

ALGUNOS EXPERIMENTOS DE COLISIONES ATOMICAS Y MOLECULARES EN EL INSTITUTO DE FISICA DE LA U.N.A.M.*

Carmen Cisneros

Instituto de Física, U.N.A.M.

Apartado Postal 139-B

Cuernavaca, Mor., 62190

RESUMEN

Se presentan en este trabajo algunos de los últimos resultados obtenidos en el Laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares del IFU-NAM, en la investigación de fenómenos de disociación molecular de iones triatómicos y caracterización de enjambres iónicos.

ABSTRACT

We report some of the last results from experiments related to molecular dissociation of triatomic ions and diffusion of ions in a uniform field, carried out at the Laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares del Instituto de Física de la U.N.A.M.

* Trabajo apoyado por el CONACyT.

I. INTRODUCCION

La gran actividad reciente en la investigación sobre la estructura de la materia, respaldada fundamentalmente en el estudio de una amplia gama de procesos y las muy especiales interacciones entre fotones, átomos y moléculas, ha estimulado nuevos avances, y ha iluminado y acelerado, por su naturaleza interdisciplinaria, el avance de amplias ramas de la física, la química y la biología.

De igual importancia es la aplicación de la información que ofrecen los datos obtenidos mediante experimentos de colisión en muchas áreas fundamentales, como son: la obtención de energía, la ingeniería química y eléctrica, la física de plasmas, las ciencias de la atmósfera y las ciencias ambientales, etc.; igualmente importante es el esfuerzo que en conjunto se realiza para obtener, por ejemplo, energía en forma económica.

El interés fundamental del grupo de Colisiones Atómicas y Moleculares del IFUNAM, es la investigación de procesos físicos relacionados con la interacción de partículas neutras o cargadas con un blanco estático, en colisiones asistidas con láser y en la medida de la radiación producida en las interacciones; enunciado así el interés del grupo, se advierte su carácter interdisciplinario, los estudios sobre estructura y dinámica molecular que se realizan en los pequeños aceleradores se sitúan corrientemente en el área de la físico-química, mientras que algunos de los fenómenos que se estudian en el tubo de deriva o la cámara de descargas pertenecen a la química de plasmas.

Para ello ha sido necesario construir varios aparatos cuyas características están determinadas por la naturaleza misma de los procesos que se desea estudiar.

Los proyectos se han diseñado tratando de cubrir aspectos de investigación básica, investigaciones en relación con disciplinas fundamentales e investigación que eventualmente tenga un impacto industrial o económico.

Los proyectos principales que se realizan actualmente en el grupo son:

- 1.- Medida de secciones diferenciales y totales en colisiones ató

micas y moleculares a energías de keV. En particular espectroscopía translacional y distribuciones angulares en procesos de disociación y formación de iones negativos por captura electrónica simple o doble o por disociación polar.

- 2.- Colisiones asistidas por láser. Medidas de transición de estado a estado y medidas de interacción de átomos y moléculas excitadas con láser.
- 3.- Estudios de parámetros que gobiernan los movimientos de enjambres de iones y electrones en descargas eléctricas. Particularmente fenómenos de transporte, difusión y formación de cúmulos iónico-moleculares.

II. MEDIDA DE SECCIONES DIFERENCIALES Y TOTALES EN COLISIONES ATOMICAS Y MOLECULARES A ENERGIA DE keV

En esta sección se discutirán algunos ejemplos de experimentos recientes realizados en el laboratorio sobre procesos de disociación molecular, tanto por captura electrónica como de disociación polar, con objeto de ilustrar el tipo de información que es posible obtener a partir de los experimentos en donde se miden distribuciones angulares y distribuciones de velocidades (espectroscopía translacional) de los productos de disociación. Se discute también brevemente el empleo de la información fundamentalmente básica en esta área, para el desarrollo y avance de nuevas tecnologías.

El estudio de las moléculas y sus reacciones a escala macroscópica forma parte del amplio campo conocido como química-física. Este nombre claramente indica el carácter interdisciplinario de esta ciencia, no sólo relacionada directamente con la química y la física, sino también con la astronomía.

Más específicamente, los resultados obtenidos mediante estos estudios son de uso práctico en física de plasmas, química de la fase gaseosa, estudio del medio interestelar y las altas capas de la atmósfera, así como en el modelado de láseres y en el diseño y construcción de reactores de fusión.

Aunque se han hecho grandes progresos durante las últimas décadas a través de una muy fructífera interacción entre la teoría y el experimento, los esfuerzos principales aún están limitados a moléculas muy simples como son sistemas diatómicos y triatómicos. Los desarrollos más importantes en los últimos tiempos se han logrado a través del uso de haces atómicos y moleculares, láseres, técnicas sofisticadas de detección y computadoras.

En general, por conveniencia los experimentos en física molecular se pueden dividir en dos clases: la espectroscopía y los experimentos de colisiones. En el caso del estudio de ionización o disociación, así como en colisiones reactivas, la espectroscopía electrónica común proporciona datos fragmentarios, mientras que los experimentos de colisión son una valiosa herramienta. La investigación de colisiones controladas con partículas con el uso de técnicas de haces puede producir información directa sobre las reacciones entre esas partículas y proporcionar también información adicional sobre su estructura y fuerzas entre ellos. En casi todas las reacciones químicas al menos una ligadura tiene que romperse, es decir, ocurre una disociación. De los diferentes métodos experimentales para el estudio de procesos disociativos por colisión hemos elegido el análisis de las distribuciones angulares^(1,2,3) combinado con la espectroscopía translacional⁽⁴⁾. En esta última técnica se han realizado avances notables que hacen posible el análisis de velocidades aun de especies neutras^(6,7,8), y aunada a la espectroscopía de fotofragmentación se ha hecho posible la interpretación de varias de las características principales de H_2 ^(9,10).

Entre los principales experimentos realizados en este laboratorio, relacionados con procesos de disociación, están el estudio de la disociación polar y la disociación colisional de los iones moleculares hidrogenoides: H_3^+ , HD_2^+ y H_3^+ en diferentes gases y vapores metálicos^(1,4,12,13) a energías incidentes de 1.5 - 5.0keV.

La importancia de disociación polar de los iones triatómicos cuando los productos finales son tres partículas cargadas, ha sido mencionada por primera vez por Montgomery y Jaecks⁽¹⁴⁾, desde el punto de vista fundamental, como un método para el estudio de la dinámica de un-

bral de sistemas de tres cuerpos. En base a una comparación de la disociación polar con el canal Lyman α ($H_3^+ \rightarrow H_2^+ + H$ (2p)) concluyen que la sección para el proceso $H_3^+ \rightarrow H^+ + H^- + H^+$ es muy grande. Hiskes y Karo⁽¹⁵⁾, en sus estudios sobre generación en Tandem de iones negativos de descargas de hidrógeno de alta densidad, hacen una estimación cuantitativa de esta sección proponiendo para ella un límite superior de $3 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$. En base a estas observaciones y a la experiencia previa en la formación de iones negativos en procesos de disociación⁽¹³⁾ se midieron por primera vez en el laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares del IFUNAM los valores absolutos de las secciones diferenciales y se calcularon los valores de las secciones totales para la disociación polar de H_3^+ , HD_2^+ y D_3^+ y se obtuvo como primera conclusión que las secciones totales no son anormalmente grandes como se mencionó en los trabajos anteriores^(14,15).

El procedimiento experimental que se utilizó está descrito ampliamente en trabajos anteriores⁽³⁾. Los iones triatómicos moleculares formados en una fuente de iones tipo colutron se aceleraron a energías entre 0.33 y 1.61 keV/amu, y mediante un filtro de Wien se hizo el análisis de velocidades y posteriormente se deflectaron 10° con un campo eléctrico. Los iones así seleccionados se hicieron incidir sobre un gas blanco con una densidad de 3×10^{13} átomos/cm². Se midieron las distribuciones angulares de los iones D^- y H^- formados y se calcularon los valores absolutos de las secciones diferenciales calculadas mediante la relación:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N(\theta)}{T \epsilon \Pi I \Delta\Omega} ,$$

donde $N(\theta)$ es el número de cuentas H^- o D^- a un ángulo θ en sistema de laboratorio, T es el tiempo de observación, ϵ es la eficiencia del detector de iones negativos (Chaneltron), Π es el espesor del blanco, I es la intensidad del haz de iones incidentes y $\Delta\Omega$ es el ángulo sólido subtendido por el detector. Las distribuciones angulares se midieron en el intervalo de $\pm 3^\circ$ en sistema de laboratorio. Las distribuciones angulares

fueron comparadas con las medidas anteriormente⁽¹⁾, donde el proceso fundamental es la captura electrónica y se encontró una diferencia importante tanto en la forma como en los valores absolutos en cada uno de los procesos mencionados.

Se han medido también distribuciones de velocidades de los iones negativos en sistema de centro de masa usando el método de espectroscopía translacional, los resultados obtenidos muestran que los iones se forman con una energía en centro de masa muy pequeña; pero consideramos que son necesarias más medidas de las distribuciones de velocidades y correlaciones angulares de las tres partículas a fin de comprobar las descripciones (generalizadas) que existen sobre la formación y fragmentación debida a la interacción coulombiana en complejos triatómicos⁽¹⁶⁾. Nuestros resultados han demostrado por una parte que las secciones totales no son tan grandes como se esperaban, que el proceso de formación del ion negativo es realmente a través de la disociación polar de la especie triatómica, que existe en efecto isotópico⁽¹⁷⁾ y que el comportamiento del sistema es muy diferente al que se observa cuando el ion negativo es formado mediante un proceso de captura electrónica.

III. ESTUDIOS DE COEFICIENTES DE IONIZACION, VELOCIDADES DE DERIVA Y COEFICIENTES DE DIFUSION LONGITUDINAL DE ENJAMBRES IONICOS

La demanda constante de datos sobre el comportamiento de gases electronegativos o mezclas de ellos, en condiciones de descarga eléctrica, mantiene vivo un interesante campo conocido como física básica de gases. Los aislantes gaseosos actuales o no, están claramente caracterizados, como es el caso del SF_6 , o bien no satisfacen las necesidades de la industria eléctrica; las soluciones de los muchos y variados problemas y necesidades de los aislantes de altos voltajes deben ser buscados en la correcta caracterización, a nivel del laboratorio de los gases comúnmente utilizados y en la investigación de nuevas mezclas gaseosas. Esto sólo se puede llevar a cabo en base a un conocimiento básico de las propiedades físicas y químicas de dichos gases. Son especialmente significati-

vos los procesos básicos que involucran la interacción de electrones de baja energía con las moléculas del gas, tales como pérdida electrónica, ionización y captura electrónica, la información sobre los fenómenos de transporte que ocurren dentro del gas como velocidades de arrastre, coeficientes de difusión así como el estudio de reacciones ion-molécula.

La mayor parte de los datos que se utilizan actualmente han sido obtenidos en tubos de deriva de varias configuraciones y grados de complejidad. En el laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares del IFUNAM se han desarrollado dos sistemas para el estudio de la física básica de gases. Un tubo de deriva⁽¹⁸⁾, una cámara Townsend⁽¹⁹⁾, cuyas características muy especiales hacen posible el estudio de gases en un intervalo de presiones de 10^{-4} Torr a varias atmósferas para valores de E/N que van desde 10^{-4} a 10^{-3} Td y distancias de vuelo de 0.1 a 45 cm.

En el tubo de deriva se trabaja a presiones bajas (10^{-4} - 10 Torr) y se estudian las reacciones ion-enjambre a energías de interacción de 0.01eV a 10eV, con posibilidades de selección del ion primario y análisis de los productos de reacción; en ambos casos por medio de espectrómetros de masas. La distancia de vuelo puede variarse entre 5 y 45 cm. La cámara de descargas o cámara Townsend está diseñada básicamente para el estudio de la corriente debida al movimiento de portadores de carga producidos por los fotoelectrones. Los fotoelectrones son a su vez producidos por un pulso muy corto de luz ultravioleta incidente sobre el cátodo, proveniente de un láser. Esta cámara opera en un intervalo de presiones de 10^{-2} Torr a varias atmósferas para valores E/N 10^{-2} - 10^4 Td y distancias de vuelo de .1 a 5 cm. La selección de iones secundarios puede hacerse mediante un espectrómetro de masa para valores de la presión de 50 Torr⁽¹⁹⁾. Hasta el momento las investigaciones realizadas en esta dirección se enfocan al desarrollo de modelos más realistas para el análisis de la difusión y deriva de iones en campos eléctricos homogéneos. En particular, se han calculado los coeficientes de ionización, movilidades de iones positivos y coeficientes de difusión longitudinal en SF_6 para valores grandes de E/N . Si bien el hexafluoruro de azufre es un gas ampliamente estudiado debido a su uso como aislante, las últimas revisiones muestran que los datos acerca de la difusión de iones en este gas son muy escasos^(20,21). Los únicos datos de que se tiene noticia tratan con la

medida de coeficientes de difusión transversal de iones negativos de SF_6 ⁽²²⁾. A partir del análisis de los transitorios iónicos usando una cámara de Townsend ^(23,24) y el modelo recientemente desarrollado ⁽²⁵⁾ para el análisis del movimiento de deriva y difusión longitudinal de iones, se obtuvieron valores para α/N (α es el coeficiente de ionización colisional), V_+ la velocidad de deriva del ion positivo y el coeficiente de difusión longitudinal D_+ y se reporta por primera vez el valor de D_+N ⁽³⁶⁾. En este sentido se investigarán sistemáticamente aspectos básicos de gases puros y multicomponentes para caracterizar los iones iniciales y los fragmentos finales formados, una vez que han ocurrido las reacciones ion-molécula o electron-molécula.

En resumen: se cuenta con un laboratorio que ha logrado integrar un grupo de investigadores y estudiantes interesados en la física atómica y molecular experimental. En la exposición anterior se han descrito sólo algunos de los experimentos y sus resultados, sin embargo no se hace mención detallada a cada una de las partes de cada aparato ni de las técnicas usadas, aunque el desarrollo del equipo y la implementación de las técnicas consume gran parte de tiempo y esfuerzo. Finalmente, estoy convencida que el éxito de un grupo experimental es el resultado de la armoniosa y desinteresada colaboración de cada uno de sus miembros.

REFERENCIAS

1. C. Cisneros, I. Alvarez, R. García, C. F. Barnett, J.A. Roy and A. Russek, *Phys. Rev.* **A19** (1979) 631.
2. I. Alvarez, C. Cisneros and A. Russek, *Phys. Rev.* **A23** (1981) 2340.
3. I. Alvarez, C. Cisneros and A. Russek, *Phys. Rev.* **A26** (1982) 77.
4. C. Cisneros, I. Alvarez, J. de Urquijo and T. J. Morgan, "Electron Correlation Effects and Negative Ions", Ed. N.O. Anderson p. 344 (1984).
5. A. Morales, J. de Urquijo, C. Cisneros, I. Alvarez and A. Russek. *Electron and Atomic Collisions XIII ICPEAC*, Ed. J. Eichler p. 636 (1983).
6. D. P. de Bruijn and J. Los, *Rev. Sc. Instrum.* **53** (1982) 1020.
7. D. P. de Bruijn. Phd Thesis Amsterdam Holanda (1982).
8. D. P. de Bruijn, J. Neuteboom and L. Los, *Chem. Phys.* **85** (1984) 233.
9. H. Helm, D.P. de Bruijn and J. Los, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1642.
10. N. Bjerre and H. Helm, *Proc. Int. Conf. on Atomic Physics*, Seattle Wa. (1985).

11. C. Cisneros, I. Alvarez, J. de Urquijo, A. Morales and H. Martínez. *Bull. Am. Phys. Soc.* 29 (1984) 936.
12. I. Alvarez, C. Cisneros, J. de Urquijo and T.J. Moragan, *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984) 740.
13. I. Alvarez, C. Cisneros, J. de Urquijo, A. Morales, C.F. Barnett and A. Russek. to be published in *Phys. Rev. A*.
14. D. L. Montgomery and D. H. Jaecks, *Phys. Rev. Lett.* 51 (1983) 1862.
15. J. R. Hiskes and A. M. Karo. to be published in *J. of Phys. D*.
16. J. Feagin, *J. of Phys.* B17 (1984) 2433.
17. I. Alvarez, C. Cisneros, J. de Urquijo, H. Martínez and T. J. Morgan, *Electron and Atomic Collisions XIV ICPEAC* (1985) to be published.
18. I. Alvarez, C. Cisneros, J. de Urquijo and A. Morales, Laboratorio de Colisiones Atómicas y Moleculares, IFUNAM (1985).
19. J. de Urquijo, I. Alvarez and C. Cisneros, *Rev. Mex. Fis.* B015 (1984).
20. T. H. Teich. Electron and Ion Swarms Proc. 2nd Int. Swarm Sem. Ed. L. G. Christophorou p. 241 (1981).
21. J. W. Gallagher, EC. Beaty, J. Dutton and L. C. Pichfor, *J. Phys. Chem.*, Ref. Data 12 (1983) 109.
22. M. J. Naidu and P. Prasad, *J. Phys.* D3 (1982) 951.
23. J. de Urquijo. Ph D Thesis University of Manchester (1980).
24. J. de Urquijo, *J. Phys.* D16 (1983) 1603.
25. J. de Urquijo, I. Alvarez and C. Cisneros, *J. Phys.* D18 (1985) 29.
26. J. de Urquijo, C. Cisneros and I. Alvarez. *J. Phys.* D, accepted for publication (1985).