



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

FRAGMENTACIÓN DE LA MOLÉCULA N_2O POR IONES DE
HIDRÓGENO A 5 KEV

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

SERGIO ALFONSO PELAYO ESCALERA

DIRECTORA DE TESIS:

DRA. BEATRIZ ELIZABETH FUENTES MADARIAGA



COYOACÁN, CIUDAD DE MÉXICO

MAYO, 2018



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**Fragmentación de la molécula N₂O por iones de hidrógeno a 5
keV**

por

Sergio Alfonso Pelayo Escalera

Tesis presentada para obtener el título de

Físico

en la

FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Coyoacán, Ciudad de México. Mayo, 2018

*Ashes and diamonds,
foe and friend,
we are all equal in the end.
-Roger Waters.*

*Dedicado a mis padres, Sergio Alfonso Pelayo Sánchez y Josefina Alejandra Escalera
Chagollán, a quienes además de la vida, debo gran parte de lo que soy.*

Agradecimientos

A la Dra. Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga, al Dr. Juan López Patiño, a la M. en I. Dalila Martínez Molina, y a la Dra. Jannet Rodríguez Legorreta; quienes sin su apoyo y dirección, el presente trabajo no hubiese llegado a su conclusión.

Al Dr. Horacio Martínez Valencia, al Dr. Luis Rodríguez Fernández, al Dr. Jesús Flores Mijangos, y a la Dra. Alejandra López Suárez; miembros de mi jurado, y quienes hicieron valiosas correcciones al presente trabajo.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico de la UNAM, DGAPA, por el apoyo económico otorgado mediante el Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica, PAPIIT, con clave: IN115718.

A Sergio Alfonso Pelayo Sánchez, a Boreta (Josefina Alejandra) Escalera Chagollán, al Tla (Alfonso José) Escalera Chagoyán, y a Mog (Hugo Daniel) Pelayo Escalera; por su apoyo económico, psicológico, y emocional a lo largo de mis estudios de licenciatura.

A todos aquellos que involucrados directa o indirectamente, permitieron y contribuyeron a la realización de este trabajo. Particularmente a los miembros del *Cubículo del Prometeo* y al Dr. Ricardo Martín Hernández Flores.

Índice general

Resumen	1
Introducción	3
1. Fundamentos	5
1.1. Colisiones	5
1.1.1. Descripción de una Colisión	5
1.1.2. Tipos de Colisiones	5
1.1.3. Secciones Eficaces	8
1.2. Medición de las Secciones Eficaces	9
1.2.1. Atenuación del Haz	9
1.2.2. Mediciones Angulares	11
1.2.3. Espectrometría de Masas	12
1.3. Cálculo de las Secciones Eficaces	13
1.3.1. Criterio Adiabático	14
1.3.2. Aproximaciones para Bajas Energías	15
1.3.3. Aproximación de Born-Oppenheimer	16
2. La molécula de N₂O	18
2.1. Estructura del Óxido Nitroso	18
2.1.1. Capas Electrónicas	18
2.1.2. Enlaces Iónicos	19

2.1.3.	Enlaces Covalentes	20
2.1.4.	Enlaces en el N ₂ O	21
2.2.	Principales Propiedades	22
2.2.1.	Producción y Generación	22
2.2.2.	Reacciones Comunes	24
2.2.3.	Principales Aplicaciones	25
2.3.	Fragmentación	27
2.3.1.	Fragmentos	27
2.3.2.	Afectaciones Directas Causadas por los Fragmentos	28
2.3.3.	Afectaciones Causadas por el Óxido Nítrico	28
2.4.	Afectaciones Causadas por el Óxido Nitroso	29
3.	Dispositivo Experimental: El Acelerador	31
3.1.	El Haz de Iones	32
3.1.1.	Lentes de Einzel	32
3.1.2.	Filtro de Velocidades Tipo Wien	33
3.1.3.	Placas de 10°	36
3.1.4.	Colimado del Haz	37
3.2.	Zona de Reacción	37
3.2.1.	Sistema de Tiempo de Vuelo	38
3.3.	Análisis de Fragmentos	38
3.3.1.	Iones Rápidos	39
3.3.2.	Iones Lentos, Espectros de Tiempo de Vuelo (TOF)	40
4.	Pruebas Preliminares y Condiciones Experimentales	43
4.1.	Pruebas de Vacío	43
4.2.	Alineación del Acelerador	46
4.3.	Voltaje de Enfoque	47
4.4.	Voltaje de 10°	48

4.5. Filtro de Velocidades	49
4.5.1. Campo Magnético	49
4.6. Selección de Iones	51
4.7. Optimización de los Espectros de Tiempo de Vuelo	52
5. Resultados Experimentales	57
5.1. Iones de H^+ colisionando N_2O	58
5.2. Iones de H_2^+ colisionando N_2O	59
5.3. Iones de H_3^+ colisionando N_2O	60
6. Análisis y Conclusiones	69
A. Bombas de Vacío	71
A.1. Bomba Mecánica	71
A.2. Bomba Turbo Molecular	72
B. Sensores de Presión	74
B.1. Sensor de Termopar	74
B.2. Medidor Iónico de Filamento Caliente	75
B.3. Cátodo Frío	75
C. Tarjeta Multicanal	77
Bibliografía	79

Resumen

Se determinaron las secciones eficaces relativas de los procesos de generación de iones positivos al hacer colisionar iones de hidrógeno (H^+ , H_2^+ , H_3^+) con una energía de 5 keV contra un blanco de óxido nitroso (N_2O), mediante la técnica de espectrometría por tiempo de vuelo, en el régimen de colisión simple. El proceso dominante fue el de ionización del blanco para H^+ ; no obstante, se observó que los procesos disociativos tienen relevancia, en las colisiones de H_2^+ y H_3^+ , sobre N_2O ; donde la suma de los procesos disociativos dominan al de la ionización del blanco.

Las mediciones de los tiempos de vuelo asociados a la relación masa-carga de los iones generados por la colisión entre los iones proyectil contra el blanco, se realizaron utilizando un acelerador lineal que opera con energías entre 1 keV y 10 keV . La caracterización y optimización de los parámetros del acelerador se obtuvieron con antelación a la adquisición de los espectros de tiempo de vuelo finales.

El método de adquisición de datos, impide identificar los procesos involucrados en la generación de fragmentos de manera particular, pues la generación de ciertos fragmentos puede ser producida por interacciones independientes. La ausencia de conteo neto de partículas neutras durante la adquisición de un espectro de tiempo de vuelo dado, provoca que el cálculo de las secciones eficaces sea relativo.

En particular, el objetivo de este trabajo fue el de saber si las colisiones de los iones de hidrógeno

sobre un blanco de óxido nitroso podrían disminuir la concentración del este gas en la atmósfera, con el fin de disminuir el deterioro de la capa de ozono. Se obtuvieron resultados desfavorables, pues en el caso de procesos disociativos, uno de los fragmentos generados con mayor sección eficaz es el óxido nítrico (NO^+), y éste es parte fundamental del proceso en el que está involucrado el N_2O para la degradación de la capa de ozono. Sin embargo un estudio sobre las colisiones de este mismo tipo de iones sobre un blanco de óxido nítrico y uno de ozono, proporcionaría información suficiente para seguir con esta línea de investigación, en el marco de las concentraciones de estos gases en la atmósfera y el posible control de las concentraciones en la atmósfera mediante colisiones controladas.

Introducción

El estudio de las interacciones por colisión entre partículas cargadas y un blanco tienen relevancia debido a que permiten una mayor comprensión de una amplia gama de procesos naturales y de su aplicabilidad (como el desarrollo de modelos teóricos). Se han desarrollado numerosas técnicas para el estudio de estos procesos, los fenómenos físicos, y las consecuencias que los involucran. Uno de los métodos de estudio, se hace mediante el cálculo de las secciones eficaces en función de la energía de colisión, los iones que actúan como proyectil, y el tipo de blanco en el que inciden.

Particularmente, es de interés el estudio de las interacciones donde los iones de hidrógeno (H^+ , H_2^+ , y H_3^+) colisionan con un gas; pues estas especies de iones inciden en las atmósferas de nuestro sistema solar como efecto del viento solar, y el conocimiento acerca de las secciones eficaces asociadas a estos procesos, aporta parte de la información requerida en modelos relacionados con la formación y evolución de atmósferas.

Además, el estudio de las colisiones contra un blanco de óxido nitroso (N_2O), permite conocer la probabilidad de que ocurran procesos que disocien a este gas, pues es el que provee una mayor contribución a los procesos asociados con la degradación de la capa de ozono en la actualidad; y la información acerca de los procesos disociativos que involucran a este gas, permitiría un control sobre la concentración del mismo en la atmósfera, dado que las emisiones de este gas no están contempladas en acuerdos ambientales internacionales, pues la revisión del caso es bastante reciente.

En el primer capítulo se habla sobre los fundamentos físicos: colisiones, secciones eficaces, cálculo y mediciones de las secciones eficaces. En el segundo capítulo se habla acerca del blanco de estudio (N_2O), y la relevancia del estudio de esta molécula. En los dos siguientes capítulos se describe el dispositivo experimental (el acelerador), y, las pruebas preliminares y condiciones experimentales en las que se llevó a cabo la adquisición de datos; respectivamente. En el siguiente capítulo se reportan los resultados experimentales y su análisis. Finalmente se hacen conclusiones acerca de los resultados obtenidos.

Capítulo 1

Fundamentos

1.1. Colisiones

1.1.1. Descripción de una Colisión

En general, una colisión es una interacción entre dos sistemas independientes en la cual ocurre intercambio de momento, cambios en sus respectivas estructuras internas, o incluso subsistemas derivados (*fragmentos*). De manera particular para describir una colisión se consideran el *proyectil*, y el *blanco*. El proyectil es acelerado con respecto a un marco de referencia previamente establecido, mientras que el blanco tiene una velocidad suficientemente pequeña respecto al proyectil como para considerarse cero. Los parámetros anteriores se designan dependiendo de las condiciones experimentales, o bien, los fenómenos que se desean medir. El estudio de colisiones puede llevarse a cabo mediante un análisis cinemático de forma directa, sin embargo, el estudio propio de las interacciones es de gran interés para la física.

1.1.2. Tipos de Colisiones

Fenomenológicamente las colisiones se clasifican en tres tipos. Las *colisiones elásticas* son aquellas en las que la energía interna de las partículas no cambia y sólo hay transferencia de momento durante la interacción. Aquéllas en las que hay cambios en la energía interna de las partículas son conocidas como *colisiones inelásticas*. Tanto en las colisiones elásticas como en

las inelásticas, la estructura del proyectil y blanco es la misma antes y después de la interacción. Finalmente, en las colisiones donde sí existe un cambio en la estructura interna de alguna de las partículas, ocurre un proceso que recibe el nombre de *reacción*¹.^[1]

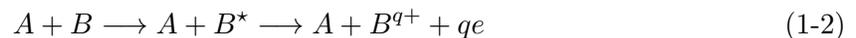
Reacciones

En las reacciones, al menos alguna de las partículas interactuantes presenta cambios en su estructura, ya sea atómica o molecular, resultando en la posible generación de nuevos *productos* o *fragmentos*. Particularmente, en las interacciones ion-molécula, las reacciones más frecuentes son: ionización simple y múltiple, transferencia de carga, captura electrónica y disociación.^[2] En el proceso de *ionización*, el blanco pierde uno o más electrones en su interacción con el *haz* o *proyectil*. La primera forma de ionización es la *ionización directa*, en la cual el blanco pierde un número entero positivo q de electrones, sin ningún proceso intermedio, como se muestra en la siguiente ecuación:



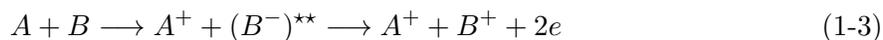
donde A es la partícula del haz, B la partícula del blanco, y e la carga del electrón. Aquí B , que inicialmente es una partícula neutra, queda cargada positivamente con una carga $+qe$ tras la interacción con A . El caso donde $q = 1$ es conocido como *ionización simple directa*.

En algunas ocasiones pueden ocurrir procesos internos, es decir, *transiciones isoméricas*^[3], previas al desprendimiento de electrones del blanco; se dice entonces que ocurre una *ionización indirecta*. Durante las transiciones isoméricas el blanco se encuentra en un estado *excitado inestable* B^* . Cuando B^* tiende a regresar a su estado base, es posible que se desprenda un electrón, como se muestra en la relación siguiente:

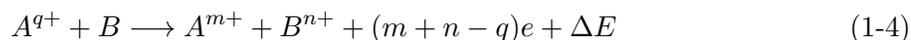


¹Las colisiones a las que se les hará alusión posteriormente son, principalmente, colisiones entre *haces iónicos* o *atómicos* y *gases atómicos* o *moleculares*.

También puede ocurrir un proceso denominado *ionización por captura electrónica* o *recombinación resonante*. En esta interacción, un electrón del haz es capturado por un elemento del blanco, quedando este último en un nivel de energía doblemente excitado inestable $(B^-)^{**}$, de manera que se pueden emitir hasta dos electrones:



También está la reacción denominada transferencia de carga. En este fenómeno, un electrón pasa de una de las partículas interatantes a la otra^[4]. Para que la transferencia de carga sea más probable, se requiere que la velocidad de colisión relativa del proyectil sea del orden de la velocidad orbital de los electrones externos del blanco^[2]. De esta manera se obtiene una molécula transitoria formada por las partículas involucradas durante el transcurso temporal de la colisión. Se dice entonces, que los mecanismos dominantes en la transferencia de carga, recaen en el conjunto de las llamadas *transiciones adiabáticas*^[5]. Otros parámetros, además del ya mencionado, son: la energía con la que incide el proyectil, la carga del mismo, y el número de electrones disponibles en ambas partículas. Esta reacción se puede representar mediante la siguiente ecuación:



La partícula del haz, A , tiene un exceso de carga $+qe$ y el blanco, B , está neutro; posteriormente, hay un cambio en el estado de carga de ambas partículas: A queda con carga $+me$, y B con $+ne$. Durante la interacción también se lleva a cabo un cambio en la energía interna ΔE de las partículas, asociado al *canal de reacción* involucrado, definido como:

$$\Delta E = I(A^{m+}) - E_i + I(B^{n+}) - E_j, \quad (1-5)$$

donde $I(A^{m+})$ e $I(B^{n+})$ representan las energías de ionización de ambas partículas, mientras que E_i y E_j corresponden a las energías internas respectivas después de la colisión. ΔE se puede medir de manera indirecta, y de esta forma obtener información acerca de los potenciales de

las moléculas involucradas^[2,4].

Un caso particular de la transferencia de carga es el de *captura electrónica simple* (SEC, por su acrónimo en inglés, *Simple Electronic Capture*), proceso en el cual se hace intercambio de un solo electrón,



Finalmente tenemos la reacción de *disociación*^[6], que es de interés en las interacciones en que involucran moléculas. En general, en un proceso disociativo ocurren simultáneamente una o varias de las reacciones descritas con anterioridad, aumentando la dificultad en el estudio de este tipo de interacciones. El fenómeno disociativo se puede esquematizar como:



donde la molécula, BC , se fragmenta debido a la interacción con el haz, A , resultando en la formación de dos productos, B , y C .

1.1.3. Secciones Eficaces

Cuando dos partículas interactúan, la *sección eficaz*² (CS, por su acrónimo del inglés, *Cross Section*) es el área transversal³ al movimiento relativo dentro del cual deben de encontrarse para dispersarse⁴ una de la otra.^[7] Podemos expresar matemáticamente a una sección eficaz, σ_{if} , asociada al proceso que involucra un cambio del estado con condiciones iniciales, i , al estado con condiciones finales, f , de las partículas⁵, como:

$$\sigma_{if} = \frac{N_f}{N_i \pi}, \quad (1-8)$$

²Las CS son cantidades comúnmente reportadas en los laboratorios donde se realizan colisiones.

³De aquí que a las CS también se les conozca en español como *Secciones Transversales*.

⁴Pese a que la traducción correcta del verbo en inglés *scatter* es *esparcir*, se optó por el uso del verbo *dispersar*.

⁵Los índices i y f se referirán a las condiciones iniciales y finales respectivamente, y no necesariamente a parámetros dependientes entre sí.

donde N_i es el número de partículas en estado i lanzadas por un haz durante un intervalo de tiempo, π el número de componentes individuales por unidad de área del blanco, y N_f el conteo de detecciones de partículas dispersadas en el estado f . Además, se puede entender a las CS como una *probabilidad de transición* entre el estado i al f , durante el proceso de interacción de las partículas.^[8]

Cabe resaltar que a cada proceso ocurrido durante una colisión, se le puede asociar una CS particular. Esto es debido a que las CS dependen del tipo de partículas interactuantes, la energía de incidencia y la velocidad relativa entre los sistemas.

1.2. Medición de las Secciones Eficaces

En el contexto de los procesos disociativos, la sensibilidad y velocidad de respuesta de los detectores involucrados en las mediciones y cálculos de las CS, desempeñan un papel fundamental en la discriminación entre las distintas interacciones ocurridas. Se debe considerar que la aplicación de uno o más métodos de medición reside en su complementariedad. A continuación se presentan tres técnicas de medición relevantes en la actualidad.

1.2.1. Atenuación del Haz

El método de *atenuación del haz* o *rayo molecular* consiste en el monitoreo de los posibles elementos del haz después de atravesar una *celda de reacción* de geometría conocida, que contiene al blanco, en función de la cantidad de partículas contenidas en dicha celda.^[9] El método se basa en que parámetros como la presión medida en la celda, están ligados a través de la CS.

⁶Supóngase un gas compuesto de solo protones, H^+ . El haz interacciona con algún gas de interés, resultando en que la estructura de varios de los elementos del gas se ve afectada; como consecuencia emergen, además de H^+ , partículas H^0 y H^- . Para separar los elementos resultantes y determinar la fracción de cada uno de ellos con respecto a la intensidad del haz inicial, basta con desviar electrostáticamente hacia un par de cajas de Faraday los iones H^+ y H^- , y

⁶Descripción basada en el trabajo respecto a colisiones entre protones y diversos gases, de Eliot en 1977 [10].

para H^0 , colocar en la dirección inicial del haz, un detector multiplicador de electrones. Las cajas de Faraday debido a sus arreglos electrostáticos conformados por varios electrodos, se pueden determinar las corrientes absolutas, y con ello, la cantidad total de iones incidentes. Sean F_i las respectivas fracciones de partículas H^i emergentes de las colisiones y π (véase ec. 1-81), las fracciones de F_i dependen de este parámetro, que a su vez puede expresarse como:

$$\pi = \alpha P, \quad (1-9)$$

donde,

$$\alpha = \frac{N_a l}{RT}, \quad (1-10)$$

con P la presión, N_a el número de Avogadro, R la constante universal de los gases, l la profundidad de la celda (recorrido total que realizan los iones), y T la temperatura del sistema.

Al efectuarse las colisiones se llegará a un equilibrio, el cual determina la interdependencia y las variaciones de cada F_i , cuyas correlaciones están dadas por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dF_i}{d\pi} = \sum_{j \neq i} (\sigma_{ji} F_j - \sigma_{ij} F_i), \quad j = -1, 0, 1. \quad (1-11)$$

Notemos que $F_1 + F_0 + F_{-1} = 1$; si $\pi \rightarrow 0$, $F_1 = 1$, $F_0 = F_{-1} = 0$; y si $\pi \rightarrow \infty$, $\frac{dF_i}{d\pi} = 0$, $i = -1, 0, 1$.

Como el sistema de ecuaciones, Ec. (1-11), está acoplado y presenta coeficientes constantes, éste tiene solución analítica. Las soluciones generales para F_i son:

$$F_i = F_{i\infty} + \sum_{j \neq i} \left(\frac{F_{i\infty} \nu - \sigma_{ji}}{\mu - \nu} e^{-\mu\pi} + \frac{\sigma_{ji} - F_{i\infty} \mu}{\mu - \nu} e^{-\nu\pi} \right), \quad (1-12)$$

donde $F_{i\infty} = \lim_{\pi \rightarrow \infty} F_i$, y:

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\sum_{i \neq j} \sum_{i \neq j} \sigma_{ij} \right) \left(1 + \sqrt{1 - A} \right), \quad (1-13)$$

$$\nu = \frac{1}{2} \left(\sum_{i \neq j} \sum_{i \neq j} \sigma_{ij} \right) \left(1 - \sqrt{1 - A} \right), y \quad (1-14)$$

$$A = \frac{4 \sum \sum \sum_{i \neq j \neq k} (\sigma_{ik} \sigma_{kj} + \frac{1}{2} \sigma_{ik} \sigma_{jk})}{\sum \sum_{i \neq j} \sigma_{ij}} \quad (1-15)$$

A partir del desarrollo anterior, es fácil determinar las CS σ_{ij} a partir de F_i , al invertir el sistema de ecuaciones, Ec. (1-12). Pero al considerar las aproximaciones a primeros órdenes de π , o bien de P , las expresiones para F_j son:

$$F_j = \alpha \sigma_{ij} P + \frac{1}{2} (\sigma_{ik} \sigma_{kj} - \sigma_{ij}^2 - \sigma_{ij} \sigma_{ji} - \sigma_{ij} \sigma_{ik} - \sigma_{ij} \sigma_{jk}) \alpha^2 P^2. \quad (1-16)$$

Además, dentro del régimen de *colisión simple*, es decir, en el cual la presión es suficientemente baja como para que una partícula del haz colisione con *a lo más* una de las partículas del blanco⁷, F_j dentro de la aproximación lineal se puede escribir:

$$F_j = \alpha \sigma_{ij} P, \quad (1-17)$$

es decir, el monitoreo de F_j en función de la presión P , determina directamente las CS σ_{ij} .

1.2.2. Mediciones Angulares

Las *secciones eficaces diferenciales* o *angulares* (DCS, por sus siglas en inglés, *Differential Cross Sections*) en las cuales la energía y la distribución angular de los fragmentos pueden medirse directamente, permiten formar una imagen detallada de las interacciones. Por conservación de energía y momento, se puede determinar la redistribución de energía de los fragmentos, y a su vez, los mecanismos que intervienen a lo largo del proceso.^[12]

Las *mediciones angulares* son una de las maneras de determinar las DCS. En general el método consiste en hacer incidir un haz de partículas bien definidas y con energía determinada, sobre una celda de reacción de longitud l , que contiene al blanco, hasta que la densidad volumétrica de partículas n sea constante. Al atravesar la celda el haz sigue un proceso similar al del método

⁷En el presente dispositivo esto ocurre a presiones por debajo de 3×10^{-5} Torr, según J. López, 2016 [11].

de atenuación del haz; las partículas neutras se detectan con un multiplicador de electrones, y las cargadas se monitorean a través de cajas de Faraday.

A partir de la intensidad de corriente, $I(\theta, \varphi)$, generada por las partículas a los ángulos de dispersión, θ , y azimutal, φ , se puede obtener la DCS, $d\sigma$, con:

$$d\sigma = \frac{I(\theta, \varphi)}{I_0 n l} d\Omega, \quad (1-18)$$

donde $d\Omega$ es el ángulo sólido subtendido por θ y φ , e I_0 la corriente inicial. De esta manera:

$$\sigma = \int d\sigma = \int \frac{I(\theta, \varphi)}{I_0 n l} d\Omega. \quad (1-19)$$

La ventaja de este método consiste en el entendimiento de las mediciones en función de los ángulos θ y φ .

1.2.3. Espectrometría de Masas

La espectrometría de masas^[13] (MS⁸, por sus siglas en inglés, *Mass Spectrometry*) surgida en los trabajos de J.J. Thompson en 1913, es una técnica analítica que ioniza especies químicas, ensamblas compuestos por unidades atómicas o moleculares, y ordena los iones con base en la proporción masa-carga, mediante la aplicación de campos magnéticos.^[14] En ocasiones el análisis provee información acerca de algún tipo de interacción entre partículas.

El método de *tiempo de vuelo*⁹ (TOF, por su acrónimo en inglés, *Time of Flight*) es un tipo de MS que añade la medición de distintas CS. La descripción y justificación de este método se expondrá en el capítulo 3.

De manera breve los instrumentos de TOF miden el tiempo requerido para que un ion atraviese una cierta distancia específica. Esto puede hacerse por un mecanismo de conteo de tiempo

⁸Particularmente, la MS, tiene una gran aplicabilidad en estudios para análisis orgánicos, investigación clínica práctica, control de calidad, determinación de transiciones metaestables, determinación de energías de disociación y afinidades electrónicas; como en la estructura, orientación y distribución espacial de especies químicas y biomoleculares en superficies biomateriales [15, 16].

⁹El término se aplica a una gama heterogénea de espectrómetros de masas, y, en algunas ocasiones se trata de una denominación errónea [17].

directo, empleando fuentes pulsadas de iones y detectores; o, al someter a los iones a campos de radiofrecuencia. En cualquiera de los casos anteriores, el aparato selecciona, del haz, aquellos iones con una cierta velocidad. Si la velocidad del ion es característica de su masa, como en el caso de iones individualmente cargados que han caído mediante el mismo potencial^[17], un filtro de velocidades puede usarse para el análisis de masas. Cabe mencionar que las CS se pueden obtener del conteo e indentificación de fragmentos generados por la colisión.

1.3. Cálculo de las Secciones Eficaces

La complejidad matemática de los modelos teóricos empleados en teoría de colisiones, en ocasiones, no permite el uso de aproximaciones que incluyan todas las características físicas involucradas en las interacciones. Es decir, en ciertas situaciones los modelos no empatan con las mediciones, presentando incluso diferencias significativas. Entonces se debe considerar que las aproximaciones no son válidas para todas las situaciones experimentales. Los ajustes a un modelo dependerán de las partículas intervinientes, y las condiciones para cada interacción, particularmente de la energía de incidencia del proyectil.^[18,19]

Existen tres principales aproximaciones en el contexto de colisiones, en función de la energía. A bajas energías, donde la velocidad del proyectil es menor al orden de magnitud de la velocidad de los electrones externos del blanco ^[9], se propone a la función de onda del sistema como una superposición de ondas representantes de la pseudomolécula formada por el haz y el blanco; se simplifica la ecuación de Schrödinger al considerar que las partículas incidentes no son deflectadas, y se determinan los coeficientes de expansión usando el principio variacional. Para la segunda aproximación se usa teoría cuántica de las perturbaciones a primeros órdenes y se determina la amplitud de dispersión para evaluar la correspondiente sección eficaz. Para el régimen de altas energías se usa una combinación de la teoría cuántica y clásica, que permite la estimación de las CS para sistemas más complejos.^[20]

A continuación se describirán algunos de los tratamientos mencionados anteriormente, los cuales han permitido la estimación de las CS correspondientes a distintos sistemas físicos y que se

han comparado con los respectivos resultados experimentales¹⁰.

1.3.1. Criterio Adiabático

En los procesos de colisiones atómicas y moleculares, particularmente donde ocurre un intercambio de carga, se puede determinar la región energética para la cual las secciones eficaces alcanzan un máximo, entre otras cantidades¹¹; mediante un desarrollo propuesto por H. S. Massey, en 1949, conocido como la aproximación *adiabática*.^[9] Esta determina una región energética para la cual las CS alcanzan un máximo.

Durante la transición electrónica del sistema *ion-molécula*, se ha observado experimentalmente que si el cambio en la energía interna ΔE es pequeño, la sección eficaz asociada a la interacción será grande; además cuando se toma una velocidad relativa de impacto fija, la variación de las CS sigue una curva de resonancia cuyo máximo ocurre a $\Delta E = 0$. Este resultado se puede interpretar al considerar una *región adiabática*¹², en la cual, las partículas se aproximan de manera que el estado de movimiento interno se ajusta gradualmente a la perturbación, es decir, no ocurre transición final pese a que sí ocurre un intercambio de carga.

Para que el método de cálculo sea válido, el concepto de órbita debe ser aplicable, y por tanto, la longitud de onda de de Broglie del proyectil debe ser pequeña en comparación con la distancia de aproximación más cercana al objetivo, siendo ésta $2a$.^[5] Cuando las partículas se separan una cierta distancia, la frecuencia de fluctuación entre los estados inicial y final con una diferencia de energía asociada ΔE , es $\omega = \Delta E/\hbar$; y si el número de fluctuaciones durante la colisión es alta, las condiciones serán cercanas a las adiabáticas y la probabilidad de haya una transición entre estados será baja. Considerando que el tiempo de colisión es a/v , con v la

¹⁰La descripción de los siguientes modelos teóricos se considera de importancia en el desarrollo del presente trabajo. Sin embargo, no se realizó la comparación entre las CS reportadas en el presente y sus respectivas estimaciones teóricas.

¹¹Como los niveles de energía de ciertos átomos y moléculas.

¹²El principio adiabático de la mecánica cuántica dice que no se pueden inducir transiciones de un estado cuántico a otro por una perturbación dependiente del tiempo, si la variación de la perturbación es pequeña durante los periodos τ del sistema [5].

velocidad relativa entre proyectil y blanco, la condición adiabática es válida cuando

$$\frac{a\delta E}{\hbar v} \gg 1. \quad (1-20)$$

De otra manera para que sea probable una transición, el tiempo de colisión debe ser corto comparado con el periodo nuclear $\tau = 1/\omega$, y que:

$$\frac{a\delta E}{\hbar v} \approx 1. \quad (1-21)$$

En general, la CS es una función decreciente de $a\delta E/\hbar v$, y alcanzará un máximo en $\delta E = 0$, es decir, cuando cumpla la condición de resonancia.

De la Ec.(1-21) se puede determinar la región adiabática, y el intervalo energético en el cual se espera que la CS sea máxima¹³. Sin embargo, hay que considerar que cuando las diferentes curvas de energía potencial inicial y final se cruzan, es inadecuado el uso de esta teoría, pues la región adiabática es prácticamente inexistente^[21] debido a que la separación internuclear es demasiado pequeña.

1.3.2. Aproximaciones para Bajas Energías

Para discriminar entre la aproximación más conveniente, se debe considerar la longitud de onda asociada al movimiento relativo entre partículas. En el caso de protones a bajas energías, es válido considerar el movimiento como clásico, pues la longitud de onda es en general pequeña en comparación de las dimensiones atómicas y moleculares¹⁴.

Parámetro de impacto

La aproximación basada en el *parámetro de impacto*, propone al núcleo como una partícula clásica, sin embargo, las transiciones electrónicas son analizadas mediante teoría de las perturbaciones cuánticas.^[22] En su forma más simple, la aproximación ignora el efecto de la interacción

¹³Un amplio número de trabajos toman como base este principio para comparar sus resultados experimentales [19].

¹⁴Para energías entre 1 y 10 keV, la longitud de onda de los protones se encuentra entre los 0.9 y 0.3 pm.

sobre la velocidad relativa de las partículas, suponiéndola constante durante la colisión, es decir, que la deflexión después de efectuadas las colisiones es nula.^[23] Finalmente el método autoconsistente de *Thomas-Fermi*. propone la evaluación de las CS a partir del uso de la mejor función de onda de la distribución electrónica.^[24]

Variables Reducidas

Cuando se trabaja en el régimen clásico y semiclásico, resulta conveniente la definición de parámetros acordes con el sistema de estudio; como en el caso de las *variables reducidas*, que permiten un análisis conveniente de los datos experimentales de las DCS, $\sigma(\theta, E)$, y los patrones de interferencia.^[23] Las variables reducidas se definen:

$$\tau = E\theta, \quad (1-22)$$

$$\rho = \theta \sin \theta \sigma(\theta, E). \quad (1-23)$$

La relación reducida es el término principal de una expansión de impacto tipo $\rho(\tau, E) = \sum_n E^{-n} \rho_n(\tau)$. Las $\rho(\tau)$ son obtenidas al eliminar el parámetro de impacto b a partir de expansiones de las funciones de dispersión clásicas tipo $\tau(b, E) = \sum_n E^{-n} \tau_n(b)$. Debido a que a primera aproximación, $\tau = \tau(b)$, el problema de inversión se facilita, y considerando los datos experimentales, es posible evaluar el potencial intermolecular.

1.3.3. Aproximación de Born-Oppenheimer

La aproximación de *Born-Oppenheimer*¹⁵ es la suposición de que el movimiento de los nucleones y electrones en una molécula pueden ser separados^[25], es decir, la función de onda de una molécula puede expresarse como:

$$\Psi = \psi_{electrónica} \otimes \psi_{nuclear}. \quad (1-24)$$

¹⁵Esta aproximación no se empleará para la obtención de secciones eficaces en el desarrollo del presente trabajo.

El tratamiento es de utilidad debido a que se pueden evaluar las secciones eficaces y las distintas energías transferidas en diferentes procesos. Esta técnica es usada en el régimen de altas energías, es decir, mayores de 100 keV. La separación entre el movimiento nuclear y electrónico induce la idea del núcleo moviéndose a través de una superficie de energía potencial determinada; esta, puede emplearse en cálculos clásicos, semiclásicos, o cuánticos.^[26]

En este tipo de cálculos se busca obtener el elemento de matriz para alguna de las transiciones electrónicas inducidas por el campo de la partícula incidente, y efectuar la suma sobre todos los estados iniciales y finales posibles, y a su vez, sobre todos los electrones del blanco. Para que el cambio en el momento de la partícula durante la colisión sea pequeño, se pueden ignorar ciertas pérdidas de energía que llegarían a afectar a la transición final, sin embargo, es necesario que la velocidad del haz sea mucho mayor que la de los electrones orbitales, es decir, cuando la energía de interacción es alta, o bien, cuando las partículas del haz son relativamente ligeras.^[20]

Capítulo 2

La molécula de N₂O

El *óxido nitroso* es un compuesto químico con fórmula N₂O, perteneciente al grupo de compuestos con fórmula general N_xO_y, llamados óxidos de nitrógeno¹.^[27] Su nombre IUPAC² es monóxido de dinitrógeno^[28], sin embargo, también es conocido como: protóxido de nitrógeno, anhídrido hiponitroso, y gas hilarante.^[29]

2.1. Estructura del Óxido Nitroso

2.1.1. Capas Electrónicas

En química y física atómica, una capa electrónica es un nivel principal de energía. Las capas electrónicas corresponden al número cuántico principal, n . Cada capa puede contener solo un número fijo de electrones: la primera puede albergar dos electrones, la segunda seis, la tercera dieciocho, etc. La fórmula general indica que, en principio, la n -ésima capa puede contener $2(n^2)$ electrones.^[30] Como los electrones están eléctricamente atraídos por el núcleo, los electrones del átomo ocuparán las capas exteriores solo si las capas internas ya han sido previamente ocupadas por otros electrones. No obstante, este no es un requerimiento estricto, los átomos pueden tener dos e incluso más capas electrónicas externas incompletas. Esto es

¹Ejemplos de óxidos de nitrógeno con carga neutra son: óxido nítrico (NO), dióxido de nitrógeno (NO₂); Aniones: dinitramida (N(NO₂)⁻), nitrato (NO₃⁻); Cationes: nitronio (NO₂⁺), nitrosonio (NO⁺).

²Nombre dado por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (*International Union of Pure and Applied Chemistry*, IUPAC)

debido al principio de *Aufbau* (v´ase fig. 2-1), del alem´an *disposici3n*, tambi3n conocido como regla de *Madelung*, o regla *diagonal*. En una configuraci3n electr3nica, los orbitales con un valor menor de $n + l$ se ocupan antes que aquellos con valores superiores de $n + l$, siendo l el n´umero cu´antico orbital.^[31] V3ase la siguiente figura:

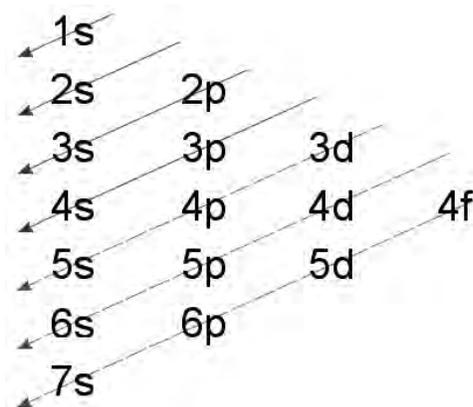


Figura 2-1: DIAGRAMA DEL PRINCIPIO DE AUFBAU, REGLA DE LA DIAGONAL. El n´umero cu´antico principal toma valores $n = 1, 2, 3, 4, \dots$, y el n´umero cu´antico azimutal con valores $l = 0, 1, 2, 3$ corresponde a las etiquetas *s*, *p*, *d*, y *f*, respectivamente. Los electrones ocupar´an en estado base los orbitales correspondientes segun el orden indicado por la flecha.

Cada capa consiste de una o m´as subcapas, y cada subcapa consiste de uno o m´as orbitales at3micos. Los electrones en las capas m´as externas determinan las propiedades qu3micas del ´atomo; a esta capa se le denomina de valencia.

2.1.2. Enlaces I3nicos

El *enlace i3nico* es un tipo de enlace qu3mico que involucra atracci3n electrost´atica entre dos iones de carga opuesta, y es la interacci3n primaria que ocurre en los compuestos i3nicos. Los compuestos i3nicos son de carga neutra, pero consisten de iones positivos (*cationes*) y negativos (*aniones*), que a su vez pueden ser simples como el ion sodio (Na^+) y el cloruro (Cl^-), o poliat3micos como el amonio (NH_4^+) y el carbonato (CO_3^{2-}).^[32] Los iones son ´atomos que han ‘ganado’ uno o m´as electrones (aniones) y ´atomos que han ‘perdido’ uno o m´as electrones (cationes). Esta transferencia de electrones es conocida como *electrovalencia*³. Es decir, un enlace

³En contraste con la *covalencia*.

iónico es la transferencia de electrones de un átomo a otro para obtener una capa de valencia completa en ambos átomos.

Es importante reconocer que un enlace iónico 'perfecto', en el cual un átomo o molécula transfiere por completo un electrón a otro, no puede existir. Todos los compuesto iónicos tienen cierto grado de enlace *covalente*. Entonces, el término *enlace iónico* es usado cuando el carácter iónico es mayor al carácter covalente, es decir, un enlace donde existe una diferencia grande de electronegatividad entre dos átomos, causando un enlace mayormente polar (iónico) que un enlace covalente.^[33]

2.1.3. Enlaces Covalentes

Un *enlace covalente*, también llamado *enlace molecular*, es un enlace químico que involucra átomos que comparten pares de electrones entre sí. Estos pares de electrones son conocidos como *pares de enlace*, y el equilibrio estable entre fuerzas atractivas y repulsivas de los átomos, cuando comparten electrones, se le conoce como enlace covalente. Para muchas moléculas, el intercambio de electrones permite que cada átomo alcance el equivalente de una capa de valencia completa, lo que corresponde a una configuración electrónica estable.^[34] Los enlaces covalentes suelen representar mediante un diagrama de Lewis, véase fig. 2-2.

Los enlaces covalentes incluyen varios tipos de interacción como: los enlaces σ y π , que dependen del tipo de superposición de orbitales; los enlaces metálicos, donde se comparten electrones libres entre una red positivamente cargada; los enlaces de tres centros y dos electrones, donde tres átomos comparten dos electrones; entre otros.^[36,37] El término covalente, en esencia, significa que los átomos comparten valencia.

La covalencia es la mejor manera de enlazar dos átomos de electronegatividad similar, es decir, no es necesario que los átomos sean del mismo elemento.^[38]

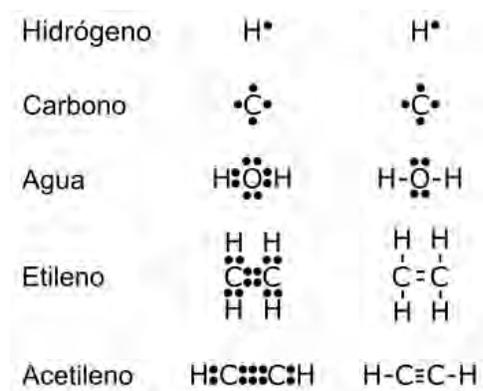


Figura 2-2: REPRESENTACIÓN DE LEWIS. Es una representación gráfica que muestra los electrones de valencia de átomos mediante puntos alrededor del símbolo del elemento. Cuando se representa un enlace covalente se suelen suplir ambos pares de enlace por una línea. ^[6,35] En la figura se muestran ejemplos de la representación de Lewis para átomos y compuestos.

2.1.4. Enlaces en el N_2O

Los enlaces con carácter parcialmente iónico y parcialmente covalente son llamados *enlaces polares covalentes*, debido a la carga negativa de los electrones, hay repulsión, y la distribución desigual de los pares de enlace conduce a la formación de un dipolo eléctrico. ^[39]

El óxido nitroso puede enlazarse de tres manera distintas, las tres con enlaces polares covalentes (véase figura 2-3) y con la misma estructura (véase figura 2-4). La primera de ellas presenta un enlace covalente triple (tres pares de electrones de enlace) entre ambos nitrógenos, y un enlace covalente simple (sólo un par de electrones de enlace) entre uno de los nitrógenos y el oxígeno; la carga positiva recae sobre el nitrógeno central, y la negativa sobre el oxígeno ($[\text{N}_2]^+[\text{O}]^-$). La segunda presenta un enlace covalente doble (dos pares de electrones de enlace) entre los nitrógenos, y un enlace covalente doble entre uno de los nitrógenos y el oxígeno; la carga positiva recae sobre el nitrógeno central, y la negativa sobre el otro nitrógeno ($[\text{N}]^-[\text{NO}]^+$). La tercera presenta un enlace covalente simple entre uno de los nitrógenos y el oxígeno, y un enlace covalente doble entre ambos nitrógenos; la carga positiva recae sobre el nitrógeno del extremo, y la negativa sobre el oxígeno ($[\text{N}]^+[\text{NO}]^-$), véase fig. 2-3 y fig. 2-4. ^[40]

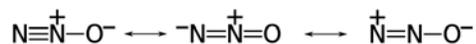


Figura 2-3: REPRESENTACIONES DE LEWIS DEL N_2O . Se muestra en notación de Lewis de las tres estructuras de resonancia en el enlace del óxido nitroso. Puede observarse que se trata de un enlace polar covalente en los tres casos, pues presentan enlaces covalentes y un dipolo eléctrico.

La estructura del N_2O tiene un ángulo de 180° entre los enlaces, es decir, no se 'dobla', en contraste al enlace de la molécula de H_2O que tiene un ángulo de 104.45° entre ellos.^[41]

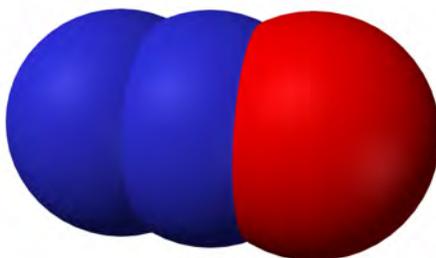


Figura 2-4: MODELO 3D DE LA MOLÉCULA N_2O . La estructura presenta un ángulo de 180° entre los enlaces. Las distancias interatómicas promedio son de 1.1257\AA entre nitrógeno-nitrógeno, y 1.1863\AA entre nitrógeno-oxígeno.^[42]

2.2. Principales Propiedades

El N_2O como un líquido refrigerado es incoloro, al evaporarse se obtiene un gas incoloro, de olor dulce y moderadamente tóxico.^[41]

2.2.1. Producción y Generación

En la industria, el óxido nitroso se prepara al calentar de manera controlado nitrato de amonio hasta los 250°C , el cual se descompone en óxido nitroso y vapor de agua^[45]; como muestra la ecuación:



la adición de sales de fosfato favorece la formación de un gas más puro a temperaturas más bajas. Sin embargo, la reacción puede ser difícil de controlar, y terminar en detonación.^[46]

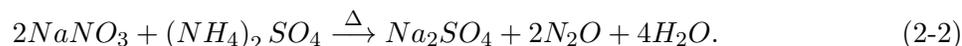
Propiedad	Valor
Peso Molecular	44.013 g/mol ^[41]
Densidad	1.22 g/cm^3 (a $-91.1\text{ }^{\circ}C$) ^[43]
Punto de Fusión	$-88.3\text{ }^{\circ}C$ (a 760 mmHg) ^[43]
Punto de Ebullición	$-91.1\text{ }^{\circ}C$ (a 760 mmHg) ^[43]
Potencial de Ionización	12.89 eV ^[43]
Solubilidad en Agua	0.1 % (a $25\text{ }^{\circ}C$) ^[44]
Solubilidad	Etanol, Éter Etilico ^[44]

Tabla 2-1: PROPIEDADES FÍSICAS DEL N_2O . Se muestran propiedades básicas del óxido nitroso.

Producción en Laboratorios Industriales

Existen varios métodos para sintetizar N_2O en un laboratorio⁴. La descomposición de nitrato de amonio es uno de ellos, como se muestra en la Ec. (2-1).

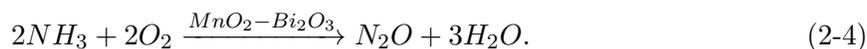
Equivalentemente se puede obtener óxido nitroso, al calentar una mezcla de nitrato de sodio y sulfato de amonio:^[47]



Un método que involucra urea, ácido nítrico, y ácido sulfúrico, es el siguiente^[48]:



La oxidación directa de amoníaco con óxido de bismuto (III) y dióxido de manganeso (IV) como catalizadores es otro de ellos:^[49]

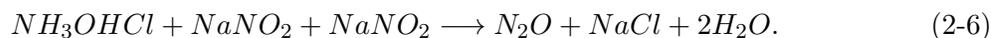


⁴El N_2O con pureza del 99.0% utilizado en el presente trabajo se compró a la empresa proveedora de gases industriales Praxair, Inc.

El ácido hiponitroso se puede descomponer en N_2O y agua, en aproximadamente 16 días a $25^\circ C$, y con un pH desde 1 hasta 3.^[47]



También se puede obtener óxido nitroso por medio de una reacción entre cloruro de hidroxilamonio con nitrito de sodio. Si el nitrito de sodio se añade a la solución, el único subproducto restante es agua salada:^[50]



También se puede obtener al hacer un tratamiento de ácido nítrico con cloruro de estaño, y ácido clorhídrico:^[51]



2.2.2. Reacciones Comunes

Termodinámicamente, el N_2O es una molécula endotérmica⁵, que además es bastante estable. Su descomposición termal se hace evidente por encima de los $873K$:^[52]



Aunque el óxido nitroso no es explosivo por cuenta propia, puede formar mezclas con compuestos orgánicos que sí lo son, tales como el metano, propano, ciclohexano, entre otros. Los estudios acerca del N_2O han contribuido significativamente a un mejor entendimiento de los mecanismos de activación de los alcanos inferiores⁶.^[53–55]

El óxido nitroso es usado como un *método de oxidación* de compuestos orgánicos y zeolitas, tomando el papel tanto de oxidante como de catalizador. Por ejemplo, para obtener el fenol a

⁵Con $\Delta H_{f,298} = 82.1 kJmol^{-1}$.

⁶Alcanos con menos de 9 carbonos.

partir de benceno por oxidación se podría hacer la siguiente reacción:



Sin embargo, los intentos de llevar a cabo esta reacción han fallado, pues la interacción con el O_2 conlleva a la destrucción del núcleo aromático y de la selectividad baja del fenol.^[52] No obstante, la oxidación puede realizarse al usar N_2O :



que muestra una mejor selectividad que el proceso anterior.^[56]

2.2.3. Principales Aplicaciones

Uso Recreativo

Desde su descubrimiento en 1772 por Joseph Priestly, el estudio de óxido nitroso ha sido de interés.^[57] Alrededor de 1799 los ingleses de clase alta hicieron uso del óxido nitroso como droga recreativa, con el propósito de causarse euforia y pequeñas alucinaciones. Las reuniones donde se hacía uso de esta sustancia con ese fin eran conocidas como 'fiestas de gas de la risa' (*laughing gas parties*). Además, debido al aumento de disponibilidad de esta sustancia, a partir del siglo XIX, el uso recreativo aumentó alrededor del mundo, registrándose en 2014, que en el Reino Unido más de medio millón de jóvenes la usaron en fiestas y festivales.^[58]

Medicina

El N_2O ha sido usado en el cuidado dental y la cirugía, como anestésico⁷ y analgésico⁸ desde 1844.^[59] Sin embargo, el óxido nitroso es un anestésico general muy débil, por ello no se suele usar solo, sino como gas portador (mezclado con oxígeno) para anestésicos más potentes como

⁷Esta práctica es menos común en la actualidad, pero en algunos países, se usa como relajante durante el parto [60].

⁸Resultados preliminares indican que el óxido nitroso puede ser usado como medicamento para pacientes con depresión resistentes al tratamiento usual [61].

el sevoflurano o el desflurano. No obstante, el uso de esta sustancia incrementa el riesgo de náusea y vómito después de una operación.^[62,63]

Motores

En automóviles, un motor de óxido nitroso⁹ es aquél en el que el oxígeno requerido para la combustión se toma de la descomposición del N_2O en lugar del oxígeno del aire. Este sistema aumenta la potencia de salida del motor de combustión interna al permitir que la quema de combustible se realice a una velocidad mayor a la normal, debido a la alta presión parcial del oxígeno inyectado en la mezcla de combustible.

El óxido nitroso también puede ser usado como oxidante en motores de cohete. Su uso es ventajoso sobre otros oxidantes debido a su estabilidad a temperatura ambiente, puede ser almacenado más fácilmente y transportado de manera relativamente más segura en un vuelo.^[64]

En una patente de 1914, el estadounidense pionero en cohetes, Robert Goddard, sugirió al óxido nitroso y a la gasolina como posibles propulsores para un cohete de combustible líquido. El N_2O ha sido el oxidante de preferencia en varios diseños híbridos de cohete¹⁰. La combinación del óxido nitroso con combustible de polibutadieno terminado en hidroxilo ha sido usado por el SpaceShipOne¹¹, entre otros. Además también es usado por los aficionados a la cohetaría de alta potencia junto con varios plásticos como combustible.^[65] Y puede ser usado en cohetes de monopropulsión, pues en presencia de un catalizador caliente, el N_2O se descompone exotérmicamente en nitrógeno y oxígeno a una temperatura de $577^\circ C$.^[66]

Aerosoles

El N_2O está aprobado para su uso como aditivo de alimentos, en su forma gaseosa, específicamente como propulsor de aerosol. Sus usos más comunes, en este contexto, son en envases para crema, aerosoles para cocinar, y como gas inerte con el fin de inhibir el crecimiento bacteriano

⁹Este tipo de motor es usado en vehículos de carreras, y suele conocerse como motor 'nitro'.

¹⁰Aquellos que usan combustible sólido con un líquido o un gas.

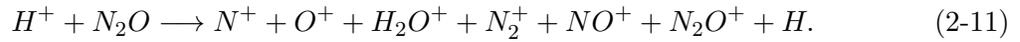
¹¹Este avión propulsado por cohete de vuelo espacial suborbital con capacidad de alcanzar velocidades de $900m/s$, actualmente se encuentra en el Museo Nacional Aéreo y Espacial (*National Air and Space Museum*) de Estados Unidos.

al llenar paquetes de papas fritas y otros aperitivos similares.^[67]

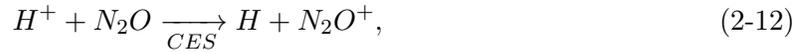
2.3. Fragmentación

2.3.1. Fragmentos

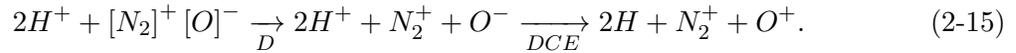
En colisiones para energías menores a $30keV$ donde el proyectil es el ion H^- , y un sistema de detección por TOF, los fragmentos generados por la colisión con N_2O , son los iones: N^+ , O^+ , H_2O^+ , N_2^+ , NO^+ , y N_2O^+ .^[68] Por lo que se espera que en una colisión donde el proyectil es un ion positivo de hidrógeno, y el blanco óxido nitroso, genere los mismos fragmentos y sólo cambien las fracciones de éstos:



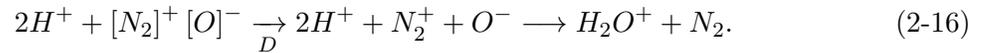
Particularmente para los iones H^+ se puede tener una captura electrónica simple (CES):



distintos tipos de disociación (D) con doble captura electrónica (DCE), en función del tipo de enlace del óxido nitroso:



Además en el proceso de la ec. (2-15), en lugar de presentarse doble captura electrónica, también puede ocurrir una reacción:



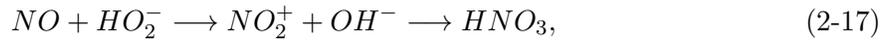
2.3.2. Afectaciones Directas Causadas por los Fragmentos

Dado que el nitrógeno atómico y el oxígeno atómico¹², son átomos muy reactivos, reaccionando rápidamente para formar: nitrídos y nitrógeno molecular, enlaces con las moléculas de su alrededor¹³, respectivamente; las afectaciones directas causadas por estos fragmentos son mínimas.^[69,70]

Las afectaciones causadas por las moléculas N₂ y H₂O también son mínimas. La molécula de nitrógeno constituye el 78.08 % del volumen del aire, y al tratarse de un gas inerte, no suele reaccionar con otras sustancias. Además, la molécula de agua, que constituye aproximadamente el 1 % del volumen del aire, solo es responsable de la humedad del mismo y de la formación de nubes¹⁴.^[74]

2.3.3. Afectaciones Causadas por el Óxido Nítrico

El óxido nítrico (NO) puede reaccionar con el radical hidropéroxido (HO₂⁻) para formar dióxido de nitrógeno (NO₂⁺), el cual al reaccionar con un radical hidroxilo (OH⁻) produce ácido nítrico (HNO₃):



que junto con el ácido sulfúrico (H₂SO₄), producen lluvia ácida.

También el óxido nítrico puede transformarse en dióxido de nitrógeno (NO₂), al reaccionar con HO₂⁺ u O₂. La exposición a corto plazo con el NO₂ incluye síntomas como náusea, disnea, y dolor de cabeza; a largo plazo los efectos incluyen función inmune y respiración deteriorada.

Por otra parte el NO participa en la degradación de la capa de ozono (O₃). En este proceso, el óxido nítrico reacciona con el ozono estratosférico para formar O₂ y NO₂:



¹²Denotado O(3P).

¹³Por encima de la capa de ozono, la presencia de radiación ultravioleta forma una atmósfera en la órbita terrestre baja (*Low Earth Orbit*), donde el 96 % del oxígeno se encuentra en su forma atómica [71-73].

¹⁴Los porcentajes de concentración en el aire son del año 2004.

Sin embargo, esta reacción se usa para medir concentraciones de NO en volúmenes de control.^[75]

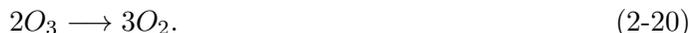
2.4. Afectaciones Causadas por el Óxido Nitroso

La capa de ozono en la estratósfera, protege a los humanos y al mundo biológico de la radiación ultravioleta dañina del sol. La degradación de esta capa se atribuye principalmente a emisiones de químicos halogenados. Entre estos destacan los clorofluorocarbonos (*CFC*) y a productos químicos bromados. El protocolo de Montreal en sustancias que degradan la capa de ozono, de la convención de Vienna, regula una amplia variedad de químicos que contribuyen a la degradación. Sin embargo, el N_2O ¹⁵ no se encuentra entre ellos, por ello es necesaria la investigación acerca de este compuesto, con el fin de entender mejor su comportamiento para tomar acción en la disminución de emisiones y control sobre la degradación del ozono.^[76,77]

El óxido nitroso tiene un impacto ambiental negativo. Pues se ha identificado como la sustancia emitida más potente que degrada la capa de ozono en el siglo XXI. Esto debido a que aproximadamente 20 %¹⁶ del N_2O que llega a la estratósfera reacciona con el oxígeno atómico para formar óxido nítrico¹⁷:



el cual, como puede verse en la ec. (2-18), al interactuar con el ozono reaccionan en oxígeno molecular y dióxido de nitrógeno; obteniendo una reacción neta sobre el ozono tipo:^[78–81]



Además, se trata de un gas invernadero muy efectivo. La actividad humana contribuye significativamente a las emisiones del N_2O , y a su vez, al incremento de la concentración de éste en

¹⁵Es interesante que el planeta Tierra es el único del sistema solar que se conoce que contenga N_2O en su atmósfera. Esto se atribuye a la presencia de vida en la Tierra y a los ciclos biológicos de los compuestos nitrogenados.

¹⁶El otro 80 % se descompone por fotólisis en nitrógeno molecular (N_2) y oxígeno atómico (O) [82].

¹⁷La mayoría del NO presente en la estratósfera es producido por la reacción de la ec. (2.19).

la atmósfera. También, el uso extensivo de fertilizantes fomenta la formación del óxido nitroso durante la nitrificación y denitrificación enzimática. Y existen procesos industriales donde el N_2O es un producto secundario.^[83–85]

Capítulo 3

Dispositivo Experimental: El Acelerador

El desarrollo del experimento que condujo a la obtención de los espectros de tiempo de vuelo del óxido nítrico, se llevó a cabo en un colisionador lineal. Este dispositivo está diseñado para acelerar iones positivos dentro del intervalo de energías de 1 a 10 *keV*.¹

Los elementos de mayor importancia del acelerador son: un *cañón de iones*², y una *cámara de reacción*. En el cañón de iones se encuentran: la fuente de iones, las lentes electrostáticas, y el filtro de velocidades. En la cámara de reacción se introduce el blanco³, y se efectúan las colisiones. Además se cuentan con zonas de detección, destinadas a la selección y conteo de los fragmentos derivados del haz, y una exclusiva para el análisis de los cationes generados a partir de blanco; así como componentes destinadas a la regulación y monitoreo de la presión a lo largo del acelerador.

A continuación se describirá la estructura del acelerador, y los procedimientos llevados a cabo, desde la generación del haz de iones, hasta la adquisición de resultados experimentales.

¹Este dispositivo se encuentra en el *Taller de Colisiones* (antes *Taller de Física Moderna*) en el edificio *Tlahuizcalpan* de la Facultad de Ciencias, UNAM. Construido bajo la dirección de la Dra. Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga en colaboración con el Dr. Farook Bashir Yousif.

²Tipo Colutron, modelo G1.

³En el presente experimento *aire* y *óxido nítrico*.

3.1. El Haz de Iones

A lo largo del acelerador se siguen diferentes etapas: la generación del haz de iones, la aceleración y enfoque del haz, la selección del tipo específico de partículas con las que se realizarán las colisiones, y la incidencia del haz en la región donde se llevarán a cabo los impactos sobre el blanco de interés. La resolución de los datos obtenidos es sensible a varios parámetros⁴ que varían en función de la energía de aceleración; éstos afectan en la estabilidad, intensidad, y enfoque del haz.

La generación de iones se obtiene mediante una descarga en arco por una fuente de nitruro de boro (BN) al introducir una mezcla de hidrógeno molecular (H_2) y argón (Ar) en su interior, véase fig. 3-1. La descarga se inicia al aplicar una corriente continua de 12 A aproximadamente⁵ al filamento de tungsteno de la fuente, esto provoca emisión de termoelectrones, y estos se aceleran hacia el ánodo al aplicar un voltaje de alrededor de los 90 V⁶.^[88] Los electrones acelerados, al incidir sobre la mezcla de gases, generan distintas especies iónicas; en el presente trabajo se emplearon H^+ , H_2^+ , H_3^+ , Ar^+ . Debe notarse que: sin el uso del Ar no se tendría una descarga suficientemente intensa como para generar plasma^[89]; y que los protones se obtienen del H_2 .

3.1.1. Lentes de Einzel

Después de la generación de los iones por la fuente estos se extraerán, acelerarán, y enfocarán mediante un conjunto de lentes electrostáticas conocido como lentes de Einzel⁷. Estas lentes constan de un arreglo de tres electrodos cilíndricos concéntricos; el primero y tercero tienen la función de acelerar los iones mediante un voltaje de aceleración (V_a) con energías entre 1 y 10 keV, y el segundo se encarga de enfocar los iones con un voltaje de enfoque (V_e) que opera entre 4/5 y 9/10 del voltaje de aceleración, véase fig. 3-2.^[90,91]

⁴Estos parámetros se describirán posteriormente.

⁵El voltaje necesario para obtener la descarga es función del tipo de gas en el interior, así como la presión del mismo [86, 87].

⁶La corriente de descarga varía entre los 100 y 350 mA, en función de la proporción entre el H_2 y el Ar en la mezcla.

⁷Del alemán *Einzellinse* que significa: lente única [91].

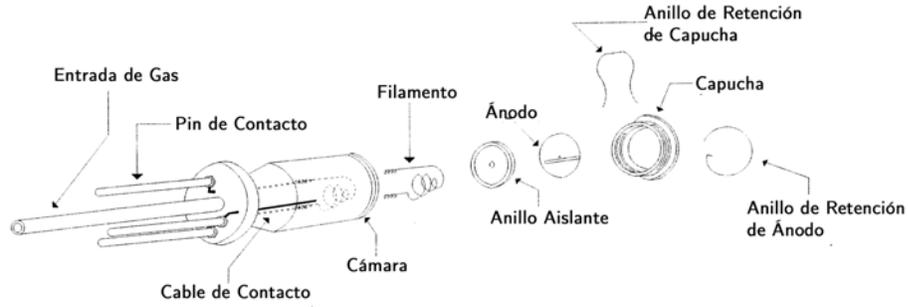


Figura 3-1: FUENTE DE IONES. Fuente de iones Colutron Modelo 101, presentando sus distintas componentes.

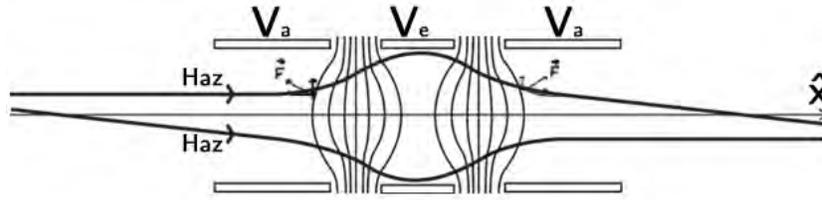


Figura 3-2: DIAGRAMA DE LA TRAYECTORIA DE LOS IONES A TRAVÉS DE LAS LENTES DE EINZEL. El primer y tercer electrodos (V_a) se encargan de acelerar a las partículas del haz en dirección \hat{x} , el segundo electrodo (V_e) redirecciona los iones y evita que se dispersen.^[90]

3.1.2. Filtro de Velocidades Tipo Wien

La selección de los iones que impactarán con el blanco se logra a partir de un filtro de velocidades tipo Wien, véase fig. 3-3. El filtro consta de un par de electroimanes que generan un campo magnético $\vec{B} = B\hat{z}$; y un par de placas electrostáticas que generan un campo eléctrico $\vec{E} = E\hat{y}$. Considerando que los iones viajan con una velocidad $\vec{v} = v\hat{x}$, y que la interacción de los campos \vec{B} y \vec{E} es nula sobre los iones de carga q a seleccionar, por la expresión de la fuerza de Lorentz se tiene:

$$\vec{F} = q \left[\vec{E} + (\vec{v} \times \vec{B}) \right] = q [E\hat{y} + vB(\hat{x} \times \hat{z})] = q(E - vB)\hat{y} = 0, \quad (3-1)$$

entonces:

$$v = \frac{E}{B}, \quad (3-2)$$

es decir, los campos desvían al haz a menos que la velocidad de las partículas cumplan con la ec. (3-2)⁸. Además para que E/B sea constante en la región central del filtro⁹, éste está diseñado para que obedezcan la misma dependencia espacial.^[92,93]

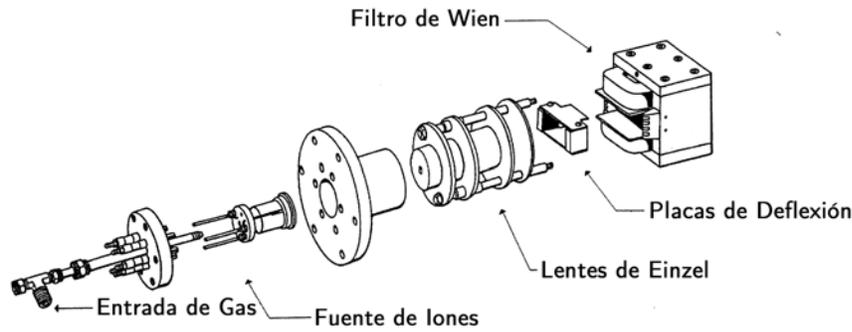


Figura 3-3: DIAGRAMA DEL CAÑÓN DE IONES (INTERIOR). Zona del acelerador encargada de la generación del haz, hasta la selección de partículas con las que se llevarán a cabo las colisiones. A partir del gas entrante, se genera el haz en la fuente, posteriormente se enfoca con las lentes de Einzel, y finalmente se seleccionan las partículas con el filtro de velocidades.

Por conservación de la energía:

$$\frac{1}{2}mv^2 = qV_a, \quad (3-3)$$

donde m es la masa de las partículas seleccionadas. Además se tiene:

$$B = ki_m - B_0, \quad (3-4)$$

⁸Los iones que no cumplan con esta expresión impactarán con el acelerador al ser desviados, y se perderán.

⁹Donde se espera que pase el haz.

donde i_m es la corriente inducida en los electroimanes, B_0 la magnetización de los electroimanes, y k la constante de proporcionalidad¹⁰ entre i_m y B ; y que:

$$E = \frac{V_f}{d}, \quad (3-5)$$

donde V_f es el voltaje aplicado a las placas electrostáticas del filtro (voltaje de deflexión), y d la distancia entre placas¹¹.

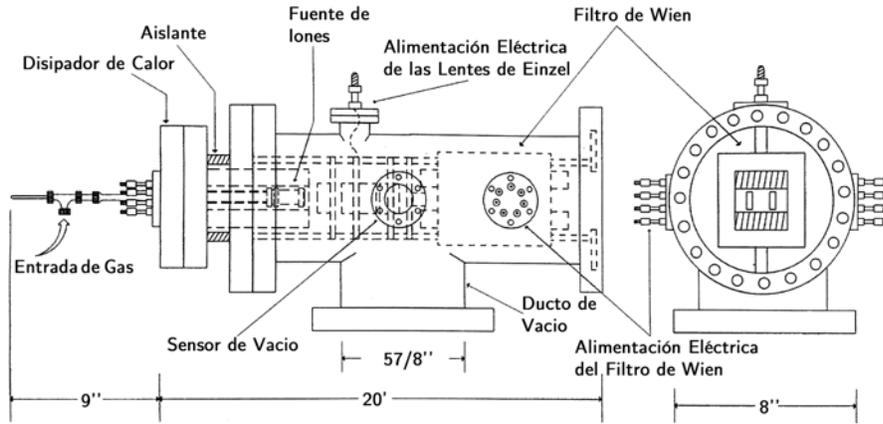


Figura 3-4: DIAGRAMA DEL CAÑÓN DE IONES (EXTERIOR). Se muestra un diagrama exterior lateral del cañón de iones, con sus respectivas medidas en pulgadas. Las líneas punteadas indican que se encuentra en el interior del cañón.

Sustituyendo la ec. (3-2) en (3-3), para obtener la relación masa-carga, se tiene:

$$\frac{m}{q} = 2 \frac{V_a}{v^2} = 2V_a \frac{B^2}{E^2}; \quad (3-6)$$

sustituyendo (3-4) y (3-5) en (3-6):

$$\frac{m}{q} = 2V_a \left(\frac{ki_m d}{V_f} \right)^2, \quad (3-7)$$

¹⁰Esta constante se obtiene mediante una caracterización previa, véase el siguiente capítulo.

¹¹Esta distancia está dada por el fabricante ($d = 1.78 \text{ cm}$) [93, 94].

definiendo:

$$C_{Wien} = 2 (dk)^2, \quad (3-8)$$

como la constante de geometría del filtro, que al sustituir en (3-7), se obtiene:

$$\frac{m}{q} (V_a, V_f, i_m) = C_{Wien} V_a \left(\frac{i_m}{V_f} \right)^2, \quad (3-9)$$

es decir, la relación masa-carga como función de V_a , i_m , y V_f . Particularmente dado un voltaje de aceleración V_a , se pueden ajustar los parámetros del filtro de velocidades, i_m y V_f , para permitir el paso de una sola especie de iones, aquéllos con los que se efectuarán las colisiones. Se muestran dos diagramas del cañón de iones en fig. 3-4 y fig. 3-5.

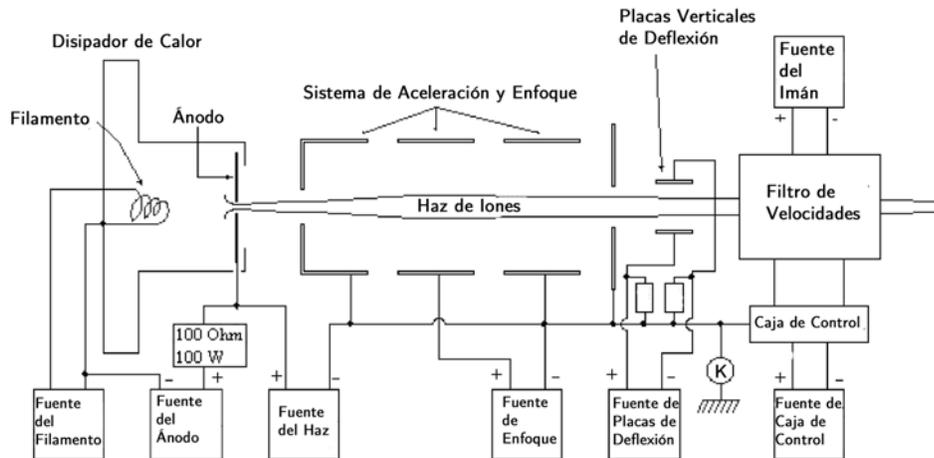


Figura 3-5: DIAGRAMA DE CONEXIONES DEL CAÑÓN DE IONES. Se muestran las conexiones básicas necesarias para hacer funcionar el cañón de iones. Bajo una operación normal, el sistema estará conectado a tierra por el punto K .

3.1.3. Placas de 10°

Al salir del filtro de velocidades, los iones son desviados 10° de su dirección original mediante un par de placas electrostáticas verticales; a éstas se les aplica un voltaje, V_{10° , de alrededor de $170 V$ por cada kV del V_a . Al desviar los iones se impide que los fotones, también generados

por la fuente, alcancen la zona de reacción; así, se evita que interactúen con las partículas del blanco, y por tanto que interfieran con los resultados de la detección. Además de afectar el funcionamiento de los detectores.

3.1.4. Colimado del Haz

Después de las placas de 10° , el haz se colima mediante dos discos circulares concéntricos con aperturas de 2 mm cada uno, y separados aproximadamente 43 cm antes de ingresar a la zona de reacción. En el interior del acelerador es necesario un alto vacío para evitar que los iones interactúen con las partículas residuales del aire¹². En total los iones viajan 130 cm aproximadamente desde que se generan en la fuente, hasta que impactan con el blanco; esto, aunado al vacío inducido, es suficiente para que el camino libre medio de los iones, l , sea del orden de 10 veces más el tamaño del acelerador¹³.^[11]

3.2. Zona de Reacción

La zona o cámara de reacción es la región del acelerador donde se efectúan las colisiones, aquí es donde se introduce el gas de interés (el *blanco*¹⁴). La cámara de reacción cuenta con un arreglo de placas electrostáticas llamado *sistema de tiempo de vuelo*.

El blanco se introduce por la parte superior y en dirección vertical a la zona de reacción, mediante el flujo generado por la diferencia de presiones entre el tanque contenedor del gas y el interior del acelerador. La cantidad de partículas entrantes se controla por medio de una válvula, que es monitoreada por un sensor de presión. Para asegurar que las colisiones se realicen dentro del régimen de colisión simple, la válvula se abre de manera que la presión en la cámara sea del orden de $1 \times 10^{-5}\text{ Torr}$ ¹⁵.

¹²Este vacío se induce mediante: dos bombas mecánicas, encargadas del *vacío primario*, de alrededor de 10^{-2} Torr ; y dos bombas turbomoleculares, encargadas del *vacío secundario*, cercano a los 10^{-7} Torr . El funcionamiento de las bombas de vacío se describe en el Apéndice A.

¹³Pues el camino libre medio es inversamente proporcional a P . Además, se se considera a las moléculas como esferas de radio r , $l = k_B T / (\sqrt{8}\pi P)$, donde: $\pi = 3.1415\dots$, k_B la constante de Boltzmann, y T la temperatura absoluta del sistema [95].

¹⁴En el presente trabajo se trata de N_2O .

¹⁵Considerando que la presión residual se encuentra entre 2×10^{-7} y $1 \times 10^{-6}\text{ Torr}$ [11].

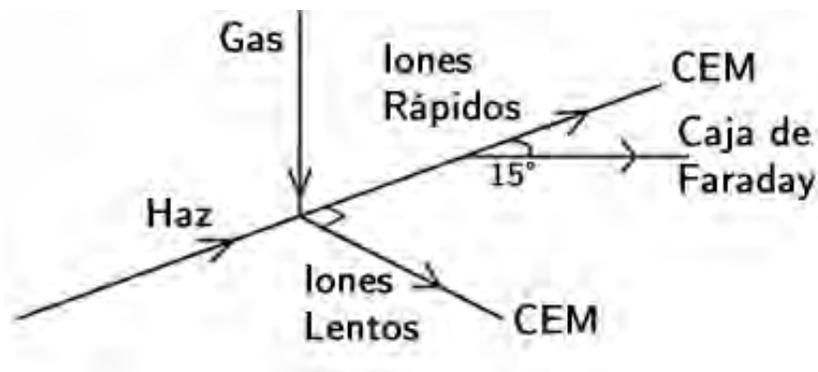


Figura 3-6: ESQUEMA DE LA CÁMARA DE REACCIÓN. La inyección del blanco se realiza utilizando una aguja hipodérmica metálica de 2 mm de diámetro aproximadamente, colocada a cerca de 3 mm por encima de la línea trazada por el haz de iones.

3.2.1. Sistema de Tiempo de Vuelo

El *sistema de tiempo de vuelo* está formado por tres¹⁶ placas cilíndricas, y un tubo de enfoque. El conjunto de placas se encarga de acelerar los fragmentos derivados de las colisiones con el blanco en dirección ortogonal al haz (véase fig. 3-6, y fig. 3-7), donde se detectarán, y posteriormente se obtendrán los *espectros de tiempo de vuelo*.

3.3. Análisis de Fragmentos

Las colisiones entre el haz y el blanco llevan a distintos tipos de interacciones, y por lo tanto los fragmentos resultantes son de especies diferentes. Los fragmentos pueden clasificarse en dos categorías¹⁷: iones rápidos, y iones lentos. Los *iones rápidos* son los fragmentos resultantes formados a partir del haz; éstos se caracterizan por tener prácticamente la misma velocidad que el haz. Los *iones lentos* son los fragmentos generados a partir del blanco; éstos permanecen como residuales en la zona de reacción. También pueden generarse *fotones* como resultado de la colisión, que son consecuencia de las transiciones entre los niveles energéticos de las moléculas del gas de interés.

¹⁶En el presente trabajo se utilizarán sólo dos de ellas.

¹⁷Aunque estas son las categorías principales, existe la probabilidad de que haya doble captura electrónica, pero en el régimen de energías del presente trabajo ésta es casi nula.

3.3.1. Iones Rápidos

Para los iones rápidos las partículas generadas a partir del haz (H^+ , H_2^+ , H_3^+) pueden entrar en dos categorías: en las que el estado de carga eléctrica no cambia durante la interacción (H^+ , H_2^+ , H_3^+ , respectivamente), y aquellas en la que los iones del haz capturan un electrón del blanco y se neutralizan (H^0 , H_2^0 , H_3^0 , respectivamente).

Detector Multiplicador de Electrones

El detector multiplicador de electrones (CEM, por su acrónimo en inglés, *Counter Electron Multiplier*) se encarga de monitorear las partículas neutras, y se coloca en la dirección del haz en ausencia de blanco. El CEM genera una corriente eléctrica, por cascada electrónica, cuando una o varias partículas inciden sobre él, permitiendo el conteo de partículas neutras formadas durante las colisiones (H^0 , H_2^0 , H_3^0) por unidad de tiempo.^[96]

Caja de Faraday y Placas Verticales Paralelas

La caja de Faraday se encarga del monitoreo de las partículas cargadas. Esta mide la corriente absoluta debida a los iones positivos (H^+ , H_2^+ , H_3^+). Además, el arreglo cuenta con un par de placas verticales paralelas cuya función es la de desviar a las partículas cargadas hacia la caja de Faraday. La caja está colocada posteriormente a las placas, a aproximadamente 15° respecto al eje del haz incidente. Se encontró que el voltaje que se debe aplicar a las placas para optimizar la corriente registrada en la caja es de alrededor de 240 V por cada keV de energía del haz.

El número de partículas registradas por el CEM sumado con el de las partículas incidentes en la caja de Faraday debería coincidir, en principio, con el número inicial de partículas que conforman al haz. Y, de ser así, de manera indirecta se pueden normalizar las CS relativas para obtener las CS absolutas¹⁸.

¹⁸Sin embargo, no se conoce la curva de eficiencia del CEM para las especies de iones de interés (H^+ , H_2^+ , H_3^+) en función de la energía de aceleración.

3.3.2. Iones Lentos, Espectros de Tiempo de Vuelo (TOF)

Los iones lentos generados a partir del blanco, que prácticamente se encuentran en reposo después de las colisiones, son acelerados en dirección ortogonal a la del haz incidente y a la del flujo del blanco, hacia un CEM conectado a una tarjeta espectrométrica multicanal¹⁹, mediante tres discos concéntricos de 7 cm de diámetro con aperturas de 1 cm y una lente cilíndrica hueca.

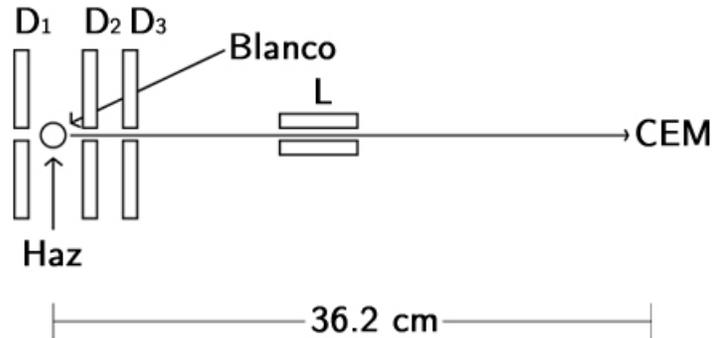


Figura 3-7: ESQUEMA DEL SISTEMA DE TIEMPO DE VUELO. Los discos son denotados por D₁, D₂, y D₃; y la lente por L; y estos están hechos de acero inoxidable. Entre las aperturas de los discos se encuentra una retícula cuadrangular de cobre cuyo fin es el de homogeneizar el campo eléctrico.

Mediante la aplicación de distintos voltajes a los discos y a la lente, una gran parte de los fragmentos generados se pueden acelerar y enfocar al centro del CEM²⁰. En el disco D₁ se aplica un voltaje pulsado V₁; mientras que en D₂, D₃, y L se aplican voltajes continuos V₂, V₃, y V_L respectivamente (véase fig. 3-7). Estos parámetros se eligen de manera que la nitidez de los espectros obtenidos sea la mayor posible.

Para separar a los fragmentos de acuerdo a su razón masa-carga (m/q) y con ello obtener los espectros de TOF, es necesario que el voltaje V₁ sea pulsado²¹. Esto se logra al acelerar los iones durante un intervalo temporal t_0 , suficientemente corto para que el tiempo T , que tardan en ser

¹⁹Modelo MCS-32. La tarjeta realiza escaneos con aperturas temporales de 100 ns en cada uno de los hasta 64000 canales utilizados. Véase apéndice C.

²⁰Esto en gran medida a la geometría del arreglo.

²¹Esto se logra al transformar el voltaje inicial continuo en un pulso cuadrado, mediante una fuente generadora de pulsos, además, las características de este pulso pueden variarse con un generador de funciones.

detectados, sea mayor. El tiempo T , en el que los iones hacen su recorrido desde su generación hasta la incidencia en el detector, es conocido como su *tiempo de vuelo*.^[17] El voltaje V_1 se sincroniza con el inicio de la adquisición de la tarjeta multicanal, de forma que el tiempo de detección coincida con el tiempo real T ; como para todos los fragmentos el voltaje aplicado es el mismo, la aceleración adquirida por los iones dependerá de su relación m/q , por tanto su tiempo de vuelo será diferente al de las otras especies de iones, de esta forma las señales estarán bien definidas en ciertos canales, y se formará un espectro de TOF.

Los iones generados durante t_0 serán registrados, y hasta la formación de un nuevo pulso, los residuos de las colisiones se dispersarán de manera aleatoria y no habrá conteo neto de ellos. ^[11] El proceso de adquisición de datos comenzará nuevamente, después de un tiempo suficientemente largo en el que los fragmentos generados por el pulso son recolectados, al aplicar nuevamente un voltaje.

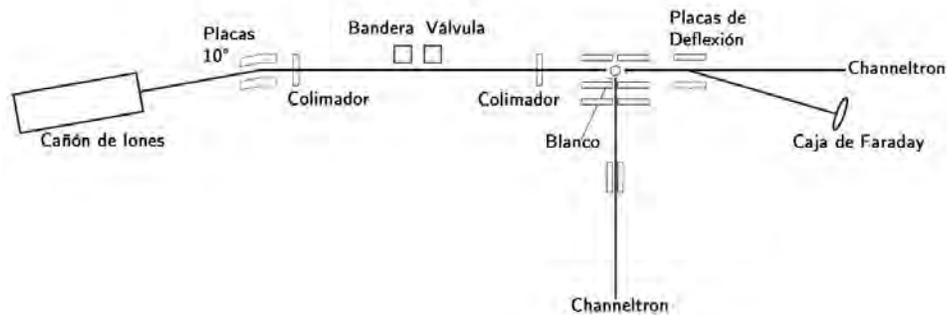


Figura 3-8: DIAGRAMA DEL ACELERADOR. Se muestran los elementos del acelerador, desde el cañón de iones hasta las zonas especializadas en la detección de iones rápidos y lentos.

La diferencia de tiempos de vuelo entre los iones pesados y ligeros, conduce a que en las gráficas de los espectros de TOF, cada uno de los componentes (picos) se asocia a una especie particular de iones; y la intensidad de cada uno de ellos²² se relacionará directamente con el número de un tipo específico de iones detectados.

Hay cuatro parámetros que intervienen directamente con la ubicación de los máximos en los

²²Área bajo la curva.

espectros de TOF: la intensidad del voltaje pulsado V_1 , la duración t_0 y la frecuencia ν del pulso, y el voltaje aplicado a la lente V_L .

La identificación de los fragmentos se logra al encontrar la relación entre m/q de la partícula y su tiempo de vuelo T . Esto se logra con el cálculo directo, en una forma simplificada, de la situación electrostática.

Después de la obtención de los espectros de TOF se realiza la identificación de los fragmentos de distintas especies en su espectro característico y se evalúa su intensidad. El área bajo la curva de cada uno de los máximos se divide entre la corriente de la caja de Farada (i_F) y la presión en la cámara de reacción (P_B) medida durante la toma de datos, para cierta energía de colisión E . De esta manera se obtienen las CS relativas asociadas a cada proceso en el que se forman los iones. Un diagrama del acelerador se muestra en la fig. 3-8.

Capítulo 4

Pruebas Preliminares y Condiciones Experimentales

En la realización de experimentos es de vital importancia que los dispositivos experimentales involucrados, ya sea de forma directa o indirecta, en la adquisición de datos se encuentren en condiciones tales que la operación de los mismos inicie y termine adecuadamente. Para ello se deben conocer los parámetros del dispositivo, y de ser posible caracterizarlos, pues la fiabilidad de los resultados experimentales obtenidos en gran medida dependerán de ellos.

A continuación se presentarán distintas pruebas realizadas sobre el dispositivo experimental, y algunas caracterizaciones¹.

4.1. Pruebas de Vacío

Antes de realizar caracterizaciones u obtención de datos experimentales, se debe de verificar que la inducción de vacío en el interior del acelerador es la correcta. Para ello se vierte alcohol en las uniones del acelerador (disipador de calor, entradas de gas, placas de 10° , etc.) y se observa si no hay cambios drásticos en la presión marcada por alguno de los sensores. En caso de que sí haya fugas, se procede a apretar los tornillos o tuercas correspondientes y se repite la prueba.

¹Las caracterizaciones del presente trabajo se realizaron para un único voltaje de aceleración (5 keV).

Pese a que no se notaron fugas en las uniones del acelerador, se observó que la inducción de vacío primario era muy lenta, como puede notarse en la tabla 4-1, por lo que se procedió a abrir

Hora $\pm 0 : 02$	Presión ± 5 (<i>mTorr</i>)
11:38	380
11:58	260
12:20	230
12:33	170
13:24	138

Tabla 4-1: PRESIÓN INDUCIDA POR LAS BOMBAS MECÁNICAS. Se muestra la hora del día y la presión marcada por el sensor, durante un funcionamiento continuo de las bombas mecánicas.

el acelerador y buscar al problema causante. Se encontró limadura de acero en la tercera lente de Einzel, y se limpió. Además la capucha de nitruro de boro se estranguló por su anillo de retención, la fuente fue reemplazada.

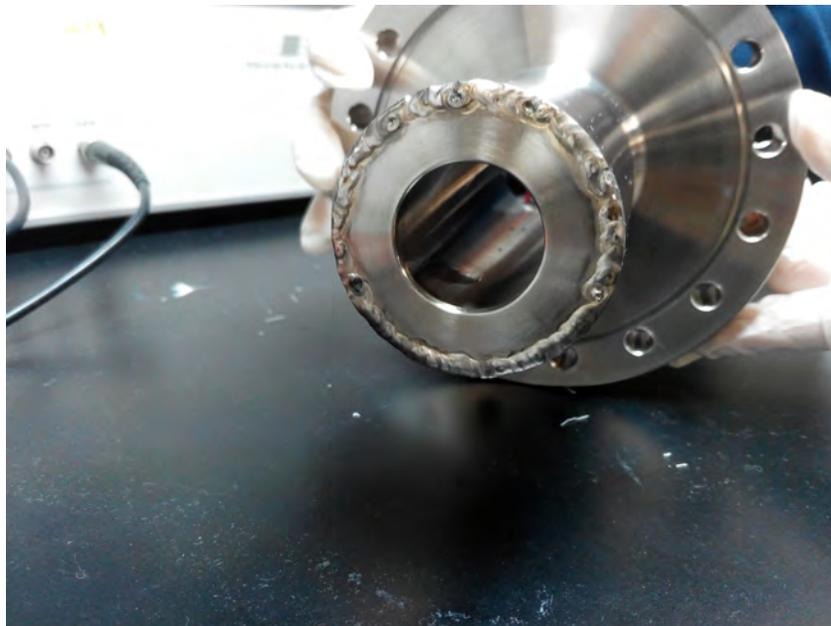


Figura 4-1: DISIPADOR DE CALOR. Se muestra el disipador de calor o *Heat Sink*, la reparación de la fuga se realizó con soldadura de acero.

Se realizaron nuevamente las pruebas de fuga en las uniones del acelerador y no se encontró ninguna, por lo que se procedió a inducir vacío. En esta ocasión la inducción del vacío secundario era lenta, sin embargo, se aplicó corriente al filamento. Se obtuvieron los resultados mostrados en la tabla 4-2. La corriente en el filamento cayó a 0 A debido a que este se rompió, pues el

Hora $\pm 0 : 02$	Presión $\pm 0.05 (\times 10^{-5} Torr)$	Corriente del Filamento $\pm 0.5 (A)$
11:40	2.3	1
11:46	2.3	2
12:46	2.3	3
13:39	2.3	4
13:43	2.1	5
13:48	2.2	6
14:07	2.2	7
14:20	2.2	8
14:26	2.1	9
14:32	2.1	10
14:52	1.5	10
15:12	1.4	11
15:25	1.5	12
15:30	1.5	15
15:55	2.4	17
15:56	2.4	0

Tabla 4-2: PRESIÓN INDUCIDA POR LAS BOMBAS TURBOMOLECULARES. Se muestra la hora del día, la presión marcada por el sensor, y la corriente aplicada al filamento, durante un funcionamiento continuo de las bombas turbomoleculares.

filamento de 15 mil sólo soporta corrientes de 12 A; el filamento se sustituyó por uno de 20 mil.^[93]

La lenta inducción de vacío secundario, requirió que se hiciera una prueba de fuga sin colocar la fuente de iones, esta resultó en que el disipador de calor permitía el acceso de agua al interior del acelerador. El disipador de calor se envió a reparar, se aplicó soldadura de acero para cubrir la fuga del mismo, véase fig. 4-1.

Ya con el disipador de calor en correcto funcionamiento y la fuente en el interior del acelerador (véase fig. 4-2), se realizaron las pruebas de fuga siendo éstas satisfactorias, pues se alcanza un vacío del orden de 10^{-6} Torr en menos de una hora, desde que se enciende las bombas mecánicas y posteriormente las turbomoleculares.



Figura 4-2: FUENTE DE IONES. Se muestra la fuente que generó los iones con los que se obtuvieron los resultados experimentales.

4.2. Alineación del Acelerador

Se continuó con la alineación del acelerador. El procedimiento consiste en nivelar el cañón de iones y la cámara de reacción; posteriormente se ajusta la altura entre ambos, a partir de la

zona media², para que sea la misma, véase fig. 4-3.

Se hizo la verificación de que las conexiones interiores del acelerador no obstruyeran la trayectoria del haz. Se encontró que el segundo colimador, aquel que separa la cámara de reacción con la zona media del acelerador, cayó por el ducto de inducción de vacío, sin embargo, este no llegó a la bomba por una malla instalada para evitar estos problemas³. También se hizo la verificación de que las conexiones en la zona de reacción operaran de manera adecuada, y que las etiquetas estuviesen bien colocadas, véase fig. 4-4.

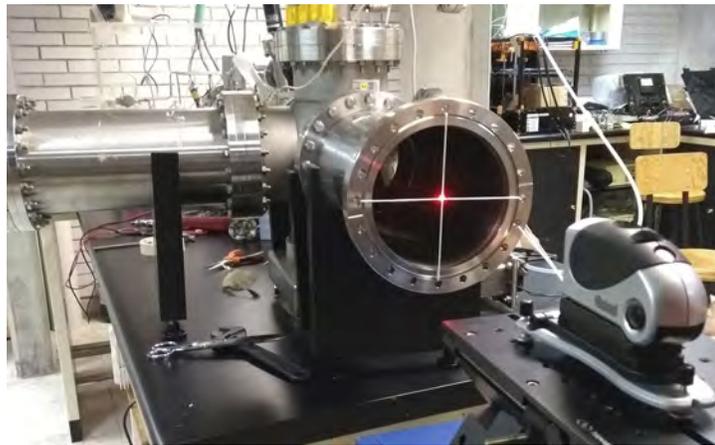


Figura 4-3: ALINEACIÓN DEL ACELERADOR. Se verifica con ayuda de un láser que la trayectoria que siguen los iones desde las placas de 10° hasta el channeltron de partículas neutras es una recta.

Finalmente con la ayuda de un láser se verificó que la trayectoria de los iones desde el filtro de 10° hasta el CEM de partículas neutras siguiese una línea recta.

4.3. Voltaje de Enfoque

Uno de los objetivos de las lentes de Einzel, además de acelerar, es el de aumentar el número de partículas del haz incidentes en la cámara de reacción; el voltaje de enfoque V_e , es el encar-

²Donde se encuentran la Bandera y la Válvula.

³Si la malla no estuviese instalada, el colimador hubiese causado la descompostura de la bomba.

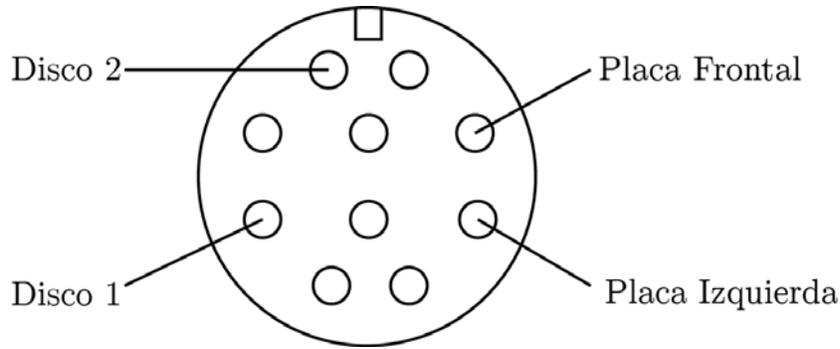


Figura 4-4: DIAGRAMA DEL MULTICONECTOR (HEMBRA). El diagrama muestra la correspondencia entre los orificios del multiconector y el elemento del acelerador con el que hacen conexión. El disco 1, el disco 2, y la placa Izquierda corresponden a D_1 , D_2 , y L , respectivamente (véase fig. 3-7); la placa frontal corresponde con la placa de deflexión (véase fig. 3-8).

gado de redireccionar a aquellos iones que tendieran a dispersarse.

El voltaje de enfoque se caracterizó con la ayuda de la bandera⁴, esta se conecta a un electrómetro digital⁵ para hacer el registro de la corriente de iones. El objetivo de la caracterización es el de encontrar los valores de V_e para los cuales los iones tienen una mayor intensidad y estabilidad. En el régimen de 5 keV de energía de las partículas del haz, se encontraron dos corrientes óptimas; esto permite que al usar alguno de estos voltajes de enfoque, la intensidad de la corriente en la zona de reacción sea óptima, y se obtengan resultados experimentales más exactos, véase fig. 4-5.

4.4. Voltaje de 10°

El voltaje V_{10° se aplica a dos placas verticales paralelas⁶ curvadas para formar una sección cilíndrica de 10° ; las placas se encargan de desviar al haz de iones y evitar que los fotones generados por la descarga en arco lleguen a la zona de reacción.

De manera similar al voltaje de enfoque, se midió la corriente de iones en la bandera, y se encontró un voltaje óptimo. Esto implica que al aplicar dicho voltaje, el haz llegará con una

⁴La bandera es una lámina de cobre de $8 \text{ cm} \times 2 \text{ cm}$, y su posición es variable a lo largo del eje vertical.

⁵Keithley 6485 Picoammeter.

⁶Las placas de 10° están separadas aproximadamente 3 cm entre sí.

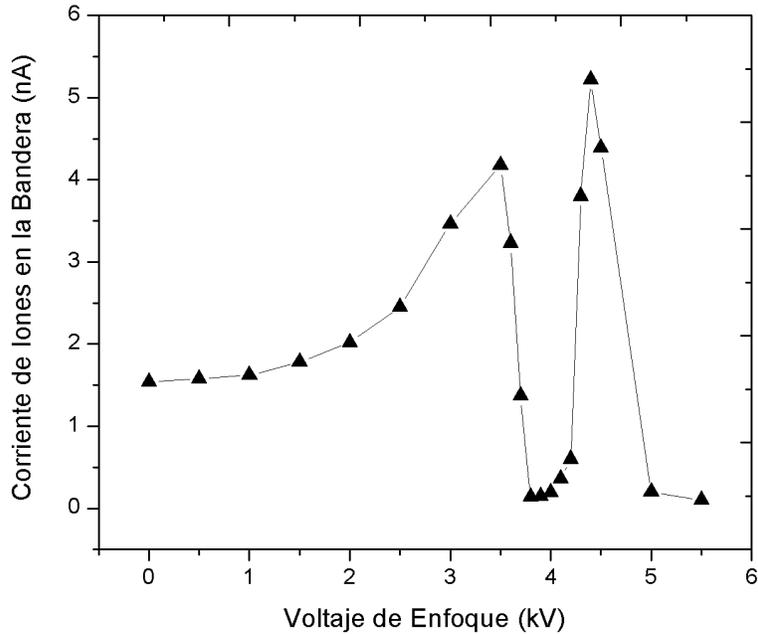


Figura 4-5: CORRIENTE DE IONES EN LA BANDERA COMO FUNCIÓN DEL VOLTAJE DE ENFOQUE PARA UN VOLTAJE DE ACELERACIÓN DE 5 kV . Se pueden observar dos máximos.

depuración óptima de fotones a la zona de reacción, véase fig. 4-6.

4.5. Filtro de Velocidades

La caracterización de los voltajes V_e y V_{10° permite que la intensidad del haz en la cámara de reacción sea óptima. Sin embargo, para que las colisiones contra el blanco sean producidas por una única especie de iones, el filtro de velocidades debe estar caracterizado.

4.5.1. Campo Magnético

Para comenzar con la caracterización del filtro de de Wien es necesario obtener la relación k entre la corriente suministrada al electroimán (i_m) y la intensidad del campo magnético (B) producido, medido con un gaussmetro (punta Hall), véase fig. 4-7.^[97]

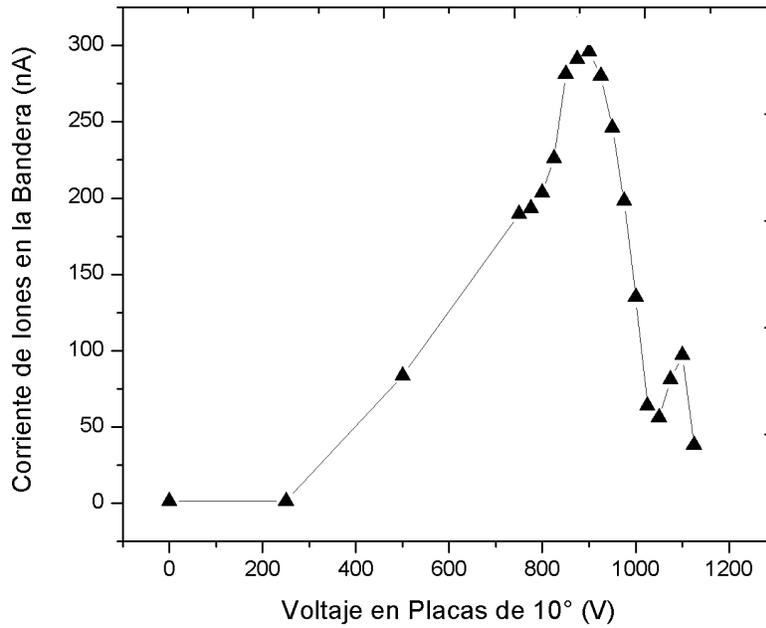


Figura 4-6: CORRIENTE DE IONES EN LA BANDERA COMO FUNCIÓN DEL VOLTAJE DE 10° PARA UN VOLTAJE DE ACELERACIÓN DE 5 kV. Se pueden observar dos máximos m_1 y m_2 . Se muestran dos máximos, uno es el voltaje óptimo principal (el de mayor intensidad), y el segundo es un máximo secundario.

Se realizaron las mediciones pertinentes para un voltaje de aceleración de 5 kV, encontrando un ajuste lineal con un índice de correlación $R^2 = 0.99993$ (véase fig. 4-7):

$$B = 0.029896 \frac{T}{A} i_m - 0.00063T, \quad (4-1)$$

obteniendo una constante de geometría del filtro:

$$C_{Wien} = 5.6636 \times 10^{-7} \frac{m^2 T^2}{A^2}. \quad (4-2)$$

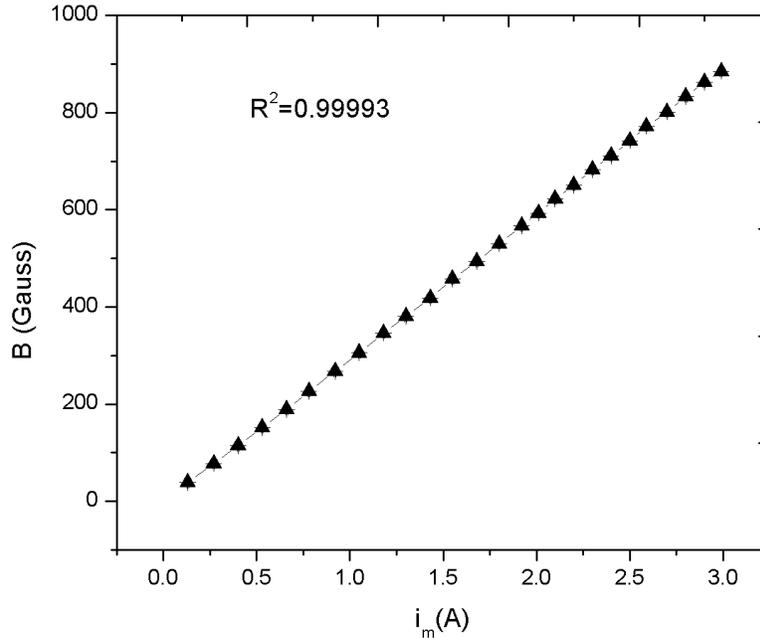


Figura 4-7: INTENSIDAD DE CAMPO MAGNÉTICO COMO FUNCIÓN DE LA CORRIENTE SUMINISTRADA AL ELECTROIMÁN PARA UN VOLTAJE DE ACELERACIÓN DE 5 kV . Se encuentra una relación lineal entre i_m y B .

4.6. Selección de Iones

Como se tiene a la intensidad del campo magnético en función de la corriente aplicada al electroimán, en principio, se pueden seleccionar a las partículas que impactarán con el haz a partir de las ecs. (3-9) y (4-2).

Sin embargo, al realizarse las mediciones que relacionan i_m con la corriente de los iones detectados en la bandera, cuyos máximos corresponden a las especies de iones seleccionadas, se encuentra que la razón masa-carga obtenida de la caracterización del filtro de velocidades no coincide con la razón masa-carga real de las partículas generadas; no obstante se encuentra un ajuste lineal entre ambas:

$$\left(\frac{m}{q}\right)_{Real} = 1.9631 \left(\frac{m}{q}\right)_{Filtro} + 5.194 \times 10^{-9} \frac{kg}{C}, \quad (4-3)$$

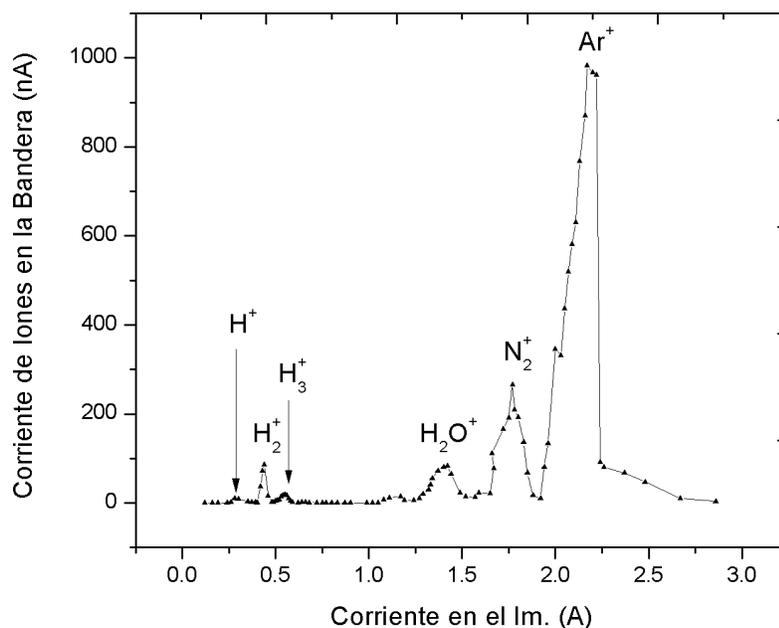


Figura 4-8: CORRIENTE DE IONES EN LA BANDERA COMO FUNCIÓN DE LA CORRIENTE SUMINISTRADA AL ELECTROIMÁN PARA UN VOLTAJE DE ACELERACIÓN DE 5 kV , Y UN VOLTAJE DE DEFLEXIÓN DE 250 V . Los máximos indican la especie de iones relacionada a cada corriente aplicada al electroimán.

con índice de correlación $R^2 = 0.9991$ (véase fig. 4-8 y fig. 4-9). De esta forma se puede tener control preciso sobre la especie de iones que llegan a la zona de reacción.

4.7. Optimización de los Espectros de Tiempo de Vuelo

Al tener control sobre las especies de iones que inciden en la cámara de reacción, sólo queda optimizar los espectros de tiempo de vuelo, véase fig. 4-10. Esto se realiza al identificar heurísticamente el valor que deben de tomar los parámetros tales como; la intensidad del haz, la presión en la cámara, el voltaje V_1 , la duración y frecuencia del pulso del voltaje V_1 (t_0 , ν), y en voltaje V_L ; que producen un espectro preciso.

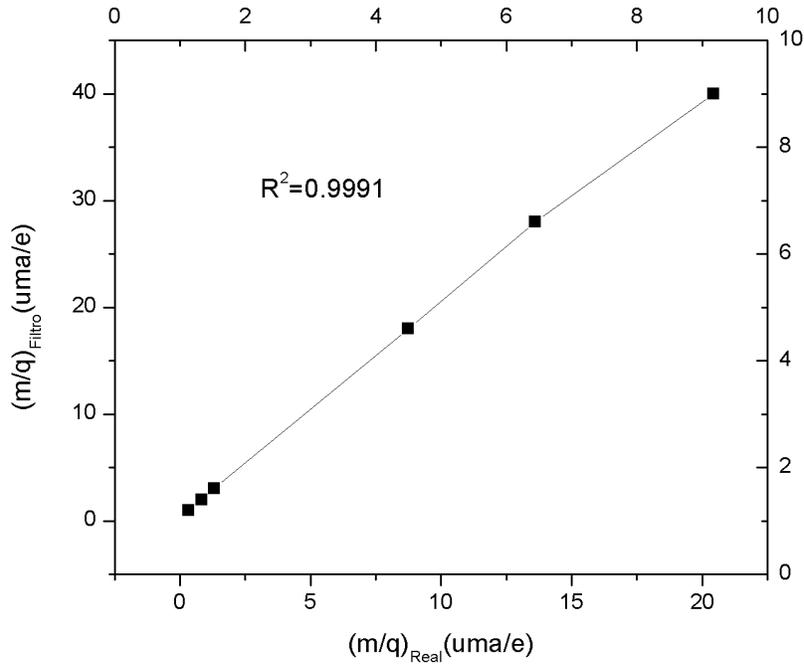


Figura 4-9: RELACIÓN MASA-CARGA REAL CONTRA RELACIÓN MASA-CARGA OBTENIDA POR LA CARACTERIZACIÓN DEL FILTRO DE VELOCIDADES. Se encuentra una relación lineal entre $(m/q)_{Real}$ y $(m/q)_{Filtro}$.

Al ser identificado el conjunto óptimo de los parámetros mencionados anteriormente, se debe relacionar la lectura del tiempo de vuelo $(T)^7$ con la relación masa-carga asociada al ion generador del máximo en cuestión.

La relación se obtiene mediante cálculos electrostáticos sencillos, las partículas cargadas tienen una aceleración debida al voltaje V_1 :

$$a = \frac{q}{m} E_{V_1} = \frac{q}{m} \frac{V_1}{2d}, \quad (4-4)$$

donde $2d$ es la distancia entre los discos D_1 y D_2 (ver fig. (3-7)). Si el pulso de duración t_0 del voltaje V_1 termina antes de que la partícula salga de la región donde se genera el campo

⁷Esta lectura es obtenida a partir de los máximos en el espectro.

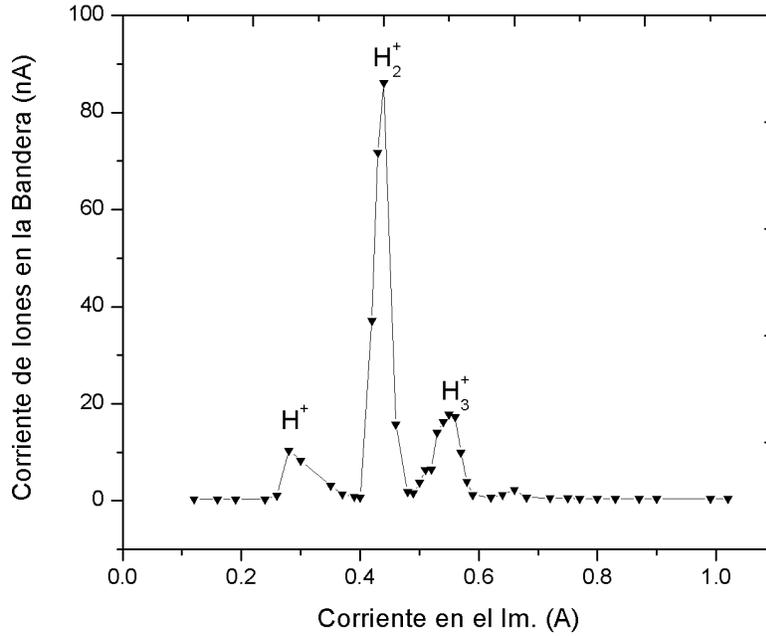


Figura 4-10: CORRIENTE DE IONES EN LA BANDERA COMO FUNCIÓN DE LA CORRIENTE SUMINISTRADA AL ELECTROIMÁN PARA UN VOLTAJE DE ACELERACIÓN DE 5 kV, Y UN VOLTAJE DE DEFLEXIÓN DE 250 V. Se muestran las especies de iones seleccionadas para efectuar las colisiones en el presente trabajo.

eléctrico E_{V_1} , la distancia que recorre la partícula es:

$$x(t_0) = \frac{V_1 q}{4d m} t_0^2, \quad (4-5)$$

y la velocidad que alcanza es:

$$v(t_0) = \frac{V_1 q}{2d m} t_0, \quad (4-6)$$

además, el tiempo que tarda en hacer el recorrido desde el disco D_2 hasta el CEM es:

$$T' = \frac{l-d}{v(t_0)} = \frac{2d m}{V_1 t_0 q} (l-d) = \frac{2dl m}{V_1 t_0 q} - \frac{2d^2 m}{V_1 t_0 q}, \quad (4-7)$$

y el tiempo que tarda en llegar al disco D_2 desde su formación es:

$$T'' = t_0 + \frac{d}{v(t_0)} - \frac{x(t_0)}{v(t_0)} = \frac{2d^2}{V_1 t_0} \frac{m}{q} + \frac{t_0}{2}. \quad (4-8)$$

Finalmente, al considerar las ecs. (4-7) y (4-8), se tiene que el tiempo que le toma a la partícula llegar, en función de su relación masa-carga, desde su generación hasta que es detectada por el CEM, es:

$$T\left(\frac{m}{q}\right) = T' + T'' = \frac{2dl}{V_1 t_0} \frac{m}{q} + \frac{t_0}{2}. \quad (4-9)$$

Es decir, T presenta una dependencia lineal⁸ con respecto a m/q . De esta forma se cumple con el objetivo de conocer, en primera instancia, los parámetros de mayor relevancia para el desarrollo experimental. Sin embargo, hay que considerar que las condiciones particulares de cada experimento son susceptibles a cambiar⁹.

⁸Sin embargo, si a la partícula le toma un tiempo menor que t_0 salir de la zona donde se genera el campo eléctrico, la dependencia del tiempo de vuelo será $T \propto \sqrt{m/q}$; para obtener este comportamiento el tiempo de duración del pulso V_1 deberá ser $t_0 < 100 \text{ ns}$.

⁹Esto debido a fluctuaciones entre la proporción de argón e hidrógeno en el cañón de iones, las cuales causan cambios en la corriente generada por los iones rápidos, y a su vez, una disminución en el número de colisiones que ocurren en la cámara de reacción.



Figura 4-11: AJUSTE DE BANDERA. Al levantar la bandera, se permite el paso de los iones proyectil hacia la cámara de reacción, donde se encuentra el blanco.

Capítulo 5

Resultados Experimentales

Cuando los espectros de tiempo de vuelo han sido optimizados, con el respectivo registro de las condiciones experimentales que le dieron lugar, se comienza el análisis de datos.

Primero, mediante un análisis de los espectros de TOF, a partir del software *PeakFit*¹, se realiza un ajuste de múltiples gaussianas (con el mismo ancho) centradas en los picos de la gráfica. De esta manera se obtienen datos del tiempo de vuelo asociado a cada máximo, y su intensidad². Luego, se identifican los fragmentos cargados generados por la colisión mediante un ajuste lineal. Posteriormente, se normalizan las intensidades como:

$$f_j = \frac{I_j}{\sum_j I_j}, \quad (5-1)$$

donde I_j es la intensidad asociada a uno de los fragmentos cargados.

En principio se tiene que la fracción neta de los fragmentos es:

$$F_j = \frac{f_j}{F}, \quad (5-2)$$

donde F es:

$$F = I_{neutros} + \sum_j I_j. \quad (5-3)$$

¹Versión 4.12.

²Al obtener el área bajo la curva de cada gaussianas.

Sin embargo, al no realizarse conteo³ de los fragmentos neutros, definimos:

$$F_{jrel} = \frac{f_j}{i_{Far}}, \quad (5-4)$$

donde i_{Far} es la corriente registrada en la caja de Faraday al obtener los espectros de tiempo de vuelo, con incertidumbre asociada:

$$\delta F_{jrel} = \frac{f_j}{i_{Far}^2} \delta i_{Far}. \quad (5-5)$$

Finalmente, por analogía a la ec. (1-17), definimos la sección eficaz relativa asociada a uno de los fragmentos cargados como:

$$\sigma_{ijrel} = \frac{RT}{N_a l P} F_{jrel}, \quad (5-6)$$

con una incertidumbre asociada:

$$\delta \sigma_{ijrel} = \sigma_{ijrel} \sqrt{\left(\frac{\delta T}{T}\right)^2 + \left(\frac{\delta F_{jrel}}{F_{jrel}}\right)^2 + \left(\frac{\delta l}{l}\right)^2 + \left(\frac{\delta P}{P}\right)^2}. \quad (5-7)$$

Las tablas: 5-1, 5-2, y 5-3 muestran, respectivamente, los datos correspondientes a la optimización del los espectros de H^+ , H_2^+ , y H_3^+ .

5.1. Iones de H^+ colisionando N_2O

El espectro de TOF obtenido para iones de H^+ colisionando el blanco de N_2O se muestra en la figura (5-1). La tabla (5-4) muestra los datos de la asociación de tiempos de vuelo con la especie de los fragmentos cargados, y su respectiva intensidad. El ajuste lineal con índice de

³Al cual tiene asociado una intensidad

Variable	Magnitud
$P_{filamento}(Ar)$	50 <i>mTorr</i>
$P_{filamento}(H_2)$	60 <i>mTorr</i>
V_{fil}	12 <i>V</i>
i_{fil}	12 <i>A</i>
V_{anodo}	90 <i>V</i>
i_{anodo}	275 <i>mA</i>
V_e	4.13 <i>kV</i>
V_f	150 <i>V</i>
i_m	0.15 <i>A</i>
V_{10°	1.01 <i>kV</i>
V_1	938 <i>V</i>
V_L	7 <i>V</i>
$V_{deflexionCamara}$	1.41 <i>kV</i>
$V_{ChanneltronNeutros}$	1.3 <i>kV</i>
i_{Far}	1.8 <i>nA</i>
ν	5.5 <i>kHz</i>
t_0	2 μs
P	$2.38 \times 10^{-5} Torr$

Tabla 5-1: DATOS DE OPTIMIZACIÓN PARA COLISIONES DE H^+ CON ENERGÍA DE 5 *keV*.

correlación $R^2 = 0.9985$ es el siguiente:

$$T_{H^+ \rightarrow N_2O} = 0.6776 \frac{m}{q} + 9.3982 \mu s, \quad (5-8)$$

véase fig. (5-2). Y las secciones eficaces relativas se muestran en la tabla (5-5).

5.2. Iones de H_2^+ colisionando N_2O

El espectro de TOF obtenido para iones de H_2^+ colisionando el blanco de N_2O se muestra en la figura (5-3).

Variable	Magnitud
$P_{filamento}(Ar)$	37.5 <i>mTorr</i>
$P_{filamento}(H_2)$	37.5 <i>mTorr</i>
V_{fil}	12 <i>V</i>
i_{fil}	12 <i>A</i>
V_{anodo}	90 <i>V</i>
i_{anodo}	350 <i>mA</i>
V_e	4.41 <i>kV</i>
V_f	120 <i>V</i>
i_m	0.49 <i>A</i>
V_{10°	0.872 <i>kV</i>
V_1	944 <i>V</i>
V_L	9 <i>V</i>
$V_{deflexionCamara}$	1.68 <i>kV</i>
$V_{ChanneltronNeutros}$	1.3 <i>kV</i>
i_{Far}	17 <i>nA</i>
ν	5 <i>kHz</i>
t_0	2 μs
P	$2.37 \times 10^{-5} Torr$

Tabla 5-2: DATOS DE OPTIMIZACIÓN PARA COLISIONES DE H_2^+ CON ENERGÍA DE 5 *keV*.

La tabla (5-6) muestra los datos de la asociación de tiempos de vuelo con la especie de los fragmentos cargados, y su respectiva intensidad. El ajuste lineal con índice de correlación $R^2 = 0.9849$ es el siguiente:

$$T_{H_2^+ \rightarrow N_2O} = 0.6955 \frac{m}{q} + 5.0683 \mu s, \quad (5-9)$$

véase fig. (5-4). Y las secciones eficaces relativas se muestran en la tabla (5-7).

5.3. Iones de H_3^+ colisionando N_2O

El espectro de TOF obtenido para iones de H_3^+ colisionando el blanco de N_2O se muestra en la figura (5-5).

Variable	Magnitud
$P_{filamento}(Ar)$	50 <i>mTorr</i>
$P_{filamento}(H_2)$	50 <i>mTorr</i>
V_{fil}	12 <i>V</i>
i_{fil}	12 <i>A</i>
V_{anodo}	90 <i>V</i>
i_{anodo}	350 <i>mA</i>
V_e	4.3 <i>kV</i>
V_f	160 <i>V</i>
i_m	0.6 <i>A</i>
V_{10°	880 <i>kV</i>
V_1	938 <i>V</i>
V_L	7 <i>V</i>
$V_{deflexionCamara}$	1.2 <i>kV</i>
$V_{ChanneltronNeutros}$	1.34 <i>kV</i>
i_{Far}	1.25 <i>nA</i>
ν	5.5 <i>kHz</i>
t_0	2 μs
P	$2.36 \times 10^{-5} Torr$

Tabla 5-3: DATOS DE OPTIMIZACIÓN PARA COLISIONES DE H_3^+ CON ENERGÍA DE 5 *keV*.

La tabla (5-8) muestra los datos de la asociación de tiempos de vuelo con la especie de los fragmentos cargados, y su respectiva intensidad. El ajuste lineal con índice de correlación $R^2 = 0.9865$ es el siguiente:

$$T_{H_3^+ \rightarrow N_2O} = 0.7517 \frac{m}{q} + 7.174 \mu s, \quad (5-10)$$

véase fig. (5-6). Y las secciones eficaces relativas se muestran en la tabla (5-9).

La comparación entre las secciones eficaces obtenidas en función de la masa de los iones fragmento producto de la colisión se muestran en la fig. (5-7).

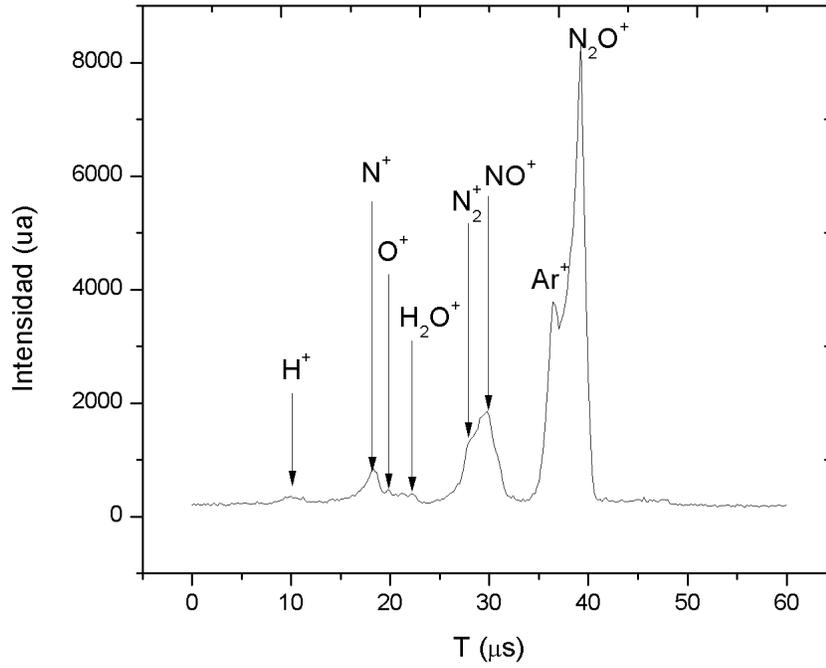


Figura 5-1: ESPECTRO DE TIEMPO DE VUELO DE PROTONES COLISIONANDO UN BLANCO DE N_2O A UNA ENERGÍA DE 5 keV . Se indica la asociación entre los fragmentos cargados y los máximos.

Ion Asociado	$T \pm 0.7 (\mu s)$	I_j
H^+	10.0	233.03
N^+	18.2	1194.1
O^+	20.6	303.32
H_2O^+	22.2	313.20
N_2^+	28.2	2158.2
NO^+	29.8	3027.7
N_2O^+	39.2	15200

Tabla 5-4: TIEMPO DE VUELO E INTENSIDAD DE LOS FRAGMENTOS CARGADOS PRODUCIDOS POR LA COLISIÓN DE H^+ CONTRA N_2O . La asociación de los iones se realizó mediante un ajuste lineal, véase fig. (5-2).

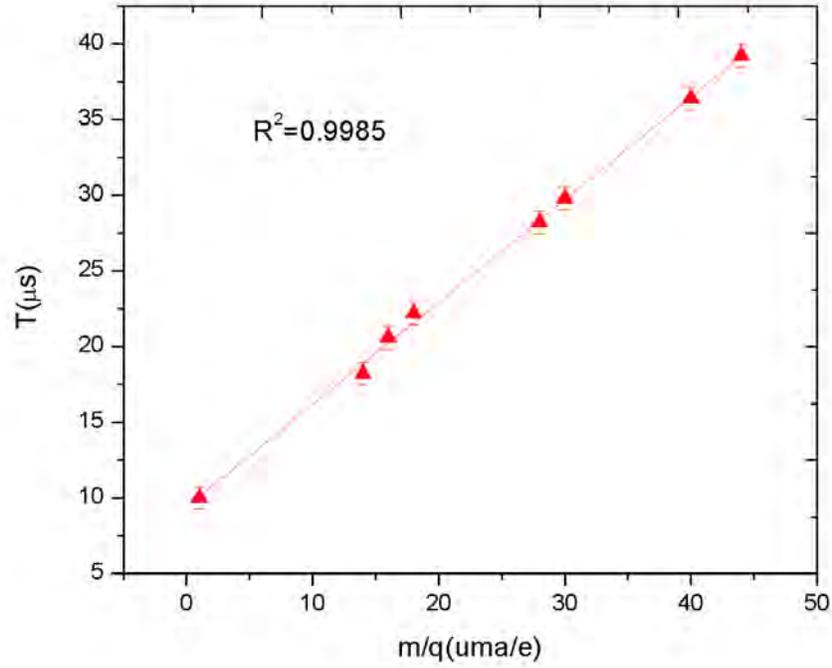


Figura 5-2: ASOCIACIÓN DE LA RELACIÓN MASA-CARGA DEL ION FRAGMENTO PRODUCIDO POR LA COLISIÓN DE H^+ CON SU RESPECTIVO TIEMPO DE VUELO. Se muestra el ajuste lineal.

Ion Asociado	σ_{ijrel} ($\times 10^{17}$ barn/A)
H^+	3.70 ± 0.5
N^+	19.0 ± 2.6
O^+	3.70 ± 0.7
H_2O^+	4.98 ± 0.7
N_2^+	34.3 ± 4.7
NO^+	48.1 ± 6.7
N_2O^+	242 ± 33.6

Tabla 5-5: SECCIÓN EFICAZ RELATIVA ASOCIADA FRAGMENTO CARGADO PRODUCIDOS POR LA COLISIÓN DE H^+ CONTRA N_2O . Debe notarse que la sección eficaz relativa tiene unidades de área por unidad de la corriente generada por los iones rápidos en la caja de Faraday.

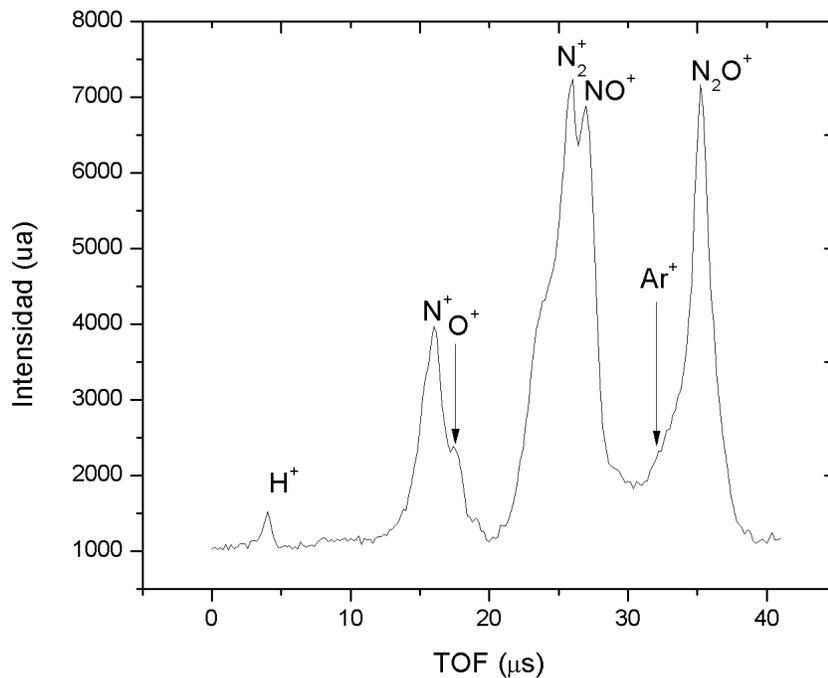


Figura 5-3: ESPECTRO DE TIEMPO DE VUELO DE IONES DE H_2^+ COLISIONANDO UN BLANCO DE N_2O A UNA ENERGÍA DE 5 keV . Se indica la asociación entre los fragmentos cargados y los máximos.

Ion Asociado	T ± 0.9 (μs)	I_j
H^+	4.00	1052.7
N^+	15.8	6607.2
O^+	18.0	2220.9
N_2^+	23.4	7056.6
NO^+	27.0	14360
N_2O^+	35.2	15070

Tabla 5-6: TIEMPO DE VUELO E INTENSIDAD DE LOS FRAGMENTOS CARGADOS PRODUCIDOS POR LA COLISIÓN DE H_2^+ CONTRA N_2O . La asociación de los iones se realizó mediante un ajuste lineal, véase fig. (5-4).

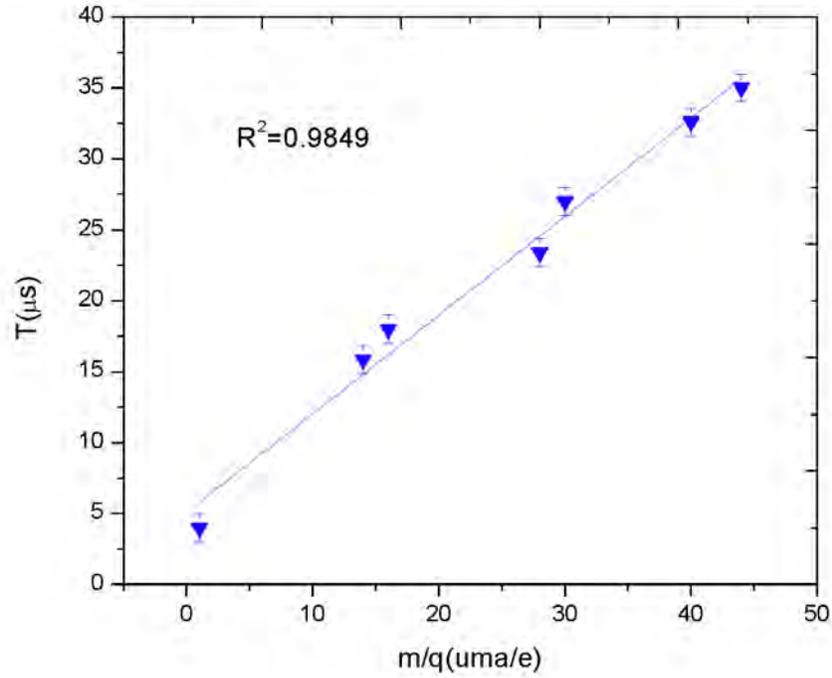


Figura 5-4: ASOCIACIÓN DE LA RELACIÓN MASA-CARGA DEL ION FRAGMENTO PRODUCIDO POR LA COLISIÓN DE H_2^+ CON SU RESPECTIVO TIEMPO DE VUELO. Se muestra el ajuste lineal.

Ion Asociado	σ_{ijrel} ($\times 10^{17}$ barn/A)
H^+	8.12 ± 1.1
N^+	51.0 ± 7.1
O^+	17.1 ± 2.4
N_2^+	54.5 ± 7.6
NO^+	111 ± 15.4
N_2O^+	116 ± 16.1

Tabla 5-7: SECCIÓN EFICAZ RELATIVA ASOCIADA FRAGMENTO CARGADO PRODUCIDOS POR LA COLISIÓN DE H_2^+ CONTRA N_2O . Debe notarse que la sección eficaz relativa tiene unidades de área por unidad de la corriente generada por los iones rápidos en la caja de Faraday.

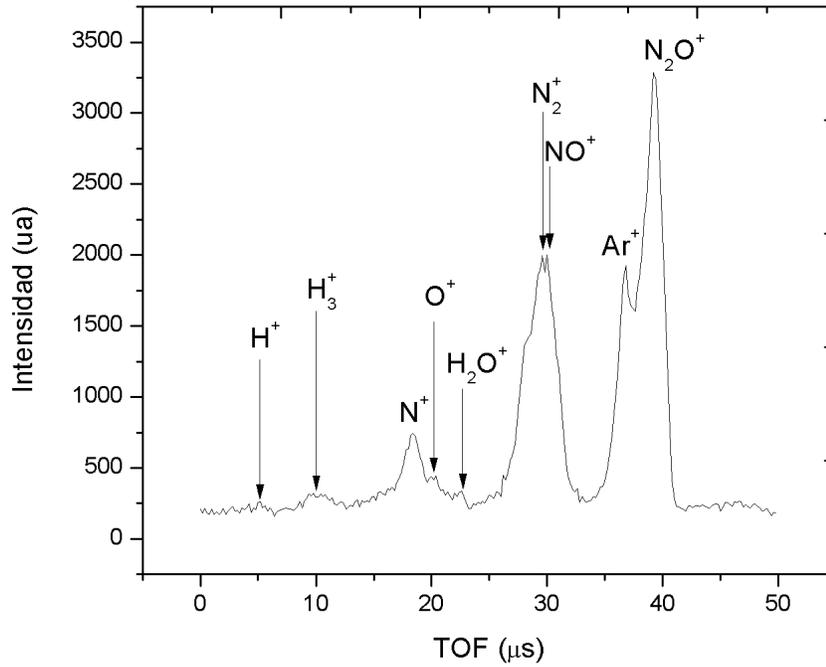


Figura 5-5: ESPECTRO DE TIEMPO DE VUELO DE H_3^+ COLISIONANDO UN BLANCO DE N_2O A UNA ENERGÍA DE 5 keV . Se indica la asociación entre los fragmentos cargados y los máximos.

Ion Asociado	T ± 0.9775 (μs)	I_j
H^+	5.20	100.9
H_3^+	9.80	230.6
N^+	18.4	1114
O^+	20.6	344.3
H_2O^+	22.4	240.5
N_2^+	28.0	2407
NO^+	30.0	3727
N_2O^+	39.4	6297

Tabla 5-8: TIEMPO DE VUELO E INTENSIDAD DE LOS FRAGMENTOS CARGADOS PRODUCIDOS POR LA COLISIÓN DE H_3^+ CONTRA N_2O . La asociación de los iones se realizó mediante un ajuste lineal, véase fig. (5-6).

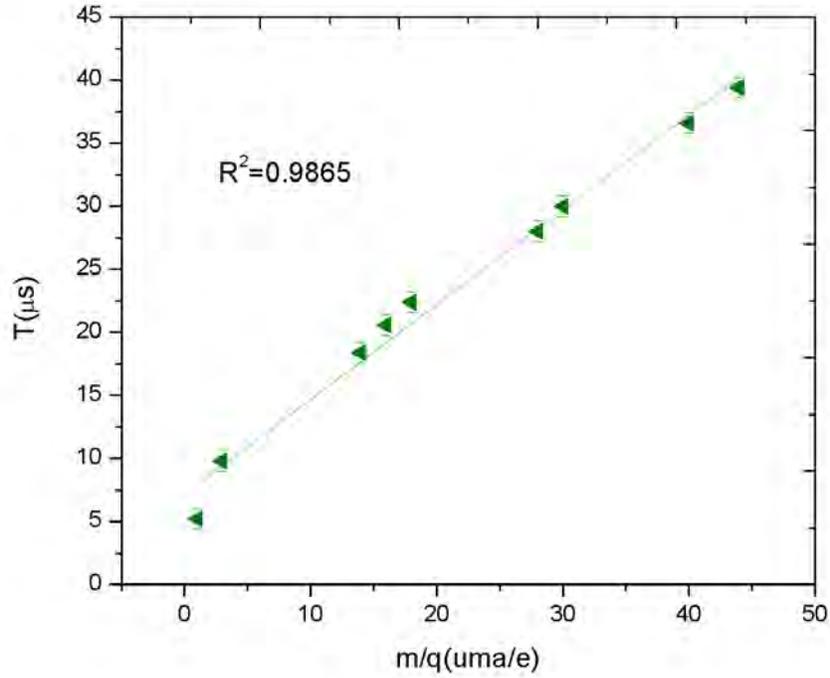


Figura 5-6: ASOCIACIÓN DE LA RELACIÓN MASA-CARGA DEL ION FRAGMENTO PRODUCIDO POR LA COLISIÓN DE H_3^+ CON SU RESPECTIVO TIEMPO DE VUELO. Se muestra el ajuste lineal.

Ion Asociado	σ_{ijrel} ($\times 10^{17}$ barn/A)
H^+	2.51 ± 0.4
H_3^+	5.73 ± 0.8
N^+	27.7 ± 3.8
O^+	8.56 ± 1.2
H_2O^+	5.98 ± 0.8
N_2^+	59.9 ± 8.2
NO^+	92.7 ± 12.8
N_2O^+	157 ± 21.6

Tabla 5-9: SECCIÓN EFICAZ RELATIVA ASOCIADA FRAGMENTO CARGADO PRODUCIDOS POR LA COLISIÓN DE H_3^+ CONTRA N_2O . Debe notarse que la sección eficaz relativa tiene unidades de área por unidad de la corriente generada por los iones rápidos en la caja de Faraday.

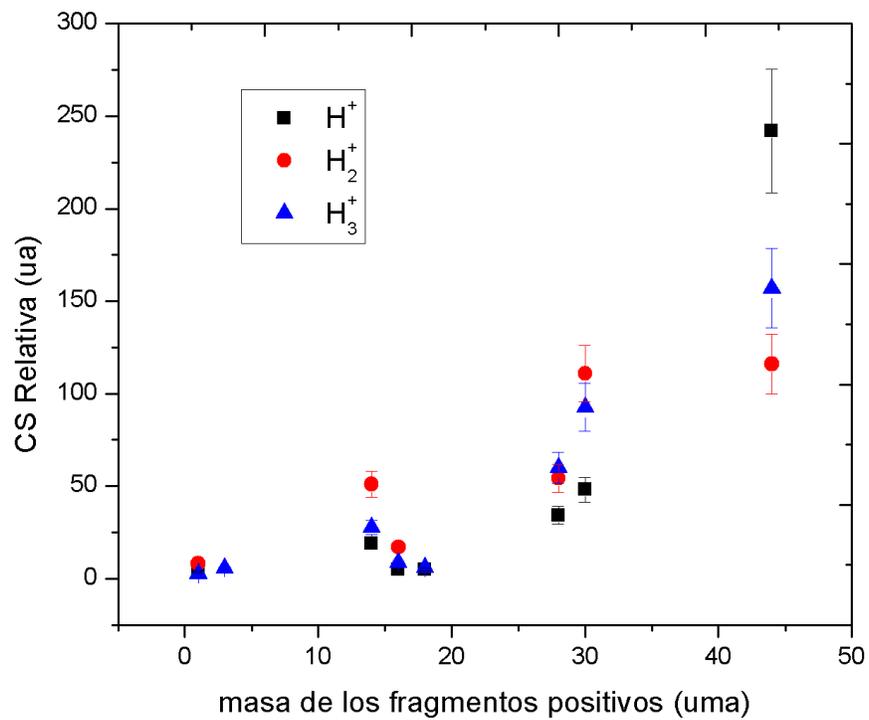


Figura 5-7: SECCIONES EFICACES RELATIVAS COMO FUNCIÓN DE LA MASA DE LOS FRAGMENTOS POSITIVOS EN COLISIONES DE IONES DE HIDRÓGENO CONTRA ÓXIDO NITROSO A 5 keV DE ENERGÍA. Se indica mediante simbolos distintos, además de colores, la especie de ion proyectil.

Capítulo 6

Análisis y Conclusiones

En la fig. (5-4) se muestra la comparación de las secciones eficaces relativas como función de la masa de los fragmentos positivos producto de la colisión entre las distintas especies de iones proyectil. Las secciones eficaces asociadas al impacto de los iones de hidrógeno sobre óxido nítrico, indican que los procesos disociativos tienen relevancia respecto a la ionización del blanco y la fragmentación del mismo, siendo del: 31.2 % en el caso de iones proyectil de H^+ , 65.23 % en el de H_2^+ como proyectil, y 54.19 % en el de H_3^+ como proyectil; todas sobre un blanco de óxido nítrico.

El método de adquisición de datos, impide identificar los procesos involucrados en la generación de fragmentos de manera particular, pues la generación de ciertos fragmentos puede ser producida por interacciones independientes. Esto debido a que el experimento sólo permite la cuantificación de los fragmentos derivados de la colisión como efecto directo de la misma. Además, se carece de información acerca de las probabilidades entre las distintas interacciones posibles como función de la energía de aceleración, el tiempo de recombinación de las especies (en caso de ser menor al tiempo de vuelo), la especie de ion proyectil, y el blanco.

La ausencia de conteo neto de partículas neutras durante la adquisición de un espectro de tiempo de vuelo dado, provoca que el cálculo de las secciones eficaces sea relativo. Sin embargo, este problema puede evitarse mediante la normalización de las secciones relativas con respecto a

las secciones absolutas reportadas con anterioridad en la literatura, para las mismas condiciones de obtención del espectros de tiempo de vuelo. De esta manera, para el presente trabajo, sería posible obtener las secciones eficaces absolutas, con las cuales se podría obtener la probabilidad de los procesos involucrados en la generación de fragmentos. También la fracción de partículas neutras se puede obtener mediante la caracterización del contador multiplicador de electrones, no obstante, esta caracterización depende de factores como: la energía de aceleración, el voltaje aplicado a los discos, el desgaste del detector, entre otros.^[98]

Debido a la complejidad de las interacciones entre iones y moléculas, el estudio de las mismas ha sido el objeto de varias investigaciones.^[68,99–101] Y la relevancia del cálculo de las secciones eficaces, derivadas de las interacciones de iones de hidrógeno, particularmente de H^+ , se debe principalmente a la incidencia de estos iones en la superficie de las atmósferas debida al viento solar.^[102,103] Además los modelos relacionados con la formación y evolución de atmósferas requieren del conocimiento de distintas secciones eficaces.^[104,105]

En particular, la realización de este trabajo se hizo para saber si las colisiones de los iones de hidrógeno sobre un blanco de óxido nitroso podrían disminuir la concentración del este gas en la atmósfera, con el fin de disminuir el deterioro de la capa de ozono. Se obtuvieron resultados desfavorables, pues en el caso de procesos disociativos, uno de los fragmentos generados con mayor sección eficaz es el óxido nítrico (NO^+), y éste es parte fundamental del proceso en el que está involucrado el N_2O para la degradación de la capa de ozono.^[75–81] Sin embargo un estudio sobre las colisiones de este mismo tipo de iones sobre un blanco de óxido nítrico y uno de ozono, proporcionaría información suficiente para seguir con esta línea de investigación, en el marco de las concentraciones de estos gases en la atmósfera y el posible control de las concentraciones en la atmósfera mediante colisiones controladas.

Apéndice A

Bombas de Vacío

A.1. Bomba Mecánica

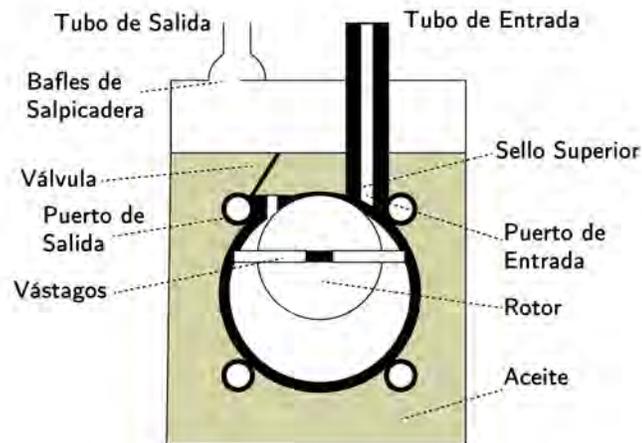


Figura A-1: DIAGRAMA DE BOMBA MECÁNICA ROTATORIA.

En la fig. A-1 se muestra un diagrama de una bomba mecánica rotatoria. En la fig. A-2, se muestra el funcionamiento; cuando el vástago A pasa por el puerto de entrada, el sistema de vacío se conecta al espacio limitado por el estator, el sello superior, el rotor, y el vástago A. El volumen de este espacio se incrementa cuando el vástago barre, y se produce así una baja de presión. Esto continúa hasta que el vástago B pasa por el puerto de entrada, cuando

el volumen del gas evacuado se aísla entre ambos vástagos. Al seguir girando, el gas aislado se mueve alrededor del estator hasta que A pasa por el sello superior. Ahora el gas está entre B y el sello superior, y con más rotación se comprime hasta que la presión es suficientemente alta (aproximadamente 850 *Torr*) para abrir la válvula de salida, y el gas se evacúa de la bomba. La presión mínima que es alcanzada con estas bombas es del orden de 5×10^{-3} *Torr*.^[106]

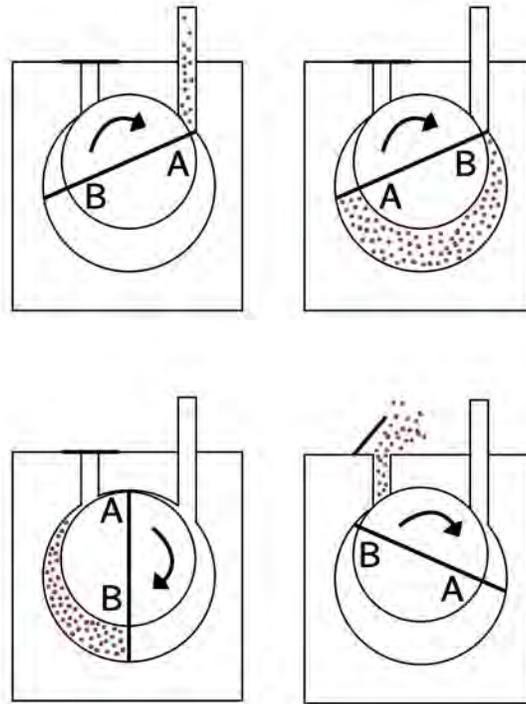


Figura A-2: PASOS DEL FUNCIONAMIENTO DE UNA BOMBA MECÁNICA ROTATORIA.

A.2. Bomba Turbo Molecular

En las bombas turbomoleculares, se imparte una dirección preferencial, en su movimiento, a las moléculas que chocan con una superficie que se mueve a gran velocidad. La bomba turbomolecular contiene etapas axiales alternadas de discos estacionarios y giratorios. Los discos presentan ranuras (véase fig. A-3b), cortadas en ángulos tales que las moléculas de gas atra-

padas en las ranuras de los discos móviles se proyectan preferencialmente hacia las ranuras de los discos fijos. La presencia de varias etapas mejora el vacío; pero debido a que el hidrógeno tiende a regresar por el camino original, la mínima presión para una bomba de este tipo es de 10^{-10} Torr. Sin embargo, necesitan el apoyo de una bomba mecánica rotatoria.^[106]

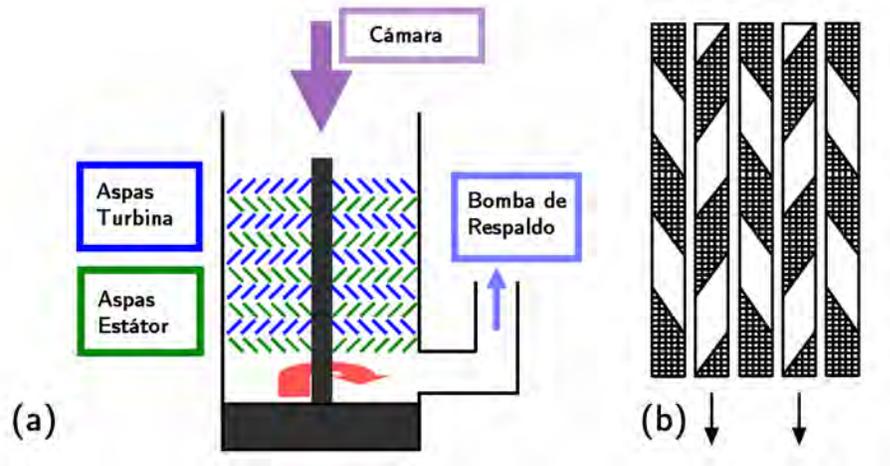


Figura A-3: BOMBA TURBOMOLECULAR. (a) Principio de funcionamiento de una bomba turbomolecular. (b) Diseño de las aspas.

Apéndice B

Sensores de Presión

B.1. Sensor de Termopar

En este dispositivo, un filamento se calienta eléctricamente, y su temperatura se mide directamente con un termopar. La corriente de calentamiento se mantiene independiente de la temperatura. Cuando la presión crece, la conducción térmica del gas aumenta, y disminuye la temperatura del filamento. El termopar puede de esta manera, dar una lectura de la presión. Las presiones más bajas que puede medir son del orden de $1 \times 10^{-3} \text{ Torr}$.^[106]

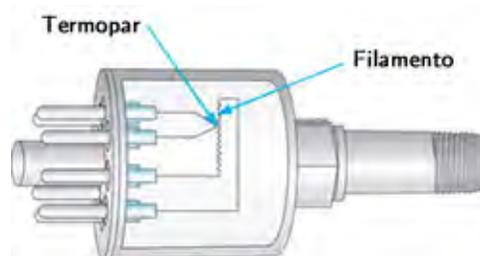


Figura B-1: DIAGRAMA DE UN MEDIDOR DE TERMOPAR.^[107]

B.2. Medidor Iónico de Filamento Caliente

Este medidor, también conocido como medidor de *Bayard-Alpert*, consiste en una rejilla cilíndrica con un colector de iones en forma de alambre fino. El cátodo (filamento) está ubicado fuera de la rejilla. El filamento emite electrones que ionizan al gas. Los iones se colectan en el ánodo, y la medida de la corriente iónica es la cuantización del vacío. El ánodo está a un potencial negativo respecto al cátodo, y la rejilla es positiva respecto a éste. Así, los electrones se aceleran hacia la rejilla, ionizan al gas, y debido al potencial negativo, se alejan del ánodo. Por el bombardeo iónico, estos medidores no deben de usarse a presiones por encima de 10^{-3} Torr, pero llegan a medir presiones del orden de 10^{-11} Torr.^[106]



Figura B-2: DIAGRAMA DE UN MEDIDOR DE BAYARD-ALPERT.^[107]

B.3. Cátodo Frío

Se usan dos placas paralelas (cátodos), con un anillo de alambre (ánodo) entre ellas. Se aplica un potencial del orden de los kV , en presencia de un campo magnético. Al emitirse un electrón del cátodo, se acelera hacia el ánodo, y el campo magnético modifica la trayectoria del electrón, haciéndola más larga, y aumentando la probabilidad de ionización. Los iones positivos

se capturan en el cátodo, produciendo una corriente. El intervalo de operación de este medidor está entre 10^{-2} Torr y 10^{-6} Torr.^[106]

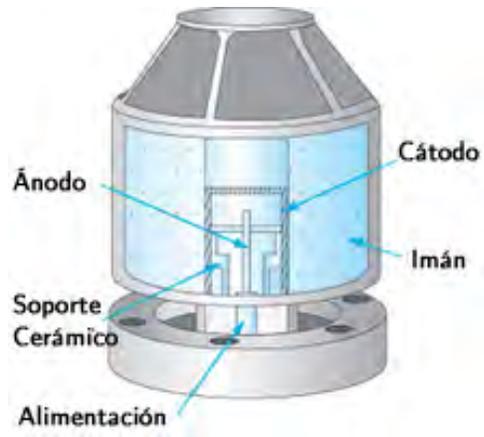


Figura B-3: DIAGRAMA DE UN MEDIDOR DE CÁTODO FRÍO.^[107]

Apéndice C

Tarjeta Multicanal

Una tarjeta escaladora multicanal o MCS (por su acrónimo en inglés, *Multichannel Scaler*), registra la tasa de conteo de eventos registrados como una función de tiempo. Cuando inicia el escaneo, la tarjeta multicanal comienza a contar en su memoria digital los eventos de entrada en el primer canal. Después de haber transcurrido el tiempo de *espera*, previamente seleccionado, la MCS avanza al siguiente canal de memoria para contar eventos. La *espera* y el proceso de avance de canal son repetidos hasta que la MCS ha escaneado todos los canales de su memoria. El despliegue en pantalla de los contenidos de la memoria muestra la tasa de conteo de los eventos de entrada contra el tiempo. En mediciones repetitivas, donde el inicio del escaneo puede ser sincronizado con el comienzo de eventos, el escaneo múltiple puede usarse para disminuir la dispersión estadística en el patrón de grabado (espectro).^[108]

La MCS cuenta con una amplia variedad de aplicaciones como:

- Conteo de fotones individuales
- Espectrometría de tiempo de fosforescencia
- Detección y recorrido de luz atmosférica y satelital (LIDAR por su acrónimo en inglés, *Light Detection and Ranging*)
- Reacciones químicas inducidas por láser

- Espectrometría de masa
- Espectrometría de tiempo de vuelo
- Difractómetros de rayos X
- Experimentos de Mössbauer.

Bibliografía

- [1] Deepak M., *Physics of Ion Impact Phenomena*, Springer Verlag, Berlin, 1991.
- [2] Luna H., Michael M., Shah M. B., Johnson R. E., Latimer C. J., McConkey J. W., *Dissociation of N₂ in Capture and Ionization Collisions with fast H⁺ and N⁺ Ions and Modeling of Positive Ion Formation in the Titan Atmosphere*, J. Geophys. Res., **108** E4-5 033, pp. 14-23, 2003.
- [3] Megill J., Galy J., *Radioactivity Radionuclides Radiation*, Springer Verlag, 2005.
- [4] Hasted J. B., *Physics of Atomic Collisions*, Second Edition, Butterworth and Co. Ltd., 1972.
- [5] Segre E., *Nuclei and Particles, an Introduction to Nuclear and Subnuclear Physics*, W. A. Benjamin Inc., New York, 1965.
- [6] IUPAC, *Compendium of Chemical Terminology*, Second Edition, 1997.
- [7] Bjorken J. D., Drell S. D., *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill College, 1964.
- [8] Marvin L. G., Kenneth M. W., *Collision Theory*, John Wiley and Sons, Chicago, 1967.
- [9] Masey H. S. , *Collisions Between Atoms and Molecules at Ordinary Temperatures*, University College, London, pp. 254-256, 1949.
- [10] Eliot M., *Sections Efficaces de Echange σ_{10} et de Ionisation σ_{01} de Ions et Atomes de Hydrogene, das la Gamme de Energie de 1 a 20 KeV, sur le Gaz N₂, CH₄, C₂H₆, C₃H₈*, Le Journal de Physique, **38**, pp. 21-27, 1977.

- [11] López Patiño J., *Procesos Disociativos en Colisiones de Protones a Bajas Energías en Gases Atmosféricos*, Tesis Doctoral, Posgrado en Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 2016.
- [12] Coplan M. A., Ogilvie K. W., *Charge Exchange for H^+ and H_2^+ in H_2O , CO , and NH_3* , J. Chem. Phys., **52** 8, pp. 4154-4160, 1970.
- [13] Sparkman O. D., *Mass Spectrometry Desk References*, Pittsburg: Global View Pub, 2000.
- [14] Mamyrin B. A., *Time-of-Flight Mass Spectrometry, Concepts Achievements and Prospects*, Int. J. Mass Spect., **206**, pp. 251-266, 2001.
- [15] Diebeler H. V., Reese M. R., *Mass Spectrometry*, National Bureau of Standards, Washington, pp. 604, 1957.
- [16] Belu A. M., Graham D. J., Castner D. G., *Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometry: Techniques and Applications for the Characterization of Biomaterial Surfaces*, Biomaterials, **24**, pp. 3635-3653, 2003.
- [17] Duckworth H. E., *Mass Spectroscopy*, The Syndics Of Cambridge University Press, 1958.
- [18] Allison S. K., Warshaw S. D., *Passage of Heavy Particles Through Matter*, Rev. Mod. Phys., **25** 4, pp. 779-817, 1953.
- [19] Masey H. S., Gilbody H. B., *Electronic and Ionic Impact Phenomena, Recombination and fast Collisions of Heavy Particles*, Second Edition, Volume II, Oxford University Press, 1974.
- [20] Bransden B. H., *The Theory of Charge Exchange*, Rep. Prog. Phys., **35**, pp. 949-1005, 1972.
- [21] Gilbody H. B., Hasted J. B., *Anomalies in the Adiabatic Interpretation of Charge-transfer Collisions*, Proc. Phys. Soc. A., **238** 1214, pp.334-343, 1956.
- [22] Bates D. R., Mc Carroll R., *Electron Capture in Slow Collisions*, Proc. Phys. Soc. A., **245** 1241, pp.175-183, 1958.

- [23] Smith F. T., Marchi R. P., Dedrick K. G., *Impact Expansions in Classical and Semiclassical Scattering*, Phys. Rev., **150** 1, pp. 79-91, 1966.
- [24] Welsh L. M., Berkner K. H., Kaplan S. N., Pyle R. V., *Cross Sections for Electron Capture by Fast Protons in H₂, He, N₂, and Ar*, Phys. Rev., **158** 1, pp. 85-92, 1967.
- [25] Born M., Oppenheimer J. R., *Zur Quantentheorie de Molekeln*, Annalen der Physik, **389** 20, pp. 457-484, 1927.
- [26] McNab I. R., *The Spectroscopy of H₃⁺*, Adv. Chem. Phys., **89**, pp. 1-87, 1995.
- [27] Chang R., *Chemistry*, McGraw-Hill, Fourth Edition, 1997.
- [28] IUPAC, *Nomenclature for Inorganic Compunds*, International Union of Pure and Applied Chemistry, Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2005.
- [29] Tarendash A. S., *Let's Review: Chemistry, the Physical Setting*, Barron's Educational Series, 2001.
- [30] Berger D., *Why do Electron Shells have set Limits?*, Faculty Chemistry Science, Bluffton College, 1999.
- [31] Ostrovsky V. N., *On Recent Discussion Concerning Quantum Justification of the Periodic Table of the Elements*, Foundations of Chemistry, **7** 3, pp. 235-239, 2005.
- [32] Ashcroft N. W., Mermin N. D., *Solid State Physics*, New York: Holt, Rinehart and Winston, 1997.
- [33] Mortimer C. E., Müller U., *Chemier. Das Bassiwissen der Chemie*, Thieme Georg Verlag, 1996.
- [34] Neumüller O. A., *Römpp Chemie Lexikon*, Frank'sche, Stuttgart, 1983.
- [35] Zumdahl S., *Chemical Principles*, Houghton-Mifflin, 2005.

- [36] March J., *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanism, and Structure*, John Wiley and Sons, 1992.
- [37] Miessler G. L., Tarr D. A., *Inorganic Chemistry*, Prentice Hall, 2004.
- [38] Langmuir I., *The Arrangement of Electrons in Atoms and Molecules*, J. Am. Chem. Soc., **41** 6, pp. 868-934, 1919.
- [39] Jensen W. B., *The Origin of the "Delta" Symbol for Fractional Charges*, J. Chem. Educ., **86**, pp. 545, 2009.
- [40] Olah G. A., Herges R., Laali K., Segal G. A., *Onium Ions, 34, The Methoxydiazonium Ion: Preparation, Proton, Carbon-13, and Nitrogen-15 NMR and IR Structural Studies, Theoretical Calculations, and Reaction with Aromatics. Attempted Preparation and the Intermediacy of the Hydroxydiazonium Ion*, J. Am. Chem. Soc., **108**, pp. 2054-2057, 1986.
- [41] NIH, *Nitrous Oxide*, National Institutes of Health, National Institute for Biotechnology Information, U. S. National Library of Medicine, PubChem, 2018.
- [42] Sutton L. E., *Tables for Interatomic Distance and Configuration in Molecules and Ions*, Chem. Soc., London, 1958.
- [43] NOAA, *Nitrous Oxide*, National Oceanic and Atmospheric Administration, CAMEO Chemicals, U.S. Gov., 2016.
- [44] OSHA, *Nitrous Oxide*, (Occupational Safety and Health Administration)'s Occupational Chemical Database. U.S. Gov., 2018.
- [45] Wiberg E., Holleman A. F., *Synthesis of Nitrous Oxide by Oxidation of Ammonia*, Inorganic Chemistry, San Diego: Academic Press, 2001.
- [46] Sanghi Organization, *Nitrous Oxide Plant*, Sanghi Organization Archive, 2013.
- [47] Pearson, *Lit Foundations, Chemistry Class 8*, Pearson Education India, 2009.

- [48] Rhodium, *Nitrous Oxide from Urea, Nitric and Sulfuric Acid*, Rhodium, Chemistry Archive, U. S. Patent 436105, 2004.
- [49] Suwa T., Matsushima A., Suzuki Y., Namina Y., *Synthesis of Nitrous Oxide by Oxidation of Ammonia*, Kohyo Kagaku Zasshi, Showa Denka Ltd., **64**, pp. 1879-1888, 1961.
- [50] Ritz J., Fuchs H., Perryman H. G., *Hidroxyamine*, Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Wiley-Vch Verlag GmbH and Co. KGaA, 2000.
- [51] Current J. D., *Pharmacology for Anesthetist, Anesthetics and Adjuvants*, Pediapress, 2017.
- [52] Mizuno N., *Modern Heterogenous Oxidation Catalysis, Design, Reactions and Characterization*, Wiley-Vch Verlag GmbH and Co. KGaA, 2009.
- [53] Groothaert M. H., Smeets P. J., Sels B. F., *Selective Oxidation of Methane by the Bis(μ -oxo)dicopper Cores Stabilized on ZSM-5 and Mordenite Zeolites*, J. Am. Chem. Soc., **127**, pp. 1394-1395, 2005.
- [54] Launay H., Loridant S., Pigamo A., *Vanadium Species in New Catalysis for the Selective Oxidation of Methane to Formaldehyde: Specificity and Molecular*, J. Catalysis, **246**, pp. 390-398, 2007.
- [55] Clempath S., Bel A. T., *A DFT Study of the Mechanism and Kinetics of Methane Oxidation to Formaldehyde Occurring on Silica-supported Molybdema*, J. Catalysis, **247**, pp. 119-126, 2007.
- [56] Iwamoto M., Hirata J., Matsukami K., Kagawa S., *Catalytic Oxidation by Oxide Radical Ions, 1, One-step Hydroxylation of Benzene to Phenol Over Group 5 and 6 Oxides Supported on Silica Gel*, J. Phys. Chem., **87**, pp. 903-905, 1983.
- [57] Zuck D., Ellis P., Dronsfield A., *Nitrous Oxide: Are you Having a Laught?*, J. Educ. Chem., **26**, 2012.
- [58] The Guardian, *Warning Over Laughing Gas Misuse*, The Guardian, Politics, 9 de Agosto 2014.

- [59] Sneade W., *Drug Discovery: A History*, John Wiley and Sons, 2005.
- [60] Speth J., Biedler A., Methers F. G., *Lachgas als Analgetikum in der Geburtshilfe*, Gynäkologe, **46**, pp. 129, 2013.
- [61] Nagele P., Duma A., Kopec M., Gebara M. A., Parsoei A., Walker M., Janski A., Panagopoulos V. N., Cristancho P., Miller J. P., Zorumski C. F., Conway C., *Nitrous Oxide for Treatment-Resistant Major Depression: A Proof-of-Concept Trial*, Biol. Psychiatry, **78**, pp. 10, 2015.
- [62] Divatia J. V., Vaidya J. S., Badwe R. A., Hawaldor R. W., *Omission of Nitrous Oxide During Anesthesia Reduces the Incidence of Postoperative Nausea and Vomiting*, Anesthesiology, **85** 5, pp. 1055-1062, 1996.
- [63] Hartung J., *Twenty-Four of Twenty-Seven Studies Show a Greater Incidence of Emesis Associated with Nitrous Oxide than with Alternative Anesthetics*, Anesthesia and Analgesia, **83**, pp. 114-116, 1996.
- [64] Berger B., *Is Nitrous Oxide Safe?*, Swiss Propulsion Laboratory, 2007.
- [65] Goddard R. H., *Rocket Apparatus*, U. S. Patent 1103503, 1914.
- [66] Space Propulsion Group, *Nitrous Oxide Safety*, Space Propulsion Group Inc., 2012.
- [67] USEPA, *The Accelerated Phaseout of Class I Ozone-Depleting Substances*, United States Environmental Protection Agency, 2010.
- [68] Wang D., Guo G., Min G., Zhang X., *Relative Dissociation Fractions of N₂O Under 15.30KeV H-, C-, and O- Negative Ion Impact*, Phys. Rev., **95** 012705, pp. 1-9, 2017.
- [69] Greenwood N. N., Earnshaw A., *Chemistry of the Elements*, Second Edition, School of Chemistry, University of Leeds, Elsevier Butterworth Heinemann, U. K, 2012.
- [70] McCulla R. D., *Atomic Oxygen O(3P): Photogeneration and Reactions with Biomolecules*, Saint Louis University, 2010.

- [71] NASA, *Out of Thin Air*, National Aeronautics and Space Administration, U. S. Gov., 2011.
- [72] NOAA, *Science: Ozone Basics*, National Oceanic and Atmospheric Administration, U. S. Gov., 2008.
- [73] IADC, *Space Debris Mitigation Guidelines*, Inter-Agency Space Debris Coordination Committee, 2002.
- [74] Williams D. R., *Earth Fact Sheet*, National Aeronautics and Space Administration, U. S. Gov., 2004.
- [75] NIOSH, *Centers for Disease Control and Prevention*, National Institute of Occupational Safety and Health, U. S. Gov., 2014.
- [76] UNEP, *Drawing Down N₂O to Protect Climate Change and the Ozone Layer*, United Nations Environment Programme, Synthesis Report, Nairobi, Kenya, 2013.
- [77] UN, *Montreal Protocol on Substances that Deplete the Ozone Layer*, United Nations, Treaty Series, **26369**, 1989.
- [78] Dameris M., *Depletion of the Ozone Layer in the 21st Century*, Int. Ed., **49**, pp. 489, 2010.
- [79] Ravishankara A. R., Daniel J. S., Portmann R. W., *Nitrous Oxide: The Dominant ozone-Depleting Substance Emitted in the 21st Century*, *Science*, **326**, pp. 123-125, 2009.
- [80] Schlesinger W. H., *Biogeochemistry: an Analysis of Global Change*, Second Edition, Academic Press, California, 1997.
- [81] Portmann R. W., Daniel J. S., Ravishankara A. R., *Stratospheric Ozone Depletion Due to Nitrous Oxide: Influences of Other Gases*, *Phil. Trans. R. Soc. B*, **367**, pp. 1256-1264, 2012.
- [82] Dvortsov V. L., Solomon S., *Response of the Stratospheric Temperature and Ozone to Past and Future Increases In Stratospheric Humidity*, *J. Geophys. Res.*, **106**, 2001.

- [83] Reay D. S., Davidson E. A., Smith K. A., Smith P., Milillo J. M., Dentener F., Crutzen P. J., *Global Agriculture and Nitrous Oxide Emissions*, Nat. Clim. Change, **2**, pp. 410, 2012.
- [84] Pauleta S. R., Dell'Acqua S., Moura I., *Nitrous Oxide Reductase*, Coord. Chem. Rev., **257**, pp. 332, 2012.
- [85] Pérez-Ramírez J., Kapteijin F., Schöfel K., Moulijn J. A., *Formation and Control of N₂O in Nitric Acid Production: Where Do We Stand Today?*, Appl. Catal. B, **4**, pp. 117, 2003.
- [86] Wadhwa C. L., *High Voltage Engineering*, Second Edition, New Age International, 2007.
- [87] Paschen F., *Ueber die zum Funkenübergang in Luft, Wasserstoff und Kohlensäure bei verschiedenen Drucken erforderliche Potentialdifferenz*, Annalen der Physik, **273** 5, pp. 69-75, 1889.
- [88] Richardson O. W., *Thermionic Emission from Hot Bodies*, Wexford College Press, 2003.
- [89] Townsend J., *Electricity in Gases*, Clarendon Press, 1915.
- [90] Heddle D. W. O., *Electrostatic Lens System*, Second Edition, Bristol and Philadelphia: IOP Publishing, 2000.
- [91] Liebl H., *Applied Charged Particle Optics*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2008.
- [92] Koopman D. W., *Charge Exchange in NH₃ and CH₄*, J. Chem. Phys. Lett., **49**, pp. 5203-5205, 1968.
- [93] Colutron, *Instructions: Model G-2-D Ion Gun System, Model E-2-D Control Unit*, Colutron Research Corporation, 2008.
- [94] Colutron, *Products 2010*, Colutron Research Corporation, 2008.
- [95] Delacroix J. L., *Introducción a la Teoría de Gases Ionizados*, Ed. Alambra, Madrid, 1968.
- [96] Allen J. S., *An Improved Electron Multiplier Particle Counter*, Rev. Sci. Inst., **18** 10, pp. 739, 1947.

- [97] Ramsden E., *Hall-Effect Sensors*, Elsevier Inc., 2006.
- [98] Nunez E. A., *Characterization of Neutral Particle Detector Time-of-Flight Measurements as Dependent on the Space and Time in the Environment of Venus*, Lulea University of Technology, Department of Computer Science, Electrical and Space Engineering, 2016.
- [99] Van Zyl B., Neumann H., Le T. Q., Amme R. C., *H+N₂ and H+O₂ Collisions: Experimental Charge-production Cross Sections and Differential Scattering Calculations*, Phys. Rev. A, **18** 2, pp. 506-516, 1978.
- [100] Toburen J. H., Nakai M. Y., Langley R. A., *Measurements of High-energy Charge-transfer Cross Sections for Incident Protons and Atomic Hydrogen in Various Gases*, Phys. Rev., **171** 1, pp. 114-122, 1968.
- [101] Guo R. S., Jahnsen L. K., Hakes C. L., Smith K. A., Stebbings R. F., *Collisions of Kilo-electronvolt H⁺ and He⁺ with Molecules at Small Angles: Absolute Differential Cross Sections for Charge Transfer*, Phys. Rev. A, **41** 11, pp. 5929-5933, 1990.
- [102] Rodrigo R., García-Álvarez E., López-González M. J., López-Moreno J. J., *A Nonsteady One-dimensional Theoretical Model Of Mars Neutral Atmospheric Composition between 30 and 200 km*, J. Geophys. Res., **95**, pp. 14795-14810, 1990.
- [103] Nair H., Allen M., Anbar A. D., Yung Y. L., Clancy R. T., *A Photochemical Model of the Martian Atmosphere*, ICARUS, **111**, pp. 124-150, 1994.
- [104] Green M. A., Teubner P. J., Campbell L., Brunger M. J., Hoshino M., Ishikawa T., Kitajima M., Tanaka H., Kimura M., Buenker R. J., *Absolute Differential Cross Sections for Electron Impact Excitation of the 10.8-11.5 eV Energy-loss States of CO₂*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **35**, pp. 567-587, 2002.
- [105] Straub H. C., Lindsay B. G., Smith K. A., Stebbings R. F., *Absolute Partial Cross Sections for Electron-impact Ionization of CO₂ from Threshold to 1000 eV*, J. Chem. Phys., **105**, pp. 4015-4022, 1996.

- [106] Miranda M. del C. J., *Técnicas Analíticas de Origen Nuclear: Un Curso Introductorio*, Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México, Departamento de Física Experimental, 1996.
- [107] Kurt J. Lesker Co., *Pressure Measurement, Technical Notes and Resources*, Kurt J. Lesker Company, 2018.
- [108] ORTEC, *Easy-MCS with the MCS(A73-B32) Software for Microsoft Windows 7 and Windows XP SP3, Hardware and Software User's Manual, Software Version 2.2*, Advanced Measurement Technology Inc., ORTEC, 2013.