Energía de ionización.

A. Monroy-Azpeitia

Escuela Superior de Física y Matemáticas, Laboratorio Avanzado II, Instituto Politécnico Nacional, Avenida Instituto Politécnico Nacional s/n Edificio 9 Unidad Profesional "Adolfo López Mateos" Col. San Pedro Zacatenco, Nueva Industrial Vallejo, Gustavo A. Madero, 07738. Ciudad de México.

> Correo electrónico: <u>monroy.azp@gmail.com</u> Fecha de entrega:12 de diciembre de 2023.

Resumen

Utilizando un bulbo electrónico Thyratron-2D21 se dedujo el gas contenido dentro de él mediante la obtención de la energía de ionización del, en principio, gas desconocido, deduciendo que se trata de Xenón un error porcentual del 0.27% realizando un análisis gráfico de los datos, y de 6.389% mediante uno estadístico. También se logró estudiar el comportamiento del gas dentro de la región de Langmuir-Child. Todo lo anterior en un total de 4 distintos arreglos experimentales.

1.Introducción

Muchas propiedades químicas y físicas de las sustancias se pueden entender al conocer los espectros energéticos de los átomos cuando son excitados conforme a los postulados de la mecánica cuántica, los cuales fueron desarrollados junto a los espectros energéticos de los átomos. Las energías de ionización son necesarias para comprender las estructuras de las moléculas y sus propiedades, como las reacciones fotoquímicas [1], en la fabricación de dispositivos electrónicos, en el diseño de fármacos, la bioquímica y otras áreas.En este trabajo se expone la teoría suficiente para entender el fenómeno, así como los arreglos experimentales utilizados para la obtención de la energía de ionización del gas contenido en un bulbo electrónico Thyratron-2D21 y el estudio de la ecuación de Langmuir-Child para luego mostrar detalladamente los resultados de estos. Se da una conclusión del experimento y se añade un pequeño apéndice con preguntas relacionadas al tema. Los datos utilizados a lo largo de este trabajo se pueden encontrar en [5].

2. Teoría

El formalismo de la mecánica cuántica, basado en el desarrollo experimental del siglo pasado, predice una discretización en el espectro energético de los átomos al resolver la ecuación de eigenvalores correspondiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi \tag{1}$$

donde se considera el potencial de interacción Coulombiano. Dichas predicciones corroboradas experimentalmente hablan de la existencia de orbitales atómicos donde los electrones están *orbitando* con cierta energía (discreta). Gracias a los trabajos en espectroscopia, junto al desarrollo de la teoría se sabe que los átomos (en especial los vapores atómicos) adsorben energía de forma discreta

$$\Delta E = h v$$
 (2)

Concluyendo así que hasta darle una energía adicional al átomo con el valor indicado en (2), como por ejemplo la absorción de un fotón, el calentamiento a alta temperatura, la dispersión inelástica de otras partículas, un electrón se moverá a un estado excitado (estado de mayor energía). Si la

energía es lo suficientemente grande el electrón dejará de estar vinculado al átomo creando así un ion positivo o catión; es decir el átomo se ionizará.

En particular en la transferencia de energía mediante la dispersión inelástica de partículas la mayor parte de la energía que llevan las partículas incidentes que chocan se transfiere al átomo sin que éste se ionice, debido a la baja energía necesaria para mantener el equilibrio de momento en el sistema.

En otras palabras, el proceso de ionización de un átomo neutro puede considerarse como una transición entre los estados del sistema; el estado inicial corresponde al estado base del átomo y el estado final corresponde a un ion positivo por un lado y a un electrón en el continuo con energía cinética cero [3].

Para separar un electrón en su estado fundamental de un átomo de un elemento gaseoso se puede considerar:

$$A(g) + E_i \to A^+(g) + e^-$$
 (3)

Siendo E_i la primera energía de ionización y A el átomo en estado gaseoso, la segunda energía de ionización correspondería a aquella para sustraer el segundo electrón la cuál se esperaría que sea mayor al primer puesto un ion positivo es más pequeño que un átomo y ejerce una fuerza atractiva mayor sobre el segundo electrón, que sigue sintiendo la misma carga nuclear.

La energía de ionización es también una tendencia periódica dentro de la tabla periódica. Moviéndose de izquierda a derecha dentro de un período, o hacia arriba dentro de un grupo, la primera energía de ionización generalmente aumenta, con excepciones como el aluminio y el azufre.

Otro término común es el potencial de ionización, el cual refiere a la energía mínima requerida para separar un electrón de un átomo o molécula específica a una distancia tal que no exista interacción electrostática entre el ion y el electrón [4]. Cuando un átomo neutro experimenta ionización, se produce una transición entre estados del sistema. El estado inicial se refiere al estado base del átomo, mientras que el estado final implica la formación de un ion positivo y un electrón libre con energía cinética cero. La representación esquemática de este proceso se muestra en la Figura 1.

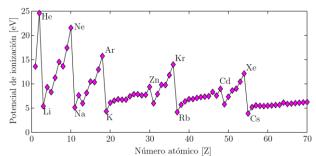


FIGURA 1: Energía de ionización de los elementos en función del número atómico.



FIGURA 2: Ejemplo de cañón de electrones.

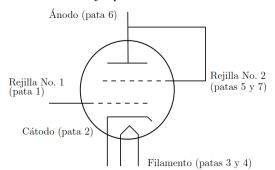


FIGURA 3: Diagrama del bulbo utilizado en el experimento.

Para la determinación del potencial de ionización en los átomos se pueden utilizar fotones o electrones acelerados a una energía conocida que expulsaron a los electrones atómicos menos ligados; en el caso de electrones acelerados se utiliza un cañón de electrones.

Mediante el empleo de electrones de alta energía provenientes de un cañón de electrones situado en un tubo al vacío, ver Figura 2, se lleva a cabo la ionización de átomos. La energía del haz de electrones se regula mediante tensiones de aceleración. Cuando la energía de estos electrones alcanza un umbral específico, se desencadena la liberación repentina de iones y electrones a lo largo del tubo, coincidiendo con la energía necesaria para ionizar los átomos.

En este trabajo se utilizó un tubo que contiene un gas a baja presión y se dirigen electrones de energía cinética conocida hacia este gas. Si los electrones tienen energías bajas, chocan elásticamente con los átomos del gas. Sin embargo, aquellos electrones cuya energía supera el umbral de ionización chocan inelásticamente, lo que provoca la expulsión de otro electrón del átomo, generando su ionización. El diagrama del aparato se muestra en la Figura 4.

Cuando el filamento calienta al cátodo, éste emite electrones térmicos. Estos electrones pueden ser acelerados al aplicar una diferencia de potencial entre el cátodo y una de las rejillas. La otra rejilla se utiliza para controlar la cantidad de



FIGURA 4 : Bulbo utilizado en el experimento (izquierda) y arreglo experimental (derecha)

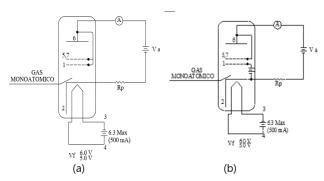


FIGURA 5: Configuraciones del circuito utilizado.

electrones que llegan al ánodo. En el ánodo, se recogen estos electrones, lo que se puede detectar como una corriente eléctrica.

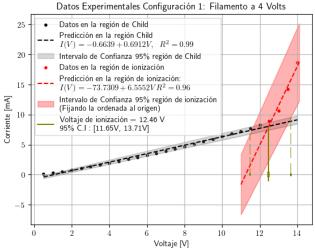
La idea detrás del experimento de este trabajo es ajustar la diferencia de potencial entre el ánodo y el cátodo hasta que el gas se ionice. Cuando esto sucede, la corriente registrada por el ánodo aumenta repentinamente y, al mismo tiempo, el voltaje disminuye. La explicación radica en que la corriente que fluye depende del voltaje según la ecuación de Langmuir-Child:

$$I = kV^{3/2} \tag{4}$$

Sin embargo, el aumento de la corriente con el voltaje sigue esta ley solo hasta que se alcanza el potencial de ionización de los átomos del gas. En este punto, la corriente aumenta abruptamente debido a la aparición de más cargas libres como resultado de la ionización. Esto provoca un cambio en la pendiente en la curva corriente vs voltaje. Es este comportamiento el que nos permite determinar el primer potencial de ionización.

3. Montaje experimental.

Se utilizó un bulbo electrónico (Thyratron, 2D21), para el cual se alimentó al filamento a 4 Volts y a 6 Volts con una fuente de corriente contina (GW, GPR-3020) dejando estos siempre constantes a lo largo del experimento, utilizando para cada caso 2 configuraciones distintas de circuito (ver Figura 6) cuyo voltaje se midió con un multímetro digital de mano (Escort, 97) y se usó una resistencia de 100 Ohms. Una vez realizado esto se varió el voltaje del circuito experimental restante, con otra fuente midiendo el voltaje



FI GURA 6: Método gráfico Configuración 1, filamento a 4V.

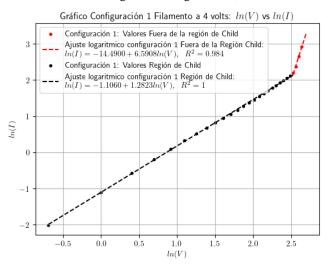


FIGURA 7: Gráfico para la obtención de la ecuación Langmuir-Child Configuración 1, filamento a 4 V.

y corriente correspondiente, ver Figura 5) con un par de multímetros digitales (Agilent, 34405A). Se realizaron un total de 35 mediciones con voltajes de entre 0.5 Volts hasta 14 Volts. Tras graficar y analizar los resultados se obtuvo de manera gráfica el potencial de ionización (ver próxima sección).

También se analizó estadísticamente los resultados, para esto muy lentamente y con extremo cuidado se fue aumentando el voltaje donde, al ver un cambio abrupto en la corriente se anotaba dicho valor. Luego se regresaba a un voltaje nulo y se repitió el proceso. De esta forma se obtuvieron un total de 12 mediciones para cada configuración del circuito y para cada voltaje de alimentación del filamento, cómo en el método gráfico.

4. Resultados experimentales

Los resultados experimentales, así como código relacionado a su análisis estadístico se anexan en [5].

Filamento a 4 V

El resultado que se obtiene al dividir el conjunto de datos para la región de Child y la de ionización, motivados con el comportamiento observado en la Figura 7 y Figura 9, en 12V

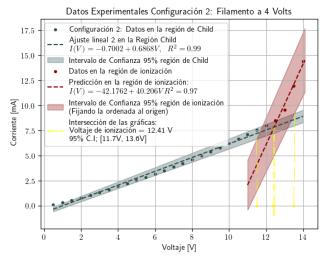


FIGURA 8: Método gráfico Configuración 2, filamento a 4V.

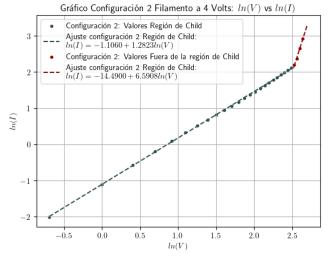


FIGURA 9: Gráfico para la obtención de la ecuación Langmuir-Child Configuración 2, filamento a 4 V.

permitió realizar un par de ajustes lineales donde se graficó la predicción del ajuste, así como los intervalos de confianza del 95% para cada región en cada configuración. Una vez realizado esto se interceptó los ajustes predichos para cada región, obteniendo así los valores esperados, predicciones, del voltaje de ionización y por ende la energía de ionización. Para el calculo de las incertidumbres se hizo un tratamiento estadístico basado en intervalos de confianza: se interceptaron las regiones correspondientes donde existía un 95% de probabilidad de que se interceptaran los resultados de la regresión lineal; obteniendo para la configuración 1:

$$E_i(conf_1, fil_{4V}) = 12.46eV$$
 (5.1)

Con un intervalo de confianza de:

C.
$$I\{E_i(conf_1, fil_{4V})\} = [11.65eV, 13.71eV]$$
 (5.2)

Y en la segunda configuración del circuito:

$$E_i(conf_2, fil_{4V}) = 12.41eV$$
 (6.1)

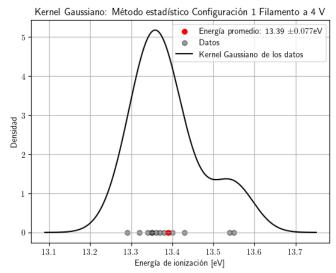


FIGURA 10: Kernel Gaussiano, datos método estadístico Configuración 1 filamento a 4 V.

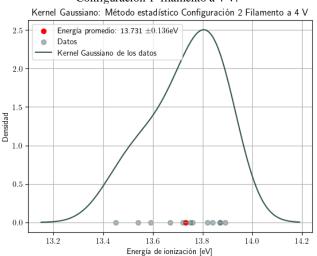


FIGURA 11: Kernel Gaussiano, datos método estadístico Configuración 2 filamento a 4 V.

Con un intervalo de confianza del 95% de:

$$C.I\{E_i(conf_2, fil_{4V})\} = [11.6eV, 13.7eV]$$
 (6.2)

Una vez realizada la partición de regiones (Child-Ionización), al graficar en escala logarítmica los resultados se obtuvieron los ajustes mostrados en las Figura 7 y la Figura 9, estadísticas aún más detalladas en [5], se obtiene lo siguiente en la región de Child para la ecuación (4):

$$I = kV^{3/2} \tag{4}$$

Obtenemos en la primera configuración:

$$I_{LC(conf_1,fil_{4V})}(V) = 0.331e^{1.282 V}$$
 (7.1)

Con intervalos de confianza para la constate multiplicativa:

$$C.I_{LC(conf_1,fil_{AV})}(K) = [0.326, , 0.336] \text{mA}$$
 (7.2)

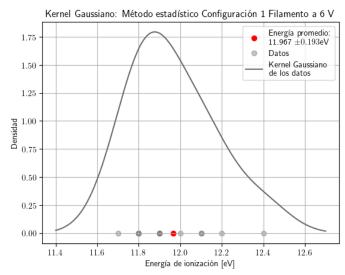


FIGURA 12: Kernel Gaussiano, datos método estadístico Configuración 1 filamento a 6 V.

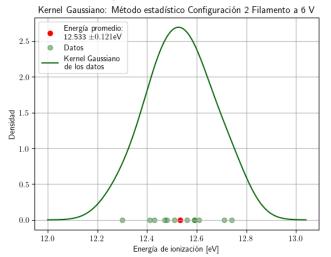


FIGURA 13: Kernel Gaussiano, datos método estadístico Configuración 2 filamento a 6 V.

Y para el exponente:

$$C.I_{LC(conf_1,fil_{4V})}(\exp) = [1.273, 1.291]$$
 (7.3)

Para la segunda configuración obtenemos:

$$I_{LC(conf_2,filay)}(V) = 0.330e^{1.282 V}$$
 (8.1)

Con intervalos de confianza para la constate multiplicativa:

$$C.I_{LC(conf_2,fil_{AV})}(K) = [0.327,0.331] \text{mA}$$
 (8.2)

Y para el exponente:

$$C.I_{LC(conf_2,fil_4V)}(\exp) = [1.273, 1.291]$$
 (8.3)

Para el método estadístico (ver Figura 10 y 11), se obtuvo:

$$E_i(conf_1, 4_V) = 13.39 \pm 0.08eV$$
 (9)

$$E_i(conf_2, 4_V) = 13.73 \pm 0.14eV$$
 (10)

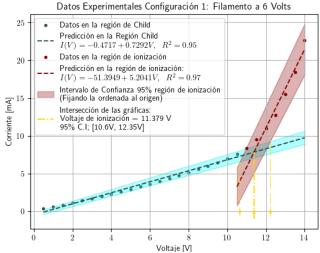


FIGURA 14: Método gráfico Configuración 1, filamento a 6V.

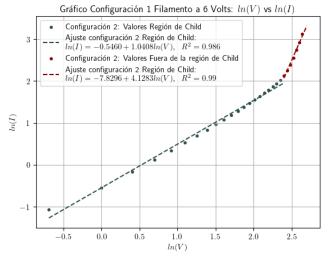


FIGURA 15: Gráfico para la obtención de la ecuación Langmuir-Child Configuración 1, filamento a 6 V.

Al comparar con los valores provistos en la tabla periódica de los elementos químicos (ver Apéndice), al promediar, concluimos que, para el método gráfico con filamento alimentado a 4 V:

$$\overline{E}_i = 12.43eV \tag{11.1}$$

Con un intervalo de confianza del 95%, en promedio, de:

$$C.I(\overline{E}_i) = [11.625eV, 13.705eV]$$
 (11.2)

Concluyendo que se trata de gas Xenón, con un error porcentual del:

$$e\% = 2.47\% \tag{11.3}$$

Mientras que para el <u>método estadístico con filamento</u> <u>alimentado a 4 V:</u>

$$\overline{E}_i = 13.56 \pm 0.11 \, eV$$
 (12.1)

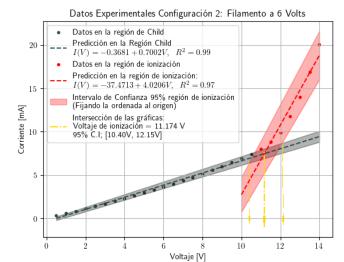


FIGURA 16: Método gráfico Configuración 2, filamento a 6V.

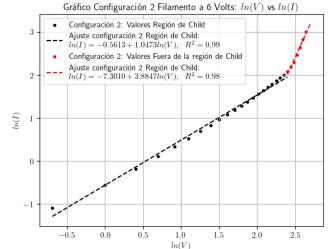


FIGURA 17: Gráfico para la obtención de la ecuación Langmuir-Child Configuración 1, filamento a 6 V.

Con un error porcentual de:

$$e\% = 11.79\% \tag{11.3}$$

Filamento a 6 V

De manera análoga se obtiene en la configuración 1:

$$E_i(conf_1, fil_{6V}) = 11.38eV$$
 (13.1)

Con un intervalo de confianza de:

$$C.I\{E_i(conf_1, fil_{6V})\} = [10.60eV, 12.35eV]$$
 (13.2)

Y en la configuración 2 del circuito:

$$E_i(conf_2, fil_{6V}) = 12.41eV$$
 (14.1)

Con un intervalo de confianza de:

$$C.I\{E_i(conf_2, fil_{6V})\} = [11.65eV, 13.71eV]$$
 (14.2)

Para la ecuación de Child, obtenemos en la <u>primera</u> <u>configuración</u>:

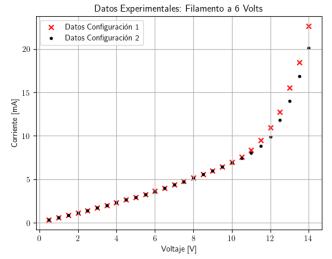


FIGURA 18: Datos experimentales: Filamento alimentado a 6V.

$$I_{LC(conf_1,fil_{eV})}(V) = 0.579e^{1.041 V}$$
 (15.1)

Con intervalos de confianza para la constate multiplicativa:

$$C.I_{LC(conf_1,filey)}(K) = [0.474, -0.618] \text{ mA}$$
 (15.2)

Y para el exponente:

$$C.I_{LC(conf_2,fil_V)}(exp) = [0.998,1.084.291]$$
 (15.3)

Y para la configuración 2:

$$I_{LC(conf_2,fil_{6V})}(V) = 0.579e^{1.041 V}$$
 (16.1)

Con intervalos de confianza para la constate multiplicativa:

$$C.I_{LC(conf_2,fil_6V)}(K) = [0.533, 0.609] \text{ mA}$$
 (16.2)

Y para el exponente:

$$C.I_{LC(conf_2,fil_6V)}(\exp) = [1.007,1.087]$$
 (16.3)

Para el método estadístico (ver Figura 12 y 13), se obtuvo:

$$E_i(conf_1, 4_V) = 13.39 \pm 0.08eV$$
 (17)

$$E_i(conf_2, 4_V) = 13.73 \pm 0.14eV$$
 (18)

Concluyendo que <u>al alimentar el filamento a 6V</u>, se obtiene Del <u>método gráfico:</u>

$$\overline{E}_i = 11.895eV \tag{19.1}$$

Con un intervalo de confianza del 95%, en promedio, de:

$$C.I(\overline{E}_i) = [11.125 \text{eV}, 13.035 \text{eV}]$$
 (19.2)

Concluyendo que se trata de gas Xenón, con un error porcentual del:

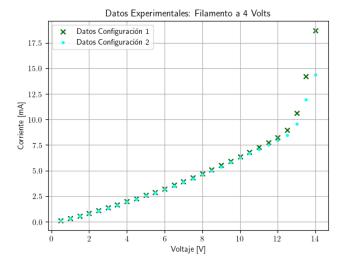


FIGURA 19: Datos experimentales: Filamento alimentado a V.

$$e\% = 1.937\% \tag{19.3}$$

Mientras que para el <u>método estadístico con filamento</u> <u>alimentado a 4 V:</u>

$$\overline{E}_i = 12.25 \pm 0.157 \, eV$$
 (20.1)

Con un error porcentual de:

$$e\% = 0.989\% \tag{20.2}$$

Así, para ambos métodos concluimos lo siguiente:

Para el método gráfico:

La energía de ionización es

$$\overline{E}_i = 12.162 \text{eV} \tag{21.1}$$

• El error porcentual para Xenón es:

$$e\% = 0.27\% \tag{21.2}$$

• El correspondiente intervalo de confianza es:

$$C.I = [11.375 \text{eV}, 13.37 \text{eV}]$$
 (21.3)

Para el método estadístico:

La energía de ionización es

$$\overline{E}_i = 12.905 \pm 0.133 \text{ eV}$$
 (22.1)

• El error porcentual para Xenón es:

$$e\% = 6.389\%$$
 (22.2)

4. Conclusiones

Se logró deducir que el gas de estudio era Xenón, obteniendo un error muy bajo el cual se cree es consecuencia de la gran cantidad de mediciones realizadas; por otra parte en todos los casos (método gráfico) cabe resaltar que se tienen muy pocas mediciones en la llamada "región de ionización", lo que provoca una muy grande incertidumbre en las predicciones en dicha región y por consecuencia en la obtención de la primera energía de ionización; se esperaría que realizando una mayor cantidad de

mediciones en dicha región se mejore drásticamente los resultaos

Por otra parte en la región de Langmuir-Child (Child) nunca se logró obtener un valor en la exponencial de 3/2, lo cual era de esperarse puesto que dentro del tubo utilizado nunca se estuvo en el vació; aún así el valor en ambas configuraciones fue relativamente cerca a él indicándonos una no muy gran cantidad de Xenón en éste.

Bibliografía

- 1. P. Atkins & R. Friedman (2005), "*Molecular Quantum Mechanics*", Editorial Oxford University Press 4ta ed.
- 2. S. Ling, J. Sanny & W. Moebs (2021), "Física Universitatia Volumen 3", Editorial OpenStax 1era edición, p. 349-355.
- 3. C.A. Vargas, "Potencial de ionización".
- Wikipedia, "Energía de ionización", https://es.wikipedia.org/wiki/Energ%C3%ADa_de_ion izaci%C3%B3n#:~:text=El%20potencial%20de%20io nizaci%C3%B3n%20(P,el%20ion%20y%20el%20elec tr%C3%B3n.
- Datos experimentales y análisis estadísticos de los mismos en : https://github.com/AzpMon/Laboratorio-Avanzado-II

Apéndice 1: Preguntas

- ¿Cuál es el gas encerrado en el tubo? Xenón.
- 2. ¿Con este método simple se podría determinar el segundo potencial de ionización? ¿Por qué? Si logramos continuar aumentando el voltaje de alimentación, podríamos analizar cambios abruptos en la corriente que corresponda a subsecuentes energías de ionización; pero el tubo utilizado tiene un régimen de voltaje de funcionamiento (caso contrario se dañará)
- 3. Discuta brevemente al menos otro método para determinar el potencial de ionización.
 - También se podría analizar la energía cinética de los electrones (corriente) emitidos cuando un fotón incide sobre el gas, según lo expuesto en la teoría se liberarán electrones y de forma análoga se podría obtener el primer potencial de ionización..
- 4. ¿Cómo se podría emplear este tubo para determinar energías de excitación de los átomos del gas (experimento de Franz-Hertz)? ¿Se aprecia esto en sus datos?
 - Analizando a detalle la configuración de conexiones del bulbo y re-plantear el circuito para medir corriente de placa en función de Voltaje. Para apreciar a detalle el fenómeno sería necesario hacer lo antes mencionado.
- 5. ¿Cómo explica usted que mientras los potenciales de ionización son máximos para los gases nobles, estos resulten mínimos para los alcalinos?

 Los gases nobles son químicamente estables pues todos sus orbitales están completos por lo que es difícil eliminar electrones adicionales. Las sustancias alcalinas no tienen sus orbitales completos por lo que se les es más fácil "ceder" un electrón de valencia, teniendo así potenciales de ionización más bajos.

Apéndice 2: Tabla Periódica

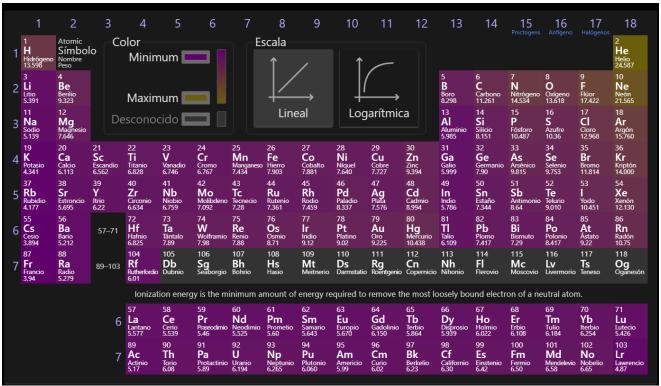


Tabla I: Tabla Periódica de los elementos Químicos. Tabla tomada de la web.