



# Espectrometría de masas a bajas energías

Alonso Torres Edgar Giovanni

Profesor, Dr. Juan López Patiño

Taller de colisiones, Edificio Tlahuizcalpan - Facultad de Ciencias, 2018-2  
Universidad Nacional Autónoma de México



(Fecha de entrega 04/06/18)

El experimento realizado que se reporta en la presente consiste en el uso de un acelerador para obtener un haz de protones que pueda ser utilizado para la colisión de éstos con una sustancia en la cámara de reacción del acelerador. Para comprobar que se tiene un haz de protones se reportan tres gráficas que muestran los espectros de masa de los iones producidos en el acelerador al introducir gas de  $H_2$  y gas de Ar. La generación de los iones se da por descarga al producir termoelectrones calentando un filamento con 12 V a 15 A y acelerándolos con un ánodo con 90 V. La selección de los iones positivos se hizo, primero, reduciendo la dispersión de los iones, debido a la descarga, empleando lentes electrostáticas (voltaje de enfoque  $V_e = 3.887 \text{ kV}$ ), después la selección de iones con una velocidad particular gracias un filtro de velocidad que crea un campo eléctrico (voltaje de deflexión) y un campo magnético, y finalmente para evitar los fotones generados se desvían las partículas  $10^\circ$  ( $V_{10^\circ} = 1 \text{ kV}$ ). Los espectros se consiguen variando la corriente del electroimán que posee el filtro de velocidades manteniendo un voltaje de aceleración de  $V_a = 5 \text{ kV}$  y para los voltajes de deflexión  $V_f = 150 \text{ V}$ ,  $200 \text{ V}$  y  $290 \text{ V}$ .

## 1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad los aceleradores son ocupados de manera muy amplia con finalidades distintas, tanto para estudiar sistemas físicos y/o químicos como sus aplicaciones en la medicina. Son utilizados para descomponer sustancias en los elementos que las constituyen al bombardear ésta con haces de partículas aceleradas y conocer dichos componentes mediante diversos métodos y técnicas (espectrometría), además que en la colisión se puede obtener información del tipo de interacción, como la sección transversal que involucra grandes cantidades teóricas con resultados experimentales [1]. También son utilizados para crear haces que atacan tumores y combatir cánceres, aniquilación de bacterias para prevenir enfermedades que se transmiten mediante los alimentos, mejorar la inyección de combustible para fabricar automóviles más eficientes [2]. Estudiar como son las interacciones ha ayudado para comprender los procesos que se llevan a cabo en las atmósferas, no sólo en la Tierra sino en otros astros en los que, por ejemplo, en ausencia de capas protectoras las partículas como protones que son lanzados desde Sol chocan en la superficie liberando material que se mantiene formando una cola debido al campo gravitacional.

Y en biología no se queda atrás, a finales del siglo pasado aproximadamente la mitad de alrededor de los 10,000 aceleradores en el mundo se utilizaban en aplicaciones médicas y 80 % se dedicaban a radioterapia con rayos X o haces de hadrones [3]. Por lo que en muchos de los estudios médicos que se llevan a cabo con aceleradores son de altas energías, con partículas ionizantes que no solamente atacan el problema, pero también parte de los pacientes razón por la cual la mayoría de estos estudios dejan lapsos de tiempo prolongados para volverse a realizar. El experimento que se reporte es sobre la espectrometría de masas a *bajas* energías, y aunque no

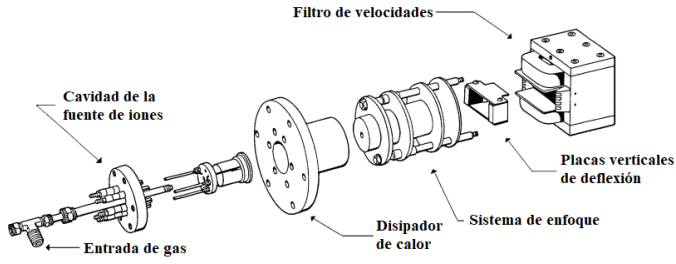
se aborda el tema sobre como hoy día se estudia la forma de implementar este tipo de aceleradores en la medicina, su importancia merece destacarse ya que no sólo sería mejor para los pacientes sino que estos aceleradores son más baratos que los de altas energías.

El experimento se basa en la espectrometría de masas, y consiste en obtener información de una sustancia (o moléculas) a través de su relación *masa-carga* al someterse a campos electromagnéticos cuando es disociada por colisiones con haces de partículas aceleradas. El objetivo es obtener un haz de protones y conocer las especies de iones que se forman al introducir en el acelerador gas de  $H_2$  y de Ar.

El resto del reporte se organiza como sigue. En la sección 2 se detalla el funcionamiento del dispositivo experimental que se utiliza y los datos de interés para conocer las especies de iones dentro del acelerador. La sección 3 contiene el procedimiento experimental para la obtención de dichos datos y observaciones que se realizan para conseguir datos con los parámetros que se establecen, éstos se reportan en la sección 4 mediante gráficas. Finalmente en la sección 5 se analizan los resultados y se da interpretación a los mismo. El reporte se concluye en la sección 6.

## 2. EL ACELERADOR

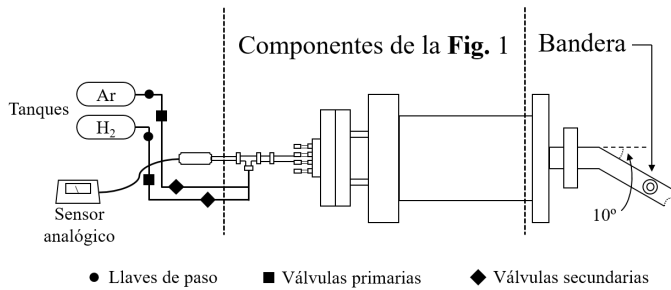
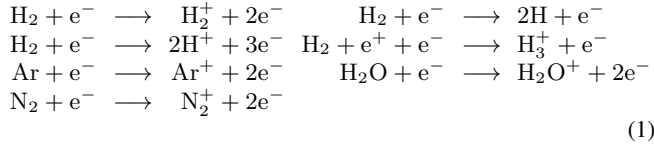
El acelerador se conforma de un cañón de iones Colutron modelo G-1 que contiene componentes para la creación del haz de iones (figura 1), una cámara de reacción donde se depositan blancos (sólidos o gaseosos) y se producen colisiones. El presente reporte se realiza hasta antes de esta cámara de reacción.



**Fig. 1.** Componentes para la generación del haz de iones dentro del cañón Colutron modelo G-1.

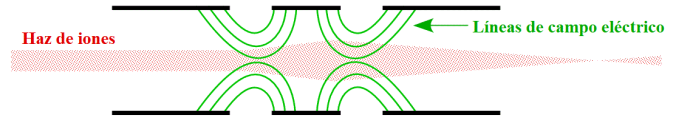
## Generación de iones

Se tienen dos tanques de gas, uno con Argón y otro con Hidrógeno molecular (figura 2). Las distintas especies de iones que se generan dentro del cañón se obtienen a partir de la mezcla de estos gases que se introducen por el tubo de entrada de gas (figura 1). La ionización se consigue a partir de una descarga de arco la cual se inicia al aplicar corriente continua a un filamento dentro del aislante térmico, produciendo así termoelectrones que son acelerados a un ánodo (con alrededor de 90 V) localizado frente al filamento. Debido a esto se llevan a cabo los siguientes procesos:



**Fig. 2.** Esquema del acelerador (no a escala). La espectrometría de masas se lleva a cabo al medir la corriente en la bandera.

Además de los anteriores productos se produce luz debido a todas las interacciones, transiciones y recombinaciones. Las partículas cargadas son aceleradas por el voltaje de aceleración  $V_a$  y pasan por las lentes electrostáticas (figura 3) para disminuir la dispersión de las partículas debido al proceso de ionización con un voltaje de enfoque  $V_e$ .



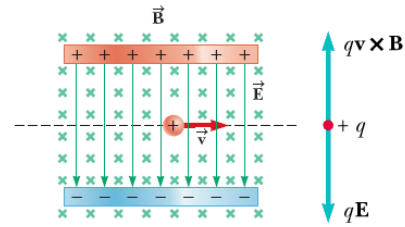
**Fig. 3.** Dibujo de lentes de electrostáticas. El haz de iones se enfoca debido al campo eléctrico producido por los voltajes en los cilindros.

Posteriormente se realiza el proceso de selección: las partículas pasan por el filtro de velocidades (ver figura 4) que consta de dos placas electrostáticas verticales las cuales crean un campo eléctrico  $\vec{E}$  transversal (voltaje de deflexión  $V_f$ ) y un electroimán que genera un campo magnético  $\vec{B}$ , ambos campos son ortogonales a la dirección de incidencia del haz. La dinámica de las partículas dentro del filtro de velocidades está gobernada por el campo electromagnético a través de la fuerza de Lorentz

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (2)$$

El criterio de selección de partículas es de aquellas cuya velocidad es tal que la fuerza neta ejercida sobre ellas debido al campo electromagnético es cero, es decir, que no son desviadas debido a la interacción con el campo. Al observar el diagrama de la figura 4 se concluye que  $-\vec{E} + v\vec{B} = 0$ , ergo

$$v = \frac{E}{B} \quad (3)$$



**Fig. 4.** Representación esquemática del filtro de velocidades visto desde la parte superior. Las partículas que logran pasar son aquellas para las que la aceleración debida al campo eléctrico y la desviación que causa el campo magnético son iguales pero en sentido opuesto.

La ecuación 3 indica la velocidad de las partículas que pasarán por el filtro sin ser desviadas y por conservación se tiene que la energía cinética de las partículas es igual a la energía suministrada por el voltaje de aceleración

$$\frac{1}{2}mv^2 = qV_a \quad (4)$$

Y por tanto

$$m = \frac{2qV_a B^2}{E^2} \quad (5)$$

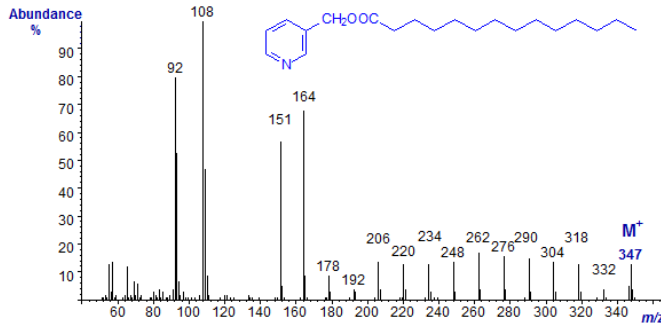
El módulo del campo eléctrico es proporcional al voltaje de deflexión  $E \propto V_f$ , y se supone que el experimento se lleva a cabo dentro de la zona lineal del electromagneto, por lo que  $B \propto I_m$ . De esta manera

$$m = 2qV_a k \left( \frac{I_m}{V_f} \right)^2 \quad (6)$$

donde  $k$  es la constante de proporcionalidad. Así la masa de las partículas que atraviesan el filtro de velocidades es proporcional al voltaje de aceleración, a su carga, al cuadrado de la corriente que genera el campo magnético e inversamente proporcional al cuadrado del voltaje de deflexión en el filtro. Después las partículas entran al tubo que conecta el cañón con la cámara de reacción, el inicio de dicho tubo es un codo que se encuentra a  $10^\circ$  (figura 2) para desviar los protones en esa dirección evitando que los fotones continúen e interactúen con el detector (la bandera).

Posterior al codo del tubo, el acelerador dispone de una bandera conectada a un electrómetro. Para corroborar que se tiene un haz de protones se usa la bandera para que los iones cargados impacten en ella y se produzca una corriente. Para la espectrometría se fija el voltaje de aceleración  $V_a$  y el de deflexión del filtro  $V_f$  para graficar el comportamiento de la corriente en la bandera  $I$  en función de la corriente del electroimán  $I_m$ .

Las gráficas que se obtiene mediante la espectrometría de masas son como la de la figura 5, en donde la altura de los picos se relaciona con la abundancia relativa de las partículas.



**Fig. 5.** Ejemplo de espectro de masas [4] de Palmitato de 3-Piridilcarbinilo (hexadecanoato o 16:0) (relacionado con los resultados de Harvey en 1982).

### 3. DESARROLLO EXPERIMENTAL

Para llevar a cabo el experimento se realiza en primer lugar el vacío dentro del acelerador utilizando dos bombas mecánicas y dos bombas turbomoleculares. El objetivo del vacío es para que el camino libre medio sea muy grande comparado con el tamaño del acelerador y de ese modo tener certeza de que las colisiones se efectúen en hasta la cámara de reacción (o hasta la bandera como es el caso de este experimento).

Después se enciende la fuente del filamento que lleva a cabo la descarga de arco.

Se procede a introducir los gases de  $H_2$  y Ar al cañón, se abren las llaves de paso (figura 2) de los tanques que contienen los gases, esto llena los tubos que al final conectan con la cavidad interna del cañón, las válvulas primarias impiden el paso de los gases al acelerador: se cierran las llaves de paso, luego entonces se abren las válvulas primarias.

Pasando las válvulas primarias se tienen las secundarias que sirven de protección para la fuente al interior del cañón pues la presión liberada directamente de los tanques es alta y puede dañar dicha fuente. Se cierran las válvulas primarias y se abren las secundarias para introducir los gases al cañón con una proporción aproximada de 2:1 del Ar.

Se procede con el sistema de aceleración colocando el voltaje de aceleración a  $V_a = 5000$  V el cual permanece fijo durante el experimento. El voltaje  $V_{10^\circ}$  de la fuente del codo a  $10^\circ$  se aumenta hasta que en el electrómetro se encuentre un máximo en la corriente de manera estimada. Luego se enciende la fuente de las lentes electrostáticas para tener un voltaje de enfoque  $V_e$  que vuelva a maximizar la corriente en la bandera.

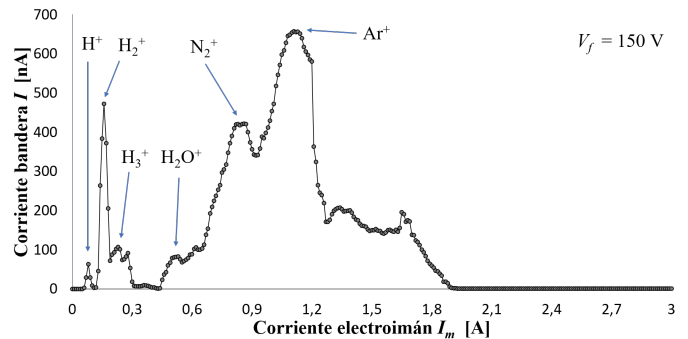
Posteriormente se enciende la fuente del voltaje de deflexión  $V_f$  del filtro de velocidades que también de deja fijo durante el experimento, y se realiza para  $V_f = 150$  V, 200 V y 290 V. Se prende la fuente del electroimán que será el parámetro (corriente del electroimán  $I_m$ ) que se varía durante el experimento. Se toman los datos de la corriente del electrómetro en función de la corriente del electroimán.

### 4. RESULTADOS

Los datos se realizaron bajo los siguientes parámetros:

La fuente del filamento de tungsteno se colocó en 12 V a 15 A, la fuente del ánodo (para la descarga) se configuró en 90 V a 0.3 A, la temperatura del aislante térmico se encontró en  $15^\circ\text{C}$ , la presión dentro del cañón fue  $1.0 \times 10^{-5}$  Torr. Además

$$V_a = 5 \text{ kV} \quad | \quad V_e = 3.887 \text{ kV} \quad | \quad V_{10^\circ} = 1000 \text{ V}$$



**Fig. 6.** Espectro de masas con  $V_f = 150$  V

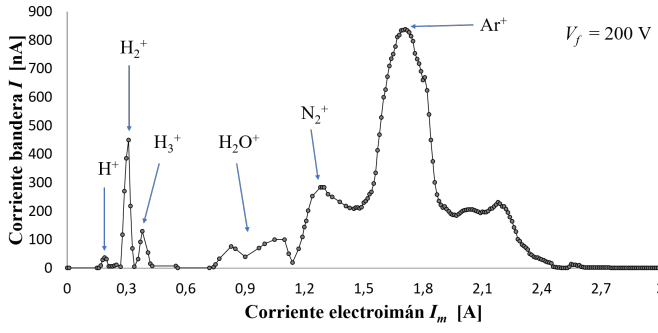


Fig. 7. Espectro de masas con  $V_f = 200$  V

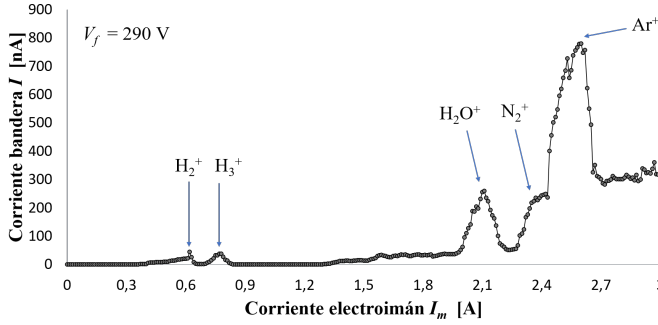


Fig. 8. Espectro de masas con  $V_f = 290$  V

## 5. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Dado que las masas son discretas y se tienen puros iones positivos, entonces cuando  $I_m$  sea tal que se satisfaga la ecuación 6 para una especie de ion en el acelerador, entonces la corriente en la bandera  $I$  aumentará. Mientras que si no se cumple la ecuación 6 indicará que a esa determinada corriente  $I_m$  no existe ninguna especie dentro del acelerador con esa masa, haciendo que la corriente  $I$  se vaya a prácticamente a cero. Este comportamiento es el que se ve en las gráficas.

Las gráficas en las figuras 6, 7 y 8 muestran el espectros de masas obtenidos, éstas tienen ciertas características:

1. A mayor voltaje de deflexión  $V_f$  los picos en las gráficas se separan más y se recorren a mayores corrientes del electroimán  $I_m$ .
2. A mayor voltaje de deflexión  $V_f$  la abundancia de los elementos responsables de los picos disminuye, con excepción del elemento responsable del pico más alto, que se mantiene prácticamente a la misma altura y anchura.

Lo primero se puede explicar gracias a la ecuación 6, si el voltaje de deflexión  $V_f$  aumenta, entonces para un ion particular tiene que aumentar la corriente en el electroimán para que el cociente sea tal que el mismo ion pase por el filtro y aporte corriente en la bandera. Por otro lado, supongamos dos voltajes de deflexión  $V_f < V'_f$ , entonces por 6 se tiene que para dos masas  $m_1 < m_2$

$$m_1 = 2qV_a k \left( \frac{I_{m,1}}{V_f} \right)^2 = 2qV_a k \left( \frac{I'_{m,1}}{V'_f} \right)^2 \quad (7)$$

$$m_2 = 2qV_a k \left( \frac{I_{m,2}}{V_f} \right)^2 = 2qV_a k \left( \frac{I'_{m,2}}{V'_f} \right)^2$$

Sacando la raíz cuadrada a ambas expresiones de 7 y tomando la diferencia se tiene que

$$\sqrt{2qV_a k} \frac{I_{m,2} - I_{m,1}}{V_f} = \sqrt{2qV_a k} \frac{I'_{m,2} - I'_{m,1}}{V'_f} \quad (8)$$

entonces

$$\frac{I_{m,2} - I_{m,1}}{I'_{m,2} - I'_{m,1}} = \frac{V_f}{V'_f} \quad (9)$$

y dado que  $V_f/V'_f < 1$  se sigue que

$$I_{m,2} - I_{m,1} < I'_{m,2} - I'_{m,1} \quad (10)$$

Llegando a la observación hecha de las gráficas, a mayor voltaje de deflexión  $V_f$  los picos se separan más entre ellos, es decir, se aumenta la resolución de los espectros. La ecuación 6 también nos dice que para un mismo voltaje de deflexión los iones con menor masa son los primeros en llegar a la bandera, es decir, no los primeros en cuestión de tiempo, sino que a menor corriente del electroimán éstos llegarán a la bandera, pues los iones más pesados necesitan mayor corriente  $I_m$ . Con esto se justifica la asignación de los iones a los picos en las gráficas.

Las gráficas muestran en primer lugar los iones generados por el hidrógeno  $H_2$ , y entre estos el más abundante es  $H_2^+$  lo que muestra que de todas las interacciones y procesos en la descarga, aquellos que generan  $H_2^+$  ocurren con mayor frecuencia. Continuando se tienen los iones que se crean del ambiente interno del cañón,  $H_2O^+$  y  $N_2^+$  pues como ya se menciono, resulta complicado deshacerse del agua en el ambiente a pesar del vacío que se lleve a cabo. Para terminar el ion de Ar, que es el más pesado y se observa que el más abundante, razón por la cual el experimento se realiza con este gas y no sólo con hidrógeno. La abundancia relativa de los iones respecto al  $Ar^+$  se muestra en la tabla I.

$V_f$	$H^+$	$H_2^+$	$H_3^+$	$H_2O^+$	$N_2^+$	$Ar^+$
150 V	10 %	72 %	17 %	12 %	65 %	100 %
200 V	4 %	54 %	16 %	13 %	34 %	100 %
290 V	—	6 %	5 %	33 %	31 %	100 %

**Tabla I.** Abundancia relativa de los iones respecto al ion de Argón. Los porcentajes de la tabla indican la cantidad de iones de Argón que hay respecto a los demás. Por ejemplo, para  $V_f = 200$  V nos indica que en promedio por cada  $H^+$  que se detecta hay 25 de  $Ar^+$ .

Luego, debido a la segunda característica de las gráficas, se concluye que cuando el voltaje de deflexión aumenta aunque se tenga una selección de velocidades, la desviación de las partículas se ejerza con mayor fuerza, haciendo el conjunto de velocidades menos homogéneo, provocando que la abundancia de las partículas que llegan a la bandera, en general, decrezca.

Finalmente, se piensa que dentro del acelerador existen impurezas, es decir, iones de mayor peso que  $\text{Ar}^+$  pues en todas las gráficas después del pico correspondiente al ion de Argón hay una meseta que indica que hay partículas más masivas llegando a la bandera.

## 6. CONCLUSIONES

El experimento se llevo a cabo con éxito, pues se consigue un haz de protones, lo cual se verifica con las gráficas en las figuras 6, 7 y 8 donde se observa el comportamiento espectral debido al carácter discreto de las masas, éstas se obtienen al considerar un voltaje de aceleración  $V_a = 5 \text{ kV}$ , voltaje de enfoque  $V_e = 3.887 \text{ kV}$ , voltaje de los  $10^\circ$  de  $V_{10^\circ} = 1 \text{ kV}$  y los voltajes de deflexión  $V_f = 150 \text{ V}$ ,  $200 \text{ V}$  y  $290 \text{ V}$ . Los resultados muestran que la ecuación 6 modela correctamente la dinámica de las partículas dentro del cañón, pues además explica las características de las gráficas, como la resolución

de los espectros y el corrimiento de éstos al modificar el voltaje de deflexión. Se concluye que el Argón es necesario para el experimento pues al ser el más abundante es esencial en la descarga que ocurre al inicio del proceso; también sobre la posibilidad de que dentro del acelerador haya impurezas las cuales se ven reflejadas en todas las gráficas como un meseta después del pico del ion de Argón. Para conocer a mayor detalle la caracterización del acelerador para tener mayor corriente en la bandera y estabilidad, así como los resultados de variar otros parámetros (como el voltaje de aceleración) y resultados de experimentos realizados en la cámara de reacción se recomienda consultar [1].

## 7. REFERENCIAS

- [1] López, P.J. (2016). *Procesos disociativos en colisiones de protones a bajas energías en gases atmosféricos* (Tesis doctoral). Recuperado de TESIUNAM. (Número de acceso: tes.TES01000746486)
- [2] Witman, S. (2014, Abril 15). *Ten things you might not know about particle accelerators*. Recuperado de <https://www.symmetrymagazine.org/article/april-2014/ten-things-you-might-not-know-about-particle-accelerators>
- [3] Amaldi, U. *Accelerators for Medical Applications*. Recuperado de <http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/e96/PAPERS/orals/fry01a.pdf>
- [4] William W.C. (2013). *Mass Spectrometry of 3-Pyridylcarbinol Esters*. Recuperado de <http://lipidlibrary.aocs.org/Analysis/content.cfm?ItemNumber=39492>