

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS

ESTUDIO DE LA FORMACIÓN Y MOVILIDAD DE IONES DE
INTERÉS BIOLÓGICO

TESIS PROFESIONAL PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA:

LUIS GERSON PÉREZ ROMERO

DIRECTOR: DR. JAIME DE URQUIJO CARMONA

CUERNAVACA, MORELOS

MARZO, 2026

ESTUDIO DE LA FORMACIÓN Y MOVILIDAD DE IONES DE INTERÉS BIOLÓGICO

Luis Gerson Pérez Romero
Marzo de 2026

*La Física me ha enseñado cuán fuerte es mi mente,
la vida cuán resiliente es mi alma,
y ambas sumadas han demostrado
cuán resistente soy ante la adversidad.
G.P.*

Miembros del jurado

Presidente

Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos

Secretario

Dr. Rolando Pérez Álvarez

Vocal

Dr. Eduardo Basurto Uribe

Vocal

Dr. Remigio Cabrera Trujillo

Vocal

Dra. Sandra Ignacia Ramírez Jiménez

Suplente

Dr. Aldo Figueroa Lara

Suplente

Dr. Joaquín Escalona Segura

LISTA DE PUBLICACIONES

L G Pérez-Romero and J de Urquijo 2025 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **58** 435206

O González-Magaña *et al* 2025 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **58** 345202

RESUMEN

Este trabajo versa sobre el estudio de las propiedades de transporte de electrones e iones, su difusión y la reactividad electrón-molécula e ion-molécula, a través de la medición de los coeficientes de enjambre electrónico en diversas mezclas de tetrahidrofurano (THF, C_4H_8O) y agua (H_2O) en la fase gaseosa, utilizando la Técnica Pulsada de Townsend (TPT) en un amplio intervalo del campo eléctrico normalizado a la densidad, E/N . Además, se presentan los cálculos de la velocidad de arrastre electrónico para las mezclas de THF con agua, utilizando un código que resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann. Esto se hizo porque la dependencia de la velocidad de arrastre con E/N para las mezclas tiene una forma muy peculiar, con un entrecruce único jamás visto antes en otros sistemas. La investigación que se ha hecho es muy relevante ya que aborda la interacción de electrones de baja energía (<20 eV) con THF, que es una molécula sustituta bien establecida de la 2-desoxirribosa. Estudios previos de medición de secciones eficaces han demostrado que la molécula de THF es una excelente candidata para los estudios en fase gaseosa de la 2-desoxirribosa debido a su gran similitud tanto en secciones eficaces como en geometría. Al combinar THF con moléculas de agua, el objetivo fue recrear un entorno que se asemejara más a las condiciones reales del núcleo celular, donde el medio circundante es el citoplasma, rico en contenido de agua. Se logró la medición de los coeficientes efectivos de ionización, los coeficientes de captura electrónica, y la velocidad de deriva de electrones en un amplio intervalo de E/N y presiones de gas. Otro resultado importante fue la medición de la formación y el transporte de iones negativos originados a partir del THF a muy bajos valores de E/N , en una región donde la energía de los electrones es insuficiente para formar iones positivos. A partir de esto, se observó la formación de cúmulos iónico-moleculares de THF, al observarse una clara dependencia de su movilidad con la presión, lo que representa un hallazgo significativo para futuros trabajos orientados a explicar la fuerte reactividad de los radicales libres producidos por electrones lentos de subionización generados por fuentes de radiación ionizante.

Abstract

This work deals with the measurement and interpretation of electron swarm coefficients in various mixtures of tetrahydrofuran (THF, C_4H_8O) and water (H_2O) in the gas phase, using the Pulsed Townsend Technique (PTT) over a wide range of the density-normalized electric field intensity, E/N . This research is of great relevance since it addresses the interaction of low-energy electrons (<20 eV) with THF, a well-established surrogate molecule for 2-deoxyribose. Previous studies have shown that THF is an excellent candidate for gas-phase studies of 2-deoxyribose because of its strong similarity both in cross sections and geometry. Its combination with water molecules, we aim to approach an environment resembling, to some extent, the conditions of the cellular nucleus, where the surrounding medium is the cytoplasm, rich in water content. As a result, effective ionisation coefficients, electron attachment coefficients, and electron drift velocities have been successfully measured over a wide range of E/N and gas pressures for pure THF, H_2O and their mixtures. Another important result was the measurement of the formation and transport of negative ions originating from THF at very low E/N , a region which the electron energy is insufficient to produce positive ions or THF dissociation. Through the measurement of the negative-ion mobility, the formation of negative ion–molecule clusters were inferred because of the clear dependence of the drift velocity/mobility of these ions with gas pressure. We believe that this finding and all the original swarm transport data reported in this thesis will shed more light and foster future work aimed at explaining the very complex strong reactivity of free radicals produced by slow, sub ionising electrons generated by ionising radiation sources.

Agradecimientos

Esta tesis va dirigida con todo mi amor a mis dos motivos para vivir y ser mejor persona; a mi amada esposa **Rebeca Domínguez Reyes (Yoyiis)**, y a la culpable de la sanación, unión y dirección enfocada de mi vida, a bebé **Ollin Xanath Pérez Domínguez**, la hija amada que tanto esperamos, que llegó en el mejor momento para revolucionar para bien nuestra vida. Agradezco de sobremanera a mi amada esposa por ser ese pilar que sostiene este proyecto, por ser la **mujer de la fe inquebrantable** que jamás se ha rendido ni ha dejado de creer en mí. A ti, amada esposa, mi amor, te debo la vida entera.

Agradezco a mi asesor, el **Dr. Jaime de Urquijo Carmona** por el apoyo que me ha brindado, por ser un guía, un mentor y un excelente líder; le agradezco todo lo que me ha enseñado y aportado porque sin usted no estaría terminando esta etapa. Gracias por el apoyo económico desinteresado que en algún momento me dio porque fue pieza fundamental para la continuidad.

Agradezco a mis suegros, los señores **Carlos Domínguez Santoyo** y **Luz Edith Reyes Campos**, a mis cuñadas **Ing. Karla Domínguez Reyes** y **Michael M. Domínguez Reyes** por el apoyo que nos han brindado a Yoyiis y a mí, por acogerme en su familia y por siempre estar ahí como un apoyo incondicional. Gracias totales por recibirme en su hogar y darme oportunidad de ser parte de su familia.

Agradezco a mi hermano el **Ing. Luis Itzhak Pérez Romero** por todo el apoyo brindado durante el proceso. Agradezco a mis papás **Socorro Romero Cervantes** y al **M. en C. José Luis Pérez López** por el gran apoyo y amor que me han dado desde la cuna. Gracias por enseñarme el valor del trabajo, por enseñarme a no rendirme y a retribuir algo a la humanidad. Agradezco a las **generaciones pasadas** que dieron todo por mejorar la calidad de vida de su descendencia.

A mis tíos y primos que, a pesar de la lejanía territorial, siempre están presentes en mis pensamientos.

Agradezco también a quienes han formado parte de mis comités evaluadores porque sin sus comentarios y puntos de vista, este trabajo no hubiera quedado tan sólido como lo es ahora. Especialmente, al **Dr. Olmo González Magaña** por ser un buen mentor y enseñarme distintas cosas útiles dentro del campo de investigación.

Institucionalmente agradezco a la **Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM)** por ser mi alma mater y al **Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM** por permitirme utilizar sus instalaciones y aportar el material necesario para llevar a cabo esta investigación.

Este trabajo fue apoyado por el proyecto **PAPIIT IN112223**. Agradezco al **M. en I. Guillermo Gerardo Bustos Maya** y a los ingenieros **Armando Bustos Gómez** y **Héctor Hugo Hinojosa Galván** por su asistencia técnica a lo largo de esta investigación.

Agradezco a la **Secretaría de Ciencias, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI)** antes **CONAHCyT** por la beca de doctorado que me otorgaron.

Índice

Resumen	v
Abstract	vi
Agradecimientos	vii
Estructura de la tesis	1
1. Introducción	3
1.1 Objetivo	3
1.2 Antecedentes	3
1.3 Estado del arte	5
1.4 Moléculas bajo estudio	8
2 El experimento pulsado de Townsend	10
2.1 Fundamentos	10
2.2 Descripción detallada del experimento	12
2.3 Aspectos técnicos del experimento	14
2.4 Medición y registro de la corriente de desplazamiento	18
3 Resultados	19
3.1 Análisis de los pulsos electrónicos	19
3.2 Incertidumbres experimentales	28
3.3 Velocidad de flujo de arrastre electrónico	28
3.3.1 Modificaciones a las secciones eficaces de THF y H ₂ O	30
3.4 Coeficiente de difusión longitudinal normalizado a la densidad del Gas	35
3.5 Coeficiente de ionización efectiva	36
3.5.1 Coeficiente de ionización efectiva para THF	36
3.5.2 Coeficiente de ionización efectiva para mezclas de THF-H ₂ O	41
3.6 Formación de iones negativos en THF	43
3.6.1 Velocidad de arrastre y movilidad de iones negativos de THF	45
3.6.2 Formación de cúmulos de iones negativos de THF	47
4 Conclusiones	52
4.1 Conclusiones	52
4.2 Sugerencias para trabajo futuro	54
Referencias	55
Apéndice	61

Estructura de la tesis

El aporte más importante de este trabajo es la medición de coeficientes de enjambre para el sistema binario de moléculas compuesto por tetrahidrofurano (THF, C_4H_8O) y agua (H_2O) como un paso precursor en el entendimiento de la interacción de electrones de baja energía con la 2-desoxirribosa y las moléculas del medio circundante a esta. Además, se logró estudiar la formación y el transporte de iones negativos de THF. Un logro importante subsecuente de esta investigación fue proponer una nueva sección de transferencia de momento para THF que simule la velocidad de arrastre electrónico y la modificación ligera de la sección de H_2O . Esto abre la posibilidad a futuro de mejorar las secciones ya publicadas y, en caso de ser necesario, proponer nuevas para reproducir todos los parámetros experimentales. La publicación arbitrada correspondiente a este artículo se puede encontrar como L G Pérez-Romero and J de Urquijo 2025 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **58** 435206.

Otro punto importante y novedoso de esta investigación surge al comparar los nuevos datos experimentales para el coeficiente de ionización efectiva con las secciones de disociación publicadas en la literatura. Al comparar la energía media de los electrones calculada y los datos del coeficiente de ionización efectiva, se demuestra que las secciones de captura electrónica disociativa tienen que modificarse al no presentar una clara zona de disociación a valores muy por debajo del E/N crítico. Esto se abordará a profundidad durante el texto.

La estructura de la tesis se compone de 4 capítulos que se describen a continuación.

En el capítulo 1 se presentan los objetivos y las justificaciones del uso de moléculas modelo como una alternativa a macromoléculas presentes en entornos celulares reales. Además, se da un panorama amplio del estado del arte en la línea de investigación de electrones de baja energía con THF. Se introduce también la importancia de la interacción de THF con el agua como un modelo de un entorno celular real.

En el capítulo 2 se describe al detalle el experimento pulsado de Townsend, explicando con suficiencia los detalles técnicos y experimentales. Por último, se

explica cómo se miden y registran los pulsos generados por la corriente de desplazamiento resultante del movimiento de las cargas en el seno del gas.

En el capítulo 3 se presentan los resultados de esta investigación. Primeramente, se presentan las incertidumbres asociadas a la medición de los coeficientes de enjambre. A continuación, se reportan la velocidad de arrastre electrónica para varias mezclas de THF-H₂O, el coeficiente de difusión longitudinal normalizado a la densidad del Gas, ND_L , y la energía característica media, ϵ . Se presenta también el coeficiente de ionización efectiva, tanto para THF puro como sus mezclas con H₂O. Se discute el coeficiente de captura a bajo E/N y se calcula la tasa de ionización de diversas mezclas de THF-H₂O en función de E/N . Se hace un análisis comparativo contra secciones de captura electrónica disociativa publicadas antes de este trabajo y se demuestra que deben modificarse al no contar los electrones con la energía suficiente para lograr estos procesos en THF por debajo del E/N crítico. Después de cubrir la parte electrónica, se reporta la velocidad de arrastre de los iones negativos, con una explicación acerca de la formación de cúmulos de iones negativos de THF en su gas paterno.

Finalmente, en el capítulo 4 se discuten los resultados obtenidos de esta investigación, abordando con detalle y aportando una explicación plausible acerca de todos los coeficientes de enjambre y la formación de cúmulos iónico-moleculares de THF, debido a su gran importancia y originalidad. Basados en los alcances de este estudio, se proponen acciones a futuro y se concluye la tesis con comentarios pertinentes.

Capítulo 1

Introducción

1.1 Objetivo

El objetivo principal de esta tesis es reportar los avances en las mediciones de los coeficientes de enjambre en tetrahidrofurano (THF, C_4H_8O), agua (H_2O) y algunas de sus mezclas, así como la formación y arrastre de cúmulos de iones negativos de THF, utilizando la Técnica Pulsada de Townsend (TPT). Ambos siendo un conjunto de datos novedoso y nunca reportado en la literatura.

Uno de los objetivos particulares de esta investigación es demostrar la existencia de la formación de cúmulos iónico-moleculares en THF, basando el cálculo en teorías bien demostradas y publicadas anteriormente para otras moléculas, las cuales se abordarán en secciones posteriores [1–3].

Otro objetivo particular es el enfoque que tendrá esta investigación al publicarse los coeficientes de enjambre en mezclas de THF- H_2O , los que serán útiles a futuro para validar y/o derivar las secciones eficaces de colisión conocidas, o mejorarlas al contar con coeficientes simulados más confiables y apegados a la medición experimental. Las mezclas de estas dos moléculas serán muy útiles como preámbulo para llevar el estudio de transporte electrónico a la fase condensada, lo cual, a su vez, conducirá mejorar el conocimiento de una célula orgánica.

Cabe destacar que gran parte de los coeficientes de ionización y transporte que se presentan son el resultado de una amplia investigación experimental, hasta donde sabemos, son completamente originales.

1.2 Antecedentes

El estudio de electrones de baja energía (LEE, por, Low Energy Electrons) ha adquirido gran importancia recientemente al hacerlos interactuar con moléculas orgánicas para explicar fenómenos relacionados con procesos que ocurren por debajo de 30 eV. En concreto, se pretende explicar la formación y transporte de

iones negativos y radicales en este régimen energético debido a su reactividad e importancia dentro del entorno biológico.

A partir del descubrimiento de la radiación ionizante con materia orgánica en forma de tejido biológico liberaba una gran cantidad de LEE ($\sim 10^4$ electrones por MeV depositado), con energías promedio entre 20 y 30 eV en su camino a través de las células, se ha hecho un gran esfuerzo a nivel mundial para comprender los procesos de termalización de éstos [4]. El motivo principal para estudiar los LEE se debe a haberse demostrado que la incidencia directa de la radiación ionizante no es la causa de los efectos genotóxicos en la célula, sino los LEE, que en sus procesos de termalización causan severos daños dentro del entorno celular, promoviendo principalmente la formación de iones negativos y radicales, los que son altamente reactivos con el material genético [5–8].

Estos iones negativos y los radicales causan severos efectos genotóxicos y catastróficos en la célula, lo que se traduce a nivel molecular como daños en el ADN, provocándose un rompimiento simple ($LEE < 5eV$) o doble ($LEE > 5eV$) de la cadena principal de esta macromolécula o de otras moléculas básicas para su correcto funcionamiento [9]. A nivel celular se observa la muerte de la célula, una disfunción, o bien, mutaciones. Si estas mutaciones no son corregidas por los diversos mecanismos de respuesta que tiene el organismo, se convierten en tumores cancerígenos [5–7,10].

El seno celular se compone principalmente de citoplasma, un líquido gelatinoso constituido en su mayoría por agua. El citoplasma rodea varios organelos de la célula, incluidos el núcleo y el nucleolo. En estos dos últimos se mantiene el material genético [11]. Por consiguiente, los LEE interactúan con muchas moléculas de agua en su camino hacia la termalización y, en algún punto, con el material genético, estableciéndose entonces una interacción con ambas moléculas, lo cual genera mucho interés debido a que no se conoce, a nivel molecular, qué procesos ocurren en esta interacción.

En la siguiente sección se explicarán los avances conseguidos a la fecha para estudiar este problema.

1.3 Estado del arte

A pesar de que se han realizado estudios de fragmentación de biomoléculas por impacto electrónico, no se han podido llegar a estudiar a profundidad las interacciones a energías tan bajas como las que presentan los LEE debido a la complejidad de algunas biomoléculas, o bien por el bajo nivel de energía de los electrones requerido experimentalmente [6,7,10,12,13]. Esto abre un canal de investigación para estudiar las interacciones de electrones con energías medias, por debajo de 30 eV, con moléculas orgánicas que se encuentran en el seno celular.

Desafortunadamente, el nivel de estudio de la interacción de los LEE con una célula es bastante complejo, por lo que se tienen que implementar moléculas modelo sustitutas, más pequeñas y menos complejas que una célula, o bien biomoléculas más complejas, tales como el ADN, para estudiar la interacción.

Se han hecho propuestas acerca de cómo podría simularse el transporte de electrones en un medio condensado acuoso, pero aún no hay estudios formales acerca de esto [14]. Aún falta estudiar, en la fase gaseosa, la interacción entre los LEE y algunas moléculas modelo como precursores, antes de dar el paso siguiente a la materia condensada.

Dentro de las moléculas modelo que se han estudiado para simular la 2-desoxirribosa, un azúcar que une los grupos fosfato en la cadena principal del ácido desoxirribonucleico (ADN), el tetrahidrofurano (THF, C_4H_8O) ha sobresalido como una molécula de referencia debido a su gran parecido tanto en las secciones eficaces de colisión como en su geometría. En la siguiente sección se abordarán al detalle las motivaciones principales para hacer uso del THF y la inclusión del agua (H_2O) como precursores de la interacción de los LEE con un medio acuoso.

Actualmente hay una alternativa para estudiar la interacción de electrones de baja energía con algunas moléculas orgánicas y, en particular, con las previamente referidas. Esto se consigue utilizando la Técnica Pulsada de Townsend (TPT) [15]. Este método permite realizar mediciones a bajas energías electrónicas, desde térmicas (26 meV) hasta 100eV sin transformar, por calentamiento, la molécula bajo estudio, debido a que se hace a temperatura ambiente ($\sim 25^\circ C$), y sin generar

necesariamente la disociación molecular. Este último punto es importante porque los métodos de haces son tan energéticos que producen captura electrónica disociativa (DEA, por Dissociative Electron Attachment), rompiendo la molécula en varios fragmentos, haciéndose imposible la detección de iones negativos no disociados de la molécula paterna y/o sus derivados (cúmulos iónicos negativos).

La TPT permite explorar un amplio intervalo de energías, yendo desde energías menores a 1 eV, pasando por el umbral energético de ionización de las moléculas, y hasta cientos de eV.

En la tabla 1 se desglosan los trabajos concernientes a esta investigación como parte del desarrollo histórico del estudio del THF, dando cuenta del estado del arte del tema en orden cronológico. El contenido de este trabajo es novedoso ya que ocupa el último peldaño en el estado del arte, siendo esta una contribución de frontera que aumenta el conocimiento en el campo de los coeficientes de enjambre medidos en moléculas de interés biológico como lo son las descritas en esta tesis.

TABLA 1				
Compendio de referencias del estado del arte de la investigación de coeficientes de enjambre y secciones eficaces de colisión para THF.				
Autor	Año	Tipo de investigación	Aportación	Ref.
A M Huels	1998	Experimental	Disociación resonante por LEE en bases de ADN.	[6]
D Antic	1999	Experimental	Producción de H ⁻ mediante DEA a partir de THF interactuando con LEE, con energías de 5-20 eV.	[13]
S Breton	2004	Experimental	Producción de aldehído a partir de la fragmentación por impacto de LEE con THF sólido en un intervalo de energías incidentes de 1-18 eV.	[16]

P Sulzer	2006	Experimental	DEA en THF mediante experimento de haces con espectroscopía de masas para detectar aniones.	[17]
K Aflatooni	2006	Experimental	Secciones eficaces de bases nitrogenadas de ADN comparadas con THF como sustituto de la desoxirribosa.	[18]
B Ibanescu	2008	Experimental	Comparación de la fragmentación por DEA entre éteres lineales y THF.	[19]
M Dampc	2009	Experimental	Obtención de la energía del umbral de ionización de la molécula de THF.	[20]
M Dampc	2011	Experimental	Fragmentación de THF por impacto electrónico desde el umbral de ionización hasta 150 eV.	[21]
N Garland	2013	Teórico	Cálculo de coeficientes de enjambre a partir de SECs de THF.	[22]
R White	2014	Teórico	Cálculo de coeficientes de enjambre a partir de SECS de THF-H ₂ O.	[23]
R Janeckova	2014	Experimental	Medición de la SECs de CEA de 4-13 eV de energía de los electrones.	[24]
H Duque	2015	Ambos	Medición y cálculo de SECs vibracionales inducidas por impacto electrónico sobre THF.	[25]
T Do	2015	Experimental	Medición de SECs diferenciales de impacto electrónico sobre THF para energías de 15-50 eV.	[26]
M Casey	2017	Ambos	Primera medición de coeficientes de enjambre para THF y comparación con simulaciones a partir de SECs.	[27]
R White	2018	Teórico	Adecuación de la ecuación de transporte de Boltzmann para pasar de la fase gaseosa a líquida.	[14]

W Wolff	2019	Ambos	Estudio de la fragmentación de THF mediante colisión electrónica con energías de 12 a 2000 eV.	[28]
J de Urquijo	2019	Ambos	Medición y cálculo de coeficientes de enjambre de mezclas de THF-Ar y THF-N ₂ .	[29]
P W Stokes	2020	Teórico	Cálculo de un conjunto de secciones autoconsistentes con los datos publicados en [29].	[30]
SEC: Sección Eficaz de Colisión; CED: Captura Electrónica Disociativa				

1.4 Moléculas bajo estudio

La necesidad de medir los coeficientes de enjambre en moléculas menos complejas que aquellas que se encuentran en el seno celular, específicamente en el núcleo, ha llevado a estudiar la interacción de los LEE con moléculas prototipo, las cuales son más simples y sirven como referencia para correlacionar los fenómenos con aquellas que se encuentran en el medio biológico. Entonces, se inicia la investigación con el THF (molécula sustituta) y el agua (presente en el seno celular) como primera aproximación al modelado de un entorno acuoso biológico real.

El tetrahidrofurano (THF, C₄H₈O) es una molécula heterocíclica compuesta por cuatro átomos de carbono, ocho de hidrógeno y uno de oxígeno. Se describe a la molécula del THF como un disolvente que aparece en los fluidos biológicos. Es un líquido incoloro y de baja viscosidad, a la vez que es uno de los éteres más polares. Se usa para hacer hidroborationes, que son medios para sintetizar alcoholes primarios a partir de alquenos; en general, se emplea ampliamente en diversos procesos de síntesis orgánica y de distintas industrias como la de polímeros o la de alimentos. Físicamente, el THF es menos denso que el agua y es miscible en ésta a 20°C

Desde que se descubrió que el THF es un excelente candidato de estudio, debido a su parecido estructural y también en las secciones eficaces de colisión

electrónica con la 2-desoxirribosa (Figura 1), se ha emprendido una rama de investigación que permitirá conocer los efectos de interacción entre esta molécula y los LEE.

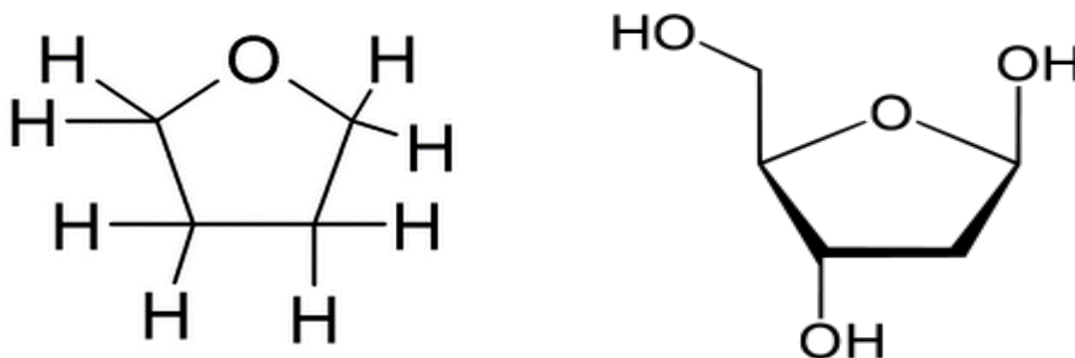


Figura 1. Comparación gráfica de la estructura química y la geometría de la molécula de THF (izquierda) y la molécula de la 2-desoxirribosa (derecha).

Como lo mencionan Aflatooni et al., el tamaño de las secciones eficaces de colisión de la desoxirribosa es, en promedio, 3-4 veces mayor que aquellas de las bases nitrogenadas del ADN (guanina, citosina, timina y adenina) [18] siendo el blanco principal de los LEEs ; razón por la cual es necesario estudiar la interacción de LEEs de manera cuantitativa.

Hay trabajos recientes que sugieren que los estudios hechos en la fase gaseosa pueden adaptarse a la fase de materia condensada blanda (viscoelásticos, disoluciones, materia viva, medios granulares, etc.) mediante modificaciones apropiadas, y usando funciones de correlación [14,22,23,25,26,29–31].

A pesar de que previamente se han reportado coeficientes de enjambre electrónico para el THF, aún no se ha logrado contar con un conjunto de secciones eficaces de colisión (SECs) completamente auto consistente con los datos experimentales [30]. Las SECs se relacionan con la probabilidad de que un electrón colisione con cierto átomo o molécula, y se comporta de una manera singular para cada partícula en cuestión. Por otra parte, los coeficientes de enjambre son parámetros provenientes del comportamiento colectivo de los electrones que interactúan con moléculas en la fase gaseosa. Sin embargo, a pesar de que no se mide lo mismo en un experimento de enjambres que en uno de haces, las SECs y los coeficientes de enjambre, están relacionados en forma biunívoca, permitiendo caracterizar el comportamiento de los LEE en ciertos medios. Por esta razón, al medir coeficientes de enjambre, es posible validar y/o derivar las secciones eficaces

de colisión.

Como se ha mencionado anteriormente, el agua juega un papel determinante en las interacciones de los LEE con moléculas que se encuentran inmersas en el material genético y es la molécula más abundante en los organismos vivos [11]. Además, es una molécula polar con una gran capacidad de formar iones negativos fácilmente, tales como H^- y OH^- , los cuales son bastante reactivos con moléculas circundantes a través de procesos resonantes. Ya que el agua se encuentra alrededor de cada organelo de la célula, incluyendo el núcleo, es de gran interés conocer el comportamiento de los iones negativos provenientes del agua con el material genético [9,21].

Dicho lo anterior, consideramos de alta relevancia el estudio de la interacción de los LEEs con el THF y el agua [32–39].

Capítulo 2

El experimento pulsado de Townsend

2.1 Fundamentos

El experimento pulsado de Townsend permite medir los coeficientes de ionización y transporte dentro del régimen multicolisional entre los electrones y los átomos o moléculas en la fase gaseosa. A estos coeficientes se les llama coeficientes de enjambre

Un enjambre se define como un conjunto de partículas cargadas (iones y/o electrones) que se desplazan a través de cierta región en el espacio, interactuando con partículas de un gas neutro cuyo número excede en gran medida a las partículas cargadas (generalmente, una partícula cargada en 10^9 o más neutros). Dichas partículas cargadas obedecen a la influencia de los campos eléctricos y magnéticos. En el caso presente, únicamente un campo eléctrico homogéneo afecta el movimiento de las cargas.

Las condiciones en las cuales está inmerso el conjunto de partículas cargadas es tal que durante su paso hacia sus electrodos respectivos, éstas tienen un gran número de colisiones por unidad de tiempo y longitud, lo cual permite establecer promedios estadísticos para evaluar cantidades intrínsecas del gas tales como el

camino libre medio, el tiempo libre medio, la velocidad de arrastre, el coeficiente de difusión, los coeficientes de ionización y captura electrónica (en el caso de que el gas tenga carácter electronegativo), y las tasas de reacción ion-molécula, entre otros coeficientes más.

Si se observa a uno de los electrones iniciales y se hace el seguimiento de éste en su recorrido hacia el ánodo bajo de influencia de un campo eléctrico uniforme, se observará que ocurre una serie de colisiones que pueden ser elásticas en las que se conserva el momento total al deflectarse las partículas, o bien inelásticas, tales como la captura electrónica o la ionización, según sea el nivel energético de las colisiones. Al liberar alrededor de 10^6 electrones del cátodo, se cuenta con un conjunto de procesos que produce un enjambre electrónico.

El experimento pulsado de Townsend permite medir la corriente de desplazamiento generada por portadores de carga susceptibles a la influencia de un campo eléctrico uniforme creado en la brecha de un condensador de placas planas, metálicas y paralelas. Cuando la reactividad ion-molécula, el desprendimiento electrónico de iones negativos o la ionización por metaestables (efecto Penning) están ausentes o bien son muy pequeños en comparación con la ionización y la captura electrónica, la corriente de desplazamiento total cuenta con dos componentes distinguibles, a saber, una componente de corta duración (típicamente entre 100-1000 ns) debida al movimiento electrónico, y una componente iónica la que, con una duración 100 o más veces mayor, se distingue de la avalancha electrónica.

El experimento se inicia al producir fotoelectrones en el cátodo mediante un láser pulsado de radiación ultravioleta (UV) cuya duración se encuentra entre 3 y 6 ns. La energía de los fotones del haz de UV debe superar la función de trabajo del material del cátodo. Los fotoelectrones iniciales son acelerados por la acción del campo eléctrico homogéneo existente entre ánodo y cátodo y dependiendo de la energía que éstos adquieran, pueden ionizar, o bien interactuar con las partículas del gas elásticamente y/o pueden ser capturados por un neutro del gas si éste es electronegativo. Para cuantificar estas interacciones, se deben definir parámetros que las describan los eventos de interacción por unidad de longitud; para los procesos de ionización se define el coeficiente de ionización (α) y para la captura electrónica se emplea (η), ambos en unidades de cm^{-1} . Como no es posible seguir

la pista de cada evento, se debe tomar en cuenta el conjunto completo de eventos de ionización y de captura, la diferencia entre ambas debe ser normalizada a la densidad del gas (N), a esta normalización se le conoce como coeficiente de ionización efectiva $\alpha_{eff}^* = (\alpha - \eta)/N$. Esto da pista de qué eventos ocurren mayoritariamente de acuerdo con la relación entre el campo eléctrico y la densidad, E/N , cuya unidad aceptada es el Townsend, $1Td = 1 \times 10^{-17} \text{ V cm}^2$. Entonces, las partículas cargadas, según su carga eléctrica, viajan a su electrodo correspondiente, generándose una corriente de desplazamiento medible con un amplificador de transimpedancia que transforma corriente a su entrada en un voltaje a su terminal de salida. El voltaje de salida se registra con un osciloscopio digital y se almacena en el disco duro de la computadora para su análisis posterior. De la componente electrónica se calcula el coeficiente de ionización efectiva, la velocidad de arrastre y el coeficiente de difusión electrónicos. El análisis de la componente iónica, dependiendo de los fenómenos ocurrientes entre los iones y las moléculas, 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), donde $1 \text{ Td} = 10^{-17} \text{ V cm}^2$.

2.2 Descripción detallada del experimento

El experimento de pulsado de Townsend consta principalmente de tres grandes partes: el sistema de electrodos, la fuente de luz pulsada, el sistema de medición y registro de la señal de la corriente de desplazamiento, y el sistema de bombeo e inyección del gas. En la figura 2 se muestra un esquema completo del experimento.

En términos generales, el experimento se conforma por un recinto metálico de acero inoxidable no magnético, hermético, y que contiene un par de electrodos planos, paralelos y metálicos, cuyo ánodo (A) se conecta a una fuente de alto voltaje. El experimento requiere que haya limpieza dentro del recinto, lo cual se logra con ayuda de un sistema de vacío que evacúa los gases contenidos en éste, formado por una bomba turbomolecular Leybold-Hereaus con capacidad de evacuación de 350 L/min apoyada por una bomba mecánica rotatoria.

El sistema de medición de vacío se compone de dos sensores. En el régimen de alta presión (615 Torr a 2 mTorr) se utiliza un sensor Pirani que tiene un intervalo de medición de 0.001 a 760 Torr. Para la región de alto vacío se utiliza un transductor de ionización (Ion Gauge) que opera en el intervalo de presiones de $10^{-3} - 10^{-7}$ Torr. Para garantizar que haya una medición precisa de la presión de trabajo, durante el experimento, se utilizó un transductor capacitivo de presión absoluta con un margen de error de 0.2% (Agilent con un intervalo de medición de 0-100 Torr). La presión de vacío requerida para el experimento debe ser lo más cercana a 10^{-7} Torr para garantizar que haya la menor cantidad de impurezas en la mezcla a medir. La brecha interelectródica se fijó en 3 cm de distancia con ayuda de un micrómetro de alta precisión con una incertidumbre de 0.005%. La temperatura dentro de la cámara se midió con un termopar "J", con una precisión de 0.05% a 25°C. Se utilizó una fuente de alto voltaje altamente estable y filtrada, con un intervalo de 0-5 kV, ajustable a una precisión del 0.05%, y un voltaje de rizo de menos de 50 mV. Por lo tanto, el ajuste de E/N tiene una incertidumbre general de 0.3%. Para calibrar el aparato experimental se hicieron mediciones de los coeficientes de enjambre en N_2 , por ser una molécula bien estudiada y con coeficientes de enjambre muy confiables. Este procedimiento devino en la medición de α con una incertidumbre de $\pm 1\%$.

Una vez que se llega a la presión base de vacío, se aísla el recinto con una llave de mariposa que se encuentra a la salida del contenedor para su posterior llenado del gas a medir. Con el apoyo de una computadora se controla el experimento y se leen los parámetros experimentales con un programa desarrollado en LabView© (propiedad de la UNAM) que controla la fuente de alimentación de alto voltaje (aplicado al ánodo), y mide continuamente la presión y la temperatura del gas al interior de la cámara. El usuario debe elegir el valor de E/N a medir para que el programa calcule el voltaje a aplicar al ánodo. El cátodo está conectado a un amplificador de transimpedancia (convertidor corriente-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 para su posterior análisis.

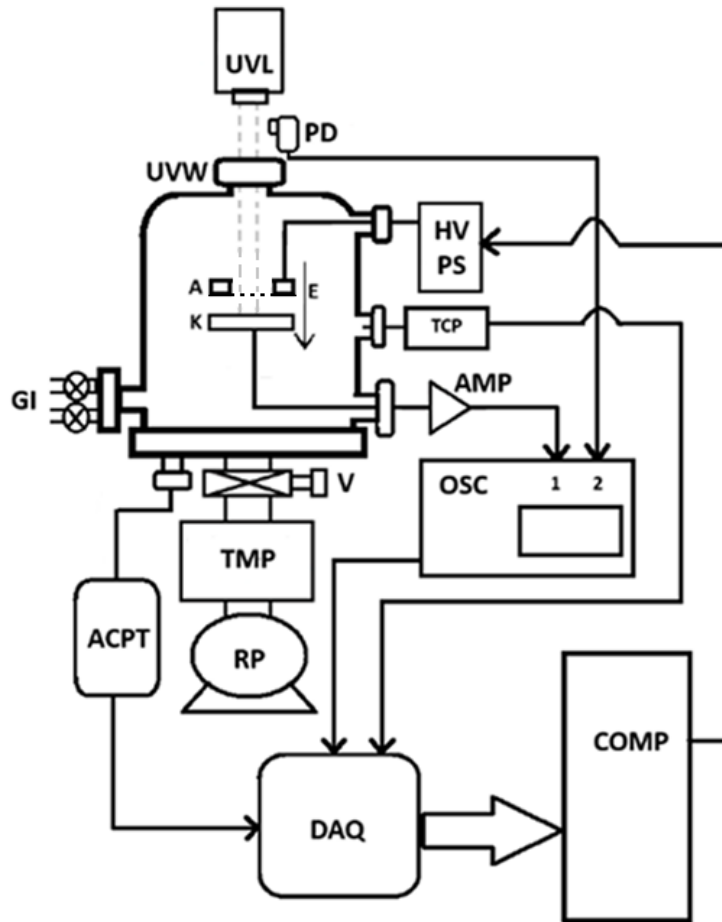


Figura 2. Diagrama representativo del montaje experimental de la cámara pulsada de Townsend. Lista de acrónimos: GI, entrada de gas; ACPT, transductor capacitivo de presión absoluta; TMP, bomba turbomolecular; RP, bomba rotatoria; DAQ, sistema de adquisición de datos; A, ánodo; K, cátodo; PD, fotodiodo; HVPS, fuente de alto voltaje; TCP, termopar; AMP, amplificador de transimpedancia; OSC, osciloscopio; COMP, computadora; V, válvula; PD, fotodiodo; UVW, ventana ultravioleta y UVL, láser ultravioleta.

2.3 Aspectos técnicos del experimento

➤ 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 3.0 cm, ajustada con un micrómetro de precisión Mitutoyo, con una incertidumbre de 0.025 mm. La salida del amplificador se conecta a un osciloscopio digital con un ancho de banda de 100 MHz.

➤ 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 radiación ultravioleta de 355 nm en pulsos cuya duración es de 3-6 ns en la amplitud del ancho total a la mitad de su altura máxima de señal (FWHM, por Full width at half the maximum) a una frecuencia de 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 sea altamente homogéneo.

➤ **Medición y registro de la corriente de desplazamiento**

Para medir las componentes electrónicas, se utiliza un osciloscopio digital con un ancho de banda de 100 MHz y un tiempo de elevación de 3 ns, en tanto que el amplificador tiene una transimpedancia de 5×10^5 V/A y tiempo de elevación de 9.0 ns, con un ancho de banda de 40 MHz para la medición de las componentes electrónicas, y otro con una ganancia de 400 kHz (10^7 V/A) y un tiempo de elevación de 900 μ s para las componentes iónicas. Estas últimas son de menor amplitud (hasta 100 veces menores, y tiempos de tránsito entre 100 μ s y 5 ms. Por ello, los efectos del tiempo de elevación se deben principalmente al amplificador. Puesto que las corrientes de desplazamiento de electrones e iones se encuentran en el intervalo de μ A para los primeros y de pA-nA para los segundos, respectivamente, las amplitudes de estos últimos 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. 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 señal de un fotodiodo cercano a la ventana de cuarzo por la cual ingresa el haz de láser a la cámara de ionización. El fotodiodo recibe una pequeña fracción de la luz dispersa, y se ubica entre la salida del láser y la entrada a la cámara (Figura 3). Después de haberse obtenido un pulso con una buena relación señal/ruido, éste se almacena en la memoria de la computadora de control.

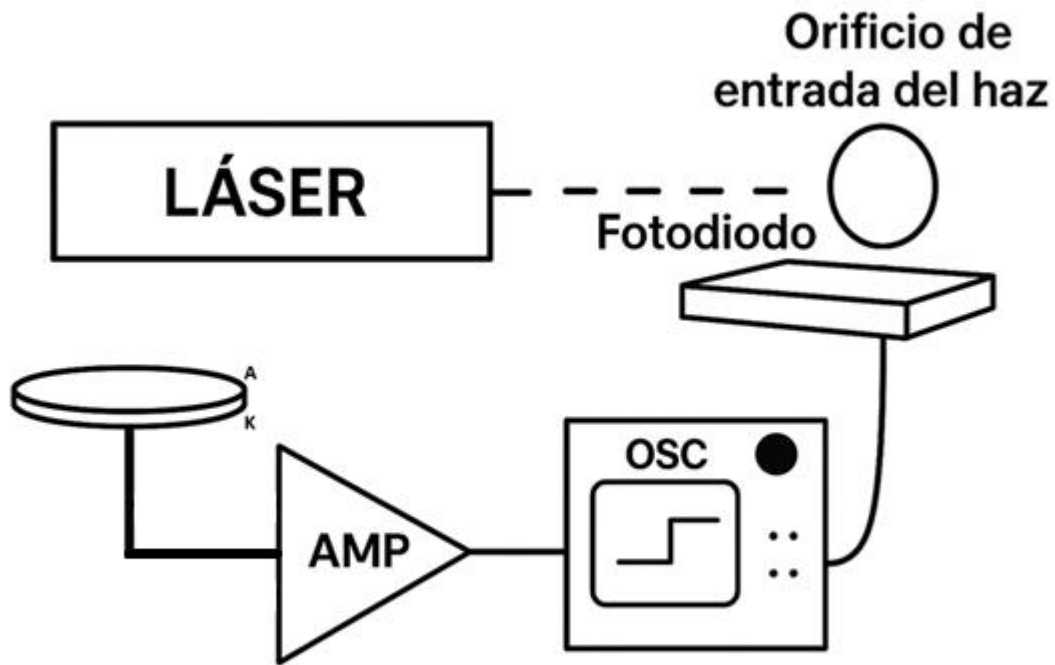


Figura 3. Esquema representativo del circuito amplificador de señales y del osciloscopio encargado de la visualización de los pulsos para su posterior registro. Además del montaje del fotodiodo para la función del disparo. El fotodiodo es empleado para medir el inicio de la corriente generada por el desplazamiento de los fotoelectrones y se toma registro de la señal a la misma frecuencia de disparo del láser para realizar el promediado de señal con el objetivo de obtener una señal más nítida con una relación S/N mayor a 10. AMP es el amplificador de transimpedancia encargado de transformar la corriente en voltaje para su registro en el osciloscopio (OSC). A y K corresponden a ánodo y cátodo, respectivamente.

➤ **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 máximo de 3.0 mV, 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 con una relación de

atenuación de 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 hace con una bomba rotatoria, marca Leybold, de 5.4 m³/hr, que lleva a la cámara de vacío con una presión mínima de 1×10^{-3} Torr. La segunda etapa es una bomba turbomolecular modelo NT150/360 de la marca Leybold-Heraeus con capacidad de evacuación de 350 l/min, con la que se llega a una presión base de 1 μ Torr.
- ❖ **Sistema de medición de la presión de trabajo.** La medición de la presión a lo largo del experimento se divide en tres etapas:
 - La etapa de bajo vacío se mide con un transductor del tipo Pirani, marca Kurt J. Lesker, modelo KJL275196, capaz de medir presiones desde atmosférica a $\sim 1 \times 10^{-3}$ Torr
 - El paso siguiente es utilizar un transductor de ionización (Ion Gauge) marca Kurt J. Lesker, modelo KJL392 de alto vacío, con un intervalo de medición entre $\sim 1 \times 10^{-3}$ y 1×10^{-8} Torr.
 - Al inyectar el gas a estudiar, y durante la medición, la presión de éste se monitorea con un transductor de presión absoluta de la marca Agilent. Este medidor tiene una precisión de 0.2% de lectura, cuya salida se conecta a un multímetro digital de 6 dígitos, de la marca Agilent, modelo 34401A. La relación de conversión es 100 mV/Torr.
- ❖ **Amplificador de transimpedancia:** Para la medición de las componentes electrónicas y iónicas se utilizó un amplificador de transimpedancia marca Femto, con ancho de banda de 40 MHz y 400 kHz, y una transimpedancia de 10^5 y 10^7 V/A, respectivamente. Estos amplificadores son lo suficientemente sensibles para amplificar señales en el intervalo de décimas de nA, La disposición física de la Cámara Pulsada de Townsend utilizada se muestra en la figura 4

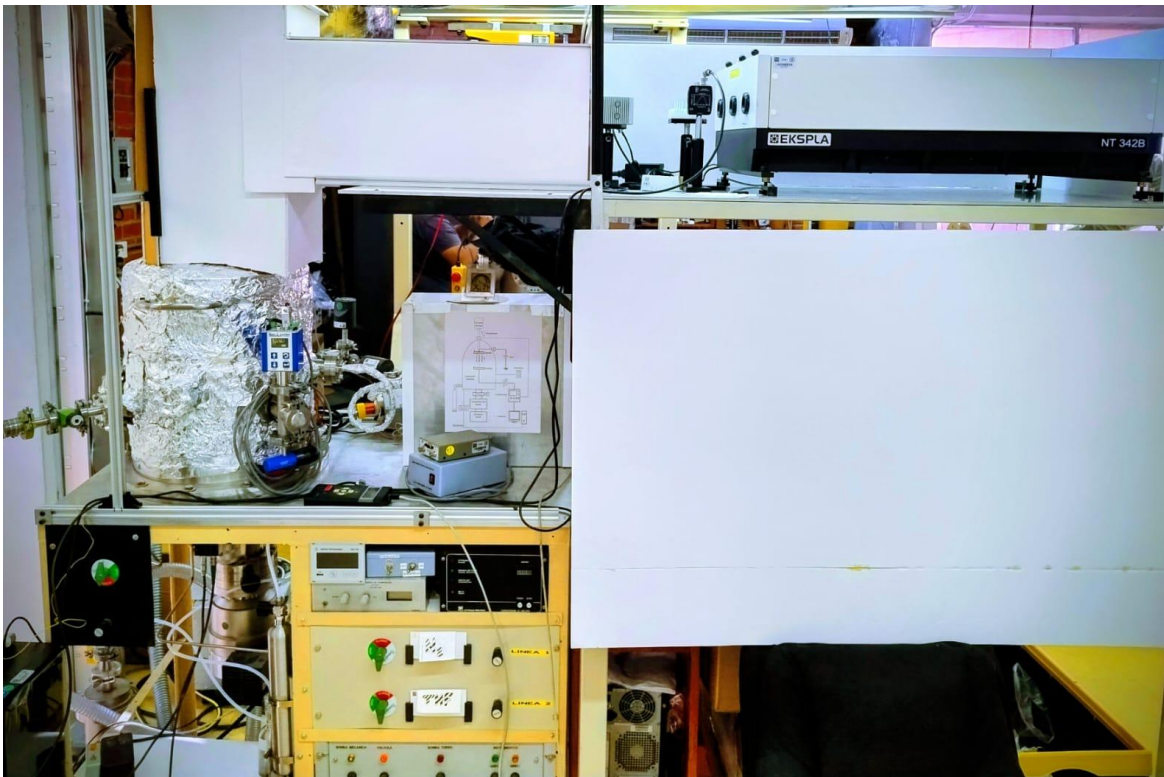


Figura 4. La cámara pulsada de Townsend del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, Campus Morelos.

2.4 Medición y registro de la corriente de desplazamiento

La bitácora de mediciones es un archivo de texto creado por el programa de control que contiene todos los parámetros del experimento, a saber, número de disparo, valor de E/N , presión del gas, temperatura, distancia interelectródica, 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 se guardan 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.

Los pulsos obtenidos se analizan en dos grandes grupos, a saber, los pulsos electrónicos y los iónicos. En esta tesis se reportan coeficientes de enjambre provenientes de pulsos electrónicos y de iones negativos de THF.

Capítulo 3

Resultados

3.1 Análisis de los pulsos electrónicos

Los pulsos electrónicos medidos fueron analizados utilizando la expresión para la corriente medible en el circuito externo de un experimento de Townsend pulsado, bajo la suposición de que el pulso inicial de fotoelectrones es similar a un pulso delta de Dirac. Dicha ecuación fue derivada por Brambring [40]

$$I_e(t) = \frac{n_0 q_0 W_F}{2d} e^{\alpha_{eff} W_F t} \left\{ \left[1 - \Phi \left(\frac{(W_F + \alpha_{eff} D_L)t - d}{\sqrt{4D_L t}} \right) \right] + e^{\frac{(W_F + \alpha_{eff} D_L)d}{D_L}} \left[\Phi \left(\frac{(W_F + \alpha_{eff} D_L)t + d}{\sqrt{4D_L t}} \right) - 1 \right] \right\} \quad (1)$$

donde n_0 es el número de fotoelectrones, q_0 es la carga del electrón, d es la distancia entre electrodos, W_F y D_L son la velocidad de deriva de flujo y el coeficiente de difusión longitudinal, respectivamente, $\alpha_{eff} = \alpha - \eta$ es el coeficiente de ionización efectiva, α y η son los coeficientes de ionización y de captura electrónica respectivamente. $\Phi(x)$ es la función error con argumento x .

Para determinar los coeficientes efectivos de ionización y transporte a partir de la ecuación (1), se obtienen primero valores aproximados de v_e y α_e a partir de la forma del pulso de avalancha, denotados como v_e^* y α_e^* , ignorando provisionalmente la difusión longitudinal (es decir, tomando $D_L \rightarrow 0$). Bajo esta suposición, los términos de función error en la ecuación (1) se reducen a -1 y $+1$, y la ecuación se simplifica a:

$$I_e(t) = \frac{n_0 q_0}{d} W_F^* e^{\alpha_{eff}^* W_F^* t} \quad (2)$$

la cual es una expresión bien conocida [15].

Como se muestra en la figura 5, el tiempo de tránsito electrónico aproximado, T_e^* , se mide entre las semiamplitudes de los flancos ascendente y descendente del pulso. Por lo tanto, la velocidad de flujo de deriva electrónica se puede calcular como $W_F^* = d/T_e^*$, siendo d un valor constante que equivale a 3.0 cm y que corresponde a la distancia de la brecha interelectrónica. Un valor inicial de α_{eff}^* puede obtenerse

realizando un análisis de regresión lineal sobre la región tipo exponencial del pulso. Al tomar el logaritmo de la ecuación (2), se obtiene:

$$\ln I_e(t) = \ln \left(\frac{n_0 q_0}{d} v_e^* \right) + \alpha_{eff}^* W_F^* t \quad (3)$$

que corresponde a una línea recta con pendiente $\alpha_{eff}^* W_F^*$. Conociendo W_F^* , se puede derivar directamente α_{eff}^* . Estos dos parámetros iniciales se utilizan como valores de entrada para ajustar los pulsos de acuerdo con la ecuación. (1). Generalmente, solo se requieren pequeños ajustes de α_{eff} y W_F , mientras que D_L se varía hasta obtener el mejor ajuste.

La figura 5 muestra tres curvas de los pulsos transitorios electrónicos medidos en Xe puro (100%) a $E/N = 50$ Td y $d = 3$ cm, para tres presiones distintas. Esto se hace para ilustrar la dependencia paramétrica cuando hay ionización y/o captura electrónica; para el transitorio medido a 25.4 Torr se ajustó la curva naranja de acuerdo con la ecuación de Brambring para probar el buen ajuste que hace esta ecuación con los transitorios electrónicos medidos, previa sustracción de la componente iónica. Los puntos de semialtura de los flancos descendentes, indicados cerca de 1377 ns, coinciden dentro de $\pm 2-5\%$, lo que conduce a incertidumbres típicas de $\pm 1-2\%$ tras el ajuste final. Después del tránsito electrónico, la corriente restante se debe a los iones lentos que derivan a través del espacio interelectrónico. Cuando la contribución iónica es pequeña en comparación con la corriente total, puede restarse fácilmente para obtener únicamente la componente electrónica. En la figura 6 también se muestra el ajuste exitoso de la ecuación (1) a los pulsos experimentales y, además, se muestra una simulación del transitorio electrónico a partir de un programa de simulación de avalanchas (SIMAV) [41,42], el cual se describirá en mayor detalle líneas abajo. La corriente total medida es la suma de las componentes electrónica e iónica. Para extraer los coeficientes del enjambre electrónico mediante el ajuste de la componente electrónica a la ecuación (1), la corriente iónica se resta primero (línea naranja en la figura 5) y luego se añade nuevamente después del análisis.

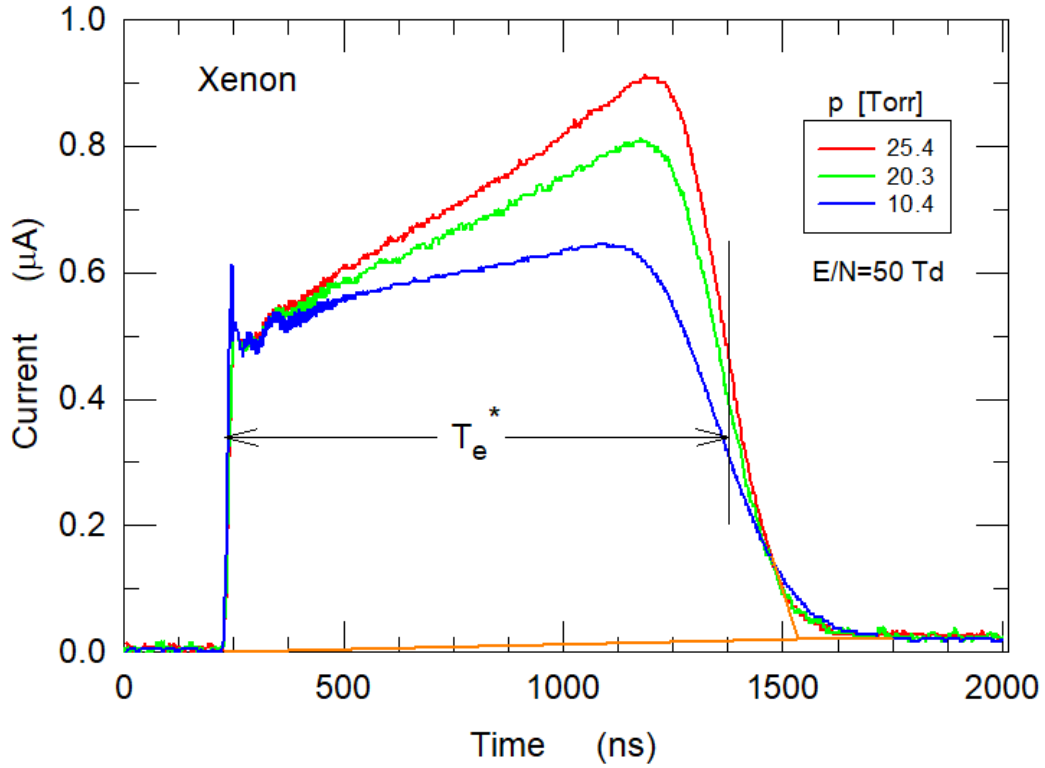


Figura 5. Avalanchas de electrones medidas en Xe al 100%, con $E/N = 50\text{Td}$, a tres presiones diferentes, junto con la curva de ajuste calculada (curva naranja) para 25.4 Torr de acuerdo con la ecuación (1). Nótese que la curva ajustada tiene un entrecruce alrededor de 1500 ns; este es el inicio de la corriente de exceso producida por los iones formados. Se indica el tiempo de tránsito electrónico aproximado, T_e^* .

Puede observarse en la figura 5 que la cola de difusión se alarga a medida que la presión del gas disminuye de 25.4 Torr a 10.4 Torr. Esto puede explicarse reescribiendo la ecuación (1) en términos de los coeficientes normalizados por densidad α_{eff}/N , ND_L y la densidad del gas N :

$$I_e(t) = \frac{n_0 q_0 W_F}{2d} \exp\left(N \frac{\alpha_{eff}}{N} W_F t\right) \left\{ \left[1 - \Phi\left(\frac{\sqrt{N} \left(W_F + \frac{\alpha_{eff}}{N} ND_L\right) t - d}{\sqrt{ND_L t}}\right) \right] + \exp\left(N \frac{W_F + \frac{\alpha_{eff}}{N} ND_L}{ND_L} d\right) \left[\Phi\left(\frac{\sqrt{N} \left(W_F + \frac{\alpha_{eff}}{N} ND_L\right) t + d}{\sqrt{ND_L t}}\right) - 1 \right] \right\} \quad (4)$$

Escrita de esta manera, la ecuación (4) permite aclarar varias condiciones experimentales importantes:

1. Los términos entre corchetes—particularmente el primero—tienen una

influencia decisiva en el desarrollo temporal de $I_e(t)$. Para un E/N fijo, el argumento de las funciones error aumenta aproximadamente con $N^{1/2}$. Por lo tanto, al aumentar la densidad (o presión) del gas, el flanco descendente del pulso de la avalancha decae más rápidamente.

2. El primer término exponencial muestra una fuerte dependencia con la densidad del gas. El término $k_{\text{eff}} = (\alpha_{\text{eff}}/N)W_F$ representa la tasa efectiva de ionización, la cual es independiente de E/N (véase Sección 3.4.1, ecuación 11). Por ello, debe tenerse cuidado en mantener la densidad del gas lo más baja posible para evitar distorsiones del campo debidas a densidades de carga local elevadas.
3. Cuando $t \rightarrow 0$, el argumento de la primera función error tiende a $-\infty$, por lo que $\Phi(-\infty) = -1$, y el término entre corchetes adquiere un valor de 2. Por otra parte, el argumento de la segunda función error tiende a $+\infty$, de modo que $\Phi(+\infty) = 1$, y su término entre corchetes se anula. De esta manera, el valor inicial de la corriente en $t = 0$ es:

$$I_e(0) = \frac{n_0 q_0 W_F}{d} \quad (5)$$

y, por tanto, el número de fotoelectrones puede estimarse como:

$$n_0 = \frac{d}{q_0 W_F} I_e(0) \quad (6)$$

En los experimentos reales, el pulso de fotoelectrones tiene una duración finita de unos pocos nanosegundos (3-6 ns). Por consiguiente, es recomendable trabajar a las presiones más bajas posibles, de modo que el tiempo de caída de la cola de difusión sea mucho mayor que los tiempos de subida del amplificador y del osciloscopio.

El análisis de los pulsos medidos experimentalmente se hizo con la ayuda de un programa de LabView ® desarrollado en el laboratorio, en el cual se usa la ecuación de Brambring [40]. Siendo que los electrones son menos masivos que los iones (1840 veces en el caso del ion más ligero, H^+) se mueven más rápido, entonces, la corriente electrónica tiene una duración mucho menor que la iónica, es decir, $T_e \ll T_n$. En general, T_e dura entre 50 ns y 1 μs , en tanto que la componente

iónica dura entre 10 μ s y decenas de ms para una brecha de 3 cm.

El programa analiza la señal electrónica a partir de los registros del osciloscopio, diferenciados por presión y E/N. La forma del pulso varía según estos factores y las propiedades del gas. En ciertas condiciones, el pulso muestra un ascenso suave, una meseta y una caída, reflejando arrastre, difusión y ionización. Al final, del tránsito electrónico, queda un remanente debido a la señal iónica.

La ecuación de Brambring se resuelve para el caso en que el pulso de radiación UV es una delta de Dirac. En realidad, el pulso proveniente del láser tiene una duración entre 3 y 6 ns. Ahora bien, si el tiempo de tránsito de los electrones es mucho mayor que la duración de este pulso, el análisis de éste conduce a resultados muy confiables. En la figura 6 se muestra el ajuste a un pulso experimental con la ecuación de Brambring (ver ecuación 4), y otro calculado con el Simulador de Avalanchas SIMAV IV, que sí toma en cuenta la duración finita del pulso de UV.

En esta tesis se realizó esta simulación con el propósito de verificar con otro sistema de simulación que los parámetros de enjambre medidos sean correctos, ya que sólo teníamos el conjunto de secciones eficaces publicadas por Stokes et al., en [30] pero no se obtenían valores similares a los valores experimentales calculados con ayuda de Bolsig+ [43], siendo que éstos son confiables después de realizar la calibración. El programa SIMAV arrojó simulaciones de los pulsos transitorios bastante cercanas a los medidos experimentalmente, con un coeficiente de correlación $r^2=0.99$, reforzando la confiabilidad en la ecuación de Brambring.

El programa SIMAV es un simulador de avalanchas electrónicas que interactúan con un medio gaseoso. Este programa calcula la corriente total y parcial de la descarga generada por los distintos portadores de carga, utilizando el método de diferencias finitas a primer orden, siendo capaz de resolver hasta que, además de a ionización y la captura, incluyen el desprendimiento electrónico colisional, la difusión, la ionización Penning y las reacciones ion-molécula [41,44].

El esquema de reacción usado en SIMAV fue el de la captura electrónica en THF, es decir $\text{THF} + e^- \rightarrow \text{THF}^-$.

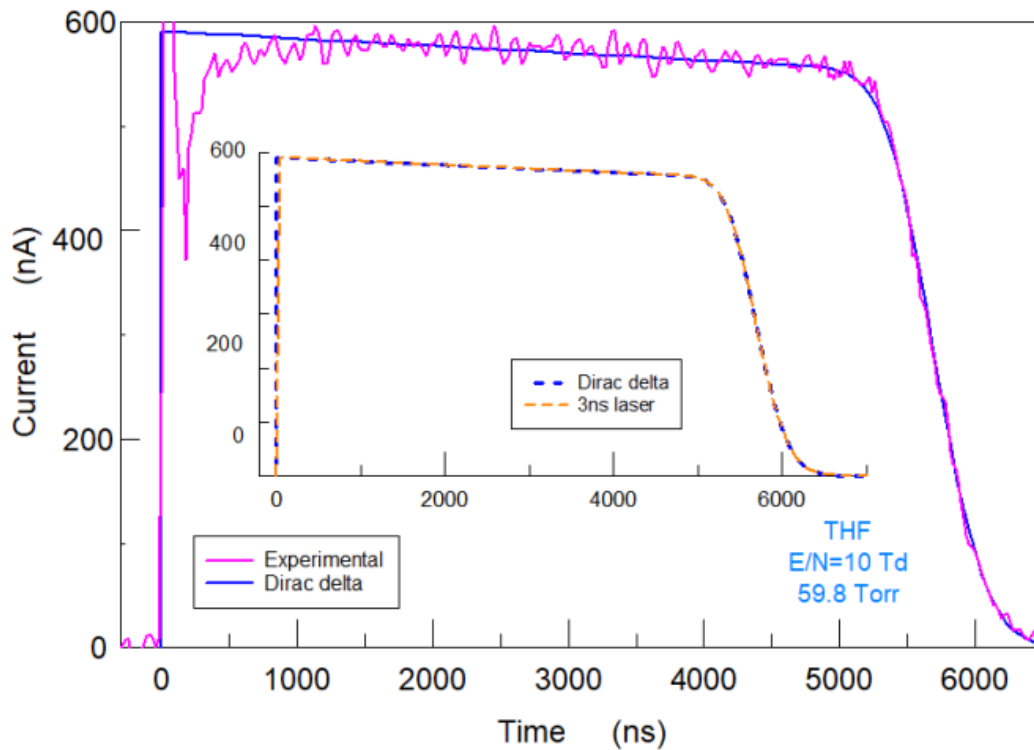


Figura 6. Comparación entre un pulso medido (Experimental) y uno simulado con la ecuación de Brambring suponiendo un pulso delta de Dirac. En el inserto se muestra la comparación entre el pulso simulado con la ecuación de Brambring y uno con SIMAV IV. En ambos casos se trata de THF a un $E/N=10Td$.

Como ya se ha mencionado, la ecuación de Brambring supone un pulso delta de Dirac con un número inicial de fotoelectrones (n_0) liberados del cátodo a $t=0$. En la figura 6 se hace una comparación entre un transitorio electrónico medido experimentalmente y sus respectivos ajustes analíticos usando la ecuación de Brambring y un simulador de avalanchas electrónicas (SIMAV) para demostrar que la aproximación de una delta de Dirac como inicio de los fotoelectrones es bastante cercana a la forma de onda medida experimentalmente y analizada con el programa de cinco puntos (Brambring); esto demuestra que no hay un efecto fuerte en aproximar con una delta de Dirac un pulso láser con una duración de 3-6ns como el que se empleó para realizar este experimento. SIMAV simula el pulso láser inicial con el que se crea la avalancha electrónica con la siguiente ecuación:

$$f_L(t) = n_0 \left(\frac{t}{T_0} \right)^2 \exp \left[- \left(\frac{t}{T_0} \right)^2 \right] \quad (7)$$

donde n_0 es una constante relacionada con el número máximo de fotoelectrones, y T_0 es un tiempo característico asociado con la duración del pulso láser. En la figura 7 se muestra la gráfica de este pulso, donde la amplitud del ancho total a la mitad de su altura (FWHM, Full Width at Half the Maximum, por sus siglas en inglés) se relaciona con T_0 mediante $\text{FWHM} = 1.15 T_0$. Las máximas desviaciones entre el análisis de los pulsos con la ecuación de Brambring y los de SIMAV IV resultó en 1-2% en la meseta y de 2-3% en la cola de difusión. Todos los pulsos tuvieron coeficientes de correlación $r^2 > 0.99$ al comparar los pulsos medidos y simulados (tanto con Brambring como con SIMAV) entre sí.

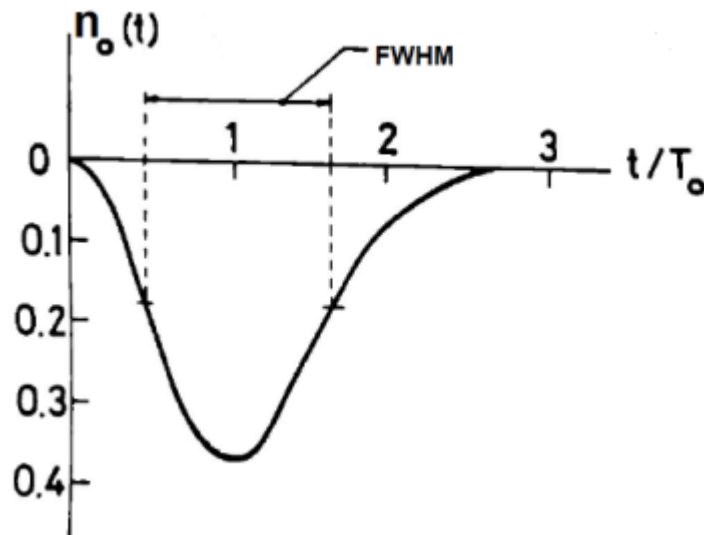


Figura 7. Gráfica representativa de la simulación de un pulso láser ultravioleta (UV). Ejemplifica la anchura de un pulso láser finito, cuya relación de su *FWHM* es distinto para cada láser. Esto implica que el número de fotoelectrones iniciales va en función del tiempo característico de cada pulso láser.

Para poder realizar el análisis con la ecuación de Brambring, es necesario definir tiempos característicos dentro del pulso. Los cuales dan valores iniciales de la velocidad electrónica y del coeficiente de ionización efectiva. Una vez que se obtiene el ajuste inicial, se modifican estos parámetros para obtener el mejor ajuste posible de la curva simulada con la ecuación de Brambring sobre la curva experimental del transitorio electrónico. Estos tiempos son los siguientes (ver figura 8):

- **T_0** : Este tiempo se refiere al tiempo de inicio de la avalancha electrónica. Se ubica en el punto medio entre el inicio del crecimiento de la corriente electrónica y el punto donde el ascenso se convierte en la meseta central.
- **T_{ini} y T_{fin}** : Estos dos tiempos característicos definen el intervalo de la meseta del pulso del cual se derivará el coeficiente efectivo de ionización al usar la ecuación (3) para calcular el valor del producto $\alpha_e v_e$. En la práctica, se ubican estos dos puntos alejados de los ascensos y descensos porque contienen la influencia instrumental.
- **T_e** : Es el tiempo característico de arribo electrónico, que se define al tomar la diferencia entre el tiempo de ascenso inicial (T_0) y el tiempo en que la corriente cesó, ubicado a la mitad del descenso en la parte difusiva (T_-). Este tiempo sirve para calcular la velocidad de arrastre electrónico.
- **T_{exc}** : Este tiempo se refiere al punto en que sólo hay corriente debida al arrastre iónico. En este punto, el tiempo del arrastre electrónico ha culminado completamente, incluyendo la parte difusiva de éste.

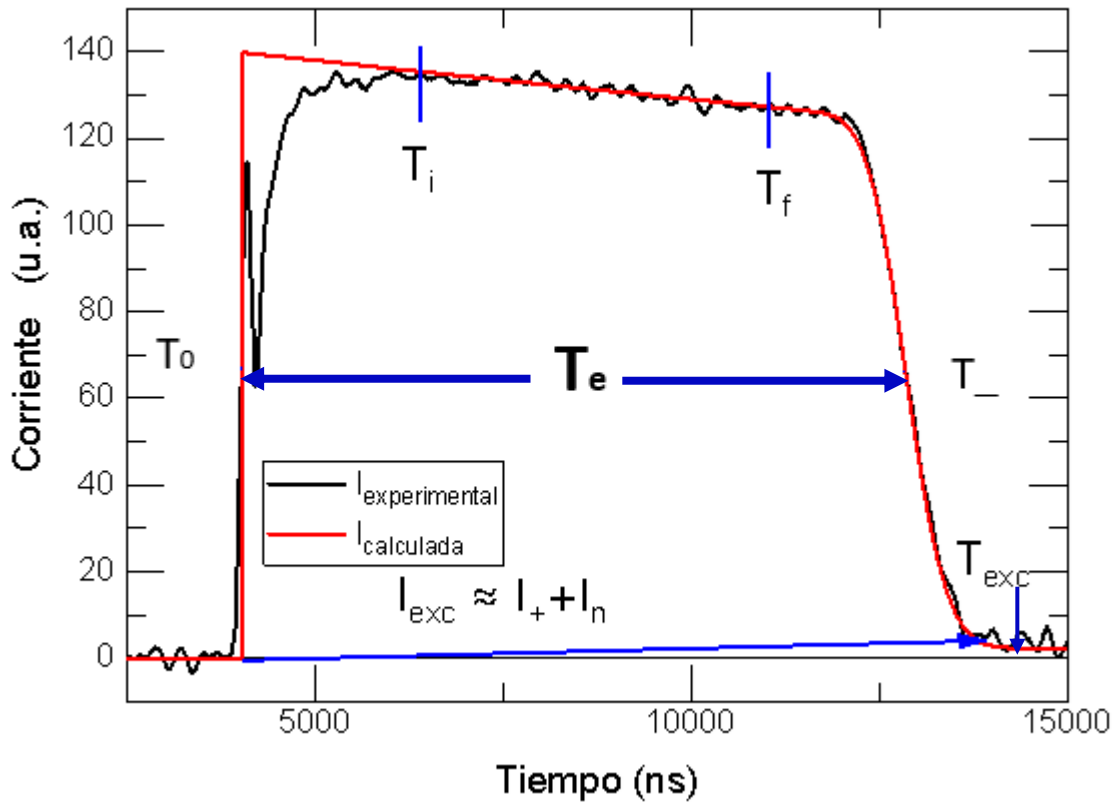


Figura 8. Representación gráfica de los tiempos característicos que toma el programa para realizar el análisis. La corriente calculada se genera al resolver la ecuación de Brambring (ecuación 4) para comparar y llegar al mejor ajuste posible con la experimental tomando en cuenta procesos de difusión. La corriente iónica está marcada al final de la electrónica y se denota como corriente de exceso (I_{exc}). Esta gráfica es un ejemplo de un pulso electrónico medido en THF a $E/N=7Td$ y $p=60$ Torr. Para mayor detalle léase el texto.

Las simulaciones de los parámetros de transporte se hacen con el código Bolsig+ [43] que resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann truncada a segundo término,. El objetivo de las simulaciones fue confirmar la calibración experimental de este trabajo, comparando mediciones de nitrógeno molecular (N_2) con datos calculados de 5 bases distintas de datos provenientes de LxCat, dando como resultado una desviación de $\pm 1\%$. En segundo lugar, se ocupó Bolsig+ para simular los parámetros de transporte para THF, H_2O y algunas de sus mezclas para comparar con los datos medidos experimentalmente, esto se profundizará en la sección 3.3.1.

3.2 Incertidumbres en las mediciones

En la Tabla 2 se presenta un resumen de las incertidumbres asociadas a los coeficientes de enjambre medidos.

Tabla 2 Incertidumbres generales de los coeficientes de enjambre medidos		
	Intervalo de E/N (Td)	Incertidumbre (%)
v_e	1-260	1.5-2.5
ND_L	1-260	8-14
$(\alpha-\eta)/N$	1-3.3 100-260	6-8
	3.6-4.5	10-20
	5-90	31
v_n, K_n	8-14	3-5
β/N	8-14	15-20

3.3 Velocidad de arrastre electrónico (flujo)

En esta sección se presentan los resultados de la velocidad de flujo de arrastre electrónico, W_F , para THF puro en un intervalo más amplio que los datos previamente reportados en [45,46]. Además, se reportan datos de la velocidad de arrastre electrónico para mezclas de THF con agua, siendo estos originales y por primera vez medidos experimentalmente. Anteriormente, se habían hecho una serie de simulaciones de la velocidad de deriva electrónica para algunas mezclas de THF-H₂O con los datos de secciones eficaces disponibles en ese momento, reportadas en [23]. De acuerdo con la discrepancia entre los datos medidos y los simulados reportados por White et al., en 2014 (ver Figura 9), es necesario mejorar las secciones eficaces de colisión para ambas moléculas.

En la Fig. 9 se muestran los valores medidos para la velocidad de flujo de arrastre electrónico para THF, H₂O y sus mezclas.

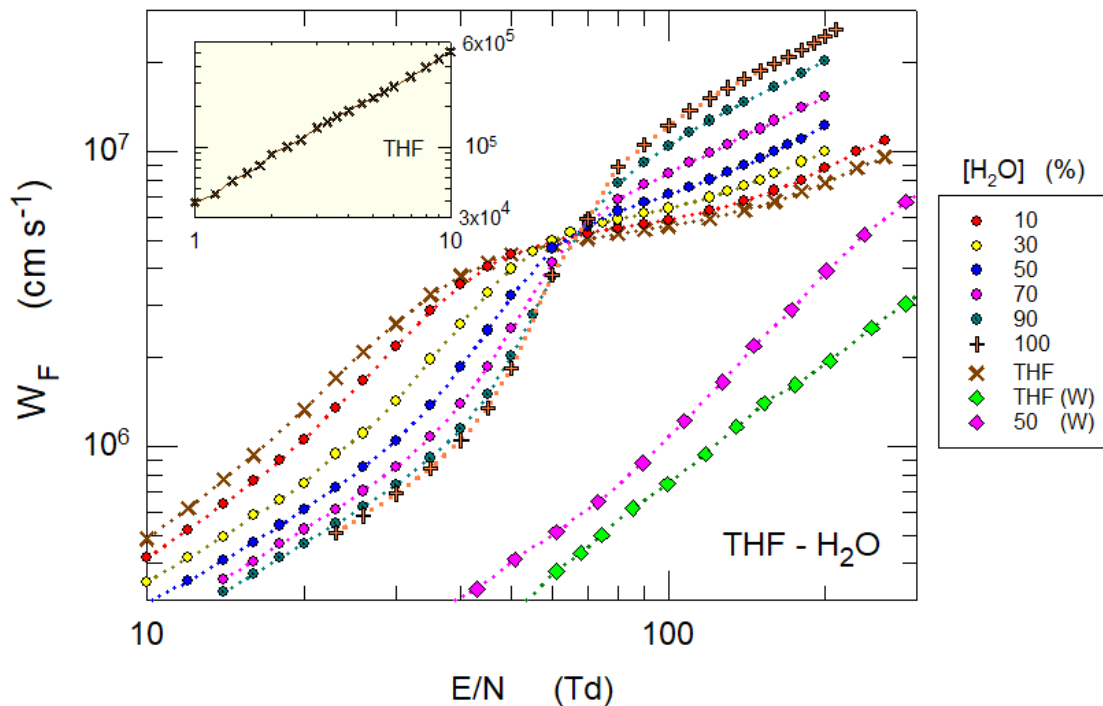


Figura 9. La velocidad de flujo de arrastre electrónico medida para mezclas de THF-H₂O (círculos para las mezclas y cruces para los gases puros), comparadas con las simulaciones de White et al., [23] denotadas como (W) para 50% H₂O (rombos rosas) y THF (rombos verdes). El inserto se refiere a los valores experimentales de THF puro para $1 \leq E/N \leq 10$ Td. Las líneas punteadas son sólo una guía visual.

Lo más notable de la gráfica es el cruce de todas las curvas en un intervalo cercano a $E/N = 65$ Td. Este hecho es relevante porque, hasta donde conocemos, no se ha presentado en otras mezclas binarias. En la gráfica también se muestran los cálculos realizados en 2014 por White et al., [23]. Se comparan con los resultados experimentales donde se observa una fuerte discrepancia entre ambos hasta del 100%. De acuerdo con el procedimiento de calibración, los datos medidos experimentalmente son confiables y, por consiguiente, no podemos compararlos con datos simulados previamente publicados debido a las inconsistencias. Esto es un problema de frontera sostenido por la calibración del experimento ya reportada en la sección experimental. Además, los datos simulados de White et al., no muestran el entrecruce de las curvas que sí se observó en los datos experimentales. Para poder comparar los datos experimentales con simulaciones confiables se tuvieron que modificar las secciones eficaces de ambas moléculas, dichas

modificaciones se abordarán en la siguiente sección.

3.3.1 Modificaciones a las secciones eficaces de THF y H₂O

Se hizo un cálculo con un conjunto de secciones de H₂O publicado en [39] con una modificación ligera en la sección de transferencia de momento, la cual se obtuvo de la base de datos de Morgan en LXCat [47]. Para referencia, todo el conjunto de secciones utilizadas en la simulación de parámetros de agua se muestra en la Tabla 3. Para THF, se tomaron secciones publicadas para mezclas de THF-Ar y THF-N₂ en [29,30] a las que se hicieron modificaciones comparativamente mayores en la sección de transferencia de momento. Para ambas moléculas, se tomaron sin modificaciones todas las demás secciones eficaces de colisión.

Tabla 3		
Secciones eficaces electrónicas para H₂O usadas para el cálculo de W_F		
Sección	Proceso	Referencia
Elástica	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{H}_2\text{O}$	[48]
Excitación	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{H}_2\text{O} (\nu 010)$	[38]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{H}_2\text{O} (\nu 100+001)$	[38]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{H}_2\text{O} (a^3b_1) (7.14 \text{ eV})$	[38]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{H}_2\text{O} (a^1 b_1) (7.49 \text{ eV})$	[38]
Disociación en Neutros	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{OH} + \text{H} (6.6 \text{ eV})$	[49]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{OH} + \text{H} (9.2 \text{ eV})$	[38]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{H}_2 + \text{O}(1S_0) (13.696 \text{ eV})$	[38]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + \text{OH} + \text{H} (18 \text{ eV})$	[38]
Rotacional	147 secciones eficaces	[38]
Ionización	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + e + \text{H}_2\text{O}^+ (13 \text{ eV})$	[50]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + e + \text{H}_2\text{O}^+ (16.9 \text{ eV})$	[50]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + e + \text{OH}^+ (18.116 \text{ eV})$	[50]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + e + \text{O}^+ (19 \text{ eV})$	[50]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow e + e + \text{OH}_2^+ (20.7 \text{ eV})$	[50]
Captura	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^-$	[49]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}^-$	[51]
	$e + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}^-$	[51]

Las secciones de transferencia de momento modificadas se muestran en la Figura 10, y los resultados de la simulación para la velocidad de arrastre electrónico (flujo) se muestran en la figura 11, destacando que la desviación promedio entre los cálculos y los datos experimentales es menor de 6%. Las líneas que tocan a las curvas de transferencia de momento en un solo punto indicando un valor de energía para las distintas concentraciones de THF-H₂O en la figura 10 corresponden a las energías medias calculadas para los valores de 65 Td (antes del entrecruce de los valores de velocidad) y para 150 Td (después del entrecruce). Esto se denotó así en la gráfica de la figura 10 como indicativo de la tendencia en los valores de la energía conforme la concentración de ambos gases variaba; para antes del entrecruce de velocidades (65 Td) la mayor energía media de los electrones corresponde a THF y después del entrecruce corresponde a H₂O. Esto explica la predominancia que tienen las moléculas sobre la distribución de energía de los electrones a distintos valores de E/N. Para mayor detalle de las energías medias electrónicas calculadas se graficaron como función del E/N para todo el intervalo que comprende la presente investigación, esto se muestra en la figura 13.

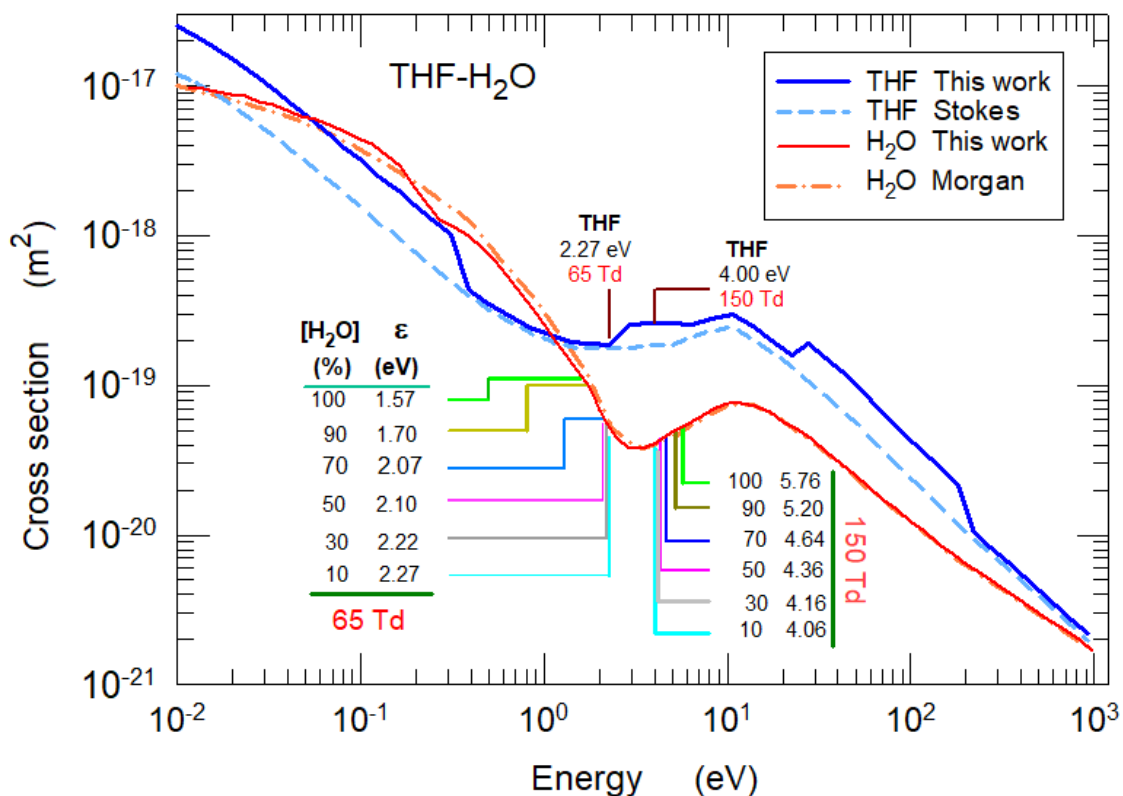


Figura 10. Comparación entre las secciones de transferencia de momento originales y las modificadas en función de la energía de los electrones (en eV).

Las líneas continuas corresponden a las modificaciones realizadas, y las punteadas a las curvas originales tomadas de la base de datos de Morgan [47] para H₂O y de los artículos publicados en [29,30] para THF. Las líneas de colores que tocan las curvas de las secciones se describen en el texto principal, correspondiendo a los cálculos de las energías medias para las mezclas de THF-H₂O para valores de E/N distintos de 65 y 150 Td.

Los resultados de la simulación concuerdan con la tendencia de los datos experimentales, así como el cruce alrededor de E/N=65 Td. Los resultados de las simulaciones se muestran en la figura 11. Para el cálculo de las energías de las mezclas de THF-H₂O se eligieron dos valores de E/N, a saber, el primero cercano a la zona de interés donde todas las curvas de velocidad se cruzan (alrededor de E/N=65 Td), y otro un poco alejado de esta zona (150 Td). Esto se hizo así para observar el cambio en la tendencia de las energías de colisión, encontrándose que las calculadas para E/N=65Td se ubican al lado izquierdo del valle de la curva de H₂O. Además, las energías medias correspondientes a las mezclas están acotadas por la más pequeña correspondiente a H₂O y la más alta a THF. Las curvas calculadas para E/N=150Td ubicadas a la derecha del valle, indican que la tendencia de las energías medias se invierte, de tal manera que el valor más pequeño corresponde ahora a THF y el más alto a H₂O. La inversión en la tendencia es congruente con el cambio en la *t* de las curvas de velocidad, en las que se aprecia que para E/N≤65Td, los valores de THF dominan y, pasado este punto, la tendencia se invierte, siendo la curva de H₂O la que tiene el valor más alto. Este efecto es debido a Conductividad Diferencial Negativa (NDC). En la referencia [52] se estudiaron cinco casos distintos para conseguir un efecto de NDC, en el que se consideran los átomos de Ar, Kr y Xe, con energías en el valle entre 0.3 y 1.95 eV. En el caso del H₂O difiere de las primeras porque el mínimo está en 3.2 eV, es decir, entre 1.5 y 10 veces más.

En la figura 11 se presentan cálculos hechos con Bolsig+ para compararlos con los aquí reportados, resultando en un acuerdo general muy satisfactorio. La desviación media entre los cálculos y las mediciones es menor al 6%.

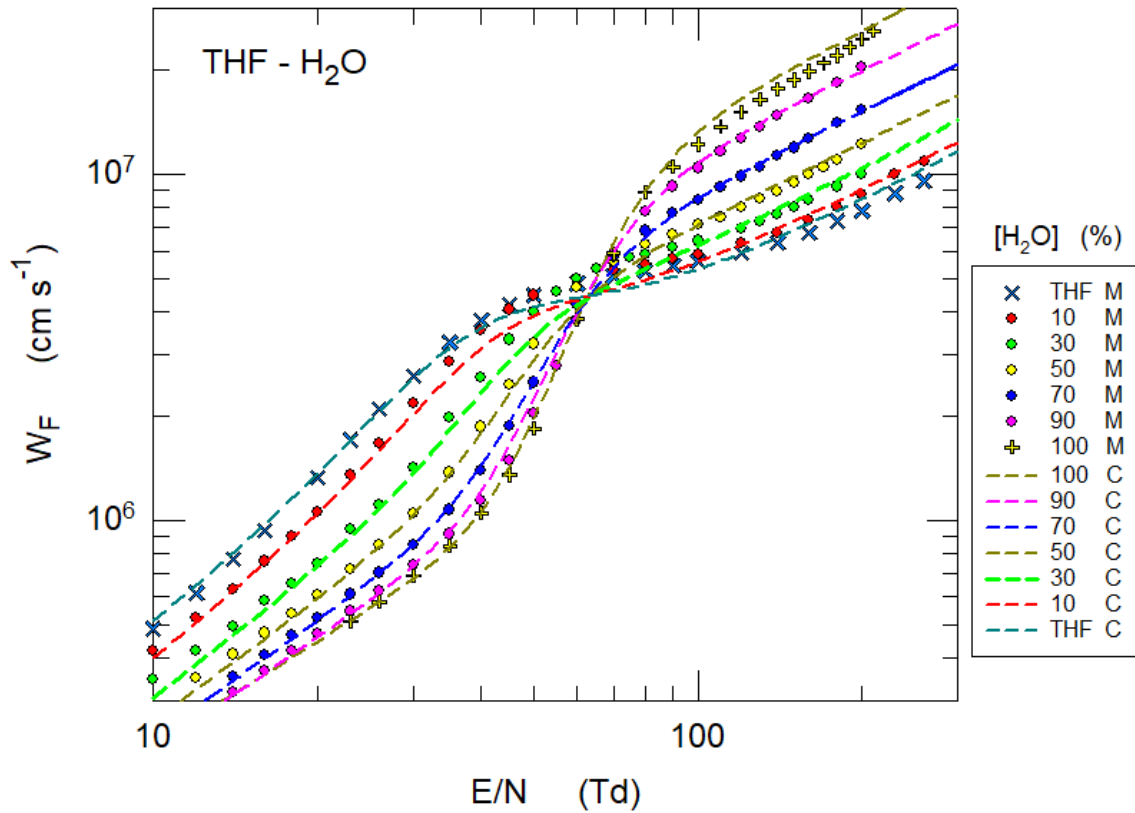


Figura 11. Valores medidos de la velocidad de flujo electrónico, W_F , en función de E/N y su comparación con los valores obtenidos con Bolsig+ [43]. Las líneas punteadas corresponden a las simulaciones, mientras que los círculos y cruces corresponden a los valores experimentales.

La velocidad de flujo, W_F , es la velocidad del centro de masa del enjambre electrónico. Cuando ocurren procesos inelásticos, tales como ionización y/o captura electrónica, se toma en cuenta la velocidad de bulto, W_B , la cual se define como [53]:

$$W_B = W_F + \alpha_{eff} D_{L,F} \quad (8)$$

donde α_{eff} es el coeficiente de ionización efectiva y $D_{L,F}$ es el coeficiente de difusión longitudinal. Cuando el gas bajo estudio es electropositivo, como es el caso de los gases nobles o el nitrógeno, entonces $\eta = 0$ y $W_B \geq W_F$. Cuando $\alpha = 0$, se cumple que $W_B = W_F$; y cuando el gas es electronegativo, $\alpha_{eff}/N < 0$, por lo tanto $W_B \leq W_F$.

Cuando $\alpha_{eff} > 0$, los electrones adicionales producidos por ionización provocan un desplazamiento de la velocidad de deriva en la dirección del campo, ya que la región de alta energía de la función de distribución de electrones se ve más poblada por estos electrones adicionales. Por otro lado, cuando $\alpha_{eff} < 0$, la región de baja energía de la función de distribución electrónica se ve parcialmente des poblada, puesto que los electrones perdidos se adhieren a las moléculas neutras, formando iones negativos.

En las figuras 12 y 13 se muestran los valores de la diferencia porcentual entre la velocidad electrónica de flujo W_F y la de bulto W_B y la gráfica de los valores calculados de la energía media del enjambre electrónico, respectivamente. En ambas figuras se reportan datos para las mezclas de THF-H₂O y para los gases puros.

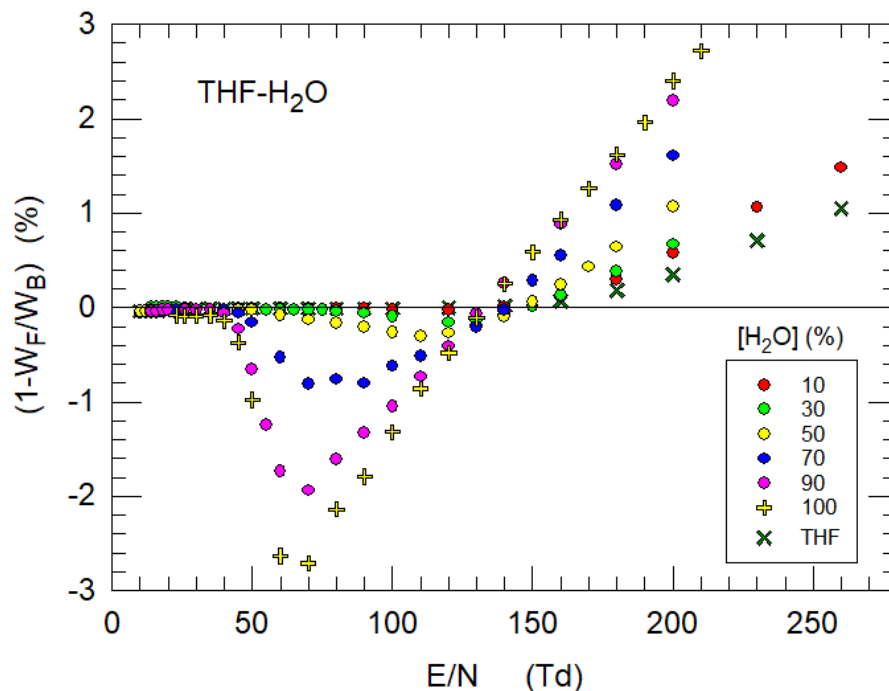


Figura 12. Diferencia porcentual entre las velocidades de flujo W_F y bulto W_B en THF, H₂O y sus mezclas.

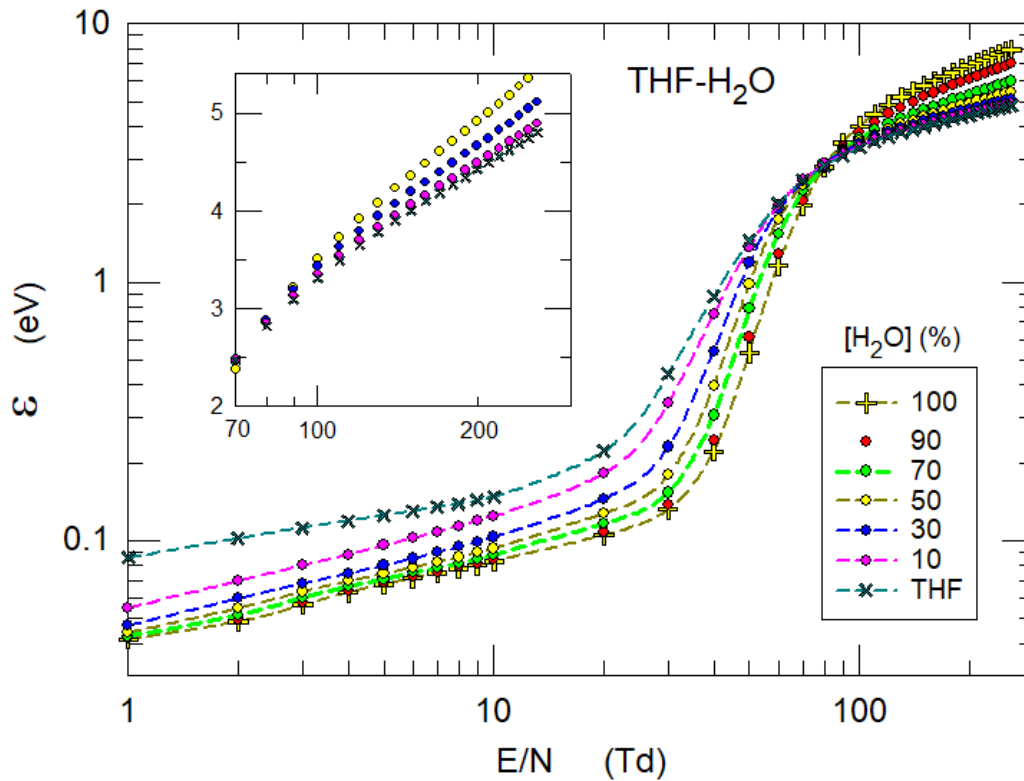


Figura 13. La energía media de los electrones, ε , para THF, H₂O y sus mezclas. Para mayor claridad, las curvas para $E/N > 70 \text{ Td}$ y concentraciones entre 10-70% se muestran en el inserto.

3.4 Coeficiente de difusión longitudinal normalizado a la densidad del Gas

Los resultados de la medición de este coeficiente se muestran en la figura 14. En la gráfica se puede observar que el THF domina la tendencia de la curva, para concentraciones mayores a 30%. Después de este umbral, el agua es la molécula dominante. Dentro de las curvas que contienen THF se observa un máximo local que se va recorriendo a mayores valores de E/N y ND_L a medida que la concentración de agua aumenta en la mezcla, hasta llegar a ser la curva de H₂O en la que ya no se observa dicho máximo. Los datos simulados para ND_L publicados en [23] se muestran para compararlos con los medidos experimentalmente para THF y la mezcla de 50%.

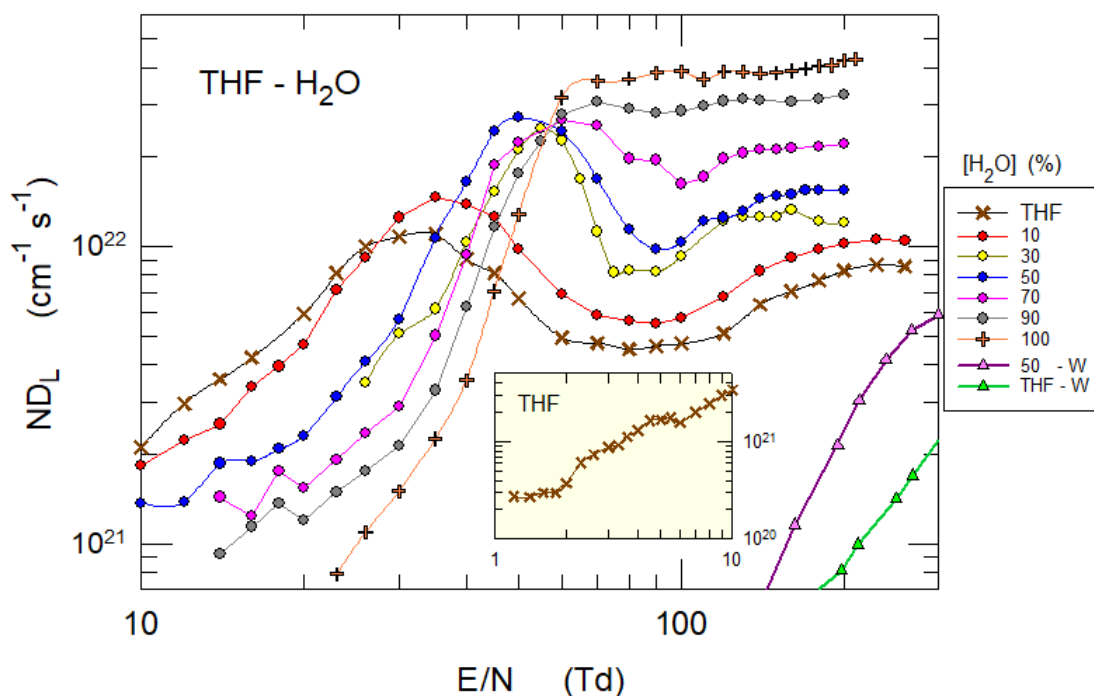


Figura 14. El coeficiente de difusión longitudinal normalizado a la densidad del gas, ND_L , para THF, H_2O y sus mezclas, en función de E/N . Se incluyen los datos simulados publicados en [23], los cuales se distinguen con “W”. En el inserto se muestran los valores de ND_L para THF en el intervalo $1 \leq E/N \leq 10$ Td

3.5 Coeficiente de ionización efectiva

El coeficiente de ionización efectiva es un parámetro que permite cuantificar el número de procesos de ionización y/o captura por impacto electrónico por unidad de longitud en la dirección del campo eléctrico y que, al tratarse de colisiones binarias, el parámetro en cuestión depende de N . Esta sección presenta los resultados en dos partes con el propósito de profundizar en los fenómenos físicos observados. Cabe resaltar que los datos que generan mayor interés son aquellos a bajo E/N debido a que son un indicativo de la formación de iones negativos, ya que se encuentra debajo del umbral de ionización. Estos iones son de gran interés en el entorno enfocado a la biología.

3.5.1 Coeficiente de ionización efectiva de THF

Se ha medido el coeficiente de ionización efectiva en un amplio intervalo, tanto de E/N como de presiones, cubriendo hasta 5 órdenes de magnitud, tal como se muestra en la figura 15. Los valores presentados de este parámetro para THF son

producto de una nueva medición más confiable que la presentada previamente en [29,30]. Los detalles se presentan en el artículo de Pérez-Romero et al., [54]. Además, se amplió el intervalo de medición en E/N a bajos valores con el propósito de medir el coeficiente de ionización efectiva debajo del valor límite de E/N (~ 130 Td), en el que $(\alpha - \eta)/N = 0$. Esta zona no ha sido estudiada previamente debido a la pequeñez de las señales medidas, aunque, en este trabajo se pudo superar dicha dificultad.

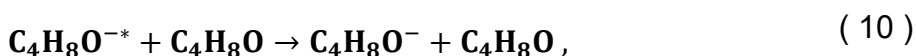
Se llevó a cabo un estudio detallado de la región de bajo E/N (1-90 Td), al variar la presión entre 10 y 90 Torr. Se identificó una tendencia general de los datos de captura electrónica, más no la dependencia con la presión. Esta carencia de resolución se debe a que las mediciones se hicieron cerca del límite inferior de detección del equipo utilizado ($\eta/N \sim 10^{-22} \text{cm}^2$).

A diferencia de las mezclas con H₂O para el THF puro, no se observa una zona de disociación bien definida, sino una transición casi directa de la zona de captura a la de ionización a partir de E/N = 90 Td. Por otra parte, hay dos experimentos previos con los que se midió la fragmentación de THF a partir de la captura electrónica disociativa (DEA, por Dissociative Electron Attachment). El primero se debe a Aflatooni et al., [18], quienes midieron una sección total de DEA y encontraron dos picos a 6.6 eV y 8.7 eV, los cuales también fueron medidos y reportados posteriormente por Janečková et al., [24] con secciones eficaces de 1.6×10^{-20} y $2.3 \times 10^{-20} \text{cm}^2$, respectivamente. De las ocho especies más abundantes detectadas en el experimento de Janečková et al., las dos más abundantes fueron H⁻ y C₃H₅⁻. Considerando la pequeñez de estos dos picos—especialmente el segundo a 8.7 eV— y, por otra parte, que el umbral de ionización del THF es 9.7 eV [20], puede entonces explicarse la ausencia de una región de captura electrónica disociativa bien definida. En el experimento de Janečková et al., el intervalo de energías cubierto fue de 54 eV, enfatizando que no se detectaron señales iónicas por debajo de 5 eV. Este hecho apoya la hipótesis de que la DEA es muy pequeña para ser detectada. Lo anterior puede apreciarse en la Fig. 15, en la que se ve prácticamente una transición abrupta entre el final de la curva de captura y el principio de la ionización.

Al descartarse la DEA a valores de $E/N < 70$ Td, la única posibilidad para que se formen iones negativos de THF puede ser un proceso resonante, tal como el observado por Chanin et al., [50] al estudiar la formación de O_2^- en O_2 a presiones menores de 25 Torr. Este proceso fue confirmado después por Grünberg [55], a presiones de hasta 800 Torr, y usando un aparato pulsado de Townsend. En estos trabajos se reporta la dependencia paramétrica del coeficiente de captura electrónica con respecto a la presión. Años después, Taniguchi et al., [56,57] derivaron una sección eficaz de captura mediante un proceso de tres cuerpos, en el que, en un primer paso, un electrón excita una molécula de O_2 , quedando capturado en un estado excitado, y a continuación otra molécula neutra choca este ion, llevándose la energía de exceso. Habiendo encontrado que la energía electrónica media de THF está por debajo del umbral de 5 eV, el proceso más probable de captura tiende a ser el descrito en este párrafo; incluso, mediante este proceso pueden generarse cúmulos iónico-moleculares, fenómeno que se discutirá en la sección 3.5, pero adelantando aquí la forma que tienen las reacciones:



Tal como ocurre en oxígeno, una segunda colisión se lleva la energía de excitación excedente para formar un ion estable



y, posiblemente, el siguiente paso sea la formación de cúmulos iónico-moleculares del tipo $(C_4H_8O^-)_n$.

Otro coeficiente muy útil en plasmas de baja temperatura es la tasa de reacción, que toma en cuenta el número de procesos de captura (en este caso) por unidad de tiempo y densidad numérica. En nuestro caso la tasa de reacción, k_{eff} , se define como

$$|k_{eff}| = W_F \left| \frac{(\alpha - \eta)}{N} \right| \quad (11)$$

Estos resultados se muestran en la figura 16 junto con los cálculos de las energías medias de los electrones, hechos con las secciones descritas anteriormente (ver sección 3.2.1) y con el código Bolsig+. También se han graficado las funciones de distribución de la energía media de los electrones, $f(\varepsilon)$, ambas en función de E/N.

Un hecho interesante en la curva de la tasa de reacción es la ausencia de una región de disociación bien definida, a diferencia de THF, H₂O y sus mezclas, mostrados en la figura 15. Nótese que al llegar al mínimo en E/N=70 Td, $(\alpha - \eta)/N$ crece súbitamente cuatro órdenes de magnitud hasta E/N=230 Td.

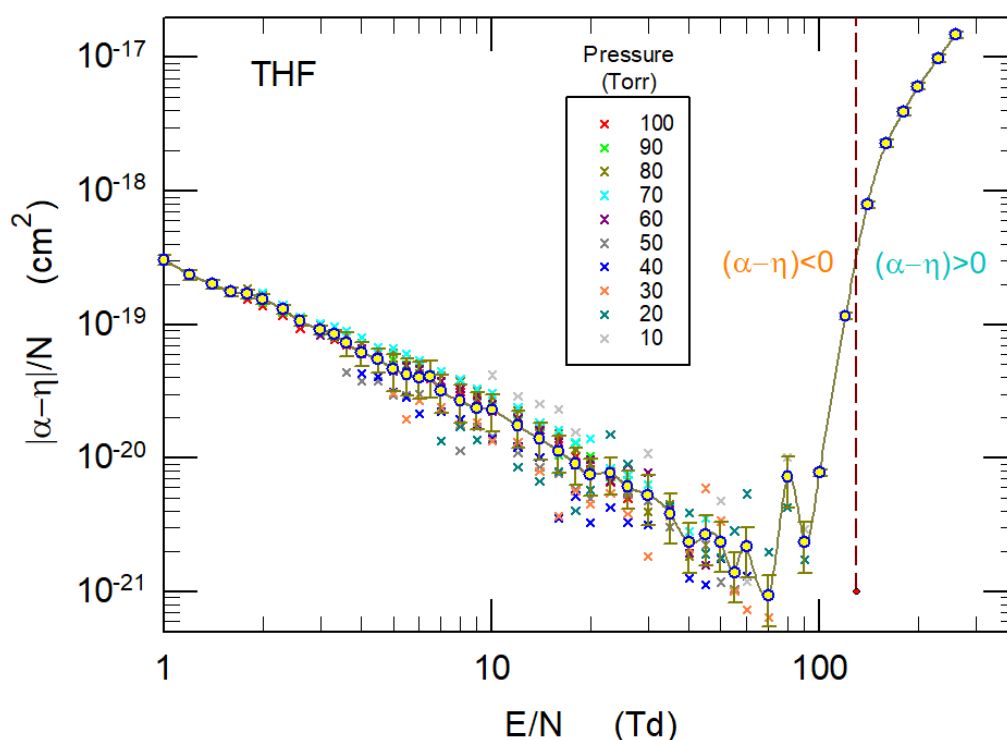


Figura 15. Gráfica del valor absoluto del coeficiente de ionización efectiva en función de E/N. La línea vertical punteada indica el cambio de signo de $(\alpha - \eta)/N$. A la izquierda se encuentran los valores negativos (zona de captura electrónica), mientras que a la derecha se encuentra la (zona de ionización). Los círculos unidos por una línea corresponden al promedio de $(\alpha - \eta)/N$.

La tasa efectiva de ionización cambia de un valor relativamente constante de $10^{-14} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ a $10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ en el mismo intervalo de E/N. La curva de la energía media

de los electrones, graficada en la figura 16 en función de E/N, indica que su valor máximo a E/N=260Td es de 4.8 eV, siendo menor que el primer pico de captura a 6.6 eV reportado por Aflatooni et al., [18] y Janečková et al.[24] Además, la función de distribución electrónica calculada, $f(\epsilon)$, para THF, mostrada en la figura 16, indica que para E/N=60 Td, $f(\epsilon)$ ya ha disminuido dos órdenes de magnitud a partir de su valor máximo de 6.6 eV (punto A), correspondiente al primer pico de la sección eficaz de captura reportado por Aflatooni et al., [18] y Janečková et al., [24], y más de tres órdenes de magnitud a 8.7 eV (punto B) para el segundo pico (Janečková et al.).

Asimismo, en el recuadro de la figura 16 puede verse que la pequeñez de la contribución por captura disociativa de los iones negativos de THF es despreciable en comparación con la de las mezclas de THF-H₂O al 10% y 30%, lo cual se debe a la captura disociativa de H₂O. Sumado a esto, la pequeñez de las secciones eficaces de formación de iones negativos de THF, con máximos en 1.6×10^{-20} y 2.3×10^{-20} cm², nos lleva a considerar que la ausencia de una región de captura disociativa en la figura 15 concuerda con los hallazgos de los estudios de haces mencionados anteriormente.

Por último, al observar el recuadro de la figura 16, se muestra el umbral de ionización de 9.7 eV para THF en el punto C debido a Dampc et al., [20]. Esto puede ayudar a explicar, en parte, el rápido incremento de $(\alpha-\eta)/N$ con E/N en la Fig. 15, y el de la tasa efectiva de ionización en la figura 16.

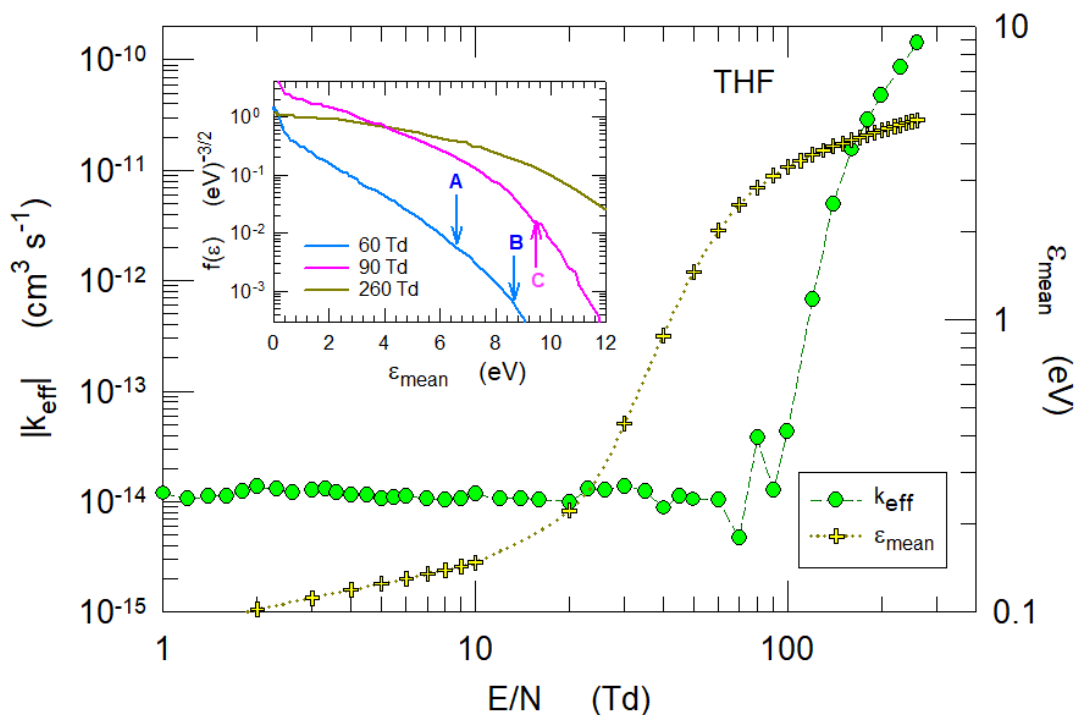


Figura 16. En el cuadro principal se muestra la tasa efectiva de ionización en THF (círculos verdes) y la energía media de los electrones, ϵ , en THF (cruces amarillas). En el inserto se han graficado las funciones de distribución de los electrones para $E/N=60$, 120 y 260 Td. Los puntos A y B corresponden a los picos de captura electrónica disociativa en THF reportados en [18,24]. El punto C corresponde al umbral de ionización de THF reportado en [20].

3.5.2 Coeficiente de ionización efectiva para mezclas de THF-H₂O

El comportamiento de este coeficiente depende de la fracción molar de agua presente en la mezcla, ya que, a diferencia del THF, el agua es bastante más electronegativa. Sin embargo, en la gráfica de la sección anterior se puede apreciar que sí existe formación de iones negativos en THF puro. Este hecho es bastante relevante porque a bajos valores de E/N , ambas moléculas son capaces de formar estos iones.

En la figura 17 se presentan los valores medidos del coeficiente de ionización efectiva para las mezclas de THF-H₂O. En el inserto se presentan los valores de las mezclas con bajo contenido de agua junto con los de THF. Se puede apreciar en la zona de captura de la gráfica, $(\alpha-\eta)/N < 0$, una transición suave entre la zona de captura resonante y la de captura disociativa para las mezclas que contienen agua, incluido el gas puro. La profundidad de este valle está en función de la concentración

de agua en la mezcla, siendo el valle más profundo el de 100% H₂O. No es posible apreciar una zona bien definida de captura electrónica dissociativa para THF. Sin embargo, se puede apreciar en la figura 17 que sí existe formación de iones negativos. Nótese que los valores de las mezclas se encuentran acotados por los valores de los gases puros.

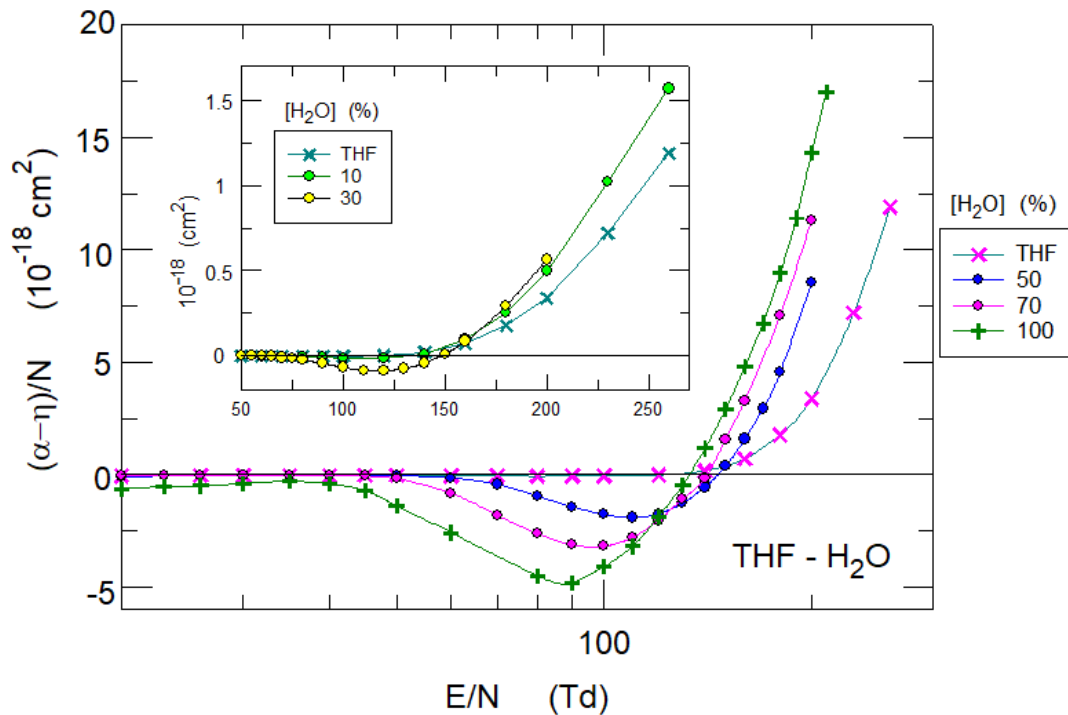


Figura 17. El coeficiente de ionización efectiva para las mezclas de THF-H₂O. En el inserto se han graficado los valores para THF y mezclas de 10 y 30% de H₂O, respectivamente. La tendencia mostrada en todas las curvas está acotada por los valores de los gases puros como extremos. Las líneas entre puntos solo son una guía visual.

En la figura 18 se muestran las tasas de ionización efectiva en THF, H₂O y sus mezclas. Se observa claramente la transición entre la zona de captura electrónica y la de ionización. En la gráfica, el punto de transición de un valor positivo a negativo es el mínimo local antes de caer en el valle. El punto mínimo del valle en cada curva corresponde a la transición de la zona de captura electrónica y la de ionización, es decir, al valor de E/N para el que $\alpha_{eff} = 0$.

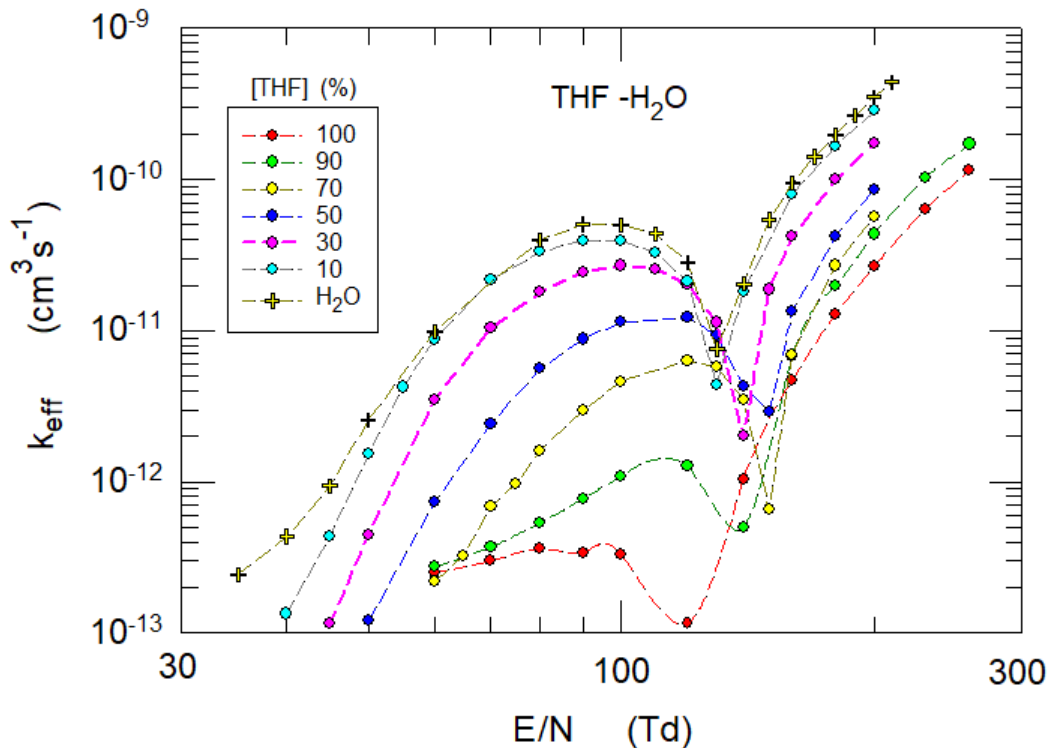


Figura 18. Tasas de ionización para THF, H₂O y sus distintas mezclas. La transición entre la parte negativa y la positiva se encuentra cerca de los mínimos de cada curva. Para mayor claridad de esta relación es necesario referirse a la figura 16. Las líneas punteadas solamente sirven de guía para el ojo.

3.6 Formación de iones negativos en THF

De acuerdo con las mediciones del coeficiente de ionización efectiva en THF, podemos afirmar la formación de iones negativos a bajos valores de E/N (figura 14). La formación de estos iones para E/N < 70 Td se ha discutido como correspondiente un proceso resonante, que se interpreta como un proceso de tres cuerpos, descrito en la sección 3.4.1. ya que por no adquirir los fotoelectrones la energía suficiente, la captura electrónica disociativa (DEA) no ocurre.

Para ahondar acerca de la presencia de iones negativos en THF, se eligió una serie de pulsos iónicos a E/N = 10 Td y un intervalo amplio de presiones entre 10 y 90 Torr. Las amplitudes máximas de la corriente iónica debida al arrastre de los iones negativos fueron de 1.1 nA, con tiempos de tránsito muy grandes, de hasta 5 ms los que, comparados con los tiempos de tránsito de los electrones, quedan en una relación alrededor de 1:1000 (figura 19). Esta medición fue posible gracias a que se empleó el amplificador de transimpedancia de 10⁷ V/A con tiempos de ascenso y

descenso de $1 \mu\text{s}$.

Los picos iniciales se deben en parte a los efectos del ancho de banda limitado del amplificador, que actúa como un filtro pasa-bajos para la corriente de desplazamiento electrónica —mucho más rápida e intensa—, aunque, por otra parte, esta región únicamente representa alrededor del 2% del tiempo total de deriva iónica. Además, se observa en dicha figura que el tiempo de tránsito iónico aumenta proporcionalmente con la presión, lo cual se hace más evidente en las figuras 20 y 21, en las que se observa que la velocidad de deriva iónica, W_n , y la movilidad reducida, K_n , varían con la presión del gas para los grupos de avalanchas en el intervalo de $E/N=8-14 \text{ Td}$.

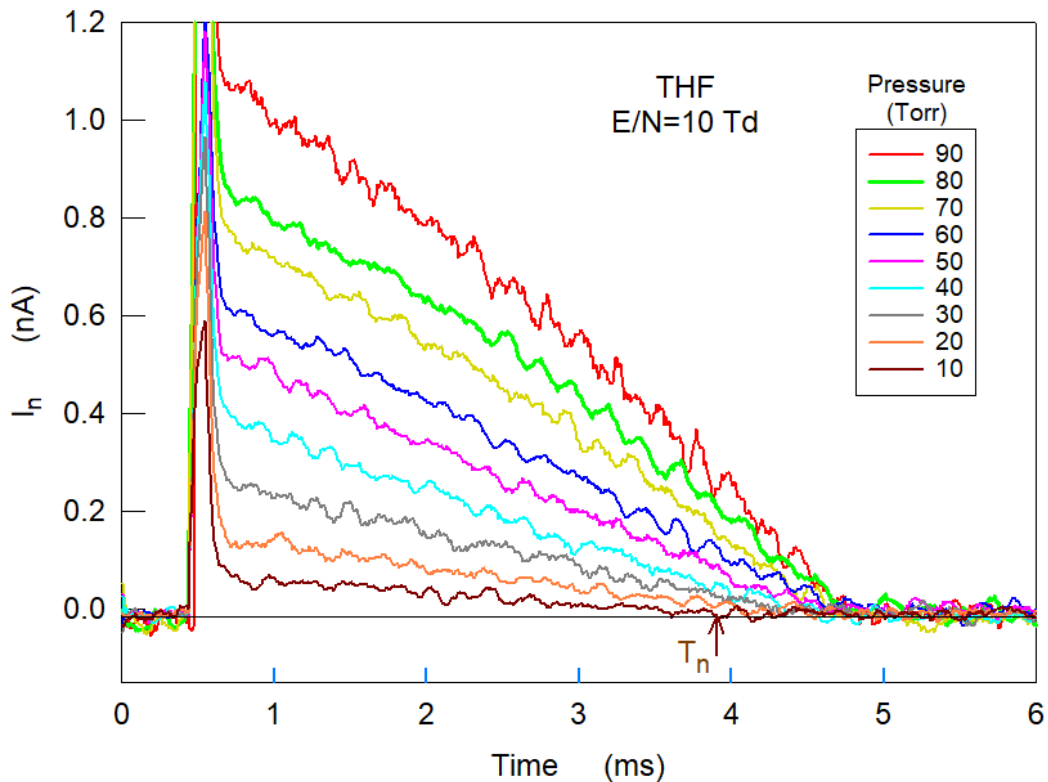


Figura 19. Señales iónicas medidas en THF a $E/N=10 \text{ Td}$ y dentro de un intervalo de presiones entre 10 y 90 Torr. La flecha señala -a manera de ejemplo- el tiempo de arribo iónico para la señal de 10 Torr, mismo que se usa para calcular la velocidad de los iones con la ecuación 12. Destaca el cambio en la intensidad de la corriente iónica medida en función de la presión.

3.6.1 Velocidad de arrastre y movilidad de iones negativos

Los valores de la velocidad de arrastre iónico se obtuvieron al tomar la diferencia de tiempos entre el inicio de la señal de la avalancha iónica y el primer cruce por cero (T_n) mediante la ecuación

$$W_n = \frac{d}{T_n}, \quad (12)$$

dichos valores se muestran en la figura 20. En la ecuación 12, $d=3\text{cm}$ y T_n es el tiempo de deriva de los iones. La movilidad reducida, K_n , se define como

$$K_n = \frac{W_n}{269 (E/N)}, \quad (13)$$

con K_n en unidades de $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, W_n en cm s^{-1} , y E/N en Td. En la figura 20 se grafican ambos coeficientes. En ambos casos se observa una dependencia lineal con E/N y un claro efecto de la presión para cada mezcla, siendo que la movilidad disminuye con la presión a valores de E/N fijos. La movilidad de un ion es inversamente proporcional a su masa, por lo que, a valores de movilidad menores (mayor presión) se forman iones más masivos. Esto sugiere que existe la formación de cúmulos. Más adelante se dará una explicación de este mecanismo de reacción.

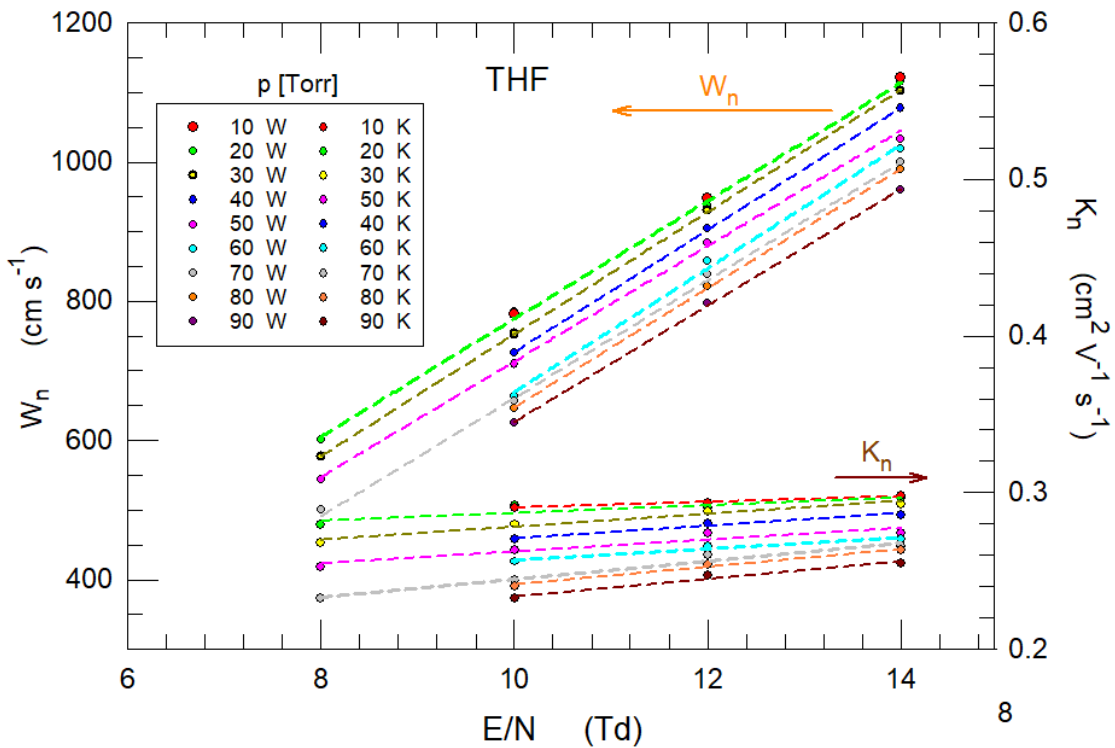


Figura 20. La velocidad de arrastre de los iones negativos (arriba, W_n) y las movilidades reducidas (abajo, K_n) para $8 \leq E/N \leq 14$ Td. Ambas familias de curvas están parametrizadas con respecto a la presión. Las líneas punteadas a través de

los valores de K_n son ajustes lineales, cuyos valores se reportan en la Tabla 4. Las flechas indican el eje vertical a utilizar para cada parámetro.

Las curvas de ajuste para K_n en la figura 20 se calcularon con la función

$$K_n = K_{00} - b \frac{E}{N}, \quad (14)$$

donde K_{00} es la movilidad a campo cero y b es la tasa de cambio de la movilidad reducida con E/N . En la Tabla 4 se reportan los valores para los parámetros K_{00} y b para cada mezcla.

Tabla 4		
Coeficientes de ajuste de la ecuación 14 para los valores calculados de K_n de la figura 20		
Presión	K_{00}	b
(Torr)	($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$)	($\text{cm}^2 (\text{V s Td})^{-1}$)
0	0.28	1.2
10	0.27	1.8
20	0.26	2.5
30	0.23	4.1
40	0.23	4.0
50	0.22	3.8
60	0.22	3.6
70	0.19	5.9
80	0.18	5.6
90	0.18	5.6
Nota: El coeficiente de correlación medio es $r^2=0.94\pm 0.06$		

El ajuste hacia una relación lineal para los valores de K_n , se obtuvo con una desviación de $\pm 5\%$ con respecto a los puntos medidos.

Un parámetro que sirve para este propósito es la movilidad reducida, que se refiere a la capacidad del desplazamiento de los iones por acción de un campo eléctrico (movilidad iónica) normalizada, teniendo en cuenta los cambios en la densidad del gas debido a variaciones de temperatura y presión. Y, de acuerdo con

la definición de movilidad, se puede llegar a que ésta es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la masa reducida del ion. McDaniel explica que esta relación surge directamente del equilibrio entre la fuerza eléctrica aceleradora eE y la fuerza de fricción promedio debida a las colisiones con moléculas neutras.

En la figura 20 se observa que tanto W_n como K_n guardan una clara dependencia inversa con la presión, es decir, a mayor presión, una menor movilidad. La teoría de dos temperaturas del transporte iónico [2,3] (una es la de los neutros y otra la de los iones) define la movilidad reducida, K_0 , como

$$K_0 \approx \frac{3e}{16 N_0} \left(\frac{2\pi}{\mu_r k T_{eff}} \right)^{1/2} \frac{1}{\Omega T_{eff}}, \quad (15)$$

donde e es la carga del ión, N_0 es la densidad del gas en condiciones estándar de presión y temperatura, μ_r es la masa reducida, Ω es la sección eficaz de colisión, k es la constante de Boltzmann y T_{eff} es la temperatura efectiva (ion-neutro) dada por

$$\varepsilon_i = \frac{3}{2} k T_{eff} \approx \frac{3}{2} k T + \frac{1}{2} M W_n^2, \quad (16)$$

donde T es la temperatura del gas. En unidades prácticas dentro del campo de estudio de la formación iónica, se tiene que

$$K_0 \approx \frac{1.85 \times 10^4}{\Omega T_{eff}^{1/2}} \frac{1}{\sqrt{\mu_r}}, \quad (17)$$

$$T_{eff} \approx T + 2.89 \times 10^{-4} M K_0^2 \left(\frac{E}{N} \right)^2, \quad (17)$$

donde M es la masa de los neutros, μ_r es la masa reducida (ion-molécula) en g/mol o Dalton, T y T_{eff} en K, y Ω en Å^2 , W_n en cm s^{-1} , E/N en Td y K_0 en $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$.

3.6.2 Formación de cúmulos de iones negativos de THF

Como se comentó en el apartado anterior, hay evidencia experimental que sugiere la formación de cúmulos iónico-moleculares en dependencia directa de la

presión. No tenemos la capacidad experimental de discriminar las masas de los iones presentes en la avalancha, ya que este experimento mide la corriente total debida a los portadores de carga, por una parte, y por la otra, las presiones de trabajo (10-90 Torr) son tan altas que el uso de la espectrometría de masas es imposible. En vista de esto, se recurrió a la teoría de Langevin [2,3,58], para la movilidad reducida a campo cero, llamada también la fórmula del límite de polarización, K_{pol} , que depende solamente de la masa reducida del ion y el neutro μ_r y de la polarizabilidad dipolar del neutro, α_d , y es aplicable a moléculas no polares. Dicha expresión es

$$K_{pol} = \frac{13.853}{\sqrt{\alpha_d \mu_r}}, \quad (19)$$

Donde μ_r es la masa reducida del neutro y el ión que se calcula con la siguiente expresión

$$\mu_r = \frac{m_{THF} m_{cluster}}{m_{THF} + m_{cluster}} \quad (20)$$

K_{pol} está en unidades de $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, con α_d en \AA^3 y μ_r en Dalton (unidades de masa atómica). Considerando que la masa del electrón es demasiado pequeña comparada con la de THF, prácticamente la molécula neutra y el ion negativo tienen la misma masa, la cual es 72 Da y, por lo tanto, $\mu_r=36$. Con $\alpha_d = 5.93 \text{\AA}^3$, [59] se tiene que $K_{pol} = 0.928 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. Si comparamos este valor con el obtenido experimentalmente, mostrado en la figura 17, éste es significativamente mayor que el valor experimental, de $K_{00} = 0.28 \pm 0.03 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ al extrapolar las curvas de movilidad a $E/N=0$ Td. Debido a que el THF es una molécula altamente polar, con un momento dipolar permanente de 1.75 Debye [60], hemos optado por explicar la formación de cúmulos a partir de teorías más apropiadas. Una de ellas es la proporcionada por De Gouw et al., [1], que es una aproximación del dipolo bloqueado (Locked dipole). De Gouw et al., midieron la movilidad reducida de moléculas altamente polares y las compararon exitosamente con esta aproximación.

En la teoría del dipolo bloqueado el parámetro de importancia es la razón $\mu_r/\alpha_d^{1/2}$, que para THF es $7.11 \times 10^{11} \text{ D cm}^{-3/2}$, tomado de la curva de la figura 3 de De

Gouw y reproducida aquí en el inserto de la figura 21. De dicha gráfica podemos inferir la razón entre la movilidad del dipolo bloqueado y el límite de polarización al tomar el valor con el cual la curva cruza el eje horizontal ($\mu_r/\alpha_d^{1/2}$), el cual se calculó en este trabajo y la razón entre la movilidad del dipolo bloqueado y el límite de polarización ($K_{LD}/K_{pol}=0.35$). Como ya se ha calculado el límite de polarización, $K_{pol}=0.928 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, entonces la movilidad de dipolo bloqueado de THF es $K_{LD}=0.32\pm 0.03 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, lo cual es solamente 14% mayor que nuestra medición de $K_{00}=0.28 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

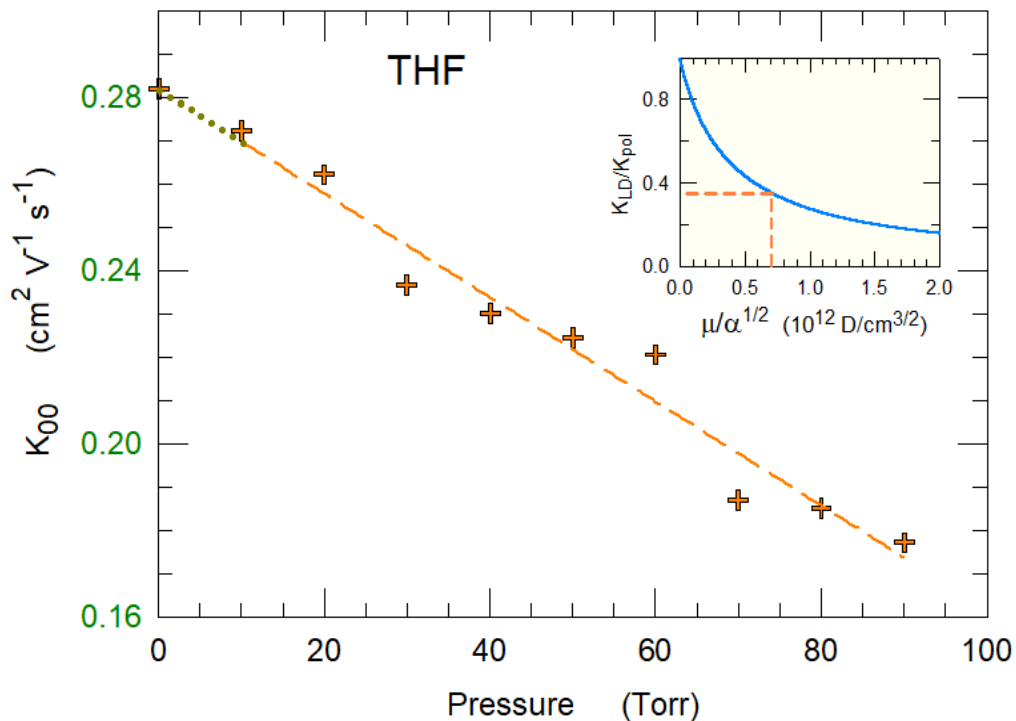


Figura 21. Movilidades reducidas de los iones negativos de THF en función de la presión del gas para $E/N=10\text{Td}$. La línea cortada naranja es la curva ajustada a los puntos con los coeficientes mostrados en la tabla 3. La línea punteada verde es la extrapolación para $p=0$ Torr para estimar el valor de K_{00} para THF. En el inserto se muestra la relación obtenida de la teoría de De Gouw [1]. Las líneas punteadas rojas muestran los valores de K_{LD}/K_{pol} , de acuerdo con el valor de $\mu_r/\alpha_d^{1/2}$ para THF.

Como no existe una forma selectiva para identificar la formación puntual de cúmulos iónico-moleculares, se introduce un nuevo parámetro para abarcar todo el conjunto de cúmulos, β , que describe el número de cúmulos formados por unidad de longitud en la dirección del campo eléctrico. Haciendo esto, es posible plantear

una ecuación de continuidad que describa la evolución espacio-temporal del grupo cumular de la corriente de desplazamiento debida a los iones negativos, cuyo análisis se presenta en el Apéndice[54].

La corriente en el circuito externo debida a los iones negativos cumulares es

$$I_c(t) = \frac{q_0}{T_c} \int_{v_n t}^d N_c(x, t) dx = \frac{n_0 q_0}{T_n} \{1 - \exp[-\beta(d - W_n t)]\}, \quad (21)$$

donde T_n es el tiempo de tránsito de las especies de cúmulos iónico-moleculares. Esta expresión es válida para $0 \approx t \leq T_n$. La ecuación (21) se ha utilizado para ajustar los pulsos iónicos de THF satisfactoriamente, exceptuando el inicio de la corriente iónica que se discutió al inicio del análisis mostrado en el apéndice; simulando el inicio de la avalancha como un pulso de Dirac en lugar de uno con anchura finita, lo que se puede observar en la figura 22 con mayor claridad.

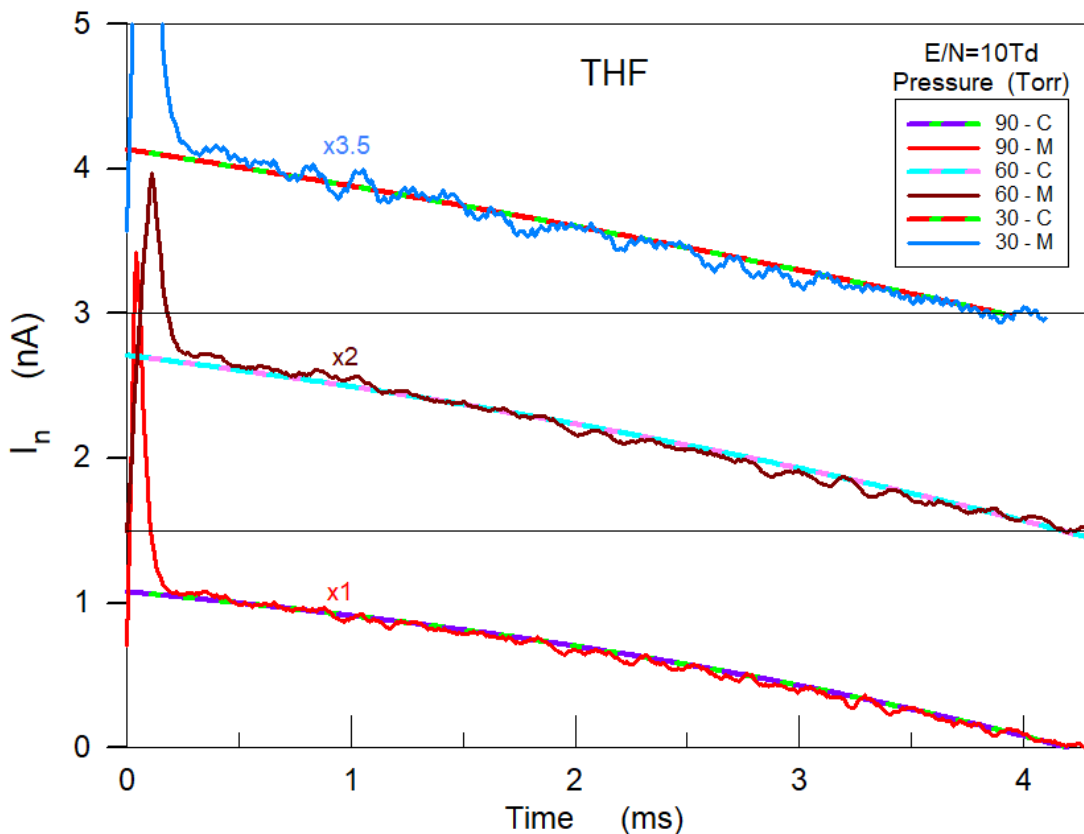


Figura 22. Tres ejemplos de avalanchas de iones negativos de THF y sus curvas ajustadas de acuerdo con la ecuación (21) para tres distintas presiones y un $E/N=10Td$. Para mayor claridad y para notar el ajuste de cada curva, se multiplicaron las curvas de acuerdo con el factor que se encuentra encima de

cada una. En la leyenda, C y M significan “calculada” y “medida”, respectivamente.

Las señales medidas experimentalmente de las avalanchas iónicas de THF son pequeñas y, en algunos casos, llegan a estar muy cerca del umbral de medición de la amplitud de la corriente (1 nA). Sin embargo, a pesar de la pequeñez de las señales, se pudieron medir y ajustar las curvas calculadas exitosamente, resultando que el error general de estos ajustes fue de 11%. Si se analiza la corriente en términos del tiempo de tránsito iónico, podemos concluir que la pequeñez de las señales se debe a que éstas duran alrededor de 4 a 4.5 ms. Tomando en cuenta que $I_c(t) \sim T_n^{-1}$ (Véase el Apéndice de la corriente iónica). Por otro lado, si nos fijamos en las curvas de la figura 22, notamos que, si se aproxima el área bajo estas curvas a la de un triángulo, se puede calcular el tamaño de la carga. Si se considera, por ejemplo, la curva de 30 Torr, se obtiene un valor de 0.67 pC, correspondiente a 4.2×10^6 electrones, que es un valor congruente con los fotoelectrones necesarios para iniciar la avalancha de Townsend cuando sólo hay captura electrónica.

Tomando los valores de las velocidades de deriva de iones negativos, W_n , de la figura 20, podemos calcular los coeficientes de formación cumular aparentes, normalizados a la densidad del gas β/N . mediante la ecuación (21), y siguiendo un procedimiento de prueba y error en los ajustes de las curvas calculadas. Contando ya con el valor del coeficiente de formación cumular aparente, se pueden calcular las tasas de reacción para la formación de los cúmulos a partir de

$$k_{clust} = \frac{\beta}{N} W_n \quad (22)$$

Estos coeficientes se muestran en la figura 23 en función de la presión. El ajuste evidenció que tanto β/N como k_{clust} presentan un incremento gradual con la presión. Los valores de W_n obtenidos tras el ajuste resultaron, en promedio, 7% inferiores a los calculados visualmente mediante el tiempo de tránsito. La incertidumbre de β/N se encuentra en el intervalo de 10–16%, lo que conduce a que la tasa de formación de cúmulos tenga un error estimado entre 17% y 23%. Finalmente, debido al elevado momento dipolar de THF, no es recomendable

emplear únicamente la expresión K_{pol} (ecuación (19)) para calcular los tamaños de los clústeres, pues ésta se basa únicamente en la polarizabilidad dipolar y la masa reducida.

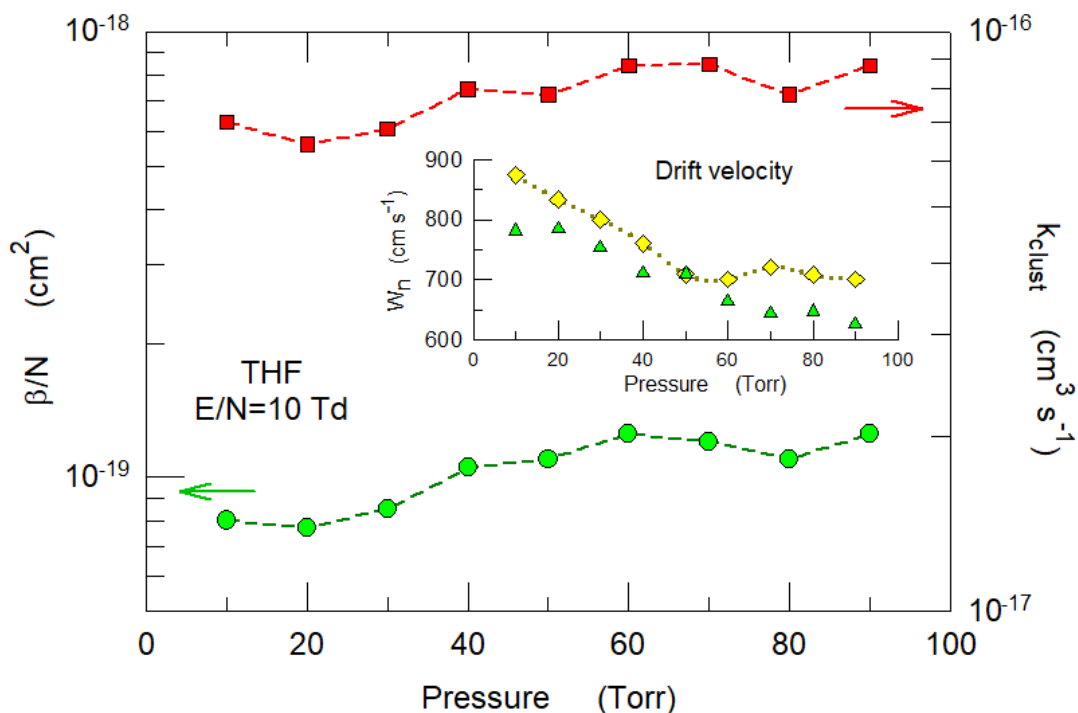


Figura 23. Coeficientes de formación cumular aparente, β/N , normalizados a la densidad del gas y las tasas de reacción para formación cumular, y la velocidad de deriva de los iones negativos de THF, W_n (en el inserto), todo graficado en función de la presión a $E/N=10$ Td. En el inserto se muestran datos de la velocidad de deriva de los iones negativos de THF (W_n), con los rombos amarillos resultantes de los ajustes a las curvas de la figura 22, y los triángulos verdes muestran los valores medidos a partir de la determinación de los tiempos de arribo de los pulsos iónicos de la figura 19.

Capítulo 4

4.1 Conclusiones

En esta sección se presentan las conclusiones pertinentes de este trabajo de investigación, y se sugieren acciones para trabajos futuros. Este trabajo ha estudiado las interacciones de electrones de baja energía (LEE) con moléculas orgánicas como el THF y el agua con la TPT. De esta investigación se pudieron obtener los coeficientes de transporte para distintas mezclas de estas moléculas y

para los gases puros en un amplio intervalo del E/N y de presiones gaseosas, resaltando que son mediciones experimentales novedosas y no existen antecedentes de la medición de los parámetros de enjambre en este sistema binario de moléculas de interés biológico.

En la velocidad de arrastre electrónico se observó algo sin precedentes al mostrar una tendencia particular los datos de THF-H₂O al cruzarse las curvas de éstas en las cercanías de E/N=65 Td. Para estudiar este comportamiento se recurrió a realizar simulaciones con un solucionador de dos términos de la ecuación de transporte de Boltzmann, llamado Bolsig+. Este cálculo se realizó utilizando secciones eficaces de colisión electrónica ya publicadas con cambios en la sección de transferencia de momento, y a partir de ello se pudo explicar el cruce de las curvas de velocidad en términos de las secciones de transferencia de momento y la energía media de los electrones.

Otro resultado original e interesante fue el estudio de la captura electrónica de THF a muy bajo E/N, al demostrar que no hay una zona de captura disociativa clara en THF debido a que la energía de los electrones no es suficiente para llegar al umbral que reportan Aflatooni y Janečková en el intervalo $70 < E/N < 120$ Td. Esto último se ha fundamentado con ayuda, nuevamente, de los cálculos hechos con Bolsig+, ya que se obtuvieron las funciones de distribución que lograron dar una explicación acerca de la pequeña contribución de la DEA por debajo de 5eV. Esta evidencia, en suma, a las mediciones del coeficiente de captura electrónica para E/N debajo del umbral de ionización, fortalece el argumento de que la formación del anión THF es a partir de un proceso resonante.

El perfeccionamiento de la técnica experimental permitiría aclarar la aún desconocida relación entre la presión y el coeficiente de captura para E/N < 60 Td. En particular, sería clave optimizar la resolución temporal para detectar corrientes en el rango de pA con mayor calidad de señal para obtener la mayor información de los tiempos de arribo, y, por consiguiente, mayor precisión a la hora de calcular la velocidad de arrastre iónico. Las propiedades singulares de la captura electrónica en THF nos motivaron a estudiar las avalanchas de iones negativos. Como muestra nuestro análisis preliminar a E/N=10 Td, es necesario un trabajo más amplio para comprender un posible proceso de formación de cúmulos de iones negativos, considerando la marcada disminución de la movilidad iónica con el aumento de la

presión. Aún no hemos identificado las masas de las especies iónicas en deriva; sin embargo, técnicas como los tubos de deriva de tiempo de vuelo, combinados con espectrometría de masas por tiempo de vuelo y/o cuadrupolar, serían de gran apoyo para este propósito, especialmente en el caso de mezclas de THF con H₂O. En última instancia, confiamos en que los datos aportados contribuyan a mejorar los conjuntos de secciones eficaces de THF y H₂O, lo cual resulta crucial para entender los procesos complejos que ocurren en los tejidos biológicos bajo la acción de la radiación ionizante.

4.2 Sugerencias para trabajos futuros

En esta tesis se han explorado varios aspectos novedosos en la interacción de electrones de baja energía (LEE) con moléculas de interés biológico, en particular, con el THF y el agua para obtener coeficientes de enjambre. También se ha estudiado satisfactoriamente la formación de iones negativos en THF y su movilidad. Sin embargo, estas moléculas son el preámbulo para entender las interacciones de LEE con moléculas modelo de componente de un entorno biológico real. Se sugiere que se profundice en el estudio de la formación y movilidad de iones negativos de mezclas de THF-H₂O, incluyendo mezclas de otras moléculas tales como oxígeno (O₂), dióxido de carbono (CO₂), y quizás algunos precursores de bases nitrogenadas.

Referencias

- [1] de Gouw J A, Krishnamurthy M and Leone S R 1997 The mobilities of ions and cluster ions drifting in polar gases *J. Chem. Phys.* **106** 5937–42
- [2] Mason E A and McDaniel E W 1973 *The mobility and diffusion of ions in gases* (John Wiley & Sons, Inc.)
- [3] Mason E A and McDaniel E W 1988 *Transport properties of ions in gases* (Wiley Series in Plasma Physics.)
- [4] Sanche L 1989 Investigations of subpicosecond radiation processes in solids with low-energy-electron techniques *Radiat. Phys. Chem.* **34** 487–92
- [5] Sanche L 2005 Low energy electron-driven damage in biomolecules *Eur. Phys. J. D* **35** 367–90
- [6] Huels M A, Hahndorf I, Illenberger E and Sanche L 1998 Resonant dissociation of DNA bases by subionization electrons *J. Chem. Phys.* **108** 1309–12
- [7] Ptasińska S and Sanche L 2007 Dissociative electron attachment to abasic DNA *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9** 1730–5
- [8] Boudaïffa B, Cloutier P, Hunting D, Huels M A and Sanche L 2000 Resonant Formation of DNA Strand Breaks by Low-Energy (3 to 20 eV) Electrons *Science (80-.)*. **287** 1658–60
- [9] Park Y, Polska K, Rak J, Wagner J R and Sanche L 2012 Fundamental mechanisms of DNA radiosensitization: Damage induced by low-energy electrons in brominated oligonucleotide trimers *J. Phys. Chem. B* **116** 9676–82
- [10] Gao Y, Zheng Y and Sanche L 2021 Low-Energy Electron Damage to Condensed-Phase DNA and Its Constituents *Int. J. Mol. Sci.* **22** 7879
- [11] Alberts B, Johnson A, Lewis J, Raff M, Roberts K and Walter P 2010 *Molecular Biology of the Cell, Fifth Edition*
- [12] Alvarado F, Bari S, Hoekstra R and Schlathölter T 2006 Quantification of ion-induced molecular fragmentation of isolated 2-deoxy-D-ribose molecules *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** 1922–8
- [13] Antic D, Parenteau L, Lepage M and Sanche L 1999 Low-Energy Electron Damage to Condensed-Phase Deoxyribose Analogues Investigated by

Electron Stimulated Desorption of H- and Electron Energy Loss Spectroscopy *J. Phys. Chem. B* **103** 6611–9

- [14] White R D, Cocks D, Boyle G, Casey M, Garland N, Konovalov D, Philippa B, Stokes P, de Urquijo J, González-Magaña O, McEachran R P, Buckman S J, Brunger M J, Garcia G, Dujko S and Petrovic Z L 2018 Electron transport in biomolecular gaseous and liquid systems: theory, experiment and self-consistent cross-sections *Plasma Sources Sci. Technol.* **27** 053001
- [15] de Urquijo J, González-Magaña O, Basurto E and Juárez A M 2024 Two- and three-body attachment, electron transport and ionisation in water-air mixtures *J. Phys. D: Appl. Phys.* **57** 125205
- [16] Breton S P, Michaud M, Jäggle C, Swiderek P and Sanche L 2004 Damage induced by low-energy electrons in solid films of tetrahydrofuran *J. Chem. Phys.* **121** 11240–9
- [17] Sulzer P, Ptasinska S, Zappa F, Mielewska B, Milosavljevic A R, Scheier P, Märk T D, Bald I, Gohlke S, Huels M A and Illenberger E 2006 Dissociative electron attachment to furan, tetrahydrofuran, and fructose *J. Chem. Phys.* **125** 1–6
- [18] Aflatooni K, Scheer A M and Burrow P D 2006 Total dissociative electron attachment cross sections for molecular constituents of DNA Total dissociative electron attachment cross sections for molecular *J. Chem. Phys.* **125** 054301
- [19] Ibănescu B C, May O and Allan M 2008 Cleavage of the ether bond by electron impact: differences between linear ethers and tetrahydrofuran *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** 1507–11
- [20] Dampc M, Mielewska B, Siggel-King M R F, King G C and Zubek M 2009 Threshold photoelectron spectra of tetrahydrofuran over the energy range 9–29eV *Chem. Phys.* **359** 77–81
- [21] Dampc M, Szymańska E, Mielewska B and Zubek M 2011 Ionization and ionic fragmentation of tetrahydrofuran molecules by electron collisions *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **44** 055206
- [22] Garland N A, Brunger M J, Garcia G, de Urquijo J and White R D 2013 Transport properties of electron swarms in tetrahydrofuran under the influence of an applied electric field *Phys. Rev. A* **88** 062712

- [23] White R D, Brunger M J, Garland N A, Robson R E, Ness K F, Garcia G, de Urquijo J, Dujko S and Petrović Z L 2014 Electron swarm transport in THF and water mixtures *Eur. Phys. J. D* **68** 125
- [24] Janečková R, May O, Milosavljević A R and Fedor J 2014 Partial cross sections for dissociative electron attachment to tetrahydrofuran reveal a dynamics-driven rich fragmentation pattern *Int. J. Mass Spectrom.* **365–366** 163–8
- [25] Duque H V., Do T P T, Lopes M C A, Konovalov D A, White R D, Brunger M J and Jones D B 2015 The role of electron-impact vibrational excitation in electron transport through gaseous tetrahydrofuran *J. Chem. Phys.* **142** 124307
- [26] Do T P T, Duque H V., Lopes M C A, Konovalov D A, White R D, Brunger M J and Jones D B 2015 Differential cross sections for electron-impact vibrational-excitation of tetrahydrofuran at intermediate impact energies *J. Chem. Phys.* **142**
- [27] Casey M J E, de Urquijo J, Serkovic Loli L N, Cocks D G, Boyle G J, Jones D B, Brunger M J and White R D 2017 Self-consistency of electron-THF cross sections using electron swarm techniques *J. Chem. Phys.* **147** 1–16
- [28] Wolff W, Rudek B, Da Silva L A, Hilgers G, Montenegro E C and Homem M G P 2019 Absolute ionization and dissociation cross sections of tetrahydrofuran: Fragmentation-ion production mechanisms *J. Chem. Phys.* **151**
- [29] de Urquijo J, Casey M J E, Serkovic-Loli L N, Cocks D G, Boyle G J, Jones D B, Brunger M J and White R D 2019 Assessment of the self-consistency of electron-THF cross sections using electron swarm techniques: Mixtures of THF–Ar and THF–N₂ *J. Chem. Phys.* **151** 54309
- [30] Stokes P W, Casey M J E, Cocks D G, de Urquijo J, García G, Brunger M J and White R D 2020 Self-consistent electron–THF cross sections derived using data-driven swarm analysis with a neural network model *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** 105008
- [31] de Urquijo J, Casey M, Konvalov D, Brunger M J, Garcia G, Petrovic Z and White R D 2015 Electron impact cross-sections for biomolecules - completeness and self-consistency via swarm analysis *J. Phys. Conf. Ser.*

- [32] Hasegawa H, Date H and Shimozuma M 2007 Electron swarm parameters in water vapour *J. Phys. D. Appl. Phys.* **40** 2495–8
- [33] Robson R E, White R D and Ness K F 2011 Transport coefficients for electrons in water vapor: Definition, measurement, and calculation *J. Chem. Phys.* **134** 1–5
- [34] Ruíz-Vargas G, Yousfi M and de Urquijo J 2010 Electron transport coefficients in the mixtures of H₂O with N₂, O₂, CO₂ and dry air for the optimization of non-thermal atmospheric pressure plasmas *J. Phys. D. Appl. Phys.* **43** 455201
- [35] Ness K F, Robson R E, Brunger M J and White R D 2012 Transport coefficients and cross sections for electrons in water vapour: Comparison of cross section sets using an improved Boltzmann equation solution *J. Chem. Phys.* **136** 1–7
- [36] de Urquijo J, Basurto E, Juárez A M, Ness K F, Robson R E, Brunger M J and White R D 2014 Electron drift velocities in He and water mixtures: Measurements and an assessment of the water vapour cross-section sets *J. Chem. Phys.* **141** 1–11
- [37] Kawaguchi S, Takahashi K, Satoh K and Itoh H 2016 Electron transport analysis in water vapor *Jpn. J. Appl. Phys.* **55** 1–7
- [38] Budde M, Cunha Dias T, Vialetto L, Pinhão N, Guerra V and Silva T 2022 Electron-neutral collision cross sections for H₂O: I. Complete and consistent set *J. Phys. D. Appl. Phys.* **55** 445205
- [39] Budde M, Dias T C, Vialetto L, Pinhão N, Guerra V and Silva T 2023 Electron-neutral collision cross sections for H₂O: II. Anisotropic scattering and assessment of the validity of the two-term approximation *J. Phys. D. Appl. Phys.* **56** 255201
- [40] Brambring J 1964 Der Stromverlauf einer Elektronenlawine mit Diffusion *Zeitschrift für Phys.* **179** 532–8
- [41] de Urquijo J, Juárez A M, Rodríguez-Luna J C and Ramos-Salas J S 2007 A Numerical Simulation Code for Electronic and Ionic Transients From a Time-Resolved Pulsed Townsend Experiment *IEEE Trans. Plasma Sci.* **35** 1204–9
- [42] Bekstein A, De Urquijo J, Ducasse O, Rodríguez-Luna J C and Juárez A M

- 2012 Determination of transport and reaction swarm coefficients from the analysis of complex transient pulses from the pulsed Townsend experiment *J. Phys. Conf. Ser.* **370**
- [43] Hagelaar G J M and Pitchford L C 2005 Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models *Plasma Sources Sci. Technol.* **14** 722–33
- [44] Bekstein A, De Urquijo J, Hernández-Ávila J L and Basurto E 2012 Measurement of electron swarm coefficients in C₂F₄-Xe and evidence of Penning ionization in C₂F₄-Ar *Eur. Phys. J. D* **66**
- [45] Pérez-Romero L G 2018 *Estudio de la interacción de electrones lentos con moléculas orgánicas de interés biológico. Tesis de Licenciatura.*
- [46] Pérez-Romero L G 2021 *Estudio del transporte en la fase gaseosa de iones negativos de THF: una molécula con interés biológico. Tesis de maestría.*
- [47] Pancheshnyi S, Biagi S, Bordage M C, Hagelaar G J M, Morgan W L, Phelps A V. and Pitchford L C 2012 The LXCat project: Electron scattering cross sections and swarm parameters for low temperature plasma modeling *Chem. Phys.* **398** 148–53
- [48] LXCat Hayashi database
- [49] LXCat Biagi's Magboltz version 11.9
- [50] LXCat Itikawa database
- [51] LXCat Trinitite database
- [52] Petrovic Z L, Crompton R W and Haddad G N 1984 Model Calculations of Negative Differential Conductivity in Gases. *Aust. J. Phys.* **37** 23–34
- [53] Robson R, White R and Hildebrandt M 2018 *Fundamentals of Charged Particle Transport in Gases and Condensed Matter* (Boca Raton, FL: Taylor and Francis Group)
- [54] Pérez-Romero L G and de Urquijo J 2025 Electron swarm coefficients in THF and THF-H₂O mixtures. Negative-ion drift and clustering in THF *J. Phys. D. Appl. Phys.* **58** 435206
- [55] Grünberg R 1969 Messungen des Anlagerungskoeffizienten von Elektronen in Sauerstoff *Zeitschrift für Naturforsch. A* **24** 1039–48
- [56] T Taniguchi, H Tagashira, I Okada and Y Sakai 1978 Three-body attachment in oxygen *J. Phys. D. Appl. Phys.* **11** 2281–4

- [57] T Taniguchi, K Kawamura, S Sakamoto and H Tagashira 1982 Three-body attachment in oxygen and an air-like nitrogen and oxygen mixture *J. Phys. D. Appl. Phys.* **15** 1187–93
- [58] Hinojosa G and Urquijo J de 2003 Test of Blanc's law for negative ion mobility in mixtures of SF₆ with N₂, O₂ and air *J. Phys. D. Appl. Phys.* **36** 2510–4
- [59] Ramírez A 2021 THF Dipole Polarizability *Ab initio Calc.*
- [60] Engerholm G G, Luntz A C, Gwinn W D and Harris D O 1969 Ring Puckering in Five-Membered Rings. II. The Microwave Spectrum, Dipole Moment, and Barrier to Pseudorotation in Tetrahydrofuran *J. Chem. Phys.* **50** 2446–57
- [61] Raether H 1964 *Electron Avalanches and Breakdown in Gases* (London: Butterworths)

Apéndice

Corriente en el circuito externo debida a la formación cumular de iones negativos.

Como punto de inicio, debemos asumir que existe una producción de un número inicial de electrones, n_0 , desprendidos del cátodo por efecto fotoeléctrico debido a un pulso láser del tipo Delta de Dirac. Si tomamos en cuenta que las mediciones de formación y arrastre de iones negativos de THF se hicieron bajo presiones altas, se puede considerar que la difusión longitudinal electrónica e iónica se puede despreciar. Las mediciones fueron realizadas a un $E/N=10$ Td, lo que asegura que los electrones no tengan energía suficiente para causar procesos de ionización. Entonces, durante el tiempo de tránsito electrónico, el número de electrones decae por procesos de captura de manera que [61]:

$$\frac{dn_e}{dt} = -\eta W_F n_e, \quad (A1)$$

donde W_F es la velocidad de flujo de arrastre electrónico. Una vez que se están formando los iones negativos debido a la captura electrónica del THF, tenemos que un total de n_n iones negativos de THF se forman con una frecuencia ηW_F pero al mismo tiempo, existe una pérdida de estos iones debida a la formación de cúmulos, los cuales tienen una frecuencia βW_n de manera que:

$$\frac{dn_n}{dt} = \eta W_F n_e - \beta W_n n_n \quad (A2)$$

donde η y β son los coeficientes de captura electrónica y de formación cumular aparente, respectivamente. Ahora se tiene que considerar la tasa de formación de cúmulos de iones negativos n_c tomando en cuenta la frecuencia de formación cumular, tal que:

$$\frac{dn_c}{dt} = \beta W_n n_n \quad (A3)$$

Resolviendo las ecuaciones A1 y A3 con las siguientes condiciones iniciales: $n_e(0) = n_0$ y $n_n(0) = 0$, se obtiene:

$$n_e(t) = n_0 \exp(-\eta W_F t) \quad (A4)$$

$$n_n(t) = \frac{n_0 \eta W_n}{\beta W_n - \eta W_F} [\exp(-\eta W_F t) - \exp(-\beta W_n t)] \quad (\text{A5})$$

Estas dos últimas ecuaciones son válidas para $0 \leq t \leq T_e$ teniendo en cuenta que T_e es el tiempo del tránsito electrónico. Tomando en consideración que, en el caso presentado, la frecuencia de captura es mucho mayor que la de formación cumular ($\eta W_F \gg \beta W_n$). Usando los datos medidos para la velocidad de arrastre electrónico y la tasa de reacción se cumple esta condición porque la razón $\eta v_e / \beta v_n$ es de 1043 a 137. Por lo tanto, la Ec. A5 se reduce a:

$$n_n(t) = n_0 \exp(-\beta W_n t) \quad (\text{A6})$$

Con esta aproximación, la solución de la Ec. A3 para el número de cúmulos formados en función del tiempo es:

$$n_c(t) = n_0 [1 - \exp(-\beta W_n t)] \quad (\text{A7})$$

Al observar la Fig. 18, se puede observar una caída de la corriente que tarda alrededor de 250 μs , esto se debe a una disminución no resuelta de $n_n(t)$ y a efectos del amplificador, ya que éste tiene un tiempo de respuesta de subida y bajada de 1 μs y no se puede realizar ningún análisis en esa zona. De manera que la Ec. A7 se va a utilizar para describir el movimiento posterior de los cúmulos iónicos, debemos primero considerar su distribución espacial, y, dado que $x = W_F t$ tenemos que se convierte en:

$$n_c(x) = n_0 [1 - \exp(-\beta x)], \quad (\text{A8})$$

a partir de esta última expresión, se puede calcular la densidad longitudinal de portadores de carga como:

$$N_c(x, 0) = \frac{\partial n_c}{\partial x} = n_0 \beta \exp(-\beta x) \quad (\text{A9})$$

Una condición que debe tomarse en cuenta es que en el cátodo no hay iones negativos, es decir, $N_c(0, t) = 0$; de modo que la ecuación de continuidad para $N_c(x, t)$ es;

$$\frac{\partial N_c}{\partial t} + W_n \frac{\partial W_c}{\partial x} = 0 \quad (\text{A10})$$

Ahora se debe tomar la transformada de Laplace de $N_c(x, t)$ de manera que

$N_c(s, t) = \mathcal{L}\{N_c(x, t)\}$ y se sustituye en la Ec. A10 para resolverla. Por lo tanto, queda como:

$$\frac{dN_c}{dt} + sW_n N_c = 0 \quad (\text{A11})$$

Al resolver la ecuación tenemos que la solución para ésta es:

$$\ln[N_c(s, t)] = \exp(-sW_n t) + C(s), \quad (\text{A12})$$

Tomando la transformada de Laplace de la ecuación A7, se obtiene la constante de integración $C(s)$ dada por:

$$C(s) = \frac{n_0 \beta}{s + \beta} \quad (\text{A13})$$

Por lo tanto, se obtiene:

$$N_c(x, t) = n_0 \beta \exp(x - W_n t) u(x - v_n t) \quad (\text{A14})$$

donde $u(x - v_n t)$ es la función escalón unitario. Integrando esta nueva expresión multiplicada por la carga elemental (q_0) y dividiendo por el tiempo de formación cumular, obtenemos la corriente en el circuito externo debida a la formación y movimiento cumular[61], como:

$$I_c(t) = \frac{q_0}{T_c} \int_{v_n t}^d N_c(x, t) dx = \frac{n_0 q_0}{T_n} \{1 - \exp[-\beta(d - W_n t)]\}, \quad (\text{A15})$$

donde T_n es el tiempo de tránsito de las especies de cúmulos iónico-moleculares.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Instituto de
Investigación en
Ciencias
Básicas y
Aplicadas



INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

POSGRADO EN CIENCIAS

Cuernavaca, Mor., a 5 de marzo de 2026

DRA. LINA ANDREA RIVILLAS ACEVEDO
COORDINADORA DEL POSGRADO EN CIENCIAS
PRESENTE

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la tesis titulada: ESTUDIO DE LA FORMACIÓN Y MOVILIDAD DE IONES DE INTERÉS BIOLÓGICO que presenta el M. en C. Luis Gerson Pérez Romero (10024372) para obtener el título de Doctorado en Ciencias.

Director de tesis: Dr. Jaime de Urquijo Carmona.

Unidad Académica: Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas (IICBA)

Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos CInC - UAEM	APROBADO	
Dr. Rolando Pérez Álvarez CInC - UAEM	APROBADO	
Dr. Eduardo Basurto Uribe UAM - Azcapotzalco	APROBADO	
Dr. Remigio Trujillo Cabrera ICF - UNAM	APROBADO	
Dra. Sandra Ignacia Ramírez Jiménez CIQ - UAEM	APROBADO	
Dr. Joaquín Escalona Segura CInC - UAEM	APROBADO	
Dr. Aldo Figueroa Lara CInC - UAEM	APROBADO	





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento con firma electrónica UAEM, soportada por el certificado vigente a la fecha de su elaboración y con efectos plenos de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS PUBLICADOS en el ÓRGANO INFORMATIVO UNIVERSITARIO "ADOLFO MENÉNDEZ SAMARÁ" número 117 de fecha 20 de abril de 2021.

Sello electrónico

JOAQUIN ESCALONA SEGURA | Fecha:2026-03-10 15:51:11 | FIRMANTE

R/KDwNs20+//yaMqP12CblyLlipD/w7TtWd3q68EU1xEWrawVBy+ar8fs9g05DPxGJ1C8qu55UFdyC1OFKjtx9DMXkMroX/uxmCythbWPXkSMcf+uIPli4kbX8Rc2/hkLO9+nL8bzGB RmryZ1UmmT6cN+hqPftlyxq4lgadlQUKaZ8uwGK0dlv8tumdO2A+B2hw8bJRlq1PwnwTETw28hCUaV+ZKXKDahTws+egiW1RiJpHdanUE3vxJQoIEBQwq7aL0XaDwVcQNtlh qfXrnJCgoYybRAEP23aFWCRJZTf6zLlbrJZOsnceXI32V3ntGeWR0A8wbayHsB6alcFtVw==

ROLANDO PEREZ ALVAREZ | Fecha:2026-03-10 17:49:45 | FIRMANTE

pUoYR8TC6s2ORXep0jBUvlZDtuuHdBrZNIQwlcZq0+3LQib+/m/otfzc+44C0hudPXeHVVseEf3aX38CoR5WatFbG9nE2JQJcCRzCeSxBOYVIPtNyZ8TOvIwQ8PGXBdj9853Vq mipOZP8rHK1miLNgF2CcjsLJn8mfZOojvCfanmBIYEYWFR2CpsAjHe0xe1/n+vSpmsok/ZfGcc5phv86s0gzhc/JluQ/8+/STUyWYTxusZJHGN7W7YENMUkctqYR3DZBYIuEI1FK xaCzsCk+wjMyYoDeQ+Knejg40zqUisY7722ixiCDbjMo4TPF5WFI5xCVTE9+4yhDeStQ==

EDUARDO BASURTO URIBE | Fecha:2026-03-10 20:40:08 | FIRMANTE

RqbCui4k6s5iO0966oyJw8xiM+NHMRF7xmjzLPbNVmW8sYkg2cqpW8Hn0kJONEJUp1o9/IAt+HTgd7ySmWxHn7SS1rWhLzthxVekFCL/x5w63WYGK9srZJkm7gKlqmGhvMd HILMCT9xbLighyWVfYwJXUBQF9AtCUaob7ioiZgY45OAITLO2jdvJk6td4NL1NLj2/JQ64Marrqb2GgT4FjsUmiGzkOIC5+wM/ZHTW0L8KxvL5g4FkMv9zwhOP14Q1E9rvgeXRY 7d4JbAsUThA2klXXqWypsoTgF5Nsf+Y3rI02YsdAHMw203eZtZbrsblJfUbtznIT7KB0A==

MIGUEL EDUARDO MORA RAMOS | Fecha:2026-03-10 21:25:49 | FIRMANTE

jct5nDf12vBH3X23zaEY42Y4YryXdHICvdSBKsgfNBi94UiWs+MMQ5cQ8ys9CK3VGF+ZwDtKNkIMDeorRh6jDxiTxP8tboIm0Uu7vruwQELygrHkUc8OKYkJreQx6x2UPIouLz+pR 6YDaL3Vahyf2U2wSg2XFgTO7XkBI9cyWYliby8J8gti5uUKFwJPY8ors6jX2P0611rlq3knFhmT0gVuaCR8Saw/RodP8AXMnFHxUUIRYDnztprZbGbYaDeNXibsB+ZcTIpphPeEP 5wY2uKlJEYH5lIKTOrczlpoef9IBGvH3P0GtmMkoDtsFj/esN8iILhcQ3/W0f681g==

ALDO FIGUEROA LARA | Fecha:2026-03-11 10:29:16 | FIRMANTE

i+crJM5oW7cHfzvY4C30NzmemDvy2XlmpWd2OCHgJ79zWl7iIRvBpPDnsM5uvbBHVAcQzJzMaNF1DqWVuK5JeldmKSCI5f/zcOSdnGeSuS6gRY02WwCmv+Ey98m7PWroiZlg 7E6w0wa+7H3/u0003TZZ0WxJgQ0a3tjQWNh9QH0wxG35cOo2Znx8uAYcsUT027/s9zP27ypvFuQGwfj7waQA0yhKLXVJncmy46t3TUe794cx4WF0CqUJgBRwnkq6BP0t6K+L uMF1ZD8OBLUe3DRZ/lmJ+XmR/9mV/Aafegoj23HPm21RNZ5tDvnUIBzv8FToUeElw/cw4MRPAf9g==

SANDRA IGNACIA RAMIREZ JIMENEZ | Fecha:2026-03-11 16:15:02 | FIRMANTE

JBFU9FPOXeUgblxKn9aqtqBnRvUhf+6Pgm94nFU8HjIwKBDjwKpJXKRg57Cq2X5epqAfnY38LX95E97ofO717mVvPT0IH4NDO13b158dZHP72m8Jdv+NIircSv+GbDUGtAaJ9iS N9TPJngAcITbrTCKJBGawQWGCsrZMpxfdB6Cr2InpAXWxiXW8rFEQyDaPITI/HOaOkhd45Qn/Khr9AERMGY0mBs0Skmtm2SFwICQ9+OJ+fm1AtiZudVuhgVwPIju8qODwQyzvB IIIJKPCJRJzx/IXC7LYrG3z+JCBhSchtGPMK1CtYWebY5iIlknQa/vcE3WMMIYzcm44nA==

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



WFCXDqyaE

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/xwGAbxB5OrksoMABx4tCxeMGCmJKrQNO>



UAEM
RECTORÍA
2023-2029