

(1-55)

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

"Formación de iones negativos por colisión
disociativa de H_2^+ , H_3^+ y HD_2^+ en H_2 , He y Xe".

"Secciones transversales totales para la captura
y despojo electrónicos de $Tl^{0(+)}$ y $K^{0(+)}$ en H_2 ".

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

PRESENTA

IGNACIO ALVAREZ TORRES

1976



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

C O N T E N I D O

	página
AGRADECIMIENTOS	3
1) Presentación del trabajo.	4
PARTE 1	
"Formación de iones negativos por colisión disociativa de H_2^+ , H_3^+ y HD_2^+ en H_2 , He y Xe".	
2) Introducción.	6
3) Teoría.	8
4) Aparato.	10
5) Procedimiento experimental.	18
6) Errores.	25
7) Resultados y comentarios.	28
Bibliografía.	44
PARTE 2	
"Secciones transversales totales para la captura y despojo electrónico de $Tl^{0(+)}$ y $K^{0(+)}$ en H_2 ".	
8) Introducción.	46
9) Teoría.	48
Un Modelo simplificado.	50
10) Aparato.	55
11) Formulación matemática del problema.	59
12) Errores	67
13) Resultados y comentarios.	68
Bibliografía	81
Conclusión general - Plan de trabajo.	82
APENDICE 1 - Cálculo de la longitud efectiva de la celda de colisión.	84

AGRADECIMIENTOS:

Quiero expresar mi agradecimiento a:

el Dr. C. F. Barnett

a Jack Ray

a Denis Sparks

a Herman Park del Oak Ridge National Laboratory,

al Dr. Jorge Flores

al Dr. Jorge Rickards

y al Dr. Eugenio Ley Koo del IFUNAM

a mi esposa Ma. del Carmen,

por la valiosa ayuda y comentarios

durante la elaboración del presente trabajo.

PRESENTACION DEL TRABAJO.

Un programa eficiente para la obtención de energía por fusión requiere de un entendimiento detallado del comportamiento del plasma dentro de los dispositivos experimentales desarrollados hasta la fecha, de tal manera que la construcción de las grandes máquinas de fusión que se construirán en el futuro, esté basada en principios bien establecidos de la dinámica de plasmas, de ahí la gran importancia del estudio de las características y limitaciones de los plasmas existentes. Las técnicas de diagnóstico y de inyección de haces neutros, así como el análisis del calentamiento y enfriamiento de los plasmas requiere como una de sus más importantes herramientas de un gran número de datos sobre procesos atómicos y moleculares. Además, la comprensión del comportamiento del plasma puede redituar en el conocimiento de procesos atómicos relevantes. Por el momento existen grandes lagunas en los datos atómicos básicos que impiden seriamente sacar fruto de la aplicación de los datos disponibles a los plasmas; es necesario por lo tanto dedicar grandes esfuerzos a la obtención de los datos que puede proporcionar la Física Atómica para la mejor comprensión y explicación de los fenómenos que ocurren dentro del plasma.

Los procesos atómicos han jugado un papel múltiple en el desarrollo y conocimiento que se tiene del plasma hasta la fecha. Un ejemplo claro de esto se tiene cuando se trata de calentar un plasma toroidal por la inyección de haces energéticos de partículas neutras de isótopos de hidrógeno: para maximizar las corrientes inyectadas, es necesario tener un conocimiento amplio de los procesos colisionales que pueden dar lugar ya sea a átomos neutros o bien a iones negativos, especies atómicas útiles en el calentamiento.

Una de las más grandes contribuciones de la Física Atómica al desarrollo del programa de Fusión es en el campo del "diagnóstico de plasmas". Casi todos los parámetros de un plasma tales como: densidad de partículas, temperatura, distribución de energía, niveles de impurezas, tiempos de confinamiento, campos magnéticos y potenciales del plasma, se pueden determinar mediante la aplicación de técnicas que proporciona la Física Atómica. Últimamente se ha mostrado que con un adecuado desarrollo del laser y de haces de partículas pesadas como elementos para "sondear" plasmas, se pueden obtener medidas que sin ambigüedad proporcionen los parámetros del plasma.

Entre los procesos atómicos a los que se ha aludido, se seleccionaron dos de ellos que tienen como característica común el poder ser analizados mediante colisiones atómicas utilizando básicamente el mismo arreglo experimental. Tanto en el problema relacionado con el calentamiento o con el diagnóstico de plasmas se encontraron problemas de gran interés que fueron tratados con las técnicas experimentales expuestas en este trabajo y que redituaron en la obtención de datos que se aplicaron de inmediato.

Se estudió en primer lugar la obtención de iones negativos H^- y D^- por el proceso de colisión disociativa de los iones HD_2^+ , H_3^+ y H_2^+ en diferentes gases. Los datos preliminares fueron expuestos y publicados en la VIII Conf. Int. de Colisiones Atómicas y Electrónicas. En segundo lugar, se determinaron las secciones totales de captura y despojo electrónicos de iones pesados, necesarios para la determinación de los potenciales espaciales del plasma y densidades relativas de partículas en los aparatos del tipo Tokamak y Elmo Bumpy Torus.

P A R T E 1

Formación de iones negativos por Colisión Disociativa de H_2^+ , H_3^+ y HD_2^+ en H_2 , He, y Xe.

2) INTRODUCCION.

La motivación de este trabajo se basa en el creciente interés que hay actualmente en desarrollar técnicas experimentales para producir haces energéticos intensos de iones negativos de hidrógeno y de deuterio. Este interés tiene como fundamento la necesidad que hay de fabricar fuentes de átomos de hidrógeno o deuterio que sirvan para elevar la temperatura de un plasma a un grado tal que sea posible mantener y producir una reacción termonuclear.¹ Una de las técnicas más comunes para la producción de haces energéticos neutros es a través de procesos de intercambio de carga por colisión. Sin embargo, en el intervalo de energías de interés (150 keV- 300 keV) la producción de D^0 a partir de D^+ es ineficiente por consideraciones de energía y de conservación de partículas, lo mismo se puede afirmar respecto de la producción de H^0 a partir de H^+ .

Un método alternativo es el despojo electrónico por colisión de D^- para formar D^0 . En este intervalo de energías, las eficiencias andan alrededor del 80%.

Hay actualmente dos métodos experimentales para formar un haz energético de D^- : (1) La formación de D^- en una fuente de iones y su posterior aceleración a la energía deseada; (2) La aceleración de iones moleculares y su disociación subsiguiente para formar D^- .

El proceso de disociación por colisión presenta interesantes posibilidades para la formación de iones negativos energéticos. Varios trabajos ²⁻⁴ se han publicado sobre los diferentes canales a través de los cuales se puede disociar un ion molecular. Además, la sección transversal total para la disociación ha sido estudiada intensamente. Una de las primeras y extensas investigaciones sobre disociación que dedicaron una atención especial a la formación de iones negativos se debe a Fedorenko ⁵. El encontró que a 12 keV de energía del ion molecular incidente, la sección transversal total para la producción de H^- a partir de H_2^+ sobre Argón era del orden de $2 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$. Williams ⁶ midió también y en forma sistemática, las secciones transversales totales para la producción de H^- a partir de H_2^+ y H_3^+ como iones moleculares incidentes, sobre H_2 y gases inertes. El intervalo de energías de los proyectiles fue de 2 keV a 50 keV. Se han llevado a cabo investigaciones muy intensas ⁷⁻⁸ sobre las secciones transversales totales para la producción de protones con H_2^+ y H_3^+ como proyectiles sobre varios gases y se ha encontrado que las secciones transversales son dependientes del estado vibracional del ion molecular.

3) TEORIA

El estado actual de la teoría de disociación así como una compilación muy completa de los trabajos experimentales hasta 1971 se encuentra en el libro de G. W. McClure y J. M. Peek.² Si por una parte, la sola descripción del sistema molecular iónico del proyectil, con los núcleos correspondientes a los átomos que lo forman, y sus electrones, son un reto a la teoría, y por otra es igualmente complicada la descripción del blanco, resulta prohibitivo por su complicación un tratamiento detallado del fenómeno de disociación.

El ión molecular de hidrógeno H_2^+ por ser el más simple ha sido el más extensamente investigado desde el punto de vista teórico como experimental. Se han hecho cálculos para estimar las secciones transversales para procesos de fotoionización (Bates⁹), de recombinación disociativa (Bauer¹⁰; Stabler¹¹), disociación por impacto de protones (Gerjuoy¹²), disociación por impacto de electrones (Kerner¹³). Sólo los cálculos realizados por Gibson²⁴ pueden compararse con los resultados experimentales; Dunn¹⁴ midió la fotoionización de H_2^+ para longitudes de onda de 3000Å a 9000Å los resultados difieren en un orden de magnitud.

La disociación de H_2^+ en colisiones con gases (H_2 , Ar, N_2) fue estudiada por Salpeter¹⁵ usando la aproximación de Born. La identificó como la probabilidad de una transferencia de cantidad de movimiento superior a la impulsión necesaria para vencer la energía de amarre del ión molecular. La sección transversal para la producción de protones resultó dependiente del inverso del cuadrado de la energía del proyectil. Por encima de los 300 keV donde se espera que sea válida la aproximación de Born el acuerdo entre teoría y experimento es muy bueno, pero a energías menores los cálculos son muy altos respecto de los datos experimentales.

Para intentar una teoría es necesario tener una idea del mecanismo por medio del cual se lleva a cabo la disociación, de aquí la importancia de las colisiones que involucran sistemas moleculares, tanto a baja como a alta energía. Se espera que del estudio de estas colisiones se obtenga un conocimiento de superficies de energía de estructuras triatómicas o aun más complejas. Muy buenos resultados han obtenido C. Cisneros y colab.¹⁶, al analizar las distribuciones angulares de los productos de disociación D^- y $D^0 + D_2^0$ obtenidos al hacer interaccionar D_2^+ en vapores de Cs a energías de 1 keV a 5 keV. En base a suposiciones muy generales, se pudo explicar la estructura de las distribuciones angulares, así como el proceso responsable de dicha estructura. Esto marca el principio de un campo muy amplio, a la vez que sugiere programas encaminados a la mejor comprensión de procesos atómicos hasta ahora sin explicación satisfactoria.

4) APARATO

Se usaron dos tipos de fuentes de iones en la terminal del acelerador Cockroft-Walton del Laboratorio Nacional de Oak Ridge: una convencional de radiofrecuencia y una de filamento. Para obtener los iones HD_2^+ , se introdujo en la fuente de radiofrecuencia una mezcla de H_2 y D_2 . El intervalo de energías de aceleración va desde 50 keV hasta 600 keV. Para trabajar en condiciones óptimas de estabilidad se trabajó con las lentes electrostáticas a voltajes tales que permitieran tener un haz de diámetro mucho mayor que el de las rejillas de la cámara. El haz es dirigido por las lentes hacia un analizador magnético que consiste básicamente en un electroimán que permite el análisis momental de los iones; éstos, así seleccionados sufren una deflexión de 90° y son dirigidos hacia la cámara especialmente diseñada para medir secciones transversales. Este aparato consiste básicamente de dos cámaras para gas, con bombeo diferencial, un conjunto de placas para deflexión electrostática que servirá para separar los productos disociados y detectores para registrar las intensidades, como se muestra en la figura 1.

Se dispone además, en el trayecto, de dos placas que permiten registrar, en forma aproximada, la corriente. Una de ellas está situada a la entrada y la otra en el punto medio del trayecto del haz en el interior de la cámara. Ambas están conectadas a un micro-microamperímetro.

Dos conjuntos de aberturas con bordes terminados a navaja fueron colocados como colimadores. El primer conjunto tiene 0.05 y 0.15 cm de diámetro y el segundo, que define la longitud geométrica de la celda de disociación, también 0.05 y 0.15 cm. Para asegurar que la dispersión en las aberturas no tiene influencia en las medidas, la abertura situada a la salida de la celda de gas se cambió de 0.15 cm. a 0.25 cm y a 0.3 cm.

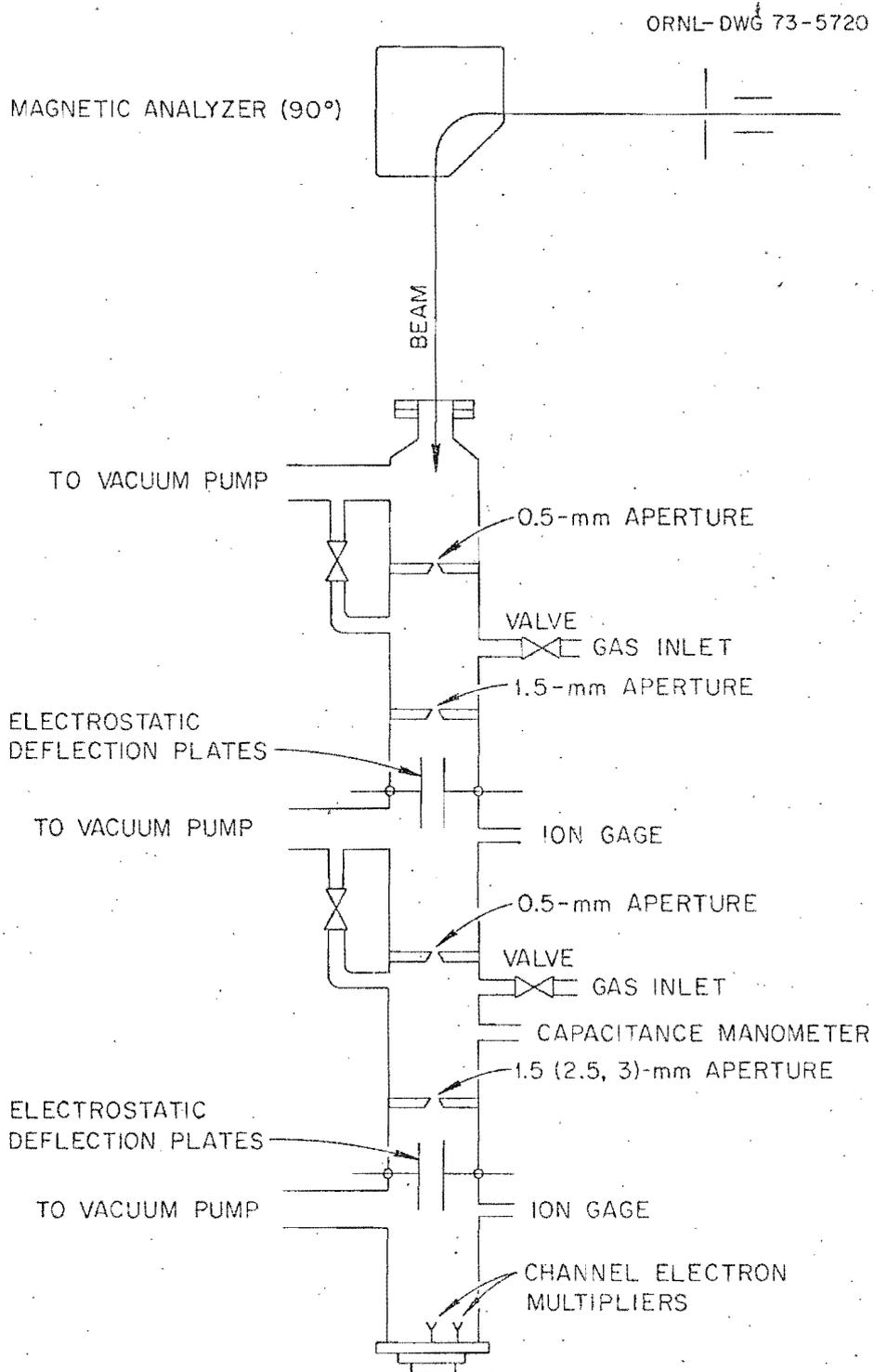


Figura 1. Diseño esquemático del aparato experimental.

La longitud geométrica de la cámara de disociación es de 30.5 cm. La rapidez de bombeo fue suficiente para mantener una presión diferencial entre esta cámara y la adyacente, de 1500. La construcción es de acero inoxidable # 304 y sus partes están ensambladas mediante O'rings de aluminio y de Indalloy Solder #3.

Las placas deflectoras que muestra la figura 1 tienen 15.24 cm de largo y 2.4 cm. de ancho y su separación es de 2.4 cm. El aislamiento entre las placas deflectoras y las paredes de la cámara es suficiente para mantener voltajes de 30 kilovolts.

El sistema es bombeado por tres bombas de difusión de aceite de 1500 litros/seg , NRC Modelo HK6-1500. Cada una de ellas tiene un baffle de la misma serie NRC, HW6 enfriado por agua, que aíslan la región de alto vacío de los vapores de aceite, de la bomba de difusión. Las bombas mecánicas auxiliares fueron Duo Seal, Modelo 1397 de The Welch Scientific Company. El vacío del sistema fue siempre del orden de 10^{-7} mm de Hg sin gas en la celda. Dos ion-gauge estratégicamente situados a lo largo de la cámara permitieron registrar el vacío de la cámara en sus diferentes secciones. La presión de la celda de colisión requiere medirse con mucha exactitud, para ello se usó un MKS Baratron o barómetro capacitivo que proporcionó un monitoreo continuo de la presión y su medida.

El barómetro capacitivo ha demostrado tener grandes ventajas sobre el uso del tradicional Mc.Leod. La más notable entre ellas es que el barómetro capacitivo, mide la presión en el sentido de la definición o sea como fuerza por unidad de área y no depende por lo tanto de la naturaleza del gas. La calibración de estos aparatos la hace la fábrica antes de suministrarlos a los laboratorios, pero lo hace en un intervalo de presiones mayor que el empleado en el experimento por lo que fue calibrado

contra un McLeod gauge de precisión, usando gas de hidrógeno en el que el efecto de bombeo es mínimo. El McLeod gauge usado fue de la Vacuum Consolidated Corporation Modelo GM 110.

Dos aspectos están involucrados en la alineación del aparato. El primero se refiere a la alineación de las cuatro aberturas y el segundo a la óptima posición de los detectores en relación con la línea definida por las aberturas. La primera se llevó a cabo con un telescopio y después se hizo pasar un rayo laser a través de los orificios hacia el centro del tubo de salida del analizador. El uso del telescopio se encontró muy adecuado y preferible al laser al principio de la alineación, pero el laser fue muy adecuado para optimizar la alineación del telescopio, sobre todo en los puntos distantes. La alineación de los detectores se llevó a cabo mediante un montaje muy conveniente. Como se puede apreciar en la figura 2 el montaje consta de dos placas móviles A y B. La placa A resbala sobre la placa fija mediante un O'ring de viton cuando se hace girar el tornillo sujeto en un extremo, proporcionando así el movimiento horizontal de los detectores dentro de la cámara. La placa B, sobre la que están sujetos los detectores, resbala sobre A, gracias a otro O'ring y mediante el otro tornillo, proporciona el movimiento vertical. La posición más conveniente de los detectores se determinó cada vez que se cambió la energía.

Se usaron dos marcas diferentes de chaneltrones, los primeros fueron Spiraltron electron Multiplier, de Bendix, Modelo 4219 y los segundos, tipo Funneltron de Mullard B419BL4. A estas energías tienen igual eficiencia para partículas cargadas y para partículas neutras. Su capacidad para detectar cualquier radiación hace que sea necesario tener cuidado para que la radiación emitida por otros instrumentos no

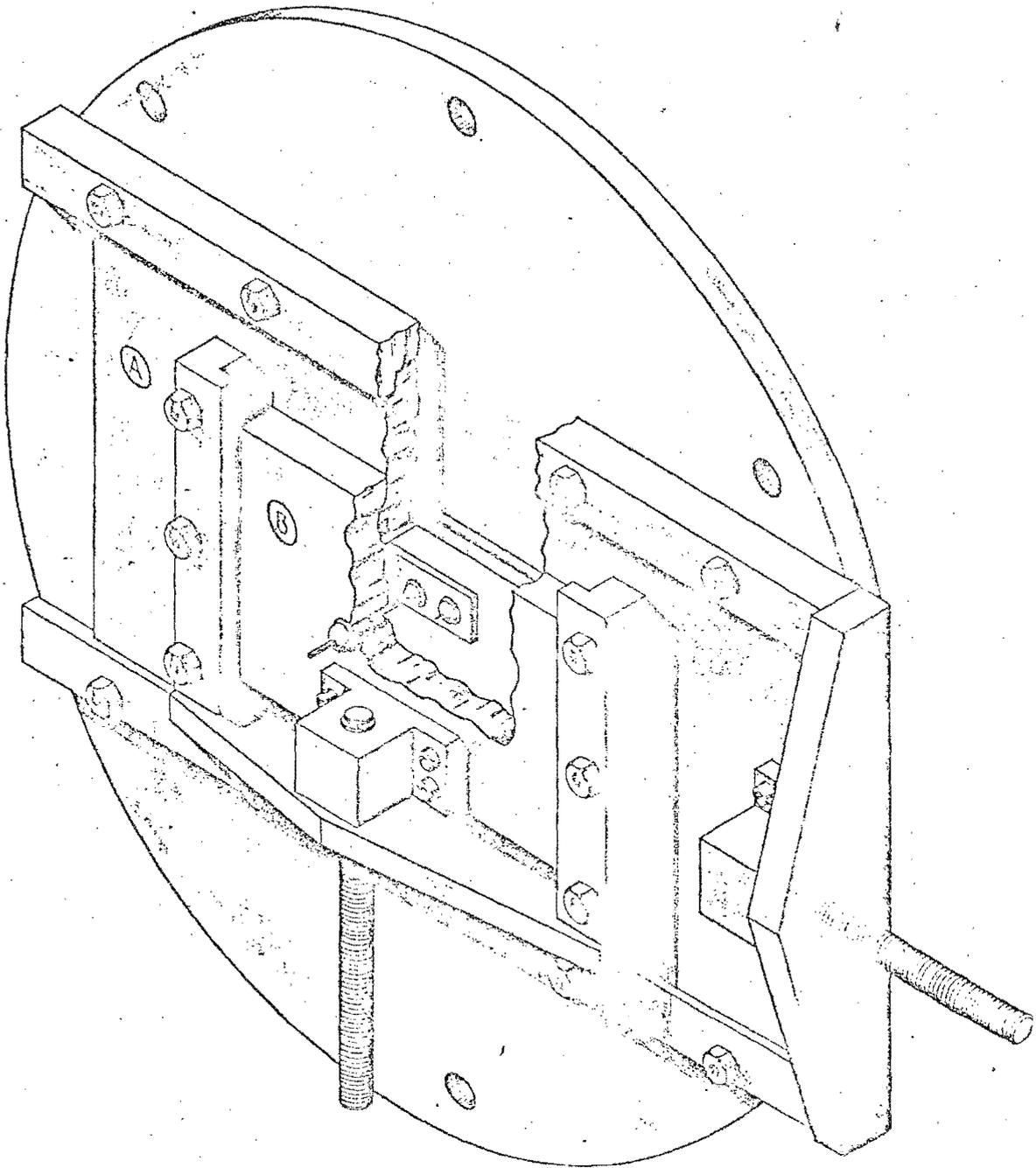


Figura 2.- Diseño que muestra el montaje deslizante de los detectores.

distorsione las medidas, por ejemplo, los ion-gauge. Se operaron con potencial de -2.8 kilovolts lo que se traduce en una ganancia del orden de 10^7 . Fueron operados todo el tiempo en la forma de saturación de carga sugerida por Ray y Barnett.¹⁷

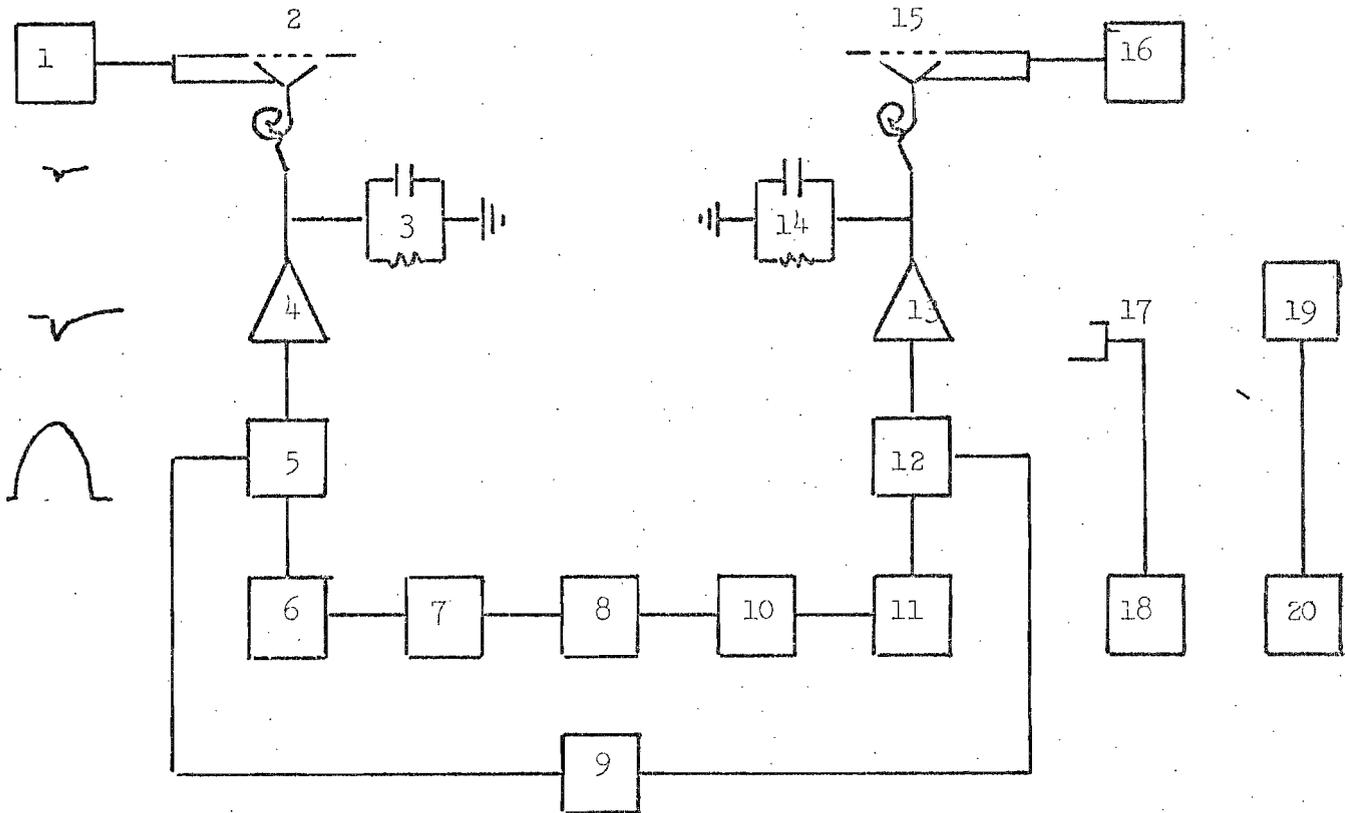
La información necesaria para determinar las secciones transversales totales y las fracciones de equilibrio, proviene de tres conjuntos de números que representan : (1) la intensidad total del haz, I_0 ; (2) La intensidad de la componente negativa, $I(D^-, H^-)$; (3) La presión del gas usado como blanco. Este último parámetro ha sido ya comentado. Los dos primeros conjuntos de números se obtienen de los detectores y el equipo electrónico asociado sirve para hacer manejable la información que de ellos proviene. El pulso de corriente que proviene del channeltron tiene una duración de unos 30 nseg, un circuito RC en el preamplificador lo transforma en un pulso de voltaje de 1 microseg. de duración de caída. Los preamplificadores usados fueron para el detector central un ORTEC modelo 113 con su capacidad ajustada a 100 pf, y un TENNELEC TC145 para el lateral, con la misma capacidad. Al intercambio de módulos en la electrónica no se observó ningún cambio en las medidas. Los pulsos así amplificados se hicieron pasar a un amplificador lineal TENNELEC TC 203 BLR. Su flexibilidad permite optimizar la razón señal/ruido. Se operó con una ganancia de 400 para ambos detectores. Los pulsos así preparados pasaron a un escalador para ser contados. Se usaron 2 ORTEC 430 como "esclavos", regidos por un "timer-counter" ORTEC 431 como "maestro". Una característica muy conveniente de los modelos 430 y 431 es que un escalador puede ajustarse para empezar o parar el conteo en cualquier número de escaladores, simultáneamente. Este hecho se lleva a cabo por interconexiones entre ellos. En esta forma fue posible contar simultáneamente

en los detectores; el tiempo de conteo se ajustó a 10 seg. en forma de tener una buena estadística.

Dos fuentes convencionales de alto voltaje, construidas por el ORNL proporcionaron la diferencia de potencial necesaria entre las placas para producir la desviación deseada de las partículas cargadas hacia el detector lateral. Un multímetro Triplet modelo 630 conectado directamente a las terminales de las placas deflectoras proporcionó una medida precisa del voltaje entre las placas.

La figura 3 muestra el esquema general de la electrónica usada.

Figura 3.- ESQUEMA DE LA ELECTRONICA EMPLEADA



- | | |
|--|--|
| 1.- Fuente de alto voltaje
J. Fluke, modelo 405 | 11.- Escalador ORTEC, modelo 430. |
| 2.- Rejilla de alta transparencia. | 12.- Amplificador lineal, TENNELEC
TC 203 BLR. |
| 3.- Circuito RC Asociado al
preamplificador | 13.- Preamplificador TENNELEC,
modelo TC 145 |
| 4.- Preamplificador ORTEC, modelo 113 | 14.- Circuito RC asociado al preampli-
ficador |
| 5.- Amplificador lineal TENNELEC,
TC 203 BLR. | 15.- Rejilla de alta transparencia. |
| 6.- Escalador ORTEC, modelo 430. | 16.- Fuente de alto voltaje ORTEC,
modelo 456. |
| 7.- "Rate-meter" ORTEC, modelo 441. | 17.- Cachador para los iones. |
| 8.- Escalador de tiempo ORTEC,
modelo 431. | 18.- Micro-microamperímetro Kithley
modelo 410. |
| 9.- Osciloscopio Tektronic Inc. | 19.- Cabeza del MKS baratron. |
| 10.- "Rate-meter" ORTEC, modelo 441. | 20.- MKS baratron, modelo 77 |

5) PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Hidrógeno 99.98% puro se colocó en la cámara de colisión a través de una válvula de fuga variable de Granville-Phillips. Esta válvula tiene una conductancia variable y continua, desde los 10 cc por segundo hasta los 10^{-10} cc por segundo. La fuga es continua una vez que se ha fijado su magnitud de tal manera que la celda de colisión, que tiene bombeo diferencial, alcanza el equilibrio a los pocos minutos de haber determinado ésta.

Los haces emergentes de la celda de colisión pasan a través de un analizador electrostático que separa las componentes del producto de la reacción. Por ejemplo, la disociación de HD_2^+ con una energía E produce 7 componentes cargadas de interés: H^+ (o H^-) con $1/5$ de E , D^+ (o D^-) con $2/5$ de E , HD^+ con $3/5$ de E , D_2^+ con $4/5$ de E y además los HD_2^+ que no fueron disociados.

La expresión

$$V = \frac{2 E b y}{q d x}$$

E es la energía del ion en eV.

b es la separación de las placas en cm.

y es la deflexión vertical en el plano de los detectores, en cm.

q es la carga de los iones en unidades de e .

d es la longitud de las placas de deflexión, en cm.

x es la distancia horizontal del centro de las placas al plano de los detectores, en cm.

V es el voltaje de las placas, en volts.

permite calcular la separación de las componentes en función de parámetros adecuados y llevar la componente seleccionada al detector lateral. A causa

de que los detectores usados son multiplicadores electrónicos de dínodo continuo fue imposible separar las componentes neutras.

El comportamiento del flujo incidente al atravesar la celda de gas se puede tratar en la forma usual: Sea $I(x)$ el flujo de A moléculas en el haz, dirigidas en la dirección x . Este flujo se define como el número de moléculas que atraviesan un área unitaria, perpendicular a la dirección del haz, en una unidad de tiempo. En términos de la velocidad de las moléculas del haz, será: $I(x) = v n_a(x)$. $n_a(x)$ es la densidad de las A moléculas (número de moléculas por unidad de volumen) en el haz en la posición x . El flujo va a decrecer a causa de las colisiones a través de la longitud de la celda de colisión. La pérdida fraccional en la intensidad del haz se puede expresar en términos del camino libre medio λ que se define como la distancia media con que un haz de moléculas atraviesan el gas usado como blanco, de esta manera:

$$\frac{I(x) - I(x + \Delta x)}{I(x)} = -\frac{\Delta I}{I} \approx \frac{\Delta x}{\lambda}$$

En el límite $-\frac{1}{I} \frac{dI}{dx} = \frac{d \ln I}{dx} = \lambda^{-1}$

de donde $I = I_0 e^{-(x/\lambda)}$

I_0 es el flujo inicial en $x = 0$.

La probabilidad de que el haz molecular sufra una colisión en el intervalo entre x y $x + \Delta x$ debe ser proporcional a la densidad del gas del blanco n_B . Luego $(x/\lambda) \propto n_B \Delta x$.

La sección transversal total para la colisión se puede definir como la constante de proporción tal que: $(1/\lambda) = \sigma n_B$

por lo tanto $I = I_0 e^{-x n_B \sigma}$

Si esta ecuación describe la atenuación del haz incidente para un creciente espesor del blanco, la ecuación que describe la formación de un producto de la reacción será de la forma:

$$I' = I_0 (1 - e^{-x n_B \sigma})$$

Por lo tanto la sección transversal total para la producción de D^- o H^- se puede escribir como:

$$\frac{I(D^-, H^-)}{I_0} = 1 - e^{-\pi \sigma(D^-, H^-)} \quad 1)$$

donde $I(D^-, H^-)$ representa la intensidad de D^- o de H^- , I_0 representa la intensidad de los iones moleculares incidentes y π es el "espesor" del blanco: $\int_{-\infty}^{\infty} d\pi = n l$
 $n (= n_B)$ es la densidad del blanco y $l (= x)$ es la longitud efectiva de la cámara de colisión.

Las fracciones de las intensidades de los iones negativos

$$F(D^-, H^-) = \frac{I(D^-, H^-)}{I_0} \quad 2)$$

tienen dos regiones de interés: (1) una región de crecimiento lineal para n muy pequeña, llamada región de blanco delgado o de colisión simple; (2) una región cuyo crecimiento muestra una dependencia cuadrática de la presión, para n grande, donde se presentan colisiones múltiples.

En la región de colisión simple, la expresión (1) se puede desarrollar en serie de potencias ya que π es muy pequeño, y tomando el primer término, la ecuación 1) queda como:

$$F^- = \sigma(D^-, H^-) \pi \quad 3)$$

Cuando el espesor del blanco se hace crecer, F^- crece linealmente y la sección transversal total se puede obtener de la pendiente de una gráfica de F^- contra π .

Es conveniente enfatizar las características de la ecuación 3 ya que es esta ecuación la que usualmente se relaciona con los parámetros macroscópicos.

El "espesor" del gas en la celda de colisión, $\bar{\pi}$ es igual a $N_A l P (RT)^{-1}$, en unidades de moléculas-cm⁻². P es la presión del del gas, en Torr ; l es la longitud de la trayectoria a través del gas usado como blanco, en cm ; T es la temperatura absoluta del gas ; N_A es el número de Avogadro y R es la constante del gas (8.31 x 10⁷ ergs-mol⁻¹-°C⁻¹) Otra forma de escribir a $\bar{\pi}$ es como QP moléculas-cm⁻², donde $Q = 9.9 l(\text{cm})T^{-1}(\text{°K}) \times 10^{15}$ moléculas-cm⁻²mol⁻¹; l y T son la longitud de la trayectoria en la celda de colisión y la temperatura del gas. Se ve que para una celda de dimensiones dadas y a temperatura ambiente, Q es una constante y $\bar{\pi}$ es una función de la presión solamente.

Por lo que respecta a la temperatura del gas T, ya que las presiones que se usan son muy bajas (lo que implica que la trayectoria libre media de una molécula del blanco es mayor que las dimensiones de la cámara de colisión) se tomó la temperatura de las paredes de la cámara de colisión. Para ello se usó un termómetro de mercurio de precisión.

La ecuación 3 se puede escribir como:

$$\frac{F^-}{P} = Q \sigma$$

Se puede apreciar más claramente la aseveración anterior de que es posible calcular la sección transversal total de una gráfica de F^- contra P, en la región de colisión simple. La región de crecimiento lineal limita el dominio de colisión simple. La precisión en la estimación de σ depende de lo cierto que sea que se trabaja en el dominio de colisión

simple o en otras palabras, que tanto se aproxime a una recta la gráfica de F^- contra P y por supuesto también de la precisión en la medida de los parámetros externos involucrados.

La figura 4 muestra el crecimiento lineal de F^- con \bar{w} en la región de colisión simple, correspondiente a HD_2^+ sobre H_2 .

Las líneas pueden no pasar por el origen, debido sobre todo a cambios en las componentes del haz, sea por colisiones entre los mismos iones del haz durante el trayecto o por colisiones contra los gases residuales en el sistema o por choques contra las aberturas. Este fondo se puede reducir de varias maneras: (1) el uso de técnicas de alto vacío, lo que reduce la existencia de gases residuales; (2) reducción de la distancia entre los detectores y la celda de colisión; (3) el uso de aberturas con los bordes terminados a navaja; (4) una alineación cuidadosa de las aberturas.

La pendiente se determinó haciendo un ajuste por mínimos cuadrados, y los valores reportados son el resultado de promediar varias determinaciones de estos valores. Esta repetición de las medidas debe efectuarse varias veces cuando algún valor se separa notablemente de otros.

Cuando se incrementa la presión del gas en la celda de colisión más allá de la correspondiente a colisión simple, la fracción F^- muestra una dependencia cuadrática de la presión; a mayores incrementos, alcanza un máximo y luego decrece hasta mostrar un valor de equilibrio que es independiente de cualquier otro incremento en la presión. Al valor de F^- en este límite se le llama "fracción de equilibrio", se denota por F_{∞}^- y se define como:

$$F_{\infty}^- = \lim_{P \rightarrow \infty} F^-$$

ORNL-DWG 75-10438

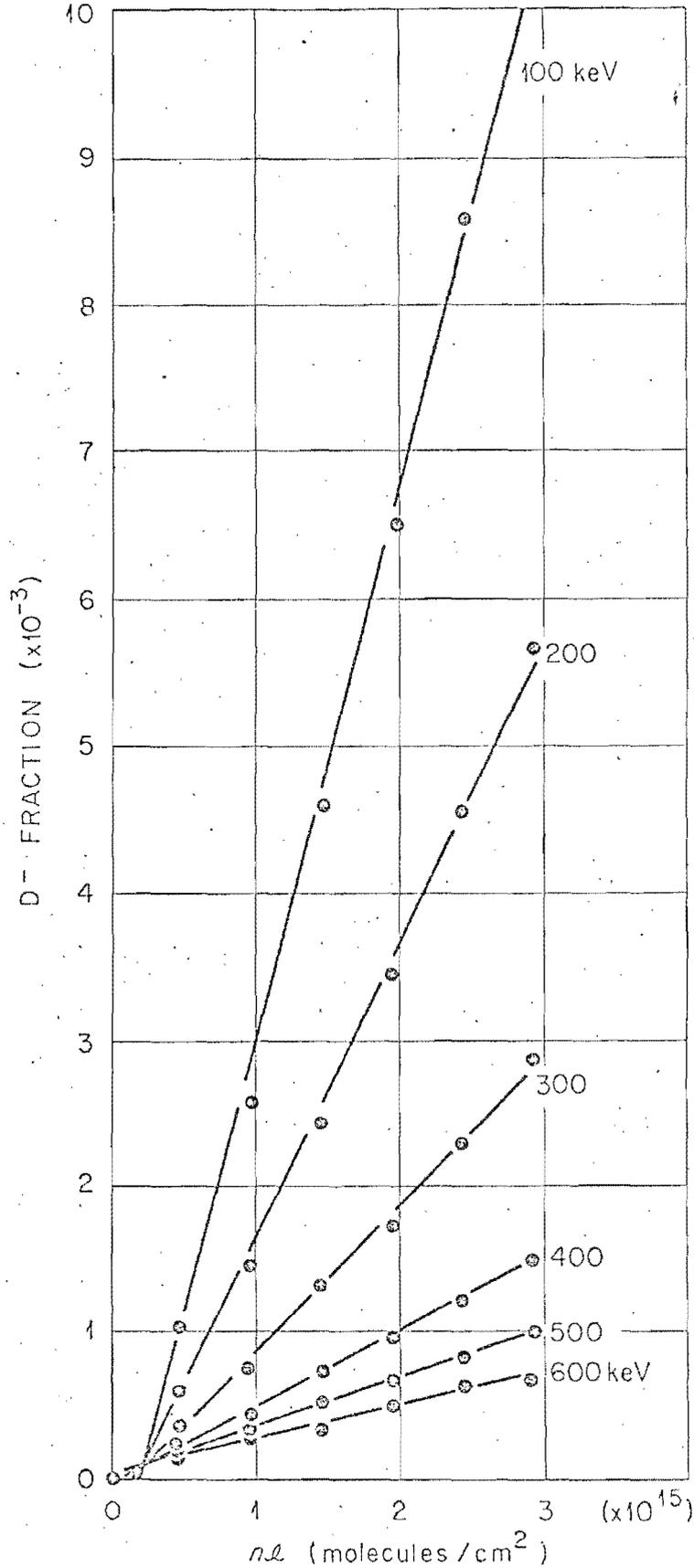


Figura 4.- Curvas típicas que muestran el crecimiento lineal de D^- para varias energías del ion molecular HD_2^+ en hidrógeno como una función del espesor del blanco $\bar{n} = nl$.

Se midieron las fracciones de equilibrio y los máximos para D^- y H^- con HD_2^+ , H_2^+ y H_3^+ sobre H_2 , He y Xe y se han comparado los resultados para la misma velocidad de D^- y H^- .

Aunque las fracciones de equilibrio reportadas van hasta 50 micrones de presión en la celda, fue posible incrementar la presión hasta el doble de este valor sin que se observara un cambio notable respecto del valor reportado.

Los iones negativos fueron detectados por el chaneltrón lateral y los neutros por el central. La intensidad total del haz fue determinada por el mismo chaneltrón central, con las placas deflectoras a potencial de tierra. Este método de medida requiere una atención especial a la estabilidad del haz. Aunque la fuente del voltaje del acelerador es muy estable, para minimizar los efectos de cualquier inestabilidad, la determinación de las medidas, componentes cargadas y neutras, y la intensidad total, se tomaron alternativamente. Se cuidó especialmente del número de partículas neutras, que debe ser constante para I. fija y presión y energía dadas; de ese modo fue posible captar alteraciones bruscas en la intensidad total y desechar esos datos. Se estima que los cambios en la intensidad total del haz para una misma medida fueron siempre menores al 1%.

6) ERRORES

Barnett y Gilbody¹⁸ han discutido con detalle las fuentes principales de error en las colisiones del tipo de disociación. Los errores sistemáticos provienen principalmente de : (1) la longitud efectiva de la celda de colisión; (2) desviaciones de la condición de blanco delgado, o sea de la región de colisión simple; (3) impurezas en el gas de la celda de colisión; (4) pérdida de productos de la reacción en el orificio de salida de la celda de colisión; (5) medida de la presión del gas.

Con la hipótesis de tener un flujo molecular, Toburen¹⁹ dedujo una forma sencilla de estimar la longitud efectiva de la celda de colisión la cual es mayor que su longitud geométrica a causa del flujo del gas a través de las aberturas de la celda causado por el bombeo diferencial. Este efecto resulta ser crítico para celdas de pequeña longitud. Para la celda usada el incremento en la longitud se estima en menos del 1%. Su cálculo se muestra en el Apéndice 1. El efecto de la longitud efectiva es que los valores calculados para las secciones transversales son ligeramente más grandes que el "verdadero" valor de las secciones.

Para la determinación del valor absoluto de la sección transversal se determinó la pendiente de F^- contra P . Se tomaron precauciones especiales para asegurar que la pendiente era lineal y que existían las condiciones de blanco delgado. La figura 4 muestra ejemplos del crecimiento lineal. Se aprecia de la figura como para H_2 como blanco y para la formación de D^- , el crecimiento lineal existe hasta más o menos 3×10^{15} molec/cm² para el intervalo de energías de 100 keV hasta 600 keV de los proyectiles HD_2^+ . En este intervalo, las curvas son lineales dentro de un 3%. El efecto de colisiones múltiples en las secciones medidas es que producen un valor ligeramente más pequeño que el "verdadero" valor.

Si el efecto de impurezas presentes en el sistema no se puede evitar, si se puede minimizar usando técnicas de alto vacío y calentando al sistema para que suelte las impurezas embebidas en el material. Esta última precaución no se consideró necesaria ya que los gases usados no se condensan fácilmente y el vacío logrado por el sistema de bombeo lo mantuvo siempre entre los 10^{-8} y 10^{-7} mm de Hg. Antes de introducir los gases a la celda de colisión, se evacuó siempre la línea de conducción de los tanques abastecedores a la celda mediante una bomba mecánica durante un tiempo mínimo de unos 10 minutos. Se consideró por lo tanto que el efecto de impurezas fue despreciable.

La pérdida de productos de la reacción en las aberturas ha sido una de las principales fuentes de errores en experimentos de disociación por lo que se prestó una atención especial a asegurar una recolección total de esos productos mediante una alineación cuidadosa e incrementando el diámetro de la abertura situada a la salida de la celda de colisión. Al incrementar su diámetro de 1.5 a 2.5 mm, se observó un incremento en la fracción $F(D^-)$ de un 20% para el haz de HD_2^+ con energía de 100 keV, del 10% para 200 keV y del 1 al 2 % para 300 keV, no advirtiéndose ningún incremento en las fracciones, a mayores energías. Se incrementó nuevamente el diámetro de la abertura de 2.5 mm a 3mm no observándose ningún cambio respecto de las fracciones medidas con la abertura de 2.5 mm. La alineación de los detectores se comprobó en forma especial a cada cambio de energía. A causa de la gran estabilidad de la energía del acelerador se estimó despreciable la influencia en las medidas causada por alteraciones en la energía.

Otras incertidumbres en las medidas debidas a cambios en la intensidad del haz y cambios o presencia de densidades en el gas usado

Como blanco se pueden evaluar mejor calculando las incertidumbres involucradas al obtener la pendiente de la línea recta a través de los datos experimentales presentes en la gráfica de F^- contra P. Estas incertidumbres se estiman menores del 10%.

Los errores encontrados en la calibración del MKS Baratron contra el medidor McLeod son menores del 3%.

Las incertidumbres combinadas, de los errores sistemáticos y al azar se calcula que son menores del $\pm 12\%$.

7) RESULTADOS Y COMENTARIOS

La figura 5 muestra las secciones totales para la producción de H^- y D^- originadas por las colisiones de H_2^+ , H_3^+ y HD_2^+ en un blanco gaseoso de H_2 . Las secciones están graficadas como funciones de la velocidad de los productos negativos D^- o H^- . Dentro de la incertidumbre experimental las secciones para la producción de esos productos negativos fueron las mismas para las especies de iones moleculares triatómicas. La producción de iones negativos con H_2^+ como proyectiles muestran una dependencia diferente de la velocidad que la que exhiben los iones H_3^+ o HD_2^+ , para velocidades mayores que 3.3×10^8 cm/seg. El mismo comportamiento ha sido observado anteriormente⁵ en el caso de producción de protones. Los H^- obtenidos a partir de HD_2^+ fueron del orden del fondo proveniente del gas residual o de colisiones con las aberturas. La producción de H^- usando H_2^+ y H_3^+ como proyectiles ha sido medida anteriormente por Williams⁶, pero a velocidades más bajas que en el presente experimento. Extrapolando los resultados obtenidos hacia velocidades más bajas y comparando con los reportados en la referencia 20, se encuentra que difieren en menos del 50%; Williams²⁰ notó una variación hasta del 20% en sus medidas de las secciones para la producción de H^- con el tiempo, mientras que las secciones para la producción de protones permanecían esencialmente las mismas. Williams investigó cuidadosamente los efectos que en sus medidas tenía el variar los parámetros en la fuente de iones y encontró modificaciones en el valor de las fracciones. En este trabajo se encontraron también fluctuaciones en los valores de las secciones para la producción de H^- y D^- al cambiar las condiciones de la fuente de iones; dichas fluctuaciones fueron de alrededor del 15%. Las secciones reportadas

ORNL-DWG 73-2898R

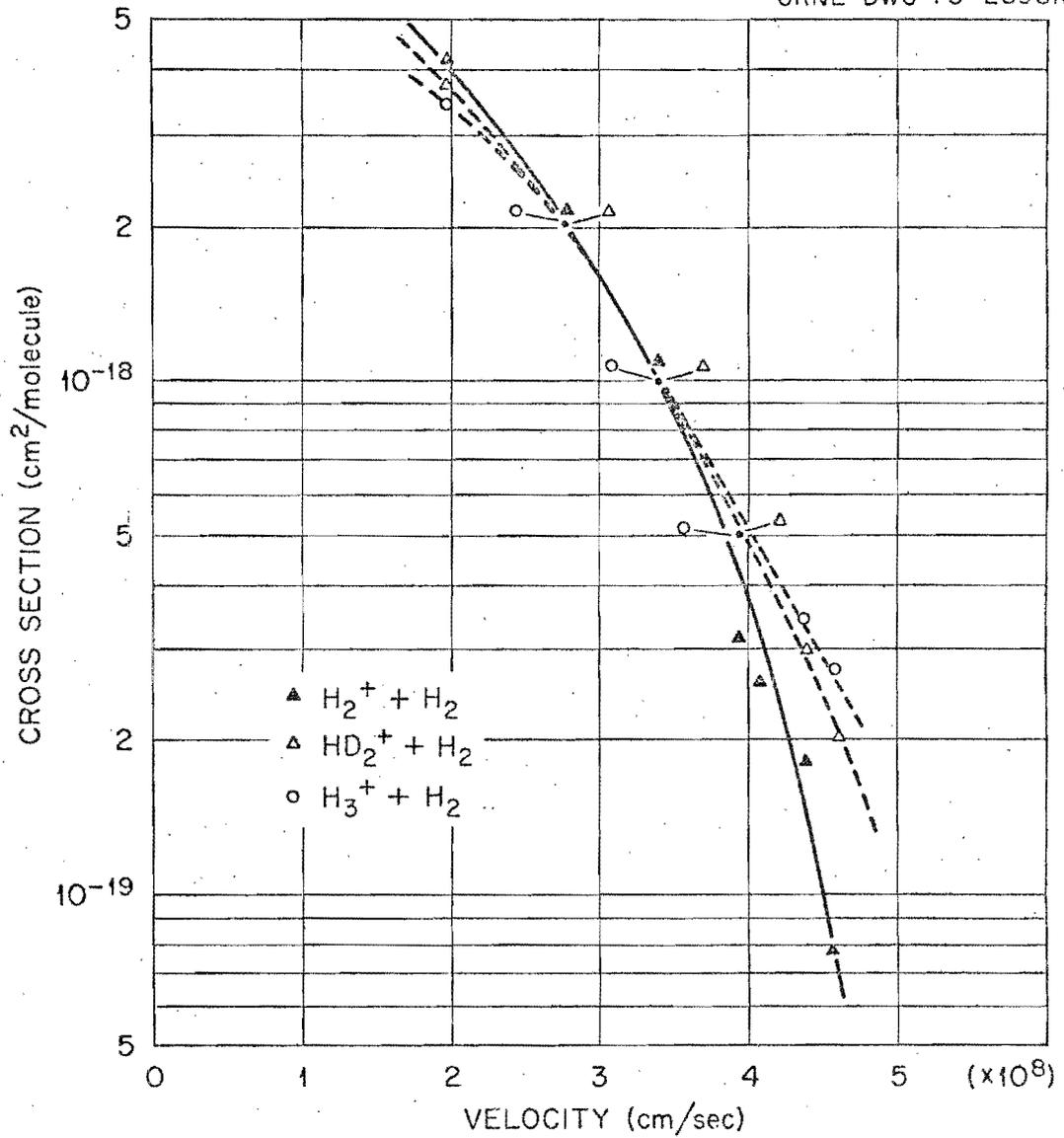


Figura 5.- Secciones transversales totales para la producción de D^- y H^- con HD_2^+ , H_3^+ y H_2^+ como proyectiles, disociados en H_2 .

aquí son aquellas para las cuales las condiciones de la fuente de iones fueron tales que la producción de iones negativos se estimó máxima.

Las fluctuaciones de los valores de las secciones con las condiciones de la fuente de iones son debidas principalmente a que los diferentes niveles vibracionales de los iones moleculares se pueblan de diferente manera, influyendo esto en el mecanismo de la disociación; este hecho ilustra nuevamente la necesidad de conocer las poblaciones de los estados vibracionales de los iones moleculares que se usan en experimentos de disociación.

La figura 6 muestra las fracciones de D^- formadas por la disociación de HD_2^+ en H_2 para energías del ion molecular incidente de 100 keV a 600 keV, como funciones de la densidad del blanco gaseoso al incrementar ésta hasta 4.8×10^{16} molec/cm². A bajas presiones, las fracciones varían linealmente, para alcanzar un máximo y luego decrecer a su valor de equilibrio. El máximo de las fracciones ocurre para densidades entre 1×10^{16} y 2×10^{16} molec/cm². La reducción en las fracciones de D^- después del máximo es debida a la pérdida de un electrón del D^- y a una colisión del nuevo átomo neutro recién formado para dar lugar nuevamente a un D^- .

Las figuras 7 y 8 muestran las fracciones de H^- formadas por la disociación de H_2^+ y H_3^+ en H_2 . Las energías se han seleccionado de manera de obtener el producto negativo a la misma velocidad.

Gráficamente aparece como si la fracción negativa correspondiente a la menor velocidad fuera decreciente aún para presiones de 50 mtorr.; incrementando la presión hasta 150 mtorr no se produjeron cambios notables en los valores de las fracciones por lo que se tomaron esas fracciones como las correspondientes a su valor de equilibrio.

ORNL-DWG 73-5723

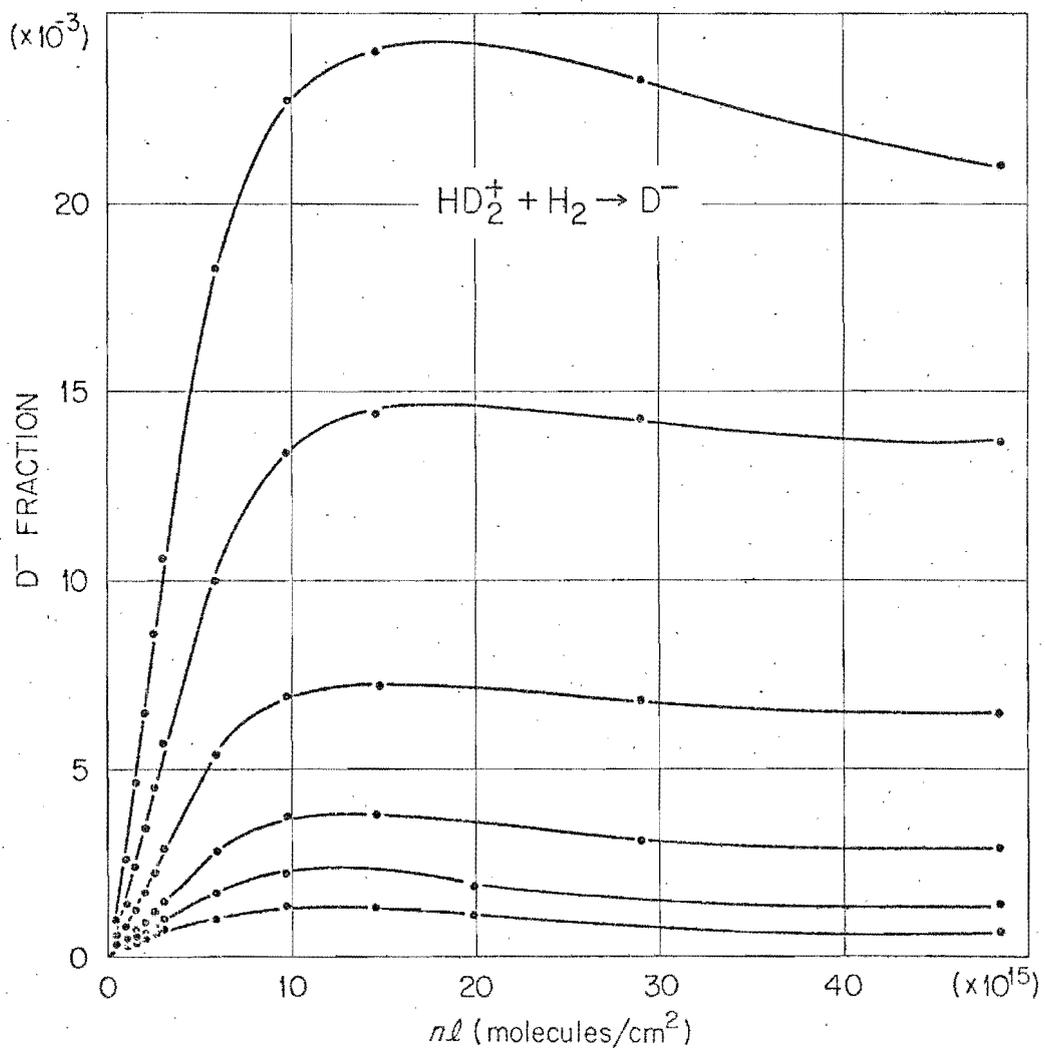


Figura 6.- Producción de D^- por la disociación de HD_2^+ en H_2 .
Las energías del ion incidente van de 100 a 600 keV.

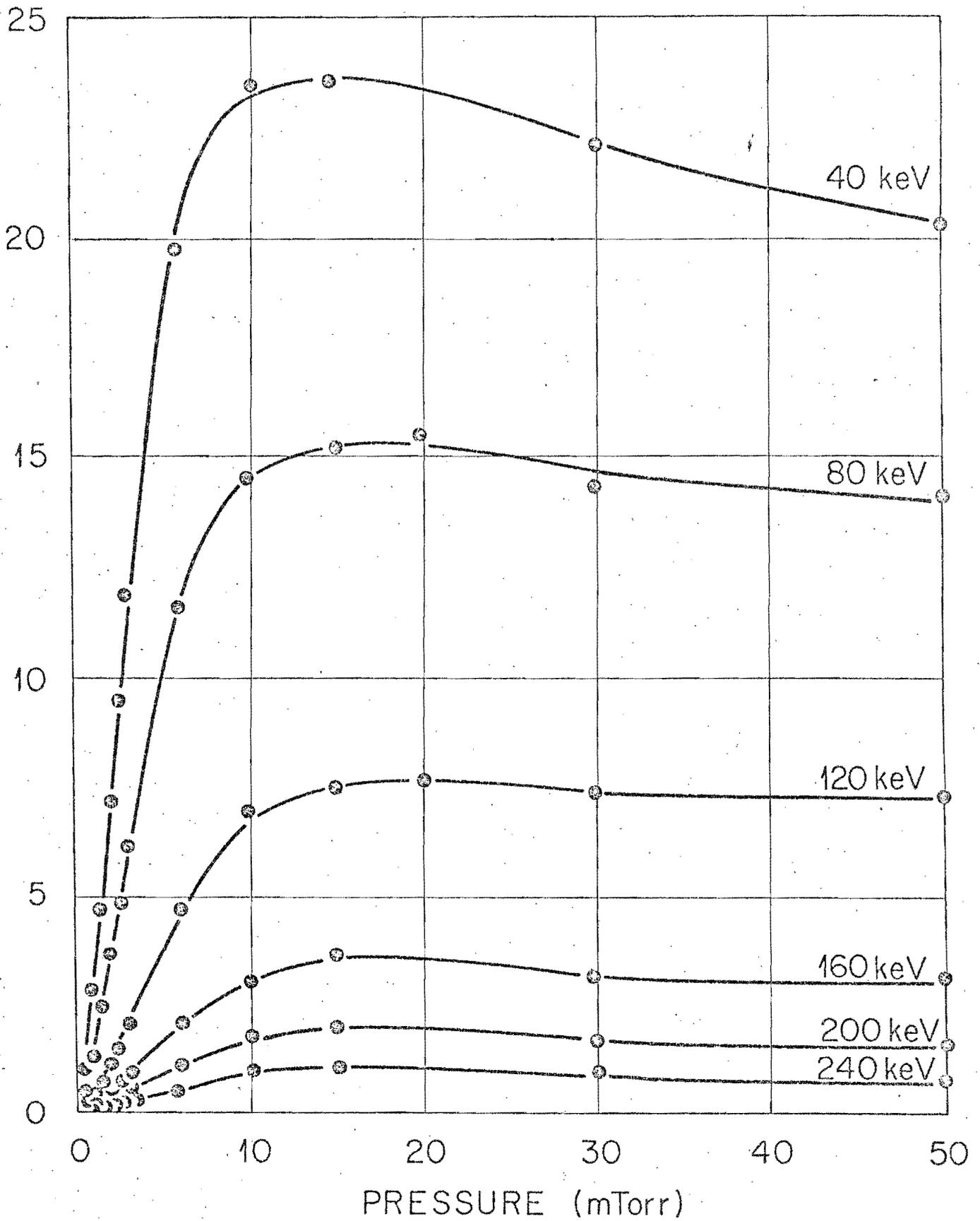


Figura 7.- Producción de H^- por la disociación de H_2^+ en H_2 .
Las energías del ion incidente van de 40 a 240 keV.

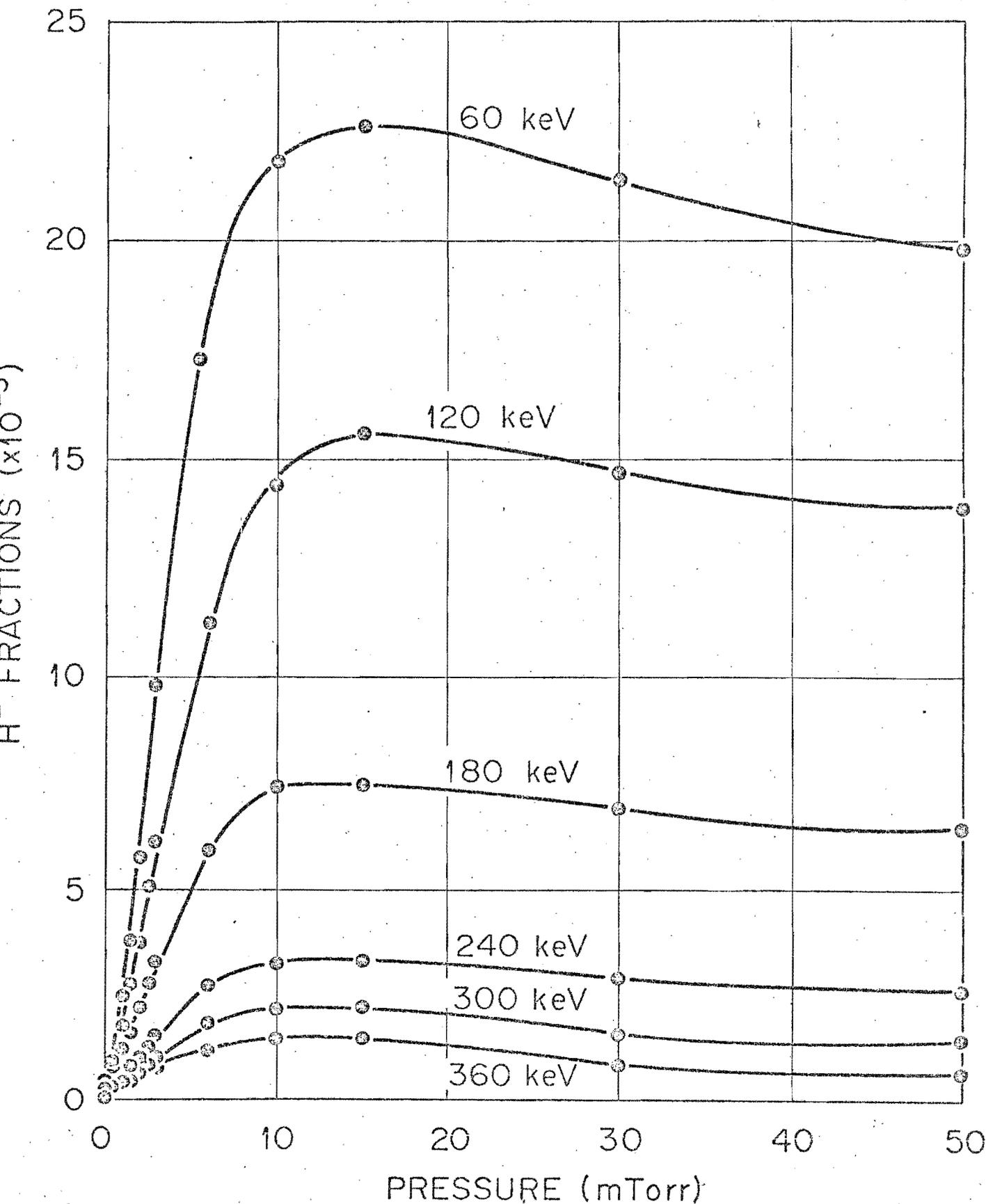


Figura 8.- Producción de H⁻ por la disociación de H₃⁺ en H₂. Las energías del ion incidente van de 60 a 360 keV.

La fracción de equilibrio obtenida para la formación de D^- a partir de HD_2^+ a 100 keV con valor 0.021 es comparable con el valor de 0.019 obtenido por Stier y Barnett²¹ para H^- proveniente de H^+ para la misma velocidad.

La figura 9 muestra las fracciones de equilibrio para la formación de H^- y D^- a partir de los tres haces moleculares estudiados, en H_2 todas ellas están expresadas en términos de H^- o D^- por átomo de H o D incidente. Para obtener los valores absolutos las fracciones mostradas deben multiplicarse por 2 para H_2^+ y HD_2^+ y por 3 para H_3^+ . Se observó que para velocidades iguales, la fracción fue independiente de la especie molecular incidente.

Los valores de los máximos de las fracciones así como sus valores de equilibrio se muestran en la Tabla 1.

En la figura 10 se muestran las fracciones de D^- obtenidas por colisión disociativa de un haz de HD_2^+ a 400 keV de energía con un blanco de He comparadas con las que se obtuvieron al usar H_2 como blanco. No obstante que la sección de producción de D^- es menor, las fracciones máximas y las fracciones de equilibrio son aproximadamente el 50% mayores que las obtenidas al usar H_2 .

Durante el curso del experimento se tuvo noticia de que en Grenoble²² se reportó la obtención de grandes cantidades de H^- al disociar H_2^+ en Xe, a bajas energías. Williams reportó también las secciones transversales usando Xe en el intervalo de velocidades de 0.5×10^9 a 2.2×10^9 cm/seg. Con objeto de estudiar el mismo sistema, se utilizó Xe como blanco con una abertura de salida de la celda de colisión de 2.5 mm. Si la dispersión de los iones negativos formados en Xe, de la cual no se tiene noticia,

ORNL-DWG 73-5722

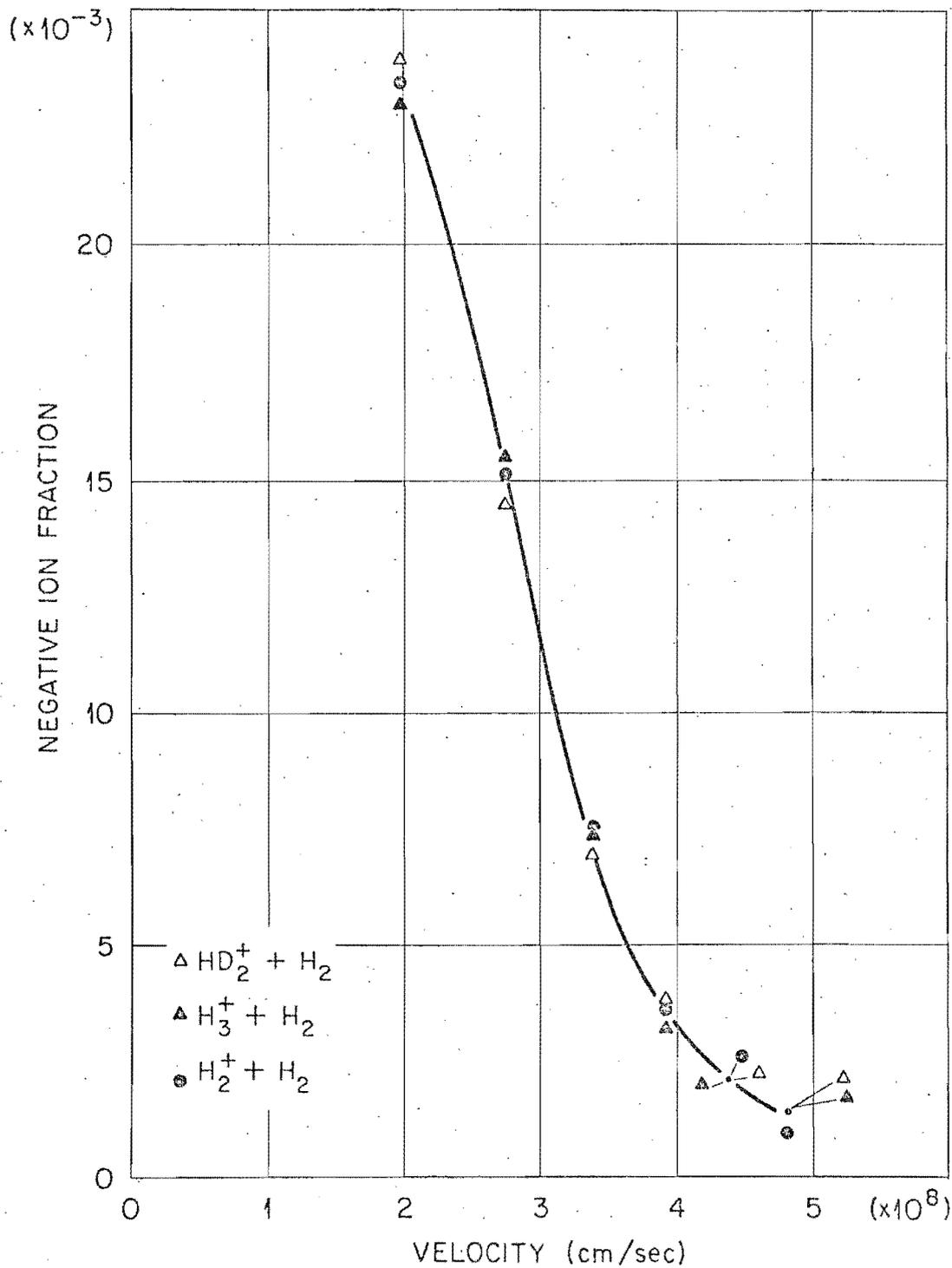


Figura 9.- Fracciones de equilibrio de D^- y H^- en H_2 como una función de la velocidad del ion negativo.

Tabla 1

Valores máximos de las fracciones y fracciones de equilibrio de H^- y D^- producidas en la colisión de H_2^+ , H_3^+ y HD_2^+ en hidrógeno.*

Energía de HD_2^+ (keV)	100	200	300	400	500	600
Valor máx. de la fracción	24.0	14.5	7.2	3.8	2.24	1.35
Fracción de equilibrio	21.0	13.7	6.5	2.9	1.4	0.68
Energía de H_3^+	60	120	180	240	300	360
Valor máx. de la fracción	22.5	15.5	7.4	3.2	2.2	1.4
Fracción de equilibrio	19.7	13.8	6.4	2.6	1.4	0.6
Energía de H_2^+ (keV)	40	80	120	160	200	240
Valor máx. de la fracción	23.5	15.5	11.0	3.6	1.96	0.98
Fracción de equilibrio	21.4	14.0	9.7	3.0	1.51	0.63

* Todas las fracciones deben multiplicarse por 10^{-3} .

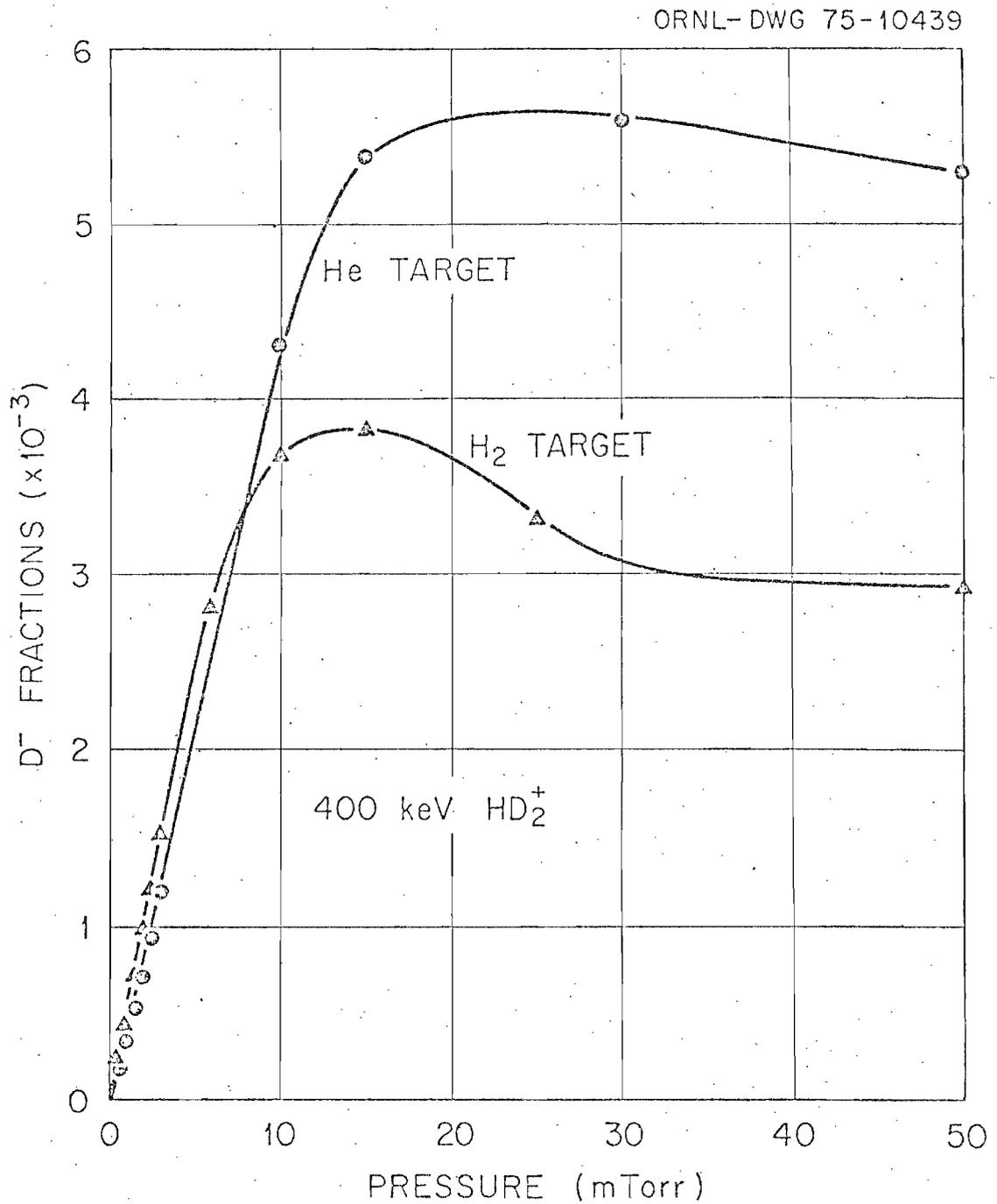


Figura 10.- Comparación de la producción de D⁻ por la disociación de HD₂⁺ en hidrógeno y en helio a 400 keV.

es mayor que la de los iones negativos formados en H_2 , es posible que dicha abertura haya interceptado alguna fracción de los iones negativos y por tanto las secciones que se presentan en la figura 11 pueden haber sido subestimadas por aproximadamente un 10%. Las secciones resultaron ser en general mayores que las que se obtuvieron al usar H_2 como blanco. En la misma figura se muestran los resultados obtenidos por Williams con Xe y H_2 como blancos gaseosos, a velocidades menores que las del presente experimento, junto con los nuevos resultados. La línea sólida es el mejor ajuste a los dos conjuntos de medidas, se observa que dentro de la incertidumbre experimental, el acuerdo es bueno.

En la figura 12 se muestran los valores de las secciones para la formación de H^- a partir de H_3^+ en H_2 comparados con los obtenidos por Williams. A velocidades de 2×10^8 cm/seg los resultados presentes son mayores por un factor de dos que los obtenidos por Williams. Una posible explicación es la pérdida de partículas debida a la geometría del arreglo experimental, la cual es determinante en procesos de disociación a velocidades pequeñas. De ahí la importancia de medir las distribuciones angulares de productos de disociación a bajas energías. C. Cisneros y colab.²³

Una conclusión de esto es que son necesarias más medidas, más experimentos, sobre todo aquellos en los que se midan las distribuciones angulares de los productos de disociación con objeto de tener más información sobre la dispersión de los iones negativos resultantes, esto, a la vez que dará más luz sobre los mecanismos de disociación, permitirá mejorar la geometría de los dispositivos experimentales para aprovechar al máximo el flujo de los iones negativos procedentes de algún proceso particular.

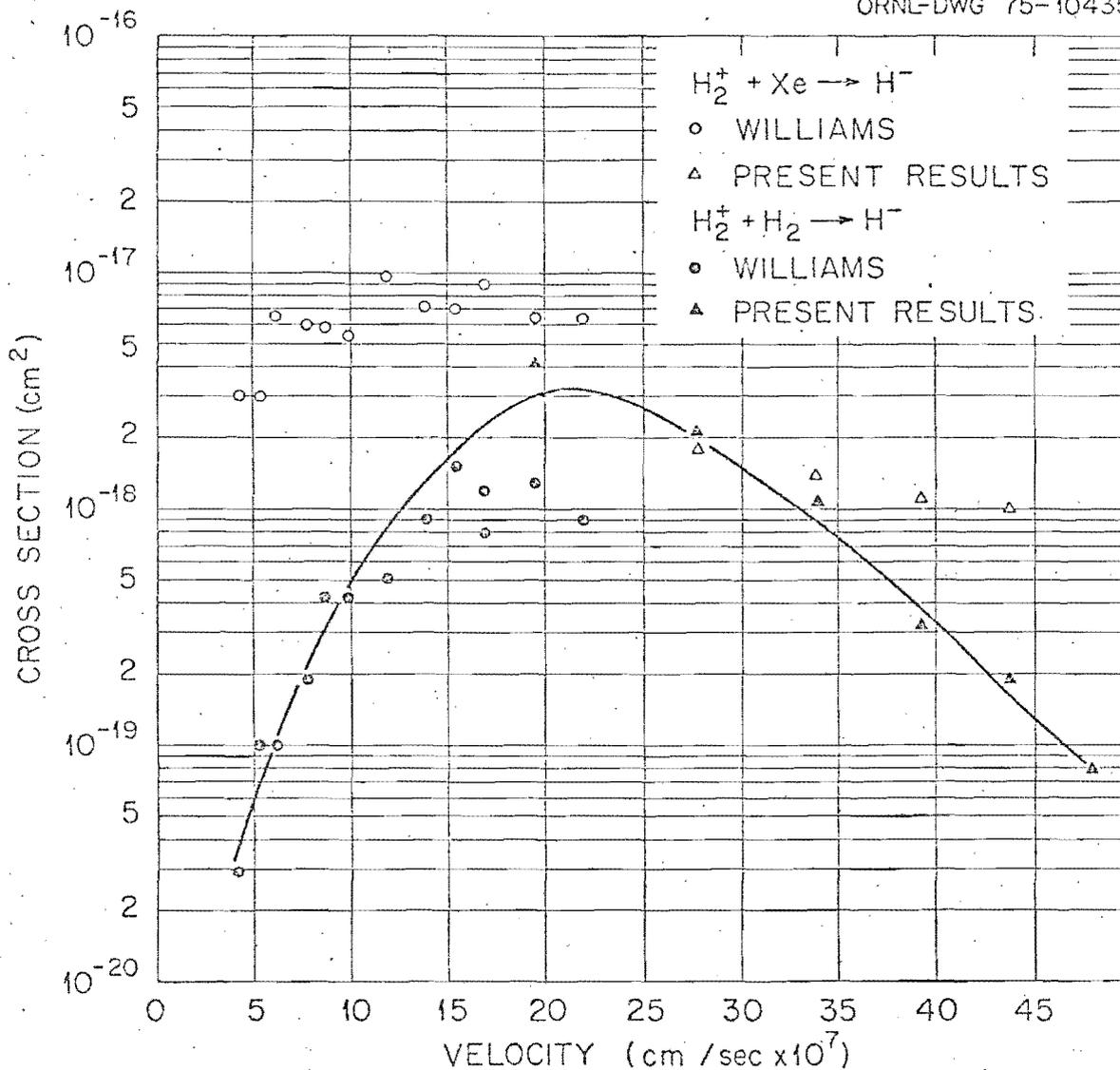


Figura 11.- Comparación de los resultados del presente trabajo con los de Williams, para la formación de H⁻ mediante las reacciones:



ORNL-DWG 75-10436

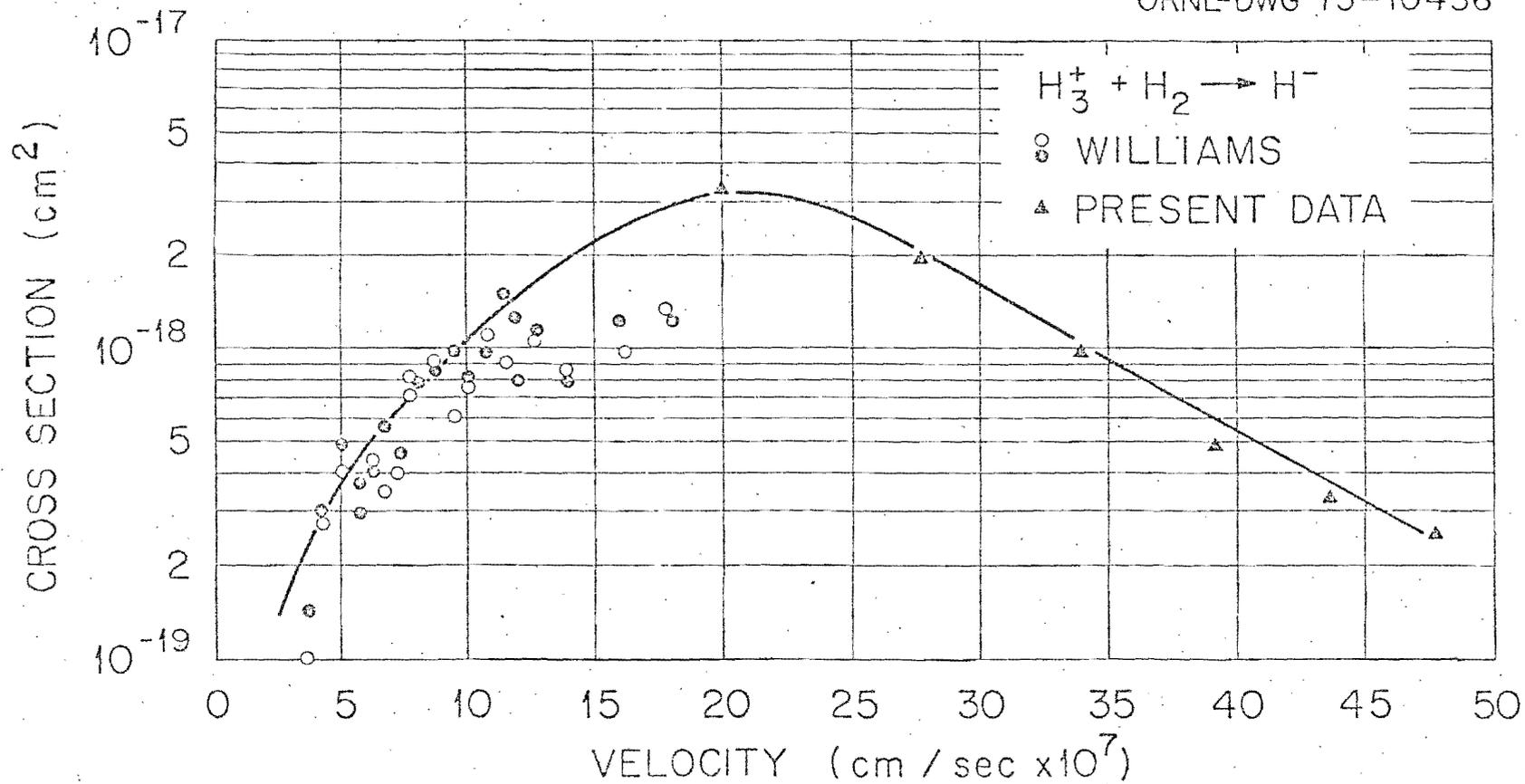


Figura 12.- Comparación de los resultados del presente trabajo con los de Williams, para la formación de H^- por medio de la reacción $\text{H}_3^+ + \text{H}_2$.

La atenuación del haz original y la producción de las diferentes componentes al atravesar el blanco gaseoso se pueden tratar en principio mediante el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, que es un método tratado en la sección 11 de la parte 2. La razón de no haber expuesto el método en esta primera parte es doble, en primer lugar el hecho de que las fracciones negativas sean casi dos órdenes de magnitud más pequeñas que las positivas ya hacen impropio el tratamiento, y en segundo lugar por la complejidad que representa en este caso. Para un sistema como H_3^+ en H_2 se presentan 6 modos primarios de disociación y 10 secundarios, lo que indica que para tener información sobre el cambio de cada una de las 5 componentes : H_3^+ , H_2^+ , H_2^0 , H^0 y H^+ a través del sistema de ecuaciones diferenciales habrá que resolver cinco ecuaciones diferenciales acopladas siendo ellas combinaciones de las 16 secciones transversales involucradas cuyo conocimiento es el realmente difícil.

Es conveniente sin embargo estudiar la variación de las componentes al incrementar la presión ya que esto permite además de seguir el curso del experimento, tener una comprobación adicional de que se está realizando bien. En la gráfica 13 se muestra la variación de las fracciones referentes a la atenuación del haz HD_2^+ y a la formación de los productos positivos: D_2^+ , HD^+ , D^+ y H^+ con la presión. La energía del proyectil es de 100 keV. Se omiten las fracciones referentes a las componentes negativas por ser de magnitud muy pequeña respecto de las demás, y las componentes neutras: D_2^0 , HD^0 , D^0 , H^0 que no fue posible diferenciar debido al sistema de detección.

La gráfica muestra las fracciones normalizadas a la unidad. En el dominio de colisión simple, la suma de los productos, debe ser igual a la atenuación del haz original. A presiones grandes, en este caso la suma de los productos debe ser igual a tres. En ambos límites el acuerdo es satisfactorio.

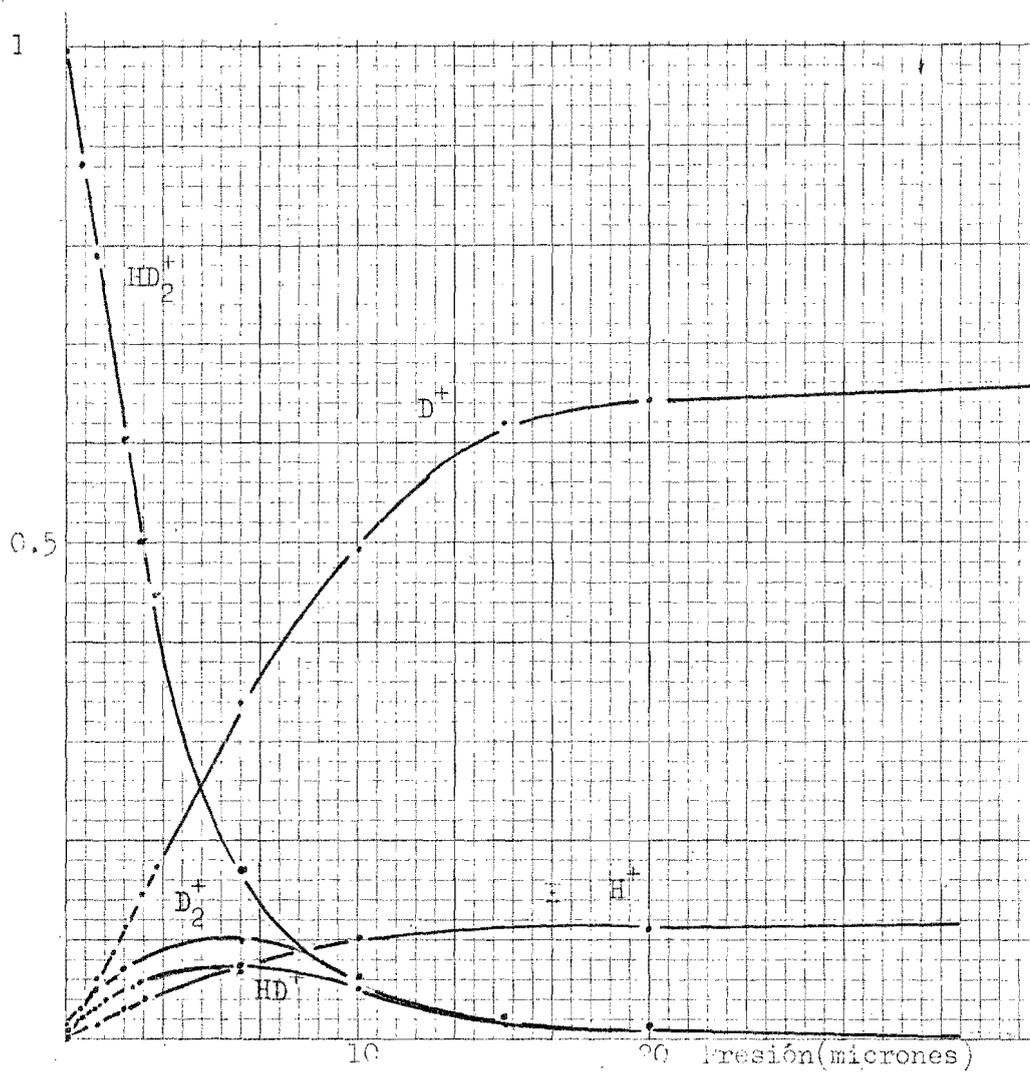


Figura 13.- Curvas que muestran la variación de las fracciones de los productos positivos como función de la presión, a 100 keV de energía del proyectil.

En la gráfica 14 se muestran los valores de las secciones transversales totales para la producción de D_2^+ , HD^+ , D^+ y H^+ para energías del proyectil HD_2^+ entre 100 keV y 600 keV en H_2 como blanco gaseoso.

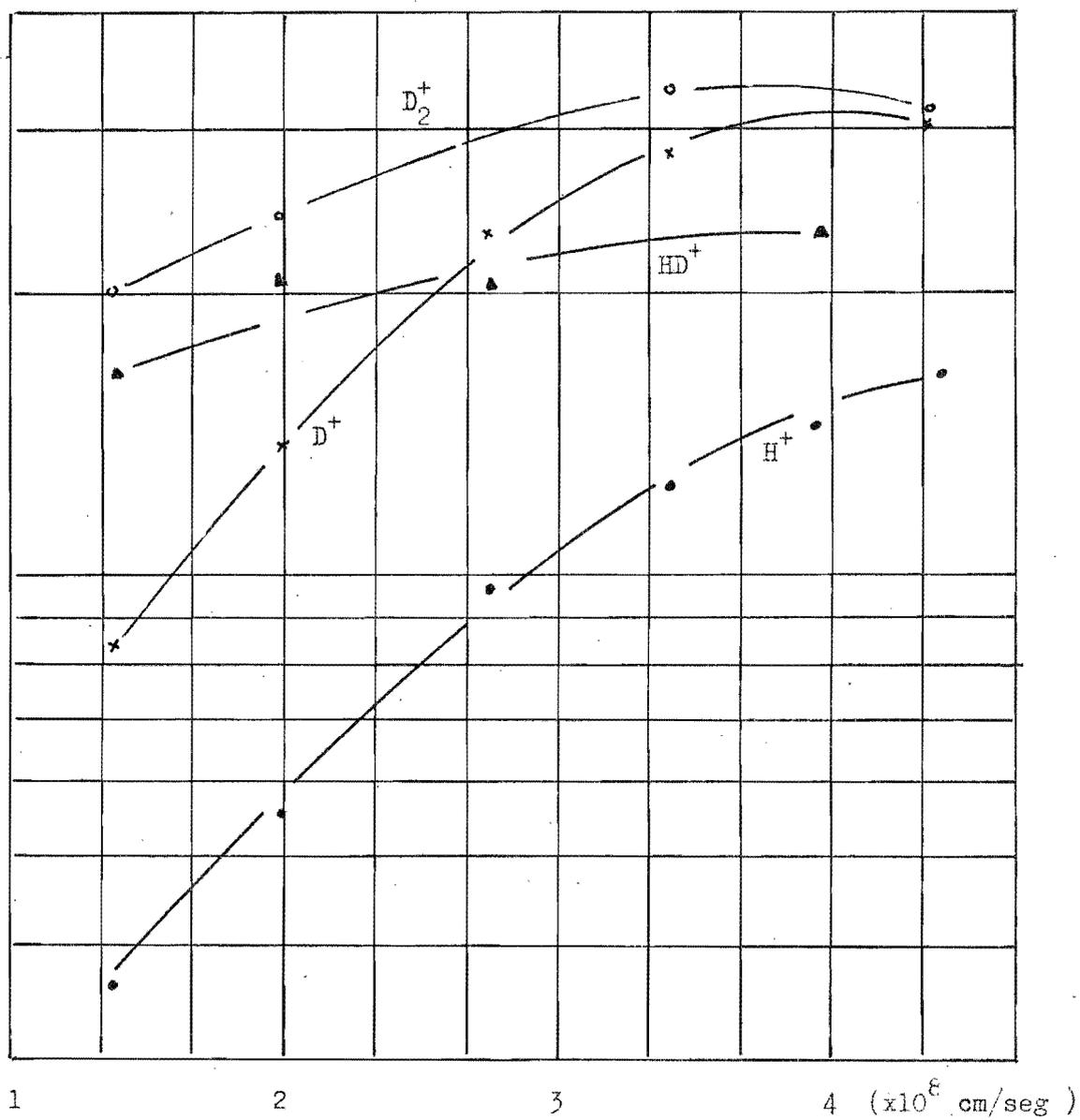


Figura 14.- Secciones transversales totales para la producción de los iones positivos: D_2^+ , HD^+ , D^+ y H^+ resultantes de la reacción $HD_2^+ + H_2$, en función de la velocidad del proyectil.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- K.H.Purser, Trans. Nucl. Si. IEEE NS20, 136 (1973).
- 2.- G.W. McClure and J.M. Peek in Dissociation in Heavy Particle Collisions (Wiley-Interscience, N.Y., 1972).
- 3.- B. Bederson and A.L. Fite in Methods of Experimental Physics (Academic Press, N.Y., 1968), Vol 7.
- 4.- R. Caudano, Thesis, Universite Catholique de Louvain (1969).
- 5.- N. V. Fedorenko, V. V. Afrosimov, R. N. Il'In, and D. M. Kaminker, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 36, 385 (1959) (English trans.: Sov. Phys.-JETP 9, 267 (1959)).
- 6.- J.F. Williams and D. N. F. Dunbar, Phys. Rev. 149, 62 (1966).
- 7.- C. F. Barnett, M Rankin, and J. A. Ray in Proceedings of the Sixth International Conference on Ionization Phenomena in Gases (Paris, 1963), p. 63, edited by P. Hubert (S:E:R:M:A:, Paris, 1964).
- 8.- D. R. Sweetman, Proc. Roy. Soc. (London) A256, 416 (1960).
- 9.- D. R. Bates, H. S. W. Massey and A. L. Stewart, Proc. Roy. Soc., (London) A216, 437 (1953).
- 10.-E. Bauer and Ta You Wu, Can. J. Phys., 34 1436 (1962).
- 11.-R. C. Stabler, Bull. Amer. Phys. Soc., 7, 313 (1962).
- 12.-E. Gerjuoy, A. E. C. Report NP-7170 (1955).
- 13.-E. H. Kerner, Phys. Rev., 92, 1441 (1953).
- 14.-G. H. Dunn, R. Geballe and D. Pretzer, Phys. Rev., 128, 2200 (1962).
- 15.-E. E. Salpeter, Proc. Phys. Soc., A63, 1295 (1950).
- 16.-C. Cisneros, I. Alvarez, C. F. Barnett, J. A. Ray and A. Russek (próxima publicación).
- 17.-J. A. Ray and C. F. Barnett, O.R.N.L. -TM-2818 (1969).
- 18.-C. F. Barnett and H. B. Gilbody in Methods of Experimental Physics (Academic Press, N.Y., 1968), Vol. 7.

- 19.- L. H. Toburen, N. Y. Nakai, and R. A. Langley, Phys. Rev., 171 114 (1968).
- 20.- J. F. Williams , Thesis, Australian National University (1965).
- 21.- P. M. Stier and C. F. Barnett, Phys. Rev., 103 896 (1956).
- 22.- Comunicación privada.
- 23.- C. Cisneros, I. Alvarez, R. García, C. F. Barnett y A. Russek,
Bol. Soc. Mex. Fis. 4 151 (1975).
- 24.- G. Gibson , UCRL Report 4671 (1956).

P A R T E 2

Secciones transversales totales para la captura y despojo electrónicos de átomos y iones de Tl y K en H_2 .

8) INTRODUCCION

El diagnóstico de plasmas a alta temperatura depende muy estrechamente de los fenómenos atómicos. Los procesos atómicos que se usan para medir los parámetros de un plasma se pueden dividir en dos clases: pasivos y activos. En las investigaciones pasivas se hace uso de emisión óptica o de partículas del plasma mismo. Ejemplos de estos métodos pasivos son la radiación óptica, bremsstrahlung y emisión de partículas neutras emitidas por el plasma. En el diagnóstico activo se usa un haz externo de partículas, o de fotones para estudiar las propiedades del plasma. Un método ingenioso, activo, para estudiar el plasma fue propuesto y desarrollado por Jobes y Hickok¹. Su método consiste en proyectar a través del plasma un haz de iones pesados, con una sola carga, y con suficiente momento para atravesar el campo magnético que confina el plasma. Por colisiones con los electrones y partículas positivas del plasma se formarán iones doblemente cargados. Si se elige adecuadamente la dinámica del haz, se puede colocar un detector en una posición tal que al deflektarse el haz de iones en una dirección transversa a través del plasma, los iones doblemente cargados, formados en esta dirección, lo encontrarán en una posición externa al plasma. colocando un analizador electrostático en este mismo punto, se puede determinar el cambio entre la energía inicial y final de los iones, lo cual dará datos sobre el potencial del plasma. La intensidad de los iones doblemente cargados, dará la densidad del plasma, que puede hacerse

con precisión suficiente si se conocen las secciones transversales involucradas. Se cree que la sección transversal de ionización del haz incidente por los electrones, será la predominante. De igual importancia puede ser sin embargo la sección transversal debida a intercambio de carga, captura y despojo, de los iones pesados.

Se midieron las secciones transversales totales de captura σ_{10} y despojo $\sigma_{01}, \sigma_{12}, \sigma_{02}$ de haces de $K^{(0,+)}$ y $Tl^{(0,+)}$ en H_2 . Se midieron también las fracciones de equilibrio incrementando la densidad del blanco hasta que las fracciones resultantes fueron independientes del estado de carga inicial. Se encontró que en este intervalo de energía (50 keV - 600 keV) las secciones de captura y despojo fueron crecientes. Las fracciones de equilibrio dependen únicamente de la velocidad de la partícula y no de la partícula misma ni de su estructura electrónica.

Los resultados se comparan con las predicciones teóricas de Firsov² y de Fleischmann³ y se analiza su comportamiento en base a la teoría adiabática de Massey⁵.

Experimentalmente Kikiani⁴ midió la sección transversal total para la producción de electrones libres, la sección transversal de ionización y la de despojo entre átomos alcalinos y diferentes gases moleculares para energías entre los 3 keV y 30 keV. Se presenta una comparación entre los datos obtenidos y los de Kikiani.

9) TEORIA

Una revisión muy completa que abarca el aspecto teórico y el experimental de procesos de intercambio de carga usando haces de hidrógeno fue publicado por H. Tawara y A. Russek.⁶ Para procesos de intercambio de carga con iones pesados a energías menores de 1 MeV, por Allison⁷ y a grandes energías, por Betz.⁸ Un resumen de las diferentes técnicas experimentales usadas fue publicado por Barnett y Gilbody.⁹

Los cálculos teóricos de procesos de intercambio de carga para partículas pesadas son muy difíciles; Mapleton¹⁰ llevó a cabo una revisión para un número limitado de casos. No existe sin embargo ninguna teoría que pueda predecir en forma razonable las secciones de pérdida o captura electrónicas en que la velocidad de la partícula incidente sea menor que la velocidad electrónica orbital. Dos teorías, con muchas aproximaciones, fueron desarrolladas por Firsov² y Fleischmann.³

De acuerdo con las ideas originales de Firsov, los procesos de transferencia de energía en las colisiones de dos átomos se deben principalmente a un flujo electrónico a través de un plano hipotético localizado en el punto medio y perpendicular a la línea que une sus centros. Aquí se observa la transferencia del momento. Firsov calculó el flujo electrónico suponiendo una distribución esférica de las velocidades de los electrones en cada punto del espacio y llevando a cabo una integración sobre el "plano de Firsov" usando una teoría estadística. Supuso que esta energía era distribuida entre todos los electrones del sistema y se utilizaba en el proceso de ionización. Si la energía de excitación era mayor que la de ionización, esta ocurría con una gran probabilidad.

De esta manera Firsov obtuvo una formulación que da una dependencia universal de las secciones transversales para la extracción de electrones

en cualquier par de átomos en colisión como una función de su velocidad relativa. Desarrollo las siguientes expresiones:

$$\sigma_i = \sigma_0 [(u/u_0)^{1/5} - 1]^2,$$

$$u_0 = \frac{23 \times 10^6 E_i}{(z_I + z_A)^{2/3}} \frac{\text{cm}}{\text{seg}},$$

$$\sigma_0 = \frac{3.7 \times 10^{-16}}{(z_I + z_A)^{2/3}} \text{cm}^2,$$

donde σ_i es la sección transversal total para la producción de electrones en una colisión entre partículas pesadas, u es la velocidad relativa del proyectil, E_i (en ev) es la energía de ionización más pequeña entre los dos átomos en colisión, z_I y z_A son los números atómicos del proyectil y del átomo blanco respectivamente. Aunque esta fórmula fue deducida en principio para colisiones entre átomos neutros, da una estimación razonable al usarla en las secciones de despojo electrónico a energías de algunos keV.

Fleischmann³ supuso en su modelo una transición en una etapa del electrón ionizado de un estado ligado al continuo. Desarrolló una ley de escalamiento semiempírica que en algunos casos se ajusta a los datos experimentales más exactamente que lo que lo hace la formulación de Firsov.

UN MODELO SIMPLIFICADO

Teoría adiabática de Massey⁵⁾

Massey explicó la dependencia relativa de la sección de captura electrónica σ_{10} con la energía de la siguiente forma:

Si se supone por ejemplo una reacción del tipo $A^+ + B^0 \rightarrow A^0 + B^+$ tal que las energías de ionización difieren por la cantidad ΔE , donde ΔE representa el cambio en la energía durante la transición electrónica y se le llama "defecto de energía" de la reacción, el intercambio de carga dependerá esencialmente de la energía de interacción ΔE , mediante argumentos muy simples. Si la velocidad de acercamiento de los sistemas atómicos es pequeña comparada con la velocidad de los electrones orbitales, la interacción entre proyectil y blanco es lo suficientemente lenta como para permitir a los electrones orbitales ajustarse progresivamente a la interacción. Este es el dominio adiabático en el que la probabilidad de captura es baja.

Este resultado no debe parecer extraño ya que es un resultado común en la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo. Los coeficientes involucrados son del tipo

$$c_b(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle b | H^{(1)} | a \rangle e^{i\omega_{ba} t'} dt'$$

donde $H^{(1)}$ es la parte del hamiltoniano correspondiente a la perturbación. integrando por partes:

$$c_b(t) = -\frac{\langle b | H^{(1)} | a \rangle}{\hbar \omega_{ba}} e^{i\omega_{ba} t} + \frac{1}{\hbar \omega_{ba}} \int_{-\infty}^t \langle b | \frac{dH^{(1)}}{dt} | a \rangle e^{i\omega_{ba} t'} dt'$$

pero como $H^{(1)}$ es una función muy lenta, la integral de la derecha se puede hacer tan pequeña como se quiera y en el límite:

$$c_b^{\text{adiab.}} = - \frac{\langle b | H^{(1)} | a \rangle}{E_b^0 - E_a^0} e^{i\omega_{ba}t} ; \quad b \neq a$$

expresión que dice que en el límite adiabático, el sistema no perturbado que empieza en un estado, termina en el mismo estado en el sistema perturbado.

Un ejemplo de esto se presenta en las colisiones elásticas entre las moléculas de un gas. Cuando dos moléculas se mueven una hacia el campo de fuerzas de la otra, sus niveles de energía electrónicos, se distorsionan continuamente, pero no ocurren transiciones ya que los electrones se mueven mucho más de prisa que los átomos y al separarse pueden haber alterado sus estados vibracionales o rotacionales pero rara vez alteran sus estados electrónicos.

Al incrementar la velocidad la probabilidad de transferencia de carga crece hasta alcanzar un máximo para una velocidad

$$v_m = \frac{a \Delta E}{h}$$

que se ha obtenido al igualar las llamadas "frecuencia propia" $\nu = \frac{\Delta E}{h}$

y la "frecuencia de impacto" $\nu' = \frac{v}{a}$, o en otras palabras, los tiempos de transición ($h/\Delta E$), y el transcurrido en la región en que actúan las fuerzas de interacción (a/v). a es la distancia efectiva en que actúan las fuerzas y v la velocidad relativa.

Si la velocidad del ion incidente sobrepasa el valor de v_m , la nube electrónica ya no puede responder a la interacción y la probabilidad

de captura decrece rápidamente.

Este criterio divide el dominio de la energía en dos regiones:

- (1) la adiabática, donde $v \ll \frac{a \Delta E}{h}$, donde la sección transversal de captura es creciente con v , hasta alcanzar un máximo en $v_m \approx \frac{a \Delta E}{h}$
- (2) la región en que $v \gg \frac{a \Delta E}{h}$ y que caracteriza la región de validez de la aproximación de Born.

La forma funcional de las secciones en la región adiabática no se desprende de las consideraciones cualitativas anteriores, aunque se intuye que dependa de alguna forma del factor $(a \Delta E/h)$. Massey sugirió una dependencia exponencial de la forma

$$\sigma = K \exp(-a \Delta E/h)$$

que aunque no tiene fundamento teórico, parece ser el comportamiento de muchas secciones transversales no resonantes.

Al término "a", se le llama "parámetro adiabático" y está determinado por la magnitud del momento que se le debe impartir al electrón para sacarlo del ión. Sea el momento, μ , con m la masa del electrón y $u = (2I/m)^{\frac{1}{2}}$; I es la energía de amarre. Si $v_m = \delta u$, resulta que $a = 2\delta h/\mu$ o bien $a = 2\delta r/n$, siendo $r = nh/\mu$ una cantidad aproximada a la magnitud del radio donde fue extraído el electrón, y n , el número cuántico principal.

Escribiendo $\Delta E/v$ como Δp , o sea el cambio en el momento en una colisión inelástica, Δp_m sería el cambio en el momento para el cual el proceso de captura es un máximo; en estos términos, el parámetro adiabático queda como $a = h/p_m$, lo que sugiere que procesos que presentan

la misma a presentan la misma transferencia de momento en la dirección hacia adelante.

Se ha encontrado ciertamente que a tiende a un valor constante en un gran número de colisiones estudiadas o sea que resulta ser independiente de los miembros que participen en la reacción. Para colisiones de intercambio de una sola carga se puede encontrar en la literatura que el valor de a , fluctúa entre 7 Å y 8 Å. Para colisiones con intercambio de dos cargas hay una mayor incertidumbre aunque el valor recomendado fluctúa entre .9 Å y 2.3 Å. Consideraciones muy detalladas sobre este tema se encuentran en Hasted,¹¹ Fogel,¹² Drukarev.¹³

Otro punto a discusión se refiere a la forma de elegir el valor ΔE ; se puede seleccionar como el valor de ΔE para una separación infinita de las partículas en colisión, o como el valor de ΔE para el cual el proceso parece más probable. El primer caso, con ΔE_{∞} parece ajustarse a un número limitado de casos, aunque es el valor más consistente con la teoría. El otro valor permite ajustar mucho más reacciones y no parece fuera de razón en vista de la forma en la que el valor de ΔE se introdujo en la teoría.

Una forma alternativa de tratar la teoría y obtener la regla para el máximo de la velocidad v_m es a través de la forma exponencial

$$\sigma = K \exp(-a \Delta E/hv)$$

que se puede escribir como

$$\sigma = k \exp(-Q/E^{\frac{1}{2}})$$

donde $Q = ka(\Delta E m^{\frac{1}{2}})$

Para aquellos procesos que exhiben una conducta exponencial, una gráfica semilogarítmica de σ contra $E^{-\frac{1}{2}}$ dará una línea recta de pendiente $-Q$. Si k_a es una constante, suponiendo a k como una constante, a también lo será y su valor se puede obtener fácilmente.

Hay dos hechos experimentales que están en desacuerdo con la teoría: (1) la existencia de dos o tres máximos observados en algunos casos en las curvas de las secciones transversales; (2) el hecho de que a pequeñas velocidades las secciones transversales son más grandes con cierta frecuencia.

El primer caso se explica por la participación en el evento de intercambio de carga de partículas excitadas y de partículas en su estado base. La segunda dificultad se ha explicado por violaciones a la condición adiabática que puede ocurrir cuando las curvas de potencial de los estados inicial y final del sistema en colisión estén tan juntas a una cierta distancia internuclear que la diferencia al mínimo sea muy pequeña.

10) APARATO

Los iones K^+ y Tl^+ fueron producidos en una fuente de iones de filamento. Se formaron por el calentamiento de alumino-silicatos en un filamento de tungsteno. Es un proceso muy conocido y descrito ampliamente por Johnson¹⁴ y Septier.¹⁵ Se trata de un material del tipo de la cerámica llamado también beta-eucryptita en el cual se almacena el metal y que al ser calentado a temperaturas del orden de los $1000^\circ C$ emite los iones metálicos. La pureza de la emisión es del orden del 99% o mejor. Los silicatos se disuelven en alcohol etílico y se cubre el filamento uniformemente. A la salida de la fuente de iones, éstos fuerpn acelerados con el Cockcroft-Walton para iones pesados del Laboratorio Nacional de Oak Ridge. Figura 1 El haz fue deflectado 90° por medio de un analizador electrostático, formado por un par de placas paralelas cilíndricas de un metro de radio, que permitieron la selección del estado de carga a la velocidad deseada.

A la salida de las placas deflectoras se hizo pasar el haz por un campo magnético estabilizado que sirvió para deflectar la masa deseada 8° y dirigirla a la entrada del aparato diseñado para medir las secciones transversales. Este aparato se muestra en la figura 2 y fue descrito en detalle en la primera parte por lo que se harán notar sólo las diferencias que se presentan al emplearlo para medir secciones de disociación o de transferencia de carga.

El sistema consta esencialmente de dos cámaras de gas con bombeo diferencial y dos conjuntos de placas deflectoras, más el sistema de detección. Al usarse para medidas de disociación, el primer conjunto de cámara y placas sirven únicamente de paso al haz de iones moleculares mientras que al usarse en procesos de intercambio de carga, cámara y placas juegan un papel indispensable.

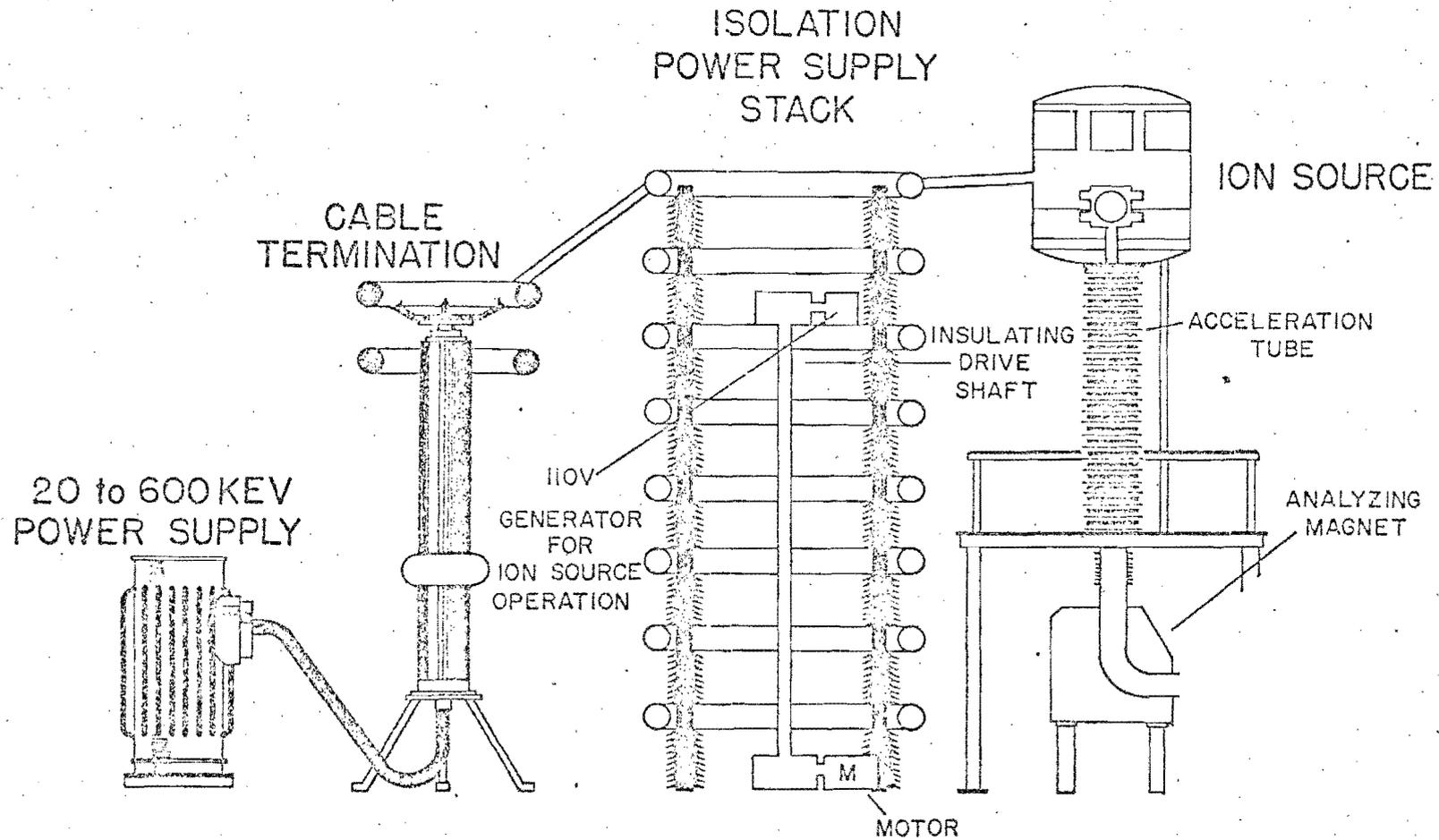


Figura 1.- Esquema del acelerador de iones pesados.

ORNL-DWG 75-10437

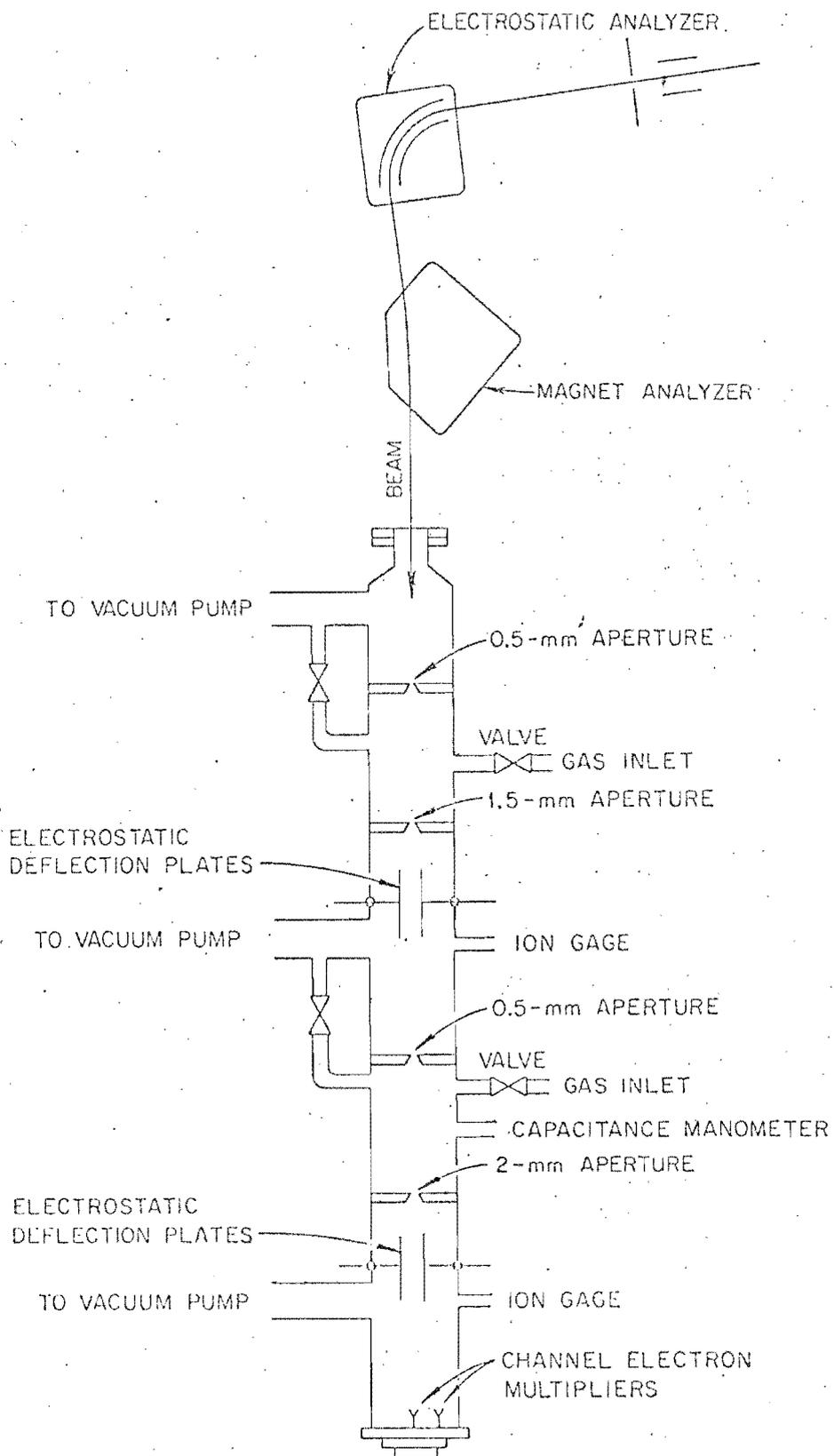


Figura 2.- Diseño esquemático del arreglo experimental.

Para obtener los haces neutros de K o Tl, los iones incidentes se neutralizan por intercambio de carga con un haz introducido en la primera celda. Para ello se permitió la entrada de aire a esta celda, a una presión aproximada de un micrón. A esta presión, la dispersión del haz fué mínima y se obtuvieron los haces neutros a la intensidad deseada. El campo eléctrico del primer conjunto de placas deflectoras se usó para desviar las componentes cargadas de modo que sólo las componentes neutras pueden pasar a la segunda celda en la que se introdujo el gas de H₂.

Para medidas en las que se requirieron iones de K o de Tl, la primera celda fue evacuada a 10^{-8} mm de Hg y el primer conjunto de placas deflectoras puestas a potencial de tierra.

Las aberturas usadas fueron las mismas. En experimentos de intercambio de carga la abertura de salida de la celda de gas no tiene un papel tan importante como cuando se trata de medidas de disociación; en el primer caso la pérdida de partículas en la abertura de salida compensa automáticamente la medida mientras que en segundo ha sido la causa de serios errores. La abertura de salida se seleccionó de 2 mm de diámetro.

Después de pasar los átomos o iones a través de la celda que contiene el blanco gaseoso, las componentes cargadas fueron desviadas por el campo eléctrico del segundo conjunto de placas al detector lateral para determinar las intensidades. Las intensidades neutras se midieron en el detector central y la intensidad total poniendo a potencial de tierra el conjunto de placas. El sistema de detección y electrónica asociada fueron los mismos descritos en la sección 4.

11) FORMULACION MATEMATICA DEL PROBLEMA

La probabilidad de que se presente un cambio en la carga de un átomo debido a la proximidad de otro, se representa por medio de la "sección transversal" de captura o pérdida electrónica. Se hacen a continuación algunas consideraciones sobre este importante concepto.¹⁶

Las partículas, átomos o moléculas del gas que se usa como blanco son muy numerosas, del orden del número de Avogadro, y su tamaño tan fuera de nuestro alcance que no se pueden identificar individualmente y por tanto no se pueden conocer sus trayectorias y de aquí la imposibilidad de conocer la frecuencia con que puede ocurrir una colisión, ni se puede medir en un instante dado ya que ocurre al azar. El hecho de que el número de partículas sea muy grande permite considerarlo como un conjunto estadístico. Las partículas se encuentran por tanto uniformemente repartidas en su volumen de confinamiento y la distribución de sus velocidades obedece a la estadística de Maxwell-Boltzman. Esto hace posible encontrar un valor medio para la frecuencia de colisión y asegurar por otra parte que las fluctuaciones serán raras e improbables.

Sea un proceso del tipo $A + B^+ \rightarrow A^+ + B$ y se trata de definir la sección para la formación del estado final. Los proyectiles del tipo B, se mueven con velocidad v , a través de un blanco gaseoso del tipo A y de densidad n_A que se encuentra en reposo. dx es la distancia recorrida por las partículas B. La probabilidad de que ocurra una colisión será directamente proporcional al número de partículas del blanco. Si P_i es la probabilidad de que ocurra la colisión, se tiene:

$$P_i = n_A \sigma dx.$$

$n_A dx$ es la densidad del gas (en partículas/cm³) y σ es una constante de proporcionalidad, la sección transversal. Para un haz de partículas de densidad n_B que incide en el blanco, el número de las que han intercambiado su carga en una unidad de tiempo en el volumen $dV = dA dx$ será

$$dI_i = n_A n_B v \sigma dA dx$$

Es interesante relacionar las cantidades anteriores con los parámetros observables como son la presión, el volumen y la temperatura del gas, las variables macroscópicas termodinámicas. Si se supone que las partículas sufrirán sólo una colisión, lo que implica una presión muy baja y una densidad uniforme en el blanco, se tendrá que:

$$I_i = \sigma l n_A \int n_B v dA$$

l es la longitud efectiva del blanco

y la integral $\int n_B v dA = I_B$

representa la cantidad de partículas incidentes en una unidad de tiempo, es decir, el flujo. Escribiendo $n_A l = \pi$ frecuentemente llamado "espesor" del blanco y que es el número de partículas por unidad de área, la expresión anterior se puede escribir como

$$\frac{I_i}{I_B} = \pi \sigma$$

Notar que la fracción anterior es justamente la fracción del haz total que ha sufrido un intercambio de carga.

Si el blanco se comporta como un gas ideal, hipótesis perfectamente justificada dado el intervalo de valores de la presión que se manejan en esta clase de experimentos, se puede usar su ecuación de estado: $PV = NRT$

La densidad de un gas, n , contenido en un volumen V , donde hay n' partículas es $n = n'/V$; y $n' = N N_0$, donde N_0 es el número de Avogadro y N el número de moles del gas. Luego:

$$n_A = \frac{n'_A}{V} = \frac{N N_0}{V}$$

$$= \frac{N N_0 P}{N R T}$$

$$\text{y } \bar{n} = \frac{N_0 l P}{R T}$$

Como la cantidad anterior se refiere al número de moléculas en el blanco, si se desea conocer el número de átomos, basta multiplicar la expresión anterior por el número de átomos que hay en cada molécula ζ .

$$\text{Sea } \frac{I_i}{I_B} = F = \bar{n} \sigma = \frac{N_0 l P \zeta \sigma}{R T}$$

$$\text{luego } \sigma = \frac{l}{\alpha} \frac{F}{P}$$

$$\text{donde } \alpha = (N_0 l \zeta / RT).$$

El espesor del blanco \bar{n} puede representarse también en la forma

$$\bar{n} = \frac{273 L \zeta P L}{(273+T) 760}$$

donde L es el número de Loschmit 2.678×10^{19} molec/cm³

ζ número de átomos por molécula del gas

P presión del gas en Torr.

l longitud efectiva de la celda de gas en cm.

T temperatura del blanco gaseoso en grados centígrados.

A temperatura ambiente ($\sim 20^\circ\text{C}$) y para $\zeta = 1$

$$\bar{n} = 3.29 \times 10^{16} P l$$

La medida de una sola sección transversal σ se puede llevar a cabo sólo en casos de partículas muy simples, generalmente σ es una combinación de las secciones de un cierto número de procesos involucrados. La variación del estado de carga del haz de partículas rápidas al pasar por un blanco gaseoso está descrito por ecuaciones diferenciales del tipo:

$$\frac{dF_m}{d\pi} = \sum_{j=-1}^Z (F_j \sigma_{jm} - F_m \sigma_{mj})$$

$$m = -1, 0, 1, 2, \dots, Z$$

$$\sum_{m=-1}^Z F_m = 1$$

La expresión dice que la variación de la fracción F_m con estado de carga m , respecto de la variación del "espesor" del blanco π , es igual al incremento en las fracciones de iones al estado de carga m a través de todos los demás estados de carga posibles j , menos la disminución de iones en el estado de carga m por la transformación del mismo estado de carga m a cualquier otro estado j .

Si por ejemplo no existen iones negativos, o su formación es despreciable respecto de la magnitud de las demás fracciones, el límite inferior de la sumatoria deberá empezar por 0. Las σ_{ij} son la suma de todas las secciones transversales de procesos en los que el ión con carga i , se transforma en uno de carga j , debiéndose extender a todos los estados de carga posibles del blanco.

Como las secciones σ_{mj} son independientes del "espesor" las soluciones de las ecuaciones diferenciales son de la forma:

$$F_m(\pi) = \left(F_m(0) + \sum_{j=-1}^Z \sigma_{jm} \int_0^{\pi} F_j(x) \exp\left(\sum_{i=-1}^Z \sigma_{mi} x\right) dx \right) \cdot \exp\left(-\sum_{i=-1}^Z \sigma_{mi} \pi\right)$$

$$m = -1, 0, 1, 2, \dots, Z.$$

$F_m(0)$ es el valor de la fracción $F_m(\bar{n})$ para $\bar{n} = 0$. Para valores muy pequeños de \bar{n} , o sea para presiones muy bajas en el blanco gaseoso, si se ha preparado el haz de manera de tener un haz de iones de carga p , todas las F_j son despreciables, menos F_p , que será aproximadamente igual a la unidad. Los términos de la exponencial se pueden desarrollar en series de potencias y se obtiene:

$$F_m(\bar{n}) = \left(1 - \sum_{j=1}^m \sigma_{mj} \bar{n} + \text{términos del orden de } \bar{n}^2 \text{ o mayores} \right) \times \\ \left(F_m(0) + \sigma_{pm} \bar{n} + \text{términos del orden de } \bar{n}^2 \text{ o mayores} \right), \text{ para}$$

$m \neq p$. Si $m = p$ el desarrollo es de la forma:

$$F_p(\bar{n}) = 1 - \sum_{j=1}^m \sigma_{pj} \bar{n} + \text{términos del orden de } \bar{n}^2 \text{ o mayores ya que} \\ F_p(0) = 1, \text{ este término representa la atenuación del haz incidente, mientras} \\ \text{que } F_m(\bar{n}) = \sigma_{pm} \bar{n} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m \sigma_{mj} \bar{n}^2 + \text{términos del orden de } \bar{n}^3 \text{ o mayores),}$$

se refieren a la razón de crecimiento de iones con carga m al atravesar la celda gaseosa los proyectiles de carga p . En este caso $F_m(0) = 0$.

El análisis de los productos finales se lleva a cabo con facilidad separando espacialmente las cargas mediante la aplicación de campos transversos, para dirigirlos a los detectores.

Si el haz de partículas rápidas atraviesa suficiente cantidad de materia ($\bar{n} \rightarrow \infty$) y sufre una cantidad suficiente de colisiones, se observa que no hay ningún cambio en la composición del estado de carga de los productos y que se establece entre ellos un equilibrio. Como este equilibrio es entre todos los procesos competitivos de pérdida y captura electrónicos, no depende del estado inicial de carga de los iones incidentes y por lo tanto

$$\frac{dF_m}{d\bar{n}} = 0$$

$$\text{o sea } \sum_{j=-1}^Z (F_j^{\text{CO}} \sigma_{jm} - F_m^{\text{CO}} \sigma_{mj}) = 0 \quad m = -1, 0, 1, 2, \dots, Z$$

Es importante hacer notar que aunque todas estas relaciones deben ser satisfechas entre las secciones transversales para intercambio de carga, de estas ecuaciones no se pueden determinar los valores individuales de las secciones y, que el número de secciones es mayor que el número de ecuaciones. Al querer aplicar a un caso particular las ecuaciones anteriores y resolver los sistemas de ecuaciones diferenciales acoplados se recomienda ver el trabajo original de Allison⁷ sobre todo para establecer las condiciones iniciales y para el cálculo de las constantes. En la exposición anterior se siguió el tratamiento de H. Tawara y A. Russek.⁶

Cuando hay pocos estados de carga involucrados y se tiene un blanco delgado, se obtienen expresiones muy simples, de la ecuación 1 resulta:

$$F_m = \bar{n} \sigma_{jm}$$

Creciendo el espesor del blanco en este dominio de colisiones simples, se obtiene un incremento lineal en las fracciones F , de donde se puede obtener el valor de la sección de la pendiente de una gráfica de F contra P . Como en el sistema hay gases residuales y hay choques entre las mismas moléculas del haz o en las mismas aberturas, las curvas pueden no pasar por el origen.

Las fracciones de equilibrio se determinaron midiendo cada fracción $F(\bar{n})$ como una función del "espesor" del blanco \bar{n} y se tomó su valor de la porción donde la curva de F contra P no muestra variación ninguna al incrementarse la presión. Cuando se presentan únicamente dos componentes, hay una relación muy simple

entre las fracciones de equilibrio y las secciones transversales:

$$\frac{F_1^{\infty}}{F_0^{\infty}} = \frac{\sigma_{01}}{\sigma_{10}}$$

Esta relación es muy útil y permite comprobar la consistencia interna del experimento. Los resultados de esta comprobación se discuten en la siguiente sección.

12) ERRORES

Los errores que pertenecen a la magnitud de las fracciones medidas, se estimaron de la reproducibilidad de los datos. Se usó una técnica de conteo de partículas, los datos son suficientes para estimar de la estadística un error menor del 1%.

Los errores pertenecientes a la determinación de las intensidades y presiones en el blanco gaseoso se evaluaron a través de las incertidumbres al obtener la pendiente de la recta en una gráfica de cociente de intensidades contra presión. La incertidumbre se calculó en menos del 10 %.

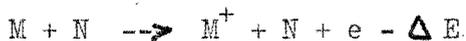
Se consideraron también otras fuentes de error como son la correcta medida de la presión, desviaciones de la condición de blanco delgado, etc. Estas fuentes de error se han considerado anteriormente con cierto detalle. Se estima que la incertidumbre total en las medidas es menor del 12 %.

13) RESULTADOS Y COMENTARIOS

Las figuras 3 y 4 muestran los resultados obtenidos para las secciones transversales totales de captura y despojo electrónicos: σ_{10} , σ_{01} , σ_{12} , σ_{02} , para los iones y átomos rápidos $K^{o(+)}$ y $Tl^{o(+)}$ en H_2 .

En el intervalo de velocidades investigado, las secciones tienen un comportamiento creciente con la velocidad de la partícula incidente, mostrando algunas de ellas haber alcanzado su valor máximo. Esta circunstancia sugiere un análisis a la luz del criterio adiabático.

Para procesos de la forma



el defecto de energía es simplemente el potencial de ionización del metal M, N representa al blanco gaseoso. Los potenciales de ionización son 4.341 y 6.108 eV, para el primer electrón, para el K y Tl respectivamente.

Se ha tomado el valor del defecto de energía "al infinito", ΔE_{∞} en todos los casos en lugar de modificar este valor por otro que represente la máxima probabilidad para el despojo electrónico. Para procesos como el indicado, el valor del parámetro adiabático "a" varía entre 7 Å y 8 Å, siendo el primero el más recomendado por la literatura.

La figura 5 señala la posición de la velocidad v_m para la cual la sección σ_{01} es máxima. Con $a = 7 \text{ Å}$ se obtiene, $v_m = 0.74 \times 10^8 \text{ cm/seg}$. Con $a = 8 \text{ Å}$, se obtiene $v_m = 0.84 \times 10^8 \text{ cm/seg}$. Este último valor parece ajustarse mejor a los resultados experimentales. La línea punteada señala el comportamiento de la ley empírica de Massey para la región de bajas velocidades. El acuerdo entre los datos experimentales y esta ley empírica es muy bueno para este caso.

ORNL - DWG 74 - 6757

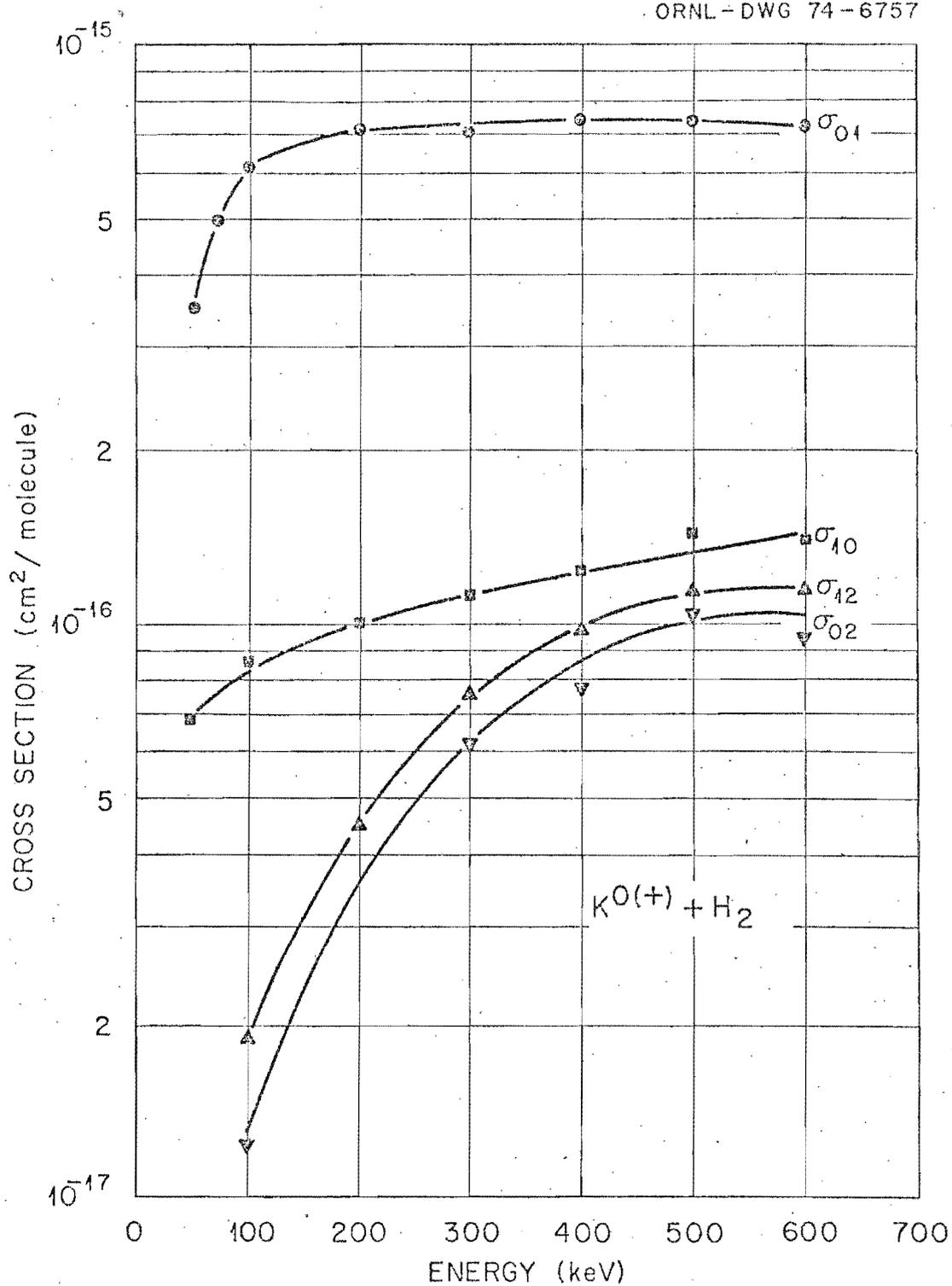


Figura 3.- Secciones transversales totales para la captura y despojo electrónicos: σ_{10} , σ_{01} , σ_{12} y σ_{02} pertenecientes a la reacción: $K^{0(+)} + H_2$.

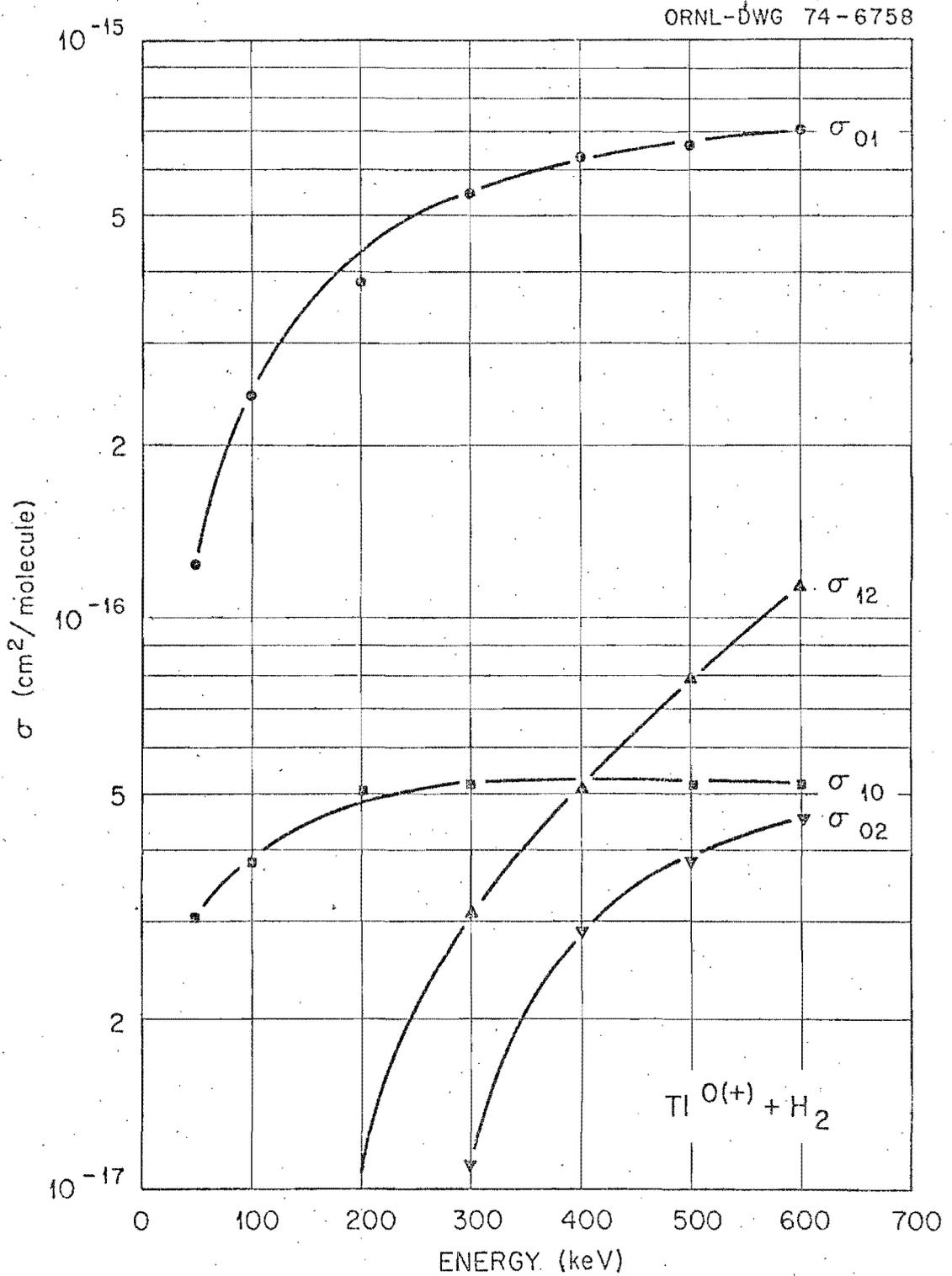


Figura 4.- Secciones transversales totales para la captura y despojo electrónico: σ_{10} , σ_{01} , σ_{12} y σ_{02} pertenecientes a la reacción: $Tl^{0(+)} + H_2$.

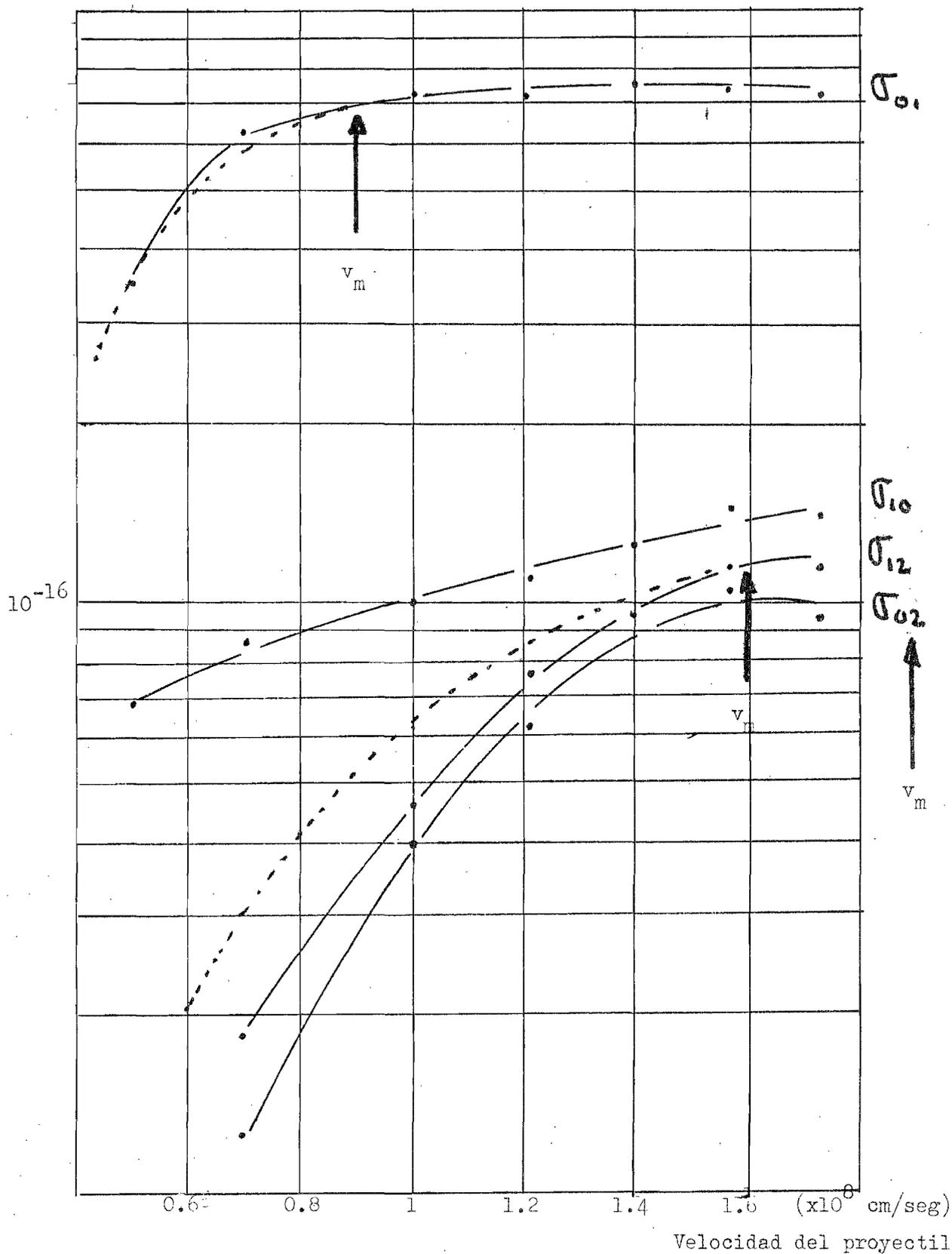


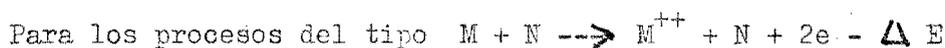
Figura 5.- Gráfica de las secciones de captura y despojo electrónicos de la reacción $\text{K}^{0,+} + \text{H}_2$, en la que se ha señalado v_m y el comportamiento de la ley empírica de Massey.

La figura 6 muestra el comportamiento de la sección σ_{01} para el Talio. El intervalo de velocidades estudiado no fue suficiente para alcanzar el máximo. Con $a \approx 7 \text{ \AA}$ se obtiene $v_m = 1 \times 10^8 \text{ cm/seg}$. Una extrapolación de los valores experimentales muestra que el valor de v_m es también razonable en este caso. No es posible sin embargo hacer uso de la fórmula empírica.



Los defectos de energía son 31.625 y 20.42 eV para el K y Tl respectivamente. Cabe hacer notar que para estos valores de los segundos potenciales de ionización hay competencia entre el simple despojo electrónico y el intercambio de carga. Con H_2 como blanco los valores del parámetro adiabático están entre 0.9 y 2.3 \AA . Con 2.1 \AA para el parámetro adiabático para el potasio, se obtiene $v_m = 1.6 \times 10^8 \text{ cm/seg}$, valor que está muy de acuerdo con los datos experimentales, como se muestra en la figura 5.

El proceso análogo para el talio no se puede tratar ya que la curva correspondiente en la figura 6, muestra una región muy apartada del máximo para poder hacer alguna comparación.



los defectos de energía son: 35.986 y 26.528 eV para el K y Tl respectivamente. Con un parámetro adiabático igual a $a \approx 2 \text{ \AA}$ se obtiene para el caso del potasio que $v_m = 1.74 \times 10^8 \text{ cm/seg}$. Este valor de v_m parece concordar también con los valores experimentales. La aplicación de la ley empírica decae más rápidamente hacia velocidades bajas que los valores experimentales. Para el caso del talio son nuevamente insuficientes los datos experimentales.

Quedan por considerar los casos correspondientes a intercambio de carga, $M^+ + N \rightarrow M^0 + N^+ - \Delta E$. Los defectos de energía tienen

Sección Transversal
(cm^2 por molécula)

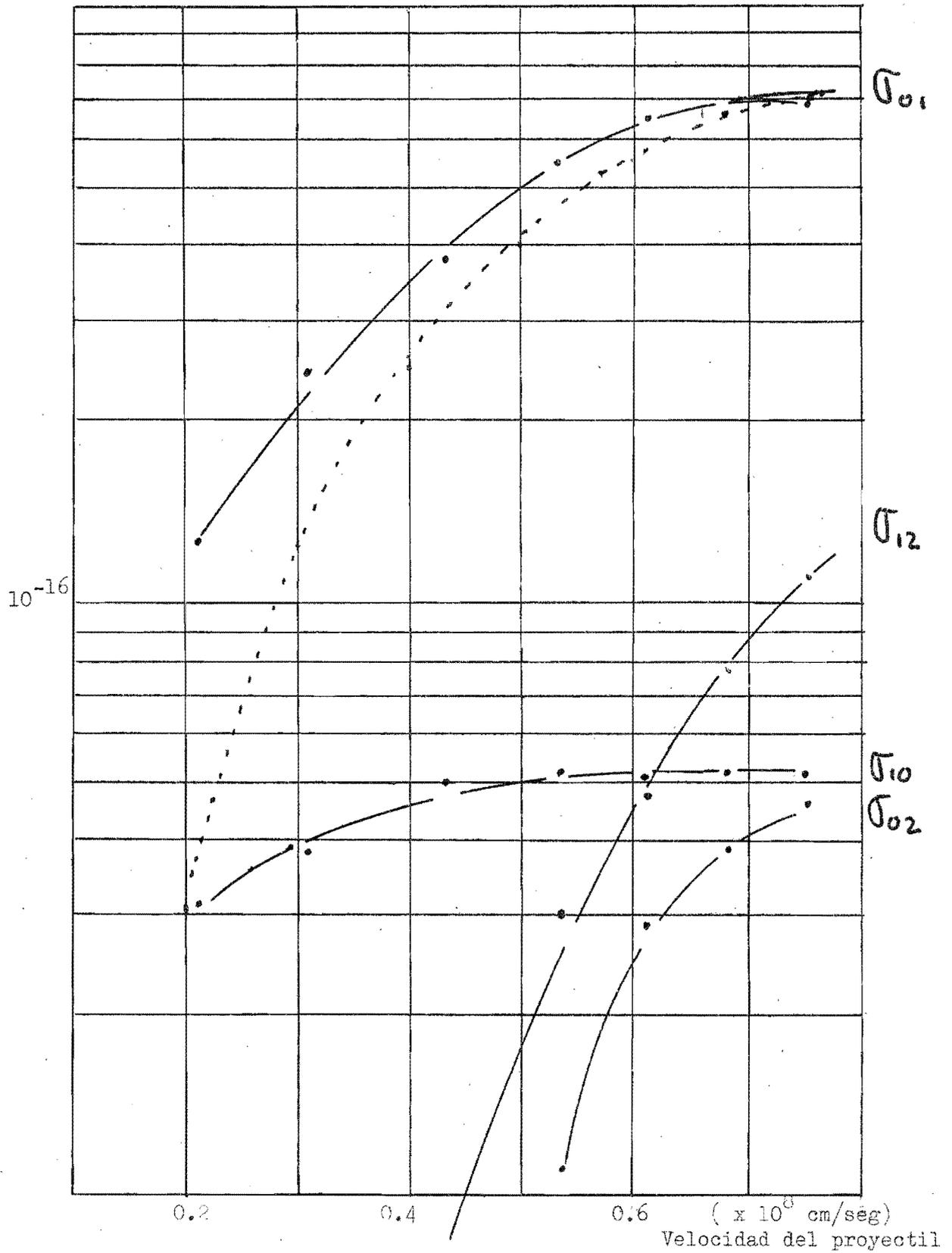


Figura 6.- Gráfica de las secciones de captura y despojo electrónicos de la reacción $\text{Tl}^{0(+)} + \text{H}_2$, en la que se ha señalado v_m y el comportamiento de la ley empírica de Massey.

los siguientes valores: 11.059 y 9.292 eV para el potasio y el talio respectivamente. Con $a = 7 \text{ \AA}$ se obtiene que $v_m = 1.9 \times 10^8 \text{ cm/seg}$ para el caso del potasio. Los datos experimentales no son suficientes para poder hacer una comparación. Para el talio, figura 6, el valor que se obtiene es $v_m = 1.6 \times 10^8 \text{ cm/seg}$ mientras que experimentalmente se observa que el máximo de la sección está por $0.5 \times 10^8 \text{ cm/seg}$. El valor del criterio de Massey para encontrar el valor de v_m , depende de dos cosas, la primera, de la seguridad y confianza para asignar una magnitud a "a", el parámetro adiabático; y la segunda, al valor del defecto de energía. Este defecto de energía puede estar dominado efectos de polarización o coulombianos, de manera de modificar su valor al infinito, sin embargo esto llevaría a obtener un valor aun mayor para v_m . Una modificación al valor del parámetro adiabático no parece razonable en este caso ya que para obtener un valor cercano a $0.5 \times 10^8 \text{ cm/seg}$ sería necesario asignar al parámetro adiabático un valor de 2 \AA indicando esto que el intercambio de carga se lleva a cabo en la segunda capa.

La figura 7 muestra una comparación entre los datos experimentales y las predicciones teóricas de Firsov² y Fleischmann³ para las secciones σ_{01} correspondientes al potasio. Las predicciones de Firsov son en general mayores que los valores experimentales. Kikiani⁴ hizo un estudio de la teoría de Firsov, y señala que la razón por la que no concuerda con los datos experimentales cuando estos involucran átomos alcalinos es por que no tiene en cuenta el efecto de capas electrónicas, cosa que no es importante al tratar de gases inertes, donde la teoría tiene un buen ajuste con los datos experimentales. Las predicciones del modelo de dos-estados ajusta mejor que el modelo de Firsov a bajas energías, pero la curva

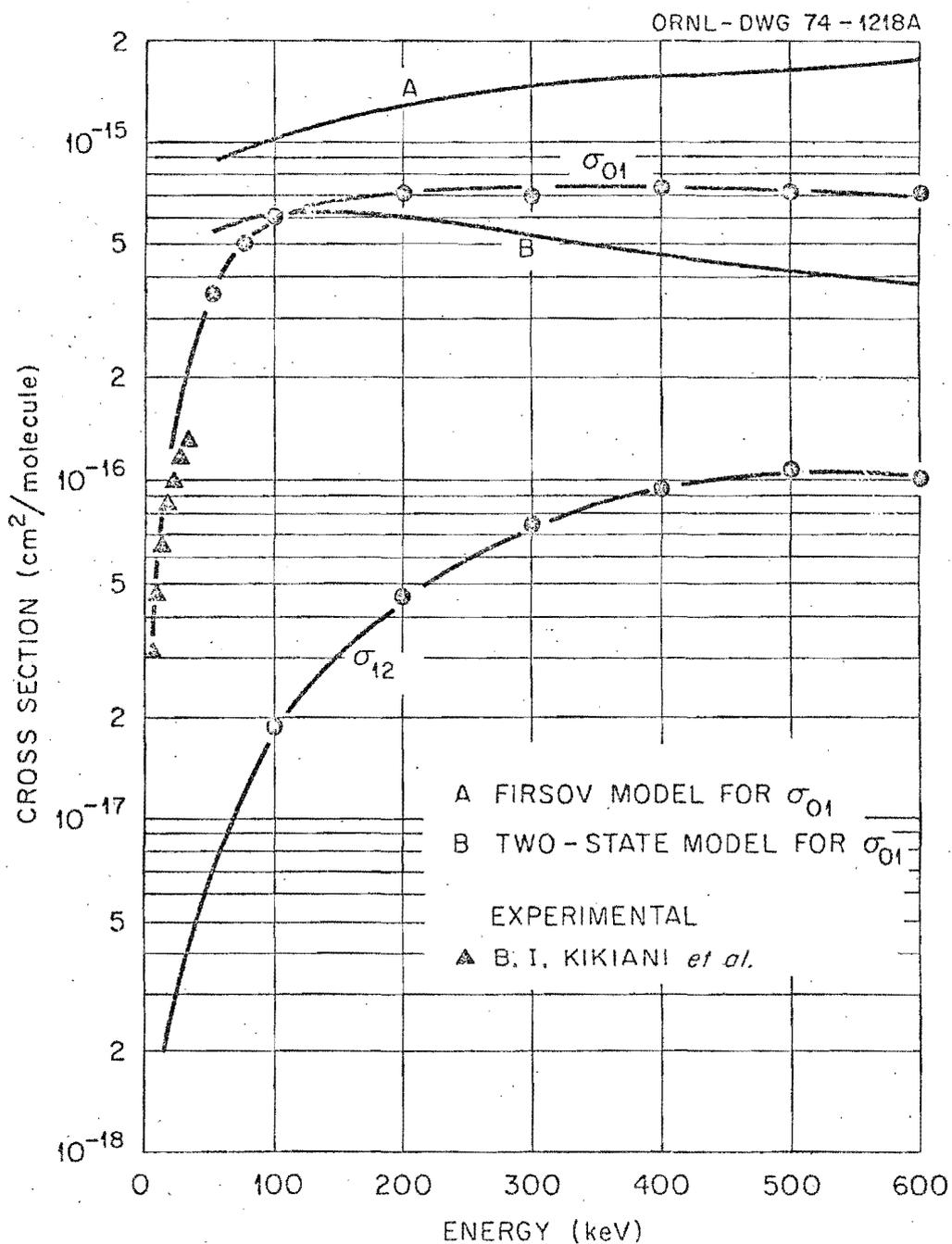


Figura 7.- Secciones transversales de despojo electrónico

σ_{01} y σ_{12} de $K^{0(0)}$ en H_2 . Se muestran las predicciones teóricas^{2,3} y medidas previas.⁴

Se separa a energías mayores siendo menor que los puntos experimentales. En esta misma figura se han dibujado los puntos experimentales obtenidos por Kikiani y se ha extrapolado la curva experimental.

En la figura 8 se hace la misma comparación para el haz de talio. Ambas teorías dan valores mayores que los experimentales, el modelo de dos-estados tiene la misma forma que la curva experimental. Este hecho sugiere que la teoría se debe modificar de tal forma que incluya las contribuciones de todos los electrones de la capa externa.

Es interesante comparar la sección transversal de ionización por impacto de electrones de Tl^+ con la sección transversal de despojo de Tl^+ en hidrógeno. Feeney y colab.¹⁷ reportaron que el máximo de la sección transversal de ionización por impacto electrónico es de $1.8 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$, para una energía de los electrones de 80 eV, decreciendo a $7 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ para 1000 eV. A 600 keV de energía de Tl^+ , el valor de la sección transversal de despojo tiene el valor de 1.1×10^{-16} y aparentemente crece a energías mayores.

La figura 9 muestra las fracciones de equilibrio para las componentes neutras y cargadas de los haces de Tl y K en H_2 , graficadas en función de la velocidad del proyectil. Ryding¹⁸ observó que cuando un ion pesado se mueve a través de la materia, las distribuciones de los estados de carga, en la región de equilibrio, dependen solamente de la velocidad de la partícula y de la naturaleza del blanco, y no de la estructura electrónica de la partícula incidente. Como se observa en la figura 9, la distribución de las componentes en la región de equilibrio es tal que las correspondientes al talio, a grandes velocidades se unen suavemente con las correspondientes al potasio a bajas velocidades.

ORNL-DWG 74-1219A

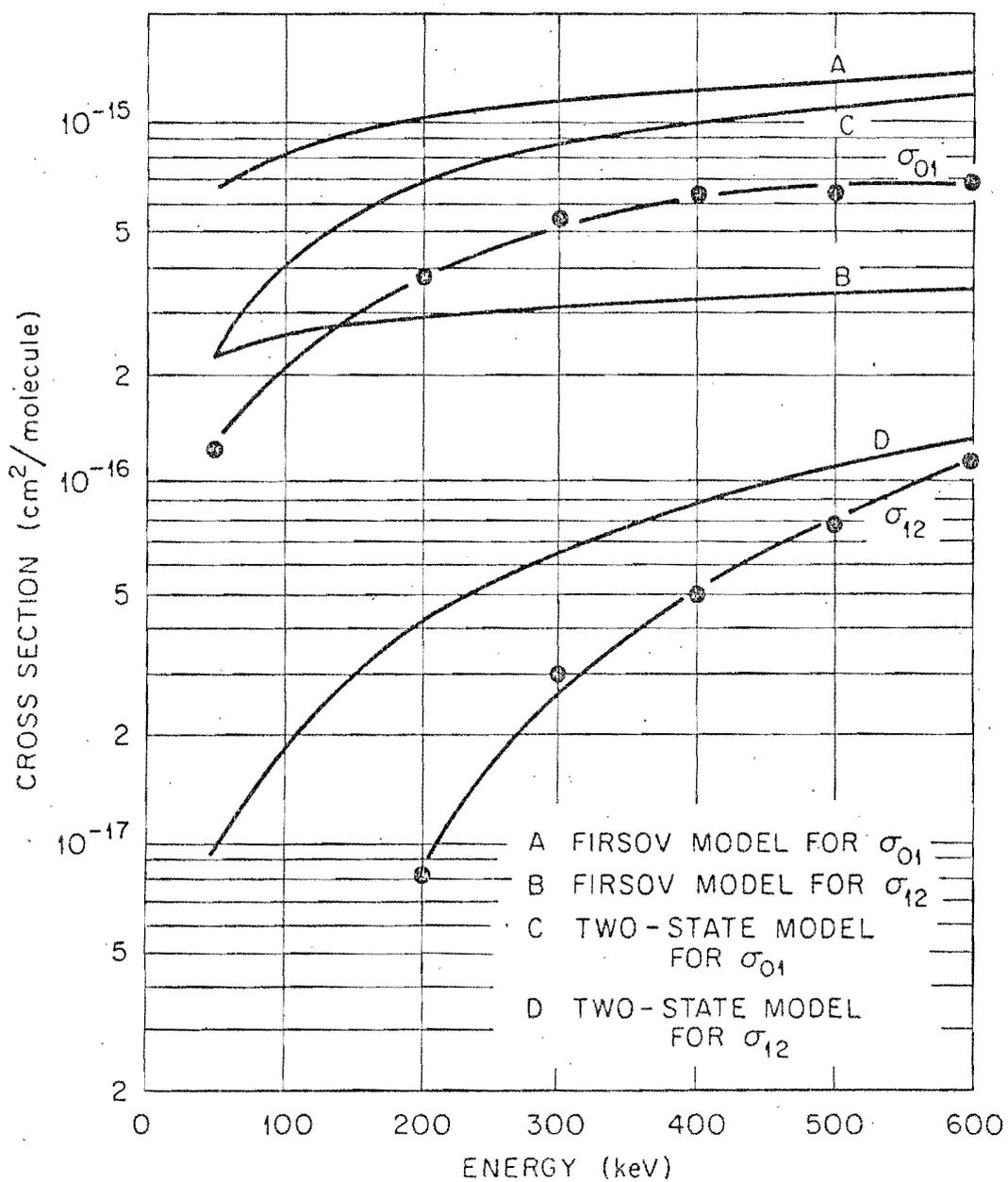


Figura 8.- Secciones transversales de despojo electrónico

σ_{01} y σ_{12} de $Tl^{0(+)}$ en H_2 que se muestran con las predicciones teóricas de las referencias 2 y 3.

ORNL-DWG 75-7473

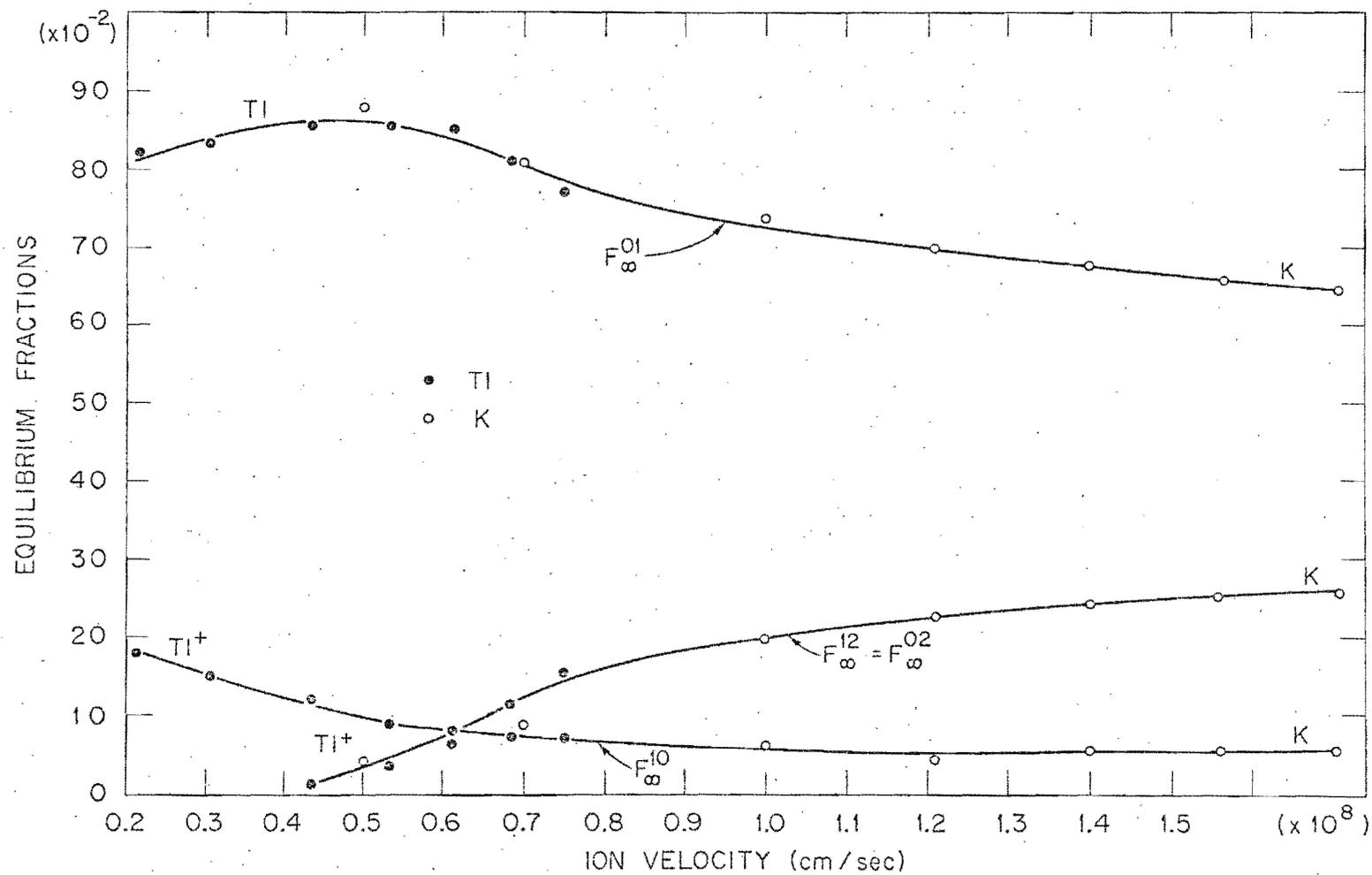


Figura 9.- Valores de las fracciones de equilibrio (F_{∞}^{10} , F_{∞}^{12} , F_{∞}^{02} , F_{∞}^{01}) graficadas contra la velocidad del ion incidente, $K^{0(+)}$ y $Tl^{0(+)}$ incidentes en un blanco de hidrógeno de densidad elevada.

Esta afirmación es válida para todos los estados de carga estudiados: 0, 1 y 2. Otro hecho importante es que la fracción de equilibrio del estado de carga 2^+ es independiente del estado de carga del proyectil, dentro del error experimental.

Una expresión generalizada para las fracciones de equilibrio correspondiente a un sistema de dos componentes es :

$$F_{m\infty} = \lim_{p \rightarrow \infty} F_m = \frac{\sigma_{jm}}{\sigma_{jm} + \sigma_{mj}}$$

Una forma de comprobar la consistencia interna del experimento, es a través de la expresión anterior, comparando el valor de la relación que hay entre las secciones transversales y el de la fracción de equilibrio medido en el experimento.

Se observa en la figura 4 que las secciones transversales que involucran despojo electrónico al estado 2^+ no se midieron a energías menores de 200 keV para σ_{12} , y para energías menores de 300 keV para σ_{02} , a causa de que el conteo fue para estos casos del mismo orden que el proveniente del fondo. Despreciando los valores de las secciones que involucran los estados doblemente cargados para energías menores de 300 keV, podemos aplicar las relaciones siguientes:

$$F_{0\infty} = \frac{\sigma_{10}}{\sigma_{10} + \sigma_{01}}$$

$$F_{1\infty} = \frac{\sigma_{01}}{\sigma_{10} + \sigma_{01}}$$

o sea que

$$\frac{F_{100}}{F_{000}} = \frac{\sigma_{01}}{\sigma_{10}}$$

La tabla 1 compara las razones de las fracciones de equilibrio con las razones de las secciones transversales de $Tl^{0(+)}$ medidas directamente para energías donde la comparación es aplicable. La diferencia entre ambos valores es muy baja.

TABLA 1. Comparación entre el cociente de las fracciones de equilibrio (F_{100}/F_{000}) y el de las secciones transversales (σ_{01}/σ_{10}) para un haz de $Tl^{0(+)}$ incidente sobre H_2 .

Energía (keV)	$\frac{F_{100}}{F_{000}}$	$\frac{\sigma_{01}}{\sigma_{10}}$
50	4.0	4.8
100	6.3	5.6
200	7.6	7.2

14) BIBLIOGRAFIA

- 1.- F. C. Jobses and R. L. Hickok, Rev. Sci. Instr. 38, 928 (1967).
- 2.- O. B. Firsov, Zh Eksperim. i. Teor. Fiz. 36 , 1517 (1959).
- 3.- M. H. Fleischmann, Phys. Rev. A 5 , 1784 (1972).
- 4.- B. I. Kikiani, G. N. Ogurtsov, N. V. Fedorenko and I. P. Flaks,
Sov. Phys. JETP 22, 264 (1966).
- 5.- H. S. W. Massey, Rept. Progr. Phys. 12, 248 (1949).
- 6.- H. Tawara and A. Russek, Rev. Mod. Phys. 45, 178 (1973).
- 7.- S. K. Allison, Rev. Mod. Phys. 30, 1137 (1958).
- 8.- H. D. Betz, Rev. Mod. Phys. 44, 465 (1972).
- 9.- B. Bederson and W. L. Fite in Methods of Experimental Physics
(Academic Press, N. Y., 1968), Vol. 7.
- 10.- R. A. Mapleton in Theory of Charge Exchange (John Wiley-Interscience
N. Y., 1972).
- 11.- J. B. Hasted in Physics of Atomic Collisions (Butterworths London 1964).
- 12.- I. M. Fogel, R. V. Mitin, V. F. Kozlov and N. D. Romashko,
Sov. Phys. JETP 35, 390 (1959).
- 13.- G. F. Drukarev, Sov. Phys. JETP 37, 603 (1960).
- 14.- F. M. Johnson, RCA Rev. 427 (1962).
- 15.- A. Septier and H. Leal, Nucl. Instr. Meth. 29, 257 (1964).
- 16.- E. W. McDaniel in Collision Phenomena in Ionized Gases (John Wiley
N.Y. 1964).
- 17.- R. K. Feeney, T. F. Divine, R. M. Kovac, D. McPherson, and W. E.
Sayle, Report ORO-3027-30 (1975).
- 18.- G. Ryding, A. B. Wittkower, and P. H. Rose, Phys. Rev. 185, 129 (1969).

15. CONCLUSION GENERAL - Plan de trabajo.

Un amplio campo de trabajo ha sido iniciado por el grupo de Colisiones en el que ocupa un lugar importante el estudio de problemas de disociación de iones moleculares a energías que van desde decenas de electrón-volts hasta los 700 kiloelectrón-volts. Se pretende estudiar los mecanismos de disociación, por medio de las distribuciones angulares de los productos disociados, a bajas energías; a altas energías, mediante el estudio de las intensidades relativas de los mismos productos.

Es de interés del grupo continuar el estudio de problemas de Física Atómica asociados a la Física de Plasmas y para ello se ha elaborado el siguiente programa:

1.- Estudio de la disociación de HeH^+ en H_2 , He, N_2 , O_2 , Ne y Ar, en el intervalo de energías de 50 keV a 700 keV. Se necesitan las secciones transversales totales para la formación de He^0 , H^0 , He^+ , H^+ ; esta necesidad proviene del hecho de que un reactor de fusión puede tener ^3He como combustible y el haz propuesto ofrece una posibilidad de obtener haces intensos de partículas neutras. La existencia de teorías sobre la disociación de este sistema, así como de datos experimentales a 10 keV añaden un interés especial a este caso.

2.- Medida de las secciones transversales diferenciales para la formación de D^- , D^0 , D^+ , a través del impacto de D_2^+ y D_3^+ en H_2 , He, N_2 y Ar. El intervalo de energías de interés es de 0.5 keV a 5 keV. La aplicación de estos resultados es en el diseño de fuentes de inyección.

3.- Medida de las secciones transversales diferenciales para la formación de D^- , D^0 y D^+ en Li, Na y Cs en el intervalo de energías de 0.5 keV a 5 keV. Este paso viene después de que se haya entendido bien la dinámica de las colisiones propuestas en el paso número 2, en el que se han elegido sistemas mas simples y manejables. Uno de los combustibles de un reactor puede consistir en la inyección de grandes corrientes de D^0 en una configuración magnética. Para obtener esas grandes corrientes se piensa hacer pasar haces de D^+ , D_2^+ y D_3^+ a través de celdas de Li, Na o Cs, para formar D^- , a energías de 1.5 keV. Los iones de D^- son acelerados a energías de 100 keV a 600 keV haciéndolos pasar por una celda de gas donde perderán un electrón para ser inyectados en el sistema.

4.- Medida de las secciones de captura y despojo electrónico de H^- y D^- en H_2 , He, N_2 , Ar y vapor de agua. El intervalo de energías de interés es de 50 keV a 700 keV. Estos datos son de mucho interés en el diseño de los sistemas inyectores. Hasta el momento no hay casi ninguna medida sobre pérdida electrónica de iones negativos.

5.- Estudio de las siguientes reacciones de intercambio de carga:



Estas medidas son importantes para entender procesos de pérdida electrónica en los plasmas.

Este plan de trabajo no está completo y está sujeto a las modificaciones que imponen las circunstancias y el propio desarrollo del grupo. Se ha tenido en cuenta desde luego el equipo que se está instalando en el laboratorio de Colisiones.

APENDICE 1

El cálculo preciso de la longitud efectiva de la celda de gas, es difícil. Un método usado por Barnett, McClure y otros, consiste en hacer pasar por la celda de colisión un haz de protones. En la celda se puede poner H_2 . La longitud efectiva se puede obtener a través de la relación $\bar{n} = I/I_0 \sigma_{10}$, ya que $\bar{n} = n l$. Sweetman aplica una corrección de $\pm 12\%$ a la longitud geométrica. Kupriyanov la determina a partir de la relación:

$$l = l_c + \frac{P^*}{P} l_a$$

donde l_c es la longitud geométrica, P^* es la presión en la cámara adyacente, donde están los analizadores, P , la presión en la cámara de gas y l_a es la distancia entre la abertura de salida de la celda de gas a los analizadores.

Un cálculo simple fue hecho por L.H. Toburen^{19- la.pte} en base a las siguientes hipótesis:

1a.- Que el flujo es molecular. Esta condición se cumple si

$$a P < 5$$

donde a , es una dimensión característica, por ejemplo, el diámetro de la abertura, en cm. y P , la presión del gas en micrones. Otra forma de definir el flujo molecular es a través del camino libre medio, por la condición de que la trayectoria libre media de las partículas sea mayor que las dimensiones del orificio conductor. La característica de este flujo es que las partículas se pueden mover libremente sin que ocurran interacciones mutuas.

2a.- Que el flujo fuera de la abertura es isotrópico. Se puede pensar que la presión decrece radialmente fuera de la abertura de la celda, como $1/r^2$, a distancias mayores que la abertura. Por otra parte, si a_0 es el radio de la abertura, la presión a una distancia a_0 , a lo largo del radio de la abertura, es la misma que dentro de la celda de gas.

La presión a una distancia r , $r > a_0$, será $P = K/r^2$.
 K se calcula por la condición de que en $r = a_0$ y $P = P_0$ el valor de K es $K = P_0 a_0^2$.

Como la sección se mide a través del producto Pl , el valor "efectivo" de Pl será:

$$Pl = P_0 l_0 + P_0 (a_{01} + a_{02}) \left[\int_{a_{01}}^{\infty} (K/r^2) dr + \int_{a_{02}}^{\infty} (K/r^2) dr \right]$$

P es la presión "efectiva"

l es la longitud "efectiva"

P_0 es la presión dentro de la cámara

l_0 es la longitud geométrica de la cámara

a_{01} es el radio de la entrada de la celda

a_{02} es el radio de la abertura de salida de la celda

luego: $Pl = P_0 l_0 + 2 P_0 (a_{01} + a_{02})$.

El incremento en la longitud por la presión en tanto por ciento está dado por $\frac{(Pl - P_0 l_0) \times 100}{P_0 l_0}$.

$$P_0 l_0$$

Se usó la estimación de Toburen para calcular la longitud efectiva de la celda.