

Principios fundamentales, técnicas de medición y análisis de datos en un acelerador de iones

O. González-Magaña

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México.

C. Gleason

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

G. Hinojosa

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México,

e-mail: hinojosa@fis.unam.mx

Recibido el 28 de mayo de 2007; aceptado el 12 de febrero de 2008

El presente trabajo pretende ser una referencia general para estudiantes y profesionales interesados en el área, en donde presentamos una introducción a las técnicas de análisis y a los principios fundamentales de operación de un acelerador típico de bajas energías. Presentamos una descripción detallada del experimento, proponemos métodos novedosos para el análisis de los resultados, con fines de ilustración introducimos simulaciones de trayectorias de iones en diferentes componentes del acelerador realizadas con un software especializado en este campo, y una nueva interfaz de control y adquisición de datos.

Descriptores: Colisiones atómicas y moleculares; secciones totales; espectroscopia traslacional; acelerador de iones.

The present work is intended to be a general reference for students and professionals interested in the field. Here, we present an introduction to the analysis techniques and fundamental principles for data processing and operation of a typical ion accelerator that operates in the low energy range. We also present a detailed description of the apparatus and propose new analysis methods for the results. In addition, we introduce illustrative simulations of the ion's trajectories in the different components of the apparatus performed with specialized software and, a new computer data acquisition and control interface.

Keywords: Atomic and molecular collisions; total cross sections; translational spectroscopy; ion accelerator.

PACS: 01.30.L-; 01.50.Pa; 06.60.-c; 07.05.Hd; 34.70.+e

1. Introducción

La influencia de los aceleradores de iones en el desarrollo de la ciencia y la tecnología es categórica. La historia de la física está plagada de descubrimientos hechos gracias a estos aparatos y de cómo han contribuido al estado actual del conocimiento humano sobre la estructura y composición de la materia[1]. Por ejemplo, los primeros aceleradores conllevaron a los descubrimientos del electrón (Thomson, 1897) y del núcleo atómico (Rutherford, 1911); hasta los aceleradores modernos, en los cuáles ha sido posible estudiar la interacción de electrones con iones moleculares complejos a energías de colisión casi nulas[2], o la interacción de iones atómicos con luz sincrotrón[3]. Los experimentos de colisiones de iones con átomos y moléculas estimulan el desarrollo de los fundamentos de la física; entender con detalle el intercambio de momento en las colisiones es un reto de actualidad para la ciencia moderna. En un artículo de la revista *Science*[4], al referirse al estado actual del campo, los autores comentan: “parece casi increíble que aun el ejemplo más simple en donde un electrón inicia un proceso de disociación: la ionización de un átomo de hidrógeno por colisión con un electrón, a la fecha haya resistido solución. A pesar de que la ecuación de Schrödinger se conoce desde hace 70 años, no existe un solo contexto en el que este ejemplo tenga una solución completa”. Como algunos ejemplos

recientes de investigaciones realizadas con este método se listan las Refs. 5 a 9.

En México, el estudio de la física atómica y molecular experimentales cumple más de 30 años[10] y en este contexto presentamos una descripción de los principios y las técnicas usadas en aceleradores que operan a energías de unos cuantos miles de electrón-volts (eV) y proponemos métodos novedosos para el análisis de los resultados del experimento. Adicionalmente, introducimos simulaciones de trayectorias de iones realizadas con un software especializado en este campo y presentamos una nueva interfaz de control y adquisición de datos.

El método consiste en la producción de un haz de iones colimado que se hace colisionar con un gas. Posteriormente, se estudian los procesos que son resultado de esta colisión como función de la energía de aceleración.

2. El acelerador

Este acelerador ha sido armado y muchas de sus partes han sido construidas en el Instituto de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma de México. Su objetivo principal es el estudio de la dinámica de colisiones de iones moleculares simples a energías de unos cuantos miles de eV. Cuenta con tres etapas: la de producción del haz, la de interacción y la relacionada con la detección y análisis de los

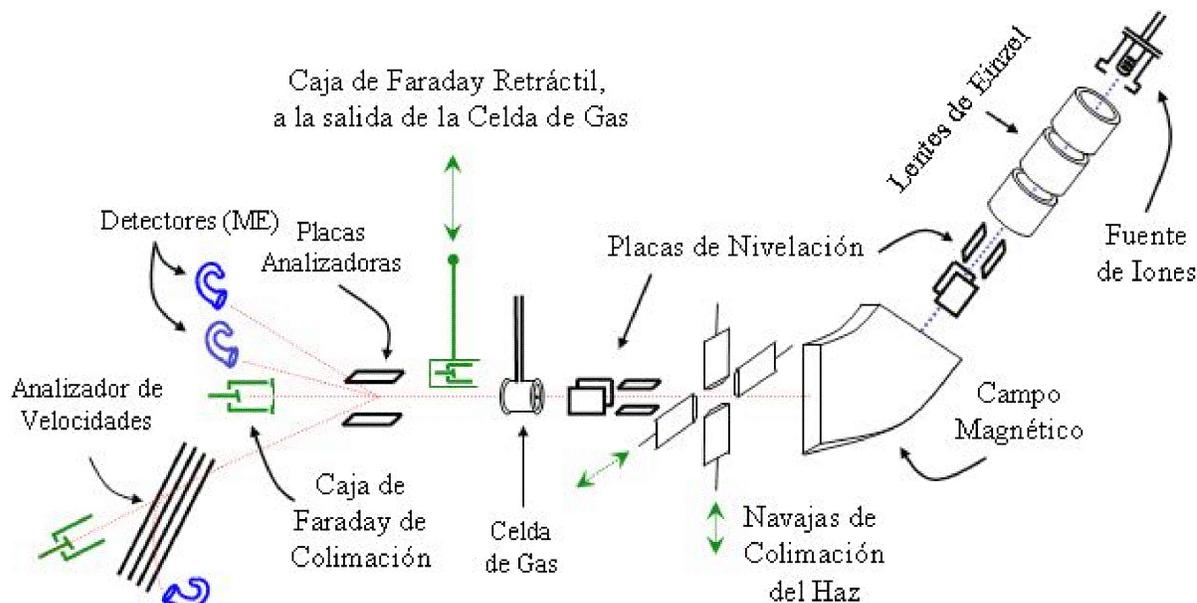


FIGURA 1. Esquema simplificado del acelerador de iones. Los detectores, las placas analizadoras, el analizador de velocidades, la caja de Faraday (CF) de colimación y la CF que está después del analizador de velocidades están ubicados en la cámara de detección. Para permitir el paso del haz, la CF a la salida de la celda de gas se puede desplazar.

productos. Ha operado en un intervalo de energías de 1 keV a 10 keV. En esta sección se presentan descripciones de los principios fundamentales de su operación y de las principales técnicas que en él se utilizan. En los casos en que existe documentación introductoria o si se desea profundizar en algún tema, se proporcionan las referencias.

El experimento inicia con la producción de un haz de iones colimado, que se consigue con el uso combinado de una fuente de iones; un sistema de lentes electrostáticas de Einzel, para enfocar el chorro de gases ionizados que salen de la fuente; un campo magnético constante, para seleccionar el momento de las partículas del haz primario y una serie de navajas para colimar el haz. En la Fig. 1 se muestra un esquema simplificado del acelerador.

Básicamente, la fuente de iones consiste en una cámara que contiene un filamento de tungsteno, en donde se confina una mezcla de gases. Por el filamento circula una corriente eléctrica que hace que su temperatura aumente, y entonces, emite electrones (a este proceso se le conoce como emisión termoiónica) y fotones (incandescencia). Estos procesos hacen que los gases dentro de la fuente se ionizen para formar un plasma, el cual es expulsado de la cámara por repulsión electrostática (debido a la diferencia de potencial entre la fuente y el primer elemento de las lentes Einzel). Para una descripción detallada de la fuente se puede consultar la Ref. 11. Los gases que se inyectan en la fuente determinan la clase de iones que se pueden producir. En la Fig. 2 se presenta un ejemplo de los iones que produce la fuente cuando se inyecta una mezcla de CO_2 y Ar. El haz puro corresponde al CO_2^+ porque en la producción de un haz, el ión del haz primario no debe tener la misma masa y carga que se originen de procesos secun-

darios a la fuente de iones. Por ejemplo, si para producir un haz de CO^+ se inyecta CO_2 en la fuente, entonces habrá un haz de CO^+ producto de la disociación por colisión con los electrones e del plasma en la fuente: $\text{CO}_2^+ + e \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O} + e$; y otro haz de CO^+ producto de la disociación inducida por colisión con el gas residual fuera de la fuente: $\text{CO}_2^+ + \text{gas residual} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O} + \text{gas residual}$; que tendrá la misma relación masa-carga y la misma velocidad que el haz primario, y que aunque tiene diferente energía cinética no se puede separar del haz primario porque su trayectoria en el campo magnético del analizador depende de su velocidad, carga y masa, y no de la energía, como se verá más adelante.

La cámara de la fuente de iones está tapada con un ánodo metálico perforado al que se le aplica una diferencia de potencial de 100 V respecto del filamento de tungsteno. Esta diferencia de potencial acelera a los electrones que emite el filamento y los hace colisionar con la mezcla de gases, ionizándolos. Tanto los electrones como los iones producidos en la cámara de la fuente contribuyen a mantener una descarga eléctrica entre el filamento y el ánodo; generalmente, el gas Ar se utiliza para apoyar esta descarga eléctrica (porque el gas Ar es rico en electrones, inerte y relativamente fácil de ionizar). La descarga es de algunas décimas de Ampere y su presencia es una condición necesaria para producir un haz de iones. Los distintos iones resultado de los procesos de ionización y disociación inducidos por impacto electrónico ($\text{CO}_2 + e$) en el plasma de la fuente, son emitidos por repulsión electrostática en la dirección del eje del acelerador hacia las lentes electrostáticas y salen por la perforación del ánodo cuyo diámetro es, normalmente, de medio milímetro. Un ejemplo de los iones que puede emitir la fuente se muestra en la Fig. 2.

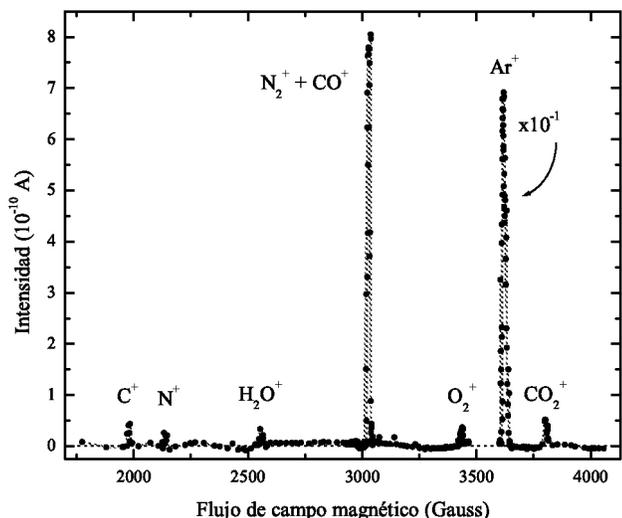


FIGURA 2. Espectro de masas de la salida de la fuente de iones. En este caso se inyectó una mezcla de Ar y CO₂ a la fuente para producir un haz primario de CO₂⁺. Los iones de N⁺, H₂O⁺ y N₂⁺ provienen de la atmósfera y se consideran contaminantes en cualquier sistema de vacío. Los iones C⁺ y CO⁺ son resultado de la disociación e ionización del gas CO₂ en la fuente. Finalmente el ión O₂⁺ se origina de la disociación e ionización del gas CO₂. Los datos de este espectro se tomaron con ayuda de una graficadora virtual en LabVIEW.

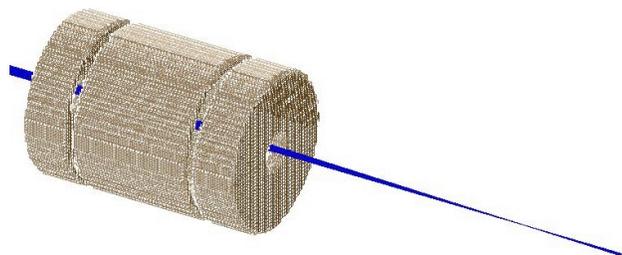


FIGURA 3. Simulación a escala de las trayectorias de iones que atraviesan las lentes de Einzel. Las lentes constan de tres electrodos, la longitud del electrodo central es mayor, como se aprecia en la figura. Las trayectorias de los iones están representadas con líneas que atraviesan por el centro a las lentes. Se nota cómo las trayectorias convergen en un punto. Los dos electrodos externos están aterrizados y el valor de la diferencia de potencial de enfoque se aplica al electrodo central. El punto de enfoque se encuentra a una distancia de 33 cm a la salida de la fuente de iones. En este caso se simuló protones con una energía de aceleración de 6 keV. El valor de la diferencia de potencial del electrodo central es 4.28 kV. La relación entre el valor de la diferencia de potencial de enfoque y el de aceleración (4.28/6.00 ~ 0.70) es el mismo para todas las energías de aceleración y se cumple con una variación de aproximadamente 10%.

Las lentes electrostáticas tienen la propiedad de enfocar el haz de iones que emite la fuente. En la Fig. 3 se muestra una simulación en SIMION de la trayectoria de los iones emitidos para un caso real. SIMION es un programa que calcula campos eléctricos y trayectorias de partículas cargadas en estos campos, a partir de una configuración de electrodos con sus correspondientes valores de diferencias de potencial

y con condiciones iniciales para las partículas. También simula efectos de colisiones con los electrodos. En la Fig. 3, puede observarse que las trayectorias se concentran en un punto. Para ilustrar aún más las propiedades de enfoque de las lentes, se muestra en la Fig. 4 un diagrama del potencial de las lentes. El modelo consiste en imaginar una sábana elástica que se tensa en los electrodos, en donde las partes altas de la sábana corresponden a los valores altos del potencial.

El siguiente elemento en la producción del haz de iones es un campo magnético constante de intensidad de flujo B , en el cual, partículas de una misma velocidad siguen una trayectoria de radio R , caracterizada por

$$B_{Gauss} = \frac{(2V_{acel})^{\frac{1}{2}}}{R} \sqrt{\frac{m}{q}}, \tag{1}$$

donde q es su carga eléctrica, m su masa y V es la diferencia de potencial en el que se han acelerado. En este caso R es un parámetro fijo determinado por la geometría del espectrómetro de masas de 60°. De la Ec. (1) y del campo B_0 necesario para deflectar una partícula de masa m_0 y carga q_0 conocidas, se obtiene una relación útil, que se usa para identificar las diferentes especies o iones, entre el campo conocido B_0 y el campo desconocido B_m para desviar otra partícula de masa $m_{u.a.}$:

$$m_{u.a.} = \left(\frac{B_m}{B_0}\right)^2 m_0 \frac{q}{q_0}, \tag{2}$$

donde B_m es el flujo de campo para deflectar el haz de iones de masa $m_{u.a.}$ y carga q en la misma trayectoria circular de radio R . Los campos magnéticos confinados a una sección de circunferencia también tienen propiedades de enfoque: la trayectoria de un haz de iones que parte del punto A de la Fig. 5 y que tiene un ángulo $\Delta\theta$ de divergencia, idealmente, se debe re-enfocar en el punto B. Las propiedades de enfoque de los campos magnéticos no se discutirán más aquí, y se refiere a los lectores interesados a la Ref. 12. Finalmente, la producción del haz termina con la colimación. Más detalles sobre la derivación de las Ecs. (1) a (9) se pueden encontrar en la Ref. 11 y se dejan como ejercicio.

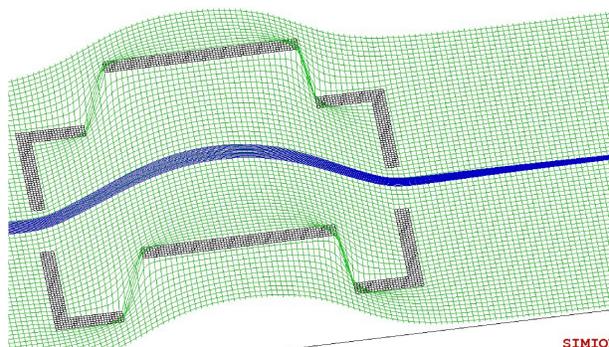


FIGURA 4. Modelo del potencial eléctrico de las lentes de Einzel. Los parámetros de simulación son los mismos que los de la Fig. 3. El programa SIMION utiliza un modelo llamado de *sábana elástica* para ilustrar el potencial. Las partes elevadas corresponden a un potencial positivo aplicado al electrodo central. Las líneas representan las trayectorias de los iones.

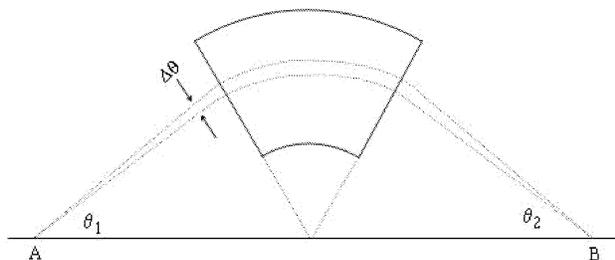


FIGURA 5. Efecto de enfoque del campo magnético de la Fig. 1. Idealmente, un campo magnético simétrico enfoca un haz de iones de divergencia $\Delta\theta$ en el punto B, si la fuente de los iones está en el punto A. Para más detalles se refiere a los artículos de Kervin[12] y de Johnson y Nier[13].

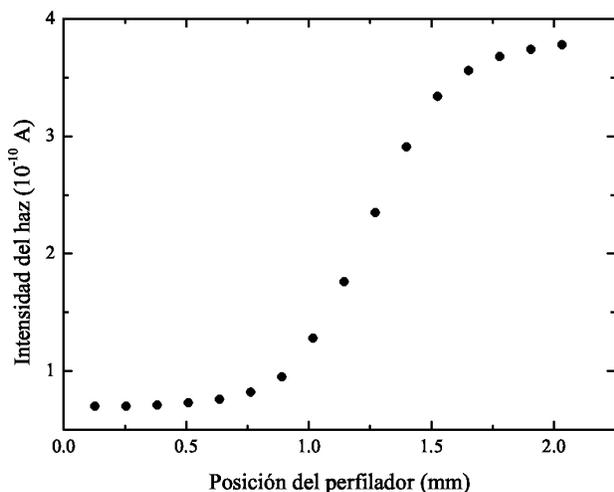


FIGURA 6. La intensidad del haz de iones como función de la posición de una navaja que se desplaza en la dirección horizontal. La navaja primero no deja pasar el haz y la corriente que se mide es la corriente de fuga I_{fuga} , que se define más adelante. Cuando la navaja deja libre la trayectoria, se mide la corriente total. En este caso, las navajas de colimación se han utilizado como perfiladores.

Es necesario colimar el haz para que su intensidad en toda la trayectoria hacia la caja de Faraday de colimación sea la misma, y para disminuir la dispersión del haz debida al efecto de la densidad de espacio-carga. El procedimiento de colimación del haz consiste en medir su intensidad en la caja de Faraday de colimación, que está ubicada en la cámara de detección (ver Fig. 1); esta caja de Faraday permite el paso del haz por un orificio de 1.5 mm de diámetro. A continuación se cierran uniformemente las cuatro navajas de colimación que están a la salida del espectrómetro de masas mediante posicionadores lineales hasta reducir en 10% la intensidad de haz, aproximadamente. Este procedimiento se repite hasta que la intensidad del haz que se mide en la caja de Faraday de colimación es igual a la intensidad del haz en la caja de Faraday a la salida de la celda de gas.

El haz de iones debe ser delgado en comparación con el área de los detectores. Esto es fácil de controlar con las navajas de colimación, sin embargo, es conveniente medir el an-

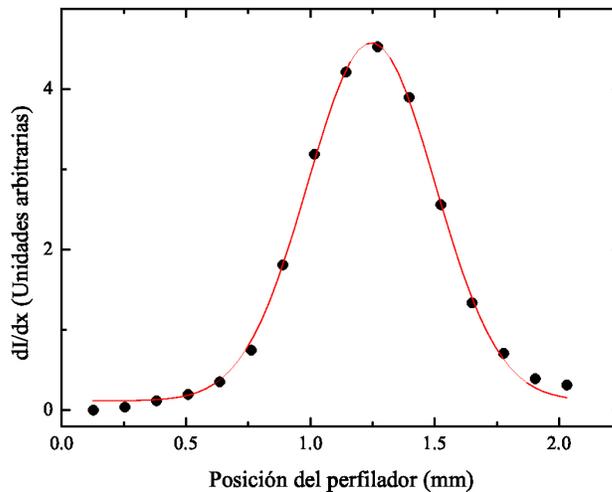


FIGURA 7. Perfil de un haz de protones de 2 keV en la dirección horizontal. Este perfil se determina a partir de la derivada espacial de los datos de la Fig. 6. La línea es un ajuste de una función de Gauss. El ancho del perfil a la mitad de la altura total es en este caso 0.51 mm.

cho espacial del haz o perfil. También es importante asegurar que el ancho del haz o perfil en energía sea pequeño en comparación con la energía de colisión, que en este caso es de unos cuantos miles de eV.

En la Fig. 6 se presenta un ejemplo de una medición del perfil espacial del haz en la dirección horizontal (el caso del perfil en la dirección vertical es análogo). El experimento consiste en medir la intensidad del haz de iones como función de la posición de una navaja que se mueve en la dirección, en este caso, horizontal; la intensidad del haz aumenta conforme la navaja descubre su trayectoria, que es el caso de la Fig. 6. El perfil, aproximadamente de Gauss como en la Fig. 7, se determina a partir la derivada espacial de los datos de la Fig. 6.

El perfil en energía del haz es muy delgado, tiene un ancho máximo de 1.5 eV. Para medir el perfil de energía del haz, se reduce la intensidad del haz con las navajas de colimación y se realiza un barrido manual con el analizador de velocidades.

En seguida de las navajas de colimación, el haz encuentra la celda de gas donde sucede la interacción o colisión con el gas. La distancia efectiva ℓ de la celda de gas es el tamaño de la arista paralela al haz de la celda de gas, más una corrección debida al flujo de gas por los orificios de entrada y salida de la misma. Los detalles sobre la derivación de ℓ se encuentran en la Ref. 14.

Para dirigir los diferentes iones producidos por la colisión del haz en la celda de gas, se genera un campo eléctrico entre las placas analizadoras que están ubicadas a la entrada de la cámara de detección. El campo eléctrico ejerce una fuerza sobre las partículas cargadas a lo largo de una distancia finita determinada por la longitud de las placas que desvían a los iones que las atraviesan. En el caso de la fragmentación de

haces de iones moleculares, el efecto de las placas es separar las trayectorias de acuerdo a su energía porque los fragmentos tienen la misma velocidad que el haz primario (en el sistema de referencia del laboratorio) y diferentes masas. En la Fig. 8 se muestra el resultado de una simulación de trayectorias para iones que pasan por las placas analizadoras. Los valores de las diferencias de potencial derivados de la simulación coinciden con los del experimento. La fórmula práctica

$$V_0 = V_{accel} \left(\frac{2d}{D} \right) \tan \theta \quad (3)$$

sirve para encontrar el valor de la diferencia de potencial V_0 que es necesario aplicar a las placas para desviar el haz un ángulo θ a la salida de las placas, donde d es su separación, D su longitud y V_{accel} el valor de la diferencia de potencial de aceleración del haz primario. La derivación de esta fórmula es simple y los detalles están en la Ref. 11. Las diferencias entre los resultados de esta simulación (que son consistentes con los medidos) y la Ec. (3) se deben a los efectos de borde del campo eléctrico. Se realizaron simulaciones en todo el intervalo de energía de operación del acelerador y se concluyó que la Ec. (3) es más exacta si se multiplica por un factor de 0.70 debido a los efectos de borde del campo eléctrico que no se consideran en la Ec. (3).

Los iones que se forman en la celda de gas también se pueden guiar hacia un par de placas paralelas cuyo eje está orientado a 45° de la trayectoria de los iones y que se encuentra al lado izquierdo en la cámara de detección. En la Fig. 1 se muestra su ubicación en el acelerador. Este sistema de placas paralelas sirve como analizador de velocidades de los fragmentos porque la velocidad v de un fragmento con carga unitaria e y masa m que atraviesa el analizador depende de la distancia x entre los colimadores de entrada y salida según

$$v = \left[\frac{x e \mathbb{E}}{m} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

donde \mathbb{E} es el campo eléctrico entre las placas paralelas. En la Fig. 9 se presenta el resultado de una simulación para iones que se mueven en el analizador de velocidades.

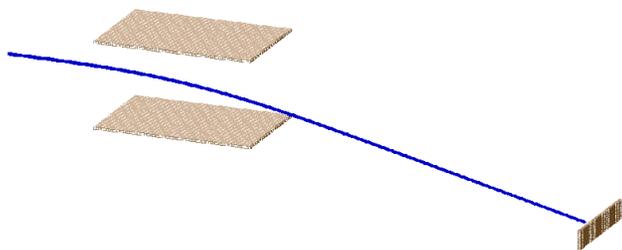


FIGURA 8. Simulación a escala de las trayectorias de iones que atraviesan las placas analizadoras. Las trayectorias de los iones están representadas con líneas que pasan a través de las placas paralelas. Para producir un campo eléctrico entre las placas se aplica una diferencia de potencial, que en este caso es de 170 V. La energía de los iones (protones) es 1 keV. Se observa que las trayectorias de los iones se deflectan en su paso por el campo eléctrico entre las placas, después continúan hacia una placa pequeña que representa la posición de un detector.

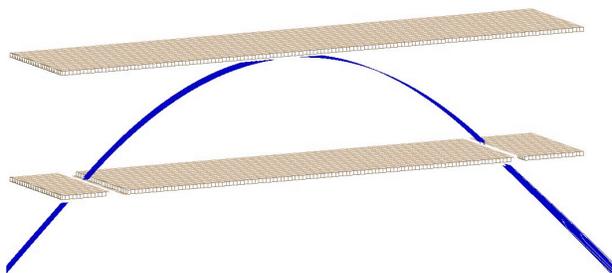


FIGURA 9. Simulación a escala de los iones que atraviesan el analizador de velocidades. Los iones *entran* al analizador por la ranura izquierda de la figura y sus trayectorias se representan con líneas. El analizador de velocidades consta de dos placas paralelas orientadas a 45° con respecto de la trayectoria de los iones. El valor de la diferencia de potencial entre la placa que tiene las ranuras de entrada y salida (que está *aterrizada*) y el de la placa contraria es, en este caso 400 V. Los iones tienen una carga electrostática de una unidad atómica, masa atómica de 20 u.a. (como sería el caso de iones de Ne^+) y una energía de aceleración de 690 eV. Se nota como las trayectorias de los iones en las ranuras de entrada y salida tienen el mismo perfil (las posiciones de entrada al analizador de los iones corresponden al reflejo especular de las posiciones en las que salen) mientras que las trayectorias de los iones muestran un punto de enfoque dentro del analizador. Esta característica permite calcular la función de eficiencia [Ecs. (7) y (8)] solamente con el perfil de entrada de los iones. Para más detalles referimos al lector a la referencia de Harrower [15].

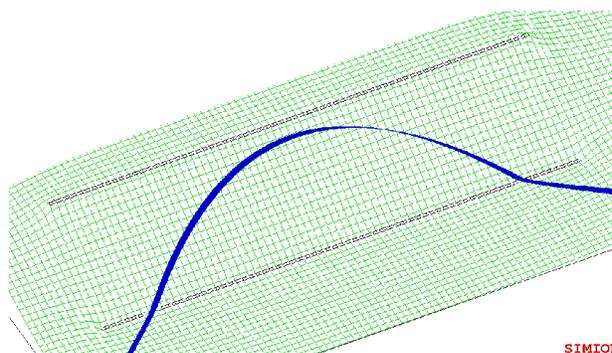


FIGURA 10. Simulación del potencial entre las placas del analizador de velocidades y de las trayectorias de los iones que corresponde al caso de la Fig. 9. Se utiliza el método de la *sábana elástica* del simulador SIMION.

Un ejemplo de la clase de espectros que se obtienen con este analizador de velocidades se muestra en la Fig. 9. En este ejemplo, los fragmentos de N^+ se originan de la colisión de $N_2^+ + He \rightarrow N^+ + N + He$ que es una disociación binaria. Como en las disociaciones el momento se conserva, es posible derivar la energía cinética total liberada (ECL) que permite comparar directamente con otros experimentos y con la teoría.

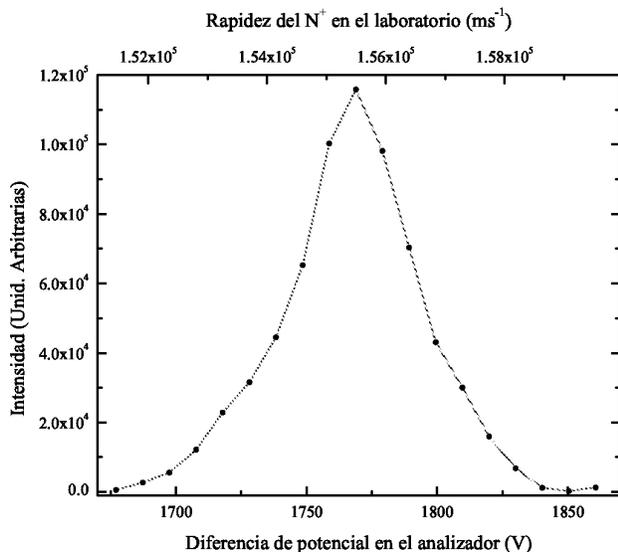


FIGURA 11. Espectro del fragmento N^+ medido en el analizador de velocidades producto de la colisión: $N_2^+ + He \rightarrow N^+ + N + He$, a una energía de 6 keV. El eje vertical son las cuentas de fragmentos N^+ acumuladas en 10 s. La velocidad del centro de masa en el SR-L (V_{CM}) coincide con el centro de la distribución del espectro. La energía interna u de la molécula se reparte como energía cinética ε entre los fragmentos según: $\varepsilon \propto 1/m$, donde m es la masa del fragmento, en este caso N^+ .

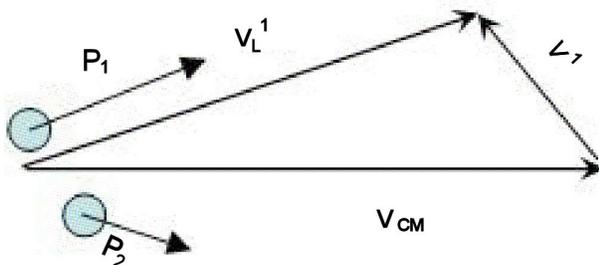


FIGURA 12. La energía inelástica de la colisión Q está dada por $Q = p^2/2M$, donde p es el momento transferido durante la colisión y $M = m_1 + m_2$ es la masa de la molécula. V_{CM} es la velocidad del centro de masas de la molécula, P_1 y P_2 son los momentos de los fragmentos en el SR-L y p_1 y p_2 son los momentos de los fragmentos en el sistema de referencia del CdeM. V_L^1 es la velocidad del fragmento 1 en el SR-L y v^1 la velocidad del fragmento en el sistema de referencia del CdeM.

3. Los espectros

La dinámica de la disociación de una molécula o de un ión molecular se puede comprender con más detalle cuando se observan los resultados experimentales desde el punto de vista del sistema de referencia de su centro de masas (CdeM).

Los espectros en energía de los fragmentos iónicos contienen información sobre la estructura interna de la molécula que se ha disociado, así como de la interacción con los átomos o moléculas de la celda de gas. Para el caso en que la

disociación de las moléculas es binaria, es posible determinar las energías cinéticas liberadas (ECL) de los diferentes canales de disociación con exactitud. La transformación de los espectros del sistema de referencia del laboratorio (SR-L) al del CdeM tiene dos aspectos: la energía y la intensidad.

La energía cinética de los fragmentos E_L se puede derivar de los espectros medidos en el laboratorio a partir de la relación vectorial entre las velocidades del fragmento \vec{v} (referida al CdeM) y la del centro de masas \vec{V}_0 (referida al laboratorio). La velocidad final del fragmento de masa m_f está dada por la suma vectorial: $\vec{V}_0 + \vec{v}$, como en la Fig. 12, donde \vec{v} es la velocidad del fragmento en el SR-CdeM. La energía cinética del fragmento en el SR-L está determinada por

$$E_L = \frac{1}{2}m_f (V_0 \pm v)^2 + Q, \tag{5}$$

donde V_0 es la rapidez del centro de masas antes de la colisión y Q la energía inelástica de la colisión, v es la rapidez del fragmento referido al CdeM. $E_L - Q$ es la energía cinética de centro de masas después de la colisión. Es importante notar que en la derivación de la energía de los fragmentos no se supone una dinámica de disociación en particular. El análisis se puede simplificar aún más si se hace la aproximación $Q = 0$. Esta aproximación es válida porque Q es normalmente muy pequeña comparada con E_L , de manera que $E_L - Q \approx E_L$. Valores típicos de Q van de ~ 10 eV a ~ 45 eV, mientras que los valores de $E_L \geq 10^3$ eV. Las energías cinéticas de los fragmentos en el sistema de referencia del CdeM no se ven afectadas por dicha aproximación cuando se hace una selección cuidadosa de la velocidad del nuevo centro de masas, el cual, corresponde al centro en el espectro de energía del fragmento de que se trate; por ejemplo, en el espectro de la Fig. 11 este centro se puede extraer de un ajuste a una curva gaussiana. Además, el efecto de Q consiste en desplazar a todos los espectros en el SR-L. Por esta razón es posible realizar el análisis de los espectros de los fragmentos y después, con una medición independiente, determinar Q . De la ecuación de transformación para la energía [Ec. (5)] se derivan las energías ε del fragmento en el sistema de referencia del CdeM. Una expresión conveniente para realizar la transformación con un código de computadora es

$$\varepsilon^{\frac{1}{2}}(i) = \mp \sqrt{\frac{m_f}{M}} E_0^{\frac{1}{2}} \pm E_L^{\frac{1}{2}}(i), \tag{6}$$

donde $\varepsilon(i)$ y $E_L(i)$ son las energías en el centro de masas y en el laboratorio, respectivamente, asociadas al punto i en el espectro de velocidades de un fragmento en particular, como en el ejemplo de la Fig. 11.

El otro aspecto en el análisis de los espectros del laboratorio, como el de la Fig. 11, es la intensidad. Debido a que el analizador de velocidades es más eficiente al contar fragmentos que son dispersados en la dirección paralela a su eje de entrada, que corresponde al pico central de los espectros, es conveniente introducir una corrección a la intensidad que resalte la estructura de las alas de los espectros medidos en

el laboratorio. Aquí proponemos un método alternativo para realizar esta corrección que está basado en la función de transmisión de Folkerts *et al.* [16] y en el método de Anderson [17].

Básicamente la idea es generar una función de eficiencia o transmisión del analizador similar a la de Anderson, basada en que la intensidad medida es proporcional al ancho de aceptación del analizador (determinada por el colimador de entrada) y al ángulo de dispersión de los fragmentos, que es función de su velocidad [17] y de su tiempo de vuelo [16] en el SR-L. El colimador del analizador de velocidades subtende un ángulo sólido fijo hacia el punto donde ocurre la disociación del ión molecular; mientras que los fragmentos, debido a su velocidad, también subtenden un ángulo sólido entre el punto de disociación y la entrada al analizador de velocidades (ver Fig. 13). El ángulo que subtenden los fragmentos depende de su velocidad y se le llamará *ángulo dinámico* θ_{din} , mientras que al ángulo asociado al colimador del analizador se le llamará *ángulo fijo* Θ . La función de eficiencia del analizador ϵ_f será una función de la velocidad del fragmento, y está dada por

$$\epsilon_f \equiv \frac{\Theta}{\theta_{din}}, \tag{7}$$

tal que si $\theta_{din} < \Theta$, entonces, la función de transmisión puede ser mayor que uno: $\epsilon_f > 1$.

La idea de la función ϵ_f se ilustra con el siguiente ejemplo: el pico central del espectro de la Fig. 11 corresponde a la posición del centro de masas (CdeM) en el SR-L. Es decir, la parte más intensa del espectro (en el SR-L) tiene una energía correspondiente en el sistema de referencia del CdeM de $\epsilon = 0$. Según las leyes de conservación de la energía y del momento, la energía interna de la molécula u se distribuye entre los fragmentos (de masas iguales, en este caso m) de acuerdo a

$$\epsilon \propto \frac{1}{m},$$

donde ϵ es la energía del fragmento y $u = 2\epsilon$. Entonces, para cualquier disociación binaria, no existen fragmentos con energía $\epsilon = 0$. Sin embargo, en los espectros medidos en el laboratorio, la intensidad que corresponde al CdeM ($\epsilon = 0$) es máxima. Por lo tanto, la función de transmisión debe ser tal que, su valor sea mayor en $\epsilon \approx 0$ y menor para $\epsilon \gg 0$.

No obstante, para un análisis completo (que resulta impráctico y aquí sólo se mencionará) se necesita conocer la función de distribución angular $D(\phi)$ en donde ϕ es el ángulo entre v^1 y V_{CM} (ver la Fig. 12). Además, la intensidad relativa del espectro es proporcional a la sección transversal σ_{ij} del proceso de que se trate. Por ejemplo, si el espectro es del fragmento O^+ , que se puede derivar de varios canales, como captura disociativa (σ_1), más disociación sin ionización (σ_2) y disociación con ionización (σ_3), entonces, la función de transmisión quedará

$$\epsilon_f \propto \sum_i^3 \sigma_i \frac{\Theta}{\theta_{din} D(\phi)}, \tag{8}$$

La intensidad observada en el laboratorio I_L , debe ser corregida con la función de transmisión Ec. (8), para obtener un espectro cuya intensidad se aproxime a la intensidad que debe observarse en el sistema de referencia del CdeM, I_{CM} , es

$$I_{CM} = \frac{I_L}{\epsilon_f}. \tag{9}$$

Con las suposiciones de que la distribución angular $D(\phi)$ es isotrópica, y que la sección transversal σ es la misma para todo el espectro, la Ec. (9) se puede usar junto con la Ec. (7) para generar una transformación aproximada como la que se muestra en la Fig. 14. Métodos alternativos de análisis para la intensidad de los espectros se describen en las Refs. 17 y 18.

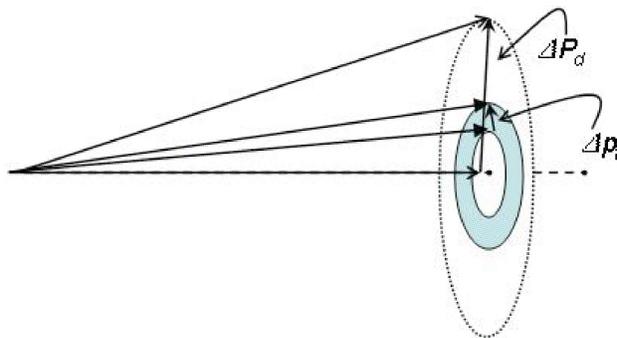


FIGURA 13. Diagrama de momentos en el sistema de referencia del laboratorio (SR-L). El disco oscuro representa el ángulo sólido que subtende el analizador de placas paralelas hacia el punto donde la molécula se disocia. El disco exterior representa al ángulo dinámico asociado al fragmento.

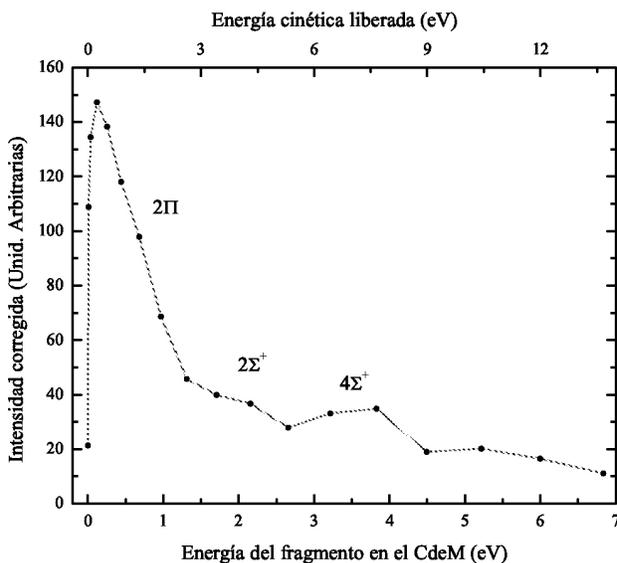


FIGURA 14. Espectro corregido según la Ec. (9) y con la Ec. (6) correspondiente al espectro de la Fig. 11. Las energías cinéticas liberadas (ECL) de los estados Σ difieren en aproximadamente 5% con los de la Ref. 19 debido al ancho de los picos. El pico central se debe principalmente a estados predisociativos del N_2^+ y se aprecia la contribución del estado 2Π . Como las masas de los dos fragmentos son iguales, $ECL = 2 \cdot \epsilon_f$ (escala superior en la gráfica).

4. Secciones transversales totales

Las técnicas que se describen en esta sección están parcialmente documentadas en las referencias; sin embargo no tenemos conocimiento de una referencia completa y con el detalle que aquí se presenta. Para una lectura complementaria referimos al lector al libro de texto de McDaniels [20] en donde se describen en forma más amplia las ecuaciones para los fragmentos. El método que describimos aquí se conoce como el del aumento de la señal con la presión (*grow rate*, en inglés). Para esta sección se utiliza como ejemplo la medición de la sección transversal de doble captura electrónica de protones en argón en el intervalo de energías en donde están bien establecidas, y en las cuales opera el acelerador.

Si N_i partículas en estado inicial i inciden en una celda de gas de densidad n y de longitud ℓ , el número de partículas en estado final N_f , que han sufrido un cambio debido a la interacción, está dado por

$$N_f = N_i n \ell \sigma_{if}, \quad (10)$$

donde σ_{if} se define como la sección transversal total del proceso que induce el cambio de estado de i a f . En el producto de las tres últimas cantidades del lado derecho de la ecuación: $n \ell \sigma_{if}$ todas las dimensiones deben cancelarse, por lo tanto, la sección transversal σ_{if} tiene unidades de área y se interpreta como la probabilidad por unidad de área por partícula para que un cambio de estado i a f tenga lugar. Al número $n \ell = \pi$ se le conoce como *grosor de la celda*.

En un experimento, las partículas del haz colisionan con el gas residual del sistema de vacío antes de llegar a la celda y pueden sufrir un cambio de estado que no tiene relación con el gas que se inyecta en la celda. Para eliminar este efecto, del número de partículas N_f que emergen de la celda cuando la presión del gas es mayor que cero, se resta el número de partículas N_f^0 cuando la presión en la celda es cero; entonces, la fracción F de partículas en estado f se escribe como

$$F_f = \frac{N_f - N_f^0}{N_i^0}, \quad (11)$$

en donde N_i^0 es el número de partículas en estado inicial i . El caso de mayor interés práctico para el análisis subsecuente corresponde a cuando N_i^0 se refiere a la corriente del haz de iones, en cuyo caso, la presión en la celda de gas se debe mantener tan baja como para que la corriente de haz no cambie apreciablemente al pasar por la celda de gas y no sean necesarias otras correcciones.

Entonces la Ec. (10) se puede reescribir en términos de las fracciones como

$$dF_f = F_i \sigma_{if} d\pi. \quad (12)$$

Una suposición importante para la validez de las Ecs. (10) y (12) es que el cambio de estado de i a f sea el resultado de una interacción única o una *colisión simple* con

el gas de la celda. Cuando la partícula incidente o proyectil sufre más de una colisión puede cambiar su estado final más de una vez. Adicionalmente, también puede haber más de un estado inicial y final accesibles a la partícula. Por ejemplo, un protón (un átomo de hidrógeno que ha perdido su electrón: H^+) tiene tres posibles estados finales que son resultado de atravesar la celda de gas: que capture un electrón, $H^+ + \text{gas} \rightarrow H^0$; que capture dos electrones, $H^+ + \text{gas} \rightarrow H^-$; o que pase por el gas de la celda sin intercambiar sus electrones, $H^+ + \text{gas} \rightarrow H^+$. La sección transversal asociada a que el protón capture un electrón del gas de la celda se denota por σ_{10} , y las secciones para los otros dos posibles estados se escriben como σ_{1-1} y σ_{11} respectivamente.

Por ejemplo, si el proyectil colisiona varias veces con el gas de la celda, entonces el incremento en la fracción F_{-1} es el resultado de los procesos cuya sección transversal *abonan* a F_{-1} , menos las secciones transversales de los procesos en los que se pierde, en este caso, la fracción de iones con carga negativa:

$$dF_{-1} = F_0 \sigma_{0-1} d\pi + F_1 \sigma_{1-1} d\pi - F_{-1} (\sigma_{-10} + \sigma_{-11}) d\pi. \quad (13)$$

Una forma general de esta última ecuación, para un sistema de tres componentes (como es el caso del H^+ , en donde los posibles estados son: 0, 1 y -1) son las tres ecuaciones diferenciales que resultan de permutar los subíndices de la Ec. (13):

$$\frac{dF_i}{d\pi} = F_j \sigma_{ji} + F_k \sigma_{ki} - F_i (\sigma_{ij} + \sigma_{ik}) \quad (14)$$

con la restricción

$$\sum_{i=1}^3 F_i = 1. \quad (15)$$

La historia de la solución al sistema de ecuaciones diferenciales Ecs. (14) es curiosa en el sentido de que por muchos años los diferentes autores discrepaban en los signos de las expresiones para las F_i . Por ahora lo que nos interesa saber es que la solución al sistema de Ecs. (14) es de la forma

$$F_i = F_{i\infty} + a_i e^{-r_1 \pi} + b_i e^{-r_2 \pi}, \quad (16)$$

donde las constantes $F_{i\infty}$, a_i , r_1 , b_i , y r_2 son funciones de las seis secciones transversales que se obtienen de permutar los subíndices ij en σ_{ij} . Para el caso particular en que el haz de iones mantiene su identidad durante la colisión (cuando la presión de la celda se mantiene tan baja como para que la intensidad del haz no cambie apreciablemente durante la colisión), entonces la fracción inicial es de una sola clase (F_k y F_i del lado derecho de las Ecs. (14) son cero). En este caso, se ha demostrado que la solución a las Ecs. (14) con las restricciones de las Ecs. (15) se puede expresar como una serie de potencias de π , que para el caso de una serie de segundo orden la solución es

$$F_i = \sigma_{ij} \pi + A \frac{\pi^2}{2}, \quad (17)$$

donde A es una constante que depende de las secciones; para fines ilustrativos aquí reproducimos su valor:

$$A = (\sigma_{kj} - \sigma_{ij}) \sigma_{ik} - (\sigma_{ij} + \sigma_{ji} + \sigma_{jk}) \sigma_{ij} \quad (18)$$

Sin embargo, cuando la dependencia entre el *grosor de la celda* π y la fracción F_i es lineal, el segundo término de la solución de la Ec. (17) es cero y se reduce al caso más simple que es el de la Ec. (12). Bajo condiciones del experimento adecuadas, es posible lograr que la relación entre π y F_i sea lineal y entonces derivar la sección transversal del cociente π/F_i . No obstante, para aplicar este método es necesario comprobar que las condiciones experimentales corresponden al caso lineal o a condiciones de *colisión simple*. Como la linealidad entre π y F_i depende de la sección σ_{ij} , de la energía de interacción, de la presión en la celda y de la densidad del haz, es importante verificar estas condiciones cada vez que se mide una sección transversal. El método consiste en medir el incremento de las cuentas de las partículas asociadas a determinada sección (en este ejemplo las cuentas por segundo de iones $N_{(H^-)}$) como función de la presión en la celda (de donde se deriva el grosor π). Tal es el caso del ejemplo que se muestra en la Fig. 15, donde se observa que la dependencia entre las cuentas de $N_{(H^-)}$ acumuladas durante cierto tiempo es lineal como función de la presión en la celda de gas y son la clase de datos que se obtienen directamente del experimento.

La Fig. 16 se derivó de los datos que se muestran en la Fig. 15. Para ello, se mide la presión en la celda de gas, se monitorea la corriente I del haz de iones (en este caso H^+), se cuentan las partículas de H^- durante un tiempo determinado, al que se le conoce como el tiempo de acumulación t_{ac} ; y con ayuda de la Ec. (11). Con estos datos, la fracción F_{-1} se obtiene a partir de

$$F_{-1} = \frac{e \cdot (N_{(H^-)} - N_{(H^-)}^0)}{t_{ac} \cdot (I_{(H^+)} - I_{fuga})}, \quad (19)$$

donde e es la carga del electrón, $N_{(H^-)}$ el número total de cuentas acumulado durante t_{ac} segundos, $e I_{(H^+)}$ es la corriente del haz en amperes. La formación de iones H^- debida a la interacción del haz con el gas residual se elimina restando $N_{(H^-)}^0$, que es el número de cuentas acumulado en t_{ac} segundos cuando la presión en la celda es cero. I_{fuga} es la corriente que se mide cuando el haz de iones se ha retirado de la caja de Faraday, es instrumental y depende de la resistencia y las conexiones del aparato con el que se mide $I_{(H^+)}$.

El grosor de la celda $\pi = n\ell$ se deriva con ayuda de la ecuación de estado de los gases ideales:

$$\pi = \frac{\ell P}{\kappa T}, \quad (20)$$

donde P es la presión en Pascal de la celda de gas ℓ su *longitud efectiva* en metros, T la temperatura en Kelvin, y κ la constante de Boltzman.

Con una relación lineal entre las variables mencionadas, como en la Fig. 15, se establece la condición de *colisiones simples* con el gas de la celda. De esta forma, el análisis necesario para derivar las secciones consiste en calcular la pendiente de una recta que ajuste a los datos. En caso de que la relación no sea lineal, también es posible derivar las secciones transversales de un ajuste polinomial, en donde, los coeficientes del polinomio son función de secciones transversales de más de un proceso, como en la Ec. (18).

Otro aspecto necesario para medir secciones con el presente acelerador es la calibración del detector (en este caso un multiplicador de electrones ME). Para aplicar el método que se describe en este artículo se necesita contar con un analizador de señal que tenga la posibilidad de variar el umbral de corte mínimo, como en este experimento que cuenta con un SCA (*single channel analyzer*) marca ORTEC. Una virtud importante de este método es que se puede aplicar a cualquier clase de multiplicador de electrones, incluso a una placa de canales multiplicadores (*channel plate*).

Adicionalmente, este método de calibración permite eliminar el ruido de los detectores debido a partículas de baja energía que no tienen relación con la física del experimento, como electrones de emisión secundaria, ruido normal en la electrónica y la corriente de electrones debida a la resistencia finita del detector, la cual cambia con el tiempo de uso del ME y el nivel de vacío base de la cámara que los contiene. Como prueba, logramos reproducir el valor de una sección transversal con el medidor de presión encendido, que tiene un filamento incandescente cuyos electrones son detectados por el ME e imitan una fuente de ruido no relacionado con la física del experimento.

El experimento de calibración del ME consiste en medir, como función del umbral o discriminador del SCA, la señal del ión de interés (en este caso las cuentas de H^-). Un ejemplo de este experimento se muestra en la Fig. 17. La tasa de conteo que se necesita para la determinación de las secciones transversales es la del nivel cero del discriminador. Sin embargo, a un nivel muy bajo de este umbral (cerca del cero) la señal debida al ruido del detector es mucho mayor que aquélla que se debe a las partículas energéticas y que contienen la física del experimento, por lo tanto la tasa de conteo carece de sentido a valores cercanos a cero en el discriminador. La verdadera tasa de conteo se deriva de la extrapolación de la curva que se ajusta a los puntos de la Fig. 17. Como el experimento se realiza a un valor fijo de este umbral (en este caso a 1.5 V), entonces las secciones transversales que se miden con este parámetro se deben escalar por un factor $f_{detector}$ dado por

$$f_{detector} = \frac{^{ext}N_i(V=0)}{N_i(V=1.5)}, \quad (21)$$

donde $^{ext}N_i(V=0)$ corresponde a la tasa de conteo extrapolada en $V=0$ y $N_i(V=1.5)$ a la tasa de conteo del experimento cuando $V=1.5$.

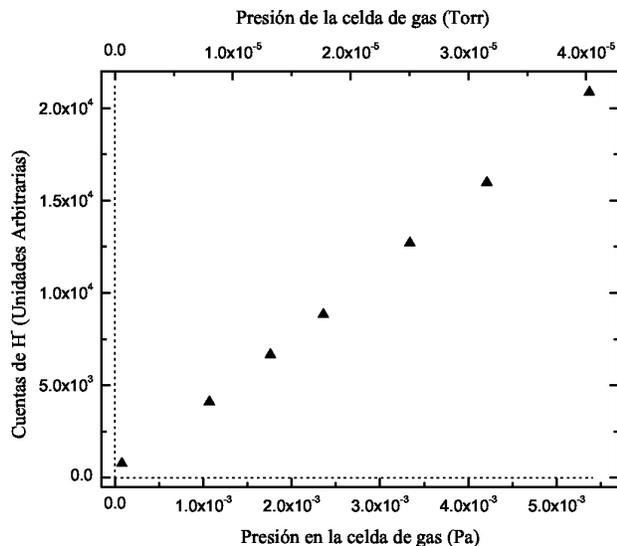


FIGURA 15. Datos que se obtienen directamente del experimento. En este caso se muestra el crecimiento de la señal de H⁻ resultado del proceso de doble captura de H⁺ en colisión con Ar. De estos datos se deriva la Fig. 16 de la que se obtiene la sección transversal σ_{1-1} . La presión base de la región de interacción es $\sim 1 \times 10^{-5}$ Pa ($\sim 8 \times 10^{-8}$ Torr).

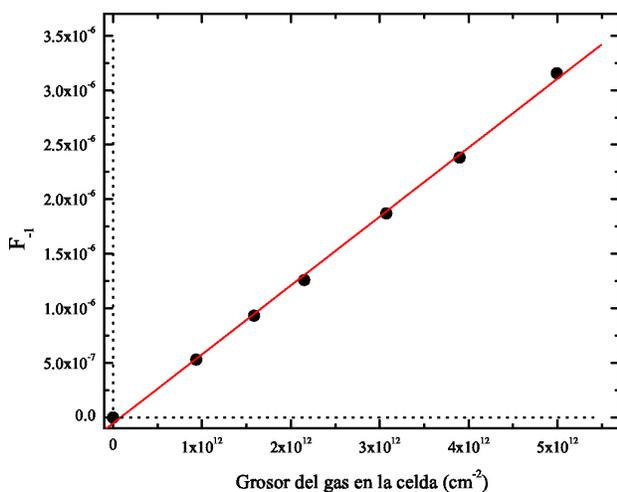


FIGURA 16. Dependencia del fragmento F_{-1} resultado del proceso de doble captura electrónica de protones en argón ($H^+ + Ar \rightarrow H^- + Ar^{2+}$) a una energía de 10 keV. Los puntos se han derivado de los datos de la Fig. 15 y las Ecs. (19) y (20). La línea es un ajuste por mínimos cuadrados a los puntos cuya pendiente corresponde a la sección σ'_{1-1} . El resultado para la sección en este caso es $6.32 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$, aquí no se ha considerado aún el factor de corrección del detector (ver Fig. 17).

Otro aspecto importante que se necesita comprobar durante la medición de las secciones transversales, es la capacidad del sistema para tomar en cuenta a todas las partículas que se producen en la celda de gas. Una prueba consiste en medir la tasa de conteo de la señal de H⁻ como función del valor de la diferencia de potencial aplicada a las placas analizadoras. Cuando la tasa de conteo no cambia, es una indicación de que el ancho del haz de partículas (en esta ca-

so de H⁻) es menor que el área de aceptación del detector, con lo que queda establecido que el sistema colecta todas las partículas. En la Fig. 18 se muestra un ejemplo de este experimento, que se debe repetir para todos los casos; la intensidad tiene una región constante, donde la tasa de conteo no cambia apreciablemente como función del valor de la diferencia de potencial en las placas.

Finalmente, para verificar la calibración absoluta del experimento en lo que se refiere a la medición de las secciones

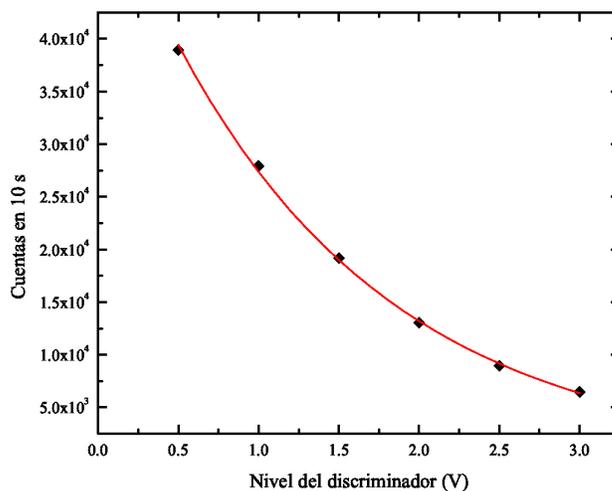


FIGURA 17. Cuentas de iones H⁻ acumuladas en diez segundos como función del nivel de discriminador o umbral del analizador de señal (SCA por las siglas en inglés de *single channel analyser*). La función exponencial $y = 56815 \cdot e^{-0.73x}$ se ajustó por mínimos cuadrados. El factor de calibración del detector $f_{detector}$ está dado por la Ec. (21) que en esta caso es $56815/19002 = 2.99$.

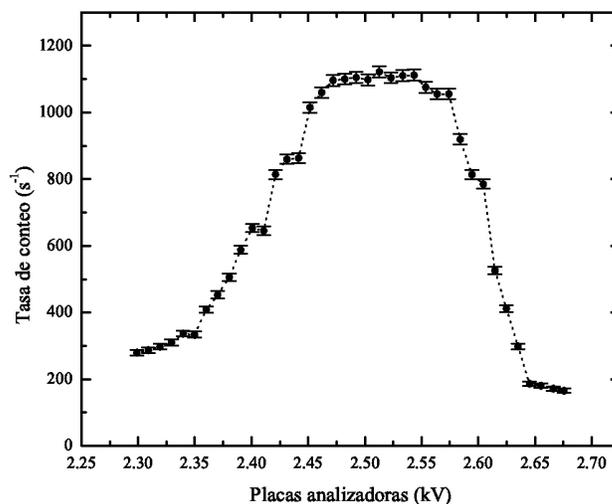


FIGURA 18. Cuentas de iones H⁻ acumuladas en diez segundos como función del valor de la diferencia de potencial en las placas analizadoras en colisión con Ar a una energía de 10 keV. La señal tiene un *plateau* entre 2.47 kV y 2.54 kV porque el ancho del haz de las partículas de H⁻ es menor que el área de aceptación del detector (ME), con lo que se garantiza que todas las partículas son contadas por el detector.

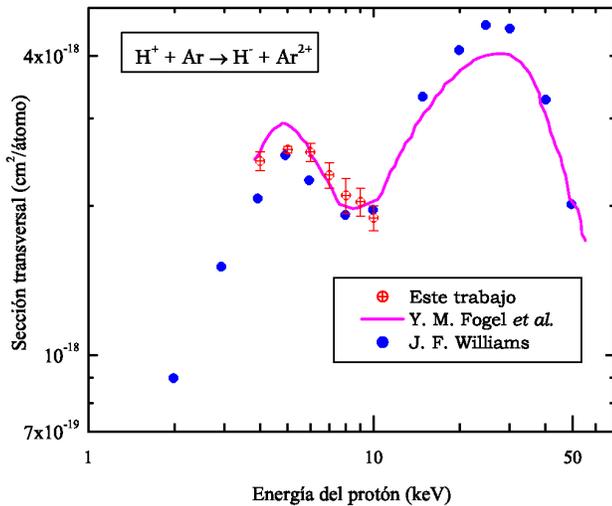


FIGURA 19. Sección transversal total de doble captura electrónica (σ_{1-1}) de protones en colisión con Ar. Las barras de incertidumbre corresponden a la desviación estándar. Tanto la tendencia decreciente con la energía de colisión, como el máximo relativo de la sección transversal se reproducen bien. Los datos que ahora se consideran de referencia son de Williams [21] y Fogel *et al.* [22].

transversales, se midió la sección de doble captura electrónica de protones en Argón σ_{1-1} : $H^+ + Ar \rightarrow H^- + Ar^{2+}$. Tanto los protones del haz inicial (el H^+ no tiene electrones), como los iones resultantes (el H^- no posee estados excitados), no tienen estructura electrónica, y por lo tanto el valor de σ_{1-1} no es susceptible a variaciones por la presencia de estados metaestables que pueden ser función de parámetros difíciles de controlar en el experimento como la presión o el nivel de incandescencia del filamento en la fuente de iones. Además es un valor bien establecido, que se puede medir sin modificar este acelerador.

En la Fig. 19 se muestran los resultados de la presente medición de la sección transversal total σ_{1-1} en el intervalo de energías de colisión de 4 keV a 10 keV. A energías mayores de 4 keV los valores de esta sección están bien establecidos y son suficientes para una calibración confiable, especialmente a la energía de 10 keV, para la cuál se conoce muy bien su valor que reproducimos aquí para referencia futura:

$$\sigma_{1-1} = 1.95 \text{ Mb}, \quad (22)$$

donde 1 Mb (megabarn) = $1 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$, para $H^+ + Ar$. Es importante notar que el máximo relativo de la sección se reproduce muy bien, y es un indicativo de la calidad del método experimental.

5. Fuentes de incertidumbre

Un aspecto importante en el análisis de los resultados son las fuentes de incertidumbre en los datos experimentales. Todas las mediciones que se realizan con este acelerador tienen asociadas incertidumbres de origen sistemático y estadístico.

TABLA I. Incertidumbres de origen sistemático expresadas en porcentajes.

Variable	Incertidumbre %
V_0 y v	--
E_0	1.0
I_{H^+} e I_{fuga}	1.0
ℓ	10.0
P	1.0
T	3.0

Las incertidumbres sistemáticas de las variables del experimento se presentan en la Tabla I. En los casos de las diferencias de potencial, la energía, las corrientes y la presión; las incertidumbres listadas son nominales (dadas por el fabricante de los aparatos con que se miden). En el caso de la longitud efectiva ℓ el valor listado corresponde a la diferencia entre la longitud geométrica y la longitud efectiva (con corrección del flujo de gas molecular[14]).

Las velocidades V_0 y v se derivan de los valores de las diferencias de potencial del analizador de velocidades (ver la Fig. 11). El mayor valor posible asociado a la incertidumbre sistemática de estas diferencias de potencial es de 1.0% (listado en la Tabla I) y corresponde a la incertidumbre nominal. Sin embargo, dado que el sistema de control digital tiene una resolución muy alta, se espera que esta fuente de incertidumbre sea despreciable, de tal forma, que se asume que no se propaga en forma significativa al derivar las velocidades a partir de estas diferencias de potencial.

El parámetro E_0 se mide con un multímetro en combinación con un atenuador de alta precisión, la incertidumbre que se presenta en la Tabla I es el resultado de combinar las incertidumbres nominales (dadas por el fabricante) de ambos instrumentos.

La intensidad de los espectros se mide con un multiplicador de electrones (conocido como *channeltron*). Por lo tanto, la incertidumbre asociada a la intensidad de los espectros, es la incertidumbre del conteo de estos dispositivos (que es el mismo caso que para una placa multicanal). El resultado del conteo de cualquier multiplicador de electrones es una distribución normal. Es decir, para una tasa de conteo fija, el resultado de varias mediciones realizadas con uno de estos dispositivos es una distribución, que en general se puede aproximar a una distribución de Gauss. Para N cuentas no correlacionadas que siguen una distribución normal, la incertidumbre es $\pm\sqrt{N}$, que en general, se cumple cuando se mide varias veces la misma variable [23].

La incertidumbre de origen sistemático ϵ_σ asociada a la medición de las secciones totales σ , se propaga de acuerdo al cociente entre las Ecs. (19) y (20), que es de donde se deriva. Según el método que se use para propagar la incertidumbre de σ , se puede demostrar que una cota superior para la incertidumbre de origen sistemático ϵ_σ es de 17%. Esta fuente de

incertidumbre corresponde a un solo punto de la Fig. 15, que es la curva de crecimiento de la señal y de donde se deriva un valor simple de σ (ver Fig. 16). El método que se utiliza aquí consiste en medir varios puntos simples para obtener una distribución de valores de $\{\sigma_i\}$ que es una distribución normal. En la Fig. 19 se grafica el promedio de la distribución $\bar{\sigma}$ y la mitad de su desviación estándar ς , es decir,

$$\bar{\sigma} \pm \frac{\varsigma}{2} \tag{23}$$

La incertidumbre total $\epsilon_{\sigma}^{total}$, es la combinación de la incertidumbre de origen sistemático y de la desviación estándar de la distribución normal de los puntos relacionados a una medición de σ , a la que hemos denotado con ς . Dado que estas incertidumbres son independientes, no correlacionadas,

$$(\epsilon_{\sigma}^{total})^2 = \epsilon_{\sigma}^2 + \varsigma^2. \tag{24}$$

En el caso de las secciones que se utilizan en este trabajo para calibración del acelerador, la incertidumbre de origen estadístico resultó mucho mayor que la incertidumbre sistemática:

$$\varsigma \gg \epsilon_{\sigma}; \tag{25}$$

y la incertidumbre que se reporta, en este caso, es:

$$\epsilon_{\sigma}^{total} \approx \varsigma. \tag{26}$$

que es consistente con la Ec. (23).

6. Simulación de trayectorias de iones

Las Figs. 3, 4, 8 y 9 se realizaron con ayuda de un programa de simulación (SIMION 3D) diseñado para el estudio y análisis de iones que vuelan en presencia de campos eléctricos generados por arreglos de electrodos. Se supone que el camino libre medio de los iones es infinito, y no toma en cuenta la repulsión electrostática entre los iones que componen los haces (conocido como efecto de la densidad de espacio y carga)[24].

Para resolver las trayectorias, el programa encuentra el potencial electrostático en todos los puntos. Para ello, resuelve la ecuación de Laplace (en 2D) o la de Poisson (en 3D) con el método de diferencias finitas, donde, los electrodos actúan como condiciones de frontera.

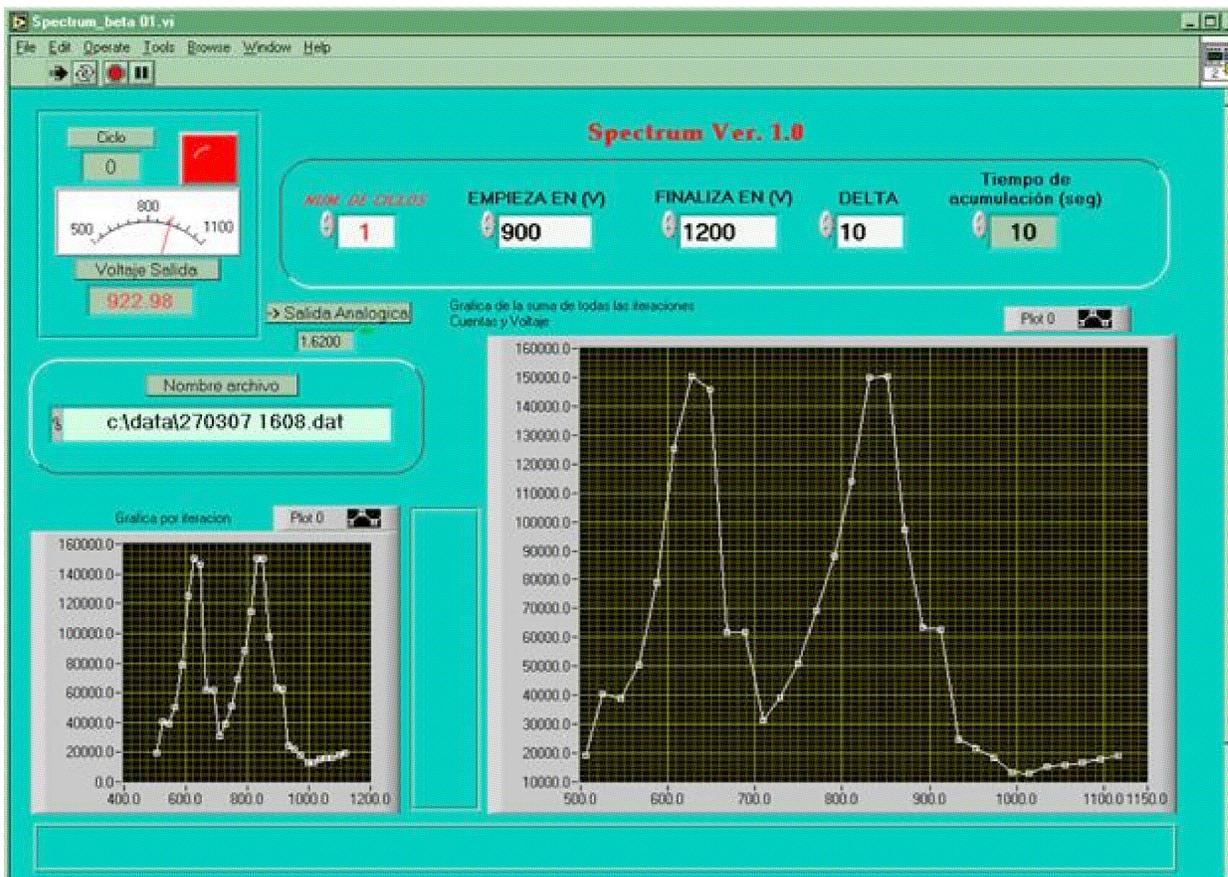


FIGURA 20. Instrumento virtual de la interfaz para el usuario del programa Espectro ver 1.0. Se muestra un ejemplo de la intensidad de los fragmentos de $\text{CO}_2^+ + \text{He}$ como función del valor de la diferencia de potencial en las placas analizadoras, el primer pico corresponde al fragmento C^+ y el segundo a O^+ .

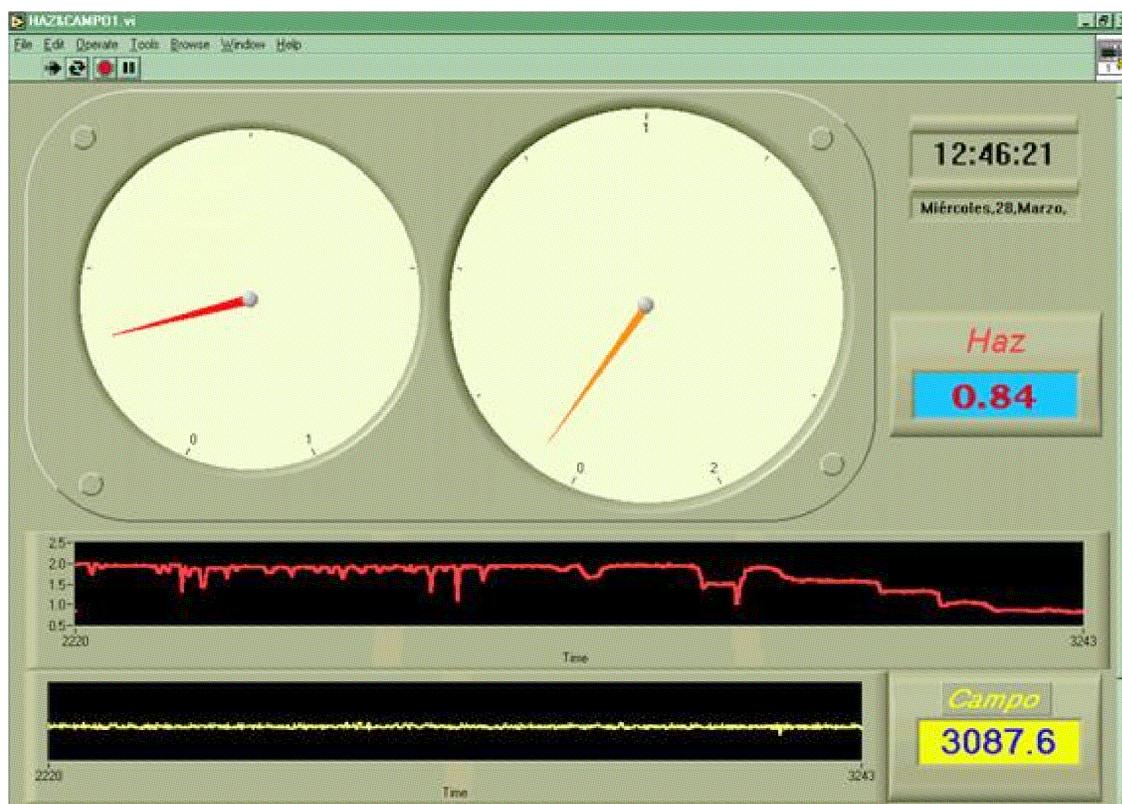


FIGURA 21. Instrumento virtual para monitoreo de la intensidad del haz de iones. Durante la preparación del experimento se optimiza la intensidad del haz en la caja de Faraday de colimación (ver Fig. 1), las agujas indican la intensidad del haz I , la izquierda es el indicador fino y la derecha el indicador grueso. Las gráficas en la parte inferior muestran las intensidades del haz y del flujo de campo magnético B como función del tiempo en intervalos de 200 ms en un total de cuatro minutos. En este caso B es estable e I ha sido reducida a la mitad con ayuda de las navajas de colimación del Haz (ver Fig. 1).

Para construir un arreglo de electrodos con este programa, primero se define una *trama* de puntos que están en el programa, distribuidos simétricamente. Enseguida, se definen las porciones de esta trama que corresponderán a electrodos junto con su valor de potencial electrostático. Además, el programa incorpora una estrategia en la que el usuario puede definir cortes transversales de los electrodos y después, mediante una operación de simetría generar el arreglo correspondiente en 3D.

Los grupos de iones se definen en este simulador de acuerdo a su masa, carga y velocidad; estos se muestran como líneas o puntos que vuelan a lo largo de su trayectoria.

El resultado es un programa cuyo uso está bien establecido en el campo de la física atómica con el que se puede modelar un gran número de instrumentos, como espectrómetros de tiempo de vuelo, trampas de iones, y cuadrípolos.

7. Adquisición de datos y control del experimento.

La mayoría de los experimentos modernos son an irrealizables sin el apoyo de un sistema de control y adquisición de datos comandado por un ordenador. El control, sobre el equipo que está involucrado en el presente experimento, se realiza

con una tarjeta de interfaz entre el CPU y los instrumentos de medición, como el gaussmetro en el imán, el electrómetro conectado a las cajas de Faraday o los contadores asociados a los detectores (ver Fig. 1). La tarjeta que se utiliza cuenta con salidas digitales, entradas analógicas y con fuentes de poder de alta resolución de -10 V a 10 V. Las salidas digitales y analógicas, así como las entradas analógicas son el puente entre un programa de PC y la electrónica asociada al experimento. A los programas que comandan instrumentos se les llama *instrumentos virtuales* (*vi*); las Figs. 20 y 21 son ejemplos de esta clase de interfaz y están escritos con ayuda de un lenguaje comercial gráfico de programación conocido como LabVIEW (de la compañía National Instruments) cuyo uso es común en investigación y en la industria. Otros programas similares son el K-max y el DAPL (de Microstar Laboratories).

Estos lenguajes de programación gráfica se especializan en procesos de control de equipo y de adquisición de datos. Utilizan una interfaz visual con el usuario, que permite mantener y controlar desde la pantalla de la PC a los instrumentos del experimento. Tienen la capacidad de realizar funciones de análisis numérico en tiempo real, y pueden realizar varias tareas simultáneamente, como el control de variables, la adquisición y el análisis de las mediciones en el experimento.

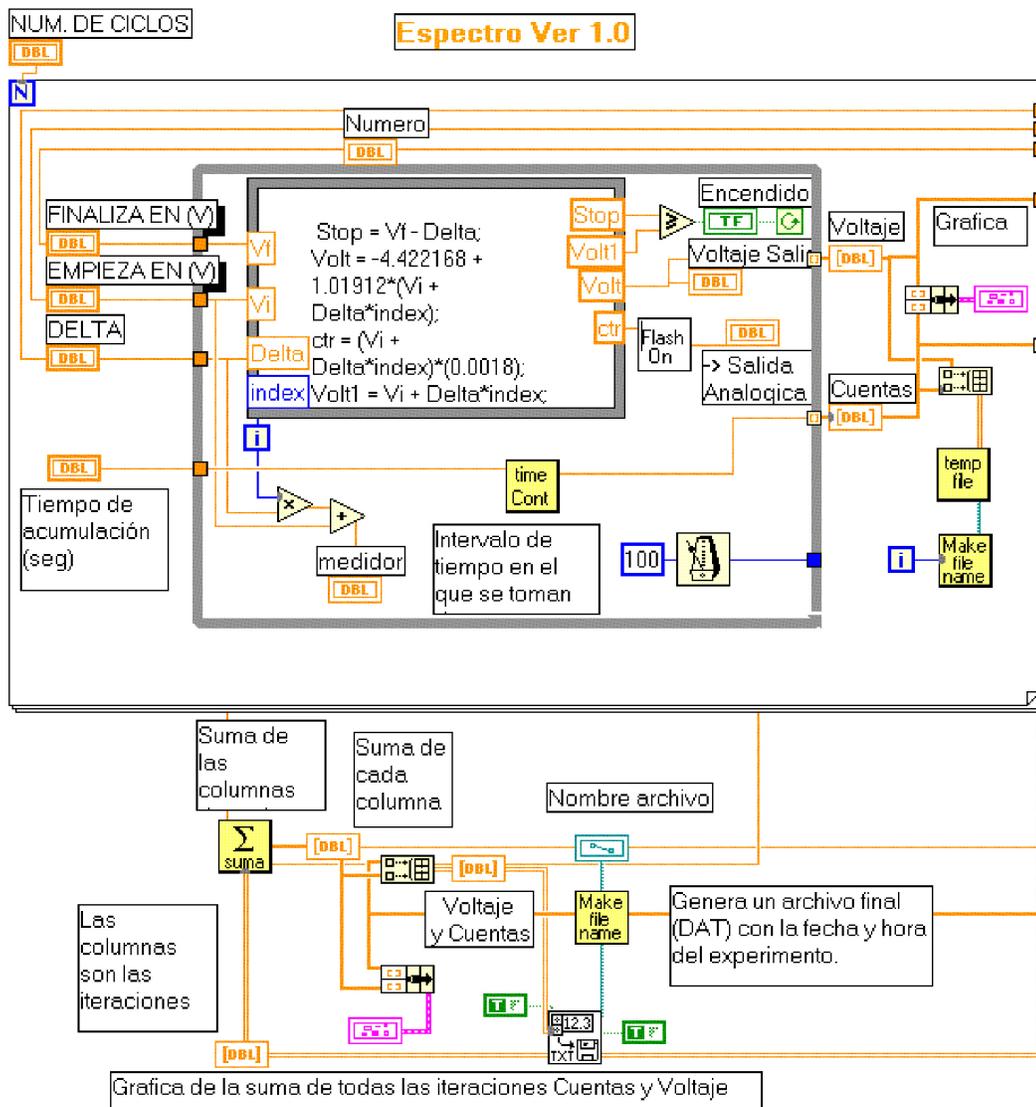


FIGURA 22. Código del programa Espectro. Su función es adquirir los datos del detector como función del valor de la diferencia de potencial, un ejemplo es el espectro de la Fig. 11. Los comandos consisten en iconos que realizan funciones diversas. Por ejemplo, en el centro se muestra un cuadro de fórmula, en donde se escribe una ecuación que procesa los datos, las variables independientes o de entrada están a la izquierda del cuadro.

En esta clase de lenguajes de programación las intrucciones consisten en iconos con propiedades y funciones, que luego se conectan entre sí, de manera que el código se *dibuja*. Este sistema de programación se conoce como *lenguaje G* y en la Fig. 22 se muestra un ejemplo.

Los diversos elementos en el diagrama de la Fig. 22 corresponden a indicadores, operaciones numéricas, procesos, subprogramas y controles para la electrónica. El programa funciona en ciclos, en cada uno se cambia el valor de la diferencia de potencial en el analizador de velocidades y durante un tiempo de acumulación t_{ac} se cuenta el número de partículas (iones) en el detector. El resultado de cada iteración se muestra en la pantalla del programa como una graficadora virtual -que funciona en tiempo real- y otra parte del programa se encarga de almacenar los datos en un archivo para su posterior análisis. La Fig. 20 muestra la pantalla de

usuario del programa Spectrum, este es sólo un ejemplo de la utilidad que tienen los lenguajes especializados en el control y adquisición de datos en los laboratorios de investigación. En la Fig. 21 se muestra otro ejemplo de los programas de control instalados recientemente en el acelerador.

8. Nota final

Los métodos de análisis, las técnicas experimentales y las herramientas aquí descritas son de uso general en otros campos de la física experimental, como es el caso del análisis de la señal de los detectores, la espectroscopía de masas, las interfaces de control y adquisición de datos, y los métodos de análisis de tiempo de vuelo; ya sea con el uso de funciones de eficiencia y con simulaciones de trayectorias de iones.

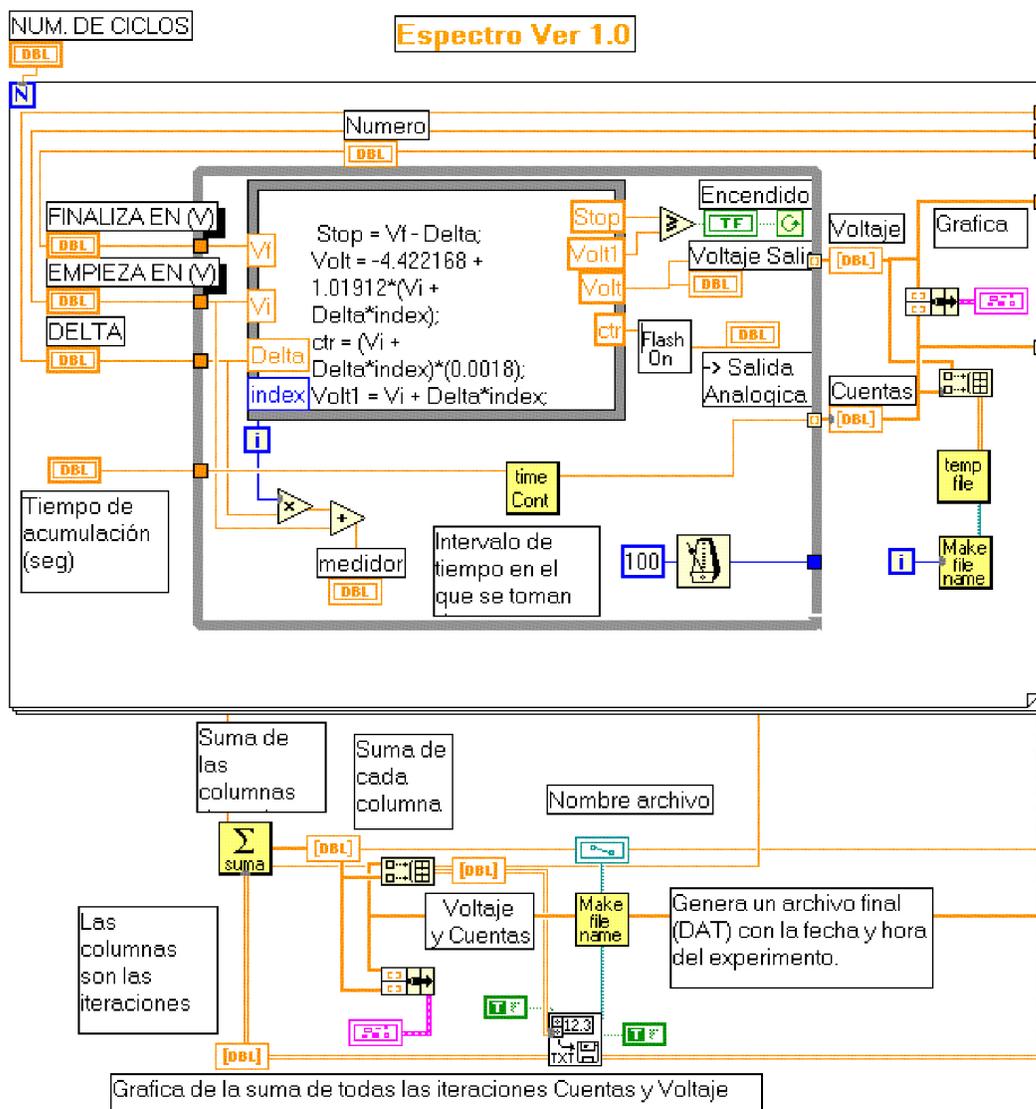


FIGURA 22. Código del programa Espectro. Su función es adquirir los datos del detector como función del valor de la diferencia de potencial, un ejemplo es el espectro de la Fig. 11. Los comandos consisten en iconos que realizan funciones diversas. Por ejemplo, en el centro se muestra un cuadro de fórmula, en donde se escribe una ecuación que procesa los datos, las variables independientes o de entrada están a la izquierda del cuadro.

A lo largo del desarrollo de la física los aceleradores han ayudado a generar conocimiento y a desarrollar tecnologías para el bienestar de la raza humana. Así mismo, estos instrumentos también han constituido el eje central del desarrollo de infraestructuras que han enriquecido la formación de científicos, ingenieros y técnicos en nuestro país.

Agradecimientos

Los autores deseamos agradecer las facilidades otorgadas por el Dr. Ignacio Álvarez T. y por la Dra. Carmen Cisneros G. en la realización de este trabajo. Además, reconocemos los apoyos del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT S52515-F) y de la Universidad Nacional Autónoma

de México a través del Instituto de Ciencias Físicas y de la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (UNAM DGAPA IN-106407). O. González-Magaña agradece a la DGAPA por la beca otorgada, así mismo C. Gleason agradece a CONACyT por la beca asignada.

Agradecemos las valiosas aportaciones de los técnicos: Ing. Armando Bustos, Anselmo González, Eladio Pérez y Reyes García del Instituto de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma de México, Campus Morelos. Agradecemos también a David A. Dahl del Laboratorio Nacional de Ingeniería de Idaho por el programa de simulación SIMION y las fructíferas discusiones con Manuel Combes de la Ecole Normale Supérieure de Cachan.

1. J. Gribbin, *Q is for quantum*, The Free Press, New York, NY 10020.
2. M. Larsson, *Rep. Prog. Phys.* **58** (1995) 1267.
3. A.M. Covington *et al.*, *Phys. Rev. A* **66** (2002) 062710.
4. W.A. Isaacs, C.W. McCurdy, T.Ñ. Rascigno y M. Baertschy, *Science* **286** (1999) 2474.
5. Toshio Kusakabe, Hiroyuki Tawara, Mineo Kimura, Jiang ping Gu y R.J. Buenker, *Phys. Rev. A* **75** (2007) 044701.
6. N.V. Maydanyuk *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 243201.
7. Toshio Kusakabe, Mineo Kimura, Lukáš Pichl, F.J. Buenker y Hiroyuki Tawara, *Phys. Rev. A* **68** (2003) 050701.
8. S. Datz, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 5555.
9. H. Luna y E.C. Montenegro, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 043201.
10. I. Alvarez *et al.*, *Boletín de la Sociedad Mexicana de Física* **20** (abril-junio 2006) 79.
11. O. González-Magaña, *Disociación del catión de agua inducida por colisión con Helio*, Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias (2006).
12. L. Kervin, *Rev. Sci. Instrum.* **20** (1949) 36.
13. E.G. Johnson y A.O. Nier, *Phys. Rev.* **91** (1953) 10.
14. G. Hinojosa Aguirre, *Generación de los H_3^+ y D_3^+ en su estado base y estudio de su disociación polar*, Tesis doctoral, Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias (1997).
15. G.A. Harrower, *Rev. Sci. Instrum.* **26** (1955) 850.
16. H.O. Folkerts, F.W. Bliet, M.C. de Jong, R. Hoekstra y R. Morgenstern, *J. Phys. B* **30** (1997) 5833.
17. S.J. Anderson, *J. Chem. Phys.* **60** (1974) 3278.
18. S.C. Goh, *Collisional dissociation of H_3^+ studied by translational spectroscopy*. Tesis doctoral, Universidad del Oeste de Australia (1983).
19. E.W. Thulstrup y A. Andersen, *J. Phys. B* **8** (1975) 965.
20. E.W. McDaniel, J.B.A. Mitchell y E. Rudd, *Atomic Collisionw, heavy particle projectil* (John Wiley & Sons, New York, 1993).
21. J.F. Williams, *Phys. Rev.* **150** (1966) 7.
22. Y.M. Fogel, R.V. Mitin, V.J. Kozlov y N.D. Romashko, *Soviet Phys. JETP* **8** (1959) 390.
23. E.E. Derenzo, *Practical interfacing in the laboratory* (Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2003).
24. D.A. Dahl, J.E. Delmore y A.D. Appelhans, *Rev. Sci. Instrum.* **61** (1990) 607.