

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS
Centro de Investigación en Ciencias

**“Estudio del transporte en la fase gaseosa de iones negativos de
THF: una molécula con interés biológico”**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA

Luis Gerson Pérez Romero

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Jaime de Urquijo Carmona

CUERNAVACA, MORELOS

MARZO, 2021



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Instituto de
Investigación en
Ciencias
Básicas y
Aplicadas

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

Coordinación de Programas Educativos

Posgrado en Ciencias



DR. JEAN MICHEL GRÉVY MACQUART
COORDINADOR DEL POSGRADO EN CIENCIAS
PRESENTE

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada “**Estudio del transporte en la fase gaseosa de iones negativos de THF: una molécula con interés biológico**” que presenta el alumno **Luis Gerson Pérez Romero (10024372)** para obtener el título de **Maestro en Ciencias**.

Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
Dr. Alejandro Ramírez Solís CInC-UAEM	APROBADO	
Dr. Marco Antonio Rivera Islas CInC-UAEM	APROBADO	
Dr. Olmo González Magaña ICF-UNAM	APROBADO	
Dr. Rolando Pérez Álvarez CInC-UAEM	APROBADO	
Dr. Jaime de Urquijo Carmona ICF-UNAM	APROBADO	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

ROLANDO PEREZ ALVAREZ | Fecha:2021-02-18 09:49:02 | Firmante

jntEVrehLZsLiCLJ6CYCYfM6h9a9uQ+VG5SxcK9xr2UN57/JHW3cRqajYwUQCgJcLo1WQ2Qe82CGqeeEY8SXJR04FAOEzmqmKlybg6wZEEdlBvvepYr/DVSu8S6CpS3D2Zt2dQV9L5+YvhRT5zfdnN9jWo8U2KgwHP+IIVCw9viuyrLir70MLPAaQYEl7XJPmXF5Lmjin9MGVW6Btb5oXdGUFm/3S7FnLCBdLRbWzMyHNNAnNQkvd2I3bNIWekk7BkQNB/fsRqfsaaTYGRcBdSneAxOg4v6wNTFYKsKSF//f1pc2HLVvy8z9bVeCzKueRzQ712mO6bSVjxR.JqA==

JAIME DE URQUIJO CARMONA | Fecha:2021-02-18 09:55:09 | Firmante

oaGZGTiYMil1do5CLdgL62onUbFwUVwZU9Ez+nZbLcVTbaPJVdE2HdDCBwYQyUIIKAEjf6GMuZJ2sZ1xYPFUWB5ai3zHYJqIKLyF/Y88y1k530Ru8ASlIpCWeS7+5l6pwOtXr+dP8GwtYG8aMF036IDa55DKNUYYcm1HZy7nmVsal7Z6gnCUKbNjbuz3MxZTE/9vBYtEGNRsq4Pg/7ABwtnChKBHYN2SzfP2uwb19Jecx5ZgY4+IxYQTX1v2fkkobHg9gw0sqDnjbfHsJzLd9YHWLKAHm7qqWepwAMf8EiVt8Lz+R5MGKksXHaxTzSnX6qJLnfqbuJDpgU97jw==

ALEJANDRO RAMIREZ SOLIS | Fecha:2021-02-18 11:58:43 | Firmante

vR+E/awKOQW9GpPLuhqM4yLJW0jovm1OQjpwzJEYrGX/Tk4yARy2qX8Wj/lfcoA+jdsjWotR3bcl82spb7Wb4KodaRuQDDdbU3nlaBt/4oVued9RiAMBruDo4CjhlfnGYLL6+6ZfJMFrs0ONHOn1w07nOwkCrqZ0D09xlCfVw3qdJFlhjjdaxlgnNs0uzuyAlMC344ZMzeXl7l6f5OysN3kUNepeAspimYnkRpXE0BOPEumiChg/r0DgR7Q7Cp2dnho1upmrtbQBYHVNCQFGqYw9+hGpg4MquUxSlq8+5dhOyIMvTAGPYI4bNMM3hSCY90EFq+x2eoaRaEpQUGcbQ==

OLMO GONZÁLEZ MAGAÑA | Fecha:2021-02-18 12:23:19 | Firmante

TWHf2bnE96YD7JzUPXPxkQsXxv31K/fualvHF2CfXjE0J8D+s+QuR3SdVQW1yP5SQAW9wmcDscygildJ9nAyJ3lZlCpopQ+dZe5g+pzMHIO97Xt+d2o0dwUZZ+1uhZ2PUal/PQr/KIHdsr7uk6W95UQB/9WvV3Sf0yzaBFiiBQ7tECJfwcia04bCX0myQBTaC7QWHstDCRPg26DY3kMsHC/O4Ns5BdBZAXDa3z3JvpuUmckdVWfQ4pO4RNyMuVnKltsPMMY2Yn/34H2N7p8E1/jjt+b4anT0/git/hNNitkZXMxGuYS2K4stFiQHWDgHwUn+HoM8dq0njQ8Y+/Lw==

MARCO ANTONIO RIVERA ISLAS | Fecha:2021-02-18 16:48:48 | Firmante

I+U2/waLxD714HhIGEN3lyrlAE07B40YNPp97BSQ9xjakfWrPxtbSvCdZdfZHNOWluX73tXnSTQPRXBPyWNPgWihMECwEy1c7tqTZKMm2MPqsAI91F1stIWMNpEE2mtuPK0JexDRn6Z0BdoLAC/RZlFvbdR61XRIKpukUaZTTWrS5ofSi3HF6nFwfnF36v6+WpMbRj2gSOvQqe1s9y+btjLL43SCGBHZXwMNa6ikecQRcuTpbCFa1y2iUCS+uZpgv4iMw+cp7omx+yGNgBGI+mGhavxpJbhVxQ4u3s0iQJkgtCzuqoXAgZHugwrA6SVNChxIOhVhmNPZOdl1Q==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



DifEwn

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/sFXC36skAnyLLTeUy0yUblfXyeCCxo90>



Lista de jurado

Presidente

Dr. Alejandro Ramírez Solís

Secretario

Dr. Marco Antonio Rivera Islas

Vocal

Dr. Olmo González Magaña

Suplente

Dr. Rolando Pérez Álvarez

Suplente

Dr. Jaime de Urquijo Carmona

Resumen

En esta tesis se presenta un estudio amplio de la evolución temporal de la corriente de iones negativos provenientes de la captura electrónica resonante de la molécula orgánica tetrahidrofurano, THF, (C_4H_8O) en el experimento pulsado de Townsend. Se observa que, a valores bajos del campo eléctrico normalizado a la densidad del gas, E/N , el ion negativo, metaestable, originalmente formado, $C_4H_8O^{-*}$, tiene dos canales, a saber, uno es el desprendimiento electrónico, probablemente colisional, al haberse observado pulsos con la estructura de una exponencial decadente. Al analizar los pulsos se encontró que, dentro del intervalo de E/N 6-20 Td ($1Td=10^{-17} \text{ V cm}^2$), las constantes de tiempo decrecen monótonamente desde $26 \mu\text{s}$ hasta $6 \mu\text{s}$. Por otra parte, una segunda forma de onda de la corriente de desplazamiento, de amplitud mucho menor que la primera, pero de muy larga duración, en el intervalo de milisegundos, se forma cuando la presión del gas se varía entre 10 y 100 Torr. Se observó, además, que el tiempo de arribo al ánodo, y por lo tanto la velocidad/movilidad del ión, depende fuertemente de la presión, lo cual sugiere que ocurre un proceso de acumulación iónico-molecular, con especies del tipo $C_4H_8O^-(C_4H_8O)_n$, ($n>1$), ya que, al aumentar su masa, la velocidad disminuye. Hasta donde se ha encontrado en la bibliografía, estos resultados son novedosos y originales, y contribuyen a crecer el ya complejo esquema de reacción del THF con electrones e iones.

Agradecimientos

Agradezco a la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM) por haberme brindado la formación académica, social y personal para poder ingresar a un Posgrado de Calidad de CONACYT. Es mi alma mater y siempre lo será por ser mi segunda casa. Al Instituto de Ciencias Físicas (ICF, UNAM) le agradezco extensamente la oportunidad de adscribirme como estudiante asociado y permitirme realizar los experimentos que se presentan en esta tesis.

Agradezco al Dr. Jaime de Urquijo Carmona por la confianza y paciencia que deposita en mí; su guía y enseñanzas son invaluable para mí. El haber sido mi asesor de la tesis de licenciatura y maestría me ha enseñado bastante.

Doy gracias a los sinodales que revisaron esta tesis y ayudaron en la mejora del escrito.

Un especial agradecimiento al Dr. Olmo González Magaña por su guía en el laboratorio y por las enseñanzas necesarias para el análisis de los datos presentados en este trabajo.

A los ingenieros Guillermo G. Bustos Maya y Armando Bustos Gómez por su ayuda en la resolución de los problemas técnicos dentro del laboratorio.

Agradezco a mis padres Socorro Romero Cervantes y José Luis Pérez López por mi formación y el apoyo depositado en mí. Agradezco a las pasadas generaciones que hicieron todo lo posible por ser personas de bien y tratar de mejorar la vida de sus futuras generaciones. También agradezco a mi hermano Luis Itzhak Pérez Romero por su soporte, ayuda, consejos y grandes momentos que hemos pasado. Y a toda mi familia que ha estado al pendiente de mi crecimiento personal y profesional.

Especialmente agradezco a todos mis amigos que siempre están ahí para mí, tanto los de la universidad, antiguos amigos de la prepa y secundaria, mis amigos nacionales y de otros países pertenecientes a la página de PotatoSlayer que me han hecho más llevadera la cuarentena por el SARS-CoV-2 y a mis amigos entrañables que me han ayudado a mejorar físicamente en el gimnasio.

Agradezco infinitamente a Rebeca Domínguez Reyes por estar a mi lado, amarme e impulsarme a ser mejor persona día con día. Le doy gracias por darme el privilegio de amarla locamente y ser mi guía para cambiar mi estilo de vida, además le agradezco a su familia por abrirme las puertas de su hogar.

AGRADECIMIENTOS INSTITUCIONALES

Se agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca de maestría otorgada a mi persona y al proyecto PAPIIT-UNAM IN 118520.

Dedicatorias especiales

A mis padres les dedico este segundo trabajo de tesis ya que ellos se han esforzado incansablemente para que sea un hombre con un buen futuro y que aporte a la humanidad cosas buenas en pro de mejorar el futuro de la sociedad. Una dedicatoria especial a mi madre que ha visto por mi bienestar y es mi apoyo incansable, mi pilar emocional y mi más grande impulsora. Abiertamente se ha declarado mi fan en bastantes ocasiones por lo que me esfuerzo para jamás decepcionarla y llenarla de orgullo.

Les extiendo una dedicatoria especial a mis antepasados y familiares que siempre se han mostrado interesados en mi desarrollo académico y personal.

A mi hermano le dedico este trabajo porque él ha seguido algunos de mis ejemplos y me ha dado bastantes lecciones de vida que me han ayudado a mejorar bastante como persona y ser humano.

Al Dr. Jaime de Urquijo por ser mi mentor, maestro y guía.

A Rebeca Domínguez Reyes le dedico este trabajo de manera especial porque fue una persona muy especial que confió en mí y casi al mismo tiempo de haber ingresado en el posgrado se convirtió en mi novia. Este hecho revolucionó mi vida y le dio un impulso importante a mi vida profesional.

Índice

Agradecimientos	vi
1. Introducción	1
1.1. Objetivo de la tesis	1
1.2. Antecedentes	2
1.3. Organización y alcance de este trabajo	3
2. Marco Teórico	5
2.1 El plasma de baja temperatura: Generalidades	5
2.2 Procesos de colisión pertinentes a este trabajo	6
2.2.1 Encuentros directos	7
2.2.2 Encuentros indirectos	9
2.3 Transporte de carga en gases débilmente ionizados	10
2.3.1 Enjambres electrónicos e iónicos	10
2.3.2 Velocidad de arrastre o deriva	12
2.3.3 Ionización por colisión electrónica con átomos o moléculas	12
2.3.4 Captura electrónica	13
2.4 El Tetrahidrofurano (THF)	15
3 El experimento pulsado de Townsend	18
3.1 Fundamentos	18
3.2 El aparato experimenta	18
3.2.1 La brecha de arrastre	20
3.2.2 Producción del haz de fotoelectrones pulsado	21
3.2.3 Medición y registro de la corriente de desplazamiento.	21
3.2.4 Adquisición de las señales y bitácora de las mediciones	22
3.2.5 Especificaciones de la instrumentación utilizada	22
4 Análisis de los pulsos de corriente	26
4.1 Desprendimiento electrónico colisional	26
4.2 Arrastre de iones estables	27
4.3 Señales iónicas negativas afectadas por desprendimiento electrónico	28
4.4 Ajuste exponencial	33
4.5 Señales iónicas negativas que sugieren formación cumular	34
4.6 Transitorios iónicos de THF a bajo E/N y alta presión	35
4.7 Medición de la velocidad de la componente iónica estable	36
5 Resultados	38
5.1 Coeficiente de vida media del ión negativo formado en THF	39
5.2 Velocidades de arrastre de los iones estables	40
5.3 Movilidad reducida	42
6 Discusión y conclusiones	44
6.1 Discusión	44
6.2 Sugerencias para trabajos futuros	45
6.3 Conclusiones	45
Referencias	46

Capítulo 1

Introducción

1.1 Objetivo

En esta tesis como objetivo general se reporta el estudio del transporte y destrucción de iones negativos en Tetrahidrofurano (THF, C_4H_8O), utilizando la Técnica Pulsada de Townsend (TPT).

Como objetivos particulares se presentan los datos obtenidos a partir del estudio de los iones negativos en THF, dividiéndose en dos grupos de interés, siendo el primero de ellos el estudio de los iones negativos formados en un intervalo amplio de la relación entre el campo eléctrico externo y la densidad del gas, E/N, pero a presiones entre 5 y 20 Torr. El segundo grupo de interés se obtiene del estudio de los iones negativos formados dentro de un intervalo amplio de presiones entre 10 y 100 Torr, pero con E/N entre 6 y 16 Td.

Se encontró que a muy bajos valores de E/N, y presiones bajas, se forma un ion negativo inestable que, por lo mostrado en las formas de los pulsos, suponemos que decae por desprendimiento electrónico colisional. Por otra parte, a presiones altas se observa el arrastre de iones negativos estables cuya velocidad depende de la presión, lo que sugiere la formación de complejos iónico-negativos moleculares a partir de impacto electrónico. Hasta donde se ha buscado en la literatura, los hallazgos reportados en esta tesis son originales.

1.2 Antecedentes

A raíz del descubrimiento de los rayos X, realizado por Wilhelm Röntgen en 1895, casi inmediatamente comenzaron las aplicaciones en medicina; tales como la radiografía, la tomografía, la terapia con radiación X y una multitud de otros usos.

Tratamientos y tomas de imágenes hechos por radiación ionizante, tales como imágenes de rayos X y radioterapias para pacientes con cáncer han demostrado ser una fuente de daños severos para el ácido desoxirribonucleico (ADN), tejido humano y otras biomoléculas. Estos daños provienen de la liberación

de electrones secundarios ($\sim 10^4$ electrones por MeV depositado) de baja energía (con energías promedio entre 20-30 eV) a partir de la ionización de biomoléculas presentes en el camino del haz de radiación. Dichos electrones lentos se termalizan mediante diferentes procesos, y han mostrado ser una gran fuente de daños para el ADN. (N. A. Garland et.al., 2013), los que se reflejan, por ejemplo, en quemaduras cutáneas, pero existen muchos otros que conllevan a problemas mayores como el malfuncionamiento de órganos, caída de pelo y síndrome de radiación aguda, entre otros.

Una vez que los electrones secundarios son liberados producen muchas especies reactivas como lo son los radicales libres, aniones y cationes antes de que se termalicen. Después de haberse termalizado, todas las especies reactivas, ya sea que surjan de las interacciones primarias o de electrones secundarios, pueden reaccionar dentro del sistema irradiado para producir nuevos compuestos y, dentro de las células, crean daño en las biomoléculas (Sanche, 2005).

Por estas razones es necesario entender los procesos inducidos por electrones secundarios provenientes de subionización y sus interacciones con biomoléculas presentes en los tejidos vegetales y animales.

La comprensión cuantitativa del transporte de electrones de baja energía en el tejido humano es fundamental para explicar el daño por la radiación y establecer modelos de dosimetría con el fin de que los tratamientos sean menos agresivos con la estabilidad biológica y emocional de los pacientes (N. A. Garland et al., 2013).

En este contexto, el experimento pulsado de Townsend, que permite medir los coeficientes de ionización y transporte de iones y electrones en átomos y moléculas en la fase gaseosa coadyuva al esfuerzo a nivel mundial por comprender y describir las interacciones de electrones las biomoléculas presentes en el tejido vegetal y humano. Ciertamente, cuando se habla de esta clase de tejidos se comprende que es materia condensada. Sin embargo, hay trabajos recientes que sugieren que los estudios hechos en la fase gaseosa pueden ser adaptados a la fase de materia condensada blanda (viscoelásticos, soluciones, materia viva, medios granulares, etc.) a través de modificaciones apropiadas, usando funciones

de correlación (N. A. Garland et. al., 2013).

En particular, el alcance de este trabajo es complementar el estudio de la formación de iones de Tetrahidrofurano (THF) y su comportamiento en distintos regímenes energéticos y de presión, lo cual contribuirá a continuar con el estudio de algunas biomoléculas tales como los azúcares constituyentes del ADN o del tejido humano con esta técnica, con la finalidad de poder dar mejores parámetros de dosimetría y tratamientos menos agresivos para pacientes sometidos a radioterapia.

1.3 Organización y alcance de este trabajo

En este capítulo se describirán primeramente algunos conceptos generales acerca de los plasmas de baja temperatura y la inserción de este trabajo en dicho campo de la ciencia. Se justificará el estudio del THF en términos de su relevancia para el estudio de la interacción de electrones lentos en el ADN y el ARN.

En el Capítulo 2 se exponen brevemente los conceptos útiles para comprender los fenómenos físicos relativos al experimento, enfocándose dicho tratamiento en colisiones relevantes al experimento.

En el Capítulo 3 se describirá en detalle el experimento pulsado de Townsend y se darán especificaciones experimentales de los aparatos utilizados para la adquisición de las mediciones.

En el Capítulo 4 se describen las mediciones realizadas y su interpretación física en términos de la formación del ion negativo por colisión electrónica, mostrando un comportamiento particular en términos de la densidad del gas: desprendimiento electrónico colisional a bajas presiones y un amplio E/N, y formación cumular en altas presiones en E/N bajos.

En el Capítulo 5 se presentan los resultados de la medición del tiempo de vida medio del ion negativo inestable y de la velocidad de arrastre y movilidad de los iones negativos cumulares formados a presiones de THF altas.

En el sexto y último capítulo se discutirán los resultados obtenidos. Los hallazgos descritos en este trabajo sugieren que hay mucho por hacer aún, así que se presentan varias líneas de avance. Finalmente se presentarán las conclusiones relativas a este trabajo.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1 El plasma de baja temperatura: Generalidades

La materia se clasifica en tres estados fundamentales, sólidos, líquidos, gases, pero cuando se encuentran ionizados se dice que están en la fase del plasma. En particular, los plasmas se presentan en la naturaleza de distintas maneras, abarcando aproximadamente el 99% de la materia visible en el universo. La definición de plasma surgió por primera vez en 1928, cuando Irving Langmuir la introdujo, al observar que la descarga obedecía a la acción del campo electromagnético. Un plasma se define como un conjunto de electrones libres, átomos y moléculas ionizadas, y partículas neutras que interactúan mediante fuerzas de origen electromagnético (Fridman, 2008).

Los plasmas abarcan aproximadamente el 99% de la materia visible en el Universo, en su mayoría se encuentra presente en las estrellas. Hay una gran variedad de plasmas que se pueden producir, desde las avalanchas de Townsend, pasando por las innumerables aplicaciones tecnológicas y los plasmas atmosféricos hasta los plasmas de fusión controlada.

Los plasmas se pueden clasificar de acuerdo con su densidad y temperatura, como se ejemplifica en la Fig. 1, desde los fríos, como el plasma interestelar, pasando por los de baja temperatura y hasta los de fusión y la corona solar.

Generalmente, los plasmas formados a partir de un gas se originan por colisión electrónica, transferencia de carga o radiaciones ionizantes.

La ionización por colisión es una interacción del tipo inelástico en la que el electrón proyectil cede toda o parte de su energía al átomo o molécula, por encima del potencial (o umbral) de ionización. Cuando la energía cinética del electrón proyectil sea menor a la de ionización, pueden ocurrir procesos de excitación y disociación molecular. (Nasser, 1971).

Otro de los procesos primordiales para la formación de iones es la ionización por fotones, este efecto se da por el intercambio de energía que ceden los fotones a los átomos o moléculas con las que interaccionan.

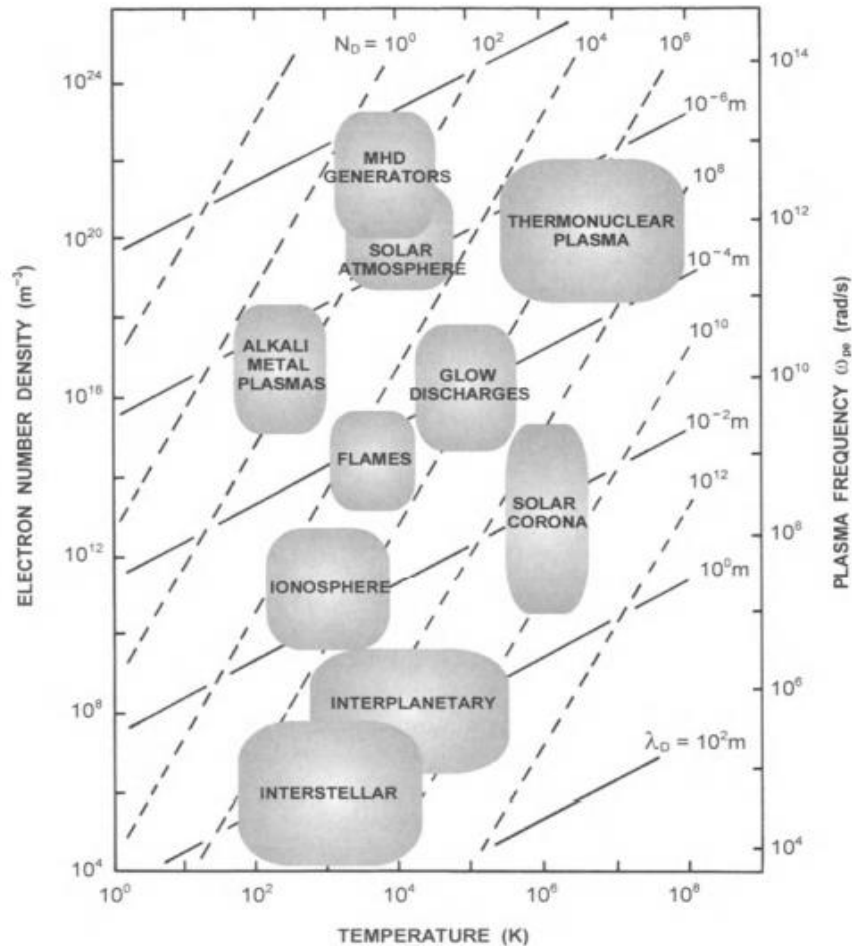


Fig. 1 Intervalos de temperatura y densidad electrónica para distintos plasmas cósmicos y de laboratorio y sus parámetros físicos característicos: longitud de Debye λ_D , frecuencia de Langmuir ω_p y el número de electrones N_D en una esfera de Debye. MHD, magnetohidrodinámica (Bittencourt, 2004).

2.2 Procesos de colisión pertinentes a este trabajo

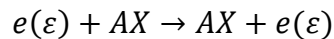
Cuando dos objetos chocan entre sí, ocurre una transferencia de momento lineal y energía entre ellos; dicha transferencia depende del tipo de colisión que se haya llevado a cabo. En general existen dos tipos de colisiones, las colisiones elásticas, en las que cada partícula conserva su energía total y momento, ocurriendo sólo una deflexión, y las colisiones inelásticas en las que hay cambios en la energía interna de las partículas. Es importante señalar que el momento total se conserva.

Además de la clasificación de las colisiones bajo el criterio de conservación de la energía y momento, existe la clasificación con respecto al tiempo de interacción y los efectos que pueden tener dos partículas después de una colisión. Por estas razones se las clasifica en dos grandes grupos: encuentros directos y encuentros indirectos. Los cuales se dividen en términos del tipo de colisión particular, ya sea de tipo elástico o inelástico (Loucas G. Christophorou, James K. Olthoff, 2004).

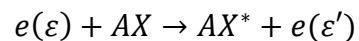
2.2.1 Encuentros directos

Este tipo de encuentros son de muy corta duración, con una duración del orden de microsegundos ($\sim 10^{-6}s$) o incluso menos tiempo, y no generan resonancia en la interacción de electrones con otras partículas. Este tipo de colisiones se generan bajo un rango amplio de energía y solo dispersan las partículas. A continuación, se enlistarán los principales procesos de colisión del tipo de encuentros directos:

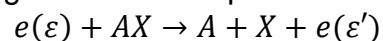
Dispersión directa elástica de electrones: Este tipo de colisiones no ionizan ni intercambian energía durante la colisión. Simplemente el electrón incidente, que cuenta con una energía inicial, después de la interacción, dicha energía no cambia, ya que el electrón emerge de la colisión sin cambios en su energía:



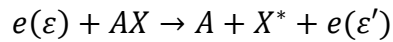
Dispersión directa inelástica de electrones: En esta interacción hay un proceso de excitación, debido a que el electrón incidente deposita parte de su energía en la molécula y la lleva desde un estado base a uno excitado. Después de la interacción, el electrón queda con una energía distinta a la inicial.



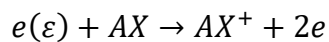
Disociación en fragmentos neutros: Ocurre a causa de la separación de los radicales (AX) que componen una molécula, sin tener ningún tipo de ionización o excitación. Es decir, el electrón incidente rompe el enlace entre estos radicales y es dispersado con una energía menor a la que llevaba antes de interactuar.



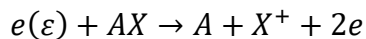
Excitación disociativa: Este proceso consiste en que un electrón con cierta energía colisiona con una molécula y, como resultado, los componentes de la misma se disocian, habiendo un efecto de excitación. Este efecto se debe a que el electrón deposita energía en uno de los radicales y lo excita desde su estado base.



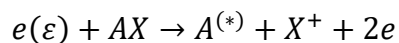
Ionización molecular por impacto electrónico: Este proceso es uno de los más importantes en el campo de la física atómica y molecular, ya que se presenta en una infinidad de situaciones naturales y en los experimentos. La descripción del proceso se basa en arrancar un electrón de una molécula debido a una colisión de otro electrón con suficiente energía para lograr este fenómeno. Una vez que se liberan los electrones (tanto el que colisiona como el que se libera de la molécula), se crea un ion.



Ionización disociativa: Si además de producirse un ion después de una colisión de un electrón, se genera una ruptura de los enlaces electrónicos de los radicales que conforman este ion, se dice que hubo un proceso de ionización disociativa.



Ionización disociativa con excitación de los fragmentos: Ocurre cuando, además de ionizar y disociar la molécula, el electrón incidente excita alguno de los fragmentos restantes de la disociación.

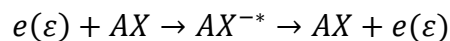


2.2.2 Encuentros indirectos

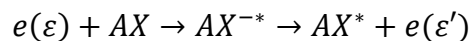
Este tipo de encuentros están limitados por un intervalo de energías menores a 20 eV. En comparación con los encuentros directos, el tiempo de interacción es muy grande y depende de la molécula con la cual se esté interactuando. Además, las moléculas blanco tienen ciertos arreglos electrónicos que hacen que los electrones, sean capturados específicamente, formando así iones negativos metaestables, AX^{*-} . Como ejemplo se tienen a estos iones negativos metaestables

que devienen en la misma molécula al perder el electrón, o bien pueden formar pares iónicos estables si la molécula tiene una afinidad electrónica positiva y si son capaces de perder la energía que hay en exceso después de la colisión resonante y que, como resultado, dio el origen metaestable de la molécula (Loucas G. Christophorou, James K. Olthoff, 2004). A continuación, se describen los principales procesos de interacción de los encuentros indirectos:

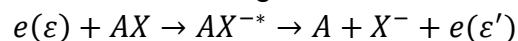
Dispersión indirecta elástica de electrones: Se forma un ion negativo metaestable, el cual decae en la molécula original después de la interacción de un electrón con ésta. El electrón no cede energía en la interacción y finalmente es liberado.



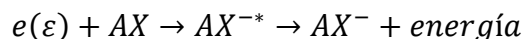
Dispersión indirecta inelástica de electrones: El electrón incidente transmite cierta cantidad de energía a la molécula y, como resultado, la excita, decayendo finalmente.



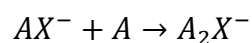
Captura disociativa: En este caso, la energía que transmite el electrón en la interacción es suficiente para disociar la molécula blanco, y una parte de esta captura el electrón para formar un ion negativo.



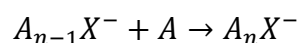
Captura electrónica no disociativa: Conlleva la captura del electrón incidente, la formación de negativo, sin haber disociación, y decayendo finalmente en un estado estable acompañado de la liberación de la energía excedente en forma de fotones.



Formación de cúmulos iónico-moleculares: Esto ocurre cuando un ion molecular, digamos negativo, se asocia con moléculas neutras del gas circundante, formando cúmulos iónico-moleculares.



Sucesivamente



2.3 Transporte de carga en gases débilmente ionizados

En esta sección, particularmente, trataremos el tema de los enjambres electrónicos e iónicos en gases, ya que son justamente los que se producen, reaccionan y desplazan en el experimento pulsado de Townsend.

A diferencia de los experimentos en los que un haz de partículas (electrones o iones), quasi-monocromático en energía, incide sobre un blanco muy poco denso en el que ocurre una sola colisión por proyectil incidente, y del cual se miden las secciones eficaces de colisión, en el experimento pulsado de Townsend el régimen es multicolisional, y su caracterización se da en términos de coeficientes o tasas de reacción.

Hay varios experimentos para el estudio de los enjambres electrónicos e iónicos en gases y, entre estos, quizá el más vigente y exitoso ha sido el experimento pulsado de Townsend (EPT). Por ello, en esta sección discutiremos los coeficientes relevantes a este trabajo.

2.3.1 Enjambres electrónicos e iónicos

Un enjambre se define como un conjunto de electrones o iones que se desplazan a través de cierta región del espacio, generalmente afectados por la presencia de campos eléctricos y magnéticos, en el seno de un gas cuya densidad es significativamente mayor que la del enjambre, generalmente en una parte por 10^9 o más. Bajo estas condiciones, las partículas cargadas sufren múltiples colisiones por unidad de longitud y, por ello, es posible establecer promedios estadísticos tales como el camino libre medio, el tiempo libre medio entre colisiones, la velocidad de arrastre, el coeficiente de difusión, los coeficientes de ionización y captura electrónica (en el caso de que el gas sea electronegativo), y las tasas de reacción ion-molécula, entre otros parámetros más. Para ilustrar lo anterior, tomemos el ejemplo simple de un electrón que, arrastrado por un campo eléctrico uniforme, choca con una molécula y la ioniza, resultando de esto dos electrones libres. Si este proceso continúa, después de un número significativo de colisiones, se tendrá una *avalancha electrónica*, acompañada de su consiguiente *avalancha iónica*. Experimentalmente, un enjambre que se lleva a cabo dentro del experimento de Townsend tiene lugar en un recinto contenedor de un gas bajo estudio, dentro del cual se encuentra un condensador de placas metálicas paralelas en donde se

dará la descarga electrónica. Si desde la superficie del cátodo iluminado por un pulso tipo delta de Dirac se liberan n_0 electrones iniciales, y habiendo un campo eléctrico uniforme entre cátodo y ánodo, separados una distancia d , a este último llegarán n electrones:

$$n = n_0 e^{\alpha d} \quad (1)$$

donde d es la separación entre placas y α es el coeficiente de ionización, el cual representa el número de electrones producidos por colisión por unidad de longitud en la dirección del campo eléctrico.

Tratándose de un fenómeno multicolisional estadístico, un parámetro importante es el camino libre medio. En ausencia de procesos inelásticos, el electrón interactuará con las moléculas al cambiar su dirección después de cada colisión. Conociendo la sección eficaz de transferencia de momento σ_T , el camino libre medio es

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\sigma_T N} \quad (2)$$

donde N es la densidad numérica del gas. (Nasser, 1971).

El camino libre medio total debe considerar todos los procesos que se pueden dar en la interacción de los electrones con las partículas del gas y, por lo tanto, se debe tener un camino libre medio total que tiene componentes provenientes de procesos elásticos, ionización, excitación y captura electrónica, por ejemplo. La expresión para denotarlo es la siguiente:

$$\frac{1}{\lambda_T} = \frac{1}{\lambda_{el}} + \frac{1}{\lambda_{ion}} + \frac{1}{\lambda_{ex}} + \frac{1}{\lambda_{cap}} \quad (3)$$

Debido a la larga distribución de trayectorias que un electrón tiene al interactuar con partículas de un gas, se puede considerar el tiempo habido entre las colisiones, conocido como el tiempo libre medio. Conviene destacar que este tiempo es inversamente proporcional a la densidad del gas, es decir $\tau \propto \frac{1}{N}$.

2.3.2 Velocidad de arrastre o deriva

Siguiendo las ideas de la sección anterior, las partículas cargadas se desplazarán hacia el ánodo sufriendo colisiones múltiples. Es posible determinar el tiempo medio de arribo del enjambre al ánodo, y a partir de este valor la velocidad de arrastre o deriva del enjambre. El promedio de la velocidad del centro de masa

de la especie i (\bar{v}_i) es conocido como velocidad de arrastre y está dado por

$$v_i = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} v_j \quad (4)$$

En el experimento de Townsend se conoce con precisión la distancia entre placas d , así que es posible medir el tiempo de tránsito, T_i . A partir de estos dos parámetros se puede medir la velocidad de arrastre de la especie i como

$$v_i = \frac{d}{T_i} \quad (5)$$

Por ejemplo, el tiempo de tránsito electrónico es mucho más corto que el iónico debido, entre otros factores a que los electrones son mucho menos masivos que el átomo más sencillo (hidrógeno).

2.2.3 Ionización por colisión electrónica con átomos o moléculas

Considerando que $n_-(x)$ electrones se encuentran en una lámina infinitesimal de anchura dx , ubicados a una distancia x del cátodo producen un número de pares iónicos dado por

$$dn_+ = dn_- = n_-(x)\alpha dx \quad (6)$$

Entonces, al integrar entre 0 y x , y con el número inicial de electrones en el cátodo ($x=0$), $n_-(0) = n_0$, tenemos que

$$n_-(x) = n_0 e^{\alpha x} \quad (7)$$

Donde α es el coeficiente de ionización, que se define como el número de ionizaciones que se producen por cada colisión electrónica por unidad de longitud a lo largo de la dirección del campo. Ver Fig. 2 para entender gráficamente el proceso físico.

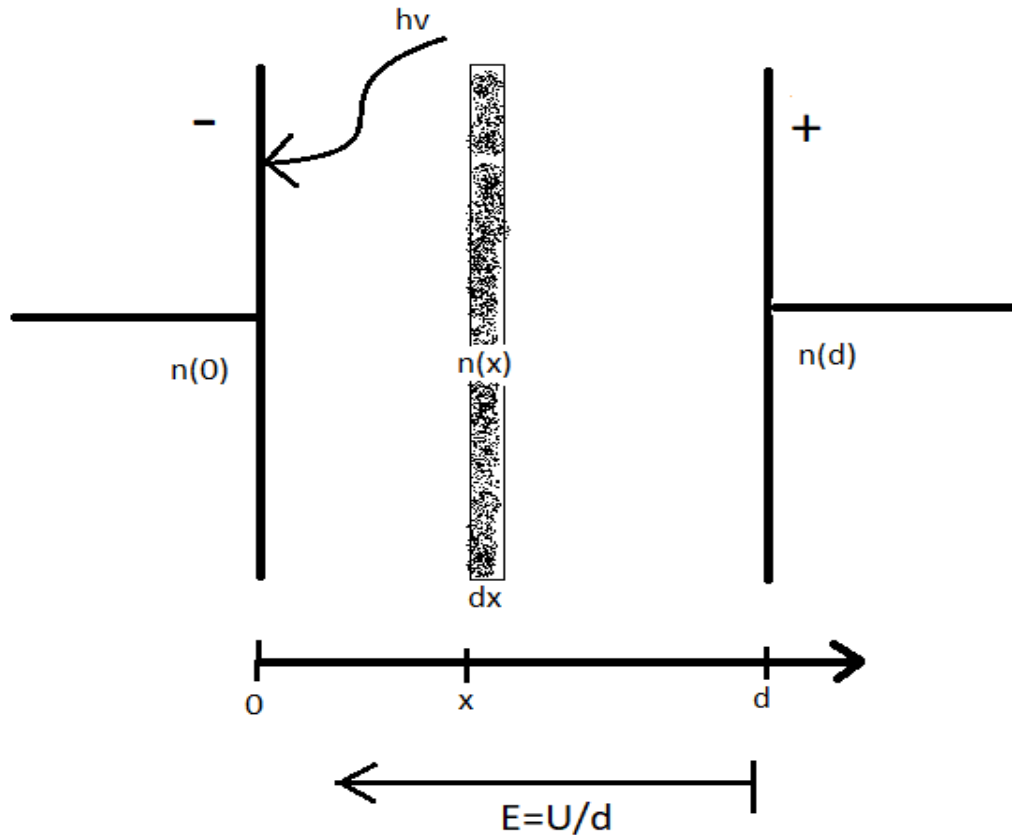


Fig. 2 Disposición gráfica del movimiento de arrastre de los electrones y ionización en una lámina infinitesimal en el seno de un gas y un espacio interelectrónico. (Teich, 1974).

2.3.4 Captura electrónica

En un gas electronegativo, la captura electrónica juega un papel muy importante en ciertas regiones de E/N , que varía dependiendo del gas. El fenómeno de la captura electrónica se da cuando un átomo o molécula colisiona con un electrón, y la energía de este último es insuficiente para escapar del potencial eléctrico por el par electrón-átomo o electrón-molécula creado, quedando así adherido temporalmente.

La probabilidad de que haya captura electrónica no-disociativa es, en general, inversamente proporcional a la velocidad de los electrones pues las moléculas son capaces de mantenerlos en sus vecindades por un periodo de tiempo relativamente más largo. Existen algunos átomos o moléculas capaces de crear iones negativos muy estables, como el hexafluoruro de azufre (SF_6) o el oxígeno (O_2); no así otros que sólo se forman por periodos de tiempo muy breves, del orden

de ps a ns. La propiedad de la molécula o átomo para capturar un electrón se caracteriza con el coeficiente de captura electrónica, η , que representa el número de electrones capturados por unidad de longitud a lo largo del campo eléctrico.

El proceso de captura electrónica es complicado en una molécula de capa cerrada como lo es el THF debido a que esta molécula tiene todos sus orbitales moleculares ocupados por electrones. Se sabe que los electrones son partículas fermiónicas que no pueden estar en el mismo estado, por lo que tratar de acoplar un electrón extra es complicado y sólo se da bajo ciertas circunstancias especiales. Por tal motivo, en el experimento pulsado de Townsend es posible generar enjambres de electrones tan lentos que una molécula de THF los capture. Como en muchas otras moléculas, se ha observado que la molécula de THF no es lo suficientemente electronegativa para formar iones negativos estables durante tiempos largos del orden de ms, de tal manera que después de cierto tiempo característico, el electrón es expulsado del ámbito de la molécula. A este proceso se le llama desprendimiento electrónico y se da por varios mecanismos. Uno de los más importantes y probables es la colisión con otros electrones y/o moléculas. Cuando, en ausencia de colisión, la molécula pierde el electrón, se habla de un autodesprendimiento electrónico. Existen otros mecanismos de desprendimiento electrónico tales como el fotodesprendimiento (Nasser, 1971).

Cuando ocurre una colisión electrón-molécula en la que ocurre disociación y uno de los fragmentos se lleva el electrón, se habla de captura electrónica disociativa. En el caso contrario se tiene una captura electrónica no disociativa; lo que conlleva a que un electrón sea capturado por una molécula sin que éste logre romper algún enlace. Generalmente este mecanismo de captura se da cuando la energía cinética de los electrones que inciden con la molécula es mucho menor que la del potencial electrostático generado por el esqueleto molecular, siendo que, en algunos casos la molécula llega a excitarse por la transferencia de energía y en otros el electrón queda capturado sin excitar a la molécula.

Los coeficientes de transporte e ionización de los que se ha hablado en esta sección dependen de relación entre el campo eléctrico externo y la densidad del gas, E/N , cuya unidad es el Townsend, adoptada en 1966 en honor a John Sealy Townsend; su abreviatura es Td y su equivalencia es $1Td = 10^{-21}Vm^2 = 10^{-17}Vcm^2$.

2.4 El Tetrahidrofurano (THF)

El tetrahidrofurano (THF) es una molécula cíclica compuesta por cuatro átomos de carbono, ocho de hidrógeno y uno de oxígeno (C_4H_8O). Se describe a la molécula del tetrahidrofurano (THF) como un solvente que aparece en los fluidos biológicos. Es un líquido incoloro y de baja viscosidad, y es uno de los éteres más polares. Es usado como producto para hacer hidroboraciones, que son medios para sintetizar alcoholes primarios a partir de alquenos. Físicamente, el THF es menos denso que el agua y es miscible en ésta a $20^\circ C$ (National Center for Biotechnology Information, 2017).

En este estudio se utiliza el THF como un modelo de la 2-Desoxirribosa porque en tanto su sección transversal como en su geometría son muy parecidas (ver Fig.3); de manera que con la TPT no ha sido posible utilizar la molécula del ADN o la Desoxirribosa por dificultades instrumentales, pero sí el THF. Conviene aclarar que las mediciones hechas con la TPT en THF en este laboratorio son las únicas a nivel mundial.

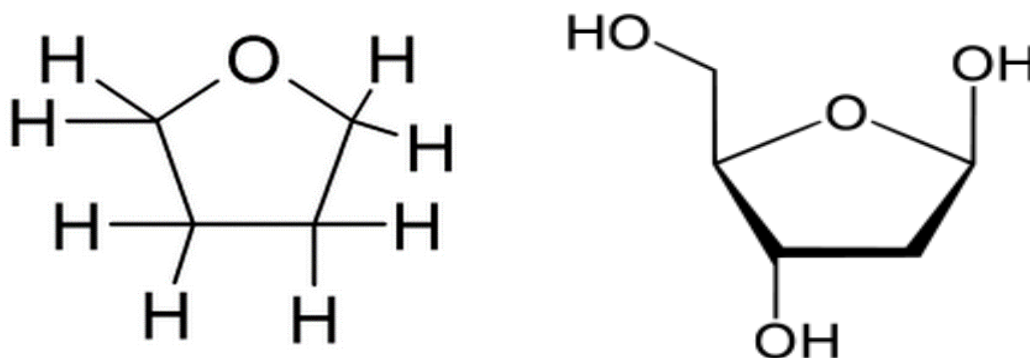


Fig. 3 Comparación gráfica de la composición química y geométrica de la molécula de THF (izquierda) y la molécula de la 2-desoxirribosa (derecha).

El THF es relevante en este contexto porque ya se cuenta con algunas secciones eficaces y con algunos parámetros de ionización y transporte. En este presente trabajo se estudia la formación de iones inducidos por colisiones de enjambres electrónicos con moléculas de THF; estos procesos generan iones positivos o negativos, dependiendo de la región de E/N que se estudie.

Las secciones transversales promedio de las 3 bases (timina, citosina y adenina) son de 3-10 veces más pequeñas que la sección transversal efectiva por nucleótido reportado para las rupturas de cadena simple en la superficie del ADN superenrollado. Consecuentemente, el daño a las bases aisladas no tiene gran impacto en la mayor porción de ruptura de la cadena. La presencia de un grupo OH en el sustituto de la ribosa mejora considerablemente su sección transversal (K. Aflatoon et. al., 2006).

La sección eficaz de colisión es un parámetro que es, en cierta forma una medida de la probabilidad de que una partícula colisione con otra, por ejemplo, la interacción del electrón con la molécula, en tanto que los coeficientes de enjambre provienen del comportamiento colectivo de los electrones con el gas. Existe una relación biunívoca entre la sección eficaz de colisión y los coeficientes de enjambre y por ello, al medir coeficientes de enjambre, es posible validar las secciones eficaces de colisión.

Esto último es particularmente importante a bajas energías, cuando los experimentos de haces son muy difíciles de conducir (energías menores a 5 eV). Trabajos recientes indican una fuerte tendencia de aumento de las secciones eficaces de captura electrónica disociativa a medida que disminuye la energía de los electrones incidentes (J. de Urquijo et. al., 2019), así como lo describe la Fig.4.

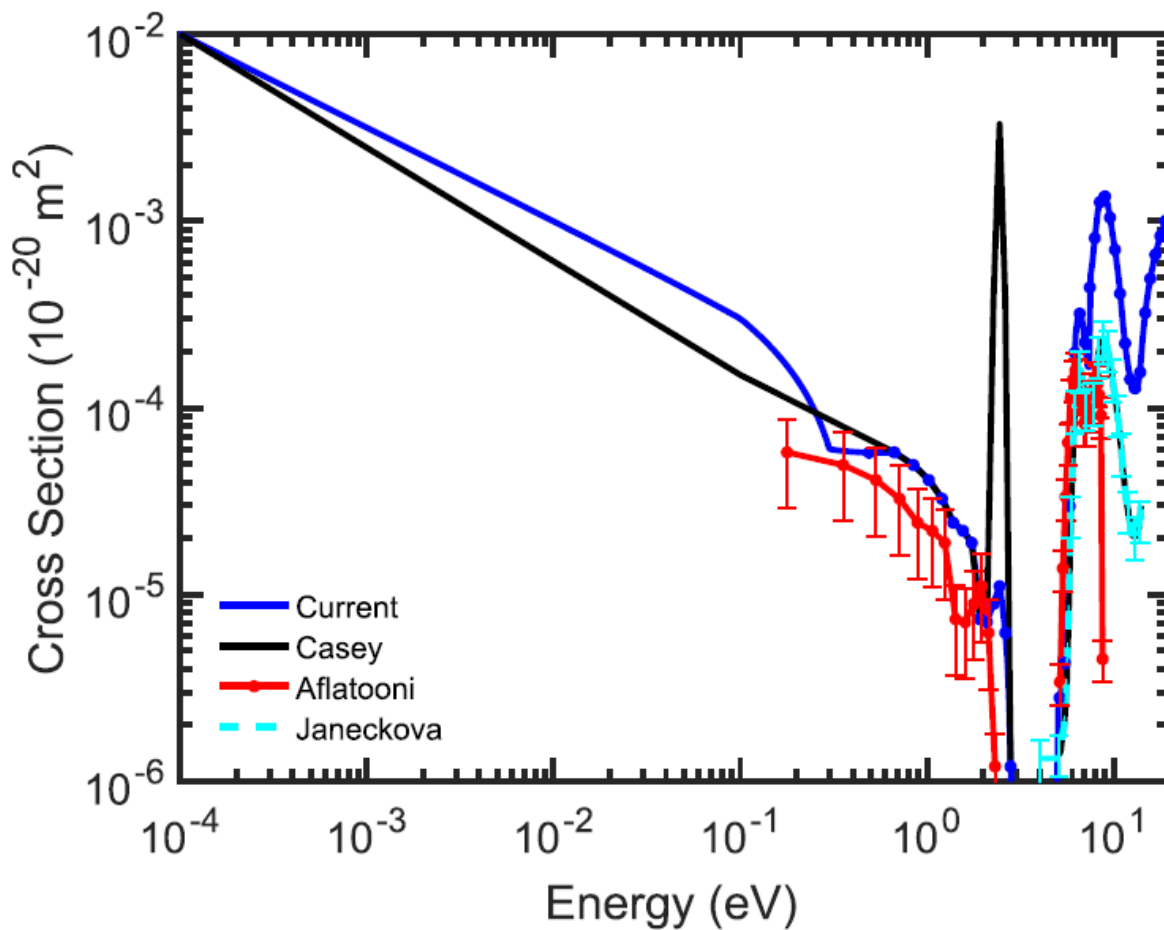


Fig. 4 Sección eficaz de captura electrónica disociativa para THF por impacto electrónico (J de Urquijo et al., 2019).

Capítulo 3

El experimento pulsado de Townsend

3.1 Fundamentos

El experimento pulsado de Townsend se centra en la observación de la corriente de desplazamiento total producida por el movimiento de los portadores de carga bajo la influencia de un campo eléctrico uniforme producido por un par de electrodos plano-paralelos. Cada portador de carga contribuye a la corriente total, medible. En la mayoría de los estudios es posible distinguir una componente rápida, cuya duración se encuentra en el intervalo 0-500 ns debida al movimiento de los electrones, seguida de una componente lenta, debida a la o las especies iónicas. La avalancha electrónica se genera por la incidencia de un pulso corto (3-6 ns) de luz ultravioleta sobre un cátodo cuya función de trabajo es compatible con la energía del fotón. Estos fotoelectrones, a su paso por la brecha interelectródica, sufren colisiones elásticas e inelásticas que conducen a la formación de iones positivos y negativos (si el gas es electronegativo), mismos que al moverse a sus respectivos electrodos generan una corriente de desplazamiento que se aplica a un amplificador de transimpedancia (corriente/voltaje). La señal de voltaje a la salida del amplificador se registra en un osciloscopio y, de éste, se transfiere en formato digital a una computadora para su análisis posterior. Dicho análisis, dependiendo de la forma del pulso, al analizar la componente electrónica, permite el cálculo de los coeficientes de ionización efectiva (la sustracción del coeficiente de ionización del coeficiente de captura electrónica), la velocidad de arrastre y coeficiente de difusión electrónicos. El análisis de la componente iónica, dependiendo de los fenómenos ocurrientes entre los iones y la molécula, permite la medición de la velocidad de arrastre de el o los iones presentes en la avalancha y, en algunos casos, los coeficientes de reacción. Todos estos coeficientes se reportan en función de la relación entre el campo eléctrico externo y la densidad del gas, E/N y, como ya se ha dicho, su unidad es el Townsend [Td], $1 Td=10^{-17} V cm^2$.

3.2 El aparato experimental

Se puede describir el experimento pulsado de Townsend en términos de tres partes, a saber: el sistema de electrodos, el láser productor de fotoelectrones y el

sistema de medición y registro de la señal de corriente de desplazamiento. A continuación, se describirán en detalle. En la Fig. 5 se muestra el esquema completo del aparato.

La estructura principal de la cámara de Townsend es un recinto metálico de vacío, hermético, que contiene un sistema de electrodos metálicos cuyo ánodo (A) se conecta una fuente de alto voltaje. La evacuación del recinto se consigue con un sistema conformado por una bomba turbomolecular apoyada por una rotatoria. Entre la bomba turbomolecular y la cámara de descargas se ubica una válvula de mariposa. Para medir la presión del gas a estudiar se utiliza un transductor de presión absoluta del tipo capacitivo, que mide la presión del gas entre 0.1 y 100 Torr con una precisión de 0.015% llamado Baratron. Para efectos de evacuar la cámara, se utilizan dos sensores, a saber, uno de alta presión, llamado Pirani, con un intervalo de medición entre 0.001 y 760 Torr, y otro que mide las presiones de alto vacío, llamado medidor de ionización (Ion Gauge) que opera en el intervalo de presiones entre 10^{-3} – 10^{-7} Torr.

La presión de vacío base debe ser cercana a 10^{-6} Torr, lo cual se logra con la bomba turbomolecular. Inmediatamente después de alcanzarse dicha presión de vacío, se aísla la cámara cerrando la válvula de mariposa y se inyecta el gas bajo estudio a la presión deseada en la cámara, medida por el Baratron.

Con el apoyo de una computadora se controla y se leen los parámetros experimentales con un programa desarrollado en LabView© (propiedad de la UNAM) que controla una fuente de alimentación de alto voltaje (aplicado al ánodo) y mide continuamente la presión y la temperatura del gas en el interior de la cámara. Cuando el operario elige el valor de E/N a medir, el programa calcula el voltaje a aplicar al ánodo. El cátodo está conectado a un amplificador de transimpedancia que convierte la corriente en voltaje para poder observar los pulsos en un osciloscopio digital. Los pulsos de corriente se almacenan en la computadora con un código que corresponde al de la bitácora para condiciones de E/N y N particulares. Posteriormente, los pulsos se analizan de acuerdo con la interpretación física que se les da.

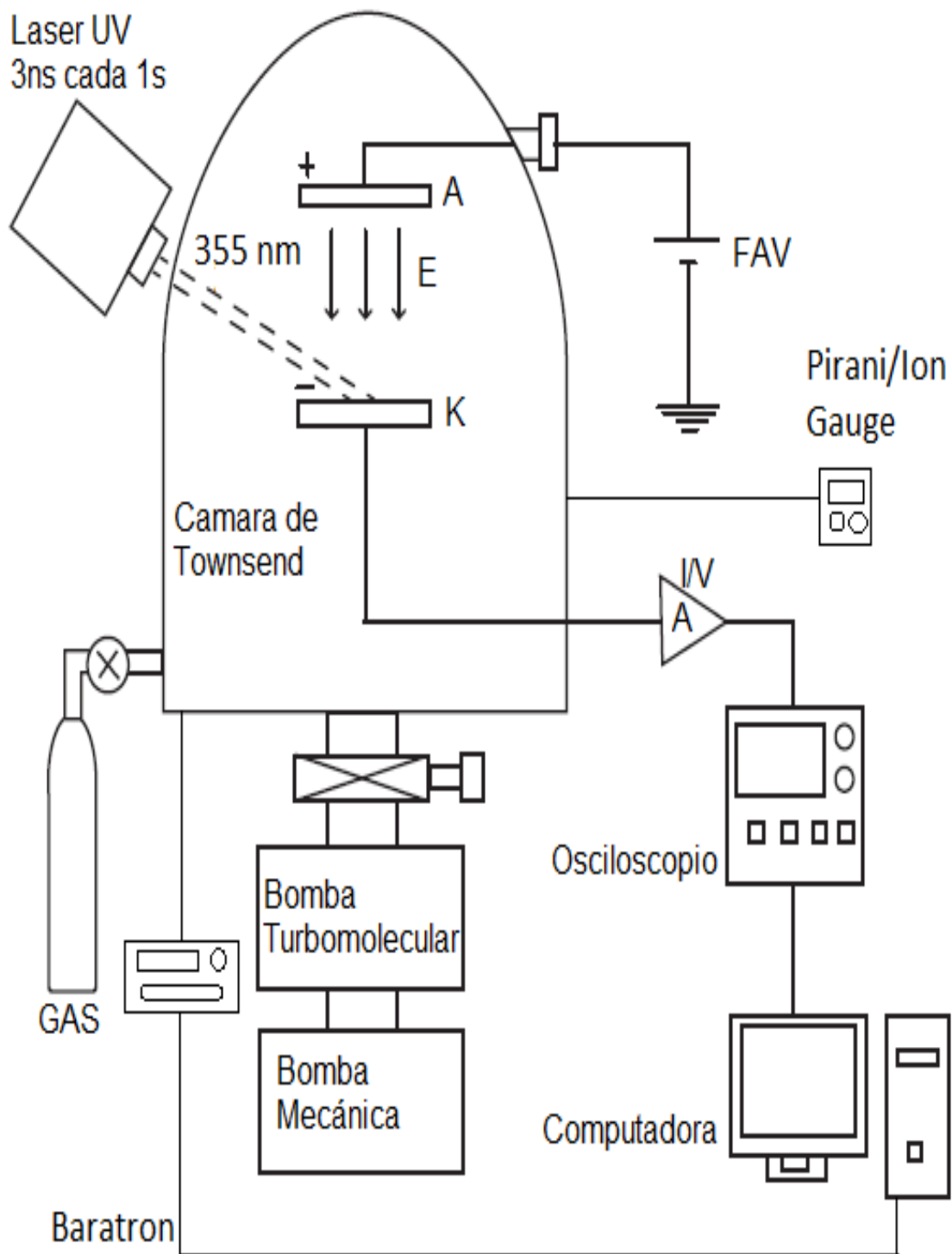


Fig. 5 Diagrama representativo del montaje experimental de la cámara pulsada de Townsend (Peralta,2016).

3.2.1 La brecha de arrastre

La brecha de arrastre consiste en dos placas metálicas planas, paralelas, pulidas a espejo, con 13.4 cm de diámetro y los bordes redondeados. El cátodo es de aluminio y el ánodo de acero inoxidable. Desde el punto de vista eléctrico, estas placas constituyen en efecto un condensador. Las placas están separadas una distancia fija de 3.1 cm, ajustada con un micrómetro de precisión Mitutoyo, con una incertidumbre de 0.025 mm. El campo eléctrico se produce mediante la aplicación de un voltaje por una fuente de alto voltaje. El ánodo está conectado a una fuente de alto voltaje, con una regulación de 0.01% y factor de rizo de 3 mV máximo. El cátodo se conecta a un amplificador de transimpedancia cuyo neutro se conecta a tierra, cerrándose así el circuito. La salida del amplificador se conecta a un osciloscopio digital con un ancho de banda de 100 MHz.

3.2.2 Producción del haz de fotoelectrones pulsado

Para generar el pulso de fotoelectrones iniciales desde el cátodo de aluminio se utiliza un láser de Nd/YAG (1064 nm en la fundamental) con dos generadores de armónicos para contar con luz ultravioleta de 355 nm en pulsos cuya duración es de 3-5 ns a una repetición de 1 Hz. Cuando los fotones que se impactan sobre el cátodo producen los fotoelectrones iniciales, el área iluminada por el haz de láser es cercana a 6mm en diámetro, es decir, mucho menor (cerca de 20 veces) que el diámetro de los electrodos, asegurándose así que el campo eléctrico en el seno de la descarga es altamente homogéneo.

3.2.3 Medición y registro de la corriente de desplazamiento

Se utiliza un osciloscopio digital con un ancho de banda de 100 MHz, en tanto que el amplificador de transimpedancia tiene una ganancia de 5×10^5 V/A con un ancho de banda de 40 MHz para la medición de las componentes electrónicas y de una ganancia de 400 kHz (10^7 V/A) para las iónicas, así que los efectos de tiempo de elevación se deben principalmente al amplificador. Puesto que las corrientes de desplazamiento de electrones y iones se encuentran en el intervalo de μ A para los electrones y pA-nA para los iones, respectivamente, sus amplitudes son compatibles con el nivel de ruido de la instrumentación. Para elevar la relación señal/ruido (S/N), se usa la opción de promediado de la señal del osciloscopio, con

lo que se consiguen relaciones S/N mayores a 10, en general. Véase la Fig.6.

En el canal 1 del osciloscopio, se conecta la salida del amplificador (AMP) y en el número 2 el pulso de disparo proveniente de la fuente de alimentación del láser, o bien la señal proveniente de un fotodiodo cercano a la ventana de cuarzo por la cual ingresa el haz de láser a la cámara de ionización. El fotodiodo se ubicó entre la salida del láser y la entrada a la cámara (ver Fig.6). Después de haber obtenido un pulso con una buena relación señal/ruido, éste se almacena en la memoria de la computadora de control.

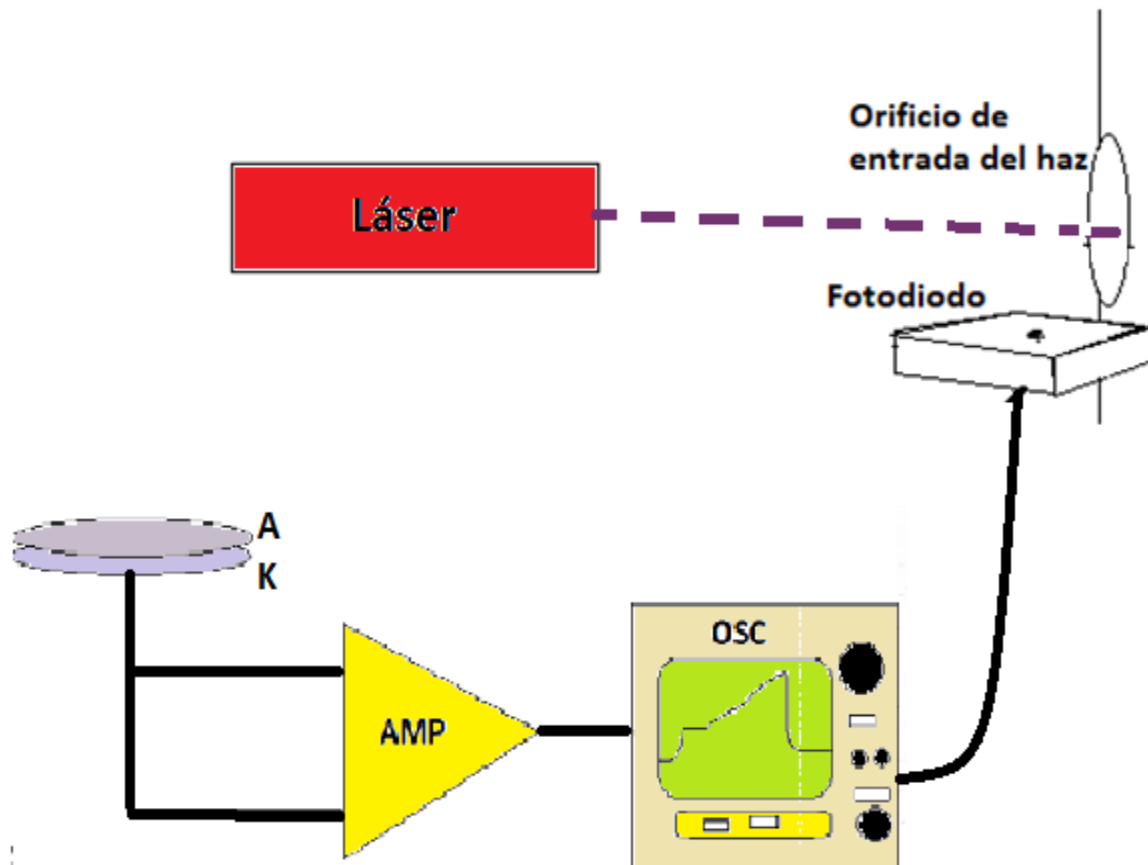


Fig. 6 *Esquema representativo del circuito amplificador de señales y del osciloscopio encargado de la visualización de los pulsos para su posterior registro. Además del montaje del fotodiodo para la función del Trigger.*

3.2.4 Adquisición de las señales y bitácora de mediciones

La bitácora de mediciones es un archivo de texto creado por el programa de control y contiene todos los parámetros del experimento, a saber, número de disparo, valor de E/N, presión del gas, temperatura, distancia interelectrónica, base de tiempo (ns/div) y amplitud (V/div).

Cada pulso es guardado en un archivo con extensión .txt. Estos archivos están vinculados con la bitácora de mediciones mediante el número de disparo. Los pulsos son registros guardados directamente de la lectura del osciloscopio digital, por lo que sus archivos contienen las lecturas de tiempo y corriente eléctrica en unidades de osciloscopio; a diferencia de la bitácora que contiene parámetros experimentales.

3.2.5 Especificaciones de la instrumentación utilizada

- ❖ **Fuente de alto voltaje:** La fuente de alto voltaje que se utilizó tiene una estabilidad de 0.01% y un factor de rizo de 3 mV máximo, lo cual asegura una intensidad de campo eléctrico constante.

- ❖ **Multímetro digital:** Para medir el voltaje aplicado al ánodo desde la fuente de alto voltaje, se utiliza un multímetro digital marca Schlumberger modelo 7150 plus. Desde luego, la conexión entre la fuente de alto voltaje y el multímetro se hace mediante un atenuador resistivo 1mV/V, es decir, que, para un voltaje máximo de 5 kV a la salida de la fuente, se tienen 5 V a la salida del atenuador.

- ❖ **Osciloscopio:** Se utiliza un osciloscopio digital marca Tektronix, modelo TDS 320, con 100 MHz de ancho de banda y resolución mínima de 5 mV/div.

- ❖ **Sistema de vacío:** La evacuación de la cámara se lleva a cabo gracias a dos bombas conectadas en serie. La primera etapa de evacuación se realizó con una bomba rotatoria, marca Leybold, de 5.4 m³/hr, con una presión mínima de 1×10^{-3} Torr. La segunda etapa es una bomba turbomolecular modelo NT150/360 de la marca Leybold-Heraeus.

- ❖ **Sistema de medición de la presión de vacío.** La medición de la presión a lo largo del experimento se divide en tres etapas
 - La primera etapa, se midió con un medidor de presión Pirani de la marca Kurt J. Lesker modelo KJL275196, capaz de medir presiones desde una presión atmosférica a $\sim 1 \times 10^{-3}$ Torr. En la segunda etapa la presión se midió con un medidor de ionización (Ion Gauge) marca Kurt J. Lesker. modelo KJL392 con un intervalo de medición entre $\sim 1 \times 10^{-3}$ y 1×10^{-8} Torr, aproximadamente.
- ❖ Después de inyectar el gas a estudiar, la presión de éste se monitorea con un transductor de presión absoluta (Baratrón) de la marca MKS modelo 722P. Este medidor tiene una precisión de 0.2% de lectura cuya salida se conecta a un multímetro digital de 6.5 dígitos, de la marca Agilent, modelo 34401A. La relación de conversión es 100 mV/Torr.
- ❖ **Amplificador de transimpedancia:** Para la medición de las componentes iónicas se utilizó un amplificador de transimpedancia marca Femto, con ancho de banda de 400kHz y un factor de transimpedancia de 10^7 V/A. Este amplificador es lo suficientemente sensible para amplificar señales en el intervalo de nA, pues 1 nA produce a su salida 10 mV, perfectamente registrables por el osciloscopio.

La disposición física del aparato se muestra en la figura 7

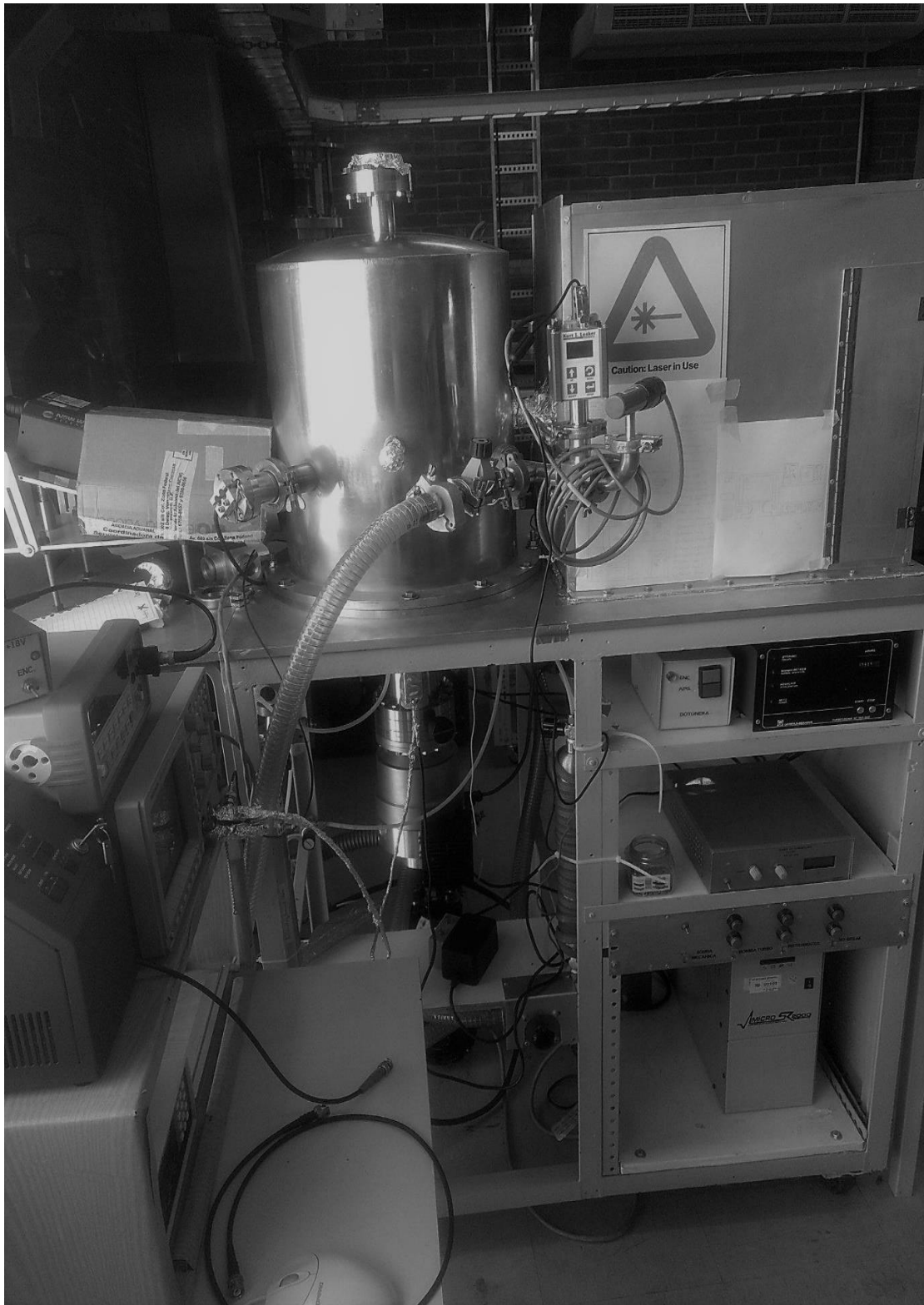


Fig. 7 La cámara pulsada de Townsend propiedad del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, Campus Morelos.

Capítulo 4

Análisis de los pulsos iónicos

En este capítulo derivaremos las expresiones útiles para analizar los pulsos iónicos en THF, comenzando por el crecimiento de la avalancha de iones negativos durante el tránsito electrónico, seguida del análisis de la pérdida del electrón por desprendimiento colisional del ion negativo, por una parte, y por la otra, el análisis de un pulso que sugiere la formación de un ion negativo cumular.

4.1 Corriente en el circuito externo

Supongamos una brecha interelectródica de distancia d , con n_i portadores de carga, moviéndose y reaccionando bajo la acción de un campo eléctrico uniforme y constante. Dicho movimiento producirá una corriente I_i . Derivaremos la corriente al igualar el trabajo mecánico que se hace para mover a los portadores de carga en la dirección del campo eléctrico con el trabajo eléctrico que genera dicha corriente. Como se trata de un campo eléctrico generado por un condensador de placas paralelas, tenemos que el valor del campo es (Teich, 1974):

$$E = \frac{U}{d} \quad (8)$$

donde U es el voltaje aplicado a las placas.

Como se ha dicho anteriormente, el trabajo eléctrico y mecánico deben ser de la misma magnitud para mover n_i cargas cuyo valor de carga es q_i , a través de una distancia dx en la dirección del campo y en un intervalo dt .

El trabajo mecánico en la dirección x en una lámina infinitesimal, dx , es

$$dW_M = n_i q_i E dx \quad (9)$$

Y el trabajo eléctrico es (10)

$$dW_E = UI_i dt$$

Por la conservación del trabajo total en el sistema, igualamos (9) y (10), obteniendo

$$n_i q_i E dx = E dI_i dt \quad (11)$$

De la ecuación 11 se obtiene el valor de la corriente

$$I_i = n_i q_i \frac{1}{d} \frac{dx}{dt} \quad (12)$$

Puesto que $\frac{dx}{dt}$ es velocidad v_i entonces el tiempo de vuelo o deriva de dicha especie

es $T_i = v_i/d$, con lo que escribimos (12) como

$$I_i(t) = \frac{q_i}{T_i} n_i(t) \quad (13)$$

4.2 Arrastre de iones estables

Como se comentó en la sección anterior, la velocidad de los electrones es significativamente mayor a la de los iones (100 veces o más), por lo que, en presencia de procesos de captura electrónica, descrita por el coeficiente de captura electrónica η , podemos escribir que el incremento/decremento infinitesimal de la densidad de electrones en el intervalo dx es

$$dn_e = n_e(x)(-\eta)dx \quad (14)$$

Al integrar la ecuación 14 tenemos el número total de electrones en función de la posición, que se expresa como sigue:

$$n_e = n_0 e^{-\eta x} \quad (15)$$

Puesto que $x = v_e t$, (15) puede escribirse como

$$n_e(t) = n_0 e^{(\alpha-\eta)v_e t} \quad (16)$$

Donde n_0 es el número de fotoelectrones iniciales. Se considera el intervalo de tiempo desde que inician el viaje los electrones iniciales hasta que arriban al ánodo ($0 \leq t \leq T_e$).

Sustituyendo (16) en (13), obtenemos la corriente electrónica en función del tiempo, dada por

$$I_e = \begin{cases} \frac{q_e n_0}{T_e} e^{(\alpha-\eta)v_e t}, & 0 \leq t \leq T_e \\ 0, & t > T_e \end{cases} \quad (17)$$

De acuerdo con (Martinez, 2003), al usar la ec. 16 para derivar la densidad de iones, se obtiene

$$n_n(t) = n_0 (1 - e^{-\eta(d-v_n t)}) \quad (18)$$

Y la corriente de los iones negativos resulta ser

$$I_n(t) = \frac{n_0 q}{T_n} (1 - e^{-\eta(d-v_n t)}) \quad (19)$$

que es válida para el intervalo de tiempo $T_e \leq t \leq T_e + T_n$.

Esta última expresión se cumple sólo para el caso de iones negativos estables, durante su paso a través de la brecha, cuya señal tiene la forma típica de la Fig. 8.

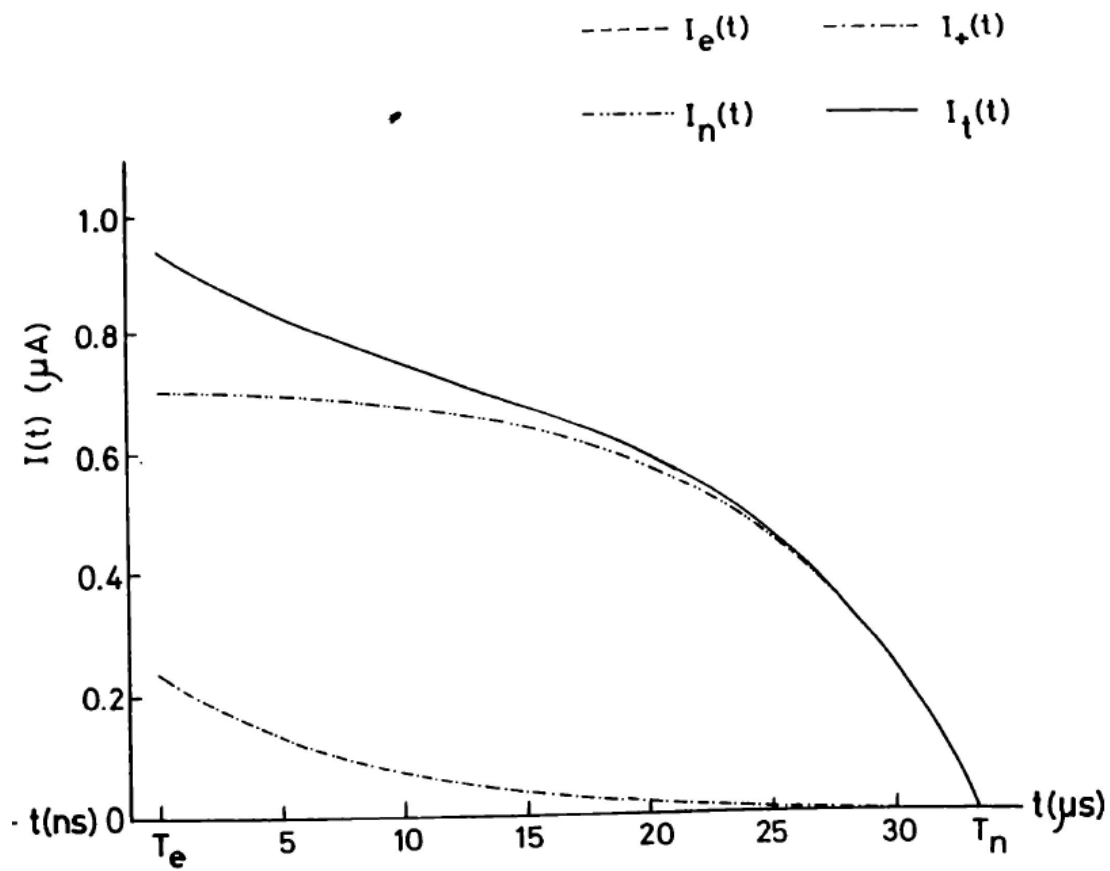


Fig. 8 Ejemplo de un pulso de iones negativos estables descrito por la ecuación 19. El tiempo de arribo se muestra en la gráfica como T_n (Urquijo, 1980).

4.3 Señales iónicas negativas afectadas por desprendimiento electrónico

Por otra parte, durante el experimento se encontró que un grupo de señales que mostraban una estructura muy diferente a la predicha por la ecuación 19, tal como la mostrada en la Fig. 9.

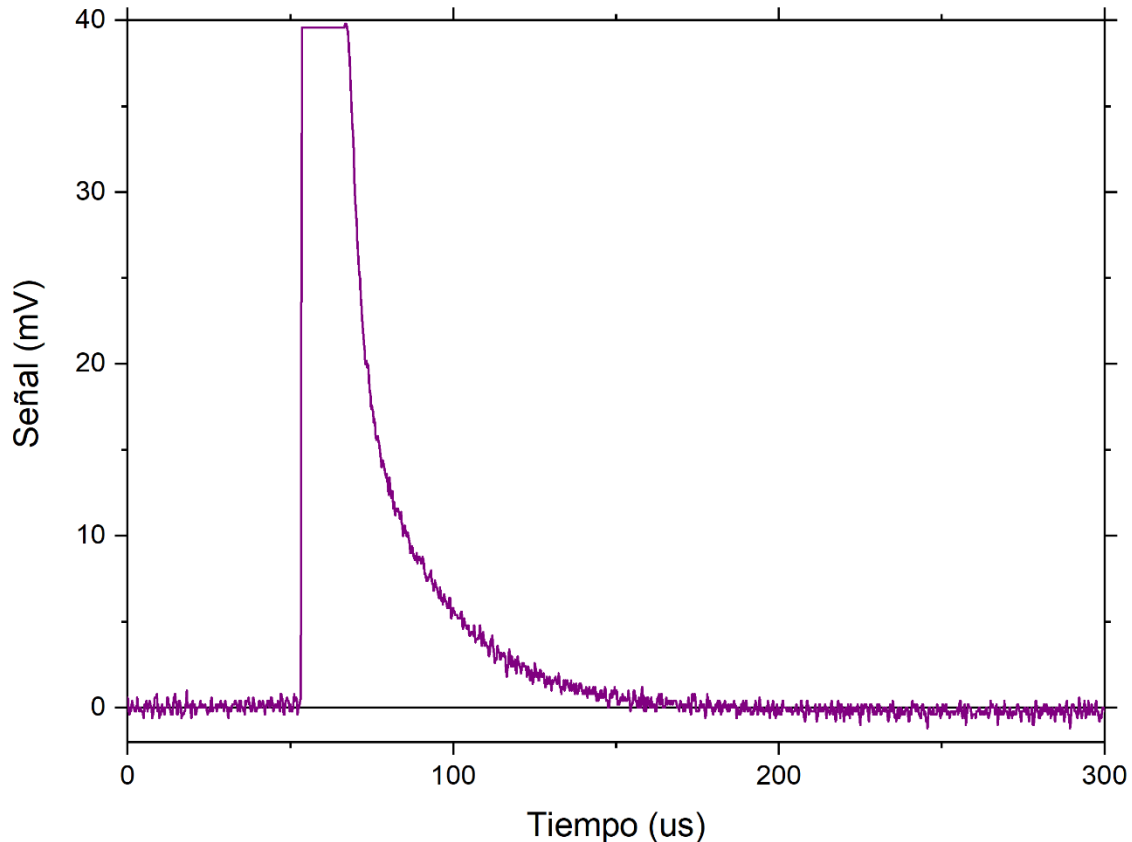
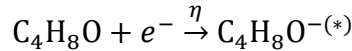


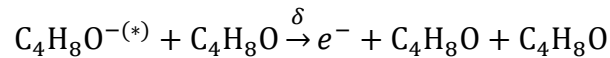
Fig. 9 Ejemplo de la señal obtenida para la corriente de iones negativos de THF que no obedece a la ecuación 19, registrada, a una presión de 10 Torr, $E/N=20$ Td y una temperatura de 21°C.

Este comportamiento se había observado y reportado previamente en los estudios de iones negativos a muy bajo E/N y alta densidad del gas en CO_2 (Rodríguez, 2004) y en mi trabajo de tesis de licenciatura en THF (Pérez, 2018). Lo primero que se observa en la figura 9 es que una vez transcurrido el tránsito electrónico (la zona inicial con una meseta), ocurre un decaimiento cuasi exponencial, sugerente de la destrucción de los iones negativos, ya sea por colisión o por autodesprendimiento del electrón. Se descartan completamente los iones positivos ya que dentro del intervalo de E/N en el que se hicieron estas mediciones, la ionización es imposible, debido a que los electrones no pueden ionizar

positivamente la molécula (ver Fig. 10 para observar el régimen de E/N). Por ello, se ha establecido un modelo de formación de iones negativos metaestables en THF tal que sólo ocurre la captura electrónica, seguida de la destrucción del ión. Más específicamente, el modelo de colisión que se plantea contempla la formación de un ión negativo metaestable, sin disociación, como



sucesido por la pérdida del electrón como



donde η es el coeficiente de captura electrónica y δ es el coeficiente de desprendimiento, definido como el número de iones negativos desprendidos de su electrón por unidad de longitud. Las mediciones realizadas a bajo E/N ($6 < E/N < 100 \text{Td}$) del coeficiente de ionización efectiva aseguran que la energía de los electrones es insuficiente para ionizar la molécula de THF (véase la Fig. 10).

Con estas nuevas condiciones experimentales y según con la Ec. 18, una vez concluido el tránsito electrónico ha quedado una nube de iones negativos distribuidos a lo largo de la brecha que, con $x=v_n t$, tenemos que

$$n_n(x, t = 0) = -n_0(e^{-\eta x} - 1) \quad (20)$$

En vista de que la nube iónica negativa se mantiene virtualmente estática durante el tránsito electrónico a causa de la enorme movilidad electrónica con respecto a la iónica, podemos asignar un nuevo tiempo de deriva iónica, con $t=0$ al final del tránsito electrónico. De la ecuación (20) podemos calcular la densidad lineal de iones negativos como:

$$N_n(x, t = 0) = \frac{\partial n_n(x, 0)}{\partial x} = \eta n_0 e^{-\eta x} \quad (21)$$

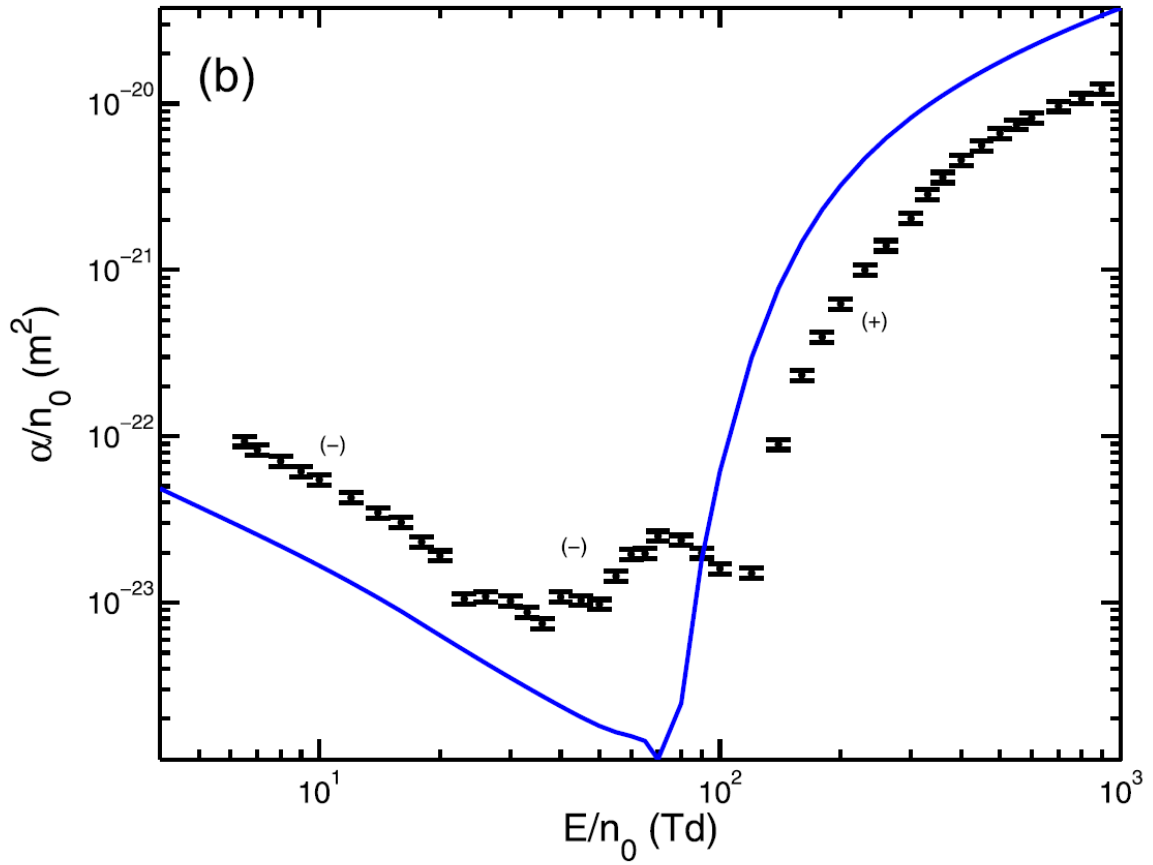


Fig. 10 El coeficiente de ionización efectiva en función de E/n_0 (n_0 en esta figura es N en esta tesis). A consecuencia de que la gráfica es logarítmica, los valores debajo de 100 Td son negativos. (J de Urquijo et. al., 2017). Los datos experimentales son las "I" y la curva continua es la calculada.

La ecuación de continuidad que describe la evolución espacial y temporal de la densidad de los iones negativos en el seno de la brecha es

$$\frac{\partial N_n}{\partial t} + v_n \frac{\partial N_n}{\partial x} = -\delta v_n N_n \quad (22)$$

Para resolver la ec. (22), comenzamos aplicando la transformada de Laplace respecto a x , obteniendo

$$\frac{dN_n}{dt} + v_n \widehat{N}_n = -\delta v_n \widehat{N}_n \quad (23)$$

Reordenando los términos e integrando,

$$\ln \widehat{N}_n = -v_n (s + \delta) t + C_n(s) \quad (24)$$

donde $C_n(s)$ es una constante de integración. Tomando ahora la transformada de Laplace de (24), bajo la condición inicial $x=0$, tenemos que

$$\widehat{N}_n(s, 0) = \frac{\eta n_0}{s + \eta} \quad (25)$$

Usando esta condición inicial, la ecuación (24) se reduce a:

$$\ln \frac{\eta n_0}{s + \eta} = C_n(s) \quad (26)$$

de donde se obtiene que

$$\widehat{N}_n = \frac{\eta n_0}{s + \eta} e^{-\delta v_n t} e^{-s v_n t} \quad (27)$$

Tomando la transformada inversa de Laplace, la expresión para la densidad lineal de iones negativos queda como

$$N_n(x, t) = \eta n_0 e^{-\eta(x-v_n t)} e^{-\delta v_n t} u(x - v_n t) \quad (28)$$

Donde $u(x-v_n t)$ es una función escalón. Para calcular la corriente de los iones negativos en el circuito externo, se integra esta expresión con respecto a la coordenada espacial x , desde algún punto arbitrario $x=v_n t$ hasta el ánodo, d , resultando que

$$I_n(t) = \frac{n_0 q e}{T_n} (1 - e^{-\eta(d-v_n t)}) e^{-\delta v_n t} \quad (29)$$

Esta ecuación es válida para el intervalo de tiempo $0 \leq t \leq T_n$. Para el caso en que no hay desprendimiento, esto es $\delta = 0$, esta ecuación se reduce a la ecuación 19 (Rodríguez, 2004). Ahora bien, cuando ocurre un decaimiento exponencial como el del pulso de la Fig. 9, es imposible medir la velocidad, v_n . Además, notamos que el producto δv_n es la constante de tiempo con unidades inversas a la unidad de tiempo

$$\tau = 1 / \delta v_n \quad (30)$$

Por otra parte, la estructura de la ec. (29) sugiere que, cuando se cumple la condición

$$\exp[-\eta(d - v_n t)] \ll 1 \quad (31)$$

Entonces resulta una expresión en la que sólo interviene la exponencial que tiene en su argumento el coeficiente τ . Para ello, supongamos que

$$\exp[-\eta(d - v_n t)] < 0.01 \quad (32)$$

Es decir, que

$$\eta(d - v_n t) < 4.6 \quad (33)$$

Para ver si se cumple la desigualdad (33) en términos de las condiciones experimentales de interés, para $d=3 \text{ cm}$, η/N que disminuye desde un valor de 10^{-18} cm^2 a 6 Td hasta 10^{-19} cm^2 a 60 Td, la velocidad del ion, v_n se incrementa desde 470 cm s^{-1} hasta 4870 cm s^{-1} (ver Sección 5) a 60 Td, $P=20 \text{ Torr}$, y un tiempo característico, t_c , en el que la señal exponencial decadente es prácticamente cero (ver Fig. 9). Tenemos por un lado que $\eta(d - v_n t) = 1.8$ a $E/N=6 \text{ Td}$, y $\eta(d - v_n t) = 0.18$ a 60 Td, con lo que se cumple con suficiencia la desigualdad (33), siendo así que la ecuación 29 se reduce a

$$I_n(t) = \frac{n_0 q_e}{T_n} e^{-t/\tau} \quad (34)$$

4.4 Ajuste exponencial

Basados en la ecuación 34, podemos ajustar una curva exponencial al transitorio medido para obtener el tiempo de vida media de esta especie iónica, τ , el cual es un parámetro utilizado para medir el tiempo en que una especie iónica existe antes de que vuelva a un equilibrio de cargas y se vuelva una molécula neutra. Un ejemplo del pulso medido y su ajuste exponencial se muestra en la Fig. 11, observándose un excelente ajuste. La parte inicial del pulso, de forma rectangular, corresponde a la corriente del tránsito electrónico, que satura la intensidad que puede registrar el osciloscopio. El nuevo tiempo inicial comienza a la izquierda de la zona con fondo violeta claro, en donde se tiene el inicio de la componente de iones negativos. La zona violeta es la región de interés, de la cual se obtiene el tiempo de vida media.

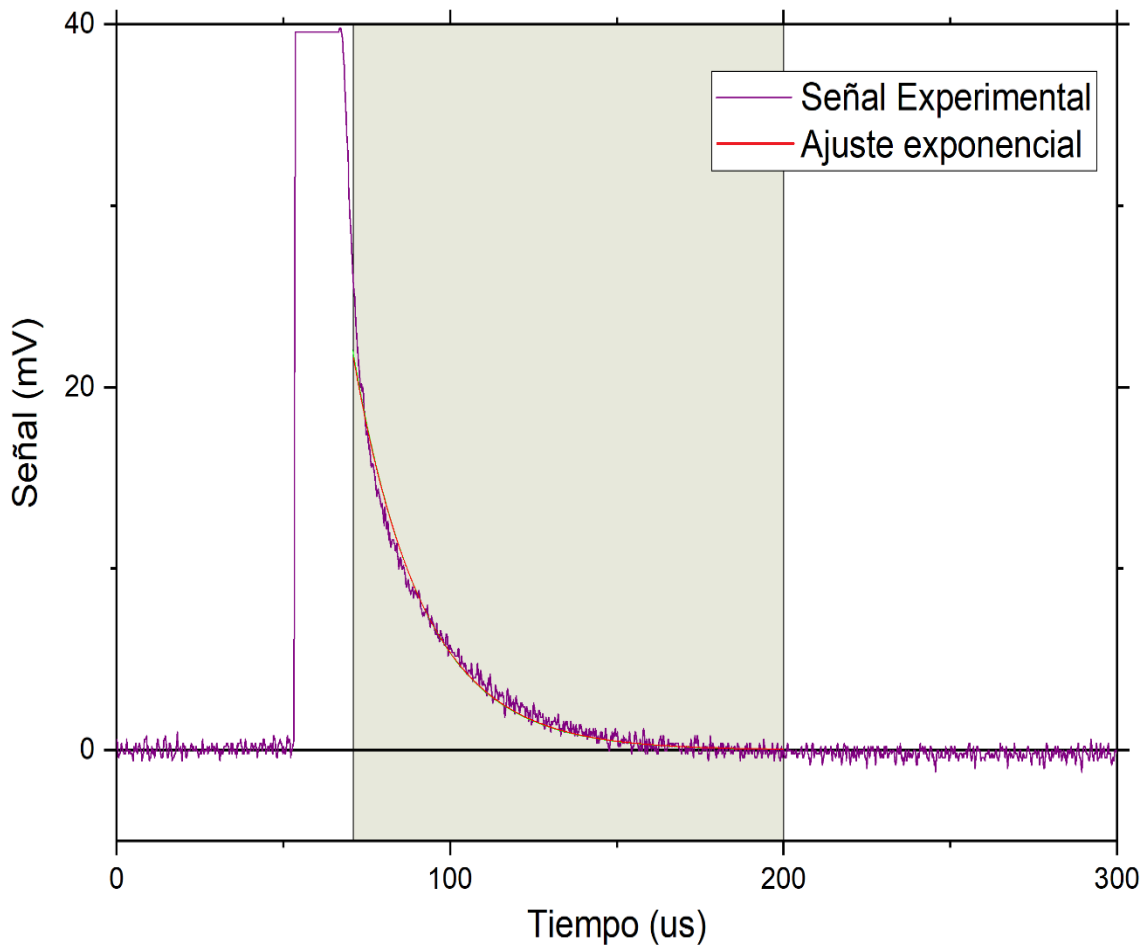


Fig. 11 *Ejemplo de ajuste exponencial a un pulso de corriente debido a un ion negativo de THF, a una presión de 10 Torr y E/N a 20 Td. Los valores de ajuste son: región de interés de tiempo [70 a 200 μ s], amplitud de la exponencial con un valor de $A_1=654$, $\tau=20.8 \mu$ s, y el coeficiente de correlación $R^2=0.9883$.*

El ajuste exponencial a las curvas medidas se hizo para un intervalo de presiones entre 5 y 20 Torr y valores de E/N en el intervalo 6-60 Td. El coeficiente de correlación, R^2 , fue siempre mayor a 0.92, indicando que las hipótesis establecidas para llegar a la ec. (34) son plausibles (ver sección 5.1 de resultados).

4.5 Señales iónicas negativas que sugieren formación cumular

Para descartar o confirmar posibles efectos de la presión del gas THF en el decaimiento y arrastre de sus iones negativos, se trabajó a relativas altas presiones en el intervalo de 10 hasta 100 Torr.

. El límite superior en la presión lo dictó la presión de saturación de vapor del THF, que es 145 Torr a 20 °C (National Center for Biotechnology Information, 2017). En esta segunda fase de la investigación, se pudo detectar la presencia de avalanchas iónicas de muy larga duración (ms) y con una estructura que, a primera

vista, sugiere la de un ion negativo estable que se forma durante el tránsito electrónico y se desplaza al ánodo sin perder su identidad al no reaccionar con las moléculas del gas. Ejemplos de este comportamiento se dan en (Urquijo, 1980), y se procedió a determinar el tiempo de arribo, T_n , de la manera indicada en la Fig. 12.

4.6 Pulsos iónicos de THF a bajo E/N y alta presión

Como parte de la exploración en el estudio de los transitorios iónicos de THF, se realizó un experimento de exploración a presiones por encima de 20 Torr para observar las variaciones en los transitorios iónicos. Los transitorios iónicos que se obtienen al medir a presiones de trabajo superiores a 20 Torr resultan ser de muy baja intensidad (con intensidad de señal superior a unos cuantos mV) pero con tiempos de tránsito muy largos, de entre 2 a 6 milisegundos.

La baja intensidad de la señal dificultó en primera instancia su observación, pero con promediado suficiente y con la escala mínima del osciloscopio (2mV/div) se pudieron medir los pulsos con una aceptable relación señal-ruido. Un ejemplo de estos pulsos se muestra en la Fig. 12.

El resultado de este experimento se muestra en la Fig. 13, donde se observa un aumento en la intensidad de señal a medida que la presión crece. Este método permitió medir pulsos iónicos a valores de E/N entre 6 y 16 Td y presiones desde 10 hasta 100 Torr.

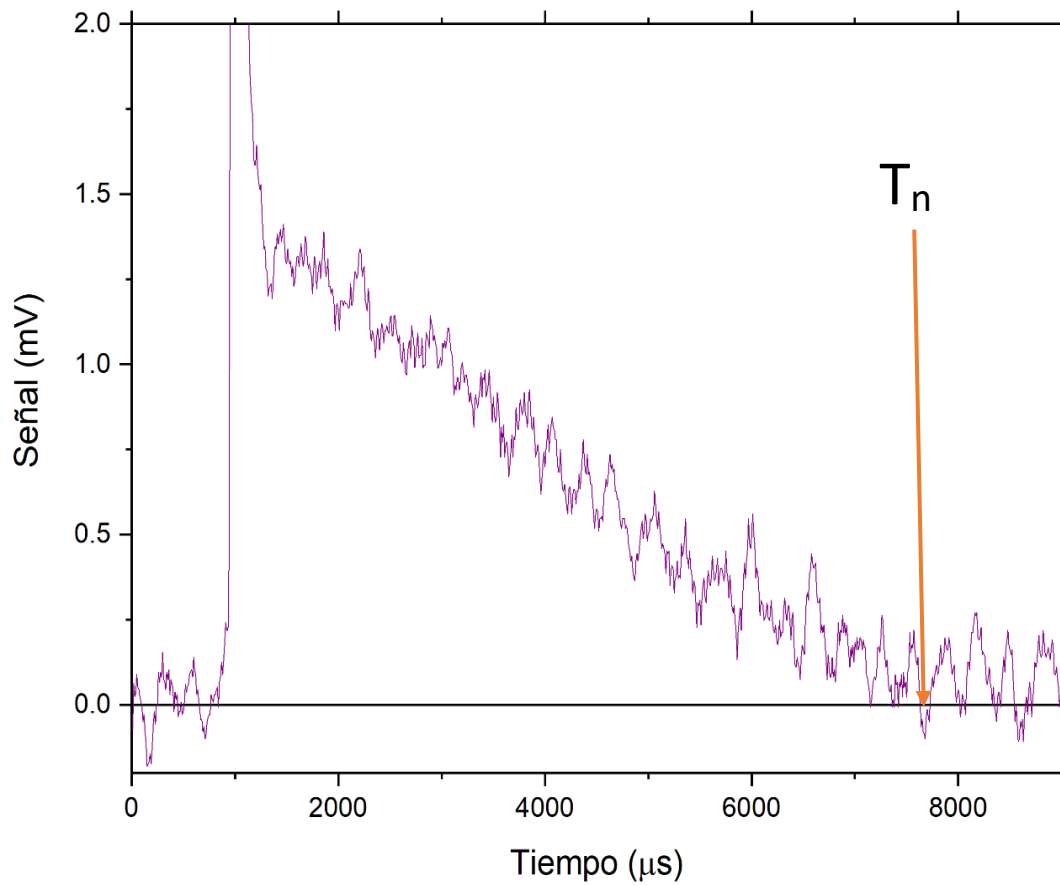


Fig. 12 *Ejemplo de un pulso medido en THF a una presión de 40 Torr y E/N de 6 Td. La flecha naranja indica el tiempo de arribo de los iones negativos conocido como T_n .*

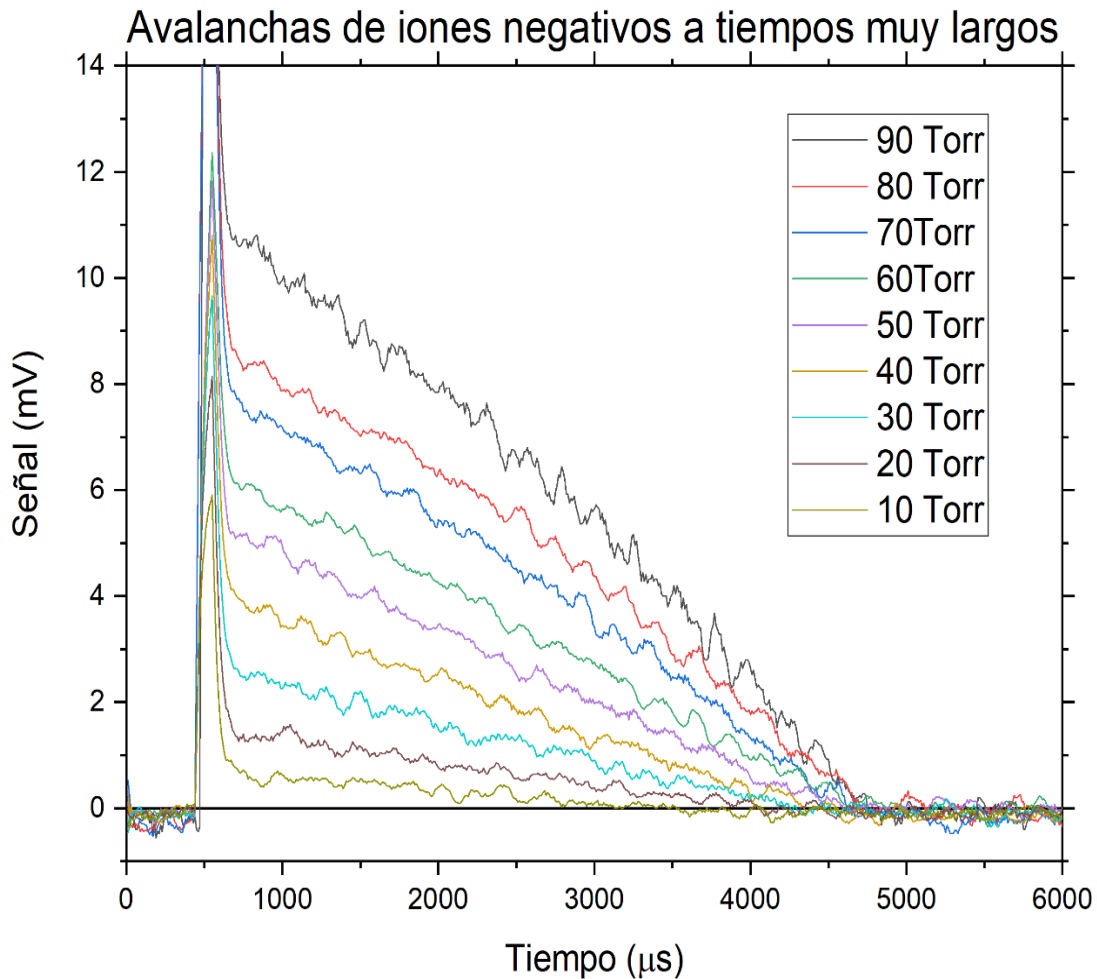


Fig. 13 Pulsos obtenidos en THF para confirmar la observación preliminar de estas nuevas especies. Se hizo a un valor fijo de $E/N=10$ Td y se varió la presión entre 90 y 10 Torr.

4.7 Medición de la velocidad de la componente iónica estable

La medición del tiempo de arribo, T_n , se ilustra en la Fig. 14, en la que se delimitan los tiempos de inicio y fin de la avalancha. Conviene destacar que las señales contienen un ruido intrínseco, que conduce a una incertidumbre de $\pm 350 \mu s$ en promedio, en la determinación del tiempo de vuelo del ion. que, en comparación con la duración de cualquiera de esos transitorios, resulta en un error experimental menor al 10%, que es muy aceptable al considerar la dificultad en la obtención de las señales por el nivel de ruido eléctrico presente.

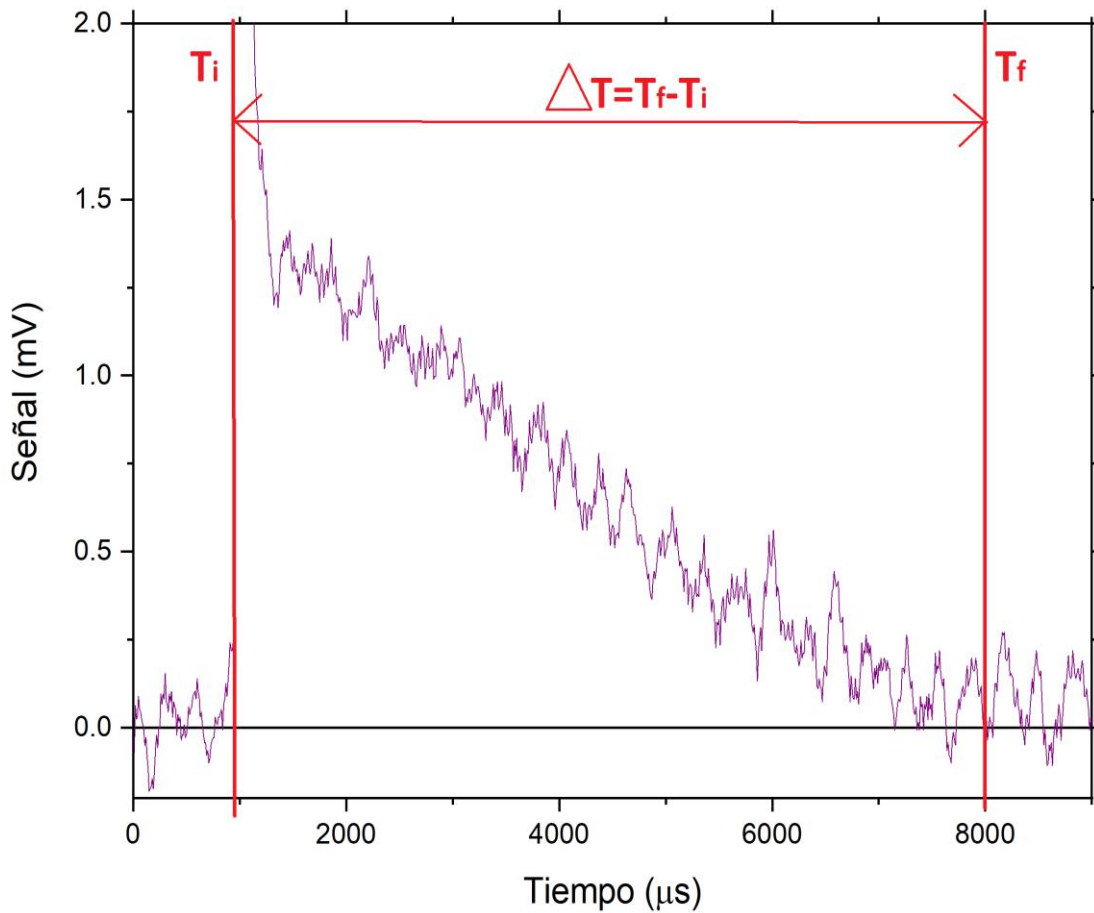


Fig. 14 Ubicación de los cursores indicadores del inicio y fin del transitorio iónico para la obtención de su tiempo de arribo.

Una vez obtenida la diferencia de tiempo, ΔT , se calcula la velocidad de arribo mediante

$$v_n = \frac{d}{\Delta T} \quad (35)$$

con $d=3.1$ cm, la separación entre electrodos. Una vez obtenida la velocidad iónica, se puede calcular la movilidad reducida, que relaciona la velocidad con el campo aplicado y normalizada a condiciones estándar (760 Torr, 0 °C), con $N_0=2.68 \times 10^{19}$ cm^{-3} a 273 K, la velocidad se da en cm s^{-1} y E/N en Td

$$K_n = \frac{v_n}{N_0 \left(\frac{E}{N} \right)} \quad (36)$$

Capítulo 5

Resultados

Los coeficientes de transporte presentados en este trabajo provienen de un análisis de las señales iónicas de THF medidas en el experimento pulsado de Townsend. Las mediciones se hicieron, para la medición del tiempo de vida media, a valores de E/N entre 6 y 60 Td, en tanto que aquellas para los iones hasta ahora calificados como “estables”, los intervalos fueron 6-16 Td y 10-100 Torr. La temperatura se mantiene casi constante durante la medición de un transitorio, pero varía lentamente en el transcurso del día entre 22 y 26 °C.

Las incertidumbres asociadas a los parámetros medidos se presentan en la siguiente tabla.

Incertidumbres en los Coeficientes medidos	
Parámetro	Incertidumbre
v_n	6-10 %
K_0	6-10 %

Tabla 1. *Incertidumbres porcentuales de cada parámetro medido en el experimento.*

5.1 Coeficiente de vida media del ión negativo formado en THF

A partir del análisis de los transitorios iónicos que presentaron una forma cuasi exponencial decadente, se obtuvo el tiempo de vida medio de los iones metaestables formados. La técnica utilizada para este análisis se detalla en la sección 4.4. En la Fig. 15 se muestran los resultados obtenidos para τ , y en la Fig. 16 se muestra el coeficiente de correlación R^2 correspondiente al ajustar a una exponencial simple.

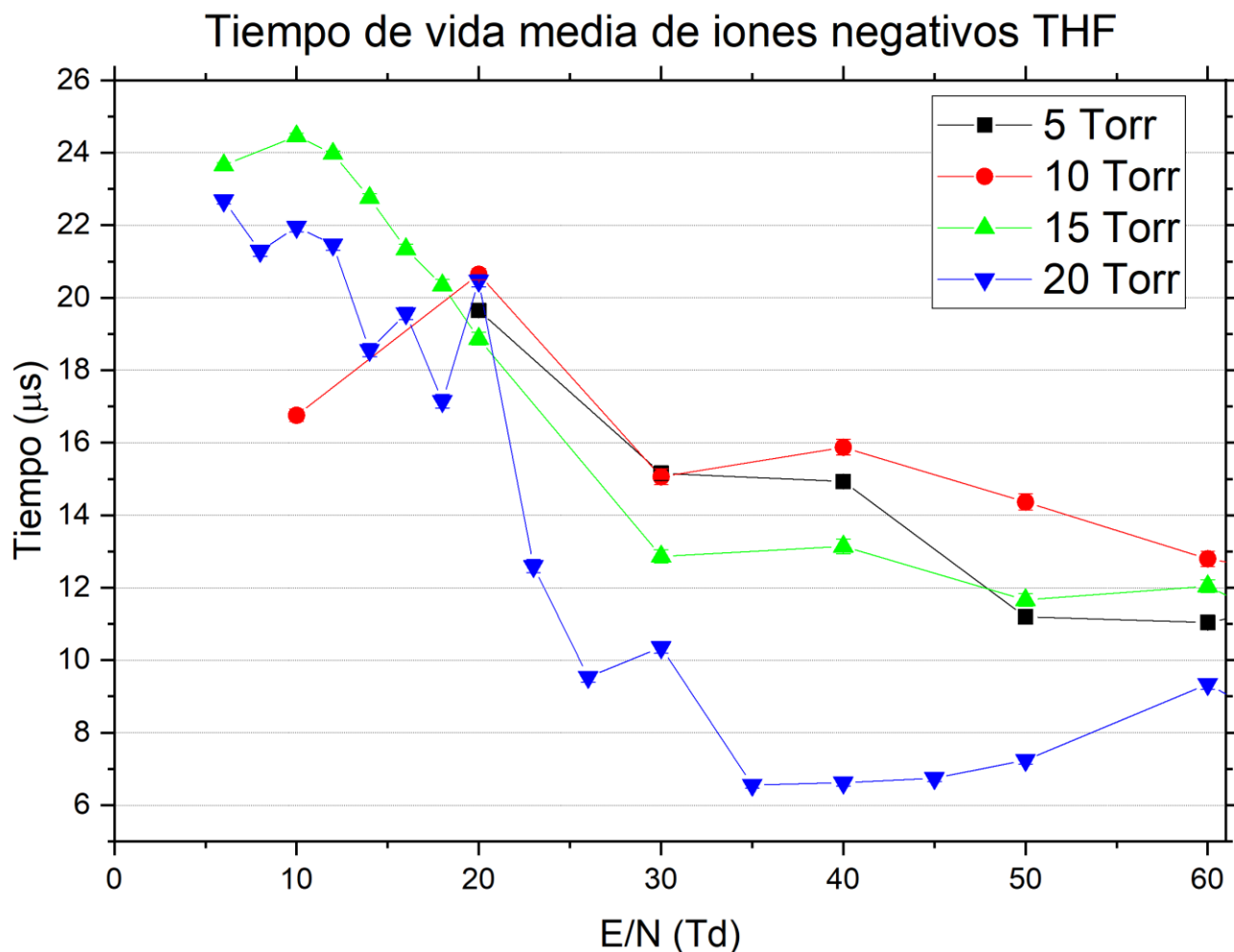


Fig. 15 El tiempo de vida media (τ) de los iones negativos metaestables de THF a medido en función de E/N a cuatro presiones del gas. La incertidumbre porcentual en estos resultados no fue mayor que el 3%.

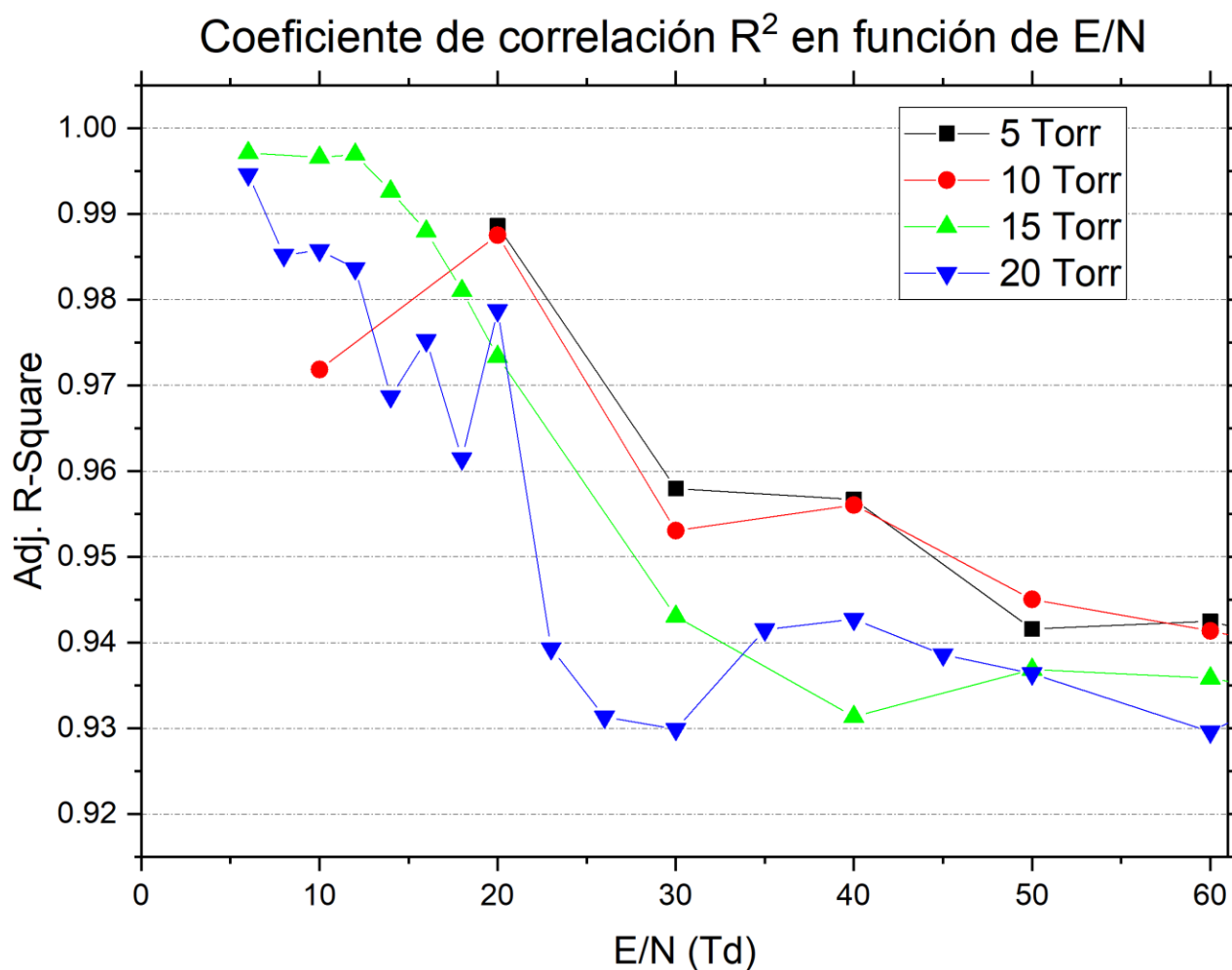


Fig. 16 El coeficiente de correlación, R^2 , correspondiente al ajuste de las curvas exponenciales de las cuales se obtienen el tiempo de vida media (Fig. 15) de los iones negativos metaestables de THF.

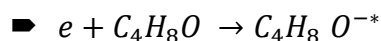
Como se puede observar en la gráfica del tiempo de vida medio de los iones negativos metaestables de THF, éste disminuye a medida que E/N aumenta. Esto sugiere que el desprendimiento electrónico es del tipo colisional. Conviene resaltar el hecho de que aun cuando el modelo planteado es simple, los ajustes, calificados por el coeficiente de correlación, R^2 , indican que el fenómeno sugerido en la sección 4.3 es plausible.

5.2 Velocidades de arrastre de los iones estables

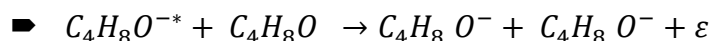
En la Fig. 17 se muestra la variación de la velocidad de los iones negativos “estables” en función de la presión y con E/N como parámetro. Dichos valores se obtuvieron a partir del método descrito en la sección 4.6 y 4.7. Se observa una clara dependencia inversa entre la velocidad con la presión del gas. Dicha dependencia

se interpreta en términos de la formación de cúmulos iónico-moleculares, ya que el ion negativo, originalmente inestable, primeramente, puede estabilizarse por colisión y acto seguido, asociarse con otra molécula, probablemente débilmente por fuerzas de Van der Waals, y así sucesivamente con más moléculas, ya que el camino libre medio se acorta, y ello es dependiente de la presión del gas. Por otra parte, para la misma intensidad de campo eléctrico, la velocidad depende, en buena medida de la masa del ion, así que a menor velocidad corresponde mayor masa. La interpretación física de este fenómeno se da por una cantidad mayor de colisiones que pueden suceder a mayor presión debido a que la probabilidad de colisión se incrementa por el número de moléculas presentes. Dicho lo anterior, se sugiere el siguiente esquema de reacción:

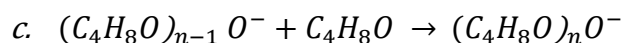
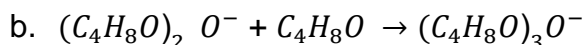
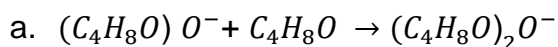
i) Formación de un ion negativo con la masa de THF, inestable:



ii) Estabilización por colisión



iii) Formación cumular



Este modelo de colisión iónico-molecular se ha estudiado en otro tipo de moléculas como el CO₂, pero no se conoce nada de esto para THF. Sin embargo, la evidencia experimental es convincente. En las componentes iónicas de THF a altas presiones se observaron transitorios muy bien definidos a bajo E/N, indicativo de la formación de iones negativos estables, que podría ser THF⁻ o un cúmulo ((C₄H₈O)_nO⁻). Contrario a la experiencia con iones de otras especies moleculares, los iones en cuestión tienen velocidades muy bajas, correspondientes a energías subtérmicas (26 meV), lo cual sugiere que tienen masas muy grandes. Es indispensable aclarar que indagar más en este aspecto, por su complejidad, no es parte de este trabajo.

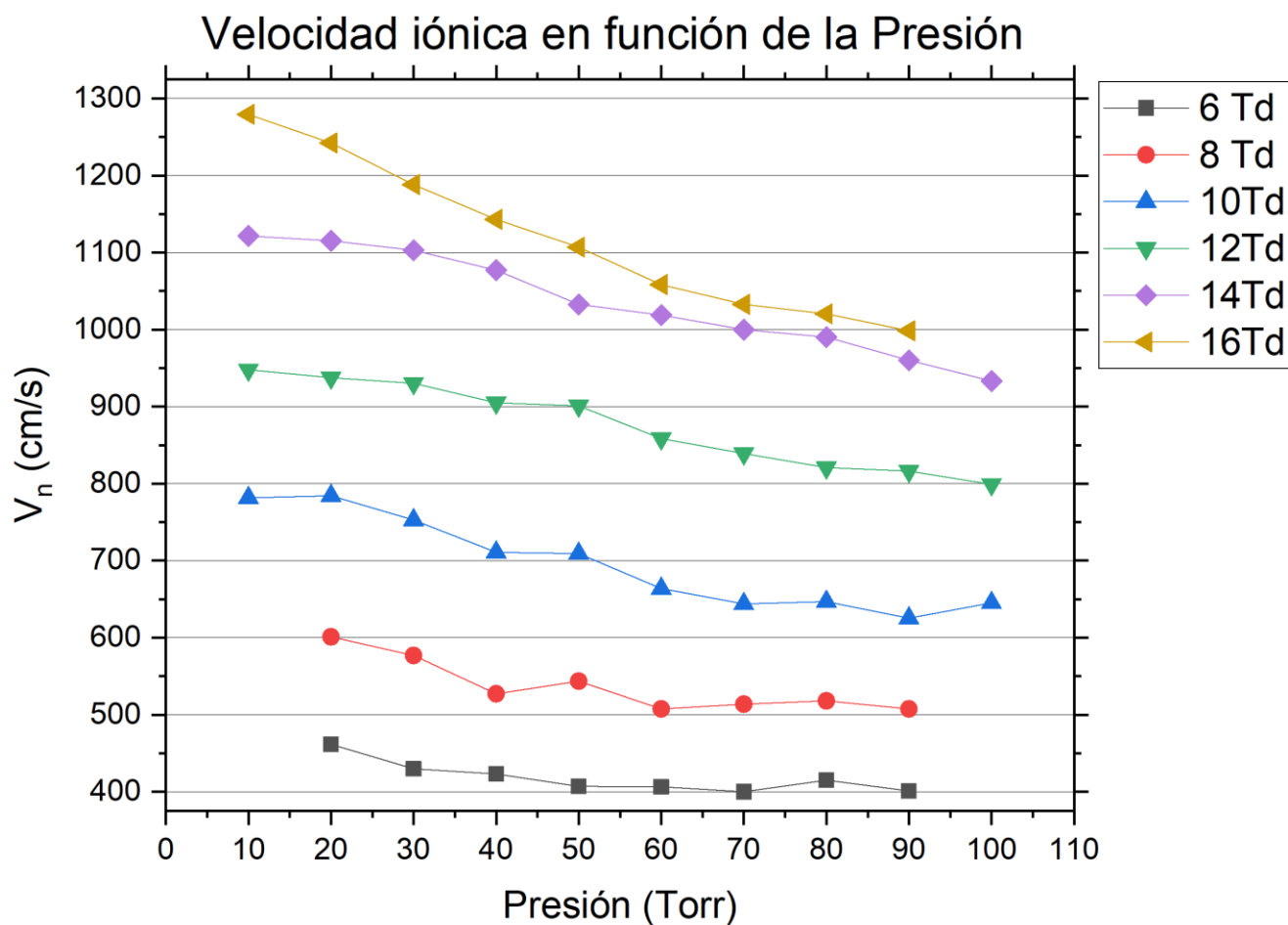


Fig. 17 Las velocidades de arribo iónico obtenidas en el experimento de Townsend a altas presiones y bajos E/N .

5.3 Movilidad reducida

Utilizando la ec. 36, en la Fig. 18 se muestran las movilidades reducidas de los cúmulos iónico-moleculares formados en THF a presiones altas y bajo E/N . El efecto de masa se puede observar claramente por la tendencia que guarda la movilidad reducida con el aumento de la presión. Estos dos factores implican un aumento en la masa del cúmulo iónico-molecular, así como un incremento en el número de cúmulos formados debido a que la probabilidad de colisión aumenta conforme el número de partículas lo hace. La forma de obtener este parámetro se describe en la sección 4.7. de este trabajo de tesis.

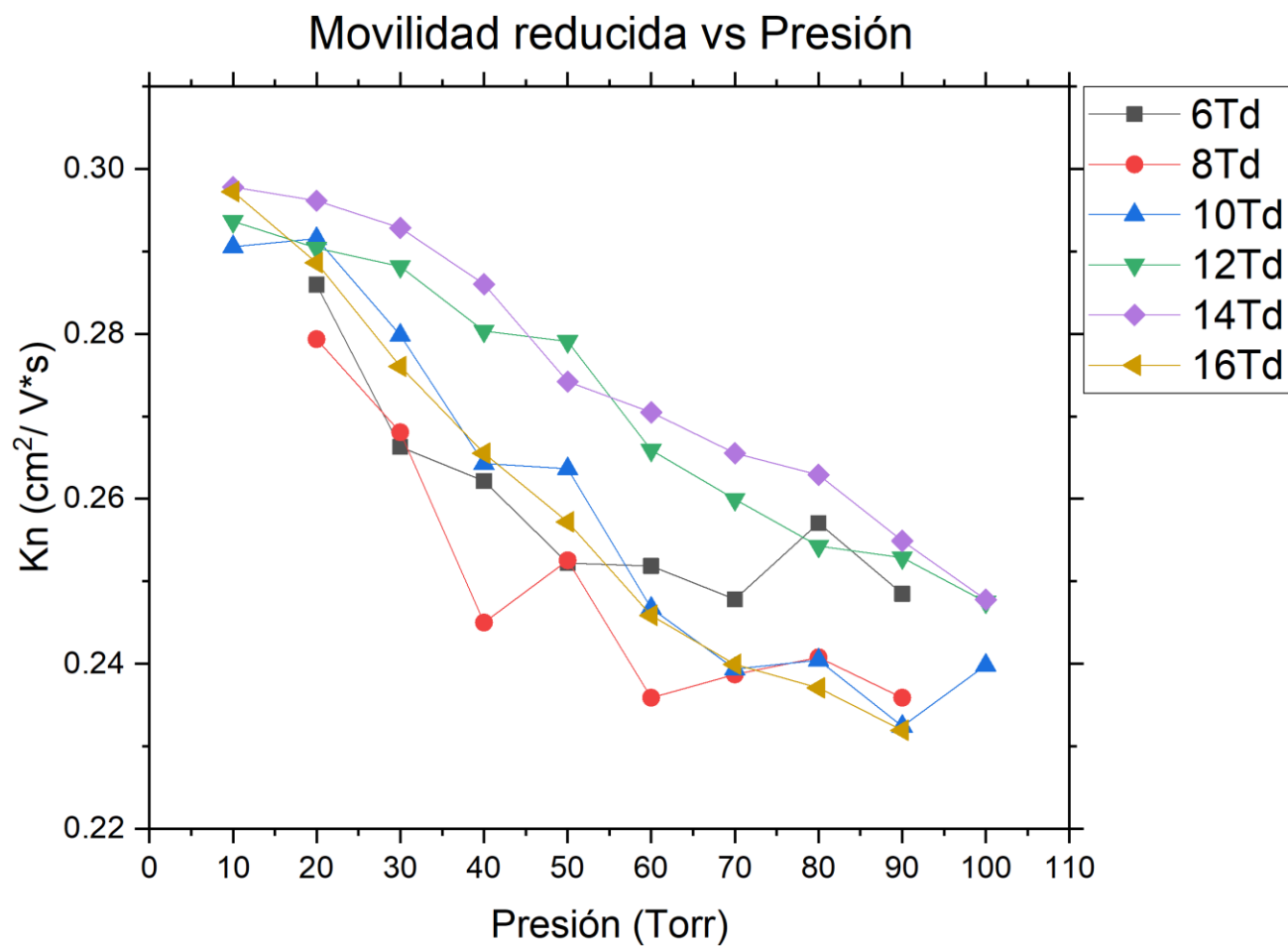


Fig. 18 La movilidad reducida de los iones negativos cumulares medida en este estudio.

Capítulo 6

Discusión, recomendaciones para trabajo futuro y conclusiones

Las mediciones que se reportan en este trabajo acerca de la destrucción y el movimiento o arrastre de los enjambres de iones negativos en el seno de THF bajo la influencia de un campo eléctrico homogéneo y constante son originales. No sabemos de ningún trabajo similar que se haya publicado.

En este capítulo haremos una discusión final, ponderada, sobre los hallazgos reportados, haciendo énfasis en que se trata de un trabajo pionero que amerita continuarse, para lo cual haremos algunas recomendaciones antes de concluir.

6.1 Discusión

Tiempo de vida media

Conviene destacar que los valores de ajuste tuvieron coeficientes de correlación muy cercanos a la unidad, con una incertidumbre del 1-4%, lo cual es indicativo de que parte de los iones negativos formados por captura resonante, es decir, que se trata de la molécula del gas ionizada negativamente, se destruyen, aunque no se puede determinar si es por colisión o por autodesprendimiento. Se tuvo cuidado de no ampliar más allá de $E/N=60$ Td esta investigación para asegurar que no hubiese iones positivos. Los tiempos de vida media característicos que oscilan entre los 6 y 25 μ s

Velocidad de arrastre iónico de cúmulos iónico-negativos

Al explorar la componente iónica de THF usando presiones cercanas a la presión de saturación, se pudo observar pulsos muy estables y de baja corriente, típicamente en el intervalo de 5 mV, lo que implica una corriente de 500 pA. Sin embargo, promediando centenas de transitorios individuales, se pudo observar claramente el pulso en el intervalo de $E/N=6-16$ Td, y presiones entre 10 y 100 Torr. La muy baja velocidad (movilidad) de estos iones y su dependencia con la presión sugiere que se trata de iones negativos cumulares, y se han presentado hipótesis para sustentar esta afirmación. Las velocidades medidas tienen entre 6 y 10% de incertidumbre de medición.

6.2 Recomendaciones para trabajos futuros

Habiendo dicho que se trata de mediciones originales y de suma importancia para conseguir el complejo esquema de reacción del THF en condiciones de enjambre, es importante que el trabajo reportado en esta tesis continúe bajo las siguientes líneas:

- i) Estudiar a mayor profundidad la dependencia de la movilidad de los cúmulos iónicos, tal que sea posible estimar la masa de los mismos.
- ii) Usando la técnica de fotodesprendimiento, estudiar los umbrales de fotodestrucción para conocer la afinidad electrónica del THF.
- iii) Usando un aparato para el estudio del desprendimiento electrónico colisional, dilucidar si realmente éste es colisional o autodesprendimiento.
- iv) Extender los estudios aquí presentados en THF al THFA (Alcohol tetrahidrofurfurilo), ya que es otra molécula de interés biológico.

6.3 Conclusiones

Se ha llevado a cabo un trabajo original sobre el estudio de la destrucción y arrastre iónico de THF en su gas paterno. Se ha demostrado la versatilidad y enorme sensibilidad del Experimento Pulsado de Townsend para estudiar fenómenos de colisión a muy bajas energías.

Referencias

- Bittencourt, J. A. (2004). Definition of a plasma. En J. A. Bittencourt, *Fundamentals of Plasma Physics* (págs. 1-2, 6-10, 12). New York: Springer.
- Fridman, A. (2008). *Plasma Chemistry*. Cambridge: Cambridge University Press.
- J de Urquijo et. al. (2017). Self-consistency of electron-THF cross sections using electron swarm techniques. *The Journal of Chemical Physics*, 195103(1-16).
- J. de Urquijo et. al. (2019). Assessment of the self-consistency of electron-THF cross sections using electron swarm techniques: Mixtures of THF-Ar and THF-N₂. *The Journal of Chemical Physics*, 054309(1-17).
- K. Aflatooni et. al. (2006). Total dissociative electron attachment cross sections for molecular constituents of DNA. *The Journal of Chemical Physics*, 054301 (1-5).
- Loucas G. Christophorou, James K. Olthoff. (2004). Low energy electron-molecule interaction processes. En J. K. Loucas G. Christophorou, *Fundamental Electron Interactions with Plasma Processing Gases* (págs. 2-3). New York: Kluwer Academic/ Plenum Publishers.
- Martinez, F. R. (2003). *Procesos macroscópicos y microscópicos*. Ciudad de México: UNAM.
- N. A. Garland et.al. (2013). Transport properties of electron swarms in tetrahydrofuran under the influence of an applied electric field. *Physical review*, 0627812(1-10).
- Nasser, E. (1971). Ionization. En E. Nasser, *Fundamentals of gaseous ionization and plasma electronics* (págs. 14-15,55-65,110-111,141-143). New York: Wiley Interscience.
- National Center for Biotechnology Information. (19 de Dec de 2017). *Pubchem Open Chemistry Database*. Obtenido de Pubchem Open Chemistry Database:
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/tetrahydrofuran#section=Top>
- Pérez, G. (2018). *Estudio de la interacción de electrones lentos con moléculas orgánicas de interés biológico*. Cuernavaca: Tesis de licenciatura.
- Rodríguez, S. (2004). *Determinación de parámetros ed descarga en oxígeno, dióxido de carbono y mezclas con nitrógeno*. Cuernavaca, Morelos: UNAM.
- Sanche, L. (2005). Low energy electron-driven damage in biomolecules. *The European Physical Journal D*, 367-390.
- Teich. (1974). Difussion. En Teich, *Notes on Electrical Discharges in Gases* (págs. GD 2-42, GD 3-1 - GD 3-4). United Kingdom.
- Urquijo, J. d. (1980). *Determination of discharge parameters in sulphur hexaflouride and oxygen by observation of laser light initiated electron swarms*. Manchester: Ph. D. Thesis.