



**UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**Disociación del catión de Agua
inducida por colisión con Helio.**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F Í S I C O

P R E S E N T A:

OLMO GONZÁLEZ MAGAÑA.

**DIRECTOR DE TESIS:
DR. GUILLERMO GUADALUPE HINOJOSA AGUIRRE.**

México D.F. Septiembre de 2006.



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.

Hoja de datos del jurado

Datos del alumno

González

Magaña

Olmo

Teléfono (52) 55 21 56 37 89

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

097109626

Datos del tutor

Doctor

Guillermo Guadalupe

Hinojosa

Aguirre

Datos del sinodal 1

Doctor

José Ignacio

Jiménez

Mier y Terán

Datos del sinodal 2

Doctora

Rocio

Jáuregui

Renaud

Datos del sinodal 3

Doctor

José

Récamier

Angelini

Datos del sinodal 4

Doctor

Enrique

Camarillo

García

Datos del trabajo escrito

Disociación del catión de Agua inducida por colisión con Helio

70 páginas

2006

**Without craftsmanship, inspiration
is a mere reed shaken in the wind.**

Johannes Brahms

**Dedicó este trabajo a las personas
más importantes en mi vida**

**Rubén, pilar de mi formación
y mi mejor amigo**

**Yolanda, constante esfuerzo
e innegable amor**

MI PROFUNDO RECONOCIMIENTO

A Rut, a quien agradezco la estimable confianza que deposito en mí. Deseando para ti las mejores satisfacciones.

A Guillermo, Laura y Gabi por su generosidad, amistad y ejemplo.

A Toño y Gabi, a quienes agradezco el interés expresado en mi trabajo.

Al profesor Enrique Camarillo por la dedicación y amistad que me ha otorgado.

Al grupo de física atómica y molecular del CCF, integrado por la doctora Carmen Cisneros, y los doctores Ignacio Álvarez y Jaime de Urquijo por sus sugerencias durante el desarrollo de todo el trabajo. Especial reconocimiento merecen los técnicos Armando Bustos, Alfonso Guerrero y Anselmo González por el soporte prestado al equipo experimental.

Al comité sinodal, por la importante contribución que realizaron en este trabajo.

A la familia de María del Carmen Cardona y Oscar Medina por su desinteresada hospitalidad.

Al valiente Pavel, por que sin ti, no conocería el sabor de la vida.

A Ada, verdadera *enfant terrible*, orgulloso de ti.

En cumplimiento de los lineamientos de proyecto CONACYT, manifiesto que este trabajo de tesis lo realicé con una beca en el proyecto 42630-F. Asimismo, se contó con el apoyo IN 155 405 de la DGAPA.

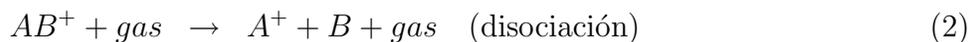
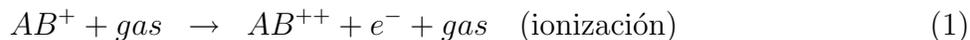
Índice

1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	2
2. Experimento	6
2.1. Descripción del Acelerador	6
2.1.1. Producción de un haz molecular, la fuente de iones	7
2.1.2. Sistema de aceleración y selección de un haz de iones	9
2.1.3. Cámaras de reacción y detección	10
2.1.4. Análisis de energía con las placas analizadoras	11
2.1.5. El analizador electrostático	15
2.1.6. El sistema de conteo de partículas	17
2.1.7. La presión base, el sistema de vacío	17
2.2. Nuevo programa para el sistema de control y adquisición de datos (LabVIEW)	21
3. Generación de un haz de agua	27
3.1. Preparación del reservorio de agua	27
3.2. Las fuentes de contaminates	28
3.3. El haz de $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$	28
4. Análisis de los espectros de colisión de $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$ con He	31
4.1. Análisis de la energía cinética en el SR-CdeM	31
4.2. Análisis de la intensidad de los espectros en el SR-CdeM	34
5. Resultados Experimentales y Discusión	39
6. Conclusiones	54
7. Apéndices	55
7.1. Apéndice A - Trayectoria de una partícula en el campo eléctrico de un par de placas oblicuas	55
7.2. Apéndice B - Transformación en energía del SR-L al SR-CdeM	57
7.3. Apéndice C - Glosario	60
8. Referencias	61

1. Introducción

El agua es un componente ubicuo que ha estado presente desde las primeras etapas de la formación de nuestro sistema planetario. Ha formado parte en una gran variedad de fenómenos físicos, químicos y biológicos. El agua no solo se encuentra en nuestro planeta, recientemente se han observado líneas en el espectro infrarrojo solar debidas al agua [1], y en objetos subestelares como las enanas café, el agua, es la molécula más abundante después del hidrógeno [2].

Los átomos y moléculas en estado iónico constituyen una parte significativa de la materia en el universo. Cuando un átomo o una molécula se ioniza, ya sea ganando electrones (aniones) o perdiéndolos (cationes) se hace más reactiva desde el punto de vista químico e interacciona fuertemente con campos magnéticos y eléctricos. Los iones absorben fotones de ciertas frecuencias, por ejemplo fotones más energéticos que los rayos X suaves, y en general, es más fácil estudiarlos (desde el punto de vista de la teoría) porque tienen menos electrones que las moléculas o los átomos originales. Experimentalmente, es posible estudiar la estructura atómica y molecular de iones porque se pueden confinar en el espacio mediante *haces de iones*, que se producen en los laboratorios. La colisión de estos haces con átomos neutros, permite el estudio de su dinámica de ionización, de disociación y de la captura electrónica, entre otros. Las ecuaciones (1) a (3) son ejemplos de tres posibles *canales* o procesos que ocurren en una colisión de molécula diatómica. *Gas* se refiere al blanco, en este experimento He.



Entre todas las moléculas triatómicas y diatómicas, la descripción de la disociación del agua es, probablemente, una de los más importantes. Su estudio se presenta en un gran número de aplicaciones y en muchas ramas de la ciencia. Por ejemplo, la dinámica de la disociación del agua es de interés en física atómica y molecular, y puede usarse para estudiar el problema fundamental de la disociación de tres cuerpos cargados eléctricamente [3, 4, 5].

En física médica, existe particular interés en estudiar los procesos de ionización y disociación de las moléculas de agua que se encuentran en los tejidos humanos. Las terapias actuales contra los tumores cancerígenos utilizan haces de partículas cargadas, como son los protones, neutrones, partículas α e iones más pesados, como el carbón. El objetivo de la terapia es dañar el ADN de las células cancerígenas para que éstas no puedan multiplicarse, mientras se minimiza el daño al tejido sano [6]. La mayor parte de la energía transferida por la radiación ionizante es absorbida por las moléculas de agua, que se disocian y forman

radicales como el OH^+ , que reaccionan con las otras componentes de la piel y de la sangre [7].

En el campo de la físico química de las atmósferas, el agua es una componente importante de las colas de los cometas, donde recientemente se ha detectado emisión de rayos X. Cuando un cometa se acerca al Sol, su superficie se calienta y se volatilizan los compuestos del núcleo (H_2O , CO , CH_4 , H_2CO , NH_3). El vapor producido por el núcleo activo escapa hacia el espacio, formando una atmósfera en la cola del cometa. El gas neutro de la cola del cometa se extiende lejos del núcleo (10^6 km) y colisiona con el viento solar. La colisión induce procesos de ionización y disociación del agua y de su catión. El intercambio de carga en la colisión es una de las propuestas para explicar la emisión de rayos X. [8, 9, 10]

Esta tesis tiene como propósitos la producción de un haz, estable y reproducible, de agua ionizada y el estudio de la dinámica de su disociación en colisión con un gas inerte (He). Se expone una descripción de las técnicas experimentales usadas en la producción del haz, para la detección y el análisis de los productos de su disociación, utilizando métodos y técnicas de análisis en el campo de las colisiones moleculares. Asimismo, se presentan resultados generales sobre la dinámica de disociación del haz de agua: $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$ a energías en el laboratorio de entre 3 y 8 keV.

1.1. Antecedentes

En 1973, Lew y Heiber [11] fueron los primeros en realizar espectroscopia óptica directa del catión de agua (H_2O^+) en un estudio de sus transiciones electrónicas. Un año después, el catión de agua fue detectado en el cometa Kohoutek por Herzberg y Lew [12] y por Wehinger *et al.* [13]. Dixon *et al.* [14] utilizaron espectroscopia fotoelectrónica para estudiarlo en 1976.

La estructura del estado base fue establecida por métodos espectroscópicos, y reportada entre otros por Strahan *et al.* [15] en 1986 y por Dinelli *et al.* [16] en 1988. El H_2O^+ fue sujeto a cálculos *ab initio* por Smith *et al.* [17] en 1975, Fortune *et al.* [18] en 1976, y por Esposti *et al.* [19] en 1987 entre otros.

En 1980, Jungen, Hallin, y Merer [20] publicaron una serie de artículos sobre el momento angular orbital en moléculas triatómicas. Reportaron las respectivas curvas de potencial de Born-Oppenheimer para la combinación de estados electrónicos de H_2O^+ . Estas curvas se obtuvieron del cálculo de los niveles vibracionales y rotacionales de algunos de los estados electrónicos [21]. Revisaron los efectos del momento angular orbital en el espín y en la estructura fina rotacional [22].

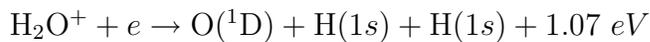
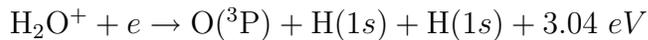
Los estudios espectroscópicos establecieron los fundamentos del conocimiento actual sobre la estructura de la molécula de H_2O^+ y sirvieron de base para las investigaciones sobre la dinámica en la interacción de esta molécula en diversos sistemas colisionales.

Uno de los primeros trabajos experimentales sobre la disociación de la molécula H_2O fue realizado por Werner *et al.* [3] en 1995. En su experimento, un haz colimado de proyectiles H^+ y He^+ colisiona con un jet efusivo de agua neutra. La energía de aceleración del haz comprende de 100 keV a 350 keV. Utilizaron detectores planos sensibles a la posición de impacto de la partícula, en un espectrómetro de tiempo-de-vuelo y usaron un sistema de señales en coincidencia para estudiar las correlaciones entre las partículas resultantes de la fragmentación Coulombiana de la molécula. Los artículos anteriores a su trabajo (citados en su artículo) se concentraron en los fragmentos individuales de la disociación de la molécula neutra de H_2O sin considerar las correlaciones entre los fragmentos resultantes. Este es el primer trabajo en donde se estudia completamente la disociación molecular -inducida por colisión- con más de dos fragmentos en coincidencia.

Werner *et al.* [3] reportan secciones totales relativas para los canales $\text{H}_2\text{O} \mapsto \text{H}^+ + \text{H}^+ + \text{O}^0$; $\text{H}_2\text{O} \mapsto \text{H}^+ + \text{H}^+ + \text{O}^+$; y $\text{H}_2\text{O} \mapsto \text{H}^+ + \text{H}^+ + \text{O}^{++}$. Encuentran que el ángulo entre los protones es ligeramente mayor al de la molécula, debido posiblemente a la repulsión electrostática.

Datz *et al.* [4] publicaron en 2000 un estudio sobre la dinámica de la ruptura de tres cuerpos del H_2O^+ en procesos de recombinación disociativa. La recombinación disociativa es el proceso en el cual un electrón libre se combina con una molécula ionizada, de forma tal que le agrega energía, esencialmente el negativo del potencial molecular de ionización, causando la disociación de la molécula neutra.

En el experimento de Datz *et al.* [4], utilizando un anillo de acumulación de iones pesados (*Heavy-Ion Storage Ring*), las moléculas de H_2O^+ , que permanecen en su interior por aproximadamente 5 segundos se relajan al estado base. Después de esto, el haz es atravesado por otro haz de electrones a la misma velocidad, y es en este momento donde ocurre la recombinación disociativa. Al ajustar la velocidad relativa de los electrones, la energía relativa de la colisión es cercana a cero eV. En condiciones de energía de colisión cercana a cero, solo dos canales de tres-cuerpos son energéticamente posibles, y son



donde la energía sobrante se reparte entre los dos átomos de hidrógeno.

Datz *et al.* observaron que el átomo de oxígeno permanece en el estado base $\text{O}(^3\text{P})$ a razón de 3.5:1 que en el estado metaestable $\text{O}(^1\text{D})$ de la molécula de agua. No lograron identificar un estado intermedio del proceso de recombinación, como por ejemplo el OH^* o el H_2^* . Finalmente, no encontraron un ángulo preferencial en el que la molécula capture al electrón.

Siegmann *et al.* [23] utilizaron iones de Xe^{17+} , Xe^{18+} y Xe^{43+} (con un estado de carga muy grande) y a altas energías, del orden de 5.9 MeV, para estudiar la ionización múlti-

ple y fragmentación de la molécula de agua. Obtuvieron una Energía Cinética Liberada (ECL), en inglés *Kinetic Energy Release* (KER) de 6.5 eV para la fragmentación Coulombiana $\text{H}_2\text{O} + \text{Xe}^{q+} \rightarrow \text{H}^+ + \text{OH}^+ + 2\text{e}^- + \text{Xe}^{q+}$, ($q = 17, 18, 43$) y observaron que es independiente del estado de carga del proyectil.

Otro experimento que utiliza iones altamente cargados fue publicado en 2004 por Pešić *et al.* [24]. Ellos estudiaron la disociación de la molécula H_2O inducida por la colisión de iones de Ne^{q+} ($q = 1, 3, 5, 7$ y 9) a energías de 2 a 90 keV y encontraron una fuerte dependencia de las secciones diferenciales de la fragmentación con el estado de carga.

Asimismo en 2004, Gobet *et al.* [25] midieron secciones parciales y totales para la ionización directa y por captura electrónica de la molécula de agua en colisiones con un haz de protones. Reportan, por primera vez, la observación en coincidencia del fragmento H_2^+ en la colisión de protones con agua. No observaron evidencia de la formación de iones negativos ni de captura electrónica doble. Para la formación de todos los productos iónicos, encontraron que la ionización directa es el proceso dominante a altas energías; y que en proporción, el catión de agua produce más fragmentos iónicos, que el agua neutra. Adicionalmente, Gobet *et al.*, enfatizan que en la medición de las secciones de productos iónicos específicos, éstas son casi independientes de la densidad del blanco. Este comportamiento de las secciones se conoce como “condición de colisión simple”.

La fragmentación de agua por iones pesados fue estudiada por Luna H. y Montenegro E. C. [26] en 2005, utilizando proyectiles multicargados de C^{3+} y O^{5+} a energías de 1 a 3.5 MeV, en este intervalo de energías de colisión el agua absorbe casi toda la energía y maximiza las medidas de los canales de ionización, captura y pérdida electrónica. Reportan secciones totales absolutas para fragmentos positivos de captura electrónica, ionización y pérdida electrónica en la colisión de iones de C^{3+} y O^{5+} con moléculas de agua y comparan sus resultados con protones, electrones y fotones. Encuentran en la dinámica de colisión, específicamente, que la relación entre las secciones de distintos canales de fragmentación es aproximadamente independiente de la energía, del estado de carga y del tipo de partícula que colisiona con la molécula de agua. Este fenómeno se toma por cierto en el caso de la radiólisis del agua.

Alvarado *et al.* [5] estudiaron en 2005 la disociación por ionización de la molécula de agua inducida por la colisión de H^+ y He^{q+} ($q = 1, 2$) a energías de 4 keV a 24 keV. Los fragmentos son observados con métodos de coincidencias en un espectrómetro de tiempo-de-vuelo de iones de retroceso. Encontraron que, aproximadamente, la mitad de los iones moleculares de H_2O^+ se disocian en el canal de dos cuerpos $\text{H}_2\text{O}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{OH}$, y enfatizan que hasta donde se conoce, no se han reportado secciones para el canal $\text{H}_2\text{O}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{O} + \text{H}$. Encontraron que el promedio de la ECL para el fragmento H^+ es de ~ 2 eV, cuando se usan proyectiles de H^+ , He^+ y He^{2+} a una energía de 6 keV.

Alvarado *et al.* [5] también estudiaron el proceso de explosión Coulombiana del $\text{H}_2\text{O}^{3+} \rightarrow \text{H}^+ + \text{O}^+ + \text{H}^+$. Para el proyectil He^{2+} a 6 keV obtienen una ECL de 17.8 eV para el fragmento H^+ . Finalmente observaron canales de energías muy altas de ECL -más de 10 eV-, en el canal $\text{H}_2\text{O}^{2+} \rightarrow \text{H} + \text{O}^+ + \text{H}^+$ para el fragmento H^+ la ECL es cerca de 14-15 eV para colisión con He^+ a 6 keV.

En todos los experimentos aquí detallados, se utiliza un jet de vapor de agua (neutra) como blanco en la zona de interacción. El haz de iones en estos experimentos consiste en partículas cargadas como protones [25, 27]; H^+ , He^+ , He^{2+} [3, 5]; C^{3+} , O^{5+} [26]; Ne^{q+} ($q = 1, 3, 5, 7, 9$) [24] y Xe^{q+} ($q = 17, 18, 43$) [23].

El presente estudio se distingue de los experimentos previamente citados, en que las energías de colisión son menores, de 3 keV a 8 keV. Por ejemplo, la energía del haz de Werner *et al.* fue de 350 keV [3], Gobet *et al.* (2001) y (2004) comprenden de 20 a 150 keV [25, 27]. El experimento de Alvarado *et al.* de 4 a 23 keV es el de energías más cercanas al presente [5], Luna *et al.* aceleraron a energías entre 1 y 3.5 MeV [26], Pešić *et al.* de 2 a 90 keV [24] y finalmente, Siegmann *et al.* fue de 5.9 MeV [23].

A energías de colisión entre 1 y 3.5 MeV, se observa que la dinámica de la disociación del $\text{H}_2^{18\text{O}^+}$ es independiente de algunos parámetros de la colisión [26]. No tenemos conocimiento de algún modelo exacto que lo describa, sin embargo, una posible explicación se basa en que la dinámica de la colisión depende del tiempo que el proyectil permanece cerca del campo de influencia de la molécula de agua. Por esta razón esperamos que a las energías de colisión del presente experimento, los datos arrojen información más detallada sobre la dinámica de disociación e ionización del ión $\text{H}_2^{18\text{O}^+}$.

2. Experimento

Los datos de la presente tesis se midieron en un acelerador electrostático de partículas cargadas instalado en el Centro de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma de México.

Este acelerador permite estudiar haces de iones moleculares a energías de 1 a 9 keV y se ha utilizado, por ejemplo, para realizar mediciones de H_3^+ y CO^+ pero hasta este trabajo no se había utilizado con H_2O^+ . Un motivo es la dificultad de producir un haz estable con esta molécula. Además, la introducción de vapor de agua en la fuente de iones disminuye la vida útil del filamento y puede constituir un riesgo para la integridad de toda la fuente. En general, la humedad es un problema cuando se intenta conseguir altos vacíos por los que la producción de un haz de H_2O^+ también constituye un riesgo para el vacío.

En esta sección se describirá el funcionamiento de las componentes del acelerador y del sistema de detección. Se agrega, además, una breve exposición sobre el sistema de control del acelerador y de adquisición de datos desarrollado para este experimento en el programa LabVIEW.

2.1. Descripción del Acelerador

El acelerador consta de tres etapas. Un diagrama simplificado del aparato se muestra en la figura 1.

El primer paso, es la producción de iones en una fuente de filamento incandescente, en cuyo interior se inyecta una mezcla de gases atómicos o moleculares que son ionizados en una descarga en arco a bajas presiones. Para producir el haz, los iones dentro de la fuente son atraídos por medio de un campo eléctrico al orificio de salida de la fuente y entonces son acelerados electrostáticamente en dirección a la línea de vacío del acelerador. Esta línea de vacío es la trayectoria que seguirá el haz dentro del acelerador. El acelerador cuenta con sistemas de alineación, enfoque y selección del haz, que se describen más adelante.

La segunda fase, consiste en la colisión del haz de iones moleculares -previamente seleccionado por un espectrómetro de masas- con un gas neutro, como blanco fijo. Este proceso se desarrolla en la cámara de reacción, que está formada por una celda de gas y un sistema de medición de la presión. La celda de gas es un contenedor metálico que impide que el gas neutro se difunda en el acelerador, confinando la región donde ocurren las colisiones al interior de la celda de gas. El gas es inyectado a la celda en dirección perpendicular a la trayectoria del haz por medio de una válvula de paso, esta válvula controla el flujo del gas en la celda y permite regular la presión del gas en el interior.

Finalmente, la tercera etapa consiste en la detección de los fragmentos iónicos resultantes de la colisión. Los fragmentos entran a la cámara de detección, donde se encuentran un par de placas metálicas oblicuas que deflecan el haz ya sea en dirección al analizador electrostático de placas paralelas o en dirección a los detectores. El analizador electrostático tiene como función determinar la distribución de velocidades de los fragmentos iónicos. Los detectores utilizados son multiplicadores de electrones tipo *Channeltron*, cuya función es detectar y contar el número de iones, en un intervalo de tiempo, provenientes de la colisión.

A lo largo de la trayectoria del haz están colocadas tres cajas de Faraday. La primera de ellas retráctil y se encuentra después de la celda de gas, en la cámara de reacción. Además, en la cámara de detección, una caja alineada a la trayectoria del haz principal (eje del acelerador) y otra en el analizador electrostático.

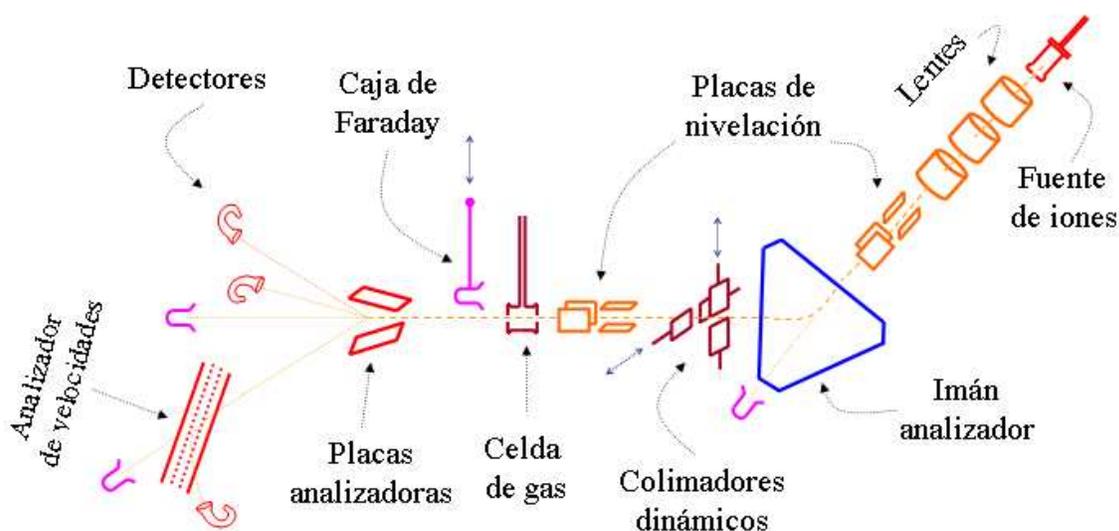


Figura 1: Esquema del acelerador. El haz se produce en la fuente de iones, donde es acelerado hacia la zona de colisión dentro de la celda de gas. Los fragmentos iónicos producto de la colisión son separados por las placas analizadoras hacia los detectores o hacia el analizador de velocidades. En este capítulo se describe cada una de las componentes del acelerador.

2.1.1. Producción de un haz molecular, la fuente de iones

En la figura 2 se presenta un esquema de la fuente de iones del acelerador. Una mezcla de gases de agua y argón se inyecta a la cámara del plasma (fuente de iones), en la cual, se encuentra un filamento de tungsteno (Volframio común, ^{74}W).

La cámara de la fuente está hecha de nitruro de boro, que consiste en proporciones iguales de boro y nitrógeno, BN. Estructuralmente es isoelectrónico al carbono, es decir, tienen el mismo número de electrones de valencia y la misma estructura (número y conectividad de átomos). El nitruro de boro forma estructuras hexagonales -como el grafito- y cúbicas -como el diamante-, tal como lo hace el carbono. La estructura cúbica del nitruro de boro lo hace uno de los materiales más duros, solo después del diamante y de los fullerenos ultra-fuertes. La estructura hexagonal, que es la utilizada en la fuente, tiene poca resistencia a esfuerzos mecánicos, pero es utilizada por su resistencia a altas temperaturas, $\sim 3000^{\circ}\text{C}$ y por ser un excelente aislante eléctrico.

A una distancia aproximada de 3 mm del filamento se encuentra una tapa circular hecha de acero inoxidable con una perforación central de aproximadamente 1 mm de diámetro, esta tapa es el ánodo. La montura de toda la fuente está soportada por un casco hueco, llamado *camisa de agua*, por donde se hace circular agua enfriada. Esto evita el sobrecalentamiento durante la operación de la fuente.

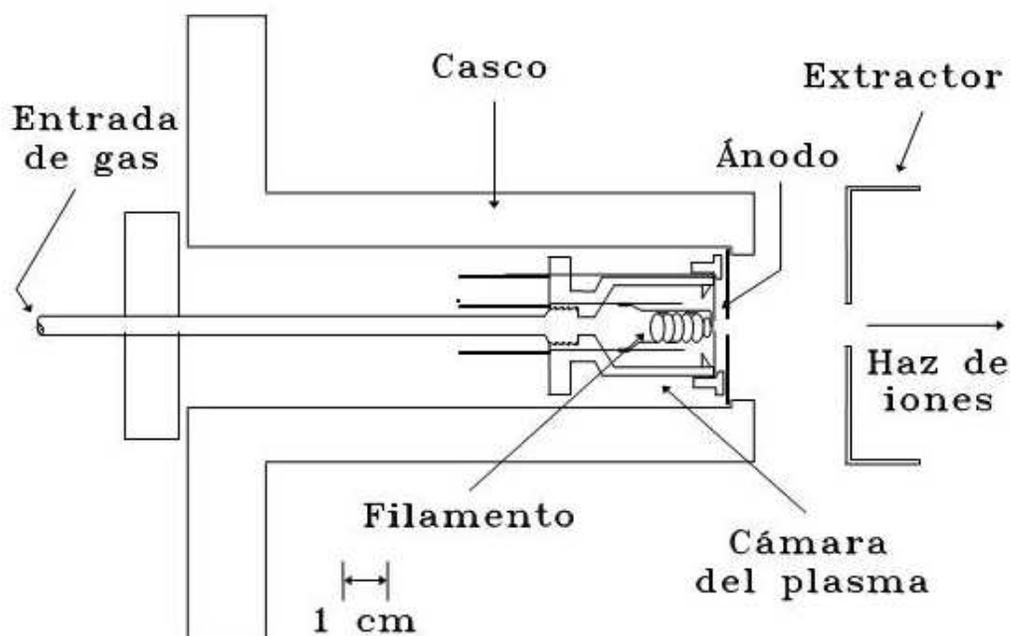


Figura 2: Fuente de iones. La emisión termoiónica de electrones entre el filamento y el ánodo genera un plasma de gas argón. Se inyecta vapor de agua dentro de la fuente y en la zona de plasma se producen un elevado número de iones de los elementos químicos (Ar, B, N) y de las moléculas presentes en la fuente (OH, O₂, N₂, H₂O).

Entre el filamento (cátodo) y el ánodo se aplica una diferencia de potencial de ~ 100 V. Una corriente de 15 A circula por el filamento, que al incandecer produce electrones por emisión termoiónica. Estos electrones se desplazan hacia el ánodo, ionizando al gas de argón, así se genera el plasma dentro de la fuente. Los procesos que ocurren en las fuentes de iones son complicados, la geometría deja poco espacio para que el plasma se forme y para que los electrones interactúen con los iones. La principal zona de interacción se concentra en torno al orificio de salida del ánodo y en el espacio entre el ánodo y el extractor principal, mientras que los electrones se concentran al interior de la fuente.

2.1.2. Sistema de aceleración y selección de un haz de iones

Los iones positivos que abandonan la fuente son acelerados aplicando un alto voltaje entre un extractor y la fuente, este extractor es el primer elemento de las lentes Einzel y se encuentra a 25 mm del casco (ver figura 2).

La lente Einzel consiste en tres secciones cilíndricas de acero (electrodos) cuyos centros están alineados con el eje del acelerador y su función es enfocar al haz de iones hacia el imán analizador. Además de la lente Einzel, el haz es dirigido hacia la zona de interacción y detección con ayuda de placas paralelas metálicas de nivelación en los sentidos horizontal y vertical, perpendiculares al haz.

El haz extraído de la fuente contiene todos los iones producidos en el plasma. Para separarlos se utiliza un espectrómetro de masas. El haz se hace pasar por un campo magnético B que es producido por un electroimán de doble devanado y núcleo de hierro dulce. El haz se separa dentro del campo magnético B del electroimán. El radio de curvatura R de la trayectoria de cada fragmento de masa m y carga q depende del cociente $\sqrt{\frac{m}{q}}$ y del alto voltaje de aceleración V aplicado en el extractor.

Para este instrumento, se encontró que la intensidad de flujo magnético B necesaria para desviar una partícula de carga q , masa m y que ha sido acelerada por una diferencia de potencial V (energía cinética $E_o = qV$ en eV) es:

$$B[\text{Gauss}] = \frac{\sqrt{2V}}{R} \sqrt{\frac{m}{q}} \quad (4)$$

donde R es el radio de curvatura, que en este caso, es un parámetro fijo determinado por la geometría del electroimán o espectrómetro de masas de 60° .

De la ecuación (4) y del campo B_0 necesario para deflectar una partícula de masa m_0 y carga q_0 conocida, se obtiene una relación útil entre el campo conocido B_0 y el campo requerido para deflectar una partícula de masa m :

$$m[u.a.] = \left(\frac{B_m}{B_0}\right)^2 m_0 \frac{q}{q_0} \quad (5)$$

donde B_m es el campo medido para deflectar el haz de iones, de masa m y carga q , en una trayectoria circular de radio R .

El haz es colimado durante su trayectoria por rendijas circulares con filo de navaja que se encuentran a la salida del electroimán, en la cámara de reacción y a la entrada de la cámara de detección.

2.1.3. Cámaras de reacción y detección

La cámara de reacción consta de una celda metálica de acero inoxidable en forma de cubo de 4.445 cm (1.75") de arista con bridas de sello de metal y colimadores en las caras de entrada y salida. A la celda se le inyecta un gas inerte (He). En la figura 3 se muestra un esquema de la celda.

La celda está montada en un manipulador de precisión, que mueve a toda la celda hacia arriba o abajo para alinear la entrada y salida de la celda con el eje del acelerador. La presión del gas en la celda se mide con un Baratrón. Medir la presión del gas en la celda es importante para garantizar que los iones moleculares colisionen solo una vez con los átomos del gas blanco, es decir, en un régimen de colisión simple. La corriente del haz se mide con una caja de Faraday retráctil colocada a la salida de la celda de gas.

Los fragmentos moleculares resultantes de la colisión con el gas He de la celda, se analizan dentro de la cámara de detección por medio de un par de placas analizadoras oblicuas, que separan a los fragmentos según su energía cinética y carga. El ángulo de separación entre cada placa y el eje del haz es de 11.5°.

La figura 4 es un esquema (las distancias indicadas están a escala) de la cámara de detección. El sistema de detección se basa en multiplicadores de electrones tipo Channeltron que pueden contar a los fragmentos iónicos de las moléculas. Hay tres detectores, uno está situado después del analizador electrostático de velocidades y sirve para contar los fragmentos que logran atravesarlo. Los otros dos están colocados para contar directamente los productos y se encuentran, uno, al mismo ángulo que el analizador, medido a partir del eje y el segundo al doble de este ángulo. Estos últimos detectores son nombrados en adelante detectores abiertos.

En el experimento no se utilizó el detector abierto a 13°, por encontrarse deficiencias en su señal de salida. Las señales de cualquiera de los detectores se pueden medir en forma independiente o en un sistema de coincidencias.

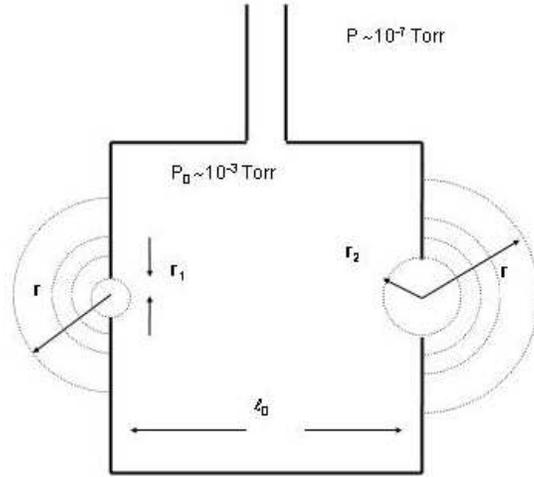


Figura 3: La celda de gas. Debido al gas, la presión dentro de la celda es cuatro órdenes de magnitud mayor que la presión en el resto del acelerador. Las dimensiones de la celda son $l_0 = 31.75 \text{ mm}$, $2r_1 = 0.5 \text{ mm}$ y $2r_2 = 1 \text{ mm}$. La condición de colisión simple se cumple si el camino libre medio de las partículas en el gas es mayor que las dimensiones de la celda, el camino libre medio es función de la presión en el interior de la celda, como se verá en la sección 2.1.7.

2.1.4. Análisis de energía con las placas analizadoras

Como se describió anteriormente, en la cámara de detección están colocadas unas placas conductoras llamadas *placas analizadoras*, a las que se les aplica un voltaje V_0 y entonces las trayectorias de las partículas cargadas que pasan por el centro de estas placas (ya sea del haz primario o de los fragmentos, en su caso) se curvan por efecto de la fuerza electrostática $q\vec{E}$, donde q es la carga de la partícula y \vec{E} es el campo eléctrico. Para el caso en que las placas sean paralelas, el campo eléctrico es constante: $E = \frac{V_0}{d}$, donde d es la distancia de separación, ver figura 5. Las trayectorias de las partículas cargadas se desvían, en la dirección perpendicular a la trayectoria del haz, una distancia y determinada por:

$$y = \frac{1}{2}at_D^2 \quad (6)$$

donde t_D es el tiempo de vuelo del fragmento dentro de las placas analizadoras y a la aceleración dada por:

$$a = \frac{qV_0}{md} \quad (7)$$

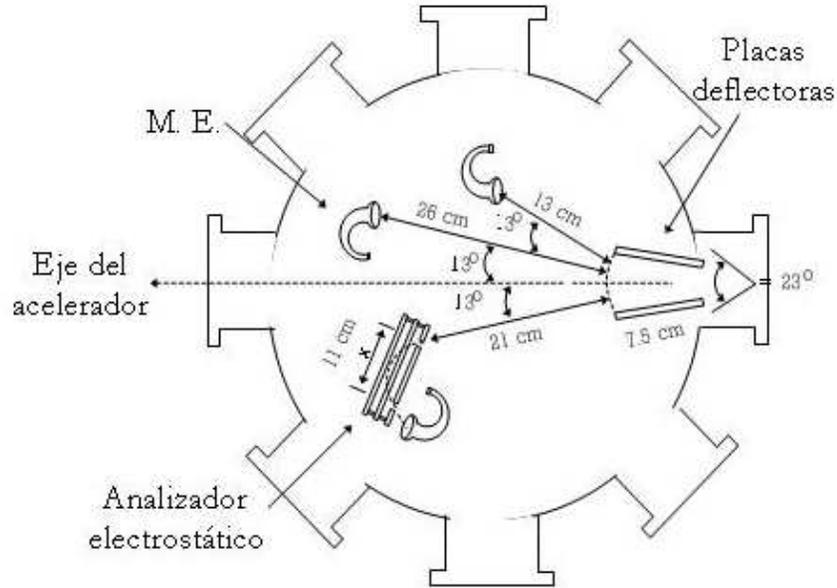


Figura 4: La cámara de detección. Las placas analizadoras oblicuas deflecan a los fragmentos positivos de la colisión por medio de una diferencia de potencial. El analizador electrostático de velocidades (en ocasiones es llamado analizador parabólico) es utilizado para medir la energía cinética de los fragmentos. Cada fragmento es detectado por medio de Multiplicadores de Electrones (M.E.) tipo *Channeltron*. En el texto se detalla el funcionamiento de cada componente.

en donde m es la masa de la partícula, q es su carga, V_0 el voltaje aplicado y d la distancia de separación.

El ángulo de deflexión de los iones a la salida de las placas, esta dado por el cociente entre las velocidades

$$\tan \theta = \frac{v_{\perp}}{v_{\parallel}}$$

donde v_{\perp} y v_{\parallel} son las componentes perpendicular y paralela de la velocidad.

La componente v_{\parallel} se obtiene a partir de la energía de aceleración, $E_{acel} = \frac{1}{2}mv_{\parallel}^2$ y $E_{acel} = qV_{acel}$ por lo que

$$v_{\parallel} = \sqrt{\frac{2qV_{acel}}{m}} \quad (8)$$

donde V_{acel} es el voltaje de aceleración, m y q la masa y carga del ión.

Un análisis de la fuerza que, por efecto del campo eléctrico entre las placas, actúa sobre la partícula nos permite encontrar la componente perpendicular de la velocidad v_{\perp} . Suponiendo que la velocidad inicial en la dirección perpendicular es cero, se tiene

$$v_{\perp} = at_D$$

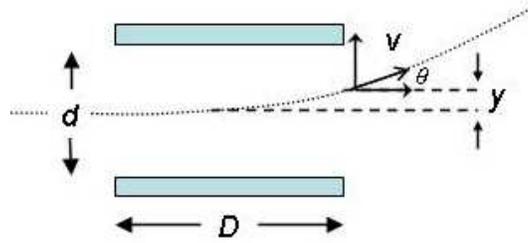


Figura 5: Esquema de unas placas analizadoras paralelas. La línea punteada representa la trayectoria de una partícula cargada al pasar a través de las placas. La fuerza del campo eléctrico constante desvía la trayectoria una distancia y del eje de simetría de las placas. v es la velocidad final de la partícula que sale con un ángulo θ respecto de la horizontal. En este análisis se desprecian los efectos de borde de los campos y los defectos de construcción como imperfecciones en las superficies y los errores de alineación. En el presente experimento se usaron placas oblicuas. Este análisis para placas paralelas, se usará para referencias futuras.

donde $t_D = \frac{D}{v_{\parallel}}$ es el tiempo de vuelo que tarda el ión en atravesar el largo D de las placas. Utilizando la ecuación (7) obtenemos

$$v_{\perp} = \frac{qDV_0}{mdv_{\parallel}} \quad (9)$$

Por lo que finalmente, se llega a una relación útil para el voltaje entre las placas V_0

$$V_0 = \frac{2d}{D} V_{\text{accel}} \tan \theta \quad (10)$$

En la figura 6 se presenta el ángulo de deflexión resultado de una simulación de trayectorias para iones de la misma velocidad y de diferente masa que entran en las placas analizadoras paralelas. Es posible separar las trayectorias porque los iones tienen diferentes energías cinéticas. De hecho, este es el caso en disociación molecular, los fragmentos y el centro de masas tienen la misma velocidad en el sistema de referencia del laboratorio y diferentes energías cinéticas. El caso de iones con masas cuya diferencia porcentual es muy pequeña, la energía cinética es casi la misma y es difícil separar las trayectorias. Este resultado es independiente del tamaño de las placas y de la forma del campo eléctrico, como se muestra en el siguiente caso de *placas analizadoras oblicuas*.

Las trayectorias de las partículas cargadas, en el caso del campo eléctrico entre placas analizadoras oblicuas, se determinan en forma similar a las del caso anterior; la diferencia es que ahora se trata de un problema bidimensional. En este caso la componente adicional produce aceleración en la dirección del haz primario. El campo eléctrico de las placas analizadoras oblicuas está dado por:

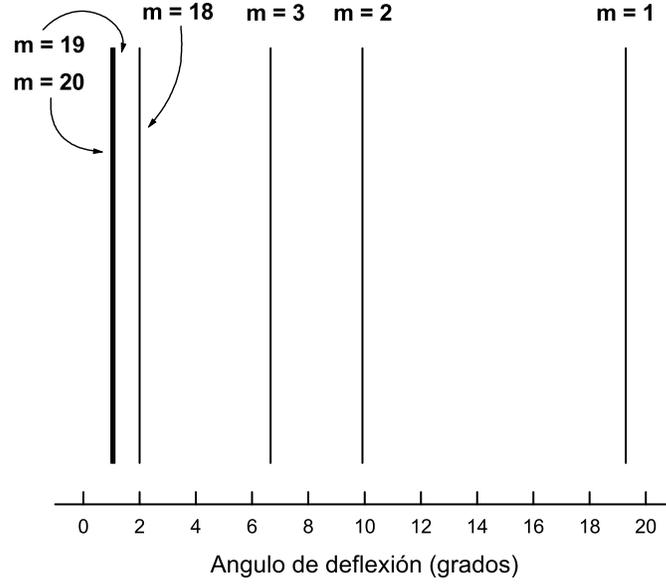


Figura 6: Separación entre iones de diferentes masas debida al campo eléctrico entre las placas analizadoras paralelas. Es posible separar iones con la misma velocidad y diferentes masas. Sin embargo, para iones con masas cuya diferencia porcentual sea pequeña, resulta complicado distinguir las trayectorias. Para lograr separar a los iones de masas similares es importante lograr condiciones óptimas de enfoque y colimación.

$$E = -\frac{V_0}{2\theta_0} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad (11)$$

en donde V_0 es el voltaje aplicado y θ_0 el ángulo de separación de cada placa con respecto a la horizontal (definida por el eje del acelerador). La ecuación (11) se tomó de la referencia [28].

Para encontrar las trayectorias de las partículas cargadas en este campo, se resolvió la ecuación (6) para las coordenadas y y x en intervalos de tiempo iguales, en cada punto se calcularon la aceleración y el ángulo de la trayectoria. Para más detalles se refiere al apéndice A. Como ejemplo, en la figura 7 se muestra la trayectoria de una partícula al pasar por entre las placas oblicuas.

En la práctica, las placas analizadoras oblicuas han presentado la desventaja de ser difíciles de alinear. Además, no presentan mejora alguna en términos de su capacidad para separar las trayectorias de las partículas con respecto a placas analizadoras paralelas. Por este motivo, se considera la perspectiva de reemplazar las placas oblicuas con un sistema

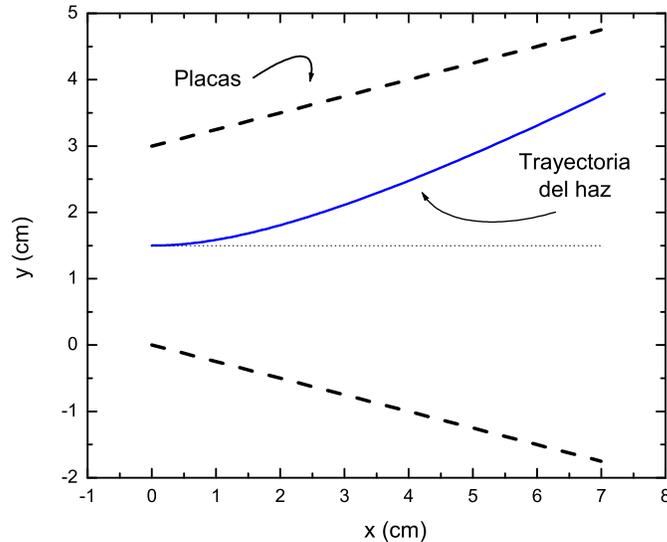


Figura 7: Trayectoria de una partícula de $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$ al pasar por el campo eléctrico generado por las placas oblicuas. En este caso la energía de cinética de la partícula es de 6000 eV y el voltaje aplicado a las placas es de 1600 V. La posición de las placas está indicada con líneas a trazos. En la simulación de las trayectorias se despreciaron los efectos de borde. El ángulo de salida de la partícula fue de 25.8° , que está en acuerdo con la posición del detector de 26° y con el voltaje aplicado a las placas en el experimento de 1600 ± 30 V.

de placas paralelas con aislamiento y conductores con resistencias para uniformizar el campo y disminuir los efectos de borde del campo eléctrico.

2.1.5. El analizador electrostático

Un dibujo esquemático del analizador de velocidades (relacionado con la energía cinética de cada fragmento) se muestra en la figura 4. El recorrido x de un ión a lo largo del analizador es, ver [28]

$$x = \frac{2mv^2}{q_e E} \sin \theta \cos \theta \quad (12)$$

donde v es la velocidad del fragmento, m su masa, q_e la carga unitaria, θ es el ángulo de entrada al analizador y E el valor del campo eléctrico dentro del analizador. E y θ se suponen constantes.

Los diámetros de los colimadores de entrada y salida d_1 y d_2 del analizador de energía

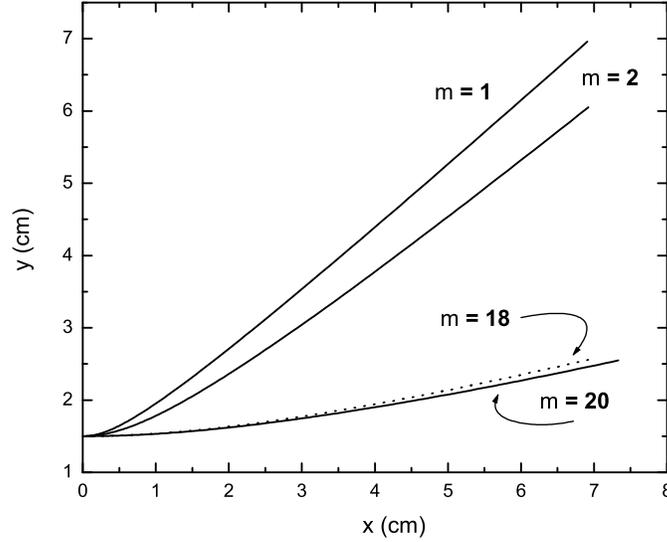


Figura 8: Trayectorias para partículas de diferentes masas atómicas en el campo eléctrico de las placas oblicuas. En este caso el voltaje aplicado a las placas es de 600 V y todas las partículas tienen la misma velocidad de entrada. Se observa que las trayectorias de masas similares son difíciles de separar puesto que tienen energías cinéticas parecidas.

definen un valor máximo y un valor mínimo para las velocidades de los iones en un campo eléctrico dado dentro del analizador. Se desea calcular la diferencia de estas velocidades y compararla con el valor mínimo de la velocidad para conocer los valores extremos del analizador. Se compara con la velocidad mínima puesto que esta razón es mayor que la razón entre la diferencia de velocidades y la velocidad máxima, y se espera considerar el peor de los casos.

Para poder comparar con el experimento se expresará la eficiencia en términos de la energía en el laboratorio E_L . Los recorridos máximo y mínimo $x_{máx}$ y $x_{mín}$ están relacionados con los diámetros de los colimadores por:

$$x_{máx} = x_{mín} + d_1 + d_2 \quad (13)$$

usando (12) para $x_{máx} - x_{mín}$,

$$x_{máx} - x_{mín} = \frac{2m}{q_e E} \text{sen } \theta \cos \theta [v_{máx}^2 - v_{mín}^2]$$

definiendo $\Delta E_L = 2m [v_{máx}^2 - v_{mín}^2]$ y sustituyendo en (13) se tiene,

$$\frac{\Delta E_L}{E_{L_{\min}}} = \frac{d_1 + d_2}{x_{\min}}$$

usando los valores medidos para el analizador, que son:

$$x_{\min} = 107.5 \text{ mm}, \quad d_1 = 3 \text{ mm} \text{ y } d_2 = 0.03 \text{ mm}.$$

la resolución del analizador resulta,

$$\frac{\Delta E_L}{E_{L_{\min}}} = 0.028 \quad (14)$$

para más detalles sobre las características del analizador se recomienda consultar las referencias [29, 30, 31, 32].

2.1.6. El sistema de conteo de partículas

Las partículas son contadas con multiplicadores de electrones (M.E.) de dinodo continuo. Es importante que los M.E. sean operados en condiciones de ganancia y de eficiencia óptimas. También es importante que las cuentas espurias (cuentas del fondo) sean eliminadas sin afectar la señal real. En la figura 9 se muestra un esquema de los multiplicadores de electrones y de sus conexiones. En el cuadro 1 se muestran los valores normales de operación de los componentes del M.E. La malla M ha sido colocada con el objeto de suprimir aquellos iones muy lentos que no provienen de la disociación y para mantener a los electrones secundarios al impacto iónico dentro del M.E. Para el caso de la medición de secciones transversales, esta malla es retirada.

La eficiencia de conteo del M.E. varía de acuerdo a la energía del ión incidente. Para determinarla se realiza una medición de distribuciones de altura del pulso como función del discriminador, que no se realizó en este trabajo de tesis ya que no se midieron secciones eficaces absolutas.

2.1.7. La presión base, el sistema de vacío

Parte fundamental del funcionamiento de cualquier acelerador de partículas es la presión en su interior, controlada a partir de su sistema de vacío. La presión del gas residual o vacío dentro del acelerador se mide en Torr, donde $1 \text{ Torr} = 1 \text{ mmHg} = \frac{1}{760} \text{ atm}$.

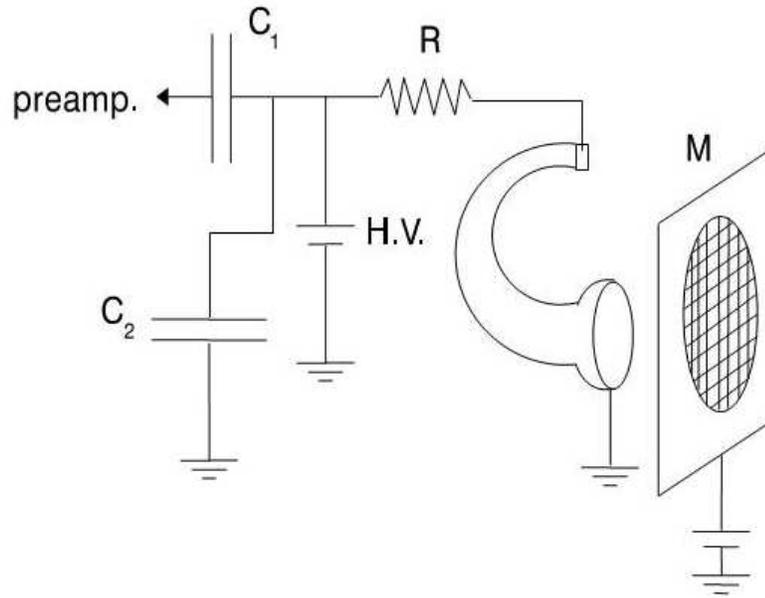


Figura 9: Conexiones de los multiplicadores de electrones (ME). Los multiplicadores utilizados se conocen como tipo *channeltron*, su funcionamiento se basa en provocar un pulso de corriente como respuesta a la colisión de un fragmento iónico en sus paredes. La colisión inicial provoca el desprendimiento de electrones que son atraídos de nuevo al interior del M.E. por medio de un potencial continuo, la avalancha de electrones crea el pulso de corriente. El sistema electrónico utilizado cuenta los fragmentos que han incidido en el M.E. a partir de cada pulso, previamente amplificado.

La longitud promedio, que puede desplazarse un ión antes de colisionar con alguna partícula del medio, se denomina camino libre medio L_s y se expresa como

$$L_s = \frac{1}{n\sigma_c} \quad (15)$$

donde n es el número de moléculas del gas residual por cm^3 y σ_c la sección transversal de colisión entre el ión y las partículas del medio.

El camino libre medio es función de la presión y de la temperatura. Utilizando la ley de Boyle $P = nkT$, expresada en unidades del sistema cgs, donde $k = 1.380658 \times 10^{-16} \text{erg} \cdot K$ es la constante de Boltzmann, obtenemos

$$n = \frac{1}{k} \frac{P_{[\mu\text{bar}]}}{T} = 9.65645 \times 10^{18} \left(\frac{P_\tau}{T} \right) \quad (16)$$

Resistencia R	1 M Ω
Capacitor C1	130 mF@5 kV
Alto voltaje (H.V.) Analizador	2.2 kV (DC)
Alto voltaje (H.V.) Detector abierto	1.8 kV (DC)
Voltaje aplicado a la malla	-28 V (DC)
Capacitor C2	0.01mF@10 kV

Cuadro 1: Valores normales de funcionamiento de los componentes del M.E. usados para la detección.

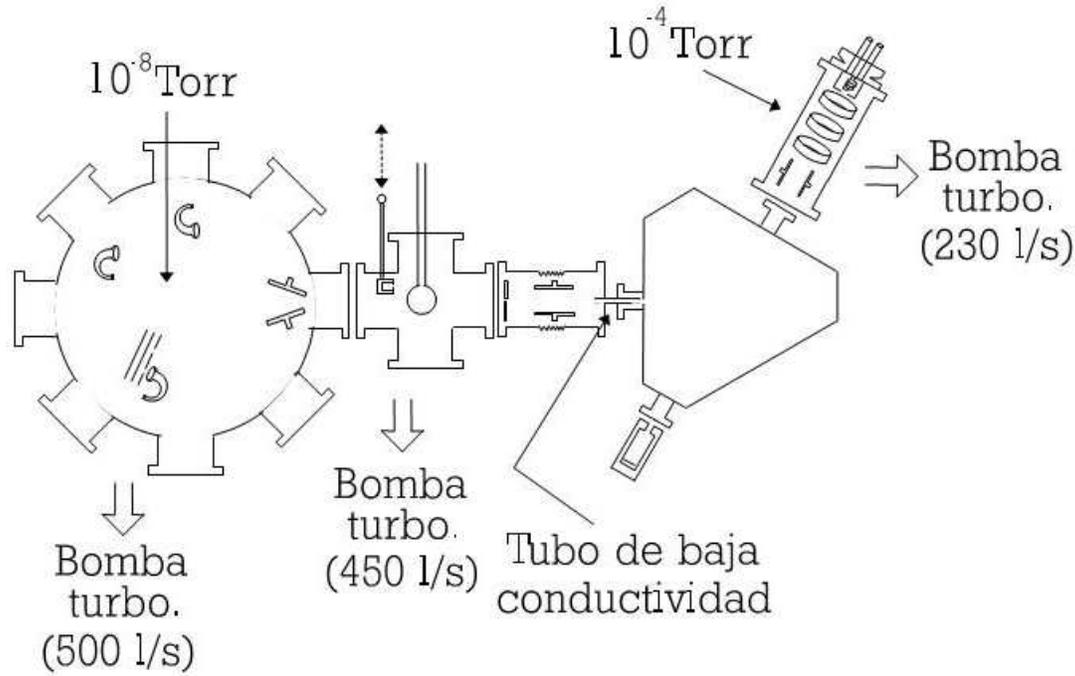


Figura 10: Sistema de vacío del acelerador. Consta de tres unidades de bombeo, La presión que se señala en la sección de la fuente es la presión de operación.

donde $P_{[\mu\text{bar}]}$ es la presión en microbar y P_{τ} es la presión en Torr.

Si se considera la colisión de iones de nitrógeno con un medio de nitrógeno, es decir, la colisión entre nitrógeno-nitrógeno, tenemos que el valor de la sección transversal de esta colisión es $\sigma_c = 4.5 \times 10^{-15} \text{cm}^2$ [33], y se tiene

$$L_s[\text{cm}] = \frac{1}{n\sigma_c} = \frac{1}{9.65645 \times 10^{18} \left(\frac{P_{\tau}}{T}\right)} \frac{1}{4.5 \times 10^{-15}} \quad (17)$$

Para $T = 298 \text{ K}$ y $P_{\tau} = 10^{-3} \text{ Torr}$, el camino libre medio para el nitrógeno es

$L_s = 6.85782 \text{ cm}$. Con la misma temperatura, pero con una $P_r = 10^{-7} \text{ Torr}$, el camino libre medio es $L_s = 68578.2 \text{ cm}$ que supera las dimensiones del acelerador.

Para minimizar las colisiones del haz con el gas residual (en su mayoría N_2) y por lo tanto garantizar que la identidad del haz se mantiene a lo largo de su trayectoria, el vacío se mantuvo a 10^{-7} Torr . En nuestro acelerador la presión base de las diferentes secciones se muestra en la figura 10.

Una bomba turbomolecular de 450 l/s de capacidad de bombeo en la sección donde está la celda de gas, se mantiene funcionando para desalojar el gas en la celda. Con estas condiciones, se alcanza una presión base cercana a 10^{-8} Torr dentro de la cámara de detección.

La región que aloja a la fuente de iones, es operada a una presión de $\sim 3 \times 10^{-4} \text{ Torr}$. Para evitar el flujo de gas de esta sección hacia las otras partes de acelerador debido a la diferencia de presión y mantener el resto del acelerador a una presión baja, existe un tubo delgado a la salida del espectrómetro magnético. Con este tubo se logró una baja conductancia [34] entre estas dos secciones del sistema de vacío. El sistema de vacío, cuenta con detectores tipo Piranni y “Ion Gauge”.

2.2. Nuevo programa para el sistema de control y adquisición de datos (LabVIEW)

Para el control del experimento en el acelerador de iones atómicos y moleculares, y para la adquisición de datos, se contaba con un sistema Keithley 570 de 8 bits que solamente es compatible con una computadora personal tipo AT (que data de los años 80). Debido a que sus componentes están descontinuados, su mantenimiento es cada vez más difícil, además el sistema resulta obsoleto y costoso debido a su baja resolución, velocidad de procesamiento y el tiempo que se necesita invertir en su mantenimiento.

En la preparación de este trabajo de investigación experimental, motivados por la necesidad de contar con un sistema de control eficaz, escalable y de fácil operación para el acelerador, se sustituyó al antiguo sistema por un sistema computacional desarrollado con programas de LabView, versión 6.0. Este nuevo sistema se apoya en la utilización de una tarjeta controladora de National Instruments, modelo NI PCI 6014.

LabVIEW (Laboratory Virtual Instrumentation Engineering Workbench) es un lenguaje de programación gráfica -también llamado lenguaje G- diseñado por National Instruments. Los programas hechos con LabView se llaman VI (Virtual Instrument) y su uso es actualmente, muy extendido en la industria y en los laboratorios de los institutos de investigación.

Es usado para tareas como la adquisición de datos, el control de instrumentos, la automatización industrial y el diseño de control. LabView es relativamente fácil de usar y permite hacer programas complejos en poco tiempo, dado que los programas no se escriben, sino que se dibujan.

Un programa VI de LabView se divide en dos partes, el Panel Frontal y el Diagrama de bloques. El Panel Frontal es la interfaz con el usuario, en él se definen los controles e indicadores que se muestran en pantalla y que el usuario puede manipular. El Diagrama de Bloques es el código del programa, aquí se colocan iconos que realizan determinadas funciones y se interconectan siguiendo reglas establecidas.

Para realizar las mediciones en este experimento se utilizó un contador marca ORTEC modelo 995. La función de este dispositivo es registrar el número de cuentas, pulsos provenientes de la electrónica asociada al detector, que se corresponden al número de partículas detectadas. Utilizando una salida de tipo serial provista en el contador, se programó la aplicación *contador.vi* para la operación remota de las funciones *Count*, *Stop*, *Reset* desde la PC. El usuario decide el intervalo de tiempo de operación y el programa lee y registra en memoria los valores del *display* del contador. Con esta nueva aplicación se logra la automatización del registro de datos durante el experimento, ver figura 11.

El programa *fuentes de poder.vi* manipula desde la PC el voltaje de una fuente de poder de 0 a 5000 volts. Esta fuente se utilizó en el experimento para operar las placas analiza-

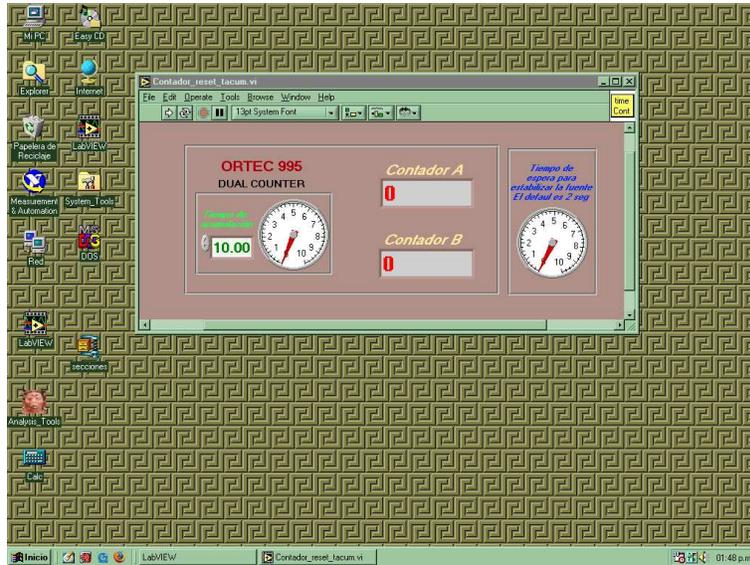


Figura 11: Instrumento virtual *contador.vi* programado en LabVIEW para manipular remotamente el contador ORTEC 995. El usuario fija el tiempo de acumulación de datos y el programa muestra el número de fragmentos o cuentas que se detectaron durante este tiempo en el ME.

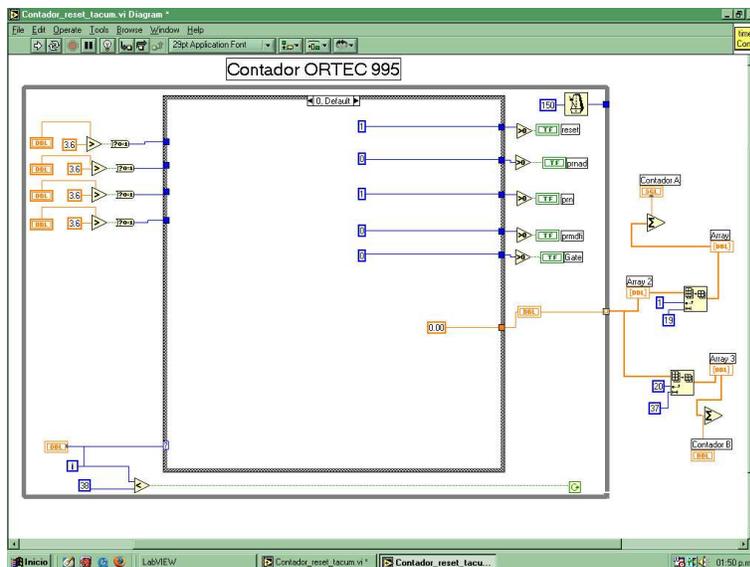


Figura 12: Código de programación en LabVIEW del programa *contador.vi*. Las líneas conectan a los distintos valores numéricos o lógicos y a los operadores y rutinas definidas por el programa.

doras oblicuas o para aplicar el voltaje en el analizador electrostático de velocidades. El programa controla el voltaje aplicado a una entrada analógica en la fuente, de manera tal que, sí se aplica una diferencia de potencial de 0 a 9 volts, la salida de la fuente de poder varía linealmente entre 0 volts y hasta un máximo de 5000 volts. El programa incluye

la ecuación de calibración de la fuente de poder, lo que permite al usuario fijar con una incertidumbre de 1 % un voltaje de 0 a 5000 volts, ver la figura 13.

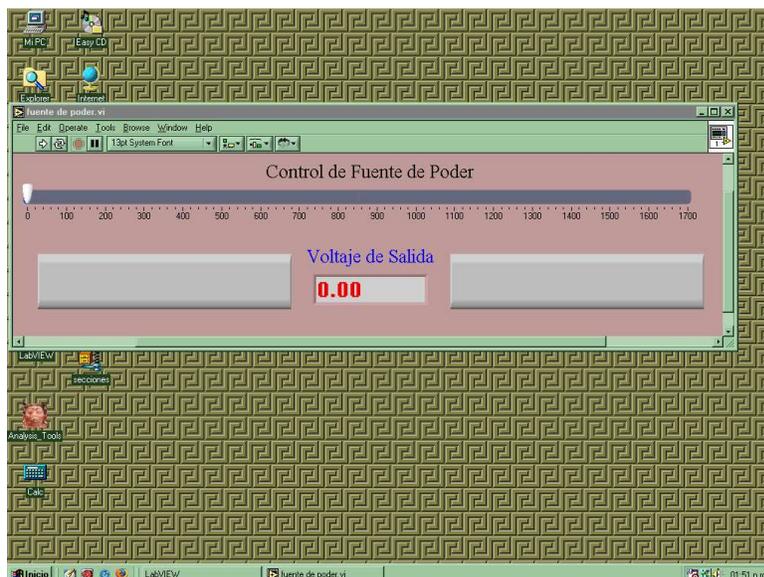


Figura 13: Instrumento virtual *fuente de poder.vi*, su función es controlar con precisión del 1 % el voltaje de salida de una fuente de poder de 0 a 5000 V. En el experimento este potencial es aplicado a las placas analizadoras (que separan a los fragmentos del haz resultante de la colisión) o puede aplicarse al analizador electrostático (que permite obtener la energía cinética de los fragmentos a partir de la velocidad de los mismos).

La aplicación *electrometro.vi* muestra en la pantalla la lectura de un electrómetro digital KEITHLEY 616, ver figura 14. Este instrumento sirve para medir la corriente que proviene de las cajas de Faraday instaladas en el acelerador. La corriente medida está relacionada directamente con el número de iones que viajan en el haz. Este programa se usa para optimizar la intensidad de los haces a la salida del electroimán, puesto que, mientras el usuario modifica el campo magnético en el electroimán, puede ver como se desplaza el indicador (círculos con una aguja en la figura) y localizar el máximo de la corriente producida por ese haz.

Spectrum.vi es el programa más importante en el experimento. Este programa se encarga de manipular en forma simultánea y controlada al contador ORTEC 995 y a la fuente de poder. El programa aplica un voltaje inicial a las placas oblicuas (o al analizador de velocidades, según sea necesario) y enciende al contador ORTEC 995 durante un intervalo de tiempo fijo. Registra el valor del voltaje de la fuente y el número de cuentas del contador y los guarda en un archivo temporal. Enseguida, el programa varía -en intervalos iguales- el voltaje aplicado, enciende nuevamente el contador y registra de nuevo el par de datos. Concluye la toma de datos hasta que se aplica el voltaje final y se registran las cuentas. A continuación, el programa guarda los datos en un archivo final y con ellos

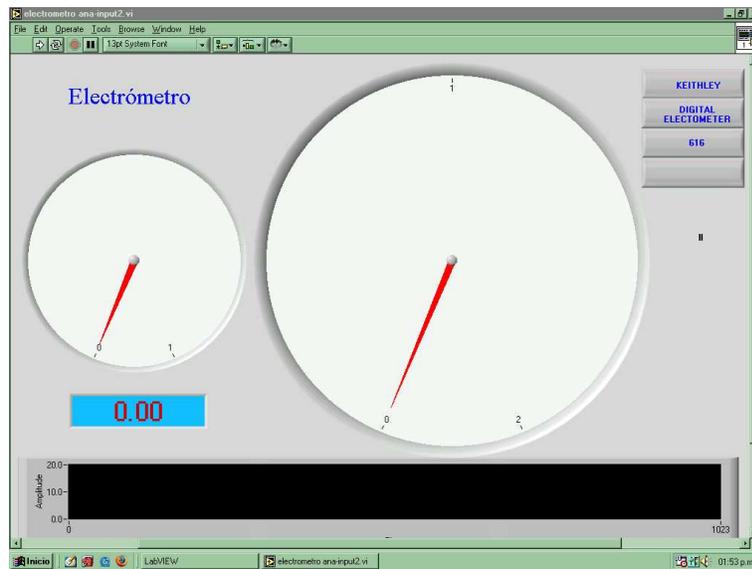


Figura 14: Instrumento virtual *electrometro.vi*, su función es mostrar en la pantalla de la PC la lectura del display de un electrómetro KEITHLEY 616. Las corrientes medidas son del orden de nA. Los dos indicadores de aguja miden la misma corriente, aunque el indicador pequeño es más sensible. En la gráfica inferior se muestra la intensidad del haz conforme transcurre el tiempo (I vs t), esto permite estimar la estabilidad del haz durante el experimento.

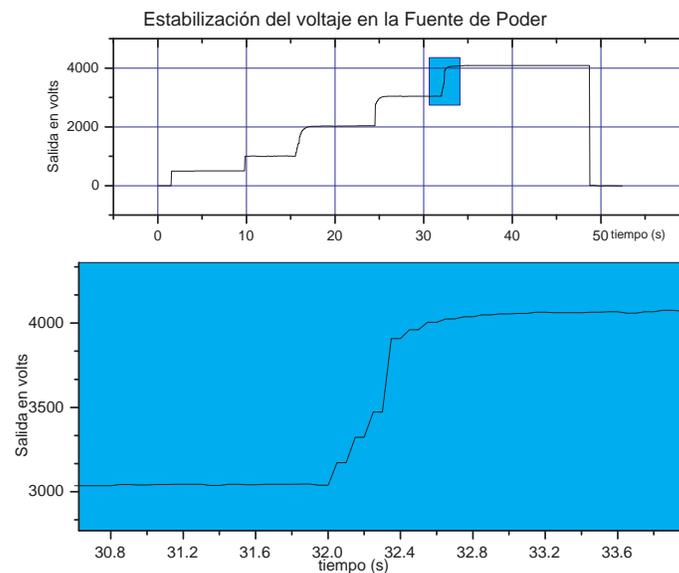


Figura 15: Respuesta en el tiempo del voltaje en la fuente de poder. Este experimento se realizó para determinar que el tiempo típico de estabilización es de 1.5 s.

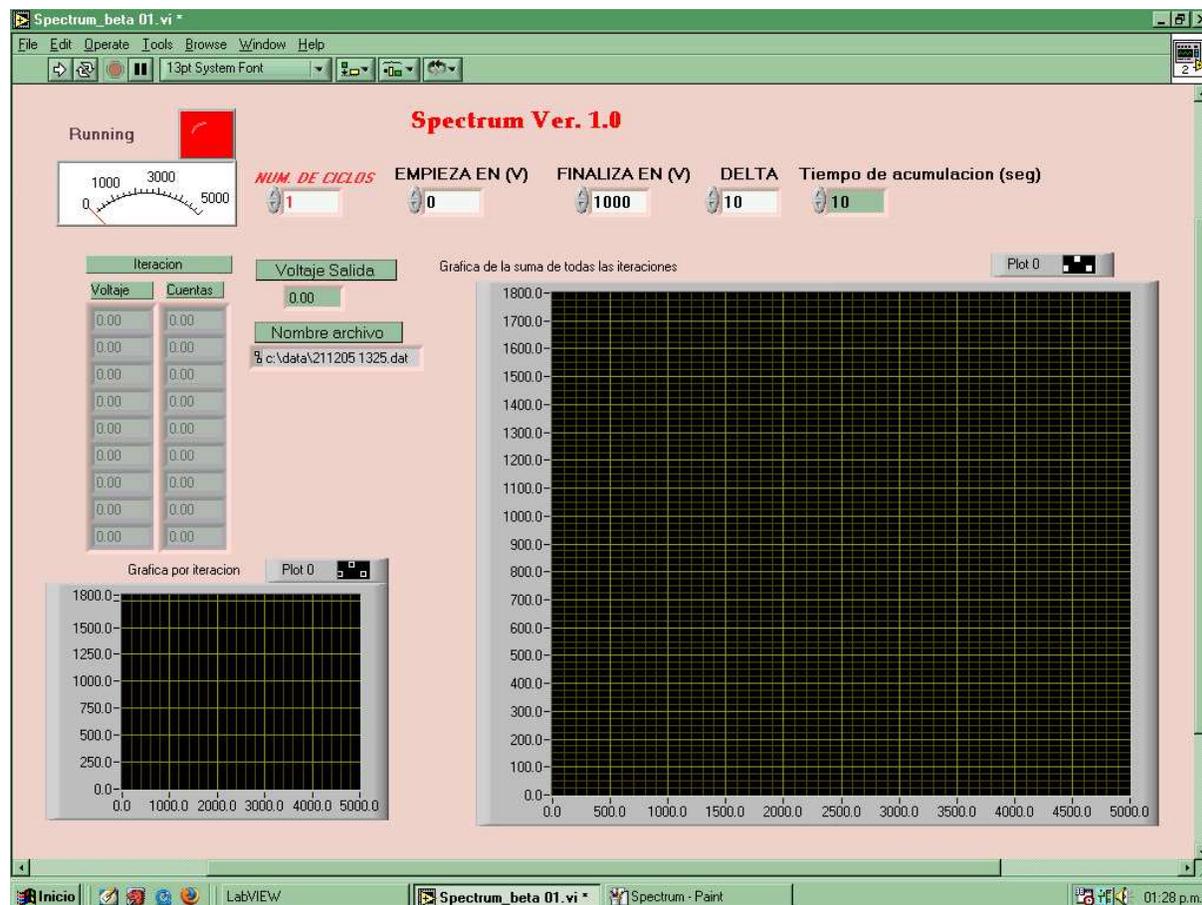


Figura 16: Instrumento virtual *Spectrum.vi*, este programa automatiza el registro de datos durante el experimento. El programa se encarga de construir los espectros. Para esto el programa aplica por pasos un voltaje al analizador electrostático (o a las placas analizadoras) y grafica el voltaje en el eje X y el número de cuentas detectadas en el eje Y. En la gráfica de la derecha se obtiene la suma de los espectros después de transcurridos todos los ciclos, en la gráfica de la izquierda solo los datos que se obtienen durante un ciclo. No se muestran espectros en esta figura.

grafica el voltaje y las cuentas para formar un espectro. El programa *Spectrum.vi* puede hacer esta operación en ciclos, esto es, guardar en un archivo temporal el espectro actual y empezar uno nuevo, al finalizar todos los ciclos, el programa suma todos los espectros en un solo archivo. Este procedimiento mejora la estadística del experimento, sin embargo, solo puede realizarse si la estabilidad del haz lo permite.

Cuando se controla externamente a la fuente de poder, es necesario esperar un tiempo aproximado de 1.5 segundos para que el voltaje de salida se estabilice, este tiempo es considerado en el programa *Spectrum.vi* antes de la toma de datos para no introducir errores, ver figura 15.

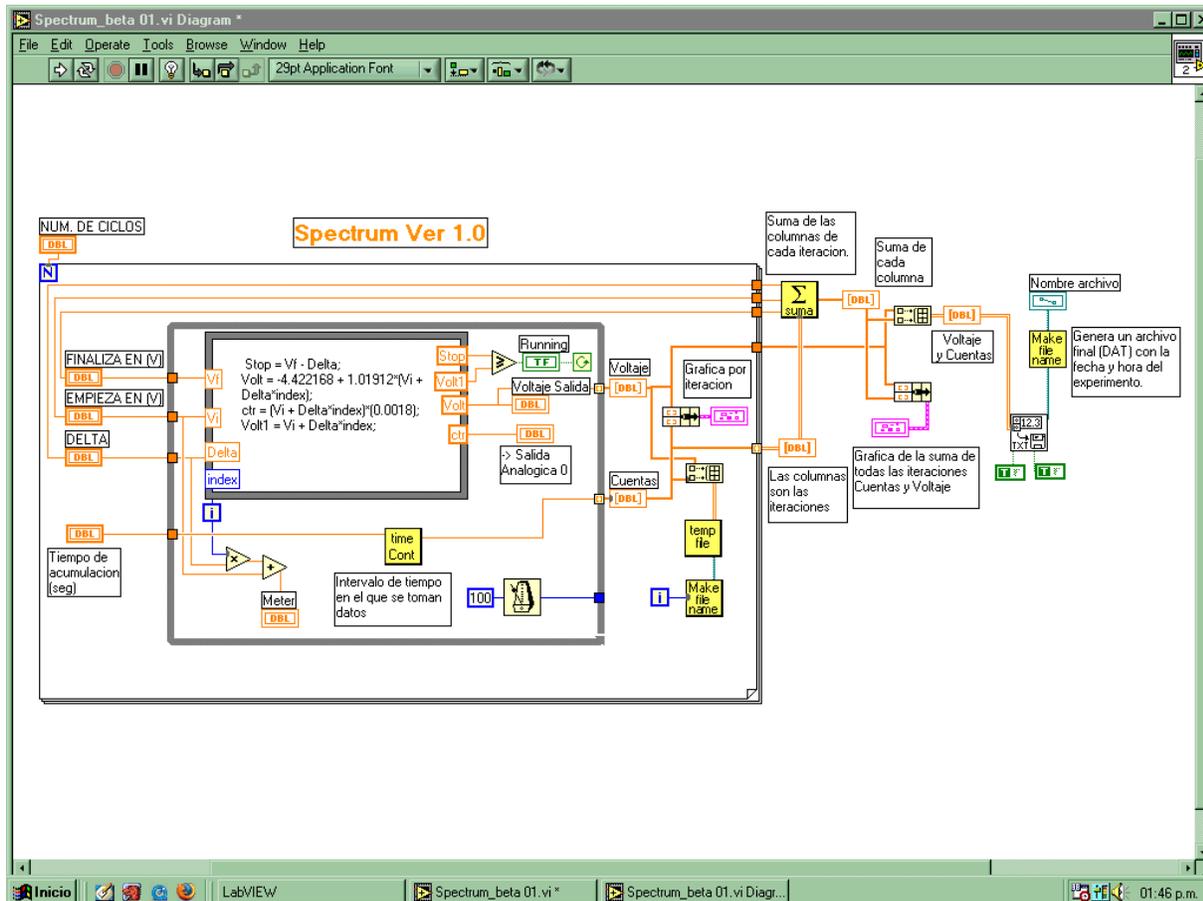


Figura 17: Código del programa *Spectrum.vi* que, como se ha mencionado, se escribe en un lenguaje gráfico. Como subrutina del programa se utiliza el código del programa *contador.vi*, que se representa como un pequeño recuadro de nombre *time Cont* en la parte inferior de la figura. El programa funciona en ciclos, cuyo número es definido por el usuario, en cada ciclo se ejecutan las instrucciones necesarias para crear un espectro (contenidas en el recuadro exterior). La suma de todos los espectros se escribe en un archivo de salida con extensión *.dat* para su posterior análisis.

3. Generación de un haz de agua

La producción de un haz de agua es por sí mismo, un reto técnico. Hasta donde se logró revisar en la literatura, solo existe un antecedente de la generación de un haz acelerado de agua, realizado en un experimento por Zajfman *et al.* en 1991 [35].

Estos autores bombardearon con electrones a 40 eV un gas de vapor de agua dentro de una fuente de iones a una presión de 10mTorr. Los iones moleculares que se formaron, son extraídos de la fuente y acelerados a una energía de 4.230 MeV en el *Argonne 4.5 MV Dynamitron accelerator*. El haz es analizado en masa por un sistema magnético y disociado en una película delgada de Formvar. El objetivo de su trabajo es medir la distribución del ángulo en el enlace de la molécula H_2O^+ .

Algunas razones para que otros autores no hayan producido haces de moléculas de agua son la dificultad de generar un haz estable, el riesgo inminente de contaminación por agua en el sistema de vacío y, como se verá en este capítulo, la contaminación del haz con moléculas de NH_4^+ .

En este capítulo se presenta un método para la producción del haz y la propuesta de utilizar el haz de agua formado por el isótopo ^{18}O que tiene la ventaja de no estar contaminado. Se observó que el haz de $(\text{H}_2^{18}\text{O}^+)$ es suficientemente estable y que presenta variaciones de menos del 20 % en un intervalo de una hora, que excede en mucho el tiempo típico para la toma de datos.

3.1. Preparación del reservorio de agua

En la fuente de iones pueden ocurrir reacciones de ionización y disociación entre los elementos que componen a la mezcla de gases. Estos son procesos complejos que ocurren en el interior del plasma y su conocimiento es empírico. El plasma en la fuente de iones es formado principalmente por argón de una ultra-altapureza 99.999 %. El cual está contenido a presión en un recipiente cilíndrico metálico de 500 cm^3 . Por medio de una válvula se controla la entrada del argón a la fuente, si la presión del gas dentro de la cámara no es la adecuada, no se formará el plasma. Un vapor de agua es introducido a la cámara del plasma, donde se ioniza y las moléculas del catión de agua forman el haz. El agua se encuentra en un reservorio conectado a la fuente con una válvula. En un tanque metálico idéntico al del Ar se introdujeron 50 ml de agua triple destilada. Para garantizar la pureza del haz se desalojó el aire -y el nitrógeno- que pudiera estar disuelto en el agua. Para esto, primero se congeló el agua del interior del recipiente al introducirlo en un baño de nitrógeno líquido y se bombeó la salida del tanque con una bomba mecánica de vacío que redujo la presión a aproximadamente 10^{-2} Torr durante 10 minutos, después de lo cual se repitió el proceso y se instaló el reservorio de agua en la fuente.

El procedimiento de drenar los gases disueltos en el agua, congelándola con nitrógeno líquido ha sido reportado en [5] y [9].

3.2. Las fuentes de contaminates

En la figura 18 se muestra el espectro de todos los iones que se producen en la fuentes de iones, los cuales son deflectados por el espectrómetro de masas. Cada punto representa una especie que se caracteriza por su masa a partir de la ecuación (5). Se identifican en la gráfica haces de N^+ , N_2^+ y NO^+ . La existencia del nitrógeno en estas especies es un indicativo de la contaminación por fugas en el sistema de la fuente de iones o por desintegración de la fuente de iones que esta hecha de nitruro de boro.

El nitrógeno de la fuente forma varias moléculas al asociarse con hidrógeno y oxígeno, en particular iones de NH_4^+ que tienen masa 18 (en u.a.). Este ion al tener la misma masa y carga que el H_2O^+ , es deflectado por el imán en la misma trayectoria y ambos viajan juntos, sin poder distinguirlos.

La presencia de la molécula B_2^+ se debe a que la fuente de iones está fabricada con boro (el compuesto es nitruro de boro), y es un indicativo de que las paredes de la cámara de la fuente de iones se desintegran durante el experimento, por lo que la propia fuente constituye un contaminante de nitrógeno. Para evitar la contaminación por nitrógeno proveniente de la fuente se tiene la perspectiva de instalar una fuente fabricada con cuarzo.

3.3. El haz de $H_2^{18}O^+$

Dado que no fue posible aislar el haz del catión de agua con el del ion NH_4^+ , se decidió utilizar el catión de agua isotópica formado por dos átomos de hidrógeno 1_1H y el isótopo del oxígeno $^{18}_8O$, cuya observación en el espectro de masas de la figura 18 constituyó un hallazgo experimental.

La masa del ión $H_2^{18}O^+$ es 20 en unidades atómicas, la intensidad de la corriente del haz, medida en la caja de Faraday de la cámara de detección es dos veces menor que la intensidad del haz de $H_2O^+ + NH_4^+$ como puede observarse en la figura 18.

Un punto delicado al usar la molécula de $H_2^{18}O^+$ en este experimento es asegurarse que no se tiene la presencia de D_2O^+ . Esta molécula tiene la misma razón masa-carga que la de $H_2^{18}O^+ \sqrt{\frac{m}{q}} = 20$, sin embargo, como se muestra en la figura 19 la abundancia natural del isótopo 2_1D es 13.6 veces menor a la del $^{18}_8O$. Estimamos que la formación de D_2O^+ es escasa comparada con $H_2^{18}O^+$ y además, en el análisis posterior en energía de los fragmentos no encontramos evidencias de su presencia, como sería la formación de

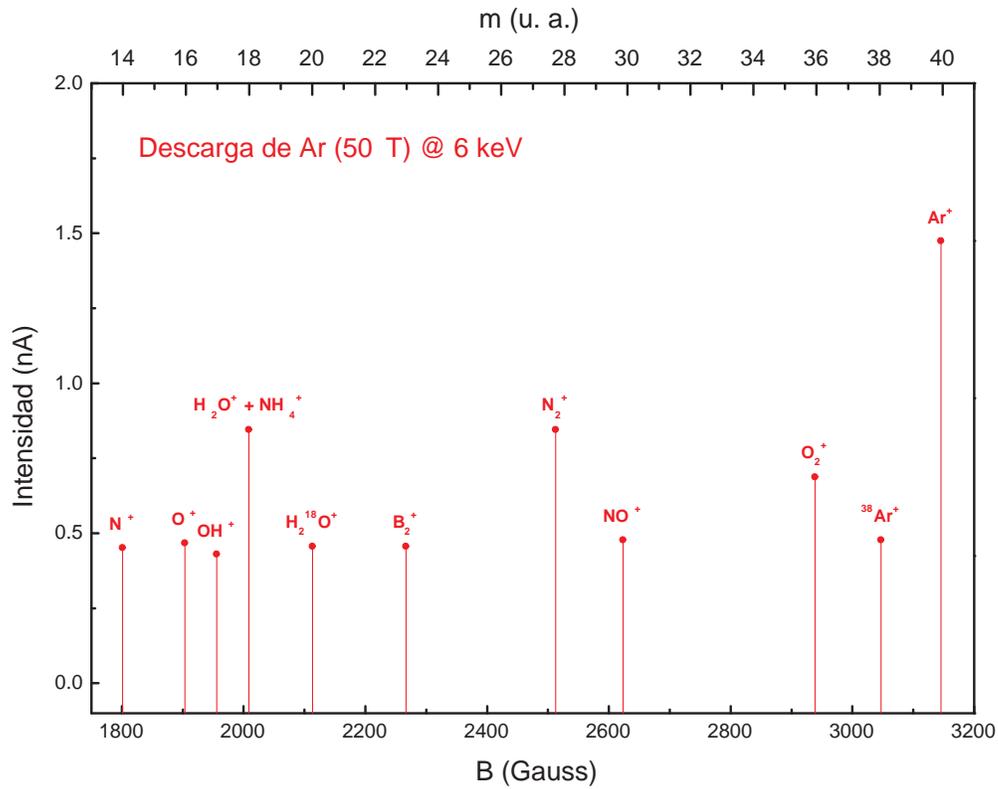


Figura 18: Espectro de masas de la salida de la fuente de iones a 6 keV. Se observa la presencia de especies con nitrógeno como N^+ , N_2^+ , NO^+ de lo cual se concluye que la fuente de iones esta contaminada por nitrógeno (ver texto). La presencia de $H_2^{18}O^+$ constituyó un hallazgo.

D, HD o D_2 . Por lo que la contaminación del haz de $H_2^{18}O^+$ por la molécula de D_2O^+ quedó descartada.

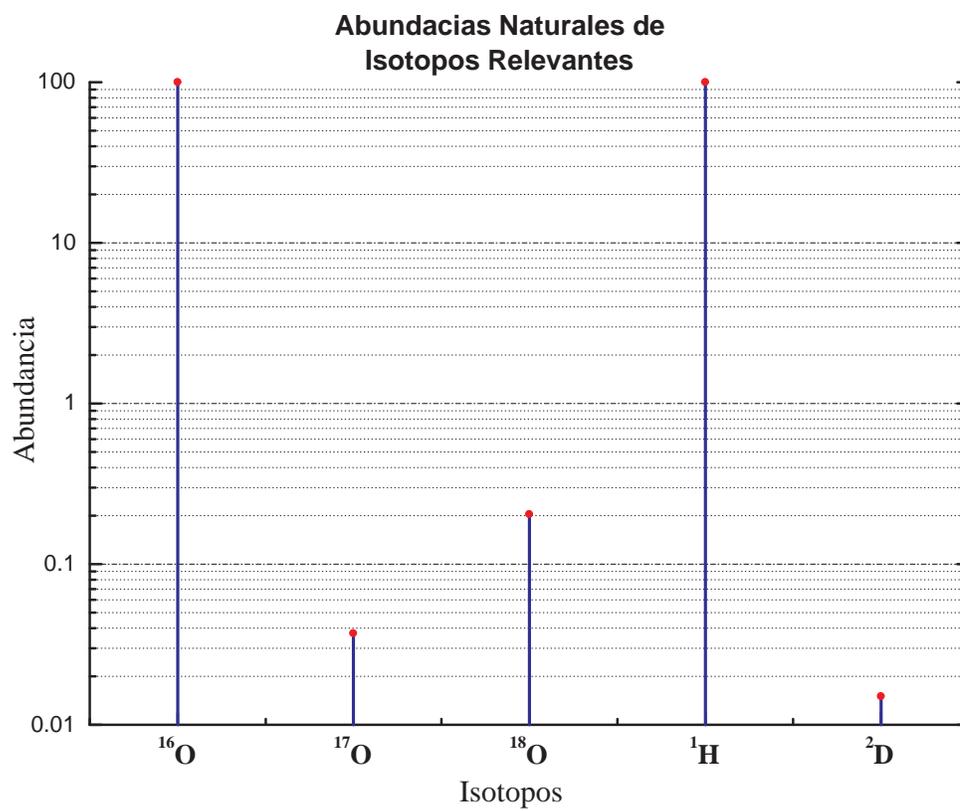


Figura 19: Abundancia natural de los isótopos del O y H. La abundancia natural del deuterio es pequeña comparada con la abundancia del ^{18}O .

4. Análisis de los espectros de colisión de $H_2^{18}O^+$ con He

La dinámica de la disociación de una molécula se puede comprender con más detalle cuando se observan los resultados experimentales desde el punto de vista del Sistema de Referencia de su Centro de Masas (SR-CdeM) del haz compuesto por iones moleculares. Los espectros en energía de los fragmentos iónicos contienen información sobre la estructura interna de la molécula que se ha disociado, así como sobre la interacción con el gas blanco (de la celda). Para el caso de moléculas diatómicas, es posible determinar las energías internas de los canales de disociación con gran precisión. Para el caso de la disociación de moléculas triatómicas, se pueden derivar algunos *umbrales* de energía interna y aspectos cualitativos sobre la dinámica de la disociación. La transformación de los espectros del Sistema de Referencia del Laboratorio (SR-L) al SR-CdeM tiene dos aspectos, la energía y la intensidad.

Uno de los objetivos de este trabajo de tesis, es documentar los métodos de análisis de la energía y de la transformación al SR-CdeM de la intensidad de los espectros obtenidos en el sistema del laboratorio para el presente sistema experimental. A continuación, se presentarán los aspectos más fundamentales de estos métodos, en el apéndice B se encuentra el programa que se utilizó para realizar la transformación.

En el texto las ideas principales se introducirán con base al caso de la disociación en dos cuerpos, y cuando se dé el caso, la exposición se extenderá, dentro de lo posible, al caso de la disociación en tres cuerpos. Se sugiere consultar [28] para mayor información.

En contraste a las referencias que se han utilizado en el pasado para el análisis de los espectros [28, 36], en esta tesis, se explican los aspectos fundamentales de una forma más accesible.

4.1. Análisis de la energía cinética en el SR-CdeM

La energía cinética de los fragmentos E_L se puede obtener a partir de los espectros medidos en el laboratorio usando la relación vectorial de las velocidades del fragmento \vec{v} y la del centro de masas \vec{V}_0 ¹. La velocidad final del fragmento de masa m_f está dada por la suma vectorial: $\vec{V}_0 + \vec{v}$ (ver el recuadro de la figura 20), donde \vec{v} es la velocidad del fragmento en el SR-CdeM. La energía cinética del fragmento en el SR-L está determinada por:

¹ V_0 es la velocidad del centro de masas antes de la colisión, si la energía inelástica de la colisión Q es cero, $V_0 = V_{CM}$

$$E_L = \frac{1}{2}m_f (V_0 \pm v)^2 + Q \quad (18)$$

donde V_0 es la velocidad del centro de masas antes de la colisión y Q la energía inelástica de la colisión.

La energía del centro de masas después de la colisión es $E_L - Q$, la ecuación (18) puede escribirse agrupando de una forma conveniente:

$$E_L - Q = \frac{1}{2}m_f V_0^2 \pm m_f V_0 v + \frac{1}{2}m_f v^2,$$

$$E_L - Q = \frac{m_f}{M} \left(\frac{1}{2} M V_0^2 \right) \pm 2 \left(\sqrt{\frac{m_f}{2}} v \right) \left(\sqrt{\frac{M}{2}} V_0 \right) \sqrt{\frac{m_f}{M}} + \frac{1}{2} m_f v^2 \quad (19)$$

que al sustituir las ecuaciones:

$$E_0 = \frac{1}{2} M V_0^2$$

$$\epsilon = \frac{1}{2} m_f v^2$$

$$\sqrt{E_0} = \sqrt{\frac{M}{2}} V_0$$

$$\sqrt{\epsilon} = \sqrt{\frac{m_f}{2}} v$$

donde ϵ es la energía del fragmento en el SR-CdeM. Además, con el cambio de variable $\epsilon \equiv x^2$ la ecuación (19) queda:

$$x^2 \pm 2\sqrt{E_0}\sqrt{\frac{m_f}{M}}x + \left(\frac{m_f}{M} E_0 - E_L \right) = 0 \quad (20)$$

en donde se ha hecho la aproximación $Q = 0$. Esta aproximación es válida porque Q es normalmente muy pequeña comparada con E_L , de manera que $E_L - Q \approx E_L$. Sin embargo, el análisis de las energías cinéticas de los fragmentos en el SR-CdeM no se ve afectada por dicha aproximación cuando se hace una selección cuidadosa de la velocidad del *nuevo* centro de masas, el cuál, corresponde al centro en el espectro de energía del fragmento de que se trate, este centro se puede extraer del ajuste a una curva Gaussiana. Además, el efecto de Q consiste en desplazar a todos los espectros en el SR-L. Por esta razón es posible realizar el análisis de los espectros de los fragmentos y después, con una medición independiente, determinar Q . La ecuación de transformación para la energía

(ecuación 20) se resuelve para x^2 de donde se obtienen las energías en el centro de masas ε para cada energía medida en el SR-L: E_L . Una expresión conveniente para realizar la transformación con un código de computadora es:

$$\sqrt{\varepsilon(i)} = \mp \sqrt{E_0 \frac{m_f}{M}} \pm \sqrt{E_L(i)} \quad (21)$$

donde $\varepsilon(i)$ y $E_L(i)$ son las energías en el centro de masa y en el laboratorio, respectivamente, asociadas al punto i en el espectro. En el apéndice B, se presenta el programa que se utilizó para realizar la transformación.

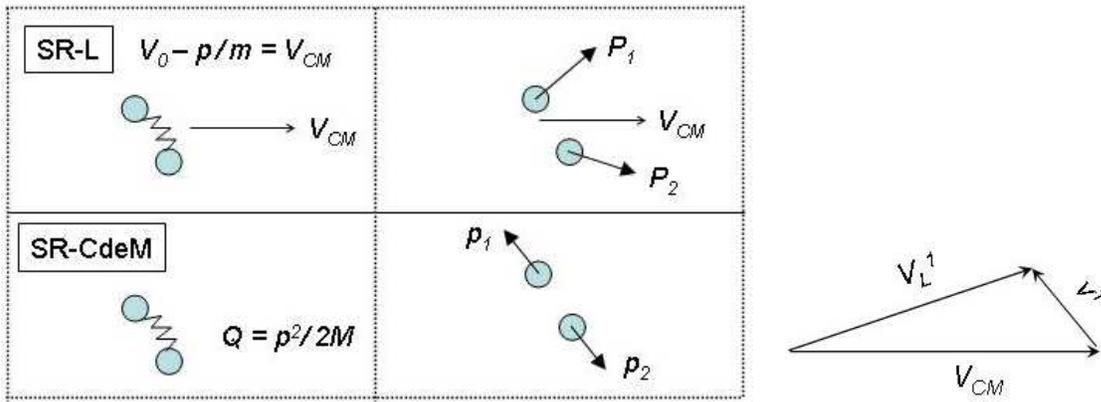


Figura 20: Comparación del proceso de disociación visto desde el punto de vista del Sistema de Referencia del Laboratorio (SR-L) y del Sistema de Referencia de su Centro de Masas (SR-CdeM). La energía inelástica de la colisión Q está dada por $Q = p^2/2M$, donde p es el momento transferido durante la colisión y $M = m_1 + m_2$ es la masa de la molécula. V_0 es la velocidad de la molécula antes de la colisión, V_{CM} es la velocidad del centro de masas, P_1 y P_2 son los momentos de los fragmentos en el SR-L y p_1 y p_2 son los momentos de los fragmentos en el SR-CdeM. A la derecha: V_L^1 es la velocidad del fragmento 1 en el SR-L y v^1 la velocidad del fragmento en el SR-CdeM.

Para ilustrar con más claridad, en la figura 20 se muestra la secuencia de disociación en dos cuerpos desde el punto de vista del SR-L (parte superior) y desde el punto de vista de SR-CdeM (parte inferior). En el SR-L, los fragmentos se alejan a velocidades resultantes de la suma vectorial de la velocidad del centro de masas en el laboratorio V_{CM} más las velocidades que ganan los fragmentos al disociarse (v). Desde el SR-CdeM, los fragmentos parecen alejarse uno del otro con las velocidades que resultan de la energía que han ganado debido a la energía interna de la molécula. En el SR-L los fragmentos parecen *dispersarse* en la dirección de propagación del haz paterno determinada por \vec{V}_{CM} , mientras que en SR-CdeM, los fragmentos parecen *alejarse* uno del otro en direcciones opuestas con momentos p_1 y p_2 respectivamente.

4.2. Análisis de la intensidad de los espectros en el SR-CdeM

El presente método está basado en el método de Anderson [36] y en la función de transmisión de Folkerts *et al.* [37]. La función de transmisión de Folkerts *et al.* [37] se diseñó para un experimento sobre la disociación de CO inducida por colisión con He^{2+} . En este caso, los estados de carga del proyectil se midieron en coincidencia con los iones de CO y sus fragmentos iónicos. Para el proyectil, utilizaron un detector sensible a la posición con análisis electrostático, y para los iones de CO, utilizaron un espectrómetro de iones de retroceso. Los fragmentos producto de la disociación, viajaban a través de un diafragma de diámetro fijo, situado enfrente del detector del espectrómetro. Ellos simulaban *esferas dinámicas* cuyo radio era función del tiempo de vuelo. La sección de las esferas dinámicas que llegan al detector después de pasar por el diafragma, depende de la energía de los fragmentos, de su masa, de su estado de carga y del diámetro del diafragma. En su cálculo de la función de transmisión, debieron tomar en cuenta, la retrodispersión de los fragmentos iónicos.

Anderson [36] estudió la disociación de H_2^+ y D_2^+ inducida por colisión con gases inertes. Él, midió sus espectros con un analizador de velocidades similar al usado en este trabajo. Para obtener su función de eficiencia, supuso que las distribuciones angulares de los fragmentos son isotrópicas y derivó expresiones analíticas para la integral correspondiente a la ecuación (23). Su análisis parte de que la intensidad medida, resulta de la integral del ancho de la función de aceptación dinámica y la función del ancho del analizador. Finalmente, con integración numérica, deriva una función general de eficiencia para analizadores con cualquier ángulo de aceptación. En la práctica, como los analizadores tienen anchos de aceptación fijos, o anchos de aceptación total (4π), no es necesario resolver una función *general* de eficiencia.

La función de eficiencia del analizador en este trabajo, es un cálculo numérico similar al de Anderson, basado en que la intensidad medida es proporcional al ancho de aceptación del analizador y a la función de aceptación dinámica. El ángulo dinámico se determina con fundamento en que, durante el tiempo de vuelo, la dispersión de los fragmentos depende de su energía cinética; en este cálculo también se toma en cuenta la retrodispersión (dirección *hacia atrás* -en los espectros-), como en el caso de Folkerts *et al.*

La idea de la transformación al SR-CdeM de la intensidad de los espectros se basa en que el colimador del analizador de placas paralelas subtiende un ángulo sólido fijo hacia el punto donde ocurre la disociación del ión molecular; mientras que los fragmentos, debido a su velocidad, también subtienden un ángulo sólido entre el punto de disociación y el analizador de placas paralelas (ver figura 21). El ángulo que subtienden los fragmentos depende de su velocidad y se le llamará *ángulo dinámico* θ_{din} , mientras que al ángulo asociado al colimador del analizador se le llamará *ángulo fijo* Θ . La función de colección o de transmisión del analizador ϵ_f será una función de la velocidad del fragmento, y

está dada por:

$$\epsilon_f = \frac{\Theta}{\theta_{din}} \quad (22)$$

De manera que cuando $\theta_{din} < \Theta$, la función de transmisión $\epsilon_f > 1$.

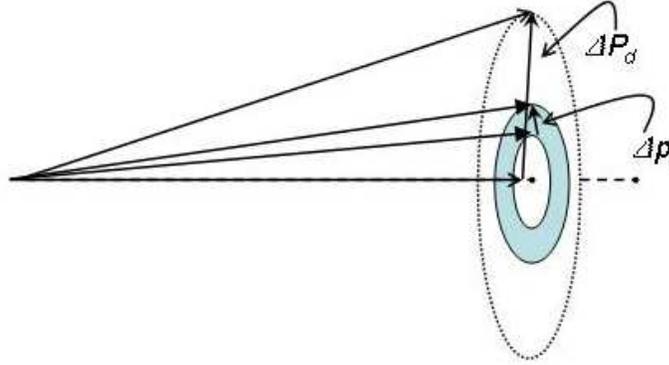


Figura 21: Diagrama de momentos en el Sistema de Referencia del Laboratorio (SR-L). El disco oscuro representa el ángulo sólido que subtende el analizador de placas paralelas hacia el punto donde la molécula se disocia. El disco exterior representa al ángulo dinámico asociado al fragmento.

La idea de la función ϵ_f se ilustra con el siguiente ejemplo: El pico central del espectro de la figura 22, corresponde a la posición del Centro de Masas (CdeM) en el SR-L. Es decir, la parte más intensa del espectro (en el SR-L) tiene una energía correspondiente en el SR-CdeM de $\varepsilon = 0$. Veamos el caso de la disociación en dos cuerpos: Según las leyes de conservación de la energía y del momento, la energía interna de la molécula u se distribuye entre los fragmentos (de masas m_1 y m_2) de acuerdo a:

$$\varepsilon_1 \propto \frac{1}{m_1}, \quad \varepsilon_2 \propto \frac{1}{m_2}$$

donde ε_1 y ε_2 son las energías de los fragmentos y $u = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$. Por lo tanto, para el caso de la disociación en dos cuerpos, no existen fragmentos con energía $\varepsilon = 0$. Sin embargo, en los espectros medidos en el laboratorio, la intensidad que corresponde al CdeM ($\varepsilon = 0$) es máxima.

Por lo tanto, la función de transmisión debe tener un valor mayor en $\varepsilon \approx 0$ y un valor mínimo para $\varepsilon \gg 0$. Si la energía de los fragmentos se deriva directamente de la ecuación (20) entonces no es necesario presuponer una dinámica de disociación en particular. En la

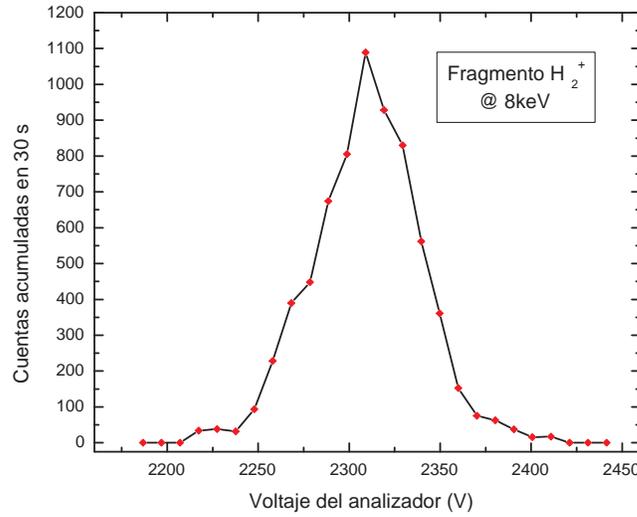


Figura 22: Espectro en el analizador electrostático del fragmento H_2^+ resultado de la disociación inducida por colisión con He de $H_2^{18}O^+$ a una energía de 8 keV. El ala de la izquierda del espectro corresponde a la dirección *hacia atrás*, y el ala de la derecha corresponde a la dirección *hacia adelante* en el Sistema de Referencia del Laboratorio.

figura 23 se presenta el resultado de la función de eficiencia para el espectro de la figura 22 que corresponde al fragmento H_2^+ según la ecuación (22).

Sin embargo, en un análisis más completo, faltaría conocer la función de distribución angular $D(\phi)$ en donde ϕ es el ángulo entre \vec{v}_1 y \vec{V}_{CM} (ver el recuadro de la figura 20). Mas aún, la intensidad relativa del espectro es proporcional a la sección transversal σ del proceso de disociación de que se trate, σ_i . Por ejemplo, si el espectro es del fragmento O^+ , que se puede derivar de varios canales, como captura disociativa (σ_1), más disociación sin ionización (σ_2) y disociación con ionización (σ_3), entonces, la función de transmisión quedaría:

$$\epsilon_f \propto \sum_i \sigma_i \frac{\Theta}{\theta_{din} D(\phi)} \quad (23)$$

La intensidad observada en el laboratorio I_L , debe ser corregida con la función de transmisión (23), para obtener un espectro cuya intensidad se aproxime a la intensidad que debe observarse en el SR-CdeM, I_{CM} :

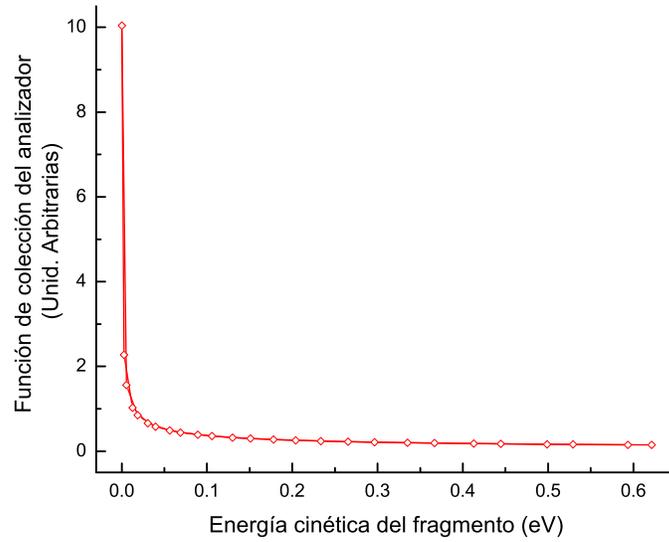


Figura 23: Función de colección del analizador de placas paralelas para el fragmento H_2^+ considerando una distribución angular isotrópica. El centro del espectro se obtuvo de un ajuste de una curva Gaussiana.

$$I_{CM} = \frac{I_L}{\epsilon_f} \quad (24)$$

Suponiendo que la distribución angular $D(\phi)$ es isotrópica, y que la sección σ es la misma para todo el espectro, la ecuación (24) se puede usar junto con la ecuación (22) para generar una transformación aproximada como la que se muestra en la figura 24.

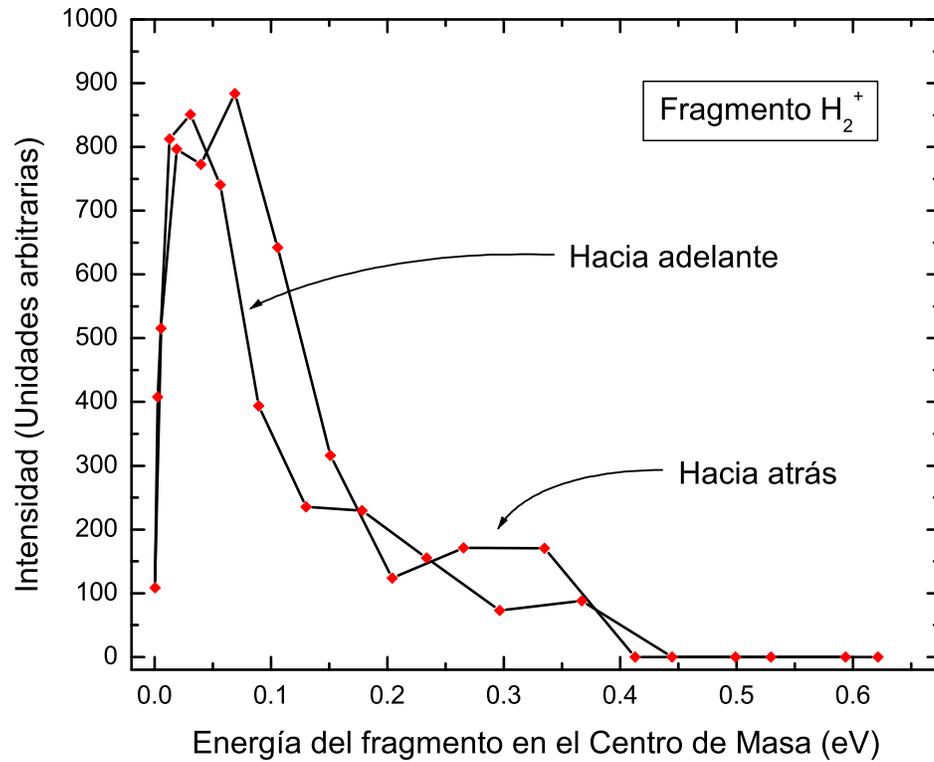
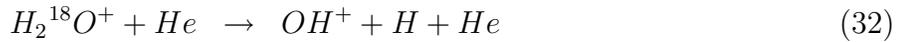
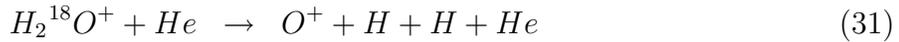
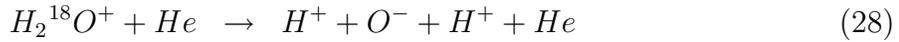
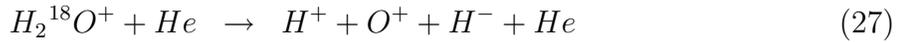
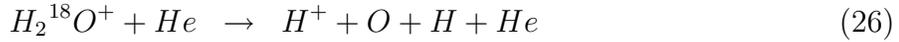
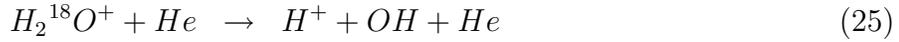


Figura 24: Espectro en el Sistema de Referencia del Centro de Masas del espectro de la figura 22. Las energías se derivaron directamente del espectro, es decir, sin considerar alguna dinámica en particular (disociación en dos o en tres cuerpos), usando la ecuación (24).

5. Resultados Experimentales y Discusión

En este capítulo se presentan los resultados de la medición de los espectros de fragmentos iónicos de $H_2^{18}O^+$ en colisión con He y el análisis de los mismos.

Los canales de disociación que producen fragmentos iónicos positivos (sin tomar en cuenta el estado interno del ión de agua) son:



Por ejemplo, el espectro del fragmento O^+ estará formado por la totalidad de las contribuciones (indeterminadas, en este experimento) de los canales (27), (30) y (31).

En las figuras 25 y 26 se muestran los fragmentos iónicos que resultan de la disociación de la molécula $H_2^{18}O^+$ por colisión con He, en este caso, los fragmentos son separados por medio de las placas analizadoras oblicuas (descritas en la sección 2.1.4), y corresponden a energías en el laboratorio de 6 y 8 keV respectivamente.

En estos espectros medidos en el detector abierto, los fragmentos iónicos resultantes de la disociación se separan de la trayectoria del haz primario ($H_2^{18}O^+$) con el campo eléctrico de las placas oblicuas. Por ejemplo, debido a su menor masa, el fragmento H^+ aparece en el detector abierto a un voltaje de placas menor que los demás fragmentos; tiene menor energía cinética que los demás fragmentos y se requiere de menor voltaje para desviarlos.

En este caso los fragmentos son contados en el detector abierto sin realizar análisis de velocidades. El ancho de los picos se debe al diámetro de ~ 1 cm de los detectores en combinación con el ancho natural de la distribución de velocidades del fragmento.

Tanto en el caso del detector abierto como en el caso del analizador de velocidades, no se distinguen (de manera individual) los canales del proceso de disociación. Por ejemplo, el primer pico del espectro en la figura 25 (que corresponde al fragmento H^+), está formado, en principio, de todos los procesos marcados por los canales (25), (26), (27) y (28).

En los espectros medidos en el detector abierto, similares a los que se muestran en

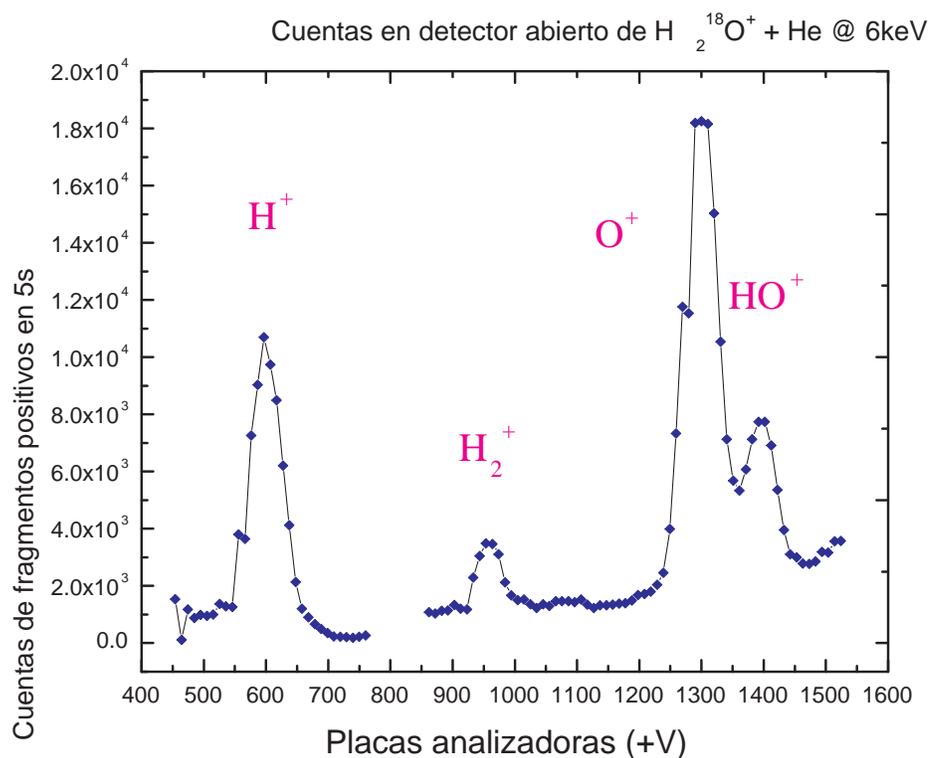


Figura 25: Espectro de los fragmentos resultantes de la colisión con He de la molécula de $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$ para una energía en el SR-L de 6 keV. Medidos en el detector abierto a 26° , a partir de las placas analizadoras, ver la figura 4 de la cámara de detección. Debido a que en estos espectros no se toma en cuenta la variación del haz, las intensidades de los picos son aparentes y no contienen información válida sobre las intensidades relativas.

las figuras 25 y 26, para los fragmentos negativos (no se muestran en este trabajo), se encontró la presencia del fragmento H^- (canal 27). Sin embargo, el fragmento O^- (canal 28) no se observó.

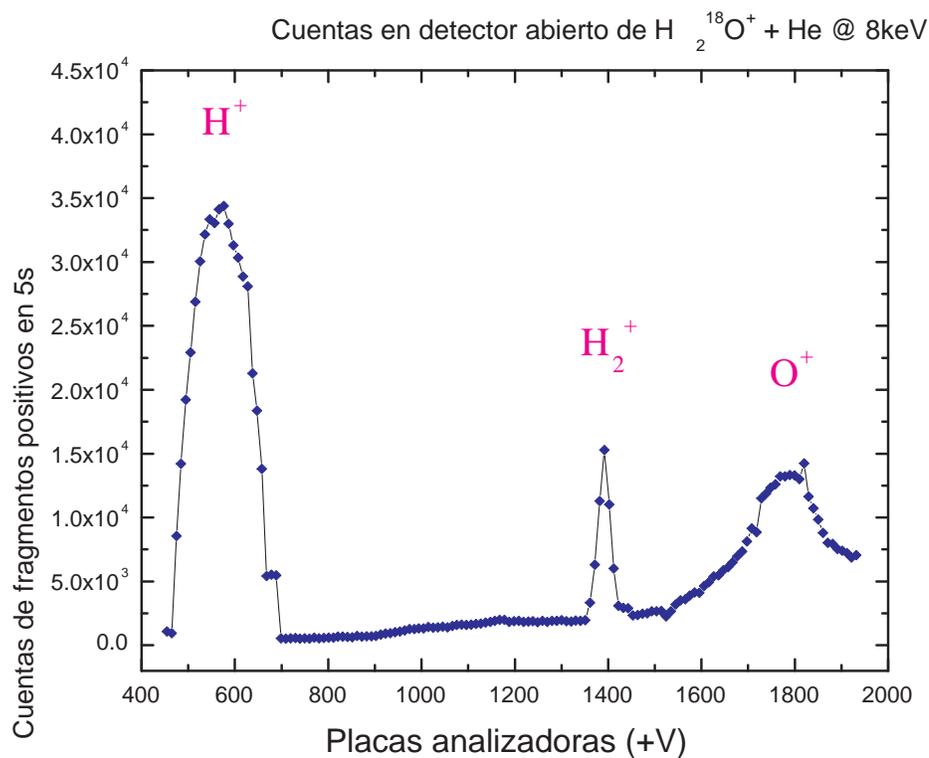


Figura 26: Espectro de los fragmentos resultantes de la colisión con He de la molécula de $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$ para una energía en el SR-L de 8 keV. El pico de la derecha corresponde al fragmento O^+ y posiblemente tiene una contribución indeterminada de OH^+ . Debido a que en estos espectros no se toma en cuenta la variación del haz, las intensidades de los picos son aparentes y no contienen información válida sobre las intensidades relativas.

El estudio de cada uno de estos fragmentos en el analizador electrostático de velocidades se realizó como se describe en la sección 4.1. Primero se midieron los espectros de cada fragmento en el analizador electrostático (SR-L). A partir de la solución (21) de la ecuación (20) en donde se empleó el código descrito en el apéndice B para realizar la transformación en energía del SR-L al SR-CdeM. En este código se consideró la ecuación (22) para calcular la función de eficiencia del analizador para cada fragmento, y la ecuación (24) para derivar las intensidades.

Para el fragmento H_2^+ se obtuvieron espectros de la distribución de velocidades para energías de 6 y 8 keV como se indica en la parte superior de las figuras 27 y 29 respectivamente.

La presencia de dos picos en el espectro de este fragmento a una energía de 6 keV es un indicativo de que los canales de disociación de este fragmento son de dos cuerpos. Este resultado se verificó que es completamente reproducible, aunque se observó que la proporción en la altura de los dos picos dependía principalmente de las condiciones de enfoque de las lentes Einzel y del voltaje utilizado en las placas analizadoras para desviar al fragmento hacia el analizador electrostático. En el caso del mismo fragmento para 8 keV, no se encontraron las condiciones necesarias de enfoque para reproducir la estructura de doble pico como en el caso de 6 KeV. Sin embargo, como se verá inmediatamente, la transformación al CdeM resalta las estructuras laterales de las colas de cada pico.

En las figuras 28 y 30 se muestra la transformación en energía al SR-CdeM del fragmento H_2^+ correspondiente a 6 y 8 keV. Como se esperaba, la intensidad del espectro es cero a una energía en el CdeM cercana a cero. Las dos curvas que se observan corresponden a las energías de los fragmentos que se disociaron hacia atrás o hacia adelante con respecto a la posición del CdeM. La escala del eje horizontal superior en cada gráfica corresponde a la Energía Cinética Liberada (ECL), en inglés *Kinetic Energy Release* (KER).

En la figura 31 se muestra el espectro del fragmento H^+ en el analizador electrostático a una energía de 6 keV (arriba) y su correspondiente transformación al SR-CdeM (abajo). En el caso de este fragmento (para todas las energías medidas) la tasa de conteo fue muy baja y por lo tanto la información del espectro al transformarlo al CdeM es confusa para su análisis, como puede observarse en la gráfica del espectro en el CdeM (abajo).

Los resultados que se obtuvieron para el fragmento O^+ , se muestran en las figuras 32 y 34 para 3 y 8 keV respectivamente. De nuevo, arriba se encuentran los espectros en el analizador para el SR-L y abajo se presentan los espectros de la transformación al SR-CdeM. El eje superior de las figuras 33 y 35 corresponde a la ECL.

Como se ha dicho, la transformación al CdeM se hizo considerando únicamente la componente de la velocidad del fragmento que se disoció de la molécula en la colisión, esta transformación es válida para cualquier canal aunque sea de tres cuerpos como son los

canales (26), (27), (28) y (31). Sin embargo, el cálculo de la ECL se realizó considerando solamente la disociación en dos cuerpos.

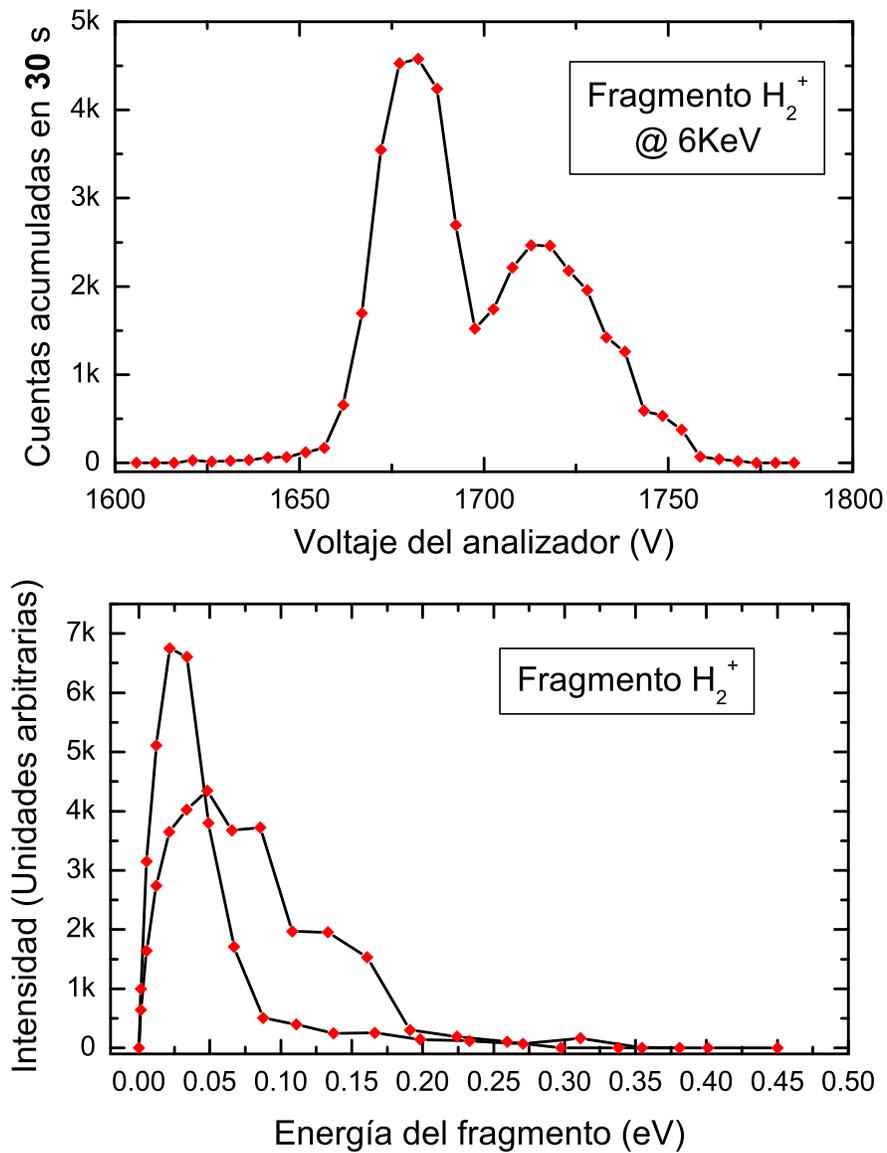


Figura 27: Espectro del fragmento H₂⁺ medido a una energía de aceleración de 6 keV (arriba) y su correspondiente espectro transformado al sistema de referencia del centro de masas, SR-CdeM (abajo). Las trayectorias de los fragmentos en el analizador electrostático de placas paralelas dependen de la velocidad con la que entran al mismo. Por esta razón, se dice que el parámetro *observable* en esta clase de espectros es la velocidad.

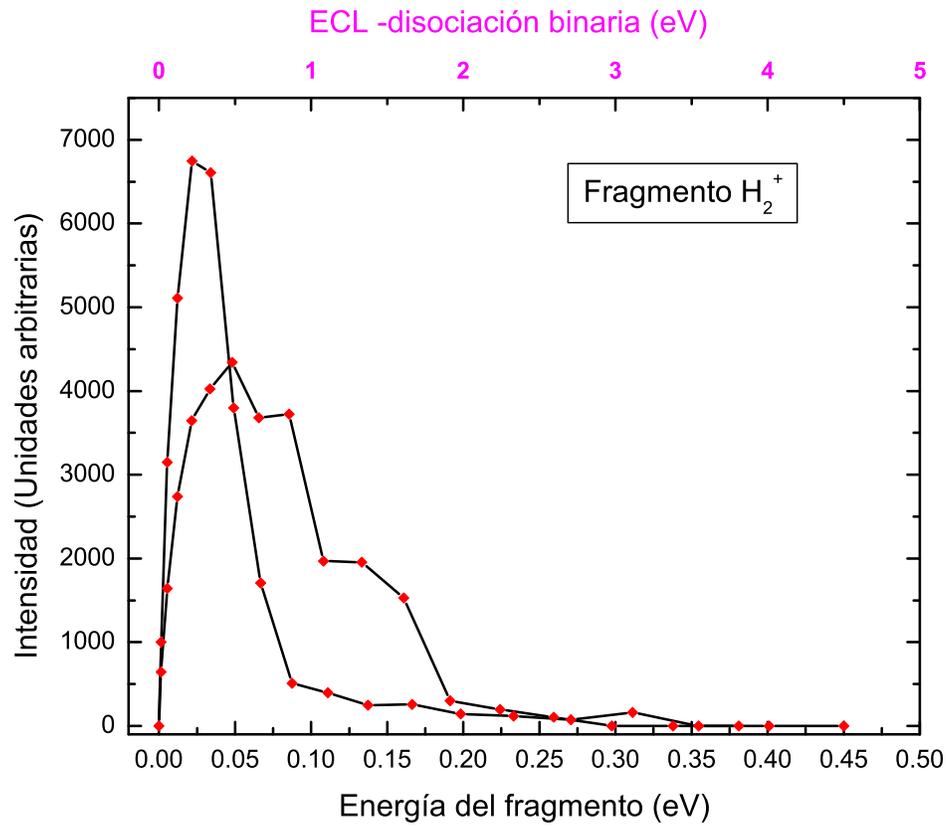


Figura 28: Espectro del fragmento H_2^+ a 6 keV transformado al SR-CdeM. En el eje superior se muestra el resultado del cálculo de la Energía Cinética Liberada (ECL) suponiendo disociación en dos cuerpos. En adelante, todos los cálculos de ECL que se muestran corresponden a la disociación en dos cuerpos.

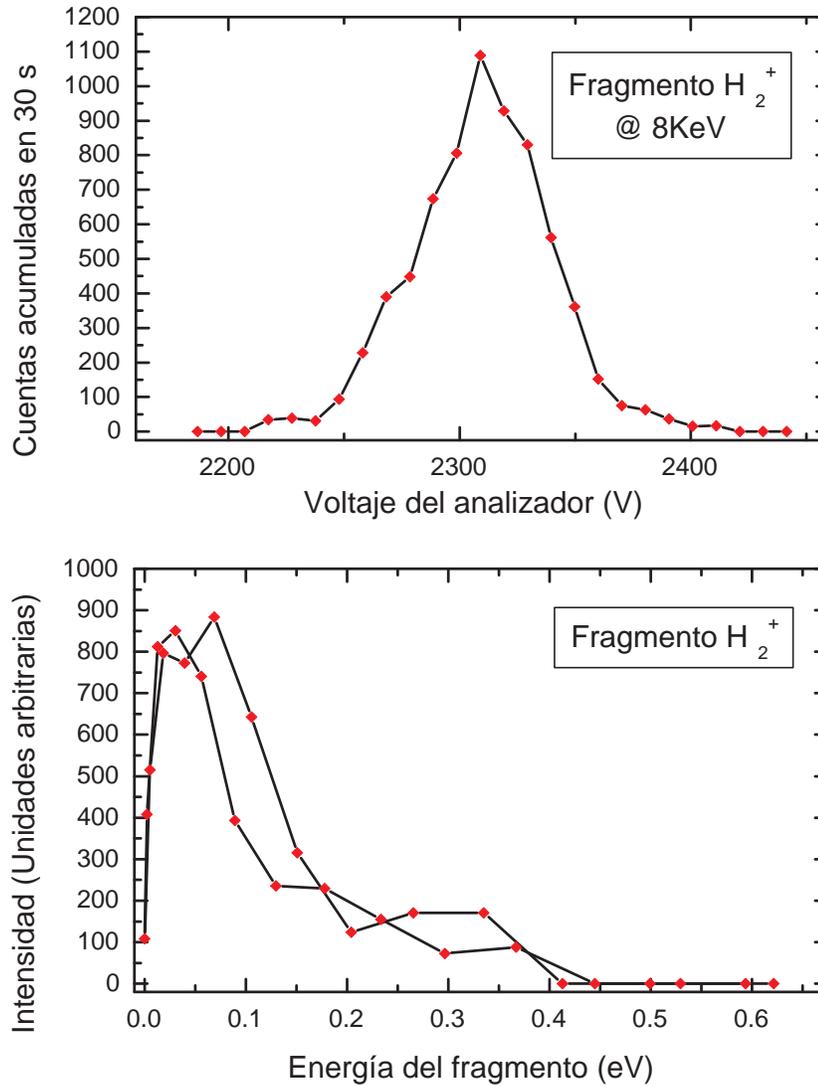


Figura 29: Espectro del fragmento H_2^+ medido a una energía de aceleración de 8 keV (arriba) y su correspondiente espectro transformado al SR-CdM (abajo).

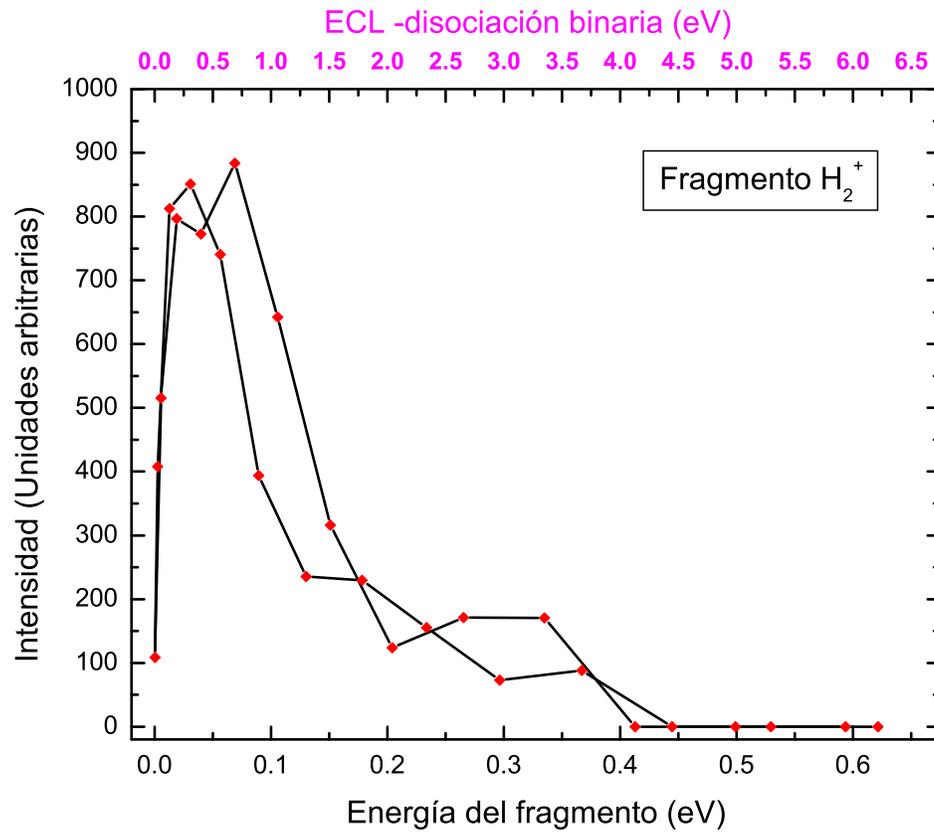


Figura 30: Espectro del fragmento H_2^+ transformado al SR-CdeM correspondiente a una aceleración de 8 keV. En el eje superior se muestra el resultado del cálculo de la Energía Cinética Liberada (ECL) suponiendo disociación en dos cuerpos.

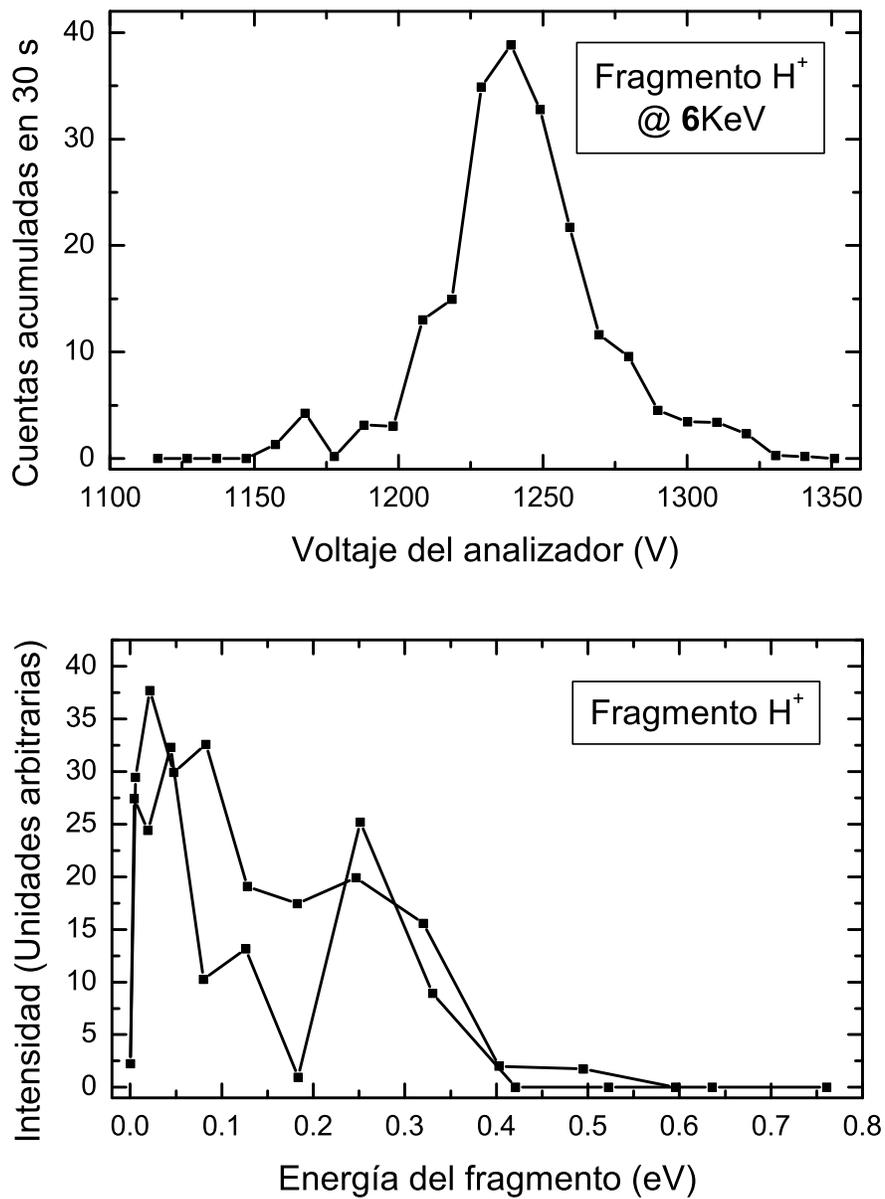


Figura 31: Espectro del fragmento H⁺ medido a una energía de aceleración de 6 keV (arriba) y su correspondiente espectro transformado al SR-CdeM (abajo). La tasa de conteo es baja e insuficiente para determinar la ECL.

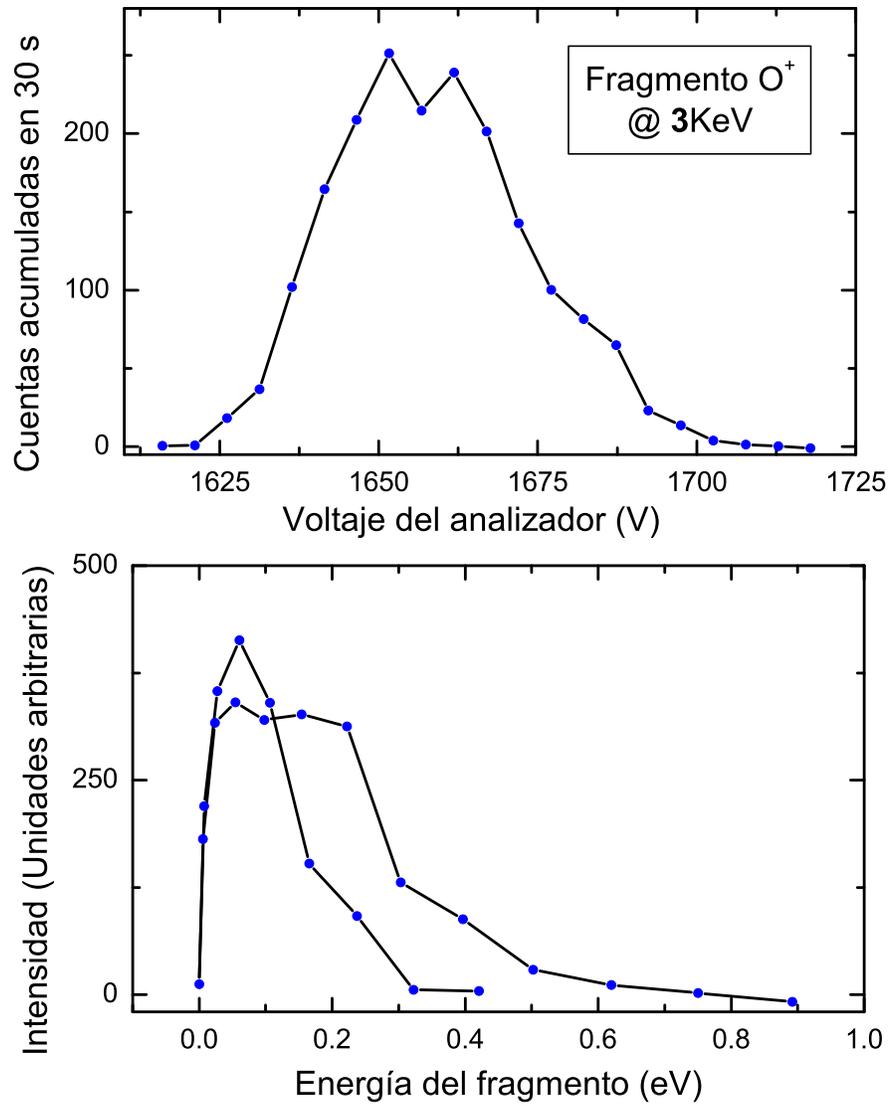


Figura 32: Espectro del fragmento O⁺ medido a una energía de aceleración de 3 keV (arriba) y su correspondiente espectro transformado al SR-CdeM (abajo).

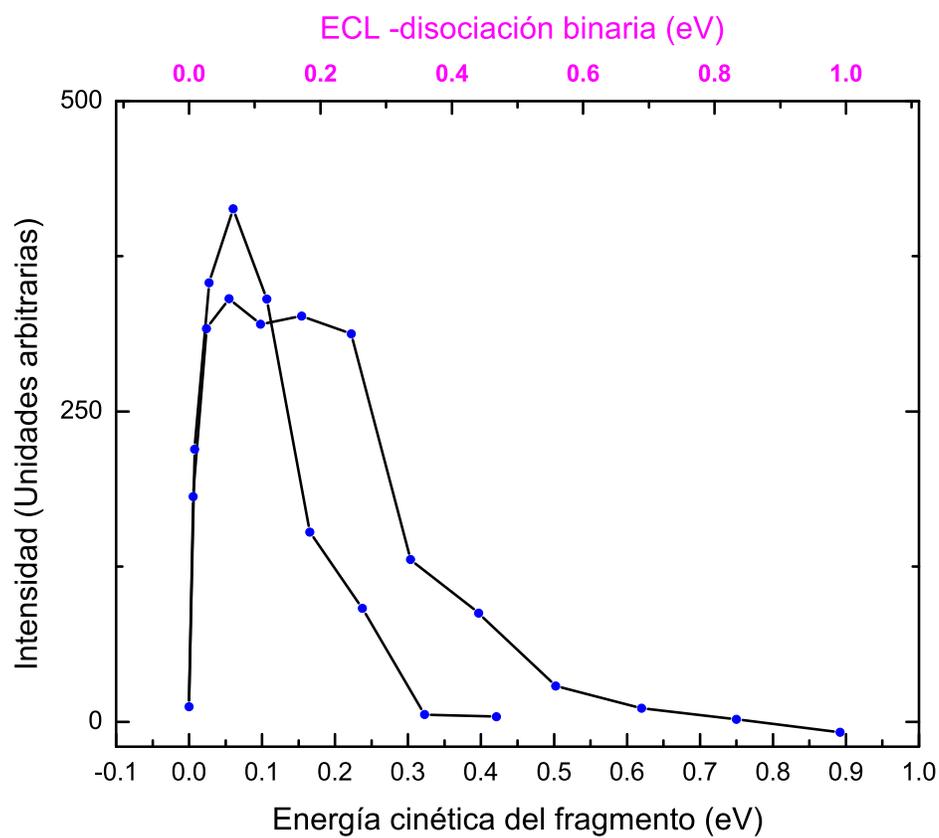


Figura 33: Espectro del fragmento O^+ transformado al SR-CdeM correspondiente a una energía de 3 keV. En el eje superior se muestra el resultado del cálculo de la Energía Cinética Liberada (ECL).

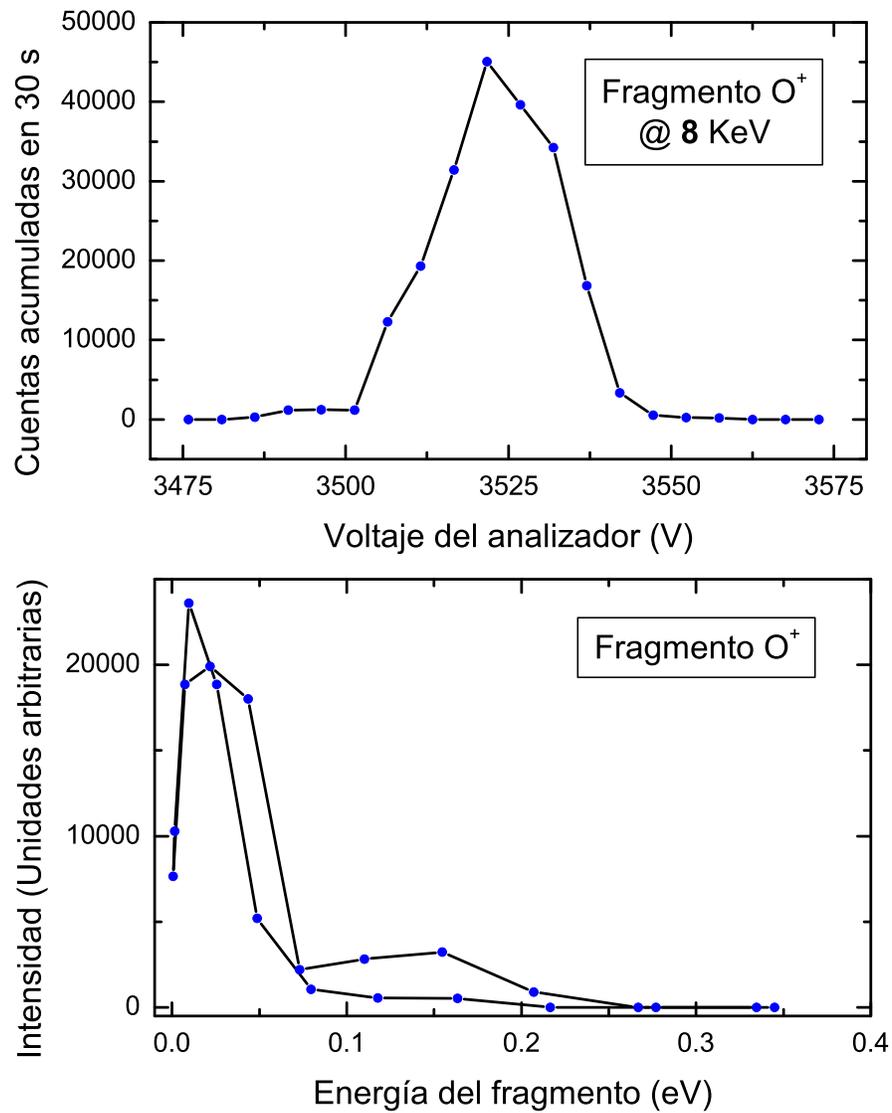


Figura 34: Espectro del fragmento O⁺ medido a una energía de aceleración de 8 keV (arriba) y su correspondiente espectro transformado al SR-CdeM (abajo).

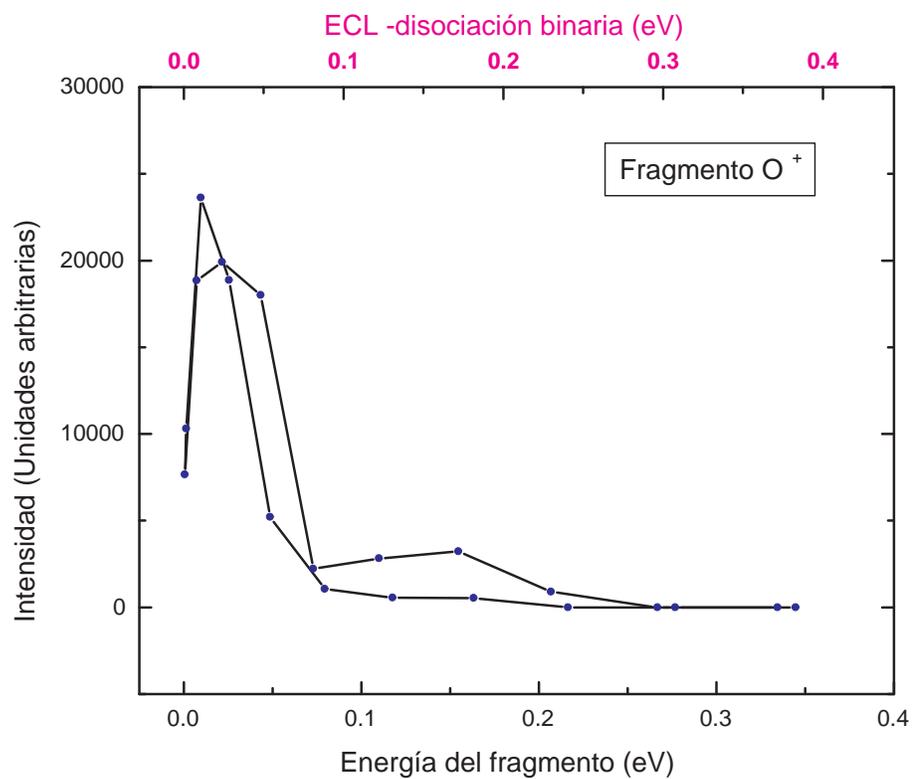


Figura 35: Espectro del fragmento O^+ transformado al SR-CdeM correspondiente a una energía de 8 keV. En el eje superior se muestra el resultado del cálculo de la Energía Cinética Liberada (ECL).

Uno de los objetivos de este trabajo de tesis consiste en demostrar la factibilidad de realizar estudios sobre la disociación colisional del ión de $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$. Con el desarrollo experimental propuesto, y los resultados hasta ahora obtenidos queda establecida una nueva línea de investigación en desarrollo en la UNAM.

Adicionalmente, fue posible observar -solo- algunos de los aspectos de su dinámica de disociación. Por ejemplo, con fundamento en la dificultad de obtener los espectros, podemos concluir, que el fragmento iónico con la menor probabilidad es el H^+ , ya que por su baja tasa de conteo es el más difícil de medir en el analizador de velocidades.

Un aspecto relevante sobre la dinámica de la disociación del catión de agua, es la posible observación del fenómeno de la Interacción Residual Blanco- Proyectil, conocido en inglés como *Projectile Residual Target Ion Interaction*[38].

Este fenómeno consiste en una clase de interacción postcolisional que sucede cuando el proyectil (en este caso el $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$) es momentáneamente atrapado por el campo eléctrico del blanco (en este caso el He). El proyectil *regresa* hacia el blanco, llevando a cabo una colisión casi frontal. A menor energía colisional, el tiempo que pasa el proyectil en las inmediaciones del campo de influencia del blanco es mayor y la probabilidad de que el proyectil y el blanco formen una cuasi-molécula metaestable aumenta, y se ejecuta una órbita parcial que termina con una colisión *de regreso*.

En el cuadro 2 se muestra el resultado de una inspección de los espectros en el SR-CdeM. Resalta el hecho de que las energías cinéticas liberadas presentan una aparente *disminución* como función de la energía de colisión: para el caso del H_2^+ , los valores de ECL son 0.50 y 0.40 eV para 6 y 8 keV respectivamente, y para el caso de O^+ , los valores de ECL son 0.10 y 0.03 eV para 3 y 8 keV respectivamente. Este es un fenómeno contraintuitivo que ya ha sido observado en sistemas colisionales con moléculas más simples por Folkers *et al.* [39, 40] y sobre el cual, se cuenta con un modelo que lo explica parcialmente basado en la Interacción Residual Blanco-Proyectil [41].

Es notable el hecho de que este efecto se observe a energías de keV. Este fenómeno es un mecanismo que *incrementa* la interacción de partículas a estas energías (como en el viento solar) y puede tener consecuencias sobre los modelos de equilibrio de plasmas en donde las secciones se estiman utilizando aproximaciones de Born-Oppenheimer, que es completamente inválido en el caso de Interacción Residual Blanco-Proyectil.

La observación de este fenómeno es preliminar y se necesitan más resultados positivos para su verificación. Se espera que con las mejoras en el sistema de control y adquisición de datos, y las mejoras (en curso) a los sistemas de vacío, a la cámara de detección y a la trayectoria del haz, puedan obtenerse haces aún más estables y espectros de mejor estadística.

Aceleración (keV)	Fragmento	ECL (eV)
3	O ⁺	0.10
6	H ₂ ⁺	0.50
6	H ⁺	- -
8	O ⁺	0.03
8	H ₂ ⁺	0.40

Cuadro 2: Valores de las Energías Cinéticas Liberadas derivadas a partir de los espectros en la transformación al SR-CdeM de los fragmentos iónicos. En todos los casos, se supone disociación en dos cuerpos, que no es exacto para los casos de los fragmentos H⁺ y O⁺. Las incertidumbres estadísticas para estas ECL en la tabla fueron del 35%. Para determinar las ECL, se tomó el centro de un ajuste (Gaussiano) al espectro en el SR-CdeM resultante de la suma de las dos componentes de los espectros (hacia adelante y hacia atrás -no especificados en las gráficas).

Los resultados de este trabajo pueden resumirse básicamente en:

- La implementación en *hardware* y en *software* de una interfaz de control y adquisición de datos actualizada, y de fácil expansión (que se describió en el capítulo 2.2).
- Se demuestra la factibilidad del estudio experimental de la disociación de H₂¹⁸O⁺ en el acelerador, como se describe en esta tesis.
- Se presentan espectros de fragmentos iónicos de la disociación de H₂¹⁸O⁺.
- Se proporcionan valores de las energías cinéticas de los fragmentos iónicos.
- Para el caso de la disociación binaria (canales 25, 29, 30 y 32) se presentan valores de las energías cinéticas liberadas (ECL).

6. Conclusiones

- Se logró producir un haz de iones moleculares de $\text{H}_2^{18}\text{O}^+$, sin contaminación y lo suficientemente estable para realizar el estudio de su disociación inducida por colisión con He.
- Se demostró que es posible estudiar la dinámica de la disociación del catión de agua, como lo muestran los espectros medidos. Adicionalmente, se realizó el análisis de los espectros en el SR-CdeM, de donde se derivaron ECL que se usarán para comparar con cálculos estructurales.
- Se logró identificar, al menos un posible aspecto de la dinámica de la colisión $\text{H}_2^{18}\text{O}^+ + \text{He}$ a energías de colisión de algunos keV. Este consiste en la interacción post-colisional del proyectil y el gas blanco, que deriva en un comportamiento contra intuitivo de ECL como función de la energía de la colisión.
- Para lograr una mejor comprensión sobre los aspectos del presente sistema colisional, se necesitan realizar más experimentos y análisis. Se han realizado mejoras sustantivas al acelerador y se tiene contemplada la instalación de una fuente de iones fabricada con cuarzo para eliminar la contaminación del haz de H_2O^+ y de esta forma, extender este trabajo de investigación al estudio de agua no isotópica.
- En este trabajo de tesis, se instaló y se implementaron los programas especializados de una interfaz de control y adquisición de datos, actualizada y suficiente de 16 bits, basada en LabVIEW. Con esto, se modernizó el equipo y se logró una mejor eficacia en la toma de datos del grupo de Física Atómica y Molecular del CCF.
- El *software* que se desarrolló y la experiencia que se desprende de este trabajo de tesis, presentan el servicio adicional de que serán útiles para otros experimentos del grupo, dado que se diseñaron en forma modular y tomando en cuenta las necesidades de al menos dos experimentos nuevos que están en construcción.

7. Apéndices

7.1. Apéndice A - Trayectoria de una partícula en el campo eléctrico de un par de placas oblicuas

```

´ ***** Program OBLICUA2.bas *****
´ Programa para simular las trayectorias de particulas en el
´ campo electrico de las placas oblicuas.
´ (Texto sin acentos)
´ -----
DECLARE FUNCTION v! (Volt!, carga!, mau!)
DECLARE FUNCTION TOF! (dist!, Vol!, charge!, mua!)
DECLARE FUNCTION acel (carga, masa, Vplacas, x, y)
CONST mp! = 1.672621E-27
CONST e! = 1.602176E-19
COLOR 14
´
´ q = 1 ´ Estado de carga
masa = 20 ´ Masa en unidades atomicas
Vx = v!(6000, 1, 20)
volts = 1600 ´ Voltaje aplicado a las placas oblicuas.
´
x = 0!
y = .015 ´ 1.5 cm
Vy = 0!
ang = 0
t = 0
´
OPEN "data.dat" FOR OUTPUT AS # 1
FOR N = 1 TO 155
t = N * 2.5E-11
´ WHILE t ¡.000000012# ´ Para recorrer siete cm en x
x = x + Vx * t + (.5) * (acel(1, masa, volts, x, y) * SIN(ang) * t * t)
y = y + Vy * t + (.5) * (acel(1, masa, volts, x, y) * COS(ang) * t * t)
Vx = Vx + acel(1, masa, volts, x, y) * SIN(ang) * t
Vy = Vy + acel(1, masa, volts, x, y) * COS(ang) * t
ang = ATN(Vy / Vx)
PRINT #1, x, y
´ t = t + .0000000025#

```

```

NEXT N
^WEND
^
CLOSE #1
PRINT " Vplacas = "; volts, " masa = "; masa, " ang = "; 57.29578 * ATN(Vy / Vx), " y
= "; y
END
^
^

FUNCTION acel (carga, masa, Vplacas, x, y)
CONST mp! = 1.672621E-27
CONST e! = 1.602176E-19
^ arctan(.25) = 14.03624 de un ajuste de recta.
^ para determinar el angulo de inclinacion de las placas
^ oblicuas usando sus coordenadas.
^ CONST TETo = .2007 ^ = 11.5 grados /57.29577951
CONST TETo = .2449787 ^ = 14.03624 grados /57.29577951
acel = ((carga * e!) / (mp! * masa)) * (Vplacas / (2 * TETo)) * (1 / SQR(x * x + y *
y))
END FUNCTION
^
^

FUNCTION TOF! (dist!, Vol!, charge!, mua!)
CONST mp! = 1.672621E-27
CONST e! = 1.602176E-19
dum! = SQR((2 * e!) / mp!)
dum2! = dum! * SQR((Vol! * charge!) / mua!)
TOF! = dist! / dum2!
END FUNCTION
^
^

FUNCTION v! (Volt!, carga!, mau!)
CONST mp! = 1.672621E-27
CONST e! = 1.602176E-19
dum! = SQR((2 * e!) / mp!)
v! = dum! * SQR((Volt! * carga!) / mau!)
END FUNCTION
^ -----

```

7.2. Apéndice B - Transformación en energía del SR-L al SR-CdeM

En este apéndice se enlista el programa en Q-basic que se utilizó en el análisis de los espectros de fragmentos de $H_2^{18}O^+$ obtenidos en el laboratorio. El presente análisis se realizó bajo la aproximación de $Q = 0$, como se discute en el capítulo 4. Los parámetros necesarios para el análisis de cada espectro, incluyendo el espectro, se leen de un archivo con extensión *.par*. El resultado se guarda en el archivo de salida *data.dat*, al cual, posteriormente se le cambia de nombre para efectos de referencia.

En este programa se emplean las ecuaciones (21) y (24) para los cálculos de la energía y la eficiencia respectivamente.

El código es el siguiente:

```

' ***** Program ECM2.bas *****
' Programa para la transformacion en energia al Sistema de
' Referencia del Centro de Masas (SR-CdeM) a partir de la
' energia en el Sistema de Referencia del Laboratorio (SR-L)
' (Texto del codigo sin acentos)
' -----
'
'
DECLARE FUNCTION v! (Volt!, carga!, mau!)
DECLARE FUNCTION TOF! (dist!, Vol!, charge!, mua!)
CONST mp! = 1.672621E-27
CONST e! = 1.602176E-19
' ARREGLOS
DIM Va(100): DIM Ia(100): DIM Rx(100)
DIM VELana(100)
DIM Ecm(100): DIM Vcm(100)
DIM Vflab(100): DIM EFana(100)
DIM Edif(100)
DIM Elab(100)
DIM ANGdin(100)
DIM Eff(100)
' - + - + - + - + - + - + - + - + - + - + - + -
' - + - + CAMBIAR PARAMETROS EN ARCHIVO:
' OPEN "HH-6KEV.PAR" FOR INPUT AS #2
' OPEN "H2-6KEV.PAR" FOR INPUT AS #2
' OPEN ".º-6KEV.PAR" FOR INPUT AS #2
' OPEN ".º8keV.PAR" FOR INPUT AS #2

```

```

OPEN "H28KeV.PAR"FOR INPUT AS #2
'OPEN "180505.PAR"FOR INPUT AS #2
INPUT #2, Ecma ' Energia del CdeM en el Lab
INPUT #2, mf ' Masa del fragmento
INPUT #2, M ' Masa total del ion
INPUT #2, Eo ' Energia de aceleracion
INPUT #2, ARCH$ ' Archivo del espectro
CLOSE #2
' - + - + - + - + - + - + - + - + - + - + - + -
' PARAMETROS GENERADOS:
Cs = (Ecma * M) / (mf * Eo)
Vfix = v!(Ecma, 1, mf) ' Velocidad del cm
mrel = mf / M
Zf = ATN(1.5 / 624)
COLOR 13: PRINT Ecma, mf, M, Eo, ARCH$, Cs: COLOR 12
' -----
' Factor de calibracion para el analizador.
' Cs = 1238.2*(20/1)/6000 = 4.127333
' Cs = 1697.508*(20/2)/6000 = 2.82918
' Cs = 2817.30*(20/18)/6000 = 0.52172
' -----
' Abre el archivo del espectro y lee volts y cuentas en el analizador.
OPEN ARCH$ FOR INPUT AS #1
N = 1
WHILE NOT EOF(1)
INPUT #1, Va(N), Ia(N)
N = N + 1
WEND
TOT = N - 1
' ----- FOR N = 1 TO TOT
Elab(N) = Va(N) / Cs
VELana(N) = v!(Elab(N), 1, mf)
dum = SQR(Eo * mrel) - SQR(Elab(N))
Ecm(N) = dum * dum
Vcm(N) = v(Ecm(N), 1, mf)
ANGdin(N) = ATN(Vcm(N) / Vfix)' Angulo dinamico.
Eff(N) = Zf / ANGdin(N)
NEXT N
OPEN "data.dat"FOR OUTPUT AS #2
FOR N = 1 TO TOT

```

```
'PRINT #2, Elab(N), Ia(N)
PRINT #2, Ecm(N), Ia(N) / Eff(N), Eff(N)
NEXT N
CLOSE #2
PRINT -; DATE$; ": "; TIME$
' -----
END
FUNCTION TOF! (dist!, Vol!, charge!, mua!)
CONST mp! = 1.672621E-27
CONST e! = 1.602176E-19
dum! = SQR((2 * e!) / mp!)
dum2! = dum! * SQR((Vol! * charge!) / mua!)
TOF! = dist! / dum2!
END FUNCTION
FUNCTION v! (Volt!, carga!, mau!)
CONST mp! = 1.672621E-27
CONST e! = 1.602176E-19
dum! = SQR((2 * e!) / mp!)
v! = dum! * SQR((Volt! * carga!) / mau!)
END FUNCTION
```

7.3. Apéndice C - Glosario

Anión - Ión con carga negativa.

Camino libre medio - La longitud promedio entre colisiones de una partícula que se desplaza a través de un medio. Depende del número de partículas en el medio y de la “probabilidad” o sección transversal de la colisión.

Catión - Ión con carga positiva.

Conductancia - Cociente del flujo, por diferencia de presión, entre dos secciones transversales dentro de un sistema de vacío, bajo la condición de estado estacionario.

Deuterio - Isótopo del hidrógeno dos veces más pesado que este, por contener dos neutrones en su núcleo.

Disociación - Separar algo de otra cosa a la que estaba unida. En moléculas, es la ruptura de uno o varios enlaces químicos -que mantenían unida a la molécula- mediante alguna acción física o química.

Ión - Átomo o agrupación de átomos que por pérdida o ganancia de uno o más electrones adquiere carga eléctrica.

Ionización - Acción y efecto de disociar una molécula en iones o convertir un átomo o molécula en ión.

Isómero - En química, los isómeros son moléculas con la misma fórmula química y el mismo tipo de enlaces entre átomos, pero en el que los átomos están dispuestos de diferente forma. Típicamente, los isómeros tienen muchas características similares, si no idénticas, en cuanto a sus propiedades y reactividad.

Isótopo - Cada uno de los elementos químicos que poseen el mismo número de protones y distinto número de neutrones. Todos los isótopos de un elemento ocupan el mismo lugar en la tabla periódica y poseen las mismas propiedades químicas.

Potencial de Ionización - Energía mínima necesaria para ionizar una molécula o átomo.

Plasma - Materia gaseosa fuertemente ionizada, con igual número de cargas libres positivas y negativas. Es el estado de la materia más abundante en el universo.

Radiólisis - Disociación de una molécula por radiación.

Ubicuo - Del lat. *ubique*, en todas partes.

8. Referencias

Referencias

- [1] O. L. Polyansky, Nikolai F. Zobov, Serena Viti, Jonathan Tennyson, Peter F. Bernath, and Lloyd Wallace. Water on the Sun: Line Assignments Based on Variational Calculations. *Science*, 277:346, 1997.
- [2] B. R. Oppenheimer, S. R. Kulkarni, K. Matthews, and T. Nakajima. Infrared Spectrum of the Cool Brown Dwarf Gl 229B. *Science*, 270:1478, 1995.
- [3] U. Werner, K. Beckord, J. Becker, and H. O. Lutz. 3D Imaging of the Collision-Induced Coulomb Fragmentation of Water Molecules. *Phys. Rev. Lett.*, 74(11):1962, 1995.
- [4] S. Datz, R. Thomas, S. Rosn, M. Larsson, A. M. Derkatch, F. Hellberg, and W. van der Zande. Dynamics of Three-Body Breakup in Dissociative Recombination: H_2O^+ . *Phys. Rev. Lett.*, 85(26):5555, 2000.
- [5] F. Alvarado, R. Hoekstra, and T. Schlathölter. Dissociation of water molecules upon keV H^+ -and He^{q+} -induced ionization. *J. Phys. B*, 38(22):4085, 2005.
- [6] B. Boudaïffa, P. Cloutier, D. Hunting, M. A. Huels, and L. Sanche. Resonant Formation of DNA Strand Breaks by Low-Energy (3 to 20 eV) Electrons. *Science*, 287:1658, 2000.
- [7] G. H. Olivera, C. Caraby, P. Jardin, A. Cassimi, L. Adoui, and B. Gervais . Multiple ionization in the earlier stages of water radiolysis. *Phys. Med. Biol.*, 43:2347, 1998.
- [8] T. E. Cravens. X-ray Emission from comets. *Science*, 296:1042, 2002.
- [9] J. B. Greenwood, I. D. Williams, S. J. Smith, and A. Chutjian. Experimental investigation of the processes determining x-ray emission intensities from charge-exchange collisions. *Phys. Rev. A*, 63(6):062707, 2001.
- [10] P. Beiersdorfer, K. R. Boyce, G. V. Brown, H. Chen, S. M. Kahn, R. L. Kelley, M. May, R. E. Olson, F. S. Porter, C. K. Stahle, and W. A. Tillotson. Laboratory Simulation of Charge Exchange-Produced X-ray Emission from Comets. *Science*, 300:1558, 2003.
- [11] H. Lew and I. Heiber. Spectrum of H_2O^+ . *J. Chem. Phys.*, 58(3):1246, 1973.
- [12] G. Herzberg and H. Lew. Tentative Identification of the H_2O^+ Ion in Comet Kohoutek. *Astronom. Astrophys.*, 31:123, 1974.
- [13] P. A. Wehinger, S. Wyckoff, G. H. Herbig, G. Herzberg, and H. Lew. Identification of H_2O^+ in the tail of comet Kohoutek. *Astrophys. J.*, 190:L46, 1974.

- [14] R. N. Dixon and G. Duxbury and J. W. Rabalais and L. Asbrink. The Renner effect in a Bent triatomic molecule executing a large amplitude bending vibration. *Mol. Phys.*, 31:423, 1976.
- [15] S. E. Strahan, R. P. Mueller, and R.J. Saykally. Measurement of the rotational spectrum of the water cation (H_2O^+) by laser magnetic resonance. *J. Chem. Phys.*, 85(3):1252, 1986.
- [16] B. M. Dinelli, M. W. Crofton, and T. Oka. Infrared Spectroscopy of the ν_3 band of H_2O^+ . *J. Mol. Spectrosc.*, 127:1, 1988.
- [17] J. A. Smith, P. Jorgensen, and Y. Örn. Limited basis molecular orbital calculation on H_2O and H_2O^+ . *J. Chem. Phys.*, 62(4):1285, 1975.
- [18] P. J. Fortune, B. J. Rosenberg, and A. C. Wahl. Theoretical studies of atmospheric molecules: SCF and correlated potential surface results for the X^2B_1 and B^2B_2 states of H_2O^+ . *J. Chem. Phys.*, 65(6):2201, 1976.
- [19] D. A. Esposti, D.G. Lister, P. Palmeri, and C. D. Esposti. *Ab initio* computations of the α vibration-rotation constants for H_2O^+ . *J. Chem. Phys.*, 87(11):6772, 1987.
- [20] CH. Jungen, K-E. J. Hallin, and A. J. Merer. Orbital Angular momentum in triatomic molecules: I. *Molec. Phys.*, 40:1, 1980.
- [21] CH. Jungen, K-E. J. Hallin, and A. J. Merer. Orbital Angular momentum in triatomic molecules: II. Vibrational and K-type rotational structure, and intensity factors in the $\tilde{A}^2A_1 - \tilde{X}^2B_1$ transitions of NH_2 and H_2O^+ . *Molec. Phys.*, 40:25, 1980.
- [22] CH. Jungen, K-E. J. Hallin, and A. J. Merer. Orbital Angular momentum in triatomic molecules: III. *Molec. Phys.*, 40:64, 1980.
- [23] B. Siegmann, U. Werner, H. O. Lutz, and R. Mann. Multiple ionization and fragmentation of H_2O in collisions with fast highly charged Xe ions. *J. Phys. B*, 34:L587, 2001.
- [24] Z. D. Pešić, J-Y Chesnel, R. Hellhammer, B. Sulik, and N. Stolterfoht. Fragmentation of H_2O molecules following the interaction with slow, highly charged Ne ions. *J. Phys. B*, 37(7):1405, 2004.
- [25] F. Gobet, S. Eden, B. Coupier, J. Tabet, B. Farizon, M. Farizon, M. J. Gaillard, M. Carre, S. Ouaskit, T. D. Märk, and P. Scheier. Ionization of water by (20-150)-keV protons: Separation of direct-ionization and electron-capture process. *Phys. Rev. A*, 70(6):062716, 2004.
- [26] H. Luna and E. C. Montenegro. Fragmentation of Water by Heavy Ions. *Phys. Rev. Lett.*, 94(4):043201, 2005.

- [27] F. Gobet, B. Farizon, M. Farizon, M. J. Gaillard, M. Carr, M. Lezius, P. Scheier, and T. D. Märk. Total, Partial, and Electron-Capture Cross Sections for Ionization of Water Vapor by 20-150 keV Protons. *Phys. Rev. Lett.*, 86(17):3751, 2001.
- [28] Guillermo Hinojosa Aguirre. *Generación de los haces H_3^+ y D_3^+ en su estado base y estudio de su disociación polar*. Tesis doctoral, Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, 1997.
- [29] G. A. Harrower. Measurement of Electron Energies by Deflection in a Uniform Electric Field. *The Rev. Sci. Instrum.*, 26(9):850, 1955.
- [30] T. S. Green. A Spectrograph for the Simultaneous Measurement of Velocity Spectra and Charge-to-Mass Ratios of Ions. *The Rev. Sci. Instrum.*, 41(11):1533, 1970.
- [31] G. A. Proca and T. S. Green. Minimum Image Size in a Parallel Plate Electrostatic Spectrograph. *The Rev. Sci. Instrum.*, 41(12):1778, 1970.
- [32] T. S. Green and G. A. Proca. A Parallel Plate Electrostatic Spectrograph. *The Rev. Sci. Instrum.*, 41(10):1409, 1970.
- [33] James M. Lafferty. *Foundations of Vacuum Science and Technology*. John Wiley & Sons, New York, 1998.
- [34] J. F. O'Hanlon. *A User's Guide to Vacuum Technology*. John Wiley & Sons, New York, 1980.
- [35] D. Zajfman and A. Belkacem. Measurement of the distribution of bond angles in H_2O^+ . *J. Chem. Phys.*, 94(4):2543, 1991.
- [36] S. J. Anderson. Collision-induced dissociation of 0.4–2.6 keV H_2^+ and D_2^+ . *J. Chem. Phys.*, 60(8):3278, 1974.
- [37] H. O. Folkerts, F. W. Blik, M. C. de Jong, R. Hoekstra, and R. Morgenstern. Dissociation of CO induced by He^{2+} ions: I. Fragmentation and kinetic energy release spectra. *J. Phys. B*, 30(24):5833, 1997.
- [38] N. V. Maydanyuk, A. Hasan, M. Foster, B. Tooke, E. Nanni, D. H. Madison, and M. Schultz. Projectile-Residual-Target-Ion Scattering after Single Ionization of Helium by Slow Proton Impact. *Phys. Rev. Lett.*, 94(24):243201, 2005.
- [39] H. O. Folkers, H. Hoekstra, and R. Morgenstern. Velocity and Charge State Dependences of Molecular Dissociation Induced by Slow Multicharged Ions. *Phys. Rev. Lett.*, 77(16):3339, 1996.
- [40] H. O. Folkers, T. Schlathölder, H. Hoekstra, and R. Morgenstern. Dissociation of CO induced by He^{2+} ions: II. Dissociation pathways and states. *J. Phys. B*, 30(24):5849, 1997.

- [41] J. Ullrich, R. Moshhammer, A. Dorn, R. Dörner, L. Ph. L. Schmidt, and H. Schmidt-Böcking. Recoil-ion and electron momentum spectroscopy: reaction-microscopes. *Rep. Prog. Phys.*, 66(9):1463, 2003.