



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS  
FÍSICA CUÁNTICA, ATÓMICA Y MOLECULAR

ESTUDIO DE LAS SECCIONES DE DESPOJO ELECTRÓNICO DE ANIONES  
DE OXÍGENO POR INTERACCIÓN CON MOLÉCULAS DE INTERÉS  
ATMOSFÉRICO

**TESIS**  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

**ALDO ANGEL MARTÍNEZ CALDERÓN**

Tutor Principal

Dr. Guillermo Guadalupe Hinojosa Aguirre  
Instituto de Ciencias Físicas

Miembros del Comité Tutor

Dr. Luis Rodríguez Fernández  
Instituto de Física

Dra. Alicia María Oliver Y Gutiérrez  
Instituto de Física

Cuernavaca, Morelos. Marzo de 2023



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



---

## Agradecimiento a Apoyos y a Servicios

Agradezco al apoyo otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT - México) durante mi programa de maestría.

Investigación realizada gracias al proyecto UNAM-PAPIIT IN107420.

Agradezco al soporte técnico del Instituto de Ciencias Físicas: Armando Bustos, Guillermo Bustos, Héctor Hinojosa, Reyes García, Juana Romero y Arturo Quintero.

Finalmente, quiero agradecer al programa ESPORA Psicológica (UNAM) por la valiosa atención brindada.

---

## Agradecimientos

Quiero agradecer a mi familia, por el ambiente de amor y felicidad en el que hemos crecido: a mis padres, por haber buscado lo mejor para mí y mis hermanos, y a mis hermanos, porque he podido verlos crecer y avanzar y he aprendido mucho con ellos. Mi familia siempre me ha motivado a cumplir varios objetivos, siempre ha confiado en mí y me ha ayudado a ver muchos aspectos que yo he ignorado. Muchas gracias por todo.

Con mis amigos he compartido muchos momentos importantes, me han regalado recuerdos que deseo jamás olvidar, gracias a todos ellos. Quisiera mencionar a algunos, pero la lista es más grande: en Técnicos viví una etapa crucial para definir mi futuro y conocí a varias personas, entre ellas, a mi mejor amigo, Rodolfo, que siento como si lo conociera de toda la vida y a mis amigas Jacqui, Yael y Dania, con quienes he formado vínculos fuertes a lo largo del tiempo. En la licenciatura conocí a mis amigos Olguín, Mali, Raúl, Lupita, Merlyn y Alondra y ahora forman parte de mí. Además, en la maestría conocí a Miroslava, una gran compañera que me compartió parte de su experiencia en la ciencia. La presencia de todos ellos ha sido esencial durante mi transcurso en el Posgrado, el cual, por diversos motivos, se había tornado un poco opaco para mí durante un breve momento. Gracias por compartir su tiempo conmigo.

A la psicóloga Elena y a los psicólogos Alain y Rodrigo, quienes, en diferentes etapas, me han ayudado a conocer una parte de mí, gracias por escucharme.

A mis profesores, de quienes he aprendido muchas cosas y me han transmitido parte de su pasión por la investigación y la docencia.

Al Dr. Guillermo Hinojosa, quien fue mi tutor de tesis de Licenciatura y ahora de Maestría, por transmitirme múltiples conocimientos y mostrarme distintos aspectos de la física experimental, por su apoyo, tiempo y la experiencia que me ha compartido y por aceptarme en su laboratorio. Su estilo de enseñanza ha sido único, muchas gracias. Además, agradezco al Dr. Olmo González por todos los comentarios, los consejos y el tiempo que compartió para mejorar.

A la doctora Alicia María y al doctor Luis Rodríguez, por aceptar ser parte de mi Comité Tutor y por los consejos y el seguimiento que me dieron.

También agradezco al jurado por las observaciones, correcciones y comentarios que me proporcionaron para finalizar este trabajo.

# Índice general

Índice general	III
Índice de figuras	VI
Índice de tablas	VIII
<b>1 Antecedentes</b>	<b>1</b>
1.1. Iones en la salud . . . . .	2
1.2. Iones en el espacio . . . . .	3
1.3. Técnicas BAT y SGR . . . . .	4
1.4. <b>Objetivos</b> . . . . .	5
<b>2 Marco Teórico</b>	<b>7</b>
2.1. Formación de aniones . . . . .	7
2.1.1. Impacto electrónico . . . . .	7
2.1.2. Captura electrónica . . . . .	8
2.1.3. Ionización de Penning . . . . .	9
2.1.4. Colisiones moleculares . . . . .	9
2.2. Teoría de Colisiones . . . . .	10
2.2.1. Determinación de la sección transversal . . . . .	11
2.2.1.1. Modelo de esferas duras . . . . .	14
2.2.2. Colisiones elásticas de dos cuerpos . . . . .	15
2.2.3. Camino libre medio . . . . .	20
2.3. Relación entre la sección transversal y el experimento . . . . .	21
2.3.1. Técnica de atenuación de la señal de partículas ionizadas (BAT) . . . . .	22

2.3.2. Técnica de aumento de la señal de partículas neutras (SGR) . . . . .	23
2.4. Acelerador de partículas . . . . .	24
2.4.1. Fuente de iones . . . . .	25
2.4.1.1. Parámetro de plasma . . . . .	25
2.4.1.2. Emisión termoiónica . . . . .	27
2.4.2. Lentes Einzel . . . . .	29
2.4.3. Espectroscopía de masas . . . . .	31
2.4.3.1. Distinción de especies . . . . .	32
2.4.3.2. Resolución del espectrómetro de masas . . . . .	33
2.4.4. Perfiladores de haz . . . . .	35
2.5. <b>Hipótesis</b> . . . . .	37
<b>3 Metodología</b>	<b>39</b>
3.1. Procedimientos generales . . . . .	40
3.1.1. Preparación del sistema de vacío . . . . .	40
3.1.2. Preparación del haz . . . . .	40
3.1.3. Detección del haz principal . . . . .	41
3.1.4. Determinación de las fracciones en el experimento . . . . .	41
3.2. Experimentos de calibración . . . . .	42
3.2.1. Espectroscopía de masas . . . . .	42
3.2.2. Detección de señales que componen al haz principal . . . . .	42
3.2.3. Experimento BAT y SGR . . . . .	43
<b>4 Resultados</b>	<b>45</b>
4.1. Análisis de Resultados . . . . .	46
4.1.1. Calibración del espectrómetro de masas: Huella del CH <sub>4</sub> . . . . .	46
4.1.2. Calibración de las placas deflectoras: Interacción C <sup>-</sup> + Ar . . . . .	48
4.1.3. Calibración de la sección transversal: Interacción C <sup>-</sup> + N <sub>2</sub> . . . . .	49
4.1.4. Sección transversal de la interacción O <sup>-</sup> + N <sub>2</sub> . . . . .	50
4.1.4.1. Análisis de una interacción . . . . .	50
4.1.4.2. Análisis de varias interacciones . . . . .	52
4.1.5. Análisis de tiempo de vida del O <sup>-*</sup> . . . . .	54
4.1.6. Análisis de errores . . . . .	56

## *ÍNDICE GENERAL*

---

<b>5 Conclusiones</b>	<b>59</b>
<b>A Artículos producidos durante este trabajo</b>	<b>61</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>65</b>



# Índice de figuras

2.1. Datos recuperados del artículo de Schulz (1962). Secciones transversales que miden a partir de la formación de $O^-$ por medio de impacto electrónico con el canal de captura disociativa. . . . .	9
2.2. Esquema típico de dispersión. La partícula en la posición $\vec{r}$ tiene masa $m$ y momento lineal $\vec{P}_i$ . El parámetro de impacto $b$ se mide desde la línea horizontal en rojo. En gris se muestran las rectas asintóticas a la trayectoria que sigue la partícula debido a un potencial con origen en el sistema de coordenadas. . . . .	10
2.3. Diagrama vectorial de los momentos. La fuerza central es paralela al vector $\vec{r}_c$ . . . . .	12
2.4. Cuadro superior, sistema de referencias de laboratorio fijado en la partícula objetivo antes del choque. Inferior, partículas después del choque con el modelo de partículas puntuales: inferior izquierda, trayectorias de las partículas vistas desde los dos SdR en varios tiempos, en rojo los ejes fijos en el SdL y en morado sistema fijo en el CdM; inferior derecha, análisis de componentes de las partículas en un tiempo arbitrario. . . . .	16
2.5. Equivalencia entre el choque de dos esferas duras y el experimento de dispersión. Cuadro superior, partículas esféricas de radio $r_1$ y $r_2$ antes de la colisión; cuadro inferior, experimento de dispersión con un potencial de esfera dura de radio $R = r_1 + r_2$ y una partícula puntual antes de la interacción. . . . .	19
2.6. Esquema del acelerador de partículas (no está a escala). Se muestran las componentes principales. . . . .	24
2.7. Distribución de velocidades (derecha, datos recuperadas del trabajo de Battaglia <i>et al.</i> (2010)) y energías correspondientes en ese intervalo (izquierda, calculada para fines ilustrativos). . . . .	28

2.8. Corte transversal de la fuente de iones en la zona de ionización. La carcasa es un conductor inoxidable no magnetizable conectada a un voltaje de aceleración del orden de 1 kV a 10 kV (zona <b>A</b> ); el voltaje del filamento (en <b>F</b> ) y el del ánodo (en <b>a</b> ) se encuentran conectados a diferencias de potencial respecto al voltaje de la carcasa. . . . .	28
2.9. Valores obtenidos en las simulaciones de Hussein (2017) (notación modificada). El potencial eléctrico (línea oscura) es constante para valores alejados de las lentes. El campo eléctrico (línea gris) aumenta en la región de entrada, por lo que acelera las partículas cargadas, pero disminuye cerca de la salida y logra desacelerarlas; este efecto permite que el haz tenga la misma energía en el punto focal. . . . .	30
2.10. Esquema de las trayectorias circulares de las partículas en el espectrómetro de masas. A la izquierda entra el haz de partículas formado por todas las especies. Si se tratara de ranuras puntuales, solo podrían salir las partículas de misma masa y llegar al detector. Como tienen un ancho, más de una partícula puede pasar a la vez. . . . .	33
2.11. Estimación del ancho del perfil del haz (cuchillas horizontales) en el laboratorio. Los resultados del experimento se encuentran punteados, la distancia se mide desde el centro de la separación de las cuchillas, por lo que la máxima separación es de aproximadamente 6 mm. Los ajustes son las líneas rojizas y en ambas se obtiene una correlación $R^2 > 0.95$ . El ancho del ajuste gaussiano es de 0.75 mm. . . . .	35
4.1. Experimento de espectrometría de masas para la mezcla de $\text{CH}_4$ y Ar en la fuente de iones con una energía de aceleración de 5 keV. Por comodidad, se representa solo la cuarta parte de la señal de $\text{CH}_4^-$ , como se indica en la gráfica. . . . .	46
4.2. Caracterización de las especies producidas en la fuente al inyectar distintos tanques con gas $\text{O}_2$ (ultra pureza y de baja calidad). El campo magnético se normaliza respecto a la energía de aceleración para tener una comparación con las señales observadas. . . . .	47
4.3. Señales capturadas con el CEM lateral para el haz de $\text{C}^-$ . Se observa la respuesta de las señales con y sin gas en la CeI. Esta interacción ejemplifica cómo las señales que no pertenecen a una fracción del haz no interfieren con los resultados. . . . .	48

4.4.	Tendencia de las fracciones $F_0$ (en azul) y $F_{-1}$ (en rojo) en función del espesor de la celda para las colisiones de $C^- + N_2$ correspondientes varias capturas a distintas energías entre 2.5 y 9 keV. El comportamiento es característico de las fracciones estudiadas. . . . .	49
4.5.	Tendencia de las fracciones $F_0$ (en azul) y $F_{-1}$ (en rojo) en función del espesor de la celda para las colisiones de $O^- + N_2$ con una energía de aceleración de 5 keV. El comportamiento es característico de las fracciones para todas las colisiones a cualquier energía medida. . . . .	51
4.6.	Secciones de pérdida del electrón de los iones $O^-$ en la interacción con $N_2$ en función de la velocidad obtenidas con la aproximación a primer orden para la interacción de $O^- + N_2$ dada una presión arbitraria inicial variable (símbolos rellenos). Se compara con los resultados (representados con los símbolos sin relleno) de Doering (1964) y Bennet <i>et al.</i> (1975). . . . .	52
4.7.	Comparación de las secciones calculadas con BAT y SGR a primer orden (con una interacción y un proceso) y a segundo orden (con varias interacciones y dos procesos de ionización). Se compara el coeficiente lineal de las ecs. 4.4a y 4.4b. . . . .	53
4.8.	Comportamiento del parámetro $\beta$ en función del TdV. La tendencia casi constante indica que el tiempo de vida del $O^-$ es mayor a los nanosegundos. El error está escalado respecto al promedio del parámetro $\beta$ . . . . .	55

## Índice de tablas

4.1.	Resumen de los valores obtenidos con nuestros experimentos. Se muestran además, los errores relativos a las secciones medidas con la técnica BAT y SGR a primer orden $\sigma_B$ y $\sigma_S$ . Las secciones $^{(1)}\sigma_B$ y $^{(1)}\sigma_S$ son los coeficientes lineales de la corrección a segundo orden para cada técnica. En promedio, los respectivos errores son $\epsilon_B = 16.05\%$ y $\epsilon_S = 9.54\%$ . . . . .	54
------	---	----

## Lista de abreviaturas, unidades y símbolos

Con la intención de una mejor comprensión a lo largo del texto, se definen algunos acrónimos utilizados.

Abreviatura	Significado	Notas
<b>BAT</b>	Técnica de atenuación del haz	del inglés, Beam Attenuation Technique
<b>BVM</b>	Bomba de vacío mecánico	-
<b>BVT</b>	Bomba de vacío turbomolecular	-
<b>CdM</b>	Centro de masa	-
<b>CeI</b>	Celda de Interacción	-
<b>CEM</b>	Canal multiplicador de electrones	del inglés, Channel electron multiplier
<b>HaP</b>	Haz principal	-
<b>SdL</b>	Sistema de laboratorio	-
<b>SdR</b>	Sistema de referencia	-
<b>SGR</b>	Técnica de crecimiento de la señal	del inglés, Signal Growth Rate
<b>SV</b>	Sistema de vacío	-
<b>TdV</b>	Tiempo de vuelo	-
<b>UV</b>	Ultravioleta	-
$\sigma_b$	Sección transversal por medio de BAT	-
$\sigma_s$	Sección transversal por medio de SGR	-

Unidades utilizadas en el documento,

Unidad	Magnitud	Equivalencia en el S.I.
e	Carga eléctrica	$1.602 \times 10^{-19}$ C
eV	Energía	$1.602 \times 10^{-19}$ J
G (Gauss)	Densidad de flujo magnético	$10^{-4}$ T (Tesla)
Torr	Presión	133.322 Pa
u	Masa atómica	$1.661 \times 10^{-27}$ kg



# RESUMEN

En este trabajo se deriva, por medio de dos métodos distintos, la sección transversal del proceso de pérdida de electrón del  $O^-$  a partir de colisiones simples con gas  $N_2$ . Se exhibe la dependencia de las secciones en función de la energía del proyectil en un rango entre 2.5 keV y 9 keV y se discute el tiempo de vida de este anión a partir de ambos cálculos. Se explica el funcionamiento del acelerador de partículas usado y los conceptos fundamentales de colisiones atómicas para lograr interpretar los resultados.

El correcto funcionamiento de los aparatos se confirma con los experimentos de calibración previos a los experimentos principales del presente estudio. La calibración del espectrómetro de masas se realiza con una especie ampliamente estudiada y disponible en el laboratorio. Se reproduce la sección transversal reportada en la literatura para la pérdida del electrón en la colisión de la especie  $C^-$  con distintas presiones de  $N_2$  a varias energías para verificar el régimen lineal de las interacciones.

# Capítulo 1

## Antecedentes

En la naturaleza es posible encontrar partículas cargadas, llamadas iones, ya sea positivamente (cationes) o negativamente (aniones), estas surgen cuando un átomo o molécula (inicialmente neutros) pierden o ganan electrones extra. Esta diferencia provoca que sus propiedades físicas cambien: de manera general, su carga permite que interactúen con campos electromagnéticos externos; a nivel interno, la configuración electrónica cambia junto con sus propiedades asociadas (energía del estado base, momento angular, spin total, etc.). Por consiguiente, al encontrarse con otras partículas, se puede esperar que no interactúen de la misma manera que con las formas neutras.

Los átomos y moléculas están conformados por electrones en su parte más externa y, al tener carga, tienen asociado un campo eléctrico, por lo que si se quisiera observar la interacción entre dos partículas, sería de repulsión o atracción entre sí. Para estudiarlas se puede hacer una aproximación de colisiones entre esferas duras, esto considera que el campo eléctrico del ion se anule a partir de cierta distancia respecto al centro de masas y que a distancias más pequeñas la partícula sea impenetrable. El impacto entre ambas esferas y el resultado después de esta colisión depende del tamaño de su superficie plana, llamada sección transversal, la cual es un parámetro fundamental en física atómica y molecular que permite conocer información sobre la formación de especies iónicas (de hecho, este concepto está generalizado para más interacciones y procesos, pero, para fines de esta tesis, el enfoque está en la formación de iones a partir del impacto entre moléculas o átomos).

Existen métodos experimentales para medir las secciones transversales correspondientes a distintos procesos, por ejemplo, se puede estudiar la pérdida del electrón extra de un ion

por medio de una colisión entre un átomo y una molécula. Utilizamos dos técnicas para medirla: la técnica de atenuación de un haz de partículas ionizadas (BAT, por sus siglas en inglés, Beam Attenuation Technique) y la técnica del crecimiento de la señal de partículas neutras (SGR, por sus siglas en inglés, Signal Growth Rate), en ambos se monitorea la variación de las partículas como función de un parámetro que incluye la cantidad de gas con el que interactúan y las dimensiones del contenedor, llamado espesor de celda. Como se detalla en el Cap. 2.3, si se fijan algunos parámetros de aceleración, la sección obtenida con cualquier método debe tener el mismo valor si se trata de un solo proceso de pérdida de electrones. Esto ocurre, por ejemplo, cuando las energías son suficientemente altas para despreciar efectos cuánticos, como el acoplamiento espín-órbita o transiciones de energía de un nivel cuántico a otro. La contribución de efectos de doble pérdida de electrones (despojo doble) son de al menos dos órdenes de magnitud menores a las de despojo simple y las colisiones de varias partículas suelen descartarse ya que el camino libre medio es suficiente para asegurar, en promedio, solo una interacción. Se propone medir la sección transversal para un proceso de pérdida de iones por medio de la colisión de un haz de aniones y explicar la tendencia de la sección cuando se mide con estas técnicas. En la literatura se han expuesto distintas aplicaciones de los aniones tanto en la salud como en la tecnología, como las que se mencionan a continuación.

## 1.1. Iones en la salud

Existen antecedentes de los posibles efectos de los iones negativos en la salud mental cuando se aplican en la atmósfera. Por ejemplo, Liu *et al.* (2017) observaron un posible efecto debido a la presencia de iones en el aire mejora la calidad del sueño. Dispusieron de un grupo de control C1 y otro en tratamiento con iones C2. En el grupo C1 notaron el doble de tensión psicológica y el triple de actividad antes del sueño que el correspondiente al grupo C2. Tanto los resultados subjetivos (encuestas) como los psicológicos (pruebas de latencia de inicio de sueño<sup>1</sup> y sueño de ondas lentas<sup>2</sup>) fueron coherentes entre sí. Un año después se publicó un artículo en el que estudiaron uno de los posibles efectos que tienen los aniones al propagarlos en el ambiente. Los pacientes eran personas perjudicadas con síntomas de una

---

<sup>1</sup>Tiempo que se tarda en entrar a la primer etapa del sueño desde que se inicia el descanso.

<sup>2</sup>La tercera etapa del sueño.



situación emocional. Se trata de un síndrome conocido como desorden afectivo estacional (SAD, por las siglas en inglés, Seasonal Affective Disorder). En éste, Bowers *et al.* (2018) reportaron una disminución en los casos de este síndrome al introducir aniones en el ambiente. Los sujetos presentan una disminución de los efectos debidos al SAD.

En el área de la salud física también se encuentran aplicaciones de los aniones. Por ejemplo, Escombe *et al.* (2009) realizaron estudios sobre la transmisión de tuberculosis en el aire (ionizado y sin ionizar). Estudiaron 150 animales (puerquitos de Guinea) expuestos en tres cámaras: una de control, una expuesta a radiación UV y otra sometida a un ambiente ionizado. Obtuvieron una notable disminución de casos de individuos infectados cuando se exponían al ambiente ionizado (35 % de animales infectados de tuberculosis en el grupo de control, 14 % en el grupo de aire ionizado y 9.5 % en el de UV). Además, el número de decesos fue disminuido en gran medida en los animales del ambiente ionizado (murió el 8.6 % de los infectados en el grupo de control, 4.3 % de los animales en el grupo ionizado y 3.6 % en el de UV). La tuberculosis no es la única transmisión que se ha logrado reducir con aniones en el ambiente. Recientemente, Hagbom *et al.* (2015) mostraron los resultados al trabajar con los virus calcivirus, rotavirus e influenza H3N2. A partir de los experimentos diseñados para estudiar estos efectos notaron que si el grupo de cerdos sanos se encontraba a una distancia próxima (entre 15 cm y 1.2 m) de los cerdos infectados, ninguno resultaba contagiado, a diferencia del grupo de control (sin exposición a iones), del cual el 75 % se infectó.

## 1.2. Iones en el espacio

La detección de aniones moleculares en el espacio ha sido uno de los descubrimientos más recientes en astrofísica. De forma cotidiana, es común estar rodeado de átomos y moléculas neutras, sin embargo, esto no siempre se observa cuando se estudian algunas regiones del universo. McCarthy *et al.* (2006) fueron los primeros en elucidar un anión de este tipo, el  $C_6H^-$ . Un año después se encontraron una cantidad extensa de aniones durante la misión CASINI, reportada por Desai *et al.* (2017), solo que no lograron determinar los mecanismos de formación de estos aniones; la forma más aceptable sobre la ionización en el espacio propuesta para algunas cadenas largas de carbono era la captura radiativa electrónica (REA, por las siglas en inglés). Sin embargo, Khamesian *et al.* (2016) mostraron que este proceso no era suficiente para considerarlo como el proceso de mayor contribución en el espacio. Varios

de los posibles mecanismos de formación de aniones en el medio interestelar se han revisado en el trabajo de Millar *et al.* (2017), pero remarcan la necesidad de tener más resultados experimentales con aniones.

Nos interesa poder proveer información sobre los posibles procesos de formación de un ion en particular. Para esto, utilizamos información obtenida a partir de técnicas previamente documentadas de colisiones atómicas. Ambas se describen brevemente a continuación (para un enfoque analítico, ver la sección 2.3).

### 1.3. Técnicas BAT y SGR

La técnica de atenuación del haz (BAT) consiste en monitorear la disminución de la intensidad de un haz de partículas cargadas cuando interactúa con un gas contenido en una celda conforme aumenta la presión dentro de la misma; algunos ejemplos del uso de esta técnica se encuentran en artículos como el de Risley & Geballe (1974), quienes experimentaron con aniones de hidrógeno y por Mendes *et al.* (2019) y Nascimento *et al.* (2013), en las cuales estudian colisiones que involucran oxígeno atómico y han reportado secciones transversales prácticamente constantes para pérdida del electrón por colisiones atómicas a velocidades cercanas a  $10^5$  m/s (comparables con las velocidades estudiadas en el presente estudio).

Además de la técnica anterior, se pueden hacer estudios de la sección transversal con el método de crecimiento de la señal (SGR), que consiste en analizar el crecimiento de la cantidad de partículas neutras bajo las mismas condiciones que en BAT. Serkovic-Loli *et al.* (2015) y Hernández & Hinojosa (2018) han logrado usar las dos técnicas mencionadas. Ambas técnicas pueden ser utilizadas de forma simultánea en el mismo acelerador, la teoría (detallada a lo largo del texto) indica que se espera que la sección obtenida tendría el mismo valor sin importar el método que se use.

Debido a los puntos anteriores, y por la relevancia con algunos iones, se plantea un problema: ¿Cuál es la tendencia de las secciones transversales para aniones formados a partir de una colisión simple entre especies encontradas en la atmósfera? Los recursos del laboratorio nos permiten iniciar esta búsqueda con un anión en particular,  $O^-$  que interactúa con moléculas de  $N_2$  en un rango de 2 keV y 9 keV, analizado con ambas técnicas.

## 1.4. Objetivos

- Generales
  - Obtener experimentalmente la sección transversal como función de la energía del proceso de pérdida de electrón del  $O^-$  en una colisión entre  $O^-$  y  $N_2$ .
  - Derivar información sobre la estructura iónica del  $O^-$  a partir de los experimentos.
- Específicos
  - Asegurar las condiciones experimentales con la calibración de sistemas de medición.
  - Medir e interpretar la sección transversal de la pérdida de un electrón del  $O^-$  para la colisión entre un haz de  $O^-$  y un blanco de  $N_2$  por medio de la atenuación de un haz de aniones  $O^-$  (método BAT) y, también, por medio del crecimiento de la señal de partículas neutras de O (método SGR).
  - Interpretar la tendencia de las secciones transversales de pérdida del electrón de  $O^-$  en  $N_2$  a altas energías cuando se miden por los métodos de BAT y SGR.
  - Explorar la posibilidad de determinar los tiempos de vida de sistemas con  $O^-$  a partir de los experimentos de colisiones atómicas.

En las siguientes secciones se describen los fundamentos teóricos esenciales para entender este trabajo. El Cap. 2 está enfocado en la teoría básica necesaria para poder entender las interacciones entre partículas: la Sec. 2.1 es un breve resumen sobre algunos procesos de formación de iones, en particular se habla acerca de los aniones; en la Sec. 2.2 se introducen distintos conceptos utilizados en colisiones atómicas y se explica el uso del modelo geométrico bajo ciertas restricciones; más adelante, en la Sec. 2.3, se explica cuál es la relación directa entre la teoría descrita y los datos que se miden en este laboratorio a partir de dos técnicas distintas, una ligada a la atenuación de partículas cargadas de un haz de iones y la otra a un incremento de partículas neutras en otro haz.

La formación de un haz de partículas es un proceso muy extenso cuyos principios se resumen a lo largo de la Sec. 2.4, bajo el enfoque del acelerador de partículas con el que se trabaja. El procedimiento experimental que se emplea para el correcto funcionamiento del acelerador, los detalles de las técnicas BAT y SGR y la manera de calibrar distintos aparatos usados se describen en la Sec. 3. Los resultados del trabajo se describen en el Cap. 4, en este se explica cómo se corrigieron algunos detalles a primer y segundo orden y se propone el uso de la técnica de tiempo de vida.

# Capítulo 2

## Marco Teórico

### 2.1. Formación de aniones

Los mecanismos (o canales) de ionización son procesos en los que una molécula o átomo adquieren o pierden electrones. Existen distintos canales, algunos iones se forman por medio de la interacción de una molécula neutra con electrones libres de distintas energías; otros, están relacionados con la interacción entre átomos o moléculas. A continuación se describen algunos mecanismos típicos de ionización.

#### 2.1.1. Impacto electrónico

Una molécula que puede separarse en especies A y B (denotada como AB), que interactúa con electrones libres a altas energías<sup>3</sup> puede ser ionizada por estos canales,



y



En el primer caso, la interacción causa la pérdida de un electrón y se forma un catión radical, pero no hay fragmentación. En el segundo, ocurre una disociación, la molécula se

---

<sup>3</sup>Energías mayores a la energía de ionización de la molécula referida.

fragmenta en un átomo neutro y un catión. En ambos casos es posible que se formen estados excitados, aunque esto no necesariamente debe ocurrir.

### 2.1.2. Captura electrónica

La interacción de los electrones a bajas energías con una molécula AB puede provocar la ionización de la molécula o de sus fragmentos por



El primer caso mostrado corresponde a una molécula que interactúa con un electrón libre, se produce la ionización de la molécula y se induce un estado excitado. Esto suele ocurrir cuando los electrones tienen una energía entre 0 y 2 eV.

El segundo caso ocurre con mayor probabilidad cuando los electrones tienen una energía entre 0 y 10 eV, la molécula se rompe en dos átomos distintos. Uno de ellos captura el electrón y forma un anión, el fragmento restante permanece neutro pero se encuentra en un posible estado excitado; la Fig. 2.1 es un ejemplo de este tipo de formación de iones, corresponde a los experimentos realizados por Schulz (1962), donde obtiene la sección transversal para átomos mediante los canales  $O_2 + e \rightarrow O^{-*} + R_1$  y  $CO_2 + e \rightarrow O^{-*} + R_2$ , donde  $R_1$  y  $R_2$  representan productos (no mencionados) durante el proceso.

El último caso mostrado corresponde a la fragmentación de la molécula. Uno de los fragmentos queda cargado negativamente, el otro pierde un electrón y forma un catión. Esto ocurre cuando la energía de los electrones es mayor a los 10 eV [Gross (2011)].

La cantidad de fragmentos ionizados en el último canal es alrededor de tres órdenes de magnitud menor que la cantidad de iones positivos formados por otros métodos [de Hoffman & Sroobant (2007)].

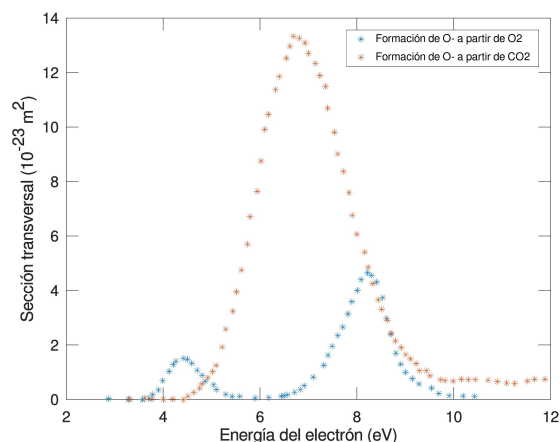


Figura 2.1: Datos recuperados del artículo de Schulz (1962). Secciones transversales que miden a partir de la formación de  $O^-$  por medio de impacto electrónico con el canal de captura disociativa.

### 2.1.3. Ionización de Penning

Si se tiene un sistema donde se introduce un gas noble en estado excitado  $A^*$  y una molécula o átomo  $B$ , la transferencia de energía de  $A^*$  a  $B$  debida a la colisión entre ellas puede provocar la expulsión de un electrón de  $B$  y por tanto, cargarla positivamente.



Esta reacción ocurre usualmente cuando la energía de excitación de  $A^*$  es superior a la energía de ionización de la especie  $B$  [Temelkov, *et al.* (2006)].

### 2.1.4. Colisiones moleculares

Además de la ionización por medio de electrones libres es posible generar especies ionizadas a partir de colisiones con los distintos átomos o moléculas que se encuentran dentro del plasma formado en la fuente.

Si una molécula  $AB^\pm$  impacta a velocidades altas un gas formado de moléculas  $D$ , pueden ocurrir, entre otros, los siguientes procesos,



En los primeros dos casos, la molécula se rompe por el impacto con D y pierden un electrón: en la ec. (2.4a) una especie pierde un electrón más y sufre la doble ionización (o doble despojo), mientras que en la ec. (2.4b) el ion se neutraliza. En el proceso (2.4c) la molécula AB se rompe y se forman dos cationes.

## 2.2. Teoría de Colisiones

La sección transversal es una medida de la probabilidad de que ocurra un proceso de dispersión durante una colisión. Es posible obtener este valor a partir de distintas técnicas, como las que se verán en las secciones siguientes. Su valor depende de la energía con la que se realice una colisión. En colisiones atómicas se puede definir esto como una especie de área de contacto efectiva entre partículas al suponer un modelo de esferas duras. Esta definición, en realidad, es una propiedad que puede ser derivada a partir de teoría de dispersión clásica, como se muestra a continuación.

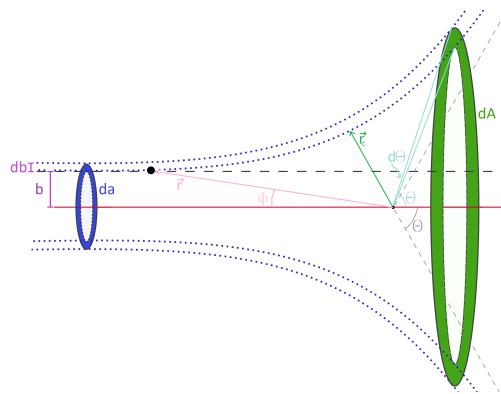


Figura 2.2: Esquema típico de dispersión. La partícula en la posición  $\vec{r}$  tiene masa  $m$  y momento lineal  $\vec{P}_i$ . El parámetro de impacto  $b$  se mide desde la línea horizontal en rojo. En gris se muestran las rectas asintóticas a la trayectoria que sigue la partícula debido a un potencial con origen en el sistema de coordenadas.



### 2.2.1. Determinación de la sección transversal

Es de interés obtener una forma de describir la sección transversal en términos de parámetros experimentales. En la Fig. 2.2, la partícula sufre una desviación en la trayectoria debido al potencial  $V(\vec{r})$ . Si se representa con  $\theta$  el ángulo polar formado por el proyectil con origen en la fuente de potencial, los límites asintóticos para la trayectoria corresponden a  $\theta = \Theta$ .

El número de partículas entrantes entre una sección de radios en el intervalo  $[b, b + db]$  por unidad de tiempo y área tiene que ser igual al número de partículas salientes por unidad de tiempo y área, es decir,  $I(2\pi b db) = I d\sigma$ . El diferencial de área  $d\sigma$  se puede expresar en términos del ángulo sólido, por lo que se puede reescribir como  $d\sigma = \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$ . Para el caso de simetría cilíndrica,  $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ , donde  $\theta$  varía en función del parámetro de impacto, así que  $d\theta = \frac{d\theta}{db} db$ , por lo que

$$\begin{aligned} I(2\pi b db) &= I \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin\theta \frac{d\theta}{db} db \\ \rightarrow b db &= \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta \frac{d\theta}{db} db \\ \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{b}{\sin\theta \frac{d\theta}{db}} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Para el desarrollo, se considera una partícula de masa  $m$ , con momento angular  $\vec{L}$  y velocidad inicial  $\vec{v}_0$ . La magnitud del momento angular  $\vec{L}$  se conserva, así que, si se conoce una vez su valor, se conoce en cualquier instante,

$$L = mv_0 b \quad (2.6a)$$

$$= mr^2 \dot{\phi}. \quad (2.6b)$$

Por otro lado, la energía total de un sistema se conserva. En general, los procesos de ionización, excitación y disociación son mucho menores a la energía cinética del proyectil (energías del orden de eV comparado con keV), esta aproximación es válida. Al suponer un

potencial  $V(\vec{r})$  que se anula a distancias infinitas, se puede expresar la energía en función de la velocidad inicial.

$$E = \frac{1}{2}mv_0^2 \quad (2.7a)$$

$$= \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\phi}^2 + V(\vec{r}) \quad (2.7b)$$

$$= \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(\vec{r}). \quad (2.7c)$$

Es importante tener una forma para describir las trayectorias, por lo que se requiere resolver las ecuaciones de movimiento. De las ecs.(2.6b) y (2.7c) se obtienen la expresiones para las velocidades angular y radial. Al dividir ambas velocidades y usar la derivación paramétrica se elimina la dependencia explícita del tiempo,

$$\frac{\dot{r}^2}{\dot{\phi}^2} = \left(\frac{\dot{r}}{\dot{\phi}}\right)^2 = \left(\frac{dr}{d\phi}\right)^2 = \frac{\frac{2E}{m} - \frac{L^2}{m^2r^2} - \frac{2}{m}V(\vec{r})}{\frac{L^2}{m^2r^4}} = \left[\frac{2mE}{L^2} - \frac{1}{r^2} - \frac{2m}{L^2}V(\vec{r})\right] r^4 \quad (2.8)$$

Para nuestro trabajo es suficiente considerar el análisis para fuerzas centrales, por lo que podemos reescribir  $V(\vec{r}) = V(r)$ . Entonces, la ecuación diferencial se puede reescribir como

$$dr = \left[\frac{2mE}{L^2} - \frac{1}{r^2} - \frac{2m}{L^2}V(r)\right]^{\frac{1}{2}} r^2 d\phi$$

$$\Rightarrow d\phi = \frac{1}{\left[\frac{2mE}{L^2} - \frac{1}{r^2} - \frac{2m}{L^2}V(r)\right]^{\frac{1}{2}} r^2} dr. \quad (2.9)$$

A partir de las ecs. (2.6a) y (2.7a) se obtiene que  $\frac{2mE}{L^2} = \frac{1}{b^2}$ , así que la ec. (2.9) se escribe como

$$d\phi = \frac{b}{\left[1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}\right]^{\frac{1}{2}} r^2} dr. \quad (2.10)$$

En los experimentos planteados no interesa conocer el valor en cada distancia, ya que los detectores se encuentran colocados a una distancia mucho mayor a  $b$  por lo que solo se

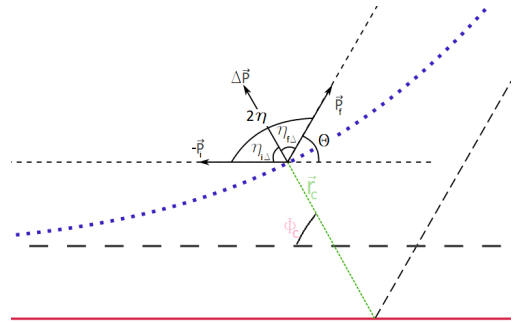


Figura 2.3: Diagrama vectorial de los momentos. La fuerza central es paralela al vector  $\vec{r}_c$ .

efectúa el cálculo en el límite de radios grandes, es decir, cuando  $r \rightarrow \infty$ . Además, el radio inicial es la distancia mínima entre la trayectoria y el origen de la fuerza central, por lo que la solución a distancias grandes está dada por

$$\phi - \phi_0 = \int_{r_0}^{\infty} \frac{b}{\left[1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}\right]^{\frac{1}{2}} r^2} dr. \quad (2.11)$$

La asíntota horizontal corresponde a  $\phi = 0$ . Nos interesa conocer el ángulo de la segunda asíntota, que es el ángulo de dispersión  $\Theta$ . La Fig. 2.3 contiene algunas consideraciones importantes para conocer  $\Theta$ .

El vector radial  $\vec{r}_c$  se encuentra fijo en el tiempo de la interacción. La fuerza de interacción en la posición  $\vec{r}_c$  se puede conocer a partir del cambio en el momento lineal, ya que  $\vec{F} = \frac{\vec{P}_f - \vec{P}_i}{\Delta t} \equiv \frac{\Delta \vec{P}}{\Delta t}$ , del cual se obtiene que  $\vec{F} \parallel \Delta \vec{P}$ . Al hacer el análisis de energía en términos de los momentos lineales asíntóticos,  $\frac{\vec{P}_i^2}{2m} = \frac{\vec{P}_f^2}{2m} \rightarrow \vec{P}_i^2 = \vec{P}_f^2 \equiv P^2$ . De estos se puede conocer el ángulo que forma cada asíntota respecto al vector  $\vec{r}_c$ , así,

$$\Delta \vec{P} = \vec{P}_f - \vec{P}_i \rightarrow \begin{cases} -\vec{P}_i \cdot \Delta \vec{P} = -\vec{P}_i \cdot (\vec{P}_f - \vec{P}_i) = P^2(1 - \cos(\eta)) = P\Delta P \cos(\eta_{i\Delta}) \\ \vec{P}_f \cdot \Delta \vec{P} = \vec{P}_f \cdot (\vec{P}_f - \vec{P}_i) = P^2(1 - \cos(\eta)) = P\Delta P \cos(\eta_{f\Delta}) \end{cases} \quad (2.12)$$

Al comparar ambas ecuaciones,

$$\begin{aligned} P^2(\cos(\eta) - 1) = P\Delta P \cos(\eta_{i\Delta}) &\Rightarrow \cos(\eta_{i\Delta}) = \frac{P(1 - \cos(\eta))}{\Delta P} \\ P^2(\cos(\eta) - 1) = P\Delta P \cos(\eta_{f\Delta}) &\Rightarrow \cos(\eta_{f\Delta}) = \frac{P(1 - \cos(\eta))}{\Delta P} \\ &\Rightarrow \cos(\eta_{i\Delta}) = \cos(\eta_{f\Delta}) \\ &\Rightarrow \eta_{i\Delta} = \eta_{f\Delta} \equiv \eta. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Es decir, el vector radial en la posición donde se unen las dos trayectorias asíntóticas biseca el ángulo formado entre esas rectas. Entonces, cuando  $\vec{r} = \vec{r}_c$ ,  $\phi = \phi_c$ .

$$\Theta = \pi - 2\phi = \pi - 2 \int_{r_c}^{\infty} \frac{b}{\left[1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E}\right]^{\frac{1}{2}} r^2} dr. \quad (2.14)$$

### 2.2.1.1. Modelo de esferas duras

La sección transversal para el modelo de esferas duras se puede obtener a partir de la ec. (2.5). Como nos interesa el límite asintótico cuando  $r \rightarrow \infty$ ,  $\theta = \Theta$ . Se considera el potencial radial de esferas duras

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & \text{si } r \leq R_0 \\ 0, & \text{si } r > R_0 \end{cases} . \quad (2.15)$$

Con  $R_0$  el radio de la esfera dura. Para  $r < R_0$

$$\Theta = \pi - 2\phi_c = \pi - 2 \int_{r_c}^{\infty} \frac{b}{\left[1 - \frac{b^2}{r^2}\right]^{\frac{1}{2}} r^2} dr. \quad (2.16)$$

La solución está dada por

$$\Theta = \pi - 2 \arcsin(b/R_0) \quad (2.17)$$

Esto quiere decir que en una dispersión de esfera dura, solo se obtienen ángulos cuando el parámetro de impacto  $b$  sea menor que el radio de la esfera. En el límite cuando  $r \rightarrow \infty$ ,  $\Theta \rightarrow \pi$ , es decir, las partículas se regresan a su trayectoria anterior al choque; es el mismo caso si  $b = 0$ . Si  $b = r$ ,  $\Theta = 0$  o sea que no hay dispersión.

De la (2.17) se puede obtener cuál es la sección transversal para este caso. Como

$$\begin{aligned} \Theta &= \pi - 2 \arcsin(b/R_0) \\ \rightarrow b &= R_0 \sin\left(\frac{\pi - \Theta}{2}\right) = R_0 \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \\ \rightarrow 1 &= -\frac{R_0}{2} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \frac{d\Theta}{db} \\ \rightarrow \left|\frac{d\Theta}{db}\right| &= \frac{2}{R_0} \frac{1}{\sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Al usar la ec. (2.18) en la ec. (2.5) ,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{bR_0 \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{2 \sin(\Theta)} = \frac{R_0 \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)R_0 \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{2 \sin(\Theta)} = \frac{R_0^2 \sin(\Theta)}{4 \sin(\Theta)} = \frac{R_0^2}{4} \quad (2.19)$$

Entonces, la sección transversal total se obtiene al integrar,

$$\sigma = \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \frac{R_0^2}{4} \sin(\Theta) d\Theta = \pi R_0^2. \quad (2.20)$$

Es decir, bajo la aproximación de esferas duras, la sección transversal es la superficie del círculo máximo inscrito en la esfera de radio  $R_0$ .

### 2.2.2. Colisiones elásticas de dos cuerpos

Dados dos cuerpos puntuales de masas  $m_1$  y  $m_2$  se puede describir su trayectoria inicial y final a partir de la conservación de momento y energía.

En un sistema genérico, si las posiciones de las masas  $m_1$  y  $m_2$  son  $\vec{l}_1$  y  $\vec{l}_2$ , respectivamente y se define el centro de masas (CdM) como

$$\vec{l} = \frac{m_1 \vec{l}_1 + m_2 \vec{l}_2}{m_1 + m_2}, \quad (2.21)$$

es posible conocer las coordenadas desde el sistema de referencia fijo en el centro de masas dado por la suma vectorial,

$$\begin{cases} \vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{L}_1 \\ \vec{L} = \vec{l}_2 + \vec{L}_2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \vec{L}_1 = \vec{L} - \vec{l}_1 \\ \vec{L}_2 = \vec{L} - \vec{l}_2 \end{cases} \quad (2.22)$$

En particular se puede elegir el origen del sistema de referencias del laboratorio sobre la partícula en reposo de masa  $m_2$  antes de la colisión. Con esta elección, se sustituye  $\vec{l}_i$  por  $\vec{r}_i$ ,  $\vec{L}_i$  por  $\vec{R}_i$  y  $\vec{L}$  por  $\vec{R}$ , con  $i \in \{1, 2\}$ . En los experimentos es posible controlar la velocidad inicial de las partículas desde el sistema de laboratorio (SdL), por lo tanto, nos interesa describir el ángulo de dispersión y los procesos finales en términos de las velocidades  $\vec{v}_1$  y  $\vec{v}_2$  (es decir, las velocidades vistas desde el CdM correspondientes a las partículas 1 y 2), o bien, de  $\vec{u}_1$  y  $\vec{u}_2$  (las velocidades de las partículas 1 y 2 vistas desde el SdL). La Fig. 2.4 muestra los diagramas utilizados para el análisis.

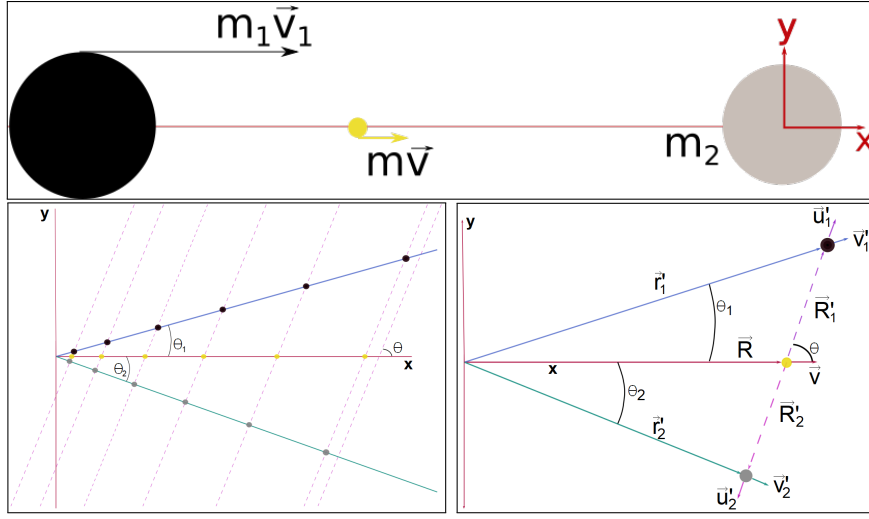


Figura 2.4: Cuadro superior, sistema de referencias de laboratorio fijado en la partícula objetivo antes del choque. Inferior, partículas después del choque con el modelo de partículas puntuales: inferior izquierda, trayectorias de las partículas vistas desde los dos SdR en varios tiempos, en rojo los ejes fijos en el SdL y en morado sistema fijo en el CdM; inferior derecha, análisis de componentes de las partículas en un tiempo arbitrario.

Antes del choque, las velocidades cumplen

$$\begin{cases} \dot{\vec{R}}_1 = \vec{u}_1 = \vec{v} - \vec{v}_1 \\ \dot{\vec{R}}_2 = \vec{u}_2 = \vec{v} - \vec{v}_2 \end{cases} \quad (2.23)$$

Por definición, la velocidad del centro de masas se puede describir con la velocidad de la partícula de masa  $m_1$ :

$$\vec{v} = \frac{m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{v}_1, \quad (2.24)$$

además, de la ec. (2.23) se sabe que

$$\vec{v} = \vec{u}_1 + \vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}_1 = \vec{v} - \vec{u}_1, \quad (2.25)$$

al insertar en la ec. (2.24),

$$\begin{aligned}
 \vec{v} &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} (\vec{v}_1 - \vec{u}_1) \\
 \rightarrow \left( -1 + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \right) \vec{v} &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{u}_1 \\
 \rightarrow \left( -\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right) \vec{v} &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{u}_1 \\
 \rightarrow \vec{v} &= -\frac{m_1}{m_2} \vec{u}_1.
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

Así, es posible referirse a la velocidad en el Cdm conociendo únicamente  $\vec{v}_1$  o  $\vec{u}_1$ .

La conservación de la energía indica que

$$\frac{1}{2} m_1 u_1^2 + \frac{1}{2} m_2 u_2^2 = \frac{1}{2} m_1 u_1'^2 + \frac{1}{2} m_2 u_2'^2. \tag{2.27}$$

Como velocidad del Cdm desde el sistema de referencia fijado en el Cdm es cero,

$$\begin{cases} \frac{m_1 \vec{u}_1 + m_2 \vec{u}_2}{m_1 + m_2} = 0 \\ \frac{m_1 \vec{u}_1' + m_2 \vec{u}_2'}{m_1 + m_2} = 0, \end{cases} \tag{2.28}$$

se deduce que

$$\begin{cases} \vec{u}_1 = -\frac{m_2}{m_1} \vec{u}_2 \\ \vec{u}_1' = -\frac{m_2}{m_1} \vec{u}_2'. \end{cases} \tag{2.29}$$

Al reescribir la conservación de la energía en términos de las velocidades con mismo subíndice,

$$\begin{aligned}
 \left[ m_1 + m_2 \left( \frac{m_1}{m_2} \right)^2 \right] u_1^2 &= \left[ m_1 + m_2 \left( \frac{m_1}{m_2} \right)^2 \right] u_1'^2, \\
 \left[ m_1 \left( \frac{m_2}{m_1} \right)^2 + m_2 \right] u_2^2 &= \left[ m_1 \left( \frac{m_2}{m_1} \right)^2 + m_2 \right] u_2'^2
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

y se llega a que la magnitud de las velocidades antes y después del choque son las mismas cuando se miden desde el sistema de referencia del CdM,

$$u'_1 = u_1, \quad (2.31)$$

$$u'_2 = u_2. \quad (2.32)$$

De las observaciones anteriores se puede conocer el ángulo de dispersión medido desde el CdM en términos de las velocidades iniciales y del ángulo de dispersión en el laboratorio. Al separar el vector en sus componentes,

$$\begin{cases} v'_{1x} = v'_1 \cos(\theta_1) = u'_1 \cos(\theta) + v \\ v'_{1y} = v'_1 \sin(\theta_1) = u'_1 \sin(\theta), \end{cases} \quad (2.33)$$

Si se dividen la componente vertical entre la horizontal,

$$\begin{aligned} \frac{v'_{1y}}{v'_{1x}} &= \frac{\sin(\theta_1)}{\cos(\theta_1)} = \tan(\theta_1) = \frac{u'_1 \sin(\theta)}{u'_1 \cos(\theta) + v} \\ &\rightarrow \tan(\theta_1) = \frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta) + \frac{v}{u'_1}}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Al utilizar  $\vec{v}$  de la (2.26) y escribir  $u'_1 = u_1$  de la ec. (2.33).

$$\frac{v}{u'_1} = \frac{\frac{m_1}{m_2} u_1}{u_1} = \frac{m_1}{m_2}, \quad (2.35)$$

entonces,

$$\tan(\theta_1) = \frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta) + \frac{m_1}{m_2}}. \quad (2.36)$$

Finalmente, al utilizar la identidad  $\cos(\theta_1) = \sqrt{\frac{1}{\tan^2(\theta_1)+1}}$ , se obtiene que

$$\cos(\theta_1) = \frac{\cos(\theta) + \frac{m_1}{m_2}}{\sqrt{1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2\frac{m_1}{m_2} \cos(\theta)}}. \quad (2.37)$$

El análisis de la Sec. 2.2 requiere de un potencial y permite obtener que la sección transversal para esferas duras es el área de la proyección de la esfera en dos dimensiones. La interacción entre la partícula y el potencial provoca un cambio de momento  $\Delta\vec{P}$  en el



proyectil, sin embargo, no proporciona información sobre qué es lo que le ocurre a la fuente del potencial después de la dispersión, por lo que el sistema puede ser elegido elástico o inelástico sin interferir en el proyectil. Por otro lado, el análisis en la Sec. 2.2.2 predice qué es lo que ocurre cuando dos partículas esféricas colisionan entre sí sin especificar cómo es que salen con ángulos distintos e ignora el tipo de potencial presente entre ellas, pero sí requiere conocer las masas de ambas partículas. Ambas descripciones son equivalentes: Si se fija el SdL en la fuente del potencial, se obtiene que el ángulo entre el eje horizontal y el proyectil es  $\Theta$  y es constante. Este ángulo coincide con el ángulo  $\theta$  de la colisión elástica (vistas desde el CdM) entre las partículas de masas  $m_1$  y  $m_2$  (Fig. 2.4 inferior derecha). Ambas partículas pueden ser consideradas dos esferas duras de radios  $r_1$  y  $r_2$  y con sus masas concentradas en sus centros geométricos respectivos. Así, la colisión de la Sec. 2.2.2 se realiza con los centros de masas, y la dispersión de la Sec. 2.2 se da cuando la distancia entre los centros es mínima, es decir, a una distancia  $R_0 = r_1 + r_2$ ; entonces, el proyectil puede ser visto como una partícula puntual y la fuente como una partícula con potencial de esfera dura de radio  $R_0 = r_1 + r_2$ . De esta forma, se obtiene una dispersión elástica donde  $\Delta\vec{P} = m_1\vec{v}'_1 - m_1\vec{v}_1 = m_2\vec{v}'_2$  es el momento que transfiere el proyectil a la fuente del potencial.

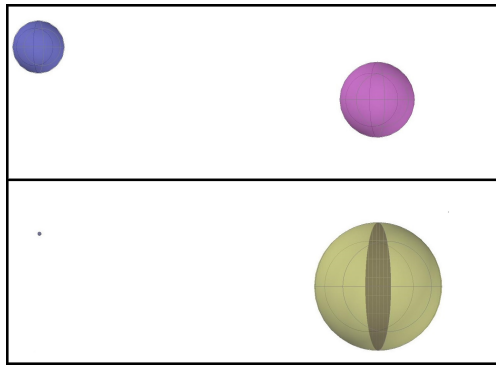


Figura 2.5: Equivalencia entre el choque de dos esferas duras y el experimento de dispersión. Cuadro superior, partículas esféricas de radio  $r_1$  y  $r_2$  antes de la colisión; cuadro inferior, experimento de dispersión con un potencial de esfera dura de radio  $R = r_1 + r_2$  y una partícula puntual antes de la interacción.

La teoría descrita toma en cuenta una situación ideal donde una sola partícula impacta una y solo una vez con un blanco fijo. Para poder utilizarla, se requiere que las condiciones sean próximas a las ideales: las partículas deben interactuar aproximadamente una sola vez. Las partículas blanco deben moverse a velocidad muy baja.

La velocidad de las partículas blanco puede ser estimada a partir de considerar el gas como un gas ideal cuya energía interna está dada por  $E = c_v k_B T$ . En el caso de una molécula diatómica a temperatura ambiente se espera que la energía cinética interna sea de  $9.75 \times 10^{-21}$  J  $\approx 6 \times 10^{-2}$  eV. Si, por ejemplo, se utilizan partículas proyectil con energías del orden de  $10^3$  eV, es suficiente para que los blancos se consideren como partículas fijas.

La colisión simple se puede asegurar si la cantidad de partículas a volumen fijo es suficientemente pequeña para que, al pasar a través de ella, la distancia de separación entre dos partículas sea menor a la longitud de la celda donde se confinen. Esto se conoce como camino libre medio. Por su relevancia, se explica en la sección siguiente.

### 2.2.3. Camino libre medio

Se estudia una partícula esférica que atraviesa una celda fija de volumen  $V$ . La celda contiene un densidad de partículas esféricas por unidad de volumen  $n = N/V$ . La cantidad de partículas  $N_0$  con las que ésta va a coincidir si viaja una longitud  $\lambda_0$  se puede conocer a partir del volumen relativo que barre a lo largo de  $\lambda_0$ ,  $N_0 = N \frac{V_\sigma}{V} = n V_\sigma$ . La sección de interacción es la sección transversal para el modelo de esferas duras, entonces,  $V_\sigma = \sigma \lambda_0$ , así,  $N_0 = n \sigma \lambda_0$ . Se define como camino libre medio a la distancia  $\lambda$  que tiene que recorrer una partícula en movimiento a través de un medio de partículas fijas para que interactúe con una y solo una partícula del medio. Dado el análisis descrito en este párrafo, esto corresponde a  $N_0 = 1$ , entonces

$$\lambda \equiv \lambda_{0|N=1} = \frac{1}{\sigma n} = \frac{k_B T}{\sigma P}. \quad (2.38)$$

En los experimentos que se realizan para este trabajo, la longitud que recorren los proyectiles tiene que ser igual a la longitud de la celda donde ocurre la interacción, que es en donde se llena de gas objetivo a temperatura ambiente.

Por otro lado, se puede conocer la cantidad de partículas por área transversal a través de un parámetro llamado *espesor de celda*, el cual se denota con  $\pi$  y es una forma de representar la presión en la celda de interacción (CeI) donde ocurre la colisión del haz con las partículas fijas. Se expresa como  $\pi = \frac{lP}{k_B T}$  (con  $k_B$  la constante de Boltzmann). Este espesor se mide dentro de la CeI de longitud  $l$  cuando se le inyecta gas a temperatura constante  $T$  y presión controlada  $P$ .

### 2.3. Relación entre la sección transversal y el experimento

En el experimento se usan contadores de partículas que se instalan después de desviarlas con campos eléctricos como función de su energía, TdV o posición. Esto se explica con más detalle en las Sec. 2.4 y en el capítulo siguiente. Al medir la cantidad total de partículas con o sin interacciones (y sin aplicar campos eléctricos) no hay variación, es decir, cumplen con una ley de conservación adicional a las mencionadas anteriormente, la conservación de partículas.

Es posible conocer la sección transversal con experimentos de colisiones. En el laboratorio se mide la cantidad relativa de partículas de carga  $k$  formadas a partir de un haz conformado por  $N_{Tot}$  partículas en total. A este cociente se le llama fracción  $F_k$  y el subíndice denota la carga formada durante el proceso. Esta fracción varía en función del espesor de celda.

La ecuación de equilibrio relaciona la fracción y el espesor de la celda a través de las secciones transversales que contribuyen en todos los procesos mecánicos durante la colisión,

$$\frac{dF_i}{d\pi} = \sum_{j \in \mathbb{A}} F_j \sigma_{ji} - F_i \sigma_{ij}, \quad (2.39)$$

Como la cantidad total de partículas  $N_{Tot}$  se preserva, la suma de las partículas de cada especie  $N_k$  también se conserva. Si se denota con  $\mathbb{A}$  al conjunto de todos los estados de carga que se puedan obtener durante el experimento,  $\sum_{k \in \mathbb{A}} N_k = N_{Tot}$ , por lo tanto, las fracciones están restringidas a la condición

$$\sum_{k \in \mathbb{A}} F_k = 1. \quad (2.40)$$

Esta ecuación es utilizada para medir la sección transversal, por lo que se estudia de forma detallada a continuación.

En particular, el camino libre medio y la energía utilizados son suficientes para considerar solamente tres estados de carga posibles,  $\mathbb{A} = \{-1, 0, 1\}$ , entonces, la ec. 2.39 proporciona las ecuaciones para tres posibles procesos,

$$\frac{dF_{-1}}{d\pi} = -F_{-1}(\sigma_{-10} + \sigma_{-11}) + F_0\sigma_{0-1} + F_1\sigma_{1-1}, \quad (2.41a)$$

$$\frac{dF_0}{d\pi} = F_{-1}\sigma_{-10} + F_1\sigma_{10} - F_0(\sigma_{0-1} + \sigma_{01}) \text{ y} \quad (2.41b)$$

$$\frac{dF_1}{d\pi} = F_{-1}\sigma_{-11} + F_0\sigma_{01} - F_1(\sigma_{10} + \sigma_{1-1}). \quad (2.41c)$$

Kvale *et al.* (1995) dan la solución de estas ecuaciones y toman en cuenta todos los procesos posibles para estos tres estados de carga. Sin embargo, en el laboratorio ha sido suficiente considerar solamente un proceso y su recíproco: aquellos que involucran a  $\sigma_{-10}$  y  $\sigma_{0-1}$ . Estos son desarrollados a continuación.

### 2.3.1. Técnica de atenuación de la señal de partículas ionizadas (BAT)

En esta técnica se analiza el decaimiento de la señal de los iones conforme aumenta la presión en la celda. Se basa en el aumento de señal de partículas neutras conforme aumenta la presión dentro de la CeI. Por las energías en las que trabajamos y por el camino libre medio entre la celda y el electroimán, solo es posible tener colisiones simples y, por lo tanto, ionización simple. Es decir, los procesos donde el cambio de  $j = 1$  a  $j = -1$  tienen probabilidad despreciable, por lo tanto,

$$\frac{dF_{-1}}{d\pi} = F_0\sigma_{0-1} - F_{-1}\sigma_{-10}. \quad (2.42)$$

La ec. (2.42) se puede desacoplar al tomar la condición  $F_0 + F_{-1} = 1$ . Si se tuviera un solo estado involucrado, el principio de balance detallado indicaría que la sección transversal total podría renombrarse  $\sigma \equiv \sigma_{-10} = \sigma_{0-1}$ , sin embargo, si se propone que los estados asociados no tienen una contribución apreciable, es decir, se desprecia  $\sigma_{0-1}$ , la ecuación se escribe como

$$\frac{dF_{-1}}{d\pi} = -F_{-1}\sigma, \quad (2.43)$$

donde se renombra  $\sigma_{-10} \equiv \sigma$  sujeta a la condición de contorno  $F_{-1}(\pi = 0) = 1$ . Así, su solución es un decaimiento exponencial para la fracción de aniones,

$$F_{-1}(\pi) = e^{-\sigma\pi}, \quad (2.44)$$

al desarrollar a primer orden en serie de Taylor,

$$F_{-1}(\pi) = 1 - \sigma\pi, \quad (2.45)$$

la cual ha sido utilizada en distintos trabajos para obtener el valor de la sección transversal.

### 2.3.2. Técnica de aumento de la señal de partículas neutras (SGR)

La técnica se basa en el aumento de señal de partículas neutras conforme aumenta la presión dentro de la CeI. El análisis se realiza para partículas neutras, o sea, carga  $i = 0$ , por lo que la ec. (2.41b) se reescribe como

$$\frac{dF_0}{d\pi} = (1 - F_0)\sigma, \quad (2.46)$$

la cual, a diferencia del método BAT, está sujeta a la condición  $F_0(\pi = 0) = 0$ , por lo tanto, la solución está dada por

$$F_0(\pi) = 1 - e^{-\pi\sigma} \quad (2.47)$$

y, al desarrollarla en serie de Taylor,

$$F_0(\pi) = \pi\sigma, \quad (2.48)$$

el cual es un crecimiento lineal.

De forma ideal, ambos resultados deben ser consistentes:  $\sigma$  puede obtenerse al usar BAT o SGR y debe tener el mismo valor. Sin embargo, en varios de los artículos publicados, no ocurre esto. Es por eso que, para diferenciar la sección calculada por la técnica BAT, la ec. (2.45) se reescribirá como  $F_{-1}(\pi) = 1 - \sigma_B\pi$  y la ec. (2.48) se denotará de la forma  $F_0(\pi) = \sigma_S\pi$ , por ser obtenida con el método SGR.

## 2.4. Acelerador de partículas

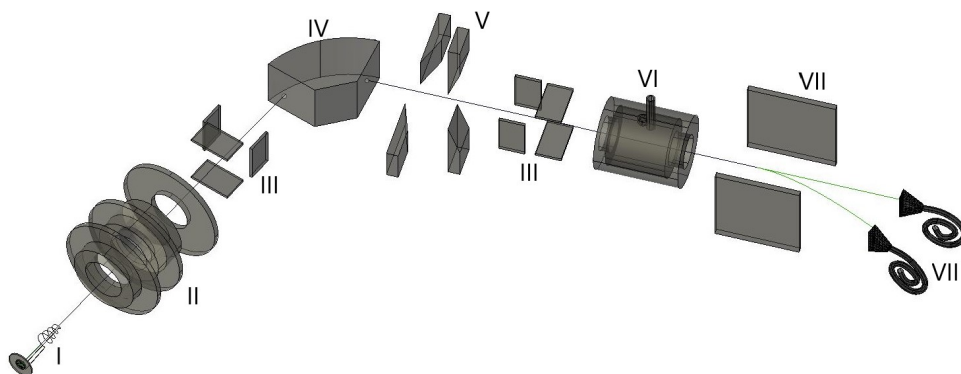


Figura 2.6: Esquema del acelerador de partículas (no está a escala). Se muestran las componentes principales.

Existen distintas maneras de generar un haz de iones como los utilizados en el experimento. Inicialmente se puede trabajar con un gas neutro en estado base y tratarlo apropiadamente para darle carga, movimiento y dirección de movimiento sobre el eje. Esto se logra, por ejemplo, dentro de los aceleradores de partículas: se trata de aparatos diseñados para impulsar a las partículas inicialmente en reposo por medio de distintos electrodos [Wille (2000)]. La trayectoria de estas partículas suele tener un eje fijo (el vertical, por ejemplo) los componentes. Los aceleradores se pueden clasificar en circulares y lineales. Los circulares son aquellos en donde se colocan imanes en órbita cerrada y guían a los iones en una órbita. En este trabajo se usa un acelerador de tipo lineal, estos se caracterizan por seguir una trayectoria abierta. En nuestro caso, las partículas chocan con un gas de partículas (un blanco) dentro de un contenedor alineado con la trayectoria.

En la fig. 2.6 se muestra un esquema del acelerador en el que se realizan los experimentos del trabajo. La primer zona (Fig. 2.6-I) es la de ionización; los componentes **II**, **III** y **V** de la Fig. 2.6 son distintos componentes metálicos utilizados para enfocar el jet de iones, corregir la trayectoria del haz y colimarlo, respectivamente; el electroimán está colocado en la región **IV** y es utilizado para separar las especies en función de su relación carga-masa; los componentes **VIII** son los canales multiplicadores electrónicos (CEM) que detectan la cantidad de partículas incidentes, funcionan con el principio de avalancha de electrones. Para la interacción se coloca una celda con gas a temperatura ambiente (Fig. 2.6-VI); se

encuentran fijas un par de placas paralelas (Fig. 2.6-VII) en la zona de detección para desviar el haz de aniones requerido después de la interacción. A continuación se detallan los principios fundamentales que se emplean en cada componente.

### 2.4.1. Fuente de iones

Dentro de esta zona se encuentra un filamento de tungsteno por el cual se hace pasar una corriente de alrededor de 15 A. Esto origina que el filamento se caliente y comience a liberar electrones por el principio de emisión termoiónica. La densidad de corriente emitida  $J_{emi}$  por un ánodo está dada por la ecuación de Richardson - Dushman [Battaglia *et al.* (2010)]. Se puede derivar a partir de la ec. 2.49 y con la estadística de Maxwell Boltzmann

$$J_{emi} = nq\langle v \rangle_\rho, \quad (2.49)$$

donde el promedio  $\langle v \rangle_\rho$  se realiza con la distribución de Maxwell Boltzmann,

$$\rho = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}. \quad (2.50)$$

Cuando se trata de este tipo de emisión, es necesario que la energía de movimiento de los electrones sea mayor que la función de trabajo del material.

La ec. (2.49) requiere conocer el número de electrones, el cual se puede deducir a partir de la estadística de Maxwell—Boltzmann. Existen algunas relaciones entre el número de partículas (electrones, en este caso), el potencial eléctrico y la temperatura del sistema, y es conveniente introducirlos para utilizarlos en las siguientes secciones.

Estos resultados son necesarios ya que, en nuestra fuente de iones, se forma un plasma a partir de la interacción de los electrones liberados por el filamento: el gas de muestra que se desea ionizar ( $O_2$ ) y un gas de Ar.

#### 2.4.1.1. Parámetro de plasma

Cuando se tiene una densidad de carga lineal es posible conocer el campo eléctrico que produce, una de las formas es resolver la ecuación de Poisson. Si se considera el caso unidimensional para un potencial  $\varphi(\vec{x})$ ,  $\nabla^2\varphi(\vec{x}) = \frac{q}{\epsilon_0}(n - Zn_i)$ , donde  $n$  es la densidad volumétrica

de electrones con carga  $q$  y  $Zn_i$  es el número de iones positivos por unidad volumétrica de carga  $-q$ . Para electrones suficientemente alejados, el número de partículas está dado por

$$n_{-1} - Zn_{-1} = n(e^{-q_{-1}\varphi/(k_B T_{-1})} - e^{-Zq_1\varphi/(k_B T_1)}), \quad (2.51)$$

bajo la condición de que  $\varphi(x = \infty) = 0$  para asegurar que el plasma cumpla con ser neutro. Cuando  $\frac{q\varphi}{k_B T} \rightarrow 0$  (es decir, temperaturas altas o valores pequeños del potencial eléctrico) se puede realizar un desarrollo en series de Taylor y realizar un corte a primer orden, lo cual lleva a que

$$n_{-1} - Zn_{-1} = n \left( -\frac{q_{-1}\varphi}{k_B T_1} + \frac{Zq_1\varphi}{k_B T_1} \right) = \frac{n}{k_B T_{-1}} \left( \frac{ZT_{-1}}{T_1} + 1 \right) \varphi(x) \quad (2.52)$$

entonces, la ecuación de Laplace se reescribe como

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{q^2 n}{\epsilon_0 k_B T_{-1}} \left( \frac{ZT_{-1}}{T_1} + 1 \right) \varphi(x), \quad (2.53)$$

cuya solución es  $\varphi(x) = e^{-x/L_D}$ , con

$$\tilde{L}_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_{-1}}{q^2 n \left( \frac{ZT_{-1}}{T_1} + 1 \right)}}. \quad (2.54)$$

Nótese que si se considera un gas con partículas negativamente cargadas,  $Z=0$ , entonces,

$$\tilde{L}|_{Z=0} \equiv L_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_{-1}}{q^2 n}} \quad (2.55)$$

A  $\tilde{L}_D$  se le conoce como longitud de Debye y se utiliza para definir una propiedad fundamental para describir procesos de plasma [Hutchinson (2002)], llamado parámetro de plasma  $g$ . El parámetro de plasma es una forma de medir la cantidad relativa de partículas contenidas en una esfera de radio  $\tilde{L}_D$  (llamada esfera de Debye) y se expresa como

$$g \equiv 3 \frac{V_D}{V} = 4\pi \frac{\tilde{L}^3}{(V/N)}, \quad (2.56)$$

Para un gas de electrones la distancia promedio entre dos partículas se puede considerar como  $\lambda = \sqrt[3]{\frac{V}{N_e}} = \frac{1}{n_e^{1/3}}$ , donde  $N_e$  es el número de electrones contenido en el volumen  $V$ . Entonces, el parámetro de plasma se encuentra determinado por

$$g = 4\pi \frac{\left( \frac{\epsilon_0 k_B T}{q^2 n_e} \right)^{3/2}}{\lambda^3} = \frac{4\pi}{q^3} (\epsilon_0 k_B T)^{3/2} T^{3/2} n_e^{-1/2}, \quad (2.57)$$



de donde se deduce que  $n \propto T^3$ . A los plasmas con esta propiedad se les conoce como plasmas ideales [Wiesemann (2012)].

### 2.4.1.2. Emisión termoiónica

Para poder describir al plasma se trata como un gas ideal de electrones con masa  $m_e$  confinados en un volumen  $V$ . La separación promedio de los electrones  $\lambda_s = \frac{1}{n^{1/3}}$ . Dada una temperatura  $T$ , la longitud de onda térmica  $\lambda_T = h[2m_e k_B T]^{-1/2}$ . Para considerar el gas ideal debe cumplirse que  $\lambda_s \gg \lambda_T$ . Esto implica que  $\sqrt{2m_e k_B T} \gg hn^{1/3}$ . Para plasmas ideales,  $n \propto T^3$ , por lo que esta desigualdad se cumple para temperaturas altas. Entonces, la densidad de corriente por unidad de área está dada por

$$J_{emi} = nq\langle v \rangle_\rho = nq \iiint_{\vec{v}} v_x \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} dv_x dv_y dv_z, \quad (2.58)$$

donde se integra sobre todas las velocidades para las componentes  $v_y$  y  $v_z$ . Para poder despojar el electrón del material debe tener una energía mínima igual a la función de trabajo  $W$ , por lo que la componente  $v_x$  se integra sobre todas las velocidades que cumplan que la energía debido al movimiento perpendicular a la superficie es mayor o igual que la función de trabajo,  $v_x \geq \sqrt{\frac{2W}{m_e}}$ . Así, la densidad de corriente por unidad de área emitidas está dada por

$$J_{emi} = AT^2 e^{-\frac{W}{mk_B T}}, \quad (2.59)$$

donde  $A$  es un parámetro que incluye la carga y masa del electrón. Este resultado se conoce como ley de Richardson - Dushman. Implica que existe una emisión de electrones y es creciente en función de la temperatura una vez que se ha alcanzado la función de trabajo.

Sin embargo, Battaglia *et al.* (2010) reportan la distribución de velocidades para los electrones que se liberan del tungsteno por emisión termoiónica (Fig. 2.7 izquierda). Con la relación  $\frac{1}{2}mv^2 = E$  se obtiene la gráfica de energías y en donde se ve que la probabilidad de que un electrón emitido tenga energía cinética mayor a 1 eV es despreciable.

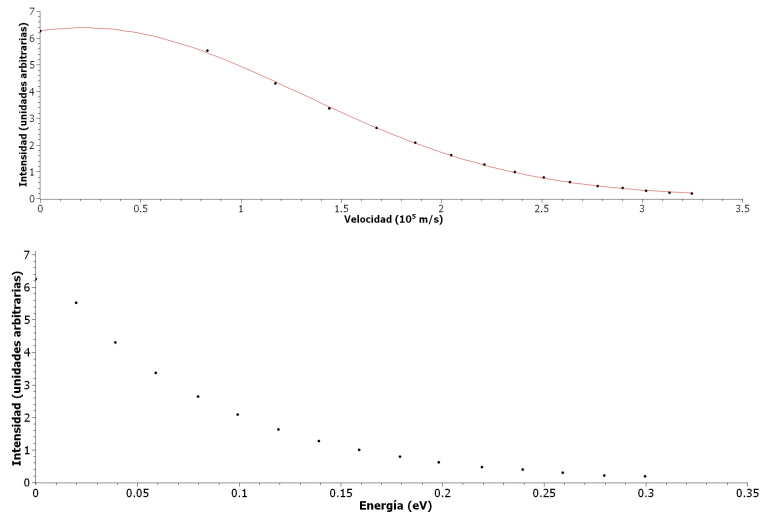


Figura 2.7: Distribución de velocidades (derecha, datos recuperados del trabajo de Battaglia *et al.* (2010)) y energías correspondientes en ese intervalo (izquierda, calculada para fines ilustrativos).

Cuando los electrones son liberados del filamento, viajan con una energía mucho menor a la energía de ionización de las partículas que estudiamos, por lo que es necesario acelerarlos. En la Fig. 2.8 se ilustran algunas conexiones de la zona de ionización. La carcasa está conectada a un potencial de aceleración del orden de kV y varía en dependencia de la energía y tipo de iones que se quieran analizar (aniones o cationes). Por el filamento atraviesa una corriente de iones de alrededor de 15 A, lo cual provoca la emisión de los electrones; el ánodo se encuentra conectado con una diferencia de potencial de 100 V respecto a la carcasa y acelera a los electrones.

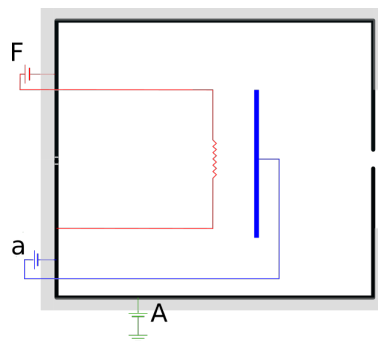


Figura 2.8: Corte transversal de la fuente de iones en la zona de ionización. La carcasa es un conductor inoxidable no magnetizable conectada a un voltaje de aceleración del orden de 1 kV a 10 kV (zona **A**); el voltaje del filamento (en **F**) y el del ánodo (en **a**) se encuentran conectados a diferencias de potencial respecto al voltaje de la carcasa.

Cuando las especies se encuentran ionizadas, son expulsadas de la fuente por el orificio que se observa y se forma un jet de iones, es una colección de especies con distintas cargas y masas; el jet no tiene una distribución espacial apropiada para el experimento, por lo que tiene que ser preparado con lentes electrostáticas. En este acelerador el haz de iones se forma con unas lentes Einzel.

### 2.4.2. Lentes Einzel

Las lentes Einzel son un sistema de tres electrodos cilíndricos coaxiales utilizados para enfocar un jet de partículas cargadas, estos pueden tener distintos radios y longitudes. En particular trabajamos con tres cilindros idénticos (Fig. 2.6-II) de radio  $R_0$ , los dos laterales están conectados a un mismo potencial y el central está conectado a un potencial distinto. En la teoría no existe una solución exacta para calcular el campo eléctrico, sin embargo, se pueden utilizar simuladores (como SIMION (2022)) que usan métodos numéricos para resolver los potenciales.

La geometría cilíndrica permite escribir la ecuación de Laplace para el potencial eléctrico  $\Phi(r, \theta, z)$  de la forma  $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = 0$ . Como el conductor es homogéneo, no hay dependencia en la variable angular, entonces el potencial solo depende de la longitud y de la distancia respecto al eje óptico. Esta aproximación se realiza alrededor del eje óptico, lo cual implica que  $r \approx 0$  (aproximación paraxial), por lo que se puede desarrollar  $\Phi$  en serie de Taylor con potencias de  $r$ ,  $\Phi(r, z) = \Phi(0, z) + \frac{\partial \Phi}{\partial r}|_{r=0} r + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2}|_{r=0} r^2 + \mathcal{O}(r^3)$ . Además, la simetría de reflexión implica que  $\Phi(r) = \Phi(-r)$ , así que se obtiene la expansión a segundo orden para el potencial  $\Phi(r, z) = \Phi(0, z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2}|_{r=0} r^2$ . De esta expansión se observa que la ecuación de Laplace implica  $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2}|_{r=0} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi(r, z)}{\partial z^2}|_{r=0}$ , por lo que el potencial se reescribe como

$$\Phi(r, z) = \Phi(0, z) - \frac{1}{4} \frac{\partial^2 \Phi(r, z)}{\partial z^2}|_{r=0} r^2, \quad (2.60)$$

es decir, para radios pequeños solo es necesario conocer el cómo varía el potencial a lo largo del eje focal para poder determinar el potencial en cualquier punto.

De manera análoga a las lentes ópticas, se tienen aberraciones. Las aberraciones esféricas se deben a los desplazamiento de las partículas salientes que intersecan al plano focal en un punto distinto al punto focal debidos a la geometría de los electrodos, mientras que las cromáticas son los cambios en las trayectorias de la partícula debido a la ligera variación

en la energía cinética de cada una. La ec. (2.60) es utilizada por Hussein (2017) para poder determinar las aberraciones esférica y cromática para partículas cargadas. Emplea los resultados de sus simulaciones en SIMION para poder determinar  $\Phi(0, z)$ . En su trabajo muestra que tanto la aberración cromática como la esférica tienden a ser nulas conforme la diferencia de potencial al que se conectan los electrodos laterales ( $V_1$ ) son despreciables respecto al del central ( $V_2$ ).

Las lentes se encuentran configuradas de forma que  $V_1 \approx 0$ , por lo que las aberraciones son despreciables al ser enfocadas. Una propiedad importante es que el potencial tiene el mismo valor cuando las partículas se encuentran alejadas de las lentes (Fig. 2.9), por lo que las partículas que llegan al punto focal tienen la misma energía con la que fueron aceleradas al inicio del experimento.

La fuente no está totalmente alineada con la entrada del electroimán, por lo que se requiere un par de placas niveladoras (un par horizontal y otro vertical, Fig. 2.6-III). Estos deflecan a las partículas al aplicar un campo eléctrico. En general, el voltaje aplicado a las placas es muy pequeño a comparación del voltaje de aceleración (cerca de 0.8%) y se mantienen en el mismo valor durante la toma de datos, por lo que el cambio en la energía cinética es despreciable y es el mismo en todo el experimento.

El haz se encuentra formado y es una colección de distintas especies cargadas. Para poder realizar el experimento debe seleccionar únicamente el anión de interés, lo cual se puede hacer con una separación función de su relación carga—masa con un electroimán cuyas líneas de campo son perpendiculares a la trayectoria de las partículas (posición vertical). El electroimán funciona como un selector de especies en relación a su cociente masa/carga, es posible conocer algunas de las características del haz principal, como el tipo de molécula que lo conforma González *et al.* (2008).

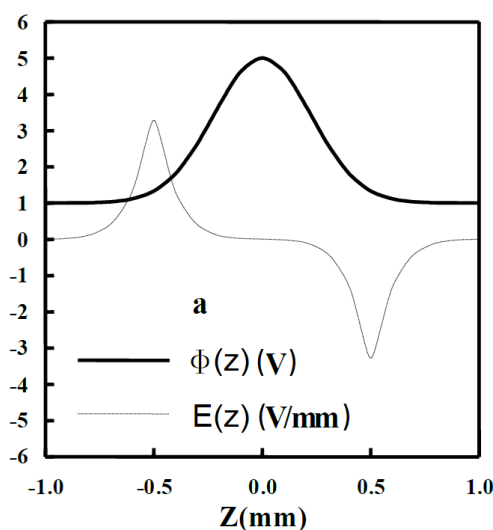


Figura 2.9: Valores obtenidos en las simulaciones de Hussein (2017) (notación modificada). El potencial eléctrico (línea oscura) es constante para valores alejados de las lentes. El campo eléctrico (línea gris) aumenta en la región de entrada, por lo que acelera las partículas cargadas, pero disminuye cerca de la salida y logra desacelerarlas; este efecto permite que el haz tenga la misma energía en el punto focal.

### 2.4.3. Espectroscopía de masas

La espectroscopía de masas es una técnica de identificación y separación de compuestos a partir de su relación carga—masa. Las técnicas de separación de especies atómicas se emplearon por Francis Aston desde 1919, al distinguir isótopos de Neón [Foro Nuclear (2022)].

El analizador de masas del laboratorio es un electroimán con un par de bobinas circulares colocadas horizontalmente por las cuales circula corriente eléctrica, lo cual origina un campo magnético en dirección perpendicular al plano sobre el que descansa alguna de las bobinas. El problema consiste en determinar el campo magnético  $B$  requerido para deflectar una partícula de masa  $m$  y carga  $q$  que ha sido acelerada por una diferencia de potencial  $\Delta\varphi_{acc}$ . Es posible resolverlo al realizar un análisis de energía y fuerza. Para calcular la velocidad se utiliza el hecho de que la energía cinética de la partícula se debe únicamente al potencial eléctrico  $\Delta\varphi_{acc}$ ,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}mv^2 &= q\Delta\varphi_{acc} \Rightarrow \\ v &= \sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}\sqrt{\frac{q}{m}}.\end{aligned}\tag{2.61}$$

Se considera el equilibrio entre las fuerzas de Lorentz y centrípeta,

$$\begin{aligned}m\frac{v^2}{r} &= qvB \Rightarrow \\ B &= \frac{mv}{qr} \Rightarrow \\ B &= \frac{\sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}}{r}\sqrt{\frac{m}{q}},\end{aligned}\tag{2.62}$$

donde  $r$  es el radio de la trayectoria circular que sigue el ión. En la eq. (2.62) se puede ver que si se conocen los valores de  $r$ ,  $B$  y  $\Delta\varphi_{acc}$ , se puede saber cuál es la relación carga—masa de la especie detectada, como se explica a continuación.

### 2.4.3.1. Distinción de especies

La Ec. (2.62) puede ser utilizada para distinguir iones distintos. Si se asume una entrada y una salida puntuales por las que solo puede pasar una partícula en cada instante y al observar que la trayectoria es tangente al círculo en la entrada del analizador, existe una única trayectoria de radio fijo  $R$  para la cual las partículas pueden entrar y salir de la zona del electroimán<sup>4</sup>.

Para dos partículas de masa  $m_{ref}$  y  $m_2$  respectivas y de misma carga acelerados por el mismo  $\Delta\varphi_{acc}$ , se debe cumplir que

$$\begin{aligned} B_{ref} &= \frac{\sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}}{R} \sqrt{\frac{m_{ref}}{q}}, \\ B_2 &= \frac{\sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}}{R} \sqrt{\frac{m_2}{q}}, \end{aligned} \quad (2.63)$$

entonces, la relación entre las especies detectadas y los campos magnéticos está dada por

$$\frac{B_2}{B_{ref}} = \sqrt{\frac{m_2}{m_{ref}}}. \quad (2.64)$$

Los espectros de masas son gráficas que relacionan la especie detectada con el campo magnético. A esas detecciones se les llama simplemente señales. La ec. (2.64) implica que, al conocer un campo magnético  $B_{ref}$  correspondiente a una especie de masa  $m_{ref}$ , se puede conocer el valor de la masa  $m_2$  detectada a partir del campo magnético aplicado para detectar esa señal. Para tener un campo de referencia se puede hacer un experimento con gas hidrógeno de ultra alta pureza, se buscan todas las señales posibles y se determina que al de menor masa le corresponde a la magnitud más pequeña del campo magnético<sup>5</sup>. Si se quiere saber qué campo corresponde a la masa de referencia dadas otras energías, se puede calcular con la relación

$$\frac{B_2}{B_{ref}} = \sqrt{\frac{\Delta\varphi_2}{\Delta\varphi_{ref}}}. \quad (2.65)$$

<sup>4</sup>Esto se puede ver de la ecuación cartesiana de un círculo de radio  $R$ ,  $(x - h)^2 + (y - k)^2 = R^2$ , donde  $(h, k)$  son las coordenadas del centro; si se fija el origen del sistema en la entrada, el vector velocidad es tangente al círculo en  $(0, 0)$ , entonces,  $\frac{dx}{dy} = 0$ . Al derivar de forma implícita a la ecuación cartesiana del círculo respecto a  $y$  se tiene que  $k = 0$ , por lo que se encuentra determinada, así que solo hay dos parámetros desconocidos y para cada punto (entrada y salida) existe una ecuación independiente, es decir, se tienen dos ecuaciones independientes y dos incógnitas: la solución es única.

<sup>5</sup>De la ec. (2.63): como el radio es constante, detectar una masa más grande requiere aumentar el campo magnético para conservar el valor de  $R$ .

De manera análoga se puede conocer el campo magnético para una misma masa con cargas distintas, por lo tanto, esta técnica puede ser empleada para haces de distintas energías, masas y cargas.

El análisis anterior considera que tanto la entrada como la salida son puntuales, sin embargo, esto no es así en los espectrómetros, éstos tienen un orificio de milímetros de ancho por lo que pueden atravesar distintas partículas al mismo tiempo. Este problema es un limitante en los experimentos llamado resolución. En los espectrómetros de masas, la resolución se puede definir como la capacidad para distinguir dos especies de distinta relación carga—masa.

### 2.4.3.2. Resolución del espectrómetro de masas

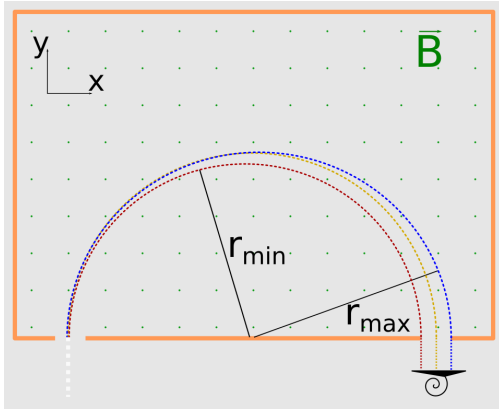


Figura 2.10: Esquema de las trayectorias circulares de las partículas en el espectrómetro de masas. A la izquierda entra el haz de partículas formado por todas las especies. Si se tratara de ranuras puntuales, solo podrían salir las partículas de misma masa y llegar al detector. Como tienen un ancho, más de una partícula puede pasar a la vez.

La capacidad para separar dos especies de distinta relación carga—masa en un espectrómetro de masas se conoce como resolución y puede conocerse a partir de la Ec. (2.62).

Para dos masas distintas  $m$  y  $m + \Delta m$ , deflectadas por un mismo campo se obtienen las ecuaciones

$$B = \frac{\sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}}{r_{min}} \sqrt{\frac{m}{q}} \quad (2.66)$$

$$B = \frac{\sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}}{r_{max}} \sqrt{\frac{m + \Delta m}{q}},$$

donde  $r_{max}$  y  $r_{min}$  son los radios correspondientes a las trayectorias que describe cada masa. Al realizar el cociente entre ambas expresiones, se obtiene,

$$1 = \frac{r_{min}}{r_{max}} \sqrt{\frac{m + \Delta m}{m}} \Rightarrow$$

$$\frac{r_{max}}{r_{min}} = \sqrt{\frac{m + \Delta m}{m}} \Rightarrow \quad (2.67)$$

$$\frac{\Delta m}{m} = \left(\frac{r_{max}}{r_{min}}\right)^2 - 1,$$

es decir, si se desea conocer la resolución del espectrómetro, es necesario conocer los radios de las trayectorias. En la práctica, medir esto es complicado: el centro de cada trayectoria puede

estar localizado en un lugar distinto, por lo que existe un intervalo infinito de puntos para medir el radio deseado<sup>6</sup>. El problema de la resolución puede ser resuelto de forma indirecta.

Si se supone una masa  $m$  fija, existe un radio máximo  $r_{max}$  y un radio mínimo  $r_{min}$  entre los que pueden ser detectada; como el campo magnético, la carga y la energía están fijos,

$$\begin{aligned} B_{max} &= \frac{\sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}}{r_{min}} \sqrt{\frac{m}{q}}, \\ B_{min} &= \frac{\sqrt{2\Delta\varphi_{acc}}}{r_{max}} \sqrt{\frac{m}{q}}, \end{aligned} \quad (2.68)$$

entonces se puede conocer el cociente entre los radios a partir de los campos,

$$\frac{B_{max}}{B_{min}} = \frac{r_{max}}{r_{min}}, \quad (2.69)$$

por lo tanto,

$$\frac{\Delta m}{m} = \left( \frac{B_{max}}{B_{min}} \right)^2 - 1. \quad (2.70)$$

Esta ecuación requiere conocer los parámetros fijos y conocer los dos campos magnéticos, mismos que se pueden medir directamente. En nuestros experimentos es posible distinguir una masa y la siguiente con una diferencia mínima por una unidad (en unidades atómicas), es decir, la resolución es tal que

$$\Delta m = m \left( \left( \frac{B_{max}}{B_{min}} \right)^2 - 1 \right) < 1u. \quad (2.71)$$

El haz de iones ahora se encuentra únicamente formado por especies con la misma relación carga—masa. Éstas siguen la trayectoria prácticamente horizontal gracias a las placas correctoras y todavía no han alcanzado el punto focal (el foco se encuentra en la zona de detección), por lo que es conveniente remover las partículas con mayor inclinación respecto al eje óptico antes de que lleguen a la CeI<sup>7</sup>, esto se puede mejorar con perfiladores de haz.

---

<sup>6</sup>En este caso, la ecuación del círculo puede tener distintos valores en  $(h, k)$  y en  $R$ , por lo que hay más variables que ecuaciones.

<sup>7</sup>El análisis en la Sec. 2.2 considera que cualquier partícula viaja paralela a un eje, por lo que se requiere que la interacción en la celda se deba solo a partículas con velocidades en la misma dirección (paralelas al eje óptico).



### 2.4.4. Perfiladores de haz

En el experimento se requiere que las partículas viajen en dirección paralela al eje óptico para homogenizar las condiciones de colisión, asegurar que al inicio del experimento se están colectando todas las partículas y disminuir la dispersión del haz [González *et al.* (2008)]. Los perfiladores de haz están diseñados para esto.

Los perfiladores de haz (Fig. 2.6-V) son dos pares de cuchillas (una horizontal y otra vertical) que se pueden separar en un intervalo de  $31.75 \mu\text{m}$  en cada dirección con el fin de reducir el tamaño del haz y así reducir la cantidad de partículas que viajan en distintas direcciones. Para que el muestreo se realice con una cantidad representativa de partículas se necesita conocer el perfil del haz, es decir, qué distribución espacial sigue. Con el perfil es posible conocer el ancho del haz, a partir de éste se define la separación de las cuchillas mínima para poder muestrear el haz.

Si el haz detectado tiene una intensidad  $I(x) = \frac{dN}{dt}$ , entonces, la cantidad de partículas medidas en un intervalo constante de tiempo  $\Delta t$  es  $\Delta N = I\Delta t = \frac{dN}{dt} \Delta t$ . Por otro lado, si en ese intervalo de tiempo las cuchillas se encuentran separadas con una separación  $\Delta x$ , la cantidad de partículas que pasan está dado por  $\lambda(x)\Delta x = \Delta N$ , es decir, la densidad de partículas está dado por la variación de la intensidad respecto a la separación de partículas,  $\lambda(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta x} = \frac{dN}{dx}$ .

Debido a que el haz de partículas se forma al hacer pasar el jet de iones a través de las lentes Einzel, se considera que éstos se encuentran cercanos al eje óptico, es decir,  $r \ll 1$ . Con esta condición se obtiene la aproximación paraaxial del potencial electromagnético, ec. (2.60).

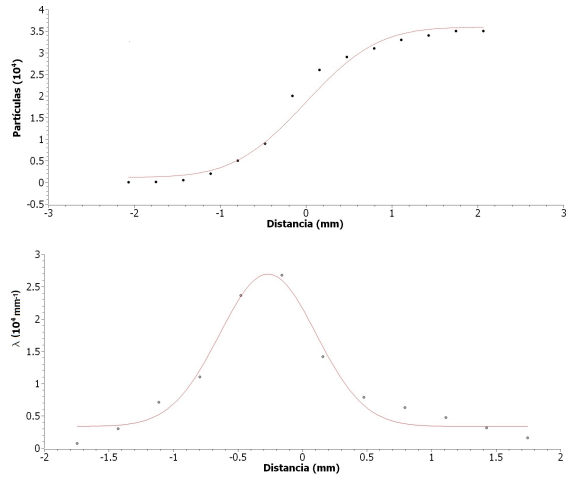


Figura 2.11: Estimación del ancho del perfil del haz (cuchillas horizontales) en el laboratorio. Los resultados del experimento se encuentran punteados, la distancia se mide desde el centro de la separación de las cuchillas, por lo que la máxima separación es de aproximadamente 6 mm. Los ajustes son las líneas rojizas y en ambas se obtiene una correlación  $R^2 > 0.95$ . El ancho del ajuste gaussiano es de 0.75 mm.

Para determinar la forma del haz se puede recurrir al formalismo canónico en estadística, donde la densidad de probabilidad está dada por la relación  $\rho(x, y_0, z_0) = Ce^{-\frac{H}{k_B T}}$ . Como se observa,  $\rho$  depende del hamiltoniano  $H = \frac{1}{2}m|\vec{v}|^2 + V(\vec{r})$ . La energía potencial se conoce ya que la carga  $q$  se encuentra confinada por un potencial eléctrico,  $V(\vec{r}) = q\Phi(\vec{r})$ .

Dado un valor fijo de  $z$  (fijado en el punto del detector, por ejemplo), la ec. (2.60) tiene la forma

$$\Phi(r, z_0) = \Phi(0, z_0) - \frac{1}{4} \frac{\partial^2 \Phi(r, z)}{\partial z^2} \Big|_{r=0, z=z_0} r^2 \equiv a_0 + br^2 \rightarrow \tilde{\Phi}(x, y, z) = a_0 + b(x^2 + y^2), \quad (2.72)$$

donde  $\tilde{\Phi}(x, y, z)$  es el potencial reescrito en coordenadas cartesianas. Debido a que este acelerador cuenta únicamente con dos pares de cuchillas, solo es posible realizar barridos alrededor de un eje mientras se mantiene fijo el otro. Entonces, si solo varía una coordenada (por ejemplo, el eje horizontal varía y el vertical se fija cerca del eje óptico), el potencial se reescribe como

$$\tilde{\Phi}(x, y_0, z_0) = a_0 + b(x^2 + y_0^2) \equiv a + bx^2, \quad (2.73)$$

así, la probabilidad de detectar a las partículas en un intervalo  $x$  y  $x + dx$  dados los demás parámetros fijos se puede obtener con el conjunto canónico,

$$\rho(x, y_0, z_0) dx \Delta y \Delta z = \lambda(x) dx = \eta e^{-\frac{b}{k_B T} x^2} dx, \quad (2.74)$$

donde  $\eta$  es un parámetro independiente de  $x$ . Por lo tanto, se espera observar una distribución gaussiana conforme aumenta la separación entre las cuchillas.

En el laboratorio se estima este valor<sup>8</sup> a partir de tomar el cambio del total de partículas cuando se varía la separación entre las navajas horizontales. La Fig. 2.11 muestra la distribución de partículas para un haz de 4 keV de metano, se estima que el ancho del haz es de 0.75 mm.

Dado todo el trasfondo mencionado en los capítulos anteriores, se espera el cumplimiento de las siguientes hipótesis.

---

<sup>8</sup>En metodología y resultados describiré con detalle cómo se realizó este experimento.

## 2.5. Hipótesis

- Los ángulos de dispersión durante las colisiones de aniones  $O^-$  con  $N_2$  son suficientemente pequeños para medir la totalidad del haz.
- El camino libre medio en el acelerador y el espesor de la celda donde ocurren las interacciones son de dimensiones suficientes para asegurar una sola colisión con el proyectil de  $O^-$ .
- La técnica SGR contiene información de un solo canal de generación de  $O$  a partir de la interacción  $O^- + N_2$ .
- La técnica BAT envuelve más de un mecanismo para el proceso descrito en el punto anterior. En particular, involucra un análisis dependiente del tiempo.
- La diferencia entre las secciones transversales estudiadas está ligada a los tiempos de vida del anión  $O^{-*}$ .



# Capítulo 3

## Metodología

Los experimentos deben realizarse bajo condiciones controladas dentro del acelerador, por ello, el sistema de vacío es indispensable, la presión dentro de la cámara de detección debe ser de aproximadamente  $5 \times 10^{-7}$  Torr. El SV cuenta con su propio procedimiento de uso, en este caso se encienden las tres bombas de vacío mecánicas (BVM) repartidas a lo largo del acelerador y después se utilizan las dos bombas de vacío turbomoleculares (BVT), localizadas en la zona de preparación del haz y en la zona de detección.

Las BVM se utilizan para alcanzar una presión de hasta  $10^{-3}$  Torr, que se mide con los sensores Pirani, estos aprovechan el principio de conducción térmica para poder obtener la presión a partir de medir el cambio en la corriente eléctrica en el filamento [Wenzel (2017)]. Las BVT son requeridas para llegar a presiones inferiores a  $1 \times 10^{-6}$  Torr y se miden con dispositivos IG (Ion Gauges, del inglés, medidor de iones), que tienen un filamento por el cual circula corriente y miden la cantidad de iones formados por los electrones liberados [Taylor (1981)].

La eficiencia de los detectores CEM (canales electrónicos multiplicadores) deben recibir menos de  $10^5$  partículas por segundo, de otra forma, alcanzan la saturación. Todos los aparatos deben encenderse en orden prioritario comenzando con aquellos que utilicen mayor corriente. A continuación se describen los procedimientos mencionados.

## 3.1. Procedimientos generales

Habitualmente, los experimentos de este laboratorio coinciden en sus primeras tres etapas. La primera es la preparación del sistema de vacío, introducido en el apartado anterior; la segunda, es la preparación de un haz genérico de partículas, ya que a los gases inyectados se les debe tratar para formar iones, dar movimiento y restringir su trayectoria; y la tercera, que es la selección del haz específico que se desea analizar. A continuación se detalla cómo se consigue todo esto y, posteriormente, se explican los procedimientos específicos para este trabajo.

### 3.1.1. Preparación del sistema de vacío

Se encienden las bombas mecánicas ubicadas en las zonas de ionización del haz y aceleración para desalojar la presión atmosférica. Cuando la presión se encuentra alrededor de  $5 \times 10^{-3}$  Torr se abren las compuertas que aíslan al acelerador del resto del mecanismo<sup>9</sup>, se enciende la bomba mecánica localizada en la zona de detección y enseguida las bombas turbomoleculares. Cuando la presión llega a  $5 \times 10^{-7}$  Torr se aplica una corriente de 5 A al filamento<sup>10</sup>, se encienden los detectores y se inicia la preparación del haz.

### 3.1.2. Preparación del haz

Se abren las válvulas del gas a ionizar<sup>11</sup> y de argón en proporciones cercanas a 2:1. Esta mezcla de gases se expande en la zona de ionización. Se aplican 5 A más al filamento para lograr una alta emisión de electrones. La interacción de estas tres especies (Ar, O<sub>2</sub> o CO<sub>2</sub> y e<sup>-</sup>) permite la formación de aniones moleculares (o atómicos). La energía de aceleración se selecciona al aplicar una diferencia de potencial en la zona de aceleración, los valores típicos usados está entre 2 kV y 8 kV. Los iones propulsados se enfocan con el sistema de lentes Einzel, cuyo potencial depende de la energía de los iones<sup>12</sup>. La trayectoria del haz se corrige al variar el voltaje entre las placas de nivelación para hacerlo entrar a la celda.

---

<sup>9</sup>El tiempo de espera para lograr ese vacío es de 30 min aproximadamente.

<sup>10</sup>Esta presión se logra entre 2 y 5 horas.

<sup>11</sup>Nitrógeno molecular y O<sup>-</sup>

<sup>12</sup>En nuestros experimentos, el voltaje para que el foco coincida con los detectores es de aproximadamente 0.7 veces el voltaje de aceleración del haz.

### 3.1.3. Detección del haz principal

Este procedimiento se utiliza indistintamente si existe o no gas en la CeI. Las partículas ionizadas atraviesan el campo magnético producido por el electroimán, cuya magnitud se controla manualmente de acuerdo a la especie que desea analizarse. Esta magnitud se determina a partir de la Ec. (2.62), que aprovecha la relación  $m/q$  del ion. Los valores determinados se pueden usar como referencia para calcular el campo correspondiente a especies con la misma relación  $m/q$  a partir de la relación (2.64). El haz que sale del campo (haz principal) debe colimarse con los dos pares de navajas (uno horizontal y otro vertical) para entrar a la celda de gas, donde se administra el gas con el cual se espera que el haz principal colisione.

La señal que se observa se debe maximizar manualmente con la modificación de las diferencias de potencial en el foco<sup>13</sup>, las placas de nivelación, el analizador cilíndrico y el valor del campo magnético.

### 3.1.4. Determinación de las fracciones en el experimento

Las fracciones se deben determinar de manera que solo involucren los procesos que se quieren estudiar. Se selecciona el haz principal (HaP) caracterizado por un número de partículas por cada unidad de segundo  $I_{Tot}$ . La cantidad de partículas neutras que se registran cada segundo llegan a un detector colocado sobre el eje óptico y se miden cuando se aplica un campo eléctrico entre la CeI y el detector y tiene una intensidad  $I_0$ , entonces, la fracción de partículas neutras está dada por la relación  $F_0 = \frac{I_0}{I_{Tot}}$ . Por otro lado, las partículas desviadas llegan a otro detector con una intensidad  $I_{-1}$ , se determina como  $F_{-1} = \frac{I_{-1}}{I_{Tot}}$ .

---

<sup>13</sup>Hasta en una centésima parte.

## 3.2. Experimentos de calibración

### 3.2.1. Espectroscopía de masas

Es posible calibrar el espectrómetro de masas al determinar la composición del aire. Se inyecta una muestra de aire en la fuente de iones y se mezcla con Ar. No hay diferencia de potencial entre las placas paralelas. Se realiza un barrido con el campo magnético del electroimán entre 0 G y -3000 G y se registran las señales detectadas, cada una corresponde a un HaP distinto. Este experimento se realiza a un voltaje de aceleración fijo (5 kV) y no se inyecta gas en la CeI. Los valores del campo magnético se pueden utilizar como referencia en cualquiera de los experimentos que incluyan estas especies.

### 3.2.2. Detección de señales que componen al haz principal

Para descartar la posible formación de especies en la CeI se realiza un barrido de diferencias de potencial entre las placas paralelas y se mide el número de partículas acumuladas durante 10 segundos en cada CEM (lateral y central). Se genera un HaP con CH<sub>4</sub> y Ar en la fuente. Para realizar la calibración, comparamos nuestros resultados con los obtenidos por Risley & Geballe (1974), quienes reportaron la sección transversal para un canal de ionización factible en nuestro laboratorio. El tamaño de paso elegido es fijo y se toma con los valores entre 5 V y 40 V. Los barridos más finos se ejecutan alrededor de los voltajes en donde se localizan máximos de intensidad. Cada barrido está hecho con una presión fija de gas en la celda, algunas presiones tomadas son de 0 Pa,<sup>14</sup> 2 Pa y 6 Pa.

---

<sup>14</sup>La presión base es de aproximadamente  $1 \times 10^{-3}$  Torr



### 3.2.3. Experimento BAT y SGR

Se selecciona el HaP del proyectil que sea requerido, en este caso, un anión atómico. Por los recursos a nuestra disposición se calibra con los resultados obtenidos por Risley Risley & Geballe (1974), donde usan como proyectil un anión de  $C^-$  y el blanco es una molécula fija de  $N_2$  en la CeI. La corriente del filamento es de aproximadamente de 15 A, pero puede variarse antes de comenzar el conteo para evitar saturar los detectores o para poder aumentar la cantidad de partículas ionizadas; el voltaje de extracción es de 100 V flotado respecto al voltaje de aceleración del proyectil ( $V_{acc}$ ). Las lentes Einzel tienen una diferencia de potencial fija con valor aproximado de  $0.7 V_{acc}$ , este valor se corrige ligeramente hasta detectar un máximo en la señal del HaP. El tiempo de acumulación asignado permanece constante durante todo el experimento (15 segundos). La presión en la CeI varía al finalizar cada conteo, se utilizan valores entre los 0 Pa y los 3 Pa (régimen lineal). Se realiza el experimento para los valores fijos del voltaje de aceleración del proyectil entre 2.5 kV y 9 kV.



# Capítulo 4

## Resultados

En la calibración se utiliza gas  $N_2$  como blanco y  $C^-$  como proyectil para comparar con los datos obtenidos por Ishikawa *et al.* (1989). El experimento de la formación de iones con  $CH_4$  permite obtener una huella de las masas detectadas. Así, es posible seleccionar el campo magnético de referencia para elegir cualquier haz con la relación masa - carga requerida. Con el experimento de barrido de voltaje se puede observar si existen especies secundarias formadas a partir de la colisión entre la celda de interacción y los detectores. El experimento de conservación del haz es útil para verificar si se forman otras especies iónicas durante el trayecto, ya que se realiza un barrido de diferencia de potencial entre las placas y, de existir especies con distintas masas o cargas, se desviarían con diferencias de potencial específicas. A continuación se detallan los resultados.

Para asegurar que los datos obtenidos son de confianza, es necesario revisar cualquier error sistemático y observar su reproducibilidad, por lo que se requiere calibrar algunos resultados con aquellos recopilados previamente y reportados en la literatura. Como referencia para nuestra calibración del espectrómetro se utiliza una mezcla de gases  $CH_4:Ar$  en proporción 6:4 en la fuente de iones. Se observan 17 señales en el barrido del campo magnético en la fuente. Se toma como referencia la primer señal correspondiente a  $H^-$  con masa  $m_H$  detectada a un campo  $B_H$  y las masas siguientes  $m$  se determinan al conocer el campo detectado  $B$  al usar la ecuación ec. (2.64) con los demás parámetros fijos, así,  $\frac{B}{B_H} = \sqrt{\frac{m}{m_H}}$ .

## 4.1. Análisis de Resultados

Es importante resaltar que el tanque de  $\text{CH}_4$  utilizado no es de calidad UAP, por lo que es posible encontrar otras especies distintas a las de la mezcla, como oxígeno o nitrógeno. La especie de mayor abundancia es  $\text{CH}_4^-$  (corresponde alrededor del 70% de las partículas detectadas por segundo). Es posible que esta señal esté combinada con la señal de  $\text{O}^-$ , ya que tienen aproximadamente la misma masa y también se encuentra la especie  $\text{O}_2^-$ .

### 4.1.1. Calibración del espectrómetro de masas: Huella del $\text{CH}_4$

Las especies formadas en la zona de ionización cuando se utiliza una muestra de gas  $\text{CH}_4$  se reportan en la Fig. 4.1. Para caracterizar algunas especies de masas altas se toman como referencia los aniones reportados en la NIST, (2022) a partir de su masa. Para el caso de masa 42 u, la única especie aniónica reportada con los posibles elementos es el  $\text{CNO}^-$ , a diferencia de las especies con otras masas, cuyas posibilidades son variadas, como lo son de 35 u ( $\text{H}_3\text{O}_2^-$  y  $\text{H}_7\text{N}_2^-$ ), 40 u ( $\text{CN}_2^-$  y  $\text{C}_2\text{NH}_2^-$ ), 41 u ( $\text{CHN}_2^-$ ,  $\text{C}_2\text{HO}^-$ ,  $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}^-$  y  $\text{C}_3\text{H}_5^-$ ) y 43 u ( $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}^-$ ,  $\text{CH}_3\text{N}_2^-$  y  $\text{C}_3\text{H}_7^-$ ).

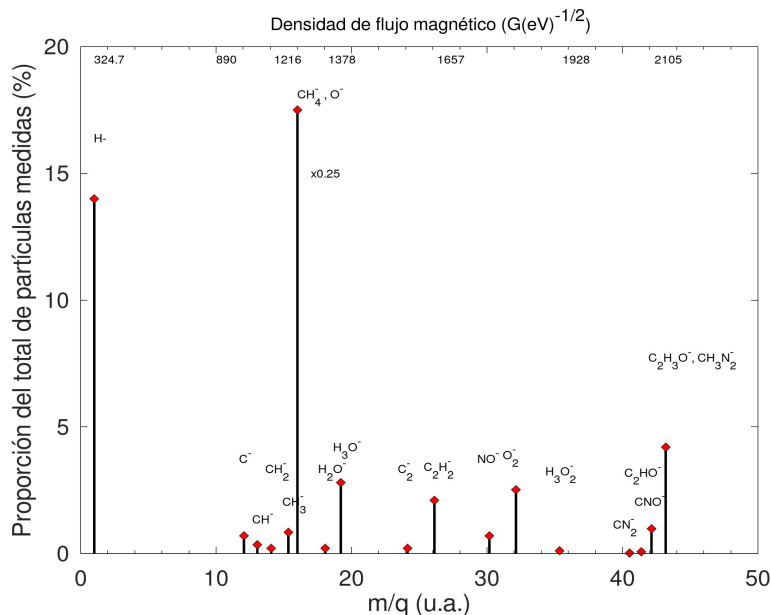


Figura 4.1: Experimento de espectrometría de masas para la mezcla de  $\text{CH}_4$  y Ar en la fuente de iones con una energía de aceleración de 5 keV. Por comodidad, se representa solo la cuarta parte de la señal de  $\text{CH}_4^-$ , como se indica en la gráfica.

La fig. 4.2 contiene los resultados al caracterizar las señales provenientes de la fuente de iones. En ambas se observa que el pico más intenso corresponde al anión  $O^-$  y el siguiente pico intenso al  $O_2^-$ . Sus valores se pueden verificar al aplicar la ec. (2.62) con los valores correspondientes de energía y masa.

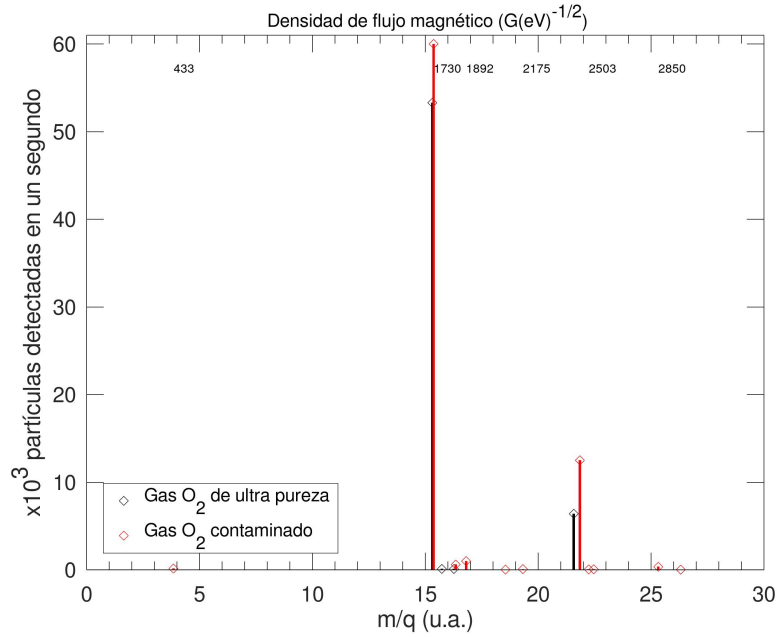


Figura 4.2: Caracterización de las especies producidas en la fuente al inyectar distintos tanques con gas  $O_2$  (ultra pureza y de baja calidad). El campo magnético se normaliza respecto a la energía de aceleración para tener una comparación con las señales observadas.

Las señales menos intensas representan menos del 1%. El gas de ultra pureza solo muestra pequeñas partículas con masas 17 u y 18 u (al asumir cargas simples), lo cual es de esperarse ya que el hidrógeno es más difícil de purgar, por lo que se cree que sus especies correspondientes son  $OH^-$  y  $H_2O^-$ . La separación entre estas tres señales es suficiente para que no se confundan al momento de seleccionar el HaP, así que pueden ser ignoradas.

### 4.1.2. Calibración de las placas deflectoras: Interacción $C^- + Ar$

Para calibrar las placas paralelas con las que se deflecta el haz de aniones hacia el CEM lateral se utilizan resultados previamente obtenidos por el artículo de Ishikawa *et al.* (1989).

Se obtiene un conteo de partículas por segundo alrededor del voltaje correspondiente al haz de  $C^-$  y se calcula la diferencia entre el haz al hacerlo interactuar con gas Ar en la celda<sup>15</sup>. Para descartar la formación de posibles estados metaestables es necesario asegurar que el haz de aniones no forme otras especies. En el haz de aniones  $C^-$  se encuentran tres señales distintas, independientemente de la cantidad de Ar en la celda.

Como se observa, la resolución de las placas es suficiente para ignorar las partículas existentes fuera del intervalo de 500 V a 900 V. Debido a que el cambio entre las señales es despreciable al interactuar con el gas en la CeI a cualquier presión (y, por lo tanto, a cualquier espesor en la celda), estas partículas no interfieren con la sección transversal calculada, por lo tanto, es posible calibrar con este haz.

En el caso del haz de  $O^-$  no se observan señales en las distintas diferencias de potencial aplicadas con las placas, por lo que es posible estudiarlo directamente con las técnicas BAT y SGR.

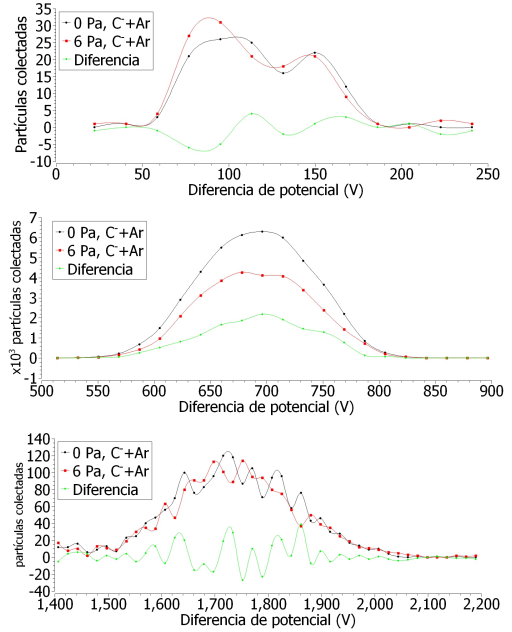


Figura 4.3: Señales capturadas con el CEM lateral para el haz de  $C^-$ . Se observa la respuesta de las señales con y sin gas en la CeI. Esta interacción ejemplifica cómo las señales que no pertenecen a una fracción del haz no interfieren con los resultados.

<sup>15</sup>Este haz se puede formar a partir de inyectar una mezcla de Ar y  $CO_2$  en la fuente de iones y repetir los procedimientos de formación y selección del haz

### 4.1.3. Calibración de la sección transversal: Interacción $C^- + N_2$

Uno de los errores sistemáticos más notorios en los experimentos de calibración de nuestro laboratorio es el error al medir la presión dentro de la  $CeI^{16}$ . Es por ello que se debe asegurar que el espesor de la celda se encuentra dentro de la región lineal del experimento. Como se busca comparar con un proceso de colisión simple entre un anión atómico, se requiere un átomo de masa similar, sin embargo, el nitrógeno tiene un tiempo de vida muy corto para ser detectado con nuestros CEM, así que no es una opción viable. Una de las especies con las que se cuenta en este laboratorio es el metano, por lo que la especie  $C^-$  es una opción viable para calibrar la celda. La Fig. 4.4 muestra los resultados al medir la sección transversal para el proceso de pérdida del electrón en la interacción  $C^- + N_2$  con los métodos BAT y SGR.

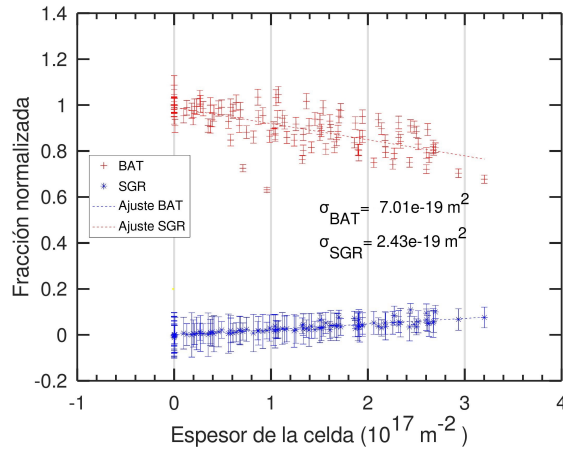


Figura 4.4: Tendencia de las fracciones  $F_0$  (en azul) y  $F_{-1}$  (en rojo) en función del espesor de la celda para las colisiones de  $C^- + N_2$  correspondientes varias capturas a distintas energías entre 2.5 y 9 keV. El comportamiento es característico de las fracciones estudiadas.

Por la relevancia del tipo de análisis y su uso en el anión de  $O^-$ , los detalles se incluyen en la sección 4.1.4. Por el momento solo es importante mencionar que se realiza un ajuste a primer orden de la fracción normalizada respecto al espesor de la celda para una sola interacción de  $C^-$  y  $N_2$ .

Se reporta una sección transversal de  $2.43 \times 10^{-19} \text{ m}^2$  cuando se utiliza la técnica SGR. Ishikawa *et al.* (1989) reportan una cantidad limitada de datos para energías entre 4 keV

<sup>16</sup>La presión se mide con un barómetro conectado a una manguera con un orificio de menos de 3 mm de radio y se calibra con los experimentos de calibración

y 15 keV, por lo que se recurre a tomar el promedio de la interpolación de sus datos en el rango que nosotros podemos alcanzar; así, la sección que ellos obtienen es, en promedio, de  $2.25 \times 10^{-19} \text{ m}^2$  para esta interacción, lo cual coincide hasta en un 9% con nuestros resultados, por lo que se considera que el orden de magnitud del espesor de la celda es confiable.

Es importante notar que nuestro trabajo también contiene información de la sección transversal para este proceso con la técnica BAT y que su valor resulta ser mayor al obtenido con la técnica SGR. Este comportamiento se discute para el caso del anión  $\text{O}^-$ , el cual es objeto principal de esta investigación.

#### 4.1.4. Sección transversal de la interacción $\text{O}^- + \text{N}_2$

Durante la medición de datos es posible encontrar señales que no corresponden al HaP y que pudieran formarse a lo largo del acelerador con las que el haz interactúa. Además, para descartar la contribución de otros procesos de colisión en la celda y reafirmar que se encuentra en el régimen lineal de colisiones, se llevan a cabo dos análisis. Uno, correspondiente a una sola interacción con corrección a primer orden, detallado a continuación y otro, que toma en cuenta correcciones de orden superior, explicado más adelante.

##### 4.1.4.1. Análisis de una interacción

Las fracciones se pueden obtener a partir de las intensidades detectadas en cada experimento. La fracción de partículas neutras  $F_0$  es la cantidad relativa de partículas en cada medición  $I_0 \Delta t$  respecto a la cantidad de partículas del HaP  $I_{Tot} \Delta t$ ,

$$F_0 = \frac{I_0}{I_{Tot}}, \quad (4.1)$$

mientras que la fracción de partículas negativas se puede conocer a partir de las partículas deflectadas por el campo eléctrico entre las placas paralelas,

$$F_{-1} = \frac{I_{-1}}{I_{Tot}}. \quad (4.2)$$

Para el análisis se utilizaron distintas aproximaciones a la sección transversal, esto, para descartar la contribución de otras secciones (debidas a dobles colisiones o doble despojo).

Para descartar problemas de recalibración en el barómetro se resuelven las ecuaciones (2.43) y (2.46) a primer orden dadas las condiciones iniciales de presión arbitraria  $\pi_k$ . Así,



las fracciones dependen de la diferencia entre las presiones de referencia y la medida,

$$F_{-1}(\pi) - F_{-1}(\pi_k) = (\pi - \pi_k)\sigma_B, \quad (4.3a)$$

$$F_0(\pi) - F_0(\pi_k) = (\pi - \pi_k)\sigma_S. \quad (4.3b)$$

Estas ecuaciones reproducen, en buena aproximación, el valor de las secciones transversal reportadas por Doering (1964) y Bennet *et al.* (1975) para la interacción estudiada cuando se utiliza la técnica SGR, pero no ocurre lo mismo con la técnica BAT.

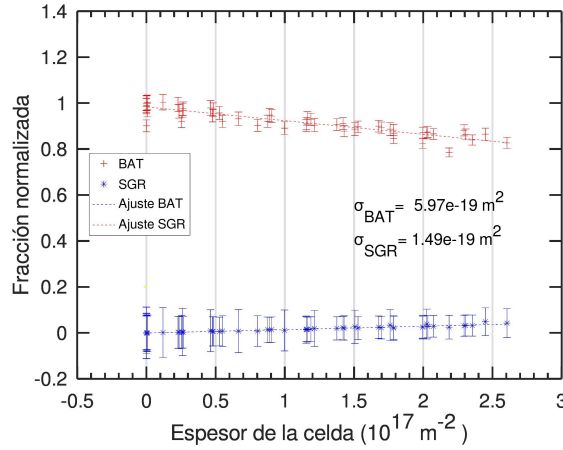


Figura 4.5: Tendencia de las fracciones  $F_0$  (en azul) y  $F_{-1}$  (en rojo) en función del espesor de la celda para las colisiones de  $\text{O}^- + \text{N}_2$  con una energía de aceleración de 5 keV. El comportamiento es característico de las fracciones para todas las colisiones a cualquier energía medida.

Al realizar la comparación en ambas técnicas en la fig. 4.6 es posible apreciar que el comportamiento de las secciones  $\sigma_S$  es aproximadamente creciente conforme aumenta la velocidad (o bien, la energía cinética), tal como se reporta en los artículos utilizados; sin embargo, la sección en BAT parece no seguir alguna tendencia en función de la energía, solo se aprecia que  $\sigma_B \geq \sigma_S$  en todos los casos.

Se obtienen las secciones a partir de la ec. (4.3a), que toma en cuenta la recalibración del aparato. Se ha usado para recalcular los datos obtenidos por Vergara, *et al.* (2021). Como se muestra en la Fig. 4.6, ambas secciones tienen un comportamiento distinto en función de la velocidad: en los puntos donde la función de SGR crece, la función de BAT es decreciente.

Como se aprecia, la tendencia creciente de las secciones  $\sigma_S$  es una característica de esta interacción. Las secciones  $\sigma_B$  no muestran un comportamiento creciente, de hecho, a excepción de un punto las secciones se aproximan ser constantes como función de la energía.

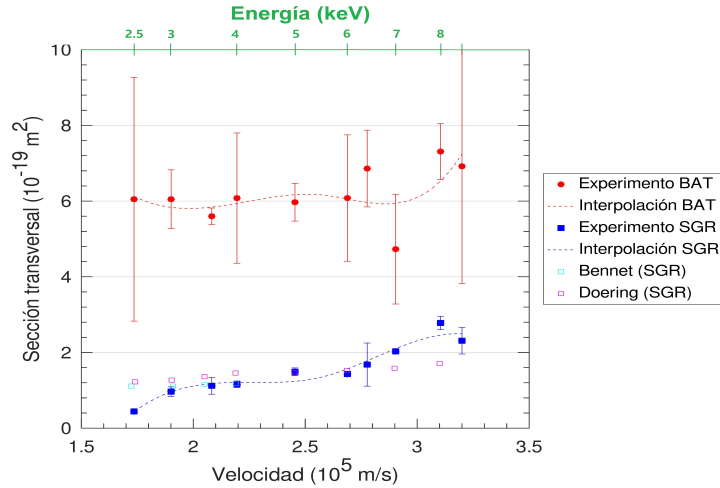


Figura 4.6: Secciones de pérdida del electrón de los iones  $O^-$  en la interacción con  $N_2$  en función de la velocidad obtenidas con la aproximación a primer orden para la interacción de  $O^- + N_2$  dada una presión arbitraria inicial variable (símbolos rellenos). Se compara con los resultados (representados con los símbolos sin relleno) de Doering (1964) y Bennet *et al.* (1975).

Para asegurar que las contribuciones debidas a despojos dobles en una sola colisión o despojos simples a partir de dos colisiones, se recurre al análisis aproximado a segundo orden de la ec. (2.41).

#### 4.1.4.2. Análisis de varias interacciones

Si se desea utilizar la corrección a segundo orden, se deben tomar en cuenta las contribuciones dadas por despojo doble, lo cual implica resolver el sistema de ecuaciones (2.41). Tal resultado se ha obtenido por Kvale *et al.* (1995), así que se toman las soluciones

$$F_{-1} = 1 - \sigma_B \pi + \sigma_B^2 \pi^2 \quad y \quad (4.4a)$$

$$F_0 = \sigma_S \pi - \left(\sigma_S - \frac{1}{2}\rho\right) \sigma_S \pi^2. \quad (4.4b)$$

De estas ecuaciones se observa que las partículas negativas solo se reducen debido a la probabilidad de despojo simple cuando aumenta la presión en la celda, mientras que las

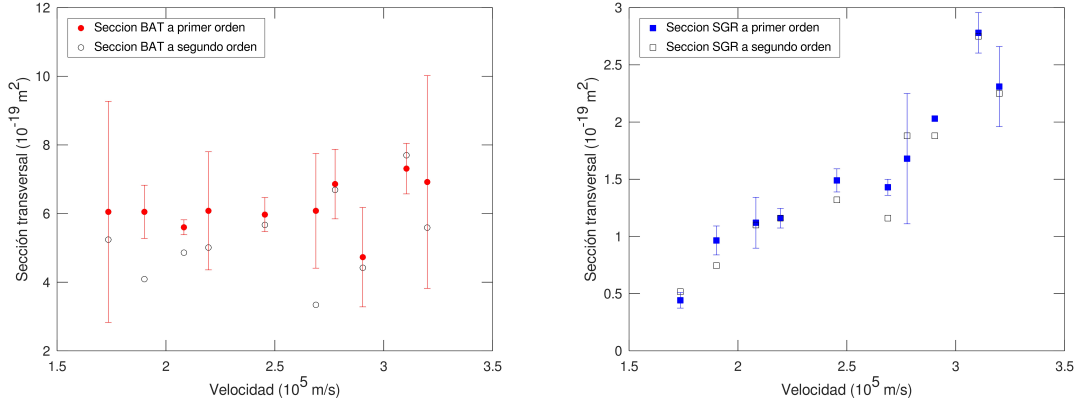


Figura 4.7: Comparación de las secciones calculadas con BAT y SGR a primer orden (con una interacción y un proceso) y a segundo orden (con varias interacciones y dos procesos de ionización). Se compara el coeficiente lineal de las ecs. 4.4a y 4.4b.

partículas neutras se ven afectadas por dos probabilidades: una es la de despojo simple de la partícula negativa,  $\sigma_S$  y la otra es la de ionización  $\rho \equiv \sigma_{01}$  debido a una doble colisión. Si la contribución de  $\rho$  es suficiente, el coeficiente del término cuadrático  $Q$  en la ec. (4.4b) permite conocer  $\rho = 2(\sigma_s + \frac{Q}{\sigma_s})$ , en la cual  $\sigma_s$  se obtiene directamente al tomar el coeficiente del término lineal de dicha ecuación. El hecho de que las partículas  $F_1$  no se detecten es suficiente para no tomarlo en cuenta en estas ecuaciones.

Ya que las fracciones obtenidas con el método SGR son del orden de  $10^{-1}$ , se requiere que, a lo mucho, la corrección en el término constante para  $F_0$  sea de orden  $10^{-2}$ . Si la contribución de  $\rho$  en las ecuaciones es suficiente, el cambio en las secciones SGR debe ser relevante. Ya que la fracción de aniones solo depende de las secciones con BAT, no debería existir un cambio en ellas.

A pesar de la diferencia existente en las secciones SGR, el comportamiento es el mismo: continúa como una función creciente de acuerdo a la velocidad del proyectil. Además, dada la tabla de los coeficientes  $\rho$  y  $\sigma_B$  del término cuadrático, sus valores no carecen de significado físico, por lo que las secciones que se toman como referencia son las calculadas a primer orden en el apartado 4.1.4.1. Con estos puntos, el siguiente paso es realizar un análisis de tiempo de vida para este caso.

Se comparan los resultados obtenidos en una y varias interacciones en la tabla 4.1, además, se incluyen los valores calculados para la sección  $\rho = \sigma_{10}$  y el coeficiente cuadrático  $Q$  de la ec. (4.4b). Es posible notar que, en ambos casos, las secciones en el término lineal

son muy parecidas, lo cual significa que este orden es una buena aproximación. Sin embargo, cuando se trata del caso a segundo orden, los términos  $\rho$  y  $Q$  salen de los valores posibles: por un lado, la probabilidad  $\rho$  no puede ser negativa y, como  $\rho < \sigma_S$ ,  $Q$  debería ser positiva; por otro, los casos en donde  $\rho > 0$  no satisfacen la condición de que  $\rho < \sigma_S$ . También se representan los valores de  ${}^2\sigma_B$ , que se obtienen al sacar la raíz cuadrada del coeficiente del término cuadrático en la ec. (4.4a). Todos son complejos, así que se omite su valor.

Energía	$\sigma_B$	${}^{(1)}\sigma_B$	$\epsilon_B$	${}^{(2)}\sigma_B$	$\sigma_S$	${}^{(1)}\sigma_S$	$\epsilon_S$	$\rho$	$Q$
(keV)	( $10^{-19}\text{m}^2$ )		(%)		( $10^{-19}\text{m}^2$ )		(%)	( $10^{-19}\text{m}^2$ )	( $10^{-38}\text{m}^4$ )
2.5	6.05	5.24	13.33	i	0.44	0.52	16.86	-18.25	-4.98
3	6.05	4.09	32.40	i	0.96	0.75	22.76	24.14	8.44
3.6	5.60	4.86	13.16	i	1.12	1.10	2.09	-16.51	-10.25
4	6.08	5.01	17.61	i	1.16	1.16	0.30	-8.34	-6.21
5	5.97	5.67	5.10	i	1.49	1.32	11.15	-3.11	-3.81
6	6.08	3.34	45.05	i	1.43	1.16	19.14	25.18	13.22
6.4	6.86	6.69	2.54	i	1.68	1.88	12.17	-21.36	-23.68
7	4.73	4.42	6.65	i	2.03	1.88	7.34	27.17	22.02
8	7.31	7.70	5.39	i	2.78	2.75	0.97	13.46	10.95
8.5	6.92	5.59	19.24	i	2.31	2.25	2.59	0.30	-4.73

Tabla 4.1: Resumen de los valores obtenidos con nuestros experimentos. Se muestran además, los errores relativos a las secciones medidas con la técnica BAT y SGR a primer orden  $\sigma_B$  y  $\sigma_S$ . Las secciones  ${}^{(1)}\sigma_B$  y  ${}^{(1)}\sigma_S$  son los coeficientes lineales de la corrección a segundo orden para cada técnica. En promedio, los respectivos errores son  $\epsilon_B = 16.05\%$  y  $\epsilon_S = 9.54\%$ .

En los dos tipos de análisis, existe una diferencia notoria entre las secciones  $\sigma_B$  y  $\sigma_S$ . Como esto no es propio de las interacciones analizadas y ya que la situación a segundo orden arroja valores sin significado físico, se eligen como referencia las secciones obtenidas a primer orden para continuar con el análisis de tiempo de vida.

#### 4.1.5. Análisis de tiempo de vida del $O^{-*}$

Las partículas del HaP recorren una distancia fija desde la salida de la CeI hasta alguno de los CEM. Durante el recorrido, podría ocurrir un proceso de decaimiento donde el  $O^{-}$  pierda el electrón y, por tanto, se neutralice. Si ocurre antes de llegar a las placas paralelas, la partícula no es deflectada y es medida como parte de la fracción  $F_0$ , por lo tanto, la sección  $\sigma_S$  debe aumentar. Por otro lado, la fracción  $F_{-1}$  también se ve afectada, ya que

llegan menos partículas y su decrecimiento debe ser más pronunciado, lo cual implica que  $\sigma_B$  también presenta una magnitud mayor. Como se muestra en los apartados anteriores, las secciones miden alrededor de los valores obtenidos por Bennet *et al.* (1975) y Doering (1964), por lo que esto no ocurre. Si el decaimiento ocurre después de salir de las placas paralelas, las partículas neutralizadas ya se encuentran deflectadas, por lo que continúan aproximadamente la misma trayectoria desviada y forman parte de la sección  $\sigma_B$ , así, este valor no se ve afectado. Sin embargo, nuestras secciones no coinciden con los valores de  $\sigma_S$ , entonces, tampoco se puede tomar como este caso.

El caso restante es que las partículas se deflecten a lo largo de las placas paralelas, así, las trayectorias se pueden ver afectadas con distintos ángulos en función de la distancia recorrida y, por lo tanto, en función del tiempo de vuelo (TdV) de estas dentro de las placas. Esto puede conducir a que no todas las partículas neutralizadas sean detectadas en el CEM central, entonces, las secciones  $\sigma_S$  tengan el mismo valor antes y después del decaimiento. Por otro lado, las partículas neutralizadas no seguirían la misma trayectoria que las negativas, así que no se detectarían en el CEM lateral. Así, la fracción  $F_{-1}$  decaería de forma más pronunciada que el valor original y la sección  $\sigma_B$  tendría una magnitud más grande. Se propone un decaimiento exponencial de la diferencia entre el recíproco de las secciones transversales  $\beta = \frac{1}{\sigma_B - \sigma_S}$  de la forma

$$\beta = Ae^{-t/\tau}. \quad (4.5)$$

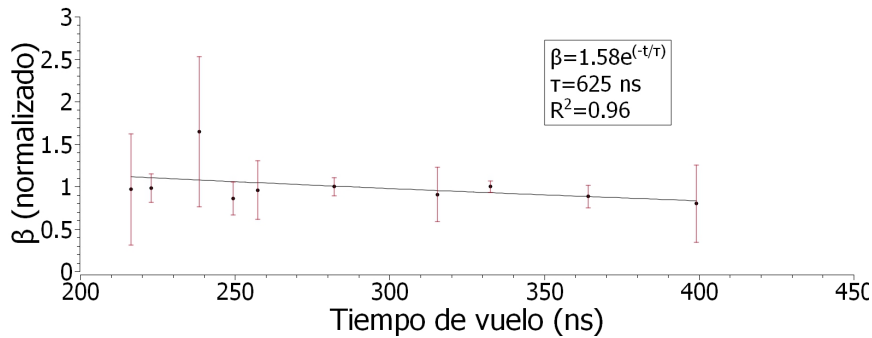


Figura 4.8: Comportamiento del parámetro  $\beta$  en función del TdV. La tendencia casi constante indica que el tiempo de vida del  $O^-$  es mayor a los nanosegundos. El error está escalado respecto al promedio del parámetro  $\beta$ .

En su artículo, Vergara, *et al.* (2021) proponen que esta diferencia entre las secciones decrece conforme aumenta la velocidad de las partículas y, por lo tanto, su inverso decae respecto al TdV, por lo que la constante que divide al tiempo se puede interpretar como el tiempo de vida del anión en cuestión.

Se obtiene el ajuste de los datos presentado en la Fig. 4.8. Como se muestra, el tiempo de vida es  $\tau = 625$  ns, lo cual quiere decir que el TdV del anión  $O^-$  es mucho menor que su TdV entre las placas<sup>17</sup>. Debido a que el error presentado (explicado en la siguiente sección) es de aproximadamente del orden del parámetro  $\beta$  y que, dada una gráfica aproximadamente constante, es posible ajustar múltiples líneas rectas, se obtiene una cota inferior para el TdV y, por lo tanto, se descarta la posibilidad de existir procesos de despojo electrónico del  $O^-$  con corta duración.

#### 4.1.6. Análisis de errores

La sección transversal está dada por

$$\sigma_{-10} = k_B \frac{T}{\lambda P}, \quad (4.6)$$

por lo que su variación depende de tres parámetros medibles: la temperatura  $T$  y presión  $P$  del gas en la CeI y el camino libre medio dentro de la CeI  $\lambda$ . Con el análisis de error,

$$\Delta\sigma_{-10}^2 = k_B^2 \left(\frac{T}{\lambda P}\right)^2 \left[ \left(\frac{\Delta T}{T}\right)^2 + \left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{\Delta P}{P}\right)^2 \right], \quad (4.7)$$

donde las incertidumbres se toman como la mitad de la mínima escala de cada aparato correspondiente. Esta ecuación sugiere que el error total se propaga de la misma forma en cada parámetro medido, por lo que la incertidumbre de cada uno de ellos y el orden de magnitud de cada valor determina qué variable es más susceptible a errores. En este caso, la contribución más grande es debida a la incertidumbre en la presión y a la medición de la temperatura.

<sup>17</sup>A diferencia del anión  $H^-$  estudiado por Vergara, *et al.* (2021), cuyo TdV es del orden de ns.

Debido a las escalas utilizadas, el error propagado por la temperatura es despreciable. Sin embargo, tanto la presión como el camino libre medio escalan de manera ligeramente significativa al error. Al sustituir los valores, se obtiene que la incertidumbre de la medición de las secciones transversales tiene un valor de  $\Delta\sigma = 2.07 \times 10^{-21} \text{ m}^2$ , por lo tanto, este error es despreciable para el análisis.

Para determinar el error producido durante los experimentos se utiliza la desviación estándar  $\Delta\sigma_B$  y  $\Delta\sigma_S$  al medir la sección transversal. Se recurre a la definición del parámetro  $\beta \equiv \frac{1}{\sigma_B - \sigma_S}$ . Del análisis en la sección anterior, se obtiene que

$$\Delta\beta^2 = \frac{1}{(\sigma_B - \sigma_S)^4} (\Delta\sigma_B^2 + \Delta\sigma_S^2) \quad (4.8)$$





# Capítulo 5

## Conclusiones

La técnica SGR es útil para medir las secciones transversales para la colisión  $O^- + N_2$  en el intervalo de energías entre 2.5 keV y 8.5 keV. En promedio, esta interacción equivale a un área de contacto de  $1.54 \times 10^{-19} \text{ m}^2$ , o bien, un radio de separación de 2.21 Å. Es interesante notar que el promedio equivale a 0.96 veces el tamaño total de los enlaces en la molécula de óxido nitroso  $N_2O$ .

Las secciones dentro en el intervalo de energías estudiadas tienen un comportamiento creciente, tal como se obtuvo anteriormente por Doering (1964) y Bennet *et al.* (1975). Sin embargo, no parecen mostrar una tendencia cuando se trata de la técnica BAT.

La técnica BAT toma en cuenta más procesos que involucran decaimiento del haz por interacciones distintas a las de colisiones entre dos partículas, por ejemplo, el tiempo de vida.

Los resultados que toman en cuenta varias interacciones concuerdan en buena medida con los obtenidos a primer orden, pero sus términos adicionales no representan una situación física, por lo que es suficiente con tomar las aproximaciones a primer orden. Ya que las tendencias de las fracciones son lineales, el régimen de espesor de celda elegido es adecuado para determinar las secciones.

Con los resultados obtenidos por la técnica BAT y SGR se deduce que el tiempo de vida del anión  $O^-$  es mayor a los ns y, por tanto, no decae por medio de resonancia Feshbach.



## Apéndice A

### Artículos producidos durante este trabajo

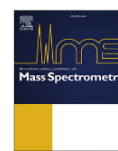
International Journal of Mass Spectrometry 469 (2021) 116681



Contents lists available at ScienceDirect

International Journal of Mass Spectrometry

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/ijms](http://www.elsevier.com/locate/ijms)



## Electron loss of $\text{CH}^-$ and $\text{CH}_2^-$ induced by interactions with $\text{N}_2$ and $\text{O}_2$ at keV energies



A. Lira<sup>a</sup>, A.A. Martínez<sup>b</sup>, A. Escalante<sup>a</sup>, S. Vergara<sup>a</sup>, G. Hinojosa<sup>b,\*</sup>

<sup>a</sup> Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, 62209, Mexico

<sup>b</sup> Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 48-3, Cuernavaca, 62251, Mexico

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 9 April 2021

Received in revised form

3 August 2021

Accepted 5 August 2021

Available online 11 August 2021

#### Keywords:

Electron detachment cross sections

Simple carbohydrate anions

Metastable states of simple molecular anions

Methylene anion

Methyldyne or carbyne anion

Lifetime

### ABSTRACT

Relative electron detachment cross sections for the projectiles  $\text{CH}^-$  and  $\text{CH}_2^-$  colliding with  $\text{N}_2$  and  $\text{O}_2$  target gases were measured. Two different methods to measure the cross sections were used, the signal growth rate and the beam attenuation. The cross sections measured with the beam attenuation technique were higher than those measured with the signal growth rate method. An analysis based on the differences of the cross sections measured with the two methods showed consistency with the time-dependent processes of metastable auto-detaching state populations undergoing decay as a function of its time of flight. These metastable processes seem to be target dependent. When the target was  $\text{O}_2$ , a decaying process characterized by a lifetime of the order of  $0.40 \pm 0.16 \mu\text{s}$  was found. For the case of the  $\text{N}_2$  as a target, it was not possible to derive a characteristic lifetime.

© 2021 Elsevier B.V. All rights reserved.

# Electron detachment cross section of $H^-$ induced by collisions with $O_2$

S Vergara<sup>1</sup>, A A Martínez<sup>2</sup>, F R Peñalver<sup>1</sup> and G Hinojosa<sup>2,\*</sup> 

<sup>1</sup> Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos 62209, Mexico

<sup>2</sup> Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 48-3, Cuernavaca 62251, Mexico

E-mail: [hinojosa@icf.unam.mx](mailto:hinojosa@icf.unam.mx)

Received 8 April 2021, revised 2 July 2021

Accepted for publication 19 July 2021

Published 27 August 2021



CrossMark

## Abstract

We present measured electron detachment cross sections from hydrogen anion induced by collisions with  $O_2$  in the energy range of 1 to 9 keV with two methods, the beam attenuation and the signal growth rate. Processes involved in the interaction are discussed in terms of the cross section differences as a function of the time of flight of the  $H^-$  through an analysing electric field. As a consequence, an ansatz value of the life-time for the auto-detaching states of  $H^-$  population of  $39 \pm 12$  ns is derived that is consistent with predictions for the lifetime of the  $(2p^2)^3P$  state of  $H^-$ .

Keywords: electron detachment cross sections, negative hydrogen, anion of hydrogen, excited state lifetime

---



# Bibliografía

- Battaglia, O., Fazio, C., Guastella, I., Sperandeo-Mineo, R. (2010). *An experiment on the Velocity Distribution of Thermoionic electrons*. American Journal of Physics, 78:1302-1308.
- Bennett, R., Moseley, J. & Peterson, M. (1975). *Electron Loss Cross Sections for  $O^-$ ,  $O_2^-$ ,  $NO_2^-$ , and  $NO_3^-$  in several gases*. Journal of Chemical Physics, 62:2223-2227.
- Bowers, B., Flory, R., Ametepe, J., Staley, L., Patrick, A. & Carrington, H. (2018). *Controlled trial evaluation of exposure duration to negative air ions for the treatment of seasonal affective disorder*. Psychiatry Research, 259:7-14.
- Desai, R., Coates, A., Wellbrock, A., Vuitton, V., Crary, F., González-Caniulef, D., Shebanits, O., Jones, G., Lewis, G., Waite, J., Cordiner, M., Taylor, A., Katarial, D., Wahlund, J., Edberg, N., & C. Sittler, C. (2017). *Carbon Chain Anions and the Growth of Complex Organic Molecules in Titan's Ionosphere*. The Astrophysical Journal Letters, 844(6).
- De Hoffman, E. & Sroobant, V. (2007). *Mass Spectrometry. Principles and Applications*. Reino de Bélgica: Wiley.
- Doering, J. (1964). *1- to 10- keV Collisional Detachment Cross Sections for O- and O2- on Argon and Nitrogen*. The Journal of Chemical Physics, 4:1664-1165.
- Escombe, A. R., Moore, D. A. J., Gilman, R. H., Navincopa, M., Ticona, E., Mitchell, B., Noakes, C., Martínez, C., Sheen, P., Ramirez, R., Quino, W., Gonzalez, A., Friedland, J., Carlton A. & Evans, C. (2009). *Upper-Room Ultraviolet Light and Negative Air Ionization to Prevent Tuberculosis Transmission*. PLoS Medicine, 6:312-323.
- Foro Nuclear (2002). *Francis William Aston, inventor of the mass spectrometer and discoverer of isotopes*. Recuperado el 30 de noviembre de 2022 de <https://rinconeducativo.org/en/recursos-educativos/francis-william-aston-inventor-del-espectrometro-de-masas-y-descubridor-de-los/>.

- González, O., Gleason, C., Hinojosa, G. (2008). *Principios fundamentales, técnicas de medición y análisis de datos en un acelerador de iones*. Revista Mexicana de Física, 54:104–119.
- Gross, J. (2011). *Mass Spectrometry: A textbook*. Alemania: Springer.
- Hasted, J., Phil, D., & Smith, R. (1955). *The Detachment of Electrons from Negative Ions*. Proceedings of the Royal Society A, 235:349-353.
- Hagbom, M., Nordgren, J., Nybom, R., Hedlund, K., Wigzell, H. & Svensson, L. (2015). *Ionizing air affects influenza virus infectivity and prevents airborne transmission*. Scientific Reports, 5(10).
- Hernández, E. & Hinojosa, G., (2018) *Collision induced electron detachment cross sections of the H<sub>2</sub>CC anion below 10 keV on O<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>*. International Journal of Mass Spectrometry, 424:35–39.
- Hussein, B. (2017). *Theoretical Design of Electrostatic Lens Accelerating and Decelerating Operated Under Different Magnification Conditions*. Ibn AL- Haitham Journal For Pure And Applied Science, 27:60-69.
- Hutchinson, I. (2002). *Principles of Plasma Diagnostics*. Inglaterra: Cambridge University Press.
- Ishikawa, J., Tsuji, H., Maekawa, T. (1989). *Electron detachment cross-sections in low energy heavy negative ion beam apparatus*. Vacuum, 39:1127-1130.
- Khamesian, M., Douguet, N., Fonseca dos Santos, S., Dulieu, O., Raoult, M., Brigg, W. J. & Kokoouline, V. (2016). *Formation of CN<sup>-</sup>, C<sub>3</sub>N<sup>-</sup> and C<sub>5</sub>N<sup>-</sup> Molecules by Radiative Electron Attachment and their Destruction by Photodetachment*. Physical Review Letters, 117(6).
- Kvale, T., Allen, J., Sen, A., Fang, X., Matulioniene, R., (1995) *Curvature in the scattered-beam growth curves in H<sup>-</sup> + (He, Ne, Ar) collisions*. Physical Review A, 51:1360-1366.
- Liu, R., Lian, Z., Lan, L., Qian, X., Chen, K., Hou, K., Li, X. (2017). *Effects of negative oxygen ions on sleep quality*. Procedia Engineering, 205:2980–2986.
- McCarthy, M., Gottlieb, C., Gupta, G., Thaddeus, P. (2006). *Laboratory and Astronomical Identification of the Negative Molecular Ion C<sub>6</sub>H<sup>-</sup>*. The Astrophysical Journal. 652:L141-L144.
- Mendes, M., Guerra, C., Lozano, A. I., Rojo, D., Oller, J. C., Limao - Vieira, P. & García, G. (2019). *Experimental electron-detachment cross sections for collisions of O<sub>2</sub><sup>-</sup> with N<sub>2</sub> molecules in the energy range 50 - 7000 eV*. Physical Review, 99(8).



## BIBLIOGRAFÍA

---

- Millar, T., Walsh, C., Field, A. (2017). *Negative Ions in Space*. Chemical Review, 117:1765-1795.
- Nascimento, R. F., Mello, S. L. A., Magnani, B. F., SantAnna, M. M., Jalbert, G., de Castro Faria, N. V. (2013). *Total Detachment Cross sections of  $C^-$ ,  $CH^-$ ,  $C_2^-$  and  $C_2H^-$  Incident on  $N_2$  at keV Energies*. Physical Review A, 87(6).
- National Institute of Standards and Technology (2022). Recuperado el 25 de agosto de 2022 de <https://webbook.nist.gov/chemistry/mw-ser/>.
- Risley, J., Geballe, R. (1974). *Absolute  $H^-$  Detachment Cross Sections*. Physical Review, 9:2485-2495.
- Serkovic-Loli, L., Hernández, L., E.M. Hernández, E., Hinojosa, G. (2015). *Electron detachment of NO- in collisions with  $O_2$  and  $N_2$  below 10 keV*. International Journal of Mass Spectrometry, 392:23-27.
- Schulz, G. (1962). *Cross Sections and Electron Affinity for  $O^-$  Ions From  $O_2$ , CO and  $CO_2$  by Electron Impact*. Physical Review, 128:178-186.
- Straum, C. (1996). *Absolute partial cross sections for electron - impact ionization of Ar  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$  and  $CO_2$  from threshold to 1000 eV*. USA: Rice University. Tesis de doctorado en física.
- SIMION (2022). Recuperado el 21 de noviembre de 2022 de <https://simion.com/>.
- Temelkov, K., Vuchkov, N., Sabotinov, V. (2006). *Penning Ionizations Cross Sections and Rate Constants*. Journal Of Physics: Conference Series, 44:116-120.
- Taylor, J. (1981). *How does an ion gauge work?*. Recuperado el 5 de diciembre de 2022 de <https://arunmicro.com/news/how-does-an-ion-gauge-work>.
- Vergara, S., Martínez, A., Peñalver, R., Hinojosa, G. (2021). *Electron Detachment Cross Section of  $H^-$  Induced by Collisions with  $O_2$* . Journal of Physics B, 54(7).
- Wenzel, O. (2017). *What is the Working Principle of the Pirani Gauge?*. Recuperado el 5 de diciembre de 2022 de <https://sens4.com/pirani-working-principle.html>
- Wiesemann, K. (2012). *A short Introduction to Plasma Physics*. Alemania: Ruhr-Universität Bochum.
- Wille, K. (2000). *The Physics of Particle Accelerators*. New York: Oxford University Press.