



24.15
Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE CIENCIAS

**Captura Electrónica Simple y Doble del Ion H^+
en SF_6**

T E S I S
Que para obtener el título de:
F I S I C O
P R E S E N T A:
IVAN DOMINGUEZ LOPEZ

Esta tesis se realizó dentro del proyecto CONACyT PCECCNA-050230

MEXICO, D. F.

1988



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 está 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.

INDICE

	Pag.
INTRODUCCION.	1
CAPITULO I.	
Modelos teóricos para procesos de intercambio de carga.	
I.1 Criterio Adiabático de Massey.	4
I.1.1 Captura electrónica simple.	4
I.1.2 Captura electrónica doble.	6
I.2 Modelo de Rapp-Francis para procesos de intercambio de carga entre iones y átomos.	9
I.2.1 Procesos resonantes simétricos.	11
I.2.2 Procesos no resonantes asimétricos.	17
CAPITULO II.	
Descripción del Aparato.	
2.1 Sistema de vacío.	26
2.2 Fuente de iones.	28
2.3 Lentes Einzel.	29
2.4 Filtro de velocidades.	30
2.5 Celda de reacción.	32
2.6 Sistema de detección.	34

CAPITULO III.

Descripción del Experimento.

3.1 Secciones de captura electrónica diferenciales en ángulo sólido y totales.	37
3.2 Descripción del experimento.	39
3.3 Errores.	43

CAPITULO IV.

4.1 Resultados.	45
-----------------	----

CAPITULO V.

5.1 Conclusiones.	52
-------------------	----

Referencias.	55
--------------	----

INTRODUCCION

El estudio experimental de las colisiones entre partículas atómicas y subatómicas se inicia poco después del descubrimiento del electrón con los experimentos clásicos de dispersión de partículas alfa por hojas metálicas delgadas. En aquella época debido a la existencia de problemas a los que las teorías existentes no daban una solución satisfactoria, surge la mecánica cuántica y con ella se dispone de una poderosa herramienta para dar solución a una gran cantidad de problemas, entre los que se encuentran aquellos en los que ocurre una colisión entre una partícula ionizada y una partícula neutra, ya sea átomo o molécula. Cuando ocurre uno de estos procesos, existen una gran diversidad de situaciones a estudiar, siendo dos de las más importantes aquellas en las que hay intercambio de carga entre las partículas que colisionan y aquellas en las que hay fragmentación de alguna de las partículas; en este trabajo se estudian los procesos del primer tipo.

Los procesos de intercambio de carga han resultado ser no sólo de gran importancia en la Física básica, sino que actualmente son de gran interés por sus aplicaciones en la Química, la Biología, la Astronomía, la Ciencia aplicada e Ingeniería. Dentro de esta última área, una de las aplicaciones principales del buen entendimiento de los procesos de intercambio de carga está encaminado a resolver el problema del calentamiento de un plasma para la obtención de energía por fusión nuclear y esto se lograría mediante la inyección de haces de partículas neutras a energías de kiloelectrón-volts (KeV^{S}).

Los procesos de intercambio de carga que son de interés general son aquellos en los que el proyectil o el blanco tienen una gran afinidad

electrónica, un potencial de ionización pequeño o ambos tienen el mismo potencial de ionización, ya que en cualquiera de estos casos las secciones transversales del proceso son generalmente grandes.

Al estudiar el proceso de captura electrónica simple y doble del ion atómico H^+ en hexafluoruro de azufre (SF_6) a energías de Kev's, el objetivo que se persigue es el de formar un banco de datos en el que se encuentren las secciones diferenciales y totales de estos procesos, ya que en la actualidad no se cuenta con esta información que puede llegar a ser de gran importancia en investigaciones posteriores.

La molécula de SF_6 presenta la estructura de un octaedro regular, con el átomo de azufre en el centro y los átomos de fluor situados en las esquinas; todos alejados a una distancia de 1.54 Å del átomo de azufre⁽¹⁾ y ligados principalmente por enlaces covalentes. El primero y el segundo potencial de ionización de esta molécula han sido determinados como de 15.7 y 17.0 eV respectivamente⁽²⁾. La energía de ligadura del $SF_6 \longrightarrow S + 6F$ es de 20.12 eV ⁽³⁾ y el diámetro de colisión de la molécula determinado por viscosidad es de 4.77 Å⁽⁴⁾.

El ion que se emplea como proyectil en este trabajo es H^+ ; se trata del ion atómico más simple que existe en la naturaleza. Se hace incidir en un blanco gaseoso formado por moléculas de SF_6 ; este gas actualmente es empleado en la industria de la electricidad como un buen aislante en cables coaxiales, interruptores y generadores de alto voltaje, etc.. Es precisamente la característica de buen aislante la que lo convierte en objeto de estudio de gran interés en los procesos de intercambio de carga.

Este trabajo se encuentra distribuido de la siguiente manera:

En el capítulo I se presentan los modelos teóricos de Massey⁽⁴⁾ y de

Rapp-Francis⁽¹⁰⁾ que describen a los procesos de intercambio de carga.

En el capítulo II se describe en detalle el dispositivo experimental empleado para realizar las mediciones de las secciones diferenciales en ángulo sólido y secciones totales para los procesos de doble y simple captura electrónica de H^+ en SF_6 .

En el capítulo III se describe la manera como se efectuó el experimento, resaltando el tipo de cantidades medibles en el laboratorio así como las incertidumbres asociadas a éstas.

En el capítulo IV se presentan los resultados obtenidos al aplicar los modelos descritos en el capítulo I; así como los resultados experimentales.

En el capítulo V se hace la comparación entre los resultados obtenidos experimentalmente y los obtenidos con los modelos de Massey y de Rapp-Francis. Se hacen conclusiones.

CAPITULO I.

I.1 CRITERIO ADIABATICO DE MASSEY.

I.1.1 CAPTURA ELECTRONICA SIMPLE.

Massey⁽⁴⁾ considera las reacciones de transferencia de carga del tipo asimétrico, es decir:



también llamado proceso de captura electrónica simple del ion A^+ incidiendo sobre el blanco B. Para que el proceso 1.1 ocurra es necesario que se disponga de cierta cantidad de energía; ésta se encuentra dada por la diferencia entre la energía liberada al neutralizar a la partícula A y la energía necesaria para ionizar a la partícula B, es decir:

$$\Delta E = I_A - I_B \quad (1.2)$$

donde I_i es el potencial de ionización de la partícula i. ΔE representa el cambio en energía en la transición electrónica del proceso. A la cantidad ΔE se le conoce como "defecto de energía". Cuando $\Delta E > 0$, se dice que se trata de un proceso exotérmico y cuando $\Delta E < 0$, al proceso se le llama endotérmico.

Massey usa un argumento basado en el principio de correspondencia para mostrar que en general las secciones transversales de transferencia de carga a muy bajas velocidades relativas de acercamiento serán extremadamente pequeñas a menos que ΔE sea pequeño. Si se supone que la velocidad de acercamiento de los dos sistemas atómicos es despreciable comparada con las velocidades de los

electrones orbitales, la interacción entre A' y B cambiará tan lentamente, que los electrones tendrán tiempo para irse reajustando a la perturbación producida sin que ocurra una transición electrónica. En este caso se dice que la colisión es adiabática. Massey describe ésta situación clásica en términos de la vibración producida por una fuerza perturbativa debida a un oscilador cuya frecuencia natural es ν . Supone que la perturbación varía con el tiempo de acuerdo a una función $F(t)$ y desarrolla esa función en una integral de Fourier. Sólomente las componentes de este desarrollo con frecuencias cercanas a ν pueden tener un efecto apreciable en la producción de una oscilación forzada. Por lo tanto la duración de la colisión τ no debe de ser grande comparada con un periodo de la vibración natural del oscilador. La excitación será débil si el producto $\tau\nu \gg 1$. Si a representa el alcance de la interacción entre A' y B , y v es su velocidad relativa de acercamiento, entonces τ será del orden a/v y la condición para excitación débil queda como $a\nu/v \gg 1$. En la mecánica cuántica se reemplaza a la frecuencia por $\Delta E/h$ donde h es la constante de Planck. La probabilidad de que ocurra la transferencia de carga entre el ión y el átomo será pequeña si:

$$a |\Delta E|/h\nu \gg 1 \quad (1.3)$$

Para un par dado de sistemas atómicos, a y ΔE son fijos aunque el parámetro adiabático a no está bien definido.

Todo lo anterior indica que la sección será pequeña si ν corresponde a la región adiabática, esto es:

$$\nu \ll a|\Delta E|/h$$

si ν es incrementada a un valor:

$$v^* \approx a|\Delta E|/h \quad (1.4)$$

la colisión no es adiabática ya que el tiempo de colisión se hace comparable con el tiempo de transición $h/\Delta E$. Entonces se espera que la sección transversal tenga un valor pico (el cual puede ser bastante grande) a una energía de impacto correspondiente a (1.4).

De este modo, en general el modelo de Massey predice que la sección de transferencia de carga para un proceso no resonante es muy pequeña a bajas energías de impacto, sube a un máximo en el que la expresión (1.4) se cumple y entonces decrece rápidamente a energías más grandes.

En la región adiabática la sección varía aproximadamente como⁽⁵⁾:

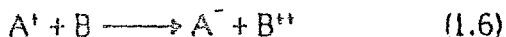
$$\sigma_{10} = K \exp[-a|\Delta E|/4hv] \quad (1.5)$$

donde K es una constante que depende del proceso considerado.

1.1.2 CAPTURA ELECTRONICA DOBLE.

En la discusión anterior, se ha dado la expresión para la sección transversal de captura electrónica simple. Esta expresión queda en términos del parámetro adiabático a al que experimentalmente⁽⁶⁾ se ha encontrado le corresponde un valor de 7 Å para una gran cantidad de procesos de captura electrónica simple en reacciones asimétricas.

Si ahora se desea estudiar a los procesos de doble captura electrónica del tipo:



y se quiere aplicar el criterio adiabático, no se puede asegurar a priori que el valor del parámetro a sea el mismo que el correspondiente a procesos de captura simple. Existe en la literatura⁽⁵⁾ una forma muy sencilla para determinar el valor de a en procesos de captura electrónica múltiple: sea m el número de electrones capturados por el ion, entonces $am=7$ Å por lo que $a=7$ Å para captura simple, $a=3.5$ Å

para captura doble, etc.. También se ha determinado experimentalmente⁽⁷⁾ el valor de α para una gran cantidad de procesos de doble captura electrónica y se encuentra que $\alpha=1.5$ Å cuando el blanco son gases inertes y que α varía desde 0.5 Å hasta 2.3 Å cuando el blanco son gases moleculares simples (H_2 y N_2). Debido entonces a que el valor de α muestra una dependencia del proceso, se acostumbra escribir una expresión más general para la sección transversal de captura electrónica cuando se aplica el criterio adiabático de Massey y ésta es la siguiente⁽⁸⁾:

$$\sigma(\nu) = A \exp[-B\alpha|\Delta E|/h\nu] \quad (1.7)$$

ΔE es el defecto de energía correspondiente al proceso de que se trate. A y B son constantes que se pueden determinar para cada proceso de la siguiente manera:

definiendo $K = \alpha|\Delta E|/h\nu$ entonces: $\sigma(\nu) = A \exp[-KB]$ y suponiendo que experimentalmente se han determinado σ_1 y σ_2 , entonces se tiene que:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= A \exp[-K_1 B] & \text{y} & & \sigma_2 &= A \exp[-K_2 B] \\ \Rightarrow & & & & A &= \sigma_2 \exp[K_2 B] \\ \Rightarrow & & & & \sigma_1 &= \sigma_2 \exp[B(K_2 - K_1)] \\ \Rightarrow & & B &= \frac{\ln(\sigma_1/\sigma_2)}{[K_2 - K_1]} & A &= \sigma_2 \left[\frac{\sigma_1}{\sigma_2} \right]^{(K_2/K_2 - K_1)} \end{aligned} \quad (1.8)$$

De acuerdo con Drukarev⁽⁹⁾, el parámetro adiabático α está relacionado con el ímpetu más probable transferido al blanco de la siguiente manera: sea P_0 y P el ímpetu de la partícula antes y después

de la colisión, entonces:

$$\frac{[P_0^2 - P^2]}{2m} = \Delta E \quad (1.9)$$

De esta manera, el ímpetu transferido será:

$$q(\theta) = |P_0 - P| = [(\Delta E/v)^2 + 4P_0^2 \sin^2(\theta/2)]^{1/2} \quad (1.10)$$

y para ángulos de dispersión pequeños ($\theta \approx 0$) se tiene que:

$$q(\theta) = |\Delta E|/v.$$

De la condición (1.4):

$a = h v_m / \Delta E$ con $v = v_m$ = velocidad a la que ocurre el máximo de la sección transversal, por lo que:

$$a = h/q_m \quad (1.11)$$

y de esta última ecuación se ve que a es inversamente proporcional al ímpetu más probable transferido en la dirección de la dispersión.

El hecho de que a sea más pequeña para procesos de doble captura que para los procesos de captura simple es obvio, ya que desde este punto de vista lo que sucede es que la cantidad de ímpetu transferido en doble captura es mayor que en captura simple.

1.2 MODELO DE RAPP Y FRANCIS PARA PROCESOS DE INTERCAMBIO DE CARGA ENTRE IONES Y ÁTOMOS.

La teoría desarrollada por Rapp y Francis⁽¹⁰⁾ que se presenta a continuación tiene por objeto estudiar el intercambio de carga entre iones y átomos gaseosos para las reacciones del tipo:



A los procesos del tipo 1.12 se les conoce en la literatura como procesos resonantes simétricos y a los del tipo 1.13 como se vio en la sección 1.1.1, se les conoce como procesos no resonantes asimétricos. Hay varias teorías que explican el proceso 1.12 por lo cual Rapp y Francis, usando la teoría existente, hacen un mejor cálculo para evaluar la sección transversal $\sigma(v)$ que caracteriza a estos procesos. El caso 1.13 es distinto ya que la teoría existente para éstos es limitada y por el tipo de ecuaciones diferenciales que es necesario resolver, se deben hacer muchas suposiciones para facilitar los cálculos.

Para encontrar las secciones totales de intercambio de carga correspondientes a los procesos 1.12 y 1.13 se cuenta básicamente con tres procedimientos generales. El primero es el tratamiento más riguroso y formal con el que se deben resolver este tipo de problemas; es conocido como método de dispersión de ondas y es puramente cuántico. El segundo método es conocido como método de parámetro de impacto; se trata de un método semi-clásico ya que en él se supone que el movimiento relativo de las partículas que colisionan es regido por las leyes de la mecánica clásica y se aplica la teoría cuántica de

perturbaciones para determinar la probabilidad de transición electrónica de un estado a otro. Por último, existen también métodos puramente clásicos como el de Grizinsky⁽¹¹⁾. Sin embargo la elección del método a usar está en función de las características del proceso que se pretende estudiar así como de la complejidad de las ecuaciones que deban de resolverse.

Por otro lado, el método que es mas conveniente para un proceso que ocurre a una cierta velocidad de acercamiento no lo será para el mismo proceso ocurriendo a otra velocidad relativa. Es por esto que los procesos 1.12 y 1.13 sólo se estudian en ciertos intervalos de velocidad; por ejemplo a velocidades de acercamiento "altas" el método que se emplea es el de dispersión de ondas. Una complicación que hay en esta región de velocidades, es que no se puede usar la aproximación de Born-Oppenheimer debido a que la velocidad relativa es comparable con la velocidad de los electrones en los átomos. A velocidades "intermedias", el método que se usa más frecuentemente es el del parámetro de impacto ya que en esta región las colisiones involucran parámetros de impacto relativamente grandes y esto es de gran utilidad para simplificar los cálculos; en esta región de velocidades también se puede aplicar el método de dispersión de ondas y es posible demostrar la equivalencia entre ambos métodos⁽¹²⁾. A velocidades "bajas" puede emplearse cualquier método semiclásico siempre y cuando se tome en cuenta que las trayectorias ya no se pueden considerar rectilíneas.

Se consideran velocidades "intermedias" a aquellas que están en el intervalo: $10^5/\mu^{1/2}$ cm/seg $\leq v \leq 10^8$ cm/seg, donde μ es la masa reducida del par que colisiona, expresada en UMA. Se consideran velocidades "altas" a aquellas que sean mayores que 10^8 cm/seg y las

velocidades "bajas" son las menores a $10^5/\mu^{1/2}$ cm/seg. Rapp y Francis estudian los procesos 1.12 y 1.13 en la región de velocidades "intermedias"

1.2.1 PROCESOS RESONANTES SIMETRICOS.

Se estudia en primer lugar a los procesos del tipo 1.12 De acuerdo con el razonamiento de Gurnes y Magee⁽¹³⁾, quienes hacen uso de la llamada aproximación de dos estados, se supone que A puede ser considerada como una molécula a cuyo estado inicial se le asocia una función de onda Ψ_i y al estado final una función de onda Ψ_f , correspondiendo estos estados al lado derecho y al lado izquierdo de la ecuación 1.12 respectivamente, con la molécula y el ion separados a una distancia infinita. Al hacer una aproximación a orden cero en la función de onda total y una aproximación a primer orden en la energía de interacción, se puede escribir la función de onda como:

$$\Psi = [C_i(t) \Psi_i + C_f(t) \Psi_f] \exp (-iEt/\hbar) \quad (1.14)$$

donde $C_i(t)$ y $C_f(t)$ son funciones del tiempo que en general pueden tomar valores complejos; E es la energía total del sistema sin tomar en cuenta el movimiento relativo entre la molécula y el ion. Las funciones Ψ_i y Ψ_f se escriben como el producto de funciones de onda internas y electrónicas. El hamiltoniano total es:

$$H = H_{int}^+ + H_{int}^0 + H_{el}^+ + H_{el}^0 + H' \quad (1.15)$$

donde los índices $^+$, 0 se refieren al ion y a la molécula respectivamente, "int" se refiere a energías internas y "el" se refiere a energías electrónicas. H' es la parte del Hamiltoniano que representa la

interacción entre el ion y la molécula. Al sustituir 1.14 y 1.15 en la ec. de Schrödinger dependiente del tiempo se obtiene:

$$C_i \dot{H}_i \Psi_i + C_f \dot{H}_f \Psi_f = i\hbar (\dot{C}_i \Psi_i + \dot{C}_f \Psi_f) \quad (1.16)$$

donde el punto arriba de C_i y C_f significa la derivada con respecto al tiempo de estos coeficientes.

Multiplicando la ec 1.16 por Ψ^* e integrando sobre todo el espacio se obtiene:

$$C_i H_{ii}^* + C_f H_{if}^* = i\hbar (\dot{C}_i + \dot{C}_f F) \quad (1.17)$$

Ahora multiplicando la ec. 1.16 por Ψ e integrando sobre todo el espacio se obtiene:

$$C_i H_{fi}^* + C_f H_{ff}^* = i\hbar (\dot{C}_i F + \dot{C}_f) \quad (1.18)$$

Las ecs. 1.17 y 1.18 forman un sistema de ecs. diferenciales acopladas, donde:

$$H_{fi}^* = \int \Psi_i^* H_i \Psi_f d\tau \quad \text{y} \quad F = \int \Psi_i^* \Psi_f d\tau = \int \Psi_f^* \Psi_i d\tau$$

El modelo que se usa para calcular la sección transversal se muestra en la siguiente figura:

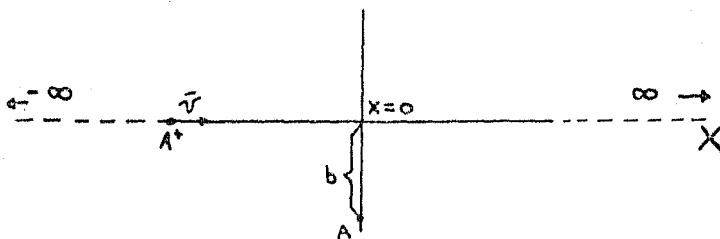


Fig. 1.1

La molécula A se localiza a una distancia fija b del eje X y el ion

que se considera inicialmente en $X = -\infty$ se mueve a lo largo del eje X y se desprecia la desviación del movimiento rectilíneo uniforme que pudiera tener para $X \sim 0$.

Si se denota por $P(b,v)$ a la probabilidad de que ocurra la transferencia de carga, entonces la sección transversal estará dada por⁽¹⁴⁾

$$\sigma(v) = 2\pi \int P(b,v) b db \quad (1.19)$$

El valor de $P(b,v)$ está dado por $|C_f(+\infty)|^2 = C_f^* C_f$. El coeficiente C_f se encuentra resolviendo las ecs 1.17 y 1.18. Como los coeficientes C^S son números complejos, entonces se pueden escribir como:

$$C_i = \rho e^{i\omega} \quad y \quad C_f = \rho' e^{i\omega'} \quad (1.20)$$

donde la amplitud ρ y la fase ω son funciones del tiempo. Puede demostrarse⁽¹⁰⁾ que el coeficiente C_f y el coeficiente C_i siempre están fuera de fase por un factor de $\pi/2$ por lo que:

$$C_i = \rho e^{i\omega} \quad C_f = i(1 - \rho^2) e^{i\omega} \quad (1.20')$$

Al sustituir esta ecuación en 1.17 o 1.18 e igualando las partes reales y las partes imaginarias se obtiene:

$$\dot{\omega} = \frac{F \dot{\rho}}{(1 - \rho^2)^{3/2}} - \frac{H_{ii}'}{h} \quad (1.21)$$

$$\frac{H_{if}'}{h} + F \dot{\omega} = \dot{\rho} / (1 - \rho^2)^{3/2} \quad (1.22)$$

Como $v = dx/dt$, al integrar 1.21 y 1.22 se obtiene:

$$P(v,b) = C_f^* C_f(+\infty) = \text{Sen}^2 \int \frac{1}{h v} \frac{H_{fi}' - F H_{ii}'}{1 - F^2} dx \quad (1.23)$$

$$\frac{2(H_{11}^S - F H_{11}^A)}{1 - F^2} = E_a - E_s \quad (1.24)$$

donde E_a y E_s representan las energías correspondientes a estados simétricos y antisimétricos de la función Ψ . H_{11}^S , H_{11}^A y F son conocidas como integrales de intercambio, de Coulomb y de traslape respectivamente. Escribiendo 1.23 en términos de 1.24:

$$P(b, \nu) = \text{Sen}^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2 \hbar \nu} (E_a - E_s) dx \right\} \quad (1.25)$$

Si ahora se supone que A es un átomo y se considera al ion A^+ como un centro puntual de carga positiva, entonces el problema es análogo al caso en que se está considerando a la molécula H_2^+ que es la molécula más simple que se puede tener. Por esta razón parece natural proponer un orbital semiempírico para el átomo A de la forma siguiente:

$$\Psi(r) = (\pi a_0)^{-3/4} (I/13.6)^{1/4} \exp[-(I/13.6)^{1/2} r/a_0] \quad (1.26)$$

donde a_0 es el radio de Bohr, I es el potencial de ionización de A en electrónvolts y r es la separación entre A^+ y e^- . Al evaluar $E_a - E_s$ de la ec. 1.24, para $R/a_0 \gg 1$ se obtiene:

$$(E_a - E_s) = 2 I (R/a_0) \exp[-(I/13.6)^{1/2} R/a_0] \quad (1.27)$$

lo que se reduce a la forma conocida para el caso de H_2^+ calculado por LCAO: $(E_a - E_s) = 27.2 (R/a_0) \exp(-R/a_0) \text{ eV}$

Sustituyendo 1.27 en 1.25 se obtiene una integral en el argumento del Sen^2 que ha sido evaluada por Dalgarno⁽¹⁵⁾, quien obtuvo la expresión

$$P(b, \nu) = \text{Sen}^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I}{a_0 \hbar \nu} (x^2 + b^2)^{1/2} \exp[-(I/13.6)^{1/2} (x^2 + b^2)^{1/2} / a_0] dx \right\} \quad (1.28),$$

$$P(b,v) = \text{Sen}^2 \left\{ \frac{21}{a_0} \frac{b^2}{h v} \left[K_0(\gamma b/a_0) + \frac{K_1(\gamma b/a_0)}{(\gamma b/a_0)} \right] \right\} \quad (1.29)$$

donde $\gamma = [1/13.6]^{1/2}$, K_0 y K_1 son funciones de Bessel de segundo tipo de orden cero y primer orden respectivamente. Como ya se ha hecho la aproximación $R/a_0 \gg 1$, entonces se puede suponer que $\gamma R/a_0 \gg 1$, y al usar las formas asintóticas para las funciones de Bessel se obtiene:

$$P(b,v) = \text{Sen}^2 \left\{ (2\pi/\gamma a_0)^{1/2} (1/hv) b^{3/2} (1 + a_0/\gamma b) \exp(-\gamma b/a_0) \right\} \quad (1.30)$$

$$= \text{Sen}^2 [A(b,v)] \quad (1.30')$$

La gráfica de la función $A(b,v)$ para alguna velocidad v tiene la forma que se da en la fig. 1.2. Gurneo y Magee⁽¹²⁾ muestran en su trabajo que al usar el método de dispersión de ondas, la gráfica para este factor de probabilidad es una función que también tiende a cero para b grande pero en forma oscilante (fig. 1.3).

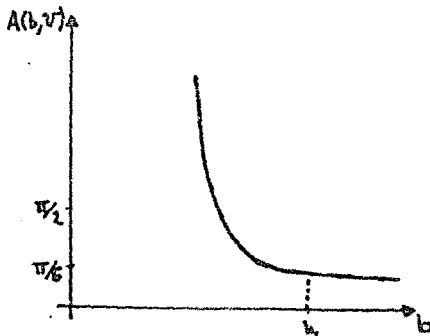


Fig. 1.2

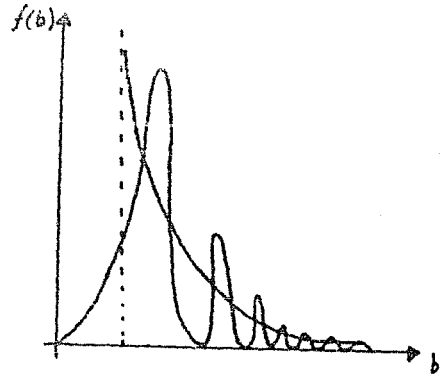


Fig. 1.3

Al graficar $P(b,v)$ se observa que es una función que oscila mucho entre cero y uno para b pequeño y para b grande deja de oscilar y tiende

a cero (fig.1.4)

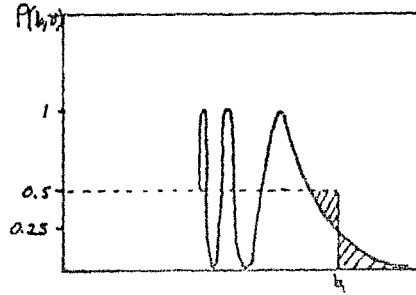


Fig. 1.4

Se necesita evaluar la integral de la ec. 1.19 pero dada la complejidad de $P(b,v)$, se puede estimar un valor de: $P(b,v) \approx 0.5$ para $0 \leq b \leq b_1$ y se elige el punto b_1 como aquel en el que $P(b_1,v)=0.25$; entonces b_1 puede determinarse resolviendo la ec. siguiente:

$$A(b_1,v) = \pi/6 \quad (1.31)$$

y la sección transversal será:

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^{b_1} (1/2) b \, db = \pi b_1^2/2 \quad (1.32)$$

Cuando se elige un valor promedio para b (\bar{b}) en la ec. 1.31 y se considera que los términos pre-exponenciales permanecen constantes, estudiando sólo el comportamiento de la exponencial, se obtiene la siguiente expresión para la $\sigma(v)$.

$$\sigma^{\frac{1}{2}}(v) = -k_1 \ln v + k_2 \quad (1.33)$$

que es la forma más conocida para la $\sigma(v)$ de los procesos resonantes. k_1 y k_2 son constantes para cada proceso de tipo 1.12 y están en función del potencial de ionización de A y del parámetro de impacto promedio que se haya elegido.

En la fig.1.5 se muestran los resultados obtenidos usando las ecs.

1.31y 1.32 para distintos átomos. En ellas se ve claramente cómo depende $\sigma(v)$ del potencial de ionización del átomo que se esté considerando.

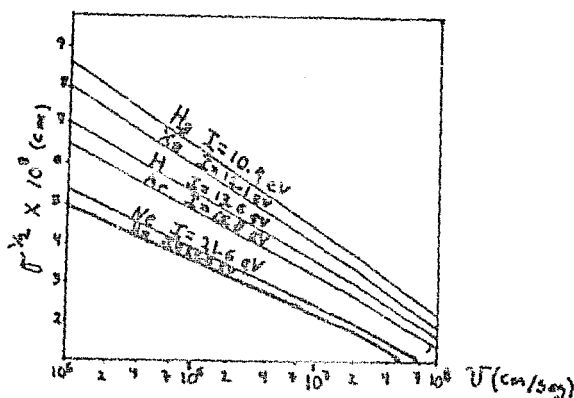
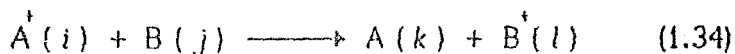


Fig.1.5

1.2.2 TRANSFERENCIA DE CARGA EN PROCESOS ASIMÉTRICOS.

Para encontrar la sección transversal de transferencia de carga en los procesos no resonantes asimétricos, se procede en forma análoga al tratamiento que se empleó en el caso de los procesos resonantes simétricos. En este caso también se emplea un tratamiento semiclásico. Se usa la aproximación de dos estados y adicionalmente se hacen consideraciones estadísticas.

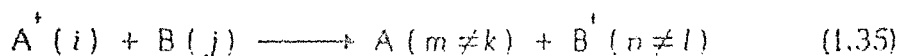
La reacción no resonante entre dos estados electrónicos particulares puede escribirse como:



donde i, j y k, l representan los estados más bajos de los iones y

átomos respectivamente. El lado derecho y el lado izquierdo de la ec. 1.34 representan dos estados asintóticos diferentes de la molécula AB^+ y la transferencia de carga ocurre cuando hay una transición electrónica de un estado a otro. Si consideramos que el espín y el momento angular se conservan, entonces podemos considerar sólo los estados electrónicos de AB^+ que tengan simetría idéntica, y como formas asintóticas a $(A^+ + B)$ y $(A + B^+)$.

Aun con estas suposiciones se están permitiendo reacciones del tipo:



Por el sólo hecho de tener $|\Delta E|$ grandes se pueden despreciar este tipo de procesos, ya que sus límites asintóticos están lo bastante separados en energía potencial como para suponer que son poco probables.

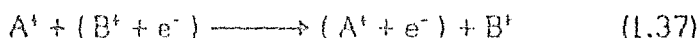
Cuando ocurre la colisión entre $A^+(i)$ y $B(j)$ se pueden formar varios estados electrónicos de AB^+ pero sólo una fracción de ellos permite el proceso de transferencia de carga. Se denota por f a esta fracción y ella representa un factor de peso estadístico para esta reacción. Es importante tomar en cuenta este factor, especialmente cuando se desea comparar estos resultados con el experimento, porque antes de la comparación se debe de tomar en cuenta f en la $\sigma(v)$ calculada.

Bates y Lynn⁽¹⁶⁾ señalan que la aproximación de dos estados puede hacerse desarrollando la función de onda total en términos de orbitales, ya sea atómicos o moleculares, pero siempre cortando la serie a dos términos, los que corresponden a reactantes y productos. Al expresar la función de onda para este caso en términos de orbitales moleculares se obtiene:

$$\Psi = C_A(t) \phi_A^{(AB^+)}(R) \exp[-iE_A^{(AB^+)}(R) t/\hbar] + C_B(t) \phi_B^{(AB^+)}(R) \exp[-iE_B^{(AB^+)}(R) t/\hbar] \quad (1.36)$$

donde $\phi^{(AB^+)}(R)$ es el orbital molecular que tiende a ϕ_i cuando $R \rightarrow \infty$; análogamente $E_i^{(AB^+)}$ es la energía de este estado que tendrá el valor de ϵ_i cuando $R \rightarrow \infty$.

Como el uso de la ec. 1.36 conduce a ecs. diferenciales difíciles de resolver, se emplea la aproximación a orden cero que consiste en sustituir los orbitales y energías moleculares por los correspondientes atómicos. De esta manera, se está considerando al proceso asimétrico de intercambio de carga como:



y se escribe la función de onda del electrón en el campo combinado de A^+ y B^+ como:

$$\Psi = C_A(t) \phi_A(r_A) \exp(-i\omega_A t) + C_B(t) \phi_B(r_B) \exp(-i\omega_B t) \quad (1.38)$$

ϕ_A y ϕ_B son los orbitales del electrón en el núcleo A^+ y B^+ , r_A y r_B son las distancias del electrón al núcleo A^+ y B^+ , $\omega = \epsilon/\hbar$ y ϵ_A , ϵ_B son las energías (potenciales de ionización) correspondientes a los estados ϕ_A y ϕ_B respectivamente. La ec. 1.38 satisface la ec. de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\left[-(\hbar^2/2m) \nabla^2 + V_A(r_A) + V_B(r_B) \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.39)$$

Al reemplazar la expresión de la ec. 1.38 en la ec. 1.39 se obtiene:

$$[(V_B)_{AA}/\hbar]C_A + [(V_A)_{AB}/\hbar]C_B \exp(-i\omega t) = i \left\{ \dot{C}_A + \dot{C}_B \exp(-i\omega t) \right\} \quad (1.40)$$

$$[(V_B)_{BA}/\hbar]C_A \exp(i\omega t) + [(V_A)_{BB}/\hbar]C_B = i \left\{ F \dot{C}_A \exp(i\omega t) + \dot{C}_B \right\} \quad (1.41)$$

Las probabilidades de encontrar al electrón en el núcleo A' y B' son $|C_A(t)|^2$ y $|C_B(t)|^2$ respectivamente. Si se supone que antes de la colisión el electrón se encuentra sobre B', entonces las condiciones iniciales serán: $C_A(-\infty) = 0$ y $C_B(-\infty) = 1$.

Como lo que interesa es encontrar $P(b, v) = F |C_A(\omega)|^2$, mediante un cambio de variable se pueden simplificar la ecs. 1.40 y 1.41 para obtener:

$$i \dot{a}_B = K_1(t) a_A \exp(i\Omega t) \quad ; \quad i \dot{a}_A = K_2(t) a_B \exp(-i\omega t) \quad (1.42)$$

donde:

$$C_B = a_B \exp(-i \int_{-\infty}^t \eta_1 dt') \quad ; \quad C_A = a_A \exp(-i \int_{-\infty}^t \eta_2 dt')$$

$$K_1 = \left[\frac{(V_B)_{BA} - F(V_B)_{AA}}{(1 - F^2) \hbar} \right] \quad K_2 = \left[\frac{(V_A)_{AB} - F(V_A)_{BB}}{(1 - F^2) \hbar} \right]$$

$$\eta_1 = \left[\frac{(V_A)_{BB} - F(V_A)_{AB}}{(1 - F^2) \hbar} \right] \quad \eta_2 = \left[\frac{(V_B)_{BA} - F(V_B)_{AA}}{(1 - F^2) \hbar} \right]$$

$$\Omega t = \omega t + \int_{-\infty}^t (\eta_1 - \eta_2) dt'$$

Rapp y Francis encuentran que $K_1 \approx (V_B)_{BA}$, $K_2 \approx (V_A)_{AB}$ y $K \gg \eta$, también muestran que $|\eta_1 - \eta_2| \ll |\omega|$ para $R/a_0 \gg 1$, lo que conduce a $\Omega \approx \omega$.

El principio del balance detallado requiere que para un valor de b y v dados, $P_1(b, v)$ para la reacción en sentido directo esté relacionada con $P_2(b, v)$ para la reacción (ec. 1.34), en el sentido inverso por:

$$P_1(b, v)/P_2(b, v) = f_1/f_2 \quad (1.43)$$

donde f_1 y f_2 son los factores estadísticos para la reacción directa e inversa respectivamente. Lo que quiere decir la ec. 1.43 es que si se tiene inicialmente $A^* + B$, es decir $a_A(-\infty) = 0$ y $a_B(-\infty) = 1$, la $|a_A(\omega)|^2$ para la transferencia de carga a $A + B^*$ debe ser la misma que $|a_B(\omega)|^2$ para el proceso inverso, es decir: $a_A(-\infty) = 1$ y $a_B(-\infty) = 0$. Las ecs. 1.42 no satisfacen este requerimiento a menos que $K_1 = K_2$ pero en este caso $K_1 \neq K_2$ porque la aproximación a orden cero para $\Phi_1(AB^*)$ y $E_1(AB^*)$ se ha usado para R finito y las funciones ϕ_A y ϕ_B no son ortogonales.

Puede mostrarse que cuando se usan orbitales moleculares no se presenta ningún problema de este tipo ya que las funciones de onda moleculares son mutuamente ortogonales y son eigenfunciones del operador Hamiltoniano total⁽¹⁰⁾. Sin embargo, la aproximación que se ha usado es buena cuando $R/a_0 \gg 1$ y $(\epsilon_B - \epsilon_A)$ no es muy grande; en este caso se puede elegir una \bar{K} tomada como un promedio de K_1 y K_2 . La función \bar{K} es justamente el término correspondiente al intercambio de carga resonante simétrico (el integrando de la ec. 1.28), con I reemplazado por un valor promedio entre I_A e I_B . (potenciales de ionización de los átomos A y B respectivamente). Al usar $v = dx/dt$ y \bar{K} , se pueden reescribir las ecs. 1.42 de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} i v (da_B/dx) &= \bar{K}(x/v) a_A \exp(i\omega x/v) \\ i v (da_A/dx) &= \bar{K}(x/v) a_B \exp(-i\omega x/v) \end{aligned} \quad (1.44)$$

Rosen y Zener⁽¹⁷⁾ han propuesto como forma general para $a_A(+\infty)$ la siguiente expresión:

$$|a_A(+\infty)|_{RZ}^2 = \left[\text{Sen}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \bar{K} dt \right] \left[\int_{-\infty}^{\infty} \bar{K} \cos \omega t dt \right]^2 \div \left[\int_{-\infty}^{\infty} \bar{K} dt \right]^2 \quad (1.45)$$

y proponen: $\bar{K} = \kappa_1 \text{Sech} \kappa_2 x$

Mientras que Gurnee y Magee⁽¹³⁾ propusieron:

$$|a_A(+\infty)|_{GM}^2 = \text{Sen}^2 \int_{-\infty}^{\infty} K \cos \omega t dt \quad (1.46)$$

En el presente caso $\bar{K}_1 = (I/a_0 \hbar) (x^2 + b^2)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\gamma (x^2 + b^2)^{\frac{1}{2}} / a_0 \right\}$ (1.47)

con I tomada como el promedio de I_A e I_B , y como se desea ajustar la ec. 1.47 a la forma $\bar{K}_2 = \kappa_1 \text{Sech} \kappa_2 x$, se proponen las siguientes condiciones:

$$\bar{K}_1(0) = \bar{K}_2(0) \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \bar{K}_1 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{K}_2 dx$$

y se encuentra que:

$$\kappa_1 = (I/a_0 \hbar) b \exp(-\gamma b/a_0) \quad (1.48)$$

$$\kappa_2 = \pi \left[2 b \exp(\gamma b/a_0) \left\{ K_0(\gamma b/a_0) + K_1(\gamma b/a_0)/(\gamma b/a_0) \right\} \right]^{-1} \quad (1.49)$$

Al sustituir $\bar{K} = \bar{K}_2$ en las ecs. 1.44 se obtiene:

$$|a_A(+\infty)|^2 = \text{Sen}^2(\pi \kappa_1 / v \kappa_2 a_0) \text{Sech}^2(\pi \omega / 2 v \kappa_2) \quad (1.50)$$

y con el uso de las ecs. 1.48 y 1.49 se llega a:

$$P_{\omega}(b, v) = f P_0(b, v) \text{Sech}^2[(\omega a_0 / \gamma v) F(\gamma b/a_0)] \quad (1.51)$$

con: $F(\gamma b/a_0) = (\gamma b/a_0) \exp(\gamma b/a_0) \left\{ K_0(\gamma b/a_0) + K_1(\gamma b/a_0)/(\gamma b/a_0) \right\}$.

Cuando $\gamma b/a_0 \gg 1$ se pueden usar las formas asintóticas para las funciones de Bessel:

$$F(\gamma b/a_0) \simeq (\pi \gamma b/2 a_0)^{\frac{1}{2}} \quad (1.52)$$

$$\Rightarrow P_\omega(b, v) = f P_0(b, v) \operatorname{Sech}^2 \left[(\omega/v) (\pi a_0 b/2 \gamma)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (1.53)$$

Si se supone que la ec. 1.53 es válida para cualquier parámetro de impacto y se hace uso de la fig.1.6, en la que se muestra el comportamiento de la función Sech comparado con $P_0(b, v)$, aquí se ha llamado $P_0(b, v)$ a la misma de la ec. 1.30. Se observa lo siguiente:

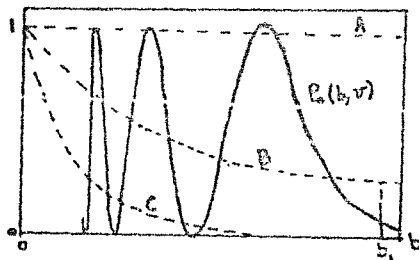


Fig. 1.6

Para velocidades "altas" la función Sech es esencialmente la unidad (curva A), sobre el intervalo donde $P_0(b, v)$ es importante y entonces:

$$P_\omega = f P_0(b, v) \quad (1.54)$$

Para velocidades "intermedias" (curva B) se puede hacer la siguiente aproximación: $P_0(b, v) = 1/2$ para $0 \leq b \leq b_1$ y se elige el punto b_1 tal que:

$$\operatorname{Sech}^2 \left[(\omega/v) (\pi a_0 b/2 \gamma)^{\frac{1}{2}} \right] = 4 P_0(b, v) \quad (1.55)$$

Al hacer los cálculos se debe de tener cuidado al tomar el valor b_1 de tal manera que sea el b_{\max} de los que cumplen la condición 1.55, para garantizar que $\gamma b/a_0 \gg 1$ se satisface.

La $\sigma(v)$ para velocidades intermedias será entonces

$$\sigma(v) = \frac{1}{2} \int_0^{b_1} \text{Sech}^2[(\omega/v) (\pi a_0 b/2\gamma)]^{\frac{1}{2}} 2 \pi b \, db \quad (1.56)$$

y para velocidades "bajas" (curva C) el límite superior de la integral en la ec. 1.56 puede igualarse a ∞ obteniendo:

$$\sigma(v) = \frac{9 (1.202) \gamma^2 v^4}{\pi a_0 \omega} \quad (1.57)$$

Se debe observar que antes de obtener la ec. 1.57 se había hecho la suposición de que $\gamma b/a_0 \gg 1$ por lo que la integración desde $b = 0$ no es del todo válida. Además, de la fig.1.6 se ve que b contribuye a la integral sólo para b pequeño, es por esto que la ec. 1.57 no debe tomarse muy en serio, o mejor aún, sólo debe usarse para cálculos del orden de magnitud de $\sigma(v)$.

Al calcular la $\sigma(v)$ para algún proceso asimétrico (figs. 1.7, 1.8 y 1.9) se observa que γ no es un factor crítico; esto quiere decir que uno puede sustituir I por I_A , I_B o un potencial promedio en la ec. 1.53 y la forma de la curva no sufrirá un cambio notable. Sin embargo, el defecto de energía ΔE que entra en los cálculos en $\omega = \Delta E/\hbar$, sí es un factor importante para determinar la $\sigma(v)$.

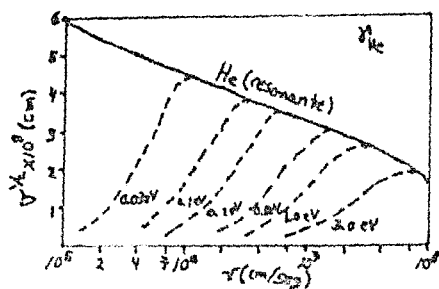


FIG. 1.7

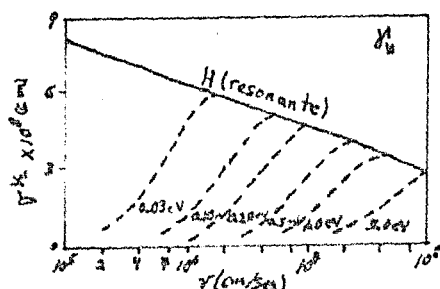


FIG. 1.8

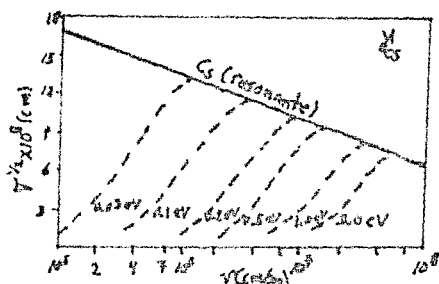


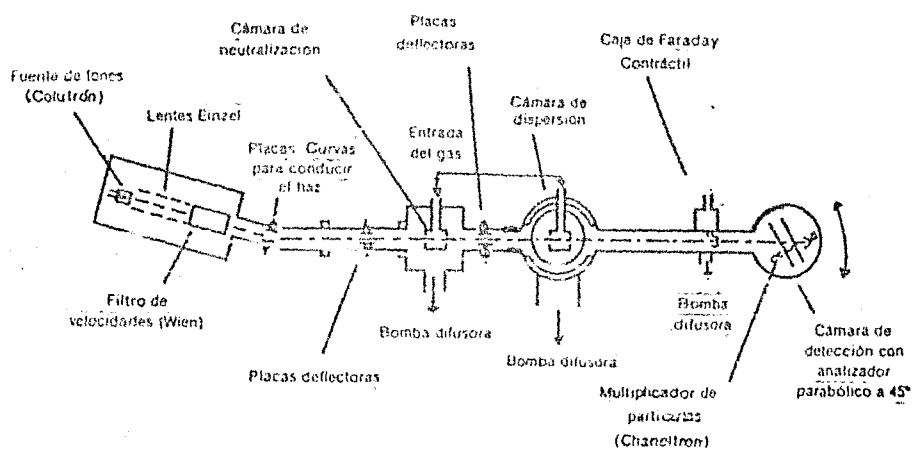
FIG. 1.9

En las figuras 1.7, 1.8 y 1.9 se puede apreciar como la $\sigma_{\text{non}}(v)$ para los procesos no resonantes tiende a la $\sigma_{\text{res}}(v)$ de los procesos resonantes para velocidades altas.

CAPITULO II.

DESCRIPCION DEL APARATO.

El aparato empleado para llevar a cabo este experimento fué el acelerador de baja energía (0.5 - 5 KeV) del Laboratorio de Física Atómica, Molecular y Óptica del IFUNAM. Su esquema se da en la figura 2.1.



Esquema del Acelerador (Fuera de Escala)

Fig 2.1

A continuación se da una descripción breve de lo que se considera son las partes principales del acelerador.

2.1 SISTEMA DE VACIO.

Para garantizar que los iones que se están enviando hacia el gas que

funciona como blanco, mantienen su identidad desde que se producen, hasta que entran en la celda de reacción, y desde que se generan los productos, hasta que éstos son detectados, es necesario contar con un sistema de vacío que proporcione una presión tal, que el camino libre medio de los iones moviéndose a través del gas residual, sea mucho mayor que la distancia que hay entre el lugar donde se producen los iones y el sistema de detección. Para encontrar la presión de operación se emplea la conocida fórmula: $\bar{l} = (n \sigma)^{-1}$, con la que se obtiene una presión del orden de $10^{-7(10)}$ torr. Para alcanzarla se emplean tres tipos de bombas de vacío: bombas mecánicas, bombas difusoras y una bomba turbomolecular.

Bombas Mecánicas: con este tipo de bombas se alcanzan presiones del orden de 10^{-3} y 10^{-4} torr⁽¹²⁾ y sirven de apoyo a las bombas difusoras y turbomolecular ya que éstas funcionan óptimamente cuando la diferencia de presiones entre la entrada y salida no es muy grande.

Bombas Difusoras: este tipo de bombas no tienen partes móviles. El gas que se encuentra en el sistema es extraído por medio de flujos de vapor de aceite que se mueven a alta velocidad y son muy densos; los vapores de aceite son recuperados al condensarse en las paredes de la bomba ya que éstas son enfriadas por medio de un serpentín de agua fría recirculada y una trampa de nitrógeno líquido. El aceite empleado en las bombas difusoras es Corning 705 o Santovac.

Bomba Turbomolecular: la bomba turbomolecular cuenta con un rotor en el cual se encuentran montadas una gran cantidad de aspas, separadas éstas por una serie de discos que se encuentran fijos a la estructura de la bomba. El eje de las aspas (rotor), tiene sus extremos montados sobre baleros. El vacío se logra debido a la diferencia de presiones

creada cuando las aspas giran a una gran velocidad (36000 rpm) (20).

2.2 FUENTE DE IONES

Otro elemento que forma parte del acelerador y que es de gran importancia es la fuente de iones, ya que es en este lugar donde se admite el gas que se desea ionizar y, por medio de descarga en arco a bajas presiones del gas, se obtiene entre otros, el ion con el que se desea trabajar. La fuente que se empleó para este experimento es una fuente de iones de descarga en arco y su esquema se da en la fig. 2.2.

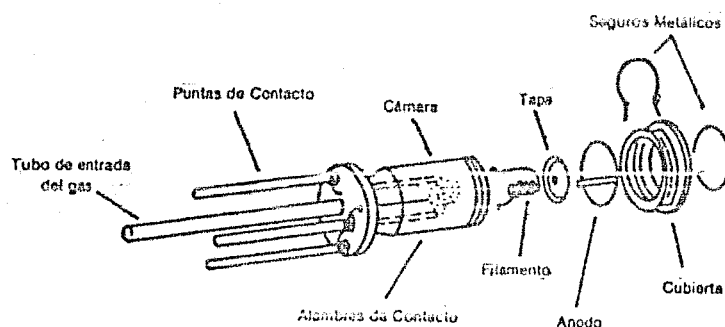


Fig. 2.2

Los elementos principales de la fuente son los siguientes:

Cuerpo de la fuente (cámara): es el recinto dentro del cual se admite el gas que se desea ionizar. Es de Nitrito de Boro que es un material de poca resistencia a los esfuerzos mecánicos pero que en cambio, tiene la ventaja de soportar altas temperaturas por lo cual puede funcionar como un horno, característica que permite obtener iones

de materiales sólidos y gaseosos.

Filamento: se trata de un filamento de Tungsteno que se conecta a una fuente de corriente para que por emisión termoiónica se obtengan los electrones responsables de la ionización. La corriente que se hace pasar por el filamento es tal que cuando se aplica una diferencia de potencial entre el filamento y el ánodo, se produce una descarga continua al ánodo.

Ánodo: una vez que el filamento ha producido electrones y que el gas que se desea ionizar se encuentra dentro del cuerpo de la fuente, los electrones son acelerados aplicando un voltaje al ánodo, tal que la energía que proporcione a los electrones sea suficiente para que estos logren ionizar a los átomos o moléculas del gas que se encuentra dentro de la fuente.

2.3 LENTES EINZEL

Al igual que una lente óptica puede hacer que los rayos luminosos que inciden en ella se concentren en un punto, de la misma manera una lente electrostática puede enfocar un haz de partículas cargadas. Así como en óptica existen lentes delgadas y gruesas, de igual forma existen lentes electrostáticas "delgadas" y "gruesas", correspondiendo las primeras a planos conductores paralelos con una abertura en el centro (por donde pasan las partículas cargadas) y aplicada a los planos conductores una diferencia de potencial. Las lentes electrostáticas "gruesas" están hechas de secciones de cilindro conductor hueco a los que se aplica una diferencia de potencial. Las lentes electrostáticas empleadas en este trabajo corresponden a este tipo y se les conoce como Lentes Einzel⁽²¹⁾. Estas constan de tres electrodos cilíndricos de igual diámetro, alineados en un mismo eje, de tal manera que cuando se aplica el

mismo potencial al primer y tercer electrodos, la energía de las partículas cargadas no se ve alterada, obteniendo únicamente un efecto de enfoque.

La geometría de las lentes Einzel, así como el circuito eléctrico, se ilustran en las figuras 2.3 y 2.4 respectivamente.

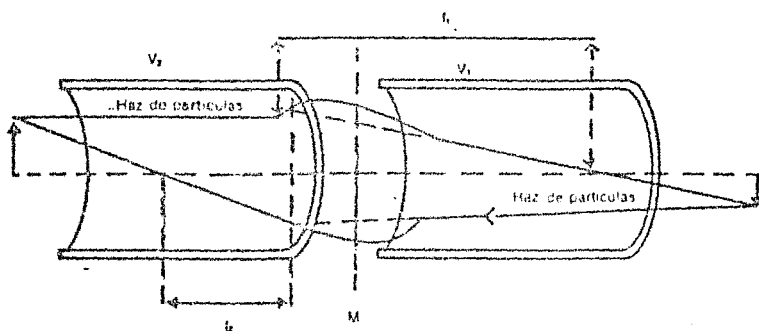


Fig.2.3

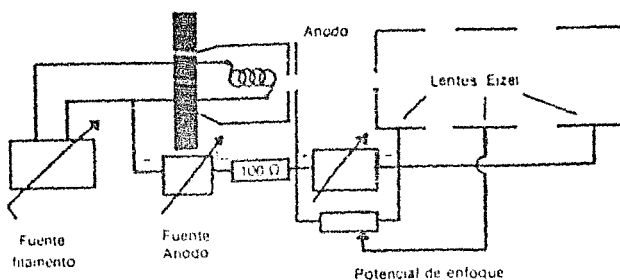


Fig.2.4

2.4 FILTRO DE VELOCIDADES

Una vez que se han producido los iones positivos y estos han sido

acelerados y enfocados por medio de las lentes Einzel, el paso a seguir es seleccionar al ion con el que se desea trabajar siendo ésta la función del filtro de velocidades también conocido como filtro de Wien. La manera como funciona este filtro es la siguiente: se aplica un campo eléctrico y uno magnético perpendiculares entre sí y a la dirección del haz incidente. Como es bien sabido, la fuerza que actúa sobre una partícula con carga ne que se mueve con velocidad v y se encuentra bajo la influencia de un campo eléctrico E y uno magnético B , está dada por la fuerza de Lorentz:

$$F = ne (E + v \times B) \quad (2.1)$$

En el filtro de Wien el campo magnético es proporcionado por un electroimán, mientras que el campo eléctrico se obtiene al aplicar una diferencia de potencial a un par de placas planas y paralelas. El esquema del filtro de velocidades se da en la siguiente figura.

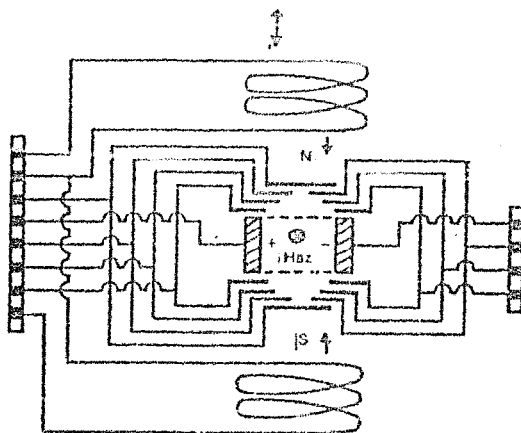


Fig.2.5

Solo aquellos iones que tengan una velocidad $v' = E/B$ podrán pasar a través del filtro sin desviarse.

Puede demostrarse que para un campo eléctrico dado, uno puede seleccionar al ion de interés variando solamente la corriente que circula por las espiras del electroimán, y que esa corriente tiene el valor de⁽²²⁾:

$$I_n = \frac{L E}{\mu_0 N \sqrt{2 q V}} \sqrt{m_n} \quad (2.2)$$

$$\Rightarrow I_2 = \sqrt{m_2 / m_1} I_1 \quad (2.3)$$

Con la última expresión lo que se quiere decir es que si ya se conoce la magnitud de la corriente I_1 que debe circular por el electroimán para seleccionar al ion positivo de masa m_1 , entonces la corriente I_2 para seleccionar al ion positivo de masa m_2 queda determinada. Esto es muy útil por ejemplo cuando se conoce el valor de la corriente para seleccionar al ion il^+ y posteriormente uno desea seleccionar al ion il_2^+ , en este caso $m_2 = 2 m_1$.

$$\Rightarrow I_2 = \sqrt{2} I_1 \quad (2.4)$$

2.5 CELDA DE REACCION

Una vez que se tiene el haz de iones deseado, éste es conducido dentro del tubo del acelerador por medio de placas deflectoras curvas y placas planas paralelas haciéndolo pasar por la celda de neutralización (en este caso no se empleó) y posteriormente por la celda de reacción; es en este lugar donde se admite al gas que se usará como blanco.

La celda de reacción es un tubo cilíndrico de acero inoxidable que mide una pulgada de longitud y una pulgada de diámetro. A la entrada tiene un colimador que mide 1mm de diámetro y a la salida se

encuentra otro que mide 2 mm de ancho por 6 mm de largo. El tubo por el que se admite el gas que sirve como blanco también es de acero inoxidable; mide 3mm de diámetro interior y sirve a la vez de soporte para la celda de reacción.

La celda de reacción se encuentra localizada en el centro de rotación de una cámara de vacío. Una computadora mueve a todo el sistema de detección que se encuentra a 47 cm de la celda de reacción, lográndose con este dispositivo, la obtención de las distribuciones angulares del proceso que se esté estudiando.

En la fig.2.6 se dá un esquema de este elemento.

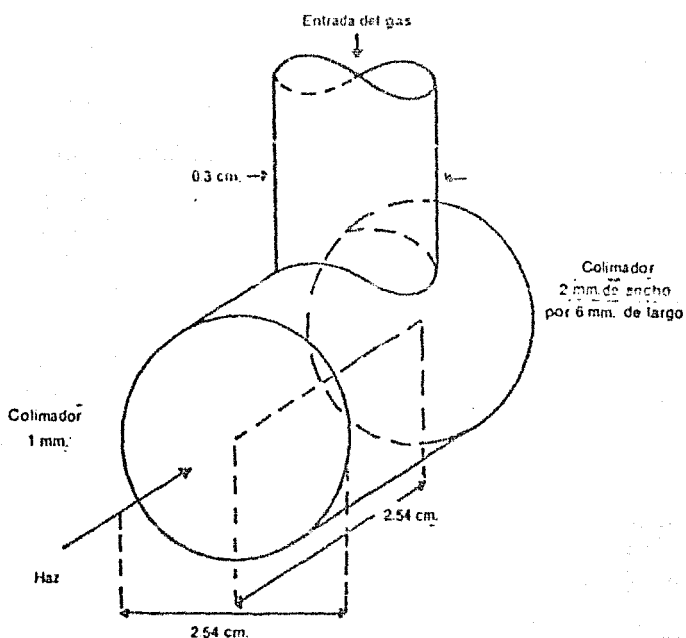


Fig.2.6

2.6 SISTEMA DE DETECCION

El sistema de detección está formado por una caja de Faraday y una cámara rotatoria en la que se encuentran : un analizador parabólico a 45° y dos multiplicadores de electrones.

Caja de Faraday: se emplea para medir la corriente de partículas que se están haciendo incidir en el blanco. El esquema de la caja de Faraday⁽²²⁾ se da en la figura.

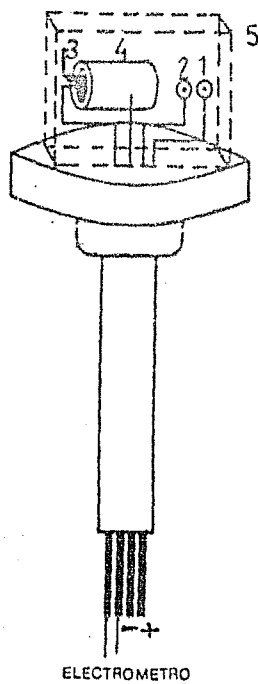


Fig.2.7

Como se puede apreciar, consta de 5 electrodos los cuales tienen las

siguientes funciones:

- El electrodo num. 1, al que se aplica un voltaje positivo V_1 , se encarga de repeler a los iones positivos del gas residual.
- El electrodo num. 2 se encuentra a un potencial negativo V_2 y su función es evitar que salgan los electrones secundarios producidos dentro de la caja.
- El electrodo num. 3 es la placa colectora que se encuentra conectada a un electrómetro; con el se mide la corriente de partículas que están incidiendo sobre el blanco.
- El electrodo num. 4 es un electrodo cilíndrico al que se aplica un potencial negativo a fin de regresar a la placa colectora los electrones que salen de la misma.
- El electrodo num. 5 es una cubierta protectora metálica que se encuentra conectada a tierra.

La cámara rotatoria es el dispositivo que permite hacer distribuciones angulares. Tiene su centro de giro en el centro de la cámara de reacción. Dentro de la cámara rotatoria se encuentra un analizador parabólico a 45° que permite separar los productos neutros de los cargados, así como separar a estos últimos de acuerdo con su energía y estado de carga. Los productos neutros son registrados con un multiplicador de electrones que se encuentra a la salida del analizador; mientras que las partículas cargadas describen una trayectoria parabólica y cuando uno aplica un voltaje V_D a las placas del analizador tal que⁽²³⁾:

$$V_D \approx 0.6 V_A$$

donde V_A es el voltaje de aceleración.

Los productos cargados son registrados con otro multiplicador de electrones tal como se ilustra en la siguiente figura:

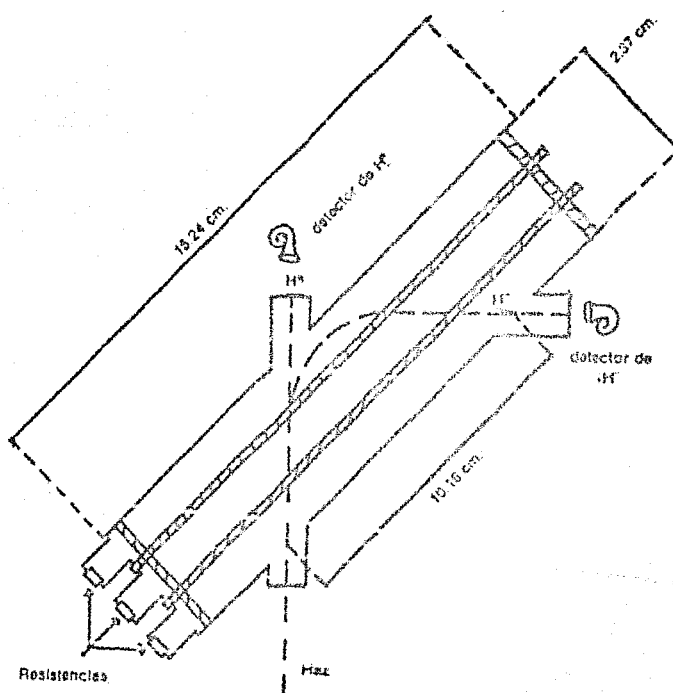


Fig.2.8

CAPITULO III.

DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO.

3.1 SECCIONES DE CAPTURA ELECTRONICA DIFERENCIALES EN ANGULO SOLIDO Y TOTALES.

Antes de pasar a describir la manera como se llevó a cabo el experimento para determinar las secciones diferenciales y totales de captura electrónica simple y doble del ión H^+ en SF_6 , es conveniente decir, primero, cómo se define la sección transversal total para un proceso determinado y, posteriormente, relacionar ésta con los parámetros que uno puede controlar y medir en el laboratorio.

Se considera el siguiente proceso de intercambio de carga simple.



en el que un ion positivo del tipo A, incide con velocidad v sobre un blanco gaseoso formado por átomos o moléculas de tipo B con una densidad de partículas n_B ; si el ion recorre dentro de este gas una distancia dx , la probabilidad de que ocurra el intercambio de carga será proporcional al producto de la distancia recorrida dentro del gas, multiplicada por la densidad de partículas que hay en el blanco, esto es:

$$P_i = \sigma_{i0} n_B dx \quad (3.2)$$

donde la constante de proporcionalidad σ_{i0} es la llamada sección transversal del proceso (captura electronica simple). Aquí se ha adoptado la convención de que σ_{nm} es la sección transversal total del proceso que hace que la partícula incidente cambie su estado de carga inicial n a un estado final de carga m .

Si ahora en lugar de considerar un solo ion incidiendo en el blanco gaseoso, se piensa en un haz de iones positivos del tipo A con una densidad estable n_A , incidiendo todos con una velocidad v , entonces el número de partículas que intercambian su carga en la unidad de tiempo en un volumen $dV = (dA)(dx)$ es:

$$dI_i = \sigma_{10} n_A n_B v dA dx \quad (3.3)$$

Si se supone que las partículas sufren sólo una colisión, es decir, una presión muy baja y una densidad uniforme en el blanco, se tiene:

$$I_i = \sigma_{10} n_B I \int n_A v dA$$

$$= \sigma_{10} n_B I I_A$$

$$I_i = \sigma_{10} \pi I_A$$

$$\sigma_{10} = I_i / \pi I_A \quad (3.4)$$

donde $\pi = n_B I$, es conocido como "espesor del blanco". De la expresión 3.4 es fácil ver que las unidades de σ_{10} son de [longitud]².

En el caso de secciones diferenciales en ángulo sólido, la última expresión se puede escribir en términos de los parámetros medibles en el laboratorio como

$$\frac{d\sigma_{10}}{d\Omega} = \frac{N^0(\theta)}{I (I_A/e) (P/K T) d\Omega L_{eff}} \quad (3.5)$$

donde $N^0(\theta)$ es el número de iones que se neutralizaron al capturar a un electrón y se dispersaron a un ángulo θ después de la colisión; I_A es la corriente total de iones que se hace incidir sobre el blanco; e es la

carga del electron; P y T son la presión y temperatura del gas que se usa como blanco, considerándolo como un gas ideal; l es la longitud efectiva del blanco; $d\Omega$ es la diferencial del ángulo sólido, determinado a partir de la geometría del sistema de detección. t es el tiempo durante el cual se registran las partículas que han intercambiado su carga y se han dispersado a un ángulo θ ; eff es la eficiencia de los contadores de partículas, que es función de la energía de las partículas detectadas⁽²⁴⁾.

La sección transversal total está dada por:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 2 \pi \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (3.6)$$

Hasta aquí se ha considerado que el proceso estudiado es el de captura electrónica simple, pero si existe interés en conocer las secciones de doble captura electrónica, lo que se hace es, de acuerdo con la fórmula para la sección diferencial en ángulo sólido, contar el número de iones que durante la colisión capturaron un par de electrones y se dispersaron a un ángulo θ , es decir; contar $N^+(\theta)$.

3.2 DESCRIPCION DEL EXPERIMENTO.

Antes de empezar a hacer el experimento, se debe asegurar que el sistema de vacío se encuentra trabajando correctamente y que éste proporciona una presión adecuada para llevar a cabo la medición. Una vez que la presión dentro del tubo del acelerador ha llegado a un valor del orden de 10^{-7} torr se puede empezar a operar con la fuente de iones.

Con el fin de obtener un haz de iones lo menos contaminado posible se procede a desgaseificar a la fuente; esto se logra calentando el filamento

mediante el aumento gradual de la corriente que pasa a través del mismo, cuidando siempre que al estar desgasificando, la presión en la fuente no aumente demasiado. Cuando se ha llegado a una corriente de 15 o 16 amperes en el filamento y la presión en la fuente es menor que 2 o 3 micrones, se aplica una diferencia de potencial entre el ánodo y el cátodo de aprox 50 volts; ésta es suficiente para proporcionar a los electrones la energía necesaria para ionizar al gas que se está admitiendo en la fuente. En este caso particular, se admitió una mezcla de gases de aprox. 30% Argón y 70% de Hidrógeno. El Argón es un gas que se denomina de apoyo ya que aporta electrones para la ionización del Hidrógeno. La mezcla de gases hace que la presión dentro de la fuente aumente hasta un valor de 70 micrones aprox.

Los electrones primarios producidos por el filamento y los electrones secundarios proporcionados por la ionización del gas, forman el gas de electrones que junto con los iones y las partículas neutras, forman un sistema al que se le conoce como plasma de arco de descarga.

Al aplicar el voltaje de aceleración, (ver fig. 2.4) todos los iones positivos que se generaron en la fuente son acelerados y enfocados por medio de las lentes Einzel. En éstas, el primer y tercer electrodos se conectan a tierra y el segundo se mantiene a un potencial positivo menor que el voltaje de aceleración. Posteriormente, los iones entran en el filtro de velocidades; en este filtro si el campo eléctrico se mantiene fijo, por ejemplo, al aplicar una diferencia de potencial a las placas de aproximadamente 200 volts, la selección del ion se realiza variando la corriente que circula por las espiras del electroimán.

Como puede apreciarse en la figura 2.1, el acelerador no está

perfectamente alineado en un solo eje. Esto obedece a que los multiplicadores de electrones son sensibles a la luz y si la fuente de iones estuviera alineada con el resto del acelerador, el detector podría contar los fotones que salen de aquella.

La fuente de iones, las lentes Einzel y el filtro de velocidades se encuentran alineados en un eje que forma un ángulo de 10° con respecto al resto del acelerador. Es por esto que se cuenta con unas placas deflectoras cilíndricas a las que se aplica una diferencia de potencial de aproximadamente 150 volts por cada kilovolt de energía de aceleración para corregir la dirección del haz de iones.

Con la ayuda de una placa de cobre que al girar se interpone al paso del haz o puede dejarlo pasar libremente, es posible optimizar la corriente del mismo. Esto se logra variando el potencial aplicado al segundo electrodo de las lentes Einzel y cambiando la corriente en el electroimán del filtro.

El haz es dirigido a través del tubo del acelerador por medio de placas planas y paralelas que lo pueden desviar horizontal o verticalmente para que de esta manera pueda pasar por el colimador que se encuentra a la entrada de la celda de reacción.

Antes de admitir el Hexafluoruro de Azufre en la celda de reacción, se debe medir la corriente total de H^+ que se está haciendo incidir en la misma para poder medir secciones absolutas. En algunas ocasiones la corriente tarda un poco en estabilizarse debido a que no hay un equilibrio entre el flujo de gas que se está admitiendo en la fuente de iones y el flujo de gas que es desalojado por el sistema de vacío. Las corrientes típicas de H^+ con las que se trabaja son del orden de 10^{-12} amperes. Esto es con el objeto de evitar procesos de saturación y

transcurre en los detectores. Una vez que se estabiliza la corriente, se admite en la celda de reacción el gas que se usará como blanco. Para este trabajo se empleó SF_6 a una presión en la celda de 4×10^{-4} torr ya que a esta presión se garantiza que el proceso se encuentra dentro del régimen de colisión simple. La presión se mide con un barómetro capacitivo que mide la presión a través de la capacitancia que hay entre una placa conductora y un diafragma que se acerca o se separa de acuerdo a la presión ejercida sobre éste.

Se supone que la temperatura del gas es la temperatura ambiente a la que se encuentra el laboratorio y que se considera generalmente como de 20°C con variaciones mínimas.

Las distribuciones angulares se realizan con la ayuda de un motor de pasos que se encarga de mover al sistema de detección. Dado que los iones H^+ que interactúan con el SF_6 lo hacen a parámetros de impacto relativamente grandes, éstos conservan casi inalteradas su energía y su masa, por lo que los ángulos de dispersión son en general pequeños y es por esto que las distribuciones angulares casi nunca se hacen a ángulos mayores a $\pm 5^\circ$ lo que equivale a ± 675 pasos del motor.

Con el analizador parabólico es posible hacer simultáneamente las distribuciones angulares para los procesos de captura electrónica simple y doble sin que ello signifique un trabajo adicional.

Con los multiplicadores de electrones se cuenta el número de partículas neutras o cargadas que se dispersaron a un determinado ángulo. Los detectores usados generan una cascada de aprox. 10^8 electrones por partícula. Con esta cascada se crea un pulso eléctrico a la salida del detector, el cual es registrado por el sistema electrónico asociado al contador y consta de un preamplificador, un amplificador

lineal, un escalador y un medidor de tiempo. Con este sistema una cuenta el número de partículas dispersadas a un cierto ángulo durante un intervalo de tiempo predeterminado.

3.3 ERRORES.

Las cantidades directamente medibles en el laboratorio y que juegan un papel importante en el cálculo de las secciones diferenciales y totales son las siguientes: Corriente total de iones que se hace incidir sobre el blanco (I_A); presión del gas que se usa como blanco, medida en la celda de reacción (P); temperatura del gas que se usa como blanco (T); longitud efectiva de la celda (l); diferencial de ángulo sólido ($d\Omega$); tiempo durante el cual se registran los productos (t) y número de productos registrados (N).

a).- Corriente de iones H^+ : Por diversas razones, muchas veces la corriente de iones que incide en el blanco no permanece constante durante el tiempo en el que se hace la distribución angular. El criterio para asignar una incertidumbre a la corriente es el de deshechar aquellos datos tomados cuando la corriente presenta una variación mayor al 10% de la lectura inicial⁽²⁵⁾.

b).- Presión del Gas: Generalmente la presión no varía significativamente mientras está corriendo el experimento, por lo que la incertidumbre porcentual se estima como del 0.1% que es la precisión dada por el fabricante⁽²⁶⁾ del barómetro capacitivo.

c).- Temperatura: La temperatura también es bastante estable ya que la construcción misma del laboratorio no permite variaciones en más del 2 %⁽²⁷⁾.

d).- Longitud efectiva: El error relativo asociado a la longitud efectiva

de la celda de reacción es del 4%.

e).- Angulo sólido: El error relativo estimado para la diferencial de ángulo sólido es del 0.1%.

f).- Tiempo: El error relativo asociado a los medidores de tiempo⁽²⁰⁾ (timers) es del 0.1%.

g).- Número de partículas: El error relativo asociado al número de partículas detectadas es $\Delta N = 1/(N)^{\frac{1}{2}}$ el cual, para $N > 16$ se hace despreciable junto a la suma de errores relativos debidos a todas las demás mediciones.

Al sumar las incertidumbres porcentuales de todas las cantidades medibles encontramos que la precisión correspondiente a las secciones diferenciales es del 16.3%.

CAPITULO IV.

4.1 RESULTADOS.

A continuación se presentan los resultados obtenidos experimentalmente, así como los encontrados al aplicar los modelos de Massey y de Rapp-Francis a los procesos de captura electrónica simple y doble del ion H^+ en SF_6 .

SECCIONES TRANSVERSALES TOTALES PARA EL PROCESO:



Resultados Experimentales.

E(KeV)	$\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-16}$
1	4.7
2	6.2
3	8.3
4	9.3
5	13

Resultados obtenidos al aplicar el modelo de Rapp y Francis.

$$\sigma(v) = \frac{1}{2} \int_0^{b_1} \text{Sech}^2 \left[\left(\frac{\omega}{v} \right) (a_0 \pi b / \gamma)^{\frac{1}{2}} \right]^2 2 \pi b \, db$$

con $f = 1$, $\gamma = (1/13.6)^{1/2}$, $I = 14.65 \text{ eV}$, $I_{SF_6}^+ = 15.7 \text{ eV}$, $I_H^+ = 13.6 \text{ eV}$.
 $\Delta E = 2.1 \text{ eV}$.

$E(\text{KeV})$	$b_1(\text{\AA})$	$\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-16}$
0.5	2.80	8.61
1.0	2.50	8.31
2.0	2.22	7.17
3.0	2.06	6.34
4.0	1.94	5.73
5.0	1.85	5.25

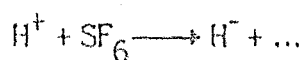
Resultados obtenidos al aplicar el modelo de Massey.

$$\sigma(v) = A \exp \left[-B \sigma |\Delta E| / \hbar v \right]$$

$A = 2.9607242 \times 10^{-15}$, $B = 22.663543$, $\sigma = 7 \text{ \AA}$, $\Delta E = 2.1 \text{ eV}$.

$E(\text{KeV})$	$\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-15}$
1	4.7
2	8.057
3	10.231
4	11.796
5	13.0

SECCIONES TRANSVERSALES TOTALES PARA EL PROCESO:



Resultados experimentales

E (KeV)	$\sigma (\text{cm}^2) \times 10^{-18}$
1	0.295
2	1.65
3	4.08
4	6.65
5	8

Resultados obtenidos al aplicar el modelo de Rapp y Francis.

$$f = 1, I_{\text{SF}_6}^+ = 15.7 \text{ eV}, I_{\text{SF}_6}^{++} = 17 \text{ eV}, E_A(\text{H}) = 0.75 \text{ eV}.$$

$$\Delta E = 2.65 \text{ eV}.$$

E (KeV)	$b_1 (\text{\AA})$	$\sigma (\text{cm}^2) \times 10^{-16}$
0.5	2.96	2.52
1.0	2.64	4.37
2.0	2.30	5.29
3.0	2.10	5.22
4.0	1.97	4.96
5.0	1.87	4.67

Resultados obtenidos al aplicar el modelo de Massey.

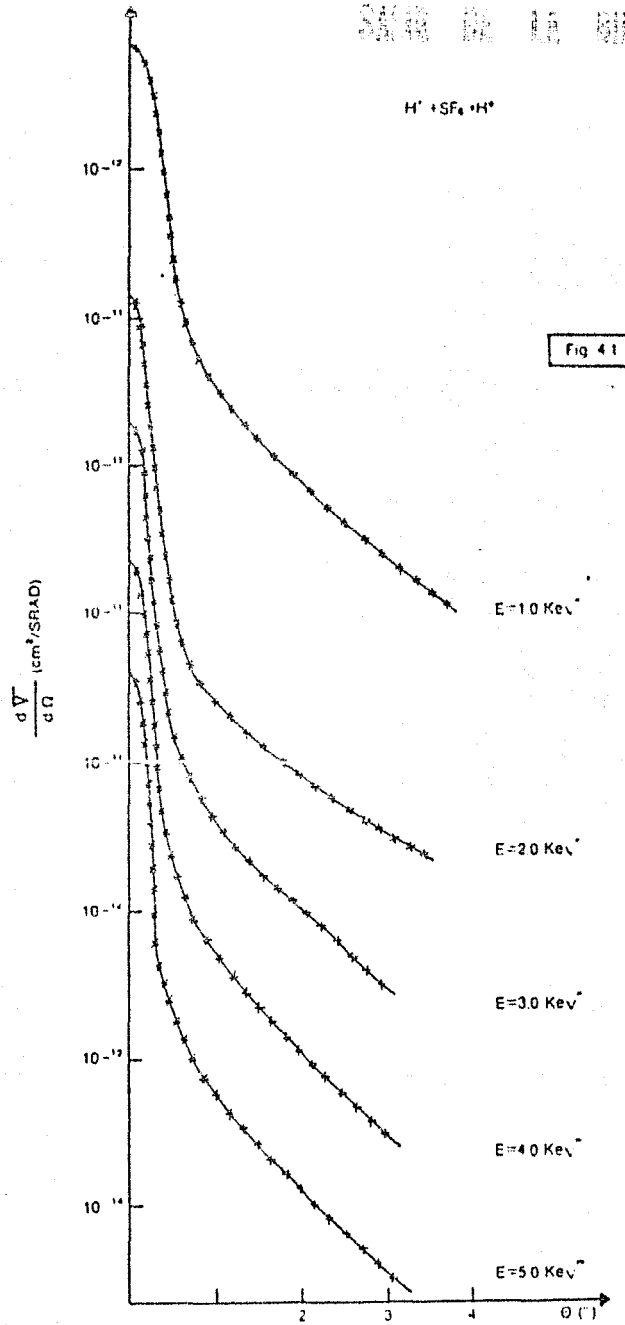
$$A = 1.1550796, B = 20.390441, a = 2 \text{ \AA}, \Delta E = 2.65 \text{ eV}.$$

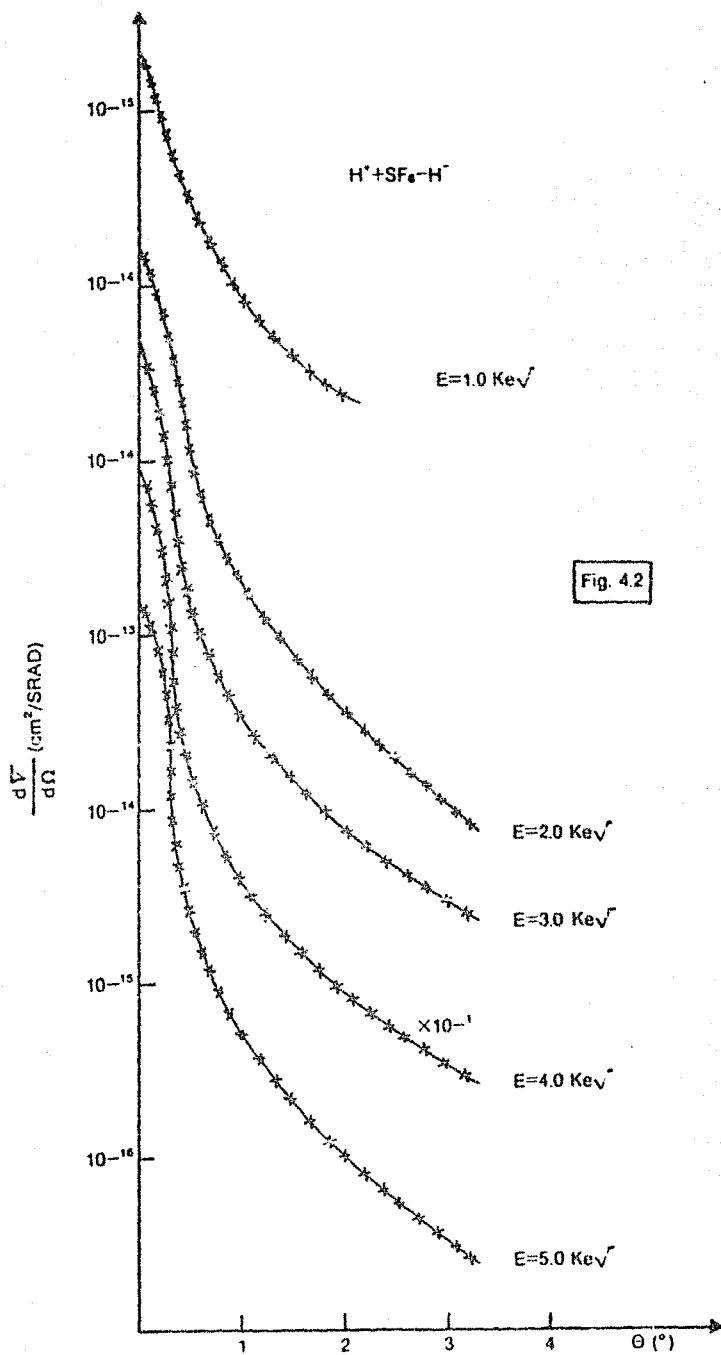
$E(\text{KeV})$	$\sigma(\text{cm}^2) \times 10^{-18}$
1	0.295
2	1.695
3	3.678
4	5.837
5	8.000

En las figuras 4.1 y 4.2 se presentan las gráficas de las secciones diferenciales en ángulo sólido para los procesos $\text{H}^+ + \text{SF}_6 \longrightarrow \text{H}^0$ y $\text{H}^+ + \text{SF}_6 \longrightarrow \text{H}^-$ respectivamente.

En las figuras 4.3 y 4.4 se presentan las secciones transversales totales para los procesos de captura electrónica simple y doble de H^+ en SF_6 .

$H^+ + SF_6 \rightarrow H^+ + SF_6^+$





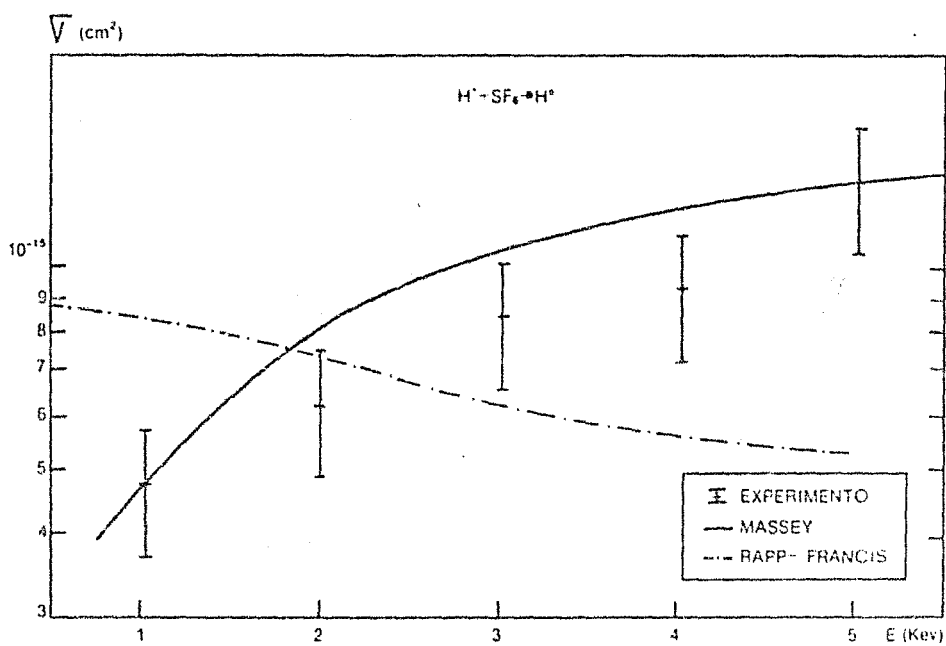


Fig. 4.3

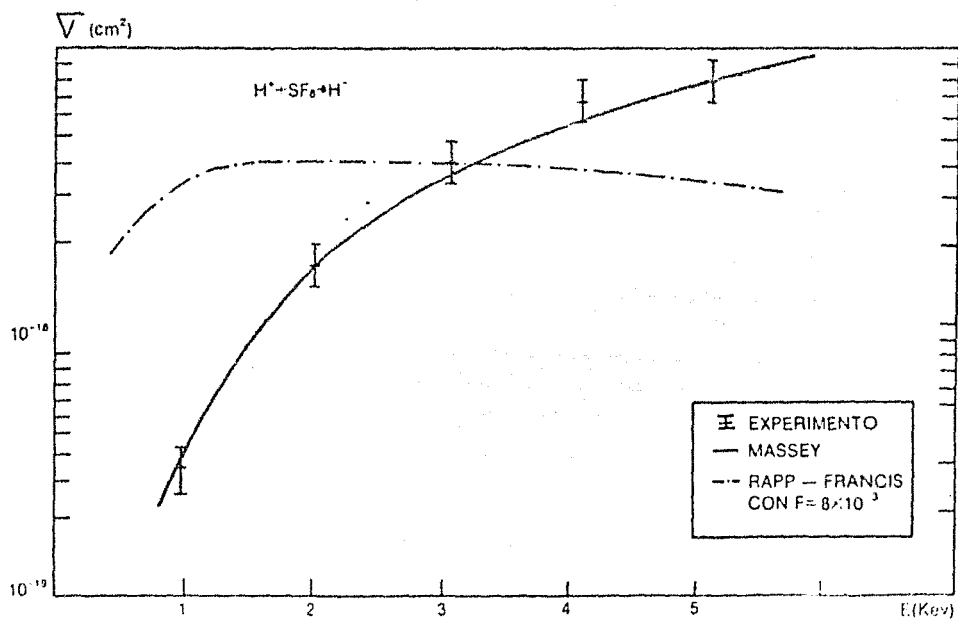


Fig. 4.4

CAPITULO V.

CONCLUSIONES.

Como se muestra en las figuras 4.1 y 4.2, las distribuciones angulares presentan un máximo a cero grados y decrecen monótonamente con el ángulo, no observándose ninguna estructura ni punto de inflexión a ángulos mayores a 0° . Esto indica que la máxima producción de partículas neutras o negativas se presenta a un ángulo de dispersión cero para las energías comprendidas en el intervalo de 1 Kev a 5 Kev.

De la figura 4.3 se puede observar que las secciones calculadas usando el modelo de Massey se ajustan razonablemente con los resultados experimentales en los cuales la sección aumenta directamente con la energía; mientras que el modelo de Rapp y Francis predice secciones del orden de magnitud pero su comportamiento es diferente ya que en este caso la sección decrece cuando la energía de aceleración aumenta.

De la figura 4.4 se puede ver que el modelo de Massey se encuentra en buen acuerdo con los resultados experimentales de doble captura electrónica en todo el intervalo de energías estudiado; mientras que el modelo de Rapp y Francis predice secciones tres órdenes de magnitud mas grandes que las experimentales y un comportamiento completamente diferente.

De lo anterior se puede concluir que el modelo de Massey se ajusta razonablemente bien con los resultados experimentales de los procesos

de simple y doble captura electrónica lo que indica que este experimento se realizó en un intervalo de energías correspondiente a la región adiabática.

El modelo de Rapp-Francis aplicado al proceso de captura electrónica simple, cuantitativamente es una buena aproximación, mientras que para doble captura electrónica este modelo no da un cálculo teórico adecuado. Esto era de esperarse si se toman en cuenta los siguientes aspectos:

1.- Este modelo está hecho para procesos de captura electrónica simple, por lo cual no tiene que ajustarse a un proceso de doble captura electrónica.

2.- Rapp y Francis en su trabajo sólo consideran colisiones del tipo: ion atómico — átomo y en este trabajo se considera la colisión del ion atómico H^+ con un blanco molecular formado por SF_6 . Aquí es importante decir que al hacer el cálculo de ΔE para el proceso de doble captura electrónica, se consideró siempre que durante la colisión, la molécula de SF_6 no sufría disociación. Las razones por las que se hizo esta suposición fueron las siguientes: i).- Después de la colisión no sabemos qué es lo que ocurre con la molécula de SF_6 ; es decir, si se disocia o no y si esto ocurre, de qué manera.

ii).- Al pretender aplicar un modelo en el que se supone que los reactantes y productos son átomos y átomos ionizados, es preferible pensar en la molécula de SF_6 como un "átomo grande" y olvidar las colisiones que involucren disociación del blanco.

3.- Este modelo sólo considera los estados electrónicos más bajos de los reactantes y productos y esta condición no se puede asegurar en el experimento, ya que en la colisión se pueden formar átomos H excitados

electrónicamente.

Por último se dirá que estos resultados no se pudieron comparar con otros trabajos experimentales ya que éste es el primer reporte sobre secciones transversales diferenciales en ángulo y totales para los procesos de doble y simple captura electrónica a partir de la colisión de H^+ en SF_6 y en el intervalo de energías de 1 a 5 KeV.

R E F E R E N C I A S.

- 1.- H. Cady G., In *Advan. Inorg. Chem. Radiochem.* 2, 105-157, (1960).
- 2.- Sell J.A. and Kuppermann A., *Chem. Phys.* 33, 379-383, (1978).
- 3.- Tang R. and Callaway J., *J. Chem. Phys.* 84 (12), 6854, (1986).
- 4.- E.W. McDaniel, *Collision Phenomena in Ionized Gases* John Wiley and Sons Inc. London, New York, Sidney, 1964, P.240-242.
- 5.- J. B. Hasted, *Phys. of Atomic Collisions*, Butterwoth, London 1972.
- 6.- J. B. Hasted, *Proc. Roy. Soc. A*-227, 466, (1955).
- 7.- Ia. M. Fogel', *Soviet Phys. JETP* 35 (8), 390, (1959).
- 8.- Valyi L., *Atom and Ion Sources* John Wiley and Son's. P.58-60, (1977).
- 9.- G. F. Drukarev, *Soviet Phys. JETP* 10, 603, (1960).
- 10.- D. Rapp and W. E. Francis, *The J. of Chem. Phys.* 37, 11, (1962).
- 11.- M. Grizinski, *Phys. Rev.* 115, 374, (1959).
- 12.- D. R. Bates and R. Mc. Carrol, *Proc. Roy. Soc. (London)* A-245, 175, (1958).
- 13.- E. F. Gurnee and J. L. Magee, *J. Chem. Phys.* 26, 1237, (1957).
- 14.- R. A. Mapleton J., *Theory of Charge Exchange* Wiley & Sons. Inc. 1972.
- 15.- A. Dalgarno, *Phil. Trans. Roy. Soc. A*-250, 426, (1958).
- 16.- D. R. Bates and N. Lynn, *Proc. Roy. Soc. (London)* A-253, 141, (1959).
- 17.- N. Rosen and C. Zener, *Phys. Rev* 40, 502, (1932).
- 18.- I. Alvarez y C. Cisneros, *Rev. Mex. Fis.* 27, 2, (1981).

- 19.- " Técnicas de Vacío ", manual Lab. II Fac. Ciencias UNAM.
- 20.- J. F. O'Hanlon, A Users Guide to Vacuum Technology John Wiley and Sons 1980.
- 21.- Gutiérrez L., Tesis de Licenciatura, Fac. de Ciencias UNAM, 1987.
- 22.- Martínez H., Tesis de Licenciatura, Fac. de Ciencias UNAM 1981.
- 23.- G. A. Harrower, The Rev. of Scientific Instruments 26, 9, (1955).
- 24.- D. A. Crandall et al., Rev. of Scientific Instruments 46, 562, (1975).
- 25.- I. Álvarez Información personal.
- 26.- Manual MKS Baratron Electronic Pressure Meter Type 114.
- 27.- León Rossano L. M., Tesis de Licenciatura Fac. de Ciencias UNAM, 1982.
- 28.- Manual Ortec Timers Mod. 719.