



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**GUÍA DE ONDAS ÓPTICAS EN RUTILO POR
IMPLANTACIÓN DE IONES DE CARBONO**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A:

EDGAR CALVA CORAZA



**DIRECTOR DE TESIS:
Dr. JORGE EDUARDO RICKARDS CAMPBELL
2015**

Ciudad Universitaria, D. F.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos del alumno
Calva
Coraza
Edgar
59 35 34 08
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
308017328
2. Datos del tutor
Dr
Rickards
Campbell
Jorge Eduardo
3. Datos del sinodal 1
Dra
Castañeda
Guzmán
Rosalba
4. Datos del sinodal 2
Dra
Beltrán
Sánchez
Marcela Regina
5. Datos del sinodal 3
Dr
Flores
Romero
Erick
6. Datos del sinodal 4
Dra
Sánchez
Aké
Citlali
7. Datos del trabajo escrito
Guía de ondas ópticas en rutilo por
implantación de iones de carbono
76 p
2015

*A mis padres Jesús y Teresa por su confianza y apoyo incondicional
Mi hermana Nayeli por su ayuda y compañía en tantas noches infinitas*

Reconocimientos

También quisiera reconocer al Ing. Francisco Javier Jaimes y al Sr. Karim López por el manejo del Acelerador Pelletron del Instituto de Física-UNAM en la realización de los experimentos en los que se basa esta tesis; a la M. en C. Rebeca Trejo Luna, al M. en C. Miguel Ángel García Cruz y al Físico Julián Mejía Morales compañeros del equipo de trabajo del Dr. Rickards cuyas ideas e investigaciones fueron fundamentales para el análisis de datos y presentación de resultados. Gracias al Dr. Erick Flores Romero por el manejo del Metricon.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca en el programa "Ayudantes de Investigador del Sistema Nacional de Investigadores nivel III o emérito" y en especial al Dr. Jorge Rickards Campbell asesor de esta tesis y guía en esta investigación.

Resumen

En la física hay un interés por estudiar la formación de guías de onda planas por implantación de iones debido a que sus aplicaciones en circuitos opto-electrónicos son inmediatas. Para la presente tesis se estudiaron implantaciones con iones de carbono a 7 MeV sobre óxido de titanio a una afluencia de 1×10^{15} iones/cm².

El objetivo de este trabajo consistió en medir los índices de refracción efectivos de una guía de onda en rutilo implantada con iones de carbono en el plano $\langle 110 \rangle$ en las direcciones del eje de índice de refracción ordinario, extraordinario y a 45° entre ellos, y así, determinar la orientación donde la guía de onda es mejor.

Las muestras usadas de rutilo tenían dimensiones de 1cm x 1cm x 0.5mm y fueron implantadas con carbono a temperatura ambiente con el acelerador Pelletron del IF-UNAM a una energía de 7 MeV.

Una vez terminada la implantación se analizaron las guías de onda en el aparato Metricon del IF-UNAM por el método de modos oscuros, donde se obtuvieron los espectros del índice de refracción.

Para tener medio de comparación se hicieron simulaciones tanto de la implantación de iones en el software SRIM, basado en el método de "Monte-Carlo"; y de los índices de refracción efectivos en el software Wgii basado en el método de "multicapas".

Por último, teniendo la comparación entre los valores teóricos (provenientes de las simulaciones) y experimentales (provenientes de Metricon) se pudo determinar que la orientación donde la guía de ondas plana presenta una mayor diferencia entre los índices de refracción de la guía y el sustrato, fue en la dirección $\langle 110 \rangle$ del eje de índice de refracción ordinario, con una diferencia de $\Delta n = 0.0466$.

Índice general

Índice de figuras	XI
Índice de tablas	XIII
1. Introducción	1
1.1. Presentación	1
1.2. Objetivo	2
1.3. Motivación	2
1.4. Planteamiento del problema	3
1.5. Metodología	3
1.6. Estructura de la tesis	4
2. Marco teórico	7
2.1. Guías de Onda Planas	7
2.1.1. Método Geométrico	7
2.1.2. Método Electromagnético	10
2.1.3. Método Cuántico	13
2.1.3.1. Curva de índice de modo	14
2.1.3.2. Método de Reflectividad	15
2.2. Rutilo	17
2.3. Efecto de la implantación de iones en materia	20
2.3.1. Frenado Nuclear	20
2.3.2. Frenado Electrónico	21
2.3.3. Curva Alcance-Energía	23
2.3.4. Daño	24
3. Diseño del experimento	27
3.1. Acelerador de iones (Pelletron)	28
3.2. Metricon Prism Coupler	29
3.3. SRIM	30
3.4. Software Wgii	32

ÍNDICE GENERAL

4. Análisis de Resultados	35
4.1. Metricon Prism Coupler	35
4.2. SRIM	37
4.3. Curva de modos	39
4.4. Wgii	40
5. Discusión y Conclusiones	45
A. Apéndice	47
A.1. Metricon	47
A.2. Curva de modos	52
A.3. Wgii	54
A.4. Comparación	56
Bibliografía	59

Índice de figuras

2.1. Esquema de los índices de refracción entre 3 medios para generar una guía de onda plana (1) n_0 =aire, n_1 =guía y n_2 =sustrato.	8
2.3. Perfil de la distribución del campo eléctrico en una guía de onda plana .	12
2.4. Perfil de índices de refracción para el trato cuántico	14
2.5. Método de reflectividad por multicapas en el trato de los frentes de onda de la luz en la guía.	16
2.6. Perfiles de modos calculados por el método de reflectividad (2).	18
2.7. Estructura del rutilo (TiO_2)	19
2.8. Proyección $\langle 110 \rangle$ del rutilo según los índices de Miller.	20
2.9. Distribución gaussiana del alcance lineal de iones en una muestra de cualquier sólido.	24
2.10. Tipos de daños producidos por implantación de iones, en círculo blanco son átomos del material y en círculo negro átomos del proyectil (3).	25
3.1. Esquema del montaje experimental en Metricon; imagen adaptada de (4).	30
3.2. Fotografía del Metricon, las partes están marcadas con letras; A:láser, B:pisma, C:pistón neumático, D:motor a pasos, E:detector óptico; imagen adaptada de (5).	31
3.3. Modos de índice refracción efectivo generados por el software Wgii basados en el perfil de onda de la imagen derecha.	33
3.4. Captura del perfil de índice dado por el software Wgii.	33
3.5. Similitud entre el perfil de daños dado por el software SRIM y las zonas del perfil de índice dado por el software Wgii.	34
4.1. Simulación de las trayectorias en la implantación de iones de carbono a 7 MeV sobre una placa de rutilo, hecha con el software SRIM.	38
4.2. Distribución del daño producido por iones de carbono de 7 MeV y afluencia de 1×10^{15} en rutilo, simulación hecha por software SRIM.	38
4.3. Perfil de índices de refracción en la dirección $\langle 110 \rangle$ a dependiente de la profundida de la guía de ondas para el calculo en el software wgii. . .	41
A.1. Intensidad vs Índice de refracción efectivo para rutilo en la dirección del eje de índice de refracción extraordinario ($\langle 110 \rangle a$).	47

ÍNDICE DE FIGURAS

A.2. Intensidad vs Índice de refracción efectivo para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle b$ (dirección en el eje del índice de refracción ordinario) implantado con iones de carbono a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$, datos experimentales de Metriton.	48
A.3. Intensidad vs Índice de refracción efectivo para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle c$ (dirección a 45° del eje del índice de refracción ordinario y extraordinario) implantado con iones de carbono a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$, datos experimentales de Metriton.	49
A.4. Espectros de Intensidad (u.a.) vs índice de refracción efectivo en las direcciones: $\langle 110 \rangle a$ eje extraordinario, $\langle 110 \rangle b$ eje ordinario y $\langle 110 \rangle c$ giro de 45° respecto al eje del índice de refracción ordinario; datos generados por Metriton.	50
A.5. Perfiles de índice de refracción para rutilo $\langle 110 \rangle$ antes de la implantación, resaltan los valores de los índices ordinario, extraordinario y a 45°	51
A.6. Curva de modos para implantaciones con iones de carbono en rutilo a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección $\langle 110 \rangle a$ (dirección del eje del índice de refracción extraordinario). Se ajustó una recta por el método de mínimos cuadrados.	52
A.7. Curva de modos para implantaciones con iones de carbono en rutilo a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección $\langle 110 \rangle b$ (dirección del eje del índice de refracción ordinario). Se ajustó una recta por el método de mínimos cuadrados.	53
A.8. Curva de modos para implantaciones con iones de carbono en rutilo a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección $\langle 110 \rangle c$ (dirección a 45° respecto al eje de índice de refracción extraordinario). Se ajustó una recta por el método de mínimos cuadrados.	53
A.9. Valor de las barreras por el software Wgii para las direcciones $\langle 110 \rangle a$, $\langle 110 \rangle b$, $\langle 110 \rangle c$	55
A.10. Espectros del Metriton para la dirección $\langle 100 \rangle a$ de rutilo implantado con carbono a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$	56
A.11. Valores de barrera para la orientación $\langle 100 \rangle$ en dirección del eje del índice de refracción ordinario.	57

Índice de tablas

3.1. Propiedades físicas del rutilo usado en el experimento, comprado a la empresa MTI Corporation.	27
4.1. Valor de los índices efectivos para los primeros 6 modos para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle$ implantados con carbono a fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección a (dirección del índice de refracción extraordinario). . . .	36
4.2. Valor de los índices efectivos para los primeros 6 modos para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle$ implantados con carbono a fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección b (giro de 90° en sentido anti-horario quedando en el eje del índice de refracción ordinario)	36
4.3. Valor de los índices efectivos para los primeros 6 modos para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle$ implantados con carbono a fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección c (giro de 45° en sentido anti-horario respecto a la dirección $\langle 110 \rangle$ a)	37
4.4. Valores de ancho de la guía (δ) e índice de refracción de la guía n_1 calculados por las gráficas de curva de modos (gráficas A.6, A.7, A.8). . .	40
4.5. Valores ingresados al software Wgii para calcular los índices de refracción efectivos teóricamente por el método de reflectividad.	40
4.6. Comparación entre los índices de refracción efectivos experimentales y teóricos (determinados por el software Wgii en la dirección $\langle 110 \rangle$ a. . .	42
4.7. Comparación entre los índices de refracción efectivos experimentales y teóricos (determinados por el software Wgii en la dirección $\langle 110 \rangle$ b. . .	42
4.8. Comparación entre los índices de refracción efectivos experimentales y teóricos (determinados por el software Wgii en la dirección $\langle 110 \rangle$ c. . .	43
A.1. Valores ingresados al software Wgii para calcular los índices de refracción efectivos teóricamente por el método de reflectividad.	54
A.2. Valores de la barrera para rutilo en la dirección $\langle 100 \rangle$	56

Introducción

1.1. Presentación

En la actualidad la necesidad de comunicación a largas distancias es fundamental en el desarrollo de los países. Mediante el uso de satélites artificiales y fibra óptica se ha incrementado la eficiencia y capacidad que tienen los humanos de transmitir información, sin embargo, el rápido crecimiento de la población demanda métodos de transferencia de datos aún más rápidos y mejor controlados, uno de ellos son las guías de onda ópticas.

La implantación de iones de baja energía ha demostrado a lo largo de los años ser un método experimental muy fácil para cambiar las propiedades tanto físicas como químicas de los materiales como el aumento en la resistencia al desgaste, la fricción o la corrosión (6). Esta técnica de implantación de iones se aplica a materiales aislantes o semiconductores.

En sus inicios el objetivo de esta técnica experimental era cambiar las propiedades eléctricas, sin embargo, el avance en la fotónica hace necesario fabricar materiales que sirvan como emisores de luz, mejores láseres y dispositivos opto-electrónicos.

Los cambios en las propiedades ópticas de los materiales se han aplicado en la creación de coberturas anti-reflejantes, confinamiento de láseres, así como filtros de luz a ciertas longitudes de onda.

Para esta tesis se utilizó como material al óxido de titanio (IV) o rutilo, por ser un material anisotrópico muy importante en la industria a nivel mundial y presentar el fenómeno de birrefringencia. El ion utilizado en la implantación fue carbono, ya que produce cambios en el índice de refracción del rutilo que permiten la propagación de ondas electromagnéticas en la región visible e infrarrojo lejano.

1.2. Objetivo

Este trabajo tiene por objetivo medir los índices de refracción efectivos de una guía de onda en rutilo implantada con iones de carbono en el plano $\langle 110 \rangle$. Por ser el rutilo un material birrefringente, la muestra se analizará en 3 direcciones diferentes: en la dirección del índice de refracción extraordinario, del índice de refracción ordinario y a 45° entre estos dos anteriores y se determinará la dirección en la cual la guía de ondas plana presenta una mayor diferencia entre los índices de refracción de la guía y el sustrato.

La implantación de iones de carbono se realizó en el acelerador Pelletron del IF-UNAM y se comparó el proceso de implantación con una simulación en el software SRIM. Los índices de refracción efectivos se midieron con el aparato Metricon y se calcularon teóricamente estos mismos valores por el método de reflectividad o método de multicapas en el software Wgii.

1.3. Motivación

El estudio de la guía de onda en rutilo por implantación de iones de carbono en la dirección $\langle 110 \rangle$ que realicé para la presente tesis, es la culminación de una investigación del grupo de trabajo dirigido por del Dr. Jorge Eduardo Rickards Campbell. Anteriormente ya se había hecho un estudio similar al de esta tesis pero en las direcciones $\langle 001 \rangle$ y $\langle 100 \rangle$, los resultados de este estudio se reportaron en la tesis de Licenciatura del Físico Julian Mejia Morales (5).

Utilizar iones de carbono a una afluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ es el resultado de la continuidad de varios trabajos de investigación previos publicados en los artículos (7) y (8):

En el primero se reporta la creación de guías de ondas en rutilo en las direcciones $\langle 100 \rangle$ y $\langle 001 \rangle$ con iones de carbono a energía de 7 MeV y afluencia de $1 \times 10^{15} \text{m}^{-2}$, analizadas usando la técnica de prisma acoplado explicando las diferencias debidas a la anisotropía del material (estructura tetragonal).

En el segundo se reporta la creación de guías de ondas en rutilo en las direcciones $\langle 001 \rangle$ y $\langle 100 \rangle$ con iones de carbono a una energía de 7 MeV y afluencias entre $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ y $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$, observando que en el caso $\langle 001 \rangle$ el índice de refracción ordinario permanece fijo y en el caso $\langle 100 \rangle$ el índice de refracción extraordinario y los modos de guía de onda, ambos dependen de la dirección.

1.4. Planteamiento del problema

Cuando se trabaja con materiales que han sido sometidos a una implantación de iones se deben tener en cuenta algunas consideraciones como:

- El ancho del canal de un modo de guía óptica debe ser del tamaño de la longitud de onda del láser que es transmitido por dicho canal.
- Para la creación de guías de ondas ópticas se necesitan grandes afluencias, el valor mínimo reportado es del orden de $\sim 10^{12}cm^{-2}$ (9), sin embargo, no se conoce un límite inferior o superior; lo que hace el proceso de fabricación lento y costoso. Para esta tesis se usará una afluencia de $1 \times 10^{15}cm^{-2}$.
- El grado de rugosidad de la cara del material por donde se introduce la señal óptica debe ser menor a una décima parte de la longitud de onda de la luz de dicha señal por lo que es necesario que la superficie de los materiales tengan un alto nivel de pulido. Considerando esto se compró una muestra a la empresa MTI Corporation de rutilo de $1cm^2 \times 0.5mm$ con la cara pulida de $1cm^2$.

Acatando los requisitos anteriores se ha comenzado a realizar investigación en dos campos importantes: primero por implantación de iones de alta y baja energía. El uso de iones de alta energía amplía el campo de trabajo al poder manipularse iones pesados (1).

Para esta tesis se usarán iones de baja energía implantados en óxido de titanio (TiO_2) mejor conocido como rutilo, por sus propiedades químicas y gran importancia en la industria.

1.5. Metodología

Pensando en el objetivo planteado, se caracterizaron guías de onda implantadas con iones de carbono en la dirección $\langle 110 \rangle$ de rutilo, para ello se realizaron los siguientes pasos:

1. Se compraron a la empresa "MTI Corporation" piezas de rutilo de dimensiones ($1cm^2 \times 0.5mm$) en el plano $\langle 110 \rangle$ y con la cara de área de $1cm^2$ pulida.
2. Con el acelerador Pelletron 9SDH-2 "National Electrostatics Corporation" del Instituto de Física de la UNAM se implantaron iones de carbono sobre la muestra de rutilo, la fuente de carbono usada es del tipo SNICS (Source of Negative Ions by Cesium Sputtering).
3. Una vez teniendo la muestra de rutilo implantada con iones de carbono en el plano $\langle 110 \rangle$ con una afluencia de $1 \times 10^{15}cm^{-2}$, se midieron sus distintos índices de refracción efectivos con el aparato Metricon.

4. Los modos de propagación se midieron a tres ángulos diferentes: en la dirección del índice de refracción ordinario, extraordinario y a 45° entre ambos.
5. Como medio de comparación se midió el perfil de índice de refracción dependiente de la intensidad con el Metricon en las 3 direcciones para una muestra antes y después de ser implantada, esto con el fin de determinar experimentalmente los valores del índice de refracción ordinario (n_o) y extraordinario (n_e).
6. Se hizo una simulación de la implantación de iones de carbono en rutilo en el software estadístico SRIM.
7. Teniendo los patrones de índices de refracción experimentales se hizo un ajuste teórico en el software Wgii que utiliza el método de multicapas.
8. Con la curva de modos se llegó a la conclusión de cuál es la mejor dirección en la propagación de guías de onda.

1.6. Estructura de la tesis

Este trabajo está dividido en 5 capítulos.

El primer capítulo da una introducción al trabajo de investigación que se hizo, mostrando el objetivo de la tesis, la motivación para hacer dicho trabajo, el problema a solucionar y los pasos a seguir para resolver dicho problema.

El segundo capítulo expone el marco teórico en el cual está fundamentada la tesis, se divide en tres partes: primero se da una explicación del fenómeno de guías de onda desde un enfoque geométrico, electromagnético y su analogía con la mecánica cuántica. En la parte cuántica se explica el método de reflectividad, útil para dar solución a las ecuaciones de guía de onda similares a la ecuación de Schrödinger.

En la segunda parte se explican brevemente las propiedades físicas del óxido de titanio, material utilizado en los experimentos de esta tesis.

Finalmente, en la tercera parte se da una introducción a los efectos de la interacción ion-materia, explicando fenómenos como el frenado electrónico, nuclear y nivel de daños.

En el tercer capítulo se explica el procedimiento experimental, exponiendo el funcionamiento del equipo utilizado, el cuál fue: el acelerador Pelletron del IF-UNAM, el Metricon igualmente del IF-UNAM y los softwares SRIM y Wgii útiles en el análisis de datos.

Para el cuarto capítulo se da el análisis de resultados, en el se muestran los espectros generados por Metricon y su tratamiento con las simulaciones de Wgii y SRIM.

Por último, en el capítulo cinco se da la discusión y conclusiones de los resultados obtenidos en el capítulo cuatro, así como el resultado del problema planteado en esta tesis.

La tesis contiene un apéndice con las gráficas e imágenes utilizadas a lo largo de la tesis y al final se encuentra la bibliografía.

Marco teórico

El marco teórico se divide en tres partes, la primera parte da una introducción al estudio de las guías de onda ópticas desde diferentes planos de estudio como el geométrico, electromagnético y cuántico. La segunda parte explica algunas propiedades físicas y químicas del óxido de titanio o rutilo.

Por último, se da una explicación de los efectos que produce la implantación de iones en materiales semiconductores.

La implantación de iones en el experimento se hizo en una placa rectangular con una cara de 1cm^2 y un grosor de 0.5mm , con lo que, dada la geometría del material, la guía de onda se comportará como una de tipo plana encerrada en 3 medios de diferentes índices de refracción, estos medios son: el aire, la película y el sustrato.

2.1. Guías de Onda Planas

El objetivo de una guía es confinar en un espacio la energía electromagnética y que esta pueda viajar dentro del área de confinamiento. Las guías de onda formadas en materiales dieléctricos permiten que el campo eléctrico dentro de la guía sólo pueda existir para ciertos vectores de onda conocidos como modos de propagación. Los campos eléctricos y magnéticos en las guías de onda planas tienen una amplitud constante en el plano normal a la dirección de propagación.

2.1.1. Método Geométrico

Para que exista una guía óptica entre dos medios, se necesita que si la luz viaja en un medio con un cierto índice de refracción (n_1) y quiere pasar a un segundo medio, este segundo medio debe tener un índice de refracción (n_2) menor al primero y el ángulo de incidencia de la luz (θ) debe ser mayor al ángulo de crítico ($\text{Sin}(\theta) = \frac{n_2}{n_1}$), fenómeno conocido como reflexión total interna. La expresión anterior proviene de considerar la

2. MARCO TEÓRICO

Ley de Snell.

Un esquema de una guía de onda simple y su dependencia con el índice de refracción se ve en la imagen 2.1.

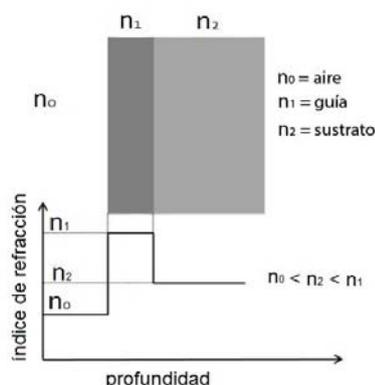


Figura 2.1: Esquema de los índices de refracción entre 3 medios para generar una guía de onda plana (1) n_0 =aire, n_1 =guía y n_2 =sustrato.

Definiendo θ_a como el ángulo de incidencia de la luz con respecto a la normal entre los materiales aire-guía y θ_s el ángulo de incidencia de la luz respecto a la normal entre los materiales guía-sustrato. Es claro ver que ambos ángulos deben satisfacer la condición de reflexión total interna o ángulo de crítico.

Si las superficies del sustrato y del aire son paralelas y considerando que el índice de refracción del aire es $n_0 = 1$, se puede hablar de un único ángulo de incidencia de la luz θ que cumple que $\theta > \theta_s$. La consideración anterior es muy importante pues de aquí en adelante se hablará de un único ángulo θ .

Para calcular los modos guiados por la onda se considerará la imagen 2.2.

Considerando la definición del vector de onda $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$ y una guía con índice de refracción n_1 , la diferencia de fase de un rayo de luz dentro de la guía viene dada como la diferencia de caminos ópticos al desplazarse una distancia dx , representada por la expresión:

$$\Delta\varphi = k_0 n_1 dx$$

Los puntos A y C corresponden al mismo frente de onda de un rayo de luz antes de ser reflejado, D representa el frente de onda después de haber sido reflejado en el punto C y el punto B indica la reflexión de la onda A. Para que haya interferencia

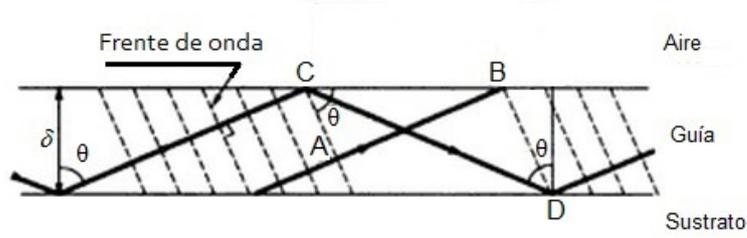


Figura 2.2: Diagrama del camino óptico de un rayo de luz dentro de una guía de onda plana, las letras A,B,C y D corresponden a los frentes de onda; imagen adaptada de (10)

constructiva entre estos dos rayos se debe satisfacer:

$$\Delta\varphi_{\bar{B}\bar{D}} = k_0 n_1 (\bar{C}\bar{D} - \bar{A}\bar{B}) \quad (2.1)$$

Calcular los valores para la distancia $\bar{C}\bar{D}$ y $\bar{A}\bar{B}$ es fácil, conociendo el ancho δ de la guía y el ángulo de incidencia de la onda θ se obtienen las ecuaciones:

$$\bar{A}\bar{B} = \frac{-\delta \cos 2\theta}{\cos \theta} \quad \bar{C}\bar{D} = \frac{\delta}{\cos \theta} \quad (2.2)$$

Combinando las dos ecuaciones anteriores se llega a que la diferencia de caminos ópticos necesaria para que haya una interferencia constructiva es:

$$\Delta\varphi_{\bar{B}\bar{D}} = 2k_0 n_1 \cos \theta \quad (2.3)$$

Y la diferencia total de fase es (10), (y es aquí lo que brinda el trato discreto o modos):

$$\Delta\varphi = 2\mathbf{k}_0 \mathbf{n}_1 \cos \theta - 2\phi_r - 2\phi_s = 2\pi \mathbf{m} \quad \mathbf{m} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}, \dots \quad (2.4)$$

De la ecuación anterior, ϕ_s es el cambio de fase en la región guía-sustrato y ϕ_r es el cambio de fase en la región guía-recubrimiento debidos a la reflexión total. La ecuación anterior es conocida como condición de resonancia transversal o ecuación de autovalores de la guía con modos de orden \mathbf{m} .

Los valores teóricos para ϕ_s y ϕ_r en los estados de polarización eléctricos (TE) y magnéticos (TM), pueden ser calculados al considerar dos materiales con índice de refracción n_1 y n_2 , donde su coeficiente de reflexión complejo esta dado por las formulas de Fresnel, lo que da lugar a dos posibles casos.

Si el coeficiente de reflexión es real entonces la onda reflejada pierde energía creando un haz difractado; por el contrario, si el coeficiente es imaginario la energía de la onda incidente será igual a la onda reflejada y sólo existirá un desplazamiento de fase.

Tomando la segunda opción, para el caso de TE, ϕ tiene la forma de $(n_1 \cos \theta_1 - \sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2})$. Dividiendo la parte imaginaria entre la real, se llega a (11):

$$\tan \phi_{TE} = \frac{\sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2}}{n_1 \cos \theta_1} \quad (2.5)$$

Análogamente para el caso de TM (11).

$$\tan \phi_{TM} = \frac{n_1^2}{n_2^2} \tan \phi_{TE} \quad (2.6)$$

El método geométrico es una buena introducción al estudio de las guías de onda plana, ya que es muy intuitivo y permite notar la discretización de los modos, al igual que da las restricciones necesarias para existir una reflexión total interna y la relación entre los índices de refracción de los materiales y el ángulo de incidencia del haz. Sin embargo, no se puede extraer más información del modo, para ello se debe dar un trato desde la teoría electromagnética.

2.1.2. Método Electromagnético

En este caso se aplicarán las ecuaciones del electromagnetismo a una guía de onda, para ello se debe considerar un medio no magnético y dieléctrico con un perfil de índices de refracción tipo escalón, esta aproximación es poco veraz porque la técnica como se creo el sustrato (por implantación de iones de carbono) brinda un perfil de índice de refracción tipo gradiente.

Usando las consideraciones anteriores las ecuaciones de Maxwell toman la siguiente forma (12):

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon \vec{E} = 0 \quad (2.7)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (2.8)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0 \quad (2.9)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \epsilon_0 n^2(\vec{r}) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.10)$$

Donde ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío, μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío y $n(\vec{r})$ es el índice de refracción del medio guía.

Tomando el rotacional a la ecuación modificada de Faraday-Lenz (2.8), usando la ley de Gauss y sustituyendo la versión modificada de la ecuación de Ampere-Maxwell, (2.10) y usando que $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r = \epsilon_0 n^2(\vec{r})$, donde ϵ_r es la permitividad eléctrica relativa; se obtiene la siguiente expresión (1):

$$\nabla^2 \vec{E} + \vec{\nabla} \left(\frac{1}{n^2} \vec{\nabla} n^2 \cdot \vec{E} \right) - \epsilon_0 \mu_0 n^2 \frac{d^2 \vec{E}}{dt^2} = 0 \quad (2.11)$$

Suponiendo que la luz se propaga en la dirección del eje Z y es confinada en el eje X, la forma más general de escribir el campo eléctrico es:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E(x) e^{i(\omega t - \beta z)} \hat{y}$$

Donde ω representa la frecuencia angular y β la constante de propagación de la onda. Aplicando la expresión anterior a la ecuación 2.11 el segundo término se anula y se obtiene la relación para guías de ondas planas en medios no homogéneos:

$$\frac{d^2 E_y}{dx^2} + [k_0^2 n^2(x) - \beta^2] E_y = 0 \quad (2.12)$$

Se usó la relación: $\kappa_0 = 2\pi/\lambda_0$ y $\omega = 2\pi c/\lambda_0$. Las soluciones a las ecuaciones anteriores deben hacerse numéricamente, sin embargo, hay técnicas para poder resolverlas. De hecho la ecuación 2.12 es de tipo Schrödinger.

La solución a la ecuación anterior queda determinada por:

$$E_y(x) = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x} \quad (2.13)$$

Donde α es de la forma $\alpha = \pm \sqrt{k_0^2 n^2(x) - \beta^2}$.

Con un trato análogo, las ecuaciones para el campo magnético quedan de la siguiente manera:

$$H_x = -\frac{i}{k_0} \frac{dE_y}{dz} \quad (2.14)$$

$$H_z = \frac{i}{k_0} \frac{dE_y}{dz} \quad (2.15)$$

Para determinar el campo eléctrico en cada una de las zonas guía, aire y sustrato se debe considerar que dentro de la guía la solución debe comportarse de tipo ondulatorio y las soluciones para aire y sustrato deben ser de tipo exponencial decreciente, es decir, una onda evanescente.

Las soluciones en las 3 regiones son (1):

$$E_y(x) = \begin{cases} A e^{-\gamma_0 x} & \text{si } x \geq 0 \\ B e^{i\kappa_1 x} + C e^{-i\kappa_1 x} & \text{si } -\delta \leq x \leq 0 \\ D e^{\gamma_2 x} & \text{si } x \leq -\delta \end{cases} \quad (2.16)$$

El valor de los coeficientes es:

$$\gamma_0^2 = \beta^2 - \kappa_0^2 n_0^2 \quad \kappa_1^2 = \kappa_0^2 n_1^2 - \beta^2 \quad \gamma_2^2 = \beta^2 - \kappa_0^2 n_2^2 \quad (2.17)$$

Para obtener los coeficientes anteriores, se aplicaron las soluciones 2.16 a la ecuación 2.12, considerando que cada solución es válida en cada una de las tres regiones, es por eso

2. MARCO TEÓRICO

que aparecen los sub-índices 0, 1 y 2 que significan aire, guía y sustrato respectivamente.

Para que las soluciones sean físicamente posibles se necesita que tanto la solución como su derivada sean continuas en las fronteras. Derivando y evaluando las funciones en $z=0$ y $z = -\delta$ e igualando cada una se tiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
 A - B - C &= 0 \\
 -\gamma_0 A - i\kappa_1 B + i\kappa_1 C &= 0 \\
 e^{i\kappa_1 \delta} B + e^{-i\kappa_1 \delta} C - e^{\gamma_2 \delta} D &= 0 \\
 i\kappa_1 e^{i\kappa_1 \delta} B - i\kappa_1 e^{-i\kappa_1 \delta} C - \gamma_2 e^{\gamma_2 \delta} D &= 0
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

Para que el sistema de cuatro ecuaciones tenga solución su determinante debe ser igual a cero, usando la definición de tangente en termino de exponenciales imaginarias, la ecuación trascendental que se obtiene es (12):

$$\tan(\kappa_1 \delta) = \frac{\kappa_1(\gamma_2 + \gamma_0)}{\kappa_1^2 - \gamma_2 \gamma_0} \tag{2.19}$$

La función tangente es periódica en múltiplos de π por lo que le da un trato discreto a las soluciones para TE en una guía de ondas planas. Algunos perfiles de la solución para el campo eléctrico en una guía de onda plana se muestran en la siguiente imagen.

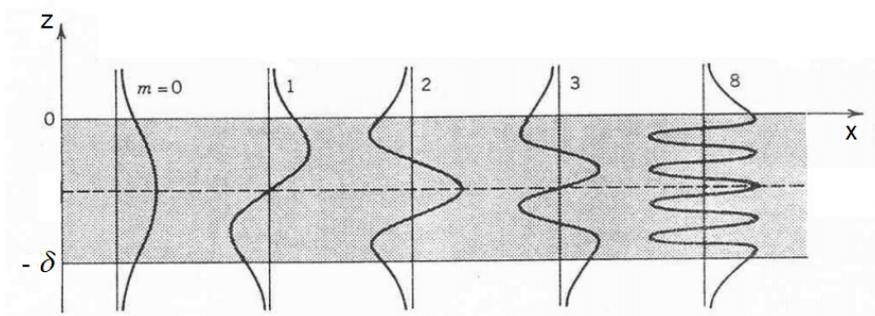


Figura 2.3: Perfil de la distribución del campo eléctrico en una guía de onda plana

Para relacionar la ecuación (2.12) en un medio homogéneo el segundo término se anula y las constantes ϵ_0 y μ_0 cambian, quedando la ecuación:

$$\nabla^2 \vec{E} - \epsilon\mu \frac{d^2 \vec{E}}{dt^2} = 0 \tag{2.20}$$

Considerando la definición de índice de refracción como la razón entre la velocidad de la luz en el vacío y en un medio material, la ecuación (2.20) toma la forma:

$$\nabla^2 \vec{E}_i - \frac{n_i^2}{c^2} \frac{d^2 \vec{E}_i}{dt^2} = 0 \tag{2.21}$$

En la ecuación anterior el termino i se refiere a cada una de las direcciones espaciales. Observando su analogía con la ecuación (2.12), se puede asociar el término β con el índice de refracción de cada modo.

$$n_m = \frac{\beta}{k} = n_1 \sin \theta_m \quad (2.22)$$

El término n_1 se refiere al índice de refracción de la guía, k es el vector de onda de la luz incidente que puede ser relacionado con la longitud de onda.

Usando la ecuación (2.19) y sustituyendo los valores de los coeficientes (2.17) se llega a la ecuación trascendental:

$$\mathbf{k}_1 \delta = \mathbf{m}\pi + \phi_r + \phi_s \quad (2.23)$$

Considerando los cambios de fase descritos por las ecuaciones de Fresnel, quedan determinados por:

$$\phi_r = \arctan \left(\frac{\mathbf{n}_m^2 - \mathbf{n}_0^2}{\mathbf{n}_1^2 - \mathbf{n}_m^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.24)$$

$$\phi_s = \arctan \left(\frac{\mathbf{n}_m^2 - \mathbf{n}_2^2}{\mathbf{n}_1^2 - \mathbf{n}_m^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.25)$$

2.1.3. Método Cuántico

El trato cuántico del problema de una guía de onda plana en un marco no relativista se basa en aproximar las ecuaciones electromagnéticas a la ecuación de Schrodinger debido a su gran parecido, es decir, es una simple analogía. Para ello se considera un pozo finito de barreras con diferente índice de refracción (Potencial), como lo ilustra la siguiente imagen (2).

La ecuación de Schrödinger clásica para una función de probabilidad con una partícula de energía E en un potencial V es:

$$\frac{d^2 \phi}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \phi = 0 \quad (2.26)$$

Haciendo el cambio de variable:

$$\begin{aligned} \frac{2mE}{\hbar^2} &\rightarrow -k^2 n_m^2 \\ \frac{2mV}{\hbar^2} &\rightarrow -k^2 n_j^2 \end{aligned}$$

Los coeficientes j y m se refieren a que esta ecuación es valida en las tres diferentes regiones. El potencial en el aire es V_0 , en la guía es V_1 y en el sustrato es V_2 , el ancho

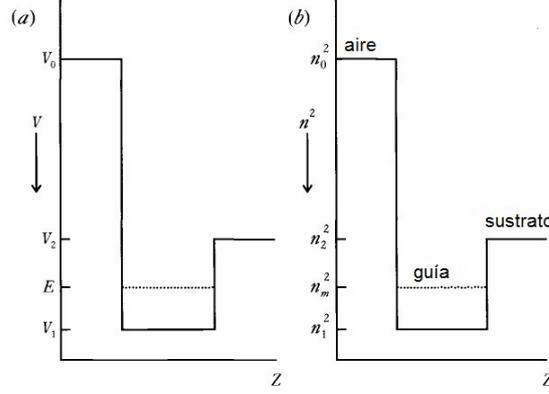


Figura 2.4: Perfil de índices de refracción para el trato cuántico

del pozo debe ser un múltiplo entero de la longitud de onda de la luz incidente en la guía, así la ecuación cuántica que modela una guía de onda plana queda de la siguiente manera:

$$\frac{d^2 \phi_j}{dz^2} + k^2(n_j^2 - n_m^2)\phi_j = 0 \quad (2.27)$$

Para resolver la ecuación anterior se pueden usar el método WKB (Aproximación de Wentzel–Kramers–Brillouin)(13). De la aplicación del método WKB a la guía de onda plana se obtiene (2):

$$\int_0^d k_z(z)dz - \phi_r - \phi_s = m\pi \quad (2.28)$$

Observe su similitud con la ecuación (2.4).

Resolviendo la ecuación trascendental anterior se tienen:

$$\frac{2\delta\pi n_1}{\lambda} \cos \theta_m + \arctan \left(\frac{n_m^2 - n_0^2}{n_1^2 - n_m^2} \right)^{1/2} + \arctan \left(\frac{n_m^2 - n_2^2}{n_1^2 - n_m^2} \right)^{1/2} = m\pi \quad (2.29)$$

La ecuación trascendental anterior tiene dos incógnitas θ_m y n_1 que a su vez determinan n_m ; aquí d es el ancho de la guía de onda, n_0 el índice de refracción del aire, n_1 el índice de refracción de la guía, n_2 el índice de refracción del sustrato, λ la longitud de onda del láser con el que se analiza la muestra y θ_m son los ángulos propios de orden m .

2.1.3.1. Curva de índice de modo

En la mecánica cuántica el cuadrado del índice de cuantización tiene una relación lineal con la energía, así que, al hacer su analogía con el problema de guías de onda se

busca una relación entre el cuadrado del índice de cuantización y el índice de refracción.

Suponiendo que el índice de refracción de la guía es igual al índice de refracción de cada modo (i.e. $n_1 \simeq n_m$), se puede modificar la ecuación (2.29) quedando como:

$$\begin{aligned} \frac{2\delta\pi n_1}{\lambda} \cos \theta_m + \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} &= m\pi \\ \frac{2\delta\pi n_1}{\lambda} \cos \theta_m &= (m+1)\pi \\ n_1 \cos \theta_m &= (m+1) \left(\frac{\lambda}{2\delta} \right) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Usando la relación $n_m = n_1 \sin \theta_m$ y la ecuación anterior se puede llegar a la ecuación conocida como curva de índice de modo (2).

$$\begin{aligned} n_m &= n_1 \sin \theta_m \\ n_m^2 &= n_1^2 \sin^2 \theta_m \\ n_m^2 &= n_1^2 (1 - \cos^2 \theta_m) \\ n_m^2 &= n_1^2 - n_1^2 \cos^2 \theta_m \\ \mathbf{n}_m^2 &= \mathbf{n}_1^2 - (\mathbf{m} + 1)^2 \left(\frac{\lambda}{2\delta} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.31)$$

Que es conocida como la ecuación de la curva de modos.

2.1.3.2. Método de Reflectividad

Reflectivity calculation method (RCM) es un método que resuelve las ecuaciones electromagnéticas dentro de la guía óptica. A grandes rasgos el método consiste en dividir el perfil de índices en varias secciones y resolver las ecuaciones en cada una, considerando las condiciones de frontera y continuidad.

Para ilustrar mejor esta idea se puede ver el esquema 2.5:

Al dividir el problema en un sistema de multicapas, se esta suponiendo que la barrera se puede aproximar como una sucesión de interfaces con diferentes índices de refracción.

Considerando la figura 2.2, el vector de onda κ puede descomponerse en dos componentes $\kappa_x = n_1 \kappa \sin \theta_m$ y $\kappa_z = n_1 \kappa \cos \theta_m$; combinando con la relación para índices de refracción efectivos 2.22 se tiene:

$$\begin{aligned} k_z^2(z) &= k^2 n_1^2(z) - k_x^2 \\ k_z &= k [n^2(z) - n_m^2]^{1/2} \end{aligned} \quad (2.32)$$

2. MARCO TEÓRICO

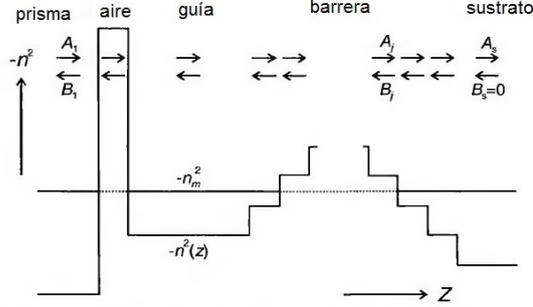


Figura 2.5: Método de reflectividad por multicapas en el trato de los frentes de onda de la luz en la guía.

Al estar determinada k_z como una raíz cuadrada puede tomar valores reales o imaginarios.

Siguiendo la simbología del esquema anterior, los valores A y B corresponden a las amplitudes de la onda de luz incidente y saliente de la guía respectivamente; las soluciones para el campo eléctrico a la ecuación (2.32) son:

$$E(z) = A \cos(k_z z) + B \sin(k_z z) \quad \text{Real} \quad (2.33)$$

$$E(z) = A \exp(-k_z z) + B \exp(k_z z) \quad \text{Imaginaria} \quad (2.34)$$

Las condiciones de frontera y continuidad que se deben cumplir para el campo eléctrico y magnético son:

$$\begin{aligned} H_j(z) &= H_{j+1}(z) & E_j(z) &= E_{j+1}(z) \\ \frac{\partial E_j(z)}{\partial z} &= \frac{\partial E_{j+1}(z)}{\partial z} & \frac{1}{n_j^2} \frac{\partial H_j(z)}{\partial z} &= \frac{1}{n_{j+1}^2} \frac{\partial H_{j+1}(z)}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.35)$$

Resolviendo las ecuaciones (2.33) y (2.34) usando las condiciones (2.35) se llega al siguiente sistema de ecuaciones para cada región.

Dentro de la guía (oscilante-oscilante).

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(k_{zj} z_j) & -\frac{k_{z(j+1)}}{k_{zj}} \sin(k_{zj} z_j) \\ \sin(k_{zj} z_j) & \frac{k_{z(j+1)}}{k_{zj}} \cos(k_{zj} z_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix}$$

En la región de la barrera (evanescente a evanescente).

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{E}{2} \left(1 + \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} \right) & \frac{E}{2} \left(1 - \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} \right) \\ \frac{E}{2} \left(1 - \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} \right) & \frac{E}{2} \left(1 + \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix}$$

De la región barrera a sustrato (evanescente a oscilante).

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{E}{2} & -\frac{E}{2} \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} \\ \frac{1}{2E} & \frac{1}{2E} \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix}$$

En la región guía a barrera (oscilante a evanescente).

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C + \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} S & C - \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} S \\ S - \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} C & S + \frac{k'_{z(j+1)}}{k_{zj}} C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix}$$

Donde esta definido $C = \cos(k_{zj}z_j)$ y $S = \sin(k_{zj}z_j)$.

Llamando M a las matrices de 2×2 de cada interfaz, se puede calcular los coeficientes de reflexión y transmisión; si se fragmenta el problema en $s-1$ interfaces, la interfaz s corresponde a la interacción de la barrera y el sustrato.

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \left[\prod_{j=1}^{s-1} M_j \right] \begin{bmatrix} A_s \\ B_s \end{bmatrix}$$

Si se afirma que $B_s = 0$, es decir, no hay ondas en dirección sustrato-guía, entonces el coeficiente de reflexión de la interfaz del prisma esta dada por (2):

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 \quad (2.36)$$

Naturalmente el coeficiente de transmisión esta determinado por $T = 1 - R$, para el caso del campo magnético es un trato similar, sin embargo, en este caso es necesario agregar los coeficientes $(n_j/n_{j+1})^2$ multiplicados por los coeficientes (k_{j+1}/k_j) provenientes de las matrices M_j .

Algunos perfiles calculados por este método se pueden ver en la imagen 2.6.

2.2. Rutilo

En esta segunda parte del marco teórico se describirán algunas propiedades del óxido de titanio (IV) o rutilo.

- El rutilo tiene una fórmula molecular de TiO_2 .
- En la naturaleza presenta estructura en 3 formas meta estables: rutilo, Anatasa (estructura tetragonal) y Brookita (estructura ortorrómbica) y 5 estructuras a alta presión.

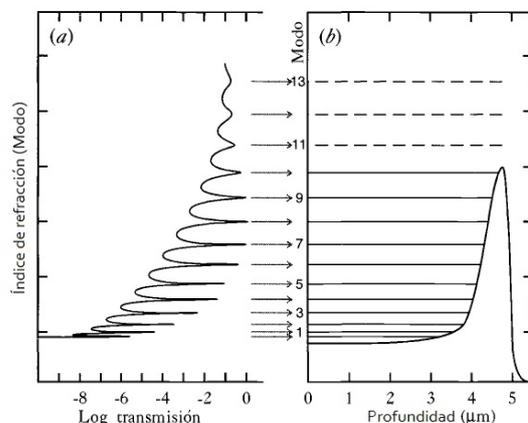


Figura 2.6: Perfiles de modos calculados por el método de reflectividad (2).

- La estructura tipo rutilo tiene 9 átomos de titanio y 6 átomos de oxígeno en la celda primaria, cada átomo de Ti está rodeado de 6 átomos de oxígeno (disposición octaédrica) y cada átomo de oxígeno se rodea de tres átomos de titanio (disposición trigonal).
- El espacio interatómico en la celda primaria es de $a = 4.59\text{Å}$ y $c = 2.96\text{Å}$
- Su peso molecular es de 79.866 g/mol(14).
- La dureza que presenta va de los 6 a 6.5 en la escala de Mohr.
- Su densidad es de 4.18 a 4.25 g/cm^3 .
- Su color va desde el blanco al rojo, castaño rojizo e incluso negro, en la naturaleza suelen encontrarse en formas aciculares delgadas llegado así a tener un color transparente.
- Aún no están bien definidos los campos de estabilidad para el óxido de titanio, sin embargo para el rutilo se le considera un polimorfo de TiO_2 de alta temperatura (15).
- El rutilo no tiene un olor propio y es insoluble en agua.
- Su temperatura de fusión es de 2116 K y su temperatura de ebullición es de 3245 K
- Refleja casi toda la radiación visible y mantiene su color.
- Se extrae generalmente de los yacimientos de zafiro.

Es muy importante este material en la industria debido a sus propiedades de dispersión, su estabilidad química y su no toxicidad. También es utilizado como fotocatalizador acelerando las reacciones químicas provocadas por la radiación luminosa y en la elaboración de cerámicos.

En la figura 2.7 puede apreciarse una imagen de la estructura del rutilo.

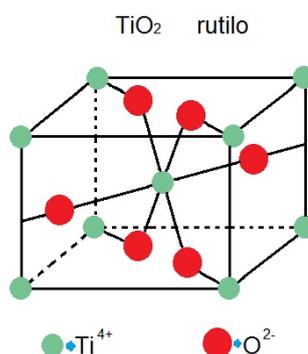


Figura 2.7: Estructura del rutilo (TiO_2)

Tal vez la mayor importancia de este material son sus propiedades ópticas, pues el rutilo es un semiconductor sensible a la luz capaz de absorber radiación electromagnética cerca de la región UV. Además, al presentar una estructura tetragonal no homogénea experimenta el fenómeno de birrefringencia.

La birrefringencia se define como el cambio del índice de refracción de un material en sus diferentes direcciones (16), es la capacidad que tiene el material de girar el plano de la luz polarizada.

En el rutilo, a la dirección perpendicular al eje óptico se le conoce como polarización ordinaria y su índice de refracción se llama ordinario y tiene un valor medido de $n_o = 2.5849$, a la dirección paralela al eje óptico se le conoce como polarización extraordinaria y su índice de refracción conocido como extraordinario tiene un valor de $n_e = 2.8656$ (ver figura en el apéndice A.5), estos datos son validos para una longitud de onda del láser usado de $\lambda = 633nm$.

La orientación a estudiar $\langle 110 \rangle$ es la siguiente:

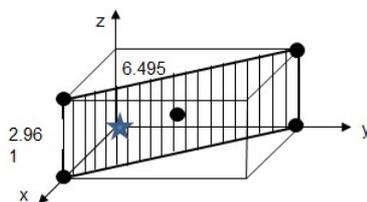


Figura 2.8: Proyección $\langle 110 \rangle$ del rutilo según los índices de Miller.

2.3. Efecto de la implantación de iones en materia

2.3.1. Frenado Nuclear

El termino de frenado nuclear se refiere a la pérdida de energía cinética de un proyectil al penetrar cualquier material, para que este fenómeno sea predominante es necesario que la velocidad del proyectil sea baja. Como la velocidad es baja el proyectil se desplaza dentro del material casi con todos sus electrones, es decir la fracción de ionización es baja.

Es indispensable que las masas del proyectil y el átomo sean similares, en este fenómeno puede ocurrir que el proyectil deposite casi toda su energía provocando un desplazamiento en la red o que la energía depositada sea poca lo que provoca una simple dispersión de Rutherford.

Por definición, la sección de frenado nuclear es:

$$S_n(E_1) = \frac{1}{\rho_2} \left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_\rho \quad (2.37)$$

Donde ρ_2 es la densidad de núcleos por unidad de volumen.

Si se calcula el promedio de la energía transferida al blanco con una sección eficaz σ , un parámetro de impacto b y aplicando la conservación de partículas dispersadas en una colisión clásica y la definición de apantallamiento inter-atómico de Lindhard (3).

$$a_L = \frac{0.8853 a_0}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{1/2}} \quad (2.38)$$

Considerando la definición de apantallamiento inter-atómico de Lindhard donde a_0 es el tamaño atómico, se puede calcular la sección de frenado nuclear considerando el cambio en energía cinética del proyectil como $E = \Delta p^2/2m_1$ y el diferencial de sección eficaz $d\sigma = 2\pi b db$, donde b representa el parámetro de impacto.

Si se define un termino de energía reducida sin unidades:

$$\epsilon = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{a_L}{Z_1 Z_2 e^2} E \quad (2.39)$$

Se puede demostrar que la sección de frenado nuclear [$eVcm^2/atomo$] queda determinada cómo (3):

$$S_n(E_1) = \frac{8.462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2 m_1}{(m_1 + m_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} S_n(\epsilon) \quad (2.40)$$

Donde $S_n(\epsilon)$ esta definida en dos regiones, para $\epsilon < 30$ toma la forma:

$$S_n(\epsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.1383\epsilon)}{\epsilon + 0.01321\epsilon^{0.21226} + 0.1959\epsilon^{0.5}} \quad (2.41)$$

Mientras que para $\epsilon > 30$ se tiene:

$$S_n(\epsilon) = \frac{\ln(\epsilon)}{2\epsilon} \quad (2.42)$$

2.3.2. Frenado Electrónico

En el caso del frenado electrónico se sigue un procedimiento similar al de frenado nuclear, sin embargo en esta parte la masa del proyectil es mucho menor a la masa del blanco con lo cual no hay deformación en la estructura de la red pero si una perdida de energía debida a la fuerza predominante coulombiana. El efecto de la fuerza coulombiana depende de la energía del ion incidente.

En un estudio realizado por Lindhard obtuvo que la energía cedida por un proyectil de masa m y velocidad v es (3):

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{z^2 e^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 m p^2 v^2} \quad (2.43)$$

La expresión anterior es similar a la ecuación de dispersión de Rutherford, sin embargo, debido a que se están tratando electrones el ángulo de dispersión puede ser considerado casi cero.

Si el proyectil de masa m y carga z atraviesa un material con N átomos con número atómico Z por unidad de volumen, el número de electrones que interactúan con el blanco es igual al número de electrones que se encuentran en un circulo de área $2\pi p dp$ y ceden

energía entre E y dE. Así la energía cedida se expresa como:

$$-dE = 2\pi NZ dx \int_{P_{min}}^{P_{max}} E p dp = \frac{NZ}{4\pi\epsilon_0^2} dx \frac{z^2 e^4}{mv^4} \int_{P_{min}}^{P_{max}} \frac{dp}{p} \quad (2.44)$$

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{z^2 e^4}{4\pi\epsilon_0^2 mv^2} NZ \ln \frac{p_{max}}{p_{min}} \quad (2.45)$$

La formula anterior es errónea debido a que cuando $p_{min} = 0$ la energía cedida por unidad de distancia tiende a infinito.

Así si en la ecuación (2.45) el valor de p_{min} iguala a cero se habla de una colisión frontal donde la energía transferida es máxima, es decir Q_0 ; por el contrario para p_{max} su valor no puede ser infinito pues esto supondría una perdida de energía infinita lo cual implicaría un alto parámetro de impacto. Bohr señalo que para este último caso el tiempo de colisión debe ser igual al periodo de vibración del electrón, así $p_{max} = \frac{v}{\omega}$.

Tomando en cuenta las observaciones hechas por Bohr, la perdida de energía por frenado electrónico es (17):

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{z^2 e^4}{mv^2} \frac{NZ}{4\pi\epsilon_0^2} \ln \frac{4\pi\epsilon_0 mv^3}{\omega z e^2} \quad (2.46)$$

Posteriormente, en un tratamiento mecánico-ondulatorio, Bethe y Bloch siguiendo la siguiente aproximación valida para diferentes tipos de partículas cargadas debido a que su velocidad permanece grande comparada con la velocidad de los electrones orbitales de los átomos del absorbedor:

$$\frac{zZe^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar v} \ll 1 \quad (2.47)$$

Dedujeron que la perdida de energía debida al frenado electrónico queda expresada como (18) [MeV kg/m²]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{z^2 e^4}{4\pi\epsilon_0^2 mv^2} NZ \ln \frac{2mv^2}{I} \quad (2.48)$$

Donde I es un potencial medio atómico de excitación ó la energía promedio de ionización; este valor puede ser calculado utilizando la función de distribución electrónica Thomas-Fermi para un átomo de la siguiente manera:

$$I = \kappa Z \quad \kappa \approx 11.5 eV \quad (2.49)$$

Aunque este valor suele ser obtenido experimentalmente.

La ecuación anterior también puede ser calculada con ajustes relativistas, esto suele ser utilizado debido a que los electrones al tener masa muy pequeña su velocidad es cercana a c (17).

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{z^2 e^4}{4\pi\epsilon_0^2 mv^2} NZ \left\{ \ln \frac{2mv^2}{I} - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 \right\} \quad \beta = \frac{v}{c} \quad (2.50)$$

2.3.3. Curva Alcance-Energía

Cuando un proyectil penetra un material con cierta energía E_0 este se irá frenando hasta permanecer en reposo, creando un sustrato. Al ir penetrando el proyectil en el material su trayectoria sufrirá desviaciones debido a interacciones electrónicas (a alta velocidad) o interacciones nucleares (a baja velocidad); como resultado la trayectoria será aleatoria y no existirán dos trayectorias iguales.

Las primeras curvas experimentales fueron hechas por Briggs, Rosenblum y Rutherford.

El alcance lineal (R_L) que puede tener un proyectil en un material es igual al camino recorrido que puede tener integrando las pérdidas de energía tanto debida a frenado nuclear como electrónico, es decir (3):

$$R = \int_0^E \frac{dE}{dE/dx} \quad (2.51)$$

La formula anterior es valida para proyectiles de alta energía donde las aproximaciones hechas en la deducción del frenado nuclear y atómico son validas, sin embargo para proyectiles de baja energía las aproximaciones no son validas, es por ello que las curvas Alcance-Energía no pueden ser calculadas teóricamente y suelen tomarse experimentalmente, generalmente el alcance suele ser expresado en $[mg/cm^2]$, es claro observar que está multiplicado por la densidad del material.

Existe otro término llamado alcance proyectado (R_p), este se define como la proyección del alcance lineal R_L en la dirección inicial del ion incidente, se puede notar que $R_p \leq R_L$. También se tiene el término de alcance transversal (R_t) el cual es la proyección del alcance lineal R_L en la dirección perpendicular a la dirección del ion incidente, siguiendo las definiciones de R_p y R_L estos dos son perpendiculares entre si.

En un experimento cotidiano el número de proyectiles es muy grande, para esta tesis del orden de 1×10^{15} iones, por tanto cada ion de carbono tiene un alcance proyectado bajo una distribución $W(R_L)$ de tipo Gaussiana. El valor del alcance proyectado en el experimento es el promedio de cada uno de los avances proyectados de cada ion, es decir:

$$\langle R_p \rangle = \frac{1}{N} \sum_i R_{p_i} \quad (2.52)$$

El valor del ancho de la distribución gaussiana $W(R_L)$ se le conoce como esparcimiento o en ingles "straggling", este valor tiene la ecuación:

$$s = \langle (\Delta R_p)^2 \rangle^{1/2} \quad (2.53)$$

2. MARCO TEÓRICO

Una muestra ideal de la distribución del alcance nuclear lineal que pueden tener la implantación de iones en materia es la imagen 2.9:

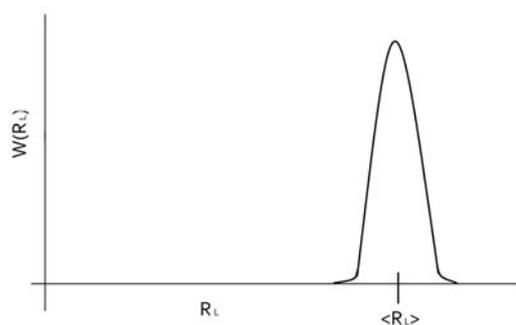


Figura 2.9: Distribución gaussiana del alcance lineal de iones en una muestra de cualquier sólido.

A medida que el ion proyectil sea más pesado el valor del alcance transversal será mayor, al igual que si el proyectil tiene baja energía el esparcimiento o straggling será mayor.

2.3.4. Daño

Durante la implantación de iones el material implantado tiende a ser dañado por la interacción con el proyectil, este daño puede presentarse de diversas formas debido a los factores de velocidad, masa y energía del proyectil al igual que la densidad y estructura del material.

Alguno de los diferentes tipos de daño producidos por iones se muestran en la imagen 2.10.

Los tipos de defectos en un material pueden ser:

- Vacancia: Este tipo de defecto se debe a una ausencia de átomo en la red cristalina del material.
- Impureza sustitucional: Corresponde a la sustitución por el átomo proyectil en la posición espacial de un átomo propio de la red.
- Impureza Intersticial: Se debe a la posición de un átomo proyectil en un lugar espacial diferente a los átomos naturales del material, es decir los átomos de la red permanecen en su posición original y entre ellos está el átomo proyectil. Este tipo de defecto genera estrés en el material.

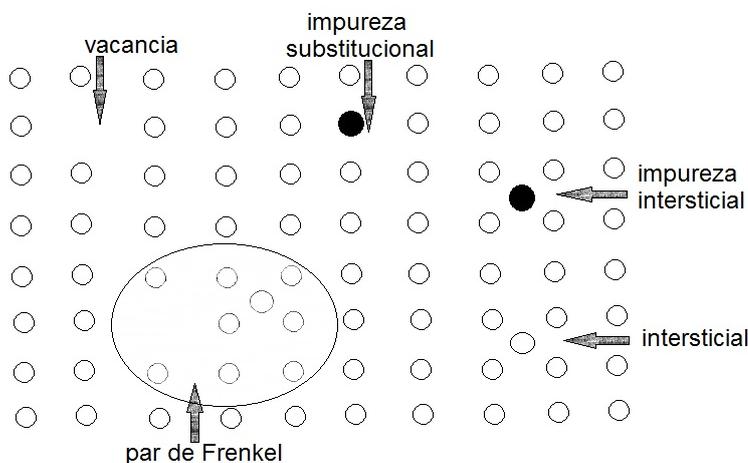


Figura 2.10: Tipos de daños producidos por implantación de iones, en círculo blanco son átomos del material y en círculo negro átomos del proyectil (3).

- Intersticial: Corresponde a un desplazamiento de los átomos del material generando estrés y una sobre densidad atómica.
- Par de Frenkel: Así se le conoce cuando un átomo de la red es desplazado de su posición original a una nueva posición generando una vacancia y una intersticial al mismo tiempo.

Los defectos anteriores son puntuales sin embargo para fines físicos se debe considerar una distribución estadística de daños, para esto se utiliza el factor de desplazamiento por átomo "dpa" (por sus siglas en ingles). Matemáticamente este factor es dado por:

$$dpa = \frac{N_v}{\rho_2 \times N_a} \quad (2.54)$$

Donde ρ_2 es la densidad molecular del material, N_a es el número de átomos por molécula y N_v el número de colisiones por átomo por centímetro cúbico.

$$N_v = N \times \Phi \quad (2.55)$$

Aquí Φ representa el valor de la afluencia.

Una distribución de daño dpa tiene forma tipo gaussiana con máximo en el valor del alcance proyectado el cual es igual al grosor de la guía óptica.

Diseño del experimento

El experimento consistió en dos bloques, primero el proceso para crear la guía de onda en rutilo y segundo estudiar dicha guía. A continuación se describen los materiales y el equipo utilizados.

Las muestras de rutilo utilizadas en este experimento fueron compradas a la empresa "MTI CORPORATION", con solo una cara pulida y pureza mayor al 99.99%, las características reportadas por el vendedor son:

Estructura	Tetragonal $a=4.5936 \text{ \AA}$ $c=2.9582 \text{ \AA}$
Método de Crecimiento	Zona Flotante
Punto de Fusión	1840 C
Densidad	4.26 gr/cm^3
Dureza	7 Mohs
Calor Especifico	0.17 Cal (a 25 C)
Indice de Refracción	$n_o = 2.47$ $n_e = 2.73$ $\lambda = 1.3mm$
Transmitancia	0.5-4.5 mm

Tabla 3.1: Propiedades físicas del rutilo usado en el experimento, comprado a la empresa MTI Corporation.

El láser de He-Ne utilizado por Metricon para obtener la curva de modos tenía una longitud de onda de $\lambda = 633nm$, el rutilo presenta un índice ordinario de $n_o = 2.5849 \pm 0.0001$ y un índice extraordinario de $n_e = 2.8656 \pm 0.0001$ determinado experimentalmente en el aparato Metricon, el espectro del que fueron determinados estos

3. DISEÑO DEL EXPERIMENTO

valores se puede ver en el apéndice, (ver fig. A.5).

A continuación se explicará cronológicamente los pasos que se siguieron para desarrollar el experimento así como también se dará una breve introducción al equipo utilizado y sus principios físicos involucrados.

3.1. Acelerador de iones (Pelletron)

El acelerador Pelletron 9SDH-2 de National Electrostatics Corporation del Instituto de Física de la UNAM es de tipo tándem electrostático de 3.0 MV capaz de acelerar iones con una energía de hasta 12 MeV; sus partes esenciales son: la fuente de iones, el tubo de aceleración de baja energía, el tubo de aceleración de alta energía, los pellets, el gas aislante, las bombas de vacío y los imanes selector y de barrido. El proceso que siguieron los iones para ser implantados se describe a continuación:

Los iones de carbono fueron extraídos de una fuente sólida por bombardeo de átomos de cesio adquiriendo energías entre los 40 a 80 keV. Debido al bombardeo los iones adquieren carga eléctrica negativa pues el cesio tiende a ceder electrones muy fácilmente; a este método se le conoce como SNICS (Source of negative ions by cesium sputtering).

Una vez que los iones negativos fueron extraídos de la fuente pasan a un proceso de primera aceleración de baja energía donde son atraídos por una terminal con carga eléctrica positiva. Al llegar al extremo de esta terminal el carbono se hace pasar por nitrógeno gaseoso neutro donde debido a las colisiones carbono-nitrógeno el ion pierde uno o más electrones cambiando su carga de negativa a positiva; a este proceso se le conoce como *stripper*.

Cuando los iones adquieren carga eléctrica positiva son repelidos por la misma terminal y son acelerados nuevamente pero esta vez en dirección contraria formando un proceso de doble aceleración.

Al final de esta doble aceleración los iones de carbono pasan por un imán, el cual para este experimento, selecciono sólo los que tenían energía de 7 MeV. Por último este haz fue colimado por un imán cuadrupolar dándole una colimación de 1mm^2 .

Como el acelerador colima el haz a 1mm^2 y se quiere implantar una superficie de 1cm^2 , fue necesario utilizar un par de arreglos de dos placas metálicas paralelas; estos arreglos se acomodaron de manera perpendicular generando campos eléctricos uniformes y ortogonales. Logrando, por fuerza eléctrica, deflectar el haz de iones.

La cámara de implantación se encontraba a un vacío de $1 \times 10^{-7} \text{Torr}$ y el resto de

las partes del acelerador tenían un vacío de $1 \times 10^{-6} \text{ Torr}$. La placa de rutilo se inclino a un ángulo aproximado de 8° para evitar el efecto de canalización ó *Channeling*.

Para conocer la afluencia es necesario medir el número de iones implantados por unidad de tiempo, como los iones tienen carga eléctrica entonces en realidad se debe medir la corriente del haz, para ello se usaron galvanómetros o copas de Faraday. La implantación duro 30 minutos y se tuvo una afluencia de aproximada de $1 \times 10^{15} \text{ iones/cm}^2$.

3.2. Metricon Prism Coupler

Una vez teniendo las muestras con los iones implantados se procedió a analizarlas en el aparato Metricon del IF-UNAM, midiendo experimentalmente los índices de refracción efectivos. A continuación se da una breve explicación de las partes y el funcionamiento del Metricon así como los detalles técnicos usados en este análisis.

El Metricon Prism Coupler modelo 2010/M es un aparato automatizado vía computadora del Instituto de Física de la UNAM utilizado para medir los índices de refracción efectivos de guías de onda; sus partes esenciales son: una base porta-muestras, un pistón neumático, un láser de He-Ne con longitud de onda de $\lambda = 633 \text{ nm}$, un prisma con índice de refracción mayor a la muestra a estudiar y un detector óptico.

Experimentalmente los pasos a seguir fueron: primero se colocó un prisma de fosforo de galio con índice de refracción de $n = 3.3059$ y se colocó el cristal de rutilo implantado con iones de carbono entre el prisma y el pistón neumático, para después hacer presión con el pistón sobre la muestra a $276 \times 10^3 \text{ Pa}$ (40 psi); el objetivo de hacer presión entre el prisma y la muestra es para crear un acoplamiento óptico entre las dos partes.

Se hizo incidir la luz láser de He-Ne sobre la cara libre del prisma y se calibra el sistema por computadora para que el láser haga un barrido con un motor a pasos de 0.90 ó 0.45 minutos de ángulo. Para este trabajo se utilizó un paso de 0.90 minutos dando una incertidumbre de ± 0.0001 en las medidas del índice de refracción.

Un esquema del montaje experimental descrito anteriormente se puede ver en la imagen (3.1).

La relación matemática entre el índice de refracción efectivo y el ángulo θ de la imagen 3.1 esta dado por la ecuación (4):

$$n_m = n_p \text{ sen } \theta \tag{3.1}$$

Donde n_p es el índice de refracción del prisma.

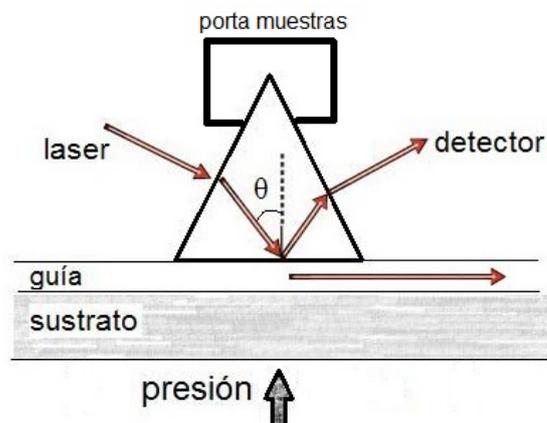


Figura 3.1: Esquema del montaje experimental en Metricon; imagen adaptada de (4).

El principio físico usado por Metricon es el método de modos oscuros donde al hacer incidir luz láser sobre el prisma con cierto ángulo de inclinación θ no se cumple el principio de reflexión total interna y la luz pasa a la guía, formando el efecto de tunelaje óptico observando una disminución brusca de la intensidad del detector.

La imagen (3.2) muestra el aparato Metricon físicamente.

Se midieron los espectros de intensidad del láser vs ángulo de incidencia del haz en el prisma; que está relacionado con el índice de refracción efectivo (ecuación 3.1), para el cristal de rutilo orientado en la dirección del índice de refracción ordinario, extraordinario y a 45° entre estos dos y con ellos se determinaron los valores de los índices de refracción efectivos, los cuales corresponden a puntos de mínima intensidad (centro del valle) (ver figura apéndice A.4).

Una vez terminado de hacerse las pruebas experimentales se procedió a realizar las simulaciones por computadora del experimento para poder comparar los valores experimentales con los resultados teóricos, se usaron los software SRIM para simular la implantación de iones y Wgii para calcular los índices de refracción efectivos. A continuación se dará una explicación de ambos programas.

3.3. SRIM

SRIM (*The stopping and range of ions in matter*) es un software desarrollado por J. F. Ziegler capaz de simular la interacción de iones con materia e ir obteniendo las posibles trayectorias de un proyectil dentro de un material. Para hacer estos cálculos el programa se basa en el método de Monte-Carlo donde se generan números aleatorios y

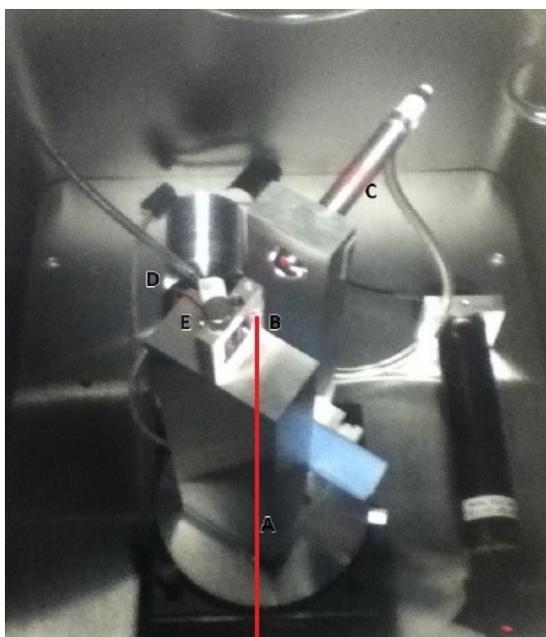


Figura 3.2: Fotografía del Metricon, las partes están marcadas con letras; A:láser, B:prisma, C:pistón neumático, D:motor a pasos, E:detector óptico; imagen adaptada de (5).

3. DISEÑO DEL EXPERIMENTO

se les aplican las ecuaciones de frenado electrónico y frenado nuclear.

El potencial que se considera en este programa es de tipo coulombiano, determinado por el número de protones y radio nuclear del material introducido. La carga del ion se determina por la carga efectiva donde se considera el apantallamiento electrónico del blanco y la velocidad del proyectil.

Este software al ser un conjunto de varios programas que calculan el frenado del proyectil puede dar mucha información como el alcance promedio, la distribución de iones, ionización, distribución del daño, iones dispersados, fonones, entre muchos otros valores por lo que es muy útil.

Se describen a detalle los métodos de funcionamiento de este programa en el libro *The Stopping and Range of Ions in Solids* de J. F. Ziegler, J. P. Biersack y U. Littmark .

Para los objetivos de esta tesis se hizo una simulación de la implantación de iones de carbono en rutilo con los siguientes parámetros: material de óxido de titanio con densidad de $4.26g/cm^3$ y ancho de $5\ \mu m$ y el ion de carbono a una energía de 7 MeV. En la simulación se usaron 5000 proyectiles.

De los resultados del cálculo con este programa solo se tomaron en cuenta la distribución de daño en el material, el alcance promedio de implantación y la distribución de las trayectorias en el eje X,Z.

3.4. Software Wgii

Se procedió a calcular los índices de refracción efectivos con el software Wgii y a continuación se da una explicación del funcionamiento del programa, el principio matemático en el que se basa y algunas capturas de pantalla para enseñar al lector el uso de este software.

Ion Implanted Waveguides (Wgii) es un software desarrollado por Ginés Lifante (2) que permite calcular los modos de propagación y el perfil del índice de refracción basándose en el método de reflectividad. Este programa permite al usuario introducir los valores experimentales de los modos encontrados y ajustar los parámetros como índice de refracción de la guía y así poder hacer que la diferencia entre los modos experimentales y los calculados con el programa sea casi cero, permitiendo encontrar el valor del índice de refracción del sustrato.

El programa se basa en tratar 3 diferentes partes: el plateau, el buffer y la barrera; estas tres zonas pueden ser aproximadas basándose en el perfil de *collision events* dado

por las simulaciones en el software SRIM (Figura 3.5).

En las imágenes 3.3 y 3.4 se muestran las interfaces de operación del software.

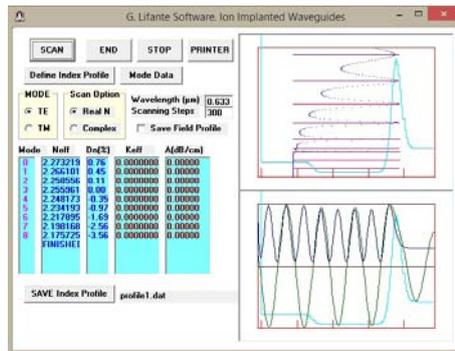


Figura 3.3: Modos de índice refracción efectivo generados por el software Wgii basados en el perfil de onda de la imagen de derecha.

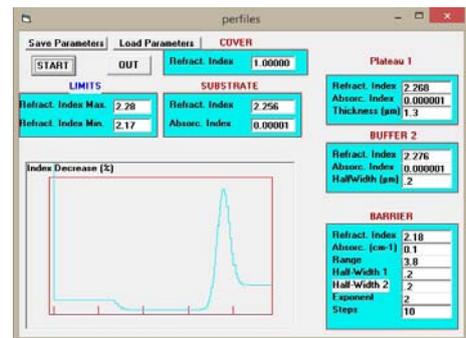


Figura 3.4: Captura del perfil de índice dado por el software Wgii.

Operar el software Wgii es muy simple, para utilizarlo se deben seguir los siguientes pasos:

- Se ingresan los valores experimentales de los índices de refracción efectivos en la pestaña principal en el botón "mode data".
- Para ajustar el perfil de la guía de onda los parámetros requeridos por el programa y su significado son los siguiente:

Substrate: Indica el índice de refracción del cristal (Cambia según la dirección de estudio).

Plateau: Se coloca el valor del índice de refracción efectivo del primer modo (n_1).

Thickness: El ancho del Plateau es aproximadamente de $0.5\mu m$.

Buffer: Corresponde al valor de $n_1 + 0.01$ (este valor se modifica al tanteo para minimizar la diferencia entre los modos experimentales y teóricos).

Barrier: Valor del último modo del índice de refracción efectivo experimental (n_m).

Range: El alcance proyectado dado por las simulaciones en SRIM.

Half-Width 1: Valor fijo de 0.4

Steps: Para este trabajo se determino 50 pero puede ser cualquier valor.

El resto de los campos se quedan con el valor por *default*.

3. DISEÑO DEL EXPERIMENTO

Siguiendo la analogía de las guías de onda en el tratamiento cuántico, si el pozo de potencial es mayor entonces esa guía es mejor en comparación a una con un potencial poco profundo; en este caso esa altura del potencial esta determinada por la diferencia entre el índice de refracción del Plateau y el índice de refracción del Barrier.

Es muy conveniente usar el software Wgii ya que los cálculos necesarios para determinar los índices de refracción efectivos por el método de reflectividad son muy grandes y este software ya los tiene programados.

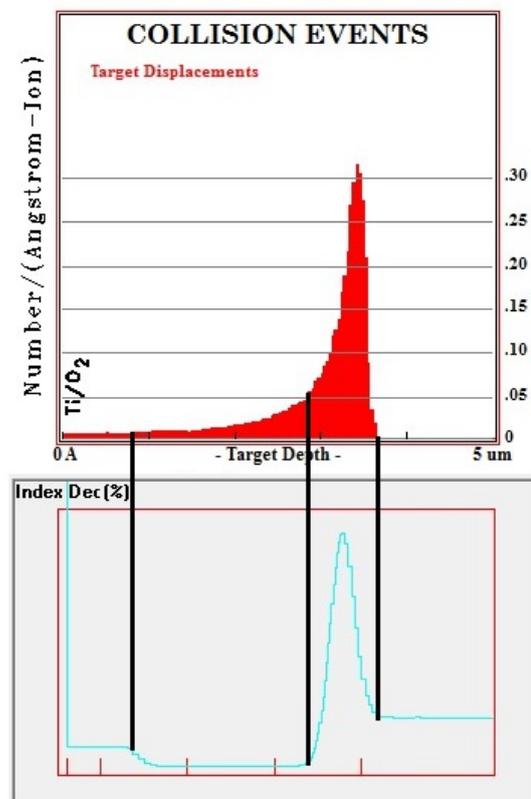


Figura 3.5: Similitud entre el perfil de daños dado por el software SRIM y las zonas del perfil de índice dado por el software Wgii.

Análisis de Resultados

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos. Las gráficas, tablas o fuentes donde están fundamentados estos resultados se encuentran en el apéndice al final de esta tesis.

El orden en que se presentan los resultados es el mismo al del desarrollo experimental, pues varios datos obtenidos en cada una de las secciones son usados en la sección posterior a estos.

4.1. Metricon Prism Coupler

Utilizando el aparato Metricon para analizar las muestras de rutilo con iones de carbono se obtuvieron experimentalmente la dependencia de la intensidad luminosa vs índice de refracción efectivo (ver gráficas en el apéndice A.1 - A.4), de estas gráficas se obtuvo el valor de los modos efectivos (puntos mínimos en la gráfica).

Los resultados obtenidos por Metricon se muestran en las tablas 4.1, 4.2 y 4.3:

La orientación del cristal para todas las muestras es $\langle 110 \rangle$ con una afluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

- El análisis se hizo a diferentes ángulos, el primero fue hecho en la dirección $\langle 110 \rangle$ a (Dirección del índice de refracción extraordinario).
- El segundo análisis se hizo a 90° girando en sentido anti-horario y se llamará la dirección b (dirección del índice de refracción ordinario).
- El tercer análisis se hizo a 45° girando en sentido anti-horario respecto a la dirección $\langle 110 \rangle$ a y se llamará la dirección c.

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Número de modo m	Índice efectivo $n_m = n_1 \sin \theta_m \pm 0.0001$
0	2.8621
1	2.8582
2	2.8522
3	2.8439
4	2.8331
5	2.8201

Tabla 4.1: Valor de los índices efectivos para los primeros 6 modos para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle$ implantados con carbono a fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección a (dirección del índice de refracción extraordinario).

Número de modo m	Índice efectivo $n_m = n_1 \sin \theta_m \pm 0.0001$
0	2.5813
1	2.5774
2	2.5708
3	2.5614
4	2.5493
5	2.5347

Tabla 4.2: Valor de los índices efectivos para los primeros 6 modos para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle$ implantados con carbono a fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección b (giro de 90° en sentido anti-horario quedando en el eje del índice de refracción ordinario)

Número de modo m	Índice efectivo $n_m = n_1 \sin \theta_m \pm 0.0001$
0	2.6810
1	2.6774
2	2.6718
3	2.6638
4	2.6540
5	2.6414

Tabla 4.3: Valor de los índices efectivos para los primeros 6 modos para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle$ implantados con carbono a fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en la dirección c (giro de 45° en sentido anti-horario respecto a la dirección $\langle 110 \rangle$ a)

De esta sección todos los datos en las tres tablas son muy importantes y serán utilizados para comparar los valores que arroje el software Wgii, pero para poder utilizar el programa Wgii es necesario conocer la distribución del daño producido por la implantación por lo que el paso a seguir es hacer las simulaciones de la colisión con el programa SRIM.

4.2. SRIM

Con el software SRIM se hizo una simulación de la implantación de iones de carbono en rutilo, los datos de la simulación fueron: iones de carbono con número atómico 6 y número de masa 12 y una energía de implantación de 7 MeV sobre una capa de rutilo con densidad de 4.26 gr/cm^3 y un espesor de $5 \mu\text{m}$, se obtuvo la distribución de trayectorias para 5 000 iones de la imagen 4.1:

El software SRIM calcula la distribución del daño producido por los iones en el material ("Detailed Calculation with full Damager Cascades")(ver Imagen 4.2), obteniendo el valor máximo y usando la ecuación (2.54) se puede calcular el factor de desplazamiento por átomo (dpa), para una implantación de iones de carbono en rutilo (TiO_2) con una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ y energía de 7 MeV .

El valor de desplazamientos por átomo (dpa) que se obtuvo fue:

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

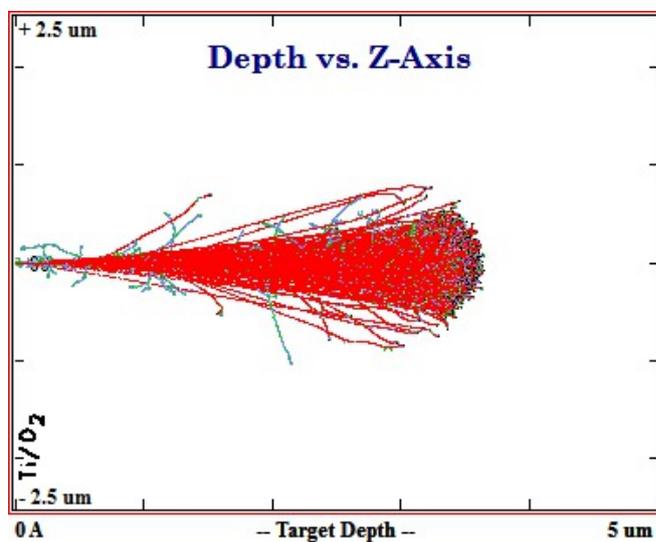


Figura 4.1: Simulación de las trayectorias en la implantación de iones de carbono a 7 MeV sobre una placa de rutilo, hecha con el software SRIM.

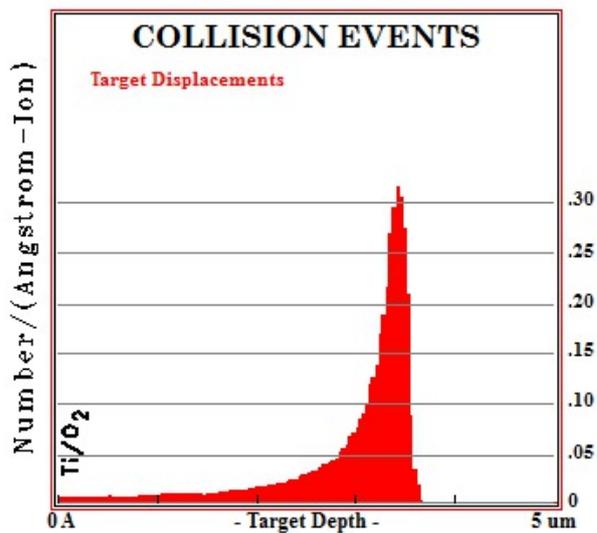


Figura 4.2: Distribución del daño producido por iones de carbono de 7 MeV y afluencia de 1×10^{15} en rutilo, simulación hecha por software SRIM.

$$dpa = \frac{0.32x10^{23}}{3(3.18x10^{22})} = 0.335 \quad (4.1)$$

Igualmente de la imagen 4.2 la profundidad a la que se alcanza el valor máximo de daño es de $3.83\mu m$, con lo cual la guía de onda creada tiene un espesor de:

$$\delta = (3.83 \pm 0.16) \mu m \quad (4.2)$$

Una vez teniendo los índices de refracción efectivos dados por Metricon y su respectivo orden de modo se tiene todo lo necesario para hacer las gráficas de curvas de modos y así determinar el ancho de la guía experimentalmente y el cambio del índice de refracción de la guía en cada una de las 3 direcciones ($\langle 110 \rangle$ a, $\langle 110 \rangle$ b y $\langle 110 \rangle$ c).

4.3. Curva de modos

El objetivo de hacer la curva de modos es determinar el índice de refracción de la guía en cada una de las direcciones de estudio y calcular que tanto cambio este valor debido a la implantación de iones.

Con los índices de refracción efectiva determinados experimentalmente con el Metricon (Ver tablas 4.1,4.2,4.3) se puede usar la ecuación (2.31) para obtener el valor de n_1 o índice de refracción de la guía después de recibir el daño producido por los iones de carbono en cada una de las direcciones.

La ecuación (2.31) tiene la forma $y = ax + b$ es decir de una línea recta donde:

$$\begin{aligned} y = n_m^2 & & a = - \left(\frac{\lambda}{2\delta} \right)^2 \\ x = (m + 1)^2 & & b = n_1^2 \end{aligned}$$

Lo cual motiva a hacer un ajuste lineal por el método de mínimos cuadrados y el valor de la ordenada al origen equivaldrá al índice de refracción de la guía y con la pendiente de la recta se puede determinar el ancho de la guía.

En el manejo de las incertidumbres se tuvieron dos métodos; para la incertidumbre en el ajuste por mínimos cuadrados se dio la incertidumbre propia de este método y después para determinar la incertidumbre de n_1 y δ se dio por el método de la derivada.

Recordando que la longitud de onda del láser utilizado fue de $\lambda = 633nm$ y usando las gráficas de curvas de modos A.6, A.7 y A.8. Los valores de índice de refracción efectivo de la guía se muestran en la siguiente tabla:

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Orientación	$\delta(\mu m)$	n_1
$\langle 110 \rangle$ a	4.347 ± 0.039	(2.8665 ± 0.0004)
$\langle 110 \rangle$ b	4.347 ± 0.049	(2.5865 ± 0.0006)
$\langle 110 \rangle$ c	4.616 ± 0.045	(2.6852 ± 0.0004)

Tabla 4.4: Valores de ancho de la guía (δ) e índice de refracción de la guía n_1 calculados por las gráficas de curva de modos (gráficas [A.6](#), [A.7](#), [A.8](#)).

4.4. Wgii

Usando los valores obtenidos del análisis de la curva de modos de la tabla [4.4](#), se calcularon los diferentes índices de refracción efectivos en el software Wgii por el método de reflectividad. Se compararon los valores teóricos (dados por los cálculos en Wgii) y experimentales (dados por el análisis en Metricon).

La forma en cómo se ingresan los datos al software Wgii se explica en la sección "*Diseño experimental-Software Wgii*", se modificó a tanteo el valor del índice refractivo del Buffer a modo de minimizar las diferencias entre los índices de refracción teóricos y experimentales.

Los valores que se dieron para el ajuste en Wgii fueron:

Orientación	Índ. ref. Plateau	Índ. ref. Buffer	Índ. ref. Barrera	Range (μm)	Barrera
$\langle 110 \rangle$ a	2.8621	2.8636	2.8201	3.80	0.0420
$\langle 110 \rangle$ b	2.5813	2.5831	2.5347	3.80	0.0466
$\langle 110 \rangle$ c	2.6810	2.6826	2.6414	3.83	0.0396

Tabla 4.5: Valores ingresados al software Wgii para calcular los índices de refracción efectivos teóricamente por el método de reflectividad.

Los datos que fueron iguales para cada una de las tres orientaciones son:

- Thickness Plateau (μm) = 0.5
- Halfwidth Buffer (μm) = 0.2
- Halfwidth 1 Barrera = 0.4

- Exponent = 2
- Steps = 50

Uno de los tres perfiles ajustados se muestra en la siguiente gráfica:

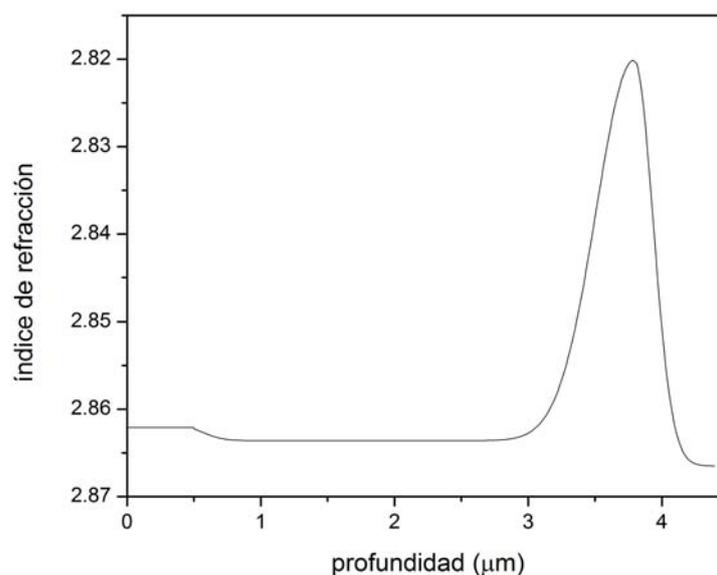


Figura 4.3: Perfil de índices de refracción en la dirección $\langle 110 \rangle$ a dependiente de la profundidad de la guía de ondas para el calculo en el software wgii.

Este perfil muestra la dependencia entre la profundidad del material y el índice de refracción, suele colocarse el eje del índice de refracción en sentido decreciente para acentuar la idea de barrera óptica. El perfil se divide en tres zonas de izquierda a derecha: la primera se llama plateau, la segunda bufer y la tercera es la barrera.

En el caso de la dirección $\langle 110 \rangle$ a (dirección del índice de refracción extraordinario) para una muestra de rutilo implantada con iones de carbono a una afluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ se obtuvo la siguiente tabla:

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Modo	Índice efectivo experimental ± 0.0001	Índice efectivo teórico	Diferencia
0	2.8621	2.8621	0.0000
1	2.8582	2.8578	0.0004
2	2.8522	2.8510	0.0012
3	2.8439	2.8419	0.0020
4	2.8331	2.8309	0.0022
5	2.8201	2.8179	0.0022

Tabla 4.6: Comparación entre los índices de refracción efectivos experimentales y teóricos (determinados por el software Wgii en la dirección $\langle 110 \rangle$ a.

Para la dirección $\langle 110 \rangle$ b, correspondiente al eje del índice de refracción ordinario se tiene:

Modo	Índice efectivo experimental ± 0.0001	Índice efectivo teórico	Diferencia
0	2.5813	2.5814	0.0001
1	2.5774	2.5767	0.0007
2	2.5708	2.5692	0.0016
3	2.5614	2.5591	0.0023
4	2.5493	2.5468	0.0025
5	2.5347	2.5324	0.0023

Tabla 4.7: Comparación entre los índices de refracción efectivos experimentales y teóricos (determinados por el software Wgii en la dirección $\langle 110 \rangle$ b.

Para la dirección $\langle 110 \rangle$ c (a 45° en sentido anti-horario del eje de índice de refracción extraordinario) los valores obtenidos son:

Modo	Índice efectivo experimental ± 0.0001	Índice efectivo teórico	Diferencia
0	2.6810	2.6810	0.0000
1	2.6774	2.6766	0.0008
2	2.6718	2.6696	0.0022
3	2.6638	2.6602	0.0036
4	2.6540	2.6487	0.0053
5	2.6414	2.6352	0.0062

Tabla 4.8: Comparación entre los índices de refracción efectivos experimentales y teóricos (determinados por el software Wgii en la dirección $\langle 110 \rangle c$).

Después de tener los ajustes teóricos de los índices de refracción efectivos se procede a calcular la curva de modos pues esta gráfica nos brinda información acerca de cuánto se modificó el índice de refracción ordinario y extraordinario debido a la implantación de iones. Esta medida indirectamente indica la calidad de la guía de onda en esa dirección pues a un mayor cambio en el índice de refracción la guía es mejor, aunque aún no se conozca el límite de la afirmación anterior.

Una vez encontrado el valor del cambio del índice de refracción debido a la implantación de iones y haciendo la diferencia entre el índice de refracción de la guía y la barrera en el ajuste Wgii se puede concluir que la mejor dirección de la guía de onda es la dirección $\langle 110 \rangle$ en el eje del índice de refracción ordinario pues su valor de barrera (ver A.9) es el mayor de los tres.

Discusión y Conclusiones

La implantación de iones en cristales permite la creación de guías de onda.

De acuerdo a la gráfica (A.9), para implantaciones de carbono en el plano $\langle 110 \rangle$ de rutilo con una afluencia de $1 \times 10^{15} \text{iones/cm}^2$. La dirección donde se produce la mejor guía es en el eje de índice de refracción extraordinario.

Debido a que la luz usada en el láser del Metricon es eléctricamente polarizada plana; el índice de refracción ordinario sólo se debe observar en una dirección (ver imagen A.2), para el resto de los ángulos se tiene el efecto del índice de refracción extraordinario. Sin embargo, en los espectros de guías de onda (ver imagen A.1 y A.3) se observa una pequeña elevación cercana al valor de 2.58; se cree que se debe a la dispersión de la luz dentro del prisma del Metricon ó a efectos del daño que producen los iones en el material.

Comparando los resultados de esta tesis y de la tesis (5), para la cara $\langle 100 \rangle$ (A.11) con misma afluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ en iones de carbono de 7 MeV y ancho de guía similar; se concluye que la mejor orientación del cristal para generar una guía de onda es la $\langle 110 \rangle$ en la dirección del índice de refracción ordinario.

El paso de iones cambia las propiedades de un material. En un caso particular, el uso de iones de carbono en rutilo a una afluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ y energía de 7MeV modificó el índice de refracción ordinario de $n_0 = 2.5849$ a $n_0 = 2.5865$ y el índice de refracción extraordinario cambio de $n_e = 2.8656$ a $n_e = 2.8665$. Estos valores se pueden ver al comparar la gráfica A.5 y las gráficas de curvas de modos A.6 y A.7.

La calidad de una guía de onda óptica depende en un grado menor del ion y material utilizado, si depende fuertemente de la afluencia que se usó en la implantación pues entre mayor sea está, mayor será el nivel de daño (dpa) en el material y será mejor la calidad de la guía, sin embargo existe un limite de dpa pues al sobrepasarlo ya no solo hay vacancias sino ya hay daño estructural mayor.

5. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

Después de comparar los índices de refracción efectivos teóricos (calculados por Wgii) y experimentales (obtenidos por Metricon), se observa que el error más grande es de 0.0062 correspondiente al 0.23 % del valor experimental lo que genera una gran confiabilidad en el software Wgii y las simulaciones de SRIM.

Dependiendo la dirección donde se haga incidir el láser los efectos del índice de refracción ordinario y extraordinario estarán ambos presentes excepto en sus respectivas alineaciones totales donde uno de ellos desaparecerá.

El ancho de la guía dado por la curva de modos no es parecido al dicho por la simulación en SRIM, recordando el software SRIM usa el método de Monte Carlo para generar las trayectorias de los iones y la curva de modos usa la ecuación trascendental (2.29) donde se hizo la aproximación que el índice de refracción de la guía (n_1) es igual al índice de refracción de los modos (n_m), tal vez esta aproximación no sea tan buena y los términos correspondientes a efectos de reflexión entre guía y sustrato o guía y aire comiencen a jugar un papel importante.

A.1. Metricon

En este apéndice se muestran las gráficas de intensidad vs índice de refracción efectivo dadas por el aparato metricon. Las muestras analizadas son de rutilo en orientación $\langle 110 \rangle$ implantados con iones de carbono a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

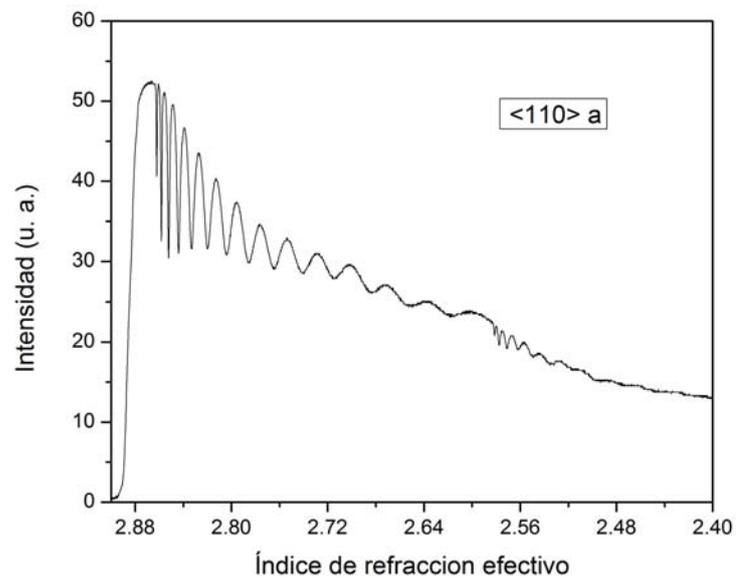


Figura A.1: Intensidad vs Índice de refracción efectivo para rutilo en la dirección del eje de índice de refracción extraordinario ($\langle 110 \rangle a$).

Juntando los tres espectros anteriores.

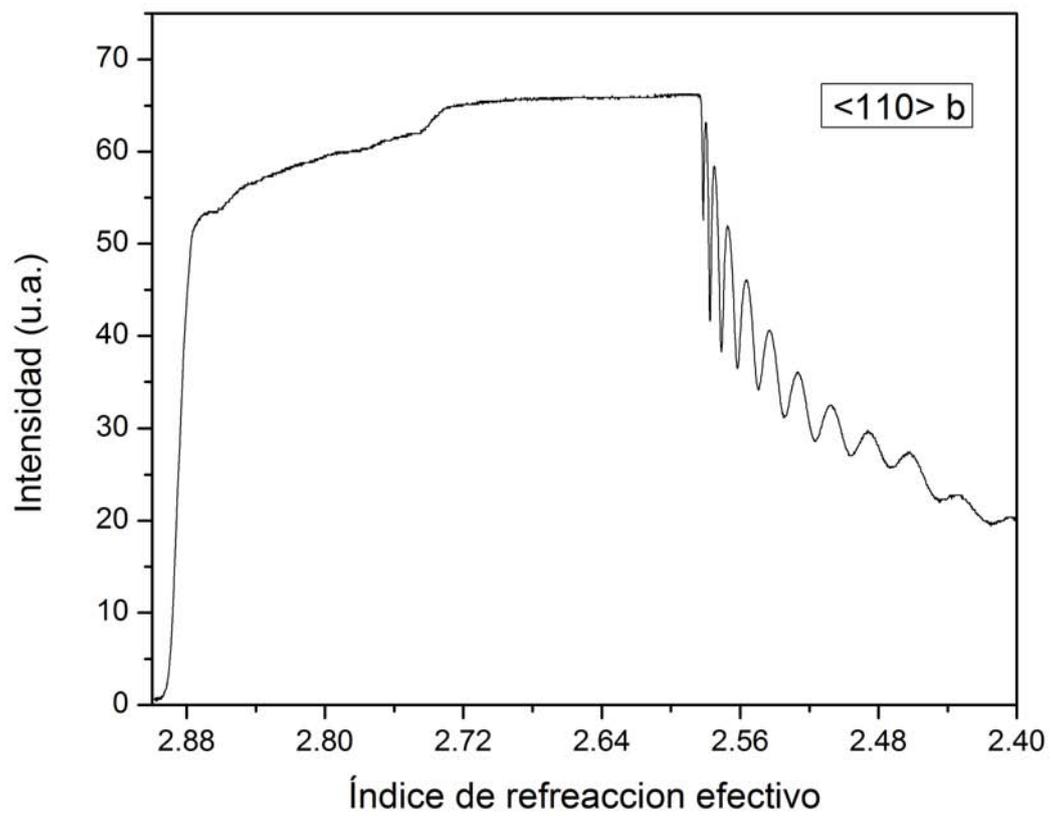


Figura A.2: Intensidad vs Índice de refracción efectivo para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle b$ (dirección en el eje del índice de refracción ordinario) implantado con iones de carbono a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, datos experimentales de Metricon.

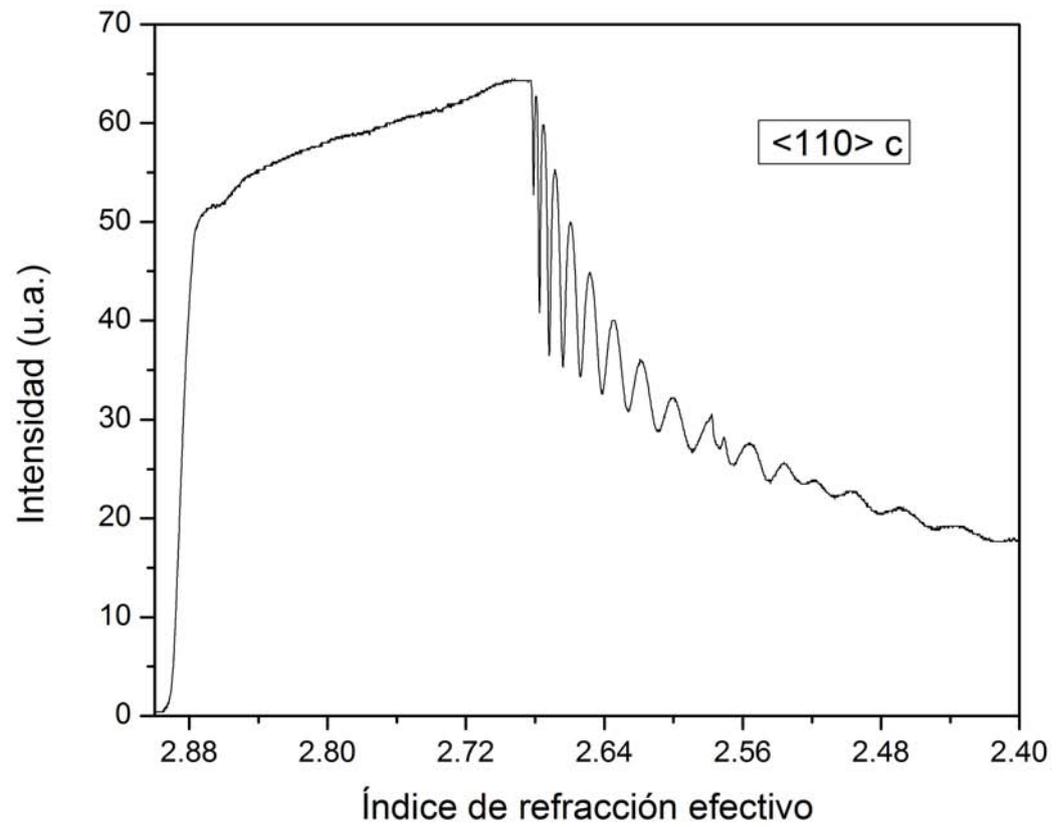


Figura A.3: Intensidad vs Índice de refracción efectivo para rutilo en orientación $\langle 110 \rangle c$ (dirección a 45° del eje del índice de refracción ordinario y extraordinario) implantado con iones de carbono a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, datos experimentales de Metricon.

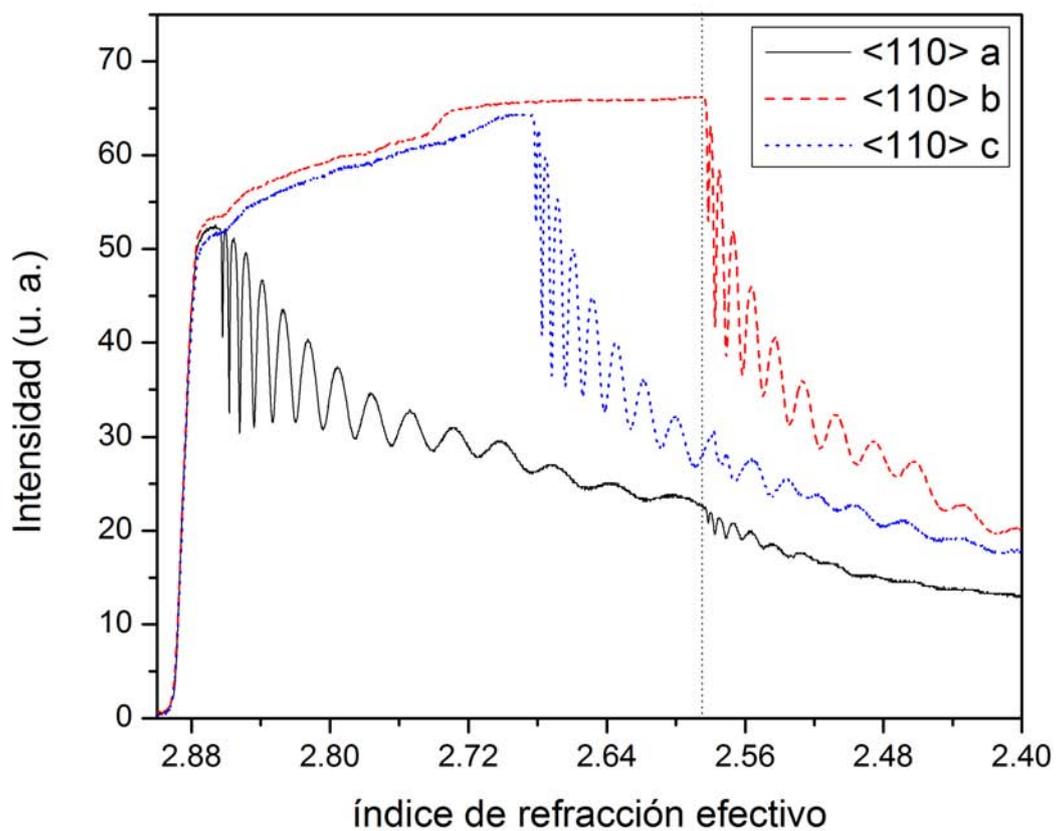


Figura A.4: Espectros de Intensidad (u. a.) vs índice de refracción efectivo en las direcciones: $\langle 110 \rangle a$ eje extraordinario, $\langle 110 \rangle b$ eje ordinario y $\langle 110 \rangle c$ giro de 45° respecto al eje del índice de refracción ordinario; datos generados por Metricon.

Los mismos espectros anteriores hechos con Metricon pero antes de la implantación son los siguientes:

Esto se hizo para medir el valor de los índices de refracción ordinario, extraordinario y a 45° .

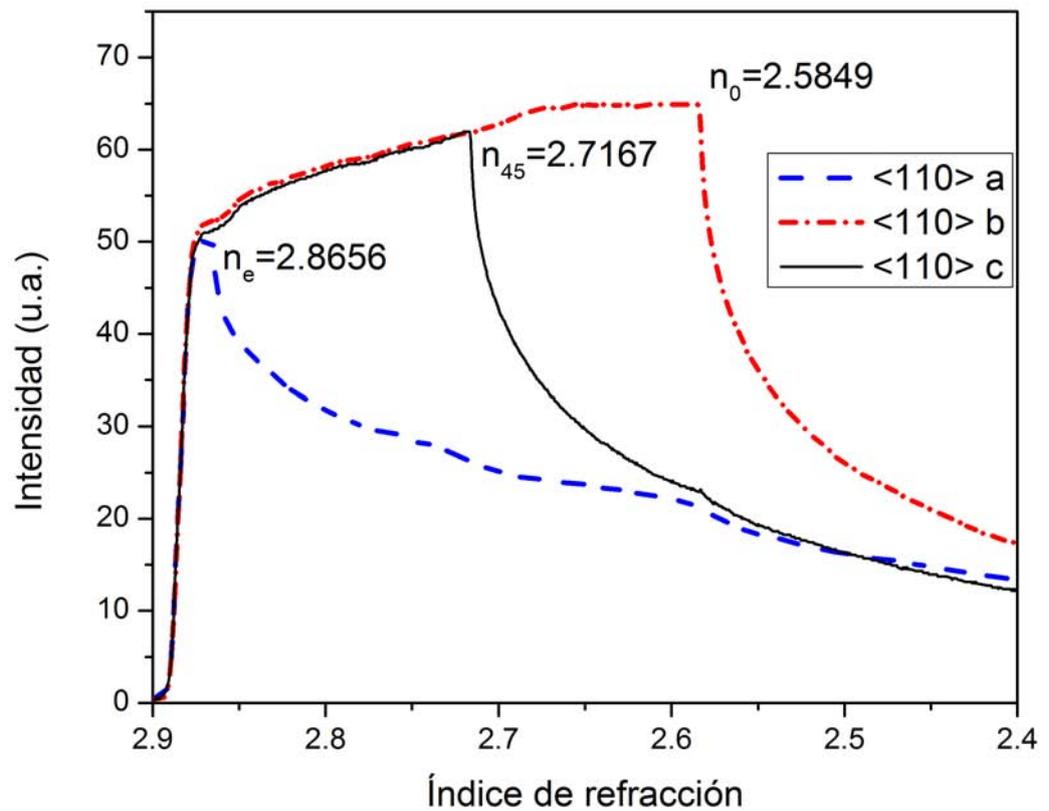


Figura A.5: Perfiles de índice de refracción para rutilo $\langle 110 \rangle$ antes de la implantación, resaltan los valores de los índices ordinario, extraordinario y a 45° .

A.2. Curva de modos

Las gráficas hechas para la curva de modos se muestran a continuación, en ellas el valor de m significa el orden del modo y n_m el índice de refracción efectivo correspondiente al modo m .

Los datos se tomaron de las tablas (4.1), (4.2) y (4.3)). Los valores se elevaron al cuadrado para ser consistentes con la ecuación de curva de modos (2.31). Para analizar las gráficas se usó el método de mínimos cuadrados para ajustar una recta.

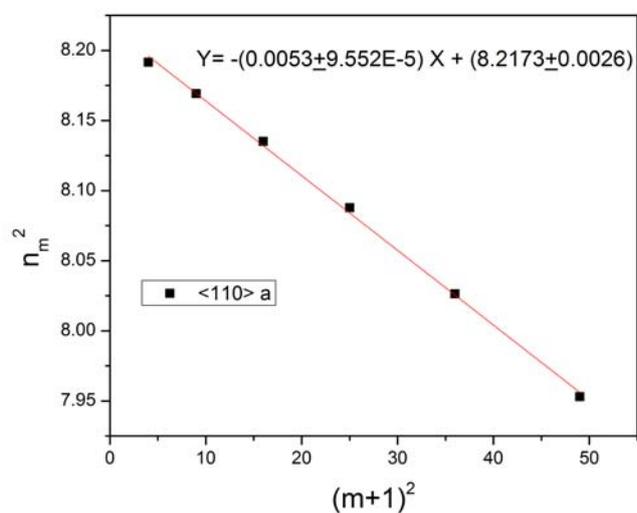


Figura A.6: Curva de modos para implantaciones con iones de carbono en rutilo a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ en la dirección $\langle 110 \rangle a$ (dirección del eje del índice de refracción extraordinario). Se ajustó una recta por el método de mínimos cuadrados.

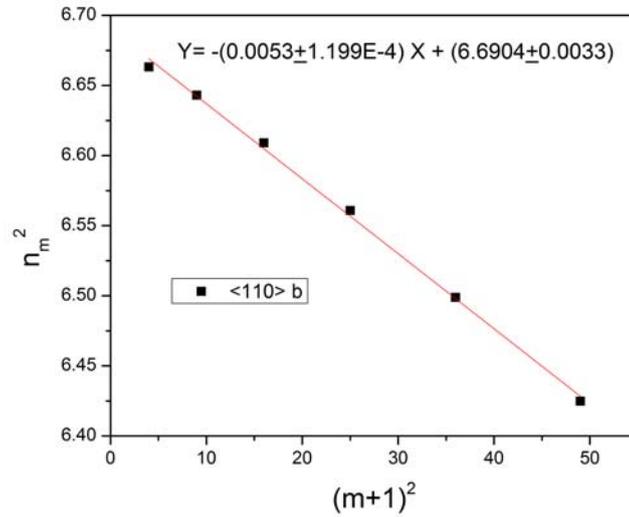


Figura A.7: Curva de modos para implantaciones con iones de carbono en rutilo a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ en la dirección $\langle 110 \rangle b$ (dirección del eje del índice de refracción ordinario). Se ajustó una recta por el método de mínimos cuadrados.

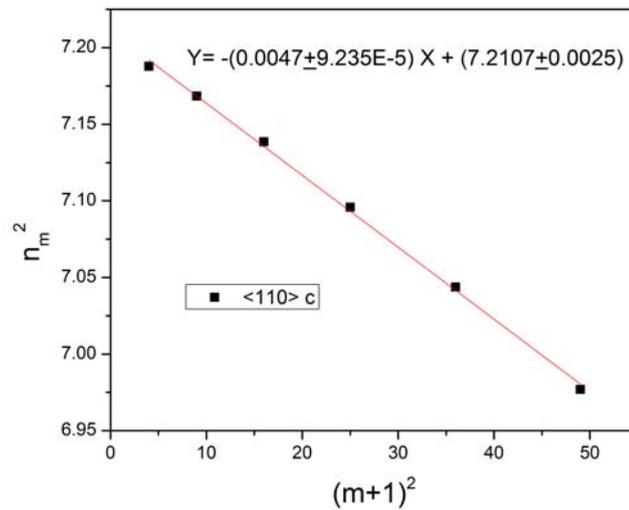


Figura A.8: Curva de modos para implantaciones con iones de carbono en rutilo a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ en la dirección $\langle 110 \rangle c$ (dirección a 45° respecto al eje de índice de refracción extraordinario). Se ajustó una recta por el método de mínimos cuadrados.

A.3. Wgii

Los valores que se dieron para el ajuste en Wgii fueron:

Orientación	Índ. ref. Plateau	Índ. ref. Buffer	Índ. ref. Barrera	Range (μm)	Barrera
$\langle 110 \rangle$ a	2.8621	2.8636	2.8201	3.80	0.0420
$\langle 110 \rangle$ b	2.5813	2.5831	2.5347	3.80	0.0466
$\langle 110 \rangle$ c	2.6810	2.6826	2.6414	3.83	0.0396

Tabla A.1: Valores ingresados al software Wgii para calcular los índices de refracción efectivos teóricamente por el método de reflectividad.

Los datos que fueron iguales para cada una de las tres orientaciones son:

- Thickness Plateau (μm) = 0.5
- Halfwidth Buffer (μm) = 0.2
- Halfwidth 1 Barrera = 0.4
- Exponent = 2
- Steps = 50

La gráfica comparativa entre los valores de la barrera usando los ajustes de perfil y la diferencia entre el índice de refracción de la guía y la barrera (Tabla A.1) es la siguiente, para las 3 direcciones de estudio.

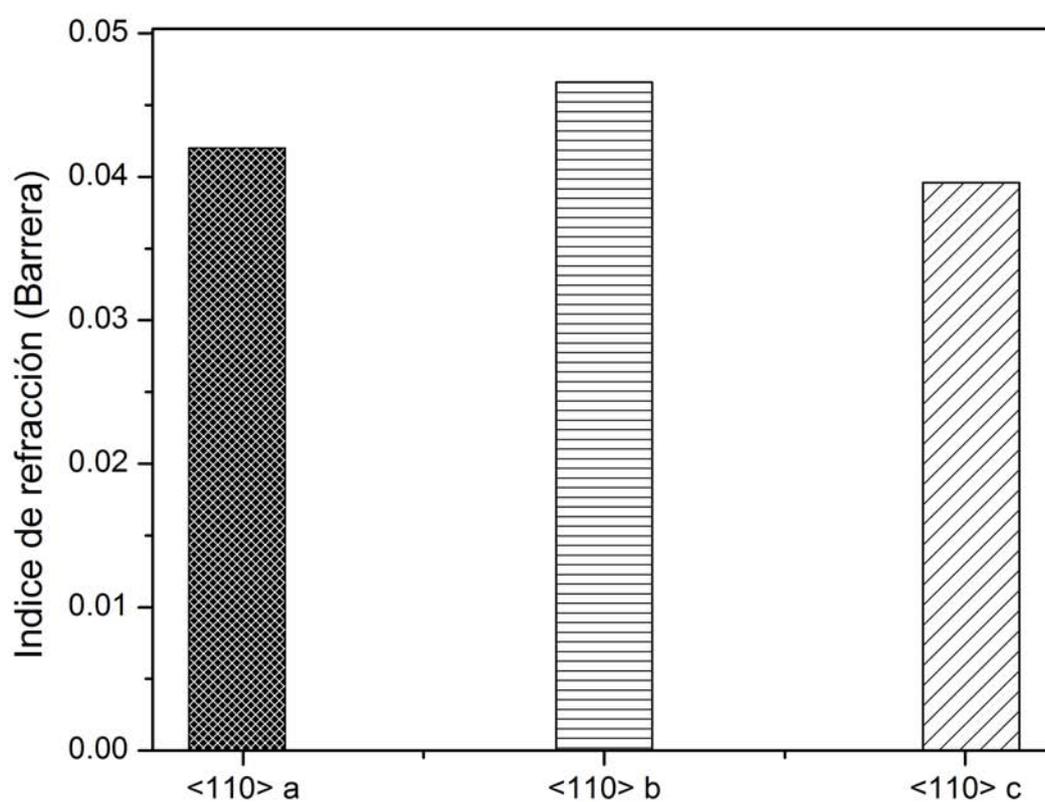


Figura A.9: Valor de las barreras por el software Wgii para las direcciones $\langle 110 \rangle$ a, $\langle 110 \rangle$ b, $\langle 110 \rangle$ c.

A.4. Comparación

Estas dos gráficas son el resultado del estudio de implantación con iones de carbono con fluencia de $1 \times 10^{-15} \text{cm}^{-2}$ en rutilo para el plano $\langle 100 \rangle$ en dirección del eje del índice de refracción extraordinario. Reportadas en la tesis de licenciatura del Físico Julian Mejia Morales bajo la tutela del Dr. Jorge Eduardo Rickards Campbell (5).

Gráfica 5 Gráfica de intensidad vs índice de refracción efectivo para C implantado en rutilo.

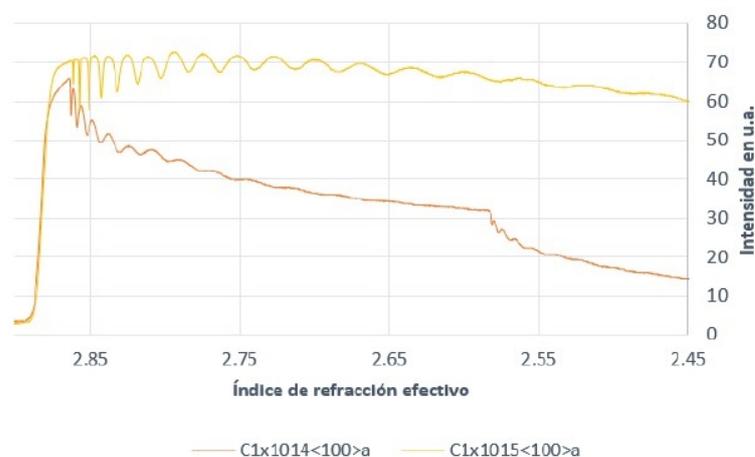


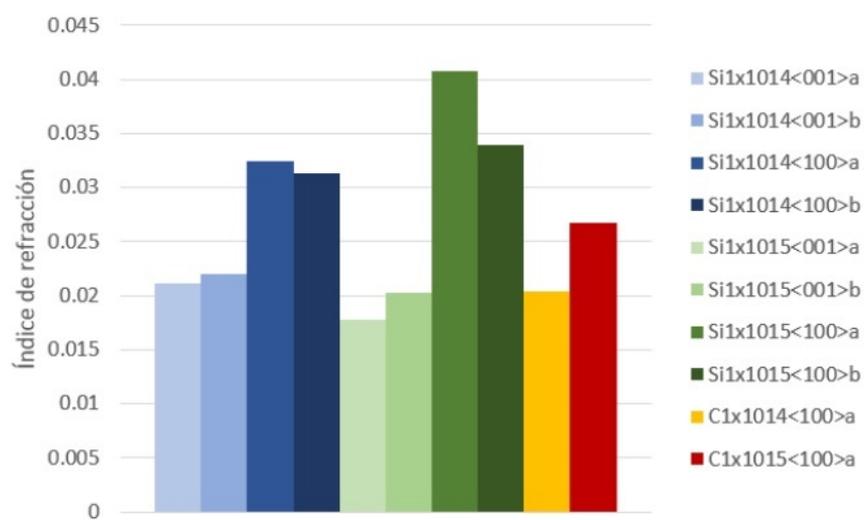
Figura A.10: Espectros del Metricon para la dirección $\langle 100 \rangle$ a de rutilo implantado con carbono a una fluencia de $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$.

Los valores reportados en la tesis (5) para el nivel de la barrera son:

Orientación	Afluencia	Barrera
$\langle 100 \rangle$ a	1×10^{14}	0.0204
$\langle 100 \rangle$ a	1×10^{15}	0.0267

Tabla A.2: Valores de la barrera para rutilo en la dirección $\langle 100 \rangle$.

La siguiente imagen muestra los valores de barrera para la cara $\langle 100 \rangle$ correspondientes al espectro de la imagen anterior (A.10).

Gráfica 2 Valores de las barreras de todos los cristales.**Figura A.11:** Valores de barrera para la orientación $\langle 100 \rangle$ en dirección del eje del índice de refracción ordinario.

Bibliografía

- [1] J. Caro. *Guías de onda por irradiación con Iones de alta Energía. Optimización y Aplicaciones*. PhD thesis, Universidad Autónoma de Madrid, Departamento de Física de Materiales, 2010. [XI](#), [3](#), [8](#), [10](#), [11](#)
- [2] P. D. Townsend, P. J. Chandler, and L. Zhang. *Optical Effects of Ion Implantation*. Cambridge Studies in Modern Optics, 2009. [XI](#), [13](#), [14](#), [15](#), [17](#), [18](#), [32](#)
- [3] J. Rickards. *La física de las radiaciones en materia*. Dirección General de Divulgación de la Ciencia, México, 2001. [XI](#), [20](#), [21](#), [23](#), [25](#)
- [4] Metricon. <http://www.metricon.com/application-overview/measuring-indexbirefringence-of-polymer-materials/>. Metricon Corporation, revisada 22/04/2015. [XI](#), [29](#), [30](#)
- [5] J. Mejia. *Caracterización de guías de onda generadas por implantación de Iones de Si y C*. Tesis Licenciatura en Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 2014. [XI](#), [2](#), [31](#), [45](#), [56](#)
- [6] Feng Chen and Xue-Lin Wang ,Ke-Ming Wang. *Development of ion-implanted optical waveguides in optical materials: A review*. ELSEVIER, ScienceDirect, Optical Materials, 15/09/2006, english pp 1523-1542, www.paper.edu.cn, 2006. [1](#)
- [7] J. Rickards, R. Trejo-Luna, E. Flores-Romero, and J. I. Golzarri ,G. Espinosa. *The production of optical waveguides by ion implantation: the case of rutile*. Revista Mexicana de Física, 31/08/2006, english, pp 72-74, . [2](#)
- [8] J. Rickards, R. Trejo-Luna, and E. Flores-Romero ,J. M. Hernández. *Optical Modification of Ion Beam Implanted Materials- Optical Waveguides Anisotropy in Rutile*. ACCAPP.2013, Eleventh International Topical Meetingon Nuclear Applications of Accelerators, english, Bruges, Belgium, . [2](#)
- [9] M.L. Caballero-Calero O. Ynsa M. D. García-Cabañes A. Toulemonde M. Trautmann C.Agulló-López F. (2009). J., Crespillo. *Thick optical waveguides in lithium niobate induced by swift heavy ions (10 MeV/amu) at ultralow fluences*. Opt. Express Vol.17, No.26, pp.24175-24182, ISSN 1094-4087., 2009. [3](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [10] S. Fernández. *Óptica Integrada, primeros pasos*. Universidad de Oviedo, 1992. 9
- [11] M. Dietrich. *Theory of Dielectric Optical Waveguides*. Academic Press, INC, 1974. 10
- [12] G. Lifante. *Integrated photonics fundamentals*. Wiley, 2003. 10, 12
- [13] S. Gasiorowicz. *Quantum Physics*. University of Minnesota, 1974. 14
- [14] NIST. <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C1317802>. U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America, revisada 03/03/2015, 2011. 18
- [15] C. Klein and S. Cornelius ,Hurlbut. *Manual de Minerología*. Reverté S. A., México, 2003. 18
- [16] W. Billmeyer Fred. *Ciencia de los Polimeros*. Reverté, 2004. 19
- [17] W. E. Burcham. *Física Nuclear*. Reverte, España, 1974. 22
- [18] H. A. Bethe and R. F. Bacher. *Nuclear Physics, A. Stationary States of Nuclei*. Cornell University, USA, 1936. 22