



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

PROCESOS DISOCIATIVOS EN COLISIONES DE
PROTONES A BAJAS ENERGÍAS EN GASES
ATMOSFÉRICOS

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A:
J U A N L Ó P E Z P A T I Ñ O

DIRECTORA DE TESIS:
DRA. BEATRIZ ELIZABETH FUENTES MADARIAGA
Facultad de Ciencias, UNAM

COMITÉ TUTOR:
DRA. ALEJANDRA LÓPEZ SUÁREZ
DR. LUIS RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ
Instituto de Física, UNAM

Ciudad Universitaria, Mayo de 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Resumen

Se midieron las secciones transversales asociadas a los procesos de formación de los iones positivos generados a partir del blanco, en colisiones de protones incidentes en cuatro gases atmosféricos: CO_2 , N_2 , O_2 y CH_4 , en el intervalo de energías de 2 keV a 10 keV. Se utilizó la técnica de espectrometría de masas de tiempo de vuelo, cuidando en todo momento que las interacciones se llevaran a cabo dentro del régimen de colisión simple. Para el caso de los tres primeros gases, las medidas resultaron complementarias a algunos resultados previamente adquiridos, mientras que para el CH_4 , los datos se obtuvieron por vez primera usando protones en este intervalo energético. En todos los casos, los procesos dominantes resultaron ser los no disociativos, es decir, los procesos que conllevaron a la formación del ion molecular respectivo.

Las mediciones se realizaron utilizando un acelerador lineal de bajas energías, para el cual se encontraron previamente los valores óptimos de operación de sus parámetros principales.

En el caso del CO_2 se identificó la formación de seis iones generados a partir del blanco: CO_2^+ , CO^+ , O_2^+ , O^+ , C^+ y CO_2^{++} . Resultó de particular interés la producción de una cantidad sustancial de iones de O_2^+ .

Por otra parte, como consecuencia de las interacciones $H^+ + N_2$ y $H^+ + O_2$, se identificaron dos iones generados; el ion molecular N_2^+ (O_2^+) y el ion atómico N^+ (O^+). Se cuantificó la producción relativa y se obtuvo que las secciones transversales cumplían con $\sigma(N^+)/\sigma(N_2^+) \leq 0,1$ para el caso de N_2 , mientras que para el O_2 eran tales que $\sigma(O^+)/\sigma(O_2^+) \approx 0,2$. Fue posible observar una estructura cerca de los 7 keV para el caso del N_2 y alrededor de los 5 keV para O_2 debida tanto a efectos clásicos como cuánticos, envueltos en las partes repulsivas y atractivas de las curvas de potencial de las moléculas.

Finalmente, para el CH_4 , los iones identificados fueron, CH_4^+ , CH_3^+ , CH_2^+ , CH^+ , C^+ y H^+ . Las mediciones de las secciones transversales asociadas a la formación de estos iones resultaron novedosas en el sentido de que fueron obtenidas por primera vez en este intervalo

de energías. A partir de los resultados obtenidos, se observó la aparición de una aparente estructura en la sección total para bajas energías, la cual no se había identificado previamente.

Palabras clave: Colisiones, acelerador lineal, secciones transversales, espectrometría de masas, tiempo de vuelo, región de colisión simple, iones positivos, protones, gases atmosféricos, bajas energías, ionización, captura electrónica, disociación.

Dedicatoria

Agradecimientos

Al Dr. Farook Bashir Yousif, y a la M. en I. Dalila Martínez Molina, ya que sin su esfuerzo y compromiso con el proyecto, simple y sencillamente no hubiera sido posible la realización del presente trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, CONACyT, por el soporte económico otorgado a lo largo de este periodo de estudios, a través de la beca doctoral con número 216130.

A la Coordinación de Estudios de Posgrado que, mediante el Programa de Apoyo a los Estudios de Posgrado (PAEP), financió la asistencia a diversos eventos académicos a lo largo de todo el periodo de estudios.

A la Sociedad Mexicana de Física por el apoyo para asistir al evento *Canadian-American-Mexican (CAM 2013) Graduate Student Physics Conference*.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico de la UNAM, DGAPA, por el apoyo parcial a la presente investigación, mediante el proyecto PAPIIT-IN-116909.

Índice general

Resumen	2
Dedicatoria	4
Agradecimientos	5
Índice general	6
Introducción	9
1. Fundamentos	12
1.1. Colisiones	12
1.1.1. Descripción de una colisión	12
1.1.2. Tipos de colisiones	13
1.1.3. Secciones transversales	15
1.2. Medición de secciones transversales	16
1.2.1. Atenuación del haz	17
1.2.2. Mediciones angulares	19
1.2.3. Espectrometría de masas	20
1.3. Cálculo de secciones transversales	21
1.3.1. El criterio adiabático	22

1.3.2.	Otras aproximaciones	23
1.3.3.	Aproximación de Born-Oppenheimer	24
1.4.	Antecedentes y justificación	26
2.	Dispositivo experimental: El acelerador	29
2.1.	El haz de iones	30
2.2.	Zona de reacción	34
2.3.	Análisis de los fragmentos	35
2.3.1.	Iones rápidos	35
2.3.2.	Iones lentos, espectros de tiempo de vuelo	36
3.	Pruebas preliminares: La caracterización	39
3.1.	Voltaje de enfoque	40
3.2.	Voltaje de diez grados	43
3.3.	Filtro de velocidades	46
3.4.	Caja de Faraday	50
3.5.	Región de colisión simple	51
3.6.	Optimización de los espectros	53
3.6.1.	Simulación SIMION-7	54
3.6.2.	Determinación del tiempo de vuelo	56
4.	Condiciones experimentales	58
4.1.	Condiciones generales	58
4.2.	Condiciones particulares	61
4.2.1.	Dióxido de Carbono, CO_2	61
4.2.2.	Oxígeno, O_2 y Nitrógeno, N_2	61

4.2.3. Metano, CH_4	62
5. Resultados y análisis	63
5.1. Protones en CO_2	63
5.2. Protones en N_2 y O_2	69
5.3. Protones sobre CH_4	76
6. Conclusiones	83
Bibliografía	86

Introducción

A partir del primer cuarto del siglo XX, hasta la actualidad, inicios del siglo XXI, es innegable la trascendencia de los resultados experimentales que han surgido en el marco de las *colisiones atómicas y moleculares*, al entendimiento de una gran variedad de sistemas físicos, tanto desde el punto de vista de su aplicabilidad, como en el desarrollo de diferentes modelos teóricos [1]. Desde entonces, se han ido desarrollando numerosas técnicas para realizar estudios cada vez más amplios dentro de esta rama, logrando entender y recrear de manera más profunda, los fenómenos físicos intervinientes durante las colisiones, así como sus consecuencias sobre los sistemas involucrados. En este sentido y tomando en cuenta los avances tecnológicos en los equipos de investigación, siempre es posible (y en general, necesario) obtener un mayor número de datos experimentales, con mejoras sustanciales en precisión y confiabilidad, que puedan proveer y justificar teorías semiempíricas o semicuantitativas en la descripción de los procesos referentes [2].

Dentro de este contexto, es de gran importancia la obtención y el estudio de *las secciones transversales* (CS, por sus siglas en inglés) en colisiones de iones sobre blancos específicos, particularmente, cuando el haz incidente se compone de protones. Lo anterior, debido a la extensa utilidad de los resultados en diferentes áreas del conocimiento. Por citar algunos ejemplos, se encuentran, desde los trabajos pioneros sobre el medio interestelar y las altas capas atmosféricas, estudios de daños radiativos en sólidos, física de plasmas, modelado de láseres, emulsiones nucleares y diseño y construcción de reactores de fusión [3]; hasta aplicaciones mucho más modernas como son, el bombardeo de superficies, el desarrollo de técnicas de estudio en ciertas áreas de la biología, la química de la fase gaseosa y por supuesto en física médica. Más aún, desde el punto de vista teórico, y debido justamente a que los protones constituyen una de las partículas cargadas más importantes y fundamentales en el universo, el conocimiento de su interacción con varios tipos de materiales es una parte esencial de la física atómica básica, así como de la materia condensada [1,4].

De entre todos los trabajos teóricos y experimentales referentes a colisiones entre iones

y moléculas, es posible destacar *las interacciones entre protones incidentes en gases atmosféricos a bajas energías*, las cuales han permitido una comprensión cada vez mas certera de ciertos procesos naturales, tanto en la atmósfera terrestre, como en distintas atmósferas planetarias y lunares del sistema solar, en las cuales abundan gases como el CO_2 , N_2 , O_2 y CH_4 . Un considerable número de estudios se han llevado a cabo para entender los procesos asociados a la precipitación de partículas energéticas provenientes del viento solar y los rayos cósmicos; cuya composición, además de fotones, está esencialmente conformada por partículas viajeras de H y H^+ con energías de unos cuantos keV [5-7]. Estudios tales como la emisión de luz y la ionización en la atmósfera superior [5], las auroras boreales, así como la producción de corrientes atmosféricas iónicas y electrónicas [6,7]. Sin embargo, y en sintonía con la relevancia de la presente investigación, un número reducido de trabajos han puesto énfasis en los *procesos disociativos* para esta región energética; a pesar de la importancia de estos últimos, sobre todo, debido a que los datos proporcionados por los fragmentos, arrojan información directa sobre las reacciones entre las partículas e información adicional sobre su estructura y fuerza de acoplamiento [1].

Es bajo esta guía, que se desarrolló el siguiente trabajo, cuyo propósito general, es presentar las CS medidas, referentes a la *formación de iones positivos secundarios generados a partir del blanco*, $\sigma(X^+)$, en interacciones de protones con algunos de los gases atmosféricos importantes: Nitrógeno N_2 , Oxígeno O_2 , Dióxido de Carbono CO_2 y Metano CH_4 , en el intervalo de energías de entre 2 keV y 10 keV. Las mediciones de las CS se obtuvieron mediante el uso de un acelerador lineal, empleando la técnica de espectrometría de masas de *tiempo de vuelo* (TOF, por sus siglas en inglés).

Con la finalidad de exponer e interpretar, de forma relativamente sencilla, los resultados obtenidos, se plantea el desarrollo del presente trabajo de la siguiente manera. En un primer capítulo, se discuten los conceptos básicos referentes a las colisiones. Se menciona el concepto de colisión, así como el de sección transversal; posteriormente se describen algunos de los métodos más usuales para obtenerlas, tanto desde el punto de vista experimental, como teórico y se finaliza con una recopilación de los trabajos previos con mayor relevancia en el tema que se han llevado a cabo.

En el segundo capítulo, se muestra una detallada descripción del sistema experimental, mientras que en el tercero se discute cómo se fueron obteniendo los parámetros necesarios para lograr el funcionamiento óptimo de todos los elementos del acelerador. En el capítulo cuarto, se determina con precisión, aunque brevemente, la forma operacional con la cual se fueron adquiriendo los resultados experimentales.

Posteriormente, se presentan y se discuten exhaustivamente los resultados obtenidos para cada uno de los gases de estudio y se realiza su respectiva comparación con los ya existentes. Finalmente, en una sección dedicada a las conclusiones, se sintetizan las principales características y los alcances de los mismos.

Capítulo 1

Fundamentos

1.1. Colisiones

1.1.1. Descripción de una colisión

Desde una perspectiva experimental, existen ciertas generalidades en las que se pueden englobar *los procesos necesarios* para llevar a cabo una *colisión*. A la luz de un panorama general, los mecanismos se pueden describir de la siguiente manera. Se consideran inicialmente dos sistemas aislados, el primero conocido como *proyectil*, el cual es generalmente acelerado con respecto a una referencia fija dentro del laboratorio, mientras tanto, el segundo hace las veces de *blanco* y su velocidad es despreciable con respecto al primero. En ambos casos, los parámetros relevantes son designados de forma hasta cierto punto arbitraria, elegidos según sean las condiciones experimentales y los fenómenos particulares que se deseen entender; este primer proceso se conoce como la preparación de los sistemas. Posteriormente, ocurre la interacción entre ellos provocando, en general, cambios en sus respectivas estructuras internas y produciendo en ocasiones algunos subsistemas derivados. Finalmente, los sistemas se separan nuevamente, y tienen lugar ciertas mediciones adecuadas para determinar, ya sea la formación de nuevos fragmentos, o bien explicar los efectos de su interacción. El análisis del primer y tercer proceso, se puede llevar a cabo de manera directa, a partir de un estudio cinemático. Mientras que la interacción, envuelve uno de los problemas más trascendentales de la física [8].

1.1.2. Tipos de colisiones

Colisiones elásticas e inelásticas

Desde un punto de vista fenomenológico, son posibles de diferenciar tres tipos de procesos independientes que pueden ocurrir durante las colisiones¹. En los primeros, la energía interna de las partículas no cambia, dando lugar a lo que se conoce como *colisiones elásticas*; estos tipos de interacciones son relevantes para la explicación de varios fenómenos, como la viscosidad, la conductividad térmica y la movilidad iónica en gases [2,9]. Por otra parte, en lo referente a los segundos, tienen lugar *procesos inelásticos*, en los cuales interviene un cambio en la energía interna de las partículas; se pueden resaltar como ejemplos de este tipo de interacciones a la excitación electrónica, incluyendo por supuesto la excitación vibracional y la rotacional. En estos tipos de colisiones se mantiene intacta la estructura de las partículas involucradas en todo momento. Por último, y cuyo interés es primordial dentro del presente trabajo, se encuentran aquellas interacciones en las que hay un *cambio estructural* en una o en ambas partículas interactuantes, este tipo de procesos reciben el nombre de *reacciones* [10]. Con la finalidad de enfatizar la importancia de las reacciones dentro de la presente investigación, en la sección subsiguiente se discute en qué consisten y cuáles son las de mayor relevancia.

Reacciones

En las reacciones, al menos alguna de las partículas interactuantes *cambia su estructura atómica o molecular*, dando como resultado la posibilidad de generar nuevos *productos o fragmentos*. Particularmente, en interacciones entre iones y moléculas, las reacciones que ocurren con una mayor frecuencia son: ionización simple y múltiple, transferencia de carga, captura electrónica y disociación [11,12].

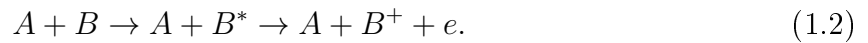
Para que ocurra el proceso de *ionización*, el blanco debe perder uno o más electrones en su interacción con el haz. Existen varias formas de que ésto ocurra. La primera consiste en lo que se denomina *ionización directa*, en cuyo caso, el blanco pierde uno o varios electrones *sin* que ocurra ningún otro evento intermedio. Una esquematización de la situación general se muestra a continuación (Ec. 1.1),



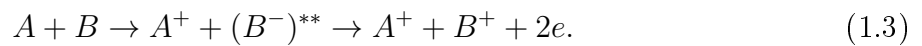
¹En el desarrollo del presente capítulo y en los subsiguientes, las colisiones a las cuales se hace alusión, son primordialmente, las efectuadas entre *haces iónicos u atómicos* incidentes en *gases* atómicos o moleculares.

En esta relación, se evidencia cómo una partícula del blanco B , inicialmente neutra, queda cargada positivamente con carga $+qe$, al ser desprendidos de ella q electrones, como consecuencia de la interacción con una partícula del haz A . El caso en el cual $q = 1$ es de suma importancia y se conoce como *ionización simple directa*.

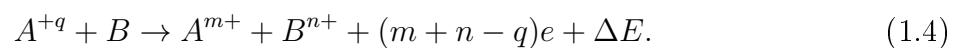
Bajo ciertas condiciones, pueden ocurrir algunos procesos internos previos, antes de que alguno de los electrones sea desprendido del blanco; se dice entonces que tiene lugar una *ionización indirecta*. Por ejemplo, en ocasiones, el proyectil incide sobre el blanco, dejándolo en un estado *excitado inestable* B^* . En el transcurso durante el cual B^* tiende a regresar a su estado base, es posible que se desprenda un electrón. La esquematización de este fenómeno se puede apreciar de la siguiente relación,



Finalmente, es posible que ocurra otro proceso sumamente interesante conocido como *ionización por captura electrónica o recombinación resonante*. En esta interacción, un electrón del haz es capturado por un elemento del blanco, quedando este último en un nivel de energía doblemente excitado inestable $(B^-)^{**}$, de tal manera que se pueden llegar a emitir hasta dos electrones,



Otro tipo de reacción, muy frecuente en el contexto de las colisiones, es el de *transferencia de carga*. En este fenómeno, un electrón pasa de una de las partículas interactuantes a la otra [13]. Una de las condiciones para que la transferencia de carga sea favorable, es que el proyectil sea *lento*, en el sentido de que la velocidad de colisión relativa sea del orden de la velocidad orbital de los electrones externos del blanco [12]. Bajo esta condición, se crea una molécula transitoria conformada por las partículas involucradas durante el transcurso de tiempo en el que se lleva a cabo la colisión; desde esta perspectiva, la captura electrónica se puede interpretar como una *transición electrónica* dentro de esta *nueva* molécula. Se dice entonces, que los mecanismos dominantes en la transferencia de carga, recaerán en el conjunto de las llamadas *transiciones adiabáticas*. Además de la velocidad relativa, otros parámetros relevantes que interfieren en el proceso son, la energía con la que incide el proyectil, así como su carga y el número de electrones disponibles en ambas partículas. Un panorama general de la situación se esquematiza a continuación,



En la relación anterior, se muestra cómo inicialmente una partícula del haz A tiene un exceso de carga $+qe$ mientras tanto el blanco B permanece neutro; posteriormente, hay un cambio en el estado de carga en ambas partículas; el proyectil A queda con carga $+me$ mientras que B con carga $+ne$. Por supuesto, durante la interacción se lleva a cabo un cambio en la energía interna de las partículas ΔE , asociado al *canal de reacción* involucrado que se define mediante,

$$\Delta E = I(A^{m+}) - E_i + I(B^{+n}) - E_j, \quad (1.5)$$

donde $I(A^{m+})$ e $I(B^{+n})$ representan las energías de ionización de ambas partículas, mientras que $E_{i,j}$ corresponden a sus respectivas energías internas después de la colisión. ΔE puede ser medida de forma indirecta y con ello obtener información sobre los potenciales de las moléculas involucradas [12,13].

Un caso particular de este tipo de reacciones, es el de *captura electrónica simple* (SEC, por su acrónimo en inglés), proceso en el cual se hace el intercambio de un sólo electrón,



Un último tipo de reacción es el de *disociación*, el cual resulta de especial interés cuando en la interacción intervienen moléculas. En general, en una colisión en la que sucede un proceso disociativo, ocurren simultáneamente y de manera compleja, uno o varios de los procesos anteriormente descritos, aumentando la dificultad en el estudio de este tipo de interacciones. El fenómeno disociativo se esquematiza en su forma más simple de la siguiente manera,



donde, la molécula inicial BC se fragmenta debido a la interacción con el haz, dando como resultado la formación de los productos B y C .

1.1.3. Secciones transversales

Uno de los conceptos pilares dentro de la rama de las colisiones, es el de *sección transversal*. Su trascendencia reside en que ha unido de manera en extremo exitosa un sinnúmero de predicciones teóricas (existen expresiones matemáticas que relacionan este parámetro con otras cantidades físicas del sistema de interés) con una inmensidad de resultados experi-

mentales². Es importante resaltar el hecho de que siempre es posible asociar *a todos y cada uno* de los distintos procesos ocurridos durante las colisiones, una sección transversal particular. Con la finalidad de establecer las bases para el entendimiento del presente trabajo, es conveniente definir este concepto de manera genérica como se describe a continuación³.

Supóngase que durante un intervalo temporal son lanzadas N_i partículas de un haz, caracterizadas por un parámetro i , e inciden sobre un blanco que contiene un número π de componentes individuales por unidad de área. Sea N_f el conteo de las partículas dispersadas en el estado f que son detectadas; entonces, se define la *sección transversal asociada al proceso, en el cual se involucra un cambio de las partículas del estado i al estado f* como,

$$\sigma_{if} = \frac{N_f}{N_i \pi}. \quad (1.8)$$

Bajo esta perspectiva, es posible entender a la CS como una *probabilidad de transición* de que durante el proceso las partículas pasen del estado i al estado f ⁴ [8]. Cabe señalar que, además de estar relacionadas con el tipo de partículas que interaccionan, las CS dependen de la energía de incidencia o de su equivalente, la velocidad relativa entre los sistemas.

1.2. Medición de secciones transversales

La capacidad de medir secciones transversales para una mayor diversidad de interacciones, está determinada por la evolución de los desarrollos tecnológicos existentes; en un inicio, solamente un reducido número de fenómenos podían ser estudiados desde una perspectiva experimental. Particularmente, en el contexto de los procesos disociativos, resulta determinante la sensibilidad y la velocidad de respuesta de los detectores involucrados para poder discriminar entre las diferentes interacciones ocurridas. Cabe destacar que en ocasiones se aplican una o más técnicas dentro del mismo estudio, ya que en general los métodos, más que ser excluyentes entre sí, bajo muchas circunstancias, resultan ser complementarios. A continuación se detallan tres de las técnicas de gran relevancia en la actualidad. La descripción de ellas se da de manera genérica, aunque por supuesto, lo que se encuentra en cada uno de los laboratorios donde se aplican estas técnicas, son variaciones e incluso

²Las CS son las cantidades comúnmente reportadas en la mayoría de los laboratorios en donde se efectúan colisiones.

³Esta es solamente una definición genérica de las CS y es adoptada porque es la que mejor refleja lo ocurrido durante las presentes mediciones.

⁴Por claridad se han seleccionado los subíndices i y f para denotar las condiciones iniciales y finales de los sistemas involucrados, aunque estos pueden consistir de todo un conjunto de parámetros independientes.

combinaciones de las mismas.

1.2.1. Atenuación del haz

Una de las técnicas más fructíferas para medir las secciones transversales, es el método de *atenuación del haz o rayo molecular*, el cual, consiste básicamente en monitorear los posibles elementos del haz después de atravesar una *celda de reacción* que contiene al blanco, y cuya geometría es conocida, en función de la cantidad de partículas allí contenidas [2]. Este método se sustenta en el hecho de que la presión medida en la celda y las intensidades, están ligadas a través de las secciones transversales. Con la finalidad de esclarecer la técnica, se tomará como base la descripción expuesta por Eliot en 1977, en un trabajo referente al estudio de colisiones entre protones y diversos gases [14].

Supóngase que se tiene un haz compuesto íntegramente de protones. El haz se hace interaccionar con un cierto gas de interés, dando como resultado que la estructura de varios de sus elementos se vea afectada; como consecuencia, emergerán, ya no solamente protones, H^+ , sino también partículas de H^0 y H^- . Es relativamente sencillo separar los elementos resultantes y determinar la fracción de cada uno de ellos con respecto a la intensidad inicial; basta por ejemplo, para los H^0 , colocar en la dirección inicial un detector multiplicador de electrones, mientras que para los iones H^- y H^+ es suficiente con desviarlos electrostáticamente hacia un par de cajas de Faraday. La ventaja de utilizar este tipo de detectores., es precisamente que las cajas de Faraday, consisten en arreglos electrostáticos conformados de varios de electrodos, situados de tal manera que permiten determinar las corrientes *absolutas*, y con ello las cantidades totales de los iones incidentes.

Sean F_i las respectivas fracciones de las partículas H^i emergentes de las colisiones, y sea π el número de partículas del blanco por unidad de área que se encuentran en la celda, claramente, las fracciones F_i dependerán de manera sustancial del valor que adquiera este parámetro, el cual a su vez puede ser expresado en términos de la presión P como,

$$\pi = \alpha P, \quad \text{donde } \alpha = \frac{N_a l}{RT},$$

con N_a el número de Avogadro, R la constante universal de los gases, l la profundidad de la celda y T la temperatura del sistema completo.

Al efectuarse las colisiones se alcanzará un equilibrio, que determinara las variaciones y la interdependencia de cada una de las fracciones; cuyas correlaciones estarán definidas por

el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales,

$$\frac{dF_i}{d\pi} = \sum_{j \neq i} (\sigma_{ji} F_j - \sigma_{ij} F_i), \quad j = -1, 0, 1, \quad (1.9)$$

que no son sino las ecuaciones usuales para equilibrio entre poblaciones. Existen varias observaciones que pueden ser planteadas de forma directa, como por ejemplo, siempre se cumple que $F_1 + F_0 + F_{-1} = 1$, además de que cuando $\pi \rightarrow 0$, $F_1 = 1$ y $F_0 = F_{-1} = 0$; mientras que en el caso opuesto en el que $\pi \rightarrow \infty$, se observa que $dF_i/d\pi = 0$, $i = -1, 0, 1$.

Es claro que las ecuaciones que determinan a las fracciones F_i están acopladas (Ec. 1.9), sin embargo, presentan características lineales aunado al hecho de que los coeficientes son constantes, y por lo tanto, pueden ser resueltas con los métodos convencionales de las ecuaciones diferenciales y el álgebra lineal de forma analítica. Como consecuencia, las soluciones generales para las F_i se escribirán como,

$$F_i = \left[F_{i\infty} + \sum_{j \neq i} \left(\frac{F_{i\infty} \nu - \sigma_{ji}}{\mu - \nu} e^{-\mu\pi} + \frac{\sigma_{ji} - F_{i\infty} \mu}{\mu - \nu} e^{-\nu\pi} \right) \right], \quad (1.10)$$

donde $F_{i\infty} \equiv \lim_{\pi \rightarrow \infty} F_i$, y las constantes μ , ν y A se definen de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i \neq j} \sum_{i \neq j} \sigma_{ij} \right) (1 + \sqrt{1 - A}), \\ \nu &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i \neq j} \sum_{i \neq j} \sigma_{ij} \right) (1 - \sqrt{1 - A}), \text{ y} \\ A &= \frac{\left[4 \sum \sum \sum_{i \neq j \neq k} \left(\sigma_{ik} \sigma_{kj} + \frac{1}{2} \sigma_{ik} \sigma_{jk} \right) \right]}{\left(\sum \sum_{i \neq j} \sigma_{ij} \right)^2}. \end{aligned}$$

A partir del desarrollo anterior, el problema de determinar las secciones σ_{ij} está formalmente resuelto si se conocen las fracciones F_i , basta con invertir las ecuaciones 1.10. Sin embargo, es posible ir aún más lejos si se consideran solamente las aproximaciones a primeros órdenes de π , o equivalentemente de P , ya que las expresiones para las F_i se simplifican considerablemente,

$$F_j = \alpha \sigma_{ij} P + \frac{1}{2} (\sigma_{ik} \sigma_{kj} - \sigma_{ij}^2 - \sigma_{ij} \sigma_{ji} - \sigma_{ij} \sigma_{ik} - \sigma_{ij} \sigma_{jk}) \alpha^2 P^2. \quad (1.11)$$

Mas aún, dentro del régimen de *colisión simple*, bajo el cual la presión es suficientemente baja como para que una partícula del haz colisione *a lo más* con una de las partículas del blanco⁵, es posible escribir a las F_j dentro de la aproximación lineal, en donde, las diferentes fracciones serán proporcionales a la presión P ,

$$F_j = \alpha \sigma_{ij} P, \quad (1.12)$$

es decir, el monitoreo de las fracciones F_j en función de la presión P , determinará las secciones transversales σ_{ij} de forma directa.

En resumen, es posible encontrar las secciones, σ_{ij} , a partir de conocer las diferentes fracciones F_j en términos de la presión P , ya que dentro del régimen de colisión simple, estas dos variables se relacionarán linealmente, determinando a su vez una pendiente que depende justamente de las σ_{ij} .

1.2.2. Mediciones angulares

En ocasiones, es posible recrear una imagen mas detallada de las interacciones con la ayuda de las *secciones transversales diferenciales o angulares* (DCS, por sus siglas en inglés) en las cuales, la energía y la distribución angular de los fragmentos puede ser medida directamente. De las relaciones de conservación de energía y momento, la redistribución de la energía entre los fragmentos puede ser determinada y con ello ayudar a vislumbrar los diferentes mecanismos intervinientes a lo largo del proceso [15].

Una forma de determinar las DCS es a través de las *mediciones angulares*. El desarrollo experimental de esta técnica, es en cierto sentido una generalización del método de atenuación del haz y se puede describir brevemente de la siguiente manera [15]. Inicialmente, se hace incidir un haz de partículas bien definidas y con una energía determinada sobre una celda de reacción de longitud l , en la cual se introduce el blanco de interés, hasta llegar a tener una densidad volumétrica de partículas n constante. Después de atravesar la celda, el haz resultante es separado de acuerdo a su respectivo estado de carga; las partículas neutras mantienen la misma dirección y son detectadas en un multiplicador de electrones mientras que las cargadas se desvían y se monitorea su intensidad con ayuda de una o varias cajas de Faraday.

Es a partir de determinar la intensidad de corriente, $I(\theta, \phi)$, generada debido a las partí-

⁵En el presente dispositivo experimental se ha encontrado que esto ocurre para presiones menores a 3×10^{-5} Torr.

culas detectadas en los ángulos θ y ϕ , que se puede evaluar la *sección transversal diferencial* $d\sigma$ de acuerdo con,

$$d\sigma = \frac{I(\theta, \phi)}{I_0 n l} d\Omega, \quad (1.13)$$

donde $d\Omega$ es el ángulo sólido subtendido por los ángulos θ y ϕ , e I_0 es la corriente total inicial. A partir de $d\sigma$ es inmediato obtener la sección transversal total, basta con realizar la respectiva integración angular,

$$\sigma = \int d\sigma = \int \frac{I(\theta, \phi)}{I_0 n l} d\Omega. \quad (1.14)$$

La ventaja de este método es evidente, pues aparte de que es posible evaluar las secciones totales, también permite entender lo que ocurre en la medición para los distintos ángulos subtendidos sobre el espacio.

1.2.3. Espectrometría de masas

La espectrometría de masas (MS, por su acrónimo en inglés) es una técnica experimental que nació de los trabajos de J. J. Thompson en 1913 y cuya principal característica consiste en descomponer una sustancia, molécula o conjunto de moléculas, en componentes más elementales, cuyo análisis puede proveer información relevante de la sustancia, o en ocasiones, de algún tipo de interacción particular. En general, la determinación y el estudio de los fragmentos elementales, se realiza en función de su relación *masa-carga*, mediante la aplicación de campos electromagnéticos [16]. La MS ha ido aumentando en importancia debido a su gran aplicabilidad en diferentes áreas de la física atómica y molecular, la química y la biología. Particularmente en estudios para análisis orgánicos, investigación clínica práctica (medicina), control de calidad (industria), determinación de transiciones metaestables, de energías de disociación y afinidades electrónicas, composición superficial; así como estructura, orientación y distribución espacial de las especies químicas y biomoleculares presentes en superficies biomateriales (importante en el desarrollo de implantes), sólo por citar algunos ejemplos [17,18].

Una ramificación de esta técnica es justamente la de *tiempo de vuelo*, (TOF, por sus siglas en inglés), en la cual se combinan, la espectrometría de masas con la medición de distintas secciones transversales. Su descripción y justificación es relativamente sencilla y debido a su importancia dentro de la presente investigación, se expone en detalle dentro de la sección 2.3.2. Mientras tanto, basta con mencionar que las CS se pueden obtener a partir

del conteo y la identificación de los diferentes fragmentos formados en las colisiones.

1.3. Cálculo de secciones transversales

En ciertas situaciones, la discrepancia entre ciertos modelos teóricos en comparación con los correspondientes resultados experimentales, se debe a la complejidad matemática involucrada dentro de la propia teoría de colisiones, heredada justamente de las mismas estructuras atómicas y moleculares. Esta complejidad, imposibilita el hecho de que se puedan realizar aproximaciones que incluyan todas las características físicas involucradas en las interacciones, dando como resultado que en ocasiones los modelos no se ajusten perfectamente a las mediciones, e incluso lleguen a presentar diferencias significativas. Por ello, aunque casi siempre se recurre al uso de desarrollos *aproximados* para lograr un mejor acercamiento, así como un entendimiento más profundo al problema en consideración, es necesario tener en cuenta que estas aproximaciones, *no* son válidas para todas las situaciones experimentales. El grado de ajuste del modelo utilizado dependerá tanto de las partículas intervinientes, así como de las condiciones particulares de las interacciones, teniendo en cuenta que en todos los casos la diferencia más importante será en términos de la energía de incidencia del proyectil [19,20].

Existen tres principales aproximaciones en el contexto de las colisiones. En la primera, dentro del régimen de bajas energías, región en la cual, la velocidad del proyectil es menor en comparación con el orden de magnitud de la velocidad de los electrones externos [2], se propone a la función de onda del sistema como una superposición de ondas representantes de una pseudomolécula formada por el haz y el blanco. En ella, se determinan los coeficientes de expansión usando un principio variacional, habiendo simplificado inicialmente la ecuación de Schrödinger al considerar que las partículas incidentes prácticamente no sufren deflexión alguna. Para la segunda aproximación, se utiliza la teoría de perturbaciones cuántica a primeros órdenes y se determina la amplitud de dispersión para evaluar la correspondiente sección transversal. Finalmente, dentro del régimen de altas energías, se usa un tratamiento, generalmente combinación de la teoría cuántica y la clásica, permitiendo con ello la estimación de las CS para sistemas un poco más complejos [9].

A continuación se describen un par de tratamientos con todo detalle, los cuales han permitido estimar las secciones transversales correspondientes a un considerable número de interacciones para distintos sistemas físicos, a partir de donde se ha podido comparar con los respectivos resultados experimentales.

1.3.1. El criterio adiabático

En 1949, H. S. Massey propuso uno de los desarrollos pilares dentro del contexto de las colisiones atómicas y moleculares, particularmente para los procesos donde interviene un intercambio de carga. Este tratamiento, conocido como la aproximación *adiabática*, determina una región energética para la cual las secciones transversales alcanzan un máximo [2]. La importancia de este desarrollo, es que ha servido, no sólo en el cálculo de las CS, sino también, en la determinación de otras cantidades como los niveles de energía de ciertos átomos y moléculas [21].

Supóngase que se hace interaccionar un ion con una molécula. Es posible abordar el tratamiento de esta interacción considerando que ambos elementos conforman un sólo conjunto: el sistema *ion-molécula*. Considérese entonces que tiene lugar una transición electrónica que envuelve un cambio en la energía interna ΔE . Se ha observado experimentalmente que si ΔE es pequeña, entonces, la sección transversal asociada a la transición será grande; más aún, en muchos casos, la variación de la CS, cuando se toma una velocidad relativa de impacto fija, sigue una curva de resonancia cuyo máximo ocurre en $\Delta E = 0$. La interpretación de este resultado se puede entender considerando una *región adiabática*, en la cual, las partículas se aproximan de manera que el estado de movimiento interno se va ajustando gradualmente a la perturbación, de tal forma que no ocurre transición final alguna, aunque sí se lleve a cabo el intercambio de carga.

Con la finalidad de profundizar en la descripción, considérense i y f los estados inicial y final del sistema respectivamente, con una diferencia de energía asociada ΔE . Cuando las partículas se separan una cierta distancia, el sistema fluctuará entre i y f con una frecuencia del orden de $\Delta E/h$. Si el número de fluctuaciones durante la colisión es alta, las condiciones serán cercanas a las adiabáticas y por ello la probabilidad de encontrar al sistema en el estado f será baja. Si se toma en cuenta que el tiempo de colisión es a/v , donde a es un parámetro del orden de las dimensiones atómicas, y v es la velocidad relativa, entonces las condiciones adiabáticas serán válidas cuando,

$$\frac{a\Delta E}{hv} \gg 1. \quad (1.15)$$

y la probabilidad de transición será baja; es decir, para que exista una posibilidad considerable de que ocurra la transición, se debe cumplir que,

$$\frac{a\Delta E}{hv} \approx 1. \quad (1.16)$$

En términos generales, la CS será una función decreciente de $a\Delta E/hv$, que alcanzará un máximo cuando se cumpla la condición de resonancia, es decir, cuando $\Delta E = 0$.

De la relación anterior, (Ec. 1.16) es posible determinar la región adiabática en términos del cambio de energía ΔE , de la velocidad relativa de movimiento v y del parámetro a , y con ello determinar el intervalo energético en el cual se espera que la CS sea máxima. Cabe señalar, que la importancia de este principio radica en que un sinnúmero de trabajos lo han tomado como base para comparar sus diversos resultados experimentales [20].

Es verdad que la teoría ha sido fructífera en el entendimiento de distintas interacciones, sin embargo hay algunos tipos de interacciones en los cuales aplicar estos resultados sería totalmente inadecuado, específicamente, aquellos en que las diferentes curvas de energía potencial inicial y final se cruzan, debido a que la separación internuclear es tan pequeña, que la región adiabática es prácticamente inexistente [21]; por ello, para entender estos procesos, es preciso que sean abordados a partir de otro tipo de aproximación.

1.3.2. Otras aproximaciones

Existen algunas otras aproximaciones que se emplean en el cálculo de las CS para bajas energías. Por ejemplo, en ocasiones, resulta fructífero definir nuevos parámetros más convenientes acordes con el sistema de estudio. El caso más significativo es el de las *variables reducidas*, las cuales son un par de parámetros, que resultan de gran ayuda, sobre todo cuando se trabaja dentro del régimen clásico y semiclásico [22].

Una manera de entender estas variables es la siguiente. Sea $\sigma(\theta, E)$, la sección transversal diferencial asociada al proceso, la cual claramente, depende tanto del ángulo de dispersión θ , como de la energía de incidencia E . Se definen las variables reducidas como,

$$\tau = E\theta \quad y \quad \rho = \theta \sin\theta \sigma(\theta, E). \quad (1.17)$$

El ángulo reducido τ , es de particular importancia, debido a que a primera aproximación, es una función solamente dependiente del parámetro de impacto de la colisión b , facilitando el problema de inversión, a partir del cual, con ayuda de los resultados experimentales, es posible evaluar el potencial intermolecular [22].

Otro tratamiento de interés, es el basado en el *parámetro de impacto*; en esta aproximación, se propone al núcleo esencialmente como una partícula clásica, mientras tanto, las transiciones electrónicas son analizadas utilizando la teoría de perturbaciones cuánticas

[23]. En su expresión más simple, esta aproximación ignora el efecto de la interacción sobre la velocidad relativa de las partículas, suponiendo que ésta permanece constante durante la colisión; es decir, que no hay deflexión después de efectuadas las colisiones [22]. Finalmente, el método autoconsistente de *Thomas-Fermi*, propone la evaluación de las CS a partir de utilizar la mejor función de distribución electrónica [24].

Como siempre, la manera correcta de discriminar entre la aproximación más conveniente, es considerando la longitud de onda asociada al movimiento relativo; que en el caso de los protones a bajas energías, resulta en general pequeña comparada con las dimensiones atómicas y moleculares⁶, y por lo tanto, es válido considerar el movimiento como esencialmente clásico [2].

1.3.3. Aproximación de Born-Oppenheimer

Por completez y debido a que es el tratamiento que se ha estudiado con mayor detalle dentro del tema de dispersión, a continuación se discutirá la aproximación de Born-Oppenheimer (o simplemente de Born). Este tratamiento es útil, no solo para evaluar las secciones transversales, sino también las distintas energías transferidas en diferentes procesos, además de ser la técnica natural empleada dentro del régimen de altas energías (mayores a 100 keV) [9], en la que se determinan separadamente el movimiento electrónico y el movimiento nuclear de la molécula, partiendo del hecho, que los electrones son mucho más ligeros que el núcleo, y por ello, ajustan su posición en un tiempo infinitesimal comparado con el movimiento nuclear. La separación entre el movimiento nuclear y electrónico introduce de manera natural a la idea del núcleo moviéndose a través de una superficie de energía potencial determinada, la cual puede ser empleada en cálculos clásicos, semiclásicos o cuánticos [25].

En este tipo de cálculos, lo que se busca es obtener el elemento de matriz para alguna de las transiciones electrónicas inducidas por el campo de la partícula incidente, y efectuar la suma sobre todos los posibles estados iniciales y finales, y a su vez, sobre todos los electrones del blanco. Born propone que si el cambio en el momento de la partícula durante la colisión es pequeño, se pueden ignorar ciertas pérdidas de energía que llegarán a afectar a la transición final. Para que esto ocurra, es necesario que la velocidad del haz sea mucho mayor que la de los electrones orbitales, es decir, cuando la energía de interacción es alta o bien, cuando las partículas del haz son relativamente ligeras [19].

⁶La longitud de onda λ asociada a los protones, se encuentra entre los 0.9 y los 0.3 pm para el intervalo energético de uno a diez keV.

Con el propósito de profundizar un poco más acerca de esta aproximación, se discutirá a continuación el desarrollo propuesto por Massey y Smith en 1933 [26], en un trabajo en extremo relevante dentro del terreno de las colisiones, que trata justamente de las interacciones entre iones positivos incidentes en gases.

Considere la interacción de dos tipos de partículas A y B , tomando como referencia la posición r del centro de masa. En este sistema, la ecuación de Schrödinger para la función de onda Ψ , se escribe de la siguiente manera,

$$\left[\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla^2 - H_a(r_a) - H_b(r_b) - V(r, r_a, r_b) - E\right]\Psi = 0, \quad (1.18)$$

donde, μ es la masa reducida del sistema, r_a y r_b , son las posiciones de A y B medidas a partir del centro de masa respectivamente; H_a y H_b , los Hamiltonianos independientes y $V(r, r_a, r_b)$, la interacción entre ambas partículas.

Sea ψ_n la solución al problema para ambas partículas independientes, sin tomar en cuenta la interacción, y E_n su energía asociada. Siempre es posible encontrar la solución general del problema, en términos de una combinación lineal de las diferentes ψ_n . Particularmente, en la región asintótica, cuando $r \rightarrow \infty$, la solución a la ecuación 1.18 toma la forma,

$$\Psi \approx e^{ikrcos\theta}\psi_0(r_a, r_b) + \sum f_n(\theta, \phi)\frac{e^{ik_n r}}{r}\psi_n(r_a, r_b), \quad (1.19)$$

con k_n definida como $k_n^2 = 8\pi^2\mu(E - E_n)/h^2$ y $f_n(\theta, \phi)$ la amplitud de dispersión. Es a partir de la relación anterior, (Ec. 1.19), que se evalúa la sección transversal σ_n , asociada a la transición del sistema al estado n -ésimo, debido justamente al impacto, es decir;

$$\sigma_n = \int_{\Omega} \frac{k_n}{k_0} |f_n(\theta, \phi)|^2 d\Omega. \quad (1.20)$$

La forma usual de obtener f_n es reescribiendo la ecuación de onda inicial Ψ , en términos de las funciones de onda independientes ψ_n , y de una función que sólo depende de r ,

$$\Psi = \sum F_n(r)\psi_n(r_a, r_b), \quad (1.21)$$

un pequeño desarrollo, muestra que las funciones F_n deben satisfacer la siguiente relación,

$$(\nabla^2 + k_n^2)F_n = \sum U_{mn}F_m, \quad (1.22)$$

donde U_{mn} se define de la siguiente manera,

$$U_{mn} = \frac{8\pi^2\mu}{h^2} \int V(r, r_a, r_b) \psi_n^*(r_a, r_b) \psi_m(r_a, r_b) dv_a dv_b. \quad (1.23)$$

La ecuación 1.22 puede ser extremadamente compleja en la mayoría de las situaciones físicas. Sin embargo, cuando se hace la aproximación, en la cual, la velocidad relativa entre A y B es mayor que las velocidades electrónicas internas (aproximación de Born), es posible despreciar los términos asociados a las ondas dispersadas en 1.22 llegando a,

$$(\nabla^2 + k_n^2)F_n = U_{0n}F_0 = U_{0n}e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}, \quad (1.24)$$

a partir de donde se determina que,

$$f_n(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int U_{0n} e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}_n) \cdot \vec{r}} dv. \quad (1.25)$$

Esta última relación ha sido utilizada en un sinnúmero de estudios, tanto teóricos como experimentales. Finalmente, cabe mencionar que existen correcciones a este método, como por ejemplo la ecuación de Bethe-Bloch, en donde bajo ciertas restricciones, se toman en cuenta las velocidades de los electrones de las últimas capas electrónicas [19].

1.4. Antecedentes y justificación

La importancia y la aplicabilidad de las CS sigue provocado un auge en el cálculo (cuando es posible) y en la medición de las mismas [27]. Sin embargo, debido a que determinarlas matemáticamente, es en extremo complicado y en ocasiones imposible (particularmente a energías bajas e intermedias) las únicas posibilidades de obtenerlas, son a partir de mediciones realizadas en el laboratorio [28]. En ciertas situaciones, aún desde el punto de vista propiamente teórico, los avances en el conocimiento de los fenómenos involucrados en las colisiones, dependen altamente de la obtención y precisión de los datos experimentales [29]. No obstante que se han realizado muchas y muy distintas investigaciones referentes al tema, las CS medidas son aún fragmentarias y no todas consistentes entre sí, dando como resultado, el que distintos grupos experimentales sigan poniendo énfasis en la medición de estas cantidades [4].

Aunque los experimentos han llegado a ser muy variados y los resultados incontables,

es posible resaltar ciertas generalidades cuando la interacción se efectúa en el intervalo de bajas energías. Por ejemplo, en colisiones ion-molécula, existen diferentes reacciones involucradas que compiten entre sí, tales como disociación, ionización y captura electrónica, y la importancia de cada una de ellas, depende, tanto del estado inicial de las partículas, como de la energía de colisión. Sin embargo, por debajo de los 50 keV la interacción dominante es la captura electrónica, mientras que para energías un poco mayores el mecanismo dominante, es la ionización directa [15,28,30,31]. En el caso de los protones, se tiene la ventaja de que las fuerzas de dispersión pueden ser despreciadas, y además, debido a su gran afinidad electrónica y reactividad, pueden ser involucrados en procesos reactivos o de transferencia de carga [32], a partir de los cuales es posible determinar, teniendo cierto cuidado, los niveles de energía molecular. Finalmente, en este tipo de interacciones se ha evidenciado que, cuando la diferencia entre la afinidad electrónica del ion incidente y el potencial de ionización del blanco es grande, se ve favorecida la producción de iones excitados [33].

Por otro lado, en cualquier interacción ion-molécula, la perturbación del proyectil crea una excitación; si la energía de excitación vertical es mayor que la energía de disociación del blanco, entonces existirá la posibilidad de que varios electrones sean removidos de su posición original, y con ello, la molécula eventualmente se vuelva inestable, decayendo posteriormente en varios fragmentos. Cuando esto sucede, la información obtenida puede ser usada para determinar la estructura y el análisis de los canales mismos de disociación, así como para identificar estados electrónicos de los fragmentos [34,35].

Una de las primeras aplicaciones de las CS, se dio en la física espacial, particularmente en interacciones entre el viento solar (protones viajeros con energías menores a diez keV) y la atmósfera terrestre (principalmente con partículas a más de 100 km sobre la superficie) [36]. Estas interacciones, en las cuales ocurre una cierta deposición de energía, pueden causar procesos en los que se lleve a cabo un intercambio de carga y en algunos casos disociación (el más común en O_2) así como procesos de excitación (el más importante en la serie de Lyman para el N_2) generando con ello auroras boreales [5]. Finalmente, como consecuencia de los descubrimientos espaciales (por ejemplo, la identificación de los componentes atmosféricos de Titán), el interés en moléculas presentes en atmósferas interplanetarias ha ido en aumento [37].

Otra aplicación de bastante interés, ocurre dentro de la física de plasmas. La medición de las CS para ciertos procesos atómicos ha sido de importancia para determinar la composición [38], el tiempo de confinamiento [39] y en general, el comportamiento de los plasmas; dando lugar al desarrollo de dispositivos de fusión nuclear controlada y en el desarrollo de fuentes de iones para aceleradores de altas energías [9,40,41].

El conocimiento de las CS, también ha permitido el desarrollo de otras líneas de investigación, como por ejemplo, el desarrollo de detectores de partículas, el estudio de sistemas de láseres de longitud de onda corta [33], la interpretación de fenómenos microscópicos de deposición de energía, conversión y flujo en gases, así como las distintas reacciones químicas que pueden ocurrir en ellos [42,43], la elaboración de cámaras de ionización y contadores [44], la dinámica química (técnicas de haces moleculares), sin mencionar la infinita gama de aplicaciones en ciencias médicas, como es el caso de tratamientos de tumores [4,45].

Bajo este contexto, las secciones obtenidas en el presente trabajo resultan, por un lado, suplementarias a las de otros grupos de investigación, como es el caso del N_2 , O_2 y CO_2 , al dar énfasis a los procesos disociativos, y *complementando* a su vez algunos datos previamente obtenidos; y por otro, innovadoras, debido a que es la primera vez que se realizan las mediciones de algunas de las secciones específicas, como ocurre con el CH_4 . La aplicabilidad que puedan llegar a tener estas mediciones, es amplia y prometedora en muchas áreas del conocimiento, aunque claro está, con una pretensión dirigida a entender de manera más profunda los procesos atmosféricos naturales y buscando la viabilidad de generar algunos otros artificiales que ayuden a la mejora y sustentabilidad de la atmósfera terrestre.

Capítulo 2

Dispositivo experimental: El acelerador

El desarrollo de los experimentos que condujeron a la obtención de las secciones transversales de interés, objetivo fundamental del presente trabajo, se llevaron a cabo en un colisionador lineal, diseñado para acelerar iones positivos dentro del intervalo de energías de uno a diez keV¹.

Los dos elementos más importantes del acelerador son, *un cañón de iones* tipo Colutron, modelo G1 (lugar donde se encuentran: la fuente de iones, un conjunto de lentes electrostáticas y el filtro de velocidades) por una parte, y *una cámara de reacción* (zona en la cual se introduce el blanco y posteriormente se efectúan las colisiones) por otra. Desde luego, el colisionador cuenta con sus respectivas zonas de detección: una, destinada a la selección y el conteo de los fragmentos derivados del haz y otra, exclusiva para el análisis de los iones positivos generados a partir del blanco; así como varias componentes destinadas a la regulación y monitoreo de la presión a lo largo de todos sus elementos.

En el presente capítulo, se describe en forma detallada la estructura del acelerador, y se explican los procedimientos llevados a cabo, desde la generación del haz de iones, hasta la adquisición de los resultados experimentales finales, es decir, la medición de las secciones transversales.

¹El acelerador se encuentra en la Facultad de Ciencias de la UNAM, y fue construido bajo la dirección de la Dra. Beatriz Fuentes en colaboración del Dr. Farook Bashir Yousif.

2.1. El haz de iones

A lo largo del acelerador, el haz debe completar diferentes etapas desde su creación, hasta su incidencia en la región donde tendrán lugar los impactos sobre el blanco elegido. Para ello, el primer paso a seguir, es la generación de los iones, posteriormente tiene lugar la aceleración y el enfoque de los mismos y finalmente se efectúa la selección del tipo específico de partículas para realizar las colisiones (protones para el presente trabajo). Es importante señalar que en todo momento se debe tener control absoluto del haz, ya que tanto la estabilidad, como la intensidad y el enfoque del mismo, son fundamentales dentro de la resolución de los datos obtenidos².

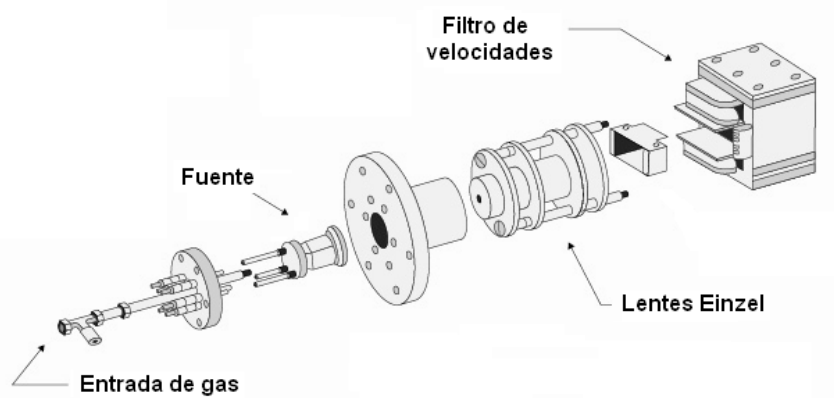


Figura 2.1. Cañón de iones Colutron modelo G-1.

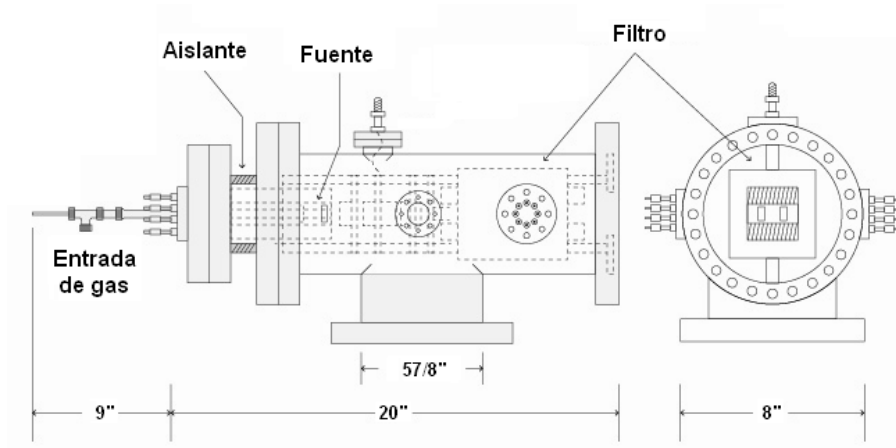


Figura 2.2. Esquemmatización del cañón.

²Desde su generación, hasta el momento de las colisiones intervienen de manera directa nueve parámetros experimentales en la creación y estabilización del haz; estos parámetros varían en función de la energía de aceleración.

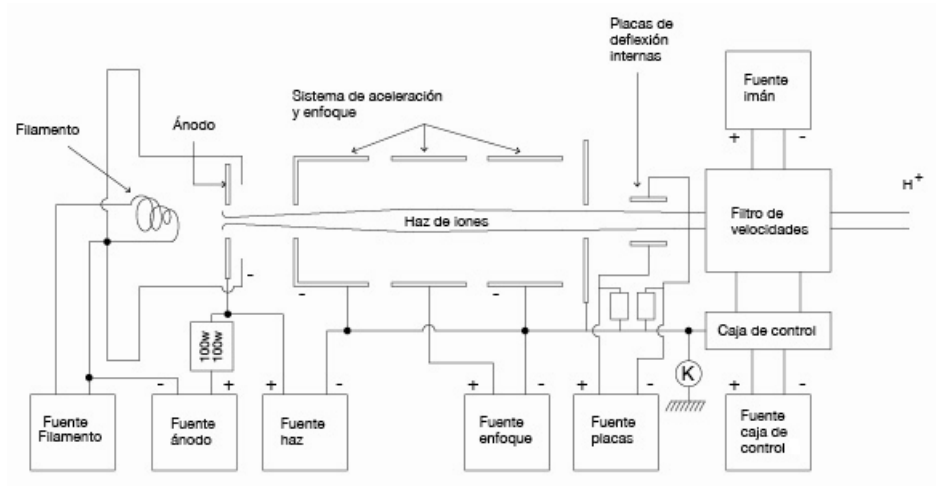


Figura 2.3. Diagrama de conexiones.

Los iones se generan al provocar una descarga en arco a partir de introducir una mezcla de H_2 y Ar en una fuente de Nitrito de Boro³. Para iniciar la descarga, es necesario aplicar una corriente continua de aproximadamente 10 A (15 V) a un filamento de tungsteno con el propósito de provocar la emisión de termoelectrones, los cuales, son a su vez acelerados hacia un ánodo mediante la aplicación de un voltaje cercano a los 80 V. A su paso, los electrones inciden sobre la mezcla de gases previamente admitidos y generan con ello distintas especies de iones tales como H^+ , H_2^+ , H_3^+ , Ar^+ , entre otros⁴. A partir del H_2 se obtienen los protones requeridos, mientras tanto, sin el uso del Ar no se lograría una descarga lo suficientemente intensa como para generar el plasma.

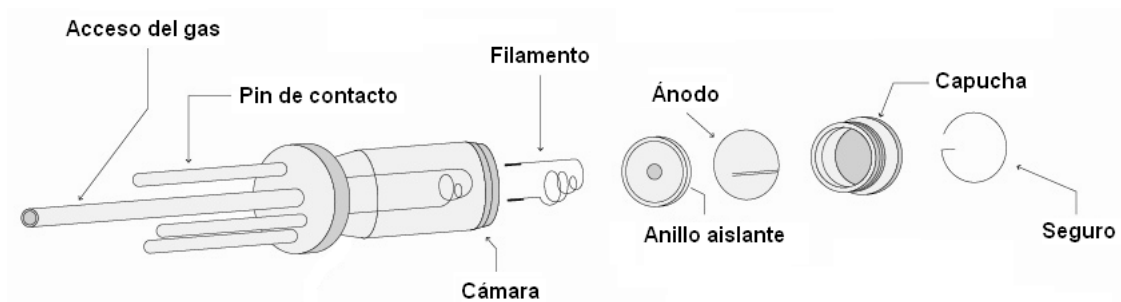


Figura 2.4. Fuente de iones Colutron modelo Q-101.

En este punto, los iones creados en la fuente son extraídos, acelerados y enfocados por un conjunto de lentes electrostáticas. Estas lentes constan de un arreglo de tres electrodos

³La mezcla se controla a través de un medidor de presión, *termocupla*, y en general está constituida por un 40% de Ar y un 60% de H_2 ; bajo estas condiciones se alcanza una corriente estable de protones del orden de hasta $10^{-7}A$.

⁴Los iones son los causantes de la corriente de descarga del plasma, esta corriente es generalmente de alrededor de 300 mA.

cilíndricos concéntricos conocido como lentes de Einzel. El primero y tercero de ellos tienen la función de acelerar los iones con energías de entre uno y diez keV según sea la elección deseada. Por otra parte, el segundo de los electrodos sirve como lente de enfoque para los iones y se opera con un voltaje de aproximadamente 840 V por cada kV de voltaje de aceleración.

La selección de los protones de entre las diferentes especies creadas en la fuente, se logra con la ayuda de un filtro de velocidades tipo Wien. El filtro consta de un par de electroimanes que generan un campo magnético vertical \mathbf{B} ; así como de un par de placas electrostáticas verticales que crean un campo eléctrico horizontal \mathbf{E} . Ambos campos son, además, ortogonales a la dirección de incidencia del haz, y lo desvían a menos que la rapidez v de las partículas que lo conforman cumplan con⁵,

$$v = \frac{E}{B}. \quad (2.1)$$

Para que esta condición sea válida, es de vital importancia que la razón E/B sea constante en la región central del filtro por donde se espera que pase el haz. Por ello, las placas electrostáticas, así como los electroimanes, son diseñadas de tal manera, que tanto E y B (más que exigírseles uniformidad) obedezcan la misma dependencia espacial [46].

Los iones cuya velocidad no cumpla con la relación anterior, se perderán e impactarán con el propio acelerador al ser desviados. A partir de un análisis de conservación de energía, es posible reescribir la selección de velocidad v en términos de la razón *masa-carga* de las partículas, a través de,

$$\frac{1}{2}mv^2 = qV_a, \quad (2.2)$$

donde V_a es el voltaje de aceleración, m la masa y q la carga de las partículas. Por otra parte, los campos E y B se relacionan directamente, y de manera lineal, con los parámetros controlables del sistema experimental V_f , el voltaje aplicado a las placas e i_m , la corriente inducida en el electroimán, respectivamente. Bajo estas consideraciones, es posible determinar la condición entre la razón m/q de las partículas no deflectadas y los parámetros V_a , i_m y V_f ,

$$\frac{m}{q}(V_a, i_m, V_f) = C V_a \left(\frac{i_m}{V_f}\right)^2. \quad (2.3)$$

La constante C depende de la geometría del filtro y ha sido determinada durante una

⁵Esta expresión se sigue de la fuerza de Lorentz, al exigir que la interacción debida a los campos sobre las partículas por seleccionar sea nula.

caracterización previa⁶, con lo cual, dado un voltaje de aceleración V_a , es posible realizar un ajuste sobre los parámetros del filtro, V_f e i_m , y permitir con ello el paso de una única especie de iones, particularmente protones, para efectuar las colisiones.

Una vez que los protones salen del filtro, son desviados diez grados por un par de placas electrostáticas verticales, a las cuales se les aplica un voltaje cercano a 120 V por cada 1 kV de V_a [47]. La desviación sirve para impedir que los fotones, generados en la fuente, alcancen la zona de reacción e interaccionen con las partículas del blanco, afectando los resultados de la detección.

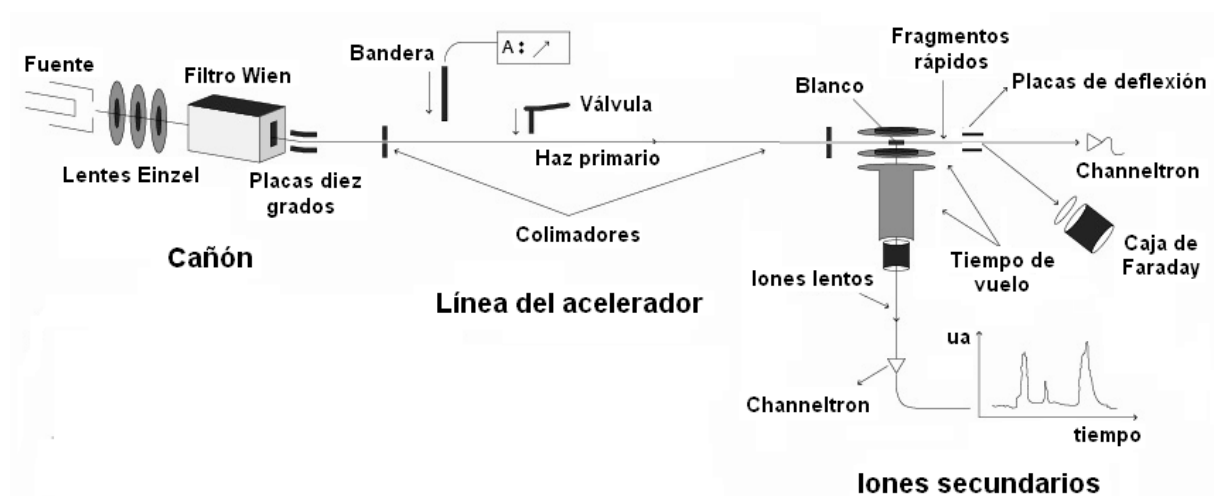


Figura 2.5. Esquemmatización del acelerador.

Posteriormente, el haz es colimado por dos discos circulares concéntricos con aperturas de 2 mm cada uno y separados aproximadamente 43 cm antes de ingresar en la zona de interacción. En total, los iones viajan cerca de 130 cm desde su creación hasta la región de impacto. Evidentemente, en todo el interior del acelerador es necesario un alto vacío para evitar que los protones interaccionen con partículas residuales de aire. Este vacío se logra con la ayuda de cuatro bombas: dos mecánicas para alcanzar el *vacío primario*, alrededor de 10^{-2} Torr, y dos turbomoleculares para llegar al *vacío secundario*, cercano a 10^{-7} Torr, suficiente para que el camino libre medio de los protones sea de un poco más de diez veces el tamaño del acelerador⁷.

⁶ $C = 2(dk)^2$, donde d es la separación entre las placas y k la constante de proporcionalidad entre i_m y B (véase la sección dedicada a la caracterización del filtro de velocidades).

⁷El camino libre medio l es inversamente proporcional a la densidad, y por lo tanto a la presión P del gas. De acuerdo al tratamiento de Loschmidt [48], si se considera a las moléculas del gas como esferas de radio r ; se tiene que $l = kT/(\sqrt{8}\pi rP)$, donde T es la temperatura absoluta del sistema y k la constante de Boltzmann.

2.2. Zona de reacción

La cámara de reacción es la región en la cual se efectúan las colisiones. Aquí es donde se introduce el gas de interés, *el blanco*, y se encuentra un arreglo de placas electrostáticas llamado *sistema de tiempo de vuelo*. A continuación se presenta una esquematización de la cámara.

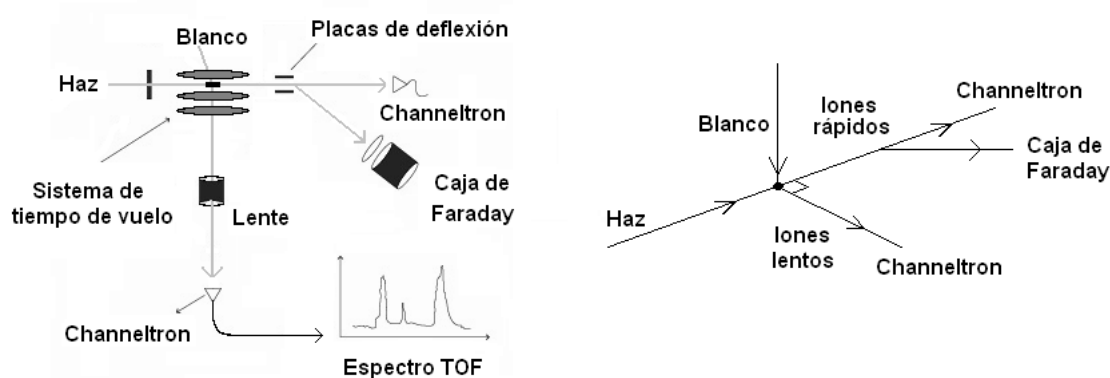


Figura 2.6. Cámara de reacción.

En la zona de reacción, el blanco se introduce por la parte superior y en dirección vertical, mediante un flujo generado por la diferencia de presiones entre el tanque contenedor del gas y el interior del acelerador. La inyección se realiza utilizando una pequeña aguja hipodérmica metálica, de aproximadamente 2 mm de diámetro colocada cerca de 3 mm arriba de la línea trazada por el haz de protones; la cantidad de partículas entrantes es controlada por medio de una válvula y es monitoreada por un medidor de presión. La válvula se abre de tal manera que se lleguen a tener presiones del orden de 1×10^{-5} Torr dentro de la cámara, de tal manera que se garantice que las colisiones se efectúen dentro del régimen de *colisión simple*, cabe señalar que la presión base o residual se encuentra típicamente entre 1×10^{-6} Torr y 2×10^{-6} Torr.

El sistema de tiempo de vuelo fue construido dentro del laboratorio y consta de tres placas cilíndricas concéntricas y un tubo de enfoque. El conjunto fue colocado de tal manera que acelerará los fragmentos derivados del blanco, en dirección ortogonal al haz de protones, hacia una de las zonas de detección, formando con ello, eventualmente, los *espectros de tiempo de vuelo*.

2.3. Análisis de los fragmentos

Durante las colisiones se llevan a cabo distintas interacciones, que a su vez, producen diferentes fragmentos resultantes. Se pueden dividir estas partículas en tres grupos principales: *fotones*, consecuencia de las transiciones en los diferentes niveles electrónicos de las moléculas del gas; *iones rápidos*, los cuales son fragmentos resultantes formados a partir del haz; y los *iones lentos*, que son productos generados debido al blanco. La distinción entre rápidos y lentos se hace porque los primeros quedan prácticamente con la misma velocidad que lleva el haz, mientras que los segundos permanecen como residuales en la zona de interacción.

2.3.1. Iones rápidos

En el caso de los iones rápidos se tienen esencialmente dos tipos de partículas creadas a partir de los protones⁸: H^+ y H^0 , en el caso de las H^+ , el estado de carga eléctrica no cambia durante la interacción, mientras que la formación de las H^0 , se da cuando los protones capturan un electrón del blanco y se neutralizan.

Las partículas neutras se monitorean en un detector multiplicador de electrones (CEM, por su acrónimo en inglés), colocado en la misma dirección en la cual continuaría el haz incidente en ausencia del blanco. Este detector genera una corriente eléctrica (cascada electrónica) cada vez que una o varias partículas inciden sobre él, permitiendo en principio, la realización del conteo del número de partículas H^0 por unidad de tiempo formadas durante las colisiones. Por otra parte, para monitorear las partículas cargadas se cuenta con una caja de Faraday, donde se mide la *corriente absoluta* debida a los H^+ ; la caja está colocada posteriormente a un par de placas verticales paralelas, de tal manera que forma un ángulo de aproximadamente quince grados con respecto al eje del haz incidente. La función de las placas, es la de desviar a las partículas cargadas hacia el centro de la misma caja. Las placas fueron previamente caracterizadas y para el caso de protones se encontró que se debe aplicar un voltaje cercano a 200 V por cada keV de energía para maximizar la corriente registrada en la caja.

En principio, el número de partículas incidentes en la caja de Faraday sumado a las registradas en el detector CEM debe coincidir con el número inicial de ellas que conforman el haz. Ambos conteos, al menos de manera indirecta, podrían dar la pauta para realizar

⁸Es posible que se formen iones H^- , correspondientes al proceso de captura electrónica doble σ_{1-1} sin embargo, dentro del presente régimen de energías, su formación es prácticamente nula.

la normalización de las *secciones relativas* y obtener las *secciones absolutas*. Sin embargo, para ello se debe conocer la curva de eficiencia del detector CEM, para la incidencia de protones, en función de la energía de aceleración, la cual hasta el momento no se ha llevado a cabo.

2.3.2. Iones lentos, espectros de tiempo de vuelo

Los *iones lentos* son generados a partir del blanco y prácticamente quedan en reposo después de efectuadas las colisiones. Dentro de la cámara de reacción, estos iones son acelerados transversalmente, tanto a la dirección del haz incidente, como a la dirección del flujo del blanco, hacia un detector CEM conectado a una tarjeta espectrométrica multicanal modelo MCS-32. La tarjeta realiza escaneos utilizando hasta 64 000 canales con aperturas mínimas temporales de 100 ns cada uno.

Como se mencionó previamente, el sistema de tiempo de vuelo consiste en tres discos concéntricos D_1 , D_2 y D_3 de 7 cm de diámetro cada uno y con aperturas de 1 cm, más un lente cilíndrico hueco L ; todos ellos constituidos de acero inoxidable y cuyo eje principal es horizontal y ortogonal a la dirección del haz de protones. A continuación se muestra el esquema del sistema.

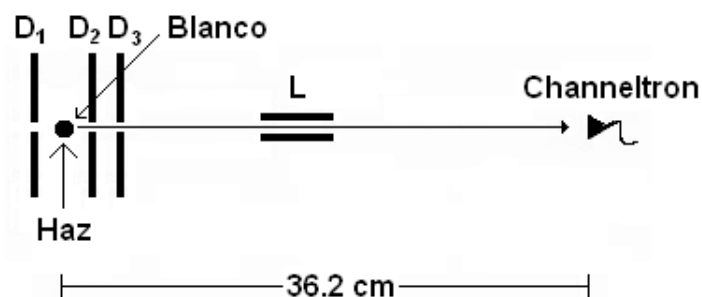


Figura 2.7. Sistema de tiempo de vuelo.

La geometría del arreglo se consideró adecuada, ya que permite acelerar y enfocar una cantidad considerable de los fragmentos generados hacia el centro del detector mediante la aplicación de distintos voltajes en cada uno de los electrodos. Cabe señalar, que en las aperturas de los discos, se colocó una retícula cuadrangular de cobre, con la finalidad de homogeneizar el campo eléctrico. Las pruebas experimentales se realizan aplicando un voltaje pulsado V_1 en D_1 , y eligiendo los voltajes (continuos) V_2 , V_3 y V_L , para el disco dos, tres y el lente, respectivamente, de tal manera que los espectros obtenidos tengan la mejor

definición posible. Cabe señalar, que a partir de las diferentes realizaciones experimentales, se ha observado que la resolución del espectro es sumamente sensible al valor de V_L , el cual oscila entre los 10 V y los 20 V.

La necesidad de que el voltaje sea pulsado, reside en el hecho de que para obtener los *espectros de tiempo de vuelo*, es necesario separar los fragmentos de acuerdo a su razón *masa-carga* m/q . Una forma de lograrlo, es acelerando los iones durante un intervalo temporal corto t_0 , en comparación con el tiempo T que tardan en ser detectados. Justamente, el tiempo que tardan en hacer el recorrido los iones desde su formación, hasta la incidencia en el detector es conocido como *tiempo de vuelo*. Si el voltaje de aceleración V_1 se sincroniza con el inicio de adquisición de la tarjeta multicanal, entonces el tiempo de detección coincidirá con el tiempo real en el cual los iones llegan al detector desde el momento de su formación, es decir, con su tiempo de vuelo; además, dado que el voltaje aplicado es el mismo para todos los fragmentos, la aceleración que adquieran los iones será diferente de acuerdo a su especie y por lo tanto, su tiempo de vuelo será diferente, provocando que se generen señales bien definidas sólo en ciertos canales específicos, es decir, formaran un espectro. *Únicamente*, los iones generados durante el tiempo t_0 serán registrados; a partir de ese momento y hasta la formación de un nuevo pulso, los residuos de las colisiones se dispersarán de manera aleatoria, por lo que no habrá un conteo neto de ellos. Al cabo de un tiempo suficientemente largo, después de recolectados los fragmentos generados durante el pulso, se aplicará nuevamente un voltaje, y con ello, el proceso de adquisición comenzará nuevamente. El voltaje pulsado se logra con la ayuda de una fuente que transforma un voltaje inicial continuo en una señal cuadrada, cuyas características se pueden controlar con ayuda de un generador de funciones.

Es evidente que los iones más pesados tardarán un mayor tiempo en ser detectados que los iones ligeros debido a que su tiempo de vuelo será mayor. Esto conducirá a que en las gráficas, de carácter espectral, cada uno de los componentes del espectro (picos) estará asociado a un tipo particular de iones y la intensidad de cada uno de ellos (área bajo la curva) se relacionará directamente con la cantidad de iones de cada especie.

En los espectros de TOF intervienen directamente ocho parámetros, de los cuales, cuatro están relacionados con la ubicación de los máximos: la intensidad del voltaje pulsado V_1 que normalmente es de 200 V, la duración del pulso t_0 que se encuentra entre los 300 y los 500 ns, la frecuencia ν del mismo de entre 1000 y 7000 Hz y el voltaje aplicado al lente V_L , menor a 20 V en todos los casos. Bajo estas condiciones, el tiempo que tardan en llegar los fragmentos es menor de 120 μs en todos los casos⁹.

⁹Los valores de estos parámetros se obtuvieron de manera heurística, buscando la configuración que

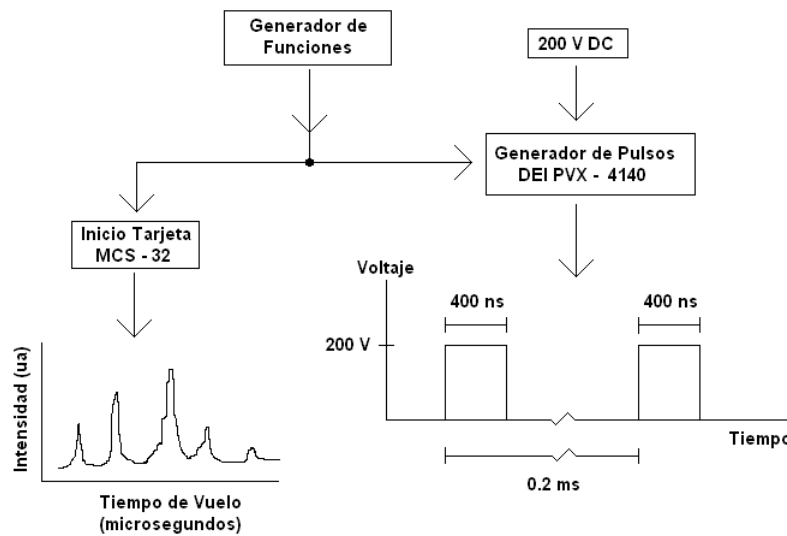


Figura 2.7. Sincronización del pulso mediante un generador de funciones.

Para realizar la identificación de los fragmentos, lo cual equivale a encontrar una relación entre m/q de la partícula y su tiempo de vuelo T , es decir, $m/q = m/q(T)$, se realizaron dos procedimientos independientes. El primero fue con ayuda del simulador computacional SIMION-7 en el cual se esquematizan las trayectorias y los tiempos de los iones dadas ciertas condiciones iniciales y el segundo fue mediante un cálculo directo considerando la situación electrostática de forma simplificada.

Ya con la calibración, para cada uno de los gases bajo estudio, se realizó la identificación de los diferentes fragmentos en su espectro característico y se evaluó el área bajo la curva de cada uno de sus máximos. El área correspondiente a cada uno de los fragmentos se dividió entre la corriente i_p y la presión P medida durante la toma de datos, para cada una de las energías de colisión E . De esta manera, los resultados fueron proporcionales a la *sección transversal relativa* asociada con el proceso (o los procesos) en el cual se formó dicho ion. La adquisición de datos tuvo una duración aproximada de 100 s para cada energía, tiempo en el cual se realizan 5×10^5 escaneos en la tarjeta multicanal.

Finalmente, para evaluar las *secciones transversales absolutas* a partir de las relativas encontradas a partir de las gráficas de tiempo de vuelo, simplemente se tomó un punto previamente medido por alguno de los trabajos ya existentes en la literatura y se normalizó para una energía particular.

permitía obtener espectros bien definidos.

Capítulo 3

Pruebas preliminares: La caracterización

Para que en un dispositivo experimental se inicien operaciones de manera adecuada, es necesario conocer los valores de *cada uno de los parámetros* que intervienen durante la realización experimental. Estos valores en ocasiones no son conocidos *a priori*, por lo cual deben ser obtenidos, ya sea mediante la elaboración de diferentes pruebas en las cuales se pueda visualizar el efecto de la variación de cada uno de ellos sobre los resultados finales, o bien, mediante la ayuda de simulaciones computacionales o cálculos numéricos.

Bajo esta perspectiva, es importante realizar dos observaciones al respecto. La primera es que una parte importante del presente trabajo consistió en la construcción y caracterización del dispositivo experimental en conjunto, por lo cual, la mayoría, si no es que todos los valores *óptimos*¹ de los parámetros, fueron obtenidos mediante pruebas experimentales enfocadas a encontrar su funcionamiento adecuado². La segunda observación, la cual se debe tener en cuenta en todo el seguimiento del presente trabajo, es que, aunque *sí* se obtuvieron de manera individual los valores óptimos de cada uno de los diversos parámetros, al momento de las realizaciones experimentales, en las cuales se determinaron las secciones transversales, estos valores *solamente* sirvieron como *punto de partida* para encontrar las condiciones adecuadas, debido a que los parámetros intervinientes son demasiados (un par de decenas) y suponer una independencia absoluta entre ellos a veces no resulta ser válido; aunque por supuesto, los valores ayudaron al iniciar cada una de las sesiones experimentales y en general no cambiaron tanto desde la situación inicial hasta el momento de la respectiva

¹Por óptimos se entienden aquellos valores que maximizan la resolución de los resultados experimentales *sin* por ello perder la estabilidad y continuidad de las condiciones experimentales.

²Aunque claramente un buen punto de partida es el seguimiento de las recomendaciones dadas por manuales y ficheros técnicos, para la mayoría de los parámetros, fueron necesarias diversas pruebas para encontrar sus valores óptimos o característicos de operación.

adquisición de datos.

Es importante mencionar además, que en el transcurso de la caracterización, se realizaron paralelamente dos artículos que sirvieron como confirmación de que el sistema iba operando de forma adecuada; el primero de ellos, referente al tema de la aplicación y uso de los aceleradores en la enseñanza de la física [49], mientras que el segundo, dentro del tema de la investigación de materiales, relacionado con la implantación de protones superficiales sobre muestras de Titanio [50], ambos artículos se anexan al final del presente trabajo.

3.1. Voltaje de enfoque

Uno de los primeros parámetros caracterizados fue el voltaje de enfoque V_e . Este voltaje se aplica al electrodo central de las lentes de Einzel ubicadas en el cañón y su funcionamiento permite aumentar el número de iones incidentes dentro de la región de interacción. Básicamente, el efecto de este voltaje, es lograr redireccionar las partículas del haz que inicialmente tiendan a dispersarse (Fig. 3.1).

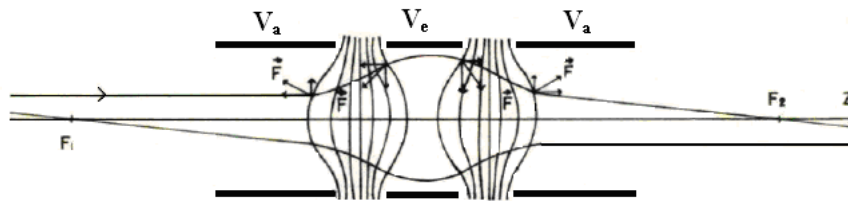


Figura 3.1. Trayectoria de los iones a través de las lentes Einzel. El electrodo central redirecciona las partículas evitando su dispersión.

La caracterización de V_e se realizó con la ayuda de una *bandera*, la cual es una lámina de cobre de ocho cm de largo por dos cm de ancho, cuya posición es variable. Está colocada en la línea del acelerador y se conecta a un electrómetro analógico (Keithley 610-CR) para hacer el registro de la corriente de los iones. en la cual se monitoreaba la corriente generada por los iones del haz i_e . La metodología consistió en seleccionar un voltaje de aceleración V_a fijo³, y variar el voltaje V_e , con el objetivo de registrar el comportamiento de la corriente incidente en la bandera, es decir, se buscaba encontrar la dependencia $i_e(V_e)$. Estas pruebas se repitieron un total de 19 ocasiones durante dos sesiones experimentales, considerando distintos valores de V_a entre 0,5 y 10,0 kV. En cada una de ellas se buscaba encontrar el

³Escoger un voltaje de aceleración V_a es equivalente a elegir una energía de aceleración E ; en lo subsiguiente se hará referencia entre uno u otro término de manera indistinta.

valor, o los valores, que mantuvieran la corriente de iones estable y con la mayor intensidad posible⁴.

En todos los casos, las corrientes registradas durante la caracterización caían dentro del intervalo de intensidades de entre los 10^{-10} a los 10^{-6} A, además de que el comportamiento de $i_e(V_e)$ resultó semejante sin importar la energía seleccionada. A continuación se muestran un par de gráficas representativas de este comportamiento, tomadas con voltajes de aceleración de siete y ocho kV, respectivamente.

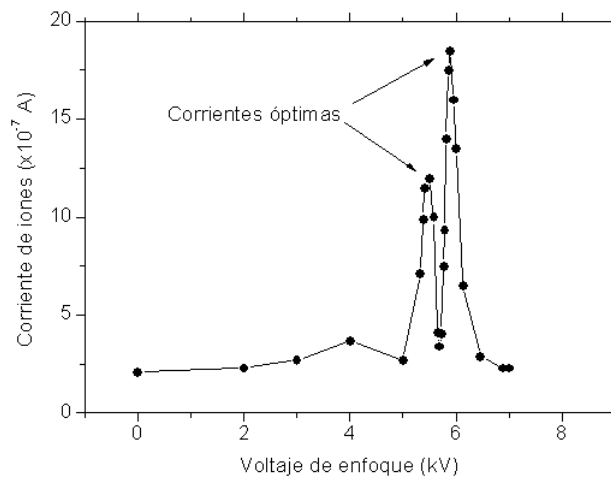


Figura 3.2. Corriente de iones i_e con $V_a = 7$ kV. Se observan dos valores máximos alrededor de 5466 V ($i_e \approx 1,2\mu A$) y 5910 V ($i_e \approx 1,8\mu A$).

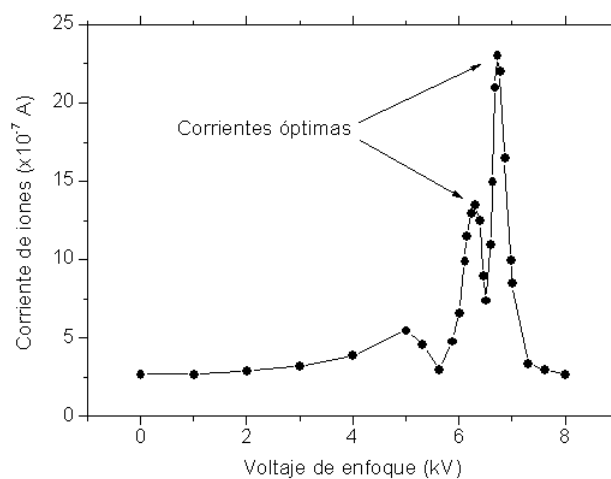


Figura 3.3. Corriente de iones i_e con $V_a = 8$ kV. Se observan dos valores máximos alrededor de 6259 V ($i_e \approx 1,3\mu A$) y 6764 V ($i_e \approx 2,3\mu A$).

⁴Por estabilidad se entiende que las variaciones en la corriente fueran pequeñas en la escala de registro del electrómetro (cambios menores al 5%) en tiempos del orden de varios minutos.

En ambos casos, se visualiza que para valores pequeños de V_e la corriente es casi nula, aunque es clara una dependencia monótona creciente de i_e hasta alcanzar una pequeña meseta. A partir de ese punto i_e cae hasta ser casi nula nuevamente y vuelve a crecer hasta un primer máximo m_1 . Posterior a ese máximo, la corriente decae conforme V_e aumenta llegando a una región en la cual se registran relativamente pocos iones en la bandera. Incrementando aún más V_e se alcanza otro máximo en la corriente registrada m_2 , cuya intensidad es mayor que la asociada al primer máximo. Finalmente, para V_e suficientemente grande, la corriente es prácticamente nula.

La presencia de dos máximos, m_1 y m_2 , en todas y cada una de las diferentes tomas de datos, sugiere la existencia de una dependencia específica entre sus voltajes asociados, V_{e1} y V_{e2} , con respecto al voltaje de aceleración V_a . Esta afirmación fue ampliamente verificada en el caso de los *voltajes óptimos* asociados *solamente* al segundo máximo V_{e2} (justamente porque la intensidad del haz debida a ellos fue mayor en todos las corridas experimentales que con respecto a los de V_{e1}). Los resultados obtenidos al graficar los voltajes óptimos de V_e con respecto al voltaje de aceleración V_a , es decir, $V_e(V_a)$, se pueden observar a continuación en la siguiente gráfica. Nótese que los puntos fueron obtenidos en dos sesiones experimentales independientes.

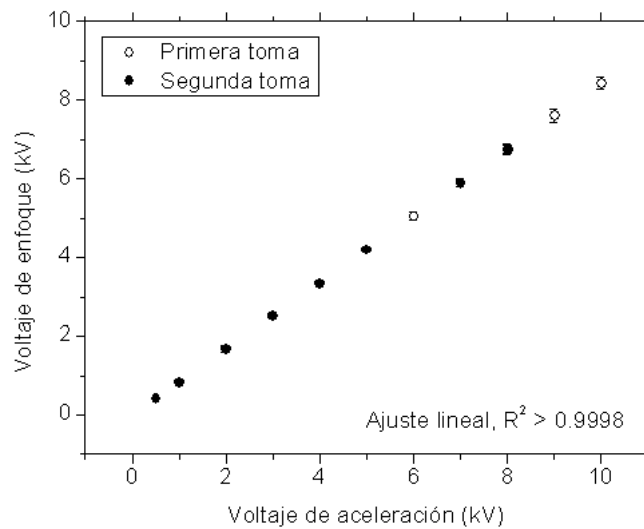


Figura 3.4. Voltajes óptimos V_e en función de V_a . Se aprecia un excelente ajuste lineal entre ambas variables.

A partir de la gráfica anterior, se observa que existe un excelente ajuste lineal entre los valores óptimos de V_e con respecto a los de V_a , en ambas corridas. En términos cuantitativos, el máximo en la corriente ocurre si se aplica al electrodo de enfoque un voltaje de

aproximadamente $841(10)V$ por cada kV en el voltaje V_a , logrando un registro del orden de los μA . En la práctica, cuando se requiere obtener una corriente máxima de protones, siempre se emplea inicialmente el voltaje de V_e de acuerdo con el valor concordante con el ajuste lineal y a partir de ese punto se comienza con la optimización.

Los resultados anteriores se justifican en el hecho de que en general, para arreglos de lentes electrostáticas con simetría cilíndrica, la relación entre el voltaje aplicado entre uno de los electrodos interiores, *lentes de enfoque*, y los exteriores, *aceleración y frenado*, debe ser lineal si se requiere mantener fijo el punto de convergencia, el cual dependerá solamente de las características *geométricas* del arreglo [51]. En este sentido, se puede concluir que el funcionamiento de las lentes Einzel con las que se cuenta en el acelerador es el adecuado en todo el intervalo de energías en el cual opera el acelerador [52].

3.2. Voltaje de diez grados

Otro parámetro que influye directamente en la intensidad del haz, es el voltaje aplicado a las placas de diez grados, V_{10} , que se encuentran en la línea del acelerador. Como ya se mencionó previamente, la necesidad de tener una desviación en la línea, es evitar el paso de los fotones hacia la zona de interacción. El voltaje V_{10} se aplica a unas pequeñas placas verticales paralelas separadas aproximadamente tres cm entre ellas, curvadas de tal manera, que forman una sección cilíndrica justo de 10^0 . Nuevamente, para realizar la caracterización, se buscaba encontrar la dependencia entre el *valor óptimo* de V_{10} con respecto a V_a que permitiera que el haz siguiera su trayectoria hacia la cámara de reacción, perdiendo el menor número de protones a lo largo del trayecto.

El procedimiento fue semejante al realizado para determinar el voltaje de enfoque óptimo descrito en la sección anterior. Es decir, se registraba el comportamiento de i_e en función de V_{10} , manteniendo V_a constante. Posteriormente, se repetía el proceso tomando un valor distinto de V_a y se cuantificaba el comportamiento de $V_{10}(V_a)$. Para la caracterización se llevaron a cabo 18 muestreos, a lo largo de tres realizaciones experimentales, utilizando seis distintos valores de V_a entre uno y seis kV. A continuación, se presentan un par de gráficas características de la corriente de los iones incidentes en la bandera (Fig. 3.5 y 3.6), en función de V_{10} .

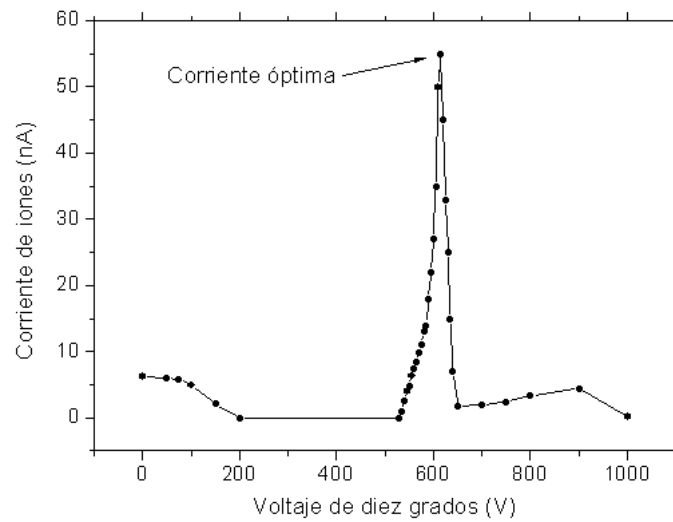


Figura 3.5. Corriente de iones i_e en función de V_{10} , para $V_a = 5kV$. Se observa la presencia de un máximo alrededor de los 613 V ($i_e \approx 55nA$).

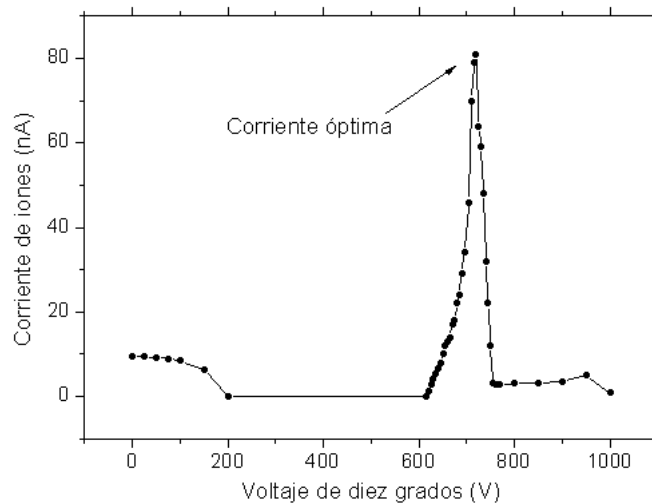


Figura 3.6. Corriente de iones i_e en función de V_{10} , para $V_a = 6kV$. Se observa la presencia de un máximo alrededor de los 717 V ($i_e \approx 80nA$).

De las gráficas anteriores, es evidente en ambos casos, la presencia de un voltaje *óptimo* alrededor del cual se permite el paso de un número considerable de iones hacia la bandera, mientras que para el resto de los voltajes casi no hay registro de ellos. Para encontrar la dependencia $V_{10}(V_a)$ nuevamente se realizaron las gráficas de los valores óptimos de V_{10} para cada voltaje de aceleración V_a . A continuación se presentan los resultados obtenidos en las tres realizaciones experimentales (Fig. 3.7).

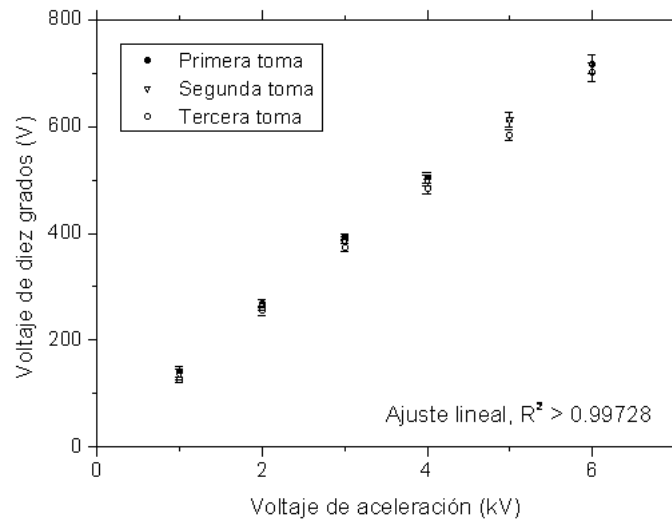


Figura 3.7. Voltajes óptimos V_{10} para las tres realizaciones experimentales. Se aprecia un comportamiento lineal entre ambos parámetros.

A partir de la gráfica anterior, se visualiza una clara dependencia lineal entre V_a y los voltajes óptimos V_{10} , además de que la diferencia entre los resultados de las distintas corridas fue pequeña, menor al 10% en todos los casos. La alta correlación entre ambos parámetros ($R^2 = 0,99728$ en el caso más alejado) permite concluir que existe un valor de V_{10} que cede el paso de los iones hacia la región de colisión, para cada V_a determinado, específicamente, se concluye que es necesario aplicar a las placas deflectoras alrededor de 117 V por cada kV de voltaje de aceleración.

La linealidad entre estos dos parámetros se puede entender de la siguiente manera. Supóngase que las placas verticales constituyen secciones de cilindros concéntricos de radios $r - d$ y $r + d$ respectivamente y separadas una de la otra en una distancia $2d = 3\text{cm}$. Para lograr que la trayectoria de los iones describa una circunferencia que pase justo a la mitad de las dos placas es necesario que el campo eléctrico \mathbf{E} generado en la región intermedia provoque una fuerza idéntica en intensidad a la fuerza centrípeta sobre los iones. Es decir, se debe cumplir que,

$$qE = \frac{mv^2}{r}, \quad (3.1)$$

donde v es la velocidad de la partícula, m su masa, q su carga y r el radio de la circunferencia que pasa justo a la mitad de las dos placas. Además, antes de entrar en la región de desviación, el movimiento de cada una de las partículas del haz es libre y por lo tanto su energía es completamente cinética, adquirida justamente debido a la aceleración provocada por V_a , es decir,

$$qV_a = \frac{mv^2}{2}, \quad (3.2)$$

la relación entre E y V_{10} se obtiene de considerar que las placas forman secciones cilíndricas concéntricas, tomando en cuenta un factor λ que incluye los efectos de borde, con lo cual,

$$V_{10} = \lambda r \frac{\ln(r+d)}{\ln(r-d)} E. \quad (3.3)$$

y al eliminar E de las ecuaciones 3.1 y 3.3, se obtiene V_a en términos de V_{10} ,

$$V_{10} = 2\lambda \frac{\ln(r+d)}{\ln(r-d)} V_a, \quad (3.4)$$

ahora bien, considerando la geometría del codo (cada uno de sus lados mide aproximadamente 6.8 cm y su inclinación es de 10^0) se obtiene que el radio de la circunferencia es $r \approx 39,2$ cm con lo cual se concluye que,

$$V_{10} = 0,153 \lambda V_a. \quad (3.5)$$

Este resultado es consistente con las mediciones experimentales. En primer lugar, la dependencia $V_{10}(V_a)$ resulta lineal como se había expuesto. Además, si se comparan los valores de proporcionalidad de las mediciones, es decir $V_{10} = 0,117V_a$, con la ecuación 3.5 se obtiene que $\lambda \approx 1,31$ difiriendo en un 31% del caso ideal en el cual se desprecian los efectos de borde. La comparación resulta razonable teniendo en cuenta que las placas no son lo suficientemente largas como para que estos efectos no tengan importancia. Debido a lo anterior, es posible concluir que la dependencia lineal, otorga un alto grado de confianza en cuanto a la respuesta de los iones, debida a la aplicación del voltaje V_{10} , esta dependencia da por satisfactoria la respectiva caracterización del voltaje de los diez grados.

3.3. Filtro de velocidades

A partir de las caracterizaciones de los parámetros anteriores V_e y V_{10} , surge una nueva necesidad complementaria a tener un haz estable con la mayor intensidad posible, y es la de garantizar que este último esté compuesto *únicamente* de protones. Para ello, es fundamental conocer en cada uno de los voltajes de interacción V_a , los valores adecuados que se deben suministrar a la corriente del electroimán i_m y al voltaje de deflexión V_f dentro del filtro de velocidades.

Con la finalidad de determinar de manera precisa los valores de este par de parámetros se realizaron dos caracterizaciones complementarias. La primera consistió en determinar la

relación explícita entre el campo magnético \mathbf{B} en función de su corriente generadora i_m , es decir $\mathbf{B}(i_m)$. La segunda caracterización, se asemeja al proceso realizado durante las optimizaciones previas, en el sentido en el que se busca encontrar los valores i_m y V_f para asegurar un registro adecuado de corriente en la bandera, pero ahora garantizando que su composición fuera únicamente de protones.

El campo magnético

Encontrar el comportamiento de $\mathbf{B}(i_m)$ se llevó a cabo de manera directa. El procedimiento consistió simplemente en realizar varios mapeos, cinco en total, con la ayuda de un *Gaussmetro* (punta Hall) tomados a distintas profundidades dentro del electroimán (0,5, 3,9, 5,0, 10,0 y 11,0 cm respectivamente, teniendo en cuenta que la longitud total del filtro es de 15 cm). Para cada uno de los mapeos, se dejaba fija la punta y se variaba la corriente aplicada i_m entre cero y tres A, tanto de forma creciente como decreciente, mientras se tomaba el registro de la magnitud del campo magnético generado. En la gráfica siguiente (Fig. 3.8) se visualiza el comportamiento de uno de los mapeos (el de cinco cm).

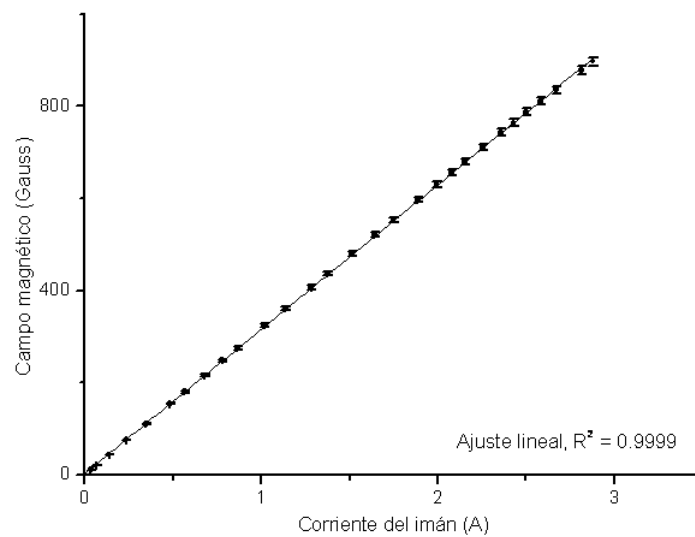


Figura 3.8. Campo magnético \mathbf{B} en función de i_m a cinco cm de profundidad.

Se observa una clara tendencia lineal, con un coeficiente de ajuste prácticamente uno; es decir, i_m y \mathbf{B} resultan ser proporcionales. Los resultados para los otros mapeos fueron idénticos; con diferencias menores al 2,5% en todos los casos, de donde es posible aseverar que el comportamiento de \mathbf{B} es independiente de la profundidad. Se concluye entonces, al realizar el análisis para todos los mapeos, que la magnitud del campo magnético resulta

proporcional a la corriente, específicamente $B(i_m) = 312,5(3,3)i_m$ (B medido en Gauss e i_m en A) y prácticamente uniforme a lo largo de todo el electroimán.

La selección de los iones

Ahora bien, debido al conocimiento explícito de la dependencia de la magnitud del campo magnético B con la corriente del electroimán i_m , es posible, en principio, seleccionar las partículas específicas para que conformen el haz de acuerdo con la ecuación 2.3. Tomando esta afirmación como punto de partida, se realizaron diferentes pruebas para determinar los valores que se deben aplicar a los parámetros i_m y V_f para cada uno de los voltajes de aceleración V_a .

Para estas pruebas, se seleccionaba un voltaje de aceleración determinado V_a , así como un voltaje en el filtro V_f y se realizaba el registro de la corriente de los iones incidentes en la bandera i_e (los que lograban atravesar el filtro) en función de la corriente aplicada al electroimán i_m . Una vez finalizado el registro, se consideraba un valor distinto para V_f y se comenzaba con un nuevo barrido. Este ciclo se repitió a lo largo de cada uno de los voltajes de aceleración de entre uno y diez kV, considerando en cada caso siete valores diferentes de V_f (80, 110, 150, 180, 220, 250 y 290 V), obteniendo así un total de 70 tomas. A continuación se muestran un par de gráficas representativas.

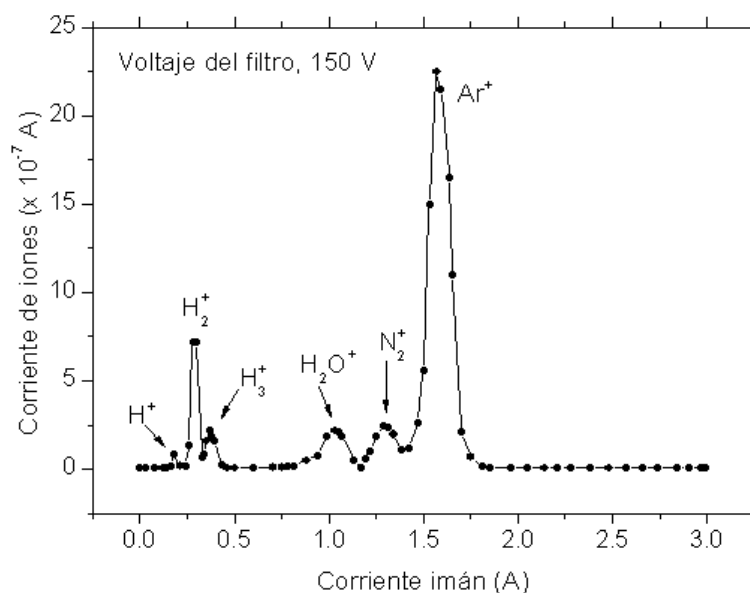


Figura 3.9. Corriente de iones i_e en función de i_m a cinco keV, para $V_f = 150V$. Se identifican seis diferentes tipos de iones generados por la fuente.

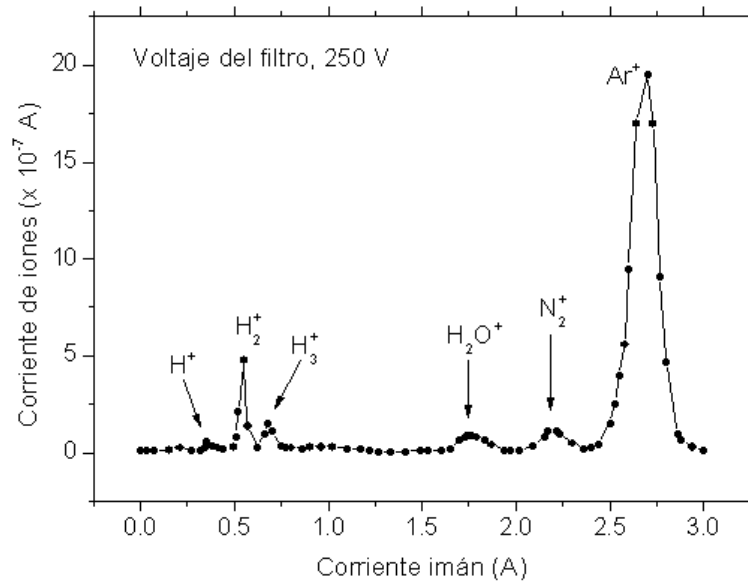


Figura 3.10. Corriente de iones i_e en función de i_m a cinco keV, para $V_f = 250V$. Se identifican seis diferentes tipos de iones generados por la fuente.

Es posible realizar varias observaciones a partir de las gráficas anteriores (Fig. 3.9 y 3.10). Por ejemplo, es notorio el carácter espectral que presentan cada una de ellas, justamente debido a que los iones se diferencian en masa de manera discreta, por lo que, para valores de i_m en la región intermedia entre el registro de uno u otro tipo de ion, no se permitirá el paso de ninguna partícula hacia la bandera y con ello la corriente registrada será prácticamente nula. Es interesante observar además, y en acuerdo con la ecuación 2.3, que las masas seleccionadas aumentan conforme i_m lo hace, es decir, la masa seleccionada m es una función monótona creciente con respecto a i_m . Finalmente, la altura y el ancho del pico asociado a una determinada masa proporciona una medición relativa de la cantidad de iones de esa especie que se está generando en la fuente de iones.

La identificación de los iones se realiza entonces de forma directa. Los tres primeros máximos corresponden a los derivados del H_2 , es claro que la generación del ion de H_2^+ es priorizada sobre H_3^+ y H^+ debido justamente a que el proceso que lo genera (ionización) es más concurrente con respecto a los que generan al otro par de iones. El siguiente par de iones identificados son provenientes principalmente del entorno: vapor de agua (H_2O^+) y aire (N_2^+); aunque es cierto que en todo momento se cuida de generar dentro del acelerador un vacío adecuado, esto no impide del todo el hecho de que se lleguen a observar residuos adicionales. Finalmente, el pico más intenso corresponde al ion de Ar^+ ; como se mencionó previamente, para generar la descarga en la fuente es necesario introducir Ar , y la razón ahora resulta clara, debido precisamente a que aporta la mayoría de los iones generados en

la fuente (incluso, más que todos los demás en conjunto).

Por supuesto, la posición donde ocurren los máximos con respecto a i_m depende del otro par de parámetros designados, todo ello nuevamente en concordancia con la ecuación 2.3. A mayor V_f los máximos serán registrados cuando i_m sea mayor, contrariamente a cuando se selecciona un valor más alto para V_a . En cuanto a las intensidades registradas en los distintos espectros, en general no presentan cambios tan abruptos como sucedería por ejemplo al cambiar algunos otros parámetros (V_e y V_{10} por ejemplo) y en todos los casos se mantienen dentro del mismo orden de magnitud.

Se concluye entonces, bajo el soporte de estas dos pruebas independientes, que existe una metodología clara y un conjunto de valores específicos para V_e e i_m a partir de los cuales se puede asegurar que el haz está compuesto de un tipo particular de iones, específicamente de protones, como eventualmente fue requerido, sin importar cuál sea el voltaje de aceleración seleccionado.

3.4. Caja de Faraday

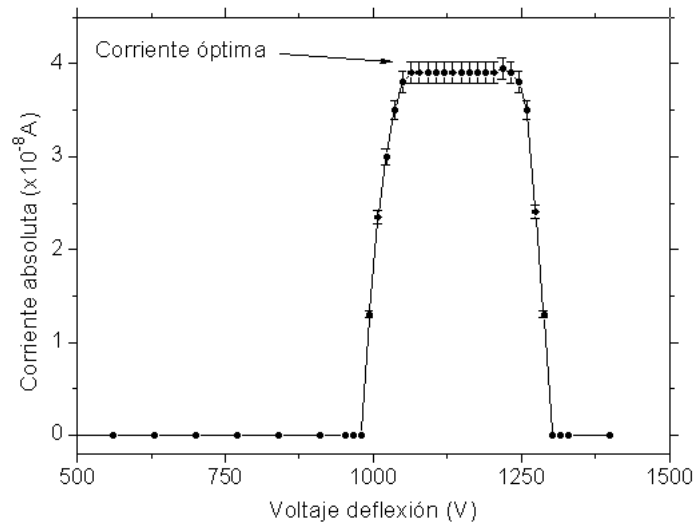
Una vez garantizada la obtención de una corriente óptima, estable y cuya composición sea íntegramente de protones, es necesario lograr que el haz atraviese toda la línea del acelerador para llegar a la zona de reacción y así se puedan efectuar las colisiones⁵. Además, en todo momento, es necesario monitorear dicha corriente, ya que su intensidad afecta sustancialmente el conteo de los fragmentos formados durante las colisiones. El dispositivo experimental con el cual se realiza dicho registro es una *caja de Faraday*.

Como ya se mencionó anteriormente, debido a que es necesario separar las partículas neutras de las cargadas en la región posterior a la zona de interacción, la caja fue colocada con un cierto ángulo de inclinación con respecto a la trayectoria de incidencia de los protones (aproximadamente quince grados). Para que los iones logran incidir en el centro de la caja, fue necesario colocar previamente, un par de placas electrostáticas verticales, en las cuales se aplicaba un voltaje de deflexión V_d de acuerdo a la energía de incidencia de los mismos.

Para verificar que la caja respondiera de forma adecuada a la incidencia del haz, se realizaron diez pruebas a largo de todo el intervalo de energías que abarca el acelerador, justamente de la corriente registrada i_e en función de V_d . Nuevamente, para cada una de las

⁵Aunque esta afirmación puede parecer trivial, encierra una de las grandes dificultades a las que se enfrenta cualquier tipo de acelerador: *la alineación*. En este caso, la alineación se realizó con la ayuda de un láser, mesas elevadoras y por supuesto algunos niveles.

tomas se mantenía V_a fijo, a continuación se muestra una gráfica característica (Fig. 3.11).



la presencia de un suficiente número de ellas como para tener una buena señal en los espectros, teniendo en cuenta en todo momento que se deben efectuar las colisiones en el régimen de *colisión simple*. Como ya se discutió anteriormente, esto sucede cuando las fracciones de las partículas F_i generadas en las colisiones (particularmente los iones rápidos) son proporcionales a P . Es decir, se debe encontrar la región lineal para $F_i(P)$ a partir de la cual se pueda elegir una presión adecuada para realizar las mediciones.

Con la intención de encontrar dicha región, se realizaron pruebas en las cuales se determinaba la cantidad relativa de partículas neutras H^0 , formadas durante las colisiones, en función de la presión P ; todo ello manteniendo el resto de los parámetros fijos. El conteo se llevó a cabo con la ayuda de un detector tipo CEM, colocado en la línea trazada por la dirección del haz de protones. Para ello, se utilizaron como blanco, tanto moléculas de CO_2 como de CO . A continuación se muestra una gráfica característica (Fig. 3.12).

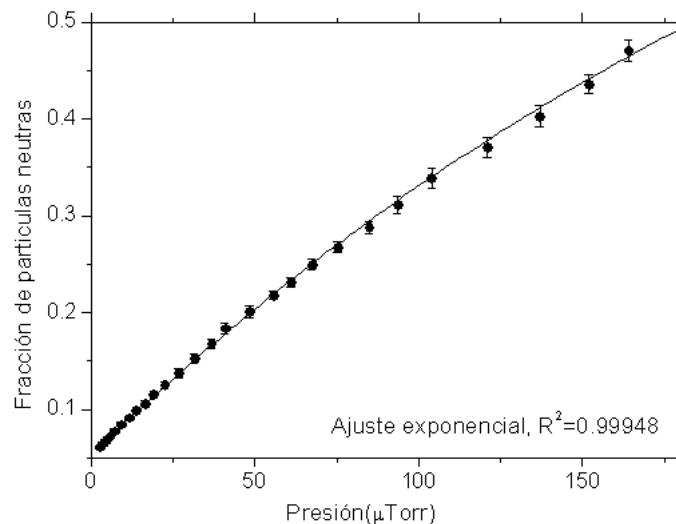


Figura 3.12. F_0 en colisiones de $p + CO_2$ a cinco keV. Se observa un comportamiento lineal para bajas presiones y un posterior aumento asintótico de tipo exponencial.

En todas las situaciones (seis pruebas diferentes), las gráficas muestran un comportamiento semejante y muy característico. En una primera región, cuando se comienza a introducir el gas a partir de la presión base (típicamente de 1×10^{-6} Torr) el número de partículas neutras crece linealmente hasta una cierta región a partir de la cual, la fracción de H^0 presenta un aumento de tipo asintótico, hasta que prácticamente se mantiene constante. Para encontrar la región lineal, se fueron descartando puntos en las gráficas, hasta obtener un último valor en la presión, de tal forma que el registro siguiera teniendo un carácter lineal.

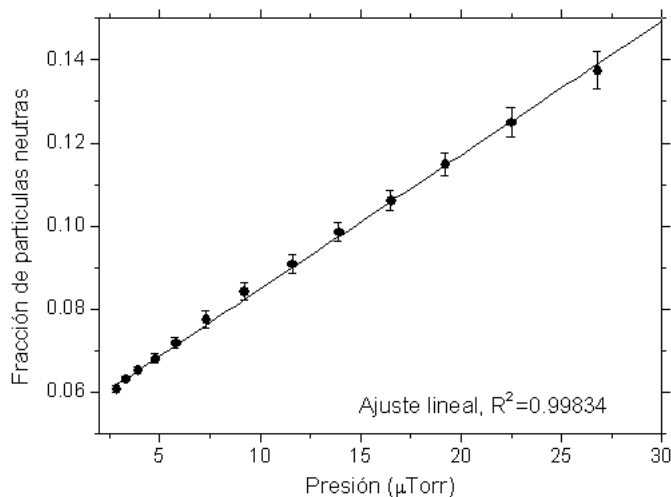


Figura 3.13. Región de colisión simple en colisiones de $p + \text{CO}_2$ a cinco keV.

En todos los casos se encontró que se alcanzaban tendencias lineales muy definidas ($R^2 \approx 0,998$) por debajo de presiones del orden de $P \approx 3 \times 10^{-5}$ Torr. Esta región resultó suficientemente cómoda en el momento de medir las secciones transversales, para las cuales se lograba una resolución suficiente en los espectros tomando presiones alrededor de 1×10^{-5} Torr.

3.6. Optimización de los espectros

La última parte de la caracterización del equipo experimental estuvo relacionada directamente con la obtención y definición de los espectros de tiempo de vuelo. Son ocho los parámetros que intervienen de manera directa en este proceso⁶ y varios de ellos fueron determinados heurísticamente, en el sentido de que se tomaban espectros para un conjunto de valores determinado y posteriormente se comparaban con aquellos tomados bajo otras condiciones mas o menos similares, repitiendo el proceso hasta que se obtenía el espectro mejor definido posible⁷.

Una vez identificado el conjunto óptimo de parámetros para cada voltaje de aceleración V_a , resultaba necesario determinar los iones que conformaban cada uno de los espectros obtenidos. Es decir, se buscaba relacionar la lectura en tiempo de vuelo T registrada en las

⁶La intensidad del haz i_e , la presión P , el número de escaneos y el tamaño de cada canal; así como la magnitud del voltaje V_1 , su duración t_0 y su frecuencia ν y finalmente, el voltaje del lente V_L .

⁷Algunos parámetros fueron los mismos a lo largo de todas las realizaciones experimentales: $V_1 = 200V$, $\nu = 5000\text{Hz}$ y $t_0 = 400\text{ns}$.

gráficas, con la masa m asociada al ion generador de ese máximo, es decir, $m(T)$. Para llevar a cabo la identificación, se realizaron dos procesos independientes, los cuales se describen a continuación.

3.6.1. Simulación SIMION-7

La primera parte de la caracterización se llevó a cabo utilizando un simulador computacional llamado SIMION-7. En este programa es posible generar configuraciones *electroestáticas* específicas dada una geometría determinada. A partir de ella, el programa resuelve la ecuación de Laplace para el conjunto de voltajes seleccionado de forma iterativa, recreando con ello el campo eléctrico asociado a la configuración y modelando así trayectorias y velocidades de partículas cargadas dadas sus condiciones iniciales.

Para la simulación, se configuró dentro del programa la geometría del sistema de tiempo de vuelo, dejando como parámetros libres los distintos voltajes aplicados a cada uno de los electrodos, con la finalidad de observar sus posibles efectos sobre las trayectorias de los iones secundarios. Principalmente, se tomaba registro de la relación entre los voltajes V_1 aplicado al primero de los discos y V_L el voltaje sobre el lente de enfoque (manteniendo el resto de los electrodos aterrizados), buscando en todo momento la configuración bajo la cual se obtuviera una menor dispersión (mayor incidencia) de los iones sobre el detector.

Se realizaron diversas simulaciones bajo distintas condiciones de V_1 y V_L . A continuación se muestran 3 de ellas, en las cuales se tomó el valor de $V_1 = 200V$ y $V_L = 55V, 65V$ y $75V$ respectivamente. Las líneas negras representan las trayectorias de los iones, para estos casos particulares se tomaron inicialmente 100 iones, con una masa de 28 uma (simulando iones de N_2^+).

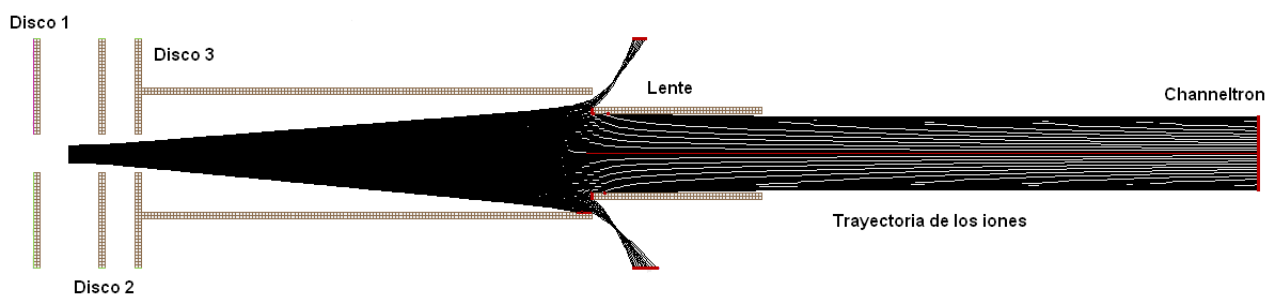


Figura 3.14. Simulación de las trayectorias con $V_1 = 200V$ y $V_L = 55V$. Bajo esta configuración, el porcentaje de iones detectados es del 40%.

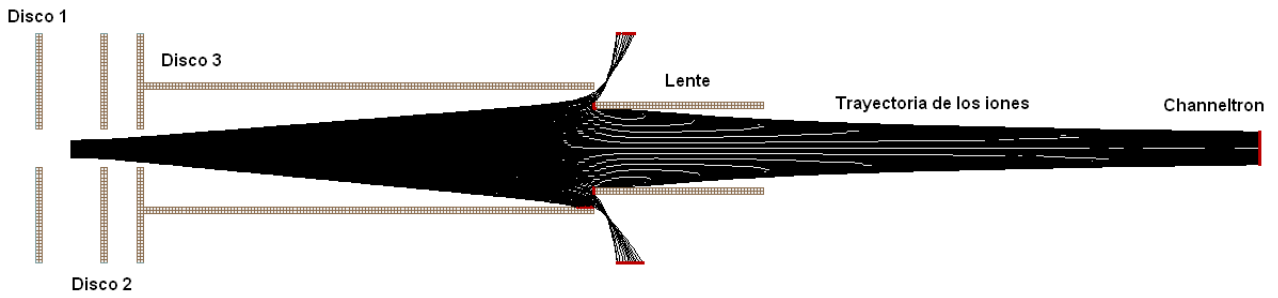


Figura 3.15. Simulación de las trayectorias con $V_1 = 200V$ y $V_L = 65V$. Configuración óptima, el porcentaje de iones detectados es del 62%.

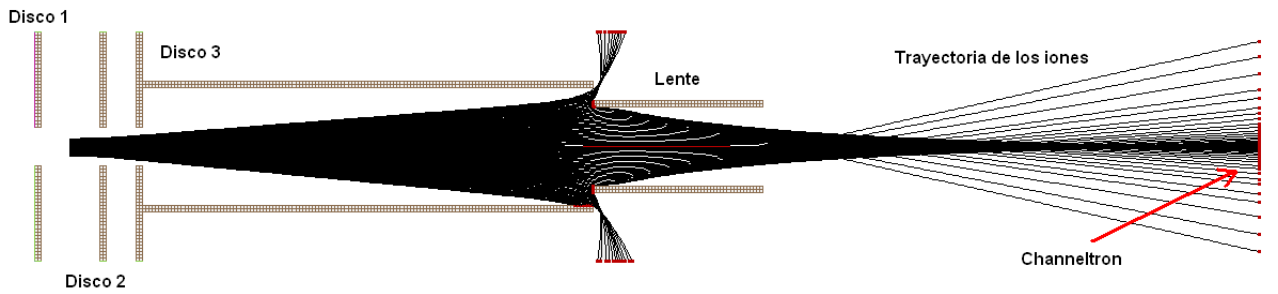


Figura 3.16. Simulación de las trayectorias con $V_1 = 200V$ y $V_L = 75V$. Bajo esta configuración, el porcentaje de iones detectados es del 18%.

Es posible observar a partir de las gráficas anteriores (Fig. 3.14, 3.15 y 3.16), que el número de iones detectados depende considerablemente del voltaje del lente V_L . En este caso las variaciones de V_L de solamente diez V con respecto al valor central de $V_L = 65V$ provocaban cambios considerables en el número de iones detectados de hasta el 47%. Esta influencia se manifestaba en todas las simulaciones, independientemente del voltaje seleccionado para V_1 y de la masa del ion seleccionado; para todas ellas, siempre existe un voltaje V_L con el cual la incidencia de los iones fue máxima.

Desde este punto de partida, la simulación ayudó tanto para realizar una estimación del voltaje óptimo del lente (aproximadamente la tercera parte de V_1), como para determinar de forma aproximada el tiempo de incidencia de los iones (bajo esta configuración, $T \approx 20\mu s$), y con ello obtener algunos valores particulares, a partir de donde fue posible llevar a cabo las pruebas experimentales para evaluar las secciones transversales de interés.

3.6.2. Determinación del tiempo de vuelo

Es clara la trascendencia de poder determinar explícitamente la relación entre la masa m de los iones y su tiempo de vuelo T . Esta relación se obtiene a partir de considerar los parámetros intervinientes en la formación del espectro, como el voltaje de aceleración de los iones V_1 y el tiempo de duración del pulso t_0 ; así como los determinados por la geometría del sistema de tiempo de vuelo: la separación $2d$ entre los discos uno y dos y el recorrido total l que realizan los iones, desde su formación hasta su detección.

La relación requerida puede encontrarse en términos de cálculos electrostáticos simples de la siguiente manera. A partir de la ecuación de movimiento para una partícula de masa m y carga q , confinada en una región donde se encuentran dos electrodos separados por una distancia $2d$ y entre los cuales se aplica un voltaje V_1 , es posible obtener la distancia recorrida de la partícula $x(t)$ para cualquier tiempo t .

Inicialmente, $x(t)$ obedece un comportamiento uniforme acelerado (considerando que el campo eléctrico generado por V_1 es uniforme), hasta alcanzar una velocidad terminal v cuando la partícula deje de sentir la presencia del campo y el movimiento se torne simplemente uniforme.

Debido a que el voltaje aplicado V_1 es pulsado, se distinguen dos comportamientos distintos al momento de calcular $x(t)$; en el primero, la partícula sale de la zona de aceleración antes de terminar el pulso, es decir, recorre una distancia mayor a d antes de haber transcurrido un tiempo t_0 , en este caso, la dependencia del tiempo de vuelo T con respecto a m/q es del tipo,

$$T \propto \sqrt{\frac{m}{q}}, \quad (3.6)$$

por otra parte, cuando el pulso termina antes de que la partícula salga de la región en la cual se genera el campo eléctrico, T presentará una dependencia lineal con respecto a m/q a diferencia del comportamiento exhibido en la ecuación 3.6:

$$T \propto \frac{m}{q}. \quad (3.7)$$

Al realizar las estimaciones respectivas para los parámetros utilizados durante las pruebas en las que $V_1 = 200V$, masas de los iones secundarios entre 1 y 44 uma y el tiempo de los pulsos $t_0 = 400ns$, se llega a la conclusión de que el tiempo de vuelo de los fragmentos será regido en todos los casos de acuerdo con la ecuación 3.7⁸, es decir, dentro del régimen

⁸Para comenzar a cambiar de régimen serían necesarios al menos 250V.

lineal. Concretamente, la dependencia será,

$$T\left(\frac{m}{q}\right) = \frac{2dl}{V_1 t_0} \frac{m}{q} + \frac{t_0}{2} \approx \frac{2dl}{V_1 t_0} \frac{m}{q} \quad (3.8)$$

Se observa cierta consistencia en este último resultado; nótese por ejemplo que T es proporcional a m/q , como era de esperarse. Además T depende inversamente proporcional a V_1 y a t_0 , es decir, que mientras mayores sean el voltaje o el tiempo de duración del pulso, la velocidad de deriva será mayor y por ello T se reducirá. Bajo esta descripción, se espera obtener con las condiciones antes mencionadas, tiempos de vuelo del orden de μs ; alrededor de siete μs si la partícula es tan ligera como un protón y cerca de $65 \mu s$ para N_2^+ .

Con esta última caracterización, se cumple con el objetivo de conocer, en primera instancia, los valores de los parámetros más importantes en el momento de los desarrollos experimentales de interés, aunque teniendo cuidado de considerar estas condiciones sólo como punto de partida, con una amplia posibilidad de que cambien en cada una de las situaciones particulares a lo largo de los experimentos.

Capítulo 4

Condiciones experimentales

Ya con una caracterización completa del acelerador y con el conocimiento de los parámetros principales, se efectuaron las mediciones de las secciones transversales para cada uno de los distintos gases de interés. Es importante resaltar que en ocasiones, las propias pruebas sirvieron como verificación de que los parámetros obtenidos eran los adecuados; aunque se debe enfatizar que en todas las realizaciones experimentales, estos últimos solamente sirvieron como una *guía* para comenzar con las mediciones y por ello sus valores fueron distintos en general entre una y otra medición.

El presente capítulo tiene como finalidad dar una descripción completa de cómo se obtuvieron las secciones transversales. En una primera parte se dan a conocer las generalidades, condiciones que se aplicaron para todos los blancos de estudio, mientras que posteriormente se especifica lo acontecido en cada uno de los cuatro gases: CO_2 , N_2 , O_2 y CH_4 .

4.1. Condiciones generales

La medición de las secciones transversales se realizó al menos en un par de ocasiones para cada uno de los blancos. Cada desarrollo experimental consistía en encontrar las condiciones adecuadas y efectuar la toma de datos correspondiente dada una energía de interacción. Una vez terminada la adquisición de datos, se elegía un nuevo valor energético y se repetía la operación, hasta abarcar todo (o en su mayoría) el intervalo de operación del acelerador, es decir, entre uno y diez keV.

El procedimiento a seguir a lo largo del desarrollo experimental, se describe a continuación. Todas las pruebas se iniciaban con la generación de un alto vacío, cuya presión

base oscilaba entre dos y cuatro μTorr , llegando inclusive a tomar valores de hasta 9×10^{-7} Torr. Una vez alcanzado este nivel de limpieza dentro del acelerador, se hacía circular una corriente continua a través del filamento. El aumento en la corriente debía ser gradual para que se llevara a cabo la desgasificación de manera adecuada, hasta llegar aproximadamente a los 15 V (10 A). Bajo estas condiciones, se ingresaban los gases generadores del haz, Ar e H_2 , al interior del acelerador, cuya composición típica resultaba ser de 40% Ar (80 mTorr) y 60% H_2 (120 mTorr) y se aplicaba un voltaje cercano a los 80 V en el ánodo de la fuente para producir una descarga de arco de aproximadamente 300 mA.

Ya con la descarga, se aceleraban los iones mediante la aplicación de un voltaje de aceleración específico V_a ¹. Se ajustaban entonces, el voltaje de enfoque V_e , el de diez grados V_{10} , el voltaje del filtro V_e y la corriente del electroimán i_m con la finalidad de obtener una corriente de protones máxima y estable. La corriente se monitoreaba en la bandera y alcanzaba intensidades del orden de 10^{-7} A, con una estabilidad tal, que la variación era menor al 5% en cada una de las tomas de datos.

Posteriormente, se levantaba la bandera para dar paso al haz hacia la cámara de reacción, y se ajustaban los parámetros hasta lograr detectar los iones en la caja de Faraday, en la cual se generaba una corriente monitoreada en todo momento con ayuda del electrómetro en interfase con el programa computacional, MUL-600. Las corrientes absolutas registradas, estuvieron entre los 10^{-8} y los 10^{-7} A, cuidando que durante las pruebas, sus intensidades no presentaran cambios mayores al 5%; en los casos en los cuales se registraban variaciones significativas, se detenía el registro, se estabilizaba nuevamente la corriente y se reiniciaba la adquisición.

Inmediatamente después, se efectuaba el ingreso del blanco de estudio. La cantidad de gas suministrada era regulada de manera indirecta por un medidor de presión, de tal manera, que esta última cambiaba a partir de la presión base, $\sim 1 \times 10^{-6}$ Torr, hasta un valor cercano a los $\sim 9 \times 10^{-6}$ Torr, garantizando que las colisiones se llevaran a cabo dentro del régimen de colisión simple. Los cambios relativos en la presión entre el inicio y el término de cada toma fueron menores al 5% en todos los casos.

Una vez estabilizados el haz y la presión, se ajustaba el voltaje del disco uno V_1 del sistema de interacción, de tal manera que su amplitud resultara ser en todos los casos de 200 V, oscilando a una frecuencia de 5000 Hz y con duración de 400 ns en cada pulso (señal cuadrada). Los discos dos y tres se mantenían aterrizados y el voltaje del lente V_L

¹Usualmente se comenzaban las pruebas con cinco kV, debido a que para esta energía, los parámetros se conocían con muy buena definición.

no excedía en ningún caso los 20 V. Como ya se mencionó anteriormente, estas condiciones se determinaron de forma hasta cierto punto heurística, buscando en todo momento que se obtuviera la mejor resolución posible en los espectros de tiempo de vuelo.

La detección de los fragmentos se realizó con ayuda de un multiplicador de electrones Channeltron, cuya señal de salida se amplificaba y se enviaba a la tarjeta multicanal MCS-32. Los parámetros de la tarjeta se adecuaron de tal manera que fueran abiertos 1000 canales de adquisición con una apertura temporal de 100 ns cada uno, registrando con ello, todos los fragmentos generados cuyo tiempo de vuelo resultara menor a los 100 μ s. Es importante señalar que para la adquisición, la tarjeta se sincronizaba con el inicio de los pulsos de voltaje, por lo cual, el canal de adquisición respectivo mostraba directamente el *tiempo real* que tardaba el ion correspondiente desde su formación hasta la incidencia en el detector. En cada realización experimental, este proceso se repetía durante 500 000 ocasiones, garantizando con ello, un número suficiente de conteos que validaran la toma de datos desde un punto de vista probabilístico. En conjunto, cada registro tenía una duración de 100 s, tiempo en el cual, se generaba el espectro de vuelo característico. Una vez finalizado el proceso, se cerraba el paso del gas blanco hasta retomar la presión base y se repetía la toma con *las mismas condiciones experimentales*, para poder realizar la posterior sustracción de la señal debida a partículas residuales.

Los espectros fueron analizados en un programa especializado en espectroscopia llamado PeakFit. Con ayuda de este programa, se realizaron los respectivos ajustes gaussianos para cada uno de los máximos registrados en el espectro, con la finalidad de evaluar el área debajo de la curva subtendida por cada uno de ellos. Justamente *estas áreas, divididas por unidad de corriente y por unidad de presión*, una vez sustraída la señal residual, estaban relacionadas con la sección transversal concerniente a la formación del ion asociado al máximo en consideración $\sigma(X^+)$, para la energía a la cual se llevaba a cabo la adquisición.

Una vez que los espectros eran registrados, se hacía la variación energética en medio o un keV, y se repetía la operación completa. Con la finalidad de garantizar que los datos fueran adquiridos bajo la mayor uniformidad posible, y debido a que a lo largo de la realización experimental se encontraban presentes demasiados parámetros para llegar finalmente a la toma de los espectros, solamente fueron considerados para el análisis, los resultados adquiridos en *sesiones experimentales completas*, realizadas de forma continua, es decir, las que se obtenían en un mismo día.

4.2. Condiciones particulares

4.2.1. Dióxido de Carbono, CO_2

Las primeras mediciones realizadas, correspondieron a la interacción $H^+ + CO_2$. Los resultados de estas mediciones fueron aceptados de manera formal en un artículo de investigación arbitrado que se anexa al final del presente trabajo [53].

Las secciones transversales adquiridas, asociadas a la formación de iones positivos, se obtuvieron en el intervalo de energías de 2,0 a 9,5 keV, y fueron el resultado de tres mediciones independientes, elegidas de entre siete sesiones experimentales. La razón por la cual solamente se tomaron en cuenta tres, fue porque las restantes estuvieron incompletas; en la mayoría de las ocasiones sólo se abarcaba la mitad del intervalo completo de energías. La causa de lo anterior era principalmente por falta de tiempo para terminar con la adquisición, o también debido a inestabilidades repentinas en la intensidad del haz.

En estos casos la presión del blanco fue considerada entre siete y nueve μ Torr, asegurando que las interacciones se llevaran a cabo dentro del régimen de colisión simple. La corriente del haz dependía de la energía de aceleración y en las tres sesiones iba desde los 9×10^{-9} A, hasta los 2×10^{-8} A.

4.2.2. Oxígeno, O_2 y Nitrógeno, N_2

En el caso de las interacciones $H^+ + N_2$ y $H^+ + O_2$ el procedimiento resultó ser un poco más complicado que en el estudio llevado a cabo sobre el CO_2 , debido a que en ambos casos, los iones principales derivados, se confundían con los elementos residuales del aire. Fue durante estas pruebas, cuando se hizo clara la necesidad de tomar un espectro base para cada una de las energías de interacción, es decir, un espectro tomado sin permitir el ingreso del gas blanco, con la finalidad de cuantificar la importancia del gas residual. Es importante señalar, que aún sin permitir el ingreso del gas, se seguían obteniendo espectros característicos, rectificando que aún con el alto vacío generado, el conteo residual no era despreciable.

Para el oxígeno se realizaron diez pruebas, de las cuales solamente se consideraron tres para el análisis de datos. Una de las principales dificultades experimentales en el caso de este blanco, fue que a lo largo de esas tomas, el haz no se lograba estabilizar de manera adecuada, debido principalmente al desgaste del filamento que se tenía en ese momento, provocando

con ello una baja definición de los espectros. El intervalo de energías en consideración fue de los dos a los diez keV, considerando sólo valores enteros de keV. La corriente del haz abarcaba de entre los 7×10^{-9} A hasta los 2×10^{-7} A, con una presión característica cercana a los 8×10^{-6} Torr.

En el caso del N_2 se realizaron once pruebas características, de las cuales se consideraron solamente tres para el análisis, debido también a razones de estabilidad. En todos los casos la corriente superaba los 10^{-8} A, alcanzando los 9×10^{-8} A en algunas ocasiones. La presión debida al gas fue nuevamente cercana a los 8×10^{-6} Torr.

Como consecuencia de las mediciones realizadas en ambas interacciones, $H^+ + N_2$ y $H^+ + O_2$, se elaboró un artículo de investigación, el cual fue recientemente aceptado y cuyo título es, *Low Energy Ionization and Fragmentation Cross Sections for H^+ Impact on N_2 and O_2* .

4.2.3. Metano, CH_4

En la interacción $H^+ + CH_4$ se presentó un problema semejante al de N_2 y O_2 , en cuanto a que se presentaban residuos ambientales N^+ (14 uma) y O^+ (16 uma) interfirientes con los iones CH_2^+ y CH_4^+ respectivamente. Aunque en términos generales, la limpieza y claridad de los espectros resultaba ser excelente, (Fig. 5.9). Para este gas se realizaron dos sesiones experimentales completas en el intervalo de entre dos y diez keV, igualmente tomando valores enteros de keV.

La facilidad con la cual se llevaron a cabo las mediciones en el presente caso, fue consecuencia de que la corriente del haz fuera más alta con respecto a la registrada en las pruebas anteriores (los valores obtenidos oscilaban entre los 3×10^{-8} A y 1×10^{-7} A, dando como resultado una razón señal-ruido mucho mayor) y con mayor estabilidad. El intervalo de presiones fue prácticamente el mismo que en los casos anteriores, entre 7×10^{-6} Torr y 9×10^{-6} Torr.

Al igual que en los gases anteriores, como consecuencia de las secciones transversales adquiridas, se elaboró un artículo titulado *Ionization and Fragmentation of CH_4 by Proton Impact*, el cual se encuentra actualmente en proceso de arbitraje.

Capítulo 5

Resultados y análisis

5.1. Protones en CO_2

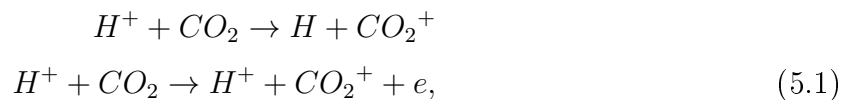
La complejidad en la modelación de las interacciones entre colisiones de iones y moléculas de CO_2 , ha provocado que estas aun no sean completamente entendidas, a pesar de que han sido el objeto de estudio de distintas investigaciones [29,54,55,56,57,58,59,60,61,62]. Desde el punto de vista experimental, diversos grupos han realizado mediciones de ciertas secciones transversales utilizando haces de protones en diferentes intervalos energéticos. Por ejemplo, Van Zyl y colaboradores se han enfocado en el proceso de captura electrónica entre 0,05 y 3 keV [54], mientras que Toburen y compañía hacen otro tanto entre 0,1-2,5 keV [55]. Complementariamente, se han llevado a cabo algunas otras mediciones referentes al proceso de intercambio de carga; Basu y colaboradores con energías entre 1-200 keV [56], Rees de 10 eV a 10 keV [57], Gao y compañía de 0,5 a 5,0 keV [58] y finalmente Lindsay y Stebbings para energías de 1 a 5 keV [29].

Existen además, varios trabajos en los cuales se abordan los procesos disociativos en la interacción $H^+ + CO_2$. En uno de ellos, Moretto y colaboradores investigan la fragmentación del blanco en C^+ , O^+ y O para una energía de 25 keV, usando la técnica de triple coincidencia [59], mientras tanto, Knudsen y compañía estudian algunos procesos disociativos en el intervalo de 50-6000 keV [60]. Rodrigo y su grupo de investigación, analizan la producción de los fragmentos derivados del blanco, en el intervalo de energías de entre 50 y 200 keV [61]. Finalmente, Browning y Gilbody, en un trabajo guía para la presente

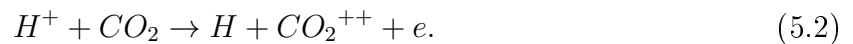
investigación, miden las secciones transversales asociadas a la fragmentación del CO_2 en el intervalo de 5 a 45 keV [62].

La relevancia de las secciones transversales $\sigma(X^+)$, derivadas de las interacciones $H^+ + CO_2$ a bajas energías, adquiridas en la presente investigación, se debe en gran medida, a su aplicación directa en la modelación de distintos procesos. Por ejemplo, sirven de soporte en el estudio e interpretación de las interacciones entre protones provenientes del viento solar, incidentes en partículas de CO_2 presentes en la atmósfera marciana [61,63]. Los modelos relacionados con la formación y evolución de esta atmósfera requieren del conocimiento de distintas secciones transversales, incluyendo las asociadas a la formación de iones positivos, $\sigma(X^+)$, además de que los resultados pueden ser cotejados con la información recabada por el *Mars Express Spacecraft*, acerca de la producción de iones y átomos energéticos emergentes [64,65].

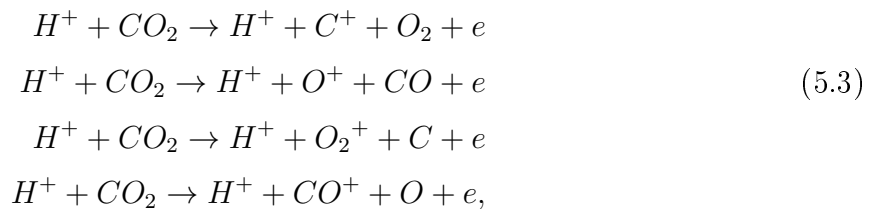
Para la presente investigación, los procesos de interés en las interacciones entre H^+ y CO_2 se pueden desglosar de la siguiente manera. En primer lugar, se encuentran los *no-disociativos*: captura electrónica simple e ionización, ambos responsables de que se lleve a cabo la formación del ion CO_2^+ ,



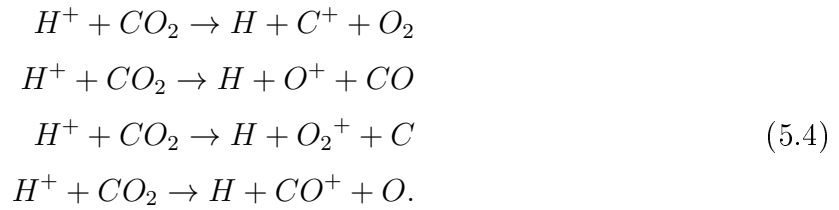
así como con la transferencia de carga ionizante, cuyo fragmento asociado es el ion CO_2^{++} ,



En cuanto a los procesos *disociativos* se refiere, se encuentran aquellos en los que interviene la ionización del blanco,



además de los procesos en que ocurre la captura de un electrón por parte del haz,



Sin embargo, es importante mencionar, que bajo la estructura actual del dispositivo experimental, *no es posible diferenciar* entre los procesos que originan a un determinado ion, es decir, que no se puede precisar la contribución de las interacciones de manera completamente independiente, *solamente* es posible cuantificar la fracción de cada uno de los diferentes iones derivados del CO_2 , y por lo tanto, sólo se pueden obtener, las secciones transversales asociadas a la formación de los distintos iones, $\sigma(X^+)$, las cuales, son en general, la suma de al menos dos tipos de procesos. Por ejemplo, en el caso de la formación del ion CO_2^+ , la sección transversal, $\sigma(CO_2^+)$, corresponderá a la suma de la asociada a la captura electrónica simple ($H^+ + CO_2 \rightarrow H + CO_2^+$) más la referente al proceso de ionización ($H^+ + CO_2 \rightarrow H^+ + CO_2^+ + e$), siendo imposible, bajo las presentes condiciones, determinar la contribución de cada una de ellas de forma independiente.

En la siguiente gráfica (Fig. 5.1) se muestra un espectro característico de tiempo de vuelo, en el cual se visualizan los diferentes fragmentos producidos en la interacción $H^+ + CO_2$.

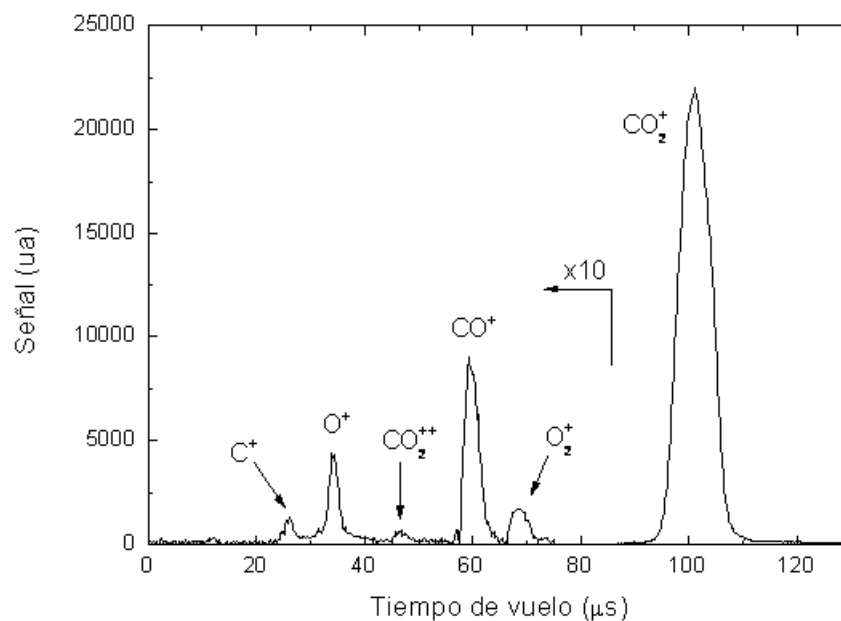


Figura 5.1. Espectro de tiempo de vuelo, $H^+ + CO_2$ a siete keV.

Las áreas debajo de cada uno de los máximos fueron normalizadas con respecto a la corriente y presión registradas durante la adquisición de datos, posteriormente se extrajo la señal de fondo, y se determinaron las áreas relativas asociadas al ion correspondiente. Justamente, estos valores resultaban proporcionales, *todos con la misma constante de proporcionalidad*, a las secciones transversales relativas a la formación del ion implicado, $\sigma(X^+)$ [62].

A continuación se muestra el comportamiento de las diferentes secciones transversales $\sigma(X^+)$, como función de la energía de interacción, (Fig. 5.2), en el intervalo de entre 2 y 9,5 keV.

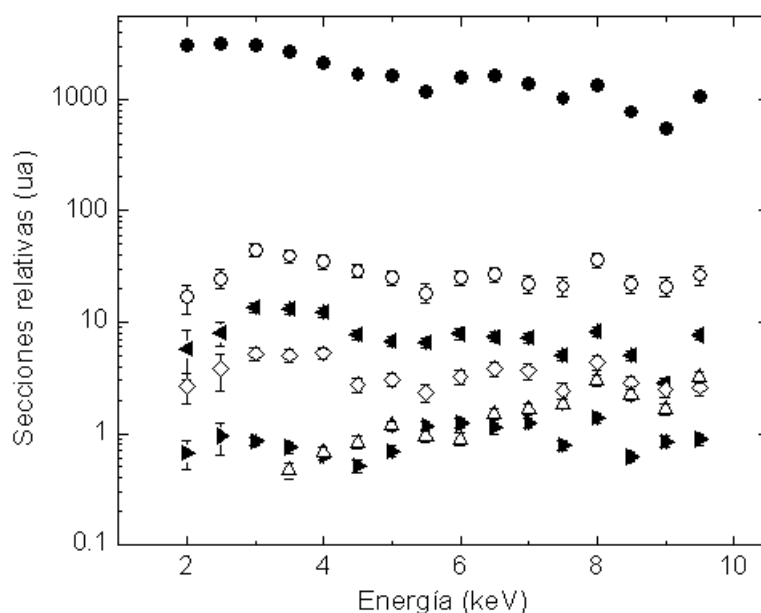


Figura 5.2. Secciones transversales relativas entre 2 y 9,5 keV. \bullet $\sigma(\text{CO}_2^+)$, \circ $\sigma(\text{CO}^+)$, \blacktriangleleft $\sigma(\text{O}_2^+)$, \diamond $\sigma(\text{O}^+)$, \blacktriangleright $\sigma(\text{C}^+)$ y \triangle $\sigma(\text{CO}_2^{++})$.

Se observa que el ion CO_2^+ es el fragmento dominante, seguido por los iones CO^+ , O_2^+ , O^+ , C^+ y CO_2^{++} . Adicionalmente a las incertidumbres de origen estadístico, mostradas en la gráfica anterior, (Fig. 5.2), se encuentran las asociadas a los errores sistemáticos, derivados de la medida de la corriente de los protones y de la presión del blanco, las cuales se estiman alrededor del 10%. En conjunto, las incertidumbres totales para el caso de 2 y 2,5 keV fueron del orden del 30%, mientras que para el resto de las energías resultaban un poco mayores al 15%.

Los fragmentos CO^+ , O_2^+ , O^+ y C^+ muestran un comportamiento creciente entre dos y tres keV, alcanzando un máximo alrededor de esta última energía, decreciendo nuevamente y volviendo a aumentar hasta un segundo máximo. La única excepción a este comportamiento

fue el ion CO_2^{++} , el cual resultó ser creciente en todo el intervalo de energías.

En una investigación previa, Straub y colaboradores [64] miden las secciones transversales asociadas a la producción de iones en el intervalo entre 25-1000 eV, para la interacción $e + CO_2$, empleando un espectrómetro de masas de tiempo de vuelo. Sus resultados muestran que para energías menores a 50 eV las secciones obedecen la relación $\sigma(CO^+) > \sigma(O^+) > \sigma(C^+)$, en acuerdo con las mediciones llevadas a cabo en la presente investigación.

Es posible hacer una equivalencia energética entre protones y electrones de acuerdo a su velocidad. El criterio para llevar a cabo este proceso, es determinar el factor de proporcionalidad entre las energías cinéticas de una y otra partícula, bajo la condición de que su velocidad sea la misma¹. Con ello, una energía protónica de 9,5 keV corresponde aproximadamente a 4,8 eV para el caso de haces de electrones. Este valor se encuentra por debajo del mínimo investigado por Rapp y Englander-Golden, quienes abordaron la interacción $e + CO_2$ [66], y cuyos resultados fueron la base de un trabajo posterior realizado por Lindsay y Stebbings, en el cual, se estudió la fragmentación del blanco para energías por debajo de los 50 eV [29]. Lindsay y Stebbings obtienen una razón $\sigma(O^+)/\sigma(CO^+) \gtrsim 1$ lejana a los presentes resultados, en los cuales esa misma razón resulta ser de aproximadamente 0.1; por otra parte, ellos mismos llegan a que la relación $\sigma(CO^+)/\sigma(C^+) \approx 2$ para 50 eV e incrementa hasta 10 en 30 eV, significativamente más cercana, aunque todavía con una notoria diferencia, a la aquí reportada, en la cual $\sigma(CO^+)/\sigma(C^+) \approx 25$, en todo el intervalo de energías en consideración.

La aparición de una cantidad significativa de O_2^+ en los espectros de tiempo de vuelo, resulta de especial interés, debido a que este ion no fue reportado ni en la investigación realizada por Lindsay y Stebbings [29], ni por las mediciones llevadas a cabo por Straub y compañía [64]; aunque en este último trabajo, se menciona, que esto ocurrió debido a la baja resolución en su sistema experimental, y por lo tanto, el máximo asociado al ion O_2^+ quedaba encubierto por el del CO^+ . La formación de O_2^+ ha ocurrido en procesos de descarga de CO_2 y se ha confirmado su presencia mediante el uso de técnicas espectroscópicas [67], en donde se muestra una creación sustancial de este ion a partir de la reacción,



La presencia de iones de CO_2^{++} , concuerda con algunas investigaciones elaboradas pre-

¹La conversión es directa (≈ 2000) y se sigue de igualar las velocidades de ambas partículas a partir de su energía cinética.

viamente por diversos grupos de trabajo [3,61,63,64,68,69,70,71,72,73]. En un par de ellas, se menciona, que la producción típica relativa al ion CO_2^+ es cercana al 1%, es decir $\sigma(CO_2^{++})/\sigma(CO_2^+) \approx 0,01$ [61,63]. Sin embargo, según lo obtenido en los presentes resultados, esta misma razón resulta ser mucho más baja y se encuentra entre $1,3 \times 10^{-4}$ y $3,0 \times 10^{-3}$ en el intervalo energético de 3,5 a 9,5 keV.

Las secciones transversales relativas, asociadas a la formación de cada uno de los fragmentos, $\sigma(X^+)$, fueron sumadas y el resultado fue normalizado para obtener la sección total asociada a la formación de iones positivos, $\sigma_+(CO_2)$. A continuación se muestra $\sigma_+(CO_2)$ en comparación con algunos resultados previos (Fig. 5.3).

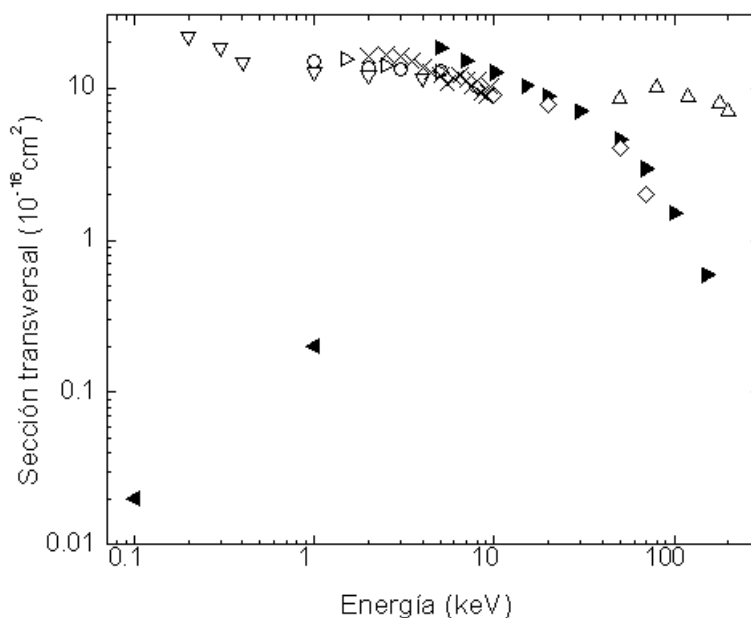


Figura 5.3. Sección transversal absoluta σ_+ , en colisiones H^+ y CO_2 .

\times Presentes resultados, \blacktriangleright Rudd, \diamond McNeal, \circ Lindsay, \blacktriangleleft Van Zyl, \triangle Knudsen, \triangleright Greenwood y ∇ Kusakabe.

En la gráfica anterior, (Fig. 5.3), se observa que las presentes mediciones se ajustan adecuadamente a las realizadas por Kusakabe y colaboradores [4], McNeal [28], Lindsay y Stebbings [29] y Greenwood y compañía [74], mostrando que, en conformidad con todos ellos, se visualiza una tendencia decreciente de $\sigma_+(CO_2)$ en función de la energía de interacción. En todos los casos en los cuales es posible realizar la comparación, la diferencia resulto ser menor al 15%.

5.2. Protones en N_2 y O_2

De la misma manera que en el caso del CO_2 , el estudio de los procesos de transferencia de carga, ionización y disociación de moléculas de N_2 y O_2 , ha sido abordado por diversos grupos de investigación. Los resultados provenientes de estos trabajos han permitido, entre otras cosas, la elaboración y sustentación de modelos acerca de la atmósfera superior terrestre así como del medio interestelar circundante; además de proveer herramientas para la interpretación de las interacciones iónicas con magnetósferas y exósferas planetarias [75].

La disociación del oxígeno molecular, O_2 , generado por la interacción con iones energéticos, es importante debido a que su estudio ha permitido profundizar en el conocimiento de las atmósferas lunares Jovianas más importantes: Europa y Ganimedes; las cuales, justamente, contienen O_2 en abundantes cantidades. Precisamente, la formación de estas atmósferas se debe en gran medida a las interacciones entre partículas cargadas incidentes sobre las superficies lunares [76,77]. El origen de estas partículas se debe esencialmente a iones energéticos que son atrapados por la magnetósfera de Júpiter y redireccionados sobre las propias superficies [78,79,80]. Es importante resaltar que uno de los principales constituyentes de estas partículas energéticas incidentes son justamente los protones [81,82].

En estas atmósferas se encuentran grandes cantidades de partículas energéticas, tanto cargadas, como neutras. La formación de estas últimas es consecuencia primordialmente del proceso del intercambio de carga entre los iones externos incidentes y las partículas atmosféricas [80]. En muchas situaciones, aunado al intercambio de carga, es posible que las moléculas residuales, así como los fragmentos generados, adquieran suficiente energía cinética como para que puedan escapar del propio campo gravitacional lunar. Debido a ello, por ejemplo en el caso de Europa, una considerable cantidad de fragmentos neutros logran escapar de su atmósfera, formando una extensa nube de gas gravitacional atrapada dentro de la propia órbita lunar [79,80,81,82,83]. Algo semejante ocurre también en Titán, el mayor de los satélites de Saturno. En este caso la atmósfera está compuesta principalmente por moléculas de N_2 y CH_4 [84], y nuevamente, el flujo iónico incidente (principalmente partículas con energías menores a los diez keV, de acuerdo a los datos adquiridos por las sondas espaciales Voyager) provoca la expulsión de estas moléculas, creando una estela de gas, orbitando a la par del propio satélite, via procesos dispersivos [85,86].

De manera más general, las partículas del viento solar, los rayos cósmicos y los fragmentos secundarios generados durante las interacciones, provocan que se lleven a cabo un sinnúmero de procesos de excitación, ionización y disociación sobre los principales constituyentes de atmósferas y cometas: N_2 , CO , CO_2 y CH_4 . Por lo tanto, si se pretende dar una descripción

completa de los fenómenos involucrados, resulta de suma importancia conocer con precisión las secciones transversales asociadas a tales interacciones [87], y desde ese punto de vista, las mediciones aquí reportadas resultan de suma relevancia para profundizar en estos aspectos. Aunado a ello, las mismas mediciones, pueden aportar información para el entendimiento de algunos otros fenómenos, como son, el balance energético, las cantidades de partículas formadas en atmósferas satelitales, la producción y calentamiento del plasma magnetosférico Joviano y la fragmentación de N_2 y O_2 [88].

De entre los trabajos previos que se han llevado a cabo, referentes a las interacciones entre $H^+ + N_2$ o bien $H^+ + O_2$, se encuentran los siguientes. Luna y colaboradores [12], estudian el proceso de disociación provocado por iones incidentes en la magnetósfera de Titán en alturas superiores a los 1000 km, empleando la técnica de espectrometría de masas de tiempo de vuelo. Por otra parte, Rudd y compañía [3], miden la sección transversal total asociada a la formación de iones positivos en interacciones de protones incidentes en N_2 y O_2 con energías de entre 5-4000 keV. Además, Knudsen y colaboradores [60], investigan la captura electrónica simple, así como la formación de fragmentos entre 60-6000 keV en protones incidentes en N_2 . Browning y Gilbody [62], abordan el proceso de transferencia de carga entre 5-45 keV en colisiones sobre N_2 y O_2 con diferentes haces iónicos y moleculares. Mientras tanto, Gao y su equipo de trabajo [58], determinan la sección transversal diferencial entre los 0^0 y 1^0 en colisiones de H^+ sobre N_2 y O_2 para 0,5, 1,5 y 5,0 keV. Koopman [89], mide diferentes secciones transversales a 0.5 keV obteniendo resultados similares a las de Rudd y colaboradores [3], Gao y compañía [58], Knudsen y colaboradores [60], y Browning y Gilbody [62]. Así mismo, Gordeev y Panov [90], realizan mediciones a 1,5 keV con protones incidentes en N_2 encontrando resultados cercanos a los de Gao y colaboradores [58]. Van Zyl y Stephen [91], muestran que el proceso de ionización es dominante, en interacciones entre protones y N_2 alrededor de los 35 keV, incrementando además suavemente entre 1-10 keV. Ellos mismos realizan mediciones entre 0,5-2,0 keV en reacciones entre protones y O_2 . Stier y Barnett [30], hacen otro tanto en protones incidentes sobre N_2 a cinco keV, con resultados parecidos a los de McNeal y Clark [6], mientras que los obtenidos por Rudd y colaboradores [3], difieren en casi un 50 % de estos últimos. Finalmente, Stebbings y compañía [92], miden además la sección total en impactos de protones sobre O_2 en el intervalo de energías de 40-10 000 eV.

Es importante resaltar que, a diferencia de los trabajos anteriormente citados (y como complemento a ellos), en la presente investigación, las mediciones conllevan un enfoque particular en la *fragmentación* de las moléculas de N_2 y O_2 . A continuación se muestra un espectro característico de tiempo de vuelo de N_2 (Fig. 5.4), en el cual, es posible observar

justamente la aparición del ion N^+ , consecuencia de la fragmentación del blanco, así como el N_2^+ , heredado de los procesos no disociativos. Los espectros de O_2 resultaron semejantes, en cuanto a que se observaban dos máximos para todas las energías. Se puede apreciar, que los procesos asociados a la formación del ion N_2^+ (O_2^+ , en su respectivo caso) resultaron ser ampliamente dominantes, característica que se mantuvo a lo largo de todo el intervalo de energías.

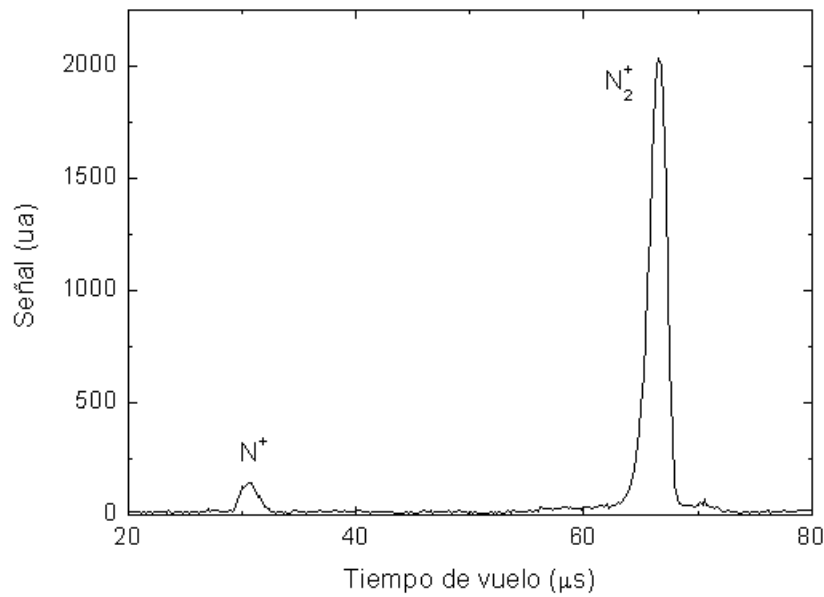


Figura 5.4. Espectro de tiempo de vuelo, $H^+ + N_2$ a dos keV.

Como ya se mencionó previamente, por debajo de los 50 keV, el proceso dominante en las interacciones, $H^+ + N_2$ y $H^+ + O_2$, es el de captura electrónica simple $H^+ + N_2 \rightarrow H + N_2^+$ ($H^+ + O_2 \rightarrow H + O_2^+$) [90], en concordancia con los presentes resultados. Sin embargo, se debe puntualizar que, nuevamente, el equipo experimental, no permite distinguir el origen de los distintos iones generados. Por ejemplo, la generación del ion N_2^+ , puede provenir del proceso de captura electrónica, así como de la ionización del blanco ($H^+ + N_2 \rightarrow H^+ + N_2^+ + e$) sin que sea posible cuantificar cuál es la contribución de cada uno de los procesos a la formación del ion. De manera general, las secciones transversales obtenidas, corresponden a la formación total de cada especie de iones detectados N^+ y N_2^+ (O^+ y O_2^+), aunque estos, sean el resultado de uno o varios procesos distintos. Finalmente, se debe destacar que, los iones doblemente ionizados, N_2^{++} y O_2^{++} , quedaron fuera del límite de la presente resolución experimental.

Nuevamente, para encontrar las secciones transversales absolutas, se consideraron las

áreas debajo de cada uno de los máximos divididas por unidad de corriente y por unidad de presión (después de haber removido la señal de fondo). Las secciones fueron normalizadas como se describe a continuación, utilizando las mediciones previas encontradas por Williams y colaboradores [93] a diez keV, para el caso de O_2 y por Browning y Gilbody [62] a cinco keV, para N_2 . Dentro del régimen de colisión simple, las secciones transversales asociadas a la producción de cada una de las diferentes especies está dada por $\sigma(X) = \frac{N_i(X)}{N_p n l}$, donde N_i es el número de partículas del tipo X producidas por N_p protones incidentes sobre el blanco distribuido a lo largo de una profundidad l y con una densidad volumétrica n . Las mediciones de Williams [93], para un caso, y Browning y Gilbody [62] para el otro, permitieron justamente encontrar la cantidad nl , la cual no es posible determinar directamente debido a las características intrínsecas del presente sistema experimental. Sin embargo, ya con este parámetro conocido, se logró evaluar la constante de normalización, y con ello, determinar las secciones absolutas.

En las siguientes gráficas (Fig. 5.5 y Fig. 5.6) se observan las secciones transversales absolutas, asociadas a la formación de los diferentes iones positivos, $\sigma(N^+)$, $\sigma(N_2^+)$, y $\sigma(O^+)$, $\sigma(O_2^+)$ respectivamente, así como la de los iones totales $\sigma_+(O_2)$ (la suma de las secciones individuales), en el caso del O_2 , en comparación con los resultados de Browning y Gilbody [62], Luna y colaboradores [12] y Williams y compañía [93]. Se observa un acuerdo razonable con respecto a estos trabajos, además de apreciarse una conexión suave entre los mismos; aunque a diferencia de ellos, en el caso de $\sigma(N_2^+)$, es claro un máximo muy pronunciado alrededor de los siete keV, mientras que otro tanto, ocurre para $\sigma(O_2^+)$ cerca de los cinco keV. Es visible el dominio de los iones moleculares, de hecho, $\sigma(N_2^+)$ es al menos un orden de magnitud mayor que $\sigma(N^+)$ en todo el intervalo energético, mientras que $\sigma(O_2^+)$ es entre cuatro y cinco veces mayor a $\sigma(O^+)$ a bajas energías y decrece alrededor de dos para diez keV.

Las mediciones de Luna y colaboradores [94], para el caso del O_2 , muestran que los canales asociados a la formación de O^+ y O_2^+ , son comparables para energías mayores a los 20 keV, $\frac{\sigma(O_2^+)}{\sigma(O^+)} \approx 1,5$, valor que aumenta hasta aproximadamente 3,5 para diez keV, cercano al aquí reportado, ≈ 2 .

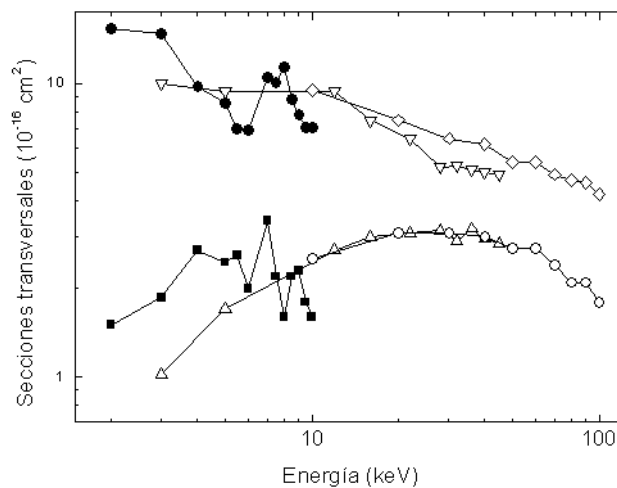


Figura 5.5. Secciones transversales absolutas en colisiones de H^+ y N_2 . $\sigma(N^+)$: \blacksquare Presentes resultados, \triangle Browning, \circ Luna; $\sigma(N_2^+)$: \bullet Presentes resultados, ∇ Browning y \diamond Luna.

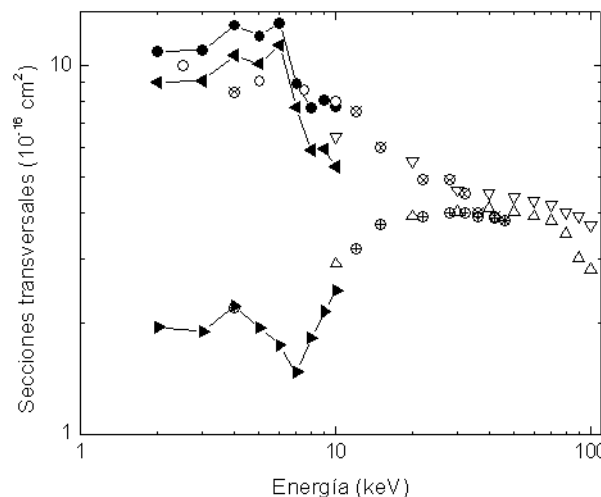


Figura 5.6. Secciones transversales totales en colisiones de H^+ y O_2 . $\sigma(O^+)$: \blacktriangleright Presentes resultados, \triangle Luna, \oplus Browning; $\sigma(O_2^+)$: \blacktriangleleft Presentes resultados, ∇ Luna, \otimes Browning; σ_+ : \bullet Presentes resultados y \circ Williams.

En ambos casos, las incertidumbres consideradas en las mediciones son, tanto de origen estadístico, debido al conteo de la señal acumulada, como al proceso de normalización, y se estiman alrededor del 10 %, así también debe tenerse en cuenta un 10 % adicional, heredado de las medidas de la presión y la corriente.

En la siguiente gráfica (Fig. 5.7), se comparan los resultados de la interacción $H^+ + N_2$, con algunas de las mediciones previamente reportadas [3,6,21,58,90,95]. Se observa una

excelente concordancia con la mayoría de los resultados, sobre todo con los de Gordeev y Panov [90], McNeal y Clark [6], y Ormond y Michel [95], aunque es clara una diferencia de más del 30 % con respecto a los presentados por Rudd y colaboradores [3], y por Gilbody y Hasted [21].

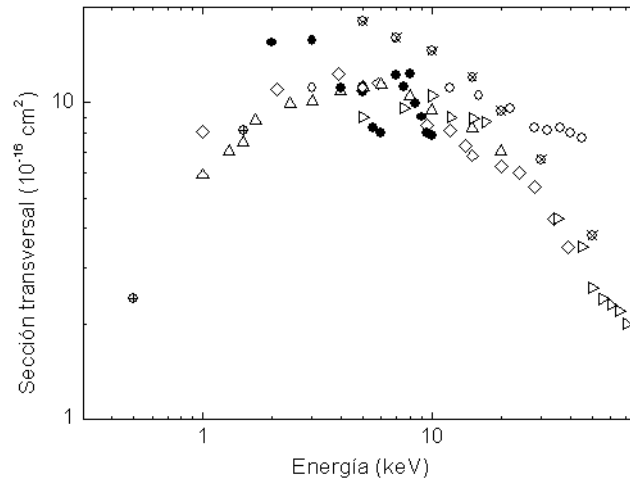


Figura 5.7. Sección transversal total σ_+ , en colisiones entre H^+ y N_2 . ● Presentes resultados, ○ Gilbody, ◇ Gordeev, △ McNeal, ▷ Ormond, ⊗ Rudd y ⊕ Gao.

Ocurre algo similar para la interacción $H^+ + O_2$ [3,62,90,94]. Se observa un acuerdo en el orden de magnitud con respecto a las mediciones previas, sin embargo, se visualiza una estructura alrededor de los cinco keV, que no aparece en los anteriores trabajos.

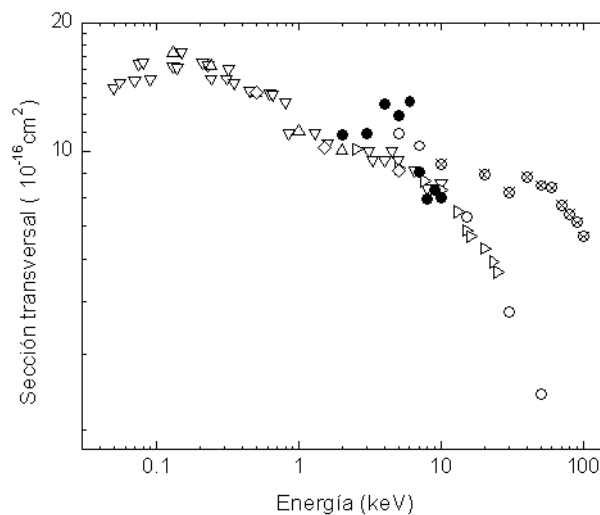


Figura 5.8. Sección transversal total σ_+ , en colisiones entre H^+ y O_2 . ● Presentes resultados, ▽ Stebbings, △ Rudd, ▷ Williams, ○ Van Zyl, ◇ Lindsay y ⊗ Luna.

La tendencia mostrada por los presentes resultados de σ_+ es similar a la de las mediciones anteriores. Aunque, entre cuatro y seis keV se muestra una diferencia del 25 % con respecto a los resultados de Stebbings y colaboradores [92], y los de Luna y compañía [94], sin embargo, con respecto a estos últimos, se muestra un excelente acuerdo para energías cercanas a los diez keV, no obstante que exista una divergencia con referencia a los de Rudd y colaboradores [3], Williams y compañía [93] y Van Zyl y su grupo de trabajo [91], para energías mayores.

Con respecto a la estructura observada entre los cuatro y los seis keV, Gao y colaboradores [58] aprecian semejanzas en sus mediciones angulares para 0,5 y 1,5 keV, en colisiones $H^+ + N_2$ y $H^+ + O_2$. Además, Cabrera y colaboradores [96] mostraron la presencia de estructura oscilatoria para pequeños ángulos de dispersión, así como para interacciones de largo alcance (bajas energías de colisión), en las cuales, las resonancias oscilatorias son de origen cuántico. Ellos indican, que para este intervalo energético, los efectos multiconfiguracionales en la estructura electrónica del O_2 es importante, en contra parte a lo que ocurre para altas energías, en donde las resonancias son menos pronunciadas debido a que los efectos cuánticos de interferencia son pequeños. Similarmente, Gao y colaboradores [58], atribuyen esas estructuras a las transiciones entre el estado inicial y final del sistema y asumen que esto ocurre cuando los reactantes se aproximan y se alejan entre ellos. En adición, algunos modelos asumen que tales transiciones ocurren alrededor de una separación internuclear bien localizada, y afirman que las estructuras en la sección total pueden aumentar debido a efectos clásicos o cuánticos resultado de las partes atractivas o repulsivas en las curvas de potencial [96]. Finalmente, Gao y colaboradores [58] agregan, que los puntos de oscilación se pronuncian considerablemente para pequeños ángulos de dispersión, donde los canales cuasiresonantes son dominantes y que esas estructuras son menos aparentes para mayores energías de interacción.

Los presentes resultados, sugieren que las mediciones de las secciones transversales, $\sigma(X^+)$, podrían ser el resultado de resonancias bien definidas que no se observan cuando las mediciones se realizan a partir del análisis de las partículas neutras, similares a las mediciones previas, en las cuales, no son resueltas las estructuras que aquí exhibidas. En este sentido, las resonancias pueden aumentar debido a la competencia entre los diferentes canales de disociación que generan los distintos fragmentos, y se manifiestan en las secciones transversales, incluso aunque no se distingan entre los procesos que originan un ion determinado. A partir de lo anterior, se concluye la relevancia de las secciones asociadas a la formación de los fragmentos del blanco $\sigma(X^+)$, para lograr apreciar la aparición de las diferentes estructuras, que no es posible visualizar cuando la medición se realizan por

el conteo de las partículas neutras. Claro está, que esta observación debería ser verificada, adquiriendo mediciones complementarias en la región por debajo de los dos keV.

5.3. Protones sobre CH_4

El estudio de la interacción $H^+ + CH_4$ es relevante, entre otras cosas, para el planteamiento y elaboración de modelos atmosféricos; particularmente, en investigaciones relacionadas con Titán, en donde la incidencia de protones, electrones y rayos cósmicos reaccionan con el CH_4 ahí presente, permitiendo la formación de diferentes subespecies [85,86]. Estas interacciones, provocan la formación de partículas ionizadas y neutras, causando transformaciones en la propia atmósfera, las cuales requieren para su interpretación, de la medición de las distintas secciones transversales asociadas a los principales procesos intervinientes: ionización, captura electrónica y disociación [97].

Desde el punto de vista experimental, diferentes grupos han realizado mediciones de las secciones transversales en interacciones de protones incidentes sobre CH_4 a bajas energías. Kusakabe y colaboradores en la zona de 0,2 a 4 keV [4], McNeal y Clark entre 1-25 keV [6], Eliot de 1 a 20 keV [14], Berkner y colaboradores, en el intervalo de energías de entre 0,15 y 35 keV [39], Lindsay y compañía para la región de 0,5 a 5 keV [98] y finalmente Koopman en 0,1-1,4 keV [46].

En el caso de energías mayores, Rudd y compañía miden la sección transversal total para 5-4000 keV [3], al igual que Toburen y colaboradores entre 100-2500 keV [55] y Collins y Kebarle entre 40-100 keV [99]. Estos últimos, ajustan sus resultados al modelo semiempírico propuesto por Gao y compañía [100], en el que se discute la dinámica de la interacción $H^+ + CH_4$ a 30 eV bajo la perspectiva de la teoría de densidad funcional dependiente del tiempo, acoplada con una aproximación de dinámica molecular.

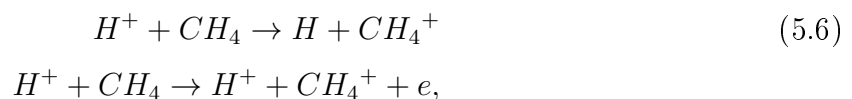
En otra investigación, Browning y Gilbody [62], reportan las secciones transversales asociadas a la ionización y a la formación de fragmentos de CH_4 , en interacciones con protones a energías de entre 5-50 keV, y ajustan sus resultados con las medidas realizadas previamente por Carré a 30 keV [101]. Similarmente, Malhi [102] investiga la formación de iones derivados de CH_n , $n = 1 - 4$ a altas energías, 1-11 MeV. Aunado a ello, Ben-Itzhak [103] investiga la interacción $H^+ + CH_4$ referente a la formación de iones, utilizando la técnica de tiempo de vuelo en triple coincidencia.

Solamente dos trabajos han sido enfocadas a la medición de las secciones transversales

disociativas para los fragmentos $CH_n, n = 1 - 4, C^+$ y H^+ . El primero de ellos, llevado a cabo por Luna y colaboradores [37] en el intervalo de 0,5-3,5 MeV, mientras que el segundo, realizado por Knudsen y compañía [60] entre 50 keV y 6 MeV. Sin embargo, a excepción de Browning y Gilbody [62], quienes realizan una investigación entre 5-50 keV, no existen estudios previos de las mediciones de las secciones transversales asociadas a la fragmentación del blanco, en interacciones $H^+ + CH_4$ para energías de entre dos y diez keV, y en ese sentido, las actuales mediciones resultan ser las primeras con tales características. Aunque es importante destacar que en la interacción $e + CH_4$, que ha sido previamente investigada por Furuya y colaboradores [104] para energías de 60 eV, se cuenta con un dispositivo experimental semejante al presente, en el sentido en el cual se utiliza la técnica de tiempo de vuelo.

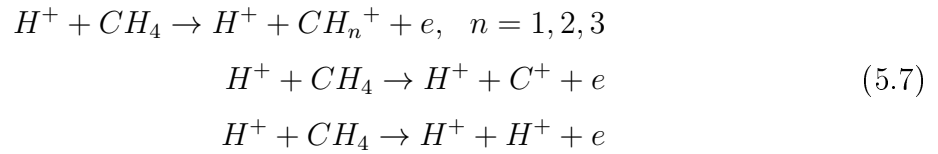
Desde el punto de vista teórico, la interacción $H^+ + CH_4$ se ha llevado a cabo para altas energías. Gulyás y colaboradores [105], aplican al sistema el método de distorsión de onda con la aproximación eikonal, extendida al caso en que existen centros múltiples de colisión, obteniendo resultados en acuerdo con aquellos reportados por Luna y colaboradores [97], Knudsen y compañía [60], así como por Ben-Itzhak y colaboradores [103]. A su vez, Jacquemin y colaboradores [106] investigan la dinámica de estas colisiones para una energía de 30 eV mediante la aproximación nuclear electrónica. Ellos describen al núcleo con mecanismos clásicos, mientras que los electrones son considerados desde un enfoque cuántico. Empleando seis orientaciones básicas, predicen los posibles procesos de reacción y evalúan diferentes secciones diferenciales obteniendo resultados semejantes a los de Gao y colaboradores [100]. Finalmente, Kimura y colaboradores [107] calculan las secciones diferenciales para una energía de dos keV y sus resultados nuevamente coinciden con los de Gao y colaboradores [100].

Al igual que en el caso del CO_2 , para el CH_4 se distinguen esencialmente dos tipos de procesos, los *no-disociativos*; captura electrónica simple e ionización, ambos responsables de la formación del ion CH_4^+ ,

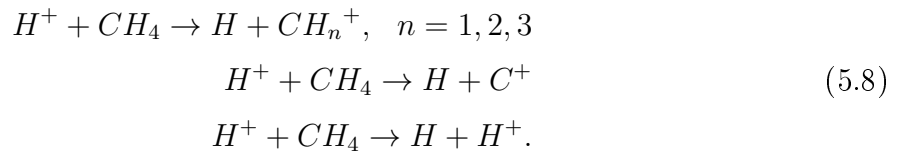


además de los *disociativos*, entre los que se encuentran aquellos en los que interviene la

ionización del blanco,



así como en los que ocurre la captura de un electrón por parte del haz,



Nuevamente, las características actuales del dispositivo experimental, no permiten la distinción entre el origen de cada uno de los iones, por lo cual se reportan solamente las secciones asociadas a la formación global de cada uno de ellos. En la siguiente gráfica (Fig. 5.9) se muestra un espectro típico de tiempo de vuelo del CH_4 , en el cual se pueden apreciar con claridad los diferentes fragmentos producidos.

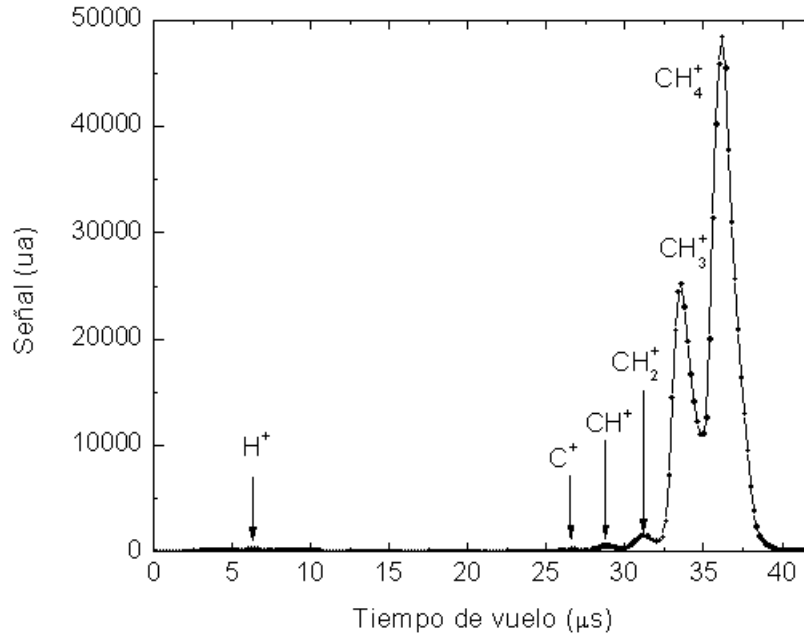


Figura 5.9. Espectro de tiempo de vuelo, $H^+ + CH_4$ a cinco keV.

En analogía con las pruebas anteriores (CO_2 , N_2 y O_2), las áreas debajo de la curva de cada uno de los picos divididas por unidad de corriente y por unidad de presión, están

relacionadas de forma directa con las secciones transversales. Se observa que el canal más favorecido corresponde al asociado a los procesos no disociativos, es decir, a la formación del ion CH_4^+ , aunque en todo el intervalo de energías se aprecia la aparición de los fragmentos CH_3^+ , CH_2^+ , CH^+ , C^+ y H^+ . Cabe señalar que los iones, CH_3^+ , CH_2^+ y CH^+ ya habían sido previamente observados en experimentos en coincidencia entre fotoiones y fotoelectrones [104,108].

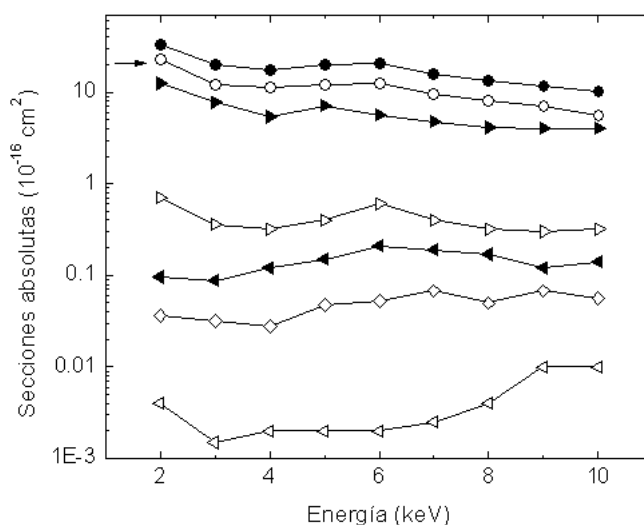


Figura 5.10. Secciones absolutas en colisiones entre H^+ y CH_4 . \bullet σ_+ , \circ $\sigma(CH_4^+)$, \blacktriangleright $\sigma(CH_3^+)$, \triangleright $\sigma(CH_2^+)$, \blacktriangleleft $\sigma(CH^+)$, \diamond $\sigma(C^+)$, \triangleleft $\sigma(H^+)$.

Las secciones transversales relativas, fueron normalizadas utilizando las mediciones previas obtenidas por Browning y Gilbody [62] para cinco keV, similarmente a como se hizo en el caso del N_2 y el O_2 .

Además de las incertidumbres estadísticas asociadas al análisis de los espectros, 15% para dos y tres keV, y 10% para el resto de las energías, se deben tomar en cuenta ciertas imprecisiones de origen sistemático. Entre ellas una incerteza del 5% asociada con la medición de la presión y otro 5% referente a la intensidad de la haz.

En la siguiente gráfica, (Fig. 5.11), se muestran las secciones transversales relativas a la formación del ion CH_4^+ , es decir, las fracciones $\sigma(X^+)/\sigma(CH_4^+)$. Se observa que la producción de los iones CH_3^+ y CH_2^+ permanece casi constante, presentando un pequeño mínimo cercano a los cuatro keV, mientras que los iones CH^+ , C^+ y H^+ incrementan en todo el intervalo energético entre dos y diez keV.

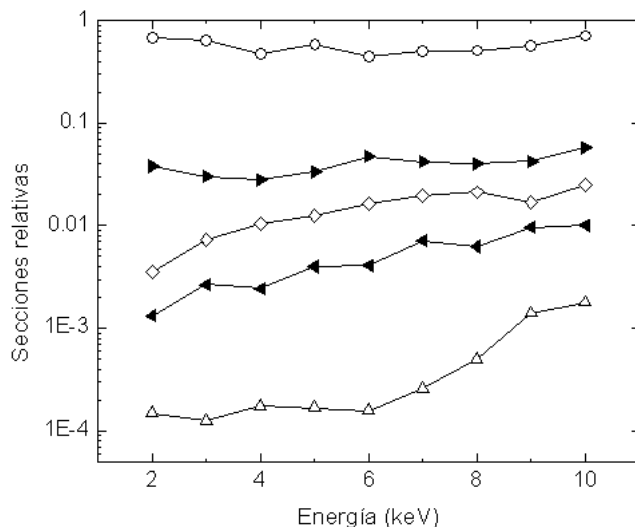


Figura 5.11. Secciones transversales relativas a la formación del ion CH_4^+ , $\sigma(X^+)/\sigma(CH_4^+)$: ○ CH_3^+ , ► CH_2^+ , ◇ CH^+ , ◄ C^+ , △ H^+ .

De acuerdo a las mediciones obtenidas por Luna y colaboradores [37], la razón entre la formación de H^+ y CH_4^+ , permanece constante en todo el intervalo de energías de 300-3500 keV, $\sigma(H^+)/\sigma(CH_4^+) \approx 0,05$, resultado menor en un factor de dos con respecto al obtenido por Ben-Itzhak [103] y colaboradores para 1 MeV. El decaimiento de esta fracción continúa hasta más abajo de los diez keV, tomando valores aún más pequeños, como es posible visualizar según los resultados de la presente investigación (Fig. 5.11).

A diferencia de lo que ocurre en estudios de incidencia con haces de fotones, en las presentes mediciones sí se logra observar algún tipo de estructura entre los cuatro y los seis keV. Sin embargo, no se cuenta con una interpretación realmente satisfactoria de esta característica, justamente porque no existen suficientes cálculos teóricos que permitan establecer las rutas de decaimiento de los diferentes iones involucrados en la interacción $H^+ + CH_4$. Lo mismo ocurre en cuanto a la compatibilidad de los mismos, ya que las energías de interacción consideradas, son lejanas en referencia a los datos experimentales previos [37,60], lo cual imposibilita la comparación entre los datos adquiridos con los ya reportados. No obstante, Luna y colaboradores [37] proponen un modelo que se basa en el análisis de tres diferentes canales de reacción, en los cuales pueden ocurrir los procesos disociativos, tanto de ionización como de doble ionización, obteniendo con ello los valores de $\sigma(X^+)/\sigma(CH_4^+)$; según el modelo $\sigma(CH_3^+)/\sigma(CH_4^+) = 0,75$ manteniéndose prácticamente constante en el intervalo energético de entre 0,5-3,5 MeV, muy cercano al encontrado en las presentes mediciones, que para el caso de diez keV resultó ser de 0,7. Por otra parte, Browning y Gilbody [62] coinciden con la anterior aproximación en cuanto a que $\sigma(CH_3^+)/\sigma(CH_4^+) = 0,75$ en el intervalo de 5-45 keV. Sin embargo, en el caso presente, el mismo valor decae de 0,7

a 0,5 entre diez y dos keV (equivalentes a cinco y un eV para el caso electrónico), decaimiento que coincide con el mismo modelo aplicado al caso de ionización por electrones, en el cual la razón $\sigma(CH_3^+)/\sigma(CH_4^+)$ decrece rápidamente desde un 80 % hasta un 50 % conforme la energía de los electrones decae entre 50 eV hasta 20 eV [37]. Cuando el modelo se evalúa para las fracciones $\sigma(CH_2^+)/\sigma(CH_4^+)$, $\sigma(CH^+)/\sigma(CH_4^+)$, $\sigma(C^+)/\sigma(CH_4^+)$ y $\sigma(H^+)/\sigma(CH_4^+)$, se observa una tendencia creciente entre 20 y 100 eV, tal y como se puede visualizar que ocurre en la presente investigación (Fig. 5.11). En resumen, aunque no es posible realizar una comparación directa, debido a la diferencia entre las energías en consideración, el modelo es consistente con la tendencia de los resultados aquí presentados.

Por otra parte, sí es posible comparar la sección transversal total asociada a la formación de los iones positivos en la interacción $H^+ + CH_4$ de manera directa con algunas mediciones previas, como se muestra a continuación (Fig. 5.12),

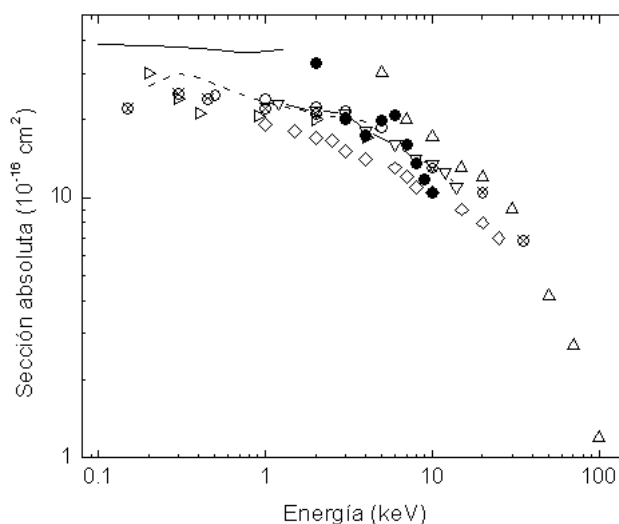


Figura 5.12. Sección absoluta σ_+ , en colisiones entre H^+ y CH_4 . • Presentes resultados, \triangle Rudd, \diamond McNeal, — Koopman, \circ Lindsay, ∇ Luna, \triangleright Kusakabe, - - Kusakabe y \otimes Berkner.

Se observa un muy buen acuerdo con los datos obtenidos por Kusakabe y colaboradores [4], así como con Lindsay y compañía [97]. Sin embargo, las mediciones resultan ligeramente mayores a las de McNeal [28] y un poco menores a las reportados por Rudd y colaboradores [3]. Es notoria además, la presencia de una pendiente muy pronunciada que no ha sido observada por ninguno de los grupos anteriores. Esta pendiente puede ser explicada a partir de algunas resonancias oscilatorias que fueron observadas por Gao y colaboradores [58] para energías menores a tres keV. Según ellos, la resonancias pueden ser el resultado de las transiciones entre los estados iniciales y finales entre los reactantes, debido a la interferencia

entre sus diferentes caminos de reacción y sus correspondientes amplitudes de dispersión. Es posible, además, que las resonancias aumenten debido a efectos asociados con la colisión, tales como difracción y dispersión. Interpretaciones similares fueron dadas por Kimura y colaboradores [106] en sus mediciones de captura electrónica y dispersión elástica directa en $H^+ + CH_4$ empleando representaciones moleculares. Otras resonancias obtenidas en menor grado, fueron observadas por Lindsay y colaboradores [97] entre 0,5-2 keV. Para energías mayores a cinco keV, las secciones transversales no presentan estructura debido a la competencia entre sus diferentes canales asociados.

Finalmente, se puede argumentar que las mediciones previas a esta investigación son básicamente derivadas de los conteos de partículas neutras resultantes de todos los procesos involucrados, y por lo tanto, es posible que cualquier estructura quede encubierta debida a la competencia de los diferentes canales de disociación. Contrariamente con lo que ocurre con los presentes resultados, en los cuales las secciones transversales asociadas con la formación de los fragmentos individuales, permiten aportar información adicional acerca de la presencia de estructuras, aún a pesar de que no sea posible distinguir entre el origen de las diferentes especies generadas.

Capítulo 6

Conclusiones

Se encontraron los valores óptimos de operación de los principales elementos de un acelerador lineal de bajas energías. Esta caracterización sirvió como base para poder efectuar colisiones entre protones y gases atmosféricos en el intervalo de energías de dos a diez keV.

Posteriormente, ya con las condiciones adecuadas, se midieron las secciones transversales asociadas a la formación de los diferentes fragmentos derivados del blanco, en colisiones de protones incidentes en cuatro gases atmosféricos, CO_2 , N_2 , O_2 y CH_4 . Las mediciones se realizaron dentro del régimen de colisión simple, utilizando la técnica de espectrometría de masas de tiempo de vuelo. En todos los casos, los procesos dominantes fueron los no disociativos, es decir, los procesos que conllevaron a la formación del ion molecular respectivo, por no menos de cinco veces para todos los gases.

En la interacción $H^+ + CO_2$ las mediciones se realizaron entre 2 y 9.5 keV. En todos los espectros de tiempo de vuelo, se identificó la formación de seis iones derivados: CO_2^+ , CO^+ , O_2^+ , O^+ , C^+ y CO_2^{++} .

La formación de los fragmentos CO^+ , O^+ y C^+ resultó prácticamente constante en todo el intervalo energético en consideración; contrariamente al ion CO_2^{++} , el cual muestra un incremento notable en función de la energía.

La suma de las diferentes secciones relativas fue normalizada de acuerdo a una medición previa. Lo anterior permitió obtener la sección transversal absoluta asociada a la formación de iones positivos y realizar con ello una comparación con los resultados ya existentes. El acuerdo resultó adecuado en todo el intervalo de energías.

Las secciones transversales asociadas a la formación de los diferentes presentó el siguiente

orden $\sigma(CO^+) > \sigma(O_2^+) > \sigma(O^+) > \sigma(C^+)$, en todo el intervalo energético de investigación.

Resultó de particular interés, la creación de una cantidad importante del ion O_2^+ , principalmente porque es aun más favorecido que el ion O^+ .

Las interacciones $H^+ + N_2$ y $H^+ + O_2$ se estudiaron en el intervalo de energías de dos a diez keV.

Para todas las energías se identificaron dos iones derivados de cada blanco; el ion molecular N_2^+ (O_2^+) y el ion atómico N^+ (O^+). Se cuantificó la producción relativa de cada uno de los iones y se obtuvo que las secciones transversales cumplían que $\sigma(N^+)/\sigma(N_2^+) \leq 0,1$ para el caso de N_2 , mientras que para el O_2 resultaron ser tales que $\sigma(O^+)/\sigma(O_2^+) \approx 0,2$.

Al comparar la producción total de iones positivos, los resultados obtenidos concordaron en muy buena medida con algunas mediciones previas, tanto en el valor numérico como en la tendencia de los resultados, mostrando una conexión suave con las anteriores.

Fue posible observar una estructura pronunciada cercana a los siete keV para el caso del N_2 y alrededor de los cinco keV para O_2 atribuida a los estados iniciales y finales del sistema, así como a los efectos tanto clásicos como cuánticos que envuelven las partes repulsivas y atractivas de las curvas de potencial de estas dos moléculas.

Finalmente, la interacción $H^+ + CH_4$ se abordó entre los dos y diez keV. De acuerdo a los espectros de tiempo de vuelo, los iones identificados fueron, CH_4^+ , CH_3^+ , CH_2^+ , CH^+ , C^+ y H^+ . La formación de ellos se dio justamente en orden creciente con la masa, es decir, $\sigma(CH_4^+) > \sigma(CH_3^+) > \sigma(CH_2^+) > \sigma(CH^+) > \sigma(C^+) > \sigma(H^+)$.

La formación de los iones CH_2^+ y CH_3^+ muestra un comportamiento decreciente hasta cuatro keV, energía a partir de la cual aumenta gradualmente, hasta alcanzar un máximo, para luego volver a decaer a lo largo del resto de las energías de interacción. Contrariamente, los iones CH^+ , C^+ y H^+ aparecen de forma más significativa conforme la energía de colisión aumenta.

La razón $\sigma(CH_3^+)/\sigma(CH_4^+)$ fue de 0,7, en excelente concordancia con mediciones experimentales previas que muestran que esta relación es independiente de la energía para energías mayores a los diez keV. Por otra parte, esa misma razón decrecía hasta 0,5 para dos keV, mostrando con ello que para energías más bajas $\sigma(CH_3^+)/\sigma(CH_4^+)$ sí depende de la energía de interacción.

Complementariamente, las distintas razones $\sigma(X^+)/\sigma(CH_4^+)$ para los demás fragmentos,

muestran una tendencia creciente en función de la energía, en acuerdo con uno de los modelos propuestos para la interacción $e + CH_4$.

La aparición de una aparente estructura alrededor de cuatro keV en la sección total, se explica en términos de la interferencia entre las secciones asociadas a los diferentes fragmentos, confirmando algunas de las inferencias realizadas por trabajos previos, tanto teóricos como experimentales.

En este último caso, nuevamente la comparación de los resultados de la medición de la sección transversal asociada a la formación de iones positivos, muestra un buen acuerdo con los resultados previamente obtenidos por otros grupos.

Bibliografía

- [1] Cisneros C., *Algunos Experimentos de Colisiones Atómicas y Moleculares en el Instituto de Física de la UNAM*, Rev. Méx. Fís. **31** 3, pp. 521-529, 1985.
- [2] Massey H. S., *Collisions Between Atoms and Molecules at Ordinary Temperatures*, University College, London, pp. 254-256, 1949.
- [3] Rudd M. E., DuBois R. D., Toburen L. H., Ratcliffe C. A. and Goffe T. V., *Cross Sections for Ionization of Gases by 5-4000-keV Protons and for Capture by 5-150-keV Protons*, Phys. Rev. A **28** 6, pp. 3244-3257, 1983.
- [4] Kusakabe T., Asahina K., Gu J. P., Hirsh G., Buenker R. J., Kimura M., Tawara H. and Nakai Y., *Charge-transfer Processes in Collisions of H^+ ions with H_2 , D_2 , CO , and CO_2 Molecules in the Energy Range 0.2-4.0 keV*, Phys. Rev. A **62** 062714, pp. 1-7, 2000.
- [5] Moore J. H., *Electronic Excitation of N_2 and Dissociative Excitation of O_2 Proton Impact*, J. Geophys. Res. Space Phys. **77** 28, pp. 5567-5572, 1972.
- [6] McNeal R. J. and Clark D. C., *Ionization and Excitation of Nitrogen by Protons and Hydrogen Atoms in the Energy Range 1-25 keV*, J. Geophys. Res. Space Phys. **74** 21, pp. 5065-5072, 1969.
- [7] McNeal R. J. and Birely J. H., *Laboratory Studies of Collisions of Energetic H^+ and Hydrogen with Atmospheric Constituents*, Rev. Geophys. Space Phys. **11** 3, pp. 633-692, 1973.
- [8] Marvin L. G. and Kennet M. W., *Collision Theory*, John Wiley and Sons, Chicago USA, 1967.
- [9] Bransden B. H., *The Teory of Charge Exchange*, Rep. Prog. Phys. **35**, pp. 949-1005, 1972.

- [10] De la Peña L., *Introducción a la Mecánica Cuántica, Vol. II*, Facultad de Ciencias UNAM, México, 1977.
- [11] Deepak M., *Physics of Ion Impact Phenomena*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [12] Luna H., Michael M., Shah M.B., Johnson R. E., Latimer C.J. and McConkey J. W., *Dissociation of N_2 in Capture and Ionization Collisions with Fast H^+ and N^+ Ions and Modeling of Positive ion Formation in the Titan Atmosphere*, J. Geophys. Res., **108**, E4-5,033, pp. 14-23, 2003.
- [13] Hasted J. B. *Physics of Atomic Collisions*, second edition, Butterworth and Co. Ltd., 1972.
- [14] Eliot M., *Sections Efficaces de Echange de Charge σ_{10} et de Ionisation σ_{01} de Ions et de Atomes de Hydrogene, dans la Gamme de Energie de 1 a 20 keV, sur les Gaz N_2 , CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 et C_4H_{10}* , Le Journal de Physique, **38** pp. 21-27, 1977.
- [15] Coplan M. A. and Ogilvie K. W., *Charge Exchange for H^+ and H_2^+ in H_2O , CO and NH_3* , J. Chem. Phys. **52** 8, pp. 4154-4160, 1970.
- [16] Mamyrin B. A., *Time-of-flight Mass Spectrometry (Concepts, Achievements and Prospects)*, Int. J. Mass Spect., **206**, pp. 251-266, 2001.
- [17] Diebeler H. V. and Reese M. R., *Mass Spectrometry*, National Bureau of Standards, Washington, pp. 604, 1957.
- [18] Belu A. M., Graham D. J. and Castner D. G., *Time-of-flight Secondary Ion Mass Spectrometry: Techniques and Applications for the Characterization of Biomaterial Surfaces*, Biomaterials **24**, pp. 3635-3653, 2003.
- [19] Allison S. K. and Warshaw S. D., *Passage of Heavy Particles through Matter*, Rev. Mod. Phys. **25** 4, pp. 779-817, 1953.
- [20] Massey H. S. and Gilbody H. B., *Electronic and Ionic Impact Phenomena Volume IV, Recombination and Fast Collisions of Heavy Particles*, second edition, Oxford University Press, 1974.
- [21] Gilbody H. B. and Hasted J. B., *Anomalies in the Adiabatic Interpretation of Charge-transfer Collisions*, Proc. Phys. Soc. A., **238** 1214 pp. 334-343, 1956.
- [22] Smith F. T., Marchi R. P., and Dedrick K. G., *Impact Expansions in Classical and Semiclassical Scattering*, Phys. Rev. **150** 1, pp. 79-91, 1966.

- [23] Bates D. R. and McCarroll R., *Electron Capture in Slow Collisions* Proc. Phys. Soc. A., **245** 1,241 pp. 175-183, 1958.
- [24] Welsh L. M., Berkner K. H, Kaplan S. N. and Pyle R. V., *Cross Sections for Electron Capture by Fast Protons in H_2 , He, N_2 and Ar*, Phys. Rev. **158** 1, pp. 85-92, 1967.
- [25] McNab I. R., *The Spectroscopy of H_3^+* , Adv. Chem. Phys. **89**, pp. 1-87, 1995.
- [26] Massey H. S. and Smith M. A., *The Passage of Positive Ions Through Gases* Proc. Phys. Soc. A., **142** 846 pp. 142-172, 1933.
- [27] Rinaldi G., Mura A., Orsini S. and Mangano V., *Report to Cross Sections Related to Plasma-planetary Atmosphere Interaction Processes*, Planetary and Space Science **59**, pp. 801-809, 2011.
- [28] McNeal R. J., *Production of Positive Ions and Electrons Ionization and Excitation of Nitrogen in Collisions of 1-25 keV Protons and Hydrogen Atoms with CO , CO_2 , CH_4 and NH_3* , J. Chem. Phys. **53** 11, pp. 4308-4313, 1970.
- [29] Lindsay B. G., Yu W. S. and Stebbings R. F., *Cross Sections for Charge-changing Processes Involving Kilo-electron-volt H and H^+ with CO and CO_2* , Phys. Rev. A **71**, 032705, pp. 1-9, 2005.
- [30] Stier P. M. and Barnett C. F., *Charge Exchange Cross Sections of Hydrogen Ions in Gases*, Phys. Rev. **103** 4, pp. 896-907, 1956.
- [31] Haugh J. M. and Birely J. H., *Formation of Electronically Excited CO_2^+ in Collisions of H^+ , H , He^+ and Ne^+ with CO_2* , J. Chem. Phys. **60** 1, pp. 264-269, 1974.
- [32] Ellenbroek T., Gierz U., Noll M. and Toennies P., *Time-of-flight Measurements of High-overtone Mode-selective Vibrational Excitation of CH_4 , CF_6 , and SF_6 in Collisions with H^+ , D^+ and Li^+ Ions at Energies between 4 and 10 eV*, J. Phys. Chem., **86** pp. 1153-1163, 1982.
- [33] Hasted B. and Lee A. R., *The Near-adiabatic Criterion in Charge Transfer Collisions*, Proc. Phys. Soc. **79**, pp. 702-709, 1962.
- [34] García G., Mejía-Ospino E., Guerrero A., Álvarez I. and Cisneros C., *Absolute Total Cross Sections Measurements of the Collision-induced Dissociation of CO^+* , Int. J. Mass Spect., **261**, pp. 53-56, 2007.

- [35] Folkerts H. O., Blik F. W., De Jong M. C., Hoekstra R. and Morgenstern R., *Dissociation of H_2 and CO by Slow Multiply Charged Ions*, Nucl. Inst. Met. Phys. Res. B., **98**, pp. 389-391, 1995.
- [36] McNeal R. J., Clark D. C. and Klingberg R. A., *Cross Sections for Positive-ion and Electron Production in Collisions of 1-25 keV Hydrogen Atoms with Atomic and Molecular Gases*, Phys. Rev. A **2** 1, pp. 131-138, 1970.
- [37] Luna H., Cavalcanti E. G., Nickles J., Sigaud G. M., and Montenegro E. C., *CH_4 Ionization and Dissociation by Proton and Electron Impact*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **36**, pp. 4717-4729, 2003.
- [38] Koopman D. W., *Measurement of Charge-exchange Cross Sections for H^+ , H_2^+ and He^+ Ions*, Phys. Rev. **154** 1, pp. 79-85, 1967.
- [39] Berkner K. H., Pyle R. V. and Stearns J. W., *Cross-sections for Electron Capture by 0.3- to 70- keV Deuterons in H_2 , H_2O , CO , CH_4 and C_8F_{16} Gases*, J. Nucl. Fus. **10**, pp. 145-149, 1970.
- [40] Morgan T. J. and Eriksen F. J., *Single-and Double-Electron Capture by 1 – 100 – keV Protons in Collisions with Magnesium and Barium Atoms* Phys. Rev. A, **19** 4, pp. 1448-1455, 1979.
- [41] McCullough R. W., Goffe T. V., Shah M. B., Lennon M. and Gilbody H. B., *Electron Capture by He^{2+} and He^+ Ions in Lithium Vapour*, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **15**, pp. 111-117, 1982.
- [42] Sidis V., *Theory of Dissociative Charge Exchange in Ion-molecule Collisions*, J. Phys. Chem. **93** 25, pp. 8,128-8,138, 1989.
- [43] Schafer K., Back W. Y., Forster K., Gassen D. and Neuwirth W., *Analysis of Initial Energies of Fragments Produced by 65 – keV Proton-molecule Collisions Using a Time-of-flight Mass Spectrometer*, Z. Phys. D. **21**, pp. 137-143, 1991.
- [44] Grosswendt B. and Willems G., *The Backscattering of low Energy Protons in Gases of Importance for Ionization Measurements*, Radiation Protection Dosimetry, **61** 1-3, pp. 245-252, 1995.
- [45] De Andrés J., Sabidó M., Lucas J. M., Sogas J. and Aguilar A., *Electron Capture Processes in Collisions between $Mg(6^2S_{1/2})$ Atoms and $Na^+(1S_0)$ Ions in the 0,10 – 4,00keV Energy Range*, Chem. Phys. Lett., **382**, pp. 106-111, 2003.

- [46] Koopman D. W., *Charge Exchange in NH₃ and CH₄*, J. Chem. Phys. Lett. **49**, pp. 5203-5205, 1968.
- [47] López-Patiño J., *Detección de los Fragmentos del Blanco en la Colisión de Protones a Bajas Energías en Aire*, Tesis de Maestría, México D.F., 2011.
- [48] Delcroix J. L., *Introducción a la teoría de los gases ionizados*, Ed. Alambra S.A Primera edición española, Madrid, 1968.
- [49] Fuentes B. E., Yousif F. B. and López-Patiño J. *Construction and Test of a 10 kV Ion Accelerator in the Faculty of Science of UNAM* Phys. Proc., **66**, pp. 617-621, 2015.
- [50] López-Suárez A., Valencia C. E., López-Patiño J., Vargas M. C. and Fuentes B. E. *Improvement of Titanium Hydrogenation by Low Energy Ion Irradiation*, Int. J. Hydrogen Energy **40**, pp. 4194-4199, 2015.
- [51] Abdelhaim A., *Síntesis Optimizada de Lentes Electrostáticas para el Enfoque de Partículas Cargadas de KeV y MeV*, Tesis Doctoral, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, pp. 39, 45, 66 y 67, 1999.
- [52] Gutiérrez L., De Urquijo J., Cisneros C. y Álvarez I., *Diseño, Construcción y Operación de un Acelerador de Iones a Energías de KeV*, Revista Mexicana de Física **34** 2, pp. 237-248, 1988.
- [53] López-Patiño J., Fuentes B. E., Yousif F. B. and Martínez H., *Relative Differential Cross Section Measurements in H⁺-CO₂ Low Energy Collisions*, Int. J. Phys. and Astronomy **3** 2, pp. 23-35, 2015.
- [54] Van Zyl B., Neumann H., Le T. Q. and Amme R. C., *H + N₂ and H + O₂ Collisions: Experimental Charge-production Cross Sections and Differential Scattering Calculations*, Phys. Rev. A **18** 2, pp. 506-516, 1978.
- [55] Toburen I. H., Nakai M. Y. and Langley R. A., *Measurements of High-energy Charge-transfer Cross Sections for Incident Protons and Atomic Hydrogen in Various Gases*, Phys. Rev. **171** 1, pp. 114-122, 1968.
- [56] Basu B., Jasperse J. R., Robinson R. M., Vondrak R. R. and Evans D. S., *Linear Transport theory of Auroral Proton Precipitation: A Comparison with Observations*, J. Geophys. Res. **92** A-6, pp. 5920-5932, 1987.
- [57] Rees M. H., *Physics and Chemistry of the Upper Atmosphere*, Cambridge University Press, 1989.

- [58] Gao R. S., Johnson L. K., Hakes C. L., Smith K. A. and Stebbings R. F., *Collisions of Kilo-electronvolt H^+ and He^+ with Molecules at Small Angles: Absolute Differential Cross Sections for Charge Transfer*, Phys. Rev. A **41** 11, pp. 5929-5933, 1990.
- [59] Moretto C. P., Bordenave M. D. and Bordenave M. A., *Fragmentation of CO_2 into $C^+ + O^+ + O$ in Collisions with Protons*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, pp. 539-546, 2000.
- [60] Knudsen H., Mikkelsen U., Paludan K., Kirsebom K., Moller S. P., Uggewrholm E., Slevin J., Charlton M. and Morenzoni E., *Non-dissociative and Dissociative Ionization of N_2 , CO , CO_2 and CH_4 by impact of 50-6000 keV Protons and Antiprotons*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **28**, pp. 3569-3592, 1995.
- [61] Rodrigo R., García-Alvarez E., López-González M. J. and López Moreno J. J., *A Nonssteady One-dimensional Theoretical Model of Mars Neutral Atmospheric Composition between 30 and 200 km*, J. Geophys. Res., **95**, pp. 14 795-14 810, 1990.
- [62] Browning R. and Gilbody H. B., *Fragmentation of Molecular Gases by 5-45 keV Protons*, J. Phys. B, **2** 1, pp. 1149-1156, 1968.
- [63] Nair H., Allen M., Anbar A. D., Yung Y. L. and Clancy R. T., *A Photochemical Model of the Martian Atmosphere*, ICARUS, **111**, pp. 124-150, 1994.
- [64] Straub H. C., Lindsay B. G., Smith K. A. and Stebbings R. F., *Absolute Partial Cross Sections for Electron-impact Ionization of CO_2 from Threshold to 1000 eV*, J. Chem. Phys. **105**, pp. 4015-4022 1996.
- [65] Green, M. A., Teubner P. J., Campbell L., Brunger M. J., Hoshino M., Ishikawa T., Kitajima M., Tanaka H., Kimura M. and Buenker R. J., *Absolute Differential Cross Sections for Electron Impact Excitation of the 10.8-11.5 eV Energy-loss States of CO_2* , J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, pp. 567-587, 2002.
- [66] Rapp D. and Englander-Golden P., *Total Cross Sections for Ionization and Attachment in Gases by Electron Impact. 1. Positive Ionization*, J. Chem. Phys. **43** 5, pp. 1464-1479, 1965.
- [67] Reyes P. G., Mendez E. F., Osorio-Gonzalez D., Castillo F. and Martínez H., *Optical Emission Spectroscopy of CO_2 Glow Discharge at Low Pressure*, Phys. Stat. Sol. C **5** 4, pp. 907-910, 2008.

- [68] Freund R. S., Wetzel R. C. and Shul R. J., *Measurements of Electron-impact-ionization Cross Sections of N_2 , CO , CO_2 , CS , S_2 , CS_2 and Metastable N_2* , Phys. Rev. A **41** 11, pp. 5861-5868, 1990.
- [69] Orient O. J. and Srivastava S. K., *Electron Impact Ionization of H_2O , CO , CO_2 and CH_4* , J. Phys. B: At. Mol. Phys. **20**, pp. 3923-3936, 1987.
- [70] Mark T. D. and Hille E., *Cross Sections for Single and Double Ionization of Carbon Dioxide by Electron Impact from Threshold up to 180 eV*, J. Chem. Phys. **69** 6, pp. 2942-2947, 1978.
- [71] Crowe A. and McConkey J. W., *Dissociative Ionization by Electron Impact III. O^+ , CO^+ and C^+ from CO_2* , J. Phys. B: At. Mol. Phys. **7** 3, pp. 349-362, 1974.
- [72] Adamczyk B., Boerboom A. J. H. and Lukasiewicz M., *Partial Ionization Cross Sections of Carbon Dioxide by Electrons (25-600 eV)*, Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. **9**, pp. 407-412, 1972.
- [73] Krishnakumar E., *A Pulsed Crossed Beam Apparatus for Measurement of Electron Impact Partial Ionization Cross-sections: Results on $CO_2 + e^- \rightarrow CO_2^+ + 2e^-$* , Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc. **97** 3, pp. 283-294, 1990.
- [74] Greenwood J. B., Chutjian A. and Smith J., *Measurements of Absolute, Single Charge-exchange Cross Sections of H^+ , He^+ and He^{2+} with H_2O and CO_2* , Astrophys. J. **529**, pp. 605-609, 2000.
- [75] Johnson R. E., Liu M., Kass D. M. and Yung Y. L., *The Loss of Atmosphere from Mars*, Science **274** 5294, pp. 1932-1933, 1996.
- [76] Johnson R. E., Quickenden T. I., Cooper P. D., McKinley A. J. and Freeman C. G., *The Production of Oxidants in Europa's Formation*, Astrobiology **3**, pp. 823-850, 2003.
- [77] Johnson R. E., Carlson R. W., Cooper P. D., Paranics C., Moore M. H. and Wong M. C., *Radiation Effect on the Surfaces of Galilean Satellites in Jupiter: The Planet, Satellites and Magnetosphere*, Cambridge Univ. Press, pp. 485-512, London 2004.
- [78] Saur J., Strobel D. F. and Neubauer F. M., *Interaction of the Jovian Magnetosphere with Europa: Constraints on the Neutral Atmosphere*, J. Geophys. Res. **103** E9, pp. 19 947-19 962, 1998.
- [79] Schreier R. and Eviatar A., *Modeling the Europa Plasma Torus*, J. Geophys. Res. **98** A12, pp. 21 231-21 243, 1993.

- [80] McGrath M. A., Lellouch E., Strobel D. F., Feldman P. D. and Johnson R. E., *Radiation Effect on the Surfaces of Galilean Satellites in Jupiter: The Planet, Satellites and Magnetosphere*, Cambridge Univ. Press, pp. 457-483, Londres 2004.
- [81] Cooper J. F., Johnson R. E., Mauk B. H., Garret H. B. and Gehrels N., *Energetic Ion and Electron Irradiation of the Icy Galilean Satellites*, *Icarus* **149**, pp. 133-159, 2001.
- [82] Paranicas C., Mauk B. H., Ratliff J. M., Cohen C. and Johnson R. E., *The Ion Environment Near Europa and its Pole in Surface Energetics*, *Geophys. Res. Lett.* **29** 5, pp. 181-184, 2002.
- [83] Burger M. H. and Johnson R. E., *Europa's Neutral Cloud: Morphology and Comparisons to Io*, *Icarus* **171**, pp. 1557-1560, 2004.
- [84] Hunter W. J., Niemann H., Yelle R. V., Kasprzak W. T., Cravens T. E., Luhmann J. G., McNutt R. L., Ip W. H., Gell D., De la Haye V., Muller W. I., Magee B., Borggren N., Ledvina S., Fletcher G., Walter E., Miller R., Scherer S., Thorpe R., Xu J., Block B. and Arnett K., *Ion Neutral Mass Spectrometer Results from the First Flyby of Titan*, *Science* **308** 5724, pp. 982-996, 2005.
- [85] Cravens T. E., Robertson I. P., Ledvina S. A., Mitchell D., Krimigis S. M. and Waite J. H., *Energetic Ion Precipitation at Titan*, *Geophys. Res. Lett.* **35** L03103, pp. 1-4, 2008.
- [86] Michael M., Johnson R. E., Leblanc F., Liu M., Luhmann J. G. and Shematovich V. I., *Ejection of Nitrogen from Titan's Atmosphere by Magnetospheric Ions and Pick-up Ions*, *Icarus* **175**, pp. 263-267, 2005.
- [87] Nier A. O., *Mass Spectrometry in Planetary Research*, *Int. J. Mass Spect. Ion Proc.* **66** 1, pp.55-73, 1985.
- [88] Zipf E. C. and Erdman P. W., *Electron Impact Excitation of Atomic Oxygen: Revised Cross Sections*, *J. Geophys. Res.* **90** A11, pp. 11 087-11 090, 1985.
- [89] Koopman D. W., *Light-ion Charge Exchange in Atmospheric Gases*, *Phys. Rev* **166** 1, pp. 57-62, 1968.
- [90] Gordeev Y. S. and Panov M. N., *Sov. Phys. Tech. Phys.* **9** A11, pp. 656, 1964.
- [91] Van Zyl B. and Stephen T. M., *Electron Capture by Low-energy H^+ Incident on O and O_2* , McGill library, Bristol pp. 437, 1991.

- [92] Stebbings R. F., Smith A. C. and Ehrhardt H., *Charge Transfer between Oxygen Atoms and O^+ and H^+ Ions*, J. Geophys. Res. **69** 11, pp. 2349-2356, 1964.
- [93] Williams J. D., Geddes J. and Gilbody H. B., *Collisional Destruction of Fast H^2 , H_2^+ and H_3^+ in H^2* , J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, pp. 811-815, 1984.
- [94] Luna H., McGrath C., Shah M. B., Johnson R. E., Liu M., Latimer C. J. and Montenegro E. C., *Dissociative Charge Exchange and Ionization of O_2 by Fast H^+ and O^+ Ions: Energetic Ion Interactions in Europa's Oxygen Atmosphere and Neutral Torus*, Astrophys. J. **628**, pp. 1086-1096, 2005.
- [95] Ormrod J. H. and Michel W. I., *Charge Equilibrium Fractions and Charge-exchange Cross Sections for Fast Ions in Nitrogen and Argon*, Can. J. Phys. **49** 5, pp. 606-620, 1971.
- [96] Cabrera-Trujillo R., Ohrn Y., Deumens E., Sabin J. R. and Lindsay B. G., *Absolute Differential and Total Cross Sections for Direct and Charge-transfer Scattering of keV Protons by O_2* , Phys. Rev. A **70** 042705, pp. 1-9, 2004.
- [97] Lindsay B. G. and Stebbings R. F., *Charge Transfer Cross Sections for Energetic Neutral Atom Data Analysis*, J. Geophys. Res. **110** A12213, pp. 1-10, 2005.
- [98] Lindsay B. G., Yu W. S. and Stebbings R. F., *Electron Transfer in Collisions of keV Hydrogen Atoms and Ions with Methane*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **38**, pp. 1,977-1,986, 2005.
- [99] Collins J. G. and Kebarle P., *Ionization Cross Sections, Charge-transfer Cross Sections, and Ionic Fragmentation Patterns of Some Paraffins, Olefins, Acetylenes, Chloroalkanes, and Benzene with 40-100-keV Protons*, J. Chem. Phys. **46** 3, pp. 1082-1089, 1967.
- [100] Gao C. Z., Wang J., Wang F. and Zhang F. S., *Theoretical Study on Collision Dynamics of $H^+ + CH_4$ at Low Energies*, J. Chem. Phys. **140** 054308, pp. 1-12, 2014.
- [101] Carré M. and Dufay M., *Sur Léxitation du Méthane et de quelques Hydrocarbures Légers par Choc de Protones Accélérés*, Comptes Rendus **265** B4, pp. 259-262, 1967.
- [102] Malhi N. B., Ben-Itzhak I., Gray T. J., Legg J. C., Needham V., Carnes K. and McGuire H., *Fragmentation of CH_4 in Collisions with Fast Highly Charged Ions*, J. Chem. Phys. **87** 11, pp. 6502-6508, 1987.

- [103] Ben-Itzhak I., Carnes k. D., Ginther S. G., Johnson D. T., Norris P. J. and Weaver O. L., *Fragmentation of CH₄ Caused by Fast-proton Impact*, Phys. Rev. A **47** 5, pp. 3748-3757, 1993.
- [104] Furuya K., Ishikawa K. and Ogawa T., *Mass Analysis of Polyatomic High-Rydberg Fragments Produced by Electron Impact on Methane*, Chem. Phys. Lett. **319**, pp. 335-340, 2000.
- [105] Gulyás L., Tóth I. and Nagy L., *CDW-EIS Calculation for Ionization and fragmentation of Methane Impacted by Fast Protons*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **46** 075201, pp. 1-9, 2013.
- [106] Jacquemin D., Morales J. A., Deumens E. and Ohrn Y., *Electron Nuclear Dynamics of Proton Collisions with Methane at 30 eV*, J. Chem. Phys. **107** 16, pp. 6146-6155, 1997.
- [107] Kimura M., Li Y., Hirsch G. and Buenker R. J., *Elastic and Inelastic Processes in H⁺ + CH₄ Collisions in the Low-kilo-electron-volt Regime*, Phys. Rev. A **52** 2, pp. 1192-1205, 1995.
- [108] Dutuit O., Ait K. M., Lemaire J. and Richard V. M., *Dissociative Photoionization of Methane and its Deuterated Compounds in the A State Region*, Phys. Scripta. **T31** 16, pp. 223-226, 1990.