

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

FACULTAD DE FÍSICA
Departamento de Física de Partículas

DETERMINACIÓN DE SECCIONES EFICACES DE
COLISIÓN DE ELECTRONES DE BAJA ENERGÍA
SOBRE ARGON, METANO Y DIÓXIDO DE CARBONO,
MEDIANTE LA ECUACIÓN DE TRANSPORTE
DE HOLSTEIN-BOLTZMANN

Memoria presentada para
optar al Grado de Licenciado
en Ciencias Físicas por:

Héctor Alvarez Pol

Marzo, 1996

Ignacio Durán Escribano, profesor titular de Física Atómica,
Molecular y Nuclear de la Universidad de Santiago de Compostela,

CERTIFICO: que la memoria titulada "Determinación de secciones eficaces de colisión de electrones de baja energía sobre argón, metano y dióxido de carbono, mediante la ecuación de transporte de Holstein-Boltzmann" ha sido realizada, bajo mi dirección, por Héctor Alvarez Pol en el Departamento de Física de Partículas de esta Universidad y constituye el trabajo de Tesina que presenta para optar al grado de Licenciado en Ciencias Físicas.

Santiago, 2 de Febrero de 1996

Fdo.: Ignacio Durán Escribano

Departamento de Física de Partículas

A mis padres.

Ninguna buena obra queda sin castigo.

Billy Wilder, basándose
en un refrán estadounidense.

*Una tesina es una cosa redonda
que sirve para coger galletas.*

Ariadna, describiendo el trabajo de su padre.

Agradecimientos

Este trabajo no habría visto la luz, después de su largo y doloroso parto, de no ser por un grupúsculo de personas a los que estoy verdaderamente agradecido. A mis superiores directos, Carmen Fernández, Juan Antonio Garzón, y en especial a mi tutor Ignacio Durán, les debo su confianza al admitirme en su grupo de investigación, su tiempo y su comprensión (y comprensión, para que terminara de una vez). Tengo también una deuda especial con Rosalino Lorenzo, que me ayudó con el texto y me introdujo en el abstruso mundo de la convergencia de funciones. María José Tobar me proporcionó abundante material sobre el tema.

No puedo dejar sin mencionar a mis compañeros y amigos, que contribuyeron a este evento científico. A Beatriz Fuentes y a José Juan Blanco, mis inefables compañeros, que trabajaron sobre mi texto, pese a tener ellos trabajos más interesantes (pregúntenle a Beatriz sobre sus picos). Antonio Cardesín me documentó ampliamente sobre las playas de Cancún, información que espero aprovechar en breve. No puedo olvidarme de la agradable conversación que, en todo momento, me proporcionó nuestra experta en informática y cafeterías, Marta Iglesias (también puso a punto el sistema informático, que conste). David Caeiro, Jesús Pose y Oswaldo Diéguez de vez en cuando también se dejaron caer por la vera de mi ordenador, evitando que me convirtiera en mutante informático. Cibrán, Dolores, Lozano, Paco (que todavía me debe cinco duros, de antes de irse a la mili), Diego, Oscar (gracias por el libro de Wilder), pusieron su huella en la tesina (afortunadamente, no de modo literal).

Todo este trabajo se debe fundamentalmente al apoyo de mi familia, mis padres, mis hermanos, y Loly y Ariadna, que repasó los cálculos fundamentales (encontrando no pocos errores).

INDICE

1	Introducción	19
2	Secciones eficaces	21
2.1	Dispersión por un centro de fuerzas	21
2.1.1	Desarrollo en armónicos esféricos	23
2.2	El pozo de potencial. Mínimo de Ramsauer-Townsend	29
2.2.1	Sección eficaz en el límite de bajas velocidades	29
2.2.2	Sección eficaz parcial a orden cero	33
2.2.3	Argon como ejemplo	36
2.3	Métodos experimentales	38
2.3.1	Experimentos en los que se observan secciones eficaces totales	38
2.3.2	Experimentos en los que se observan separadamente las secciones elásticas e inelásticas	40
3	Deriva y difusión de una nube de electrones	43
3.1	Balance de energía	44
3.2	Métodos experimentales de determinación de los parámetros de deriva	47
3.3	La ecuación de Holstein-Boltzmann	49
3.3.1	Contribución elástica	51
3.3.2	Contribución inelástica	54
3.3.3	Simplificaciones	55

3.4	La ecuación de Holstein: resolución y programación	61
3.4.1	Observaciones de la programación	66
4	Estudio de los gases puros	69
4.1	Argon	69
4.1.1	Resultados	74
4.2	Metano	78
4.2.1	Resultados	85
4.3	Dióxido de carbono	88
4.3.1	Resultados	93
5	Estudio de las mezclas	97
5.1	Modificaciones en la ecuación de Holstein	97
5.2	Resultados	98
5.2.1	Mezclas binarias: argon-metano	99
5.2.2	Mezclas binarias: argon-dióxido de carbono	105
5.2.3	Mezclas ternarias: argon-dióxido de carbono-metano . .	113
6	Conclusiones	121
7	Apéndices	123
7.1	Apéndice A: Estudio de las secciones eficaces inelásticas del CO_2 .	123
7.2	Apéndice B: Código del programa	130

LISTA DE FIGURAS

2.1	<i>Sección eficaz de colisión para el pozo de potencial, en el límite de bajas velocidades, representada frente a k_0a.</i>	31
2.2	<i>Comportamiento de los desfases de primer, segundo y tercer orden frente a la velocidad. Se muestran tres ejemplos con distintas intensidades.</i>	34
2.3	<i>Comportamiento de las secciones eficaces parciales y totales de los tres primeros órdenes frente a la velocidad. Se muestran tres ejemplos con distintas intensidades.</i>	35
2.4	<i>Valores de los desfases de los tres primeros órdenes para el argon.</i> 37	
4.1	<i>Sección eficaz de transferencia de momento e inelásticas del argon. Se compara con las ofrecidas por Brown [30], Milloy [31], England [32], Nakamura [33] y Pack [15].</i>	70
4.2	<i>Funciones de densidad electrónica frente a la energía para el argon. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.</i>	73
4.3	<i>Velocidad de deriva en el argon. Los datos experimentales son de Wagner [36], Bowe [37], Pack [34], Robertson [38] y Christophorou [25].</i>	75
4.4	<i>Energía característica de los electrones en el argon. Los datos experimentales son de Townsend [39], Warren [40] y Milloy [41].</i> 76	
4.5	<i>Coefficiente de asimetría obtenido para el argon, el metano y el dióxido de carbono.</i>	77
4.6	<i>Sección eficaz de transferencia de momento del metano. Se compara con las ofrecidas por Schmidt [42] y de Althorpe [43].</i>	79
4.7	<i>Secciones eficaces inelásticas del metano. Se compara con las ofrecidas por Schmidt [42] y de Althorpe [43].</i>	80

4.8	<i>Funciones de densidad electrónica frente a la energía en el metano. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.</i>	83
4.9	<i>Velocidad de deriva del metano. Los datos experimentales son de Wagner [36], Mathieson [8], Jean-Marie [46], Puiz [47], Skelding [48], Fulda-Quenzer [49] y Kunst [26].</i>	86
4.10	<i>Energía característica de los electrones en el metano. Los datos experimentales son de Duncan [50], Skelding [48], Fulda-Quenzer [49], Haddad [51], Millican [52] y Schmidt [45].</i>	87
4.11	<i>Sección eficaz del dióxido de carbono. Se compara con las ofrecidas por Palladino [9]</i>	89
4.12	<i>Funciones de densidad electrónica frente a la energía en el dióxido de carbono. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.</i>	92
4.13	<i>Velocidad de deriva del CO₂. Los datos experimentales son de Elford [55], Binnie [56] y Christophorou [54].</i>	94
4.14	<i>Energía característica de los electrones en el CO₂. Los datos experimentales son de Rees [57] y de Skelding [48].</i>	95
5.1	<i>Velocidad de deriva de la mezcla con 10% de argon y 90% de metano. Los datos experimentales son de Mathieson [8], Christophorou [25], Jean-Marie [46], Skelding [48], Yamashita [59] y Kunst [26].</i>	100
5.2	<i>Velocidad de deriva de la mezcla argon-metano. Los datos experimentales son de Mathieson [8], Jean-Marie [46] y Skelding [48].</i>	101
5.3	<i>Velocidad de deriva de la mezcla argon-metano. Los datos experimentales son de Jean-Marie [46], Puiz [47] y Wong [58]. . .</i>	102
5.4	<i>Energía característica de las mezclas argon-metano. Los datos experimentales son de Skelding [48], Fulda-Quenzer [49] y Schmidt [45].</i>	103
5.5	<i>Coefficiente de asimetría obtenido para las mezclas argon-metano.</i>	104
5.6	<i>Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de English [62], Lehraus [63], Mathieson [64], Chang [61] y Zhao [60].</i>	106

5.7	<i>Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de English [62], Allison [65], Lehraus [63], Ma [66], Puiz [47], Chang [61] y Zhao [60].</i>	107
5.8	<i>Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Ma [66], Peisert [35] y Chang [61].</i>	108
5.9	<i>Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Chang [61] y Zhao [60].</i>	109
5.10	<i>Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Zhao [60].</i>	110
5.11	<i>Energía característica de las mezclas argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Skelding [48].</i>	111
5.12	<i>Coefficiente de asimetría obtenido para las mezclas argon-dióxido de carbono.</i>	112
5.13	<i>Velocidad de deriva de las mezclas argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6. Los datos experimentales son de Chang [61].</i>	114
5.14	<i>Energías características de las mezclas argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6.</i>	115
5.15	<i>Desviaciones típicas por centímetro de deriva de las mezclas argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6.</i>	116
5.16	<i>Funciones de densidad electrónica frente a la energía en las mezclas ternarias indicadas. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.</i>	117
5.17	<i>Coefficiente de asimetría de la mezcla argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6.</i>	118
7.1	<i>Secciones eficaces del CO₂ ajustadas en este trabajo. Véase el texto en lo referente a los números de las secciones eficaces. . .</i>	124
7.2	<i>Velocidad de deriva de la mezcla con un 90% de argon y un 10% de dióxido de carbono. Véase la explicación en el texto.</i>	126

- 7.3 *Funciones de densidad electrónica de la mezcla con un 90% de argón y un 10% de dióxido de carbono. La gráfica de la izquierda se corresponde con las funciones conseguidas con las secciones eficaces completas, mientras que en la de la derecha se han suprimido las secciones eficaces marcadas con un 1 en la gráfica 7.1. Cada curva representa la función obtenida a un campo distinto, el indicado en la gráfica, en V/cm torr. 127*
- 7.4 *Funciones de densidad electrónica de la mezcla con un 90% de argón y un 10% de dióxido de carbono. La gráfica de la izquierda se corresponde con las funciones derivadas de las secciones de la gráfica 7.1, suprimiendo las secciones inelásticas marcadas con un 1, mientras que en la de la derecha se han suprimido además las secciones eficaces marcadas con un 2. Cada curva representa la función obtenida a un campo distinto, el indicado en la gráfica, en V/cm torr. 129*

LISTA DE TABLAS

4.1	<i>Sección eficaz de transferencia de momento del argon. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2.</i>	72
4.2	<i>Sección eficaz de transferencia de momento del metano. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2.</i>	81
4.3	<i>Primera sección eficaz inelástica del metano. Las energías aparecen en eV, y la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2.</i>	82
4.4	<i>Segunda sección eficaz inelástica del metano. Las energías aparecen en eV, y la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2.</i>	82
4.5	<i>Sección eficaz de transferencia de momento del CO_2. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10^{-15}cm^2.</i>	90
4.6	<i>Primera sección eficaz inelástica del CO_2. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2.</i>	91
4.7	<i>Segunda sección eficaz inelástica del CO_2. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2.</i>	91

Capítulo 1

Introducción

En el año 1908, Townsend utilizó la medida de la velocidad de deriva y del coeficiente de difusión de una nube de electrones que se mueven en el seno de un gas, sometidos a un campo eléctrico, para obtener expresiones aproximadas de secciones eficaces. Hasta la llegada de la mecánica cuántica, que permite el cálculo teórico de las secciones eficaces, los métodos de Townsend, y sus posteriores mejoras, fueron la única manera de obtener las secciones eficaces de los gases. Hoy en día estos trabajos, con diversas modificaciones, mantienen su importancia en la determinación de secciones eficaces a muy bajas energías, por debajo de la decena de eV, donde otros métodos, como el de dispersión de haces de electrones, no consiguen la precisión requerida.

Este trabajo se ha desarrollado en el marco de la labor de investigación del Grupo de Desarrollo de Detectores del Departamento de Física de Partículas. En alguna forma es continuación del trabajo que María José Tobar Vidal realizó en este Grupo.

En el presente texto, realizaremos un análisis de los resultados experimentales que se tienen de los parámetros de deriva de los electrones en distintos gases. Utilizando la ecuación de Holstein-Boltzmann, nos centraremos en la determinación de las secciones eficaces de interacción de electrones de baja energía, con los gases comunmente utilizados en cámaras de deriva. Para ello se ha desarrollado un método de prueba-error en el que se hacen variar las secciones eficaces. De ellas se obtienen los parámetros de deriva de electrones en los gases, que pueden compararse con los resultados obtenidos experimentalmente.

Tras esta introducción, en el segundo capítulo se deducen las relaciones teóricas que justifican la forma de las secciones eficaces de los gases estudiados en el trabajo. Se realiza un estudio de desfases en el análisis de ondas parciales, con los resultados que depara un pozo de potencial, y los obtenidos para un gas de los utilizados, el argón. También se presentan los métodos de obtención de las secciones eficaces, experimentalmente. El tercer capítulo presenta un análisis inicial del problema a tratar, y una explicación de algunos de los métodos por los que los autores que se mencionan en el texto obtuvieron sus parámetros de deriva. Se realiza la deducción completa de la ecuación de Holstein-Boltzmann, en la forma en la que es utilizada a lo largo del trabajo. Igualmente se explica cómo se ha implementado la ecuación, y todos los detalles concernientes a su programación. En el cuarto capítulo se aplica el programa a los gases argón, metano y dióxido de carbono puros. De esta forma se analizan los datos sobre parámetros de deriva, y se llega a las secciones eficaces que, en cada caso, satisfagan mejor los ajustes. Lo mismo se realiza en el capítulo quinto, pero con las mezclas binarias que forman el argón y el metano o el dióxido de carbono, y también con mezclas ternarias de los tres componentes. Tras las conclusiones, se incluye un apéndice explicativo del método de trabajo. Variando las secciones eficaces inelásticas del dióxido de carbono se llega a diferentes velocidades de deriva. Sólo un estudio de como se comportan las distribuciones electrónicas nos permitirá intuir qué es lo que pasa entre los electrones y las moléculas del gas. En otro apéndice se muestra el programa utilizado.

Capítulo 2

Secciones eficaces

2.1 Dispersión por un centro de fuerzas

En esta sección deduciremos de forma teórica aquellas expresiones que explican el comportamiento de un proceso de dispersión. A partir de las expresiones de las funciones de onda que describen el haz de partículas, y de ciertas elaboraciones, obtendremos expresiones para las secciones eficaces de dispersión. El conocimiento de estos parámetros conduce a la explicación completa del fenómeno de dispersión de un haz de partículas por un centro dispersor. Se pueden encontrar discusiones sobre estos razonamientos, por ejemplo, en los libros de Mott [1], Crompton [2], Massey [3], o en el artículo escrito por Hooper et al. [4]. Consideraremos la dispersión de un haz de partículas cargadas, que en nuestro caso serán electrones, por una región pequeña y esféricamente simétrica en donde la energía potencial es distinta de cero. Consideraremos esta región como el átomo, y denotaremos $V(r)$ a la energía potencial de una partícula a una distancia r del núcleo. En los experimentos de dispersión de un haz de partículas, se mide el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo en un área dS colocada a una distancia r de los átomos. Para ello se lanza un haz contra un blanco, colocando un detector móvil, o una serie de detectores a una distancia determinada del blanco. Con el fin de realizar el cálculo teórico, supongamos que sólo existe un único átomo que disperse los electrones. Entonces el número de partículas que atraviesan la superficie dS , será proporcional al área de esta superficie, e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia r entre el átomo y la superficie. O lo que es lo mismo, será proporcional al ángulo sólido $d\omega$ subtendido por la

superficie dS desde el centro del átomo. El número de partículas dispersadas en el ángulo sólido $d\omega$ será también proporcional a la corriente de electrones que atraviese la unidad de área del haz incidente. Sea θ el ángulo existente entre las direcciones asintóticas de la partícula incidente antes y después de su colisión. Si se supone que N partículas cruzan una superficie unitaria por unidad de tiempo en el haz incidente, el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo según un ángulo θ , en el ángulo sólido $d\omega$ es

$$NI(\theta)d\omega \quad (2.1)$$

Se puede ver que $I(\theta)d\omega$ tiene las dimensiones de un área, y la denominaremos sección eficaz efectiva de dispersión en el ángulo sólido $d\omega$ o más comunmente como sección eficaz diferencial de dispersión.

El análisis que realizaremos es aplicable a cualquier tipo de partícula, cargada o no, aunque lo referiremos exclusivamente a los electrones. Sean (x, y, z) las coordenadas cartesianas del electrón en cada momento, y sean (r, θ, ϕ) sus coordenadas en el sistema esférico usual, donde se escoge el eje z como el origen del ángulo θ . Supongamos que el átomo contra el que el electrón colisiona está situado en el origen, y por tanto un electrón que se encuentre a una distancia r del origen tendrá un potencial $V(r)$. Asumiremos que el potencial $V(r)$ tiende a cero más rápido que $1/r$, lo que deja fuera del análisis el caso de la dispersión por un potencial de tipo coulombiano. Un análisis de este tipo de potencial debe realizarse separadamente, debido a los problemas de convergencia que presenta en sus cálculos. Supóngase que un haz de electrones se desplaza con velocidad v de izquierda a derecha según el eje z . Representaremos este haz de electrones con una onda plana e^{ikz} donde k es igual a

$$k = \frac{2\pi mv}{h} = \frac{mv}{\hbar} \quad (2.2)$$

donde v y m son la velocidad y la masa del electrón, y h la constante de Planck (\hbar es la constante de Planck reducida). Esta onda representa una densidad unitaria de electrones por unidad de volumen, y por tanto un flujo de v electrones que atraviesan la unidad de área por unidad de tiempo.

Necesitamos una expresión para la onda dispersada, que nos permita, dentro de un comportamiento general adecuado (simetría esférica), tener suficiente flexibilidad para estudiar la dispersión. De esta forma, cuando la onda sea dispersada por un átomo, su amplitud en el punto (r, θ, ϕ) tendrá la forma

$$r^{-1}f(\theta)e^{ikr} \quad (2.3)$$

El problema se reduce a encontrar la función $f(\theta)$. A partir de ella se puede deducir el número de dispersiones por ángulo sólido y por unidad de tiempo.

El número de electrones de la onda dispersada que cruzan un elemento de área dS en el punto (r, θ, ϕ) es

$$vr^{-2}|f(\theta)|^2 dS \quad (2.4)$$

por unidad de tiempo. De este modo, si en el haz incidente un electrón atraviesa un área unitaria por unidad de tiempo, la dispersión $I(\theta)d\omega$ en el ángulo sólido $d\omega$, también por unidad de tiempo, es igual a $|f(\theta)|^2 d\omega$. Entonces la sección eficaz diferencial de dispersión resulta ser

$$I(\theta) = |f(\theta)|^2 \quad (2.5)$$

El número de partículas dispersadas entre los ángulos θ y $\theta + d\theta$ es

$$2\pi|f(\theta)|^2 \sin\theta d\theta \quad (2.6)$$

en la que 2π surge de la integración en el ángulo azimutal, donde la función $f(\theta)$ no muestra ninguna dependencia por su simetría. Para solucionar el problema de dispersión es necesario encontrar una función ψ , solución de la ecuación de ondas, que se comporte a grandes distancias del átomo como una onda incidente plana, representando la parte del haz no dispersada, más una onda que represente la parte dispersada. Por tanto la solución para valores de r grandes debe ser

$$\psi(r, \theta) \rightsquigarrow e^{ikz} + r^{-1}e^{ikr} f(\theta) \quad (2.7)$$

La ecuación de ondas que debe de satisfacer ψ se corresponde con la ecuación de Schrödinger, y se puede escribir

$$\nabla^2\psi + [k^2 - U(r)]\psi = 0 \quad (2.8)$$

donde

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2}V(r) \quad (2.9)$$

Antes de considerar la solución de la ecuación, debemos introducir ciertos desarrollos en esféricos armónicos cuya explicación se encuentra en el siguiente apartado.

2.1.1 Desarrollo en armónicos esféricos

La onda plana e^{ikz} es una solución de la ecuación de ondas

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = 0 \quad (2.10)$$

Esta misma ecuación puede resolverse en coordenadas polares esféricas. Realizando los cambios de variable pertinentes se encuentra que la solución es

$$\psi(r, \theta) = P_l(\cos\theta) f_l(r) \quad (2.11)$$

donde f_l es la solución de la ecuación auxiliar (ecuación de Legendre)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df}{dr} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f = 0 \quad (2.12)$$

y donde $P_l(\cos\theta)$ es el l -ésimo coeficiente de Legendre. La ecuación 2.12 puede resolverse en series de potencias. Si se hace de esta forma, se encuentran dos soluciones: la primera de ellas es una serie de potencias que comienza en (o tiene como factor común) r^l , mientras que la segunda comienza en r^{-l-1} . Ambas soluciones son expresables en términos de las funciones de Bessel. Denotaremos por $f_l(r)$ la solución de la ecuación 2.12 que sea acotada en $r = 0$. Con esta condición, $f_l(r)$ queda determinada, salvo una constante multiplicativa.

Dadas las soluciones de la ecuación 2.10, cualquier combinación lineal de estas es también solución de la ecuación. Sean A_l una serie de constantes arbitrarias. Entonces según la afirmación anterior se tiene que

$$\sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) f_l(r) \quad (2.13)$$

se puede considerar como la solución más general de la ecuación 2.10, con simetría axial (sin dependencia en ϕ) y finita en el origen (se exige que la función de onda que describa el haz de electrones cumpla estos requisitos).

Por tanto podremos expandir de esta forma la onda plana e^{ikz} , de manera que

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) f_l(r) \quad (2.14)$$

La manera de obtener los coeficientes A_l adecuados es multiplicando ambos miembros de la igualdad por $P_l(\cos\theta) \sin\theta$ e integrar en la variable θ desde 0 hasta π . Una integral resulta inmediata tras un cambio de variable, ($t = \cos\theta$) obteniéndose

$$\frac{2}{2l+1} A_l f_l(r) = \int_{-1}^{+1} e^{ikrt} P_l(t) dt \quad (2.15)$$

donde f_l está definido salvo una constante multiplicativa, y por tanto A_l no puede determinarse hasta que la constante se determine. Se puede definir exactamente f_l por medio de su desarrollo asintótico para r grandes. Integrando

por partes el miembro derecho de la ecuación 2.15, obtenemos

$$\int_{-1}^{+1} e^{ikrt} P_l(t) dt = \frac{1}{ikr} [e^{ikrt} P_l(t)]_{t=-1}^{t=+1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^{+1} e^{ikrt} P_l'(t) dt \quad (2.16)$$

Para poder proseguir los cálculos hay que realizar una serie de aproximaciones. Podemos ver que el segundo término es del orden $1/r^2$. Por ello, para valores de r grandes, se puede despreciar y queda

$$\frac{2}{2l+1} A_l f_l(r) \rightsquigarrow \frac{1}{ikr} [e^{ikrt} P_l(t)]_{t=-1}^{t=+1} \quad (2.17)$$

Como $P_l(1) = 1$, $P_l(-1) = (-1)^l$, la parte de la derecha de la expresión 2.17 es igual a

$$2i^l (kr)^{-1} \text{sen}(kr - \frac{1}{2}l\pi) \quad (2.18)$$

De este modo, si determinamos f_l completamente, estipulando que sea la solución de la ecuación 2.12 con el comportamiento asintótico

$$f_l(r) \rightsquigarrow (kr)^{-1} \text{sen}(kr - \frac{1}{2}l\pi) \quad (2.19)$$

nos queda que A_l debe ser igual a $(2l+1)i^l$, y así

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)i^l P_l(\cos\theta) f_l(r) \quad (2.20)$$

con lo que tenemos el desarrollo en armónicos buscado.

Consideremos ahora la ecuación de ondas 2.8, donde se introduce el potencial que provoca la dispersión de los electrones en el campo de un átomo. Realizando un análisis similar al anterior, se puede observar que la solución general con simetría axial (independiente de ϕ) será, en este caso

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) L_l(r) \quad (2.21)$$

donde de nuevo A_l son constantes arbitrarias, mientras que los L_l son las soluciones de la ecuación

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dL_l}{dr}) + [k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}] L_l = 0 \quad (2.22)$$

Como en el caso de la ecuación 2.12, tendremos dos soluciones, una finita en el origen, y la otra infinita. Debemos elegir la constante A_l de modo que la función ψ , dada por la ecuación 2.21, represente una onda incidente más

una onda dispersada, teniendo de este modo la forma asintótica que ofrece la función de la ecuación 2.7. Además, se debe exigir a la función de onda que describa el comportamiento de los electrones, que sea finita en todas partes, incluso en el origen. Entonces cogemos aquella solución de la ecuación 2.22 que sea finita en el origen, único punto con problemas del desarrollo. Con esto $L_l(r)$ queda perfectamente definida salvo una constante multiplicativa arbitraria. Si realizamos el cambio

$$L_l(r) = \frac{G_l(r)}{r} \quad (2.23)$$

entonces la ecuación 2.22 se reduce a

$$\frac{d^2 G_l}{dr^2} + [k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}]G_l = 0 \quad (2.24)$$

Debe observarse que, para r grande, los dos últimos términos entre corchetes tienden a cero, con lo que, para este caso, se espera que el comportamiento asintótico de cualquier solución G sea del tipo

$$G_l \rightsquigarrow A \operatorname{sen}(kr + \epsilon) \quad (2.25)$$

donde tanto A como ϵ son constantes. Para llegar a la expresión completa de las funciones $G_l(r)$, exigiremos que las soluciones de la ecuación 2.24 tengan la forma

$$G_l(r) = u(r)e^{ikr} \quad (2.26)$$

donde en todo el desarrollo se utilizará la parte real o compleja de la función $G_l(r)$. Sustituyendo en la ecuación 2.24, se obtiene:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + 2ik \frac{du}{dr} - [U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}]u = 0 \quad (2.27)$$

Observando el comportamiento esperado de la función $G(r)$, indicado en la ecuación 2.25, se llega a que, para valores grandes de r , la función $u(r)$ debe ser prácticamente constante, y por tanto

$$\frac{d^2 u}{dr^2} \ll k \frac{du}{dr} \quad (2.28)$$

con lo que podemos despreciar el primer término de la izquierda, e integrar la ecuación 2.27, obteniendo

$$2ik \ln u = \int [U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}] dr \quad (2.29)$$

con lo que

$$u(r) = e^{\frac{-i}{2k} \int [U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}] dr} \quad (2.30)$$

El término de la derecha tiende a un valor constante para r grande si y sólo si $U(r)$ tiende a cero más rápido que $1/r$. De esta forma, para campos que caen más rápido a cero que los coulombianos, la solución $G(r)$ cumple la condición de que su forma asintótica para valores de r grandes tenga la forma que se muestra en la ecuación 2.25. Ahora podemos retroceder en los pasos seguidos, y escribir la solución de la ecuación 2.22. Esta será

$$L_l(r) = \frac{G_l(r)}{r} = \frac{u(r)e^{ikr}}{r} = \frac{1}{r} e^{ikr - \frac{i}{2k} \int [U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}] dr} \quad (2.31)$$

Visto lo anterior, la solución de la ecuación 2.22, que es finita en el origen, tiene la forma

$$L_l(r) = \frac{C}{r} \text{sen}(kr - \frac{1}{2}l\pi + \eta_l) \quad (2.32)$$

donde C es una constante arbitraria, y η_l es una función que depende de k y de $U(r)$. La constante η_l recibirá el nombre de desfase de orden l . El término $-\frac{1}{2}l\pi$ se añade para que, en el caso de que el potencial $U(r)$ sea cero, el desfase η_l sea también cero. Para fijar la constante arbitraria C , se define $L_l(r)$ de forma que sea la solución acotada en todo punto de la ecuación 2.22 que tenga la forma asintótica

$$\frac{1}{kr} \text{sen}(kr - \frac{1}{2}l\pi + \eta_l) \quad (2.33)$$

Para encontrar la solución completa, nos queda determinar las constantes A_l en la ecuación 2.21. Utilizaremos la información que supone el saber cómo se comportan las ondas dispersadas por el potencial. Si sustraemos la onda plana incidente, expresada en armónicos en la ecuación 2.20, de la solución general con simetría axial, obtendremos la expresión de la onda dispersada. Se deben elegir las constantes A_l de forma que corresponda realmente con una onda dispersada, esto es, de modo que no haya términos del tipo $r^{-1}e^{-ikr}$ en el desarrollo asintótico. Estos términos corresponderían a ondas convergentes hacia el centro de coordenadas. Por esto, se debe exigir, para todo valor de l , que, cuando r sea grande, se tenga

$$A_l L_l(r) - (2l+1)i^l f_l(r) \rightsquigarrow C_l r^{-1} e^{ikr} \quad (2.34)$$

donde C_l es de nuevo una constante. Llegados a este punto, y con las expresiones asintóticas de L_l y f_l (ecuaciones 2.33 y 2.19, respectivamente), se obtiene para la parte izquierda de la ecuación anterior

$$\frac{e^{ik\rho}}{2ikr} [A_l e^{i\eta_l} - (2l+1)i^l] - \frac{e^{-ik\rho}}{2ikr} [A_l e^{-i\eta_l} - (2l+1)i^l] \quad (2.35)$$

con la notación

$$k\rho = kr - \frac{1}{2}l\pi \quad (2.36)$$

Se elige, por tanto, A_l para que el segundo término se anule, con lo que

$$A_l = (2l + 1)i^l e^{i\eta_l} \quad (2.37)$$

Con esto, la función de ondas que representa la onda incidente y la onda dispersada queda determinada, tomando la expresión

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)i^l e^{i\eta_l} L_l(r) P_l(\cos\theta) \quad (2.38)$$

Yendo por partes, y recordando expresiones anteriores, podemos identificar como correspondiente a la forma asintótica de la onda dispersada el término

$$\frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \quad (2.39)$$

con

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)[e^{2i\eta_l} - 1] P_l(\cos\theta) \quad (2.40)$$

Esto nos da la expresión para la amplitud de la onda dispersada. Como $f(\theta)$ es complejo, la intensidad dispersada $I(\theta)$ viene dada por el cuadrado del módulo, esto es, por $A^2 + B^2$, donde

$$A = \frac{1}{2k} \sum (2l + 1)[\cos 2\eta_l - 1] P_l(\cos\theta) \quad (2.41)$$

$$B = \frac{1}{2k} \sum (2l + 1)\sin 2\eta_l P_l(\cos\theta) \quad (2.42)$$

En el caso de que el potencial $V(r)$ de la expresión 2.9, corresponda al campo de Coulomb, las series pueden expresarse en términos de funciones analíticas. Además, en este caso la intensidad de dispersión resulta ser la misma que la calculada clásicamente. En otros casos, como en el desarrollado en el apartado 2.2, los resultados clásicos no coinciden con los del análisis cuántico.

La sección eficaz elástica total Q de un átomo para los electrones de una velocidad determinada (correspondiente a una energía determinada), se define como el número total de electrones dispersados elásticamente por el átomo, por unidad de tiempo, a partir de un haz de intensidad unidad, esto es, un haz tal que un electrón cruza un área unitaria por unidad de tiempo. En la práctica, se mide el número de dispersiones a partir de un ángulo mayor que uno dado θ_0 , pero como $f(\theta)$ está acotado en $\theta = 0$ para los campos atómicos,

Q es muy insensible a la elección de θ_0 , y por tanto θ_0 puede ser tomado como cero. La fórmula para la sección eficaz elástica total, después de su integración en la variable azimutal, es

$$Q = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin(\theta) d\theta \quad (2.43)$$

lo que tras la sustitución del valor de $f(\theta)$ lleva a

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l \quad (2.44)$$

2.2 El pozo de potencial. Mínimo de Ramsauer-Townsend

Un pozo de potencial es un modelo aproximado, cercano al comportamiento de potenciales físicos de interés, de fácil estudio teórico. Lo utilizaremos como primera aproximación al estudio de ciertos átomos. Será una aproximación especialmente adecuada en el caso de los gases nobles, debido a que el potencial generado por un átomo de un gas noble cae mucho más rápidamente con la distancia que ningún otro átomo, y se puede esperar que su comportamiento sea similar al del pozo de potencial esférico.

Tomemos como potencial de la partícula en el campo

$$V(r) = \begin{cases} -D & \text{si } r < a \\ 0 & \text{si } r > a \end{cases} \quad (2.45)$$

donde D es una constante positiva. Este ejemplo muestra un comportamiento que, en algunas de sus características, es común a otros potenciales atractivos, con la condición de que decaigan más rápidamente que r^{-2} , para valores grandes de r .

2.2.1 Sección eficaz en el límite de bajas velocidades

Supongamos que la longitud de onda asociada al electrón λ es mucho más grande que la distancia a , de modo que podamos despreciar todos los desfases η_l excepto el primero η_0 .

Para encontrar η_0 tenemos que encontrar la forma asintótica de la función $G(r)$, solución de (véanse las ecuaciones 2.9 y 2.24)

$$\frac{d^2G}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)G = 0 \quad (2.46)$$

que se anule en el origen (de modo que $r^{-1}G$ sea acotado). La solución es

$$A \operatorname{sen}(kr) \quad (r < a) \quad (2.47)$$

$$B \operatorname{sen}(kr + \eta_0) \quad (r > a) \quad (2.48)$$

donde

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2.49)$$

$$k'^2 = k^2 + k_0^2 \quad (2.50)$$

$$k_0^2 = \frac{2mD}{\hbar^2} \quad (2.51)$$

Las constantes A y η_0 deben elegirse de modo que G y $\frac{dG}{dr}$ sean continuos en $r = a$, esto es, de modo que

$$A \operatorname{sen}(ka) = B \operatorname{sen}(ka + \eta_0) \quad (2.52)$$

$$Ak' \cos(ka) = Bk \cos(ka + \eta_0) \quad (2.53)$$

De estas dos ecuaciones se llega a

$$\eta_0 = \operatorname{arctg}\left(\frac{k}{k'} \operatorname{tg}ka\right) - ka \quad (2.54)$$

Según la velocidad de los electrones tienda a cero, η_0 , en general, también tiende a cero, como se deduce del estudio de la ecuación 2.54. La sección eficaz de dispersión, que en este caso toma el valor

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \operatorname{sen}^2 \eta_0 \quad (2.55)$$

tiende al límite finito

$$Q = 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{tg}k_0 a}{k_0 a} - 1 \right)^2 \quad (2.56)$$

Sin embargo hay casos excepcionales; si $k_0 a = \operatorname{tg}k_0 a$, el límite se anula, mientras que si $k_0 a$ es un múltiplo impar de $\frac{1}{2}\pi$, η_0 no tiende a cero con k , y la sección eficaz de dispersión tiende a infinito. Ello se puede observar en la

Figura 2.1: *Sección eficaz de colisión para el pozo de potencial, en el límite de bajas velocidades, representada frente a k_0a .*

figura 2.1, donde se ha representado la sección eficaz de colisión en función de los parámetros del potencial.

Este comportamiento de la sección eficaz, en el límite de bajas velocidades, se puede relacionar con la distribución de niveles de energía permitidos, con momento angular nulo dentro del pozo de potencial. Al igual que en el caso anterior, se debe exigir la continuidad de las soluciones y sus derivadas en $r = a$. Por tanto, la existencia de un nivel de energía $-E_1$ implica las soluciones

$$A \sin(k''r) \quad (r < a) \quad (2.57)$$

$$B e^{\beta r} \quad (r > a) \quad (2.58)$$

y con las condiciones de continuidad de las soluciones y derivadas

$$A \sin(k''a) = B e^{-\beta a} \quad (2.59)$$

$$A k'' \cos(k''a) = -B \beta e^{-\beta a} \quad (2.60)$$

donde en este caso

$$\beta^2 = \frac{2mE_1}{\hbar^2} \quad (2.61)$$

$$k''^2 = k_0^2 - \beta^2 \quad (2.62)$$

$$k_0^2 = \frac{2mD}{\hbar^2} \quad (2.63)$$

A partir de las ecuaciones anteriores se obtiene

$$\frac{\operatorname{tg} k''a}{k''} = \frac{-1}{\beta} \quad (2.64)$$

siendo las soluciones aquellas β que determinan los niveles de energía. Ahora bien, si exigimos que $E_1 = 0$ sea un nivel de energía permitido, entonces $k_0 a$ debe ser un múltiplo impar de $\frac{1}{2}\pi$, la misma condición que para la existencia de un límite no acotado de la sección eficaz de dispersión a bajas velocidades. Las sucesivas discontinuidades infinitas se corresponden con más niveles de energía permitidos, según alcancemos los múltiplos impares de $\frac{1}{2}\pi$. Como ejemplo, vemos que cuando $k_0 a = \frac{1}{2}\pi$, sólo está permitido un nivel de energía ($E_1 = 0$), mientras que, cuando se alcanza el valor $k_0 a = \frac{3\pi}{2}$, hay dos niveles de energía, siendo el de mayor energía $E_1 = 0$, y así sucesivamente. Este comportamiento cuasiperiódico y singular de la sección eficaz en el límite de bajas velocidades ocurre también en otros potenciales atractivos.

2.2.2 Sección eficaz parcial a orden cero

Teniendo en cuenta la expresión 2.54 de la sección anterior, tenemos que

$$\lim_{k \rightarrow 0} \eta_0 = \lim_{k \rightarrow 0} [\arctg(\frac{k}{k_0} \operatorname{tg} k_0 a) - ka] \quad (2.65)$$

Este límite queda indefinido para múltiplos enteros de π , de modo que

$$\lim_{k \rightarrow 0} \eta_0 = s\pi \quad \text{si } k_0 a \neq \frac{1}{2}\pi \quad (2.66)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \eta_0 = \frac{1}{2}(2s+1)\pi \quad \text{si } k_0 a = \frac{1}{2}\pi \quad (2.67)$$

donde s toma valores enteros comenzando por el cero.

Es conveniente quitar esta multiplicidad, especificando que η_0 tienda a cero según la velocidad, y por tanto k , tiendan a ∞ . El límite de la expresión 2.54, cuando $k \rightarrow \infty$, es cero. Si permitimos que η_0 cambie de forma continua según k decrece, encontramos que en el límite cuando $k \rightarrow 0$, η_0 tiende al múltiplo entero de π más cercano, por debajo de $k_0 a$, esto es, a un múltiplo de π igual al número de niveles de energía con momento angular nulo que existan en el agujero de potencial. Se producen excepciones sólo cuando $k_0 a$ es un múltiplo semientero de $\frac{1}{2}\pi$, en cuyo caso η_0 tiende a $k_0 a$. En la figura 2.2 se puede ver la variación de η_0 con k , para tres casos en los que existen dos, uno y ningún nivel de energía en el pozo.

A partir de la ecuación 2.44, se obtiene que la variación con la velocidad de la sección eficaz en orden cero es

$$Q_0 = \frac{4\pi}{k} \operatorname{sen}^2 \eta_0 \quad (2.68)$$

Se puede ver que, si el límite de bajas velocidades de η_0 es $s\pi$, donde s es mayor que 2, entonces Q_0 se anula para aquellos valores de k para los que $\eta_0 = (s-1)\pi, (s-2)\pi, \dots$. Para estos valores de k , el significado físico de este cero de la sección eficaz sugiere que el pozo de potencial es lo suficientemente profundo como para introducir una o más longitudes de onda completas de forma adicional en su rango de acción. Puede verse en la figura 2.3 el comportamiento de las secciones eficaces con respecto a la velocidad, en distintos casos de intensidad del potencial.

Si Q_0 pasa por un cero, para algún valor finito de k para el que las secciones eficaces de primer orden y órdenes superiores son pequeñas, la sección eficaz

Figura 2.2: *Comportamiento de los desfases de primer, segundo y tercer orden frente a la velocidad. Se muestran tres ejemplos con distintas intensidades.*

Figura 2.3: *Comportamiento de las secciones eficaces parciales y totales de los tres primeros órdenes frente a la velocidad. Se muestran tres ejemplos con distintas intensidades.*

total Q presentará un profundo mínimo para los electrones de esa velocidad particular. Esta posibilidad también existe en el caso de potenciales atractivos en general, y es responsable del efecto Ramsauer-Townsend en la dispersión de electrones por distintos átomos o moléculas.

2.2.3 Argon como ejemplo

Podemos encontrar un análisis de la dispersión de electrones de baja energía por átomos de gases nobles, y en especial del argon, en los trabajos de Massey [3], Hoeper et al. [4] y Mimmagh [5]. En ellos se estudian, a partir de los datos disponibles en su momento de las secciones eficaces de colisión, los desfases que describen mejor el comportamiento de los potenciales que se generan, o bien, en sentido contrario, se deducen las secciones eficaces de los desfases obtenidos en base a consideraciones teóricas. El método utilizado para obtener los desfases del potencial de dispersión, consiste en un ajuste por mínimos cuadrados sobre los datos disponibles, de modo que se puedan reproducir las distribuciones angulares experimentales de dispersión elástica en función de las energías. Se comienza con una serie de valores de los desfases, que se introducen en la expresión de la sección eficaz diferencial

$$I(\theta) = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [e^{2im_l} - 1] P_l(\cos\theta) \right|^2 \quad (2.69)$$

con lo que se obtiene una curva que comparar con la experimental. Un método de prueba-error conduce a los valores de los desfases adecuados al análisis.

En las figuras 2.4 se observa el comportamiento de los desfases encontrados para el argon. Se puede observar cómo el desfase de orden cero η_0 pasa por un valor cero (o múltiplo de π) en un punto cercano al cero de velocidades (o de momentos). Como ya se ha explicado, en esta zona los desfases de órdenes mayores son prácticamente nulos, con lo que la mayor contribución a la sección eficaz proviene del desfase de orden cero, y como este se anula, se obtiene un mínimo de la sección eficaz, tal y como se observa experimentalmente.

Los valores de los desfases ofrecidos por los autores antes mencionados son parecidos, si bien debe hacerse notar que Hoeper et al. [4] no ofrecen el comportamiento de las secciones eficaces, ni tampoco el del desfase de orden cero, en sus proximidades del cero de energías o velocidades, precisamente donde debería obtenerse un valor nulo o múltiplo de π , acorde con el resultado experimental que confirma el mínimo de Ramsauer. Los valores de este mínimo

Figura 2.4: *Valores de los desfases de los tres primeros órdenes para el argon.*

se ofrecen en el trabajo de Massey [3] o en el de Mimmagh [5]; estos últimos aparecen en la figura 2.4.

2.3 Métodos experimentales

La determinación de las secciones eficaces de los gases en los que derivan los electrones, se puede realizar experimentalmente, si bien, los métodos ofrecen datos parciales, tanto en el rango de energías en los que pueden ser utilizados, como en el tipo de colisión sobre el que aporta datos. Se puede encontrar mayor información sobre estos métodos experimentales en los libros de Mott [1] y Crompton [2], así como en el artículo de Phelps [6].

Los experimentos destinados a la determinación de las secciones eficaces pueden clasificarse en dos parcelas diferenciadas: aquellos en los que se observan la suma de los efectos debidos tanto a las colisiones elásticas como inelásticas, y los experimentos en los que se puede investigar por separado los dos tipos de colisión. Enumeraremos y explicaremos brevemente ambos casos.

2.3.1 Experimentos en los que se observan secciones eficaces totales

Los resultados de estos experimentos nos dan información, únicamente, acerca de la sección eficaz total, y no sobre las secciones eficaces diferenciales. No distinguen entre las secciones correspondientes a transiciones entre distintos estados. Existen dos tipos de experimentos base dentro de esta caracterización.

1. *Energía de frenado del material para electrones rápidos.* El método experimental consiste en la determinación de los alcances logrados por las partículas rápidas en los distintos materiales. El frenado se produce, fundamentalmente, por la interacción entre los electrones del haz y los electrones ligados a los átomos. Supongamos que hay N electrones por unidad de volumen. La energía de frenado se define en términos de la pérdida de energía cinética del electrón por unidad de longitud de camino en el material. Denotando a las energías de los estados atómicos ligados como E_n , y a sus correspondientes secciones eficaces Q_n , se tiene que

este cociente de pérdida de energía cinética es

$$-\frac{dT}{dx} = N\left[\sum_n Q_n(E_n - E_0) + \int_{\kappa=0}^{\kappa_{max}} (E_\kappa - E_0)Q_\kappa d\kappa\right] \quad (2.70)$$

donde E_0 es la energía del estado fundamental del átomo, y E_κ es la correspondiente a los valores de energía continuos (estados no ligados), y viene dada por

$$E_\kappa = \frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} \quad (2.71)$$

La sección eficaz correspondiente al proceso de ionización de un electrón, con energías entre E_κ y $E_{\kappa+d\kappa}$, se denota por $Q_\kappa d\kappa$. κ_{max} está relacionado por la fórmula 2.71 con la energía máxima que el electrón puede ceder al átomo.

2. *Medida de las secciones eficaces totales. Método de Ramsauer.* El método se basa en las pérdidas de electrones que se producen en un haz cuando atraviesa un gas. Si se dispara un haz homogéneo de electrones a través de un gas, el haz se hace cada vez más difuso. Sea J la intensidad del haz de electrones. Si consideramos que todos los electrones que se desvían o pierden energía por colisiones dejan de pertenecer al haz, la pérdida de intensidad $|\delta J|$ que se produce al atravesar una distancia δx en el gas a presión p se puede escribir como

$$\delta J = -J\alpha p \delta x \quad (2.72)$$

donde α depende sólo de la naturaleza del gas y de la energía (la velocidad) del haz de electrones. Integrando esta ecuación, se obtiene que la intensidad del haz después de atravesar una distancia de x centímetros es

$$J = J_0 e^{-\alpha p x} \quad (2.73)$$

Se puede determinar la constante α midiendo la variación de la corriente del haz con la longitud del camino recorrido en el gas. Este tipo de experimento fue introducido por Ramsauer y aplicado por él y otros investigadores para la medida de α en todos los gases simples y algún vapor metálico, o de otro tipo.

A partir de la definición de sección eficaz Q se deduce que, si N_0 es el número de átomos por centímetro cúbico en el gas a temperatura y presión normales,

$$\alpha = \frac{N_0 p}{p_0} \left[\sum_n Q_n + \int_0^{\kappa_{max}} Q_\kappa d\kappa \right] = \frac{N_0 p}{p_0} Q \quad (2.74)$$

donde p es la presión durante las determinaciones experimentales, y p_0 la presión en condiciones normales.

La aplicación de este método se restringe a electrones de bajas y medias velocidades (de 0.5 a 400 voltios), y da cuenta de la magnitud de la suma de todas las secciones eficaces. El método ofrecerá los valores de la sección eficaz elástica en aquellos gases que tengan sus secciones inelásticas por debajo de las energías de los electrones del haz.

2.3.2 Experimentos en los que se observan separadamente las secciones elásticas e inelásticas

Hay otro conjunto de experimentos en los que se determinan las magnitudes relativas de las diferentes secciones eficaces Q_n y de las secciones eficaces diferenciales, $I_n(\theta)$ como función del ángulo de dispersión. También se obtiene información sobre la variación de cada sección eficaz con la velocidad en el impacto. No se suelen obtener magnitudes absolutas, que se deducen a partir de los métodos de la sección anterior. Entre los métodos reseñados en la bibliografía, cabe destacar los siguientes:

1. *Métodos eléctricos.* En este tipo de experimentos se realizan medidas directas de las distribuciones angulares de los electrones dispersados, o de las probabilidades relativas de excitación, por medio de la observación del número de electrones dispersados por unidad de ángulo sólido. En el caso de impactos ionizantes, puede medirse la sección eficaz absoluta, que toma el valor

$$\int_0^{\kappa_{max}} Q_{\kappa} d\kappa \quad (2.75)$$

observando la corriente de iones positivos producida por un haz homogéneo de electrones lanzados a través de un gas a baja presión.

2. *Métodos ópticos.* En este tipo de experimentos un haz homogéneo de electrones se lanza a través de un gas o vapor, y se mide la intensidad de la luz emitida por los átomos excitados por el haz, para distintas longitudes de onda. Despreciando las posibles complicaciones debidas a reabsorciones u otros efectos atómicos, la intensidad de la línea del espectro $n \rightarrow m$ será proporcional a $Q_n A_{nm}$, donde A_{nm} es la probabilidad de transición óptica. La variación en la intensidad de la luz de una determinada longitud de onda con la velocidad de los electrones excitados

nos ofrece la variación de Q_n con la velocidad del impacto, si A_{nm} es independiente del método de excitación. Si A_{nm} se puede calcular, es posible comparar las magnitudes de la sección eficaz Q_n para diferente n .

Este método tiene la ventaja de ser más sensible que el método eléctrico, y el comportamiento de la sección eficaz Q_n puede examinarse para estados altamente excitados. Se usa para electrones de altas energías, de menos interés en nuestro caso.

3. *Técnica de modulación de haces cruzados.* El método es adecuado para determinar las secciones eficaces de un átomo particular si, a temperaturas ordinarias, la fase gaseosa es monoatómica. Los átomos forman un haz que se cruza con el haz de electrones. Los productos de las colisiones se detectan posteriormente, y se analizan.

La técnica consiste en disociar una parte considerable de las moléculas del haz molecular, de modo que se pueda tener un haz mixto. El haz de electrones se lanza perpendicularmente al haz mixto moléculas-átomos. Pueden ocurrir distintos tipos de colisiones con los átomos y las moléculas: colisiones elásticas o inelásticas, que involucran excitaciones de diferentes estados cuánticos o ionización. Se miden las probabilidades en términos de las corrientes de electrones dispersados, según las diferenciales de ángulos sólidos adecuadas y de flujos de fotones con una cierta frecuencia según ciertas direcciones. Lo importante es que las cantidades medidas provengan de las colisiones con átomos o moléculas del haz semidisociado. Para asegurarse de esto, el haz mixto se interrumpe a intervalos regulares, de manera que se consigue una modulación en la señal buscada, pero no en la señal de fondo. Por medio del uso del adecuado detector sensible al desfase y un amplificador selectivo, se puede así separar el ruido de fondo.

Es también necesario determinar el grado de disociación del haz mixto. Cuando se haya medido la sección eficaz de ionización de los átomos y moléculas, se puede usar sobre el haz un espectrógrafo de masas. Este método se ha usado fundamentalmente para hidrógeno, aunque también con algunas modificaciones en el caso del helio, o neon, o en el caso de átomos normales o moléculas en fase vapor, como átomos de metales alcalinos.

4. *Mediciones sobre la nube de electrones.* Se trata de determinar las secciones eficaces tanto elásticas como inelásticas a través del conocimiento de los parámetros de deriva de los electrones en el gas. El análisis completo del método se realizará en los capítulos siguientes, siendo éste el

objetivo de esta tesina. Gran parte de los artículos de la bibliografía se basan en este método, resaltando por su claridad los de Frost y Phelps [7], Mathieson [8] y Palladino [9].

Capítulo 3

Deriva y difusión de una nube de electrones

El trabajo con cámaras de deriva y detectores gaseosos para la detección de partículas y radiación, obliga al estudio minucioso de las propiedades que estos gases presentan ante la deriva de una distribución de electrones. El paso de la radiación provoca la ionización localizada del gas y como resultado de esta, se tiene una cantidad de electrones e iones positivos que, por acción del campo eléctrico, se dirigen en sentidos opuestos. Los electrones, en su aproximación al ánodo, adquieren energía del campo, y la pierden en colisiones con las moléculas del gas, alcanzando una velocidad aproximadamente constante. El sistema queda caracterizado, en este estado estacionario, por una serie de parámetros de deriva, medibles experimentalmente.

Cuando se intenta describir el comportamiento de una nube de electrones que atraviesa un gas o una mezcla de gases, es esencial conocer qué tipos de interacción se producen entre los electrones y los átomos o moléculas. Esta descripción resulta compleja ante la variedad de comportamientos posibles. Dentro del rango de colisiones con electrones de bajas energías, se tiene, en primer lugar, que las colisiones pueden ser elásticas o inelásticas, y dentro de estas últimas, existen diversos procesos por los que el gas puede pasar a un estado de mayor energía. En el caso más simple, como resulta ser el de los elementos nobles, el gas únicamente contiene átomos, con lo que podremos observar colisiones elásticas para los electrones que incidan con energías bajas, y colisiones inelásticas a partir de la energía umbral requerida por el cambio interno del átomo. En el caso de que el medio en el que se muevan los electrones

sea un gas constituido por moléculas, tendremos, además, la posibilidad de que se exciten sus modos rotacionales o vibracionales.

3.1 Balance de energía

Vamos a estudiar el movimiento de una nube de electrones cuando atraviesa un gas que está a presión p , bajo la acción de un campo eléctrico de intensidad E . Los electrones ganarán energía del campo eléctrico según se vayan moviendo en el medio. Perderán energía por las colisiones que sufran con el gas. Cuando la distribución se encuentre en estado estacionario, debemos encontrar un balance entre la energía perdida y la ganada. La nube de electrones tendrá una serie de parámetros de deriva bien definidos, como son la velocidad de deriva u en la dirección del campo, o la energía característica ϵ_k . Estas cantidades dependerán de las secciones eficaces del gas que atraviese la nube de electrones.

Se puede hacer un análisis simple del balance de energía. Supongamos que el recorrido libre medio, que en general es inversamente proporcional a la sección eficaz de colisión, y por tanto depende de la velocidad, toma un valor constante l en el gas, independientemente de la energía de los electrones. Supongamos también que, en cada colisión con un átomo o molécula del gas, los electrones pierden una fracción constante de su energía λ . Llamemos c a la velocidad media del movimiento aleatorio del electrón (recordemos que después de cada colisión, el electrón puede moverse en cualquier dirección). El camino realmente recorrido por un electrón, cuando avanza una distancia x en la dirección del campo es igual a $\frac{cx}{u}$, el número de colisiones efectuadas será $\frac{cx}{ul}$, y la energía media perdida en las colisiones con el gas será $\frac{\lambda\epsilon cx}{ul}$. Por esto, cuando los electrones deriven de forma estacionaria, tendremos el balance

$$\frac{\lambda\epsilon cx}{ul} = Eex \quad (3.1)$$

siendo e la carga del electrón. Aproximemos el valor de la energía del electrón por su energía cinética media $\epsilon = \frac{1}{2}mc^2$. Sustituyendo, se llega a

$$\frac{\lambda c^3}{u} = \frac{2Eel}{m} \quad (3.2)$$

Haciendo uso de las ecuaciones básicas del movimiento uniformemente acelerado, y suponiendo que, después de las colisiones, todas las direcciones que

puede adquirir el electrón son igualmente probables, encontramos una segunda relación, ya que la distancia media recorrida en la dirección del campo, en un intervalo de tiempo δt , será $u\delta t$, y por tanto

$$\frac{Ee(\delta t)^2}{2m} = u\delta t \quad (3.3)$$

Tomando como aproximación para δt

$$\delta t = \frac{l}{c} \quad (3.4)$$

correcta salvo un factor multiplicativo del orden de la unidad, se llega a

$$2uc = \frac{El}{m} \quad (3.5)$$

A efectos experimentales podemos expresar esta dependencia de la velocidad con el recorrido libre medio de una forma más conveniente. Como el recorrido libre medio es inversamente proporcional a la presión p del gas, a una temperatura fija, tanto u , la velocidad de deriva, como c , la velocidad media del movimiento aleatorio de los electrones, son funciones de la variable campo eléctrico dividido entre la presión, E/p . Si se miden c y u de los electrones del gas para un valor fijo de la variable E/p , entonces se pueden calcular los valores de λ y de l . También se pueden expresar las dependencias en la variable E/N , donde N es el número de átomos o moléculas del gas por unidad de volumen. De esta forma, no es necesario especificar la temperatura a la que se produjo la medida. Se tiene la equivalencia

$$1 \frac{V}{cm \text{ torr}} \text{ a } 300K = 3.22 \cdot 10^6 Vcm^2 \quad (3.6)$$

La realidad de las colisiones de los electrones en un gas suele ser bastante más compleja que el bosquejo realizado. Los electrones que colisionan se acercan con distintas energías, y el camino libre que recorren entre colisiones no es en realidad constante. Con el método anterior lograremos unos valores medios tanto del recorrido libre medio l como de la energía fraccional perdida por colisión. Por tanto, empleando las expresiones anteriores no se puede conseguir la forma precisa de la sección eficaz de colisión, a partir de los parámetros de deriva obtenidos experimentalmente. Sólo con electrones de muy bajas energías se puede intentar determinar con precisión las pérdidas fraccionarias de energía para átomos y moléculas, ya que para estos electrones los métodos de medida con haces de electrones no se pueden utilizar.

Supongamos que la energía de los electrones que componen la nube es tan baja como para que las únicas colisiones posibles sean del tipo elástico. Supongamos además que la energía media de los átomos o moléculas (térmica) es mucho menor que la de los electrones, y que la concentración de electrones en la nube que deriva en el gas es baja, de forma que no tendremos que considerar los efectos de interacciones mutuas.

Con estas premisas, la fracción de energía perdida en el impacto por un electrón cuando resulta dispersado por un átomo según un ángulo ψ es

$$\frac{2m}{M}(1 - \cos\psi) \quad (3.7)$$

donde m es la masa del electrón y M la masa del átomo o molécula contra el que choca. Este resultado se obtiene a partir de un análisis clásico del choque, tomando la aproximación claramente válida de que la masa del electrón es mucho menor que la masa del átomo (y por tanto la masa reducida es casi igual a la masa del electrón). Sea $I(\psi)$ la sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido para la dispersión elástica del electrón de una energía determinada. Entonces, la fracción de energía perdida por colisión es

$$\frac{2m}{M} \frac{\int_0^\pi (1 - \cos\psi) I(\psi) \sin\psi d\psi}{\int_0^\pi I(\psi) \sin\psi d\psi} \quad (3.8)$$

Teniendo en cuenta que la sección eficaz total Q es precisamente la integral del denominador, y llamando sección eficaz de transferencia de momento a

$$Q_m = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos\psi) I(\psi) \sin\psi d\psi \quad (3.9)$$

entonces la energía fraccional perdida por colisión será

$$\frac{2m}{M} \frac{Q_m}{Q} \quad (3.10)$$

La sección eficaz de transferencia de momento dependerá de la energía de los electrones que colisionan, y tendrá un comportamiento muy parecido al de la sección eficaz total, diferenciándose únicamente, de forma apreciable, si existe un aumento de la sección eficaz diferencial de dispersión en la dirección de incidencia del electrón (ya sea hacia delante o hacia atrás).

Con todo este razonamiento, se llega a que la fracción de energía perdida por cada electrón, cuando atraviesa una distancia δx en su recorrido en un gas

que contiene N partículas por unidad de volumen, es $\frac{2m}{M}NQ_m\delta x$. Identificando términos, podemos asignar a λ y a l los valores

$$\lambda = \frac{2m}{M} \quad (3.11)$$

$$l = \frac{1}{NQ_m} \quad (3.12)$$

para colisiones puramente elásticas. Es importante ver que la sección eficaz de transferencia de momento actúa como la sección eficaz total en este caso. En un gas molecular no podemos tomar simplemente $\lambda = \frac{2m}{M}$ ya que los electrones pueden colisionar excitando modos rotacionales o vibracionales de la molécula, aún a muy bajas energías.

3.2 Métodos experimentales de determinación de los parámetros de deriva

Los parámetros de deriva de los electrones en el gas, como son las velocidades de deriva, los coeficientes de difusión o las energías características, pueden obtenerse experimentalmente por métodos diversos. Estos datos experimentales son de interés en el desarrollo de los detectores gaseosos, y en especial de las cámaras de deriva.

Posteriormente nos basaremos, en este mismo trabajo, en los datos que diversos autores han conseguido sobre estos parámetros de deriva, para ajustar y verificar las secciones eficaces de los gases sobre los que realizamos el cálculo informático. Se pueden encontrar revisiones sobre los métodos que se describen, y otros similares en las referencias [2, 3] de la bibliografía.

1. *Método de los obturadores eléctricos sincronizados.* El método consiste en la colocación de dos obturadores que impidan el paso de los electrones, en diferentes lugares de la zona de deriva. Los obturadores se abren durante breves espacios de tiempo, y a intervalos regulares. Haciendo que ambos funcionen en fase, esto es, se abran y cierren al mismo tiempo, y variando la frecuencia de los obturadores, se puede obtener la velocidad de los electrones. Los electrones pasarán por ambos obturadores sólo si recorren la distancia entre ellos en un número entero de aperturas. Observando la variación de la corriente que atraviesa ambos obturadores

como función de la frecuencia, se determina la velocidad de deriva. En este método, como en todos los restantes, los montajes experimentales son muy diversos. Como ejemplo se puede ver el artículo de Davies et al. [10].

2. *Medida del tiempo de vuelo.* Este método, en sus diversas variantes a la hora de ponerlo en práctica, consiste en la determinación de la velocidad de deriva por medio de la medida del tiempo que tardan en desplazarse los electrones una distancia determinada. Una de las formas de realizarlo consiste en la colocación de unas ventanas estrechas, de modo que la radiación ionizante, que produce los electrones, entre en la cámara colimada. El retraso entre las señales recibidas en el ánodo, y generadas en dos diferentes ventanas de entrada determina la velocidad de deriva, conocida con precisión la distancia entre las ventanas.

Otra forma de medir la velocidad de deriva utilizando el tiempo de vuelo, consiste en utilizar un fotocátodo, de modo que al iluminarlo se formen un grupo de fotoelectrones que deriven en un campo uniforme en la cámara. El sistema se dispara al iluminar el fotocátodo, de forma que la determinación del tiempo de vuelo es muy precisa. Los pulsos se emiten a una frecuencia determinada, y el estudio de la señal obtenida lleva a la determinación de la velocidad de deriva de los electrones. También se pueden colocar dos rejillas colectoras a distintas distancias. Como ejemplo de estos métodos pueden verse los artículos de El-Hakeem et al. [11], o Bowe et al. [12].

3. *Electrodo fraccionado para la medida de las energías características.* Este método, también utilizado en principio por Townsend, consiste en hacer que los electrones deriven, con velocidad constante, en una cámara llena del gas considerado. Se coloca un electrodo con un pequeño hueco en el centro, que realice la función de colimador, y el electrodo final que recoge los electrones se fracciona en círculos concéntricos (o de otra forma, según la geometría escogida). Con esto, los electrones se difunden en el gas sólo a partir del punto por el que atraviesan el electrodo colimador (a efectos de medida).

Para una nube de electrones que deriva en un gas, el coeficiente de difusión D en ausencia de campo eléctrico proviene de la expresión que toma la velocidad local de flujo en cada punto de la nube \bar{v} ,

$$n\bar{v} = -D\nabla n \quad (3.13)$$

siendo n el número de electrones por unidad de volumen en cada punto. Cuando introducimos el campo eléctrico en el sistema, obtendremos que

los electrones derivarán con una velocidad determinada por el gas y el campo en cada punto, de modo que

$$n\bar{v} = -D\nabla n + n\bar{u} \quad (3.14)$$

Si imponemos que se satisfaga la ecuación de continuidad, se tiene que

$$\nabla(n\bar{v}) = \nabla(-D\nabla n + n\bar{u}) = 0 \quad (3.15)$$

Tomando el campo en la dirección z , llegamos a

$$\nabla^2 n = \frac{u}{D} \frac{\partial n}{\partial z} \quad (3.16)$$

Hace falta resolver este problema con las adecuadas condiciones de contorno para cada montaje experimental. La fracción de corriente recibida por cada parte del electrodo, ofrece la información necesaria para obtener la energía característica (véase la ecuación 3.70). Un ejemplo de utilización de este método, con el análisis completo de la ecuación 3.16, se puede encontrar en el artículo de Warren et al. [13].

Actualmente se suelen realizar las mediciones del coeficiente de difusión (y por tanto de la energía característica) en una cámara de deriva con una serie de hilos anódicos. La señal producida por los electrones se recoge por los hilos, y se trata para obtener la información requerida. Existen una gran diversidad de montajes experimentales que ofrecen la información con mayor o menor precisión. Una explicación de como tratar la información se recoge en el artículo de Alber et al. [14], o en el de Pack et al. [15].

3.3 La ecuación de Holstein-Boltzmann

Los coeficientes o parámetros de transporte de los electrones que se mueven en un gas bajo la influencia de un campo eléctrico externo, se pueden obtener de forma teórica de la llamada ecuación de Holstein-Boltzmann. Esta es una ecuación integro-diferencial que relaciona de una manera no lineal las secciones eficaces de colisión y las distribuciones energéticas de los electrones. La ecuación fue propuesta por Holstein [16] en 1946, como una aproximación a las complicadas expresiones que aparecen al plantear el problema según las ecuaciones de transporte de Boltzmann.

Existen una serie de cantidades promedio que determinan el comportamiento de los electrones cuando atraviesan un gas, como son la densidad electrónica, la velocidad de deriva, la energía media o la característica. Todas ellas pueden determinarse una vez que se conozca la función de distribución de los electrones $f(\vec{r}, \vec{v})$. Esta función especifica el número de electrones por unidad de espacio de fases, de forma que $f(\vec{r}, \vec{v})d\vec{r}d\vec{v}$ denota el número de electrones que, situados en el intervalo $d\vec{r}$ centrado en \vec{r} , tienen velocidades en el intervalo $d\vec{v}$ en torno a \vec{v} .

La función de distribución debe satisfacer una ecuación de continuidad en el espacio de las fases, esto es, en el de posiciones y velocidades. Esta ecuación describirá el equilibrio que existe entre el número de electrones que abandonan y alcanzan un elemento de volumen $d\vec{r}d\vec{v}$ del espacio de fases, supuesto que el sistema se encuentre en estado estacionario. El flujo resultante en la posición es consecuencia de la velocidad de los electrones, mientras que en el espacio de las velocidades se produce por la aceleración que les provoca el campo eléctrico, y el frenado de las colisiones con los átomos o moléculas del gas.

Supongamos que en la región donde se produce la deriva existe un campo eléctrico constante entre los electrodos, y perpendicular a estos. Escogiendo adecuadamente el eje x según la dirección del campo, la distribución electrónica resulta independiente de las coordenadas y y z . La ecuación de transporte de Boltzmann bajo estas condiciones toma la forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\left(v_x \frac{\partial f}{\partial x}\right) - \left(a \frac{\partial f}{\partial v_x}\right) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{colisiones} \quad (3.17)$$

donde se tiene que la expresión de la aceleración es

$$a = -\frac{Ee}{m} \quad (3.18)$$

siendo E el campo eléctrico aplicado entre los electrodos, y siendo $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{colisiones}$ el cociente de cambio de la función de distribución a causa de las colisiones de los electrones con otros electrones, moléculas neutras o excitadas, iones, etc.

Deben hacerse una serie de suposiciones previas sobre el sistema a estudiar. Cuando los campos aplicados son bajos, las energías de los electrones no alcanzan valores que permitan las ionizaciones de las moléculas. Además supondremos que la cantidad de moléculas en un estado excitado o ionizadas es despreciable frente a las que se encuentran en su estado fundamental. De esta forma no se tendrán en cuenta las colisiones que se produzcan entre estas moléculas excitadas o ionizadas y los electrones. Por otra parte, supondremos

que la densidad electrónica es lo suficientemente baja como para despreciar las colisiones que se puedan producir entre los electrones. Sólo nos queda estudiar los procesos de colisión elásticos y de excitación (inelásticos), que se produzcan entre los electrones individuales y las moléculas del gas en su estado fundamental.

Trataremos de forma independiente los procesos que contribuyen al último término de la ecuación 3.17, según provengan de colisiones elásticas o inelásticas.

3.3.1 Contribución elástica

Como se puede ver en el apartado 3.1, utilizaremos nuestro conocimiento de que la energía perdida por los electrones en colisiones elásticas proviene, según la ecuación 3.7, de la masa finita de las moléculas del gas en el que se mueven los electrones. Para la realización de los cálculos, supondremos que las moléculas del gas se encuentran inicialmente en reposo, cada vez que colisionan con los electrones. Esta suposición se basa en el hecho de que las energías térmicas que sacuden las moléculas son muy inferiores a las energías medias de las distribuciones electrónicas, y por tanto despreciables. Cuando los campos reducidos sean muy bajos, la suposición deja de ser correcta. Más adelante, se introducirá un término en la ecuación que corrija las distribuciones para este caso.

Con esto podemos encontrar, como ya vimos antes en la ecuación 3.7, la pérdida de energía fraccional

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2m}{M}(1 - \cos\psi) \quad (3.19)$$

donde ΔE es la energía perdida por un electrón de energía E , siendo m y M las masas del electrón y de la molécula respectivamente, y ψ el ángulo con el que el electrón sale deflectado. Usando que la pérdida fraccional va a ser muy pequeña, dadas las masas del electrón y de la molécula, podemos asegurar, a partir del desarrollo en serie de la función, que

$$\frac{\Delta E}{E} = 2\frac{\Delta v}{v'} = 2\frac{(v' - v)}{v'} \quad (3.20)$$

donde v' es la velocidad inicial del electrón, mientras v es la final (en cada caso

$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$). De este modo, se tiene que

$$\frac{v}{v'} = 1 - \frac{m}{M}(1 - \cos\psi) \quad (3.21)$$

Con esta información resulta fácil encontrar una expresión para $(\frac{\partial f}{\partial t})_{colisiones}$ una vez que se evalúe el número de electrones que entra o abandona cada elemento de volumen del espacio hexadimensional de fases. Empezaremos por ver que el número de electrones que dejan el elemento de volumen $d\vec{r}d\vec{v} = dv_x dv_y dv_z dx dy dz$ centrado en (v_x, v_y, v_z, x, y, z) , en cada momento dt va a ser igual al número de electrones que hay en el elemento de volumen, esto es, $f(v_x, v_y, v_z, x, t)d\vec{v}d\vec{r}$, multiplicado por la probabilidad de que un electrón abandone el elemento. La probabilidad de que un electrón en $d\vec{v}d\vec{r}$ se defleccione un ángulo ψ , en el intervalo temporal dt , para pasar al ángulo sólido $d\omega$, en el espacio de las velocidades es

$$T(v, \psi, dt, d\omega) = Nvq_m(v, \psi)d\omega dt \quad (3.22)$$

donde $q_m(v, \psi)$ es la sección eficaz diferencial elástica, N es la densidad de las moléculas del gas y v la velocidad del electrón antes de la colisión. Así, el número de electrones del elemento diferencial del espacio de fases que salen hacia el ángulo sólido $d\omega'$, en el momento dt , es

$$T(v, \psi, dt, d\omega')f d\vec{v}d\vec{r} = Nfvq_m(v, \psi)d\vec{r}d\vec{v}d\omega' dt \quad (3.23)$$

Encontraremos el número final de electrones que emigran al integrar la anterior cantidad sobre todos los posibles ángulos sólidos por los que los electrones escapan. El resultado es que, de el elemento de volumen $d\vec{r}d\vec{v}$ salen, en el intervalo de tiempo dt

$$Nfv d\vec{r}d\vec{v} dt \int_{\omega'} q_m(v, \psi) d\omega' \quad (3.24)$$

Calcular los electrones que entran en el diferencial de volumen, provenientes de otros diferenciales cercanos $d\vec{v}'d\vec{r}'$, resulta más complicado. Si suponemos que el ángulo sólido subtendido por el elemento $d\vec{v}$, visto desde el punto donde se encuentre el electrón en su elemento de partida (origen), es $d\omega$, entonces la probabilidad de que un electrón que se encuentra en el diferencial $d\vec{v}$ se disperse según el ángulo sólido $d\omega$, en un instante dt , será

$$T(v', \psi, dt, d\omega) = Nv'q_m(v', \psi)d\omega dt \quad (3.25)$$

siendo v' la magnitud del vector velocidad que va del origen al centro de $d\vec{v}'$. Además, para que el electrón entre en el elemento de volumen en el espacio de

fases, se debe tener en cuenta la condición impuesta por la ecuación 3.21. Con esto, la probabilidad de que un electrón en el elemento de volumen $d\vec{v}'$ y con velocidad v' pase en el momento dt al elemento $d\vec{v}$, con velocidades entre v y $v + dv$ y subtendido por el ángulo sólido $d\omega$ es

$$T(v', v, \psi, dt, dv, d\omega) = Nv'q_m(v', \psi)\delta(v - [v' - \frac{v'm}{M}(1 - \cos\psi)])dv d\omega dt \quad (3.26)$$

De esta forma podemos obtener el número de electrones que ocupan $d\vec{v}'d\vec{r}'$ en el momento dt llegados por transiciones a partir de otros elementos. Análogamente al caso de las salidas, se obtiene

$$Nv \int_{\vec{v}'} f(v'_x, v'_y, v'_z, x, t)q_m(v', \psi)\delta((v - [v' - \frac{v'm}{M}(1 - \cos\psi)])dv d\omega dt d\vec{r}'d\vec{v}') \quad (3.27)$$

expresión que, con la ayuda de las relaciones $d\vec{v} = v^2d\omega dv$ y $d\vec{v}' = v'^2d\omega' dv'$, se convierte en

$$dt d\vec{v} d\vec{r}' \int_{\omega'} f(v'_x, v'_y, v'_z, x, t)q_m(v', \psi)(\frac{v'}{v})^3 Nv' d\omega' \quad (3.28)$$

Para obtener la expresión anterior se ha utilizado la propiedad de la función delta de Dirac

$$\delta[g(x)] = \sum_j \frac{1}{|g'(x_j)|} \delta(x - x_j) \quad (3.29)$$

donde $g'(x)$ es la derivada de $g(x)$, y los x_j son los ceros simples de la función $g(x)$.

Con lo anterior, podremos obtener el término $(\frac{\partial f}{\partial t})_{col.elas.}$ a partir de las ecuaciones 3.24 y 3.28. La diferencia de estas nos dará $(\frac{\partial f}{\partial t})_{col.elas.}d\vec{v}d\vec{r}'dt$, de forma que, escrito en coordenadas polares, con el eje polar paralelo a la velocidad \vec{v} (y por tanto paralelo al campo eléctrico aplicado), se tiene

$$\begin{aligned} (\frac{\partial f}{\partial t})_{col.elas.} &= Nv \int_{\omega'} [f(\theta', \varphi', v', x, t)(\frac{v'}{v})^4 q_m(\psi, v') \\ &\quad - f(\theta, \varphi, v, x, t)q_m(\psi, v)]d\omega' \end{aligned} \quad (3.30)$$

Como el cambio que se puede producir entre las velocidades inicial y final es muy pequeño, v' debe ser aproximadamente igual a v , y por tanto podemos realizar un desarrollo de Taylor centrada en v , teniendo

$$\begin{aligned} f(\theta', \varphi', v', x, t)(\frac{v'}{v})^4 q_m(\psi, v') &= f(\theta', \varphi', v, x, t)q_m(\psi, v) \\ &\quad + \frac{m}{M}(1 - \cos\psi)\frac{1}{v^3} \frac{\partial}{\partial v} [v^4 f(\theta', \varphi', v, x, t)q_m(\psi, v)] + \dots \end{aligned} \quad (3.31)$$

con lo que la expresión 3.30 se aproxima por

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.elas.} &= Nv \int_{\omega'} [f(\theta', \varphi', v, x, t) - f(\theta, \varphi, v, x, t)] q_m(\psi, v) d\omega' \\ &+ \left(\frac{N}{v^2}\right) \frac{m}{M} \frac{\partial}{\partial v} \int_{\omega'} (1 - \cos\psi) q_m(\psi, v) v^4 f(\theta', \varphi', v, x, t) d\omega' \end{aligned} \quad (3.32)$$

3.3.2 Contribución inelástica

Podemos deducir la contribución de las colisiones inelásticas al término $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)$ de forma similar al caso anterior, pero teniendo en cuenta las nuevas leyes de conservación que se generan. Si llamamos v_i a la velocidad umbral para la producción de algún tipo de colisiones inelásticas, tendremos que

$$v'^2 - v^2 = v_i^2 \quad (3.33)$$

Se puede interpretar fácilmente esta ecuación, considerando que es necesaria una cantidad de energía mínima para excitar un estado por encima del fundamental, en un átomo o molécula. Esta energía umbral es, precisamente, la que pierde el electrón en su colisión. De esta forma, la ecuación de conservación es cuadrática en la velocidad.

Esta ecuación de conservación entra en los cálculos de la misma forma que lo hacía la ecuación 3.21 en el apartado anterior. De forma equivalente, llamando $q_i(\psi, v)$ a la sección eficaz diferencial de colisión inelástica que excita el nivel i , se tiene

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col.inel.} &= \sum_i Nv \int_{\omega'} [f(\theta', \varphi', v', x, t) \left(\frac{v'}{v}\right)^2 q_i(\psi, v') \\ &- f(\theta, \varphi, v, x, t) q_i(\psi, v)] d\omega' \end{aligned} \quad (3.34)$$

En este caso v' no tiene por que tomar un valor próximo a v , según vemos en la ecuación 3.33, con lo que no es válido utilizar una aproximación en desarrollo. Para deducir la expresión anterior se ha utilizado de nuevo la propiedad 3.29 de la función delta, aplicada, en este caso, a la condición de conservación en colisiones inelásticas 3.33.

3.3.3 Simplificaciones

Con todo lo anterior, podemos reescribir la ecuación 3.17 como

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial t} &= -(v_x \frac{\partial f}{\partial x}) - (a \frac{\partial f}{\partial v_x}) \\
&+ Nv \int_{\omega'} [f(\theta', \varphi', v, x, t) - f(\theta, \varphi, v, x, t)] q_m(\psi, v) d\omega' \\
&+ (\frac{N}{v^2}) \frac{m}{M} \frac{\partial}{\partial v} \int_{\omega'} (1 - \cos\psi) q_m(\psi, v) v^4 f(\theta', \varphi', v, x, t) d\omega' \\
&+ \sum_i Nv \int_{\omega'} [f(\theta', \varphi', v', x, t) (\frac{v'}{v})^2 q_i(\psi, v') \\
&- f(\theta, \varphi, v, x, t) q_i(\psi, v)] d\omega' \tag{3.35}
\end{aligned}$$

con lo que nos queda una ecuación integro-diferencial en 5 variables independientes $(\varphi, \theta, v, x, t)$. Se usará un método aproximado para su resolución, empleado por primera vez por Lorentz, y perfeccionado para el caso que nos ocupa por Morse, Allis y Lamar [17]. El método se basa en que, para campos aplicados de intensidad suficientemente baja, y suponiendo que $(\frac{\partial f}{\partial x})$, el gradiente de difusión, es también pequeño, entonces la función de distribución $f(\theta, \varphi, v, x, t)$ es prácticamente simétrica en el espacio de velocidades. Con esto, podemos realizar un desarrollo en armónicos esféricos, quedándonos sólo con los primeros dos términos, eliminando además la dependencia en φ , ya que la ecuación 3.35 muestra simetría alrededor del eje x , dirección del campo eléctrico. Esta aproximación es buena si los términos que despreciamos en el desarrollo tienen un peso específico muy pequeño frente a los dos primeros. En principio, no podemos saber si esto será cierto o no para un gas, y sólo después de encontrar su solución, y comparar los resultados obtenidos con los obtenidos por aproximaciones más exactas, se podrá estimar la valía del método. El desarrollo exacto en armónicos esféricos de la función de distribución es la siguiente suma infinita

$$f(\theta, v, x, t) = \sum_n f_n(v, x, t) P_n(\cos\theta) \tag{3.36}$$

y en la aproximación escogida sólo estimamos los dos primeros términos

$$f(\theta, v, x, t) \simeq f_0(v, x, t) + \cos\theta f_1(v, x, t) \tag{3.37}$$

En general, se puede comprobar en diversos casos que la aproximación es buena cuando la sección eficaz total de transferencia de momento es mayor que la sección eficaz total debida a colisiones inelásticas.

Procedemos a sustituir el desarrollo 3.37 en la ecuación 3.35. Los términos de $(\frac{\partial f}{\partial t})_{col}$ pertenecientes a las colisiones elásticas sólo presentan el sumando no

simétrico, dado que los términos que llevan f_0 se cancelan mutuamente. Esto ocurre porque en los procesos de dispersión que no cambian la energía cinética de los electrones, no queda afectada la parte simétrica de la distribución. La ecuación queda

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(f_0 + \cos\theta f_1) &= -(v_x \frac{\partial}{\partial x})(f_0 + \cos\theta f_1) - (a \frac{\partial}{\partial v_x})(f_0 + \cos\theta f_1) \\ &+ Nv \int_{\omega'} [\cos\theta' - \cos\theta] q_m(\psi, v) f_1(v, x) d\omega' \\ &+ (\frac{N}{v^2}) \frac{m}{M} \frac{\partial}{\partial v} \int_{\omega'} (1 - \cos\psi) q_m(\psi, v) v^4 f_0(v, x) d\omega' \\ &+ \sum_i Nv \int_{\omega'} [f_0(v', x) (\frac{v'}{v})^2 q_i(\psi, v') - f_0(v, x) q_i(\psi, v)] d\omega' \end{aligned} \quad (3.38)$$

Se han despreciado los sumandos asimétricos f_1 en la parte de $(\frac{\partial f}{\partial t})_{col}$ correspondiente a las colisiones inelásticas, debido a que se espera que sean muy pequeños en comparación con los términos anteriores.

Podemos obtener la separación de las ecuaciones en f_0 y en f_1 . Para ello es necesario tomar nuevas coordenadas polares que expresen el ángulo sólido $d\omega'$, medidas desde el vector velocidad \vec{v} , de coordenadas v , θ y φ . De esta forma el ángulo de dispersión del electrón ψ se convierte en un ángulo polar, que junto con el ángulo azimutal ξ , referido a un eje perpendicular cualquiera de \vec{v} definen el sistema. Llamaremos \vec{k} a la dirección del campo eléctrico aplicado. Podemos escribir el ángulo sólido sobre el que se integra en los términos de colisiones en la ecuación 3.38 como

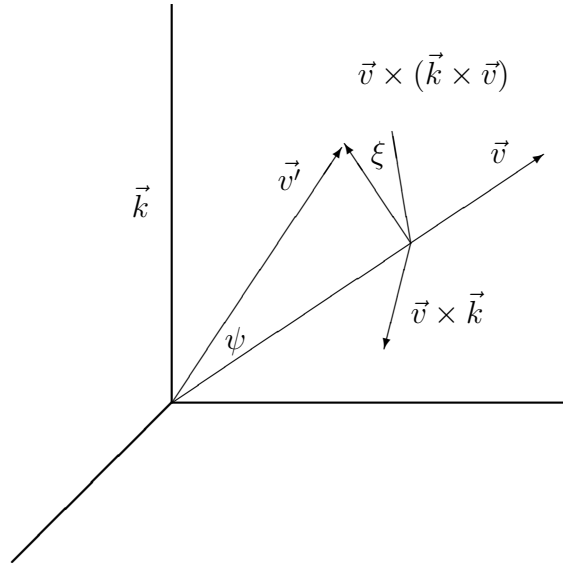
$$d\omega' = \text{sen}\psi d\psi d\xi \quad (3.39)$$

Eligiendo adecuadamente los ejes según el diagrama siguiente se obtiene el desarrollo de \vec{v}'

$$\vec{v}' = \cos\psi \vec{v} + (v \text{sen}\psi \text{sen}\xi) \left(\frac{\vec{v} \times \vec{k}}{v \text{sen}\theta} \right) + (v \text{sen}\psi \cos\xi) \left(\frac{\vec{v} \times (\vec{k} \times \vec{v})}{v^2 \text{sen}\theta} \right) \quad (3.40)$$

donde los vectores de dirección se han dividido por las cantidades adecuadas para ser unitarios. Con estas transformaciones, se llega a que

$$\cos\theta' = \left(\frac{\vec{v}' \cdot \vec{k}}{v} \right) = \cos\theta \cos\psi + \text{sen}\theta \text{sen}\psi \cos\xi \quad (3.41)$$



Con estas transformaciones llevadas a la ecuación 3.38, multiplicando por $\frac{1}{4\pi}$ y realizando las integraciones en las variables θ y ξ , se obtiene la ecuación

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial t} = & -\frac{v}{3} \frac{\partial f_1}{\partial x} - \left(\frac{a}{3v^2} \frac{\partial}{\partial v}\right)(v^2 f_1) \\ & + \frac{m}{Mv^2} \frac{\partial}{\partial v} \{v^3 f_0 2\pi N v \int_0^\pi (1 - \cos\psi) q_m(\psi, v) \text{sen}\psi d\psi\} \\ & + \sum_i \left\{ \frac{v' f_0(v')}{v} 2\pi N v' \int_0^\pi q_i(\psi, v') \text{sen}\psi d\psi \right. \\ & \left. - f_0(v) 2\pi N v \int_0^\pi q_i(\psi, v) \text{sen}\psi d\psi \right\} \end{aligned} \quad (3.42)$$

mientras que si antes de integrar se multiplica toda la ecuación 3.38 por $\frac{3\cos\theta}{4\pi}$, se obtiene

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -v \frac{\partial f_0}{\partial x} - a \frac{\partial f_0}{\partial v} - 2\pi N v f_1 \int_0^\pi (1 - \cos\psi) q_m(\psi, v) \text{sen}\psi d\psi \quad (3.43)$$

Debe tenerse en cuenta que, tal como se ha definido en la ecuación 3.9, en las integrales correspondientes a las colisiones elásticas aparece la sección eficaz de transferencia de momento Q_m . De forma análoga se puede definir la sección eficaz total de colisiones inelásticas, como

$$Q_i = 2\pi \int_0^\pi q_i(\psi, v) \text{sen}\psi d\psi \quad (3.44)$$

y las ecuaciones 3.42 y 3.43 se simplifican en su notación

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial t} = & -\frac{v}{3} \frac{\partial f_1}{\partial x} - \left(\frac{a}{3v^2} \frac{\partial}{\partial v}\right)(v^2 f_1) + \frac{m}{Mv^2} \frac{\partial}{\partial v}(v^3 f_0 NvQ_m) \\ & + \sum_i \left[\frac{v' f_0(v')}{v} Nv'Q_i(v') - f_0(v) NvQ_i(v) \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

y

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -v \frac{\partial f_0}{\partial x} - a \frac{\partial f_0}{\partial v} - Nv f_1 Q_m \quad (3.46)$$

Supondremos ahora que la situación es estacionaria, de forma que las parciales respecto al tiempo se anulan. Además, supondremos las distribuciones homogéneas espacialmente, de forma que también consideraremos nulas las derivadas respecto a la variable espacial. Con esto, tenemos que las ecuaciones anteriores pasan a ser

$$\begin{aligned} \frac{a}{3v^2} \left(\frac{d}{dv}\right)(v^2 f_1) + \frac{m}{Mv^2} \frac{d}{dv}(v^3 f_0 NvQ_m) \\ + \sum_i \left\{ \frac{v' f_0(v')}{v} Nv'Q_i(v') - f_0(v) NvQ_i(v) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3.47)$$

y

$$-a \frac{df_0}{dv} - Nv f_1 Q_m = 0 \quad (3.48)$$

y de esta última ecuación se puede despejar f_1 , y sustituir su valor en la ecuación 3.47 con el resultado

$$\begin{aligned} -\frac{a}{3v^2} \left(\frac{d}{dv}\right) \left(\frac{va}{NQ_m} \frac{df_0}{dv}\right) + \frac{m}{Mv^2} \frac{d}{dv}(v^4 f_0 NQ_m) \\ + \sum_i \left\{ \frac{v' f_0(v')}{v} Nv'Q_i(v') - f_0(v) Q_i(v) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

A la hora de realizar los cálculos trabajaremos en ocasiones con campos reducidos muy pequeños, con lo que la suposición de que las energías de los átomos o moléculas del gas es muy pequeña frente a la energía media de los electrones que se difunden por el gas, puede no ser cierta. Para tener en cuenta los efectos de la temperatura del gas en las colisiones de los electrones, introduciremos una corrección en la expresión de $f_0(v)$, que afecte a las pérdidas de energía producidas por las colisiones elásticas. De hecho, esto no es más que reconocer que los electrones tienen una distribución maxwelliana cuando están a la temperatura del gas y sin campo eléctrico, y que las colisiones no cambian esta distribución. Una explicación matemática completa de como se

introduce este término se puede encontrar en el trabajo de Allis [18], o en el artículo de Margenau [19].

De esta forma, con T la temperatura del gas, y con κ la constante de Boltzmann, sustituimos $f_0(v)$ por

$$f_0(v) + \frac{\kappa T}{mv} \frac{df_0}{dv} \quad (3.50)$$

Y así, la ecuación 3.49 pasa a ser

$$\begin{aligned} & -\frac{a}{3v^2} \left(\frac{d}{dv} \right) \left(\frac{va}{NQ_m} \frac{df_0}{dv} \right) \\ & + \frac{m}{Mv^2} \frac{d}{dv} \left(v^4 NQ_m \left(f_0 + \frac{\kappa T}{mv} \frac{df_0}{dv} \right) \right) \\ & + \sum_i \left\{ \frac{v' f_0(v')}{v} Nv' Q_i(v') - f_0(v) Nv Q_i(v) \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Podemos realizar ahora un cambio de variable, de velocidades a energías, de forma que $\frac{1}{2}mv^2 = \varepsilon$, y multiplicando por $4\pi\sqrt{\varepsilon}/m$ se tiene

$$\begin{aligned} & -\frac{(am)^2}{3} \frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{NQ_m} \frac{dF_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) + \frac{2m}{M} \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \varepsilon^2 NQ_m (F_0(\varepsilon) + \kappa T \frac{dF_0(\varepsilon)}{d\varepsilon}) \right\} \\ & + \sum_i N[\varepsilon' F_0(\varepsilon') Q_i(\varepsilon') - \varepsilon F_0(\varepsilon) Q_i(\varepsilon)] = 0 \end{aligned} \quad (3.52)$$

donde $F_0(\varepsilon) = 4\pi\sqrt{\frac{2}{m^3}} f_0(v)$ es la nueva función de distribución en función de las energías, que guarda la normalización, de modo que ahora

$$\int_0^\infty F_0(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = 1 \quad (3.53)$$

Tenemos una ecuación diferencial de segundo orden, que convertiremos en una ecuación integro-diferencial, integrando la ecuación en la variable energía. Los términos que provienen de colisiones elásticas son diferenciales exactos, mientras que en el otro término, que describe las colisiones inelásticas, hay que tener en cuenta que

$$v'^2 - v^2 = v_i^2 \quad (3.54)$$

o pasado a energías

$$\varepsilon' - \varepsilon = \varepsilon_i \quad (3.55)$$

Con todo obtenemos

$$\begin{aligned} & \left[\frac{(eE)^2}{3} \frac{\varepsilon}{NQ_m} + 2m\kappa T \varepsilon^2 \frac{NQ_m}{M} \right] \frac{dF_0}{d\varepsilon} + 2m\varepsilon^2 \frac{NQ_m}{M} F_0 \\ & + \sum_i \int_{\varepsilon}^{\varepsilon+\varepsilon_i} \varepsilon' F_0(\varepsilon') NQ_i(\varepsilon') d\varepsilon' = 0 \end{aligned} \quad (3.56)$$

donde la aceleración es $a = -\frac{Ee}{m}$.

Esta es la ecuación de Holstein-Boltzmann que intentaremos resolver, introduciendo las secciones eficaces de los gases por los que derivan los electrones. Cualquier información que queramos obtener sobre los parámetros de deriva se puede expresar como una integral de la función de distribución, o de sus derivadas.

Existen varios pasos importantes en la deducción de esta expresión en los que hemos realizado una serie de aproximaciones sin justificación a priori, y que es necesario repasar.

Cuando realizamos el desarrollo en esféricos armónicos y cogemos sólo los dos primeros términos, estamos realizando una aproximación que facilita mucho los resultados, pero que limita las posibilidades de utilización del método. Esto se debe fundamentalmente a que las condiciones necesarias para poder utilizar la aproximación son muy restrictivas, en cuanto a la forma que las secciones eficaces inelásticas pueden tener. De hecho, las secciones eficaces del gas deben cumplir la condición siguiente, tal como especifica Holstein [16]

$$\int_{\omega} (1 - \cos\psi) q_m(\psi, v) d\omega \gg \sum_i \int_{\omega} q_i(\psi, v) d\omega \quad (3.57)$$

Se verá que gases de uso común en detectores, como son el metano, que estudiaremos posteriormente, no cumplen, a priori, esta regla. En algún rango de energías las secciones eficaces inelásticas del metano adquieren valores comparables o superiores a las secciones eficaces de transferencia de momento. La fiabilidad del método utilizado en estos casos debe restringirse a las pruebas que se puedan hacer de los resultados, al compararlos con los resultados que se obtienen por otros métodos más precisos, como son la solución exacta o una expansión con más términos. En cuanto a este último desarrollo, la expansión multitérmino, no utilizado en este trabajo, puede ser estudiado en el artículo dedicado al mismo de Pitchford et al. [20].

Se debe justificar también la introducción de un término nuevo en la ecuación, realizada al sustituir la función de distribución f_0 , por la ecuación

3.50, en la parte que explica las colisiones elásticas. La introducción del término tiene un origen físico claro. En el límite de campos reducidos bajos, la ecuación 3.49 conducía a una energía cero para los electrones, lo que no es compatible con la existencia de una temperatura, que obliga a los electrones a adquirir una energía cinética del orden de la que tienen las moléculas del gas, esto es, a temperatura ambiente (290 K), de unos 0.025 eV. Por tanto el término queda plenamente justificado en este límite, mientras que para campos altos, es despreciable, como ya se esperaba al asegurar que las moléculas se consideraban en reposo en las colisiones con los electrones. Este término corrige por tanto los problemas que tal suposición podía acarrear para campos muy bajos.

También se ha despreciado una serie de términos de la ecuación en los que, dentro de las integrales que representan los balances energéticos de las colisiones inelásticas, sólo se encontraba f_1 , esto es, el segundo factor del desarrollo en dos términos. Basándose en la ecuación 3.57 podemos asegurar que la mayor contribución a la velocidad de deriva promedio proviene de los términos de colisiones elásticas. A pesar de ello, no se pueden despreciar el resto de los términos, porque con ello no se tendrían en cuenta los efectos de pérdidas de energía por colisiones inelásticas, que acaban siendo importantes.

3.4 La ecuación de Holstein: resolución y programación

Partiremos de la ecuación de Holstein-Boltzmann, tal y como se ha deducido anteriormente, esto es

$$\left[\frac{(eE)^2}{3} \frac{\varepsilon}{NQ_m} + 2m\kappa T \varepsilon^2 \frac{NQ_m}{M} \right] \frac{dF_0}{d\varepsilon} + 2m\varepsilon^2 \frac{NQ_m}{M} F_0 + \sum_i \int_{\varepsilon}^{\varepsilon+\varepsilon_i} \varepsilon' F_0(\varepsilon') NQ_i(\varepsilon') d\varepsilon' = 0 \quad (3.58)$$

Aplicaremos esta ecuación en todos los casos que nos propongamos resolver, aún en aquellos en los que las secciones eficaces inelásticas aparezcan a energías lo suficientemente altas como para suponer que no influiran apreciablemente para los campos en los que estamos trabajando. Esto es lo que se podría pensar en el caso de argón, donde el umbral de inicio de las secciones eficaces inelásticas se presenta a energías bastante altas. Sin embargo, y como se verá posteriormente, aún en este caso notaremos los efectos en nuestros cálculos.

Como ya expusimos, la ecuación no describe colisiones superelásticas, muy improbables en el rango de temperaturas y en los gases en los que se está trabajando.

Con el objetivo de llegar a una expresión adecuada al trabajo informático, se utilizará una serie de cambios en las variables de la ecuación, realizados por primera vez por Frost y Phelps [7]. Estos cambios se producen en la escala de las secciones eficaces, de la variable energética y de la definición de constantes.

$$\begin{aligned}\alpha &= \left(\frac{E}{p}\right)^2 \frac{M_0 e^2}{6mQ_0^2} & \theta &= \frac{Q_m/Q_0}{M/M_0} \\ \eta_i &= \frac{M_0 Q_i}{2mQ_0} & \theta' &= \frac{Q_m}{Q_0} \\ z &= \frac{\epsilon}{\kappa T} & F_0(z) &= (\kappa T)^{\frac{3}{2}} F_0(\epsilon)\end{aligned}\quad (3.59)$$

donde $Q_0 = 10^{-15} \text{cm}^2$ es constante y M_0 es la masa molecular del átomo de hidrógeno. De esta manera la ecuación de Holstein 3.58 se traduce a la forma

$$z\left[\frac{\alpha}{\theta'} + z\theta\right]\left(\frac{dF_0(z)}{dz}\right) + z^2\theta F_0(z) + \sum_i \int_z^{z+z_i} z' F_0(z') \eta_i(z') dz' = 0 \quad (3.60)$$

La condición de normalización para la nueva distribución será

$$\int_0^\infty F_0(z) \sqrt{z} dz = 1 \quad (3.61)$$

Esta ecuación se puede resolver siguiendo un proceso iterativo, tras realizar unas transformaciones. En primer lugar, reordenando los términos de forma que se obtiene en uno de los miembros una derivada logarítmica de la función de distribución, llegamos a que

$$-\frac{1}{F_0} \frac{dF_0}{dz} = \frac{z\theta\theta' + \frac{\theta' S(z, F_0)}{zF_0}}{z\theta\theta' + \alpha} = G(z) \quad (3.62)$$

donde representamos

$$S(z, F_0) = \sum_i \int_z^{z+z_i} F_0(z') z' \eta_i(z') dz' \quad (3.63)$$

como la integral que recoge los efectos de la dispersión inelástica de los electrones por los átomos o moléculas.

Escrito de esta forma es fácil observar que la función de distribución de los electrones se puede encontrar integrando la ecuación 3.62, para obtener

$$F_0(z) = A e^{-\int_0^z G(z') dz'} \quad (3.64)$$

La constante A queda fijada por la normalización de la función de distribución

$$\int_0^{\infty} \sqrt{z} F_0(z) dz = 1 \quad (3.65)$$

Conseguiremos resolver de forma aproximada la ecuación de Holstein-Boltzmann siguiendo un sistema iterativo. Se comienza con una función de distribución F_0 de prueba (llamémosla $F_0^{(0)}$), que se introduce en la ecuación 3.62. Con las entradas de las secciones eficaces tanto elásticas como inelásticas, y tras las operaciones adecuadas se encuentra la función auxiliar $G(z)$ (o al igual que antes $G^{(0)}(z)$). De aquí se vuelve a encontrar otra función de distribución, $F_0^{(1)}$, sin más que usar la ecuación 3.64. Repitiendo estos dos pasos tenemos un proceso iterativo que, si es convergente, nos permite hallar una sucesión de funciones de distribución $\{F_0^{(n)}\}$ cuyos términos se aproximan a la solución F_0 de la ecuación 3.60. El proceso se sigue hasta que se cumple un determinado criterio de convergencia, según el cual las funciones obtenidas en iteraciones sucesivas se diferencien poco, o bien una propiedad integral de la distribución (como la energía media o la velocidad de deriva) se estabilice. El número de iteraciones que el programa realiza en la búsqueda de la estabilidad varía según el gas, el campo reducido y la precisión requerida en el criterio de convergencia. Esta serie de procesos se realiza para cada uno de los valores del campo reducido E/p que se especifique^a.

Una vez encontrada la distribución electrónica en energías para cada campo, se deducen de ella los coeficientes de deriva, y aquellas informaciones de interés en el estudio del paso de los electrones por el gas.

1. La velocidad de deriva se define como

$$u = -\left(\frac{E}{p}\right) \left(\frac{2e^2 \kappa T}{9Q_0^2 m}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} \frac{z}{\theta'} \frac{dF_0}{dz} dz \quad (3.66)$$

Este parámetro determina la velocidad con la que se desplaza la nube de electrones que deriva en el gas. Esta velocidad no tiene por que coincidir con la velocidad de un electrón prueba en el gas, y se obtiene como un promedio sobre la distribución que determina las energías de los electrones.

En un detector de deriva, donde es necesario saber con precisión la posición de la ionización primaria, el conocimiento de la velocidad de deriva de los electrones en el gas permite la determinación de una de las coordenadas del punto de ionización. Esto ayuda a reproducir la traza de las partículas que atraviesa el gas del detector.

^aSe utiliza la presión $p = N\kappa T$ en vez de la densidad N del gas

2. El coeficiente de difusión transversal al campo (y a la dirección de la velocidad de deriva) se determina por la ecuación

$$D = \left(\frac{1}{p}\right) \left(\frac{2(\kappa T)^3}{9Q_0^2 m}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \frac{z}{\theta'} F_0 dz \quad (3.67)$$

Esta cantidad da una medida cuantitativa del ensanchamiento que las colisiones producen en la distribución espacial de la nube electrónica, según esta se mueve en el seno del gas. Remitiéndonos de nuevo a la cámara de deriva, se encuentra que aquellos gases que ofrecen valores del coeficiente de difusión mayores, provocan que la recogida de señal se realice en una zona menos localizada del detector, con la consiguiente pérdida de localización de la partícula inicial. Los gases denominados fríos, como el dióxido de carbono, tienen la propiedad de presentar un coeficiente de difusión transversal muy pequeño. Esto resulta adecuado para los detectores que requieran una precisa localización espacial.

3. La energía media de los electrones viene dada por

$$\bar{\varepsilon} = \kappa T \int_0^\infty z^{\frac{3}{2}} F_0(z) dz \quad (3.68)$$

Esta cantidad, importante desde el punto de vista teórico, no se puede determinar experimentalmente. Esta es la razón de que se utilice como parámetro de mayor interés experimental la energía característica, que no es más que una combinación de coeficientes, que se pueden obtener experimentalmente, y que tiene las dimensiones de energía. Las energías medias y características de los electrones suelen encontrarse próximas, estando relacionadas en primera aproximación (frecuencias de colisión independientes de la energía de los electrones incidentes, véase [2]) por la expresión

$$\varepsilon_k = \frac{2}{3} \bar{\varepsilon} \quad (3.69)$$

4. La energía característica ε_k se define como

$$\varepsilon_k = \frac{eD}{\mu} \quad (3.70)$$

donde μ es la movilidad de los electrones, esto es, el cociente entre la velocidad de deriva y el campo eléctrico. La movilidad de los electrones resultaría un coeficiente constante, en el caso en el que la dependencia de la velocidad de deriva con el campo reducido aplicado fuera lineal. Esto, como veremos, sólo ocurre para campos reducidos muy pequeños, y en

general la movilidad será una función no constante, dependiente del gas y del campo reducido.

En muchas de las referencias utilizadas se estudia el cociente entre el coeficiente de difusión y la movilidad, lo cual tiene dimensiones de voltaje. En el presente trabajo se han considerado equivalentes el cociente y la energía característica (con el adecuado cambio de dimensiones y unidades).

5. El coeficiente de asimetría es

$$\left\langle \frac{f_1}{f_0} \right\rangle = -\left(\frac{E}{p}\right) \frac{e}{Q_0} \int_0^\infty \frac{z^{\frac{1}{2}}}{\theta'} \frac{df_0}{dz} dz \quad (3.71)$$

Este coeficiente definido por Mathieson [8], no es más que el valor medio del cociente entre los valores que adquieren los coeficientes de primer y segundo orden del desarrollo de la función de distribución. Será, por tanto, una medida del buen comportamiento de la aproximación de dos términos para el gas que nos ocupe en cada momento. Cuando el coeficiente sea pequeño (mucho menor que uno), la aproximación de dos términos será correcta (véase el apartado 4.1.1 y la figura 4.5).

6. Se define la desviación típica por distancia x de deriva como

$$\sigma(x) = \sqrt{\frac{2Dx}{u}} \quad (3.72)$$

donde x es la distancia recorrida por la nube electrónica. Se suele especificar la desviación típica en un centímetro de deriva, y de esta forma lo utilizaremos en este trabajo. Ofrece información sobre la dispersión transversal de la señal en los detectores.

La velocidad de deriva y la energía característica son de gran interés cuando se quieren determinar con precisión las características del detector. Ambas ofrecen información sobre las distribuciones electrónicas en el medio, y por ende, de las secciones eficaces de los gases. La información que ofrecen no resulta redundante, sino complementaria, debido a que en la velocidad de deriva aparece la expresión de la derivada de la distribución de electrones, mientras que en la energía característica lo que aparece es la distribución en sí. Una explicación más completa, y un algoritmo destinado a encontrar las secciones eficaces a partir de estas informaciones independientes (no empleado aquí) se pueden encontrar en la referencia [21].

En los capítulos dedicados a cada gas, o a mezclas de estos, se compararán los valores obtenidos por el programa, utilizando las fórmulas anteriores, y los valores que para estos parámetros han obtenido diversos autores en recientes trabajos.

3.4.1 Observaciones de la programación

Como se ha mostrado en el apartado 3.4, es necesario a lo largo de nuestros cálculos trabajar con varias funciones (en concreto F_0, G, S) que dependen de la variable continua energía, representada, salvo un cambio de escala, por z . Para traducir a lenguaje informático esta pretensión, hacemos una partición, en subintervalos iguales, del intervalo de energías $[0, z_{max}]$ y calculamos los valores de las funciones en los puntos de la partición. De este modo, el programa trabaja con una red de 2^N subintervalos, donde N toma valores entre 13 y 15, dependiendo del tipo de gas. Se han realizado pruebas con valores de N mayores (hasta $N = 19$) sin apreciar una mejora sustancial, y retardando el tiempo de computación considerablemente. Ciertas funciones como son las secciones eficaces, tanto elásticas como inelásticas, están definidas sólo en ciertos puntos, aún siendo necesario su conocimiento en cada determinación de G o F_0 . Se utiliza una subrutina de interpolación para conseguir los valores en todos los puntos de la partición. La interpolación usada actualmente es cuadrática, pudiéndose usar otras aproximaciones como la lineal, sin que los resultados resulten modificados.

Los parámetros de deriva se obtienen para determinados valores del campo, pudiendo elegir el usuario el valor inicial y el final, y el número de puntos en los que se calculan los parámetros. Usualmente los cálculos que se han realizado abarcan campos reducidos entre 0.050 y 4.500 V/cm torr. En este rango las distribuciones electrónicas no adquieren energías demasiado elevadas en los gases que nos ocupan, de forma que no se encuentran fenómenos de ionización en ningún caso. En todos los casos la variable temperatura se puso en 290K.

Cada uno de los cálculos iterativos realizados entre las funciones $F_0^{(n)}(z)$ y $G^{(n)}(z)$ se ha hecho dándole valores a las funciones en un intervalo de trabajo. Este intervalo empieza en un valor próximo a cero, comenzando la iteración para un valor no nulo, extrapolarlo posteriormente la función $G(z)$ en puntos próximos a $z = 0$, de forma que sea cero cuando $z = 0$. Se realizan así los cálculos porque no disponemos de secciones eficaces de energía menor que una

dada, y por tanto comenzamos las iteraciones en este valor. Las distribuciones energéticas caen de forma exponencial, haciendo posible escoger un valor a partir del que se puede suponer que la función se anula, o que no influirá en la determinación de los parámetros de deriva. Este valor máximo de z corresponderá a la máxima energía a la que el programa trabaja, siendo del orden de algunos electronvoltios.

Si en cada iteración recorriéramos el rango completo de energías en el cálculo de las funciones $F_0^{(n)}(z)$ y $G^{(n)}(z)$, tendríamos un retraso considerable e innecesario en el tiempo de computación. Cuando la distribución se hace prácticamente cero, no interviene en el proceso de determinación de los parámetros de deriva, y por tanto es aconsejable, y así se ha hecho, escoger un criterio de corte en energías altas. Para ello, se trabaja, para el primer campo reducido, sobre todo el rango de trabajo, hasta el límite superior de energías, elegido previamente de forma que se compruebe que es muy superior a la energía en la que se anulan las distribuciones. Sobre este primer resultado se considera donde se puede poner un corte, tal que los resultados en los parámetros de deriva cambien en una cantidad menor al 0.01%. En los sucesivos valores del campo reducido, se escoge una cota de corte ligeramente superior, (escogida en función de nuestra experiencia en la visualización de los resultados), dado que para campos mayores es de esperar que aumente la probabilidad de encontrar electrones a mayores energías.

Las iteraciones se producen hasta que se cumpla un criterio de convergencia. Este criterio se puede elegir a partir de una función estadística que analice la discrepancia entre los valores de las funciones $F^{(n)}(z)$ en dos iteraciones consecutivas. Para esta función estadística se puede escoger entre una propiedad integral de la distribución, como es la energía media o la velocidad de deriva, o una función que de cuenta de la distancia entre las distribuciones en cada iteración. Ambos criterios se han utilizado, no existiendo diferencias apreciables entre las aproximaciones finales.

Tras la consecución de una distribución electrónica ajustada a nuestros criterios para cada valor del campo reducido, se procede a extraer toda la información integral que podamos obtener. Para ello se habilitan una serie de funciones que calculan los valores de los parámetros de deriva que nos interesen. Estas funciones se encuentran a través de integrales, las cuales se realizan por una subrutina externa que hace una suma de trapecios. Sin embargo, en el caso de las integraciones realizadas en el proceso de iteración para conseguir ajustar la distribución electrónica en función de la energía, a partir del conocimiento de $G(Z)$, las continuas llamadas a esta subrutina ralentizarían

el programa en demasía. La solución adoptada consistió en guardar el valor de la integral realizada para la variable z anterior, y sumarle y restarle las cantidades necesarias (esto es, los trapecios adecuados).

Como se ha explicado, el programa realiza una serie de iteraciones hasta llegar a cumplir un criterio de convergencia. En su comienzo es necesario tomar una función inicial $F_0^{(0)}(z)$, con cierto sentido físico, de manera que se tome como base sobre la que comenzar las iteraciones. Se ha escogido una función triparamétrica, de la forma

$$F_0(z) = Ae^{-(az^2+bz+c)} \quad (3.73)$$

La constante A establece la normalización de la función. En el caso de escoger los parámetros $a = 0, b = 1, c = 0$, se obtiene la función de Maxwell, que normalizada es

$$F_0(z) = \frac{e^{-z}}{\Gamma(3/2)} = \sqrt{\frac{4}{\pi}} e^{-z} \quad (3.74)$$

La función inicial se introduce para la primera iteración del primer campo reducido. Para las primeras iteraciones de los campos reducidos siguientes se utilizó la distribución obtenida, como resultado final, en el paso inmediatamente anterior.

En otros momentos se han usado otro tipo de funciones, con diversos parámetros, encontrándose que los resultados sólo cambiaban para campos muy bajos (en el cálculo del primer y tal vez del segundo campo reducido pedido), y de forma poco apreciable.

Capítulo 4

Estudio de los gases puros

4.1 Argon

El argon es un gas atómico, como son los que forman los elementos nobles. Por esta razón, el potencial que notarán los electrones que deriven en su seno tendrá simetría esférica, y caerá rápidamente, de forma que las secciones eficaces de transferencia de momento tienen un mínimo de Ramsauer-Townsend muy pronunciado, aproximadamente a una energía de 0.21 eV. Los estudios de las secciones eficaces del argon a bajas energías se remontan a los trabajos de Ramsauer en el año 1921, donde encontró los indicios del anómalo comportamiento de las secciones eficaces en este rango. Los resultados de distintos autores [9, 15, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29] han sido tenidos en cuenta a la hora de determinar que sección eficaz se considera inicialmente en la programación, intentando posteriormente cambiarla con el fin de conseguir un mejor ajuste a los parámetros de deriva.

En la figura 4.1 se presenta la sección eficaz de transferencia de momento del argon introducida en el programa, comparada con algunas de las ofrecidas por los artículos antes mencionados. En la tabla 4.1 se presenta tabulada esta sección eficaz que, introducida en el programa, ajusta con mayor exactitud los parámetros de deriva experimentales. Las secciones eficaces que se han conseguido son muy parecidas a las ofrecidas en los artículos recientes. Las determinaciones experimentales son bastante precisas, ya que el gas no presenta secciones eficaces inelásticas en las energías consideradas. Por tanto, en principio deberíamos considerar incorrecto nuestro análisis si las secciones

Figura 4.1: *Sección eficaz de transferencia de momento e inelásticas del argon. Se compara con las ofrecidas por Brown [30], Milloy [31], England [32], Nakamura [33] y Pack [15].*

eficaces que obtuvieramos no concordaran con estos resultados establecidos.

Las secciones eficaces inelásticas del argon se presentan a energías por encima de los 10 eV. Estas secciones eficaces se refieren a los procesos de excitación electrónica del argon, ya que al ser un gas monoatómico no presenta ningún tipo de excitación por rotación o vibración. El hecho de encontrar las secciones eficaces inelásticas a energías tan altas, hace que los electrones alcancen unas energías medias (y también características) muy altas, en comparación con el resto de gases estudiado. Los electrones que derivan en el gas con energías menores a los 10 eV sólo colisionan elásticamente, perdiendo en cada colisión una parte muy pequeña de su energía, como se puede ver en el apartado 3.1. Tanto en el metano como en el dióxido de carbono, que estudiaremos posteriormente, se encuentra que las secciones eficaces inelásticas aparecen a energías muy bajas (del orden de 0.1 eV). Los electrones de baja energía colisionan con las moléculas, manteniendo sus energías medias y características muy bajas. De hecho, en los valores de campo reducido en los que nos movemos en este trabajo, sólo podríamos chequear el comportamiento de las secciones eficaces para el metano y el dióxido de carbono en energías muy bajas (por debajo de los 5 eV en el primer caso, y menos aún en el segundo), mientras que en las mezclas que ambos realizan con el argon se pueden estudiar los comportamientos de las secciones eficaces a más altas energías (poco más de los 10 eV).

En la figura 4.2 se puede ver la forma que toman las distribuciones de la nube de electrones que se mueve en el gas argon. Se mostrarán las funciones de densidad electrónica, esto es la función F_0 multiplicada por la raíz de la energía (en todos los casos se representará esta cantidad normalizada, véase la expresión 3.53). Los electrones alcanzan con facilidad energías altas, del orden de varios eV, hasta encontrarse con colisiones inelásticas en las que pierden rápidamente su energía. La forma que adquieren estas distribuciones o densidades es característica de cada gas. Requiere una explicación en función de las secciones eficaces, tanto elásticas como inelásticas. Las densidades electrónicas del argon toman valores muy bajos en un amplio rango de energías, esto es, no se ven frenados por colisiones inelásticas hasta superar los 10 eV. La forma de estas densidades depende directamente de las secciones eficaces elásticas, en este caso. Véase, respecto a la forma analítica de las distribuciones, las referencias [2, 17].

Energía	Sección	Energía	Sección	Energía	Sección
0.010	3.981	0.11	0.462	1.20	1.575
0.011	3.903	0.12	0.369	1.30	1.717
0.012	3.837	0.13	0.278	1.40	1.861
0.013	3.778	0.14	0.226	1.50	2.005
0.014	3.717	0.15	0.176	1.60	2.149
0.015	3.657	0.16	0.144	1.70	2.295
0.016	3.603	0.17	0.119	1.80	2.441
0.017	3.517	0.18	0.101	1.90	2.588
0.018	3.410	0.19	0.090	2.0	2.742
0.019	3.323	0.20	0.086	2.2	3.031
0.020	3.221	0.22	0.082	2.4	3.330
0.022	3.077	0.24	0.087	2.6	3.631
0.024	2.928	0.26	0.094	2.8	3.933
0.026	2.793	0.28	0.110	3.0	4.238
0.028	2.675	0.30	0.137	3.5	5.005
0.030	2.550	0.35	0.212	4.0	5.782
0.035	2.265	0.40	0.285	4.5	6.565
0.040	2.037	0.45	0.377	5.0	7.389
0.045	1.873	0.50	0.481	6.0	9.196
0.050	1.665	0.55	0.591	7.0	11.064
0.055	1.493	0.60	0.683	8.0	12.987
0.060	1.320	0.70	0.840	9.0	14.948
0.070	1.056	0.80	0.987	10.0	16.216
0.080	0.834	0.90	1.148	11.0	16.549
0.090	0.689	1.00	1.292	12.0	16.373
0.100	0.569	1.10	1.433	13.0	15.909

Tabla 4.1: Sección eficaz de transferencia de momento del argón. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2 .

Figura 4.2: *Funciones de densidad electrónica frente a la energía para el argon. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.*

4.1.1 Resultados

Se han encontrado datos experimentales obtenidos por distintos autores, [22, 25, 34, 35] que nos ofrecen una amplia muestra con la que comparar los valores de los parámetros de deriva que ofrece el programa. Tanto en este gas como en el resto, se han escogido como parámetros determinantes la velocidad de deriva y la energía característica, que, independientemente, proporcionan información sobre las distribuciones electrónicas y de los que se dispone una mayor cantidad de referencias.

La velocidad de deriva que el programa ha obtenido para el argon, a partir de la sección eficaz de transferencia de momento ofrecida en la tabla 4.1, se presenta en la figura 4.3, comparada con las obtenidas por otros autores referenciados anteriormente.

La velocidad de deriva del argon crece con el campo reducido, aunque no lo hace de forma lineal, a partir de campos reducidos del orden de 0.2 V/cm torr . El origen de este comportamiento se encuentra en la ausencia de secciones eficaces inelásticas a bajas energías (las energías del mínimo de Ramsauer-Townsend), que permite que la velocidad crezca con el campo. Los resultados del programa concuerdan bien con los experimentales, si bien estos muestran ciertas discrepancias entre sí, del orden del 10% o incluso mayores.

La energía característica del argon se muestra en la figura 4.4. Crece con el campo reducido, comportamiento que encontramos en todos los casos estudiados (la energía característica se comporta de forma muy parecida a la energía media, que debe crecer con el campo aplicado, véase la ecuación 3.69). Toma valores altos, ya que los electrones se encuentran en un medio en el que sólo pueden colisionar elásticamente, mientras no alcancen energías de más de 11 eV, y por tanto pierden muy poca energía por colisión. A bajas energías se combinan en el argon la inexistencia de las secciones eficaces inelásticas con un mínimo de Ramsauer-Townsend muy marcado.

Dado que las secciones eficaces inelásticas del argon se presentan a unas energías muy altas, muy por encima del mínimo de Ramsauer-Townsend, y que no alcanzan la magnitud de las elásticas en el rango de energías en el que se trabaja en esta serie de cálculos, las aproximaciones usadas al deducir la ecuación de Boltzmann-Holstein quedan plenamente justificadas. Como prueba de ello se puede observar en la figura 4.5 el coeficiente de asimetría del argon, calculado para los campos reducidos utilizados, que, en ningún

Figura 4.3: *Velocidad de deriva en el argon. Los datos experimentales son de Wagner [36], Bowe [37], Pack [34], Robertson [38] y Christophorou [25].*

Figura 4.4: *Energía característica de los electrones en el argon. Los datos experimentales son de Townsend [39], Warren [40] y Milloy [41].*

Figura 4.5: *Coeficiente de asimetría obtenido para el argon, el metano y el dióxido de carbono.*

caso toma valores mayores de 0.05, ni siquiera para los campos en los que las energías medias se aproximan a los valores umbrales de las secciones eficaces inelásticas.

4.2 Metano

El metano es un gas a temperatura ambiente, compuesto por moléculas formadas por un átomo de carbono y cuatro átomos de hidrógeno. Por sus características espectrales se emplea en muchas ocasiones como componente de las cámaras de deriva. con la función principal de absorber los fotones ultravioleta producidos por el argon en la avalancha anódica.

La sección eficaz de transferencia de momento del metano presenta un mínimo de Ramsauer-Townsend, provocado por el carácter simétrico del potencial de la molécula. Este mínimo aparece alrededor de los 0.25 eV. Se encuentran secciones eficaces inelásticas de excitación de niveles rotacionales a energías bajas, con umbrales en 0.2 eV, aproximadamente, lo que provoca un cambio profundo en las distribuciones electrónicas. A energías intermedias (sobre 9 eV) surgen los umbrales de las secciones eficaces de disociación de la molécula. Como explica Davies [10], no existe ningún estado electrónico excitado estable en la molécula del metano, y todas las excitaciones electrónicas conducen a la disociación de la molécula con la producción de dos o tres fragmentos como resultado. Las secciones eficaces de ionización aparecen a energías mayores de las que se emplean en nuestros cálculos (esto es, los campos reducidos en los que hemos hecho trabajar al programa, no provocan que los electrones alcancen estas energías). Esto se puede comprobar tanto con las distribuciones electrónicas obtenidas por el programa, como por los datos experimentales.

En el programa se han introducido los valores de las secciones eficaces de transferencia de momento, así como los valores de tres secciones eficaces inelásticas, dos de rotación, y la de disociación. Estas secciones eficaces, función de la energía, se introducen como ficheros de datos, con lo que el acceso a la modificación de los mismos para ajustar los valores de los parámetros de deriva es inmediata. Se han tenido en cuenta los resultados previos tratados en los artículos [26, 42, 43, 44] de la bibliografía.

Según la polémica suscitada por diversos autores [10, 20, 22], el método

Figura 4.6: *Sección eficaz de transferencia de momento del metano. Se compara con las ofrecidas por Schmidt [42] y de Althorpe [43].*

Figura 4.7: *Secciones eficaces inelásticas del metano. Se compara con las ofrecidas por Schmidt [42] y de Althorpe [43].*

Energía	Sección	Energía	Sección	Energía	Sección
0.010	13.804	0.11	1.587	1.20	3.186
0.011	13.502	0.12	1.431	1.30	3.396
0.012	13.021	0.13	1.321	1.40	3.604
0.013	12.731	0.14	1.239	1.50	3.808
0.014	13.315	0.15	1.173	1.60	4.010
0.015	12.012	0.16	1.128	1.70	4.210
0.016	11.695	0.17	1.091	1.80	4.406
0.017	11.412	0.18	1.066	1.90	4.601
0.018	11.153	0.19	1.045	2.0	4.794
0.019	10.702	0.20	1.035	2.2	5.175
0.020	10.459	0.22	1.015	2.4	5.515
0.022	9.867	0.24	1.003	2.6	5.808
0.024	9.362	0.26	0.999	2.8	6.070
0.026	8.942	0.28	1.010	3.0	6.327
0.028	8.589	0.30	1.025	3.5	6.940
0.030	8.100	0.35	1.090	4.0	7.520
0.035	7.016	0.40	1.196	4.5	7.966
0.040	6.135	0.45	1.313	5.0	8.309
0.045	5.325	0.50	1.492	5.5	8.631
0.050	4.693	0.55	1.641	6.0	8.940
0.055	4.109	0.60	1.791	7.0	9.311
0.060	3.638	0.70	2.069	8.0	9.559
0.070	2.931	0.80	2.303	9.0	9.688
0.080	2.432	0.90	2.531	10.0	9.727
0.090	2.062	1.00	2.753	11.0	9.752
0.100	1.779	1.10	2.972	12.0	9.724

Tabla 4.2: *Sección eficaz de transferencia de momento del metano. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en $10^{-16}cm^2$.*

Energía	Sección	Energía	Sección	Energía	Sección
0.159	0.000	0.400	0.588	1.600	0.363
0.160	0.025	0.450	0.574	1.800	0.359
0.170	0.188	0.500	0.550	2.000	0.356
0.180	0.334	0.550	0.530	2.500	0.367
0.190	0.401	0.600	0.511	3.000	0.409
0.200	0.438	0.650	0.495	4.000	0.592
0.220	0.514	0.700	0.481	5.000	0.810
0.240	0.552	0.800	0.456	6.000	1.012
0.260	0.572	0.900	0.435	7.000	1.094
0.280	0.588	1.000	0.417	8.000	1.095
0.300	0.594	1.200	0.390	9.000	1.041
0.350	0.602	1.400	0.373	10.000	0.955

Tabla 4.3: Primera sección eficaz inelástica del metano. Las energías aparecen en eV, y la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2 .

Energía	Sección	Energía	Sección	Energía	Sección
0.355	0.000	0.480	0.203	1.600	0.186
0.360	0.013	0.500	0.209	1.800	0.182
0.370	0.035	0.530	0.218	2.000	0.180
0.380	0.058	0.570	0.225	2.500	0.194
0.390	0.081	0.600	0.228	3.000	0.234
0.400	0.104	0.650	0.229	4.000	0.402
0.410	0.124	0.700	0.229	5.000	0.628
0.420	0.142	0.800	0.226	6.000	0.866
0.430	0.158	0.900	0.221	7.000	0.973
0.440	0.173	1.000	0.214	8.000	0.975
0.450	0.185	1.200	0.200	9.000	0.907
0.460	0.192	1.400	0.191	10.000	0.832

Tabla 4.4: Segunda sección eficaz inelástica del metano. Las energías aparecen en eV, y la sección eficaz está expresada en 10^{-16}cm^2 .

Figura 4.8: *Funciones de densidad electrónica frente a la energía en el metano. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.*

de resolución de la ecuación de Boltzmann a través de una aproximación de dos términos puede no resultar el más adecuado. Ello es debido, según afirman, a que las secciones eficaces totales inelásticas resultan del orden de la elástica en diversas zonas, como son en el mínimo de Ramsauer-Townsend, y a muy altas energías, donde las secciones eficaces de disociación de la moléculas son muy altas. Si bien esto es cierto, las energías en las que nos mantenemos en este trabajo sólo permiten que los problemas surjan en la zona del mínimo de Ramsauer-Townsend, y aún en esta zona la separación entre lo obtenido por la aproximación de dos términos y otras aproximaciones no resulta grande. Incluso en el propio texto de Davies et al. [10] aparece una comparativa con un Monte Carlo realizado por el autor, en la que se puede observar que para campos pequeños (del orden de 3 V/cm torr o menores, como los elegidos para los cálculos) es mejor la aproximación de dos términos en su ajuste a los datos experimentales (obtenidos por el propio autor). También en el artículo de Pitchford [20] se ofrece una comparación de los parámetros de deriva obtenidos por los métodos de dos términos, y multitérmino, obteniéndose diferencias mínimas.

En la figura 4.6 se presentan las secciones eficaces de transferencia de momento del metano introducidas en el programa, comparadas con algunas de las ofrecidas por los artículos antes mencionados. En la figura 4.7 se observan las secciones eficaces inelásticas con las que se obtuvieron los resultados, y los resultados de otros autores.

Se ofrecen también los valores de las secciones eficaces, tanto de transferencia de momento como las dos primeras inelásticas, en las tablas 4.2, 4.3 y 4.4. El programa considera también un proceso inelástico a energías mayores, con el umbral por encima de los 9.1 eV.

Los resultados obtenidos se asemejan a los que recientemente Althorpe et al. [43] presentan, obtenidos a partir de un método teórico independiente del aquí expuesto. La variación, respecto a las propuestas por otros autores, consiste en la subida de la posición del mínimo de la sección eficaz de transferencia de momento, como se puede observar en la figura 4.6. Las determinaciones experimentales de la posición de este mínimo se ven dificultadas por la coincidencia, en cuanto a la energía que se produce, con el máximo de las secciones eficaces de dispersión inelástica.

En la figura 4.8 se puede ver la forma que toman las distribuciones electrónicas del metano. Los electrones que derivan en este gas colisionan inelásticamente a bajas energías. Esto explica que no existan, prácticamente,

electrones con energías por encima de los 2 eV, para los campos reducidos indicados. En términos generales, se observa una disminución en los valores de las distribuciones, para aquellas energías en las que las probabilidades de colisionar inelásticamente son altas.

4.2.1 Resultados

Se han recopilado datos sobre recientes medidas de los parámetros de deriva del metano, como son la velocidad de deriva o la energía característica. En concreto, se ha recurrido especialmente a las referencias [8, 22, 26, 35, 45] de la bibliografía.

La velocidad de deriva y la energía característica del metano, que el programa ha obtenido a partir de las secciones eficaces ofrecidas en las tablas 4.2, 4.3 y 4.4, se presenta en las figuras 4.9 y 4.10, comparadas con las obtenidas por varios autores, referenciados en el pie de cada figura. La velocidad de deriva obtenida ajusta perfectamente la zona de crecimiento lineal a campos bajos, esto es, la zona en la que la movilidad es constante (véase la página 64). En la zona del máximo los valores experimentales se distribuyen en una banda con una anchura de aproximadamente $0.5 \text{ cm}/\mu\text{s}$. En ningún caso los valores experimentales considerados se separan de la curva obtenida por el programa más de un 5%.

El máximo que presenta la velocidad de deriva para un campo reducido de $1 \text{ V}/\text{cm torr}$ puede explicarse por la estructura de secciones eficaces inelásticas en el rango de décimas de eV, y las pérdidas de energía fraccionales que conlleva. Una disertación completa se puede encontrar en el artículo de Palladino y Sadoulet [9].

La energía característica calculada por el programa para el metano coincide muy bien con los valores experimentales en todo el rango de campos reducidos estudiado. Las discrepancias con los datos experimentales es aún menor que en el caso de la velocidad de deriva. Como se puede ver, los valores alcanzados, aun para campos del orden de los $3 \text{ V}/\text{cm torr}$, son bastante bajos, como ya se explicó al hablar de las densidades electrónicas.

El coeficiente de asimetría del metano se ofrece en la gráfica 4.5. Como se puede ver, toma valores muy grandes (0.9) para campos algo menores a $1 \text{ V}/\text{cm torr}$. Respecto a esto véase el comentario de la página 84.

Figura 4.9: *Velocidad de deriva del metano. Los datos experimentales son de Wagner [36], Mathieson [8], Jean-Marie [46], Puiz [47], Skelding [48], Fulda-Quenzer [49] y Kunst [26].*

Figura 4.10: *Energía característica de los electrones en el metano. Los datos experimentales son de Duncan [50], Skelding [48], Fulda-Quenzer [49], Haddad [51], Millican [52] y Schmidt [45].*

4.3 Dióxido de carbono

El tercer gas que se estudia es el formado por las moléculas triatómicas del dióxido de carbono. La sección eficaz de transferencia de momento presenta un mínimo para una energía de aproximadamente 1 eV, con un valor ligeramente superior a los $4 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$, aunque no tan pronunciado como en el caso del argón. Debido a su carácter lineal, se presenta una serie de secciones eficaces inelásticas correspondientes a las transiciones entre los niveles de excitación rotacional que puede alcanzar la molécula. Estas secciones inelásticas, pese a ser de menor magnitud que las elásticas, determinan en gran medida el comportamiento de las distribuciones de electrones que atraviesan el gas, con lo que la energía media de estos se reduce considerablemente. Este proceso de "enfriamiento", hace de este gas un componente muy útil para los requerimientos de ciertos detectores (véase el comentario de la página 64).

Debido a la diversidad que presentan las secciones eficaces inelásticas del dióxido de carbono, se pondrá como ejemplo en el estudio pormenorizado del comportamiento de las distribuciones de electrones que derivan en el seno del gas. Este estudio se realiza en el Apéndice A.

Se han tenido en cuenta los trabajos [9, 53] de la bibliografía como base de la sección eficaz que inicialmente se consideró. Se presentan las secciones eficaces del dióxido de carbono en la figura 4.11, y en las tablas 4.5, 4.6 y 4.7 se especifican los valores de las secciones eficaces de transferencia de momento y las dos primeras inelásticas. En el programa se han tenido en cuenta cuatro secciones eficaces más. Las dos primeras, con umbrales en 0.68 eV y 0.89 eV, son muy estrechas en el rango de energías. De inferior magnitud resultan dos secciones eficaces que aparecen con energías umbrales de 3.3 eV y 7.6 eV. Pese a ser menores casi en un orden de magnitud, estas secciones son muy importantes en la determinación de los parámetros de deriva de las mezclas que contengan dióxido de carbono, debido a su posición en el rango de energías, un poco mayor que el mínimo de la sección eficaz de transferencia de momento.

En la figura 4.12 se puede ver la forma que toman las funciones de densidad electrónica del dióxido de carbono. Los electrones que derivan en este gas colisionan inelásticamente a bajas energías con lo que pierden rápidamente su energía, más rápido aún que en el caso del metano. De esta forma, los electrones no alcanzan energías por encima de los 0.4 eV, dentro de los campos reducidos indicados. Para explicar la forma de estas densidades, como en el caso del metano, hay que tener muy en cuenta las secciones eficaces inelásticas.

Figura 4.11: *Sección eficaz del dióxido de carbono. Se compara con las ofrecidas por Palladino [9]*

Energía	Sección	Energía	Sección	Energía	Sección
0.010	15.297	0.11	5.008	1.20	0.417
0.011	15.296	0.12	4.770	1.30	0.426
0.012	14.510	0.13	4.620	1.40	0.444
0.013	14.213	0.14	4.441	1.50	0.463
0.014	13.831	0.15	4.256	1.60	0.482
0.015	13.402	0.16	3.951	1.70	0.506
0.016	13.125	0.17	3.765	1.80	0.532
0.017	12.821	0.18	3.597	1.90	0.567
0.018	12.539	0.19	3.441	2.0	0.604
0.019	12.302	0.20	3.306	2.2	0.703
0.020	11.983	0.22	3.068	2.4	0.827
0.022	11.590	0.24	2.780	2.6	0.964
0.024	11.168	0.26	2.497	2.8	1.168
0.026	10.784	0.28	2.215	3.0	1.344
0.028	10.240	0.30	1.932	3.5	1.645
0.030	10.005	0.35	1.431	4.0	1.717
0.035	8.993	0.40	1.140	4.5	1.652
0.040	8.488	0.45	0.944	5.0	1.484
0.045	8.103	0.50	0.815	6.0	1.236
0.050	7.772	0.55	0.727	7.0	1.113
0.055	7.338	0.60	0.664	8.0	1.085
0.060	7.058	0.70	0.569	9.0	1.111
0.070	6.436	0.80	0.504	10.0	1.135
0.080	6.033	0.90	0.465	11.0	1.165
0.090	5.652	1.00	0.437	12.0	1.191
0.100	5.310	1.10	0.420	13.0	1.209

Tabla 4.5: Sección eficaz de transferencia de momento del CO_2 . Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10^{-15}cm^2 .

Energía	Sección	Energía	Sección
0.080	0.000	0.220	1.096
0.085	0.590	0.240	1.030
0.090	1.195	0.260	0.979
0.100	2.625	0.280	0.937
0.110	2.960	0.300	0.899
0.120	3.019	0.320	0.865
0.130	2.998	0.350	0.820
0.140	2.900	0.370	0.792
0.150	2.781	0.400	0.757
0.160	2.580	0.450	0.705
0.170	2.275	0.500	0.662
0.180	1.902	0.550	0.625
0.190	1.550	0.600	0.593
0.200	1.253	0.700	0.541

Tabla 4.6: *Primera sección eficaz inelástica del CO₂. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10⁻¹⁶cm².*

Energía	Sección	Energía	Sección
0.282	0.000	0.420	3.514
0.285	0.086	0.450	3.333
0.290	0.247	0.480	2.734
0.300	0.525	0.500	2.273
0.310	0.815	0.520	1.907
0.320	1.226	0.550	1.467
0.330	1.798	0.600	1.132
0.340	2.376	0.700	0.823
0.350	2.904	0.800	0.738
0.360	3.261	0.900	0.688
0.370	3.415	1.000	0.646
0.380	3.497	1.100	0.610
0.390	3.509	1.200	0.579
0.400	3.476	1.300	0.552

Tabla 4.7: *Segunda sección eficaz inelástica del CO₂. Las energías aparecen en eV, mientras que la sección eficaz está expresada en 10⁻¹⁶cm².*

Figura 4.12: *Funciones de densidad electrónica frente a la energía en el dióxido de carbono. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.*

Aún en los casos de campos reducidos altos, las densidades presentan caídas rápidas en sus valores, a partir del umbral de las secciones eficaces inelásticas, sobre la décima de eV.

4.3.1 Resultados

Se han recopilado datos sobre recientes medidas de los parámetros de deriva del dióxido de carbono, como son la velocidad de deriva, el coeficiente de difusión o la energía característica. En concreto, se ha recurrido especialmente a las referencias [22, 54] de la bibliografía.

La velocidad de deriva y la energía característica del dióxido de carbono que el programa ha obtenido a partir de las secciones eficaces ofrecidas en las tablas 4.5, 4.6 y 4.7 se presentan en las figuras 4.13 y 4.14, comparadas con las obtenidas por los autores que se especifican en el pie de la figura.

La velocidad de deriva del dióxido de carbono no presenta un máximo como en el caso del metano. La movilidad, esto es, el cociente entre la velocidad de deriva y el campo eléctrico aplicado, resulta casi constante. Los resultados obtenidos ajustan perfectamente los datos experimentales disponibles. Salvo el caso de los datos obtenidos por Binnie [56], el resto difieren en menos de un 1%.

La razón por la que la velocidad de deriva del dióxido de carbono no presenta un máximo radica en sus secciones eficaces de baja energía. Las secciones eficaces elásticas e inelásticas son un orden de magnitud superior a las del resto de los casos estudiados. Los electrones pierden muy rápidamente su energía en colisiones inelásticas, con lo que no alcanzan nunca energías mayores de las décimas de eV, insuficientes para alcanzar el mínimo de la sección eficaz de transferencia de momento. Si los electrones alcanzaran esta zona de las secciones eficaces del dióxido de carbono, la velocidad de deriva se comportaría como la del metano. De hecho, esto es lo que ocurre en las mezclas, como se verá en la página 105.

La energía característica de los electrones que derivan en el dióxido de carbono es muy baja, como era de esperar después de las explicaciones dadas. Para los campos expuestos, apenas sube del valor de la energía característica térmica, (la energía característica que deberían tener los electrones en ausencia de campo eléctrico).

Figura 4.13: *Velocidad de deriva del CO₂. Los datos experimentales son de Elford [55], Binnie [56] y Christophorou [54].*

Figura 4.14: *Energía característica de los electrones en el CO₂. Los datos experimentales son de Rees [57] y de Skelding [48].*

El coeficiente de asimetría del dióxido de carbono se encuentra en la figura 4.5. Se puede ver claramente que toma valores muy bajos (en los campos reducidos en los que se realizaron los cálculos toma valores por debajo de 0.3) con lo que podemos afirmar que la aproximación en dos términos está también plenamente justificada para este gas.

Capítulo 5

Estudio de las mezclas

De especial interés resulta el estudio de la deriva de los electrones en mezclas de gases, que se usan de forma habitual en los detectores. El estudio de las mezclas se introduce naturalmente a través de la suposición de que las frecuencias de colisión, calculadas para cada uno de los componentes a su correspondiente presión parcial, se suman. La ecuación utilizada es la misma que en los casos anteriores, arreglada de forma que esta suposición se tenga en cuenta, y que actúe de igual forma sobre los gases de la mezcla. En lo que sigue se presentan las alteraciones que se han realizado en la ecuación de Holstein-Boltzmann, así como los resultados que se han obtenido para diversas mezclas. Se han realizado cálculos tanto con mezclas binarias, de argon-metano y argon-dióxido de carbono, como con mezclas ternarias de argon-metano-dióxido de carbono.

5.1 Modificaciones en la ecuación de Holstein

Cuando se trata de encontrar los parámetros de deriva en el caso de una mezcla de gases, la ecuación de Holstein debe modificarse para incluir las proporciones entre las distintas secciones eficaces. Esto no es más que decir que los electrones colisionaran porcentualmente con cada gas, como lo indique la presión parcial que ese gas tenga en la mezcla. Por tanto la ecuación 3.60 tomará la forma

$$z\left[\frac{\alpha}{\theta'} + z\theta\right]\left(\frac{dF_0(z)}{dz}\right) + z^2\theta F_0(z) + \sum_k \sum_i \int_z^{z+z_{ik}} z' F_0(z') \eta_{ik}(z') dz' = 0 \quad (5.1)$$

donde k indica el componente de la mezcla, con presión parcial pf_k y fracción molar f_k , de forma que

$$\begin{aligned}\alpha &= \left(\frac{E}{p}\right)^2 \frac{M_0 e^2}{6mQ_0^2} & \theta &= \sum_k f_k \frac{Q_{mk}}{Q_0} / \frac{M_k}{M_0} \\ \eta_{ik} &= f_k \frac{M_0 Q_i}{2mQ_0} & \theta' &= \sum_k f_k \frac{Q_{mk}}{Q_0}\end{aligned}\quad (5.2)$$

Para la resolución de la ecuación se seguirán los mismos pasos que en el caso de un único componente, esto es, un proceso iterativo entre las ecuaciones 3.62 y 3.64, hasta que la solución se estabilice según un criterio previo de convergencia. En este caso la integral que representa las colisiones inelásticas toma la forma

$$S(z, F_0) = \sum_i \sum_k \int_z^{z+z_{ik}} F_0(z') z' \eta_{ik}(z') dz' \quad (5.3)$$

El resto de variables no especificadas mantienen el mismo valor que en el caso de la deriva en un único gas.

5.2 Resultados

Se presentan a continuación los resultados obtenidos al preparar el programa para que, siguiendo las indicaciones del capítulo anterior, introduzca mezclas de gases. En todos los casos que se mostrarán a continuación, el método de trabajo es común. Se introducen en los programas las secciones eficaces de los componentes, obtenidas previamente en cada ajuste individual. Estas secciones eficaces pueden mejorarse ahora con esta nueva prueba comparativa, ya que al considerar mezclas puede cambiar, y efectivamente en todos los casos cambia, el rango de energías que adquieren los electrones al derivar en el seno del gas. De esta forma, para algún componente influirán más en los resultados partes de la sección eficaz que no tenían importancia cuando se estudiaba el gas por separado, ya que los electrones no alcanzaban esas energías, o bien las distribuciones tomaban valores pequeños. Por tanto, puede considerarse que las secciones eficaces que se han presentado en las figuras 4.1, 4.6 y 4.11, son el resultado del trabajo realizado ajustando los parámetros de deriva tanto individualmente como en cada una de sus mezclas. Como en casos anteriores, se ha prestado mayor importancia a la velocidad de deriva, parámetro del que se tiene además mayor información.

5.2.1 Mezclas binarias: argon-metano

Con todo lo anterior, comenzamos la sección de mezclas con el estudio de una de las más utilizadas históricamente. Existe una amplia información bibliográfica sobre los parámetros de deriva que, de forma experimental, se pueden encontrar para el argon-metano, en diversas proporciones. En todos los casos, predominan las medidas realizadas en mezclas con pequeña cantidad de metano, debido a que este es un gas inflamable, existiendo normas que limitan su concentración en las mezclas utilizadas en cámaras de deriva. Los datos utilizados provienen de los trabajos [8, 22, 26, 28, 35, 45, 58, 59] de la bibliografía.

En las figuras 5.1, 5.2 y 5.3 se presentan los resultados de la velocidad de deriva para mezclas con distintos proporciones de argon y metano. En todos los casos los ajustes ofrecen buenos resultados, mejorando cuanto mayor sea la cantidad de metano en la mezcla. Excepto en el peor de los casos, la mezcla con un 20% de argon, en donde la separación porcentual máxima entre la curva y los datos experimentales llega, en algunos casos, al 10%, los resultados no se separan de los valores ofrecidos por otros autores más del 5%.

El comportamiento de las velocidades de deriva en estas mezclas sigue un patrón fijo, determinado por los comportamientos individuales que ocurren en cada gas, dadas sus características secciones eficaces. La velocidad de deriva toma valores mayores en las mezclas que contienen mayor cantidad de metano, salvo en una pequeña zona a energías muy bajas (donde aún no aparecen los efectos de las colisiones inelásticas, y la velocidad es lineal con el campo reducido). La forma de las velocidades es muy parecida, presentando un máximo en todas las proporciones estudiadas. La posición del máximo se desplaza, aumentando la energía a la que se produce con la cantidad de metano que hay en la mezcla.

En la figura 5.4 se presentan las energías características de algunas mezclas, para las que existen datos experimentales con los que comparar. En este caso, las energías calculadas por el programa son ligeramente superiores a los datos que se conocen.

En la figura 5.5 se presentan los coeficientes de asimetría obtenidos por el programa para algunas mezclas de las estudiadas. Se puede ver que, como cabía esperar, cuanto más metano contenga la mezcla, mayor será el coeficiente de asimetría. En todos los casos se tiene que el coeficiente de asimetría alcanza

Figura 5.1: *Velocidad de deriva de la mezcla con 10% de argon y 90% de metano. Los datos experimentales son de Mathieson [8], Christophorou [25], Jean-Marie [46], Skelding [48], Yamashita [59] y Kunst [26].*

Figura 5.2: *Velocidad de deriva de la mezcla argon-metano. Los datos experimentales son de Mathieson [8], Jean-Marie [46] y Skelding [48].*

Figura 5.3: *Velocidad de deriva de la mezcla argon-metano. Los datos experimentales son de Jean-Marie [46], Puiz [47] y Wong [58].*

Figura 5.4: *Energía característica de las mezclas argon-metano. Los datos experimentales son de Skelding [48], Fulda-Quenzer [49] y Schmidt [45].*

Figura 5.5: *Coefficiente de asimetría obtenido para las mezclas argon-metano.*

máximos para campos reducidos pequeños, del orden de $0.5 V/cm torr$.

5.2.2 Mezclas binarias: argon-dióxido de carbono

La mezcla constituida por el argon y el dióxido de carbono es también común en las especificaciones de los detectores gaseosos. Esta mezcla no tiene los problemas de utilización que comporta el metano en grandes concentraciones, a causa de su poder deflagrante. Para comparar los valores de los parámetros de deriva obtenidos, con los datos experimentales, se han utilizado las referencias [22, 35, 60, 61] de la bibliografía. En este caso, la profusión de datos experimentales obtenidos para la velocidad de deriva nos llevan a presentar un estudio pormenorizado de los resultados obtenidos en un rango que comprende las mezclas con cantidades de dióxido de carbono entre el 8 y el 20%. Se presentan los resultados de las velocidades de deriva de las distintas mezclas en las figuras 5.6, 5.7, 5.8, 5.9 y 5.10.

La velocidad de deriva de las mezclas argon-dióxido de carbono cambia de forma rápida con la concentración de los componentes. Para las mezclas con menos del 16% de dióxido de carbono, la velocidad de deriva presenta un máximo relativo, alrededor de $1 V/cm torr$ de campo reducido. El máximo aparece a energías mayores según la mezcla sea más rica en dióxido de carbono, como ocurría en el caso de las mezclas argon-metano. A campos reducidos mayores la velocidad de deriva vuelve a crecer en todos los casos. Por contra, si en el gas hay más de un 16% de dióxido, la velocidad de deriva no tiene máximo, sino que crece en todo momento. El cambio se produce de forma gradual, reduciéndose el *plateau* de la saturación de la velocidad de deriva, hasta desaparecer para concentraciones con más del 16% de dióxido de carbono.

Señalaremos el detalle de que, en los casos de baja concentración del dióxido, se presente un máximo en la velocidad de deriva de los electrones en las mezclas, aún cuando ni el argon, ni el dióxido de carbono, lo presentaban por separado. La razón estriba en la forma que adquieren las distribuciones electrónicas de las mezclas con bajo contenido en dióxido de carbono. Los electrones derivan en un medio que es mayoritariamente argon, de forma que sus energías medias alcanzan valores altos. Así llegan a valores para los que el dióxido ofrece un mínimo en la sección eficaz de transferencia de momento, junto a unas secciones eficaces inelásticas de un orden de magnitud semejante. Esta situación resulta similar a la que se presenta en el metano, y que provoca la forma de su velocidad de deriva. Sin embargo esto no ocurre en el dióxido

Figura 5.6: *Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de English [62], Lehraus [63], Mathieson [64], Chang [61] y Zhao [60].*

Figura 5.7: *Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de English [62], Allison [65], Lehraus [63], Ma [66], Puiz [47], Chang [61] y Zhao [60].*

Figura 5.8: *Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Ma [66], Peisert [35] y Chang [61].*

Figura 5.9: *Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Chang [61] y Zhao [60].*

Figura 5.10: *Velocidad de deriva de la mezcla argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Zhao [60].*

Figura 5.11: *Energía característica de las mezclas argon-dióxido de carbono. Los datos experimentales son de Skelding [48].*

Figura 5.12: *Coefficiente de asimetría obtenido para las mezclas argon-dióxido de carbono.*

puro o en sus mezclas más ricas, ya que en estos casos las secciones eficaces inelásticas a bajas energías frenan a los electrones, por lo que su probabilidad de alcanzar la zona de energías donde se encuentra el mínimo de Ramsauer-Townsend es casi nula.

En la figura 5.11 se muestra la energía característica de los electrones que derivan en mezclas argón-dióxido de carbono, en aquellas proporciones para las que se disponía de datos experimentales. El acuerdo con los datos experimentales resulta aceptable en ambos casos, especialmente en la mezcla al 50%.

En la figura 5.12 se presentan los coeficientes de asimetría obtenidos por el programa para algunas de las mezclas estudiadas. Se puede ver que en ningún caso se alcanza el valor 0.5, para los campos con los que se ha trabajado. Por tanto, la aproximación en dos términos resulta apropiada para el análisis de las mezclas argón-dióxido de carbono.

5.2.3 Mezclas ternarias: argón-dióxido de carbono-metano

Avanzando en el camino seguido hasta el momento, afrontamos el estudio de una mezcla de tres gases, aquellos que hemos considerado individualmente, y en mezclas binarias anteriormente.

Esta mezcla ternaria se ha estudiado tomando las secciones eficaces tabuladas en los apartados anteriores, sin que los resultados aquí obtenidos hayan requerido modificarlas. Por esto, el estudio de las mezclas ternarias constituye una prueba del buen comportamiento de las secciones eficaces encontradas en los apartados anteriores. La aproximación de dos términos resulta aceptable en las mezclas consideradas, ya que el coeficiente de asimetría toma valores pequeños (solo en una región próxima a 1 V/cm torr toma valores próximos a 0.5). Esto se puede ver en la gráfica 5.17

Las velocidades de deriva de las mezclas de argón-dióxido de carbono-metano en las proporciones 88%-6%-6%, 84%-10%-6% y 79%-15%-6%, de las que se disponen datos experimentales, se presentan en la figura 5.13. Las formas que se obtiene son similares a las observadas en las mezclas anteriores, ya que la alta concentración de argón provoca que las energías de los electrones suban rápidamente, alcanzando la zona del mínimo de la sección eficaz de transferencia de momento del metano y del dióxido.

Figura 5.13: *Velocidad de deriva de las mezclas argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6. Los datos experimentales son de Chang [61].*

Figura 5.14: *Energías características de las mezclas argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6.*

Figura 5.15: *Desviaciones típicas por centímetro de deriva de las mezclas argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6.*

Figura 5.16: *Funciones de densidad electrónica frente a la energía en las mezclas ternarias indicadas. Se representa para varios valores del campo reducido, expresado en V/cm torr.*

Figura 5.17: *Coeficiente de asimetría de la mezcla argon-dióxido de carbono-metano en sus proporciones 88-6-6, 84-10-6 y 79-15-6.*

El acuerdo de los resultados obtenidos por el programa, con los datos experimentales es muy bueno; en el peor de los casos la mayor diferencia de un dato experimental a la curva es menor del 5%.

En las figuras 5.14 y 5.15 se representan las desviaciones típicas por centímetro de deriva (véase la definición en la ecuación 3.72) y las energías características de las mezclas antes señaladas.

En la figura 5.16 se puede ver la forma que toman las funciones de densidad electrónica en estas mezclas ternarias. Los electrones colisionan inelásticamente tanto con el metano como con el dióxido de carbono, y no alcanzan en su deriva energías altas. Las irregularidades de las densidades electrónicas se pueden explicar en función de las secciones eficaces inelásticas tanto del metano como del dióxido de carbono, como se vió en los casos anteriores de mezclas binarias. Se observa, por ejemplo, que presentan un pequeño mínimo local para una energía del orden de décimas de eV, donde en el dióxido de carbono la probabilidad de colisionar inelásticamente es muy alta. Además, este mínimo local resulta más acusado cuando crece la proporción de dióxido en la mezcla.

Capítulo 6

Conclusiones

El objetivo de este trabajo es desarrollar un método para determinar con precisión las secciones eficaces de interacción de electrones de baja energía, con distintos gases comunmente utilizados en cámaras de deriva. Para ello se ha desarrollado un método de prueba-error en el que se hacen variar las secciones eficaces y, a partir de ellas, se obtienen parámetros de transporte que puedan compararse con resultados bien medidos experimentalmente.

En la primera parte de la memoria se realiza una revisión de los conceptos de deriva y difusión de electrones en gases, y en especial del mínimo de Ramsauer-Townsend. Se deduce y explica la ecuación de Holstein-Boltzmann, exponiendo la manera en la que se puede resolver. Se ha desarrollado un programa FORTRAN, presentado en la memoria, con la finalidad de resolver la ecuación de Holstein-Boltzmann. Los cálculos se realizan en argón, metano y dióxido de carbono, así como en las mezclas binarias argón-metano y argón-dióxido de carbono, y en las mezclas ternarias de estos gases, en distintas proporciones. Se han modificado las secciones eficaces de los gases, hasta conseguir un ajuste satisfactorio entre los parámetros de deriva obtenidos por el programa y los obtenidos experimentalmente por diversos autores. Se extraen las siguientes conclusiones:

1. Se han encontrado las secciones eficaces elásticas e inelásticas de los gases estudiados, que mejor ajustan los parámetros de deriva, tanto de los gases por separado, como de sus mezclas en diversas proporciones. Las secciones eficaces del argón encontradas no difieren apreciablemente de las referidas en la bibliografía. En el caso de las secciones eficaces

del metano, los resultados obtenidos se asemejan a los que recientemente Althorpe et al. [43] presentan, obtenidos a partir de un método teórico independiente del aquí expuesto. La variación, respecto a las anteriormente propuestas por otros autores, consiste en la subida de la posición del mínimo de la sección eficaz de transferencia de momento, como se puede observar en la figura 4.6. En el caso del dióxido de carbono, las secciones eficaces de transferencia de momento tampoco difieren considerablemente de las consideradas por los autores citados en la memoria, habiéndose ajustado las secciones eficaces inelásticas.

2. Para encontrar las secciones eficaces de aquellos gases considerados fríos, esto es, aquellos que presentan secciones eficaces inelásticas (de rotación) a bajas energías, es necesario considerar el estudio de las mezclas que estos gases forman con un gas caliente, esto es, un gas que no presente secciones eficaces inelásticas a bajas energías. Sólo de este modo, ajustando los parámetros de deriva obtenidos para estas mezclas con los experimentales, podremos, con el método utilizado, poner en evidencia el papel que desempeñan las secciones eficaces, tanto elásticas como inelásticas, de energías medias.
3. Se han obtenido las distribuciones electrónicas que los electrones presentan en su deriva a través del gas. Se explica, en términos generales, la forma que presentan estas distribuciones, en función de las secciones eficaces del gas (o de las secciones de los gases que componen la mezcla) que los electrones atraviesan. Como las colisiones inelásticas provocan en los electrones una pérdida de energía considerable, se observa la disminución de las densidades electrónicas para aquellas energías en las que la probabilidad de esta colisión es alta, frente a la probabilidad de colisionar elásticamente. En base a estos comportamientos se explica la forma que presenta la velocidad de deriva de los electrones en el gas, o en las mezclas de gases consideradas.

Capítulo 7

Apéndices

7.1 Apéndice A: Estudio de las secciones eficaces inelásticas del CO_2 .

El dióxido de carbono presenta una serie de secciones eficaces inelásticas con un umbral en el rango de las décimas de eV, o de algunos eV. Estas son adecuadas para la realización de un estudio demostrativo del trabajo realizado en toda la tesina, y de como se ha llegado a las conclusiones sobre el comportamiento de los parámetros de deriva. Mostraremos en este apéndice los efectos importantes en los parámetros de deriva derivados de la modificación de las secciones eficaces inelásticas, o de su desaparición. Los resultados muestran las razones por las que se introducen secciones eficaces a energías de algunos eV, que están casi un orden de magnitud por debajo de las elásticas de esa energía. Los valores calculados parten de las secciones eficaces recogidas en los trabajos estudiados en la bibliografía [9, 53], con distintos ajustes para optimizar los resultados de las velocidades de deriva. Se presentan en la figura 7.1, en la que se han marcado de forma especial aquellas secciones eficaces inelásticas que, con objeto de mostrar los efectos que conlleva, se han suprimido en el cálculo de los parámetros de deriva.

Se ha utilizado para esta comparativa la mezcla con un 90% de argón y un 10% de dióxido de carbono, ya que el estudio del dióxido de carbono puro, para los campos en los que se ha realizado el trabajo, no provoca que los electrones alcancen las energías de las secciones eficaces en el orden de los

Figura 7.1: *Secciones eficaces del CO_2 ajustadas en este trabajo. Véase el texto en lo referente a los números de las secciones eficaces.*

eV. Como se ha comentado en la página 98, es precisamente con el estudio de las mezclas con el que conseguimos determinar las secciones eficaces de altas energías (del orden de los eV) en los gases que presentan grandes secciones eficaces inelásticas a bajas energías.

En la figura 7.2 se puede comprobar como la influencia de las secciones eficaces inelásticas de energías altas es enorme, pese a su pequeña magnitud relativa. La curva marcada con un 1 es el resultado que nos ha ofrecido el cálculo de la velocidad de deriva, cuando no consideramos la sección eficaz inelástica del dióxido de carbono también marcada con un 1 en la figura 7.1. De la misma forma, la curva marcada con un 2 es el resultado de la velocidad de deriva, cuando no consideramos las secciones eficaces inelásticas del dióxido de carbono marcadas con un 1 y con un 2 en la figura 7.1. La curva marcada con la palabra "todas" es la velocidad de deriva que el programa ofrece cuando se tienen en cuenta todas las secciones eficaces indicadas en la figura 7.1. Daremos a continuación una explicación de este hecho cimentada en el comportamiento de las distribuciones de electrones. Si no existiesen las secciones eficaces inelásticas de más alta energía, (marcada en la figura 7.1 con un 1), los electrones con más de un eV no tendrían un método inelástico de perder grandes cantidades de energía en cada colisión, y por tanto sus energías crecen, encontrándose en una zona en la que la sección eficaz de transferencia de momento es más alta, pero el momento transferido en cada colisión es bajo. Sin embargo, al existir estas secciones eficaces inelásticas, los electrones pierden parte de su energía en estas colisiones, lo que les lleva a una zona donde la sección eficaz de transferencia de momento es menor, y así aumenta su velocidad de deriva. Como se puede ver en la figura 7.2, la mayor diferencia se encuentra en los campos altos, donde las energías que los electrones alcanzan son mayores. Se puede razonar del mismo modo para el caso de las secciones eficaces inelásticas de energías entre 0.8 y 1 eV. En este caso los efectos se notan a campos menores (en la zona inmediatamente anterior al máximo de la velocidad de deriva), por ser secciones eficaces de menor energía las que se eliminan.

En la figura 7.3 se observan las distribuciones electrónicas obtenidas con las secciones eficaces de la figura 7.1, completas en un caso y sin las inelásticas de altas energías en el otro. Las diferencias entre las distribuciones se explican claramente en base a lo expuesto anteriormente. Al quitar las secciones eficaces de energías altas, los electrones ganan mayores energías con facilidad, tomando las distribuciones valores menores a energías menores (la integral debajo de cada curva tiene que ser la misma). Con ello, y vista la situación del mínimo de la sección eficaz de transferencia de momento, se llega

Figura 7.2: *Velocidad de deriva de la mezcla con un 90% de argon y un 10% de dióxido de carbono. Véase la explicación en el texto.*

Figura 7.3: *Funciones de densidad electrónica de la mezcla con un 90% de argón y un 10% de dióxido de carbono. La gráfica de la izquierda se corresponde con las funciones conseguidas con las secciones eficaces completas, mientras que en la de la derecha se han suprimido las secciones eficaces marcadas con un 1 en la gráfica 7.1. Cada curva representa la función obtenida a un campo distinto, el indicado en la gráfica, en V/cm torr.*

a que la velocidad de deriva será menor para campos altos. En estas distribuciones se observa también como, para cualquier campo, tienen un fuerte bajón para energías de 0.5 eV, justo las energías en las que hay un máximo de la sección eficaz inelástica. Los electrones que alcanzan estas energías colisionan inelásticamente con facilidad, perdiendo esta posición del espacio de fases.

En la figura 7.4 se realiza el mismo análisis, mostrando que es lo que pasa cuando se eliminan las secciones eficaces marcadas con un 2 en la figura 7.1 (secciones en el rango de 1 eV). A la izquierda se muestra la misma función que se presenta a la derecha en la figura 7.3, a efectos comparativos, mientras que a la derecha se presenta la nueva función sin los cuatro picos inelásticos de mayores energías (marcados con un 1 y un 2 en la gráfica 7.1). Se observa en todos los casos que, para una energía de 1 eV, la función de densidad electrónica crece, ya que los electrones no se encuentran con las secciones eficaces inelásticas que los frenan, llevándolos a otra zona del espacio de fases. Todos estos cambios en las energías de los electrones provocan que estos adquieran distintas velocidades de deriva, dependiendo de las secciones eficaces que encuentren.

Figura 7.4: *Funciones de densidad electrónica de la mezcla con un 90% de argón y un 10% de dióxido de carbono. La gráfica de la izquierda se corresponde con las funciones derivadas de las secciones de la gráfica 7.1, suprimiendo las secciones inelásticas marcadas con un 1, mientras que en la de la derecha se han suprimido además las secciones eficaces marcadas con un 2. Cada curva representa la función obtenida a un campo distinto, el indicado en la gráfica, en $V/cm\ torr$.*

7.2 Apéndice B: Código del programa

En este apéndice se incluye el listado del código de programación utilizado en el presente trabajo. El programa contiene las siguientes rutinas y funciones:

- **SUBROUTINE INDATA** Proporciona los datos que el programa requiere, tales como la proporción de las mezclas, para qué campos debe calcular los parámetros, etc.
- **SUBROUTINE BAHOLP** Resolución de la ecuación de Holstein.
- **SUBROUTINE ITRAP(FUNC,A,B,S)** Rutina de integración de funciones de una variable.
- **SUBROUTINE ITRAP1(FUNC,A,B,D,S)** Rutina de integración de funciones que dependen de una variable y un parámetro.
- **SUBROUTINE ITRAP2(FUNC,A,B,D,E,S)** Rutina de integración de funciones que dependen de una variable y dos parámetros.
- **SUBROUTINE DASEF** Entradas de las secciones eficaces de los gases.
- **SUBROUTINE INSEF** Rutina de interpolación de las secciones eficaces para todos los valores de la energía.
- **SUBROUTINE INTERP2(A2,A1,A0)** Rutina con los procesos de interpolación.
- **SUBROUTINE FICHEROS** Salidas de ficheros con las secciones eficaces de los gases.
- **SUBROUTINE FICHEWDE** Salida de ficheros con las velocidades de deriva.
- **SUBROUTINE FICHEDIF** Salida de ficheros con los coeficientes de difusión.
- **SUBROUTINE FICHEENE** Salida de ficheros con las energías medias.
- **SUBROUTINE FICHEMOV** Salida de ficheros con las movilidades.

- **SUBROUTINE FICHEDES** Salidas de ficheros con las desviaciones típicas.
- **SUBROUTINE FICHECOC** Salidas de ficheros con las energías características.
- **SUBROUTINE FICHEASI** Salidas de ficheros con los coeficientes de asimetría.
- **FUNCTION QFF0(H)** Proporciona una función de distribución electrónica inicial como punto de partida en la primera iteración.
- **FUNCTION ZFN0(H)** Proporciona los valores de la función a normalizar.
- **FUNCTION ETA(H,G,F)** Calcula la función η (véase la ecuación 3.59).
- **FUNCTION SZFN0(H,G,F)** Calcula parte de la integral inelástica.
- **FUNCTION CSFN0(H,G,F)** Calcula la cota del integrando.
- **FUNCTION THEA(H,G)** Calcula el valor de θ (véase la ecuación 3.59).
- **FUNCTION THEP(H,G)** Calcula el valor de θ' (véase la ecuación 3.59).
- **FUNCTION ZZFN0(H)** Calcula la energía media.
- **FUNCTION WGZ(H,G)** Calcula la velocidad de deriva.
- **FUNCTION DFN0(H,G)** Calcula el coeficiente de difusión.
- **FUNCTION F1F0G(H,G)** Calcula el coeficiente de asimetría.

El programa ofrece los resultados de sus cálculos en una serie de ficheros, referidos a continuación:

- ASIPRO.DAT Coeficiente de asimetría en función del campo reducido (expresado en todos los casos en $V/cm\ torr$).
- COCPRO.DAT Energía característica en función del campo reducido.
- DESPRO.DAT Desviación típica en función del campo reducido.

- DIFPRO.DAT Coeficiente de difusión en función del campo reducido.
- DIPROA.DAT Función de densidad electrónica en función de la variable z (energía, salvo un cambio de variable, véase la ecuación 3.59), cuando el campo aplicado es $0.5 V/cm torr$.
- DIPROB.DAT Función de densidad electrónica en función de la variable z , cuando el campo aplicado es $1 V/cm torr$.
- DIPROC.DAT Función de densidad electrónica en función de la variable z , cuando el campo aplicado es $1.5 V/cm torr$.
- DIPROD.DAT Función de densidad electrónica en función de la variable z , cuando el campo aplicado es $2 V/cm torr$.
- DIPROE.DAT Función de densidad electrónica en función de la variable z , cuando el campo aplicado es $2.5 V/cm torr$.
- DIPROF.DAT Función de densidad electrónica en función de la variable z , cuando el campo aplicado es $3 V/cm torr$.
- ENEPRO.DAT Energía media en función del campo reducido.
- MOVPRO.DAT Movilidad en función del campo reducido.
- QMARGS.DAT Sección eficaz elástica del argón en función de z .
- QMCH4.DAT Sección eficaz elástica del metano en función de z .
- QMCO2.DAT Sección eficaz elástica del dióxido de carbono en función de z .
- QI1ARG.DAT Primera sección eficaz inelástica considerada del argón en función de z .
- QI2ARG.DAT Segunda sección eficaz inelástica considerada del argón en función de z .
- QI1CH4.DAT Primera sección eficaz inelástica considerada del metano en función de z .
- QI2CH4.DAT Segunda sección eficaz inelástica considerada del metano en función de z .
- QI3CH4.DAT Tercera sección eficaz inelástica considerada del metano en función de z .

- QI1CO2.DAT Primera sección eficaz inelástica considerada del dióxido de carbono en función de z .
- QI2CO2.DAT Segunda sección eficaz inelástica considerada del dióxido de carbono en función de z .
- QI3CO2.DAT Tercera sección eficaz inelástica considerada del dióxido de carbono en función de z .
- QI4CO2.DAT Cuarta sección eficaz inelástica considerada del dióxido de carbono en función de z .
- WHPRO.DAT Velocidad de deriva en función del campo reducido.

```

*****
PROGRAM H53
*****
*
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-G,O-Z)
  IMPLICIT INTEGER (H,N)
*
  COMMON /PANT/ HBPANT,HBPANTA,HFISEF,HFIWDE
*
  EXTERNAL INDATA
  EXTERNAL BAHOLP
*
  PRESENTACION POR PANTALLA (=1/no=0)
*
  HBPANT=1
  HBPANTA=0
*
  FICHEROS DE SECCIONES EFICACES (=1/no=0)
*
  HFISEF=1
*
  FICHEROS DE VELOCIDADES DE DERIVA (=1/no=0)
*
  HFIWDE=1
*
  ENTRADA DE DATOS
*
  CALL INDATA
*
  ECUACION DE HOLSTEIN
*
  CALL BAHOLP
*
  END
*
*****
SUBROUTINE INDATA
*****
*
  DECLARACIONES
*
  DOUBLE PRECISION EPSORD,CEROFN,COTSG,COAMP
  DOUBLE PRECISION ZL,ZU,EPL,EPM,PEP
  DOUBLE PRECISION MG0,P0
  DOUBLE PRECISION CIT,Q0,T
  DOUBLE PRECISION PI,K,M,M0
  DOUBLE PRECISION CFN0I
  DOUBLE PRECISION DEE,DWE
*
  INTEGER N
  INTEGER NL,NI
  INTEGER ITERS
*
  COMMON /DIVI/ N
  COMMON /CERO/ EPSORD,CEROFN,COTSG,COAMP
  COMMON /COCA/ ZL,ZU,EPL,EPM,PEP
  COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
  COMMON /MAP0/ MG0(4),P0(4)
  COMMON /PACA/ ITERS,CIT,Q0,T
  COMMON /CGEN/ PI,K,M,M0
  COMMON /CEQF/ CFN0I(3)
  COMMON /PWEE/ DEE(24),DWE(24)
*
  PRESIONES PARCIALES DE LOS GASES
  CO2 CH4 Xe Ar
  DATA P0 /0.06,0.06,0.00,0.88/
*
  NUMERO DE SECCIONES EFICACES INELASTICAS DE CADA GAS
  NUMERO MAXIMO 4
  DATA NI /4,3,0,2/
*
  NUMERO DE DIVISIONES (2**N)
*

```

```

DATA N / 14/
*
*   EXTREMO INFERIOR DEL INTERVALO DE ENERGIAS      ZL
*   EXTREMO SUPERIOR DEL INTERVALO DE ENERGIAS     ZU
*   CAMPO REDUCIDO MINIMO                            EPL
*   CAMPO REDUCIDO MAXIMO                            EPM
*   PASO DE CAMPO (DIVISOR DE 0.25)                 PEP
*
DATA ZL,ZU,EPL,EPM,PEP /0.400,1024.0,0.000,2.50,0.10/
*
*   PARAMETROS DE LA FUNCION DE PRUEBA
*
DATA CFN0I / 0.01,1.00,0.20/
*
*   NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES                     ITERS
*   COEFICIENTE DEL CRITERIO DE ITERACION           CIT
*   NORMALIZACION DE SECCIONES EFICACES            Q0
*
DATA ITERS,CIT,Q0 /500,0.010,1D-15/
*
*   EPSILON                                          EPSORD
*   COTA INFERIOR DE LA DISTRIBUCION                CEROFN
*   COEFICIENTE DEL CRITERIO                        COTSG
*   DE CORTE EN ENERGIAS                           COAMP
*   COEFICIENTE DE AMPLIACION DE INTERVALO
*
DATA EPSORD,CEROFN,COTSG,COAMP /8D-16,1D-33,0.9999,2.0/
*
*   CONSTANTES GENERALES
*
*   NUMERO PI                                         PI
*   CONSTANTE DE BOLTZMANN (eV/K)                   K
*   MASA DEL ELECTRON (MeV)                          M
*   MASA DEL HIDROGENO (MeV)                         M0
*
DATA PI,K,M,M0 /3.141593,8.617526D-5,0.511,938.743/
*
*   PARAMETROS DE LOS GASES
*
*   TEMPERATURA (K)                                  T
*   NUMERO DEL ULTIMO GAS CONSIDERADO                NL
*
DATA T,NL /290,4/
*
*   MASAS REDUCIDAS DE LOS GASES                    MG
*   CO2      CH4      Xe      Ar
*
DATA MG0 /44.00,16.00,131.29,39.95/
*
*   DATOS EXPERIMENTALES (MINUIT)
*
DATA DEE /0.20,0.40,0.60,0.80,1.00,1.20,1.40,
+ 1.60,1.80,2.00,2.20,2.40,2.60,2.80,3.00,
+ 3.20,3.40,3.60,3.80,4.00,4.20,4.40,4.60,4.80/
*
DATA DWE /2.22,4.26,6.31,8.34,9.36,10.39,10.40,
+9.42,9.06,8.50,8.53,8.29,7.95,7.69,7.25,
+7.10,6.99,6.92,6.79,6.73,6.71,6.65,6.60,6.55/
*
RETURN
END
*
*****
SUBROUTINE BAHOLP
*****
*
*   DECLARACIONES
*
DOUBLE PRECISION EPSORD,CEROFN,COTSG,COAMP
DOUBLE PRECISION MG0,P0,MG,P
DOUBLE PRECISION ZL,ZU,EPL,EPM,PEP
DOUBLE PRECISION CIT,Q0,T
DOUBLE PRECISION PI,K,M,M0
DOUBLE PRECISION ZI
DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0
DOUBLE PRECISION FNA(2**15)

```

```

DOUBLE PRECISION CKT,TMN
DOUBLE PRECISION IINE(4,8),CINE(4,8)
DOUBLE PRECISION COA,COB,COC,COD,COE,COF,COG
DOUBLE PRECISION GN0,GD0,SUM,CSUM,COTASUM
DOUBLE PRECISION THEA,THEP,SZFN0
DOUBLE PRECISION QFF0
DOUBLE PRECISION CSFN0
DOUBLE PRECISION ZMED,ZMEDA,ZMEDIF
DOUBLE PRECISION MEGZ,MEFN0
DOUBLE PRECISION CNORM,RES
DOUBLE PRECISION ALF0
DOUBLE PRECISION CETA
DOUBLE PRECISION MSQI,SQI
DOUBLE PRECISION SUG,MSG
DOUBLE PRECISION WDA
DOUBLE PRECISION NWGZ
DOUBLE PRECISION ERFN
DOUBLE PRECISION ZFIW,ZDIM,FGMAX,FGFIN
DOUBLE PRECISION EA1,EA2,EA3
DOUBLE PRECISION ERRORAJ,ERRORA0
DOUBLE PRECISION DEA(100)
DOUBLE PRECISION DEP,DWD
DOUBLE PRECISION DEE,DWE
DOUBLE PRECISION DIFI,ENIO,MOVI,DESVI,COCIE,ASIME
DOUBLE PRECISION PARM,PARI
DOUBLE PRECISION FFMM
DOUBLE PRECISION CSFJM1,CSFJ,CSJI0M,CSJI0
*
INTEGER HBPANT,HBPANTA,HFISEF,HFIWDE
INTEGER N
INTEGER J,L,I
INTEGER DIM,DIM0
INTEGER DIMA,DIMC,DIMM,DIMF
INTEGER NL,NI
INTEGER I0,II
INTEGER ITER,ITERS,ITA,ITERE
INTEGER J0,JI0,JF0
INTEGER V,V0,V00,VA,VU
*
COMMON /PANT/ HBPANT,HBPANTA,HFISEF,HFIWDE
COMMON /DIVI/ N
COMMON /CERO/ EPSORD,CEROFN,COTSG,COAMP
COMMON /COCA/ ZL,ZU,EPL,EPM,PEP
COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
COMMON /MAP0/ MG0(4),P0(4)
COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
COMMON /PACA/ ITERS,CIT,Q0,T
COMMON /CGEN/ PI,K,M,M0
COMMON /UMBR/ ZI(4,8)
COMMON /CONS/ DIM,CKT,TMN
COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
COMMON /SUMA/ SQI(4,8)
COMMON /PAES/ NWGZ
COMMON /PWEE/ DEE(24),DWE(24)
COMMON /PAMI/ PARM(12),PARI(12)
COMMON /FUMI/ FFMM
COMMON /WDER/ VU
COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),
+MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)
*
EXTERNAL ZFN0,ZZFN0,SZFN0,CSFN0
EXTERNAL WGZ,DFN0,F1F0G
*
PRESENTACION
*
IF (HBPANT.EQ. 1) THEN
  PRINT *, ' PROGRAMA H53 '
  PRINT *, ' ENTRADA EN LA SUBROUTINA BAHOLP'
  PRINT *, ' '
ENDIF
*
CONSTANTE DEL CAMBIO DE VARIABLE LINEAL CKT
*
CKT=K*T
*

```



```

*          CONSTANTE DE PERDIDA DE ENERGIA POR COLISION CETA
*
CETA=M0/(2*M)
*
*          COTA DEL SEGUNDO TERMINO DEL DENOMINADOR DE G(Z)
*
DO 111 J=1,4
  MG(J)=MG0(J)
111 CONTINUE
*
*          DEFINICIONES PREVIAS
*
P(1)=P0(1)
P(2)=P0(2)
P(3)=P0(3)
P(4)=P0(4)
*
*          NUMERO DE PARTICIONES EN EL INTERVALO DE ENERGIA
*
DIM0=2**N
DIM=DIM0
*
*          PASO ENTRE PARTICIONES
*
TMN=ZU/DIM
*
*          SALIDA POR PANTALLA
*
IF (HBPANT .EQ. 1) THEN
  WRITE (*,*) ' '
  WRITE (*,*) ' - * - MEZCLAS (2 a 2) - * - '
  WRITE (*,*) ' '
  WRITE (*,1001) N,ZU,TMN
1001   FORMAT (2X,'N ZU TMN ', I6, F10.2, F10.6)
  WRITE (*,*) ' '
  WRITE (*,*) ' CO2 CH4 Xe Ar '
  WRITE (*,1002) P
1002   FORMAT (2X,'P ', 4F6.2)
  WRITE (*,1003) NI
1003   FORMAT (2X,'NI ', 4I6)
  WRITE (*,*) ' '
  WRITE (*,1004) CIT,COTSG,COAMP
1004   FORMAT (2X, 'CIT/COTSG/COAMP ', F5.3, F10.6, F6.1)
  WRITE (*,*) ' '
ENDIF
*
*          DEFINICION DE LA VARIABLE ENERGIA (CERO EN EL ORIGEN)
*
Z0(1)=0.D+000
*
DO 21 J=2,DIM0
*
*          VARIABLE ENERGIA
*
Z0(J)=Z0(J-1)+TMN
*
*          FUNCION DE PRUEBA
*
FN0(J)=QFF0(J)
*
21 CONTINUE
*
*          COTA INFERIOR DE LA DISTRIBUCION
*
DO 232 J=1,DIM0
  COA=FN0(J)
  IF (COA .LT. CEROFN) THEN
    FN0(J)=CEROFN
  ENDIF
232 CONTINUE
*
*          NORMALIZACION DE LA FUNCION DE PRUEBA
*
CALL ITRAP(ZFN0,1,DIM0,RES)
*

```

```

IF (RES .LT. EPSORD) THEN
  CNORM=1
ELSE
  CNORM=RES
ENDIF
*
DO 22 J=1,DIM0
  FN0(J)=FN0(J)/CNORM
  COA=FN0(J)
  IF (COA .LT. CEROFN) THEN
    FN0(J)=CEROFN
  ENDIF
22 CONTINUE
*
*   CALCULO DE LA ENERGIA MEDIA (CONTROL DE ITERACION)
*
CALL ITRAP(ZZFN0,1,DIM0,RES)
ZMEDA=CKT*RES
*
*   LLAMADA A LOS DATOS DE SECCIONES EFICACES
*
CALL DASEF
*
*   INTERPOLACION DE LAS SECCIONES A
*   TODOS LOS VALORES DE ENERGIA
*
CALL INSEF
*
*   SALIDA POR FICHERO DE LAS SECCIONES EFICACES
*
IF (HFISEF .EQ. 1) THEN
  WRITE (*,*) ' Salida ficheros sec. efic. '
  CALL FICHEROS
  WRITE (*,*) ' '
ENDIF
*
*   SALIDA POR PANTALLA
*
IF (HBPANT .EQ. 1) THEN
  WRITE (*,*) ' EP ITE ZMED ZFIW ZDIM
+ W(cm/us) '
*
ENDIF
*
*   COMIENZO DE LAS ITERACIONES (ITERACION DEL CAMPO)
*
V=1
I0=0
EP=EPL
*
1   EP=EP+PEP
*
*   TERMINO CALCULADO PARA CONOCER G(Z)
*
ALF0=441.95825*EP**2
*
*   ITERACION EN ENERGIAS
*
ITA=0
ITER=0
2   ITER=ITER+1
*
*   CALCULO DE LA FUNCION G(Z). INTEGRALES PREVIAS
*
J0=IDNINT(ZL/TMN)+1
*
IF (J0 .EQ. 1) THEN
  J0=2
ENDIF
*
DO 440 L=1,NL
  IF (P(L) .GT. 0.005) THEN
    IF (NI(L) .GT. 0) THEN

```

```

DO 441 I=1,NI(L)
*
    JI0=IDNINT(ZI(L,I)/TMN)
    IF (J0+JI0 .LT. DIM) THEN
        CALL ITRAP2(SZFN0,J0-1,J0+JI0,L,I,RES)
        IINE(L,I)=CETA*RES
*
        CALL ITRAP2(CSFN0,J0-1,J0+JI0,L,I,RES)
        CINE(L,I)=CETA*RES
*
    ELSE
        CALL ITRAP2(SZFN0,J0-1,DIM,L,I,RES)
        IINE(L,I)=CETA*RES
*
        CALL ITRAP2(CSFN0,J0-1,DIM,L,I,RES)
        CINE(L,I)=CETA*RES
*
    ENDIF
441    CONTINUE
    ENDIF
440    CONTINUE
*
    CALCULO DE LA FUNCION G(Z). VALOR DE LA FUNCION EN CADA PUNTO
*
    SUG=0
*
    DO 9 J=J0,DIM
*
        INTEGRALES S(Z,F)
*
        SUM=0
        CSUM=0
        COTASUM=0
*
        DO 8 L=1,NL
*
            IF (P(L) .GT. 0.005) THEN
                IF (NI(L) .GT. 0) THEN
*
                    DO 7 I=1,NI(L)
*
                        JI0=IDNINT(ZI(L,I)/TMN)
                        IF (J .LE. DIM-JI0) THEN
*
                            COA=SZFN0(J-1,L,I)+SZFN0(J,L,I)
                            COB=SZFN0(J-1+JI0,L,I)+SZFN0(J+JI0,L,I)
                            COC=CETA*TMN*0.5*(-COA+COB)
                            COD=IINE(L,I)+COC
*
                            IF (COD .LT. 0) THEN
                                IINE(L,I)=0
                            ELSE
                                IINE(L,I)=COD
                            ENDIF
*
                            COA=CSFN0(J-1,L,I)+CSFN0(J,L,I)
                            COB=CSFN0(J-1+JI0,L,I)+CSFN0(J+JI0,L,I)
                            COC=CETA*TMN*0.5*(-COA+COB)
                            COD=CINE(L,I)+COC
*
                            IF (COD .LT. 0) THEN
                                CINE(L,I)=0
                            ELSE
                                CINE(L,I)=COD
                            ENDIF
*
                        ELSE
                            COA=SZFN0(J-1,L,I)+SZFN0(J,L,I)
                            COC=CETA*TMN*0.5*(-COA)
                            COD=IINE(L,I)+COC
*
                            IF (COD .LT. 0) THEN
                                IINE(L,I)=0
                            ELSE

```

```

      IINE(L,I)=COD
      ENDIF
*
      COA=CSFN0(J-1,L,I)+CSFN0(J,L,I)
      COC=CETA*TMN*0.5*(-COA)
      COD=CINE(L,I)+COC
*
      IF (COD .LT. 0) THEN
        CINE(L,I)=0
      ELSE
        CINE(L,I)=COD
      ENDIF
      ENDIF
*
      SUM=SUM+IINE(L,I)
      CSUM=CSUM+CINE(L,I)
*
      IF (J .LT. J10) THEN
        COA=FN0(J10)/FN0(J)
      ELSE
        COA=1.00
      ENDIF
*
      COTASUM=COTASUM+COA*CINE(L,I)
7      CONTINUE
      ENDIF
8      CONTINUE
*
*      CALCULO Y ALMACENAMIENTO FINAL DE G(Z)
*
      COF=1.00/Z0(J)
      COA=THEP(J,NL)*SUM/(Z0(J)*FN0(J))
      COB=THEP(J,NL)*COF*COTASUM
*
*      ELECCION DE COTA EN EL TERMINO INTEGRAL
*
      IF (COA .LT. COB) THEN
        COC=COA
      ELSE
        COC=COB
      ENDIF
*
      GN0=Z0(J)*THEA(J,NL)*THEP(J,NL)+COC
      GD0=Z0(J)*THEA(J,NL)*THEP(J,NL)+ALF0
*
      GZ(J)=GN0/GD0
*
9      CONTINUE
*
*      VALORES DE GZ(J) EN PUNTO PROXIMOS A CERO
*
      COA=GZ(J0)/Z0(J0)
      DO 333 J=1,J0
        GZ(J)=COA*Z0(J)
333      CONTINUE
*
*      CALCULO DE LA FUNCION DE DISTRIBUCION A PARTIR DE G(Z)
*
      FN0(1)=1
      COA=0
*
      DO 11 J=2,DIM
        COB=TMN*0.5*(GZ(J-1)+GZ(J))
        COA=COA+COB
*
        IF (COA .GT. 200) THEN
          COA=200
        ENDIF
        IF (COA .LT. -200) THEN
          COA=-200
        ENDIF
*
        COC=DEXP(-COA)

```

```

        IF (COC .GT. CEROFN) THEN
            FN0(J)=COC
        ELSE
            FN0(J)=CEROFN
        ENDIF
11    CONTINUE
*
*        NORMALIZACION DE LA DISTRIBUCION
*
        CALL ITRAP(ZFN0,1,DIM,RES)
        IF (RES .LT. EPSORD) THEN
            CNORM=1
        ELSE
            CNORM=RES
        ENDIF
*
        DO 32 J=1,DIM
            FN0(J)=FN0(J)/CNORM
            IF (FN0(J) .LT. CEROFN) THEN
                FN0(J)=CEROFN
            ENDIF
32    CONTINUE
*
*        CALCULO DE LA ENERGIA MEDIA
*
        CALL ITRAP(ZZFN0,1,DIM,RES)
        ZMED=CKT*RES
*
        IF (ITER .GT. 1) THEN
            SUM=0
            DO 2311 J=1,DIM
                COA=DABS(FN0(J)-FNA(J))
                COB=0.50*(FN0(J)+FNA(J))
                SUM=SUM+COA/COB
2311    CONTINUE
            ERFN=SUM/DIM
        ENDIF
*
*        CRITERIO DE ITERACION
*
        ZMEDIF=DABS(ZMED-ZMEDA)
        IF (ITER .EQ. 1) THEN
            ZMEDA=ZMED
*
            DO 2310 J=1,DIM
                FNA(J)=FN0(J)
2310    CONTINUE
            GOTO 2
        ENDIF
*
        IF (ITER .LT. ITERS) THEN
            IF ((ZMEDIF .GT. CIT*ZMED) .OR. (ERFN .GT. CIT)) THEN
*
                ZMEDA=ZMED
*
                DO 2312 J=1,DIM
                    FNA(J)=FN0(J)
2312    CONTINUE
*
                GOTO 2
            ELSE
                ITA=1
                ITERE=ITER
                ITER=0
            ENDIF
        ELSE
            ITA=1
            ITERE=ITER
            ITER=0
        ENDIF
*
*        VELOCIDAD DE DERIVA (CENTIMETROS/MICROSEGUNDOS)
*
        CALL ITRAP1(WGZ,1,DIM,NL,RES)
        NWGZ=RES

```

```

WDRIFT=3.7558*EP*RES
*
*   ESTADISTICA
*
IF (NWGZ .LT. EPSORD) THEN
  NWGZ=1
ENDIF
*
*   COEFICIENTE TRANSVERSAL DE DIFUSION (CENTIMETROS2/SEGUNDO)
*
CALL ITRAP1(DFN0,1,DIM,NL,RES)
DIFUS= 123.4976 * RES
*
*   ENERGIA MEDIA DE LOS ELECTRONES (eV)
*
CALL ITRAP1(ZFN0,1,DIM,NL,RES)
ENERG = 0.02499 * RES
*
*   RAZON DE ASIMETRIA
*
CALL ITRAP1(F1F0G,1,DIM,NL,RES)
ASIM= 1.201732*EP*RES
*
*   A CONTINUACION SE ESPECIFICAN LA MOVILIDAD(CM2/V/MICROSEG),
*   PARA UNA ATMOSFERA DE PRESION; LA DESVIACION STANDAR
*   (MICROMETROS) PARA UN CM DE DERIVA
*   (O CONSTANTE DE DIFUSION); EL COCIENTE ENTRE
*   LA CONSTANTE DE DIFUSION Y LA MOVILIDAD (VOLTIOS)
*   (O ENERGIA CARACTERISTICA, EN eV).
*
AMOVIL = WDRIFT / (EP * 760)
DESVIA = 10 * SQRT(2*DIFUS/WDRIFT)
COCIEN = 0.000001 * (DIFUS/AMOVIL)
*
*   INTRODUCCION DE LOS VALORES PARA CADA CAMPO EN VECTORES
*
DEP(V)=EP
DWD(V)=WDRIFT
DIFI(V)=DIFUS
ENIO(V)=ENERG
MOVI(V)=AMOVIL
DESVI(V)=DESVIA
COCIE(V)=COCIEN
ASIME(V)=ASIM
*
V=V+1
*
*   FICHEROS DE SALIDA DE LAS DISTRIBUCIONES ELECTRONICAS
*
IF (EP.GT.0.49) THEN
  IF (EP.LT.0.51) THEN
    OPEN(30,FILE='DICH4A',ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='UNKNOWN')
*
    DO 5148 J=1,DIM,5
      COA = DSQRT(Z0(J)) * FN0(J)
      WRITE (30,4004) Z0(J), COA
5148    CONTINUE
*
    ENDFILE 30
    CLOSE (30)
  ENDIF
ENDIF
*
IF (EP.GT.0.99) THEN
  IF (EP.LT.1.01) THEN
    OPEN(30,FILE='DICH4B',ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='UNKNOWN')
*
    DO 5149 J=1,DIM,5
      COA = DSQRT(Z0(J)) * FN0(J)
      WRITE (30,4004) Z0(J), COA
5149    CONTINUE
*
    ENDFILE 30
    CLOSE (30)
  ENDIF
ENDIF

```

```

ENDIF
*
IF (EP.GT.1.49) THEN
  IF (EP.LT.1.51) THEN
    OPEN(30,FILE='DICH4C',ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='UNKNOWN')
*
    DO 5150 J=1,DIM,5
      COA = DSQRT(Z0(J)) * FN0(J)
      WRITE (30,4004) Z0(J), COA
5150    CONTINUE
*
    ENDFILE 30
    CLOSE (30)
  ENDF
ENDIF
*
IF (EP.GT.1.99) THEN
  IF (EP.LT.2.01) THEN
    OPEN(30,FILE='DICH4D',ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='UNKNOWN')
*
    DO 5151 J=1,DIM,5
      COA = DSQRT(Z0(J)) * FN0(J)
      WRITE (30,4004) Z0(J), COA
5151    CONTINUE
*
    ENDFILE 30
    CLOSE (30)
  ENDF
ENDIF
*
IF (EP.GT.2.49) THEN
  IF (EP.LT.2.51) THEN
    OPEN(30,FILE='DICH4E',ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='UNKNOWN')
*
    DO 5152 J=1,DIM,5
      COA = DSQRT(Z0(J)) * FN0(J)
      WRITE (30,4004) Z0(J), COA
5152    CONTINUE
*
    ENDFILE 30
    CLOSE (30)
  ENDF
ENDIF
*
IF (EP.GT.2.99) THEN
  IF (EP.LT.3.01) THEN
    OPEN(30,FILE='DICH4F',ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='UNKNOWN')
*
    DO 5153 J=1,DIM,5
      COA = DSQRT(Z0(J)) * FN0(J)
      WRITE (30,4004) Z0(J), COA
5153    CONTINUE
*
    ENDFILE 30
    CLOSE (30)
  ENDF
ENDIF
*
4004  FORMAT (2F10.6)
*
*      CRITERIO DE CORTE DE LA DISTRIBUCION A ENERGIAS ALTAS
*
COA=COTSG*NWGZ
SUM=0
COD=0
*
DO 7821 J=1,DIM
  COB=Z0(J)*FN0(J)*GZ(J)/THEP(J,NL)
  IF (COD .LT. COB) THEN
    COD=COB
  ENDF
  COC=TMN*COB
  SUM=SUM+COC
  IF (SUM .GT. COA) THEN
    JF0=J

```

```

        FGFIN=COB
        GOTO 7812
    ENDIF
7821 CONTINUE
*
7812 CONTINUE
ZFIW=TMN*JF0
FGMAX=COD
*
*       SOBREALORACION DE LA ENERGIA DE CORTE
*
COA=1.0*ZFIW+50
*
JF0=IDNINT(COA/TMN)
*
DIMA=DIM
*
IF (JF0 .GT. DIM0) THEN
    DIM=DIM0
ELSE
    DIM=JF0
ENDIF
*
IF (DIM .GT. DIMA) THEN
    DO 7823 J=DIMA,DIM
        FN0(J)=FN0(DIMA)
7823 CONTINUE
    ENDIF
    IF (HBPANT .EQ. 1) THEN
        ZDIM=TMN*DIMA
        WRITE (*,9116) EP,ITERE,ZMED,ZFIW,ZDIM,WDRIFT
9116 FORMAT (2X, F5.3, I4, F6.2, F8.1, F7.1, F8.3)
    ENDIF
*
*       VUELTA A LA ITERACION PARA UN NUEVO CAMPO
*
IF (EP .LT. EPM) THEN
    GOTO 1
ENDIF
*
VU=V-1
*
*       FICHEROS DE SALIDA DE LOS PARAMETROS DE DERIVA
*
IF (HFIWDE .EQ. 1) THEN
    WRITE (*,*) ' '
    WRITE (*,*) ' Salida de los ficheros '
    WRITE (*,*) ' '
*
    CALL FICHEWDE
    CALL FICHDIF
    CALL FICHEENE
    CALL FICHEMOV
    CALL FICHEDES
    CALL FICHECOC
    CALL FICHEASI
ENDIF
*
*       COMPARATIVA DE ERROR DE AJUSTE (MINUIT)
*
V0=1
COD=0
COF=0
COG=0
I0=0
H=1
*
IF (HBPANT .EQ. 1) THEN
    PRINT *, ' '
ENDIF
*
DO 6111 J=1,24
    COA=DEE(J)
    COB=COA-EPL
    COC=EPM-COA

```



```

IF ((COB .GT. -0.001) .AND. (COC .GT. -0.001)) THEN
DO 6112 V=V0,VU
COB=ABS(COA-DEP(V))
IF (COB .LT. 0.001) THEN
DEA(II)=DWE(J)-DWD(V)
COC=(DEA(II))**2
IF (HBPANT .EQ. 1) THEN
WRITE (*,9113) DEP(V),DWD(V),DWE(J)
9113   FORMAT (2X, 3F8.3)
ENDIF
COD=COD+COC
I0=I0+1
V0=V
II=II+1
GO TO 6110
ENDIF
6112   CONTINUE
6110   CONTINUE
ENDIF
6111   CONTINUE
*
IF (I0 .GT. 0) THEN
ERRORAJ=100*COD/I0
EA1=COD/I0
COD=0
EA3=COD/I0
ELSE
ERRORAJ=999.9
EA1=999.9
EA3=999.9
ENDIF
FFMM=EA1+EA3
IF (HBPANT .EQ. 1) THEN
PRINT *,' '
WRITE (*,9114) FFMM
WRITE (*,9115) EA1,EA3
9114   FORMAT (2X,' Er.++ =', F8.3, ' Er.md. =', F8.3)
9115   FORMAT (2X,'EA1,3 =', 2F8.3)
ENDIF
*
500   CONTINUE
*
END
*
*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION QFF0(H)
*****
*
*   FUNCION DE PRUEBA INICIAL DE LA DISTRIBUCION
*
*
DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0,R
DOUBLE PRECISION CFN0I
*
*
INTEGER H
*
*
COMMON /CEQF/ CFN0I(3)
COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
*
R=-Z0(H)
QFF0=DEXP(R)
*
*
RETURN
END
*
*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION ZFN0(H)
*****
*
*   FUNCION DE NORMALIZACION DE FN0
*
*
DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0
*
*
INTEGER H
*
*
COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
*
ZFN0=FN0(H)*Z0(H)**0.5

```

```

*
  RETURN
  END
*
*****
  DOUBLE PRECISION FUNCTION ETA(H,G,F)
*****
  FUNCION ETA
*
  DOUBLE PRECISION MG,P
  DOUBLE PRECISION QM,QI
*
  INTEGER H,G,F
*
  COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
  COMMON /SEFI/ QM(2**15,4),QI(2**15,4,8)
*
  ETA=P(G)*QI(H,G,F)
*
  RETURN
  END
*
*****
  DOUBLE PRECISION FUNCTION SZFN0(H,G,F)
*****
  FUNCION EN LA INTEGRAL INELASTICA S(Z,F)
*
  DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0,ETA
*
  INTEGER H,G,F
*
  COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
  SZFN0=FN0(H)*Z0(H)*ETA(H,G,F)
*
  RETURN
  END
*
*****
  DOUBLE PRECISION FUNCTION CSFN0(H,G,F)
*****
  COTA DEL INTEGRANDO
*
  DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0,ETA
*
  INTEGER H,G,F
*
  COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
  CSFN0=Z0(H)*ETA(H,G,F)
*
  RETURN
  END
*
*****
  DOUBLE PRECISION FUNCTION THEA(H,G)
*****
  FUNCION THETA
*
  DOUBLE PRECISION MG,P,R
  DOUBLE PRECISION QM,QI
*
  INTEGER H,G,F
*
  COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
  COMMON /SEFI/ QM(2**15,4),QI(2**15,4,8)
*
  R=0
  DO 91 F=1,G
    R=R+P(F)*QM(H,F)/MG(F)
91  CONTINUE
*
  THEA=R
*
  RETURN

```

```

      END
*
*****
      DOUBLE PRECISION FUNCTION THEP(H,G)
*****
*      FUNCION THETA'
*
      DOUBLE PRECISION MG,P,R
      DOUBLE PRECISION QM,QI
*
      INTEGER H,G,F
*
      COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
      COMMON /SEFI/ QM(2**15,4),QI(2**15,4,8)
*
      R=0
      DO 92 F=1,G
        R=R+P(F)*QM(H,F)
92    CONTINUE
*
      THEP=R
*
      RETURN
      END
*
*****
      DOUBLE PRECISION FUNCTION ZZFN0(H)
*****
*      FUNCION DE CALCULO DE ENERGIAS MEDIAS
*
      DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0
*
      INTEGER H
*
      COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
      ZZFN0=FN0(H)*Z0(H)**1.5
*
      RETURN
      END
*
*****
      DOUBLE PRECISION FUNCTION WGZ(H,G)
*****
*      FUNCION DE CALCULO DE VELOCIDADES DE DERIVA
*
      DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0,THEP,R
*
      INTEGER H,G
*
      COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
      R=1.D-34
      IF (THEP(H,G) .LT. R) THEN
        WGZ=0
      ELSE
        WGZ=Z0(H)*FN0(H)*GZ(H)/THEP(H,G)
      ENDIF
*
      RETURN
      END
*
*****
      DOUBLE PRECISION FUNCTION DFN0(H,G)
*****
*      FUNCION DE CALCULO DEL COEFICIENTE DE DIFUSION
*
      DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0,THEP
*
      INTEGER H,G
*
      COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
      IF (THEP(H,G) .LT. 1) THEN
        DFN0=0

```

```

ELSE
  DFN0=Z0(H)*FN0(H)/THEP(H,G)
ENDIF
*
RETURN
END
*
*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION F1F0G(H,G)
*****
  FUNCION PARA CALCULAR EL COEFICIENTE DE ASIMETRIA
*
  DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0,THEP
*
  INTEGER H,G
*
  COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
*
  IF (THEP(H,G) .LT. 1) THEN
    F1F0G=0
  ELSE
    F1F0G=(Z0(H)**0.5)*FN0(H)*GZ(H)/THEP(H,G)
  ENDIF
*
  RETURN
  END
*
*****
SUBROUTINE ITRAP(FUNC,A,B,S)
*****
*
  DOUBLE PRECISION FUNC,S,R,CKT,TMN
*
  INTEGER A,B,C
  INTEGER DIM
*
  COMMON /CONS/ DIM,CKT,TMN
*
  IF ((B-A) .LT. 1) THEN
    S=0
  ELSE
    IF ((B-A) .LT. 2) THEN
      S=TMN*0.5*(FUNC(A)+FUNC(B))
    ELSE
      R=0
      DO 81 C=A+1,B-1
        R=R+FUNC(C)
81      CONTINUE
      S=TMN*(R+0.5*(FUNC(A)+FUNC(B)))
    ENDIF
  ENDIF
*
  RETURN
  END
*
*****
SUBROUTINE ITRAP1(FUNC,A,B,D,S)
*****
*
  DOUBLE PRECISION FUNC,S,R,CKT,TMN
*
  INTEGER A,B,C,D
  INTEGER DIM
*
  COMMON /CONS/ DIM,CKT,TMN
*
  IF ((B-A) .LT. 1) THEN
    S=0
  ELSE
    IF ((B-A) .LT. 2) THEN
      S=TMN*0.5*(FUNC(A,D)+FUNC(B,D))
    ELSE
      R=0

```

```

      DO 81 C=A+1,B-1
        R=R+FUNC(C,D)
81    CONTINUE
        S=TMN*(R+0.5*(FUNC(A,D)+FUNC(B,D)))
      ENDIF
    ENDIF
  *
  RETURN
  END
  *
*****
  SUBROUTINE ITRAP2(FUNC,A,B,D,E,S)
*****
  *
  *
  DOUBLE PRECISION FUNC,S,TMN,R,CKT
  *
  INTEGER A,B,DIM,C,E
  *
  COMMON /CONS/ DIM,CKT,TMN
  *
  IF ((B-A) .LT. 1) THEN
    S=0
  ELSE
    IF ((B-A) .LT. 2) THEN
      S=TMN*0.5*(FUNC(A,D,E)+FUNC(B,D,E))
    ELSE
      R=0
      DO 81 C=A+1,B-1
        R=R+FUNC(C,D,E)
81    CONTINUE
        S=TMN*(R+0.5*(FUNC(A,D,E)+FUNC(B,D,E)))
      ENDIF
    ENDIF
  *
  RETURN
  END
  *
*****
  SUBROUTINE DASEF
*****
  *
  SECCIONES EFICACES NORMALIZADAS (10**-15 CENTIMETROS2)
  *
  DOUBLE PRECISION Q11,Q12,Q13,Q14,Q15
  DOUBLE PRECISION Q21,Q22,Q23,Q24
  DOUBLE PRECISION Q31,Q32,Q33,Q34
  DOUBLE PRECISION Q41,Q42,Q43,Q44
  DOUBLE PRECISION ZLM,ZUM,XI,PX
  DOUBLE PRECISION ZI
  DOUBLE PRECISION CKT,TMN
  *
  INTEGER NQ,DIM
  INTEGER NL,NI
  INTEGER SE
  INTEGER I,H
  *
  COMMON /GAS1/ Q11(161),Q12(41),Q13(38),Q14(42),Q15(40)
  COMMON /GAS2/ Q21(165),Q22(48),Q23(37),Q24(22)
  COMMON /GAS3/ Q31(151),Q32(19),Q33(50),Q34(50)
  COMMON /GAS4/ Q41(165),Q42(19),Q43(19),Q44(50)
  COMMON /PSEF/ ZLM,ZUM,NQ(4,8),XI(4,8),PX(4,8)
  COMMON /SELO/ SE(4,8)
  COMMON /UMBR/ ZI(4,8)
  COMMON /CONS/ DIM,CKT,TMN
  COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
  *
  *
  EXTREMO INFERIOR DEL INTERVALO ZLM
  EXTREMO SUPERIOR DEL INTERVALO ZUM
  *
  *
  DATA ZLM,ZUM /0.4,4000/
  *
  *
  NUMERO DE PUNTOS DE LAS SECCIONES Qij NQ(,)
  *
  DATA NQ /161,165,151,165,
+ 41,48,19,19,

```

```

+ 38,37,0,19,
+ 42,22,0,50,
+ 40,0,0,0,
+ 21,0,0,0,
+ 11,0,0,0,
+ 0,0,0,0/
*
*   ESPECIFICACION DE ENTRADA LOGARIT.=1 / NO-LOGARIT.=0 (eV)
*
*   DATA SE /1,1,0,1,
+ 1,1,1,1,
+ 1,1,1,1,
+ 1,1,1,1,
+ 1,1,1,1,
+ 1,1,1,1,
+ 1,1,1,1,
+ 1,1,1,1/
*
*   VALORES INICIALES DE X XI(.)
*
*   DATA XI /-2.00,-2.00,0.01,-2.00,
+ -1.10,-0.80,1.20,1.070,
+ -0.55,-0.45,9.00,1.20,
+ -0.17,0.95,9.00,9.00,
+ 0.49,9.00,9.00,9.00,
+ 0.49,9.00,9.00,9.00,
+ 0.85,9.00,9.00,9.00,
+ 9.00,9.00,9.00,9.00/
*
*   UMBRALES DE LAS SECCIONES INELASTICAS ZI(.)
*
*   DO 111 L=1,NL
*   DO 112 I=1,NI(L)
*   H=I+1
*   IF (SE(L,H) .EQ. 1) THEN
*     ZI(L,I)=10**XI(L,H)/CKT
*   ELSE
*     ZI(L,I)=XI(L,H)/CKT
*   ENDIF
*   112 CONTINUE
*   111 CONTINUE
*
*   PASO DE LA VARIABLE EN LAS TABLAS PX(.)
*
*   DATA PX /0.025,0.025,0.100,0.025,
+ 0.050,0.050,0.050,0.050,
+ 0.050,0.050,0,0.050,
+ 0.005,0.050,0,0,
+ 0.025,0,0,0,
+ 0.010,0,0,0,
+ 0.010,0,0,0,
+ 0,0,0,0/
*
*   GAS1 - SECCIONES EFICACES DEL CO2 (LOGARITMICAS)
*
*   TRANSFERENCIA DE MOMENTO
*   UTILIZA QM 11 NQ=41 XI=-2.000 PX=0.100
*
*   DATA Q11 /1.200,1.190,1.180,
+ 1.170,1.160,1.150,1.140,1.130,1.120,1.110,1.100,
+ 1.090,1.080,1.070,1.060,1.050,1.040,1.025,1.010,
+ 1.000,0.985,0.965,0.950,0.940,0.930,0.920,0.910,
+ 0.900,0.890,0.875,0.860,0.850,0.835,0.820,0.805,
+ 0.790,0.780,0.770,0.755,0.740,0.725,0.710,0.695,
+ 0.680,0.670,0.660,0.645,0.630,0.600,0.580,0.560,
+ 0.540,0.520,0.500,0.480,0.450,0.420,0.380,0.340,
+ 0.290,0.240,0.190,0.145,0.100,0.060,0.020,-0.020,
+ -0.060,-0.090,-0.120,-0.150,-0.175,-0.200,-0.225,-0.250,
+ -0.275,-0.295,-0.315,-0.330,-0.345,-0.360,-0.370,
+ -0.380,-0.380,-0.375,-0.365,-0.350,-0.335,
+ -0.320,-0.300,-0.280,-0.250,-0.220,-0.180,-0.140,-0.090,
+ -0.050,0.010,0.075,0.125,0.165,0.200,0.220,0.230,0.235,
+ 0.230,0.220,0.200,0.170,0.145,0.115,0.095,0.070,0.055,
+ 0.045,0.040,0.035,0.040,0.045,0.050,0.055,0.060,0.070,
+ 0.075,0.080,0.085,0.095,0.100,0.110,0.115,0.120,0.125,

```

```

+ 0.130,0.133,0.136,0.138,0.140,0.143,0.145,0.143,
+ 0.140,0.135,0.130,0.120,0.110,0.100,0.090,0.075,
+ 0.060,0.050,0.040,0.030,0.020,0.010,0.000,-0.010,
+ -0.020,-0.030,-0.040,-0.055,-0.070/
*
*
*       INELASTICA 1
*       UTILIZA QI 12 NQ=41 XI=-1.100 PX=0.050
*
*       DATA Q12 /-4.000,-0.990,-0.580,-0.530,-0.520,-0.540,-0.580,
+ -0.700,-0.900,-0.960,-1.000,-1.030,
+ -1.060,-1.090,-1.120,-1.150,-1.180,-1.210,-1.240,-1.270,
+ -1.300,-1.330,-1.360,
+ -1.390,-1.420,-1.450,-1.480,-1.510,-1.540,-1.570,-1.600,
+ -1.630,-1.660,-1.690,-1.720,-1.750,-1.780,-1.810,-1.900,
+ -2.000,-3.000/
*
*       INELASTICA 2
*       UTILIZA QI 13 NQ=38 XI=-0.550 PX=0.050
*
*       DATA Q13 /-4.000,-1.000,-0.500,-0.460,-0.470,-0.650,-0.880,
+ -1.010,-1.090,-1.130,-1.160,-1.190,-1.220,
+ -1.250,-1.280,-1.310,-1.340,-1.370,-1.400,-1.430, -1.450,-1.490,
+ -1.520,-1.550,-1.580,-1.610,-1.640,-1.670,-1.700, -1.730,-1.760,
+ -1.790,-1.820,-1.850,-1.880,-2.000,-2.500,-3.000/
*
*       QI 14 NQ=22 XI=-0.22 PX=0.005
*
*       DATA Q14 /-4.000,-0.600,-0.580,-0.580,-0.580,-0.600,
+ -0.700,-1.000,-1.370,-1.580,-1.980,-2.590,-3.000, -3.000,-3.000,
+ -3.000,-3.000,-3.000,-3.000,-3.000,-3.000,-3.000,-3.000,-2.140,
+ -1.150,-0.700,-0.670,-0.660,-0.670,-0.740,-0.900, -1.000,-1.050,
+ -1.090,-1.130,-1.160,-1.190,-1.210,-1.240,-1.270, -1.300,-1.330/
*
*       QI 15 NQ=22 XI=-0.05 PX=0.005
*
*       DATA Q15 /-4.000,-1.450,-1.150,-1.020,-1.010,-1.020,-1.150,
+ -1.250,-1.350,-1.420,-1.460,-1.560,-1.640,-1.600, -1.475,-1.330,
+ -1.150,-1.020,-1.010,-1.020,-1.150,-1.200,-1.240,-1.280,
+ -1.320,-1.340,-1.360,-1.380,-1.400,-1.450,-1.500,-1.550,
+ -1.600,-1.630,-1.640,-1.650,-1.660,-1.670,-2.000,-2.500/
*
*
*       GAS2 - SECCIONES EFICACES DEL METANO (LOGARITMICAS)
*
*       TRANSFERENCIA DE MOMENTO
*       UTILILIZA QM 21 NQ=165 XI=-2.000 PX=0.100
*
*       DATA Q21 /0.140,0.135,0.128,0.120,0.110,0.100,0.090,
+ 0.080,0.070,0.060,0.050,0.035,0.020,0.005,-0.010,-0.025,
+ -0.040,-0.055,-0.070,-0.090,-0.110,-0.135,-0.160, -0.185,-0.210,
+ -0.240,-0.270,-0.300,-0.330,-0.365,-0.400,-0.435, -0.470,-0.505,
+ -0.540,-0.575,-0.610,-0.645,-0.680,-0.715,-0.750,-0.780,
+ -0.810,-0.840,-0.865,-0.890,-0.910,
+ -0.930,-0.945,-0.960,-0.970,-0.980,-0.985,-0.990, -0.995,-0.998,
+ -1.000,-1.000,-0.995,-0.990,-0.980,-0.970,-0.960,
+ -0.945,-0.924,-0.900,-0.875,-0.850,-0.825,-0.800,-0.775,
+ -0.750,-0.725,-0.702,-0.680,-0.660,-0.640,-0.620, -0.600,-0.580,
+ -0.560,-0.540,-0.520,-0.500,-0.480,-0.460,-0.440, -0.420,-0.400,
+ -0.380,-0.360,-0.340,-0.320,-0.300,-0.280,-0.262, -0.245,-0.230,
+ -0.215,-0.200,-0.185,-0.170,-0.155,-0.140,-0.125, -0.110,-0.100,
+ -0.090,-0.080,
+ -0.070,-0.060,-0.050,-0.040,-0.035,-0.030,-0.025, -0.020,-0.017,
+ -0.014,-0.013,-0.012,-0.011,-0.011,-0.012,-0.013, -0.014,-0.015,
+ -0.020,-0.025,-0.030,-0.040,-0.050,-0.065,-0.070, -0.105,-0.135,
+ -0.170,-0.210,-0.240,-0.270,-0.310,-0.340,-0.365,-0.400,
+ -0.446,-0.460,-0.480,-0.530,-0.582,-0.600,-0.620,-0.650,
+ -0.685,-0.700,-0.720,-0.760,-0.804,-0.820,-0.840,-0.850,
+ -0.860,-0.880,-0.900,-0.920,-0.940/
*
*
*       INELASTICA 1
*       UTILIZA QI 22 NQ=48 XI=-0.800 PX=0.050
*

```

```

DATA Q22 /-4.000,-1.500,-1.360,-1.280,-1.250,-1.230,-1.225,
+ -1.220,-1.230,-1.240,-1.260,-1.280,-1.300,
+ -1.320,-1.340,-1.360,-1.380,-1.400,-1.415,
+ -1.430,-1.440,-1.445,-1.448,-1.445,-1.435,-1.410,
+ -1.365,-1.300,-1.230,-1.160,-1.090,-1.020,-0.980,-0.960,
+ -0.960,-0.980,-1.020,-1.070,-1.140,-1.220,
+ -1.300,-1.400,-1.500,-1.600,-1.700,-1.800,-1.900,-2.000/
*
*
*
INELASTICA 2
UTILIZA QI 23 NQ=37 XI=-0.400 PX=0.050
*
*
DATA Q23 /-4.000,-2.000,-1.740,-1.680,-1.650,-1.640,-1.640,
+ -1.645,-1.655,-1.670,-1.690,-1.705,-1.720,-1.730,-1.740,
+ -1.745,-1.740,-1.710,-1.660,-1.600,
+ -1.500,-1.400,-1.300,-1.200,-1.100,-1.040,-1.010,-1.010,-1.040,
+ -1.080,-1.170,-1.270,-1.300,-1.400,-1.500,-1.600,-1.700/
*
*
*
INELASTICA 3
UTILIZA QI 24 NQ=22 XI=0.950 PX=0.050
*
*
DATA Q24 /-3.000,-1.564,-1.190,-0.952,-0.816,-0.714,-0.680,
+ -0.646,-0.629,-0.612,-0.611,-0.612,-0.646,-0.663,-0.697,-0.731,
+ -0.748,-0.782,-0.833,-0.884,-0.918,-0.952/
*
*
*
GAS3 - SECCIONES EFICACES DEL XENON
NO AJUSTADA EN EL PRESENTE TRABAJO
TRANSFERENCIA DE MOMENTO
UTILIZA QM 31 NQ=151 XI=0.01 PX=0.10 (ev)
*
*
DATA Q31 /8.425,1.900,0.720,0.310,0.158,0.095,0.076,0.082,0.105,
+ 0.140,0.175,0.215,0.260,0.308,0.358,0.415,0.473,0.540, 0.600,
+ 0.675,0.750,0.825,0.925,1.000,1.075,1.175,1.275,1.350, 1.425,
+ 1.525,1.625,1.725,1.800,1.900,2.000,2.075,2.175,2.225, 2.300,
+ 2.350,2.400,2.475,2.525,2.575,2.625,2.675,2.700,2.730, 2.780,
+ 2.800,2.830,2.880,2.890,2.900,2.910,2.900,2.925,2.945, 2.950,
+ 2.950,2.950,2.947,2.944,2.941,2.938,2.935,2.932,2.929, 2.926,
+ 2.923,2.920,2.908,2.896,2.884,2.872,2.860,2.848,2.836, 2.824,
+ 2.812,2.800,2.790,2.780,2.770,2.760,2.750,2.740,2.730, 2.720,
+ 2.710,2.700,2.690,2.680,2.670,2.660,2.650,2.640,2.630, 2.620,
+ 2.610,2.600,2.595,2.590,2.585,2.580,2.575,2.570,2.565, 2.560,
+ 2.555,2.550,2.545,2.540,2.535,2.530,2.525,2.520,2.515, 2.510,
+ 2.505,2.500,2.495,2.490,2.485,2.480,2.475,2.470,2.465, 2.460,
+ 2.455,2.450,2.445,2.440,2.435,2.430,2.425,2.420,2.415, 2.410,
+ 2.405,2.400,2.395,2.390,2.385,2.380,2.375,2.370,2.365, 2.360,
+ 2.355,2.350/
*
*
*
INELASTICA 1
UTILIZA QI 32 NQ=19 XI=1.200 PX=0.050 (logaritmicas)
*
*
DATA Q32 /-2.124,-1.404,-1.188,-0.954,-0.864,-0.792,-0.738,
+ -0.666,-0.630,-0.594,-0.576,-0.558,-0.540,-0.540, -0.540,-0.540,
+ -0.540,-0.549,-0.558/
*
*
*
GAS4 - SECCIONES EFICACES DEL ARGON (logaritmicas)
*
*
TRANSFERENCIA DE MOMENTOS
UTILIZA QM 41 NQ=42 XI=-2.000 PX=0.100
*
*
DATA Q41 /-0.400,-0.405,-0.410,-0.415,
+ -0.420,-0.425,-0.431,-0.437,-0.442,-0.451,-0.465,-0.477,
+ -0.491,-0.505,-0.515,-0.530,-0.545,-0.560,-0.575,-0.592,
+ -0.610,-0.630,-0.650,-0.670,-0.690,-0.705,-0.725,-0.750,
+ -0.780,-0.805,-0.840,-0.875,-0.910,-0.945,-0.985,-1.030,
+ -1.075,-1.105,-1.155,-1.195,-1.245,-1.300,-1.355,-1.420,
+ -1.505,-1.595,-1.655,-1.750,-1.830,-1.910,-1.980,-2.040,
+ -2.065,-2.075,-2.075,-2.065,-2.050,-2.010,-1.950,-1.870,
+ -1.790,-1.720,-1.660,-1.603,-1.550,-1.490,-1.430,-1.375,
+ -1.315,-1.260,-1.210,-1.170,-1.135,-1.100,-1.070,-1.040,
+ -1.010,-0.975,-0.945,-0.915,-0.888,-0.861,-0.834,-0.807,
+ -0.780,-0.753,-0.726,-0.699,-0.672,-0.645,-0.618,-0.591,

```



```

COMMON /SEFI/ QM(2**15,4),QI(2**15,4,8)
COMMON /SUMA/ SQI(4,8)
COMMON /PANT/ PANTA
*
ZU=DIM*TMN
*
*   SECCIONES EFICACES: L INDICA EL NUMERO DE GAS
*   H CORRESPONDE AL NUMERO DE SECCION
*
DO 771 L=1,NL
IF (P(L) .GT. 0.005) THEN
  DO 772 H=1,NI(L)+1
*
    GOTO (761,751,741,731),L
*
  L=1 CORRESPONDE AL CO2
*
761    GOTO (762,763,764,765,766,767,768),H
*
  H=1
*
762    DO 710 J=1,NQ(L,H)
        Y(J)=Q11(J)
710    CONTINUE
        GOTO 780
*
  H=2
*
763    DO 711 J=1,NQ(L,H)
        Y(J)=Q12(J)
711    CONTINUE
        GOTO 780
*
  H=3
*
764    DO 712 J=1,NQ(L,H)
        Y(J)=Q13(J)
712    CONTINUE
        GOTO 780
*
  H=4
*
765    DO 713 J=1,NQ(L,H)
        Y(J)=Q14(J)
713    CONTINUE
        GOTO 780
*
  H=5
*
766    DO 714 J=1,NQ(L,H)
        Y(J)=Q15(J)
714    CONTINUE
        GOTO 780
*
  H=6
*
767    DO 715 J=1,NQ(L,H)
        T=0.490+(J-1)*0.010
        Y(J)=-0.0078*((T-0.59)/0.030)**4-1.04
715    CONTINUE
        GOTO 780
*
  H=7
*
768    DO 716 J=1,NQ(L,H)
        T=0.850+(J-1)*0.010
        Y(J)=-0.114*((T-0.900)/0.030)**4-1.220
716    CONTINUE
        GOTO 780
*
  L=2 CORRESPONDE AL METANO
*
751    GOTO (752,753,754,755),H
*
  H=1

```

```

*
752      DO 720 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q21(J)
720      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      H=2
*
753      DO 721 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q22(J)
721      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      H=3
*
754      DO 722 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q23(J)
722      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      H=4
*
755      DO 723 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q24(J)
723      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      L=3 CORRESPONDE AL XENON
*
741      GOTO (742,743),H
*
*      H=1
*
742      DO 749 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q31(J)
749      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      H=2
*
743      DO 748 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q32(J)
748      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      L=4 CORRESPONDE AL ARGON
*
731      GOTO (732,733,734),H
*
*      H=1
*
732      DO 739 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q41(J)
739      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      H=2
*
733      DO 738 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q42(J)
738      CONTINUE
          GOTO 780
*
*      H=3
*
734      DO 737 J=1,NQ(L,H)
          Y(J)=Q43(J)
737      CONTINUE
          GOTO 780
*
780      IF (SE(L,H) .EQ. 1) THEN
*
          QXI=10**XI(L,H)/CKT
          J=1
          DO WHILE ((Z0(J) .LT. QXI) .AND. (J .LE. DIM))

```

```

        J=J+1
    END DO
    J0=J
*
    COD=DABS(Z0(J0-1)-QXI)
    IF (COD .LT. 1.D-2) THEN
        J0=J-1
        K0=1
        Q(J0)=10**Y(K0)
    ELSE
        QX=QXI
        K=1
        DO WHILE ((QX .LE. Z0(J0)) .AND. (K .LE. NQ(L,H)))
            K=K+1
            QX=10**((XI(L,H)+(K-1)*PX(L,H))/CKT)
        END DO
        K0=K
*
        ZX1=10**((XI(L,H)+(K0-2)*PX(L,H))/CKT)
        ZX2=10**((XI(L,H)+(K0-1)*PX(L,H))/CKT)
        COA=10**Y(K0-1)
        COB=10**Y(K0)
        COC=(COB-COA)/(ZX2-ZX1)
*
        Q(J0)=COC*(Z0(J)-ZX1)+COA
*
    ENDIF
*
*
PUNTOS SUCESIVOS
*
    J=J0+1
    DO WHILE ((K0+1 .LE. NQ(L,H)-1) .AND. (J .LE. DIM))
        K=K0-1
        QX=10**((XI(L,H)+(K-1)*PX(L,H))/CKT)
        DO WHILE (QX .LE. Z0(J))
            K=K+1
            QX=10**((XI(L,H)+(K-1)*PX(L,H))/CKT)
        END DO
        K0=K
*
        ZX1=10**((XI(L,H)+(K0-2)*PX(L,H))/CKT)
        ZX2=10**((XI(L,H)+(K0-1)*PX(L,H))/CKT)
        COA=10**Y(K0-1)
        COB=10**Y(K0)
        COC=(COB-COA)/(ZX2-ZX1)
*
        COD=COC*(Z0(J)-ZX1)+COA
*
        X1=10**((XI(L,H)+(K0-3)*PX(L,H))/CKT)
        X2=10**((XI(L,H)+(K0-2)*PX(L,H))/CKT)
        X3=10**((XI(L,H)+(K0-1)*PX(L,H))/CKT)
        y1=10**Y(K0-2)
        y2=10**Y(K0-1)
        y3=10**Y(K0)
*
        CALL INTERP2(A2,A1,A0)
*
        COA=A2*Z0(J)**2+A1*Z0(J)+A0
*
        X1=10**((XI(L,H)+(K0-2)*PX(L,H))/CKT)
        X2=10**((XI(L,H)+(K0-1)*PX(L,H))/CKT)
        X3=10**((XI(L,H)+K0*PX(L,H))/CKT)
        y1=10**Y(K0-1)
        y2=10**Y(K0)
        y3=10**Y(K0+1)
*
        CALL INTERP2(A2,A1,A0)
*
        COB=A2*Z0(J)**2+A1*Z0(J)+A0
*
        COE=(COA+COB)/2
*
        COF=DABS(COD-COE)
*
    IF (COF .LT. 0.05*COD) THEN

```

```

        Q(J)=COE
        ELSE
        Q(J)=COD
        ENDIF
*
        J=J+1
        END DO
        I0=J
*
        DO 555 J=I0,DIM
        Q(J)=0
555        CONTINUE
*
        ELSE
*
* INTERP. DE SECC. EFIC. EN eV
* Primer punto
        QXI=XI(L,H)/CKT
        J=1
        DO WHILE ((Z0(J) .LT. QXI) .AND. (J .LE. DIM))
        J=J+1
        END DO
        J0=J
*
        COD=DABS(Z0(J0)-QXI)
        IF (COD .LT. 1.D-2) THEN
        J0=J-1
        K0=1
        Q(J0)=Y(K0)
        ELSE
        QX=QXI
        K=1
        DO WHILE ((QX .LE. Z0(J0)) .AND. (K .LE. NQ(L,H)))
        K=K+1
        QX=(XI(L,H)+(K-1)*PX(L,H))/CKT
        END DO
        K0=K
*
        ZX1=(XI(L,H)+(K0-2)*PX(L,H))/CKT
        ZX2=(XI(L,H)+(K0-1)*PX(L,H))/CKT
        COA=Y(K0-1)
        COB=Y(K0)
        COC=(COB-COA)/(ZX2-ZX1)
*
        Q(J0)=COC*(Z0(J0)-ZX1)+COA
        ENDIF
*
* PUNTOS SUCESIVOS
*
        J=J0+1
        DO WHILE ((K0+1 .LE. NQ(L,H)) .AND. (J .LE. DIM))
        K=K0-1
        QX=(XI(L,H)+(K-1)*PX(L,H))/CKT
        DO WHILE (QX .LE. Z0(J))
        K=K+1
        QX=(XI(L,H)+(K-1)*PX(L,H))/CKT
        END DO
        K0=K
*
        ZX1=(XI(L,H)+(K0-2)*PX(L,H))/CKT
        ZX2=(XI(L,H)+(K0-1)*PX(L,H))/CKT
        COA=Y(K0-1)
        COB=Y(K0)
        COC=(COB-COA)/(ZX2-ZX1)
*
        Q(J)=COC*(Z0(J)-ZX1)+COA
        END DO
        I0=J
*
        DO 556 J=I0,DIM
        Q(J)=0
556        CONTINUE
        ENDIF
*
        IF (H .EQ. 1) THEN

```

```

DO 810 J=1,DIM
  IF (J .LE. J0) THEN
    QM(J,L)=Q(J0)
  ELSE
    QM(J,L)=Q(J)
  ENDIF
810  CONTINUE
*

ELSE IF (H .EQ. 2) THEN
  I=H-1
  DO 811 J=1,DIM
    IF (J .LE. J0) THEN
      QI(J,L,I)=0
    ELSE
      QI(J,L,I)=Q(J)
    ENDIF
811  CONTINUE
*

ELSE IF (H .EQ. 3) THEN
  I=H-1
  DO 812 J=1,DIM
    IF (J .LE. J0) THEN
      QI(J,L,I)=0
    ELSE
      QI(J,L,I)=Q(J)
    ENDIF
812  CONTINUE
*

ELSE IF (H .EQ. 4) THEN
  I=H-1
  DO 813 J=1,DIM
    IF (J .LE. J0) THEN
      QI(J,L,I)=0
    ELSE
      QI(J,L,I)=Q(J)
    ENDIF
813  CONTINUE
*

ELSE IF (H .EQ. 5) THEN
  I=H-1
  DO 814 J=1,DIM
    IF (J .LE. J0) THEN
      QI(J,L,I)=0
    ELSE
      QI(J,L,I)=Q(J)
    ENDIF
814  CONTINUE
*

ELSE IF (H .EQ. 6) THEN
  I=H-1
  DO 815 J=1,DIM
    IF (J .LE. J0) THEN
      QI(J,L,I)=0
    ELSE
      QI(J,L,I)=Q(J)
    ENDIF
815  CONTINUE
*

ELSE
  I=H-1
  DO 816 J=1,DIM
    IF (J .LE. J0) THEN
      QI(J,L,I)=0
    ELSE
      QI(J,L,I)=Q(J)
    ENDIF
816  CONTINUE
  ENDIF
772  CONTINUE
  ENDIF
771  CONTINUE
*

RETURN
END
*
```

```

*****
      SUBROUTINE INTERP2(A2,A1,A0)
*****
*
*
      DOUBLE PRECISION A2,A1,A0
      DOUBLE PRECISION COA,COB,COC,COD,COE,COF
      DOUBLE PRECISION DDD,DD2,DD1,DD0
      DOUBLE PRECISION X1,X2,X3,Y1,Y2,Y3
*
      COMMON /INTP/ X1,X2,X3,Y1,Y2,Y3
      COMMON /CERO/ EPSORD,CEROFN,COTSG,COAMP
*
      DDD=X1**2*X2+X2**2*X3+X3**2*X1-X3**2*X2-X1**2*X3-X2**2*X1
*
      COC=DABS(DDD)
*
      IF (COC .LT. CEROFN) THEN
          A2=0.0
          A1=0.0
          A0=0.0
          GOTO 20
      ENDIF
*
      DD2=Y1*X2+Y2*X3+Y3*X1-Y3*X2-Y1*X3-Y2*X1
      DD1=X1**2*Y2+X2**2*Y3+X3**2*Y1-X3**2*Y2-X1**2*Y3-X2**2*Y1
      COA=X1**2*X2*Y3+X2**2*X3*Y1+X3**2*X1*Y2
      COB=X3**2*X2*Y1+X1**2*X3*Y2+X2**2*X1*Y3
      DD0=COA-COB
*
      A2=DD2/DDD
      A1=DD1/DDD
      A0=DD0/DDD
*
20    CONTINUE
*
      RETURN
      END
*
*****
      SUBROUTINE FICHEROS
*****
*
*      SALIDAS DE LOS FICHEROS DE LAS SECCIONES EFICACES
*
*
      DOUBLE PRECISION Z0,GZ,FN0
      DOUBLE PRECISION CKT,TMN,ZU
      DOUBLE PRECISION Q11,Q12,Q13,Q14,Q15
      DOUBLE PRECISION Q21,Q22,Q23,Q24
      DOUBLE PRECISION Q31,Q32,Q33,Q34
      DOUBLE PRECISION Q41,Q42,Q43,Q44
      DOUBLE PRECISION ZLM,ZUM,XI,PX
      DOUBLE PRECISION MG,P
      DOUBLE PRECISION QM,QI
      DOUBLE PRECISION COA,COB,COC,COD,COE
*
      INTEGER HBPANT,HFISEF
      INTEGER N,DIM,NL,NI
      INTEGER NQ
      INTEGER SE
      INTEGER J,L,I,H,J0,I0
      INTEGER K,K0
      INTEGER PANTA
*
      COMMON /PANT/ HBPANT,HFISEF
      COMMON /DIVI/ N
      COMMON /CONS/ DIM,CKT,TMN
      COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
      COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
      COMMON /ZGFN/ Z0(2**15),GZ(2**15),FN0(2**15)
      COMMON /PSEF/ ZLM,ZUM,NQ(4,8),XI(4,8),PX(4,8)
      COMMON /SELO/ SE(4,8)
      COMMON /SEFI/ QM(2**15,4),QI(2**15,4,8)
      COMMON /SUMA/ SQI(4,8)
      COMMON /PANT/ PANTA
*

```

```

*          SALIDAS FORMATEADAS
*
4004      FORMAT (2F10.4)
*
      DO 4000 L=1,NL
      IF (P(L) .GT. 0.005) THEN
          GOTO (4100,4200,4300,4400),L
*
*          L=1 CORRESPONDE AL CO2
*
4100          OPEN(30,FILE='QMCO2', ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
      DO 5100 J=1,DIM,8
          WRITE (30,4004) Z0(J), QM(J,L)
5100          CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          DO 4110 H=1,NI(L)
          GOTO (4111,4112,4113,4114),H
*
*          H=1
*
4111          OPEN(30,FILE='QI1CO2', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
      DO 5111 J=1,DIM,8
          WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5111          CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          GOTO 4101
*
*          H=2
*
4112          OPEN (30,FILE='QI2CO2', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
      DO 5112 J=1,DIM,8
          WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5112          CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          GOTO 4101
*
*          H=3
*
4113          OPEN (30,FILE='QI3CO2', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
      DO 5113 J=1,DIM,8
          WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5113          CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          GOTO 4101
*
*          H=4
*
4114          OPEN (30,FILE='QI4CO2', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
      DO 5114 J=1,DIM,8
          WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5114          CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
4101          CONTINUE
4110          CONTINUE
*
          GOTO 4001

```



```

*
*           L=2 CORRESPONDE AL METANO
*
4200       OPEN (30,FILE='QMCH4', ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
          DO 5200 J=1,DIM
            WRITE (30,4004) Z0(J), QM(J,L)
5200       CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          DO 4210 H=1,NI(L)
            GOTO (4211,4212,4213),H
*
*           H=1
*
4211       OPEN (30,FILE='QI1CH4', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
          DO 5211 J=1,DIM
            WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5211       CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          GOTO 4201
*
*           H=2
*
4212       OPEN (30,FILE='QI2CH4', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
          DO 5212 J=1,DIM
            WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5212       CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          GOTO 4201
*
*           H=3
*
4213       OPEN (30,FILE='QI3CH4', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
          DO 5213 J=1,DIM
            WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5213       CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          CONTINUE
4201       CONTINUE
4210       GOTO 4001
*
*           L=3 CORRESPONDE AL XENON
*
4300       CONTINUE
          GOTO 4001
*
*           L=4 CORRESPONDE AL ARGON
*
4400       OPEN(30,FILE='QMARGS', ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
*
          DO 5400 J=1,DIM
            WRITE (30,4004) Z0(J), QM(J,L)
5400       CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          DO 4410 H=1,NI(L)
            GOTO (4411,4412),H
*
*           H=1

```

```

*
4411      OPEN (30,FILE='QI1ARGS', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
          DO 5411 J=1,DIM
            WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5411      CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          GOTO 4401
*
*      H=2
*
4412      OPEN (30,FILE='QI2ARGS', ACCESS='SEQUENTIAL',
+STATUS='UNKNOWN')
          DO 5412 J=1,DIM
            WRITE (30,4004) Z0(J), QI(J,L,H)
5412      CONTINUE
*
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
4401      CONTINUE
4410      CONTINUE
4001      CONTINUE
          ENDIF
4000      CONTINUE
*
          RETURN
          END
*
*****
          SUBROUTINE FICHEWDE
*****
          FICHERO DE SALIDA DE LA VELOCIDAD DE DERIVA
*
          DOUBLE PRECISION MG,P
          DOUBLE PRECISION DEP,DWD,DIFI,ENIO,
+ MOVI,DESVI,COCIE,ASIME
*
          INTEGER J,L,I,H,J0,I0
          INTEGER NL,NI
          INTEGER VU
*
          COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
          COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
          COMMON /WDER/ VU
          COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),
+ MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)
*
9001      FORMAT (2F8.3)
          OPEN (30,FILE='WHPRO.DAT',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
*
          DO 500 J=1,VU
            WRITE (30,9001) DEP(J),DWD(J)
500      CONTINUE
          ENDFILE 30
          CLOSE (30)
*
          RETURN
          END
*
*****
          SUBROUTINE FICHEDIF
*****
          FICHERO DE SALIDA DEL COEFICIENTE DE DIFUSION
*
          DOUBLE PRECISION MG,P
          DOUBLE PRECISION DEP,DWD,DIFI,ENIO,
+ MOVI,DESVI,COCIE,ASIME
*
          INTEGER J,L,I,H,J0,I0
          INTEGER NL,NI
          INTEGER VU

```

```

*
COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
COMMON /WDER/ VU
COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),
+ MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)
*
9001   FORMAT (2F10.3)
*
OPEN (30,FILE='DIFPRO.DAT',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
DO 500 J=1,VU
WRITE (30,9001) DEP(J),DIFI(J)
500   CONTINUE
*
ENDFILE 30
CLOSE (30)
*
RETURN
END
*
*****
SUBROUTINE FICHEENE
*****
*       FICHERO DE SALIDA DE LA ENERGIA MEDIA
*
DOUBLE PRECISION MG,P
DOUBLE PRECISION DEP,DWD,DIFI,ENIO,
+ MOVI,DESVI,COCIE,ASIME
*
INTEGER J,L,I,H,J0,I0
INTEGER NL,NI
INTEGER VU
*
COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
COMMON /WDER/ VU
COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),
+ MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)
*
9001   FORMAT (2F8.3)
OPEN (30,FILE='ENEPRO.DAT',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
DO 500 J=1,VU
WRITE (30,9001) DEP(J),ENIO(J)
500   CONTINUE
*
ENDFILE 30
CLOSE (30)
*
RETURN
END
*
*****
SUBROUTINE FICHEMOV
*****
*       FICHERO DE SALIDA DE LA MOVILIDAD
*
DOUBLE PRECISION MG,P
DOUBLE PRECISION DEP,DWD,DIFI,ENIO,
+ MOVI,DESVI,COCIE,ASIME
*
INTEGER J,L,I,H,J0,I0
INTEGER NL,NI
INTEGER VU
*
COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
COMMON /WDER/ VU
COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),
+ MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)
*
9001   FORMAT (2F8.4)
OPEN (30,FILE='MOVPRO.DAT',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
DO 500 J=1,VU
WRITE (30,9001) DEP(J),MOVI(J)
500   CONTINUE

```

```

*
  ENDFILE 30
  CLOSE (30)
*
  RETURN
  END
*
*****
SUBROUTINE FICHEDES
*****
  FICHERO DE SALIDA DE LA DESVIACION ESTANDAR
*
  DOUBLE PRECISION MG,P
  DOUBLE PRECISION DEP,DWD,DIFI,ENIO,
+ MOVI,DESVI,COCIE,ASIME
*
  INTEGER J,L,I,H,J0,I0
  INTEGER NL,NI
  INTEGER VU
*
  COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
  COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
  COMMON /WDER/ VU
  COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),
+ MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)
*
9001  FORMAT (2F8.2)
      OPEN (30,FILE='DESPRO.DAT',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
      DO 500 J=1,VU
        WRITE (30,9001) DEP(J),DESVI(J)
500   CONTINUE
*
  ENDFILE 30
  CLOSE (30)
*
  RETURN
  END
*
*****
SUBROUTINE FICHECOC
*****
  FICHERO DE SALIDA DEL COCIENTE DIFUSION/MOVILIDAD
*
  DOUBLE PRECISION MG,P
  DOUBLE PRECISION DEP,DWD,DIFI,ENIO,MOVI,
+ DESVI,COCIE,ASIME
*
  INTEGER J,L,I,H,J0,I0
  INTEGER NL,NI
  INTEGER VU
*
  COMMON /NUGA/ NL,NI(4)
  COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)
  COMMON /WDER/ VU
  COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),
+ MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)
*
9001  FORMAT (2F8.4)
      OPEN (30,FILE='COCPRO.DAT',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')
      DO 500 J=1,VU
        WRITE (30,9001) DEP(J),COCIE(J)
500   CONTINUE
*
  ENDFILE 30
  CLOSE (30)
*
  RETURN
  END
*
*****
SUBROUTINE FICHEASI
*****
  FICHERO DE SALIDA DEL COEFICIENTE DE ASIMETRIA
*
  DOUBLE PRECISION MG,P

```

```
      DOUBLE PRECISION DEP,DWD,DIFI,ENIO,MOVI,  
+ DESVI,COCIE,ASIME  
*  
      INTEGER J,L,I,H,J0,I0  
      INTEGER NL,NI  
      INTEGER VU  
*  
      COMMON /NUGA/ NL,NI(4)  
      COMMON /MAPR/ MG(4),P(4)  
      COMMON /WDER/ VU  
      COMMON /FICW/ DEP(90),DWD(90),DIFI(90),ENIO(90),  
+ MOVI(90),DESVI(90),COCIE(90),ASIME(90)  
*  
9001      FORMAT (2F8.4)  
      OPEN (30,FILE='ASIPRO.DAT',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='UNKNOWN')  
      DO 500 J=1,VU  
          WRITE (30,9001) DEP(J),ASIME(J)  
500      CONTINUE  
*  
      ENDFILE 30  
      CLOSE (30)  
*  
      RETURN  
      END  
*
```


Bibliografía

- [1] N.F. Mott y H.S.W. Massey, *The Theory of Atomic and Molecular Collisions*, Oxford University Press, London, 1965.
- [2] L.G.H. Huxley y R.W. Crompton, *Difussion and Drift of Electrons in Gases*, J. Willey, New York, 1974.
- [3] H.S.W. Massey, *Atomic and Molecular Collisions*, Taylor & Francis Ltd., London, 1979.
- [4] P. S. Hoeper, W. Franzer and R. Gupta, Phys. Rev. **168**, 50 (1968).
- [5] D. J. R. Mimmagh, R. P. McEachran and A. D. Stauffer, J.Phys. B, **26**, 1727 (1993).
- [6] A. V. Phelps, Rev. Mod. Phys. **40**, 399 (1968).
- [7] L. S. Frost and A. V. Phelps, Phys. Rev. **127**, 1621 (1962).
- [8] E. Mathieson and N. El Hakkem, Nucl. Instr. and Meth. **159**, 489 (1979).
- [9] V. Palladino and B. Sadoulet, Nucl. Instr. and Meth. **128**, 323 (1975).
- [10] D. K. Davies, L. E. Kline and W. E. Bies, J. Appl. Phys, **65**, 3311 (1989).
- [11] N. El Hakkem and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **166**, 447 (1979).
- [12] J. C. Bowe, Phys. Rev. **117**, 1411 (1960).
- [13] R. W. Warren and J. H. Parker, Phys. Rev. **128**, 2261 (1962).
- [14] T. Alber et al, Nucl. Instr. and Meth. **A349**, 56 (1994).
- [15] J. L. Pack, R.E. Voshall, A. V. Phelps and L.E. Kline, J. Appl. Phys. **71**, 5363 (1992).
- [16] T. Holstein, Phys. Rev. **70**, 367 (1946).

- [17] P. M. Morse, W. P. Allis and H. W. Lamar, Phys. Rev. **48**, 412 (1935).
- [18] W. P. Allis, *Motions of Ions and Electrons*, Handbuch der Physik V. 21, Springer-Verlag, Berlin, 1956.
- [19] H. Margenau, Phys. Rev. **69**, 508 (1946).
- [20] L. C. Pitchford, S. V. Oneil and J. R. Rumble Jr., Phys. Rev. A **23**, 294 (1981).
- [21] W. Lowell Morgan, J.Phys. D, **26**, 209 (1993).
- [22] G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [23] S. F. Biagi, Nucl. Instr. and Meth. **A283**, 716 (1989).
- [24] B. Schmidt, Nucl. Instr. and Meth. **A252**, 579 (1986).
- [25] L. G. Christophorou, D. L. McCorkle, D. V. Maxey and J. G. Carter, Nucl. Instr. and Meth. **163**, 141 (1979).
- [26] T. Kunst, B. Götz and B. Schmidt, Nucl. Instr. and Meth. **A324**, 127 (1993).
- [27] L. S. Frost and A. V. Phelps, Phys. Rev. **136**, A1539 (1964).
- [28] F. Sauli, *Principles of Operation of Multiwire Proportional and Drift Chambers*, CERN, Geneva, 1977.
- [29] A. V. Zarubin, Nucl. Instr. and Meth. **A283**, 409 (1989).
- [30] Citado en F. Sauli, *Principles of Operation of Multiwire Proportional and Drift Chambers*, CERN, Geneva, 1977.
- [31] Citado en D. J. R. Mimmagh, R. P. McEachran and A. D. Stauffer, J.Phys. B, **26**, 1727 (1993).
- [32] Citado en T. Kunst, B. Götz and B. Schmidt, Nucl. Instr. and Meth. **A324**, 127 (1993).
- [33] Citado en D. J. R. Mimmagh, R. P. McEachran and A. D. Stauffer, J.Phys. B, **26**, 1727 (1993).
- [34] J. L. Pack and A. V. Phelps, Phys. Rev. **121**, 798 (1961).
- [35] A. Peisert and F. Sauli, *Drift and Difussion of Electrons in Gases: a Compilation*, CERN, Geneva, 1984.

- [36] Citado en E. Mathieson and El Hakkem, Nucl. Instr. and Meth. **159**, 489 (1979).
- [37] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [38] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [39] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [40] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [41] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [42] B. Schmidt, J.Phys. B, **24**, 4809 (1991).
- [43] S. C. Althorpe, F. A. Gianturco and N. Sanna, J.Phys. B, **28**, 4165 (1995).
- [44] F. A. Gianturco, J. A. Rodrigues-Ruiz and N. Sanna, J.Phys. B, **28**, 1287 (1995).
- [45] B. Schmidt and S. Polenz, Nucl. Instr. and Meth. **A273**, 488 (1988).
- [46] Citado en A. Peisert and F. Sauli, *Drift and Difussion of Electrons in Gases: a Compilation*, CERN, Geneva, 1984.
- [47] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [48] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [49] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [50] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [51] Citado en B. Schmidt and S. Polenz, Nucl. Instr. and Meth. **A273**, 488 (1988).
- [52] Citado en B. Schmidt and S. Polenz, Nucl. Instr. and Meth. **A273**, 488 (1988).

- [53] G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 566 (1986).
- [54] L. G. Christophorou, P. G. Datskos and J. G. Carter, Nucl. Instr. and Meth. **A309**, 160 (1991).
- [55] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [56] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [57] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [58] L. Wong, J. Armitage and J. Waterhouse, Nucl. Instr. and Meth. **A273**, 476 (1988).
- [59] T. Yamashita et al., Nucl. Instr. and Meth. **A283**, 709 (1989).
- [60] T. Zhao, Y. Chen, S. Han and J. Hersch, Nucl. Instr. and Meth. **A340**, 485 (1994).
- [61] Yuan-Hann Chang et al, Nucl. Instr. and Meth. **A311**, 490 (1992).
- [62] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [63] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [64] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [65] Citado en G. W. Fraser and E. Mathieson, Nucl. Instr. and Meth. **A274**, 544 (1986).
- [66] Citado en A. Peisert and F. Sauli, *Drift and Difussion of Electrons in Gases: a Compilation*, CERN, Geneva, 1984.