

## CALCULO DE LA CARGA MEDIA DE IONES PESADOS EN MEDIOS GASEOSOS

Jorge M. Rigol Pérez,

### RESUMEN

En este trabajo se calcula la carga media de iones pesados (Sn, Ta, U, Fm) al atravesar un medio gaseoso (O, Ar, Kr) diluido. Con este fin se utiliza el modelo de Bell, que asume una distribución de Tomas-Fermi para los electrones en el átomo. Los resultados se comparan con los datos experimentales.

### ABSTRACT

The mean charge of heavy ions (Sn, Ta, U, Fm) during their travelling through a dilute gas (O, Ar, Kr) are calculated. The Bell's model is used which assume a Tomas-Fermi distribution for the electrons in the atom. The results are compared with the experimental ones.

### INTRODUCCIÓN

En los últimos años, y en parte debido a la creación de nuevos separadores llenos con gas que se dedican a las investigaciones con iones pesados [1, 2, 3, 4], ha aumentado el interés y la necesidad de conocer la carga media de iones pesados al atravesar medios gaseosos diluido ( $\approx 100$  Pa). En un amplio resumen sobre esta temática, realizado por Betz [5], se comparan los distintos métodos utilizados para el cálculo de la carga media de los iones moviéndose en un medio gaseoso.

Dada la complejidad de este proceso es necesario acudir a modelos simplificados como los de Bohr [6], Lamb [7], Knipp y Teller [8], Bell [9], o bien a fórmulas semiempíricas como las obtenidas por Dimitriev y Nikolaev [10]. El modelo de Bell, distinto a los demás, tiene en cuenta el tipo de gas por el que se desplaza el ión. Sin embargo, este modelo quedó en el olvido durante largos años, quizás, por ser demasiado laborioso. Como los resultados experimentales confirman [11] una fuerte dependencia de la carga media del ión con el tipo de gas, se justifica el estudio de las posibilidades del modelo de Bell aplicado a iones más pesados y con menores energías que los obtenidos en el proceso de fisión.

## MODELO DE BELL

De acuerdo con este modelo [9], el valor de la carga ( $q$ ) de un ión corresponderá al valor de la carga media  $\langle q \rangle$ , si para un valor dado de la velocidad del ión, la sección transversal de captura de un electrón por el mismo es igual a la sección transversal de pérdida de un electrón.

Según este modelo, para calcular la sección transversal de captura de un electrón asociado a un átomo del gas por parte del ión que se desplaza con carga ( $q$ ) y velocidad  $v$ , se integra la expresión:

$$(1) \quad \sigma_c(q, v) = \pi \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r_0^2(r) D(r) dr \int_{v_i}^{v_f} p(v_e) P(v, v_0, v_e) dv_e$$

donde  $v_e$  es la velocidad del electrón en el átomo del gas;  $p(v_e)$  es la probabilidad de que el electrón tenga la velocidad  $v_e$ , calculada por el modelo de Tomas-Fermi;  $v_0$  es la velocidad máxima que puede tener un electrón asociado al ión (se calcula por el modelo de Tomás-Fermi),  $P(v, v_0, v_e)$ , es un factor geométrico determinado por las condiciones:

$$(2) \quad P(v, v_0, v_e) = \begin{cases} 0 & \text{módulo } (v-v_e) \geq v_0 \\ 1 & \text{módulo } (v-v_e) < v_0 \\ [(v_0)^2 - (v-v_e)^2] / (4vv_e) & \text{módulo } (v-v_e) < v_0 \end{cases}$$

$$v + v_e \leq v_0$$

$$v - v_e \leq v_0 \leq v + v_e$$

$D(r)dr$  es la probabilidad de encontrar el electrón en el átomo del gas entre  $r$  y  $r + dr$  y  $r_0(r)$  es la distancia electrón-ión tal que la fuerza de atracción del electrón por parte del ión es igual a la fuerza de atracción por parte del átomo del gas. Para calcular  $r_0(r)$  es necesario tener en cuenta el apantallamiento del núcleo del átomo del gas, realizado por los

restantes electrones, lo cual calculamos utilizando la distribución de Tomas-Fermi.

Para calcular la sección transversal de pérdida de electrones se utiliza la conocida expresión para la dispersión de un electrón por un átomo:

$$(3) \quad d\sigma/d\Omega = [8m \pi^2 Z_{\text{eff}} e^2 / h^2]^2 / (\Delta p)^4$$

donde  $Z_{\text{eff}}$  es la carga efectiva del átomo del gas;  $m$  es la masa del electrón y  $\Delta p$  es el cambio de la cantidad de movimiento del electrón durante el choque.

Debe tenerse en cuenta que la carga del átomo de gas varía en la medida en que el ión se acerca al mismo. Esto implica que para calcular la carga efectiva del átomo hay que asumir determinado modelo. En nuestro caso, hemos seguido un camino un poco diferente al de Bell (ver [9]). Calculamos la distancia para la cual la función subintegrando de la expresión (4) muestra un máximo. Esta distancia corresponde a determinado valor del campo eléctrico. Entonces calculamos la distancia desde el núcleo del átomo de gas para la cual el campo creado toma el mismo valor que el obtenido antes. Al valor de la carga capaz de crear tal campo lo hemos considerado como la carga efectiva.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, el valor de la sección transversal para la pérdida de un electrón por parte del ión con carga  $q$  y velocidad  $v$  se calcula de acuerdo con la expresión:

$$(4) \quad \sigma_L(p, v) = \int_{r_{\text{min}}}^{r_{\text{max}}} D(r) dr \int_{\Omega_0} d\sigma(v, v_0, v_e) / d\Omega \cdot d\Omega$$

donde el ángulo sólido  $\Omega_0$  está determinado por factores geométricos (ver [9]) y  $v_0$  se calcula a partir de los potenciales de ionización obtenidos por el método de Hartree-Fock en [12],  $D(r)dr$  es la probabilidad de encontrar el electrón en el ión entre las distancias  $r$  y  $r + dr$ , lo cual se calcula mediante el modelo de Tomas-Fermi.

#### DETERMINACIÓN DE LA CARGA MEDIA

Después que se han calculado las secciones transversales de pérdida y captura de electrones por parte de un ión con carga  $q$  en dependencia de su velocidad, se determina el valor de la velocidad para el cual los valores de ambas secciones transversales coinciden. Este valor se pone, entonces, en correspondencia con el valor de la carga media  $\langle q \rangle = q$ .

Para ilustrar lo dicho, en la Figura 1 presentamos el cálculo de la carga media del ión tántalo-181, en argón. Los valores de  $\sigma_C$  y  $\sigma_L$  están

dados en unidades de  $\pi a_0^2$  donde  $a_0$  es el radio clásico del átomo de hidrógeno. Como se observa, los valores de la velocidad del ión para los cuales su carga media toma los valores 3, 5 y 7 serán 1.5, 1.9 y 2.6 respectivamente (la velocidad se expresa en unidades de  $v_0$  que es igual a  $2,19 \cdot 10^6$  m/s y que corresponde a la velocidad del electrón en el átomo de hidrógeno).

En la Tabla 1 se muestran los valores calculados para la velocidad de los iones de yodo, tántalo, uranio y fermio para los cuales su carga media toma los valores 3, 5 y 7 en los gases oxígeno, argón y kriptón.

### COMPARACION CON LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES

En las Figuras 2 y 3 se comparan los valores calculados de la carga media del yodo y del tántalo en oxígeno con los datos experimentales tomados de [5] y [13]. En las Figuras 4-6 se comparan los resultados teóricos para iones de uranio en oxígeno, argón y kriptón con los resultados experimentales tomados de [13]. En el peor de los casos el valor teórico se diferencia del experimental en menos de un 25 %.

Debe tenerse presente que los criterios como los de Bohr [6] y Lamb [7] que no tienen en cuenta el tipo de gas, pueden arrojar resultados que se diferencien de los experimentales en un 30 - 40 % fundamentalmente para gases ligeros.

Además, en nuestros cálculos se observa una clara dependencia de la carga media con el tipo de gas, lo cual es un hecho establecido experimentalmente [11]. La determinación experimental de la carga media de un ión en un gas se realiza con una exactitud cercana al 5 % [13]. Si tenemos en cuenta que en nuestros cálculos no se utiliza ni un solo parámetro de ajuste o normalización se puede concluir que este modelo se puede utilizar para calcular la carga media de iones más pesados que los fragmentos de fisión y que se desplazan a menores velocidades.

### CONCLUSIONES

El modelo propuesto originalmente por Bell para calcular la carga media, en gases, de los fragmentos de fisión con número atómico entre 40 y 50 y energías entre 80 y 100 Mev se ha empleado para el cálculo de la carga media de iones con número atómico hasta 100 y para energías mucho más bajas y cercanas a 5 Mev.

Tabla 1. Cálculo de la velocidad de algunos iones en distintos gases.

GAS	OXÍGENO			ARGÓN			KRYPTON		
	3	5	7	3	5	7	3	5	7
YODO (53)	1.3	1.8	2.5	1.6	1.9	2.5	1.4	1.8	2.3
TÁNTALO (73)	1.2	1.9	2.6	1.5	1.9	2.6	0.6	1.4	1.9
URANIO (92)	1.1	1.8	2.3	0.8	1.4	1.8	1.1	1.7	2.1
FERMIO (100)	1.4	2.0	2.4	1.6	2.1	2.5	1.4	2.0	2.2

Nota: Los valores 3, 5 y 7 corresponden a las cargas medias de los iones.

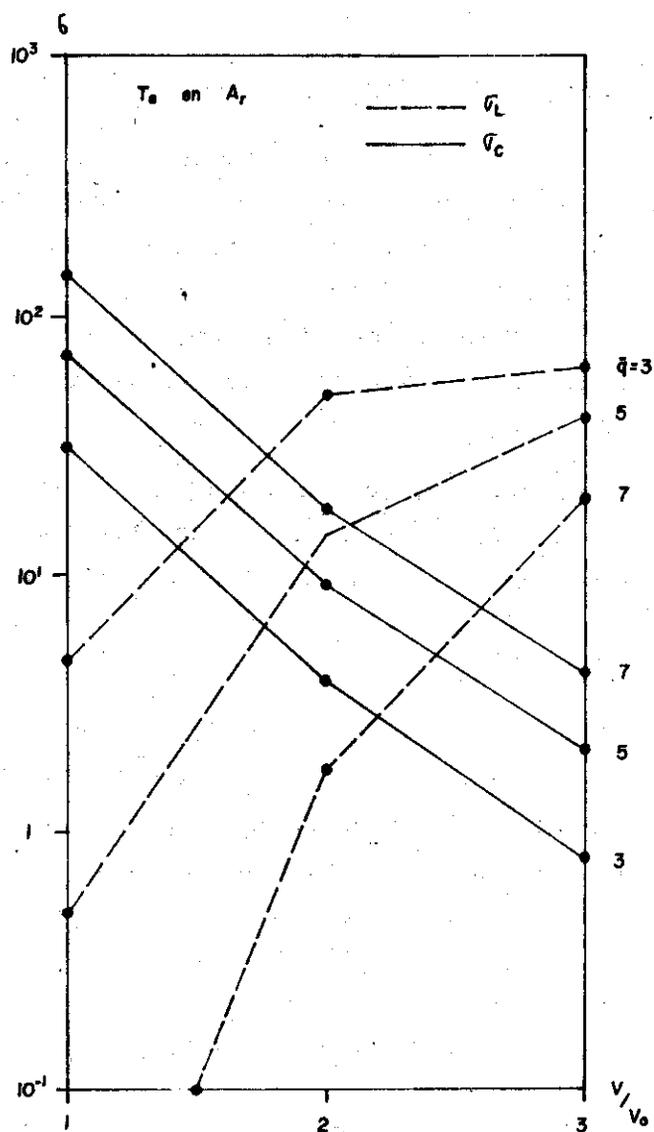


Fig. 1

Figura 1. Dependencia de las secciones transversales de pérdida ( $r_L$ ) y captura ( $r_C$ ) de electrones por parte de iones de tántalo en argón, con la velocidad, para distintos valores de la carga media.

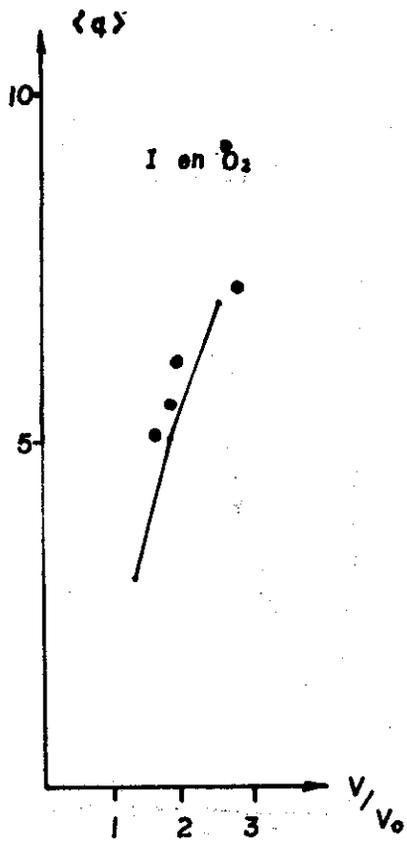


FIG. 2

Figura 2. Dependencia de la carga media de iones de yodo en oxígeno con la velocidad.

Figura 3. Dependencia de la carga media de iones de tántalo en oxígeno con la velocidad.

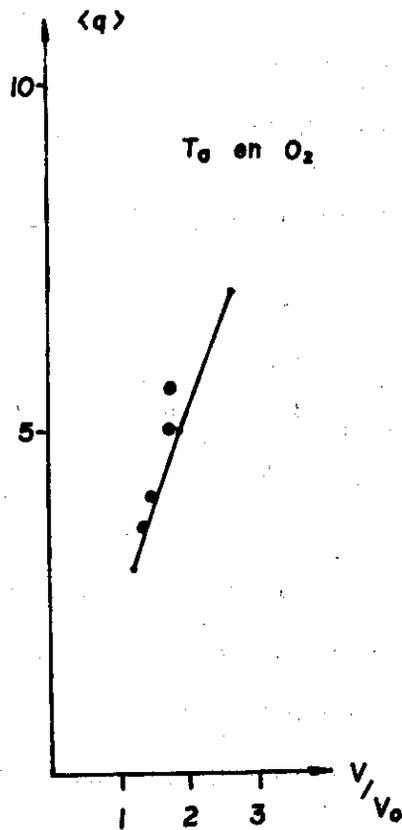


FIG. 3

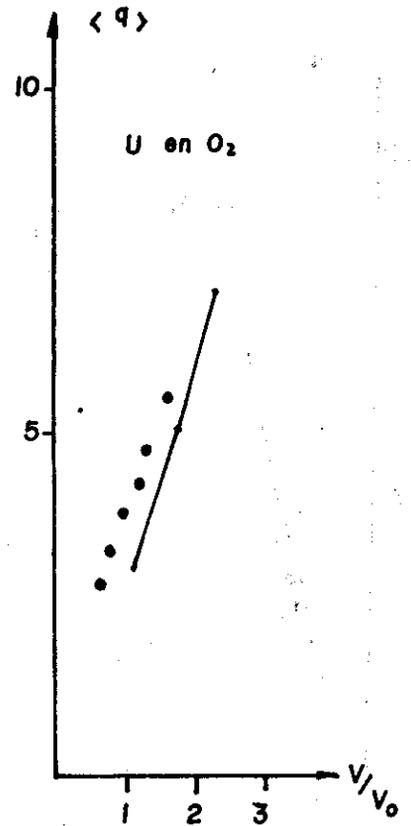


FIG. 4

Figura 4. Dependencia de la carga media de iones de uranio en oxígeno con la velocidad.

Figura 5. Dependencia de la carga media de iones de uranio en argón con la velocidad.

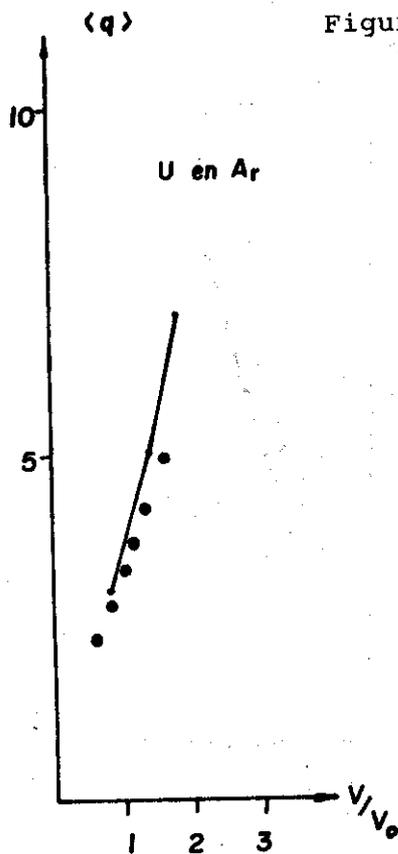


FIG. 5

Figura 6. Dependencia de la carga media de iones de uranio en kripton con la velocidad.

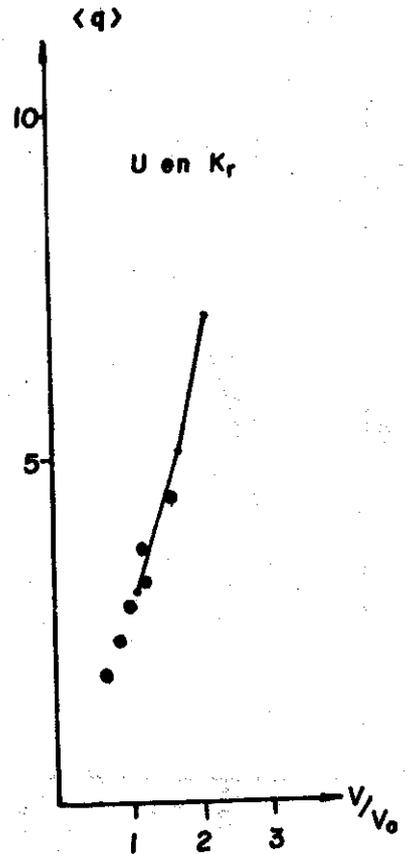


FIG. 6

#### REFERENCIAS

1. GHIORSO, A. et al. (1988): Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A269: 192.
2. MIYATAKE, A. et al. (1987): Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B26: 309.
3. BERTHES, G. (july 1987): G.S.I. Report, ISSN 0171-4546.
4. OGANESIAN, Yu. T. et al. [en prensa]: Nuclear Instruments and Methods.
5. BETZ, H.D. (1972): Rev. of Modern Physics, 44: 465.
6. BOHR, N. (1940): Phys. Rev., 58: 654.
7. LAMB, W.E. (1940): Phys. Rev., 58: 696.
8. KNIPP, T.K., E. TELLER (1941): Phys. Rev., 59: 659.
9. BELL, G.I. (1953): Phys. Rev., 90: 548.
10. DIMITRIEV, I.S., V.S. NIKOLAEV (1964): Zh.E.T. Fiz., 47: 615.
11. VOROBEJEV, N.F. et al. (1988): Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B33: 207.
12. CARLSON, T.A. et al. (1970): Atomic Data, 2: 63.
13. WITTKOWER, A.B. et al. (1973): Phys. Rev., A7: 159.