 47 5.1 Sección Transversal Diferencial 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 58 Referencias 60 <td>3.3.</td> <td>Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones</td> <td></td>	3.3.	Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones	
3.3.2 Filtro de Velocidades. 24 3.4 Celda de Reacción. 29 3.5 Sistema de Detección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 <i>Resultados y Discusión</i> 47 5.3 Sección Transversal Diferencial. 47 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 58 <i>Conclusiones</i> 58 Referencias 60	3.3.1	Lentes Einzel	
3.4 Celda de Reacción 29 3.5. Sistema de Detección 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 Desarrollo Experimental. 40 4.1. Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 58 <i>Conclusiones</i> 58 Referencias 60	3.3.2	Filtro de Velocidades	
3.5. Sistema de Detección. 31 3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 Desarrollo Experimental. 40 4.1. Distribuciones Angulares. 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 <i>Resultados y Discusión.</i> 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Diferencial. 55 Capítulo 6. 58 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	3.4	Celda de Reacción	
3.5.1 Caja de Faraday. 31 3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 Desarrollo Experimental. 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2 Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4 Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 Resultados y Discusión 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total 55 Capítulo 6. 58 58 Conclusiones. 58 58	3.5.	Sistema de Detección.	
3.5.2 Analizador Parabólico. 33 3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 Desarrollo Experimental. 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2 Descripción del Experimento. 40 4.3 Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4 Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 47 Resultados y Discusión. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 58 Conclusiones. 58 58 Referencias 60	3.5.1	Caja de Faraday.	
3.5.2.1 Calibración del Analizador. 34 3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 Desarrollo Experimental. 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2 Descripción del Experimento. 40 4.3 Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4 Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 Resultados y Discusión. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	3.5.2	Analizador Parabólico	
3.5.3 Multiplicador de Electrones. 38 Capítulo 4 40 Desarrollo Experimental 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2 Descripción del Experimento. 40 4.3 Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4 Errores Experimentales 46 Capítulo 5. 47 Resultados y Discusión 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	3,5,2,1	Calibración del Analizador.	
Capítulo 4 40 Desarrollo Experimental 40 4.1 Distribuciones Angulares. 40 4.2 Descripción del Experimento. 40 4.3 Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4 Errores Experimentales 46 Capítulo 5. 47 Resultados y Discusión. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	3.5.3	Multiplicador de Electrones	
Desarrollo Experimental 40 4.1. Distribuciones Angulares 40 4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales 46 Capítulo 5. 47 Resultados y Discusión. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. S8 Conclusiones. S8 Referencias	Capítulo	4	40
4.1. Distribuciones Angulares	Desarrolla	o Frnerimental	40
4.2. Descripción del Experimento. 40 4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales. 46 Capítulo 5. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias	4 1	Distribuciones Angulares	40
4.3. Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales. 43 4.4. Errores Experimentales 46 Capítulo 5. 47 6.1 5.1 Sección Transversal Diferencial. 4.3. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. Conclusiones. 58 Conclusiones. 58 Referencias	4.1.	Descripción del Experimento	
4.4. Errores Experimentales 46 Capítulo 5. 47 Resultados y Discusión. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	4.3	Cantidades Directamente Medibles y Cálculo de las Secciones Totales.	
Capítulo 5. 47 Resultados y Discusión. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	4.4.	Errores Experimentales	
Resultados y Discusión. 47 5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas. 49 5.3 Sección Transversal Total. 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	Capítulo 5		47
5.1 Sección Transversal Diferencial. 47 5.2 Variables reducidas	Resultado	s y Discusión	
5.1 Sección Transversal Diferencial 49 5.3 Sección Transversal Total 55 Capítulo 6. 58 Conclusiones. 58 Referencias 60	5 1	Sección Transversal Diferencial	
5.3 Sección Transversal Total	52	Variables reducidas	
Capítulo 6	5.3	Sección Transversal Total	
Conclusiones	Capítulo 6		58
Referencias	Conclusio	nes.	58
	Referencia	IS	60

·

Capítulo 1

Introducción

La necesidad de comprender los diferentes procesos que se desarrollan a cada momento en la naturaleza, ya sean fenómenos astrofísicos [1], de plasmas [2], de fusión [3] o en las reacciones termoquímicas entre otros; han originado un gran interés en el estudio de diferentes aspectos de la física involucrada, en particular el de las interacciones entre iones atómicos o moleculares con átomos.

La interacción entre iones atómicos o moleculares con átomos, está relacionada con diferentes procesos los cuales dependen fuertemente de la energía del haz incidente [4]; estos procesos pueden ser la excitación, disociación, intercambio de carga y/o la combinación de ellos, lo cual hace que su estudio se complique y aunque el avance en planteamientos teóricos para tratar de entender y describir los diferentes aspectos de tales procesos es definitivamente grande [5,6], actualmente es imposible analizar detalladamente sistemas de muchas partículas, por lo que es primordial hacer estudios de las moléculas más simples, es decir del hidrógeno molecular y de sus diferentes isótopos [7,8] para poder así empezar a entender los procesos moleculares de sistemas más complejos y tratar de responder a las diferentes preguntas que a pesar de los avances en este campo, aun no es posible responder.

En esta dirección, la fidelidad de los resultados depende básicamente tanto del método experimental como de los métodos matemáticos de aproximación; si bien las diferentes teorías y los métodos analíticos junto con el gran desarrollo de la computación han permitido plantear modelos teóricos más realistas y obtener soluciones más aproximadas [9,10], no puede dejarse de lado la comprobación experimental de las interacciones atómicas y moleculares ya sea mediante el empleo directo de un haz atómico o molecular o mediante otro procedimiento como pulsos láser [11].

En general hay varias investigaciones experimentales acerca de las propiedades e interacciones de los procesos que ocurren en sistemas atómicos y moleculares, muchos de estos trabajos tratan con el átomo de hidrógeno, sin embargo, para sistemas moleculares, el ión molecular H_2^+ , es el que ha sido analizado con más detalle [12,13].

Un estudio importante en el cual se midió la sección total y diferencial transversal de la producción de protones y átomos de hidrógeno en un intervalo de energía de 1.0 - 5.0 keV

Capítulo 2

Antecedentes y Teoría de la Investigación

2.1. Procesos de Disociación Molecular en Colisiones Ión Molecular – Átomo. En la colisión de iones moleculares con átomos puede ocurrir el intercambio de electrones entre ellos, lo cual da como consecuencia el cambio en su estado de carga de acuerdo al número de electrones que pierden o ganan en el proceso de transferencia.

Existen varios procesos que pueden ocurrir después de la transferencia de electrones, en particular el proceso de captura disociativa del ión H_2^+ al colisionar con átomos de algún gas, el cual es un proceso fundamental en colisiones de iones moleculares.

De la interacción de un ión molecular de hidrogeno H_2^+ con átomos de Argón se pueden producir los siguientes procesos:

$$H_2^+ + \operatorname{Ar} \rightarrow (H_2^0)^* + \operatorname{Ar}^+ \rightarrow H^0 + H^0 + \operatorname{Ar}^+$$
(1)

$$H_2^+ + \operatorname{Ar} \rightarrow (H_2^0)^* + \operatorname{Ar}^+ \rightarrow H^+ + H^0 + \operatorname{Ar}^+ + e$$
(2)

$$H_2^+ + Ar \rightarrow (H_2^0)^* + Ar^+ \rightarrow H^+ + H^+ + Ar^+ + 2e$$
 (3)

$$H_2^+ + \operatorname{Ar} \rightarrow (H_2^0)^* + \operatorname{Ar}^+ \rightarrow H^- + H^+ + \operatorname{Ar}^+$$
(4)

$$H_2^+ + \operatorname{Ar} \to (H_2^-)^* + \operatorname{Ar}^{2^+} \to H^- + H^0 + \operatorname{Ar}^{2^+}$$
 (5)

Las cinco reacciones anteriores son los procesos de captura disociativa del ión molecular H_2^+ , cuyos fragmentos de disociación son H^0 (procesos 1, 2 y 5), H^+ (procesos 2, 3 y 4) y H^- (procesos 4 y 5). El producto de los procesos (4) y (5) es el que nos interesa y por lo tanto estos procesos se estudiaran en este trabajo.

2.2. Modelo de Captura Electrónica

Generalmente, los experimentos donde ocurre transferencia de carga muestran un máximo en la sección transversal como función de la velocidad del ión incidente. Este hecho puede explicarse en base a la hipótesis adiabática de Massey.

En este modelo, para que un proceso de captura electrónica $(A^+ + B \rightarrow A + B^+)$ ocurra, se necesita de la disposición de cierta cantidad de energía ΔE , esta energía es resultado de la diferencia de las energías de ionización tanto de la partícula incidente A como de la partícula blanco B; esto es: $\Delta E = I_A - I_B$.

Massey usa un argumento basado en el principio de correspondencia mediante el cual muestra que en general, la sección transversal de transferencia de carga será extremadamente pequeña a muy bajas velocidades relativas de acercamiento, a menos que el potencial de ionización ΔE sea pequeño.

Suponiendo que la velocidad de acercamiento de dos sistemas atómicos es pequeña comparada con las velocidades de sus electrones orbítales, la interacción entre A^+ y *B* será tan lenta, que los electrones tendrán tiempo para reajustarse a la perturbación producida sin que ocurra una transición electrónica. Cuado se cumple esto, decimos que la colisión es adiabática.

Massey, describe esta situación como clásica en términos de la vibración producida al aplicar una fuerza perturbativa a un oscilador cuya frecuencia natural es v; supone que tal perturbación varia con el tiempo de acuerdo a una función F(t) la cual desarrolla en una integral de Fourier.

Solamente las componentes de este desarrollo con frecuencias cercanas a ν pueden tener un efecto apreciable para la producción de una oscilación forzada; por lo tanto la duración τ de la colisión no debe ser grande comparada con el periodo de la vibración natural del oscilador.

La ionización será débil si $\tau v >> 1$. Si *a* representa el alcance de la interacción entre A^+ y *B*, y "v" es su velocidad relativa de acercamiento, entonces τ será del orden de a/v, y la condición para excitación débil queda como: av/v >> 1.

Por otra parte, como $v = \Delta E / h$, entonces la probabilidad de que ocurra la transferencia de carga será pequeña si:

$$a \Delta E / hv >> 1$$
 2.0

5

generados por la colisión del ión molecular H_2^+ en átomos de Ar, ha sido llevado a cabo por Martínez y Yousif [14].

El objetivo primordial de este trabajo de tesis, es el de entender las interacciones atómicas y moleculares a través de mecanismos experimentales, por ejemplo: impacto electrónico, intercambio de carga y disociación molecular. Esto, para contribuir a establecer el tipo de interacciones que se desarrollan a estas escalas en diferentes medios físicos.

Es de nuestro interés el estudio de la disociación del ión molecular más simple, el ión H_2^+ ; en particular en esta tesis, se presentan las medidas absolutas de las secciones transversales diferencial y total del producto H^- generado por la colisión del ión H_2^+ en átomos de Argón en el intervalo de energías de 1.0 a 5.0 keV.

Es importante mencionar que las medidas aquí reportadas no se encuentran en la literatura, por lo que se espera que el presente trabajo contribuya al entendimiento de este mecanismo de disociación, además de estimular el trabajo en esta dirección.

La organización del presente trabajo de tesis es como a continuación se describe.

En el capítulo 1 se da una introducción global al tema de investigación y se menciona el punto principal así como la importancia del presente trabajo en el contexto general.

En el capítulo 2 se presenta una descripción de los procesos de disociación molecular en las colisiones ión molecular-átomo, el modelo de disociación molecular y una revisión bibliográfica de trabajos previos.

En el capítulo 3 se detalla la descripción del arreglo experimental, así como el funcionamiento de cada uno de los componentes.

El capítulo 4 trata sobre el desarrollo experimental y los diferentes parámetros así como los crrores que se asocian a cada medida.

En el capítulo 5 se presentan los datos obtenidos haciendo un análisis y discusión de los mismos, para finalmente en el capítulo 6 presentar las conclusiones relevantes del trabajo tras la comparación con resultados previos relacionados con el ión H_2^+ .

Lo anterior indica que la sección será pequeña si "v" corresponde a la región adiabática de energía cinética, esto es: $v \ll a \Delta E / h$

En caso de que "v" se incremente a un valor $v^* \approx a \Delta E / h$; la colisión deja de ser adiabática debido a que el tiempo de colisión es ya comparable con el tiempo de la transición $h/\Delta E$ y se espera entonces que la sección transversal para la transferencia de carga no sea pequeña y llegue a su valor máximo a esta energía de impacto.

En general, este modelo predice que la sección de transferencia de carga para un proceso no resonante es muy pequeña a bajas energías de impacto, sube a un valor máximo cuando se satisface la ecuación $v^* \approx a \Delta E / h$ y después decrece a energías mayores.

2.3. Modelo de Disociación Molecular.

En esta sección se discutirá el método de análisis de las distribuciones angulares de los productos de la disociación molecular.

Para lo anterior se observan los ángulos en el sistema de laboratorio a los que los fragmentos disociados son emitidos. Si se conocen el estado inicial del ión molecular H_2^+ puede entonces determinarse la energía (E_d) sobre el nivel de disociación del ión.

Los resultados experimentales de las distribuciones angulares son analizados por medio de las variables introducidas por una "ley de escalamiento".

Esta ley se basa en las siguientes suposiciones:

- a) Todas las orientaciones del ión H_2^+ son igualmente probables para disociarse.
- b) La energía de disociación es pequeña comparada con la energía de aceleración del haz incidente.
- c) Las energías de disociación son grandes comparadas con la energía rotacional, así que los productos resultantes de la disociación son emitidos en la dirección de la línea que une los dos protones al momento de la captura.
- d) Las transferencias electrónicas son rápidas comparadas con los periodos vibracional y rotacional. La molécula puede considerarse con una orientación y geometría fija durante el proceso de excitación.
- e) El centro de masa del ión molecular sufre una deflexión despreciable debido al proceso de la colisión. La figura 1 ilustra el proceso de disociación.



Figura 1. Geometría de la colisión por la cual un ión H_2^+ es disociado por un átomo de Ar.

Inicialmente el ión H_2^+ tiene una velocidad V_i y una energía E_i . Al disociarse, los fragmentos liberados poseen masa M y las velocidades de estos fragmentos en el sistema centro de masa y de laboratorio se denotan como V_d , $-V_d$ y V_1 , V_2 respectivamente. En esta definición, V_d es paralela al vector de separación interprotonica R en el momento de disociación.

El vector R forma un ángulo Θ respecto al eje Z positivo, el cual esta en la dirección del haz incidente; así como Φ que describe el ángulo azimutal en el plano X-Y.

 $\theta_1 \ y \theta_2$ definen la dirección de las partículas disociadas con respecto a la dirección del haz incidente cuya velocidad se denota como V_i y son medidos en el sistema del laboratorio. ϕ_1 y ϕ_2 son los ángulos correspondientes que forma los vectores V_d y $-V_d$ con respecto a la dirección del haz incidente.

Como las medidas son hechas en el sistema de laboratorio es necesario obtener las velocidades V_1 y V_2 así como las direcciones θ y ϕ en el sistema de laboratorio en términos de $\Theta_y \Phi$.

Como la velocidad relativa de los dos sistemas de referencia es enteramente en la dirección del eje Z, se sigue que:

$$\phi_1 = \Phi, \quad \phi_2 = \pi + \Phi \tag{2.1}$$

Se considera ahora el siguiente conjunto de ecuaciones que se derivan de las relaciones trigonométricas: ley de los senos y ley de los cosenos aplicados a la Figura 1, y considerando que la velocidad incidente V_i es mucho mayor que la velocidad de disociación V_d .

Las velocidades V_1 y V_2 en términos de los ángulos θ_1 y θ_2 así como de Θ y Φ que se obtienen son:

$$\frac{sen\theta_1}{V_d} = \frac{sen\Theta}{V_1}$$
(2.2)

$$\frac{sen\theta_2}{V_d} = \frac{sen\Theta}{V_2}$$
(2.3)

$$V_1 = \left(V_i^2 + V_d^2 - 2V_i V_d \cos\Theta\right)^{\frac{1}{2}} \approx V_i - V_d \cos\Theta \approx V_i$$
(2.4)

$$V_2 = \left(V_i^2 + V_d^2 + 2V_i V_d \cos\Theta\right)^{\frac{1}{2}} \approx V_i + V_d \cos\Theta \approx V_i$$
(2.5)

Por otro lado, de las ecuaciones (2.2) y (2.3) junto con la aproximación de (2.4) y (2.5) se obtiene que:

$$sen\theta_1 = sen\theta_2 = \left(\frac{V_d}{V_i}\right)sen\Theta = \left(\frac{E_d}{E_i}\right)^2 sen\Theta$$
 (2.6)

donde E_d es la energía de disociación.

Como consecuencia de (2.1) y (2.6) se tiene que la relación entre las diferenciales de ángulo correspondientes a los dos sistemas esta dada por:

$$d\phi_1 = d\phi_2 = d\Phi \tag{2.7}$$

$$d\Theta = \left(\frac{E_i}{E_d}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\cos\theta_1 d\theta_1}{\cos\Theta} = \left(\frac{E_i}{E_d}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\cos\theta_2 d\theta_2}{\cos\Theta}$$
(2.8)

Suponiendo que los ángulos θ_1 y θ_2 son pequeños entonces son validas las aproximaciones:

$$sen\theta_1 \approx \theta_1$$
, $sen\theta_2 \approx \theta_2$, $\cos\theta_1 \approx 1$, $\cos\theta_2 \approx 1$ (2.9)

Sustituyendo los resultados de la ecuación (2.9) en las ccuaciones (2.6) y (2.8) y rescribiendo se tiene que:

$$sen\Theta d\Theta d\Phi \approx \frac{E_{i}}{E_{d}} \frac{sen\theta_{1}d\theta_{1}d\phi_{1}}{\cos\Theta}$$

$$sen\Theta d\Theta d\Phi \approx \frac{E_{i}}{E_{d}} \frac{sen\theta_{2}d\theta_{2}d\phi_{2}}{\cos\Theta}$$
(2.10)

Ahora como

$$\cos\Theta = \left(1 - sen^2\Theta\right)^{\frac{1}{2}} \approx \left[1 - \left(E_i / E_d\right)\theta_1^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\cos\Theta \approx \left[1 - \left(E_{_{I}}/E_{_{d}}\right)\theta_2^2\right]^{\frac{1}{2}}$$
(2.11)

Entonces se obtiene finalmente:

$$sen\Theta d\Theta d\Phi \approx \frac{\left(\frac{E_i}{E_d}\right)sen\theta_1 d\theta_1 d\phi_1}{\left(1-\theta_1^2 \frac{E_i}{E_d}\right)^{\frac{1}{2}}} \approx \frac{\left(\frac{E_i}{E_d}\right)sen\theta_2 d\theta_2 d\phi_2}{\left(1-\theta_2^2 \frac{E_i}{E_d}\right)^{\frac{1}{2}}}$$
(2.12)

Si *N* denota el número de partículas incidentes, N_b el número de átomos presentes en el blanco, ambos por unidad de área, $\left(\frac{d\Omega}{4\pi}\right)$ el elemento de ángulo sólido y $\sigma(R,\Theta,\Phi)$ la sección transversal de captura, entonces:

$$dN = \left(\frac{1}{4\pi}\right) (NN_b \sigma(R,\Theta,\Phi)) d\Omega$$
(2.13)

La dependencia funcional de σ con R y Θ , proviene del hecho de que el valor de R en el momento de excitación determina la forma de la distribución angular. Estableciéndose que $E_d = E_d(R)$ y denotando por $\rho(R)dR$ a la probabilidad de que la molécula tenga una separación internuclear entre R y R + dR, la expresión que se tiene es:

$$\left(\frac{d^2 N}{dE_d d\Omega}\right) = \left(\frac{NN_b}{4\pi}\right) \left(\rho(R) \frac{dR}{dE_d}\right) \sigma(R,\Theta,\Phi)$$
(2.14)

y de acuerdo con la ecuación de transformación (2.2):

$$\left(\frac{d^2 N}{dE_d d\Omega}\right) = \frac{\left(\frac{NN_b}{4\pi}\rho(R)\frac{M}{M}\frac{E_i}{E_d}\sigma(R,\Theta,\Phi)\right)}{\frac{dE_i}{dR}\left(1-\theta^2\frac{M}{M}\frac{E_i}{E_d}\right)^{\frac{1}{2}}}$$
(2.15)

Por último se efectúa una integración sobre la separación internuclear R, como $dE_d = (dE_d / dR)dR$ se obtiene:

$$\left(\frac{1}{E_i}\right) \binom{dN}{d\Omega} = \left(\frac{NN_b}{4\pi}\right) \int_0^{R_d} \sigma(R,\Theta,\Phi) \rho(R) / \left[E_d \left(E_d - E_i \theta^2\right)\right]^{\frac{1}{2}} dR$$
(2.16)

donde R_d es la separación internuclear para la cual $E_d = E_t \theta^2$.

Se promedia la ecuación (2.16) sobre todos los valores de Φ ya que este ángulo no se observa en el experimento.

La sección diferencial puede ser expresada como una función de las variables reducidas $E_i \theta^2$.

$$\left(\frac{1}{E_i}\right)\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = f(E_i\theta^2) = f(E_d)$$
(2.17)

resultando una curva para todas las energías que concuerda con la ley de escalamiento de la Ref. [15].

La última expresión muestra el tipo de variables reducidas que deben introducirse en un experimento como el descrito aquí. De este modo al graficar $d\sigma/E_i d\Omega_{iab}$ contra $E_i \theta^2$, todos los datos de la sección eficaz deben caer en una curva universal (salvo posiblemente por un factor constante de normalización) lo cual debe interpretarse de acuerdo a un proceso físico.

2.4. Resumen de Trabajos Previos.

Existen en la literatura varios estudios previos de colisiones en los que se ha analizado el sistema H_2^+ + átomos neutros para determinar los productos de disociación; sin embargo es casi nula la información disponible respecto a la sección transversal angular y total de la captura disociativa que conduzca a la formación de los iones H^- producidos mediante la colisión de iones H_2^+ en Argon.

En esta sección se presentan de manera resumida la información encontrada respecto al ión molecular H_2^+ y su interacción con diferentes gases.

- H. Martínez y P.G. Reycs [15], reportan la distribución angular del producto H⁻ generado por la interacción del ión molecular H⁺₂ con vapor de Mg a energías de 1, 2, 3,
 4 y 5 keV. Concluyen que el mecanismo de producción del ión H⁻ es a través de los estados predisociativos del H⁺₂ que interactúan con el blanco.
- Berkner y coautores [16], en 1976, reportan medidas de sección transversal total de transferencia de electrónica y/o de disociación, de los productos generados por la colisión de iones H⁺, H⁰, H⁻ y H₂⁺ en Xe en el intervalo de energía de 1.25 a 25 keV. En particular miden la sección transversal total de la formación del ión H⁻ producido por el impacto del ión molecular H₂⁺ en Xe, encontrando que la sección presenta un comportamiento monótono creciente como función de la energía incidente.
- De Bruijn y coautores [17], realizaron un estudio experimental para analizar el camino por el cual se lleva acabo la transferencia de carga disociativa en el proceso de colisión del ión H₂⁺ en gases de Ar, Mg, Na y Cs, en un intervalo de energía de 1.5 a 6.5 keV. Particularmente, realizaron distribuciones de energía de los fragmentos H⁰ producidos en los procesos anteriormente mencionados. Encontrando que sus resultados se pueden explicar por medio del criterio adiabático de Massey.
- En 1984, Peterson y Bae [18], reportan las distribuciones de la captura disociativa en la colisión de iones H₃⁺, H₂⁺ y O₂⁺ con átomos de Cs. Ellos utilizan los resultados de De Bruijn y coautores [17] para explicar la formación del fragmento de disociación H⁻.
- Otro trabajo experimental es el de B. E. Fuentes y coautores [19]. En éste; se presenta la distribución angular del H⁻ producido mediante la colisión del ión H⁺₂ en Kr. El intervalo de energía incidente fue de 1.0 a 5.0 keV y a ángulos de dispersión entre -4° y 4°.

Los autores sugieren que el mecanismo de producción del H^2 es mediante un proceso de dos pasos: en el primer paso, se forman átomos de H en estados predisociativos de los productos de transferencia de carga de H_2 con el blanco y después uno de estos átomos de hidrogeno H captura un electrón en una segunda colisión, produciendo el ión H^2 .

 Finalmente está el trabajo realizado recientemente por Martínez y Yousif [14], en el cual se reporta la probabilidad de formación del fragmento H⁰ producido en la colisión del ión H⁴₂ en Ar a bajas energías. Los autores concluyen que el proceso dominante es el de captura disociativa.

En general, siendo el ión molecular H_2^+ el más simple en la naturaleza, aun se desconocen y no se pueden describir adecuadamente diferentes aspectos de su comportamiento y en particular de sus mecanismos de ionización o disociación introduciendo así el incremento de estudios tanto experimentales como teóricos. Se presentan a continuación dos estudios teóricos de la ionización del ión H_2^+ .

- Mohsen Vaface y Hassan Sabzyan [20], investigan sobre la simulación de la ionización del ión molecular H₂⁺ a través de un campo intenso de láser; esto, mediante la solución directa de la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo para núcleos fijos. A través este método se obtiene la detección simultánea de las componentes paralelas y perpendiculares de las razones de ionización.
- Liang-You Peng y colaboradores [21], hacen un calculo para el espectro de energía de un protón generado por la fotodisociación del ión molecular H⁺₂ mediante pulsos cortos e intensos de luz infrarroja; para esto, utilizan la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo, la discretizan e integran.

Ellos comparan sus resultados con medidas experimentales recientes que cumplen sus condiciones y concluyen que el método es excelente.

Capítulo 3

Aparato 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, accleración 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 y una fotografía del mismo en la figura 3.



Figura 2. Esquema del acelerador de partículas de baja energía.



Figura 3. Fotografía del acelerador de partículas de baja energía.

3.1. 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

$$\lambda = (\sigma \eta)^{-1} \tag{3.1}$$

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} cm² 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 x 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.

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 4).



Figura 4. Fotografía de una bomba mecánica.

3.1.2 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. Una foto de una bomba turbomolecular se muestra en la figura 5.



Figura 5 Fotografía de una bomba turbomolecular.

3.2. Fuente de Iones.

El haz incidente de iones de H_2^+ se produce por medio de una fuente de iones tipo *colutron*, de la cual se muestra una fotografía en la figura 6 y un esquema en la figura 7.



Figura 6 Fotografía de la fuente de iones.



Figura 7. 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 termoiónica, se producen los electrones necesarios para ionizar el gas contenido en el cuerpo de la fuente.

3.- ÁNODO: Una vez que el filamento ha producido electrones y que el gas a ionizar se encuentra dentro del cuerpo de la fuente, los electrones 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 H_2^+ se admite dentro de la fuente de iones gas de hidrógeno (H_2) a una presión de 100 µHg. 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 0.1 A.



Figura 8 Electrónica de la fuente de iones.

Sistemas de Enfoque, Aceleración y Selección de Iones.

En la fuente de iones no solo se producen iones de H_2^+ sino también otros iones, como H^+ y H_3^+ 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.

3.3.

3.3.1 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 9).

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 10). 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 (11) y (12) respectivamente.







(unidades en om)

Figura 10 Lentes electrostáticas gruesas.



وردهم

Figura 11 Fotografía de las lentes Einzel.



Figura 12 Electrónica de las lentes Einzel.

3.3.2 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 13).



Figura 13 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).





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:

 $F_{\kappa} = eE$

Fuerza electrostática

$$F_{\mathcal{M}} = v_0 eB \tag{3.3}$$

(3.2)

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:

$$v_0 = \frac{E}{B} \tag{3.4}$$

pero

$$v_0 = \sqrt{\frac{2qV}{M_0}} \tag{3.5}$$

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

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

$$B\sqrt{\frac{2qV}{M_0}} = E \tag{3.6}$$

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

$$F_{C} = \frac{M_{x}v_{x}^{2}}{R} = ev_{x}B - eE = eBv_{0}\left[\sqrt{\frac{M_{0}}{M_{x}}} - 1\right]$$
(3.7)

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

$$R = \frac{2V}{E\left[\sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1\right]}$$
(3.8)

En la figura 15 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:

$$\tan\phi \approx sen\phi \approx \phi \tag{3.9}$$

Por lo tanto:

$$\frac{D}{L} = \frac{a}{R} \tag{3.10}$$

$$D = \frac{La}{R} \tag{3.11}$$

Entonces de la ecuación (3.8) se obtiene:

$$D = LaE \frac{\left[\sqrt{\frac{M_0}{M_x}} - 1\right]}{2V}$$
(3.12)





Separación de Iones.

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 (3.6) que expresa la condición para que no haya deflexión se obtiene la siguiente condición para la masa:

$$M_0 = 2qV \left[\frac{B}{E}\right]^2 \tag{3.13}$$

Como el campo magnético para una bobina está dado por:

$$B = KI \tag{3.14}$$

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:

$$\frac{\sqrt{2qV}KI}{E} = \sqrt{M_0} \tag{3.15}$$

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

$$A = \frac{E}{K\sqrt{2qV}} = cte \tag{3.16}$$

Por lo tanto:

$$I = A\sqrt{M_0} \tag{3.17}$$

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

$$I_n = A\sqrt{M_n} \tag{3.18}$$

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

28

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.

3.4 Celda de Reacción.

El haz sigue su trayectoria y entra a la cámara de reacción, en donde se encuentra la celda de reacción (figuras 16 y 17); es aquí en donde se lleva a cabo el proceso de colisión.



Figura 16 Fotografía de la celda de reacción.



Figura 17 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.

3.5. 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 esta 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.

3.5.1 Caja de Faraday.

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



Figura 18 Fotografía de la caja de Faraday.



Figura 19 Diagrama de la caja de Faraday.

Como se muestra en las figuras 18 y19, 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 ~-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 ~-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:

$$\frac{N_i}{t} = \frac{I_0}{e} \tag{3.19}$$

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°.

3.5.2 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 20.



Figura 20 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:

$$V_{D} = (0.632)E_{a} \tag{3.20}$$

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 M Ω .

3.5.2.1 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 (energía de aceleración) aplicado en la fuente de iones, se seleccionó al ión 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 1 y la figura 21 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 1 Distribución de energía a 3 keV.



Figura 21 Distribución de partículas a una energía de 3 keV.

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 y se muestran en la figura 22.

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



Figura 22. Curva de calibración para el analizador.

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

$$V_D = 0.632E_a \tag{3.21}$$

3.5.3 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 23). Tienen una capa de material semiconductor, sobre la superficie interior del tubo, que posee características de emisión de electrones secundarios.



Figura 23 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 10⁷ a 10⁸ electrones. De esta forma, un solo ión 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 24 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.





Diagrama del Channeltron.

Capítulo 4

Desarrollo Experimental

4.1. 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 H_2^+ y el gas Ar.

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 $\pm 5.0^{\circ}$ 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.

4.2. Descripción del Experimento.

Para poder realizar los experimentos planteados en este trabajo, que son procesos de captura disociativa, es necesario primero obtener una presión de vacío del orden de 10^{-7} Torr en todo el sistema experimental, 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 H_2^+ , los cuales se obtienen (ya que en la naturaleza sólo se encuentra hidrógeno molecular) admitiendo gas de hidrógeno (H_2) de 99.999% de pureza dentro de la fuente de iones a una presión de 100 µHg; posteriormente es necesario

aplicar una corriente en el filamento de 16 A., y un potencial en el ánodo de 80 V, con estos valores la corriente de descarga que se obtiene en el ánodo es de aproximadamente 0.1 A.

Después de haber producido el haz con los iones de H_2^+ , es necesario enfocarlo ya que este no se encuentra colimado. Además, en éste no solo se encuentran los iones de H_2^+ necesarios para el proceso, sino que también existen partículas de $H^+ y H_3^+$ 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, por esta razón es necesario corregir la dirección del haz de iones, para ello se cuenta con un juego de placas paralelas cilíndricas a las que se les aplica un voltaje de 150 V por cada keV de aceleración, el haz sigue su trayectoria pasando por varios colimadores situados a lo largo del acelerador.

Antes de admitir el gas blanco en la celda de reacción para que se lleve a cabo el proceso de interacción, se mide la corriente del haz en la caja de Faraday contráctil, la magnitud de la corriente es del orden de 10⁻¹⁰ A. Esta corriente se mide en un electrómetro analógico Keithely Modelo 610C.

Una vez que se logra obtener una corriente del haz de iones lo más intensa posible (10^{-9} A) se adecúan los parámetros en el sistema de detección (analizador parabólico y Channeltron), además de que se admite el gas blanco (Ar) en la celda de reacción a una presión de $4x10^{-4}$ Torr, esta presión se mide con un barómetro capacitivo (Baratrón); al analizador parabólico se le aplica un voltaje de 632 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 $\pm 5.0^{\circ}$ con un incremento angular de 0.1° y un tiempo de acumulación de 10 s, este es el tiempo en el que el contador de partículas permanece en cada ángulo contando las partículas provenientes de la

interacción. El motor a pasos permite el movimiento de sistema de detección y es controlado por una PC.

El experimento se realiza en un tiempo aproximado de 25 minutos por distribución. Cada distribución se realiza 5 veces en diferentes días y condiciones, para cada energía, lo que equivale a 45 distribuciones. El tiempo dado en horas que se invierten para esto es de 20 horas efectivas de mediciones.

Estos experimentos se repiten al menos dos veces con diferencia de un mes para probar que los resultados obtenidos son absolutos, por lo que todo este experimento se realizo en el transcurso de tiempo de 6 meses.

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

17-	1.	tal-la	2 -		1	somial lag	:	1		- 1	
Ŀп	1a	tadia	.) S	c resumen.	ias	variables	invo	lucradas.	en e	er –	experimento.
											1

Cantidad (unidades)	Variable
10 ⁻⁷ Torr	Presión de vacío en el aparato
	experimental
100 µНg	Presión del gas a ionizar (H_2) en la fuente
	de iones
16 A	Corriente del filamento de la fuente de
	iones
80 V	Potencial en el ánodo
0.2 A	Corriente de descarga en el ánodo de la
	fuente de iones
860 V/keV	Voltaje de enfoque aplicado en la segunda
	Lente Einzel
150 V	Voltaje aplicado para el campo eléctrico
	en el filtro de velocidades
В	Campo magnético que depende de la
	energía de aceleración
150 V/keV	Voltaje en las placas paralelas cilíndricas
	para corregir la dirección del haz

50 V (electrodo 1)	Voltajes aplicados a los electrodos de la
~90 V (electrodo 2)	caja de Faraday
~-300 V (electrodo 3)	
10^{-10} A (6.24 x 10^8 partículas)	Magnitud de la corriente del haz incidente
	(H_{2}^{+})
4x10 ⁻⁴ Torr	Presión del gas blanco en la celda de
$(32.6 \text{ x } 10^{12} \text{ átomos/cm}^2)$	reacción (Ar)
632 V/keV	Voltaje aplicado en el analizador
	parabólico
3000 V	Voltaje en el Channeltron
±5.0°	Movimiento del sistema de detección
0.1°	Incremento angular
10 s	Tiempo de acumulación

Tabla 3 Variables involucradas en el experimento

4.3. 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 $N_i = \frac{I_0}{\rho}$.

2.- La presión, que está implícita en el espesor del blanco (π) en la celda de colisión. Dicho espesor está dado por:

$$\pi = \frac{N_A L P}{RT} \tag{39}$$

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 Abogadro (6.02x10²³ /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:

$$\pi = QP \left(\frac{\acute{a}tomos}{cm^2}\right) \tag{40}$$

Si L = 2.54 cm, T = 300 °K y P está en Torr se tiene que:

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

$$Q = 8.17 \times 10^{20} \text{ átomos/m}^2 = 8.17 \times 10^{16} \text{ átomos/cm}^2$$
(41)

Entonces:

$$\pi = 8.17 \times 10^{16} \ P \ (\text{atomos/cm}^2) \tag{42}$$

3.-El número de partículas H^- 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:

$$I(\theta) = \frac{N(\theta)}{t} \tag{43}$$

donde t es el tiempo de acumulación.

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

$$d\Omega = \left(\frac{r^2}{d^2}\right) 3.1416 \tag{44}$$

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:

$$d\Omega = 7.85 \times 10^{-7} [steradianes]$$
⁽⁴⁵⁾

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N(\theta)}{\left[N_{t}\pi d\Omega\right]} \tag{46}$$

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 (4x10⁻⁴ Torr).

 $d\Omega$ es el ángulo sólido sustendido por el detector (steradianes). El ángulo sólido está dado por $d\Omega = \frac{r^2}{d^2} 3.1416 = 7.85 \times 10^{-7} (steradianes).$

Sustituyendo en la ecuación (46) las cantidades directamente medibles, se obtiene:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{RTeN(\theta)}{N_A LPI l d\Omega}$$
(47)

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:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = K \frac{N(\theta)}{PIt}$$
(48)

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

La sección transversal total se obtiene integrando la ecuación (48), es decir, utilizando la relación:

$$\sigma = \int \left(\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}\right) d\Omega = 2\pi \int \left(\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}\right) sen(\theta) d\theta$$
(49)

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

4.4. 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_i) , presión del gas (P), temperatura (T), longitud efectiva (L), tiempo de acumulación (t), número de partículas detectadas a un ángulo $\theta(N(\theta))$. A cada una de estas cantidades se le asocia un error porcentual.

La incertidumbre total asociada al experimento es la suma de todos estos errores.

1.- Corriente total de iones (I_i) : Por diversas razones, muchas veces la corriente de iones que incide en el blanco, no permanece constante durante el tiempo en que se realizan las distribuciones angulares. El criterio para asignar una incertidumbre a la corriente es el de desechar aquellos datos tomados cuando la corriente presenta una variación mayor al 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 5.

Resultados y Discusión.

En este capítulo se presentan las graficas de los resultados obtenidos de las secciones transversales diferenciales y totales, así como de la distribución angular en términos de las variables reducidas definidas mediante el modelo de escalamiento utilizado.

5.1 Sección Transversal Diferencial.

En la figura 25 se muestra la sección transversal diferencial para la formación del ión H^- mediante la incidencia de una haz de iones de H_2^+ sobre Ar.

Las energías de colisión están entre 1.0 y 5.0 keV. Puede observarse que el ión H^- se forma principalmente en la dirección frontal del haz incidente y que aparecen varias estructuras a ángulos diferentes de 0°.



Figura 25. Distribución angular de los fragmentos H^- formados por la colisión del ión molecular H_2^+ en un blanco de Ar a energías de 1, 2, 3, 4 y 5 keV.

5.2 Variables reducidas.

En general, un pico en la distribución angular de fragmentos producidos por disociación puede ser interpretado como algo debido a una singularidad en el jacobiano de la transformación [19]; por lo que la energía de disociación puede ser determinada de la localización del pico mediante la ecuación $E_d = E\theta_{plco}^2$

Para obtener una visión más clara de los procesos de colisión y adquirir mayor información de algunas características de la interacción molecular; las distribuciones angulares medidas son graficadas en términos de las variables reducidas definidas mediante el modelo de escalamiento de distribuciones angulares de fragmentos producidos por disociación molecular.

La expresión obtenida por éste modelo, lo cual se hizo en el capítulo 1 es la siguiente:

$$\left(\frac{1}{E_i}\right)\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = f(E_i\theta^2) = f(E_d)$$
(2.17)

En esta ecuación, $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ es la sección transversal diferencial para la formación del fragmento $H^$ producido a un ángulo θ y E_i es la energía de incidencia del haz inicial. La figura que se obtuvo al graficar los datos experimentales de acuerdo a la ecuación (2.17) se presenta en la figura 26.



Figura 26. Distribución angular de la reacción $H_2^+ + Ar \rightarrow H^-$ graficada en términos de las variables reducidas $(1/E)d\sigma/d\Omega$ y $E\theta^2$ para energías incidentes de 1, 2, 3, 4 y 5 keV.

En la figura 26, la línea continua representa un promedio de todos los datos de las distribuciones angulares a todas las energías de colisión junto con su correspondiente error estadístico.

En ésta, se encuentra una estructura bien definida (etiquetada en la figura 26 con la letra "a") la cual se relaciona con el valor de la energía de disociación (E_d), esto es 2.71 eV (8.9 keV- deg²). Dos estructuras menos claras (etiquetadas en la figura 26 como "b" y "c") se logran distinguir; la primera entre 4.05 y 6.56 eV (13.29 y 21.52 keV- deg²) y la segunda entre 9.66 y 12.08 eV (31.74 y 39.64 keV- deg²).

Algunas de estas estructuras han sido observadas previamente en la disociación del ión H_2^+ en átomos Mg [15] (a energías de disociación de 4.0, 7.2 y 12.1 eV); así como en la disociación de este mismo ión pero con átomos de Kr [19] (a energías de disociación de 4.0 y 7.3 eV).

Peterson y Bae [18] observaron entre 7.0 y 8.0 eV el mismo tipo de estructuras en el sistema $D_2^+ + Cs$. Ellos concluyen que tales estructuras son causadas por la predisociación del estado $c^3\Pi_u$ que se acopla rotacionalmente al estado repulsivo $b^3\Sigma_u^+$. Esta interpretación se basa en la investigación de Bruijn et al [17], quien uso diferentes gases como blanco para estudiar al disociación inducida por colisión del ión molecular H₂⁺ en diferentes gases.

Peterson y Bae concluyen que las estructuras entre 7.2 y 10.0 eV esta siempre presente pero con diferentes intensidades de acuerdo a las características del blanco.

La estructura que se observa a una energía de disociación de 4.0 eV en blancos de Mg y Kr aparece también en el presente experimento, es decir con un blanco de Ar, solo que entre 4.05 y 6.56 eV. Los potenciales de ionización de éstos elementos blanco son 7.646, 13.999 y 15.759 eV respectivamente y se observan en la figura 27.

En la figura 27 se muestran también las curvas de potencial del ión H_2 . Se han marcado los potenciales de ionización de varios elementos y se observa que con blancos con un alto potencial de ionización como el Ar, se obtiene principalmente un cambio al estado base (máximo poco definido en la figura 26 y etiquetado como "a").

Para bajos potenciales de ionización como el Cs se obtiene H_2^+ en los estados

 $a^{3}\Sigma_{g}^{*}, c^{3}\Pi_{u}, B^{''}\Sigma_{u}^{*}$ (máximo bien definido e intenso), para blancos intermedios como el Mg, el canal más importante que se obtiene es el estado repulsivo $b^{3}\Sigma_{u}^{*}$ (máximos bien definidos y amplios) [19].



Figura 27. Intervalos cuasi-resonantes en la transferencia de carga del ión H_2^+ con varios blancos. Las curvas de potencial H_2 están dadas por la energía de ionización con respecto al estado base del H_2 . Las líneas punteadas son las energías de ionización con respecto al estado base del H_2 .

Se sugiere que la relación entre la energía cinética liberada y el valor encontrado de la energía de disociación E_d , conduce a un proceso en el que un electrón es transferido del átomo de Ar al ión molecular, conduciendo a productos excitados que pueden capturar otro electrón en su trayectoria y producir el ión H^- , esto es:

$$H_{2}^{+}(X^{2}\Sigma_{g}^{+}) + Ar \to H_{2}^{0}(c^{3}\Pi_{u}) + Ar^{+} \to H_{2}^{0}(b^{3}\Sigma_{u}^{+}) + Ar^{+} \to H^{0} + H^{0} + Ar^{+}$$
(5.1)

Seguido por

$$H^0 + Ar \to H^- + Ar^+ \tag{5.2}$$

Este canal de disociación se observa esquemáticamente en la figura 28.

La interpretación anterior es la misma que Peterson y Bae [18] dan para el proceso $D_2^+ + Cs$.





53

Para el pico a 2.71 eV la posible explicación, es considerar la doble captura electrónica del ión $H_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ pasando al estado repulsivo $H_2^-(b+e^{-2}\Sigma_g^+)$ a una separación internuclear de 1.2 Á, y su posterior disociación formando un átomo de H y un ión negativo H^- , lo cual da una energía de disociación de aproximadamente de 2 eV, esto es:

$$H_{2}^{+}(X^{2}\Sigma_{g}^{2}) + Ar \to H_{2}^{-}(b^{+}e^{-2}\Sigma_{g}^{+}) + Ar^{2+} \to H^{-} + H^{0} + Ar^{2+}$$
(5.3)

Este canal de disociación se observa esquemáticamente en la figura 29.



Figura 29. Curvas de potencial de los iones H^+ , $H \ge H_2^0$

Dado que las secciones transversales diferencial y total del ión H^- están formadas por contribuciones de dos canales de disociación; entonces estas están presentes simultáneamente, esto es la reacción (5.1) seguida de la (5.2), así como la (5.3). En el presente trabajo de tesis no fue posible identificar la contribución de cada uno de ellos; para esto se requiere hacer un estudio cuidadoso de las curvas de energía potencial molecular del sistema de colisión.

5.3 Sección Transversal Total.

La sección transversal total para los productos H^- de este experimento se muestra en la figura 29, así como las obtenidas por Fedorenko et al [22] para una energía de 12 keV.

Se puede observar en la figura 30, que la sección transversal total para la formación del ión $H^$ producido por la colisión del ión molecular H_2^+ en Ar es del orden de $10^{-17} cm^2$. Por otro lado, aunque las medidas realizadas en este experimento no cubren el intervalo en energía en el cual realizo sus experimentos Fedorenko et al [22], los resultados que obtuvo para la sección transversal total para la captura disociativa del ión H^- parecen ser consistentes con los obtenidos en este trabajo.

Los procesos mediante los cuales se producen los productos H^- a energías de keV como en este experimento (procesos (4) y (5)); requieren de una interacción determinada con los electrones del blanco para obtener la energía necesaria de transferencia (> 17.32 eV y> 13.39 eV respectivamente) lo cual determina la probabilidad de producción de este ión, esto a diferencia del proceso (1) el cual es el mecanismo dominante para la captura disociativa y que se verifica mediante las medidas realizadas por Martínez y Yousif [14].

Martínez y Yousif [14] reportan que la sección transversal total para el ión H^0 cs del orden de $10^{-16} cm^2$, aproximadamente diez veces más grande que la sección transversal total para la formación del ión H^- .



Figura 30. Grafica de la sección transversal total de los fragmentos H^- producidos en la colisión del ión molecular H_2^+ en átomos de Ar a energías de colisión de 1, 2, 3, 4 y 5 keV.

Debido a la información relevante contenida en la forma de la sección transversal total en función de la energía de colisión para los procesos de transferencia de carga, se puede considerar que hay dos procesos que compiten entre si. Se sabe que la sección transversal total para los diferentes procesos depende fuertemente del potencial de ionización de los átomos blanco así como del comportamiento a baja energía de colisiones asimétricas de transferencia de carga, lo cual puede ser analizado en términos de la energía E_m , a la cual la sección transversal de captura electrónica alcanza un valor máximo.

Basándose en argumentos de balance de energía se tiene que la sección total transversal exhibe un comportamiento de cuasi- resonancia, es decir, la energía E_m a la cual la sección transversal del proceso (5.1) seguido por el (5.2) ocurre, es de 33,422.39 eV.

Lo anterior esta de acuerdo con el comportamiento creciente de la sección total transversal para las reacciones (5.1) y (5.2) medidas por Martínez y Yousif [14] y Martínez et al [23]. Para que ocurra la reacción (5.3) la energía E_m es de 700 eV.

Si bien no es posible identificar el proceso especifico del presente estudio, la forma de la curva en la figura 30 indica que podría ser debido principalmente por el proceso (5.3).

Capítulo 6.

Conclusiones.

En los experimentos realizados en la presente tesis se obtuvieron las medidas de las secciones transversales diferencial y total del ión H^- producido por la disociación molecular del ión H_2^+ con átomos de Ar; en el intervalo de energía de 1.0 a 5.0 keV y ángulos de dispersión entre -4° y 4°.

Al graficar las distribuciones angulares de los fragmentos H^- , se observa que la formación del ión H⁻ es principalmente en la dirección frontal del haz incidente y que a ángulos diferentes de cero, se observa un comportamiento decreciente con algunas estructuras bien definidas.

Este hecho sugiere que la reacción:

 $H_2^+ + Ar \rightarrow H_2 + Ar^+ \rightarrow H + H + Ar^+$ seguida por $H + Ar \rightarrow H^- + Ar^+$

es apropiada y que puede explicar la presencia de las estructuras a energías de disociación así como de predisociación.

Por otro lado, estas estructuras se observan también en la distribución angular del proceso de disociación molecular del mismo ión pero con diferentes blancos, pero con diferente intensidad la cual es fuertemente dependiente del blanco utilizado.

La estructura a 2.1 eV es atribuida al proceso:

$$H_{2}^{+}(X^{2}\Sigma_{g}^{2}) + Ar \rightarrow H_{2}^{-}(b^{+}e^{-2}\Sigma_{g}^{+}) + Ar^{2+} \rightarrow H^{-} + H^{0} + Ar^{2+}$$

lo cual sugiere que es el causante del comportamiento de la sección total transversal en función de la energía.

La sección total transversal para la formación del ión H^- tiene una magnitud del orden de $10^{-17} cm^2$ y aunque las medidas realizadas en este experimento no cubren el intervalo en energía en el cual realizo sus experimentos Fedorenko et al, los resultados que obtuvo parecen ser consistentes con los obtenidos en este trabajo

Finalmente, cabe mencionar que aunque la teoría sobre distribuciones angulares de fragmentos producidos por disociación molecular nos permite analizar los resultados para tratar de

comprender tales procesos, aun no existe teoría que reproduzca bien el comportamiento cuantitativo de este estudio; por lo que son necesarios experimentos como estos que aporten datos que conduzcan a los teóricos a desarrollar tal teoría en este campo de investigación.

Referencias

- [1] WAD. Watson, Astrophys. J. 183, L17 (1973); B.J. McCall et al Astrophys. J. 522, 338 (1999).
- [2] C. Gorse, Pure & Appl. Chem., 64, 691 (1992).
- [3] R.K. Janev, Comments At. Mol. Phys. 26, 83 (1991).
- [4] A. T Hasan, International. Journal Mass Spectrometry. 247, 81-84 (2005).
- [5] M S Pindzola, F Robicheaux y J Colgan, J. Phys. B. 38, L285-L290 (2005).
- [6] V D Rodriguez, P Macri y R Gayet, J. Phys. B. At Mol. Opt. Phys. 38, 2775-2791 (2005)
- [7] Mate B, Thibault F, Tejeda G, Fernández J M, Montero S, J. Chem. Phys. 122 (6), 064313 (2005).
- [8] Morales J, Diz A, Deumens E, Ohrn Y, J. Chem. Phys. 103(23), 9968-9980 (1995).
- [9] Errea L F, Macias A, Mendez L, Rabadan I, Riera A, Phys. Rev. A65 (1), 010701, (2002).
- [10] A Palacios, H Bachau y F Martín, J. Phys. B. At Mol. Opt. Phys. 38, L99-L105 (2005)
- [11] P Q Wang, A M Sayler, K D Carnes, J F Xia, M A Smith, B D Esry y Ben-Itzhak, J. Phys.B. At Mol. Opt. Phys. 38, L251-L257 (2005)
- [12] PCE McCartney, C McGrath, J W McCarkey, M B Shah y J Geddes, J. Phys. B. At Mol. Opt. Phys. 32, 5103-5108 (1999).
- [13] C McGrath, M B Shah, PCE McCartney y J W McCarkey, Phys. Rev. A64,062712 (2001).
- [14] H. Martinez and F.B. Yousif, Phys. Rev. A69, 062701 (2004).
- [15] H. Martinez and P.G. Reyes, International. Journal Mass Spectrometry. 173, 17 (1998).
- [16] K. H. Berkner, W. G. Graham, R. V. Pyle y J. W. Stearns, Phys. Rev. 14, 664 (1976).
- [17] D. P. De Bruijn, J. Neuteboom, V. Sidis y J. Los, Chem. Phys. 85, 215 (1984).
- [18] J. R. Peterson and Y.K. Bac, Phys. Rev. A30, 2807 (1984).
- [19] B. E. Fuentes, H. Martínez, C. Cisneros, I. Álvarez y J. De Urquijo, Nuclear Instruments and Methods B95, 158 (1995).
- [20] Mohsen Vafaee y Hassan Sabzyan, J. Phys. B. At Mol. Opt. Phys. 37, 4143-4157 (2004)
- [21] Liang-You Peng, I D Williams y J F McCann, J. Phys. B. At Mol. Opt. Phys. 38, 1727-1743 (2005)
- [22] N. V. Fedorenko. V.V. Afrosimov, R. N. Il'n and D.M. Kaminker, Sov. Phys. JETP 36, 267 (1959).
- [23] H. Martínez, A. Morales, J. De Urquijo, I. Alvarez y C. Cisneros, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B40/41, (1989).