

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

DETECCIÓN DE FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN DE H_2^+ EN AIRE

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

PEDRO CORONA ARROYO

DIRECTOR DE TESIS: DRA. BEATRIZ E. FUENTES MADARIAGA MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. HORACIO MARTÍNEZ VALENCIA MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. FAROOK BASHIR YOUSIF



posgrado en ciencias físicas u n a m

MÉXICO, D.F.

2011



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. En primer lugar quiero agradecerle a **Dios** por mi vida y por la oportunidad de estudiar la maestría en esta gran institución que es la Universidad Nacional Autónoma de México.

A mi esposa Claudia y a mis hijos Diego y Karime les quiero expresar todo mi amor y mi agradecimiento por estar siempre a mi lado.

A mis padres les agradezco el amor y el apoyo que me han dado a lo largo de mi vida. También va un agradecimiento para mi hermano.

A la Dra. Beatriz E. Fuentes Madariaga y al Dr. Farook Bashir Yousif les expreso mi agradecimiento por permitirme realizar este trabajo en el taller de colisiones de la Facultad de Ciencias, lo que ha representado un aprendizaje importante en mi formación.

Al Dr. Horacio Martínez Valencia le agradezco el apoyo que me ha brindado en todas las ocasiones que lo he requerido, y por la revisión de este trabajo. Sus comentarios sobre el mismo fueron importantes.

Al Dr. Alejandro Amaya Tapia, al Dr. Jesús Flores Mijangos y al Dr. Luis Rodríguez Fernández les quiero agradecer que se hayan tomado la molestia y el tiempo de revisar mi trabajo, y que sobre todo, lo enriquecieran con sus comentarios y observaciones.

Por último, un agradecimiento al CONACYT por la beca 210891 otorgada para la realización de mis estudios de maestría dentro del programa Posgrado en Ciencias Físicas de la UNAM y a la DGAPA por el proyecto PAPIIT IN116909 y por el otorgamiento de una beca de fomento a la graduación.

ÍNDICE

RESUMEN	6
INTRODUCCIÓN	7
CAPÍTULO 1. CONCEPTOS GENERALES	9
1.1 COLISIONES ATÓMICAS Y MOLECULARES	9
1.1.1 TIPOS DE COLISIONES	9
1.1.2 CANALES	11
1.1.3 UMBRALES	12
1.1.4 SECCIÓN TRANSVERSAL	13
1.2 PROCESOS ATÓMICOS Y MOLECULARES	15
1.2.1 EXCITACIÓN DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS	15
1.2.2 IONIZACIÓN DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS	20
1.2.3 TRANSFERENCIA DE CARGA EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS	24
1.2.4 DISOCIACIÓN DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS	26
1.3 ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE TIEMPO DE VUELO (TOF-MS)	27
1.4 DETECCIÓN DE LOS FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN H_2^+ EN AIRE	29
CAPÍTULO 2. SISTEMA EXPERIMENTAL	31
2.1 SISTEMA DE VACÍO	33
2.1.1 BOMBA MECÁNICA	33
2.1.2 MEDIDOR DE VACÍO TERMOPAR	35
2.1.3 BOMBA TURBOMOLECULAR	36
2.1.4 MEDIDOR DE IONIZACIÓN DE CÁTODO CALIENTE	37
2.2 FUENTE DE IONES	38
2.3 ACELERACIÓN, ENFOQUE Y SELECCIÓN DE IONES	41
2.3.1 MOVIMIENTO DE PARTÍCULAS CARGADAS BAJO LA ACCIÓN	
DE UN CAMPO ELÉCTRICO	41

2.3.2 LENTES EINZEL	43
2.3.3 FILTRO DE VELOCIDADES	44
2.4 BANDERA	47
2.5 CÁMARA DE REACCIÓN Y TUBO DE TIEMPO DE VUELO	47
2.4.1 SISTEMA DE INTERACCIÓN	48
2.6 DETECTORES	51
CAPÍTULO 3. DESARROLLO EXPERIMENTAL	53
3.1 FUNCIONAMIENTO DEL CAÑÓN DE IONES	53
3.1.1 PRODUCCIÓN DE VACÍO	53
3.1.2 GENERACIÓN DEL HAZ DE IONES POSITIVOS	53
3.1.3 ACELERACIÓN, ENFOQUE Y SELECCIÓN DE IONES	54
3.2 DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS OPERACIONALES DEL	
CAÑÓN DE IONES	55
3.3 DETECCIÓN DE LOS FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN DE H_2^+ EN AIRE	56
3.4 DATOS EXPERIMENTALES	56
3.4.1 DATOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LA MEZCLA DE H_2^+ Y Ar EN LA	
FUENTE DE IONES	57
3.4.2 DATOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LAS LENTES EINZEL	59
3.4.3 DATOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LAS PLACAS DE DEFLEXIÓN	
EN EL CODO DE 10°	60
3.4.4 DATOS DE LA DETECCIÓN DE LOS FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN	
DE H ₂ ⁺ EN AIRE	62
3.4.4.1 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 2.94 \text{ kV}$	62
3.4.4.2 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 3.94 \text{ kV}$	64
3.4.4.3 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 4.94 \text{ kV}$	66
3.4.4.4 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 5.94 \text{ kV}$	68
3.4.4.5 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA V _a = 6.94 kV	70

CAPÍTULO 4. RESULTADOS	73
4.1 VALORES ÓPTIMOS PARA LOS COMPONENTES DE LA FUENTE DE IONES	73
4.2 RELACIÓN DE OPTIMIZACIÓN PARA LAS LENTES EINZEL	74
4.3 RELACIÓN DE OPTIMIZACIÓN PARA LAS PLACAS DE DEFLEXIÓN EN	
EL CODO DE 10°	75
4.4 CÁLCULO DEL VALOR DE LA MASA PARA EL ION H^+_2	76
4.5 RESULTADOS DE LA DETECCIÓN DE FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN DE	
$H_2^+ EN AIRE$	79
4.6 USO DEL PROGRAMA SIMION PARA SIMULAR EL TUBO DE TIEMPO	
DE VUELO	80
CAPÍTULO 5. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS Y CONCLUSIONES	88
5.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES	88
5.2 PLANES FUTUROS DEL ACELERADOR	89
APÉNDICE A. DATOS UTILIZADOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DEL CAÑÓN DE IONES	90
BIBLIOGRAFÍA	95

RESUMEN

Se reportan las mediciones de los parámetros operacionales para la generación, el enfoque y la selección del ion H_2^+ en el intervalo de 2.94 a 6.94 keV de un acelerador electrostático localizado en la Facultad de Ciencias de la UNAM. Los resultados indican que se puede generar un haz estable con una mezcla de 50 militorr de H_2 y 40 militorr de Ar. Para el enfoque se requiere un voltaje de 775.1 ± 3.3 V por cada kV del voltaje de aceleración. También se presentan las primeras señales obtenidas de los fragmentos de la colisión de H_2^+ en aire, y se comparan los datos con simulaciones realizadas usando el software SIMION.

ABSTRACT

Measurements of the operational parameters for the generation, focus and selection of H_2^+ ions in the energy range of 2.94 – 6.94 keV of an electrostatic accelerator located in the Faculty of Science (UNAM) are reported. The results show that a mixture of 50 militorr of H_2 and 40 militorr of Ar give rise to a steady ion current. A focus voltage of 775.1 ± 3.3 V for each kV of acceleration voltage is required. The first signals of the fragments of the collision of H_2^+ into air are also presented, and the data obtained is compared to computer simulations using SIMION.

INTRODUCCIÓN

El trabajo de tesis que se presenta consistió en la detección de fragmentos de la colisión de H_2^+ en aire, el cual se realizó en el Taller de Colisiones de la Facultad de Ciencias de la UNAM. Para ello, se utilizó un acelerador electrostático de bajas energías, ya que su intervalo de operación se encuentra entre 1 y 10 keV. La importancia de este trabajo reside en que, en primer lugar, fue necesario caracterizar el sistema experimental, ya que éste es nuevo y por lo tanto se requería del conocimiento de los parámetros operacionales que permitieran generar haces de iones de una manera óptima, pero sobre todo, y ese fue el principal objetivo, obtener las primeras señales de fragmentos detectados como resultado de la colisión mencionada al inicio de este párrafo.

Para ello, se construyó un sistema de seis discos dispuestos de manera paralela, y que se conoce como sistema de interacción, el cual se colocó en la cámara de reacción del acelerador, para llevar a cabo colisiones entre iones de hidrógeno y diferentes gases, con la finalidad de identificar los fragmentos de la colisión empleando la técnica de tiempo de vuelo. Por razones propias del trabajo en laboratorio y de tiempo, ya no fue posible llevar a cabo la colisión de iones de H⁺₂ con algún gas de interés, por lo que se decidió realizar las primeras pruebas con aire como el gas blanco, logrando obtener las primeras señales de fragmentos detectados. La discusión sobre los experimentos, los datos obtenidos y los resultados se encuentran a lo largo de esta tesis, la cual se ha estructurado como se menciona a continuación.

En el capítulo 1, se presentan conceptos generales sobre las colisiones; en particular, se describen algunos procesos atómicos y moleculares tales como la ionización y la transferencia de carga que dan lugar a los iones que se producen en la colisión de H_2^+ en aire.

En el capítulo 2, se describen los componentes principales del sistema experimental, tales como el sistema de vacío, el cañón de iones constituido por la fuente de iones, las lentes Einzel (para el enfoque de iones) y el filtro de velocidades (para la selección de un ion en particular), la cámara de reacción y el sistema de interacción al interior de la misma (donde se realizan las colisiones), entre otros elementos.

En el capítulo 3, se describen los experimentos realizados para determinar los parámetros operacionales del cañón de iones, tales como la corriente en el filamento, el voltaje en el ánodo, la presión de la mezcla de gases al interior de la fuente de iones, el voltaje de enfoque de las lentes Einzel y el voltaje de deflexión de un par de placas paralelas en función del voltaje de aceleración, así como la

corriente en el electroimán para seleccionar el ion H_2^+ . El conocimiento de estos parámetros permite la generación de un haz óptimo que pueda usarse para llevar a cabo colisiones.

También se presentan las primeras imágenes de los pulsos registrados en un osciloscopio, como prueba de la detección de fragmentos de la colisión de H_2^+ en aire. Si bien no fue posible identificar los iones generados después de la colisión, se observó que éstos llegan al detector, quedando sólo el trabajo a futuro para la mejora en la detección.

En el capítulo 4, se presentan los resultados de los diferentes experimentos realizados, y se compara lo obtenido experimentalmente, en cuanto a la detección de fragmentos, con simulaciones usando el software *SIMION*, encontrando que hay diferencias entre lo que se midió y lo que se esperaría obtener. Lo realizado en el laboratorio indica que la configuración actual del sistema de interacción no optimiza la detección, por lo que se realizó una propuesta de configuración para llevar a cabo en el laboratorio.

Por último, en el capítulo 5 se presentan las conclusiones de este trabajo, y los planes futuros para el acelerador.

CAPÍTULO 1. CONCEPTOS GENERALES

Las colisiones atómicas son de fundamental importancia en la física atómica y molecular y desempeñan también un importante papel en otros campos tales como la astrofísica, la química, la física de plasmas y la física del láser. Básicamente, estos fenómenos involucran colisiones entre una *partícula elemental* (fotón, electrón, ...) y un *sistema atómico* (átomo, ion, molécula) o entre dos sistemas atómicos.

En una colisión, las partículas que se aproximan cambian su movimiento debido a la interacción mutua entre ellas, produciendo un intercambio de momento y energía. En muchos casos, las partículas finales no son idénticas a las partículas iniciales; por lo tanto, las colisiones se pueden clasificar en diferentes tipos, según la naturaleza de los productos de una colisión.

1.1 COLISIONES ATÓMICAS Y MOLECULARES [1], [2]

1.1.1 TIPOS DE COLISIONES

Considérese un experimento típico de colisiones el cual se ilustra esquemáticamente en la figura 1.1. Un haz de partículas A, bien colimado y casi monoenergético, se hace incidir sobre un blanco. El haz incidente no debe ser ni demasiado intenso, de manera que la interacción entre las partículas incidentes pueda ser despreciada, ni demasiado débil, ya que se desea observar un número razonable de "eventos" durante el experimento.

El blanco por lo general consiste en una muestra macroscópica que contiene un gran número de dispersores B. Las distancias entre estos dispersores son usualmente muy grandes con respecto a la longitud de onda de de Broglie de la partícula incidente, por lo que en tal caso se pueden despreciar efectos de coherencia entre las ondas dispersadas por cada uno de los centros de dispersión. Además, si el blanco es suficientemente delgado, se puede despreciar la dispersión múltiple por varios dispersores. Puede entonces considerarse que cada dispersor B actúa como si fuera el único, centrando así la atención en el estudio de una colisión típica entre una partícula A del haz incidente y un dispersor B del blanco.



Figura 1.1. Esquema de un proceso de colisión atómica.

Después de la colisión, algunas o todas las partículas emergentes son registradas por detectores, localizados a una distancia macroscópica del blanco. Varios procesos pueden ocurrir, entre ellos:

i) *Dispersión elástica*: las dos partículas A y B son simplemente dispersadas sin ningún cambio en su estructura interna,

$$A + B \to A + B \tag{1.1}$$

ii) *Colisiones inelásticas*: cualquiera de las dos partículas A o B, o ambas, sufren un cambio en su estado interno durante el proceso de colisión. Denotando con A* y B* estos nuevos estados internos o *estados excitados*, se puede tener

$$A + B \rightarrow A^* + B$$
$$\rightarrow A + B^*$$
$$\rightarrow A^* + B^*$$
(1.2)

Incluidas en esta categoría están aquellas reacciones en las cuales uno o ambos átomos son *ionizados* y uno o más electrones son expulsados, dejando un ion positivo, o varios:

$$A + B \rightarrow A^{+} + B + e^{-}$$
$$\rightarrow A + B^{+} + e^{-}$$
$$\rightarrow A^{2^{+}} + B + 2e^{-}$$
(1.3)

Otro proceso es aquel en el que uno o más electrones se transfieren de un átomo a otro. Por ejemplo,

$$A + B \rightarrow A^{-} + B^{+}$$
$$\rightarrow A^{2-} + B^{2+}$$
(1.4)

Tales colisiones se conocen como transferencia de carga, o captura electrónica.

iii) Reacciones: el sistema compuesto (A + B) se divide en dos partículas C y D, diferentes de A y B,

$$A + B \to C + D \tag{1.5}$$

o en n > 2 partículas. Esto es,

$$A + B \rightarrow C_1 + C_2 + \dots + C_n \tag{1.6}$$

1.1.2 CANALES

Un canal es un posible modo de fragmentación del sistema compuesto (A + B) durante la colisión. Se caracteriza por el número y la naturaleza de los fragmentos en lo cuales el sistema (A + B) puede descomponerse. En las colisiones elásticas las dos partículas que colisionan A y B permanecen en el canal inicial, mientras que las colisiones inelásticas o las reacciones son procesos que conducen de un canal inicial dado a un canal final diferente. Se dice que un canal es *abierto* si la colisión correspondiente es permitida por las leyes de conservación conocidas (tal como la conservación de la energía); de lo contrario se dice que es *cerrado*.

1.1.3 UMBRALES

Considérese una reacción general del tipo (1.6), y denótese por E_A , E_B , E_1 , E_2 , ..., E_n las energías internas de las partículas A, B, C₁, C₂, ..., C_n. Trabajando en el *sistema del centro de masa* (CM), en el cual el centro de masa del sistema compuesto (A + B) está en reposo, escribimos la ley de conservación de energía como

$$K_i + E_A + E_B = K_f + E_1 + E_2 + \dots + E_n$$
 (1.7)

donde K_i y K_f son las energías cinéticas inicial y final, respectivamente. Esta relación puede también escribirse como

$$\mathbf{K}_{\mathrm{f}} = \mathbf{K}_{\mathrm{i}} + \mathbf{Q}_{\mathrm{if}} \tag{1.8}$$

donde

$$Q_{if} = E_A + E_B - (E_1 + E_2 + \dots + E_n)$$
(1.9)

es el cambio en la energía interna que ha ocurrido.

Una condición necesaria para que la reacción suceda es que $K_f \ge 0$. Como resultado, si $Q_{if} \ge 0$ la reacción es siempre permitida desde el punto de vista de la conservación de energía (puede ser prohibida por otras leyes de conservación) y se llama *exotérmica*. Por otra parte, si $Q_{if} < 0$, la reacción se dice que es *endotérmica*. Puede sólo ocurrir si

$$\mathbf{K}_{i} \geq \mathbf{K}_{i}^{t} \tag{1.10}$$

donde $K_i^t = -Q_{if}$ se conoce como el *umbral* de la reacción (en el sistema CM). En el *sistema de laboratorio*, donde la partícula blanco B está en reposo antes de la colisión, la correspondiente energía de umbral $(T_i^t)_L$ está dada por

$$(K_{i}^{t})_{L} = \frac{m_{A} + m_{B}}{m_{B}} K_{i}^{t}$$
(1.11)

donde m_A y m_B son las masas de las partículas A y B, respectivamente.

Para ilustrar los conceptos de canales y umbrales introducidos más arriba, considérese la dispersión de electrones por átomos de hidrógeno inicialmente en el estado base 1s. Dado que la masa del protón es mucho mayor que la masa del electrón, los sistemas de laboratorio y del centro de masas coinciden.

Para energías del electrón incidente E_i^e (= K_i) por debajo de la energía umbral para la excitación del nivel n = 2 del hidrógeno (esto es, para E_i^e < 10.2 eV) el único canal final abierto corresponde al proceso de dispersión elástica:

$$e^{-} + H(1s) \rightarrow e^{-} + H(1s)$$
 (1.12)

Para energías del electrón incidente E_i^e variando entre la energía umbral para la excitación del nivel n = 2 (10.2 eV) y la energía umbral para ionización con valor de 13.6 eV, los canales inelásticos e⁻ + H^{*} – donde H^{*} denota un estado excitado del hidrógeno – se abren sucesivamente, correspondiendo a colisiones inelásticas:

$$e^- + H(1s) \rightarrow e^- + H^*$$
 (1.13)

Finalmente, si $E_i^e \ge 13.6 \text{ eV}$, el canal de ionización (H⁺ + 2e⁻) se vuelve abierto, correspondiendo a la reacción de ionización

$$e^- + H(1s) \rightarrow H^+ + 2e^-$$
 (1.14)

1.1.4 SECCIÓN TRANSVERSAL

Los resultados de los experimentos de colisiones se expresan usualmente en términos de cantidades llamadas *secciones transversales*. Se puede definir la *sección transversal para un cierto tipo de evento en una colisión dada como la razón entre el número de eventos de este tipo por unidad de tiempo y por unidad de ángulo sólido, y el flujo de partículas incidentes con respecto al blanco.*

En un experimento de colisiones, se observa la interacción entre un haz de partículas incidentes A y un material blanco B. El número total de colisiones durante la realización del experimento es proporcional al número total de partículas incidentes y al número de partículas blanco por unidad de área en la trayectoria del haz. En estos experimentos, se cuentan los productos de la colisión que salen del blanco. Después de la colisión, aquellas partículas que no interactuaron con el blanco continúan su movimiento en la dirección incidente, pero aquellas que interactuaron con el blanco son desviadas hacia algún ángulo como se representa en la figura 1.2. El número de partículas que salen del blanco varía de una dirección a otra. El número de partículas desviadas hacia un elemento de ángulo sólido $d\Omega$ ($d\Omega$ = sen $\theta d\theta d\phi$) es proporcional a la *sección transversal diferencial*. Esta sección transversal diferencial, la cual se denota por $d\sigma(\theta, \phi)/d\Omega$, se puede escribir, siguiendo la definición dada anteriormente, como

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{J_{A}} \frac{dN(\theta,\varphi)}{d\Omega}$$
(1.15)

donde J_A es el flujo incidente (o densidad de corriente incidente), y es igual al número de partículas incidentes por unidad de área por unidad de tiempo.

La relación entre $d\sigma/d\Omega$ y la sección transversal total σ resulta directa:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{\pi} \operatorname{sen} \theta d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\varphi$$
(1.16)

La mayoría de los experimentos son realizados en el sistema de referencia del laboratorio (Lab) en el cual el blanco está inicialmente en reposo mientras que los proyectiles se mueven.

Los cálculos de las secciones transversales son generalmente más fáciles de realizar en el sistema del centro de masas (CM) en el cual el centro de masas del sistema proyectil-blanco está en reposo (antes y después de la colisión).



Figura 1.2. Dispersión entre un haz incidente de partículas y un blanco fijo: las partículas dispersadas son detectadas dentro de un ángulo sólido d Ω .

1.2 PROCESOS ATÓMICOS Y MOLECULARES^{[1] [2] [3]}

1.2.1 EXCITACIÓN DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS.

El proceso por el cual un estado atómico o molecular discreto se transforma en otro, y por el cual el átomo o molécula se lleva a un nivel de energía más alto se llama excitación. En la excitación de átomos, el estado electrónico alcanza un nivel de energía más alto. En la excitación de moléculas, no sólo los estados electrónicos sino también los estados vibracionales y rotacionales de la molécula pueden cambiar.

Los átomos y moléculas se pueden excitar principalmente por el impacto de electrones, iones o partículas neutras, y por la absorción de fotones.

La excitación por impacto de electrones ocurre si la energía del electrón incidente, en la colisión inelástica electrón-átomo o electrón-molécula, es la necesaria para la transición de un nivel de energía electrónico a otro en el caso atómico, y además de los estados electrónicos, los estados rotacional y vibracional en el caso molecular. Después de la colisión inelástica, la energía cinética del electrón incidente es menor y esa diferencia de energía se utiliza en el incremento de la energía interna de la partícula sobre la cual impactó el electrón, esto es, en la excitación de esta partícula a un nivel de energía más alto.

Sean $v_{e(m)}$ y $v_{e(n)}$ las velocidades del electrón antes y después de la colisión inelástica, respectivamente, mientras que el átomo se lleva del estado *m* con energía E_m al estado *n* con energía E_n . El incremento en la energía interna E_{mn} se puede entonces expresar como:

$$\frac{m}{2}(v_{e(m)}^2 - v_{e(n)}^2) = E_m - E_n = E_{mn}$$
(1.17)

Este incremento de energía se llama *energía de excitación* de la transición dada. De la expresión anterior se sigue que si la energía de colisión E_e es menor que la energía de excitación entonces no ocurre el proceso de excitación, es decir, la sección eficaz de excitación σ_g es cero. Así, la función $\sigma_g(E_e)$ tiene un umbral bien definido en $E_e = E_{mn}$. Si la energía de impacto E_e es mayor que la energía de excitación E_{mn} , la sección eficaz de excitación es mayor que cero.

Usando la teoría cuántica, se encuentra que la sección eficaz de excitación para energías cercanas al valor umbral de excitación, se puede expresar como:

$$\sigma_{0n} = C(E_e - E_{0n})^{1/2} \tag{1.18}$$

donde C es una constante y se cumple que $E_e - E_{0n} \ll E_{0n}$. La figura 1.3 muestra los valores de la sección eficaz de excitación en la transición 1s-2p del átomo de hidrógeno para diferentes energías de impacto. En este caso, los valores experimentales concuerdan con aquellos obtenidos con la expresión (1.18) para un pequeño intervalo de energías de impacto.

Más allá de la energía umbral de excitación, los valores de la función de excitación muestran un incremento lineal conforme aumenta la energía de impacto hasta un valor máximo después del cual la función comienza a decrecer. Por otra parte, hay que mencionar que la forma de la función de excitación puede cambiar sustancialmente con el tipo de transición involucrada en la colisión.

La sección eficaz de excitación puede calcularse con mayor detalle usando métodos de aproximación clásicos o cuánticos o mediante el uso de fórmulas semi-empíricas. La aproximación clásica a las colisiones inelásticas de los electrones es el modelo de colisión de dos partículas, el cual describe el impacto de los electrones incidentes sólo sobre los electrones orbitales del átomo, ya sea ignorando o tomando en cuenta el movimiento de estos electrones.



Figura 1.3. Valores de la sección eficaz de excitación en la transición 1s-2p del átomo de hidrógeno para diferentes energías de impacto. (ver referencia [16]).

El modelo clásico es la aproximación más simple a la colisión inelástica entre electrones y como tal no se espera que proporcione datos precisos sobre la posición y el valor máximo de la sección eficaz de excitación. Sin embargo, da una descripción cualitativa sobre la dependencia de la sección eficaz de excitación con respecto de la energía de impacto.

Una descripción más precisa de los procesos de excitación se obtiene de un tratamiento cuántico. Debe mencionarse, sin embargo, que debido a dificultades sustanciales de los cálculos en términos de la mecánica cuántica, se prefiere aplicar diferentes aproximaciones.

Si el electrón colisiona con una molécula, ésta interacciona con el electrón como un sistema unitario y en consecuencia no sólo los estados electrónicos, sino también los estados vibracionales y rotacionales de la molécula pueden sufrir un cambio. En este caso, la energía impartida por el electrón incidente puede contribuir parcialmente a la excitación de electrones y al cambio del movimiento de los átomos que conforman a la molécula.

El espectro de energía de los estados electrónicos en una molécula es así un sistema de niveles vibracionales (v) y rotacionales (j), como se ilustra en la figura 1.4. La figura muestra la estructura de bandas característica de una molécula diatómica.

En una molécula diatómica se pueden excitar sus electrones por el impacto de un electrón sin cambiar la distancia r entre los núcleos, esto es, la molécula es llevada por la energía de impacto (según el principio de Franck–Condon) del punto r_0 en la curva de potencial del estado base, al mismo valor r_0 en la curva de potencial del estado base, al mismo valor r_0 en la curva de potencial del estado excitado, como se observa en la figura 1.5.



Figura 1.4. Esquema de niveles de energía para los estados vibracionales y rotacionales de una molécula diatómica.



Figura 1.5. Transición tipo Frank–Condon desde el estado base al estado excitado en una molécula diatómica.

Debido a los diferentes estados vibracionales, el espaciamiento atómico dentro de la molécula oscila en el intervalo Δr alrededor de la distancia de equilibrio r_0 del estado molecular estable. Por lo tanto, la transición desde el estado base a un estado electrónico superior ocurre en el intervalo Δr y la probabilidad de transición tiene los valores más grandes en el límite de este intervalo, es decir en el punto de retorno de la vibración, donde es más probable que se encuentren los núcleos.

La excitación de los estados electrónicos en una molécula ocurre por impacto electrónico esencialmente de la misma manera que en los átomos. Las secciones eficaces de excitación son más grandes para transiciones permitidas, y las funciones de excitación tienen un valor máximo en energías cercanas al valor umbral de excitación.

Si los estados rotacionales y vibracionales de la molécula son excitados simultáneamente con los estados electrónicos, la dependencia con la energía de la función de excitación será de diferente forma comparada con la función de excitación de los puros estados electrónicos.

En los procesos de excitación mediante colisiones inelásticas de átomos con átomos o moléculas, o de iones con átomos o moléculas, es muy probable que ocurra un gran número de procesos en comparación con los que ocurren en la colisiones inelásticas de electrones con átomos o moléculas. Esto se debe a que los iones y átomos poseen estructura y pueden cambiar sus estados de energía, cosa que no

ocurre con los electrones. Si consideramos dos átomos de hidrógeno en el estado base, la colisión inelástica átomo-átomo puede dar lugar a las siguientes transiciones:

$$H(1s) + H(nl)$$

$$H(1s) + H(1s) \rightarrow H(nl) + H(1s) \qquad (1.19)$$

$$H(nl) + H(n'l')$$

Las secciones eficaces de excitación para los procesos descritos por (1.19) se pueden calcular utilizando la aproximación de Born. Se ha encontrado que las secciones eficaces de excitación son más grandes para las colisiones de átomos con iones, que para las colisiones de átomos con átomos.

Por último, los átomos o moléculas pueden también excitarse por la absorción de fotones. Este tipo de excitación ocurre sólo si la energía hv del fotón 'absorbido' es igual a la diferencia entre el nivel de energía E_n del estado excitado y el del estado a energía E_m , esto es, si la condición de Bohr

$$hv = E_n - E_m \tag{1.20}$$

se satisface y si hay una transición ópticamente permitida entre los dos estados.

Un sistema atómico o molecular también se puede excitar por la dispersión de fotones sobre el átomo o la molécula. Parte de la energía hv del fotón dispersado puede gastarse en la excitación del átomo o la molécula. En este caso la energía del fotón dispersado disminuye por el valor de la energía de excitación $E_{mn} = E_n - E_m$ y se reduce a

$$hv' = hv - (E_n - E_m)$$
(1.21)

1.2.2 IONIZACIÓN DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

La ionización es un proceso en el cual los electrones atómicos o moleculares se llevan desde un estado de energía discreto a un estado en el espectro continuo, esto es, uno o más electrones escapan desde el átomo o la molécula. Como resultado de la ionización, el átomo originalmente neutro o el ion con carga n se transforma a un ion con carga m o n + m con la emisión simultánea de m electrones libres, lo que se representa como:

$$A + e^{-} \rightarrow A^{(m)} + (m)e^{-} + e^{-}$$
 (1.22)

$$A^{(n)} + e^- \rightarrow A^{(n+m)} + (m) e^- + e^-$$
 (1.23)

Los átomos o moléculas se pueden ionizar por impacto de electrones, de átomos o iones y por la absorción de fotones.

Las colisiones inelásticas de átomos o moléculas con electrones pueden conducir a la ionización si la energía requerida para la expulsión de uno o más electrones se comunica en la colisión por los electrones incidentes al átomo o molécula. La cantidad de energía necesaria para la expulsión de electrones depende del estado de energía dado de los átomos o moléculas en el momento de la colisión.

Se define E_{nl}^{i} como la energía mínima necesaria para la ionización de un átomo o molécula tanto en su estado base como en cualquier estado excitado (*n* y *l* son los números cuánticos principal y orbital, respectivamente). Esta energía corresponde a la energía de enlace del electrón en el nivel de energía en cuestión. La energía E^{*i*} necesaria para la ionización del estado base se llama *potencial de ionización*. La ionización ocurre si la energía del electrón que colisiona con el átomo o la molécula excede el valor de E_{nl}^{i} . Debe mencionarse que es posible que la ionización ocurra incluso a energías de impacto electrónico por debajo del valor del potencial de ionización. Esto sucede cuando los átomos o moléculas se llevan a un estado excitado por impacto electrónico y nuevas colisiones con electrones durante el tiempo de vida del estado excitado conducen finalmente a la ionización. De igual manera que la sección eficaz de excitación, la sección eficaz de ionización σ_{nl}^{i} es cero a energías de impacto electrónico *E*_e $\leq E_{nl}^{i}$. La sección eficaz para la ionización simple σ_{i} es función de la energía de impacto electrónico. Esta función se llama función de ionización de la molécula. Si $E_e = E_{nl}^i$ la función de ionización muestra un umbral pronunciado.

La sección eficaz de ionización se incrementa conforme aumenta la energía de impacto y su valor cercano a la energía umbral de ionización se puede obtener para la ionización simple de átomos por medio de la expresión:

$$\sigma_i = \mathcal{C}(E_e - E_0^i) \tag{1.24}$$

donde C es una constante. En esta expresión se ha ignorado la interacción entre el electrón incidente y los electrones expulsados. Una expresión más precisa que considera esta interacción modifica el exponente en (1.24) a 1.1296 para la ionización de átomos y a 1.056 para la ionización de iones.

La función de ionización aumenta con una mayor energía de impacto hasta un valor máximo después del cual decrece con energías de impacto más grandes como se muestra para algunos átomos y moléculas en la figura 1.6.



Figura 1.6. Valores de la sección eficaz de ionización del H_1 , H_2 , He, Ne, N_2 y Ar para diferentes energías de impacto.

Para calcular las secciones eficaces de ionización se emplean métodos clásicos o cuánticos, o bien, fórmulas semi-empíricas. El punto de vista clásico es considerar al electrón y al átomo o molécula como esferas elásticas duras de masa constante las cuales en una colisión intercambian energía y momento sujetos a las leyes de conservación. Como resultado del impacto, el electrón primario usualmente produce un ion positivamente cargado y otro electrón.

Si la colisión es elástica, los electrones incidentes sólo transfieren una parte pequeña de su energía cinética a las partículas. Consideremos, por ejemplo, una colisión con un solo grado de libertad entre dos partículas de masas m_1 y m_2 , donde m_2 está inicialmente en reposo, la razón entre las energías cinéticas es :

$$\frac{E_{2f}}{E_{1i}} = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2}$$
(1.25)

Para $m_1 \ll m_2$, la relación anterior se reduce a sólo:

$$\frac{E_{2f}}{E_{1i}} = \frac{4m_1}{m_2}$$
(1.26)

Para $m_1 / m_2 \approx 1/1800$, que es el caso de un electrón que choca con el ion de hidrógeno, la fracción de la energía transferida en la colisión (del electrón al ion) es solamente 4/1800. Por lo tanto, no ocurre ionización del ion de hidrógeno.

Si la colisión es inelástica, los átomos o moléculas se ionizan por la energía que adquieren de los electrones incidentes. Por lo tanto, la condición para que ocurra ionización es que la energía cinética de los electrones, $\frac{1}{2}$ mv², sea por lo menos igual a la energía de ionización del átomo, E_{nl}^{i} , esto es:

$$\frac{1}{2}\operatorname{mv}^2 \ge E_{nl}^i \tag{1.27}$$

La ionización de átomos y moléculas por colisiones inelásticas con iones o átomos depende de los estados de las partículas que colisionan y de la energía de impacto, además el proceso puede ocurrir de varias formas.

Si la colisión inelástica es átomo con átomo, para que ocurra la ionización la energía de impacto debe ser mayor que:

$$E_u = \frac{E_0^i (m_1 + m_2)}{m_2} \tag{1.28}$$

donde m₁ y m₂ son las masas de las partículas que colisionan. Se sigue de esta expresión que para m₁ = m₂ se tiene $E_u = 2E_0^i$, como sucede en los procesos H + H o H⁺ + H₁.

A bajas energías de impacto la ionización se logra si los átomos o moléculas en colisión se encuentran en un estado excitado y si la energía de excitación de una partícula se transfiere a la otra durante la colisión inelástica. Este proceso tiene varios canales de salida, tales como:

 \rightarrow A + B⁺ + e⁻

$$A^* + B^* \rightarrow A^+ + B^- + e^-$$
(1.29)

$$A + B \rightarrow A + B^{+} + e^{-}$$
(1.30)

En la reacción del tipo (1.29) las energías de excitación de ambos átomos se comunican a una de las partículas y las energías combinadas son suficientes para la ionización. El proceso de tipo (1.30) puede ocurrir sólo si el potencial de ionización E_B^i de la partícula B es más baja que la energía de excitación E_A^e de la partícula A, esto es, $E_B^i < E_A^e$.

Por último, los átomos y moléculas pueden también ionizarse por la absorción de fotones. Este proceso se conoce como *fotoionización*, y difiere de la excitación por absorción de fotones en que el estado final de los electrones involucrados en el proceso se encuentran en el continuo y no en el espectro discreto de energías.

La fotoionización ocurre si la energía hv del fotón capturado por el átomo o la molécula excede el potencial de ionización de la partícula, esto es, $hv > E_{nl}^{i}$. Los fotones de cualquier frecuencia que satisfagan esta condición pueden ser absorbidos e inducir fotoionización. En este proceso la energía cinética E_{e}^{k} del electrón liberado está dada por la ecuación de Einstein:

$$E_{e}^{k} = hv - E_{nl}^{i}$$
(1.31)

y la energía del fotón se puede referir a longitud de onda por la ecuación $eV = hv = hc/\lambda$, de donde se tiene que:

$$\lambda = \frac{hc}{eV} = \frac{12400}{V} \stackrel{\circ}{A}$$
(1.32)

donde V está en volts. El umbral del valor de la energía del fotón requerido para llevar a cabo la ionización, será aquel que tenga el valor de longitud de onda dado por la expresión anterior con V igual al potencial de ionización.

1.2.3 TRANSFERENCIA DE CARGA EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

En el proceso denominado transferencia de carga, los átomos y las moléculas que colisionan intercambian electrones entre sí; como consecuencia de esto, estas partículas cambian su estado de carga de acuerdo al número de electrones que pierden o ganan en el proceso de transferencia. La expresión general que describe este tipo de proceso es

$$A^{i} + B \rightarrow A^{f} + B^{(i-f)} + \Delta E$$
(1.33)

donde 'i' y 'f' son las cargas de las partículas, dadas en unidades de carga electrónica, antes y después del intercambio de carga, respectivamente, mientras que ΔE es la diferencia entre las energías de ionización de las partículas A y B.

Los procesos descritos por (1.33) se pueden agrupar dependiendo del número de electrones transferidos, por ejemplo:

i) Captura electrónica

$$A^{+} + B \rightarrow A + B^{+} + \Delta E_{1}$$
(1.34)

ii) Captura electrónica doble

$$A^{+} + B \rightarrow A^{-} + B^{2+} + \Delta E_2 \tag{1.35}$$

iii) Pérdida electrónica

$$A^{+} + B \rightarrow A^{2+} + B^{-} + \Delta E_{3}$$
 (1.36)

Si en el intercambio de carga ocurre que $\Delta E = 0$, se dice que el proceso es resonante, y se describe por:

$$A^{+} + A \rightarrow A + A^{+} \tag{1.37}$$

La transferencia de carga por resonancia ocurre entre iones y átomos del mismo elemento.

Por otra parte, cuando el blanco es una molécula, existe la posibilidad de que ocurra un rompimiento de la misma durante o inmediatamente después del intercambio de carga. A este tipo de transferencia se le denomina *transferencia con disociación*. Si BC representa una molécula y A⁺ es el ion incidente, el proceso se representa de la siguiente manera:

$$A^{+} + BC \rightarrow A + (BC)^{+}$$
(1.38)

seguida, ya sea por:

$$(BC)^{+} \rightarrow B + C^{+} \tag{1.39}$$

o por:

$$(BC)^+ \to B^+ + C \tag{1.40}$$

Otra posibilidad es una combinación entre transferencia de carga disociativa y ionización:

$$A^{+} + BC \rightarrow A + B^{+} + C^{+} + e \qquad (1.41)$$

1.2.4 DISOCIACIÓN DE ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

La disociación es el proceso por el cual la molécula se descompone en sus átomos debido a la energía impartida a la molécula. La cantidad de energía requerida para inducir la disociación molecular siempre depende del estado de energía interna de la molécula la cual, al momento de la colisión, puede estar en diferentes estados electrónico, rotacional o vibracional. La energía necesaria para la disociación de una molécula en su estado base se llama *energía de disociación* y se simboliza con la letra D. Las energías de disociación de algunas moléculas son: H_2 (4.48 eV), N_2 (9.76 eV), NO (6.59 eV) y O_2 (5.12 eV). (ver referencia [4]).

La energía requerida para la disociación de moléculas se puede comunicar por colisiones simples o múltiples con electrones, átomos, moléculas o fotones.

En el caso de excitación vibracional, la molécula se disocia si su energía vibracional excede la energía de disociación, y esta energía puede incrementarse debido a colisiones simples o múltiples con otras partículas. Los niveles de vibración molecular pueden excitarse y conducir a la disociación molecular en gases y vapores si la energía térmica kT de las partículas atómicas y moleculares se incrementa a un valor más grande que $\Delta V = V_n - V_m$ el cual es la diferencia entre los niveles de energía vibracional.

La transición desde un nivel vibracional a otro se permite en práctica sólo entre niveles adyacentes en el caso de niveles vibracionales discretos bajos y la probabilidad de transición rápidamente se incrementa con mayores números cuánticos vibracionales. En el intervalo de energía más grande del espectro vibracional, las transiciones entre niveles no adyacentes también son permitidas. A niveles cercanos a la energía de disociación (banda activa) la probabilidad de transición al espectro continuo aumenta a un grado en el cual la disociación se vuelve posible. Este tipo de excitación vibracional se llama excitación térmica y la disociación resultante se conoce como *disociación térmica*.

1.3 ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE TIEMPO DE VUELO (TOF-MS)^{[5],[6]}

En el espectrómetro de masas de tiempo de vuelo (TOF-MS, por sus siglas en Inglés), la separación de iones de diferentes masas se basa en el hecho de que a todos los iones se les proporciona la misma energía; por lo tanto, iones de diferentes masas tendrán diferentes velocidades. Si hay una distancia fija de recorrido de los iones, el tiempo de su recorrido variará con su masa, con las masas más ligeras viajando más rápidamente y de ese modo alcanzando el detector en un período más corto de tiempo.

El diseño básico de un espectrómetro de masas de tiempo de vuelo con haces pulsados se muestra esquemáticamente en la figura 1.7. En este caso, los iones se forman por impacto de electrones en la fuente de iones (F es el filamento, y T es la trampa de electrones). Un pulso de voltaje sobre la rejilla G_1 extrae los iones de la fuente y una diferencia de potencial entre las rejillas G_1 y G_2 acelera a los iones en el tubo de vuelo. La región entre las rejillas G_2 y G_3 es libre de campo. Los iones llegan a la rejilla G_3 separados en tiempo, y esta separación se hace permanente por un pulso de voltaje repelente sobre la rejilla G_3 aplicado después de que los iones de una razón m/e dada han pasado la rejilla y antes de que los iones de la siguiente razón m/e lleguen. Las corrientes de iones positivos son entonces medidas en el colector C.



Figura 1.7. Esquema de un espectrómetro de masas de tiempo de vuelo. F es el filamento, T es la trampa de electrones, G_1 , G_2 y G_3 son rejillas a distintos voltajes.

La energía cinética T adquirida por los iones a través del potencial acelerador V es:

$$T = mv^2 / 2 = eV$$
(1.42)

El tiempo de vuelo t_f (en segundos) está dado por:

$$\mathbf{t}_{\mathrm{f}} = \mathbf{d} / \mathbf{v} \tag{1.43}$$

donde d es la longitud de la trayectoria lineal que recorren los iones y v es la velocidad de los mismos. Entonces,

$$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}}$$
(1.44)

Sustituyendo la ecuación (1.44) en la ecuación (1.43), se obtiene

$$t_{\rm f} = d \sqrt{\frac{\rm m}{2\rm eV}} \tag{1.45}$$

Reescribiendo,

$$t_f = d \sqrt{1/2V} \sqrt{m/e}$$
 (1.46)

pero si d y V se mantienen constantes,

$$t_{\rm f} = k \sqrt{\rm m/e} \tag{1.47}$$

Por lo tanto, el tiempo de vuelo es simplemente proporcional a la raíz cuadrada de la razón m/e de las partículas. Por consiguiente, la identificación de diferentes iones es por medio del tiempo en que son detectados.

1.4 DETECCIÓN DE LOS FRAGMENTOS DE H₂⁺ EN AIRE

Algunos de los procesos más importantes en el estudio de la dinámica molecular son la transferencia de carga, la ionización y la disociación. Ejemplos de la importancia de estos estudios se pueden ver en las referencias [7] y [8]. Ahora bien, si se utiliza como proyectil a iones de H_2^+ y como gas blanco el aire, siendo que éste es una mezcla de gases en la que mayoritariamente se encuentra nitrógeno (N₂, 78.03%) y oxígeno (O₂, 20.99%), los procesos que se dan al interaccionar los iones de H_2^+ con las moléculas del aire pueden ser tan diversos como:

i)
$$H_2^+ + N_2 \rightarrow H_2 + N_2^+$$
 (Transferencia de carga no-disociativa) (1.48)

ii)
$$H_2^+ + N_2 \rightarrow H_2 + N^+ + N$$
 (Transferencia de carga disociativa) (1.49)

iii) $H_2^+ + N_2 \rightarrow H_2 + N^+ + N^+ + e^-$ (Transferencia de carga disociativa con ionización) (1.50)

iv)
$$H_2^+ + N_2 \rightarrow H_2^+ + N_2^+ + e^-$$
 (Ionización) (1.51)

v)
$$H_2^+ + O_2 \rightarrow H_2 + O_2^+$$
 (Transferencia de carga no-disociativa) (1.52)

vi)
$$H_2^+ + O_2 \rightarrow H_2 + O^+ + O$$
 (Transferencia de carga disociativa) (1.53)

vii) $H_2^+ + O_2 \rightarrow H_2 + O^+ + O^+ + e^-$ (Transferencia de carga disociativa con ionización) (1.54)

viii)
$$H_2^+ + O_2 \rightarrow H_2^+ + O_2^+ + e^-$$
 (Ionización) (1.55)

El propósito del presente trabajo fue detectar los fragmentos producidos en la colisión de H_2^+ en aire. En los experimento realizados, se generó un haz primario de iones de hidrógeno con energías que se encontraban entre 3 y 7 keV. Como se explica en el siguiente capítulo, estos iones fueron acelerados y enfocados por un sistema de lentes electrostáticas, y posteriormente se utilizó un filtro de velocidades para seleccionar el ion H_2^+ . El haz de iones H_2^+ continuó su trayectoria a lo largo del acelerador hasta

incidir sobre el haz de moléculas de aire, el cual se formó dentro de la cámara de reacción localizada al final del acelerador, permitiendo la entrada de aire por medio de un conjunto de agujas hipodérmicas de menos de 1 mm de diámetro colocadas dentro de un tubo de 5mm de diámetro. Este tubo se encuentra por la parte superior de la cámara de reacción y se tuvo cuidado en que el extremo que está al interior quedara 5 mm arriba de la dirección del haz de iones H_2^+ . Esto fue para obtener un haz de aire bien colimado en la región de interacción, la cual se encuentra en la distancia central entre dos discos circulares, que forman parte de un arreglo de seis discos dispuestos de manera paralela y que se ha colocado perpendicularmente a la dirección del haz de iones H2+. Cada uno de estos discos tiene una apertura central de 1 cm, y se les ha colocado una malla en su centro para que la configuración de las líneas de campo eléctrico sea uniforme al aplicar una diferencia de potencial entre los discos. Los procesos físicos de interés ocurren en la región de interacción; la extracción de los fragmentos positivos de la colisión se logró aplicando un voltaje de 700 V al disco 1. Como una primera prueba para la detección de fragmentos, se decidió conectar los discos 2, 3, 4 y 6 a tierra y utilizar el disco 5 como una lente de enfoque, variando su valor entre 0 y 500 V, generando así la señal correspondiente a la detección de los productos de la colisión. La señal se visualizó en un osciloscopio, pero no fue posible identificar los fragmentos ni el número de ellos que son detectados. Para tal efecto, se cuenta con una tarjeta multicanal y el software MCS-32 para la obtención de espectros TOF, ya que mediante esta técnica se puede lograr la identificación de los fragmentos de la colisión, pero por las características de estos elementos, se requiere que iones pulsados lleguen al detector, lo cual al tiempo de escribir esta tesis no se consiguió. Por lo tanto, queda mucho trabajo por realizar para poder emplear la técnica de tiempo de vuelo.

También es importante mencionar que como parte preliminar de esta tesis, se requirió de la determinación de los parámetros operacionales del acelerador, ya que el sistema experimental usado es nuevo, y por lo tanto fue necesario conocer los valores que permitieran la generación de un haz de iones H_2^+ óptimo.

CAPÍTULO 2. SISTEMA EXPERIMENTAL

Los experimentos descritos en el apartado 1.4 se desarrollaron en el Taller de Colisiones de la Facultad de Ciencias de la UNAM, utilizando un acelerador de bajas energías (1 - 10 keV).

El acelerador está formado principalmente por un cañón de iones **Colutron** modelo G1 que en su interior contiene: i) una fuente de iones, ii) unas lentes electrostáticas para la aceleración y el enfoque del haz (lentes Einzel), iii) unas placas de deflexión vertical y iv) un filtro de velocidades para la selección de iones (filtro de Wien); la línea del acelerador que conecta al cañón de iones con la cámara de reacción que es la parte última del sistema experimental. A lo largo de esta línea se encuentran: i) un codo de 10° dentro del cual se colocaron unas placas paralelas verticales para corregir la dirección del haz de iones, ii) una válvula manual para aislar la parte del cañón de la parte de la cámara de reacción, iii) un medidor de vacío para la parte de la cámara de reacción y iv) una lámina delgada de cobre (bandera) con dimensiones de 8.5 x 1.5 cm para la medición de la intensidad de corriente; al final de la línea del acelerador se encuentra la cámara de reacción donde además de inyectar el gas blanco, se cuenta con un sistema de interacción formado por seis discos paralelos, dos detectores y una caja de Faraday.

Se tiene también un sistema de vacío conformado por dos bombas mecánicas y dos bombas turbomoleculares, con las cuales se puede alcanzar una presión del orden de 10⁻⁶ Torr. Para la medición de tales presiones se cuenta con un medidor termopar y un medidor por ionización de cátodo caliente.

Otros elementos que conforman el sistema experimental son un refrigerador tipo Schiller que hace recircular el agua dentro del recipiente de la fuente de iones, para evitar un sobrecalentamiento de la misma; dos tanques pequeños que están conectados al cañón de iones para inyectar hidrógeno molecular y argón; un electrómetro analógico Keithley 610CR para observar los máximos en la intensidad del haz generado, y un osciloscopio HP para visualizar los fragmentos de la colisión. En la figura 2.1 se indican las tres secciones en las que se divide el acelerador, y la figura 2.2 muestra un esquema de los componentes principales del mismo.



Figura 2.1. Se indican las tres secciones en las que se divide el sistema experimental; además, se observan las bombas de vacío, y al fondo, las diferentes fuentes de voltaje empleadas.



Figura 2.2. Esquema del acelerador electrostático con sus componentes principales.

2.1 SISTEMA DE VACÍO^{[9],[10]}

Uno de los aspectos más importantes a considerar en los experimentos de colisiones entre partículas, es el vacío a través del cual se desplazan tanto el proyectil como los productos de la colisión. La idea básica es garantizar que el proyectil mantenga su identidad desde que es producido en la fuente de iones, hasta que llega a la cámara de reacción en donde interactúa con el blanco, así como con los productos de la colisión hasta que éstos son detectados.

Para lograr tal objetivo, es necesario que la presión en el interior del sistema experimental sea lo suficientemente baja para que el proyectil tenga un camino libre medio (λ) mucho mayor que la distancia que recorrerá hasta la cámara de reacción. La expresión para el camino libre medio de una molécula de diámetro *d* dentro de un gas a una presión *P* y a una temperatura *T* es:

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2\pi} \ d^2 P} \tag{2.1}$$

donde $k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ es la constante de Boltzmann. Sustituyendo en la expresión (2.1) el diámetro de las moléculas de aire, el cual es de 3.66 x $10^{-10} \text{ m}^{[11]}$, una presión del orden de 2 x 10^{-6} Torr (1 Torr = 133.32 Pa), y una temperatura ambiente de 23 °C (= 300 K), se obtiene que el camino libre medio es $\lambda = 26.1 \text{ m}$.

2.1.1 BOMBA MECÁNICA^[12]

Las bombas mecánicas se utilizan para alcanzar presiones en el intervalo de 10⁻¹ a 10⁻³ Torr, lo que se conoce como vacío primario; por lo general, sirven de apoyo a otro tipo de bombas como la turbomolecular, la cual comienza a operar a partir de 10⁻³ Torr.

Las bombas mecánicas que forman parte del sistema experimental son de la marca ALCATEL modelo 2015 SD, y son del tipo de paletas rotatorias. En éstas, hay una parte funcional que está compuesta de: i) un espacio cilíndrico hueco (estator) con válvulas de entrada y salida, ii) un cilindro de diámetro menor (rotor) montado excéntricamente dentro del estator y iii) dos paletas deslizables sujetas por medio de un resorte sobre el rotor. Su funcionamiento se puede describir por medio de un ciclo de cuatro etapas, las cuales son: i) Entrada. Las paletas deslizables se mueven cuando el rotor gira. El

volumen entre la entrada y la paleta inferior se incrementa; esto causa que el gas se mueva dentro de esta región desde la entrada. Cuando pasa la segunda paleta, se cierra el espacio, ii) Transferencia. El gas contenido en el espacio entre las dos paletas se transfiere al orificio de salida conforme gira el rotor, iii) Compresión. El espacio comunica con la salida, la cual tiene una válvula. El gas se comprime hasta que se abre la válvula de descarga y iv) Salida. El gas es expulsado al recipiente de aceite cuando la presión es suficiente para abrir la válvula. La figura 2.3 se refiere a un esquema del ciclo de operación de la bomba mecánica, y la figura 2.4 es una fotografía de la misma.



Figura 2.3. Ciclo de operación de la bomba mecánica de paletas rotatorias.



Figura 2.4. Fotografía de una bomba mecánica Alcatel modelo 2015 SD.

2.1.2 MEDIDOR DE VACÍO TERMOPAR^[13]

El medidor de vacío utilizado para indicar la presión del vacío primario dentro del cañón de iones es un medidor del tipo termopar (Thermocouple Gauge) de la marca MDC, el cual ofrece una medida confiable desde 0.1 hasta 1 000 micrones de Hg.

Este medidor consiste en una estructura metálica que contiene un filamento, el cual se calienta por una corriente constante. El termopar es soldado a un puente de conducción en el centro del filamento, proporcionando así un medio para medir directamente la temperatura del puente.

La temperatura del puente se incrementa mientras el aire se extrae del sistema ya que, con menos aire residual, se reduce el efecto de enfriamiento. Dado que el voltaje del termopar aumenta con la temperatura, la señal desde el sensor se incrementa mientras la presión al interior del sistema se reduce. Por lo tanto, en el extremo inferior del intervalo de presión del instrumento, la señal del termopar se encuentra en su máximo valor. Por el contrario, en el extremo superior del intervalo de presión, el efecto de enfriamiento del gas residual es considerable, por lo que se produce una señal más baja desde el elemento termopar. La figura 2.5 muestra un esquema de las partes principales del medidor termopar.



Figura 2.5. Esquema de las partes principales de un medidor de vacío tipo termopar.
2.1.3 BOMBA TURBOMOLECULAR^[14]

En su forma más general, este tipo de bomba contiene en su interior un rotor sobre el cual están montadas una gran cantidad de aspas, separadas cada una de éstas por una serie de discos que se hallan fijos a la estructura de la bomba. El eje de las aspas (rotor) tiene sus extremos montados sobre baleros lubricados con aceite para reducir el efecto de la fricción. El vacío se logra debido a la diferencia de presiones creada cuando las aspas giran a una gran velocidad (56, 000 rpm). El intervalo en que trabajan eficientemente estas bombas es de 10⁻³ a 10⁻¹⁰ Torr, y es característico que se encuentren entre la bomba mecánica y el sistema a evacuar. En la figura 2.6 se observa la parte superior de la bomba turbomolecular Varian TV-301 Navigator que forma parte del sistema experimental, y en la figura 2.7 se muestran las dos bombas de vacío (mecánica y turbomolecular) conectadas en la parte posterior del cañón de iones.



Figura 2.6. Fotografía de la bomba turbomolecular VARIAN TV-301 Navigator, en la cual se pueden observar las aspas giratorias.



Fotografía 2.7. La bomba turbomolecular se encuentra entre el cañón de iones (el sistema a evacuar) y la bomba mecánica.

2.1.4 MEDIDOR DE IONIZACIÓN DE CÁTODO CALIENTE

Los medidores de ionización de cátodo caliente (Ionization Gauge) están diseñados para medidas de alto y ultra alto vacío, lo que corresponde a un intervalo entre 1×10^{-3} y 2×10^{-10} Torr. Estos dispositivos, a los que comúnmente se les refiere como medidores Bayard-Alpert, consisten de varios componentes incluyendo: i) un filamento resistivo, ii) una malla metálica cargada positivamente y iii) un colector cargado negativamente.

Cuando se hace pasar corriente por el filamento, éste emite electrones. La malla, un alambre enrollado en espiral y cargado positivamente, atrae y acelera los electrones emitidos por el filamento. El colector, un alambre cargado negativamente, se coloca estratégicamente en el camino de los electrones salientes. Como los electrones colisionan con las moléculas del aire dentro del tubo, las moléculas del aire pierden un electrón y se ionizan positivamente y en consecuencia son atraídos hacia el colector cargado negativamente. El número de iones positivos es proporcional a la densidad molecular cuando la presión

es menor a 10⁻³ Torr; por tanto, la corriente de iones positivos sobre el colector es una medida indirecta de la presión. En la figura 2.8 se puede observar un esquema de los componentes principales del medidor descrito.



Figura 2.8. Esquema de las partes principales de un medidor de vacío de ionización de cátodo caliente.

2.2 FUENTE DE IONES^[15]

La fuente de iones *Colutron* es donde se admite el gas a ionizar y, por medio de una descarga en arco, se obtiene el ion con el que se desea trabajar; la figura 2.9 es un esquema de los componentes de la fuente y en la figura 2.10 se presenta una fotografía de ella. El cuerpo de la fuente (2) está hecho de nitruro de boro, el cual es un material que posee un bajo coeficiente de expansión térmica, además es un excelente aislante eléctrico y puede resistir altas temperaturas hasta del orden de los 3 000 °C, pero debido a su estructura molecular presenta la desventaja de ser poco resistente a esfuerzos mecánicos, por lo que debe manejarse con cuidado. En el experimento que se describe en este trabajo, se inyectó una mezcla de gases, hidrógeno molecular (H₂) y argón (Ar), al interior de la fuente a través del tubo marcado con el número (1).

La manera como funciona esta fuente es la siguiente: al circular una corriente de 16 A por el filamento de tungsteno (3), éste se pone incandescente y emite una gran cantidad de electrones (emisión termoiónica). Al aplicar una diferencia de potencial entre el ánodo (4) (por medio del conector (6)) y el filamento (cátodo), los electrones emitidos adquieren la suficiente energía cinética para ionizar a las moléculas de H_2 y a los átomos de Ar, formando un plasma que se denomina descarga en arco. La corriente que se aplica al filamento se proporciona a través de los conectores marcados con el número (5). El ánodo tiene un orificio central de 1 mm de diámetro, por el cual salen los iones que se producen en la fuente, y se encuentra a una distancia aproximada de 3mm del filamento.

Entre el filamento y el ánodo hay una tapa (7) de nitruro de boro con un orificio y sobre ésta se apoya la placa del ánodo. La tapa (8) es del mismo material que la fuente y se fija a ésta por medio de un seguro (9). Un seguro más (10) hace presión entre (4) y (8) para sellar herméticamente la cámara de descarga. Los conectores de la cámara (5) y (6) se ensamblan a la brida (11) de acero inoxidable para aislar de atmósfera a vacío. La estructura de toda la fuente se coloca dentro de un casco hueco, por el cual circula agua, para mantener estable la temperatura de la fuente de iones durante la operación de la misma.



Figura 2.9. Esquema de la fuente de iones con las partes que la conforman.



Figura 2.10. Fuente de iones Colutron.

Los procesos físicos que ocurren al interior de la fuente de iones son complicados, pero nuestro interés fue básicamente obtener iones positivos de hidrógeno, los cuales se generaron por los siguientes procesos de colisión múltiple^[17]:

i) $H_2 + e \rightarrow 2H + e$,	$H + e \rightarrow H^+ + 2e$	(2.2)
ii) $H_2 + e \rightarrow H_2^+ + 2e$,	$H_2^+ + e \rightarrow H^+ + H + e$	
	$H_2^+ + e \rightarrow 2H^+ + 2e$	(2.3)
iii) $H_2 + e \rightarrow H_2^+ + 2e$,	$H_2^+ + e \rightarrow 2H$,	
	$H + e \rightarrow H^+ + 2e$	(2.4)

iv)
$$H_2 + e \rightarrow H_2^+ + 2e$$
, $H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$,
 $H_3^+ + e \rightarrow H^+ + 2H + e$ (2.5)

2.3 ACELERACIÓN, ENFOQUE Y SELECCIÓN DE IONES

Los iones positivos que salen por el orificio del ánodo son acelerados aplicando una diferencia de potencial entre la fuente y un extractor, que en el caso de nuestro sistema experimental, es el primer elemento de unas lentes electrostáticas, conocidas como lentes Einzel, las cuales se emplean para enfocar el haz de iones. Posteriormente, el haz enfocado entra a un filtro de velocidades, conocido como filtro de Wien, para seleccionar un ion en particular, según el tipo de estudio que se realice; para este trabajo se seleccionó al ion H_2^+ .

Para una mayor comprensión de la aceleración y del enfoque de los iones producidos en la fuente, se presenta a continuación una descripción simple del movimiento de partículas cargadas sujetas a la acción de un campo eléctrico.

2.3.1 MOVIMIENTO DE PARTÍCULAS CARGADAS BAJO LA ACCIÓN DE UN CAMPO ELÉCTRICO^{[18],[19]}

En las lentes electrostáticas, la distribución del campo no puede por lo general ser expresada en términos de una función exacta, tampoco es posible deducir matemáticamente las trayectorias de las partículas aún cuando el campo se haya mapeado experimentalmente. Por lo tanto, es necesario introducir la idea de refracción de un haz de partículas cargadas en la frontera de una superficie de potencial.

El espacio entre dos placas cargadas se representa por lo tanto como un conjunto de superficies equipotenciales cuya densidad de distribución puede ajustarse según se requiera; en todos los puntos de estas superficies las líneas de fuerza estarán en ángulos rectos con respecto a ellas. El problema entonces es encontrar la trayectoria seguida a través de este sistema por un electrón de velocidad dada y dirección inicial dada. La desviación sufrida en cada superficie equipotencial sucesiva se evalúa y se hace un mapeo punto a punto sobre la suposición de propagación rectilínea entre ellas; la precisión se incrementa con el grado de subdivisión del campo.

Consideremos un electrón de velocidad v_0 que se aproxima a una superficie equipotencial especificada por potenciales constantes V₀ y V₁ sobre cada lado de la superficie (Fig. 2.11).



Figura 2.11. Refracción de una partícula cargada a través de una superficie equipotencial.

Los ángulos de incidencia *i* y refracción *r* están definidos como en la óptica geométrica con respecto a la perpendicular en el punto de incidencia, *O*. La energía cinética del electrón debe ser igual a su energía potencial, suponiendo que es acelerado desde el reposo a través de una diferencia de potencial V_0 ; es decir,

$$eV_o = \frac{1}{2} m{v_o}^2$$
 (2.6)

de donde $v_0 = \sqrt{2eV_0/m}$. Al atravesar la superficie, la velocidad tangencial del electrón no cambiará, ya que no hay fuerza eléctrica en esta dirección, pero la componente normal cambiará desde $v_0 \cos i$ a un valor más grande $v_1 \cos r$ en la región de mayor potencial. (En la práctica, la transición no será abrupta como se supone aquí, sino que sucederá sobre una región finita de potencial variable con una aceleración finita). Por lo tanto,

$$v_{\rm o}\,\mathrm{sen}\,i = v_{\rm 1}\,\mathrm{sen}\,r,\tag{2.7}$$

sen *i* / sen *r* =
$$v_1$$
 / $v_o = \sqrt{V_1/V_o} = N_1 / N_o$ (2.8)

donde N_0 y N_1 pueden denominarse los índices de refracción de los espacios respectivos. Este cociente es constante para todos los electrones incidentes.

2.3.2 LENTES EINZEL

Cuando el haz sale de la fuente de iones se dispersa espacialmente por lo que se requiere de un sistema de lentes que enfoque o concentre las partículas cargadas. Este sistema se conoce como lentes Einzel.

Las lentes Einzel que se emplearon en el desarrollo de este trabajo tienen las siguientes características: se trata de tres secciones de cilindro hueco de igual diámetro construidas en acero inoxidable, que se encuentran alineadas en un mismo eje. La distancia focal depende de la separación entre los cilindros y del voltaje aplicado a éstos. En este caso, la separación entre los cilindros es fija, y por lo tanto la distancia focal sólo es función del voltaje aplicado a cada sección del cilindro. La figura 2.12 muestra una fotografía de las lentes.



Figura 2.12. Fotografía de las lentes Einzel al interior del cañón de iones

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

En las lentes del sistema experimental, el primer y el tercer electrodos se encuentran conectados a tierra, por lo que el enfoque del haz se obtuvo aplicando un potencial positivo al segundo electrodo, según la energía de aceleración de los iones. Más adelante se describe cómo se determinó la relación entre el voltaje de enfoque en las lentes, y la energía de aceleración de los iones.

2.3.3 FILTRO DE VELOCIDADES^{[20], [22]}

Este filtro de velocidades (también conocido como filtro de Wien) está compuesto de un electroimán, para generar un campo magnético, y un par de placas paralelas, para generar un campo eléctrico. Las placas paralelas se encuentran montadas entre los polos del electroimán para producir un campo eléctrico perpendicular al campo magnético. La figura 2.13 muestra una fotografía del filtro de velocidades.



Figura 2.13. Fotografía del filtro de velocidades.

Si una partícula de masa *m* y carga *q* entra en una región de campo eléctrico $\stackrel{?}{\mathbf{E}}$ y campo magnético $\stackrel{?}{\mathbf{B}}$, los cuales son perpendiculares entre sí y a la velocidad *v* de la partícula (ver figura 2.14), las ecuaciones de movimiento en el filtro son^[21]:

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = q\mathrm{B} \,\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} \tag{2.9}$$

$$m\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}t^2} = q \left(\mathrm{E} - \mathrm{B}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)$$
(2.10)

$$m \frac{\mathrm{d}^2 z}{\mathrm{d}t^2} = 0 \tag{2.11}$$

donde el eje *x* está en la dirección de la velocidad de la partícula, los ejes *y* y *z* están en las direcciones del campo electrostático $\stackrel{?}{\mathbf{E}}$ y del campo magnético $\stackrel{?}{\mathbf{B}}$ respectivamente, y *t* es el tiempo que comienza en cero cuando la partícula entra a la región de los campos en (*x*, *y*, *z*) = (0, 0, 0). Las soluciones a las ecuaciones anteriores son:

$$x = \frac{m(Bv - E)}{qB^2} \operatorname{sen}\left(\frac{q}{m}Bt\right) + t\frac{E}{B}$$
(2.12)

$$y = \frac{m(Bv - E)}{qB^2} \left[\cos\left(\frac{q}{m}Bt\right) - 1 \right]$$
(2.13)

$$z = 0 \tag{2.14}$$

las cuales para $(q/m)Bt \ll 1$ pueden aproximarse por:

$$x = vt \tag{2.15}$$

$$y = \frac{q(\mathbf{E} - \mathbf{B}v)}{2m}t^2 \tag{2.16}$$

$$z = 0 \tag{2.17}$$



Figura 2.14. El filtro de velocidades visto desde la entrada del haz. La velocidad v de la partícula está en dirección x, el campo eléctrico E en dirección y y el campo magnético B en la dirección z.

De las ecuaciones anteriores, se deduce que las partículas con velocidad inicial $v = v_0 = E/B$ pasan sin desviarse a través del filtro, mientras que las partículas con velocidad $v \neq v_0$ se desvían en el plano *xy*. Si las partículas de interés tienen masa m_0 , carga q_0 y energía cinética q_0V_a , donde V_a es la diferencia de potencial a través de la cual las partículas han sido aceleradas, entonces los campos en el filtro de Wien deben satisfacer la relación:

$$\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{B}} = \left(\frac{2q_0 V_{\mathrm{a}}}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(2.18)

para garantizar que las partículas de interés pasen sin desviarse a través del filtro.

2.4 BANDERA^[23]

Para la medición de la corriente de iones, se utilizó una lámina rectangular de cobre (8.5 x 1.5 cm), conocida como bandera, la cual se sujetó a un atravesador (ver figura 2.15) que se desplaza verticalmente en el interior de la línea del acelerador. Esto para situar a la bandera en medio de la trayectoria del haz de iones, y por lo tanto registrar la corriente producida desde el cañón. La bandera se encuentra conectada a un electrómetro analógico Keithley 610CR por medio de alambre de cobre que sale por una de las terminales de una brida.



Figura 2.15. Fotografía de la lámina de cobre (bandera) utilizada para medir la corriente de iones.

2.5 CÁMARA DE REACCIÓN Y TUBO DE TIEMPO DE VUELO

La cámara de reacción es la parte final del acelerador, y es el lugar donde interacciona el haz producido en la fuente de iones con el gas que se hace incidir por la parte superior de la cámara. Tiene dos niples, uno en la dirección del eje principal del acelerador, y otro a la derecha del acelerador; a este último se le denomina tubo de tiempo de vuelo, ya que en esta parte se envían y se detectan los productos de la colisión utilizando la técnica de tiempo de vuelo (TOF). En su interior tiene un dispositivo de seis discos paralelos que podemos denominar como sistema de interacción, y en el niple del eje principal se encuentran unas placas de deflexión, una caja de Faraday y un detector tipo

Channeltron de la marca Amptektron modelo 501. En el tubo de tiempo de vuelo se encuentra un detector Channeltron. La figura 2.16 es un esquema simplificado de la cámara de reacción.



Figura 2.16. Esquema del interior de la cámara de reacción (vista superior).

2.5.1 SISTEMA DE INTERACCIÓN^[23]

El sistema de interacción está constituido por seis discos de acero inoxidable con una apertura central y con las dimensiones indicadas en la figura 2.17; los discos se dispusieron de manera paralela por medio de tornillos y se encuentran aislados entre sí por medio de cerámicos y nylacero (figuras 2.18 y 2.19). La región entre el disco 1 (izquierda del acelerador) y el disco de 2 (derecha del acelerador) se conoce como la *región de interacción*, ya que en esa parte ocurren las colisiones entre el haz de iones generado en el cañón y las moléculas del gas inyectado en la parte superior de dicha región. La figura 2.20 muestra el tubo para la inyección del gas blanco (aire para el presente trabajo); en el extremo inferior del tubo se colocaron agujas hipodérmicas para que el flujo del gas que entra en la cámara de reacción sea laminar.



Figura 2.17. Discos de acero inoxidable para el sistema de interacción.



Figura 2.18. Esquema del sistema de interacción.



Figura 2.19. Fotografía del sistema de interacción.



Figura 2.20. Fotografía del tubo para la inyección del gas blanco al interior de la cámara de reacción.

Los iones positivos $(N^+, N_2^+, O^+, O_2^+, NO^+, entre otros)$ formados a partir de la colisión entre el haz principal (H_2^+) y el gas blanco (aire), son desviados hacia el tubo de tiempo de vuelo aplicando un voltaje de 700 V al disco 1. Después de salir de la región de interacción, los productos de esta colisión son mayormente acelerados y enfocados por un voltaje en el disco 5, mientras los demás están conectados a tierra; con el fin de que el campo eléctrico sea uniforme entre los discos, se colocaron mallas en las aperturas centrales de los mismos.

Finalmente, las partículas cargadas viajan por una región libre de aproximadamente 30 cm antes de ser detectadas por el Channeltron. La señal del detector se conectó a un osciloscopio HP para poder visualizar las partículas detectadas.

2.6 DETECTORES^[24]

Se utilizaron dos detectores del tipo multiplicadores de electrones (CEM, por sus siglas en Inglés) de dinodo continuo. La figura 2.21 muestra una fotografía de uno de ellos.

Los CEM son detectores muy eficientes tanto de iones positivos como de iones negativos, así como de electrones y fotones. Son tubos de vidrio enroscado con un diámetro interno de aproximadamente 1mm y un diámetro externo de 2, 3 o 6 mm construidos de un vidrio especial de plomo de silicio. Este vidrio exhibe las propiedades de conductividad eléctrica y emisión secundaria.

El funcionamiento de un CEM es el siguiente: cuando un ion incide en la cara de entrada se producen típicamente de 2 a 3 electrones secundarios (figura 2.22). La emisión secundaria se lleva a cabo dentro de los primeros 200 Å de la superficie. Estos electrones son acelerados a través del canal mediante un alto voltaje positivo. Los electrones golpean las paredes del canal produciendo electrones adicionales (y así sucesivamente) hasta que a la salida emerge un pulso de 10⁷ a 10⁸ electrones. Para iones positivos la entrada está generalmente a un voltaje negativo de 1200 a 3000 volts, y la salida está a tierra. Para la detección de iones negativos la entrada está a tierra o a un potencial positivo, y la salida está a un voltaje positivo alto. Debajo de esta capa se encuentra una capa conductora de varios cientos a miles de angstroms de espesor. La eficiencia de este detector depende de la energía de los iones incidentes. El resultado final es una cascada de electrones que son registrados como un pulso de corriente, típicamente del orden de milivolts. Este pulso es muy chico, por lo que se hace pasar por un preamplificador y después por un amplificador antes de que pueda ser registrado por el contador.



Figura 2.21. Fotografía de uno de los dos detectores CEM que se tienen en el taller de colisiones.



Figura 2.22. Vista del corte de un detector CEM en donde se observa la multiplicación de electrones.

CAPÍTULO 3. DESARROLLO EXPERIMENTAL

3.1 FUNCIONAMIENTO DEL CAÑÓN DE IONES

El funcionamiento del cañón de iones Colutron modelo G1 se puede describir básicamente en tres etapas:

- 1. Producción de vacío.
- 2. Generación del haz de iones positivos.
- 3. Aceleración, enfoque y selección de iones.

3.1.1 PRODUCCIÓN DE VACÍO

Para llevar a cabo cualquier experimento en el acelerador, se requiere en primer lugar obtener una presión de vacío óptima, la cual se ha logrado que sea del orden de 10^{-6} torr (ya que esto garantiza que el camino libre medio λ de los iones producidos en la fuente sea casi 18 veces mayor que la dimensión longitudinal del acelerador). Para ello, se procede de la siguiente manera:

- 1. Se encienden las dos bombas mecánicas y se abren las válvulas electroneumáticas correspondientes.
- Se observa la lectura inicial en el medidor termopar (la cual es mayor a 1000 militorr) y se espera a que la presión disminuya hasta un valor mínimo, el cual se encuentra entre 18 y 23 militorr.
- 3. Se encienden entonces las dos bombas turbomoleculares y se espera a que lleguen a su máxima velocidad de funcionamiento (56,000 rpm).
- 4. Se enciende el medidor *ion gauge*, y se espera a que la lectura sea del orden de 10⁻⁶ torr, lo cual puede tomar alrededor de una hora y media si el interior del acelerador no está muy sucio.

3.1.2 GENERACIÓN DEL HAZ DE IONES POSITIVOS

Después de que se ha alcanzado la presión deseada, se continúa con la generación de iones positivos al interior de la fuente. Los pasos a seguir son:

- 1. Se enciende el refrigerador para que recircule el agua por el cilindro que contiene a la fuente de iones, con el fin de evitar un sobrecalentamiento que dañe a la misma.
- 2. Se enciende la fuente del filamento, y se aumenta gradualmente el voltaje al filamento hasta un valor máximo de 16 V (lo cual produce una corriente máxima de 20 A), mientras se observa la presión en el cañón de iones. En cada aumento del voltaje, la presión de vacío disminuye (por la presencia de impurezas desprendidas por el filamento), por lo que es necesario esperar unos minutos para que esta presión aumente hasta el valor deseado antes de continuar variando el voltaje.
- 3. Se enciende la fuente del ánodo, y se aplica al mismo un voltaje hasta un valor máximo de 150V, y lentamente se permite la entrada del gas (o mezcla de gases) al interior de la fuente de iones hasta que se produce una descarga en arco. La corriente en el ánodo no debe exceder los 0.4 A.

3.1.3 ACELERACIÓN, ENFOQUE Y SELECCIÓN DE IONES

Una vez que la descarga en arco es continua y estable, es necesario acelerar y enfocar los iones que se extraen de la fuente, ya que éstos salen en todas direcciones. Por último, se selecciona un ion en particular que se usa como partícula incidente (proyectil). Los pasos a seguir son:

- 1. Se coloca la bandera en la posición donde pueda incidir el haz, y se enciende el electrómetro.
- 2. Se encienden las fuentes de aceleración, de enfoque, de las placas de deflexión en el codo de 10°, de las placas paralelas en el filtro de velocidades y del electroimán. Para cada valor seleccionado del voltaje de aceleración, se ajustan los valores del voltaje de enfoque y del voltaje de deflexión en el codo de 10° hasta que se observa una intensidad máxima del haz de iones en el electrómetro.
- 3. Se selecciona un valor particular para el voltaje de las placas paralelas en el filtro de velocidades, y se varía la corriente en el imán para identificar los valores máximos en la intensidad del haz de iones. En principio, el primer máximo debe corresponder al ion H⁺, el segundo máximo al ion H₂⁺ y el tercer máximo al ion H₃⁺.

3.2 DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS OPERACIONALES DEL CAÑÓN DE IONES

Los parámetros operacionales son las diferentes cantidades físicas cuyos valores requieren ajustarse en el sistema experimental, para optimizar la producción, la aceleración, el enfoque y la selección de iones. Éstos son:

- 1. Corriente en el filamento $i_{\rm f}$
- 2. Voltaje en el ánodo $V_{\text{ánodo}}$
- 3. Presión del gas en el interior de la fuente de iones P_{gas}
- 4. Voltaje de enfoque en las lentes Einzel $V_{\rm e}$
- 5. Voltaje de deflexión en las placas paralelas del codo de $10^{\circ} V_{d}$
- 6. Corriente en el imán del filtro de velocidades i_m

Las diversas pruebas realizadas en el laboratorio permitieron determinar experimentalmente estos parámetros, lo cual consistió en lo siguiente:

- 1. Encontrar los valores de la corriente en el filamento i_f y del voltaje en el ánodo V_{anodo} , así como la presión del gas P_{gas} (o de la mezcla de gases) en el interior de la fuente de iones que garantizaran una descarga en arco estable.
- 2. Encontrar la relación entre el voltaje de enfoque en las lentes Einzel V_e y el voltaje de aceleración V_a . Los valores seleccionados para el voltaje de enfoque, fueron aquellos para los cuales la intensidad *i* del haz generado fue máxima.
- 3. Encontrar la relación entre el voltaje de deflexión V_d en las placas del codo de 10° y el voltaje de aceleración V_a para corregir la dirección del haz.
- 4. Encontrar los valores de la corriente en el imán imagentaria que permitieran identificar máximos en la intensidad del haz. Estos máximos correspondían a los diferentes iones producidos en la fuente, lo que permitió calcular sus masas, en particular la del ion H₂⁺.

La gran cantidad de información obtenida en la realización de estas pruebas se registró en tablas (ver apéndice A); se utilizaron los valores promedio de las diferentes cantidades medidas, para encontrar los parámetros operacionales especificados en el inicio de este apartado.

3.3 DETECCIÓN DE LOS FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN DE H₂⁺ EN AIRE

Para garantizar que los fragmentos de la colisión formados en la región de interacción lleguen al detector, es necesario conocer los valores del voltaje que deben aplicarse a cada disco en el sistema de interacción. Como una primera prueba, se decidió aplicar voltaje solamente a los discos 1 y 5, mientras que los restantes se conectaron a tierra. La idea fue utilizar el disco 1 para acelerar los fragmentos hacia el detector, y el disco 5 como una lente de enfoque para optimizar el número de fragmentos detectados. Para ello, se procedió de la siguiente manera:

- Se aplicó al disco 1 un voltaje de 700 V, y se seleccionaron los valores de 0, 100, 200, 300, 400 y 500 V para el voltaje en el disco 5
- Para cada valor seleccionado del voltaje en el disco 5, se registraron en el osciloscopio cinco espectros en intervalos de 2 minutos cada uno.
- 3. Se contaron los pulsos observados en cada espectro y se obtuvo el promedio del número de pulsos para cada valor del voltaje en el disco 5.

Lo anterior se realizó en el intervalo de 3 a 7 kV del voltaje de aceleración, por lo que el número total de espectros obtenidos fue de 150.

3.4 DATOS EXPERIMENTALES^[23]

Se realizaron diferentes pruebas para la determinación de los parámetros operacionales y para la detección de fragmentos en el tubo de tiempo de vuelo. En cada una de estas pruebas se procedió de la siguiente manera: en primer lugar, se generó el haz de iones; después, para cada valor del voltaje de aceleración (entre 3 y 7 keV), se ajustó el voltaje de enfoque, el voltaje de deflexión en las placas del codo de 10° y la corriente en el electroimán del filtro de velocidades, hasta encontrar el primer y segundo máximos en la intensidad del haz generado, mismos que se visualizaron en la carátula del electrómetro (para este trabajo se seleccionó el ion H_2^+ , correspondiente al segundo máximo). Para la detección de los fragmentos de la colisión, se permitió además la entrada de aire al interior de la cámara de reacción, y se aplicó un voltaje de 700 V al disco 1 para acelerar los fragmentos hacia el detector. Se grabaron en un osciloscopio los espectros obtenidos para los diferentes valores del voltaje de enfoque en el disco 5.

3.4.1 DATOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LA MEZCLA DE H_2^+ Y A_r EN LA FUENTE DE IONES

En las tablas 3. 1 – 3.5 se observa la intensidad *i* del haz de iones H_2^+ en función de las presiones para H_2 y Ar al interior de la fuente de iones. Se inyectó inicialmente H_2 hasta la marca de 60, 70, 80, 90 y 100 militorr, para posteriormente inyectar Ar en intervalos de 10 militorr hasta que la descarga se mantuviera estable, y fuera posible la lectura de la intensidad del haz en el electrómetro. A cada valor considerado de la presión se le restaron 23 militorr, ya que fue el valor mínimo que registró la aguja en el medidor termopar. (ver 2.1.2)

	$P_{H2} \pm 1$ (militorr)				
$P_{Ar} \pm 1$ (militorr)	37	47	57	67	77
0	1.2 x 10⁻⁰ A	1.5 x 10⁻⁰ A	1.6 x 10⁻⁰ A	1.8 x 10⁻⁰ A	1.9 x 10⁻⁰ A
10	1.5 x 10⁻⁰ A	1.7 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10 ⁻⁹ A	2.2 x 10⁻⁰ A	2.3 x 10⁻⁰ A
20	1.9 x 10⁻⁰ A	2.1 x 10⁻⁰ A	2.3 x 10⁻⁰ A	2.5 x 10⁻⁰ A	2.5 x 10⁻⁰ A
30	2.9 x 10⁻ ⁹ A	2.7 x 10⁻⁰ A	3.1 x 10⁻⁰ A	2.8 x 10⁻⁰ A	3.0 x 10⁻⁰ A
40	1.1 x 10⁻ଃ A	2.4 x 10⁻ ⁸ A	7.5 x 10⁻⁰ A	4.7 x 10⁻⁰ A	5.0 x 10⁻⁰ A
50				1.4 x 10⁻ ⁸ A	2.2 x 10⁻ ⁸ A

Tabla 3.1. Intensidad *i* del haz de iones H_2^+ en función de las presiones de H_2 y Ar al interior de la fuente de iones, para un voltaje de aceleración de 2.94 kV.

	$P_{H2} \pm 1$ (militorr)				
$P_{Ar} \pm 1$ (militorr)	37	47	57	67	77
0	1.2 x 10⁻⁰ A	1.5 x 10⁻⁰ A	1.7 x 10⁻⁰ A	2.2 x 10⁻ ⁹ A	2.4 x 10⁻⁰ A
10	1.4 x 10⁻⁰ A	1.6 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10⁻⁰ A	2.5 x 10⁻⁰ A	2.7 x 10⁻⁰ A
20	1.6 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10⁻⁰ A	2.4 x 10⁻⁰ A	2.8 x 10⁻ ⁹ A	3.0 x 10⁻⁰ A
30	2.4 x 10⁻⁰ A	2.7 x 10⁻⁰ A	3.0 x 10⁻⁰ A	3.5 x 10⁻⁰ A	3.6 x 10⁻⁰ A
40	2.9 x 10⁻ ⁸ A	3.7 x 10⁻ ⁸ A	4.6 x 10⁻ ⁸ A	5.2 x 10⁻ ⁹ A	7.6 x 10 ⁻⁹ A
50				4.4 x 10⁻⁰ A	

Tabla 3.2. Intensidad *i* del haz de iones H_2^+ en función de las presiones de H_2 y Ar al interior de la fuente de iones, para un voltaje de aceleración de 3.94 kV.

	P _{H2} ± 1 (militorr)				
$P_{Ar} \pm 1$ (militorr)	37	47	57	67	77
0	1.1 x 10⁻⁰ A	1.5 x 10⁻⁰ A	1.7 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10⁻⁰ A	2.2 x 10⁻⁰ A
10	1.3 x 10⁻⁰ A	1.7 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10⁻⁰ A	2.2 x 10⁻⁰ A	2.5 x 10⁻⁰ A
20	1.6 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10⁻⁰ A	2.4 x 10⁻⁰ A	2.5 x 10⁻⁰ A	2.8 x 10⁻⁰ A
30	2.1 x 10⁻⁰ A	2.6 x 10⁻⁰ A	2.9 x 10⁻⁰ A	2.9 x 10⁻ ⁹ A	3.2 x 10⁻⁰ A
40	4.5 x 10⁻ ⁸ A	1.2 x 10⁻ ⁸ A	5.6 x 10⁻ ⁸ A	4.6 x 10⁻⁰ A	4.6 x 10 ⁻⁹ A

Tabla 3.3. Intensidad *i* del haz de iones H_2^+ en función de las presiones de H_2 y Ar al interior de la fuente de iones, para un voltaje de aceleración de 4.94 kV.

	P _{H2} ± 1 (militorr)				
P _{Ar} ± 1 (militorr)	37	47	57	67	77
0	1.1 x 10⁻⁰ A	1.3 x 10⁻⁰ A	1.5 x 10⁻⁰ A	1.8 x 10⁻⁰ A	2.1 x 10⁻⁰ A
10	1.3 x 10⁻⁰ A	1.5 x 10⁻⁰ A	1.9 x 10⁻⁰ A	2.1 x 10⁻⁰ A	2.4 x 10⁻⁰ A
20	1.5 x 10⁻⁰ A	1.9 x 10⁻⁰ A	2.4 x 10⁻⁰ A	2.5 x 10⁻⁰ A	2.7 x 10⁻⁰ A
30	2.4 x 10⁻⁰ A	2.4 x 10⁻⁰ A	2.9 x 10⁻⁰ A	3.0 x 10⁻⁰ A	3.2 x 10⁻⁰ A
40	4.8 x 10⁻ ⁸ A	5.5 x 10⁻ ⁸ A	7.3 x 10⁻⁰ A	4.5 x 10⁻⁰ A	4.8 x 10⁻⁰ A
50				7.0 x 10⁻ ⁸ A	1.1 x 10⁻ ⁷ A

Tabla 3.4. Intensidad *i* del haz de iones H_2^+ en función de las presiones de H_2 y Ar al interior de la fuente de iones, para un voltaje de aceleración de 5.94 kV.

	$P_{H^2} \pm 1$ (militorr)				
$P_{Ar} \pm 1$ (militorr)	37	47	57	67	77
0	1.1 x 10⁻⁰ A	1.4 x 10⁻⁰ A	1.7 x 10⁻⁰ A	2.1 x 10⁻⁰ A	2.4 x 10⁻⁰ A
10	1.3 x 10⁻⁰ A	1.7 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10⁻⁰ A	2.4 x 10⁻⁰ A	2.5 x 10⁻⁰ A
20	1.5 x 10⁻⁰ A	2.0 x 10⁻⁰ A	2.3 x 10⁻⁰ A	2.6 x 10⁻⁰ A	2.9 x 10⁻⁰ A
30	2.0 x 10⁻⁰ A	2.6 x 10⁻⁰ A	2.8 x 10⁻⁰ A	3.3 x 10⁻⁰ A	3.4 x 10⁻⁰ A
40	5.1 x 10⁻ ⁸ A	5.2 x 10⁻⁰ A	4.1 x 10⁻⁰ A	5.3 x 10⁻⁰ A	9.0 x 10⁻⁰ A
50			6.0 x 10⁻ ⁸ A		

Tabla 3.5. Intensidad *i* del haz de iones H_2^+ en función de las presiones de H_2 y Ar al interior de la fuente de iones, para un voltaje de aceleración de 6.94 kV.

3.4.2 DATOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LAS LENTES EINZEL

Se establecieron las condiciones iniciales para la generación del haz de iones, en las cuales se fijó un valor para el voltaje de aceleración V_a y se varió el voltaje de enfoque V_e hasta alcanzar un máximo en la corriente, mismo que se observó en el electrómetro. Por lo tanto, el valor del voltaje de enfoque V_d que se reporta es aquel que optimiza la corriente *i* del haz de iones.

En la tabla 3.6 se presentan los valores promedio del voltaje de enfoque V_e en las lentes Einzel en función del voltaje de aceleración V_a para el haz de iones H_2^+ . (Los valores medidos para cada prueba se pueden consultar en el apéndiceA).

$V_{\rm a} \pm 0.5\%$ (V)	$V_{\rm e} \pm 0.5\%$ (V)
2920	2332
2930	2385
2940	2324
3430	2794
3440	2651
3920	3270
3930	3198
3940	3129
4430	3619
4440	3387
4920	3873
4930	3969
4940	3807
5430	4320
5440	4175
5920	4750
5930	4819
5940	4543
6430	5179
6440	4883
6920	5562
6930	5630
6940	5265

Tabla 3.6. Voltaje de enfoque	Ve en función
del voltaje de aceleración $V_{\rm a}$.	



Gráfica 3.1. Voltaje de enfoque $V_{\rm e}$ en función del voltaje de aceleración $V_{\rm a}$.

En la gráfica 3.1 se puede observar que el valor del voltaje de enfoque V_e aumenta linealmente con el voltaje de aceleración V_a . La relación entre estos dos parámetros se establece en el siguiente capítulo.

3.4.3 DATOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE LAS PLACAS DE DEFLEXIÓN EN EL CODO DE 10°

Una vez establecidas las condiciones iniciales para la generación del haz, se fijó un voltaje de aceleración V_a y se varió el voltaje de enfoque V_e hasta alcanzar un máximo en la corriente, a partir del cual comenzó a variarse el voltaje de deflexión V_d en las placas paralelas del codo de 10° hasta obtener una corriente *i* máxima. Por lo tanto, el valor del voltaje de deflexión V_d que se reporta es el que optimiza la corriente *i* del haz de iones, la cual se registró en el electrómetro.

En la tabla 3.7 se presentan los valores promedio del voltaje de deflexión V_d en el codo de 10° en función del voltaje de aceleración V_a para el haz de iones H_2^+ . (Los valores medidos para cada prueba se pueden consultar en el apéndice A).

$V_{\rm a} \pm 0.5\%$ (V)	$V_{\rm d} \pm 1.25 ({\rm V})$
2940	340.0
3440	370.0
3940	457.8
4440	492.5
4940	567.0
5440	624.8
5940	662.5
6440	742.3
6940	774.5

Tabla 3.7. Voltaje de deflexión $V_{\rm d}$ en función del voltaje de aceleración $V_{\rm a}$.



Gráfica 3.2. Voltaje de deflexión $V_{\rm d}$ en las placas del codo de 10° en función del voltaje de aceleración $V_{\rm a}$.

En la gráfica 3.2 se puede observar que el valor del voltaje de deflexión V_d aumenta linealmente con el voltaje de aceleración V_a . La relación entre estos dos parámetros se establece en el siguiente capítulo

3.4.4 DATOS DE LA DETECCIÓN DE LOS FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN DE H_2^+ EN AIRE

Después de generar el haz de iones de H_2^+ , se procedió a realizar las colisiones con moléculas de aire dentro de la cámara de reacción, con el fin de obtener las primeras señales en el osciloscopio de los fragmentos detectados. El objetivo de esto fue, por un lado, saber si los productos de la colisión llegaban al detector, y por el otro, determinar si la configuración elegida para la realización de las primeras pruebas optimizaba la detección de los fragmentos de la colisión. Esta configuración consistió en fijar un voltaje $V_1 = 700$ V para el disco 1 del sistema de interacción, y variar seis valores del voltaje en el disco 5 del mismo sistema, esto es $V_5 = 0$, 100, 200, 300, 400 y 500 V.

Se realizaron cinco conteos de los pulsos registrados para cada valor del voltaje V_5 , en intervalos de dos minutos, para cada uno de los valores del voltaje de aceleración del haz principal, lo cual hizo un total de 150 conteos. Se calculó el número promedio de los pulsos observados en las señales registradas por el osciloscopio, para estudiar la relación entre el número de pulsos detectados y el voltaje V_5 del sistema de interacción.

3.4.4.1 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 2.94$ kV

Una vez generado el haz principal, se establecieron las condiciones experimentales al interior de la cámara de reacción para la colisión entre los iones de H_2^+ y las moléculas de aire, las cuales fueron:

 $P_{\text{aire}} = 9.7 \text{ x } 10^{-5} \text{ torr}$ $V_1 = 700 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 1)}$ $V_5 = 0 - 500 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 5)}$ $V_{\text{detector}} = -2800 \text{ V}$ $T_{\text{conteo}} = 2 \text{ min}$

Se realizó el registro de los pulsos con un osciloscopio, en el cual se observaron espectros de voltaje contra tiempo. Cada vez que se realizaba un conteo, se obtenían espectros de la misma naturaleza. Por razones de espacio, sólo se muestra una imagen de dichos espectros, la cual corresponde a una valor de voltaje $V_5 = 100$ V y un voltaje de aceleración $V_a = 2.94$ kV.



Figura 3.1. Imagen obtenida del osciloscopio para un voltaje en el disco 1 $V_1 = 700$ V, y un voltaje en el disco 5 $V_5 = 100$ V. El voltaje de aceleración fue $V_a = 2.94$ kV.

En la tabla 3.8 se registra el número promedio de pulsos observados para cada valor de voltaje en el disco 5, siendo constante el voltaje en el disco 1 con un valor de 700 V.

$V_5 \pm 1 ({ m V})$	No. de pulsos
0	16
100	7
200	6
300	3
400	2
500	2
$V_{\rm a} = 2940 \pm 0.5\%$ (V)	

Tabla 3.8. Número promedio de pulsos observados para diferentes valores del voltaje en el disco 5.



Gráfica 3.3. Número de pulsos en función del voltaje V_5 en el disco 5 para un voltaje de aceleración de 2.94 kV.

Se puede observar que el número de pulsos decrece con el aumento del voltaje V_5 , y que a partir de cierto valor (mayor a 500V) la detección de los fragmentos de la colisión será nula. Esto parece indicar que esta configuración no optimizó la detección de los fragmentos deseados. La razón de este comportamiento se discute en el capítulo siguiente.

3.4.4.2 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 3.94$ kV

Una vez generado el haz principal, se establecieron las condiciones experimentales al interior de la cámara de reacción para la colisión entre los iones de H_2^+ y las moléculas de aire, las cuales fueron:

 $P_{\text{aire}} = 9.7 \text{ x } 10^{-5} \text{ torr}$ $V_1 = 700 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 1)}$ $V_5 = 0 - 500 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 5)}$ $V_{\text{detector}} = -2800 \text{ V}$ $T_{\text{conteo}} = 2 \text{ min}$

Se realizó el registro de los pulsos con un osciloscopio, en el cual se observaron espectros de voltaje contra tiempo. Cada vez que se realizaba un conteo, se obtenían espectros de la misma naturaleza. Por razones de espacio, sólo se muestra una imagen de dichos espectros, la cual corresponde a una valor de voltaje $V_5 = 100$ V y un voltaje de aceleración $V_a = 3.94$ kV.



Figura 3.2. Imagen obtenida del osciloscopio para un voltaje en el disco 1 $V_1 = 700$ V, y un voltaje en el disco 5 $V_5 = 100$ V. El voltaje de aceleración fue $V_a = 3.94$ kV.

En la tabla 3.9 se registra el número promedio de pulsos observados para cada valor de voltaje en el disco 5, siendo constante el voltaje en el disco 1 con un valor de 700 V.

$V_5 \pm 1 (V)$	No. de pulsos
0	15
100	12
200	11
300	8
400	5
500	4
$V_{\rm a} = 3940 \pm 0.5\%$ (V)	

Tabla 3.9. Número promedio de pulsos observados para diferentes valores del voltaje en el disco 5.



Gráfica 3.4. Número de pulsos en función del voltaje V_5 en el disco 5 para un voltaje de aceleración de 3.94 kV.

Para esta energía se observa el mismo comportamiento anterior, que a mayor voltaje V_5 disminuye el número de pulsos detectados, y que para un cierto valor del voltaje V_5 (mayor a 500 V) la detección de los fragmentos disminuye a cero.

3.4.4.3 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 4.94$ kV

Una vez generado el haz principal, se establecieron las condiciones experimentales al interior de la cámara de reacción para la colisión entre los iones de H_2^+ y las moléculas de aire, las cuales fueron:

 $P_{\text{aire}} = 9.7 \text{ x } 10^{-5} \text{ torr}$ $V_1 = 700 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 1)}$ $V_5 = 0 - 500 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 5)}$ $V_{\text{detector}} = -2800 \text{ V}$ $T_{\text{conteo}} = 2 \text{ min}$

Se realizó el registro de los pulsos con un osciloscopio, en el cual se observaron espectros de voltaje contra tiempo. Cada vez que se realizaba un conteo, se obtenían espectros de la misma naturaleza. Por razones de espacio, sólo se muestra una imagen de dichos espectros, la cual corresponde a una valor de voltaje $V_5 = 100$ V y un voltaje de aceleración $V_a = 4.94$ kV.



Figura 5.5. Imagen obtenida dei oscioscopio para un voltaje en el disco i $V_1 = 700 \text{ V}$, y un voltaje en el disco 5 $V_5 = 100 \text{ V}$. El voltaje de aceleración fue $V_a = 4.94 \text{ kV}$.

En la tabla 3.10 se registra el número promedio de pulsos observados para cada valor de voltaje en el disco 5, siendo constante el voltaje en el disco 1 con un valor de 700 V.

$V_5 \pm 1 ({ m V})$	No. de pulsos
0	9
100	8
200	6
300	5
400	7
500	5
$V_a = 4940 \pm 0.5\%$ (V)	

Tabla 3.10. Número promedio de pulsos observados para diferentes valores del voltaje en el disco 5.



Gráfica 3.5. Número de pulsos en función del voltaje V_5 en el disco 5 para un voltaje de aceleración de 4.94 kV.

De nueva cuenta, se observa de esta gráfica que el número de pulsos decae con el voltaje V_5 , y aunque para el valor $V_5 = 400$ V se tiene un número de pulsos mayor que para el voltaje $V_5 = 300$ V, para el siguiente valor $V_5 = 500$ V vuelve a disminuir el número de pulsos.

3.4.4.4 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 5.94$ kV

Una vez generado el haz principal, se establecieron las condiciones experimentales al interior de la cámara de reacción para la colisión entre los iones de H_2^+ y las moléculas de aire, las cuales fueron:

 $P_{\text{aire}} = 9.7 \text{ x } 10^{-5} \text{ torr}$ $V_1 = 700 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 1)}$ $V_5 = 0 - 500 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 5)}$ $V_{\text{detector}} = -2800 \text{ V}$ $T_{\text{conteo}} = 2 \text{ min}$

Se realizó el registro de los pulsos con un osciloscopio, en el cual se observaron espectros de voltaje contra tiempo. Cada vez que se realizaba un conteo, se obtenían espectros de la misma naturaleza. Por razones de espacio, sólo se muestra una imagen de dichos espectros, la cual corresponde a una valor de voltaje $V_5 = 100$ V y un voltaje de aceleración $V_a = 5.94$ kV.



Figura 3.4. Imagen obtenida del osciloscopio para un voltaje en el disco 1 $V_1 = 700$ V, y un voltaje en el disco 5 $V_5 = 100$ V. El voltaje de aceleración fue $V_a = 5.94$ kV.

En la tabla 3.11 se registra el número promedio de pulsos observados para cada valor de voltaje en el disco 5, siendo constante el voltaje en el disco 1 con un valor de 700 V.

$V_5 \pm 1 ({ m V})$	No. de pulsos
0	16
100	17
200	18
300	18
400	20
500	15
$V_{\rm a} = 5940 \pm 0.5\%$ (V)	

Tabla 3.11. Número promedio de pulsos observados para diferentes valores del voltaje en el disco 5.



Gráfica 3.6. Número de pulsos en función del voltaje V_5 en el disco 5 para un voltaje de aceleración de 5.94 kV.

A diferencia de lo que sucedió para los voltajes de aceleración de 2.94, 3.94 y 4.94 kV, para este voltaje no se observa un decaimiento del número de pulsos conforme aumenta V_5 , pero tampoco es visible un aumento considerable en la detección de los pulsos conforme al valor de V_5 . Puede ser posible que las condiciones al interior de la cámara de reacción se hayan modificado, a pesar de estar monitoreando que los parámetros involucrados tanto en la generación del haz como en la colisión se mantuvieran constantes.

3.4.4.5 DETECCIÓN DE FRAGMENTOS PARA $V_a = 6.94$ kV

Una vez generado el haz principal, se establecieron las condiciones experimentales al interior de la cámara de reacción para la colisión entre los iones de H_2^+ y las moléculas de aire, las cuales fueron:

 $P_{\text{aire}} = 9.7 \text{ x } 10^{-5} \text{ torr}$ $V_1 = 700 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 1)}$ $V_5 = 0 - 500 \text{ V} \text{ (voltaje en el disco 5)}$ $V_{\text{detector}} = -2800 \text{ V}$ $T_{\text{conteo}} = 2 \text{ min}$ Se realizó el registro de los pulsos con un osciloscopio, en el cual se observaron espectros de voltaje contra tiempo. Cada vez que se realizaba un conteo, se obtenían espectros de la misma naturaleza. Por razones de espacio, sólo se muestra una imagen de dichos espectros, la cual corresponde a una valor de voltaje $V_5 = 100$ V y un voltaje de aceleración $V_a = 6.94$ kV.



Figura 3.5. Imagen obtenida del osciloscopio para un voltaje en el disco 1 $V_1 = 700$ V, y un voltaje en el disco 5 $V_5 = 100$ V. El voltaje de aceleración fue $V_a = 6.94$ kV.

En la tabla 3.12 se registra el número promedio de pulsos observados para cada valor de voltaje en el disco 5, siendo constante el voltaje en el disco 1 con un valor de 700 V.

$V_5 \pm 1 ({ m V})$	No. de pulsos
0	7
100	5
200	4
300	4
400	6
500	4
$V = 6940 \pm 0.5\%$ (V)	

Tabla 3.12. Número promedio de pulsos observados para diferentes valores del voltaje en el disco 5


Gráfica 3.7. Número de pulsos en función del voltaje V_5 en el disco 5 para un voltaje de aceleración de 6.94 kV.

En esta gráfica se observa un comportamiento similar a lo que sucedió para el voltaje de aceleración $V_a = 4.94 \text{ kV}$, ya que después de $V_5 = 300 \text{ V}$ hay un aumento en el número de pulsos en $V_5 = 400 \text{ V}$ para disminuir nuevamente en $V_5 = 500 \text{ V}$.

CAPÍTULO 4. RESULTADOS

En este capítulo, se reportan los resultados obtenidos para conocer los valores de los parámetros operacionales del cañón de iones, así como los resultados para la detección de los fragmentos de la colisión de H_2^+ en aire en el tubo de tiempo de vuelo. En primer lugar, se presentan los valores de la corriente en el filamento, del voltaje en el ánodo y de la presión en la fuente de iones que permiten obtener una descarga en arco continua y estable. En segundo lugar, se presentan las relaciones de optimización para las lentes Einzel y para las placas de deflexión en el codo de 10°. Después, se muestran los valores calculados para la masa del ion H_2^+ a diferentes voltajes de aceleración y se comparan con el valor reportado en la literatura.

Por último, se discuten los resultados en la detección de fragmentos para los diferentes valores del voltaje V_5 en el sistema de interacción (con un valor fijo V₁ = 700 V) en el intervalo de 2.94 a 6.94 kV del voltaje de aceleración.

4.1 VALORES ÓPTIMOS PARA LOS COMPONENTES DE LA FUENTE DE IONES

De todas las pruebas realizadas, se puede establecer que para el buen funcionamiento de la fuente de iones es conveniente que:

- 1. el cuerpo de la fuente y el ánodo estén limpios,
- 2. la separación entre el filamento y el ánodo sea menor 4 mm,
- 3. recircule el agua de manera continua a través del cilindro de enfriamiento,
- 4. tener una presión al interior del cañón adecuada (del orden de 10^{-6} torr)

Por otra parte, se encontró que los siguientes valores permiten obtener una descarga en arco continua y estable:

- 1. Filamento: $15 \pm 3\%$ A, $12 \pm 3\%$ V.
- 2. Ánodo: $60 80 \pm 3\%$ V.
- Presión de gas en el interior de la fuente de iones: en el intervalo de 37 a 97 militorr. Más allá de este intervalo, el incremento de las presiones no reflejó necesariamente un aumento en la señal de los iones producidos. Se puede trabajar con H₂ a 50 militorr y Ar a 40 militorr.
- 4. La corriente de descarga es por lo general de 0.25 A.
- 5. La intensidad del haz generado es por lo general del orden de 10^{-9} A.

4.2 RELACIÓN DE OPTIMIZACIÓN PARA LAS LENTES EINZEL

En la gráfica 4.1 se observa la recta ajustada a los puntos experimentales para encontrar la relación entre el voltaje de enfoque V_e y el voltaje de aceleración V_a .



Gráfica 4.1. Recta ajustada para los valores del voltaje de enfoque V_e en función del voltaje de aceleración V_a .

La relación entre el voltaje de enfoque V_e y el voltaje de aceleración V_a está dada por la expresión:

$$V_{\rm e} = (0.7751 \pm 0.0033) V_{\rm a} + (84.699 \pm 21.141) \,\rm V \tag{4.1}$$

Lo anterior significa que por cada kV del voltaje de aceleración debemos aplicar un voltaje de enfoque de 775.1 \pm 3.3 V.

4.3 RELACIÓN DE OPTIMIZACIÓN PARA LAS PLACAS DE DEFLEXIÓN EN EL CODO DE 10°

En la gráfica 4.2 se observa la recta ajustada a los puntos experimentales para encontrar la relación entre el voltaje de deflexión V_d en el codo de 10° y el voltaje de aceleración V_a .



Gráfica 4.2. Recta ajustada para los valores del voltaje de deflexión $V_{\rm d}$ en función del voltaje de aceleración $V_{\rm a}$.

La relación entre el voltaje de deflexión $V_{\rm d}$ y el voltaje de aceleración $V_{\rm a}$ está dada por la expresión:

$$V_{\rm d} = (0.1132 \pm 0.000365) V_{\rm a} - (0.2624 \pm 1.41) \,\rm V \tag{4.2}$$

Lo anterior significa que por cada kV del voltaje de aceleración debemos aplicar un voltaje de deflexión en las placas del codo de 10° de 113.2 ± 0.365 V.

4.4 CÁLCULO DEL VALOR DE LA MASA PARA EI ION H⁺₂

De la ecuación (2.18), la cual expresa la condición para que no exista desviación de las partículas a través del filtro, se despeja m_0 para obtener la masa de los iones seleccionados en el filtro,

$$m_0 = 2q_0 V_{\rm a} \left(\frac{\rm B}{\rm E}\right)^2 \tag{4.3}$$

que está en términos del campo eléctrico E y magnético B, los cuales no se midieron directamente de la electrónica asociada al sistema experimental, por lo que sus valores se obtuvieron a partir de información proporcionada por el manual del cañón de iones y por el valor experimental asignado a uno de los parámetros requeridos.

Se sabe que el campo magnético para una bobina de alambre está dado por:

$$\mathbf{B} = ki_{\rm m} \tag{4.4}$$

donde i_m es la corriente aplicada a la bobina, y *k* es la constante de proporcionalidad que depende del número de vueltas, de la constante de permeabilidad μ_o y de la geometría de la bobina. Dado que el fabricante no especifica las características de la bobina, el valor de la constante k se obtuvo a partir de las curvas experimentales tomadas del manual del cañón de iones Colutron, las cuales se muestran en la figura 4.1.



Figura 4.1. Campo magnético en función de la corriente según el fabricante (Colutron Co.)

De la figura 4.1, se observa que se requiere de una corriente de aproximadamente 3.6 A para producir un campo magnético de 1,100 Gauss, que es el valor máximo que se puede alcanzar en el modelo 600 (que forma parte del sistema experimental), según lo indica el fabricante. El valor de la constante k es 305.5 Gauss / A, por lo tanto se tiene:

$$B = (305.5 \text{ Gauss / A}) i_{\rm m}$$
(4.5)

El campo eléctrico entre un par de placas paralelas separadas una distancia L está dado por:

$$E = \frac{V_F}{L}$$
(4.6)

donde $V_{\rm F}$ es la diferencia de potencial entre las placas del filtro de velocidades. Para el modelo 600, el valor de *L* es 0.0178 m, por lo tanto se tiene:

$$E = \frac{V_{\rm F}}{0.0178\,\rm m} \tag{4.7}$$

Para todas las pruebas realizadas, se decidió aplicar un voltaje $V_F = 290$ V, por lo que el valor del campo eléctrico entre las placas del filtro tuvo el valor constante de:

$$E = 16 \ 292.13 \ V/m \tag{4.8}$$

Sustituyendo (4.5) y (4.8) en la ecuación (4.3), y realizando las operaciones necesarias, se obtiene una expresión simplificada para el cálculo de la masa, en términos de parámetros directamente medibles, la cual está dada por:

$$m_0 = (1.13 \times 10^{-30} V_a \dot{l}_m^2) \text{ kg}$$
(4.9)

En la tabla 4.1 se presentan los valores del voltaje de aceleración, del voltaje de enfoque, del voltaje de deflexión en el codo de 10° , de la corriente del imán para la cual se seleccionó al ion H_2^+ y del valor calculado de la masa utilizando la ecuación (4.9).

$V_{\rm a} \pm 0.5\%$ (V)	V _e ± 0.5% (V)	V _d ±1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)	$m_0 \pm \delta m_0$ (kg)
2920	2332	297.5	0.90	2.66 x 10 ⁻²⁷ ± 2.96 x 10 ⁻²⁹
2930	2385	287.5	0.93	$2.85 \times 10^{-27} \pm 3.07 \times 10^{-29}$
2940	2324	340.0	0.90	2.68 x 10 ⁻²⁷ ± 2.98 x 10 ⁻²⁹
3430	2794	330.0	0.84	2.72 x 10 ⁻²⁷ ± 3.24 x 10 ⁻²⁹
3440	2651	370.0	0.77	2.29 x 10 ⁻²⁷ ± 2.98 x 10 ⁻²⁹
3920	3270	312.5	0.79	$2.75 \times 10^{-27} \pm 3.48 \times 10^{-29}$
3930	3198	417.5	0.78	2.69 x 10 ⁻²⁷ ± 3.45 x 10 ⁻²⁹
3940	3129	457.8	0.75	2.49 x 10 ⁻²⁷ ± 3.32 x 10 ⁻²⁹
4430	3619	367.5	0.76	2.88 x 10 ⁻²⁷ ± 3.79 x 10 ⁻²⁹
4440	3387	492.5	0.69	$2.38 \times 10^{-27} \pm 3.45 \times 10^{-29}$
4920	3873	387.5	0.65	2.34 x 10 ⁻²⁷ ± 3.60 x 10 ⁻²⁹
4930	3969	407.5	0.68	2.56 x 10 ⁻²⁷ ± 3.77 x 10 ⁻²⁹
4940	3807	567.0	0.66	2.42 x 10 ⁻²⁷ ± 3.67 x 10 ⁻²⁹
5430	4320	525.0	0.67	$2.74 \times 10^{-27} \pm 4.09 \times 10^{-29}$
5440	4175	624.8	0.63	2.43 x 10 ⁻²⁷ ± 3.86 x 10 ⁻²⁹
5920	4750	570.0	0.64	2.73 x 10 ⁻²⁷ ± 4.26 x 10 ⁻²⁹
5930	4819	505.0	0.64	2.73 x 10 ⁻²⁷ ± 4.27 x 10 ⁻²⁹
5940	4543	662.5	0.58	$2.25 \times 10^{-27} \pm 3.88 \times 10^{-29}$
6430	5179	535.0	0.58	$2.43 \times 10^{-27} \pm 4.20 \times 10^{-29}$
6440	4883	742.3	0.57	$2.35 \times 10^{-27} \pm 4.13 \times 10^{-29}$
6920	5562	649.8	0.58	$2.62 \times 10^{-27} \pm 4.52 \times 10^{-29}$
6930	5630	557.5	0.57	2.53 x 10 ⁻²⁷ ± 444 x 10 ⁻²⁹
6940	5265	774.5	0.51	$2.03 \times 10^{-27} \pm 3.98 \times 10^{-29}$

Tabla 4.1. Se muestran los diferentes parámetros operacionales que se ajustaron para la identificación del segundo máximo (correspondiente al ion H_2^+), así como los valores de la masa calculada.

El valor promedio de la masa calculada es de 2.55 x 10^{-27} kg, el cual comparado con el valor reportado para el ion H₂⁺ que es de 3.346 x 10^{-27} , representa un 76.2% de precisión.

4.5 RESULTADOS DE LA DETECCIÓN DE FRAGMENTOS DE LA COLISIÓN DE H_2^+ EN AIRE

En la sección 3.4.4 se mostraron los datos sobre el número de fragmentos detectados en función del voltaje V_5 para cinco diferentes valores del voltaje de aceleración V_a . El valor del voltaje en el disco 1 fue siempre el mismo, $V_1 = 700$ V, mientras que los discos 2, 3, 4 y 6 se conectaron a tierra.

La tabla 4.2 resume estos datos, y la gráfica 4.3 nos permite observar que para los valores del voltaje de aceleración 2.94, 3.94, 4.94 y 6.94 kV existe un decaimiento del número de pulsos conforme aumenta el valor del voltaje V_5 . No obstante, este comportamiento no se observa para el voltaje de aceleración de 5.94 kV, lo cual puede deberse a cambios en las condiciones del experimento.

	V ₅ ± 1 (V)						
<i>V</i> a ± 0.005%							
(kV)	0	100	200	300	400	500	
2.94	16	7	6	3	2	2	
3.94	15	12	11	8	5	4	
4.94	9	8	6	5	7	5	
5.94	16	17	18	18	20	15	
6.94	7	5	4	4	6	4	

Tabla 4.2 Número de pulsos en función	n del voltaje	V_5 para diferentes	s voltajes de aceleración.
---------------------------------------	---------------	-----------------------	----------------------------



Gráfica 4.3. Número de pulsos en función del voltaje V_5 para cinco diferentes valores del voltaje de aceleración Va

Otro aspecto importante por mencionar es que por la forma en que se registraron estos datos, no es posible establecer una correspondencia entre los pulsos observados y los fragmentos de la colisión detectados. El osciloscopio sólo permite visualizar la señal de las partículas que llegan al detector, pero no se tiene mayor información sobre que iones corresponden a cada pulso, sobre sus intensidades ni tampoco sobre su tiempo de vuelo, ya que para ello se requeriría de una fuente pulsada y de una tarjeta multicanal con un software específico, para generar un conteo de los fragmentos detectados según su tiempo de vuelo.

Lo más que se puede decir es que, al parecer, la configuración elegida para aplicar al disco 1 un voltaje $V_1 = 700$ V y al disco 5 un voltaje V_5 entre 0 y 500 V, no es la que optimiza la llegada de los fragmentos de la colisión al detector, por lo que una posibilidad es crear diferentes simulaciones con el programa SIMION para encontrar una configuración óptima que pueda probarse en el laboratorio.

4.6 USO DEL PROGRAMA SIMION PARA SIMULAR EL TUBO DE TIEMPO DE VUELO

El programa *SIMION 7.0* es un programa de simulación de óptica de iones que modela problemas con arreglos de potencial electrostáticos y/o magnetostáticos en dos y tres dimensiones^[27]. Para los propósitos de este trabajo, se creó un arreglo de potencial electrostático como el que se describió en la sección 2.4, con el fin de encontrar los valores que deben aplicarse a los seis discos para optimizar la llegada de los fragmentos de la colisión al detector. En primer lugar, se realizó la simulación para las mismas condiciones en que se obtuvieron los espectros en el laboratorio, esto es, aplicando un voltaje de 700 V al disco 1 y un voltaje de 0, 100, 200, 300, 400 y 500 V al disco 5, con el fin de comparar con el experimento. Las figuras 4.2 - 4.7 muestran las trayectorias de 50 iones N_2^+ , los cuales se forman en la región entre el disco 1 y el disco 2, y son acelerados hacia la derecha hasta que algunos de ellos llegan al detector.



Figura 4.2. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 0$ V.



Figura 4.3. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 100$ V.



Figura 4.4. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 200$ V.



Figura 4.5. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 300$ V.



Figura 4.6. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 400$ V.



Figura 4.7. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 500$ V.

A diferencia de lo que se obtuvo experimentalmente, se puede observar que para $V_5 = 0$, 100, 200 y 300 V, aumenta el número de iones detectados, y que para $V_5 = 400$ y 500 V disminuye el número de los mismos. En la tabla 4.3 se indica el número de iones que llegan al área del detector (el diámetro del detector es de 10 mm aproximadamente) según el voltaje aplicado al disco 5.

V_5 (V)	No. de iones detectados
0	11
100	11
200	15
300	18
400	9
500	5

Tabla 4.3. Se indica el número de iones que llegan al detector (de un total de 50) para la simulación.

Los resultados de las simulaciones anteriores son los mismos si se consideran otros iones tales como N^+ , O_2^+ , O^+ y NO^+ , lo que nos indica que el disco 5 sólo tiene un efecto de enfoque, más no cambia la energía de los iones, los cuales llegaran al detector en diferentes tiempos según su masa.

Por lo tanto, como resultado de las simulaciones que se trabajaron, se propone aplicar al disco 1 un voltaje de 700 V, al disco 2 un voltaje de 300 V y al disco 4 un voltaje de 100 V. La diferencia de potencial entre el disco 1 y el disco 2 es de 400 V, suficiente para acelerar los fragmentos de la colisión hacia el detector, mientras que el disco 4 juega el papel de una lente de enfoque. Se utilizaron 50 iones (en este caso iones O_2^+), de los cuales 30 de ellos llegan al área del detector. Lo mismo sucedió para los iones de O^+ , N^+ , N_2^+ , y NO⁺. La figura 4.8 muestra la imagen de la simulación con la configuración propuesta.



Figura 4.8. Imagen de la simulación de los iones O_2^+ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V, en el disco 2 es de $V_2 = 300$ V y en el disco 4 es de $V_4 = 100$ V.

Sin embargo, en las condiciones experimentales del laboratorio, no se produce un solo tipo de ion, sino que son de diferente especie, por lo que se realizaron otras simulaciones en donde se consideraron los iones N^+ , N_2^+ , O^+ , O_2^+ y NO⁺ a la vez. En estas simulaciones se consideraron 50 iones (10 de cada especie) y sus posiciones se definieron de tal manera que uno se generó después de otro, situación que no corresponde a la que sucede dentro de la cámara de reacción, en donde las posiciones de donde comienzan a viajar los iones generados en el área de interacción (entre los discos 1 y 2) son aleatorias.

Las figuras 4.9 – 4.14 muestran las simulaciones descritas en el párrafo anterior para los seis diferentes valores del voltaje $V_{5.}$



Figura 4.9. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ , O_2^+ , N^+ , O^+ y NO⁺ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 0$ V.



Figura 4.10. Imagen de la simulación de los iones N₂⁺, O₂⁺, N⁺, O⁺ y NO⁺ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 100$ V.



Figura 4.11. Imagen de la simulación de los iones N₂⁺, O₂⁺, N⁺, O⁺ y NO⁺ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 200$ V.



Figura 4.12. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ , O_2^+ , N^+ , O^+ y NO⁺ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 300$ V.



Figura 4.13. Imagen de la simulación de los iones N_2^+ , O_2^+ , N^+ , O^+ y NO⁺ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 400$ V.



Figura 4.14. Imagen de la simulación de los iones N₂⁺, O₂⁺, N⁺, O⁺ y NO⁺ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V y en el disco 5 es de $V_5 = 500$ V.

De estas simulaciones se obtiene que el número de iones detectados aumenta hasta $V_5 = 300$ V, que en $V_5 = 400$ V disminuye, y que aumenta nuevamente en $V_5 = 500$ V, pero ahora el número de iones detectados (ver tabla 4.4) es menor con respecto a las simulaciones donde se consideró un solo tipo de ion (ver tabla 4.3).

V_5 (V)	No. de iones
	detectados
0	3
100	3
200	5
300	5
400	1
500	3

Tabla 4.4. Se indica el número de iones que llegan al detector (de un total de 50) para la simulación.

Se realizó otra simulación con la misma propuesta de aplicar al disco 1 un voltaje de 700 V, al disco 2 un voltaje de 300 V y al disco 4 un voltaje de 100 V, sólo que ahora considerando a los iones de N⁺, N_2^+ , O^+ , O_2^+ y NO⁺ a la vez. La figura 4.8 muestra la imagen de la simulación con esta configuración, en la cual aumenta el número de iones detectados a 9.



Figura 4.15. Imagen de la simulación de los iones N₂⁺, O₂⁺, N⁺, O⁺ y NO⁺ en el tubo de tiempo de vuelo, donde el voltaje en el disco 1 es de $V_1 = 700$ V, en el disco 2 es de V₂ = 300 V y en el disco 4 es de $V_4 = 100$ V.

Las diferencias entre los resultados obtenidos experimentalmente y las simulaciones con el programa *Simion*, pueden deberse a distintos factores, como por ejemplo, que el detector no se encuentre bien alineado con respecto a la trayectoria de los fragmentos de la colisión, lo que afecta el número de partículas registradas por el Channeltron.

CAPÍTULO 5. ANÁLISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

5.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

1. Se lograron producir haces de iones H_2^+ lo suficientemente estables para la realización de los experimentos planteados en este trabajo; se conocen ahora los valores que optimizan el funcionamiento de la fuente de iones.

2. Se encontró la relación entre el voltaje de enfoque V_e en las lentes Einzel y el voltaje de aceleración V_a de los iones H_2^+ , la cual establece que por cada kV del voltaje de aceleración se debe aplicar un voltaje de enfoque de 775 V.

3. Se encontró la relación entre el voltaje de deflexión V_d en las placas del codo de 10° y el voltaje de aceleración V_a de los iones H_2^+ , la cual establece que por cada kV del voltaje de aceleración se debe aplicar un voltaje de deflexión de 113 V.

4. Se lograron detectar fragmentos de la colisión de H_2^+ en aire. Sin embargo, no fue posible utilizar la técnica de tiempo de vuelo para identificar dichos fragmentos. Se requiere de mayor trabajo en el laboratorio para: i) crear haces pulsados en el sistema de interacción (de los iones producidos en la colisión), ii) encontrar la configuración en el sistema de interacción que optimice la llegada al detector de los fragmentos de la colisión y iii) obtener espectros de TOF utilizando una tarjeta multicanal y un software para tal propósito.

5. Se compararon las imágenes obtenidas en el osciloscopio para la actual configuración en el sistema de interacción, con las simulaciones realizada con el programa *SIMION*. En el primer caso, se encontró que el número de iones que llegan al detector disminuye conforme se aumenta el voltaje en el disco 5, mientras que en las simulaciones ocurre que para un voltaje de 300 V en el disco 5 se logra una mayor detección de fragmentos, ya sea que se haya considerado a los iones N⁺, N₂⁺, O⁺, O₂⁺ y NO⁺ por separado o a la vez.

6. Se propone una configuración para el sistema de interacción, en donde se utilicen los discos 1, 2 y 4 con voltajes de 700, 300 y 100 V, respectivamente, para detectar un mayor número de fragmentos que la configuración actual. Esta configuración lo es tanto para los iones considerados individualmente como en grupo.

5.2 PLANES FUTUROS DEL ACELERADOR

Con el fin de obtener espectros de tiempo de vuelo usando la tarjeta multicanal, se requiere trabajar en los siguientes aspectos:

- 1. Incrementar la corriente del haz de iones para aumentar el número de colisiones con el blanco, y por lo tanto, tener un mayor número de fragmentos viajando en el tubo de tiempo de vuelo.
- Optimizar el sistema de interacción, esto es, determinar los valores de los voltajes que deben aplicarse a los discos para que se puedan extraer y acelerar un gran número de fragmentos de la colisión.
- 3. Verificar la alineación del orificio del detector Channeltron para comprobar que no se pierden fragmentos de la colisión.

Una vez que se obtengan espectros, será necesario aprender a interpretar la información que proporcionan éstos, como lo es la identidad de cada fragmento y el número de fragmentos detectados de cada especie. Esto se hará para diferentes energías de impacto del haz de iones.

El siguiente paso será medir secciones totales, para conocer que procesos físicos y bajo qué condiciones son más probables. Lo anterior se realizaría para diferentes blancos.

APÉNDICE A. DATOS UTILIZADOS PARA LA OPTIMIZACIÓN DEL CAÑÓN DE IONES

En este apéndice se reportan los datos correspondientes a ocho pruebas^[23], realizadas en diferentes fechas, para determinar experimentalmente los parámetros operacionales del cañón de iones. Se indica el número de prueba, así como los valores medidos para el filamento, el ánodo, la presión de gas al interior de la fuente, el voltaje de aceleración, de enfoque, de deflexión, de las placas en el filtro de velocidades, la corriente en el imán y la intensidad del haz de iones generado.

A.1 PRUEBA 1

Filamento: $8 \pm 3\%$ A, $15 \pm 3\%$ V Ánodo: $80 \pm 3\%$ V, $0.1 \pm 3\%$ A Presión de gas: 100 ± 1 militorr V_{filtro} : 290 ± 8.7 V

$V_{\rm a} \pm 0.5$ % (V)	V _e ± 0.5% (V)	V _d ± 1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)	<i>i</i> ± 2% (A)
2920	2385	280.0	0.93	2.4 x 10⁻ ⁸
3920	3150	362.5	0.78	2.3 x 10⁻ ⁸
4920	3978	375.0	0.68	2.1 x 10⁻ ⁸
5920	4763	540.0	0.64	2.6 x 10⁻ ⁸
6920	5614	572.0	0.57	2.6 x 10⁻ ⁸

Tabla A.1. Valores del voltaje de enfoque $V_{\rm e}$, del voltaje de deflexión $V_{\rm d}$ y de la corriente del imán $i_{\rm m}$ en función del voltaje de aceleración $V_{\rm a}$. Se indica también la intensidad *i* del haz detectado.

A.2 PRUEBA 2

Filamento: $8 \pm 3\%$ A, $15 \pm 3\%$ V

Ánodo: $70 \pm 3\%$ V, $0.1 \pm 3\%$ A

Presión de gas: 100 ± 1 militorr

 $V_{\rm filtro}: 290 \pm 8.7 \text{ V}$

V _a ± 0.5 % (V)	V _e ± 0.5% (V)	V _d ± 1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)	<i>i</i> ± 2% (A)
2930	2385	287.5	0.93	9.0 x 10⁻ ⁹
3430	2794	330.0	0.84	1.1 x 10⁻ ⁸
3930	3198	417.5	0.78	1.0 x 10⁻ ⁸
4430	3619	367.5	0.76	1.0 x 10⁻ ⁸
4930	3969	407.5	0.68	9.0 x 10 ⁻⁹
5430	4320	525.0	0.67	1.1 x 10⁻ ⁸
5930	4819	505.0	0.64	1.8 x 10⁻ ⁸
6430	5179	535.0	0.58	1.1 x 10 ⁻⁸
6930	5630	557.5	0.57	1.5 x 10⁻ ⁸

Tabla A.2. Valores del voltaje de enfoque V_{e} , del voltaje de deflexión V_{d} y de la corriente del imán i_{m} en función del voltaje de aceleración V_{a} . Se indica también la intensidad *i* del haz detectado.

A.3 PRUEBA 3

Filamento: $15 \pm 3\%$ A, $12 \pm 3\%$ V

Ánodo: $80 \pm 3\%$ V, $0.25 \pm 3\%$ A

Presión de gas: 110 ± 1 militorr

 $V_{\rm filtro}: 290 \pm 8.7 \text{ V}$

V _a ± 0.5 % (V)	V _e ± 0.5% (V)	V _d ± 1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)	<i>i</i> ± 2% (A)
2920	2279	315.0	0.86	1.9 x 10 ⁻⁹
3920	3390	262.5	0.79	4.1 x 10 ⁻⁹
4920	3769	400.0	0.61	3.5 x 10⁻ ⁹
5920	4738	600.0	0.63	0.5 x 10⁻ ⁹
6920	5511	727.5	0.58	3.0 x 10⁻ ⁹

Tabla A.3. Valores del voltaje de enfoque V_{e} , del voltaje de deflexión V_{d} y de la corriente del imán i_{m} en función del voltaje de aceleración V_{a} . Se indica también la intensidad *i* del haz detectado.

A.4 PRUEBA 4

Filamento: $15 \pm 3\%$ A, $12 \pm 3\%$ V Ánodo: $60 \pm 3\%$ V, $0.25 \pm 3\%$ A Presión de gas: 110 ± 1 militorr

 $V_{\rm filtro}$: 290 ± 8.7 V

$V_{\rm a} \pm 0.5 \%$ (V)	V _e ± 0.5% (V)	V _d ± 1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)
2940	2378	317.5	0.88
3940	3183	452.0	0.76
4940	3868	580.0	0.66
5940	4594	650.0	0.59
6940	5332	795.0	0.53

Tabla A.4. Valores del voltaje de enfoque V_{e} , del voltaje de deflexión V_{d} y de la corriente del imán i_{m} en función del voltaje de aceleración V_{a} .

A.5 PRUEBA 5

Filamento: $15 \pm 3\%$ A, $12 \pm 3\%$ V

Ánodo: $60 \pm 3\%$ V, $0.25 \pm 3\%$ A

Presión de gas: 100 ± 1 militorr

 $V_{\rm filtro}$: 290 ± 8.7 V

$V_{\rm a} \pm 0.5$ % (V)	V _e ± 0.5% (V)	V _d ± 1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)	<i>i</i> ± 2% (A)
2940	2303	335.0	0.91	2.0 x 10⁻ ⁸
3940	3127	467.5	0.74	1.6 x 10⁻ ⁸
4940	3846	555.0	0.65	3.3 x 10⁻ ⁸
5940	4551	670.0	0.57	4.4 x 10⁻ ⁸
6940	5295	745.0	0.49	6.1 x 10⁻ ⁸

Tabla A.5. Valores del voltaje de enfoque V_{e} , del voltaje de deflexión V_{d} y de la corriente el imán i_{m} en función del voltaje de aceleración V_{a} . Se indica también la intensidad *i* del haz detectado.

A.6 PRUEBA 6

Filamento: $15 \pm 3\%$ A, $12 \pm 3\%$ V Ánodo: $60 \pm 3\%$ V, $0.25 \pm 3\%$ A Presión de gas: 110 ± 1 militorr

 $V_{\rm filtro}$: 290 ± 8.7 V

V _a ± 0.5 % (V)	V _e ± 0.5% (V)	V _d ± 1.25 (V)	i _m ± 0.005 (A)	<i>i</i> ± 2% (A)
2940	2278	335.0	0.91	1.0 x 10⁻ ⁸
3940	3140	447.0	0.75	8.2 x 10 ⁻⁹
4940	3752	557.5	0.67	2.1 x 10⁻ ⁸
5940	4506	630.0	0.57	1.9 x 10⁻ ⁸
6940	5236	750.0	0.51	2.0 x 10-8

Tabla A.6. Valores del voltaje de enfoque V_{e} , del voltaje de deflexión V_{d} y de la corriente del imán i_{m} en función del voltaje de aceleración V_{a} . Se indica también la intensidad *i* del haz detectado.

A.7 PRUEBA 7

Filamento: $15 \pm 3\%$ A, $12 \pm 3\%$ V

Ánodo: $60 \pm 3\%$ V, $0.25 \pm 3\%$ A

Presión de gas: 110 ± 1 militorr

 $V_{\rm filtro}: 290 \pm 8.7 \, {\rm V}$

$V_{a} \pm 0.5 \% (V)$	V _e ± 0.5% (V)	V _d ± 1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)	<i>i</i> ± 2% (A)
2940	2367	375.0	0.87	4.0 x 10 ⁻⁸
3440	2721	377.5	0.74	2.9 x 10⁻ ⁸
3940	3088	470.0	0.73	4.6 x 10⁻ ⁸
4440	3423	465.0	0.64	3.1 x 10⁻ ⁸
4940	3833	585.0	0.64	6.0 x 10⁻ ⁸
5440	4216	612.0	0.61	4.4 x 10⁻ ⁸
5940	4599	695.0	0.59	5.4 x 10⁻ ⁸
6440	4942	757.0	0.56	4.7 x 10⁻ ⁸
6940	5293	777.5	0.49	1.0 x 10⁻ ⁸

Tabla A.7. Valores del voltaje de enfoque V_{e} , del voltaje de deflexión V_{d} y de la corriente del imán i_{m} en función del voltaje de aceleración V_{a} . Se indica también la intensidad *i* del haz detectado.

A.8 PRUEBA 8

Filamento: $15 \pm 3\%$ A, $12 \pm 3\%$ V

Ánodo: $60 \pm 3\%$ V, $0.25 \pm 3\%$ A

Presión de gas: 110 ± 1 militorr

 $V_{\rm filtro}$: 290 ± 8.7 V

V _a ± 0.5 % (V)	V _e ± 0.5% (V)	<i>V</i> _d ± 1.25 (V)	<i>i</i> _m ± 0.005 (A)	<i>i</i> ± 2% (A)
2940	2294	337.5	0.89	9.1 x 10⁻ ⁹
3440	2582	362.5	0.8	9.2 x 10 ⁻⁹
3940	3110	452.5	0.76	1.0 x 10⁻ ⁸
4440	3352	520.0	0.73	1.7 x 10⁻ ⁸
4940	3740	557.5	0.66	1.2 x 10⁻ ⁸
5440	4134	637.5	0.65	1.8 x 10⁻ ⁸
5940	4468	667.5	0.59	1.3 x 10⁻ ⁸
6440	4824	727.5	0.57	1.6 x 10 ⁻⁸
6940	5220	805.0	0.55	1.5 x 10 ⁻⁸

Tabla A.8. Valores del voltaje de enfoque V_{e} , del voltaje de deflexión V_{d} y de la corriente del imán i_{m} en función del voltaje de aceleración V_{a} . Se indica también la intensidad *i* del haz detectado.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] B.H. Bransden, y C.J. Joachain, C.J., *Physics of atoms and molecules*, Longman, 1983.
- [2] E.W. McDaniel, *Collision phenomena in ionized gases*, Wiley, 1964.
- [3] E. Nasser, *Fundamentals of gaseous ionization and plasma*, John Wiley & Sons, 1971.
- [4] J.B. Hasted, *Physics of atomic collisions*, Butterworths, 1964
- [5] W.C. Wiley, e I.H. McLaren, *The Review of Scientific Instruments*, 26(12), 1955.
- [6] R.J. Cotter, *Analytical Chemistry*, 64(21), 1992.

[7] H. Luna, M. Michael, M.B. Shah, R.E. Johnson, C.J. Latimer, y J.W. McConkey, J. Geophysical Research, 108(E4), 5033,2003.

[8] H. Luna, C. McGrath, M.B. Shah, R.E. Johnson, M. Liu, C.J. Latimer, y E.C. Montenegro, *The Astrophysical Journal*, 628, 1086–1096, 2005.

- [9] S. Dushman, Vacuum technique, John Wiley & Sons, 1960.
- [10] A. Roth, Vacuum technology, North-Holland, 1982.
- [11] D.R. Lide (editor-in-chief), Handbook of Chemistry and Physics, CRC, 2009
- [12] Alcatel, Mechanical Pump Manual, 2000.
- [13] MDC, Instruction manual for vacuum measuring instruments, 1991.
- [14] Varian, Instruction Manual, 2002.

[15] Colutron Research Company, página web www.colutron.com

[16] L. Vályi, Atom and ion sources, John Wiley & Sons, 1977.

[17] H. Zhang, *Ion sources*, Springer-Verlag, 1996.

[18] L. Artsimóvich y S. Lukiánov, *Movimiento de las partículas cargadas en los campos eléctricos y magnéticos*, *Ed. Mir*, 1974.

[19] V.E. Cosslett, Introduction to electron optics (The production, propagation and focusing of electron beams), Oxford, 1950.

[20] L. Wählin, Nuclear Instruments and Methods, 27(1964), 55-60.

[21] K. Jensen y E. Veje, Nuclear Instruments and Methods, 122(1974), 511–515.

[22] R.K. Wangness, *Electromagnetic Fields*, Wiley, 1986.

[23] Lab. de Colisiones, *Bitácora*, Facultad de Ciencias, 2009.

[24] Burle Electro-Optics, Inc., Channeltron Handbook, 2000.

[25] D.C. Baird, *Experimentation: An introduction to measurement theory and experiment design*, Prentice–Hall, 2000.

[26] P.R. Bevington y D.K. Robinson, *Data reduction and error analysis for the physical sciences*, Mc Graw–Hill, 1992.

[27] INEEL, Simion 3D Version 7.0 user's manual, 2000.