UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

(1-56) 20 Todo 78 - 9 his

FACULTAD DE CIENCIAS

DISTRIBUCIONES ANGULARES Y SECCIONES TOTALES PARA LA FORMACION DE D A PARTIR DE LA INTERACCION DE  $D_2^+$  CON Cs

TESISQue para obtener el grado deDOCTOREN CIENCIAS (FISICA)presentaMARIA DEL CARMEN CISNERO GUDIÑO

1976



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

# DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

## CONTENTO

## I.- Introducción

- A) Significado Práctico
- B) Significado Teórico

### II.- Aparatos y Medidas

- (A) Descripción General
- B) Celda de Cesio
- C) Sistema de Detección
- D) Procedimiento
- E) Errores

## III.- Resultados Experimentales

# IV.- Teoría

- (A) Probabilidad de captura electrónica
- .B) Teoría de las Distribuciones Angulares

## V.- Resultados y Discusión

#### VI.- Conclusiones

#### I.- INTRODUCCION

## A. SIGNIFICADO PRACTICO.

La formación de haces de iones negativos ha sido por mucho tiempo de gran interés en aceleradores electrostáticos tipo tandem, Sin embargo últimamente el interés se ha extendido a otros campos tales como las fabricas de mesones, la implantación de iones de alta energía, estudios de superficies, simula ción de daño por neutrones en materiales de reactores y el calentamiento de plasmas en reactores de fusión. Un método propuesto recientemente para calentar un plasma toroidal magneticamente confinado, <sup>1</sup> a temperaturas mayores que 10s que se obtienen por calentamiento ohmico es inyectar átomos de deuterio de 150-1000 keV. Esos átomos son ionizados y transfieren ener gia al plasma Maxweliano, de baja energia, a través de colisio nes Coulombianas, calentando de esta manera al plasma. Las secciones para la formación de D<sup>o</sup> en el rango de energía necesaria para el calentamiento del plasma son muy pequeñas tanto por captura electrónica como por colisiones disociativas. Con objeto de obtener suficiente cantidad de atomos de deuterio se ha sugerido obtener iones D a baja energía, acelerarloga 150-1000 keV y pasar los iones negativos a través ∴ de una celda de gas para despojar a los iones de su electrón extra. La eficiencia para la conversión de  $D^-$  en  $D^0$  en dicha celda es 70 a 80%.

Existen dos metodos para la producción de haces de D (1) Extracción directa de una fuente de iones. (2) El paso de D<sup>o</sup>, D<sup>+</sup>, D<sub>2</sub><sup>+</sup> o D<sub>3</sub><sup>+</sup> a energías de 1 a 5 keV a través de celdas de vapores alcalinos que tienen una al ta eficiencia para la formación de D<sup>-</sup>. Hasta hace poco la cantidad de iones D<sup>-</sup> resultantes, usando este método han sido muy modestas.<sup>2</sup> Las secciones para la producción de D<sup>-</sup> por captura electrónica han sido medidas por varios investigadores.<sup>3-6</sup> Los iones formados de esta manera deben ser acelerados a energías mayores antes de llegar a la celda de neutralización. Luego parece que la forma más atractiva de obtener haces intensos de D<sup>-</sup> es a través de colísiones de captura electrónica de iones de deuterio con vapores de Cs.

Si D<sup>-</sup> debe ser acelerado eficientemente es necesario conocer la distribución angular de tales iones que emergen de la celda de vapor, con objeto de optimizar la geometría de dicha celda así como la óptica del haz.

Por las razones expuestas anteriormente las secciones para la producción de haces de iones negativos presentan un gran interés tanto práctico como académico.

#### B. SIGNIFICADO TEORICO

En este trabajo se presenta la medida de las secciones diferenciales y totales para la producción de iones negativos y átomos neutros que resultan de simple y doble captura electrónica a estados disociativos por atomos hidrogénicos en vapores de Cs. Ya que este estudio fue motivado por el interés en la producción de D para su uso en calentamiento de plasmas por inyección, <sup>7,8</sup> los datos experimentales que se reportan son para  $D_2^+$ ; incidente en Cs. Sin embargo la descripción teórica indica que a las mismas velocidades incidentes no debe ha ber diferencia, entre  $H_2^+$  y  $D_2^+$  ni electrónica ni cinemati camente. Esos dos son intercambiables, pero la teoría predice una diferencia en las distribuciones angulares que resultarían de  $HD^+$  en Cs. Específicamente, las secciones experimentales reportadas son para colisiones simples del tipo:

$$D_2^+$$
 (X'  $\Xi_g^+$ ) + Cs -  $D_2^o$  (estado repulsivo) + Cs<sup>+</sup>  
-  $D_2^-$  (estado repulsivo) + Cs<sup>2+</sup> (1)

en el rango de energías de 1 a 5 keV. Los estados repulsivos involucrados, se espera, que sean el estado  $b^3 \sum_{u}^{+} para D_2^{\circ} y$  el  $(b + e^{-})^2 \sum_{g}^{+} para D_2^{-}$  (estos son los estados repulsivos de menor energía)<sup>9</sup>; los resultados experimentales son consistentes con dichas asignaciones.

La captura electrónica puede llevarse a cabo a separaciones relativamente grandes donde las fuerzas de dispersión entre los dos sistemas que coliden son débiles.

Por tanto el centro de masa del ion molecular incidente sufre una deflección despreciable. Sin embargo si la captura electrónica tiene lugar a un estado repulsivo del sistema molecular los fragmentos de disociación se encontrarán a ángulos substanciales, (típicamente a algunos grados) de la dirección del haz incidente debido a la componente transversal de la velocidad proveniente del proceso de disociación.

Dicha velocidad es fuertemente dependiente de la separación internuclear en el ion molecular al tiempo de la captura electrónica. Luego la distribución angular de los fragmentos de disociación pueden proporcionar una valiosa información de la dependencia de la sección de captura electrónica  $O_c$ , respecto a la separación internuclear del ion molecular en el mo mento de la captura electrónica. Ya que sólo la componente transversa de la velocidad de disociación afecta las distribuciones angulares, se puede obtener también información sobre la dependencia de la sección de captura electrónica respecto a la orientación del ion molecular en el momento de la captura electrónica.

El aparato y las técnicas experimentales se describen en el capítulo II, los datos experimentales se presentan en el capítu lo III. El capítulo IV da la teoría de la distribución angular de los fragmentos de disociación lo que proporciona una considerable cantidad de información concerniente a la sección de captura electrónica a estados disociativos. Dicha sección puede ser obtenida a partir de la distribución angular de los productos de disociación.

## II.- EQUIPO Y MEDIDA

# A) DESCRIPCION GENERAL

El aparato mostrado en la figura 1 es esencialmente el mis mo utilizado en el estudio de las distribuciones angulares de D proveniente de  $D^{0}$  y  $D^{+}$  en vapores de Cs.<sup>7</sup> Consiste b<u>á</u> sicamente en cuatro partes: fuente de iones, celda de neutral<u>i</u> zación, cámara de dispersión y cámara de detección.

Los iones se obtuvieron de una fuente de iones tipo Von -Ardene, se aceleraron a la energía deseada, enfocáronse y anali záronse magnéticamente después de colimarse se hicieron entrar en la celda de colisión la cual estaba llena con  $C_s$  a suficientemente baja presión para asegurar colisión simple, ahí se disociaba el ion  $D_2^+$  y se obtenían el D y D<sup>0</sup> deseados. El sistema de detección rota alrededor del eje de la celda de Cs, dicho sistema es capaz de rotar  $\frac{4}{2}45^{\circ}$  de la dirección del haz incidente sin embargo la geometría de la celda sólo per mite la detección de los fragmentos de disociación producidos hasta  $\frac{1}{2}7^{\circ}$  respecto a la dirección del haz incidente.

Entre la celda de Cs y el sistema de detección se encuentra una caja de Faraday retráctil con objeto de medir la corrien te total del haz incidente. El sistema de detección está formado por un analizador electrostático parabólico con dos dete<u>c</u> tores de dínodo continuo tipo chaneltron de embudo. Las trayectorias y abertura fueron escogidas de tal manera que la resolución angular del sistema fuera de 0.1<sup>0</sup>.

# B. CELDA DE CESIO

La celda de Cs fue hecha de un block de acem inoxidable de 3.9 cm de ancho y 2.8 cm de largo. Montado por una conec ción tipo tornillo a la celda de Cs estaba el depósito de Cs de 2.5 cm de largo por 2.5 cm de ancho, hecho también de acero inoxidable. La celda de Cs tiene una abertura de entrada circular de 1 mm de diámetro con bordes tipo filo de cuchillo con objeto de minimizar la dispersión por aberturas, la abertura de salida fué hecha en la misma forma que la de en trada pero sus dimensiones fueron 2 x 6 mm : La celda fue calentada por cuatro resistencias de tantalio enrolladás en barras de cuarzo y puestas en cuatro cavidades a lo largo del block de acero inoxidable. Con la conección tipo tornillo la temperatura en la cámara de colisión fue siempre un poco mayor que la del depósito de Cs, de tal manera que la densidad de vapores de Cs fue determinada a partir de la temperatura del depósito.

La temperatura fue medida por medio de dos termopares de chromel-alumel, colocados uno en la celda y el otro en el depósito de Cs. Los termopares fueron calibrados a 100 y a  $0^{\circ}$ C. La medida de la temperatura fue hecha con una exactitud de menos de  $0.5^{\circ}$ C. Los datos fueron tomados para temperaturas en el depósito de 75 a  $150^{\circ}$ C. La densidad del vapor de Cs fue calculada a partir de los datos disponibles sobre presiones de vapor  $10^{-12}$ . Dichos datos fueron graficados y se les ajustó la mejor curva, figura 2, usándose esos valores para relacionar la temperatura con la densidad del vapor.

Sujetas a los lados de la celda de colisión estaban dos placas de cobre enfriadas por agua que reducian rápidamente la temperatura de la celda cuando se hacía correr agua a través de ellos. Con objeto de prevenir al sistema de vacio y detección de la contaminación por Cs la celda y el horno fueron puestos dentro de un cilindro enfriado por agua de 12 cm de diámetro. El sistema completo fue bombeado por una bomba de difusión enfriada por nitrógeno líquido. Para presiones de vapor de Cs de  $10^{-3}$  Torr la presión en los alrededores de la celda fue menor que 5 x  $10^{-7}$  Torr.

### SISTEMA DE DETECCION

С.

El sistema de detección está descrito ampliamente en  $^{13,14}$ e incluye una caja de Faraday- detector de emisión secunda ria. La cual puede medir tanto el flujo de  $D_2^+$  como  $D^+$  o  $D^0$ , el flujo de  $D^0$  es medido determinando primero el coeficiente de emisión secundaria para  $D^+$  en el blanco de cobre y luego

7.-

suponiendo que el coeficiente de emisión secundaria fue el mis mo para D<sup>+</sup> y D<sup>0</sup> en este rango de energías <sup>15</sup>. El coeficiente de emisión secundaria fue medido frecuentemente y cuan do se observaron cambios mayores del 10% en los valores promedio el detector fue limpiado completamente.

El analizador parabólico de 45<sup>0</sup> ha sido descrito por " Harrower 16. Se hizo un corte en la placa posterior del analizador de tal manera que el haz neutro entrara por una abertura de 1mm de diámetro y fuera monitoreado. Tanto la componente neutra como la componente cargada fueron contadas por un detector tipo channeltron. Ya que el haz total fue medido por un detector de emisión secundaria se tomaron cuidadosas. precausiones en convertir los iones D' contados a flujo de corriente. Así mismo la eficiencia del channeltron para detec tar D fue calibrada comparando un haz de D de intensidad conocida con el conteo del channeltron 17. La figura 3 muestra la eficiencia del channeltron como función de la energía para D y D' cuando el frente del detector está a tierra y el colector se mantiene a -3keV. Además el frente del multiplicador fue cubierto con una rejilla de transmisión 94% para asegurar una respuesta uniforme sobre toda la abertura del mul. tiplicador. Los datos que se presentan han sido corregidos por este factor de transmisión.

### D. PROCEDIMIENTO

La cantidad medida designada por Ed o c/dw (donde f repre-

senta cualquier fragmento  $D^{-}, D^{+}, o D^{0} + D_{2}^{0}$ ) está definida por

$$\frac{d\sigma_{f}}{d\omega} = \frac{I_{f}(\theta, \phi)}{I_{o}n\ell} \qquad ($$

donde  $I_f(\Theta, \phi)$  es el número de fragmentos del tipo f (i.e.,  $D^+$   $D^-$ , o  $D^0 + D_2^0$ ) por unidad de ángulo sólido y por segundo detectados en la dirección 9,4 respecto a la dirección del haz incidente, I es el número de iones  $D_2^+$  incidente por unidad de área y por segundo n es el número de átomos. de Cs por unidad de volumen y  $\ell$  es la longitud efectiva de la cámara de dispersión. Aunque d $\sigma_{f/}$ d $\omega$ , formalmente parece una sección diferencial y se mide como tal no es estrictamente una sección diferencial de dispersión. Los fragmentos detecta dos a un ângulo 8 dado no han sido dispersados. El centro de masa del ion molecular incidente es deflectado solamente por una pequeña fracción de grado en colisiones de captura electrónica. El gran ángulo al cual los fragmentos son detectados es debido a la componente transversa de la velocidad que adquieren en el proceso de disociación. La cantidad definida por el lado derecho de (2) será denotada de todas maneras co debido a la terminología en uso lo cual sin em mo do<sub>c</sub>/dw bargo puede dar lugar a confusiones notacionales posteriores.

La sección total para la producción de fragmentos del tipo fe se obtiene por integración de d $\sigma_f/d\omega$  sobre todos los angulos sólidos,

y esta es una sección total en el sentido estricto.

 $\sigma_f = 2\pi \int_0^{\pi} \frac{d\sigma_f}{dw} \sin \theta d\theta$ 

Se llevaron a cabo diferentes medidas a diferentes presiones de vapor bajas y se determinó  $d\sigma_f/d\omega$  para cada una de ellas, a partir de la ecuación (2). Los resultados fueron com parados con objeto de estimar la reproducibilidad de los resul tados experimentales así como para determinar la región de colisión simple, la figura 4 muestra los resultados para una energía dada y tres conjuntos de datos completamente diferentes (se cambiaron tanto lo como n). Se observa que los resultados experimentales se encuentran dentro del error experimental del 27%, debido a errores sistemáticos que se describen a continuación.

E. ERRÓRES

Existen varias fuentes de error. Se han considerado las si guientes como posibles causas de error sistemático: (1) la lon gitud efectiva de la celda de interacción, (2) la determinación de la densidad (3) la medida del haz total (4) los límites de integración (5) la dispersión en energía del haz dispersado (6) la calibración de los detectores. Debido al flujo de Cs por

10.

las aberturas de la celda de interacción de trayectoria geomé trica del haz dentro de dicha celda debe ser aumentada. Esta longitud se ha corregido tradicionalmente por la suma del diá metro de la abertura de entrada y un diámetro efectivo de la abertura de salida, el cual es definido como el diámetro de un círculo cuya área es igual al área de la abertura. Con esta corrección la longitud efectiva fue de 3.03 cm, lo cual significa un 19% de corrección en la longitud. Con esta corrección el error en la longitud de la celda se estima que no mayor del -4%. La mayor fuente de error en las presentes me didas proviene de la determinación de la densidad del Cs la cuantificación de dicho error es muy difícil probablemente la mejor estimación puede provenir de la dispersión de los datos presentados en la figura 2. A 105°C la dispersión en los da tos de presión de vapor es de <sup>+</sup>23%. La incertidumbre en la temperatura aumenta un -2% a dicho error dando una incerti dumbre total de  $\frac{1}{25}$ . Al determinar la intensidad de  $D_2^{\dagger}$ incidente se hizo la suposición de que el coeficiente de emisión secundaria de  $D^{\dagger}$  y  $D^{\circ}$  era el mismo a la misma energía medidas previas 11 indican que el coeficiente de emisión secundaria para H<sup>o</sup> es mayor que para H<sup>+</sup> para energías mayores de 20 keV. Extrapolando esos datos a las energías a las que se han realizado estos experimentos indican que se ha subestimado el flujo de D<sup>O</sup> por un 5%. Al integrar la sección. diferencial, ecuación 3, se ha tomado como límite superior

11.

el ángulo máximo que permite la geometría utilizada y no  $\pi$ , sin embargo la contribución de ángulos mayores es muy pequeña y por tanto no se ha hecho ninguna corrección por este he cho.

12.

Las secciones pudieron ser subestimadas si la ventana de energía del detector era menor que la dispersión en energías del haz. Sin embargo se hicieron varias pruebas que mostraron que todas las particulas estaban siendo medidas por el detector. La calibración del detector está probablemente dentro de un 3% de. Por tanto el error total se ha estimado como del 26%.

#### III. RESULTADOS EXPERIMENTALES

Los datos fueron tomados para D producido en colisiones simples de  $D_2^+$  a 1, 2, 3, 4 y 5 keV en Cs. El D detectado en cada uno de los casos fue de la mitad de la energía del ion molecular incidente. Las diferencias de energía debidas a las energías de disociación no son observables dada la reso lución del analizador. La figura 5 muestra las "secciones diferenciales" absolutas que se obtuvieron a cada una de las energías estudiadas. A 2 keV de energía del ion molecular incidente se midieron también las distribuciones angulares de  $D^+$ , y  $D^0$  +  $D_2^0$  además de la de  $D^-$ . Los resultados se muestran en la figura 6. En el caso de la componenete neutra no fué posible separar  $D^{O}$  de  $D_{2}^{O}$  dadas las características del analizador. Sin embargo se espera que la componente  $D_2^0$  sólo contribuya a la distribución angular a ángulos pequeños ( 1°) dado que dicha componente proviene sólo de la dispersión pro piamente dicha. Se ha mostrado que en las colisiones de captura electrónica / la dispersión es menor de un grado.

La figura 7 muestra los ángulos dentro de los cuales el 50% y el 90% de las partículas, D<sup>-</sup>, son dispersadas como función de la energía. Dichas cantidades son de gran utilidad en el diseño de dispositivos para producir haces de iones negativos ya que proporcionan un criterio para la dispo

13.-

sición geométrica de las celdas de colisión.

Los resultados mostrados en la figura 7 se determinan a partir de las curvas  $I(\Theta)$  sen  $\Theta$  vs.  $\Theta$ . Un ejemplo de la forma que dichas curvas adoptan se muestra en la figura 8 para una energía incidente de 2keV.

14

Las secciones totales para la formación de D<sup>-</sup> a partir de  $D_2^+$ , se obtuvieron integrando las secciones diferenciales usando la ecuación (3). La figura 9 muestra los valores de dichas secciones junto con lo que se obtuvieron para D<sup>-</sup> producido a partir de D<sup>+</sup> y D<sup>O 7</sup> a la misma energía por deuterón. La sección para la formación de D<sup>O</sup> + D<sub>2</sub><sup>O</sup> a 2 keV fue 9.8 x 10<sup>-15</sup> cm<sup>2</sup>.

## IV. TEORIA

## A) PROBABILIDAD DE CAPTURA ELECTRONICA

Antes de que cualquier proceso de transferencia de carga pueda ser considerado seriamente en colisiones a baja energía un cruzamiento o un cruzamiento cercano de los niveles de los estados moleculares involucrados debe ser demostrado. En el presente caso existen estados moleculares del ion molecular triatómico (Cs  $H_2$ )<sup>+</sup>, en conexción con esto, en vez de H podemos tener cualquier isótopo, hidrógeno o deuterio ya que am bos son electrónicamente indistinguibles. Los estados del ion molecular triatómico que consideraremos se separan adíabaticamente en: (a)  $Cs^{0} + H_{2}^{+}$  (el estado inicial); (b)  $Cs^{+} + H_2 y (c) Cs^{2+} + H_2$ . Debido a que  $H^0 y H^{-}$  se han me dido en el experimento se considerarán los estados repulsivos  $H_2$  y  $H_2$  para los niveles  $Cs^+ + H_2$  y  $Cs^{2+} + H_2^-$ . La figura 10 muestra un conjunto de niveles aproximado en donde se incluyen dichos estados. Notese que a causa de que el ion mo lecular es triatómico se tiene una superficie de energía la cual es función de tres variables: r, la separación entre Cs-H<sub>2</sub>; R la separación entre los dos protones de H<sub>2</sub> y ángulo de orientación 🕰 , ilustrado en la figura 11. La dependencia de la energía con 🛪 es pequeña comparada con los otros dos variables, particularmente para r grande, y por tan to será despreciada.

Tomando la energía del sistema completamente disociado  $Cs^{\circ} + H^{\circ} + H^{+}$  (i.e.,  $R = r = \infty$ ) como el cero de energía la energía para diferentes estados se ha graficado y se muestra en la figura 10, como función de r, para diferentes valores de R. Las curvas se obtuvieron empezando por los valores para r =  $\infty$ . La energía para el estado Cs<sup>0</sup> + H<sub>2</sub><sup>+</sup> con r =  $\infty$  y R finita es justamente el negativo de la energía de disociación de H<sub>2</sub> para un valor dado de R. Por otra parte la energía del sistema  $Cs^{2+} + H_2^-$  a r = co es igual a la sumá de las dos primera energías de ionización del Cs (3.9 + 25.1 = 29 eV) me nos la energía de disociación y menos las dos primeras energias de ionización del estado (b + e) ${}^{2}\Sigma_{\sigma}^{+}$  del H<sub>2</sub>. Similarmente la energia del nivel  $Cs^+ + H_2^\circ (b^3 \Sigma_1^+)$  a r =  $\infty$  es igual a la primera energía de ionización del Cs, menos la energía de disociación y la primera energía de disociación del estado  $b^{3}\Sigma_{1}^{+}$  del H<sub>2</sub>. Como puede observarse en la figura 12, quien muestra energías relevantes de  $H_2^+$ ,  $H_2^0$  y  $H_2^-$ , las energías de ionización de esos estados a r = ∞ no son valores únicos, son funciones muy sensibles de la separación interpro tónica R, en el ion molecular hidrogénico. Para un valor dado de R, la energía de ionización es la diferencia entre la curva  $H_2^+$  1s  $\sigma_g$  y la curva apropiada  $H_2^-$  o  $H_2^0$ . En la figura 10 se muestran las curvas de energía graficadas como fun ciones de r para R = 0.7, 0.8, 1.0, 1.2 y 1.4 A<sup>0</sup>. Procedien-

16.-

do hacia adentro, de r =  $\infty$ , las curvas Cs<sup>0</sup> + H<sub>2</sub><sup>+</sup> y Cs<sup>+</sup> + H<sub>2</sub><sup>0</sup> permanecen practicamente constante exhibiendo una pequeña dependencia en la polarización  $- \propto /2r^4$ , hasta que el transla pe de cargas comienza a ocurrir <sup>18</sup>. Por otra parte la curva  $Cs^{2+} + H_2^-$  cae rapidamente como  $-2e^2/r$  debido a la atracción coulombiana. Cabe hacerse notar que dichas curvas no son cálculos muy exactos y que pueden ocurrir desviaciones cuando el translape de cargas comienza a ocurrir. Sin embargo son suficientemente adecuadas para indicar los cruzamientos de niveles (o pseudocruzamientos) de tal manera que la captura electrónica doble o simple a estados disociativos de H<sub>2</sub> sea posible. Se debe hacer notar que los cruzamientos que tienen realmente sentido son aquellos para los cuales las. curvas tienen las mismas R y r. Para propósitos de comparación se ha incluido en la figura 10 una curva para el estado  $Cs^{2+} + H_2^- (X + e^-)^2 \sum_{u}^{+} para R = 0.8 \text{ Å}$ . El estado  $(X+e^-)^2 \sum_{u}^{+}$ se muestra en la figura 12 para el estado atractivo H,

17.

Para captura electrónica simple los estados principales del ion molecular  $(CsH_2)^+$  son el estado inicial  $Cs^0 + H_2^+$  y el estado final  $Cs^+ + H_2^0$ , los cuales están ilustrados en la figura 10. En este caso la molécula  $H_2^0$  está en el estado repulsivo  $b^3 \Sigma_u^+$  ((1so, 2po), mostrado en la figura 12. Las curvas de energía para el estado base atractivo del  $H_2^0$  caen muy abajo del estado repulsivo y por tanto no se muestran en la figura 10. La variación de la energía del estado  $Cs^+ + H_2^{o}$ con r es del tipo  $- \propto /2r^4$ , la energía de polarización; pero ya que la polarizabilidad de  $H_2^{o}$  es pequeña la variación en energía es también muy pequeña.

Se observa que el estado  $Cs^+ + H_2^0$   $(b^3 \Sigma_u^+)$  exhibe cruzamiento de niveles con el estado inicial pero solamente cuando la distancia interprotón es pequeña al momento de la colisión. Luego se espera que la captura de un solo electrón ocurra para valores de R  $\leq 0.8$  Å.

También se puede ver de la figura 10 que las curvas de ener gia para el estado inicial  $Cs^{0} + H_{2}^{+}$  cruzan las curvas corres pondientes al estado  $Cs^{2+} + H_{2}^{-}$  de tal manera que es posible la doble captura electrónica en un solo proceso. Sin embargo como veremos más tarde los datos sugieren que el mecanismo de doble captura electrónica es proceso de dos pasos. Primero de un cruzamiento del estado  $Cs^{0} + H_{2}^{+}$  con un estado  $Cs^{+} + H_{2}$  se transfiere un electrón del Cs al ion molecular. A medida que r decrece, durante el encuentro, el nivel  $Cs^{+} + H_{2}$  cruza el nivel  $Cs^{2+} + H_{2}^{-}$  y se transfiere un segundo electrón ocurriendo todo el proceso de dos pasos en una sola colisión.

BL. TEORIA DE LAS DISTRIBUCIONES ANGULARES

En esta sección se trata la distribución angular de los productos de disociación cuando la captura electrónica lleva a un estado repulsivo de  $H_2^-$  o  $H_2^0$  (o  $D_2^-$  o  $D_2^0$ ). Se intenta presentar en esta sección una interpretación de los datos observados partiendo de las siguientes suposiciones generales:

1.- El proceso de captura es rápido comparado con el movimiento vibracional y rotacional. Esta suposición se basa en el hecho de que para la menor energía incidente usada en este experimento el tiempo de interacción es aproximadamente de  $10^{-15}$  seg, mientras que los periodos vibracionales son del orden de  $10^{-14}$  seg. y los periodos rotacionales son del orden de  $10^{-12}$  seg. Por tanto se puede considerar que el ion molecular incidente tiene orientación y separación R fijas durante el proceso de captura electrónica.

2.- Las energías de disociación (que dan lugar a los com ponentes de la velocidad a lo largo del eje interprotónico), son grandes comparadas con las energías rotacionales por tan to éstas pueden ser despreciadas y los productos de disociación serán emitidos en la dirección de la línea que une los dos protones al momento de la captura.

3.- Todas las orientaciones de H<sub>2</sub>, son igualmente pr<u>o</u> bables.

4.- Las velocidades de disociación son pequeñas comparadas con las velocidades de haz incidente. Ya que las energías de disociación son del orden de 5eV y las energías del haz incidente son de 1 keV esta aproximación es adecuada.

5.- El centro de masa del ion molecular incidente sufre una delfexión despreciable debido al proceso de la colisión.

La figura 13 ilustra el procedo de disociación. El ion tiene una velocidad v<sub>i</sub> y una energía E<sub>i</sub>. Al disociar-H\_' se cada uno de los fragmentos de disociación adquiere una velocidad  $\vec{v}_d$  y  $-\vec{v}_d$  respectivamente en el sistema del centro de masa de H<sub>2</sub>, donde  $\vec{v}_d$  es paralela al vector de separación interprotónica R, al tiempo del proceso de captura. El vector R hace un ángulo 🗢 respecto al eje z positivo, que coin cide con la dirección del haz incidente, mientras que 🤷 👋 es el ángulo azimutal en el plano x-y. Las medidas se hicieron en sistema de laboratorio de tal manera que es necesario obte ner las velocidades  $v_1 y v_2 y$  las direcciones  $\theta$ ,  $\phi$ , én, el sistema de laboratorio en términos de  $\Theta$ ,  $\check{\Phi}$  en sistema de centro de masa

Dado que la velocidad relativa de los dos sistemas de referencia es enteramente en dirección del eje z se sigue que:

 $\phi_1 = \phi_2$ ,  $\phi_2 = \pi + \phi_2$  (4)

Ya que  $v_d \ll v_i$ , se tiene de la ley de los senos:

$$\frac{\operatorname{sen} \Theta}{\operatorname{v}_{d}}^{1} = \frac{\operatorname{sen} \Theta}{\operatorname{v}_{1}}, \quad \frac{\operatorname{sen} \Theta}{\operatorname{v}_{d}}^{2} = \frac{\operatorname{sen} \Theta}{\operatorname{v}_{2}}, \quad (5)$$

Y de la ley de los cosenos:

$$v_{1} = (v_{1}^{2} + v_{d}^{2} - 2v_{1}v_{d} \cos\Theta)^{\frac{1}{2}} \simeq v_{1} - v_{d} \cos\Theta \simeq v_{1},$$

$$v_{2} = (v_{1}^{2} + v_{d}^{2} + 2v_{1}v_{d} \cos\Theta)^{\frac{1}{2}} \simeq v_{1} + v_{d} \cos\Theta \simeq v_{1},$$
(6)

Usando (5) con la aproximación (6)

$$\operatorname{sen} \Theta_{1} = \operatorname{sen} \Theta_{2} = \frac{v_{d}}{v_{1}} \operatorname{sen} \Theta = \left(\frac{E_{d}}{E_{i}}\right)^{2} \operatorname{sen} \Theta, \qquad (7)$$

Donde E<sub>d</sub> es la energía de disociación y E<sub>i</sub> es la energía del haz incidente. Cada uno de los fragmentos resultará con la mitad de la masa y la mitad de la energía de tal manera que:

$$= \frac{\left(\frac{2E_{d}}{2M}\right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\frac{2E_{i}}{2M}\right)^{\frac{1}{2}}} = \left(\frac{E_{d}}{E_{i}}\right)^{\frac{1}{2}},$$

(\$)

Un resultado que es independiente del proyectil que se trate,

Como consecuencia de (4) y (7), se sigue que la relación entre Ángulos infinitesimales está dada por:

$$\mathbf{d} \mathbf{\phi}_1 = \mathbf{d} \mathbf{\phi}_2 = \mathbf{d} \mathbf{\phi}_3;$$

$$1\Theta = (E_1/E_d)^2 \quad \frac{\cos \Theta}{\cos \Theta} \quad \frac{d \Theta}{1} = (E_1/E_d)^2 \quad \frac{\cos \Theta}{2} \quad \frac{d \Theta}{2}.$$

Ahora como  $\theta_1$  y  $\theta_2$  son pequeñas, las aproximaciones:

$$\sin \theta_1 \sim \theta_1$$
,  $\sin \theta_2 \sim \theta_2$ ,

 $\cos \theta_1 \sim 1$ ,  $\cos \theta_2 \sim 1$ , (10)

son validas.

 $H_2^{T}$ 

n D<sub>2</sub>

Nóteses que  $\bigcirc$  no es pequeña, puede tomar cualquier valor de 0 a  $\pi$ , es el cociente  $(E_d/E_i)^{\frac{1}{2}}$  lo que hace a  $\vartheta_1$  y  $\vartheta_2$  pequeñas). De las ecuaciones (7)-(9) se sigue que:

$$\operatorname{sen} \Theta \ \mathrm{d} \Theta \ \mathrm{d} \overline{\Phi} \simeq \left(\frac{\mathrm{E}_{\mathbf{i}}}{\mathrm{E}_{\mathbf{i}}}\right) \quad \frac{\operatorname{sen} \Theta_{\mathbf{i}} \ \mathrm{d} \Theta_{\mathbf{i}} \ \mathrm{d} \Phi_{\mathbf{i}}}{\cos \Theta} \simeq \left(\frac{\mathrm{E}_{\mathbf{i}}}{\mathrm{E}_{\mathbf{i}}}\right) \quad \frac{\operatorname{sen} \Theta_{\mathbf{i}} \ \mathrm{d} \Phi_{\mathbf{i}} \ \mathrm{d} \Phi_{\mathbf{i}}}{\cos \Theta} \qquad (11)$$

(9)

Ahora:

$$\cos \Theta = (1 - \sin^2 \Theta)^{\frac{1}{2}} \simeq (1 - \frac{E_1}{E_d} \Theta_1^{2})^{\frac{1}{2}}$$
$$\simeq (1 - \frac{E_1}{E_d} \Theta_2^{2})^{\frac{1}{2}},$$

De tal manera que:

$$\operatorname{sen} \otimes d \otimes d \Phi \sim \frac{(E_{i}/E_{d}) \operatorname{sen} \theta_{1} d \vartheta_{1} d \vartheta_{1}}{(1 - \vartheta_{1}^{2} E_{i}/E_{d})^{\frac{1}{2}}}$$
(13)  
$$\sim \frac{(E_{i}/E_{d}) \operatorname{sen} \vartheta_{2} d \vartheta_{2} d \vartheta_{2}}{(1 - \vartheta_{2}^{2} E_{i}/E_{d})^{\frac{1}{2}}},$$

lo cual da las relaciones necesarias entre los ángulos sólidos diferenciales en los dos sistemas. La distribución direccional de los fragmentos de disociación en el sistema de  $H_2^{0}$  o  $H_2^{-}$  está dada por:

$$dN = \sigma_c (R, \Theta, \Phi) \frac{NN_t}{4\pi} \operatorname{sen} \Theta d\Theta d\Phi$$

$$= \sigma_{c} (R, \Theta, \Phi) \frac{NN_{t}}{4\pi} d\Omega,$$

donde N y N<sub>t</sub> son respectivamente el número de moléculas inciden tes y el número de átomos en el blanco por unidad de área  $d\Omega/4W$ es la fracción orientada dentro de  $d\Omega$ ;  $\nabla_c$  es la sección di-

12

ferencial de doble captura. Este último término depende de la orientación,  $\mathfrak{G}$ ,  $\Phi - \Phi_0$ , del ion  $\mathrm{H_2}^+$  cuando pasa por el áto mo de Cs localizado en la posición azimutal  $\Phi_0$ . Más aún, la separación interprotónica R en el momento de la captura determina la velocidad de separación  $v_d$ , de cada fragmento, del centro de masa de la molécula ya que la energía de cinética de disociación es función de R. Por tanto

$$\frac{d^{2}N}{dE_{d}dR} = \frac{NN_{t}}{4\pi} \left( P^{(R)} \frac{dR}{dE_{d}} \mathcal{O}_{c}^{(R)} \mathcal{O}_{c}^{(R)} \mathcal{O}_{c}^{(R)} \right)$$
$$= \frac{NN_{t}}{4\pi} \frac{Q^{(R)}}{dE_{d}/dR} \mathcal{O}_{c}^{(R)} \mathcal{O}_{$$

Aquí  $\rho$  (R) dR da la probabilidad de que la molécula tenga una separación entre R y R + dR donde  $\rho$  (R) es precisamente el cuadrado del valor absoluto de la función de onda vibracional. La dependencia de  $B_d$  en R se puede observar en la figura 12. Para obtener la distribución angular de los fragmentos en el sistema de laboratorio basta utilizar la expresión (13) en la (14) la cual da:

$$\frac{d^{2}N}{dE_{d}d\omega} = \frac{NN_{t}}{4\pi} \frac{\rho(R)}{dE_{d}/dR} \frac{(E_{i}/E_{d}) \sigma_{c}(R, \Theta, \Phi)}{(1 - \theta^{2} E_{i}/E_{d})^{2}}, (15)$$

24.-

(14)

donde d $\omega$  = sen $\vartheta$  d $\vartheta$  d $\vartheta$ , es el ángulo sólido en sistema de laboratorio. El subíndice 1 ó 2 que identifica al fragmento ha sido omitido. La expresión (15) para el número de fragmentos es una diferencial doble, en energía de disociación y en ángulo. Ya que sólo fue madida la distribución angular este resultado debe ser integrado sobre todos las  $E_d$ , de un valor mínimo  $E_i \vartheta^2$ , que indicará que el fragmento puede verse a un ángulo \vartheta a infinito. Equivalentemente la integración pue de llevarse a cabo sobre la distancia interprotón R, ya que d $E_d = (dE_d/dR) dR$ ,

$$\frac{1}{E_{i}}\frac{dN}{d\omega} = \frac{NN_{t}}{4\pi} \int_{0}^{R_{d}} \frac{\nabla_{c}(R,\Theta,\Phi) Q(R) dR}{E_{d}^{\frac{1}{2}}(E_{d}-E_{i}\theta^{2})^{\frac{1}{2}}},$$
(16)

donde  $R_d$  es el valor de R para el cual Ed =  $E_i \theta^2$ . (Ed =  $\infty$ para R =0) El resultado final (16) debe ser promediado sobre todos los valores de  $\Phi$  ya que éste tampoco fue observado en el experimento.

La dependencia funcional de la sección de captura  $\mathcal{T}_c$  de R,  $\Theta$ ,  $\Phi$  es el punto en donde la teoría y el experimento coinciden. Los datos experimentales de dN/dw sugerirán la dependencia funcional de  $\mathcal{T}_c$  en R,  $\Theta$ ,  $\Phi$ . Esto a su vez debe dar información sobre el ion molecular triatómico (Cs H<sub>2</sub>) tal como cruzamiento de niveles.

## V RESULTADOS Y DISCUSION

26.

La teoría de la sección anterior ha considerado la distri bución angular observada en el laboratorio cuando el proceso de disociación es causado por la captura electrónica a un estado repulsivo. El resultado de la ecuación (16) da las distribuciones angulares de cualquier fragmento en términos de la orien tación ( $\Theta$ ,  $\overline{\Phi}$ ) y la dependencia en R de la sección de captura a un estado repulsivo en particular. Este resultado irá aplicado en esta sección a las distribuciones angulares observadas en es te experimento.

Sea  $\mathfrak{T}_+$  (R, $\mathfrak{S}$ ) la sección de doble captura de  $\mathbb{D}_2^-$ , y sea  $d\mathfrak{T}_-/d\mathbf{w}$  la sección diferencial para la producción de  $\mathbb{D}_-$ , ento<u>n</u> ces (16) puede escribirse en la forma:

$$\frac{1}{E_{i}}\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{4\pi} \quad \theta^{R} \frac{\sigma_{+-}(R,\Theta)}{\left(E_{d}^{-}(E_{d}^{-}-E_{i}^{-}\theta^{2})\right)^{\frac{1}{2}}}$$
(17)

La integración de (17) es sobre R,y  $\overline{o}$  y Ed son funciones solamente de R. Además de la ecuación (12) se puede observar que cualquier función de  $\Theta$  es una función de:

 $\left[\left(E_{d}^{-}-E_{i}^{-}\theta^{2}\right)/E_{d}^{-}\right]^{2}$ , lo que hace a  $\sigma_{+}$  función de  $E_{i}^{-}\theta^{2}$  y

Finalmente ya que  $R_d$  es sólo función de  $E_i \vartheta^2$  se ve que la de pendencia angular de la sección diferencial puede ser expresada en términos de las variables reducidas  $E_i^{-1} d \sigma / d \omega y E_i \vartheta^2$ como una sola curva universal para todas las energías:

$$\frac{1}{E_i} \frac{d\sigma}{d\omega} = f(E_i \Theta^2).$$
(18)

La figura 14 muestra los datos de la figura 5 regraficados en términos de las variables reducidas. Es claro entonces que las cinco suposiciones hechas en la sección IV son válidas. Adicionalmente la figura 12 testifica la consistencia y hasta cierto punto la exactitud de los datos expermientales.

Las distribuciones angulares presentan un pico muy interesante a aproximadamente 23.5 keV-grado<sup>2</sup> el cual merece atención es pecial. En conección con esto debemos recordar que la captura electrónica a un estado repulsivo no es el único mecanismo para la disociación. Existen otros cuatro procesos que pueden ser responsables de la disociación:

1.- Disociación directa por colisión violenta. Uno de los deuterones de D<sub>2</sub><sup>+</sup> colisiona fuertemente con el cesio de tal manera que es lanzado fuera de la molécula.

2. Disociación por polarización. El cambio rápido en la

27.-

polarización inducida produce una fuerza en  $D_2^{+}$  y debido al ajus te adiabático de los electrones con la separación cambiante r puede haber disociación.<sup>19</sup>

3.- Captura electrónica a un estado atractivo. El rápido cambio en la fuerza molecular puede causar excitaciones vibracionales en el continuo así como en estados vibracionales ligados.

4.- Excitación de iones moleculáres a un estado repulsivo sin captura electrónica (Este proceso por supuesto sólo puede producir fragmentos neutros y positivamente cargados)

5.- Captura electrónica a un estado repulsivo.

Los primeros tres procesos tienen una característica común que los distingue de los dos últimos. La distribución de los fragmentos de disociación de los tres primeros es grande alr<u>e</u> dedor de cero grados y decrece monotónicamente a medida que aumenta el ángulo <sup>20,21</sup>. Por otra parte el cuarto y quinto pro ceso dan lugar a distribuciones con máximo a ángulos relativamente grandes y para el caso de D sólo el último proceso pr<u>e</u> senta dicho comportamiento. Los datos experimentales claramente muestran ambas características. Por tanto con objeto de estar seguros que se está tratando con el proceso de captura electrónica a un estado repulsivo sin ambiguedad alguna el pi co que se estudió es el que aparece en la distribución angular entre 15 y 35 keV-grado<sup>2</sup>. Se debe de tener en cuenta sin embargo que no obstante que otros procesos pueden contribuir a la sección diferencial en la región de 0 a 15 keV-grado<sup>2</sup> es aún posible que esto sea debido también a captura electrónica a un estado repulsivo.

La figura 15 muestra el pico alrededor de 15 y 35 keVgrado<sup>2</sup> de la figura 14 de la cual se ha substraído el "fondo" en la misma figura se ha graficado la distribución angular que se sigue de la ecuación (17) con una dependencia en la sección de captura.

$$\mathbf{O}_{+-}(\mathbf{R}, \mathbf{\Theta}) = \begin{cases} \sec^8 \theta, & \text{para } \mathbf{R} \leq 0.71 \text{ Å}, \\ 0, & \text{para } \mathbf{R} > 0.71 \text{ Å}, \end{cases}$$
(19)

y normalizada para hacer d $\sigma$  /d $\omega$  = 2.5 x 10<sup>-15</sup> a 22.5 keVgrado<sup>2</sup>. Esto se ajusta a los datos experimentales razonablemente bien. Cualquier otra dependencia haría correr el pico hacia la derecha o izquierda. La dependencia angular en 19 tiene un máximo muy pronunciado en  $\theta$  = 90°, lo que indica que la configuración fuertemente preferida para la captura es el de una molécula lineal triatómica como se indica en la figura 16. Los picos teóricos y experimentales no se ajustan exacta-

29.

mente debido a que los intervalos a los que están tabuladas las funciones de onda vibracionales son muy grandes. Se esp<u>e</u> raría que un corte a R= 0.70 Å en la ecuación (19) haría que los datos coincidieran exactamente.

Luego se observa que la forma y localización del pico en la "sección diferencia" d $\circ$  -/d $\omega$  da esencialmente la dependen cia de la sección de doble captura electrónica en R y  $\Theta$  en el momento en que ion molecular hidrogenoide interactúa con el átomo de cesio.

La sección diferencial para la producción de  $D^{\circ}$  es algo más complicada que la de la producción de D<sup>-</sup> ya que  $D^{\circ}$  puede provenir de la disociación de  $D_2^{-}$  y  $D_2^{\circ}$ . Luego:

$$\frac{1}{E_{i}} \frac{d\sigma_{o}}{d\omega} = \frac{1}{E_{i}} \frac{d\sigma_{-}}{d\omega} + \frac{1}{4\pi} \int_{0}^{Rd} \frac{2\sigma_{+o}(R, 0) \rho(R) dR}{\left[E_{d}^{o}(E_{d}^{o} - E_{i}^{\theta})\right]^{2}}.$$
 (21)

El primer término del lado derecho de (21) toma en cuenta el hecho de que producirán un D<sup>o</sup> por cada D<sup>-</sup> en la disociación de D<sub>2</sub><sup>-</sup>. El segundo término proviene de la disociación de D<sub>2</sub><sup>o</sup> que produce dos fragmentos D<sup>o</sup>. Si la disociación excitacional de D<sub>2</sub><sup>+</sup> (proceso 4) es significante se tiene que agregar un ter cer término a la parte derecha de (21) este término es similar a (17), pero  $\sigma_{+-}$  debe ser reemplazada por  $\sigma_{ex}$ , la sección de excitación, y E<sub>d</sub> por la apropiada energía de disociación E<sub>d</sub><sup>+</sup>, arriba del límite de disociación del estado 2p $\sigma$ u de D<sub>2</sub><sup>+</sup>. Este último término es pequeño y puede ser despreciado en la ecua ción (21). Por el mismo argumento dado para llegar a la ecuación (18) se sigue que

$$\frac{1}{E_{i}} \frac{d \sigma_{o}}{d \omega} = g(E_{i} \theta^{2}).$$
 (22)

La sección reducida por la formación de  $D^0$  a partir de  $D_2^+$  muestra el mismo comportamiento que la sección reducida para la formación de  $D^-$  mostrada en la figura 15.

#### VI CONCLUSIONES

Dos de los hechos observados sugieren un mecanismo para los procesos de captura observados:

A) Las distribuciones angulres de D<sup>O</sup> y D<sup>-</sup> como las que se muestran en la figura 6 tienen máximos que sólo pueden ser explicados por una sección de captura de la forma:

 $\sigma_{c} = \begin{cases} 1, \text{ para } R \leq 0.71 \text{ Å} \\ 0, R > 0.71 \text{ Å} \end{cases}$ 

La diferencia en las localizaciones de los picos en las distribuciones de  $D^0$  y  $\overline{D}^{-}$  es debida sólo a la diferencia en energías de disociación de los estados repulsivos  $\overline{D_2^{-0}}$  y  $\overline{D_2^{-1}}$ .

Luego se debe notar que el pico de D<sup>o</sup> no proviene de la disociación de D<sub>2</sub> en cuyo caso ambas distribuciones serían igu<u>a</u> les. De hecho la estructura de la distribución de D<sup>o</sup> que cae arriba de la estructura con doble máximo de D<sup>-</sup> (para  $\theta$  entre 3.5 y 5°), en la figura 6 incuestionablemente contiene fragmentos de D<sup>o</sup> que son complementos de D<sup>-</sup> de la disociación de D<sub>2</sub><sup>-</sup>. El pico de D<sup>o</sup> a 3.31° es debido a captura electrónica simple de D<sub>2</sub><sup>+</sup> a un estado repulsivo de D<sub>2</sub><sup>o</sup> y se encontró que esta sección tiene la misma dependencia en R que la sección de doble captura electrónica a un estado repulsivo de D<sub>2</sub><sup>-</sup>. B) Sólo los niveles de los estado  $Cs^{\circ} + D_2^{+} y Cs^{+} + D_2^{\circ}$ tienen cruzamientos de niveles, cuando R es menor que una can tidad dada. La figura 10, que no es muy exacta muestra que dichos cruzamientos de niveles ocurren solamente cuando - $R \leq 0.8$  Å. Los datos indican que para las curvas de energía correctos esto debe ocurrir para R  $\leq 0.71$  Å.

Este segundo hecho explica fácilmente la distribución angular de D<sup>O</sup> en términos de cruzamiento de niveles. Ahora bien ¿Qué ocurre con D<sup>-</sup>, puede provenir sólo de D<sub>2</sub><sup>-</sup>? Este muestra con comportamiento similar para  $R \le 0.71$  Å, no obstante el hecho de que todas las curvas de  $Cs^{2+} + D_2^{-}$  cruzan las curvas de  $Cs^{O} + D_2^{+}$ , independientemente del valor de R. Sin embargo se sugiere que estos últimos cruces no son críticos.

El mecanismo que se sugiere para doble captura electrónica es un proceso de dos pasos en una sola colisión.

Primero un cruzamiento del, nivel  $Cs^{\circ} + D_2^{+}$  con  $Cs^{+} + D_2^{\circ}$ produce un estado repulsivo de  $D_2^{\circ}$  para R  $\leq 0.71$  Å y segundo a medida que la colisión continua el estado  $Cs^{+} + D_2^{\circ}$  que ha sido poblado en el primer paso hace un segundo cruce con un es tado  $Cs^{2+} + D_2^{-}$  produciendo  $D_2^{-}$ . La figura 12 muestra dichos cruces e indica que éstos pueden ser muy sensitivos a R. El segundo pico pequeño a ángulos grandes que se observa en la figura 6 es interesantes pero al parecer no involucra ningún nuevo fenómeno. La suposición de que la sección de cap tura es constante para  $R \leq 0.71$  Å es por supuesto una aproxima ción burda. Es más probable que dicha sección aumente a medida que R disminuye. Ya que una disminución en los valores de R hacen que los cruces ocurran para valores más pequeños de r donde el elemento de matriz de acoplamiento que causa la transición es grande <sup>21</sup>.

34

Las colisiones átomo-átomo, ion-átomo a alta y baja energia han contribuido grandemente a la explicación de los niveles de energia de sistemas moleculares diatómicos y de las li mitaciones de la aproximación adiabática en el comportamiento 22-25 molecular Las colisiones que involucran moléculas o iones diatómicos o poliatómicos en átomos pueden proporcionar información sobre superficies de energía de estructuras molecu lares triatómicas o más complejas y de las transiciones cuasia diabáticas en esas estructuras. Los datos experimentales mostrados aquí representan solo un punto de partida. Se necesitan de inmediato más datos experimentales sobre el sistema para obtener una información más exacta sobre la 🎘 sección de doble captura. Desde el punto de vista teórico se deben obtener tanto las superficies de energía del ion molecu

lar triatómico (D<sub>2</sub> Cs)<sup>+</sup> como de los elementos de la matriz de interacción en los cruzamientos con objeto de dar una mejor interpretación a los datos.

Se espera que la comparación de la teoría con el experime<u>n</u> to mostrará que la explicación téorica actual de los procesos deba revisarse <sup>21</sup>.

Ciertamente otros sistemas de gran interés en fisicoquími ca además de  $(D_2 C_5)^+$  deben ser estudiados, sistemas como - $H_3^+$ ,  $(H_2 He)^+$ , etc. y claramente es necesaria la elaboración de un programa que incluya tanto investigación teórica como ex perimental en cada sistema de interés dicho programa fácilmente podría abarcar varios años de interesante investigación.

#### REFERENCIAS

- 1.- Physics News in 1975. American Institute of Physics. Public. R-275,41 (1975).
  - 2.- Yu I. Bel'chenco, G. I. Dimov and V. G. Dudnikov, Sov. Phys. Tech. Phys. 20, 40 (1975).
  - 3.- H. Bohen, G. Clausnitzer and H. Wilson Z Physik <u>208</u>, 1959 (1968).
  - 4.- A. S. Schlachter, P. J. Borkholm, D. H. Loyd,
    C. W. Anderson and W. Haeberli Phys. Rev. <u>177</u>,
    184 (1969).
  - 5.- W. Grubler, P. A. Schmelgback, V. Koning and P. Marmier, Helv. Phys. Acta 43, 254 (1970).
- 6.- F. W. Meyer and L. W. Anderson, Phys Rev. A 11, 589 (1975).
- 7.- C. Cisneros, I. Alvarez, C. F. Barnett and J. A. Ray. Angular distributions and total cross sections for D<sup>-</sup> formation from interaction of D<sup>+</sup> and D<sup>0</sup>, proxima publicación.

8.- "Atomic, Molecular and Nuclear Data Needs for C.T.R." ERDA Report: ERDA-39

9.- T. E. Sharp, Atomic Data 2, 119 (1971)

10.- A. N. Nesmeianov, "Vapor Pressures of the Elements" traducida y editada por J. I. Carasso (Academic Press, New York, 1961)

11. L. L. Marino, A.C.H. Smit and E. Caplinger Phys. Rev. <u>128</u>, 2243 (1962).

R. H. Hultgren; R.L. Orr, P.D. Anderson and K.K. Kelley, "Selected Valves of thermodynamic Properties of Metals and Alloys (John Wiley and Sons, N. Y., 1963), p. 68. Los datos que se presentan fueron tomados del suplemento de 1970.

13.- H. H. Fleishmann, C. F. Barnett and J.A. Ray Php Rev 10 569 (1974).

 14.- C. Cisneros, I. Alvarez, C.F. Barnett and J. A.
 Ray. "Differential and total cross sections for stripping of H<sup>o</sup> and D<sup>o</sup> in N<sub>2</sub>", proxima publicación.

- 15.- P.M. Stier, C.F. Barnett and G.E. Evans Phys. Rev. <u>96</u>, 973 (1954)
- 16.- G.A. Harrower, Rev. Sci. Intr. 26 850 (1955)
- 17.- D.H. Crandall, J.A. Ray and C. Cisneros. Rev. Sci. Instr. <u>46</u> 562 (1975).
- 18.- La curva  $Cs^{0} + H_{2}^{+}$  que se muestra en la figu ra 10, ha sido tomada de la figura 2 de J. C. Crow and A. Russek Phys. Rev. <u>138 A</u> 669 (1965). Dicha curva es para un punto carga que interactúa con Cs neutro, a la cual se le ha sumado la energía de disociación de  $H_{2}^{+}$ .
- 19.- A. Russek, Physica <u>48</u>, 165 (1970).
- 20.- I. Alvarez, C. Cisneros, C.F. Barnett, J.A. Ray. próxima publicación.
- 21.- A. Russek comunicación privada.
  - 22.- W. Lichten, Phys. Rev. <u>164</u>, 131 (1963).

23.- U. Fano and W. Lichten Phys, Rev. Letters. <u>14</u>, 627 (1965).

24.- A. Russek Phys. Rev. <u>A4</u>, 1918 (1971.

25.- M. Barat and W. Lichten Phys. Rev. <u>A 6</u>, 211 (1972).



. Sa ta ta

(NOT TO SCALE)

> FIGURA 1 Diagrama del aparato

> > Antonia i anala

المرد الأرتج الأراسين

e the

CHANNEL ELECTRON

PLATE ANALYZER:







peratura del horno. Los datos fueron tomados del conjunto de presiones de vapor de Cs publicadas por Hultgren et al (12), valores publicados por Nesmeianov (10) y medidas por Marino et al (11).



Sección diferencial para la formación de D<sup>-</sup> a partir de D<sub>2</sub><sup>+</sup> a 2 keV, como función del ángulo de dispersión, para diferentes parámetros experimentales.



Secciones diferenciales para la formación de D a partir de  $D_2^+$  a energías de 1.0, 2.0, 3.0, 4.0 y 5.0 keV en vapores de Cs.



Sección diferencial para la formación de D<sup>-</sup>, D<sup>+</sup> y D<sup>o</sup> + D<sub>2</sub><sup>++</sup>, como función del ángulo de dispersión, obtenidos a partir de D<sub>2</sub><sup>+-</sup> a 2 keV.



Angulos a los que el 90% y el 50% del D producido se encuentra, como función de la energía incidente. Los datos se muestran para colisiones simples y multiples.

# 1800 1600 1400

600

400

200

Ô



Real to a star

*θ* (deg)

FIGURA 8

 $I(\Theta)$  sen  $\Theta$  como función del angulo de

dispersion para D a 1 keV.

ORNL-DWG 75-10465



Secciones totales para la formación de D<sup>-</sup> como función de la energía de D<sup>+</sup>. Los resultados de D<sup>-</sup> a par tir de D<sup>+</sup> fueron tomados de la referencia 7. Las seccio nes para la producción de D<sup>-</sup> a partir de D<sub>2</sub><sup>+</sup> fueron graficados a la mitad de su energía del ion molecular inci-

Contest the second s



FIGURA 10 Curvas de energía potencial para los iones moleculares triatómicos  $Cs^{2+}H_7^-$ ,  $Cs^{-}H_7^-$  y  $Cs^{-}H_2^-$ 

estan estatu bangenen meneri bangenen bangen peneri bangen bangen bangen bangen bangen bangen bangen bangen ba Bangen kangen peneri bangen bangen

R

and a start of the s

FIGURA 11 Diagrama esquemático del sistôma molecular Cs - H<sub>2</sub>

ORNL-DWG 75-9446

Cs





25



FIGURA 12

Curvas de energía potencial de  $H_2^+$ ,  $H_2^-$  y  $H_2^-$ .



Geometría de la colisión por la cual un ion molecular  $H_2^+$  és disociado por un átomo de Cs.



Figura 5 regraficada en términos de los variables reducidas  $1/E = d\sigma/d\Omega$ , y E  $\theta^2$ . La línea punteada es el "fondo".

![](_page_56_Figure_0.jpeg)

Sección diferencial reducida  $1/E d\sigma/d\Omega$ , misma de la figura 14 en la que se ha substraido el fondo.

![](_page_57_Picture_0.jpeg)

Configuración de molécula lineal triatómica.