



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ESPECTROSCOPIA DE RAYOS X INDUCIDOS CON IONES Y EMITIDOS EN DIRECCIÓN RASANTE A LA SUPERFICIE

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
F Í S I C O
P R E S E N T A

Rolando Tavera Sánchez

DIRECTOR DE TESIS:

DR. LUIS RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ



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.

FACULTAD DE CIENCIAS



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

División de Estudios Profesionales

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales
Facultad de Ciencias
P r e s e n t e .

Por este medio hacemos de su conocimiento que hemos revisado el trabajo escrito titulado:

"Espectroscopía de rayos X inducidos con iones y emitidos en dirección rasante a la superficie"

realizado por **Tavera Sánchez Rolando**, con número de cuenta **098510335**, quien opta por titularse en la opción de **Tesis** en la licenciatura en **Física**. Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Propietario	Dr.	José Alvaro Chávez Carvayar	
Tutor(a) Propietario	Dr.	Luis Rodríguez Fernández	
Propietario	Fís.	Luis Flores Morales	
Suplente	Dra.	Beatriz Elizabeth Fuentes Madariaga	
Suplente	Dra.	Alejandra López Suárez	

Atentamente
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Ciudad Universitaria, D.F., a 22 de noviembre del 2007.
**LA COORDINADORA DEL COMITÉ DE TITULACIÓN
DE LA LICENCIATURA EN FÍSICA**

M. EN C. ALICIA ZARZOSA PÉREZ
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Señor sinodal: antes de firmar este documento, solicite al estudiante que le muestre la versión digital de su trabajo y verifique que la misma incluya todas las observaciones y correcciones que usted hizo sobre el mismo.

A mi padre Bernabé

Esto es por ti jefe, por brindarme el apoyo necesario durante toda la carrera, incluyendo la etapa de la huelga.

A mi madre Josefina

Querida madre, te agradezco mucho el apoyo y los consejos durante mi estancia en la universidad.

A Angelita

Que me diste el último aliento en esta aventura. Gracias.

Agradecimientos

A la Universidad Nacional Autónoma de México y a los profesores que me brindaron su conocimiento.

A mi director de tesis.

A mis sinodales por la atenciones brindadas.

A mis compañeros:

Armando, Miguel Ángel, Eduardo y Rogelio, les agradezco me hayan soportado los primeros semestres. Después de que me dejaron ya no fue lo mismo. Y muy en especial a María, mi querida compañera universitaria.

Contenido

Capítulo 1. Introducción	1-1
Capítulo 2. Índice de refracción en materiales densos	2-1
2.1 Campos electromagnéticos en medios materiales	2-1
2.2 Ondas electromagnéticas en la materia	2-6
2.3 Descripción microscópica de medios materiales	2-12
2.4 Coeficientes de reflexión y transmisión	2-21
2.5 El vector de Poynting y la irradiancia	2-27
Capítulo 3. Ondas electromagnéticas dentro de películas delgadas	3-1
3.1 Condiciones para los campos eléctricos	3-1
3.2 Campos electromagnéticos	3-4
3.3 Caso para una sola película sobre un sustrato	3-9
3.4 Intensidad en un punto fuera de la película	3-16
Capítulo 4. Inducción de rayos X: XRF, PIXE, EDS	4-1
4.1 Principios físicos de la inducción de rayos X	4-1
4.2 Emisión de rayos X en películas delgadas	4-4
4.3 Dispositivos experimentales para la inducción de rayos X (XRF, PIXE, EDS)	4-5
4.4 Radiación de fondo	4-9
Capítulo 5. Simulación	5-1
5.1 Cálculo del índice de refracción para rayos X	5-1
5.2 Intensidad en función del ángulo α	5-4
5.3 Análisis de la transmitancia	5-5
5.4 Análisis de las reflexiones	5-12
5.5 Efectos de la absorción	5-20
5.6 Intensidades de los rayos X rasantes en función del ángulo α	5-23
5.7 Efecto debido al área de un detector real	5-52
Capítulo 6. Conclusiones	6-1
Apéndice	
A.1 Ángulos Críticos	A-1

Resumen

En esta tesis se hace un estudio teórico de la intensidad de los rayos X inducidos en películas delgadas y emitidos en direcciones rasantes a la superficie en la región cercana al ángulo crítico. En esta zona se presenta un aumento en la intensidad de los rayos X debido al efecto de interferencia constructiva de las ondas reflejadas y transmitidas (el cálculo del vector de Poynting siempre mantiene la conservación de la energía). El objetivo principal de este trabajo es describir los efectos físicos involucrados y aplicarlos en la realización de cálculos sobre la emisión de rayos X inducidos en diversos tipos de películas delgadas y observados en direcciones a ángulos rasantes a las superficies. De aquí se busca determinar qué sistemas son los más convenientes para poder observar estos efectos con los dispositivos experimentales existentes en los laboratorios de los aceleradores de partículas del IFUNAM.

En el capítulo 1 de esta tesis se da una introducción a los efectos que suceden al observar rayos X emitidos en direcciones rasantes a la superficie y los objetivos de la tesis. En el capítulo 2 se revisan los conceptos de los campos electromagnéticos en medios materiales para aplicarlos en la determinación de los índices de refracción para ondas en la región de los rayos X, así como los coeficientes de transmisión y reflexión. En el capítulo 3 se estudian los efectos de interferencia generados por ondas electromagnéticas en sistemas de películas delgadas y que son los responsables de los fenómenos generados en la región de rayos X. Aquí se desarrolla, de una manera detallada, la deducción de la expresión matemática para la intensidad de rayos X en función del ángulo de emisión. En el capítulo 4 se hace una revisión de los procesos con los cuales típicamente se inducen rayos X en películas delgadas: fluorescencia (fotones) e irradiación con partículas (electrones y iones). En el capítulo 5 mostramos las simulaciones de los rayos X esperados en diversos sistemas de películas delgadas y se analizan las contribuciones de los diversos factores involucrados. Finalmente en el capítulo 6 se dan las conclusiones en las que se muestra en qué tipo de sistemas de películas delgadas podría ser conveniente probar la viabilidad experimental de esta técnica.

Capítulo 1

Introducción

La caracterización de materiales es cada vez más importante en la ciencia, tecnología e industria. Para conocer las propiedades de los diversos materiales se han ido desarrollando múltiples técnicas y procedimientos [1,2]: desde los tradicionales métodos químicos, mecánicos, eléctricos y ópticos, hasta otros más complejos en cuanto a su instrumentación: microscopía electrónica, espectrometría de masas, resonancia magnética, fluorescencia de rayos X, espectroscopía de electrones Auger, etc. Debido a que todos los métodos presentan ventajas y desventajas, la aplicabilidad de cada uno depende de precisión y de las propiedades particulares que se deseen determinar en un material. De esta manera la conveniencia dependerá de la propiedad que se desee caracterizar y con cuánta precisión.

Para el estudio de películas delgadas se han utilizado diversos métodos que emplean rayos X. Por ejemplo se tiene la difracción de rayos X (XRD, X-ray Diffraction) y la emisión de rayos X característicos inducidos de diversas formas: a) por incidencia de fotones (XRF, X-ray Fluorescence), b) por electrones (EDS, Energy Dispersive Spectroscopy) y c) por iones (PIXE, Particle Induced X-ray Emission). Bajo ciertas condiciones de las películas delgadas a estudiar se ha encontrado la conveniencia de utilizar técnicas que involucran la observación de los rayos X inducidos en direcciones rasantes a la superficie [3]. Como un ejemplo de lo anterior se encuentra la medición del elemento P en aditivos que forman películas muy delgadas sobre sustratos de InP utilizando PIXE [4]. En este caso la detección de los rayos X $K\alpha$ del P, en direcciones rasantes a la superficie, permite atenuar considerablemente aquellos que provienen del sustrato y por tanto registrar solamente los emitidos por la película delgada. Sin embargo la implementación de esta técnica requiere del desarrollo de ciertos sistemas de precisión y calibración muy cuidadosos [5].

También, cuando se observan los rayos X en direcciones rasantes a las superficies de películas delgadas aparecen efectos de interferencia que generan respuestas ondulatorias en la intensidad de los rayos X. Estos efectos están relacionados directamente con las propiedades de las películas delgadas (composición, espesores y densidades), de tal manera que su descripción puede ser de utilidad para la caracterización de las películas [6, 7]. En la figura 1.1 se muestra una imagen tomada de la referencia [6] en donde se indican las intensidades de emisión de rayos X $K\alpha$ del Cr y $L\alpha$ del Au emitidos en el sistema de películas delgadas Cr / Au / Cr / SiO₂ y observados en direcciones rasantes a la superficie. Estas direcciones se indican en función del ángulo α mostrado en el recuadro superior de la figura 1.1a. En ésta se observan los efectos de la interferencia en la intensidad de los rayos X $K\alpha$ del Cr al presentar oscilaciones en función del ángulo α de detección. Sin embargo en el caso de los rayos X $L\alpha$ del Au no se observan estos efectos. Como puede verse, los efectos de interferencia están determinados por las características de los sistemas de películas y de las energías de los

rayos X involucrados. Además, para estos estudios se requiere de dispositivos muy precisos para manipular a la muestra o al detector de los rayos X.

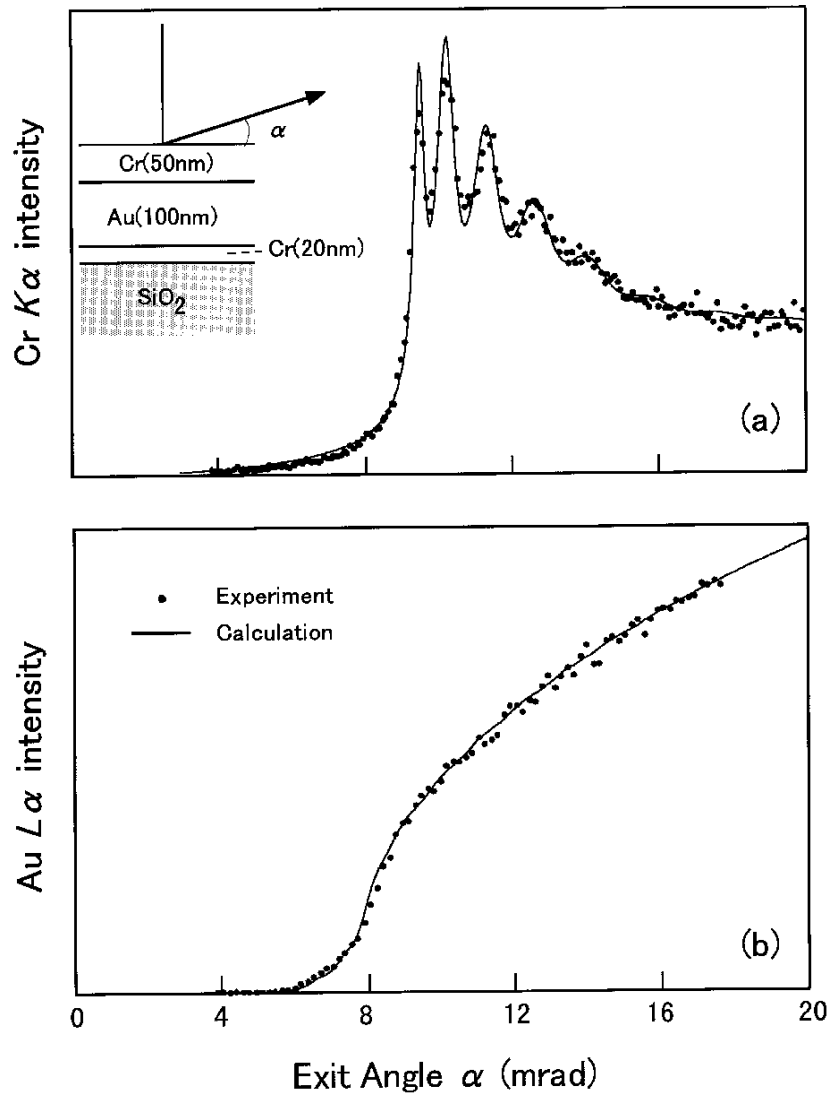


Figura 1.1. Imagen original tomada de la referencia [6] en donde se muestran las intensidades de emisión de los rayos X: (a) $K\alpha$ del Cr y (b) $L\alpha$ del Au emitidos en el sistema de películas delgadas Cr / Au / Cr / SiO_2 y observados en direcciones rasantes a la superficie. Las direcciones se toman con base en el ángulo α indicado en el recuadro de (a).

Cuando se utilizan métodos como PIXE bajo un arreglo experimental típico junto con la detección en direcciones rasantes a la superficie de la muestra, se pueden observar burdamente los efectos de interferencia mencionados. En la figura 1.2 se muestra una imagen tomada de la referencia [8] en donde se indican las intensidades de emisión de los rayos X $M\alpha$ del Au inducidos por PIXE en una película delgada de Au con un espesor de 0.64 nm sobre un sustrato de GaAs. De acuerdo a esta referencia y por el dispositivo

experimental empleado la observación de estos efectos de interferencia a ángulos rasantes se da cuando la muestra está inclinada alrededor de los -45° con respecto a la incidencia del haz de iones. A partir de esto es posible ver el efecto de interferencia en la joroba que tienen los datos experimentales. En este caso, es de esperarse que si se pudiese contar con un dispositivo experimental de manipulación de alta precisión y la detección en un área muy pequeña sería posible observar los efectos de interferencia, tal como se muestran en la figura 1.1.

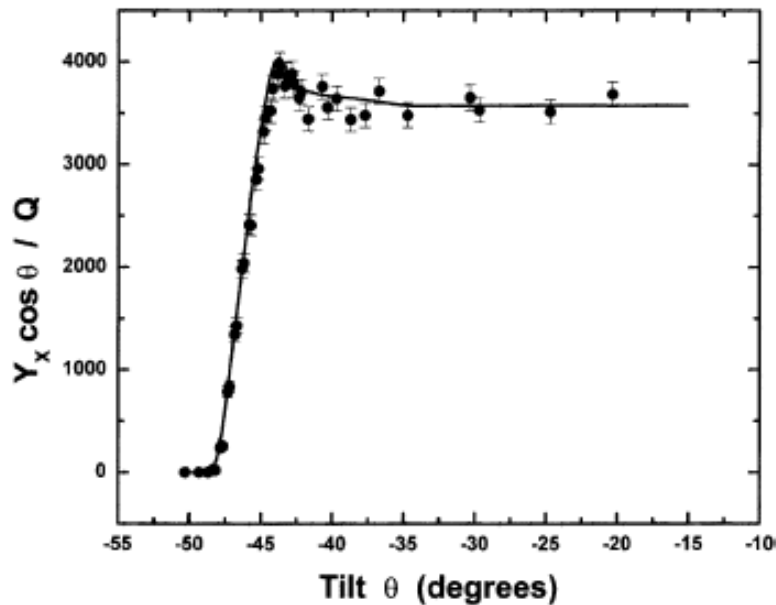


Figura 1.2. Imagen original tomada de la referencia [8] en donde se muestran las intensidades de emisión de los rayos X $M\alpha$ del Au inducidos por PIXE en una película delgada de Au con un espesor de 0.64 nm sobre un sustrato de GaAs. En el eje X se muestra la inclinación de la muestra con respecto a la incidencia del haz, siendo hacia aproximadamente -45° donde se efectúa la observación en ángulos rasantes a la película.

Es importante mencionar que este aumento en la intensidad de los rayos X, que se presenta cerca del ángulo crítico, es debido al efecto de interferencia constructiva de las ondas reflejadas y transmitidas. El cálculo del vector de Poynting siempre mantiene la conservación de la energía [9].

En los laboratorios de los aceleradores de partículas del IFUNAM existe el interés en observar estos fenómenos y evaluar su viabilidad para el análisis de películas delgadas. Sin embargo, estos efectos de interferencia ocurren en sistemas de películas delgadas muy específicos. Por este motivo, si se desea implementarla como una técnica de análisis, el primer paso es averiguar en qué tipo de sistemas de películas delgadas se presentan éstos efectos de interferencia y su aplicabilidad. Así se podrá determinar si vale la pena invertir en la infraestructura necesaria para su implementación experimental en los laboratorios de los aceleradores del IFUNAM.

El objetivo de este trabajo es describir los efectos físicos involucrados y aplicarlos en la realización de cálculos sobre la emisión de rayos X inducidos en diversos tipos de películas delgadas y observados en direcciones a ángulos rasantes a las superficies. De aquí se determinan qué sistemas son los más convenientes para poder aplicar la técnica.

En esta tesis se analizan los diversos factores involucrados en estos efectos a ángulos rasantes. Así, en el capítulo 2 se revisan los conceptos de los campos electromagnéticos en medios materiales para aplicarlos en la determinación de los índices de refracción para ondas en la región de los rayos X, así como los coeficientes de transmisión y reflexión. En el capítulo 3 se estudian los efectos de interferencia generados por ondas electromagnéticas en sistemas de películas delgadas y que son los responsables de los fenómenos generados en la región de rayos X. Aquí se desarrolla, de una manera detallada, la deducción de la expresión matemática para la intensidad de rayos X en función del ángulo de emisión. En el capítulo 4 se hace una revisión de los procesos con los cuales típicamente se inducen rayos X en películas delgadas: fluorescencia (fotones) e irradiación con partículas (electrones y iones). En el capítulo 5 mostramos las simulaciones de los rayos X esperados en diversos sistemas de películas delgadas y se analizan las contribuciones de los diversos factores involucrados. Finalmente en el capítulo 6 se dan las conclusiones en las que se muestra en qué tipo de sistemas de películas delgadas podría ser conveniente probar la viabilidad experimental de esta técnica.

Referencias

- [1] K.A. Robinson and J.F. Robinson. “Análisis instrumental”. Pearson-Prentice Hall. Madrid, 2001.
- [2] D.A. Skoog and J.J. Learly. “Principles of instrumental analysis”. Harcourt Brace College Publishers. Fort Worth, 1992.
- [3] K.Tsuji, M. Huisman, Z. Spolnik, K. Wagatsuma, Y. Mori, R.E. Van Grieken and R.D. Vis. *Spectrochimica Acta Part B* 55 (2000) 1009.
- [4] L. Rodríguez-Fernández, W.N. Lennard, G.R. Massoumi, H. Xia, L.J. Huang, Y. Hung, S. Chang. *Nuclear Instruments and Methods B* 136 (1998) 1191.
- [5] L. Rodríguez-Fernández, W.N. Lennard, H. Xia, G.R. Massoumi. *Applied Surface Science* 103 (1996) 289.
- [6] T. Noma, K. Takada and A. Iida. *X-ray Spectrometry* 28 (1999) 433.
- [7] T. Noma, A. Iida and K. Sakurai. *Physical Review B* 48 (1993) 17524.
- [8] W.N. Lennard, J.K. Kim, L. Rodríguez-Fernández. *Nuclear Instruments and Methods B* 189 (2002) 49.
- [9] M. Tolan. “X-ray Scattering From Soft-Matter Thin Films: Materials Science and Basic Research”. Springer. Berlin, 1999.

Capítulo 2

Índice de refracción en materiales densos.

2.1 Campos electromagnéticos en medios materiales.

Ecuaciones de Maxwell en un medio material.

En un medio material, la presencia de un campo electromagnético produce efectos en los electrones y sus espines, de tal manera que se inducen efectos eléctricos y magnéticos en el interior del mismo material. El tratamiento clásico de los campos eléctrico \mathbf{E} y de inducción magnética \mathbf{B} en medios materiales, considerando cada una de las moléculas del medio, es un problema prácticamente imposible de resolver. Por este motivo el estudio clásico del campo electromagnético en medios materiales se efectúa de una manera promedio considerando los resultados estadísticos del comportamiento molecular del medio material. Así pues, lo importante es el promedio del campo o fuente sobre un volumen grande del material comparado con el tamaño de las moléculas. En estos casos se estará hablando de fenómenos macroscópicos.

En medios materiales las ecuaciones de Maxwell son

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J} \quad (2.1c)$$

y

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.1d)$$

en donde ρ representa la distribución de carga libre y \mathbf{J} el vector de densidad de corriente.

En estas ecuaciones de Maxwell, comparándolas con las del espacio vacío, se han introducido dos nuevas cantidades vectoriales: El vector de desplazamiento eléctrico \mathbf{D} y el vector de campo magnético \mathbf{H} . Las componentes j de estos nuevos vectores están dadas como

$$D_j = E_j + P_j - \sum_i \frac{\partial Q_{ji}}{\partial x_i} + \dots \quad (2.2)$$

y

$$H_j = B_j - M_j + \dots \quad (2.3)$$

en donde las cantidades P_j , M_j , Q_{ji} y demás términos de orden superior representan el desarrollo en momentos multipolares (momento dipolar eléctrico, dipolar magnético, cuadrupolar, etc.) del efecto promedio macroscópico debido a los campos electromagnéticos \mathbf{E} y \mathbf{B} en el material. Las ecuaciones de Maxwell sólo podrán ser resueltas cuando se conozca cómo es la dependencia de \mathbf{D} , \mathbf{H} y \mathbf{J} en función de \mathbf{E} y \mathbf{B} . A esta dependencia se le conoce como ecuaciones constitutivas electromagnéticas del material y se pueden expresar como

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}(\mathbf{E}, \mathbf{B}), \quad (2.4)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{E}, \mathbf{B}), \quad (2.5)$$

y

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}(\mathbf{E}, \mathbf{B}). \quad (2.6)$$

A esta última ecuación constitutiva se le conoce como la ley generalizada de Ohm. Estas ecuaciones constitutivas no necesariamente son sencillas y en algunos casos dependen incluso de la historia pasada (es decir, histéresis), y de otras variables termodinámicas como la temperatura, densidad, etc.

En una gran variedad de casos solamente los términos debidos al momento dipolar resultan ser significativos. En estos casos para describir los efectos electromagnéticos en el material se recurre únicamente a los vectores de polarización eléctrica \mathbf{P} y magnética \mathbf{M} .

El vector de polarización \mathbf{P} de un material es una medida del comportamiento promedio del medio que nos indica el momento dipolar eléctrico resultante promedio por unidad de volumen debido a un campo eléctrico \mathbf{E} dentro del material.

De esta manera el vector desplazamiento \mathbf{D} se define como

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}. \quad (2.7)$$

Entonces claramente se tiene

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{D}}{\epsilon_0} - \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0}. \quad (2.8)$$

Lo cual nos dice que el campo eléctrico \mathbf{E} es la diferencia entre el campo \mathbf{D}/ϵ_0 , que existiría en la ausencia de polarización, y el campo \mathbf{P}/ϵ_0 que surge de la polarización.

Para un material que sea eléctricamente lineal y homogéneo tenemos que \mathbf{P} es proporcional a \mathbf{E} , por lo que

$$\mathbf{P} = \chi(\mathbf{E}) \mathbf{E}, \quad (2.9)$$

donde $\chi(\mathbf{E})$ es la susceptibilidad eléctrica del material y depende de \mathbf{E} y se puede representar como un tensor de orden dos. De esta manera se define el tensor de permitividad eléctrica como

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_0 (1 + \chi(\mathbf{E})) = K_e \varepsilon_0, \quad (2.10)$$

donde K_e es el tensor dieléctrico del medio. De esta manera

$$\mathbf{D} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{E}) \mathbf{E}. \quad (2.11)$$

Mientras que las componentes del vector de desplazamiento son

$$D_j = \sum_i \varepsilon_{ji} E_j. \quad (2.12)$$

Si el medio, además de ser homogéneo y lineal, es isotrópico el tensor ε_{ji} es una matriz diagonal con sus tres elementos iguales, por lo que \mathbf{P} y \mathbf{E} están en la misma dirección y son mutuamente proporcionales. Se deduce consecuentemente que \mathbf{D} es proporcional a \mathbf{E} , esto es

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (2.13)$$

en donde ε es ahora una constante.

En el caso de que el material sea no lineal la expresión para \mathbf{D} se complica de tal manera que sus componentes quedarían expresadas como

$$D_j = \sum_i \varepsilon_{ji}^{(1)} E_j + \sum_{i,k} \varepsilon_{jik}^{(2)} E_i E_k + \dots, \quad (2.14)$$

donde se tendrían que considerar términos de primer orden (lineales), de segundo, tercero, etc.

Es conveniente señalar que al igual de \mathbf{E} , se tiene que \mathbf{D} se extiende en todo el espacio y de ninguna manera está limitada a la región ocupada por el material como ocurre con \mathbf{P} . Las líneas de \mathbf{D} comienzan y terminan en cargas móviles, libres. Las líneas de \mathbf{E} comienzan y terminan bien sea en cargas libres o en cargas de polarización ligadas.

De manera análoga a la anterior tenemos que el vector de magnetización \mathbf{M} de un material es una medida del comportamiento promedio del medio que nos indica el momento dipolar magnético resultante promedio por unidad de volumen inducido por el campo \mathbf{B} dentro del material. El vector de campo magnético se puede expresar

$$\mathbf{H} = \mu_0^{-1} \mathbf{B} - \mathbf{M}. \quad (2.15)$$

Para un medio lineal no ferromagnético y homogéneo se tiene que \mathbf{M} es proporcional a \mathbf{B} , de tal manera que

$$\mathbf{M} = \chi_m(\mathbf{B}) \mathbf{B}, \quad (2.16)$$

donde χ_m es la susceptibilidad magnética del material. De esta manera se define el tensor de permeabilidad magnética del medio como

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_0 (1 + \chi_m(\mathbf{B})) = K_m \mu_0, \quad (2.17)$$

donde K_m es el tensor de magnetización del medio. Se tiene entonces que

$$\mathbf{H} = \boldsymbol{\mu}^{-1}(\mathbf{B}) \mathbf{B}, \quad (2.18)$$

y las componentes del vector de campo magnético quedan como:

$$H_j = \sum_i \mu_{ji}^{-1} B_j. \quad (2.19)$$

El tensor de permeabilidad es diagonal con los tres elementos iguales por lo cual se puede expresar como

$$\mathbf{H} = \mu^{-1} \mathbf{B}, \quad (2.20)$$

donde μ es constante y ambos vectores son paralelos y proporcionales. En este caso también tendremos que χ_m es constante. En el caso de que $\chi_m < 0$ se dice que el material es diamagnético y si $\chi_m > 0$ el material es paramagnético. Los materiales ferromagnéticos son aquellos en los que χ_m no es lineal y su dependencia con \mathbf{B} es más complicada. Ya que en general, las respuestas de los medios a los campos magnéticos difiere tan solo ligeramente de la del vacío. No es necesario describir el proceso en detalle. Basta decir que el material quedará polarizado.

Finalmente la ley de Ohm generalizada se puede expresar de una manera semejante a las anteriores. Para un medio lineal y homogéneo la densidad de corriente se puede expresar con ayuda del tensor de conductividad $\boldsymbol{\sigma}$ que es función de \mathbf{E} y \mathbf{B}

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{E}, \mathbf{B}). \quad (2.21)$$

Por lo general para materiales no ferromagnéticos la intensidad de \mathbf{B} es mucho más baja que la de \mathbf{E} por lo cual se suele expresar solamente en términos de \mathbf{E} . Las componentes de \mathbf{J} se expresan como

$$J_j = \sum_i \sigma_{ji} E_j. \quad (2.22)$$

Se tiene que σ_{ji} es un tensor diagonal con sus tres elementos iguales, por lo tanto

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2.23)$$

donde σ es una constante y \mathbf{J} resulta ser paralelo y directamente proporcional a \mathbf{E} . Este resultado es la conocida *ley de Ohm*.

Condiciones de frontera en la interfase entre dos medios distintos.

A partir de las ecuaciones de Maxwell en su forma integral es posible deducir las condiciones que tendrán los vectores \mathbf{E} , \mathbf{D} , \mathbf{B} y \mathbf{H} en la frontera que divide a los dos medios distintos denotados en adelante como 1 y 2.

Estas condiciones se pueden poner en forma vectorial con ayuda del vector unitario \mathbf{n} que es normal a la interfase como

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{n} = \rho_s, \quad (2.24)$$

$$(\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \times \mathbf{n} = 0, \quad (2.25)$$

$$(\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.26)$$

y

$$(\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) \times \mathbf{n} = \mathbf{J}_s. \quad (2.27)$$

La primera ecuación indica que la diferencia entre las componentes normales a la superficie para el vector \mathbf{D} , entre los medios 1 y 2, es igual a la densidad superficial de carga libre neta en la interfase. La segunda indica que la diferencia entre las componentes de \mathbf{E} paralelas a la superficie debe de ser cero, por lo cual estas componentes deben de ser iguales. Análogamente, la tercera señala que las componentes normales de \mathbf{B} a la superficie que define la interfase deben de ser iguales. Finalmente la última ecuación indica que la diferencia entre las componentes de \mathbf{H} paralelas a la superficie deben de ser iguales a la componente paralela a la superficie del vector de densidad de corriente \mathbf{J} que se denota como \mathbf{J}_s .

2.2 Ondas electromagnéticas en la materia.

Ecuaciones de onda en un medio lineal, homogéneo e isotrópico.

Si se tiene un medio material lineal, homogéneo e isotrópico las ecuaciones de Maxwell para éste se reducen a

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho / \varepsilon, \quad (2.28)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.29)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \mu \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mu \sigma \mathbf{E} \quad (2.30)$$

y

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0. \quad (2.31)$$

Suponiendo que el medio no tiene una carga eléctrica neta, aplicando el rotacional a las dos últimas ecuaciones y haciendo uso de la relación

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \quad (2.32)$$

y combinándolas con las otras dos, tenemos las ecuaciones de onda para los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} dadas como

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \sigma \mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0 \quad (2.33)$$

y

$$\nabla^2 \mathbf{B} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} - \sigma \mu \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0. \quad (2.34)$$

Las ecuaciones de onda deducidas antes rigen el campo electromagnético en un medio lineal homogéneo en el cual la densidad de carga neta es cero sea un medio conductor o no. Sin embargo, no es suficiente que estas ecuaciones se satisfagan, sino que también los campos deben de satisfacer las ecuaciones de Maxwell. Estas ecuaciones de onda son consecuencia necesaria de las ecuaciones Maxwell, pero el inverso no es cierto.

En el caso que dentro del material haya una fuente generadora de campo eléctrico la ecuación de onda para \mathbf{E} se escribe como

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \sigma \mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -(4\pi P)^{1/2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_s). \quad (2.35)$$

Donde P es la potencia que irradia la fuente de una manera isotrópica y la función delta de Dirac se evalúa en el punto \mathbf{r}_s donde se encuentre la fuente.

La solución más sencilla para estas ecuaciones es la de una onda plana monocromática con frecuencia de oscilación ω . De esta manera al ser una solución sencilla para \mathbf{E} , se tiene que el campo \mathbf{B} se puede obtener de la ecuación de Maxwell donde el rotacional de \mathbf{E} es igual a la derivada parcial con respecto del tiempo de \mathbf{B} , de tal manera que esta puede hallarse con facilidad. Además una solución general la podemos construir con el método de Fourier donde esta solución es una superposición lineal de ondas planas monocromáticas.

Entonces la solución de onda plana para el campo eléctrico \mathbf{E} se plantea como

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad (2.36)$$

que al sustituirla en la ecuación (2.35) queda como

$$e^{-i\omega t} (\nabla^2 \mathbf{E} + \omega^2 \varepsilon \mu \mathbf{E} + i\omega \sigma \mu \mathbf{E}) = 0. \quad (2.37)$$

La solución de la parte espacial de la ecuación anterior es

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.38)$$

donde \mathbf{k} es el vector que apunta en la dirección de propagación de la onda y cuya magnitud está dada como:

$$k^2 = \omega^2 \left(\varepsilon \mu + i \frac{\sigma \mu}{\omega} \right). \quad (2.39)$$

Esto se toma a partir de la analogía de una onda plana que se propaga en una dirección en donde el término imaginario indica el amortiguamiento que sufre la amplitud de la onda. En los casos en que la frecuencia de la radiación es muy grande se tiene que el término imaginario dentro de la raíz resulta ser despreciable, por lo que el vector \mathbf{k} en muchos casos puede expresarse como

$$\mathbf{k} = \omega \sqrt{\varepsilon \mu} \hat{\mathbf{k}}, \quad (2.40)$$

donde $\hat{\mathbf{k}}$ es el vector unitario en la dirección de propagación de la onda.

Velocidad de la radiación electromagnética e índice de refracción.

El efecto neto de introducir un material lineal homogéneo e isotrópico en el espacio libre es cambiar ϵ_0 por ϵ y μ_0 por μ en las ecuaciones de Maxwell. La velocidad de fase de la onda electromagnética en el medio pasa a ser

$$v = \frac{1}{\sqrt{\mu \epsilon}}. \quad (2.41)$$

El cociente entre la velocidad de la onda electromagnética en el vacío y en la materia se denomina índice de refracción absoluto

$$n = \frac{c}{v} = \sqrt{\frac{\epsilon \mu}{\epsilon_0 \mu_0}}. \quad (2.42)$$

En términos de las constantes dieléctrica y de magnetización relativas del medio, n pasa a ser

$$n = \sqrt{K_e K_m}. \quad (2.43)$$

Generalmente K_m no se desvía de la unidad como lo hace K_e . Poniendo $K_m = 1$ en la fórmula (2.43) para n , resulta la expresión denominada *Relación de Maxwell* para el índice de refracción

$$n = \sqrt{K_e}. \quad (2.44)$$

Suponiendo que tenemos un campo eléctrico que oscila con una frecuencia ω grande, el término imaginario en la parte espacial de la ecuación de onda (2.37) puede ser despreciado, quedando la ecuación:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \omega^2 \epsilon \mu \mathbf{E} = 0. \quad (2.45)$$

Esta ecuación también puede expresarse en términos del índice de refracción del medio como

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 n^2 \mathbf{E} = 0. \quad (2.46)$$

En donde

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2.47)$$

Aquí λ es la longitud de onda para el campo \mathbf{E} en el vacío. De esta manera tenemos que

$$kn = \frac{\omega}{c_0} n = \frac{\omega}{v} = \frac{2\pi\nu}{v} = \frac{2\pi}{\lambda'}. \quad (2.48)$$

donde λ' es la longitud de onda en el medio, c_0 es la velocidad de la luz en el vacío, de tal manera que

$$\lambda' = \frac{\lambda}{n} = \frac{2\pi c_0}{\omega n}. \quad (2.49)$$

Una solución de onda plana monocromática para la ecuación anterior es

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{i(k\mathbf{s}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega\left(\frac{n}{c}\mathbf{s}\cdot\mathbf{r} - t\right)}. \quad (2.50)$$

donde \mathbf{s} ahora representa el vector unitario en la dirección de propagación de la onda.

En el caso de que en el material la conductividad σ no sea despreciable tenemos que el índice de refracción será considerado como complejo de tal manera que de acuerdo con la ecuación (2.39) tenemos que se define el nuevo índice de refracción complejo n' como

$$n'^2 = n^2 \left(1 + i \frac{\sigma}{\omega \epsilon} \right)^2. \quad (2.51)$$

De una manera aún más general tenemos que el índice de refracción complejo lo podemos expresar como

$$n'^2 = n^2 (1 - \kappa^2 + 2i\kappa), \quad (2.52)$$

donde κ es la parte imaginaria del índice de refracción por lo que

$$n' = n (1 + i\kappa). \quad (2.53)$$

En este caso la solución a la ecuación de onda queda como:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-kn\kappa\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} e^{i(k\mathbf{s}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} = \mathbf{E}_0 e^{-\frac{\omega}{c}n\kappa\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} e^{i\omega\left(\frac{n}{c}\mathbf{s}\cdot\mathbf{r} - t\right)} = \mathbf{E}_0 e^{-\frac{\mu}{2}\mathbf{s}\cdot\mathbf{r}} e^{i\omega\left(\frac{n}{c}\mathbf{s}\cdot\mathbf{r} - t\right)}, \quad (2.54)$$

donde μ viene a ser el coeficiente de atenuación de la onda dentro del medio. Este coeficiente está dado como

$$\mu = \frac{2\omega}{c_0} n\kappa = \frac{4\pi}{\lambda} n\kappa. \quad (2.55)$$

El coeficiente de atenuación lo tomamos de esta manera debido a que este término es el responsable del decaimiento exponencial de la intensidad I de la onda.

Se llama profundidad de penetración a la distancia que recorre la onda en el material en donde reduce su amplitud en la proporción $1/e$. Esta distancia es igual a

$$\delta = \frac{1}{\mu} = \frac{\lambda}{4\pi n \kappa}. \quad (2.56)$$

Aquí se tiene que si la parte imaginaria del índice de refracción es grande resultará en una onda atenuada dentro del material. Por el contrario si tenemos que es un material donde la parte imaginaria del índice de refracción sea considerablemente menor, la onda va a poder propagarse profundidades grandes sin tener pérdidas considerables.

Solución general para la ecuación de onda por componentes del campo eléctrico.

La ecuación de onda en forma vectorial se puede descomponer en tres ecuaciones escalares para cada una de las componentes del vector \mathbf{E} . De esta manera para cada componente $u = u(x, y, z)$ tenemos la ecuación

$$\nabla^2 u + k^2 n^2 u = 0. \quad (2.57)$$

La ecuación de onda para cada componente es separable y se propone la solución de la forma

$$u = u(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z). \quad (2.58)$$

Sustituyendo esto en la ecuación (2.57) queda como

$$\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + k^2 n^2 = 0. \quad (2.59)$$

La cual se puede expresar como

$$\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = -\frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} - \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} - k^2 n^2 = -k_x^2. \quad (2.60)$$

Entonces para X se tiene la ecuación

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + k_x^2 X = 0, \quad (2.61)$$

cuya solución para una onda plana es

$$X(x) = A_{k_x} e^{ik_x x} + B_{k_x} e^{-ik_x x}. \quad (2.62)$$

Luego, procediendo de manera análoga, la ecuación para las otras variables se expresa como

$$-\frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + k^2 n^2 - k_x^2 = k_y^2, \quad (2.63)$$

cuyas ecuaciones separadas son

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + k_y^2 Y = 0 \quad (2.64)$$

y

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + k_z^2 Z = 0, \quad (2.65)$$

en donde

$$k_z^2 = k^2 n^2 - k_x^2 - k_y^2. \quad (2.66)$$

De esta manera la solución en forma de una onda plana monocromática es

$$u(x, y, z) = (A_{k_x} e^{ik_x x} + B_{k_x} e^{-ik_x x})(A_{k_y} e^{ik_y y} + B_{k_y} e^{-ik_y y})(A_{k_z} e^{ik_z z} + B_{k_z} e^{-ik_z z}). \quad (2.67)$$

Una solución general para la ecuación de onda puede considerarse como una superposición de ondas planas con diferentes vectores de onda (esto es, con diferentes longitudes de onda).

$$u = \sum_{k_x} \sum_{k_y} (A_{k_x} e^{ik_x x} + B_{k_x} e^{-ik_x x})(A_{k_y} e^{ik_y y} + B_{k_y} e^{-ik_y y})(A e^{ik_z z} + B e^{-ik_z z}). \quad (2.68)$$

Aquí en esta última ecuación los términos k_i deben tomarse como constantes y como índices en la suma. También aquí se omiten los subíndices k_z en las constantes debido a que pueden expresarse en términos de k_x y k_y . Para evitar confundir las k_i con constantes e índices, el problema puede evitarse escribiendo la solución tomando las sumas como integrales de tal manera que puede usarse todo un espectro continuo

$$u = \iint (A(k_x, k_y) e^{ik_x x} + B(k_x, k_y) e^{-ik_x x})(C(k_x, k_y) e^{ik_y y} + D(k_x, k_y) e^{-ik_y y})(E e^{ik_z z} + F e^{-ik_z z}) dk_x dk_y. \quad (2.69)$$

Las constantes A , B , C y D se determinan a partir de las condiciones de frontera del sistema que se esté estudiando.

2.3 Descripción microscópica de medios materiales

Descripción microscópica de la polarización de la materia.

La teoría de Maxwell considera la materia como continua, representando sus respuestas eléctrica y magnética a los campos aplicados \mathbf{E} y \mathbf{B} en términos de las constantes ε y μ . Por consiguiente K_e y K_m son también constantes mientras que n es, por lo tanto, un número complejo. Para poder analizar teóricamente la dispersión, la dependencia de la frecuencia del índice de refracción, es necesario incorporar la naturaleza atómica de la materia y aprovechar algún aspecto de la misma que depende de la frecuencia. Las contribuciones de grandes números de átomos pueden promediarse para representar el comportamiento de un medio isótropo.

Cuando un material está sujeto a un campo eléctrico aplicado, la distribución de la carga interna se distorsiona. Esto se debe a la generación de momentos dipolares eléctricos que, a su vez, contribuyen al campo interno total. De manera más sencilla, el campo externo separa las cargas negativas de las positivas del medio (cada par de las cuales es un dipolo) y luego ellas aportan un componente adicional al campo. El momento dipolar resultante se denomina polarización eléctrica \mathbf{P} . Para la mayoría de los materiales \mathbf{P} y \mathbf{E} son proporcionales y pueden relacionarse satisfactoriamente como

$$(\varepsilon - \varepsilon_0)\mathbf{E} = \mathbf{P}. \quad (2.70)$$

La redistribución de la carga y la polarización que de ello procede puede producirse mediante los mecanismos siguientes. Existen moléculas que disponen de un momento dipolar permanente como resultado de una compartición desigual de electrones de valencia; éstas se denominan moléculas polares. La agitación térmica hace que los dipolos moleculares se mantengan al azar. Con la introducción de un campo magnético, los dipolos se alinean y el material asume una polarización orientada. En el caso de moléculas no polares y átomos, el campo aplicado distorsiona la nube de electrones, desplazándola con respecto al núcleo y produciendo por consiguiente un momento dipolar. Además de esta polarización electrónica, existe otro proceso que se aplica a las moléculas. En presencia de un campo eléctrico, los iones negativos y positivos experimentan un desplazamiento recíproco. Por lo tanto los momentos dipolares se inducen, produciendo lo que se denomina polarización atómica o iónica.

Si el material es sometido a una onda electromagnética armónica incidente, la estructura de su carga interna experimentará fuerzas y/o torsiones variables en el tiempo, proporcionales a la componente del campo eléctrico de la onda.

La nube electrónica del átomo del material está ligada al núcleo positivo por una fuerza eléctrica de atracción que la mantiene en una especie de configuración de equilibrio. Sin conocer mucho más detalles de las interacciones atómicas internas, podemos anticipar que, al igual que otros sistemas mecánicos estables que no están completamente afectados por pequeñas perturbaciones, tiene que haber una fuerza neta F para restablecer el pequeño equilibrio del sistema. Además podemos pensar razonablemente que para desplazamientos

muy pequeños de x , desde el equilibrio (donde $F = 0$), la fuerza sea lineal en x . Dicho de otra forma, una representación gráfica de $F(x)$ frente a x cruzará el eje x en el punto de equilibrio ($x=0$) y será una línea recta muy cerca de ambos lados. Por lo tanto para pequeños desplazamientos, se puede suponer que las fuerzas de reestablecimiento tienen la forma de $F = -kx$. Una vez que un electrón ligado haya sido perturbado momentáneamente de esta forma, oscilará alrededor de su estado de equilibrio con una frecuencia de resonancia o natural dada por $\omega_0 = \sqrt{k/m_e}$ donde m_e es su masa. Esta es la frecuencia oscilatoria del sistema sin excitación.

Un medio material se representa como una agrupación, en el vacío, de un número muy elevado de átomos polarizables, cada uno de los cuales es pequeño (con respecto a la longitud de onda de la luz) y está cerca de sus vecinos. Cuando una onda electromagnética incide en dicho medio, cada átomo puede considerarse como un oscilador forzado clásico que está siendo excitado por un campo eléctrico variable en el tiempo $\mathbf{E}(t)$ de la onda, que aquí se supone está aplicado en la dirección de x . La figura 2.1 es una representación mecánica de tal oscilador en un medio isótropo donde la capa de carga negativa está atada a un núcleo positivo estacionario por muelles idénticos. La fuerza ejercida sobre un electrón de carga q_e por el campo $\mathbf{E}(t)$ de una onda armónica de frecuencia ω tiene la forma

$$\mathbf{F}_E = q_e \mathbf{E}(t) = q_e \mathbf{E}_0 \cos(\omega t). \quad (2.71)$$

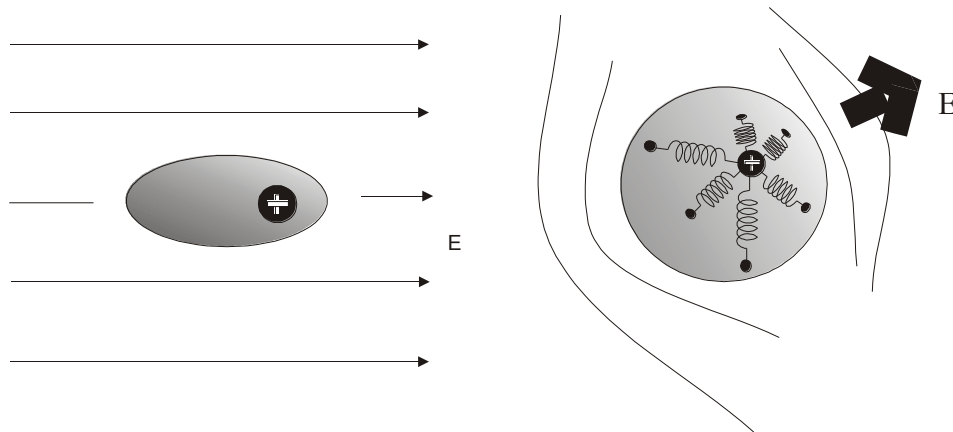


Figura 2.1. Polarización de la materia.

Dentro de un material donde hay N átomos por unidad de volumen y en el que cada átomo se comporta como un oscilador armónico, usamos un modelo de átomo o molécula en el que el electrón está ligado con una fuerza proporcional a su desplazamiento (como si el electrón estuviera sujeto en su lugar por un resorte). Hacemos notar que este no es un modelo clásico legítimo de un átomo, pero se puede demostrar que la teoría cuántica da resultados equivalentes a este modelo. La ecuación de movimiento para estos átomos debido a una fuerza eléctrica es

$$F = q_e E = m \left(\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega_0^2 x \right). \quad (2.72)$$

El primer término es la fuerza debido al campo eléctrico externo, mientras que en el segundo miembro tenemos primeramente el producto de la masa del electrón por su aceleración seguido de la fuerza de amortiguamiento de los osciladores atómicos. Por último tenemos la fuerza restauradora, siendo x el desplazamiento paralelo a la dirección de E , (suponiendo un oscilador isótropo cuya fuerza restauradora es la misma en todas direcciones) además de tomar por el momento una onda linealmente polarizada, así E no cambia de dirección). Si el campo eléctrico que actúa sobre el átomo varía armónicamente con el tiempo

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}. \quad (2.73)$$

Entonces el desplazamiento oscilará con la misma frecuencia y se puede suponer el desplazamiento en la dirección x

$$x = x_0 e^{i\omega t}. \quad (2.74)$$

De aquí se tiene que

$$\frac{dx}{dt} = i\omega x \quad \text{y} \quad \frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x.$$

Sustituyendo y despejando x en función de E

$$x = \frac{q_e / m}{-\omega^2 + i\gamma\omega + \omega_0^2} E. \quad (2.75)$$

Ahora tomando en cuenta que el momento dipolar se define como $p = q_e x$ para cada molécula, tenemos

$$\mathbf{p} = \frac{q_e^2 / m}{-\omega^2 + i\gamma\omega + \omega_0^2} \mathbf{E}. \quad (2.76)$$

Como \mathbf{p} es proporcional a \mathbf{E}

$$\mathbf{p} = \varepsilon_0 \eta(\omega) \mathbf{E}, \quad (2.77)$$

donde η se llama polarizabilidad atómica. Con esta definición se tiene que

$$\eta = \frac{q_e^2 / m \varepsilon_0}{-\omega^2 + i\gamma\omega + \omega_0^2}. \quad (2.78)$$

La solución cuántica para los movimientos de los electrones en átomos da una respuesta similar excepto por las modificaciones siguientes. Los átomos tienen varias frecuencias naturales, cada frecuencia con su propia constante de disipación γ . También la intensidad efectiva de cada modo es diferente, lo cual se puede representar multiplicando la polarizabilidad para cada frecuencia por un factor de intensidad f , que es un número del orden de 1. Representando los tres parámetros ω , γ y f por ω_k , γ_k y f_k para cada modo de oscilación y sumando sobre los diversos modos, la ecuación (2.78) se modifica en la forma siguiente

$$\eta(\omega) = \frac{q_e^2}{\varepsilon_0 m} \sum_k \frac{f_k}{-\omega^2 + i\gamma_k \omega + \omega_{0k}^2}. \quad (2.79)$$

Si N es el número de átomos por unidad de volumen en el material, la polarización \mathbf{P} es simplemente $\mathbf{P} = N\mathbf{p} = \varepsilon_0 N\eta\mathbf{E}$ y es proporcional a \mathbf{E}

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 N\eta(\omega)\mathbf{E}. \quad (2.80)$$

En otras palabras, cuando hay un campo eléctrico senoidal que actúa sobre un material, hay un momento dipolar inducido por unidad de volumen que es proporcional al campo eléctrico (con una constante de proporcionalidad η que depende de la frecuencia). A frecuencias muy altas, η es muy pequeña, no hay mucha respuesta. Además la constante de proporcionalidad es un número complejo, lo que significa que la polarización no sigue exactamente al campo eléctrico, sino que puede estar algo desfasada. Sin embargo a frecuencias bajas puede haber una respuesta fuerte. De todos modos hay una polarización por unidad de volumen cuyo módulo es proporcional a la intensidad del campo eléctrico.

Índice de refracción.

Utilizando la relación (2.70) y despejando ε en términos de la polarización P y el campo eléctrico E , ambos escalares ya que son paralelos, se tiene que

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{P}{E}. \quad (2.81)$$

Utilizando los valores escalares de P y de E de la relación (2.80)

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_0 N\eta(\omega) = \varepsilon_0(1 + N\eta(\omega)). \quad (2.82)$$

De tal manera que

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 + N\eta(\omega). \quad (2.83)$$

Utilizando la relación (2.44) se encuentra el índice de refracción complejo

$$n^2 = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \quad (2.84)$$

y

$$n^2 = 1 + N\eta(\omega). \quad (2.85)$$

Tomando η de la ecuación (2.78) la ecuación (2.85) resulta ser

$$n^2 = 1 + \frac{Nq_e^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{-\omega^2 + i\gamma\omega + \omega_0^2}. \quad (2.86)$$

Ahora bien, podría pensarse que esta ecuación sirve para materiales densos. Sin embargo necesita modificarse por diversas razones. Primero, la derivación de esta ecuación supone que el campo polarizante sobre cada átomo es el campo E_x . Esta hipótesis no es correcta debido a que en los materiales densos también hay campos producidos por átomos vecinos, que pueden ser comparables a E_x . Recordemos que tratamos a un sólo átomo como si estuviera aislado del resto del material. El campo en este “agujero” (que podemos llamar campo local) está aumentado sobre el campo promedio \mathbf{E} en la cantidad $\mathbf{P}/3\varepsilon_0$.

Los mismos razonamientos valdrán para el campo eléctrico de una onda, en tanto la longitud de la onda sea mucho mayor que el espaciamiento entre los átomos. Limitándose a tales casos se tiene

$$\mathbf{E}_{local} = \mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\varepsilon_0}. \quad (2.87)$$

Este campo local es el que se debe utilizar, esto es, hay que escribir la ecuación (2.80) de la forma

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 N\eta \mathbf{E}_{local}. \quad (2.88)$$

Usando el \mathbf{E}_{local} se encuentra que

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 N\eta \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\varepsilon_0} \right) \quad (2.89)$$

o

$$\mathbf{P} = \frac{N\eta}{1 - (N\eta/3)} \varepsilon_0 \mathbf{E}. \quad (2.90)$$

En otras palabras, aún para materiales densos \mathbf{P} es proporcional a \mathbf{E} (para campos senoidales). No obstante la constante de proporcionalidad no es $\varepsilon_0 N \eta$ como se estableció en la ecuación (2.80), sino que debe ser $\varepsilon_0 N \eta / [1 - (N \eta / 3)]$. Por lo tanto se debe corregir la ecuación (2.85) así

$$n^2 = 1 + \frac{N \eta}{1 - (N \eta / 3)}. \quad (2.91)$$

Para poder utilizar la polarizabilidad atómica, será más conveniente utilizar la siguiente expresión, que es equivalente

$$3 \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = N \eta. \quad (2.92)$$

Hay otra complicación para los materiales densos. Debido a que los átomos vecinos están muy cercanos, hay una interacción fuerte entre ellos. Por eso los modos internos de oscilación se modifican. Las frecuencias naturales de las oscilaciones atómicas son desplegadas por las interacciones y, por lo general, son fuertemente amortiguadas. El coeficiente de resistencia se vuelve muy grande, así que las ω_0 y las γ de los sólidos serán muy diferentes a las de los átomos libres. Con estas reservas, podemos representar η , al menos aproximadamente, por la ecuación (2.79). Entonces se tiene que

$$3 \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N q_e^2}{m \varepsilon_0} \sum_k \frac{f_k}{-\omega^2 + i \gamma_k \omega + \omega_{0k}^2}. \quad (2.93)$$

Como puede observarse, el índice de refracción es una cantidad compleja que depende de la frecuencia ω . Incluso ya se ha visto que en el caso de un material conductor el índice de refracción es complejo y depende de ω . Ahora lo que queremos es examinar las consecuencias de esta dependencia con la frecuencia.

Índice de refracción en metales.

La teoría que hemos estado utilizando para materiales sólidos también se puede aplicar a buenos conductores, como los metales, con muy pocas modificaciones. En los metales, algunos electrones no tienen fuerza alguna que los sujete a cualquier átomo particular; son estos electrones libres los responsables de la conductividad. Hay otros electrones que están ligados y la teoría anterior es aplicable directamente a ellos. No obstante, su influencia generalmente es superada por los efectos de los electrones de conducción. Ahora se considerará solamente los efectos de los electrones libres.

Si no hay fuerza restauradora sobre un electrón, pero con resistencia a su movimiento, su ecuación de movimiento difiere de la ecuación (2.72) solamente porque falta el término en $\omega_0^2 x$, así pues todo lo que tenemos que hacer es poner $\omega_0^2 x = 0$ en el resto de nuestra

derivación –excepto que hay una diferencia más. La razón que se tuvo para distinguir entre el campo medio y el campo local en un material es que en un aislante cada uno de los dipolos está fijo en una posición, así que tienen una relación definida con la posición de los otros. Pero debido a que los electrones de conducción en un metal se mueven por todas partes el campo entre ellos es en promedio el campo medio \mathbf{E} . Así que la corrección hecha a la ecuación (2.77), usando la ecuación (2.87), no se debe hacer para los electrones de conducción. Por lo tanto la fórmula para el índice de refracción de metales debería ser como la ecuación (2.86) excepto que con ω igual a cero, o sea

$$n^2 = 1 + \frac{Nq_e^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{-\omega^2 + i\gamma\omega}. \quad (2.94)$$

Esto es solamente la contribución de los electrones de conducción, que se supondrá es el término de mayor importancia para los metales.

Ahora se tratará de encontrar el valor de γ por medio de la conductividad del metal. La conductividad de un metal proviene de la difusión de los electrones a través de un cristal, los electrones van de dispersión en dispersión en una trayectoria dentada y entre dispersiones se mueven libremente excepto por una aceleración debida a cierto campo eléctrico promedio, como lo muestra la figura 2.2.

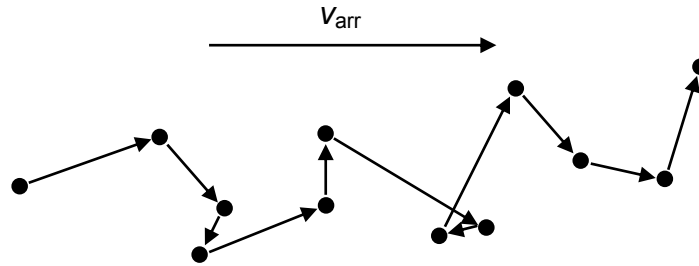


Figura 2.2. El movimiento de un electrón libre.

La velocidad promedio de arrastre \mathbf{v}_{arr} , es simplemente el producto de la fuerza eléctrica por el tiempo promedio τ entre colisiones. Para un electrón la aceleración es $q_e\mathbf{E}/m$, por lo que

$$\mathbf{v}_{arr} = \frac{q_e\mathbf{E}}{m} \tau. \quad (2.95)$$

De la ecuación (2.72) tenemos que para un electrón que no está sujeto a una fuerza de restauración, la velocidad es constante cuando $\ddot{x}=0$. Entonces la fuerza de arrastre es igual a la fuerza aplicada. Es decir, se tiene que $q_e\mathbf{E} - \gamma m\mathbf{v}_{arr} = 0$, en donde $\gamma m\mathbf{v}_{arr}$ es la fuerza de arrastre y $q_e\mathbf{E}$ es la fuerza eléctrica. Considerando la ecuación (2.95) se tiene

$$\gamma = \frac{1}{\tau}. \quad (2.96)$$

Aunque no es fácil medir τ directamente, podemos determinarlo midiendo la conductividad del metal. Experimentalmente se encuentra que un campo eléctrico \mathbf{E} en un metal produce una densidad de corriente \mathbf{j} proporcional a \mathbf{E} (para materiales isotrópos)

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}. \quad (2.97)$$

La constante de proporcionalidad σ se llama conductividad. La densidad de corriente se define como

$$\mathbf{j} = Nq_e \mathbf{v}_{arr}. \quad (2.98)$$

Entonces

$$\sigma = \frac{Nq_e^2}{m} \tau. \quad (2.99)$$

Así que τ —y por consiguiente γ — se pueden relacionar con la conductividad eléctrica observada. Usando las ecuaciones (2.96) y (2.99) podemos escribir nuestra fórmula para el índice de refracción, ecuación (2.94), en la forma siguiente

$$n^2 = 1 + \frac{\sigma / \varepsilon_0}{i\omega(1 + i\omega\tau)}, \quad (2.100)$$

donde

$$\tau = \frac{1}{\gamma} = \frac{m\sigma}{Nq_e^2}. \quad (2.101)$$

Esta es una fórmula conveniente para el índice de refracción de los metales.

Aproximación a altas frecuencias.

Se tratará ahora con el índice de refracción para metales incidiendo sobre ellos ondas electromagnéticas de alta frecuencia como los rayos X, que es de nuestro particular interés en este trabajo.

Para frecuencias muy altas $\omega\tau$ es mucho mayor que uno y la aproximación de ecuación (2.100) queda como

$$n^2 = 1 - \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega^2 \tau}. \quad (2.102)$$

Para ondas de frecuencias altas el índice de un metal se vuelve real —y menor que uno!— también esto es evidente según la ecuación (2.94) si se desprecia el término de

disipación con γ , como puede hacerse para valores muy grandes de ω . La ecuación (2.94) da

$$n^2 = 1 - \frac{Nq_e^2}{m\epsilon_0\omega^2}. \quad (2.103)$$

Que por supuesto es la misma ecuación (2.102). La cantidad $Nq_e^2/m\epsilon_0$ es el cuadrado de la frecuencia de plasma. Así que se puede escribir la ecuación (2.102) en la forma

$$n^2 = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2. \quad (2.104)$$

La frecuencia de plasma es una especie de frecuencia crítica.

Para $\omega < \omega_p$ el índice de un metal tiene una parte imaginaria, y las ondas son atenuadas, pero para $\omega \gg \omega_p$ el índice es real y el metal se vuelve transparente. De esta manera los metales son transparentes a los rayos X.

Cabe la pregunta de por qué la frecuencia de plasma debería tener algo que ver con la propagación de ondas electromagnéticas en los metales. La frecuencia de plasma es una frecuencia natural de oscilaciones de densidad de los electrones libres. (Un grupo de electrones es repelido por fuerzas eléctricas y la inercia de los electrones conduce a una oscilación de densidad). Así pues, las ondas longitudinales de plasma son resonantes a ω_p .

Si redefinimos a la ecuación (2.103) como

$$n^2 = 1 - Y^2, \quad (2.105)$$

entonces

$$Y^2 = \frac{Nq_e^2}{m\epsilon_0\omega^2}. \quad (2.106)$$

Y recordando que N es el número de átomos por unidad de volumen y cada átomo tiene Z electrones, N estará determinado por

$$N = \frac{Z\rho N_A}{M}. \quad (2.107)$$

donde ρ es la densidad de masa, M es la masa por mol del material y N_A es el número de Avogadro. Entonces se tiene

$$Y = \frac{q_e h}{2\pi E} \sqrt{\frac{N_A}{m\epsilon_0}} \sqrt{\frac{Z\rho}{M}}, \quad (2.108)$$

donde se ha utilizado la relación de cuantización de Einstein: $E = h\nu = h\omega/2\pi$. Haciendo uso de los valores siguientes obtenemos el parámetro Y en función de la energía E en keV, el número atómico del elemento Z , su densidad ρ en g/cm^3 y su masa atómica M en g/mol

$$\begin{aligned} q_e &= 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}, \\ h &= 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}, \\ m &= 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}, \\ \varepsilon_0 &= 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2, \\ N_A &= 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}, \\ 1 \text{ J} &= 6.242 \times 10^{15} \text{ keV} \quad \text{y} \\ 1 \text{ m} &= 100 \text{ cm}. \end{aligned}$$

$$Y = \frac{28.83 \times 10^{-3}}{E} \sqrt{\frac{Z \rho}{M}}. \quad (2.109)$$

Este parámetro Y es muy importante en el estudio teórico de las intensidades de los rayos X generados en películas delgadas y capturados a ángulos rasantes. Lo cual es parte importante de este trabajo por lo que será retomado en los capítulos siguientes.

2.4 Coeficientes de reflexión y transmisión

En esta parte estudiaremos los coeficientes de reflexión y de transmisión para una onda incidiendo en una superficie desde un material 1 hacia un material 2 con índices de refracción n_1 y n_2 , respectivamente, como en la figura 2.3. Utilizaremos los índices de refracción complejos obtenidos anteriormente.

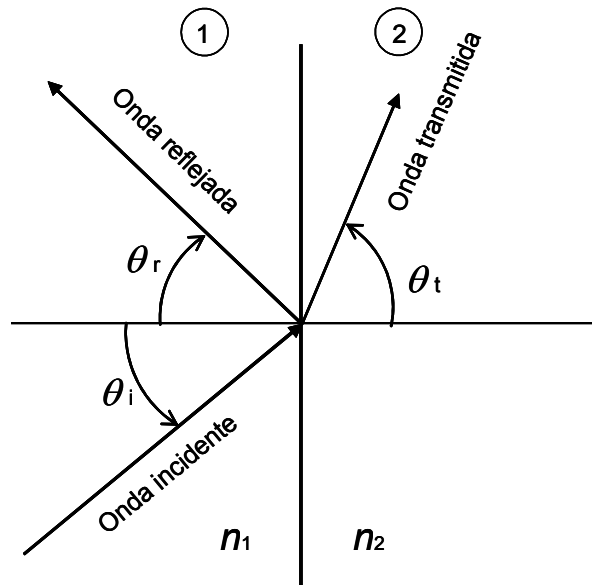


Figura 2.3. Reflexión y refracción de una onda electromagnética.

Los coeficientes que se encontraron serán los coeficientes de Fresnel en su forma más general posible, conteniendo una parte real y una parte imaginaria cuyos efectos se estudiarán en los capítulos siguientes. En este capítulo los obtendremos en función de la componente normal a la superficie del vector de propagación \mathbf{k} , tanto del vector incidente como del vector transmitido. En el siguiente capítulo se utilizarán estos coeficientes ya en su forma conocida en función de los índices de refracción complejos.

Ondas en materiales densos.

Recordando la manera conveniente de describir una onda plana sinusoidal que hemos empleado anteriormente, tenemos que cualquier componente de campo en la onda (usamos \mathbf{E} como ejemplo) se puede escribir en la forma

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}, \quad (2.110)$$

donde \mathbf{E} representa la amplitud del campo en el punto \mathbf{r} (desde el origen) al tiempo t . El vector \mathbf{k} apunta en la dirección en que viaja la onda y su módulo $|\mathbf{k}| = k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda. La velocidad de fase de la onda es $v_f = \omega/k = c/n$, así

$$k = \frac{\omega n}{c}. \quad (2.111)$$

Se supondrá que \mathbf{k} está en la dirección de z , entonces $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ es simplemente kz . Para \mathbf{k} en cualquier otra dirección debemos reemplazar z por r_k , la distancia al origen en la dirección \mathbf{k} ; es decir, debemos reemplazar kz por kr_k . Así pues, la ecuación (2.110) es una representación conveniente de una onda en cualquier dirección.

Por supuesto, se debe recordar que

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z. \quad (2.112)$$

Para una \mathbf{E} sinusoidal, como la ecuación (2.110), $\partial \mathbf{E} / \partial t$ es igual a $i\omega \mathbf{E}$ y la $\partial \mathbf{E} / \partial x$ es $-ik_x \mathbf{E}$ y análogamente para las otras componentes. En tanto que la operación $\nabla = (\partial / \partial x, \partial / \partial y, \partial / \partial z)$ como operador puede ser reemplazada por las tres multiplicaciones $(-ik_x, -ik_y, -ik_z)$. Estos tres factores se transforman como las componentes del vector \mathbf{k} , esto es, se reemplaza el operador ∇ por multiplicación por $-i\mathbf{k}$ en la ecuación de Faraday (2.31) para obtener una relación que nos será útil después, la cual queda como

$$-i\mathbf{k} \times \mathbf{E} = -i\omega \mathbf{B} \quad (2.113)$$

o

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{E}}{\omega}. \quad (2.114)$$

Se sabe por experiencia que cuando una onda plana llega a la separación entre dos materiales diferentes hay una onda reflejada y una onda transmitida. se eligen los ejes con el plano yz en la superficie y el plano xy perpendicular a las superficies de onda incidente, como muestra la figura 2.4.

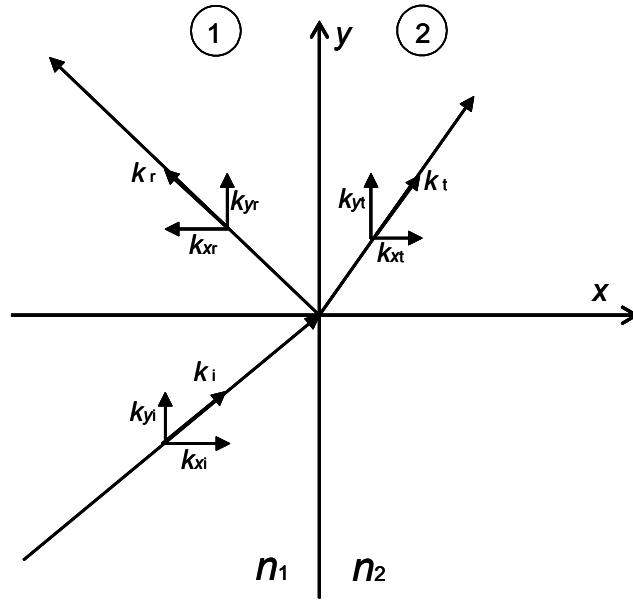


Figura 2.4. Componentes del vector de propagación \mathbf{k} en los medios 1 y 2.

Entonces se puede escribir el vector eléctrico de la onda incidente en la forma

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}. \quad (2.115)$$

Como \mathbf{k} es perpendicular a z

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y. \quad (2.116)$$

Se escribe la onda reflejada como

$$\mathbf{E}_r = \mathbf{E}_{0r} e^{i(\omega_r t - \mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r})}. \quad (2.117)$$

De modo que su frecuencia es ω_r , su número de onda es k_r y su amplitud es \mathbf{E}_{0r} . Finalmente se escribe para la onda transmitida

$$\mathbf{E}_t = \mathbf{E}_{0t} e^{i(\omega_t t - \mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r})}. \quad (2.118)$$

Se sabe que la ecuación de Maxwell (2.31) da la ecuación (2.114), así que para cada una de las ondas tenemos

$$\mathbf{B}_i = \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{E}_i}{\omega}, \quad \mathbf{B}_r = \frac{\mathbf{k}_r \times \mathbf{E}_r}{\omega_r} \quad \text{y} \quad \mathbf{B}_t = \frac{\mathbf{k}_t \times \mathbf{E}_t}{\omega_t}. \quad (2.119)$$

Además si se nombran n_1 y n_2 a los índices de los dos medios, tenemos según la ecuación (2.111):

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 = \frac{\omega^2 n_1^2}{c_0^2}. \quad (2.120)$$

Como la onda reflejada está en el mismo material, se tiene

$$k_r^2 = \frac{\omega_r^2 n_1^2}{c^2}. \quad (2.121)$$

Mientras que para la onda transmitida

$$k_t^2 = \frac{\omega_t^2 n_2^2}{c^2}. \quad (2.122)$$

Ondas reflejadas y transmitidas.

Se hará el análisis de una onda polarizada que llega perpendicularmente al plano de incidencia. Así pues, tomamos \mathbf{E}_i de modo que tenga solamente la componente z , y puesto que todos los vectores \mathbf{E} tienen la misma dirección, podemos dejar de lado el signo del vector.

Mientras ambos materiales sean isótropos, las oscilaciones inducidas sobre las cargas del material estarán también en la dirección z , y el campo \mathbf{E} de las ondas transmitida y radiada tendrán solamente componentes z . Así pues, para todas las ondas, E_x , E_y , P_x , y P_y son cero. Las ondas tendrán sus vectores \mathbf{E} y \mathbf{B} como se muestran en la figura 2.5.

Los campos en la región 1 son, por supuesto, la superposición de los campos de las ondas incidente y reflejada, así pues, usando las condiciones de contorno, se debe escribir

$$\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_i + \mathbf{E}_r, \quad (2.123)$$

y

$$\mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_t. \quad (2.124)$$

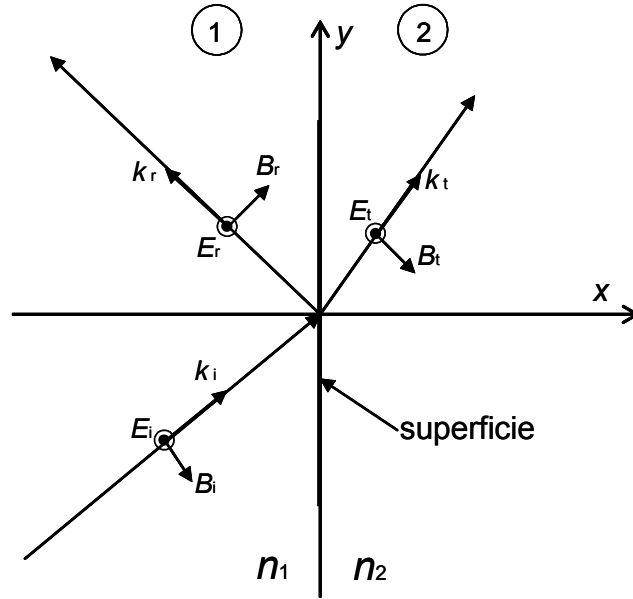


Figura 2.5. Polarización de las ondas, con \mathbf{E} perpendicular al plano de incidencia.

En $x = 0$

$$\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_r = \mathbf{E}_t. \quad (2.125)$$

Así pues

$$\mathbf{E}_{0i} e^{i(\omega t - k_y y)} + \mathbf{E}_{0r} e^{i(\omega_r t - k_{ry} y)} = \mathbf{E}_{0t} e^{i(\omega_t t - k_{ty} y)} \quad (2.126)$$

Que debe ser cierta para todo t y para todo y . Considerando el caso particular cuando $y=0$, tenemos

$$\mathbf{E}_{0i} e^{i\omega t} + \mathbf{E}_{0r} e^{i\omega_r t} = \mathbf{E}_{0t} e^{i\omega_t t}. \quad (2.127)$$

Esta ecuación dice que dos términos oscilantes son iguales a una tercera oscilación. Esto puede suceder sólo si todas las oscilaciones tienen la misma frecuencia

$$\omega = \omega_r = \omega_t. \quad (2.128)$$

Las frecuencias de las ondas reflejada y transmitida son iguales a la de la onda incidente.

Por definición, el módulo de \mathbf{k} está dado por $k^2 = n^2 \omega^2 / c^2$ por lo que se tiene

$$\frac{k_t^2}{n_2^2} = \frac{k_r^2}{n_1^2} = \frac{k_i^2}{n_1^2}. \quad (2.129)$$

Considerando ahora la ecuación (2.126) para $t = 0$. Utilizando nuevamente la misma clase de razonamiento que acabamos de aplicar, pero ahora para cualquier valor de y , tenemos que

$$k_{yt} = k_{yr} = k_{yi}. \quad (2.130)$$

Además, de la ecuación (2.129) se tiene

$$k_{xr}^2 + k_{yr}^2 = k_{xi}^2 + k_{yi}^2. \quad (2.131)$$

Combinando estas dos últimas ecuaciones se tiene

$$k_{xr}^2 = k_{xi}^2. \quad (2.132)$$

O sea que $k_{xr} = \pm k_{xi}$, el signo positivo no tiene sentido; no daría una onda reflejada, sino una onda incidente, así pues, se tiene

$$k_{xr} = -k_{xi}. \quad (2.133)$$

Ahora podemos obtener las amplitudes de las ondas reflejada y transmitida. Haciendo uso de los resultados para las ω y los k , los factores exponenciales de la ecuación (2.126) se pueden cancelar y se obtiene

$$\mathbf{E}_{0i} + \mathbf{E}_{0r} = \mathbf{E}_{0t}. \quad (2.134)$$

Para obtener \mathbf{E}_{0r} y \mathbf{E}_{0t} se requiere una relación más. A partir de las relaciones dadas en (2.119) se tiene que

$$B_{yi} = -\frac{k_x E_i}{\omega}, \quad B_{yr} = -\frac{k_{xr} E_r}{\omega}, \quad B_{yt} = -\frac{k_{xt} E_t}{\omega}. \quad (2.135)$$

Evaluable los campos \mathbf{E}_i , \mathbf{E}_r y \mathbf{E}_t en la frontera, $x = 0$, y aplicando las condiciones de contorno

$$\frac{k_{xi}}{\omega} \mathbf{E}_{0i} e^{i(\omega t - k_y y)} + \frac{k_{xr}}{\omega} \mathbf{E}_{0r} e^{i(\omega t - k_y y)} = \frac{k_{xt}}{\omega} \mathbf{E}_{0t} e^{i(\omega t - k_y y)}. \quad (2.136)$$

Dado que las k_y son iguales, esto se reduce a

$$k_{xi} \mathbf{E}_{0i} + k_{xr} \mathbf{E}_{0r} = k_{xt} \mathbf{E}_{0t}. \quad (2.137)$$

Con esta ecuación combinada con la ecuación (2.134), y tomando en consideración el resultado obtenido en la ecuación (2.133) obtenemos

$$\mathbf{E}_{0r} = \frac{k_{xi} - k_{xt}}{k_{xi} + k_{xt}} \mathbf{E}_{0i}, \quad (2.138)$$

$$\mathbf{E}_{0t} = \frac{2k_{xi}}{k_{xi} + k_{xt}} \mathbf{E}_{0i}. \quad (2.139)$$

Estos son los coeficientes de Fresnel para las amplitudes de las ondas reflejada y transmitida en comparación con la amplitud de la onda incidente. Como se mencionó anteriormente, están en función de las componentes ortogonales a la superficie. Estos coeficientes serán retomados en el capítulo siguiente para el análisis que se estudia en este trabajo. Los tendremos en función del ángulo rasante de salida α y de los índices de refracción complejos.

2.5 El vector de Poynting y la irradiancia

El vector de Poynting.

Cualquier onda electromagnética existe en alguna zona del espacio, siendo por lo tanto natural considerar la energía radiante por unidad de volumen o densidad de energía, u . Podemos calcular la densidad de energía del campo \mathbf{E} como

$$u_E = \frac{\epsilon_0}{2} E^2. \quad (2.140)$$

De manera análoga, la densidad de energía del campo magnético \mathbf{B} es

$$u_B = \frac{1}{2\mu_0} B^2. \quad (2.141)$$

La relación $E = cB$ se deriva específicamente para ondas planas, sin embargo su aplicación es bastante general. Utilizando $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ se deduce que

$$u_E = u_B. \quad (2.142)$$

La energía que fluye en el espacio en forma de onda electromagnética es compartida, por igual, por los campos constituyentes, eléctrico y magnético. Puesto que

$$\mathbf{u} = u_E + u_B, \quad (2.143)$$

$$u = \epsilon_0 E^2, \quad (2.144)$$

o de manera equivalente,

$$u = \frac{1}{\mu_0} B^2. \quad (2.145)$$

Para representar el flujo de energía electromagnética asociada con una onda viajera, se supondrá que S representa el transporte de energía por unidad de tiempo (la potencia) a través del área unidad. Teniendo una onda electromagnética viajando con velocidad c a través de un área A , durante un intervalo de tiempo Δt muy pequeño, tan solo la energía contenida en el volumen cilíndrico, $u(c\Delta t A)$ cruzará A . Por lo tanto

$$S = \frac{uc\Delta t A}{\Delta t A} = uc. \quad (2.146)$$

O, utilizando la ecuación (2.144)

$$S = \frac{1}{\mu_0} EB. \quad (2.147)$$

Ahora, se supondrá (para medios isótropos) que la energía fluye en la dirección de la propagación de la onda. El vector \mathbf{S} correspondiente es, entonces

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (2.148)$$

o

$$\mathbf{S} = c^2 \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B}. \quad (2.149)$$

La magnitud de \mathbf{S} es la potencia por unidad de área que cruza una superficie cuya normal es paralela a \mathbf{S} . Se le conoce como vector de Poyting. Apliquemos estas consideraciones al caso de una onda armónica plana, linealmente polarizada (las direcciones de los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} son fijas) que viaja a través del espacio libre en la dirección \mathbf{k}

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (2.150)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (2.151)$$

Utilizando la ecuación (2.149), encontramos que

$$\mathbf{S} = c^2 \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B} \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (2.152)$$

Este es el flujo de energía instantánea por unidad de área por unidad de tiempo.

Irradiancia.

A la irradiancia se le define como la energía media por unidad de área por unidad de tiempo. Cualquier clase de detectores de nivel de luz está dotada de una ventana que permite el paso de energía radiante a través de un área fija A . La dependencia del tamaño de esa ventana se elimina dividiendo la energía total recibida entre A . Asimismo, puesto que la luz entrante no puede medirse instantáneamente, el detector tendrá que integrar el flujo energético durante un tiempo finito T . Si la cantidad que hay que medir es la energía *neta* por unidad de área recibida, depende de T siendo, por lo tanto, de utilidad limitada. Si otra persona lleva a cabo una medición similar bajo las mismas condiciones, podrá conseguir un resultado diferente utilizando un tiempo T diferente. Sin embargo, si se divide por T , se obtendrá una cantidad sumamente práctica correspondiente a la energía media por unidad de área por unidad de tiempo, es decir la irradiancia I .

El valor promedio en un intervalo de tiempo mucho mayor que el período de oscilación de una onda armónica ($T \gg \tau$) de la magnitud del vector de Poyting, simbolizado por $\langle S \rangle_T$; es una medición de I . En el caso específico de los campos armónicos y de la ecuación (2.152)

$$\langle S \rangle_T = c^2 \varepsilon_0 |\mathbf{E} \times \mathbf{B}| \langle \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \rangle. \quad (2.153)$$

Puesto que $\langle \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \rangle_T = \frac{1}{2}$ para $T \gg \tau$,

$$\langle S \rangle_T = \frac{c\varepsilon^2}{2} |\mathbf{E}_0 \times \mathbf{B}_0| \quad (2.154)$$

o de otra manera

$$I \equiv \langle S \rangle_T = \frac{c\varepsilon^2}{2} E_0^2. \quad (2.155)$$

la irradiancia es proporcional al cuadrado de la amplitud del campo eléctrico. Finalmente dos maneras alternativas de decir lo mismo son simplemente

$$I = \frac{c}{\mu_0} \langle B^2 \rangle_T, \quad (2.156)$$

o como

$$I = \varepsilon_0 c \langle E^2 \rangle_T. \quad (2.157)$$

Referencias.

- [1] R. Feymann, Leighton, Sand. “*Lecciones de Física*”. Tomo 2, Editorial Fondo Educativo Interamericano o Addison-Wesley Iberoamericana. México, 1987.
- [2] M. Born y E. Wolf. “*Principles of Optics*”. Cambridge University Press. London, 1983.
- [3] J.D. Jackson. “*Classical Electrodynamics*”. Second edition, John Wiley & Sons. New York, 1975. Capítulo de introducción.
- [4] J. R. Reitz, F. J. Milford, R. W. Christy. “Fundamentos de la Teoría Electromagnética”. Tercera Edición, Addison-Wesley Iberoamericana. México, 1986.
- [5] E. Hecht. “*Óptica*”. Tercera Edición, Addison Wesley Iberoamericana. Madrid, 2000.

Capítulo 3

Ondas electromagnéticas dentro de películas delgadas

3.1 Condiciones para los campos eléctricos

Consideraciones físicas.

Se considera un sistema multicapas formado por varias películas delgadas sobre un sustrato grueso. Estas películas son de diferentes materiales entre sí y se considera que los materiales serán lineales, homogéneos e isotropos. Este sistema se muestra esquemáticamente en la figura 3.1. Cada una de estas películas se denota con un número $j = 1, 2, 3, \dots$ etc, dependiendo del número de películas. Vamos a suponer que hay $M - 1$ películas delgadas, donde M es un número natural y que el sustrato se denotará con $j = M$. El índice de refracción de cada una de las películas y el sustrato se denotará como n_j . El marco de referencia se tomará como un sistema coordenado cartesiano común (x, y, z) de tal manera que las diferentes interfases entre las superficies de las películas tengan un valor de z constante en sus ecuaciones geométricas de planos. Esto quiere decir que el eje z es perpendicular a las interfases. Así, para la capa j tendremos que z es tal que $z_j < z < z_{j-1}$. El sustrato llena todo el espacio con $z < z_{M-1}$. El espacio correspondiente a $z > z_0$ se considera vacío y ahí el índice de refracción se denota como $n_0 = 1$. Ahora se considera que una fuente puntual radiante se encuentra dentro de la j_f -ésima película delgada.

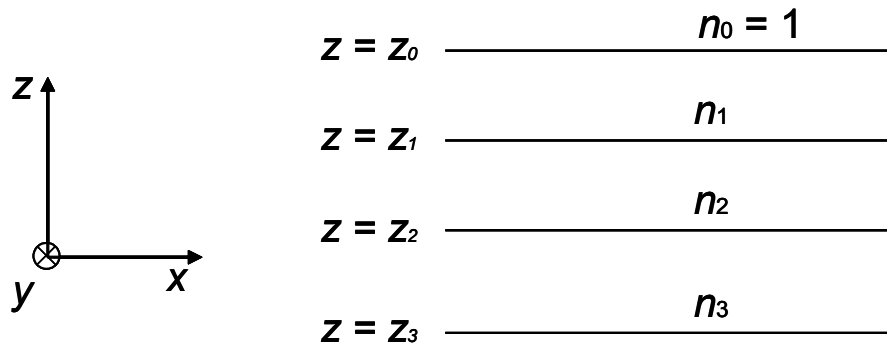


Figura 3.1. Condiciones físicas, sistema multilaminado

De acuerdo a la ecuación (2.52) tenemos que cada una de las películas delgadas tiene un índice de refracción complejo y que denotaremos como $n_j = n_{Rj} + in_{Ij}$, donde n_R es la parte real, n_I es la parte imaginaria y el subíndice j hace referencia a la capa con $j = 0, 1, 2, 3, \dots$. Como en este trabajo se está tratando con radiación electromagnética correspondiente a rayos

X (energías de los fotones del orden de keV) cuyas frecuencias son altas, es posible considerar la aproximación dada por la expresión (2.103). De esta manera la parte real y la parte imaginaria del índice de refracción se expresa como:

$$n_{Rj} = 1 - \delta_j \quad (3.1a)$$

y

$$n_{Ij} = \beta_j. \quad (3.1b)$$

La parte imaginaria se asociará con los coeficientes de atenuamiento para rayos X en un material. Lo anterior se detalla más adelante. Por lo pronto de las ecuaciones 3.1a y 3.1b se tiene que $\delta_0 = 0$, $\beta_0 = 0$, y para $j \neq 0$, δ_j y β_j son números muy pequeños, típicamente del orden de 10^{-3} o menores. Usualmente, y en particular en este trabajo, la δ_j es un número positivo. De aquí que la parte real del índice de refracción sea menor a uno.

Índice de refracción y ángulo crítico.

La parte real del índice de refracción de un material se puede expresar en términos del ángulo crítico. Para esto se parte de que las condiciones para la refracción de una onda plana que atraviesa una interfase están dadas por la ley de Snell [1,2]

$$n_0 \text{sen} \theta_0 = n_1 \text{sen} \theta_1. \quad (3.2)$$

donde n_0 es el índice de refracción del medio por donde incide la onda a un ángulo θ_0 con respecto de la normal a la interfase entre los dos medios y n_1 es el índice de refracción del medio por donde se refracta la onda con un ángulo de transmisión θ_1 . En este caso no interviene la parte compleja del índice de refracción pues para el análisis de las ondas en la interfase solamente se consideran las condiciones de frontera y no trayectorias donde se presente la atenuación.

Si una onda viaja en el vacío ($n_0 = 1$) viaja hacia un material con índice real n_1 entonces la ley de Snell se expresa como

$$\text{sen} \theta_0 = n_1 \text{sen} \theta_1. \quad (3.3)$$

Al ángulo θ_0 cuyo correspondiente θ_1 sea igual a 90° se le denotará como ángulo crítico del haz incidente y en este caso no hay una onda refractada hacia el interior del material. A este ángulo crítico lo denotaremos como θ_{0c} . Para ángulos de incidencia mayores al θ_{0c} no hay onda refractada. De esta manera tenemos que la parte real del índice de refracción para el ángulo crítico es

$$\text{sen} \theta_{0c} = n_1. \quad (3.4)$$

Como en este trabajo vamos a tratar con rayos X emitidos por una fuente en direcciones rasantes a la superficie, es conveniente describir a estos rayos X en términos del ángulo

α entre la superficie y la dirección de emisión de la radiación, en lugar de hacerlo con respecto a la normal a la superficie como comúnmente se efectúa en la teoría (ver capítulo 2). Esto es, se considera ahora al ángulo $\alpha = \pi/2 - \theta$ y puesto que al tomar ángulos rasantes se tendrá que α resulta ser muy pequeño y permite efectuar aproximaciones de una manera sencilla.

En términos del ángulo complementario de θ_{0c} , α_c , tenemos que la parte real del índice de refracción queda:

$$n_{R1} = \text{sen}(\pi/2 - \alpha_c) = \cos \alpha_c. \quad (3.5)$$

Luego si α_c es pequeño y desarrollando en serie de Taylor para la función coseno alrededor de cero se tiene

$$\cos \alpha_c \approx 1 - \frac{\alpha_c^2}{2!} + \frac{\alpha_c^4}{4!} - \dots \quad (3.6)$$

Para ángulos del orden de miliradianes ($\alpha_c < 80$ mrad) el término de cuarto grado y mayores se desprecian, por lo que la ecuación (3.5) quedará determinada como

$$n_{R1} = 1 - \frac{1}{2} \alpha_c^2 \quad (3.7)$$

Entonces, comparando esta última ecuación con la (3.1a) se puede escribir

$$\delta_1 = \frac{1}{2} \alpha_c^2. \quad (3.8)$$

De la ecuación (2.103), que representa la parte real del índice de refracción para ondas con altas frecuencias, se deriva la ecuación (2.109) en función de parámetros manejados en física experimental, como son: la energía E (en keV), el número atómico del elemento Z , su densidad ρ y su masa M . Comparando con la ecuación (3.7) resulta que el parámetro Y del capítulo 2 se asocia precisamente con el ángulo crítico

$$\alpha_c = \frac{28.83}{E} \sqrt{\frac{Z\rho}{M}} \quad (\text{mrad}). \quad (3.9)$$

Tomando al sistema de películas multicapas considerado se tiene que este parámetro δ_1 , que se acaba de determinar, corresponde solamente para el material de la película superior. Con un tratamiento similar se puede demostrar que para la j -ésima película el correspondiente δ_j queda dado como

$$\delta_j = \frac{1}{2} \alpha_{cj}^2. \quad (3.10)$$

Como la parte imaginaria del índice de refracción está asociada con la absorción que sufre la onda en el interior de un material y, por la condición dada por la ecuación (2.54) para la parte imaginaria, se tiene que

$$\beta_j = \frac{\mu\lambda}{4\pi}. \quad (3.11)$$

donde μ es el coeficiente de absorción másico del material de la película delgada y λ es la longitud de onda de la línea de emisión correspondiente en vacío.

3.2 Campos electromagnéticos

Campos eléctricos dentro de la película j -ésima.

Las ondas electromagnéticas que aparecen en todo el espacio y que son producidas por una fuente localizada en el punto $\mathbf{r}_f = (x_f, y_f, z_f)$ dentro la película j_f se determinan a partir de la solución de las ecuaciones de Helmholtz

$$k^2 n_j^2 \mathbf{E} + \nabla^2 \mathbf{E} = 0, \quad \text{dentro del medio } j, \text{ con } j \neq j_f, \quad (3.12)$$

$$k^2 n_j^2 \mathbf{E} + \nabla^2 \mathbf{E} = -(4\pi P)^{1/2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_f), \quad \text{dentro de la película } j = j_f, \quad (3.13)$$

en donde P es la potencia radiada por la fuente. Las componentes transversales del campo electromagnético paralelas a las superficies de las películas que son soluciones a estas ecuaciones deben de satisfacer también las condiciones de frontera de tal manera que \mathbf{E} y $\partial\mathbf{E}/\partial z$ sean continuas. Además, para los casos $z \rightarrow \pm\infty$, (es decir, en el vacío y dentro del sustrato) los campos deben de satisfacer las condiciones de radiación de Sommerfeld, la cual indica que el campo será una superposición de ondas planas propagándose por el material.

Las soluciones generales a estas ecuaciones para cada componente son como las indicadas en la ecuación (2.69) las cuales resultan ser complicadas. Los valores de las constantes $A_j(k_x, k_y)$, $B_j(k_x, k_y)$, $C_j(k_x, k_y)$, $D_j(k_x, k_y)$ dependen de las condiciones del sistema y además no pueden obtenerse de una forma cerrada. Sin embargo para cada k_x y k_y se pueden determinar implementando una fórmula recursiva que se puede derivar de las condiciones de frontera en el que \mathbf{E} y $\partial\mathbf{E}/\partial z$ sean continuas en las interfases de las películas. De esta manera tenemos que el cálculo del campo electromagnético requiere de una evaluación numérica de dos integrales de Fourier. [1]

Expresión para el campo electromagnético en $z > z_0$.

Volviendo nuevamente al objetivo de este trabajo, se tiene el interés en analizar los rayos X que son emitidos en un sistema multicapa a ángulos rasantes a la superficie de la muestra con la finalidad de poder analizar propiedades físicas de las películas. Entonces el interés general se centrará en determinar la intensidad de la radiación electromagnética producida en una película j -ésima y que llega a un detector. Como vemos, esto requiere de una evaluación numérica que tomará mucho tiempo de cálculo y no resultará ser muy conveniente si se buscan aplicaciones para la emisión de rayos X en ángulos rasantes. Por este motivo es necesario buscar la manera de simplificar el problema.

Para poder efectuar esta simplificación partiremos de las condiciones generales que se tienen experimentalmente en estos casos [1, 2, 3]. Así pues, consideremos el campo eléctrico en un punto $\mathbf{r} = (x, y, z)$ en el vacío $z > z_0$ debido a una fuente puntual en $\mathbf{r}_f = (x_f, y_f, z_f)$. El vector \mathbf{r} puede ser la posición de un detector puntual de rayos X. Si la magnitud r es muy grande comparada con la de r_f y la del espesor de las películas delgadas, tendremos entonces que la componente transversal del campo electromagnético en el vacío se puede expresar como una onda esférica

$$E \approx \frac{1}{4\pi} B_0(k_x, k_y) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_f)} e^{-i\omega t}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_f|}, \quad (3.14)$$

en donde $B_0(k_x, k_y)$ es un coeficiente en función de k_x y k_y , los cuales se pueden poner en función del ángulo α . Esta función debe depender de la amplitud de la onda producida en el interior de la película j_f y además incluir toda la superposición de campos debidos a las ondas que se transmiten debido a reflexiones múltiples dentro de las películas.

Si se toma en cuenta que el punto $\mathbf{r} - \mathbf{r}_f$ es rasante a la superficie, es decir, muy cercano a la superficie $z = z_0$, y que además el espesor de las películas es mucho más pequeño que r tendremos que las componentes tanto del vector de propagación \mathbf{k} como el de posición $\mathbf{r} - \mathbf{r}_f$ serán casi paralelos a las superficies con respecto a las coordenadas z . Así tendremos que z y k_z serán muy pequeñas, de tal manera que

$$k_x^2 + k_y^2 \gg k_z^2, \quad (3.15)$$

$$(x - x_f)^2 + (y - y_f)^2 \gg (z - z_f)^2, \quad (3.16)$$

y

$$k_x^2(x - x_f)^2 + k_y^2(y - y_f)^2 \gg k_z^2(z - z_f)^2. \quad (3.17)$$

Como en este caso \mathbf{k} y $\mathbf{r} - \mathbf{r}_f$ son prácticamente paralelos tendremos que el ángulo α se puede expresar en términos del coseno como

$$\cos \alpha = \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} \cong \frac{\sqrt{(x-x_f)^2 + (y-y_f)^2}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|} \quad (3.18)$$

y que

$$\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}_f) = k_x(x-x_f) + k_y(y-y_f) + k_z(z-z_f) \approx k|\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|. \quad (3.19)$$

De esta manera la componente del campo paralela a los planos de las películas estará dada como

$$E \approx \frac{1}{4\pi} B_0 (\cos \alpha) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}_f)} e^{-i\omega t}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|}. \quad (3.20)$$

El error en esta aproximación es del orden de

$$O = \frac{1}{k^{1/2} |\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|^{1/2} \text{sen} \alpha}. \quad (3.21)$$

Expresión para el campo electromagnético en el interior de una película $z_j < z < z_{j+1}$.

En el interior de las películas los campos eléctricos resultan ser más complejos debido a que tenemos ondas viajando hacia arriba (dirección z positiva) o hacia abajo (dirección z negativa), además de que se deben considerar los efectos de la superposición de ondas debidas a las transmisiones y reflexiones múltiples que ocurren dentro.

Sin pérdida de generalidad para este caso las ondas también pueden expresarse como ondas esféricas de la forma [4]

$$E_j = \frac{1}{4\pi} \left[A_j(k_x, k_y) \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}_f)}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|} + B_j(k_x, k_y) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}_f)}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|} \right]. \quad (3.22)$$

en donde los coeficientes A_j y B_j tienen que incluir los efectos de la superposición de ondas mencionados. Los valores de estas constantes deberán de obtenerse a partir del estudio de la reflexión y transmisión de las ondas en el interior de las películas y del cumplimiento de las condiciones de frontera en cada una de las interfaces. La ecuación anterior por conveniencia se puede expresar como

$$E_j = \frac{e^{i(k_x(x-x_f) + k_y(y-y_f))}}{4\pi |\mathbf{r}-\mathbf{r}_f|} \left[A_j(k_x, k_y) e^{-ik_{z_j}(z-z_f)} + B_j(k_x, k_y) e^{ik_{z_j}(z-z_f)} \right] \quad (3.23)$$

Coefficientes de reflexión y transmisión para películas delgadas.

Para hacer el análisis de las ondas electromagnéticas dentro de las películas delgadas es necesario conocer cómo será su reflexión o su paso a través de cada una de las interfases. Para ello es necesario conocer cómo son los coeficientes de reflexión y transmisión.

Aquí se tiene que dentro de la película delgada j el vector de propagación \mathbf{k} está definido como

$$n_j \mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}} + k_z \hat{\mathbf{z}}. \quad (3.24)$$

donde el parámetro \mathbf{k} es el número de onda en el vacío $k = 2\pi/\lambda$, teniendo la longitud de onda λ correspondiente en el vacío. La magnitud al cuadrado de la ecuación (3.24) será

$$k^2 n_j^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \quad (3.25)$$

Ahora se debe encontrar una forma de la ecuación anterior con variables que se puedan obtener experimentalmente, esto es, el ángulo rasante α , el número de onda (o la longitud de onda) y el índice de refracción. De las ecuaciones (2.138) y (2.139) tenemos que los coeficientes de reflexión y transmisión estarán en función de la componente normal a la interfaz del vector de propagación \mathbf{k} . Esto es, k_z es la única componente del vector \mathbf{k} que varía al pasar de un medio a otro. El valor de $k_{z,j}$ para la película j -ésima se obtiene despejándolo de la ecuación (3.25)

$$k_{z,j} = (k^2 n_j^2 - k_x^2 - k_y^2)^{1/2}. \quad (3.26)$$

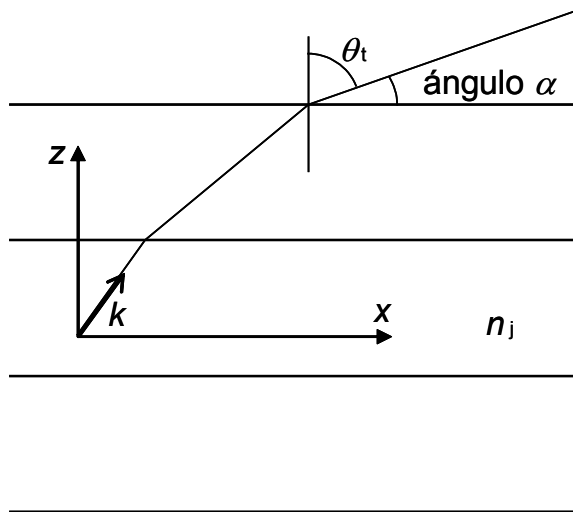


Figura 3.2. Componentes del vector de propagación \mathbf{k} .

Como se demostró en el capítulo anterior, las componentes del vector \mathbf{k} paralelas a las superficies no cambian (k_x y k_y) y, a partir de la figura 3.2, para la zona $z > z_0$ se tiene

$$k \cos \alpha = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (3.27)$$

y por lo tanto la ecuación (3.26) quedará como

$$k_{z,j} = k \left(n_j^2 - \cos^2 \alpha \right)^{1/2}. \quad (3.28)$$

Con esto, ahora los coeficientes de reflexión y transmisión dados por las ecuaciones (2.138) y (2.139) los podemos expresar en términos del ángulo α que es un observable de laboratorio y trataremos de encontrar su forma general para un sistema multilaminado de películas delgadas.

Para una onda plana adentro de la capa $j + 1$ y que incide sobre su interfase superior con $z = z_j$ tenemos que los coeficientes de reflexión y transmisión serán

$$R_{j+1,j} = \frac{k_{z,j+1} - k_{z,j}}{k_{z,j+1} + k_{z,j}} \quad (3.29)$$

y

$$T_{j+1,j} = \frac{2k_{z,j+1}}{k_{z,j+1} + k_{z,j}}. \quad (3.30)$$

Por otro lado para una onda plana que incide en la interfase $z = z_j$ desde la capa j el coeficiente de reflexión estará dado como

$$R_{j,j+1} = \frac{k_{z,j} - k_{z,j+1}}{k_{z,j} + k_{z,j+1}}, \quad (3.31)$$

o lo que es lo mismo

$$R_{j,j+1} = -R_{j+1,j}. \quad (3.32)$$

En tanto que para el coeficiente de transmisión se tiene que

$$T_{j,j+1} = \frac{k_{z,j}}{k_{z,j+1}} T_{j+1,j}. \quad (3.33)$$

Utilizando la ecuación (3.28) los coeficientes anteriores pueden expresarse en términos de α como

$$R_{j+1,j}(\alpha) = \frac{(n_{j+1}^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} - (n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}{(n_{j+1}^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + (n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}, \quad (3.34)$$

$$T_{j+1,j}(\alpha) = \frac{2(n_{j+1}^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}{(n_{j+1}^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + (n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}, \quad (3.35)$$

$$R_{j,j+1}(\alpha) = \frac{(n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} - (n_{j+1}^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}{(n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + (n_{j+1}^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}, \quad (3.36)$$

y

$$T_{j,j+1}(\alpha) = \frac{2(n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}{(n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + (n_{j+1}^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}} \quad (3.37)$$

3.3 Caso para una sola película sobre un sustrato

Continuando con el análisis de los campos eléctricos dentro de una película delgada vamos a estudiar primeramente el caso más sencillo que es el de una película delgada sobre un sustrato grueso. En este caso $M = 2$ donde $j = 1$ corresponde a la película y $j = 2$ al sustrato. La fuente de radiación se va a encontrar en algún punto dentro de la película delgada, esto es, dentro de la región $z_1 < z < z_0$. Como se ha indicado antes, las ondas que se encuentren en el vacío, $z > z_0$, se moverán exclusivamente en dirección z positiva y las ondas que se mueven en el sustrato, $z < z_1$, se desplazarán solamente hacia z negativa. En el interior de la película el campo eléctrico será una combinación de las ondas producidas por la fuente y las ondas que presentan reflexiones múltiples en las dos interfases de la película. Como se está interesado en registrar las ondas que se mueven en el vacío se tiene que tomar en cuenta que éstas serán el resultado de una serie de reflexiones y transmisiones múltiples en el interior de la película delgada.

Interferencia de haces múltiples para $z > z_0$.

El campo eléctrico a la salida de la película delgada no estará determinado por un solo haz, sino por una cantidad no medible de haces debido a la múltiple reflexión dentro de la película delgada, como se muestra en la figura 3.3. Por lo tanto el campo eléctrico fuera de la película estará determinado por la interferencia de todos los haces salientes de la película. Aquí vamos a tener dos casos: uno cuando el número de reflexiones en el interior de la película es par y otro cuando sea impar. Vemos a continuación cada uno de los casos.

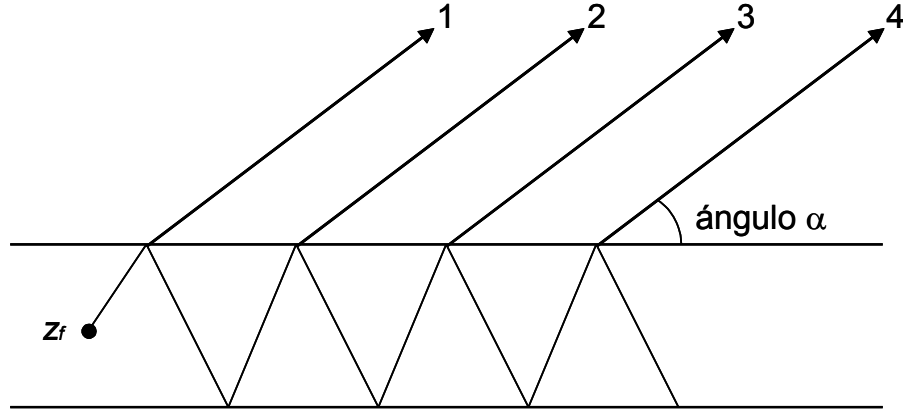


Figura 3.3. Emisión de rayos X dirigidos hacia la superficie $z = z_0$.

En el primer caso, cuando el número de reflexiones es par, tenemos que el \mathbf{k}_1 de la onda inicial saliente de la fuente está dirigido hacia la superficie $z = z_0$ (hacia arriba) y como se muestra en la figura 3.3. Aunque sea un número incontable de reflexiones, se supondrá que en el exterior de la película delgada se tienen n transmisiones del campo eléctrico (después haremos el límite cuando n tiende a infinito) [4,5]. El campo total sería

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{(1)} + \mathbf{E}^{(2)} + \dots + \mathbf{E}^{(n)}. \quad (3.38)$$

Aquí $E^{(1)}$ es el campo eléctrico directamente transmitido, y por lo tanto tendrá un valor:

$$E^{(1)} = T_{10} E_i e^{-\text{Im}[k_{z1}(z_0 - z_f)]}, \quad (3.39)$$

en donde E_i corresponde al campo transversal emitido por la fuente en la dirección indicada y el término $e^{-\text{Im}[k_{z1}(z_0 - z_f)]}$ se toma para considerar el atenuamiento de E_i antes de llegar a la superficie $z = z_0$. El siguiente rayo transmitido $E^{(2)}$ será el campo eléctrico reflejado en la interfaz entre los medios n_1 y n_0 para después ser reflejado por la interfaz entre los medios n_1 y n_2 y, posteriormente, ser transmitido [1,2]

$$E^{(2)} = T_{10} R_{10} R_{12} E_i e^{-\text{Im}[k_{z1}(z_0 - z_f)]} e^{-i2[k_{z1}(z_0 - z_1)]}, \quad (3.40)$$

en donde el último término corresponde a la diferencia de camino óptico que tiene este rayo al moverse en el interior de la película. Por lo tanto, para los demás campos eléctricos tendremos

$$E^{(3)} = T_{10} R_{10} R_{12} R_{10} R_{12} E_i e^{-\text{Im}[k_{z1}(z_0 - z_f)]} e^{-i4[k_{z1}(z_0 - z_1)]} = T_{10} R_{10}^2 R_{12}^2 E_i e^{-\text{Im}[k_{z1}(z_0 - z_f)]} e^{-i4[k_{z1}(z_0 - z_1)]}, \quad (3.41)$$

$$E^{(4)} = T_{10} R_{10} R_{12} R_{10} R_{12} R_{10} R_{12} E_i e^{-\text{Im}[k_{z1}(z_0 - z_f)]} e^{-i6[k_{z1}(z_0 - z_1)]} = T_{10} R_{10}^3 R_{12}^3 E_i e^{-\text{Im}[k_{z1}(z_0 - z_f)]} e^{-i6[k_{z1}(z_0 - z_1)]}, \quad (3.42)$$

y así sucesivamente, hasta llegar a $E^{(n)}$ dado por

$$E^{(n)} = T_{10} R_{10}^{n-1} R_{12}^{n-1} E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2(n-1)[k_{z,1}(z_0-z_1)]}. \quad (3.43)$$

Si ahora se considera un número infinito de ondas transmitidas y se sustituyen en la ecuación (3.38) el campo eléctrico se expresa como

$$E = T_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left[\sum_{n=1}^{\infty} R_{10}^{n-1} R_{12}^{n-1} e^{-i2(n-1)[k_{z,1}(z_0-z_1)]} \right] E_i. \quad (3.44)$$

Como las magnitudes de R_{10} y R_{12} son menores o iguales a la unidad tenemos que la suma en esta expresión es convergente de la forma

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}, \quad (3.45)$$

donde $|x| < 1$. Por lo tanto la componente transversal del campo eléctrico fuera de la película delgada para un número par de reflexiones estará determinada por la expresión

$$E = \frac{T_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]}}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} E_i. \quad (3.46)$$

El segundo caso se tiene cuando el número de reflexiones es impar. Esto se tendrá cuando el vector \mathbf{k}_1 saliente de la fuente está dirigido hacia la superficie del sustrato $z = z_1$ (hacia abajo) como se muestra en la figura 3.4.

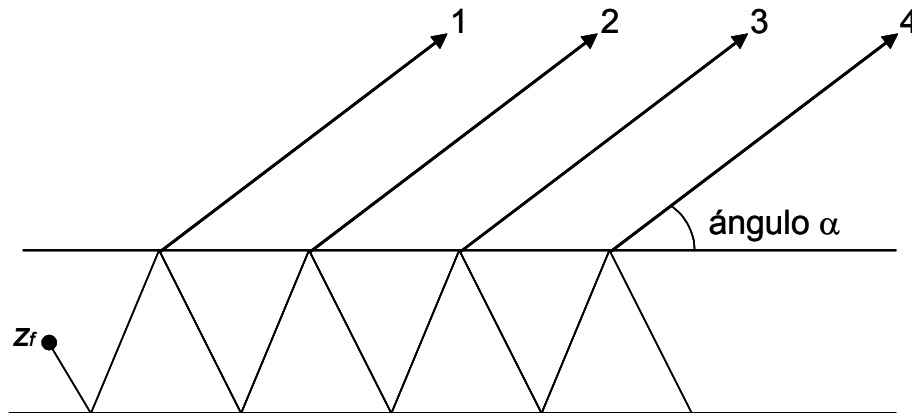


Figura 3.4. Emisión de rayos X dirigidos hacia la superficie $z = z_1$.

El tratamiento que se da para este caso es el mismo que el anterior con la única diferencia de que hay que tomar el coeficiente de la primera reflexión en la interfaz entre el medio n_1 y el medio n_2 . El resto del tratamiento es el mismo. Así, para la primera onda transmitida en este caso su campo eléctrico transversal estará dado como

$$E^{(1)} = T_{10} R_{12} E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}, \quad (3.47)$$

en donde se han tomado el atenuamiento y la diferencia de camino óptico con respecto al rayo que sale transmitido directamente. Luego para el siguiente rayo que es transmitido y los subsecuentes se tiene que

$$E^{(2)} = T_{10} R_{12} R_{10} R_{12} E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}, \quad (3.48)$$

$$E^{(3)} = T_{10} R_{12} R_{10} R_{12} R_{10} R_{12} E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} e^{-i4[k_{z,1}(z_0-z_1)]}, \quad (3.49)$$

y así sucesivamente, de tal manera que para un número infinito de rayos se tiene

$$E = T_{10} R_{12} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} \left[\sum_{n=1}^{\infty} R_{10}^{n-1} R_{12}^{n-1} e^{-i2(n-1)[k_{z,1}(z_0-z_1)]} \right] E_i. \quad (3.50)$$

Esta última expresión converge de acuerdo a la ecuación (3.45) y por lo tanto se puede expresar como

$$E = \frac{T_{10} R_{12} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} E_i. \quad (3.51)$$

Finalmente tendremos que el campo eléctrico final será la suma de los campos eléctricos dados por (3.46) y (3.51) encontrados para los dos casos, de tal manera que

$$E = \frac{T_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} \right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} E_i. \quad (3.52)$$

Esta última expresión nos indica cómo sería el efecto de la interferencia de haces múltiples en el campo eléctrico fuera de la película, pero además este campo debe de cumplir con las condiciones de frontera en la película. Por lo tanto se debe conocer cómo es el campo eléctrico en el interior de la película.

Interferencia de haces múltiples dentro de la película, $z_1 < z < z_0$

Se tiene que en el interior de la película el campo eléctrico resultante será la suma de las interferencias de cada uno de los campos que se reflejan dentro. Como posteriormente será

necesario evaluar las condiciones de frontera para los campos eléctricos en la interfaz $z = z_0$ procederemos a hacer un análisis semejante al anterior, en donde buscaremos la resultante del campo E como la superposición de los campos eléctricos E^+ que se mueven con dirección z positiva hacia la interfase, (hacia arriba) y los E^- que se mueven desde la interfase, (hacia abajo).

Para el caso de los E^+ el resultado es igual al obtenido en la sección anterior sin el término de transmisión T_{10} pues las E^+ son las que dan origen a las ondas transmitidas hacia el vacío, $z > z_0$. De esta manera se tiene que

$$E^+ = \frac{e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} (1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]})}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} E_i. \quad (3.53)$$

Ahora se requiere encontrar el campo resultante E^- en la parte inferior de la interfase $z = z_0$, para las ondas que se mueven en dirección z negativa, (hacia abajo). En este caso nuevamente se tendrá que considerar si la onda es el resultado de un número par o impar de reflexiones que sufra dentro de la película. Cuando el número es impar tendremos que el primer rayo en ir “hacia abajo” será (ver figura 3.3)

$$E^{-(1)} = R_{10} E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]}. \quad (3.54)$$

El segundo y los subsecuentes serán

$$E^{-(2)} = R_{10}^2 R_{12} E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]} \quad (3.55)$$

y

$$E^{-(3)} = R_{10}^3 R_{12}^2 E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i4[k_{z,1}(z_0-z_1)]}. \quad (3.56)$$

Así sucesivamente para un número impar de reflexiones se tiene

$$E^- = R_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left[\sum_{n=1}^{\infty} R_{10}^{n-1} R_{12}^{n-1} e^{-i2(n-1)[k_{z,1}(z_0-z_1)]} \right] E_i, \quad (3.57)$$

la cual se reduce a

$$E^- = \frac{R_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]}}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} E_i. \quad (3.58)$$

Para el caso de un número par de reflexiones tendremos que para el primer rayo y los subsecuentes (ver figura 3.4)

$$E^{-(1)} = R_{12} R_{10} E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}, \quad (3.59)$$

$$E^{-(2)} = R_{10}^2 R_{12}^2 E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]} \quad (3.60)$$

y

$$E^{-(3)} = R_{10}^3 R_{12}^3 E_i e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} e^{-i4[k_{z,1}(z_0-z_1)]} . \quad (3.61)$$

Para un número par de reflexiones

$$E^- = R_{10} R_{12} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} \left[\sum_{n=1}^{\infty} R_{10}^{n-1} R_{12}^{n-1} e^{-i2(n-1)[k_{z,1}(z_0-z_1)]} \right] E_i, \quad (3.62)$$

la cual se reduce a

$$E^- = \frac{R_{10} R_{12} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} E_i. \quad (3.63)$$

La resultante final de E^- se obtiene sumando las ecuaciones (3.58) y (3.63), de tal manera que

$$E^- = \frac{R_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]} \right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} E_i. \quad (3.64)$$

Condiciones de frontera en la interfase $z = z_0$.

Hasta este momento hemos encontrado cómo sería la resultante de la superposición de las ondas de campo eléctrico tanto en la parte de arriba como debajo de la interfase $z = z_0$ en función del ángulo rasante α . Sin embargo, todavía hay que considerar que los campos eléctricos deben de satisfacer las condiciones de frontera en esta interfase. Para ello tomamos las soluciones generales para el vacío y el interior de la película dadas por las ecuaciones (3.20) y (3.23). Ahora será necesario encontrar las condiciones que deben de guardar los coeficientes $A_1(\alpha)$, $B_1(\alpha)$ y $B_0(\alpha)$. Por otro lado y con base en lo anterior, estas constantes deberán ser proporcionales a la superposición de todas las ondas dadas en las secciones anteriores. Además el campo eléctrico inicial E_i debe de ser proporcional a la potencia radiada por la fuente P , de tal manera que [1]

$$E_i \sim \left(\frac{P}{4 \pi} \right)^{1/2}. \quad (3.65)$$

Como se ha mencionado antes tenemos que el término A_1 está asociado con las ondas que se mueven “hacia abajo”, B_1 con las que se mueven “hacia arriba” y B_0 con las que se transmiten en el vacío. De acuerdo a lo anterior se puede expresar a las constantes como

$$A_1(\alpha) = A'_1 \frac{R_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}\right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} \left(\frac{P}{4\pi}\right)^{1/2}, \quad (3.66)$$

$$B_1(\alpha) = B'_1 \frac{e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}\right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} \left(\frac{P}{4\pi}\right)^{1/2} \quad (3.67)$$

y

$$B_0(\alpha) = B'_0 \frac{T_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}\right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} \left(\frac{P}{4\pi}\right)^{1/2}. \quad (3.68)$$

donde A'_1, B'_1 y B'_0 son constantes reales. En la interfase $z = z_0$ se tienen que cumplir la continuidad del campo eléctrico y la continuidad de la derivada con respecto de z del campo eléctrico. La continuidad del campo eléctrico es

$$\frac{e^{i(k_x(x-x_f)+k_y(y-y_f))}}{4\pi|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_f|} \left[A_1(\alpha) e^{-ik_{z,1}(z_0-z_f)} + B_1(\alpha) e^{ik_{z,1}(z_0-z_f)} \right] = \frac{e^{i(k_x(x-x_f)+k_y(y-y_f))}}{4\pi|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_f|} B_0(\alpha) e^{ik_{z,0}(z_0-z_f)}. \quad (3.69)$$

Sustituyendo $A_1(\alpha)$, $B_1(\alpha)$ y $B_0(\alpha)$ en la ecuación anterior se tiene

$$\begin{aligned} & A'_1 \frac{R_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}\right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} \left(\frac{P}{4\pi}\right)^{1/2} e^{-ik_{z,1}(z_0-z_f)} + \\ & + B'_1 \frac{e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}\right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} \left(\frac{P}{4\pi}\right)^{1/2} e^{ik_{z,1}(z_0-z_f)} = \\ & = B'_0 \frac{T_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} \left(1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]}\right)}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} \left(\frac{P}{4\pi}\right)^{1/2} e^{ik_{z,0}(z_0-z_f)} \end{aligned} \quad (3.70)$$

Lo anterior se reduce a

$$A'_1 R_{10} e^{-ik_{z,1}(z_0-z_f)} + B'_1 e^{ik_{z,1}(z_0-z_f)} = B'_0 T_{10} e^{ik_{z,0}(z_0-z_f)}. \quad (3.71)$$

Procediendo de forma análoga, para la continuidad de la $\frac{\partial E}{\partial z}$ se tiene que

$$-iA'_1 k_{z,1} R_{10} e^{-ik_{z,1}(z_0-z_f)} + iB'_1 k_{z,1} e^{ik_{z,1}(z_0-z_f)} = iB'_0 k_{z,0} T_{10} e^{ik_{z,0}(z_0-z_f)}. \quad (3.72)$$

De estas ecuaciones se obtiene que el coeficiente del campo eléctrico fuera de la película delgada es

$$B_0(\alpha) = \frac{k_{z,0}}{k_{z,1}} \frac{T_{10} e^{-\text{Im}[k_{z,1}(z_0-z_f)]} (1 + R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_f-z_1)]})}{1 - R_{10} R_{12} e^{-i2[k_{z,1}(z_0-z_1)]}} \left(\frac{P}{4\pi} \right)^{1/2}. \quad (3.73)$$

3.4 Intensidad en un punto fuera de la película

Intensidad dependiente del ángulo α

En la sección anterior se demostró cómo sería el campo eléctrico E en un punto del vacío debido a una fuente en el interior de la película delgada. Como en este trabajo se quiere determinar la intensidad de los rayos X emitidos por la película, la magnitud física que se necesita determinar es la irradiancia. Como se muestra en la ecuación (2.155) la irradiancia es proporcional al cuadrado del valor esperado del campo eléctrico. De esta manera si se sustituye la ecuación (3.73) en la (3.20) y considerando que $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_f| \approx r$ tenemos que el cuadrado de campo eléctrico es

$$|E(\alpha)|^2 = \frac{1}{4\pi r^2} \left(\frac{k_{z,0}}{k_{z,1}} \frac{T_{10} e^{-\text{Im}(k_{z,1}(z_0-z_f))} (1 + R_{12} e^{i2(k_{z,1}(z_f-z_1))})}{1 - R_{10} R_{12} e^{i2(k_{z,1}(z_0-z_1))}} \right)^2 \left(\frac{P}{16\pi^2} \right). \quad (3.74)$$

Esta expresión indica cómo sería la magnitud al cuadrado del campo eléctrico por unidad de área sobre una esfera de radio r . El último término que aparece entre paréntesis se asocia con la probabilidad de inducir rayos X en la película debidos a la radiación con la que se excita a los átomos de la película. De esta manera la intensidad observada en un punto localizado a una distancia r en dirección al ángulo α por unidad de área, por estereorradián y por fotón emitido en z_f se expresa como

$$I(\alpha) = \left(\frac{k_{z,0}}{k_{z,1}} \frac{T_{10} e^{-\text{Im}(k_{z,1}(z_0-z_f))} (1 + R_{12} e^{i2(k_{z,1}(z_f-z_1))})}{1 - R_{10} R_{12} e^{i2(k_{z,1}(z_0-z_1))}} \right)^2. \quad (3.75)$$

Como se muestra en la figura 3.5 la producción de rayos X dentro de la película no es debida a una sólo fuente puntual sino a una serie continua de fuentes puntuales a lo largo de la trayectoria por donde viaje la radiación que excita a los átomos de la película y que induce la emisión de los rayos X. En general, cuando la película es muy delgada, esta trayectoria es una línea recta transversal a la película. Tomando en cuenta este hecho, se debe integrar esta última ecuación sobre el grosor de la película $z_0 - z_1$, en términos de la coordenada espacial z_f , de esta manera se tiene la relación

$$I(\alpha) = |T_{01}(\alpha)|^2 \int_{z_1}^{z_0} e^{-2\text{Im}\{k_{z,1}(z_0-z_f)\}} \left| \frac{1 + R_{12}(\alpha)e^{2ik_{z,1}(z_f-z_1)}}{1 - R_{10}(\alpha)R_{12}(\alpha)e^{2ik_{z,1}(z_0-z_1)}} \right|^2 dz_f. \quad (3.76)$$

Esta expresión también se puede obtener a partir del teorema de reciprocidad [3,4] o por otro método con campos eléctricos [4,5].

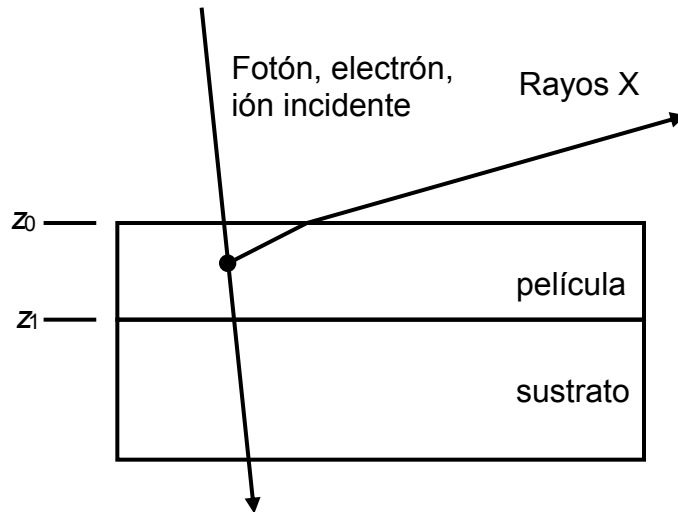


Figura 3.5. Producción de rayos X debido a la incidencia de iones, fotones o electrones a través de una línea continua dentro de la película delgada.

Referencias

- [1] H. P. Urbach and P. K. Bokx. *Physical Review B* **53** (1996) 3752.
- [2] T. Noma, A. Iida and K. Sakurai, *Physical Review B* **48** (1993) 17524.
- [3] G. H. Vineyard. *Physical Review B* **26** (1982) 4146.
- [4] J. R. Reitz, F. J. Milford, R. W. Christy. “Fundamentos de la Teoría Electromagnética”. Tercera Edición, Addison-Wesley Iberoamericana. México, 1986.
- [5] E. Hecht. “Optica”. Tercera Edición, Addison Wesley Iberoamericana. Madrid, 2000.

Capítulo 4

Inducción de rayos X: XRF, PIXE y EDS

En este trabajo se está estudiando los efectos en los rayos X que son inducidos en una película delgada y que son detectados a ángulos rasantes a la superficie. En los capítulos anteriores se ha mostrado cómo son los efectos en ondas electromagnéticas de longitudes de onda muy pequeñas en medios materiales. En este capítulo se muestra cómo se generan las ondas electromagnéticas de rayos X por transiciones atómicas. Dichas ondas son las consideradas en estos estudios.

4.1 Principios físicos de la inducción de rayos X

El fenómeno físico en el cual se basa la emisión de rayos X es la transición de un electrón de una capa atómica superior a una más interna [1]. Esta transición se produce cuando existe una vacante en alguna de las capas atómicas internas. Una manera de producir vacantes es por medio de la ionización de las capas internas del átomo. Esto se puede lograr excitando al átomo por medio de la incidencia de proyectiles como: electrones, iones o fotones. De esta manera, el choque de uno de estos proyectiles con uno de los electrones produce su expulsión del átomo quedando este último ionizado. Posteriormente se presenta la subsecuente desexcitación del átomo por medio del decaimiento de un electrón desde una capa superior para cubrir la vacante acompañada de la emisión de un fotón de rayos X para eliminar el exceso de energía en el átomo, tal como se muestra en la figura 4.1. En este último proceso hay una competencia con otros procesos, como SON la emisión de un electrón Auger, o la emisión simultánea de un electrón Auger y un fotón de rayos X (efecto Auger radiativo). La energía del fotón emitido es característica del elemento en cuestión, por lo cual es posible, mediante la medición de dicha energía, la identificación del elemento. Por este motivo se les denomina rayos X característicos. Las transiciones electrónicas mencionadas dan origen a grupos de líneas de rayos X bien determinadas, y que tienen una denominación acorde con la capa de la cual se removió el electrón original. Así, una línea que fue causada por una vacante en la capa K del átomo (número principal cuántico $n=1$), se llamará una línea K ; una línea debida a una vacante en la capa L (número cuántico principal $n=2$) será una línea L , y así sucesivamente.

Ahora bien, el electrón que llena una vacante puede provenir de un gran número de subcapas, limitado solamente por las reglas de selección en transiciones atómicas (estas reglas están dadas por la mecánica cuántica). Esta situación hace que aparezca una cierta cantidad de líneas K , de líneas L , etc., que deben también identificarse. La distinción se hace en virtud de la intensidad relativa que cada una de estas líneas tiene dentro de su grupo. De esta manera, la línea K más intensa será la línea K_α y la siguiente es la K_β . Cada una de estas líneas puede, a su vez, estar compuesta por cierto número de transiciones, que se reconocen por los subíndices (1, 2, 3, ...) existiendo así las líneas $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$; $K_{\beta 1}$, $K_{\beta 2}$, La figura 4.2 describe las líneas más importantes para el análisis con PIXE, señalando las

transiciones atómicas a la cual corresponden. La nomenclatura descrita se conoce como de Siegbahn.

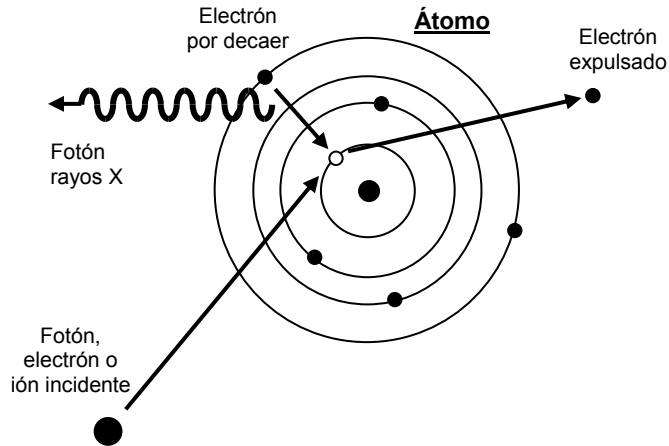


Figura 4.1. Diagrama de un proceso físico en el cual se muestra cómo se induce la emisión de un fotón de rayos X.

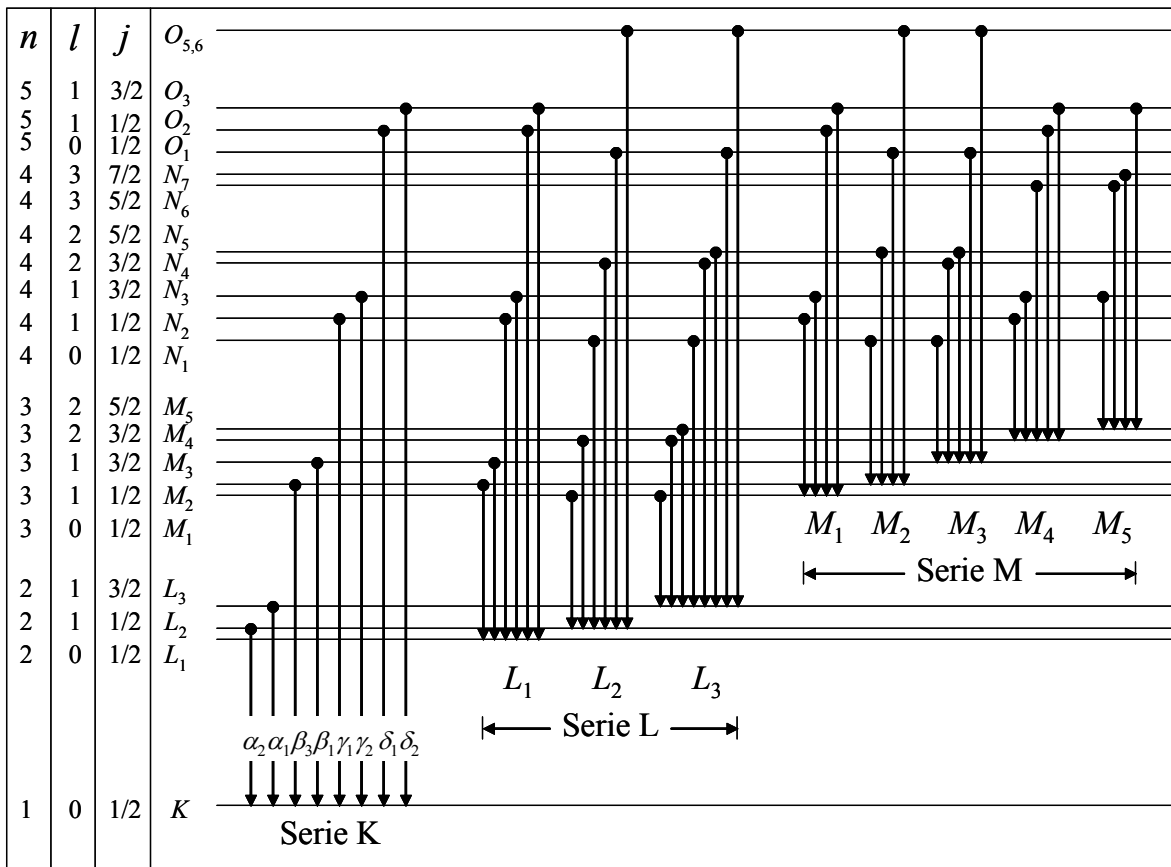


Figura 4.2. Niveles de energía atómicas y transiciones atómicas que dan origen a rayos X.

La probabilidad de producir fotones de rayos X de una línea en particular, o *Sección eficaz de producción de rayos X*, es una magnitud física que depende de varios factores, como lo son el tipo de proyectil (electrón, ión o fotón), su energía de incidencia, y el átomo en particular. Para las líneas K esta sección eficaz se relaciona directamente con la probabilidad de ionizar el átomo, o *sección eficaz de ionización*, a través de la ecuación

$$\sigma_{X,i} = \sigma_{1,K} \omega_K P_i \quad (4.1)$$

donde $\sigma_{X,i}$ es la sección eficaz de producción de rayos X, $\sigma_{1,K}$ es la sección eficaz de ionización, ω_K es la producción de fluorescencia y P_i es la intensidad relativa de todas las posibles transiciones que producen radiación en la línea i . La fluorescencia ω_K es el cociente del número total de fotones X emitidos entre el número total de vacantes producidas en la capa K .

Para la capa L (y capas superiores) las expresiones son más complicadas, puesto que además de las transiciones radiativas de electrones procedentes de capas más altas, se puede dar el caso de transiciones no radiativas entre las subcapas L_1 , L_2 y L_3 . De esta manera, si se crea una vacante en la subcapa L_1 , ésta puede llenarse con un electrón de la subcapa L_2 , dejando a su vez una vacante que se ocupa con un electrón de la subcapa L_3 , tal como se muestra en la figura 4.3. El efecto neto es un hueco en L_3 . A estas transiciones no radiativas se les conoce como Coster-Kroning. En estos casos, es preciso conocer las secciones de ionización y las fluorescencias para cada subcapa. De esta manera, se tiene un conjunto de secciones eficaces para las líneas L más comunes:

$$\sigma_{X,L_\alpha} = (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{3\alpha}, \quad (4.2)$$

$$\sigma_{X,L_\beta} = \sigma_{L_1} \omega_1 F_{1\beta} + (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) \omega_2 F_{2\beta} + (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{3\beta}, \quad (4.3)$$

$$\sigma_{X,L_\gamma} = \sigma_{L_1} \omega_1 F_{1\gamma} + (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) \omega_2 F_{2\gamma} \quad (4.4)$$

y

$$\sigma_{X,L_1} = (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3 F_{31}, \quad (4.5)$$

donde las σ_{L_i} son las secciones de ionización de las subcapas i ; ω_i son las fluorescencias, f_{ij} es la probabilidad de una transición Coster-Kroning de la capa j a la capa i ; F_{nx} es la probabilidad de que ocurra una transición radiativa, tomada como la fracción de rayos X originados por una vacante en la subcapa L_n y que contribuya a la línea L_x .

Como puede verse de las ecuaciones (4.2) - (4.5), se requiere de un conocimiento de las secciones de ionización de cada subcapa para poder calcular la sección de producción de rayos X de cada una de las líneas L . Sin embargo, en ocasiones se puede definir una fluorescencia promedio y utilizar una intensidad relativa de la línea i , en analogía con el caso de la capa K , y resultará entonces

$$\sigma_{X,L_i} = \sigma_{1,L} \bar{\omega}_L P_i, \quad (4.6)$$

donde $\sigma_{i,L}$ es la sección de ionización total de la capa L , ω_L es la fluorescencia promedio, y P_i es la intensidad relativa. El uso de esta ecuación se ve limitado porque P_i depende de la energía de incidencia del proyectil.

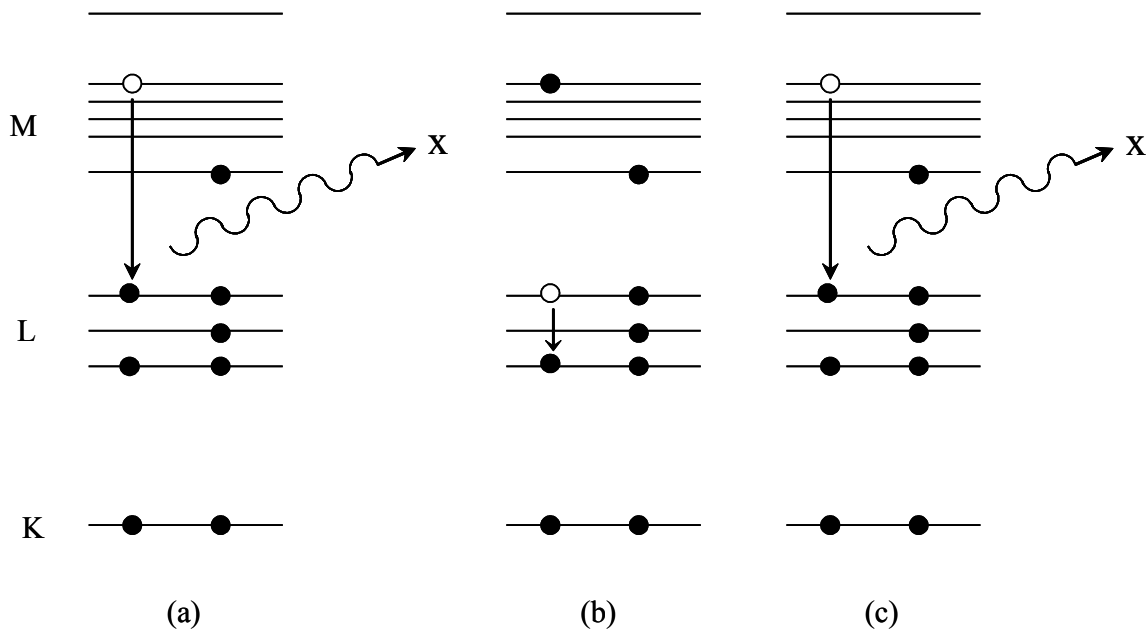


Figura 4.3. Se muestran dos ejemplos de los eventos posibles cuando la producción de rayos X involucra niveles atómicos L o superiores. En (a) se produce la emisión directa de un fotón de rayos X debido a una vacante inicial en la capa L_3 . En (b) se presenta la generación de una vacante en la capa L_3 debida inicialmente a una ionización en la capa L_1 la cual por medio de una transición Coster-Kronig es ocupada por un electrón de la capa L_3 . Posteriormente en (c) se produce la emisión de un fotón de rayos X.

4.2 Emisión de rayos X en películas delgadas

Al incidir iones, electrones o fotones energéticos sobre un material se va a producir la emisión de rayos X debido a los efectos explicados en la sección anterior. Si el material consiste en una película muy delgada (< 250 nm) el número de fotones de rayos X emitidos de una determinada línea de emisión correspondiente a átomos de un elemento constituyente de la película y que son registrados por un detector que subtende un ángulo sólido Ω es

$$Y_x = \frac{\Omega}{4\pi} \frac{N_0 \sigma_X \rho t}{\cos \theta}, \quad (4.7)$$

donde Y_x es el número de fotones de rayos X inducidos y detectados, N_0 es el número de partículas (fotones, iones o electrones) que inciden sobre la película, σ_X es la sección de producción de rayos X para el elemento de interés y para la línea de emisión indicada, ρ es

la densidad atómica del elemento en cuestión en el blanco, t es el espesor de la película y θ es el ángulo entre la normal al blanco y la dirección del haz incidente de fotones o partículas.

Esta aproximación es adecuada para películas delgadas debido a que se pueden ignorar otros efectos como el frenado de los iones o la dispersión en el caso de electrones. Así, cuando la inducción se efectúa con iones la pérdida de energía al atravesar la película es muy pequeña (no más del 2-3 %) y la sección de producción de rayos X se puede considerar constante. Cuando se utilizan electrones, al chocar con la película se dispersan mucho debido a la masa pequeña de los mismos electrones. En este caso la σ_X puede considerarse como una función promedio que depende solamente de la energía de los electrones incidentes. Cuando la ionización se produce con fotones la σ_X está asociada directamente con el coeficiente de absorción de los fotones incidentes por los átomos del elemento emisor de rayos X.

4.3 Dispositivos experimentales para la inducción de rayos X (XRF, PIXE y EDS)

Cuando la inducción de los rayos X en la película delgada se produce por medio de fotones estamos hablando del procedimiento conocido como fluorescencia de rayos X o XRF por sus siglas en inglés X-Ray fluorescence [2, 3]. En este caso el sistema experimental consiste en un tubo de rayos X o en un acelerador que produce radiación de sincrotrón. El método más común es con un tubo de rayos X. Así, los fotones emitidos por el tubo se hacen incidir sobre la muestra con la película delgada y los rayos X emitidos son registrados con un detector, figura 4.4.

Cuando la inducción de los rayos X se efectúa por medio de iones se le conoce como técnica de Emisión de Rayos X Inducidos por Partículas o PIXE, por sus siglas en inglés: Particle Induced X-ray Emission [4]. Aquí el sistema experimental consiste por lo regular en una cámara al vacío conectada a una línea por donde pasa un haz de iones proveniente de un acelerador de partículas. El haz de iones se hace incidir sobre la película tal como se muestra en la figura 4.5 y los rayos X emitidos son registrados por un detector. El número de iones N_0 que incide en la película se obtiene a partir de la carga total integrada en el blanco y dividida entre el estado de carga del ión incidente (+1, +2, etc.) y la carga fundamental $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$.

Cuando la inducción de los rayos X se efectúa por medio de los electrones producidos en un microscopio electrónico se le conoce a la técnica como espectroscopía por dispersión en energía o EDS, por sus siglas en inglés Energy Dispersión Spectroscopy [5, 6]. Aquí los electrones producidos por el filamento del microscopio se hacen incidir sobre la película y los rayos X inducidos son registrados por medio de un detector, tal como se muestra en la figura 4.6.

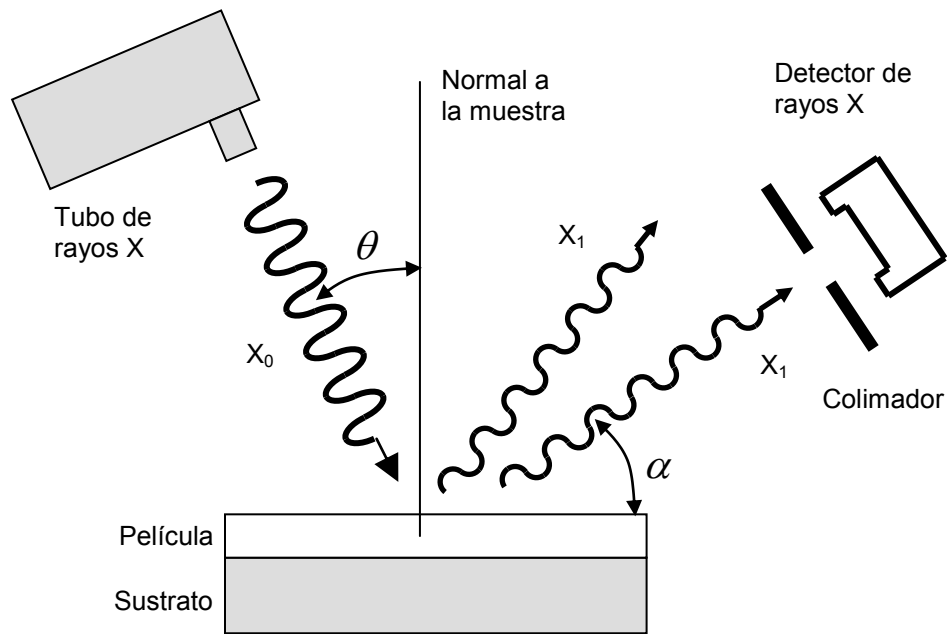


Figura 4.4. En la fluorescencia de rayos X se hacen incidir fotones X_0 producidos por un tubo de rayos X sobre la muestra con un ángulo θ con respecto de la normal. Los fotones incidentes producen la ionización de capas atómicas internas en los átomos de la película generando la emisión de rayos X característicos X_1 que son registrados por un detector que forma un ángulo α con respecto a la superficie de la muestra.

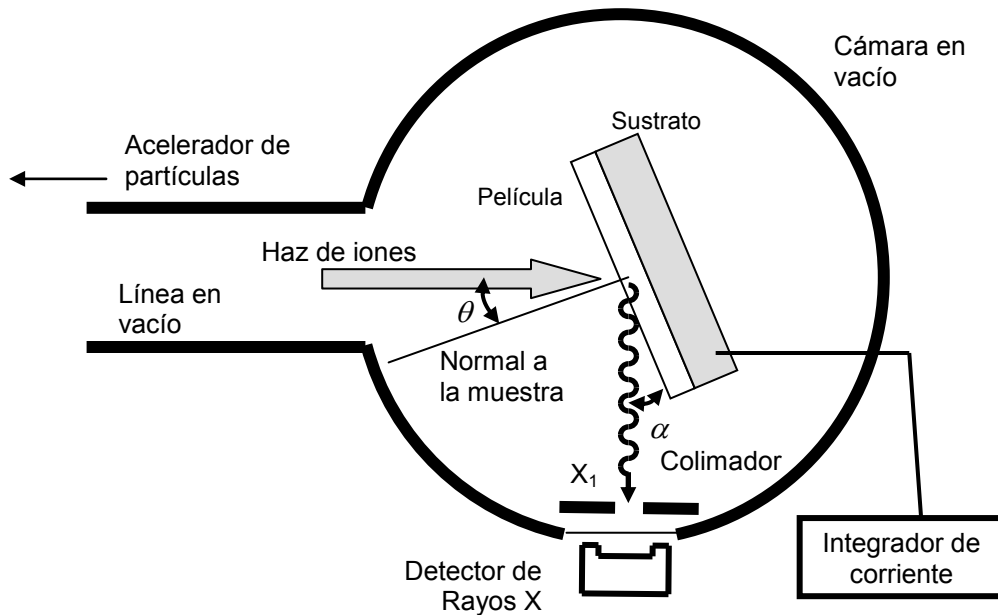


Figura 4.5. Sistema típico de inducción de rayos X por incidencia de iones. Aquí un haz de iones (protones, helio, etc.) se hacen incidir sobre la muestra con un ángulo θ con respecto de la normal. Los iones incidentes producen la ionización de capas atómicas internas en los átomos de la película generando la emisión de rayos X característicos X_1 que son registrados por un detector que forma un ángulo α con respecto a la superficie de la muestra.

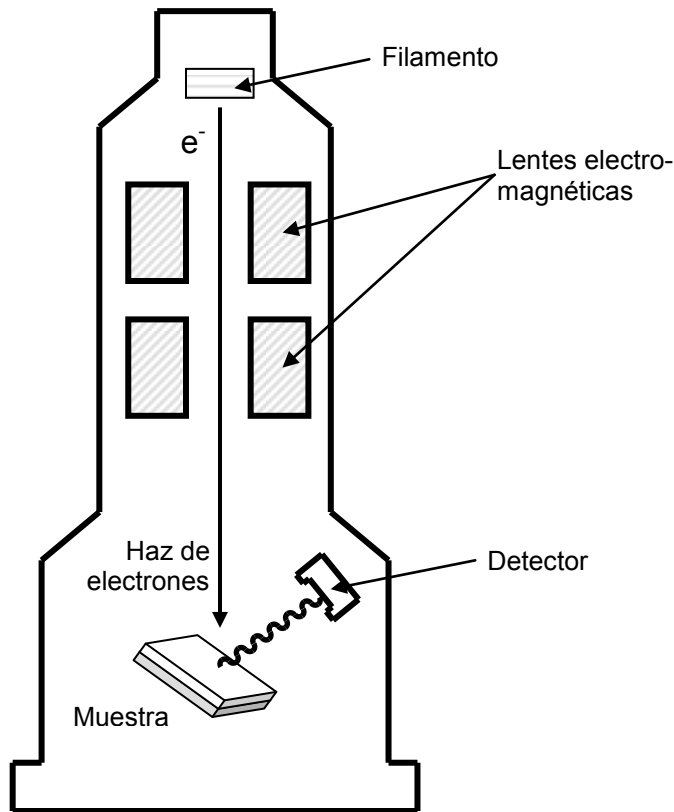


Figura 4.6. Sistema típico utilizado en los microscopios electrónicos para detectar los rayos X generados en una muestra por la incidencia de los electrones. Aquí a la técnica se le conoce como Espectroscopía por Dispersión en energía, EDS.

En los tres casos anteriores se tiene que el proceso experimental de registro de los rayos X es semejante. En la figura 4.7 se muestra el procesamiento electrónico de la radiación registrada por el detector. Inicialmente los rayos X que interaccionen con el detector van a producir la generación de carga eléctrica en su interior. La carga eléctrica producida se colecta por dos electrodos para formar un pulso eléctrico con un voltaje máximo V_0 directamente proporcional a la energía del fotón de rayos X que interaccionó con el detector. Este pulso eléctrico es enviado a un preamplificador para que aumente su tamaño y posteriormente a un amplificador que acondiciona la señal para que pueda pasar a un convertidor análogo a digital (ADC). En el ADC los pulsos son convertidos a valores digitales dependiendo de la altura de la señal análoga V_p . Los pulsos digitales pasan a un analizador multicanal o MCA (Multichannel Analyzer) en donde se grafica el tamaño de la señal producida en el detector contra el conteo del número de eventos que ocurren. Como el tamaño de la señal es proporcional a la energía de los rayos X que registre el detector, tendremos que el MCA nos indica el espectro de la radiación que está llegando al detector. Esto es, la intensidad de los rayos X contra su energía. En la figura 4.8 se muestra un espectro típico de rayos X obtenido utilizando XRF, PIXE o EDS.

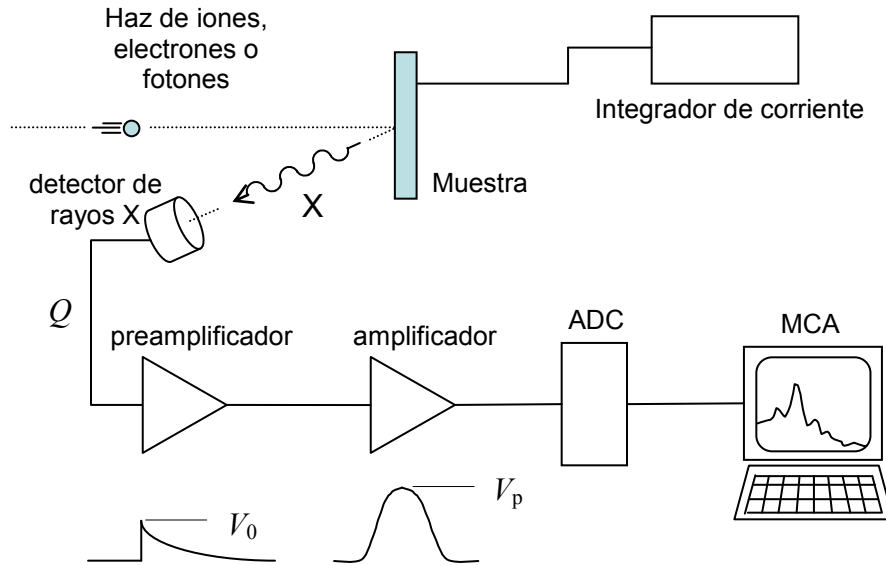


Figura 4.7. Sistema típico de detección de rayos X. Primero los rayos X son emitidos por una muestra debido a su interacción con iones, electrones o fotones. Los rayos X que registre el detector van a producir una carga eléctrica Q que genera un pulso eléctrico en el preamplificador. Posteriormente el pulso es acondicionado por un amplificador y convertida a señal digital con el ADC. Finalmente la señal digital se envía a un analizador multicanal, MCA, en donde se obtiene el espectro de la radiación registrada por el detector.

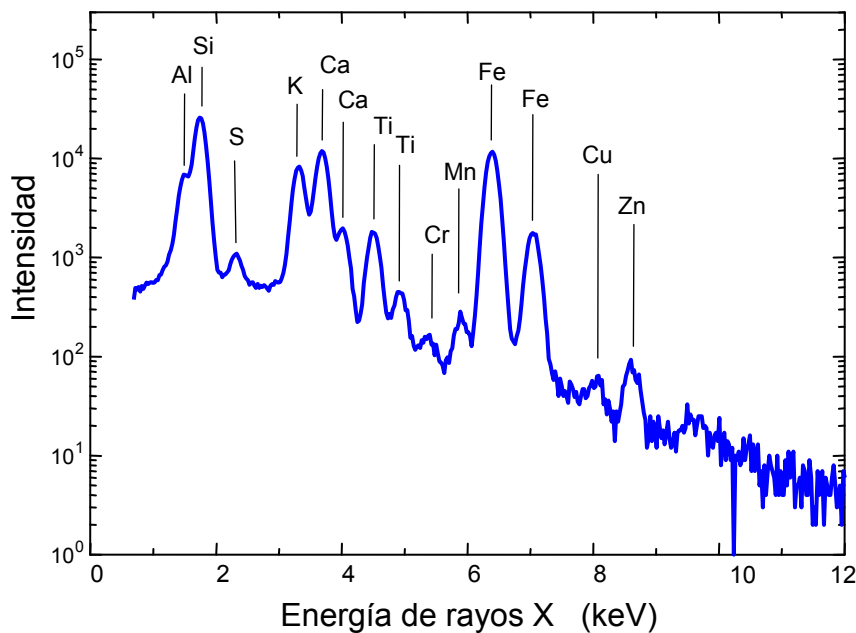


Figura 4.8. Espectro típico de emisión de rayos X como se obtiene en un analizador multicanal (MCA). Los picos corresponden a las líneas de emisión de los rayos X característicos emitidos por la muestra. En la figura se indica a qué elemento corresponde cada uno de los picos. Como puede verse, los picos se encuentran superpuestos sobre un fondo de radiación continuo denominado como fondo de radiación.

4.4 Radiación de fondo

Los espectros de emisión de rayos X presentan una radiación de fondo, a la cual se superponen las líneas de rayos X característicos emitidos por la muestra, tal como se muestra en la figura 4.8. Las causas de este fondo son, principalmente, la radiación de frenado (*Bremsstrahlung*) de los electrones secundarios al perder energía dentro de la muestra, la dispersión de la radiación en el detector (*dispersión Compton*), radiación gamma emitida por otras interacciones nucleares entre los iones y el blanco o el sustrato (como en el caso de protones interactuando con flúor). Todos estos factores complican el análisis de un espectro de rayos X, por lo cual su deconvolución se efectúa actualmente con programas de cómputo, que tienen como parte fundamental el ajuste de las líneas (aproximadamente gaussianas) y del fondo. Un ejemplo de estos es el programa AXIL [7].

Referencias

- [1] A. Beiser. *“Conceptos de física moderna”*. Segunda edición, McGraw-Hill. México, 1990.
- [2] D.A. Skoog and J.J. Learly. *“Principles of instrumental analysis”*. Harcourt Brace College Publishers, Fort Worth, 1992.
- [3] K.A. Robinson and J.F. Robinson. *“Análisis instrumental”*. Pearson-Prentice Hall. Madrid, 2001.
- [4] S.A.S. Johansson and J.L. Campbell. *“PIXE, a novel technique for elemental analysis”*. John Wiley & Sons. New York 1979.
- [5] D. Vaughan. *“Energy-Dispersive X-ray Microanalysis: An introduction”*. Editado por KeveX Instruments, Inc. San Carlos, 1989.
- [6] M.J. Yacamán y J. Reyes. *“Microscopía electrónica: una visión del microcosmos”*. Fondo de Cultura Económica. México, 1995.
- [7] P. Van Espen, H. Nullens and W. Maenhaut. *“Microbeam Analysis”*. Newbury San Francisco Press. San Francisco, 1979.

Capítulo 5

Simulación

El objetivo de este trabajo es analizar cómo se espera que sea el comportamiento de los rayos X inducidos en películas delgadas y su observación para ángulos rasantes a la superficie. Con la finalidad de poder hacer esto se hará una serie de comparaciones con diferentes sistemas sencillos para identificar cómo serían los espectros de interferencia esperados en estos casos. Además se analizarán por separado cada uno de los términos involucrados en estas simulaciones.

5.1 Cálculo del índice de refracción para rayos X

La longitud de onda λ de la radiación en el vacío la expresamos en cm y la calculamos con base en la energía de los rayos X a partir de la conocida expresión

$$E = hv = \frac{hc}{\lambda}, \quad (5.1)$$

en donde $h = 6.626 \times 10^{-34}$ J·s es la constante de Planck y $c = 2.998 \times 10^8$ m/s es la velocidad de la luz en el vacío.

Primero se analiza el índice de refracción para el caso de rayos X. En este caso se hablará de rayos X cuando las longitudes de onda de la radiación electromagnética sean menores de 25 Å y mayores 0.025 Å ($0.025 \text{ Å} < \lambda < 25 \text{ Å}$), esto es, correspondiente a energías de 0.5 keV a 500 keV.

Como se ha mostrado en el capítulo 2, la parte real del índice de refracción sigue el modelo de von Laue que estableció en 1931. En ello se indica que mientras la radiación incidente corresponda a los rayos X y no se encuentre muy cerca de un borde de absorción, el índice de refracción será proporcional a la densidad electrónica como

$$n^2 = 1 - \frac{Nq_e^2}{m\epsilon_0\omega^2}, \quad (5.2)$$

y para frecuencias grandes tenemos que

$$n = \sqrt{1 - \frac{Nq_e^2}{m\epsilon_0\omega^2}} \cong 1 - \frac{Nq_e^2}{2m\epsilon_0\omega^2} = 1 - 4.152 \times 10^{-4} \frac{Z\rho}{ME^2}. \quad (5.3)$$

Lo anterior se expresa como

$$n = 1 - \delta. \quad (5.4)$$

En la figura 5.1 se muestra el cálculo de δ en función de la energía de los rayos X en varios medios materiales correspondientes a diferentes densidades electrónicas. La flecha indica cómo aumenta la densidad electrónica en estos medios. En esta gráfica la mayor densidad electrónica corresponde al oro y la menor al carbón. De acuerdo con la ecuación 3.8 tenemos que el ángulo crítico tiene un comportamiento semejante al de δ , esto es, decrece con la energía de los rayos X y aumenta con la densidad electrónica del medio.

Factor δ en función de la energía de los fotones

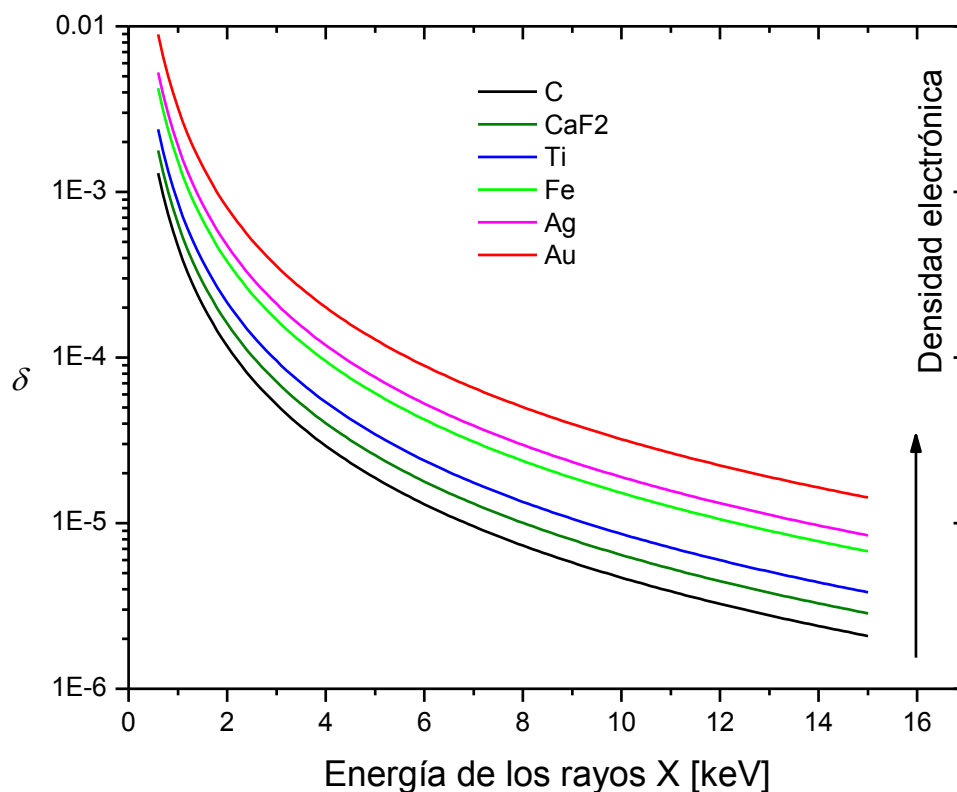


Figura 5.1. Dependencia del factor δ en función de la energía de los fotones

De la ecuación (3.11) tenemos que la parte imaginaria del índice de refracción está dada como

$$\beta_j = \frac{\mu\lambda}{4\pi}, \quad (5.5)$$

en donde μ es el coeficiente de atenuación lineal de los rayos X de energía E en un material dado. Por lo regular lo que se reporta en tablas es el coeficiente de atenuación másico μ en

unidades de cm^2/g . El coeficiente de atenuación lineal se obtiene dividiendo el valor másico entre la densidad del medio absorbedor, cuyas unidades serán en cm^{-1} . El coeficiente de atenuación para rayos X de energía (o línea de emisión) i en un medio material j se denotará como μ_i^j . Por ejemplo, el coeficiente de atenuación para los rayos X de la línea K_α del hierro en oro se expresará como $\mu_{\text{Fe}K\alpha}^{\text{Au}}$. El coeficiente de atenuación se puede obtener a partir de tablas [1-5] o mediante los programas de cómputo ATTENV4 de Orlic et al. [6] o el XCOM [7].

En la figura 5.2 se muestra el cálculo del factor β en función de la energía de los fotones en varios medios materiales correspondientes a diferentes densidades electrónicas. Para este cálculo se utilizó el programa XCOM [7]. Los saltos en las gráficas corresponden a los bordes de absorción de cada elemento (corresponden a las energías de ionización de cada una de las capas atómicas: K, L, M, \dots).

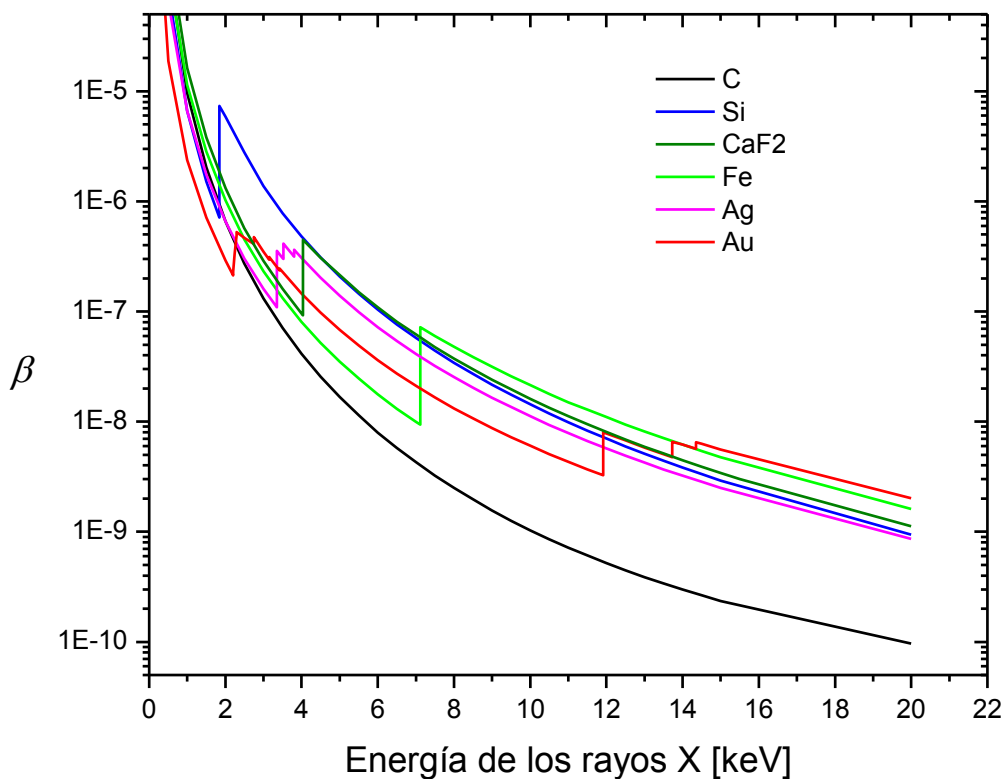


Figura 5.2 Dependencia de la parte imaginaria β del índice de refracción en función de la energía de los fotones.

5.2 Intensidad en función del ángulo α

En el capítulo 3 se mostró que la intensidad de los rayos X emitidos a lo ancho de una película delgada y que son observados a un ángulo α rasante, por unidad de área, por estereorradián y por fotones emitidos está dado por la ecuación (3.76)

$$I(\alpha) = \frac{|T_{01}(\alpha)|^2}{\Delta z} \int_{z_1}^{z_0} e^{-2 \operatorname{Im}[k_{z,1}(z_0 - z_f)]} \left| \frac{1 + R_{12}(\alpha) e^{2ik_{z,1}(z_f - z_1)}}{1 - R_{10}(\alpha) R_{12}(\alpha) e^{2ik_{z,1}(z_0 - z_1)}} \right|^2 dz_f \quad (5.6)$$

en donde se ha dividido entre $\Delta z = z_0 - z_1$ para normalizarla independientemente del grosor de la película. Para el estudio de esta expresión, por conveniencia se representa en tres partes, de tal manera que

$$I(\alpha) = |T_{01}(\alpha)|^2 \frac{\Psi(\alpha)}{\Gamma(\alpha)}. \quad (5.7)$$

En esta expresión $\Psi(\alpha)$ es la función resultante de integrar la parte dependiente de la profundidad z_f en donde se encuentra la fuente puntual de rayos X en la película, la cual está dada como

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha) = & \int_{z_1}^{z_0} e^{-2 \operatorname{Im}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_f)} \left| 1 + R_{12} e^{2ik_{z,1}(z_f - z_1)} \right|^2 dz_f = \frac{1 - e^{-2 \operatorname{Im}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)}}{2 \operatorname{Im}\{k_{z,1}\}} \left[1 + R_{12}^2 e^{-2 \operatorname{Im}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)} \right] + \\ & + \frac{e^{-2 \operatorname{Im}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)}}{\operatorname{Re}\{k_{z,1}\}} \left[\operatorname{Re}\{R_{12}\} \operatorname{sen}(2 \operatorname{Re}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)) + \operatorname{Im}\{R_{12}\} \left[\cos(2 \operatorname{Re}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)) - 1 \right] \right]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

La función $\Gamma(\alpha)$ es el denominador del coeficiente por interferencia de haces múltiples, dado como

$$\begin{aligned} \Gamma(\alpha) = & \left| 1 - R_{10} R_{12} e^{2ik_{z,1}(z_0 - z_1)} \right|^2 = \\ = & 1 + e^{-2 \operatorname{Im}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)} \left[2(\operatorname{Re}\{R_{10}\} \operatorname{Im}\{R_{12}\} + \operatorname{Im}\{R_{10}\} \operatorname{Re}\{R_{12}\}) \operatorname{sen}(2 \operatorname{Re}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)) - \right. \\ & \left. - 2(\operatorname{Re}\{R_{10}\} \operatorname{Re}\{R_{12}\} - \operatorname{Im}\{R_{10}\} \operatorname{Im}\{R_{12}\}) \cos(2 \operatorname{Re}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)) + R_{10}^2 R_{12}^2 e^{-2 \operatorname{Im}\{k_{z,1}\}(z_0 - z_1)} \right]. \end{aligned} \quad (5.9)$$

El cálculo de la $I(\alpha)$ dado por la ecuación (5.6) resulta ser complicado y su forma difícil de visualizar directamente a partir de los términos involucrados. Por este motivo, para comprender mejor cómo es esta intensidad se procederá a efectuar cálculos para diferentes sistemas de películas delgadas. Así también estudiar cómo son los comportamientos por separado de cada uno de los términos o factores involucrados con la finalidad de ver cómo es su relación con la intensidad $I(\alpha)$. En las siguientes secciones se analizan estos términos involucrados.

Dado que la teoría se basa en ángulos α rasantes, tenemos que la región en la que se hará énfasis para los cálculos estará entre 0 y 80 miliradianes. En el apéndice 1 se muestran los ángulos críticos calculados para varias líneas de rayos X característicos en diversos medios materiales.

5.3 Análisis de la transmitancia.

En primera instancia se procederá a estudiar la transmitancia $|T_{01}|^2$, que es parte de la ecuación (5.6). El coeficiente de transmisión de un medio i hacia un medio j lo expresamos como T_{ij} y está dado por

$$T_{ij} = \frac{2(n_i^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}{(n_i^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + (n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}. \quad (5.10)$$

Para $i=0$ (vacío) y $j=1$ (película) queda como

$$T_{01} = \frac{2\text{sen}\alpha}{\text{sen}\alpha + (n_1^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}. \quad (5.11)$$

El análisis que aquí se hace corresponde solamente para la superficie vacío-película donde el término T_{01} no depende del espesor de la película, ni del sustrato. Para este caso la transmitancia $|T_{01}|^2$ es

$$|T_{01}|^2 = \frac{4\text{sen}^2\alpha}{\left[\text{sen}^2\alpha + a_1^{1/2} + 2a_1^{1/4}\text{sen}\alpha \cos\theta_1 \right]}, \quad (5.12)$$

en donde

$$a_1 = (\text{sen}^2\alpha + \delta_1^2 - \beta_1^2 - 2\delta_1)^2 + (2\beta_1 - 2\beta_1\delta_1)^2 \quad (5.13)$$

y

$$\theta_1 = \frac{1}{2} \text{ang} \cos \left[\frac{\text{sen}^2 \alpha + \delta_1^2 - \beta_1^2 - 2\delta_1}{\left[(\text{sen}^2 \alpha + \delta_1^2 - \beta_1^2 - 2\delta_1)^2 + (2\beta_1 - 2\beta_1 \delta_1)^2 \right]^{1/2}} \right]. \quad (5.14)$$

En el caso de la ecuación (5.6) tendremos que la transmitancia es la función moduladora general de la forma del espectro de intensidad de los rayos X rasantes. En la figura 5.3 se muestra la transmitancia para rayos X de la línea de Si $K\alpha$ en una película de silicio en función del ángulo α .

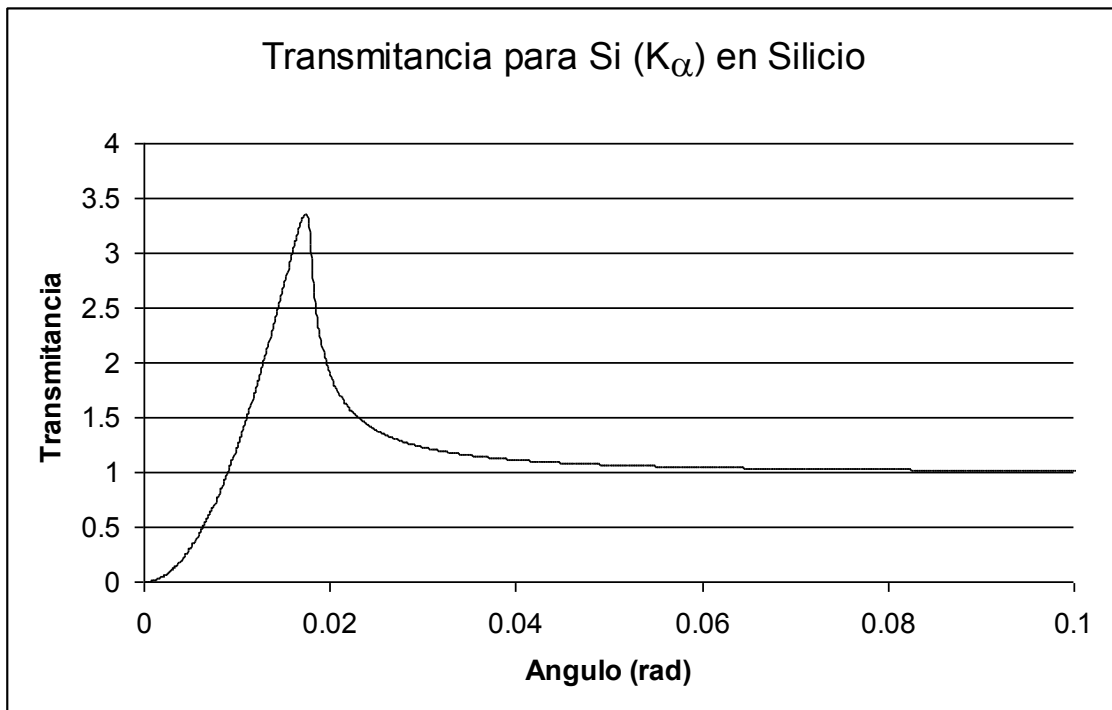


Figura 5.3. Transmitancia de la línea Si $K\alpha$ en una película de Si.

En esta gráfica se observa cómo la transmitancia crece a partir de cero hasta un máximo de intensidad muy marcado sobre el ángulo crítico (17.8 mrad). Posteriormente decrece hasta alcanzar una regularidad a partir a los 80 miliradianes, llegando al valor unidad.

A continuación, en las siguientes figuras 5.4 a 5.10 se muestran las transmitancias para diferentes líneas de rayos X en diversos materiales.

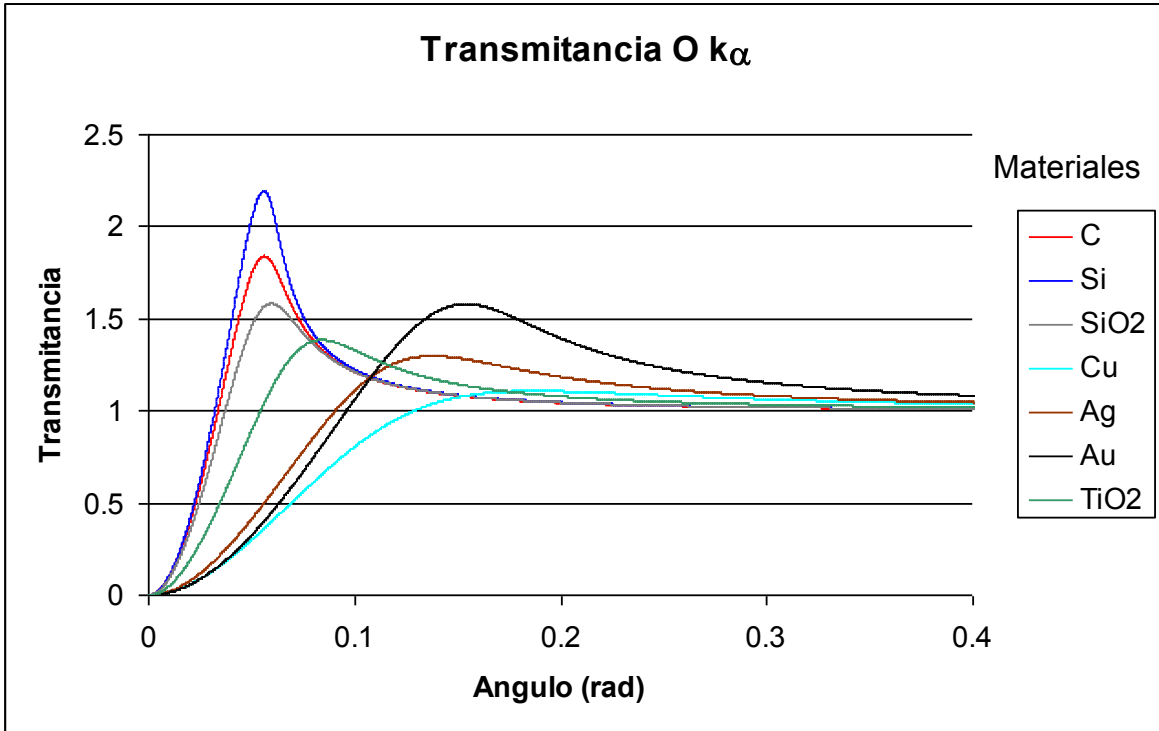


Figura 5.4. Transmitancias $|T_{01}|^2$ para rayos X de O $K\alpha$ en diversos materiales.

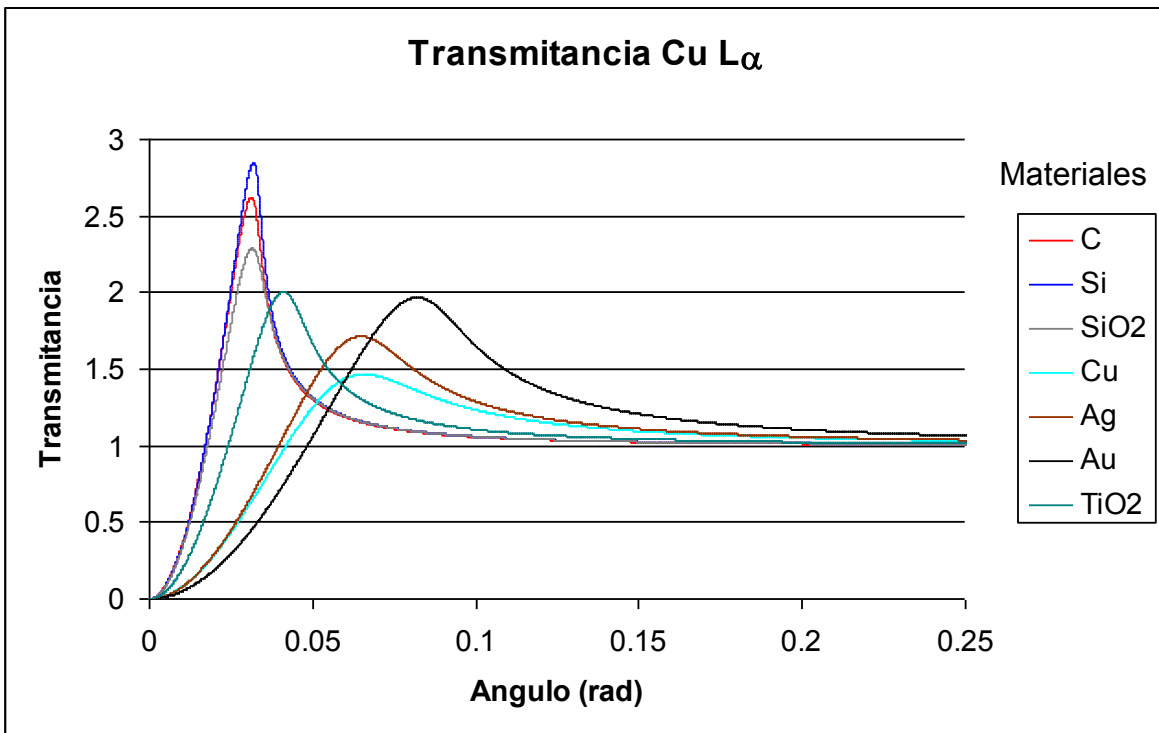


Figura 5.5. Transmitancias $|T_{01}|^2$ para rayos X de Cu $L\alpha$ en diversos materiales.

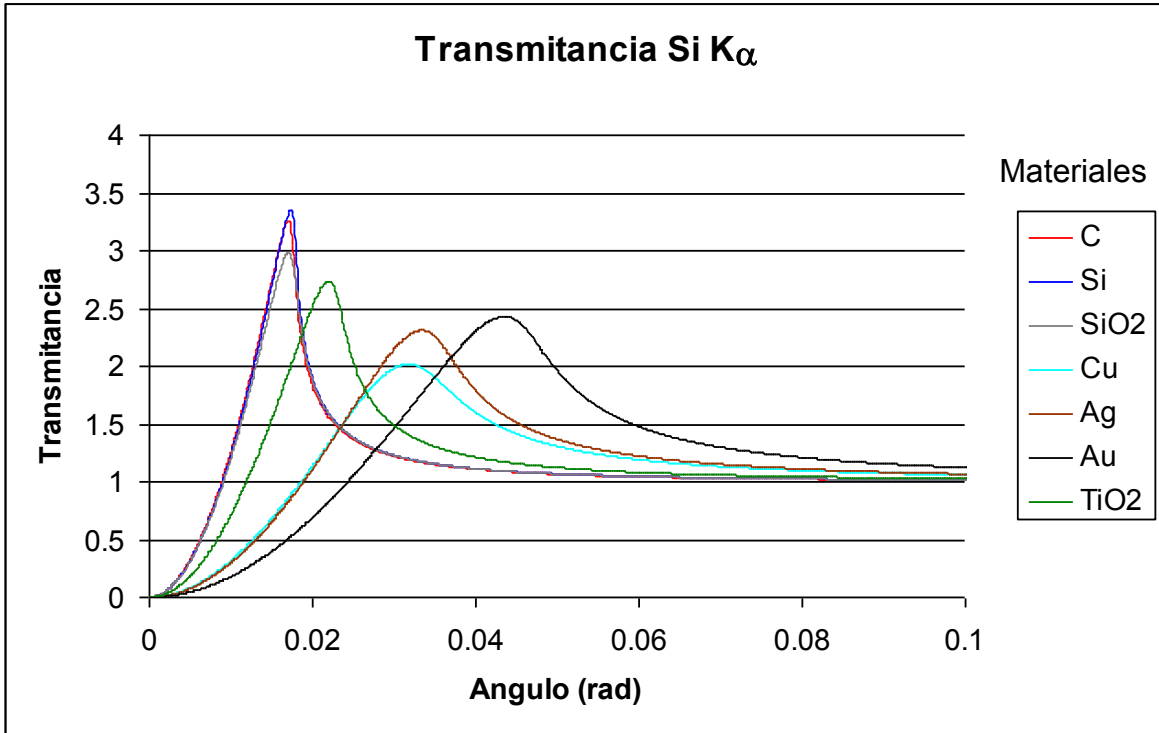


Figura 5.6. Transmitancias $|T_{01}|^2$ para rayos X de Si $K\alpha$ en diversos materiales.

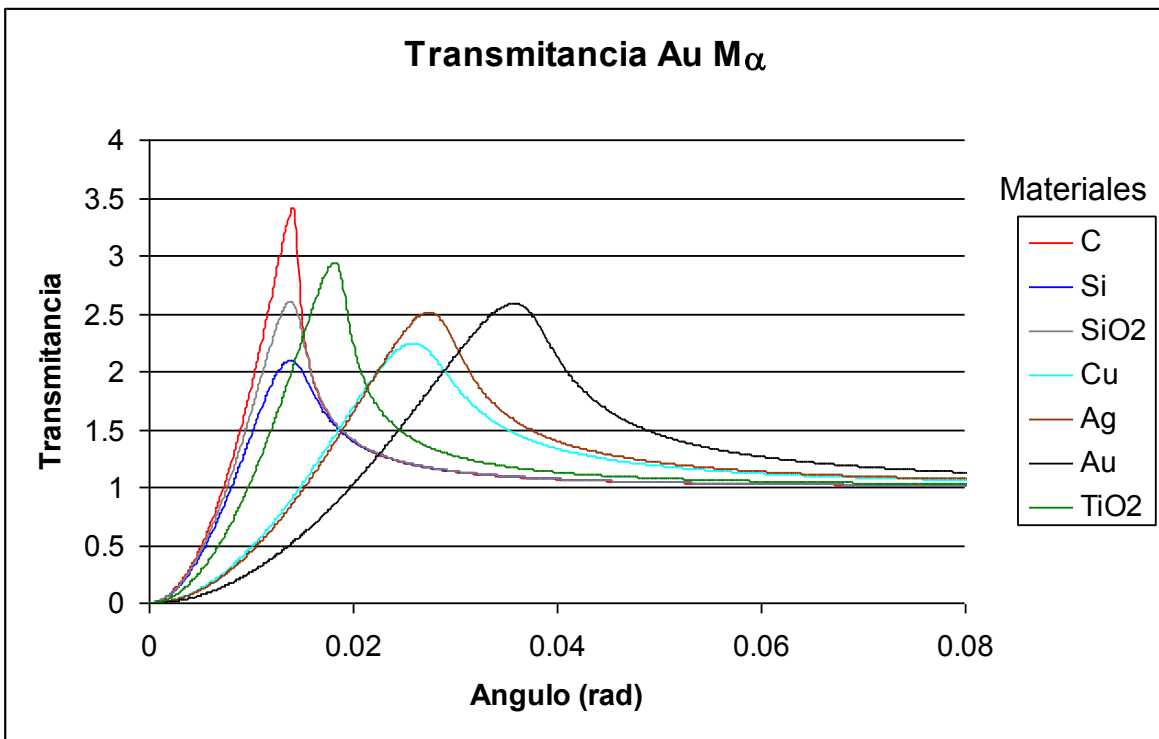


Figura 5.7. Transmitancias $|T_{01}|^2$ para rayos X de Au $M\alpha$ en diversos materiales.

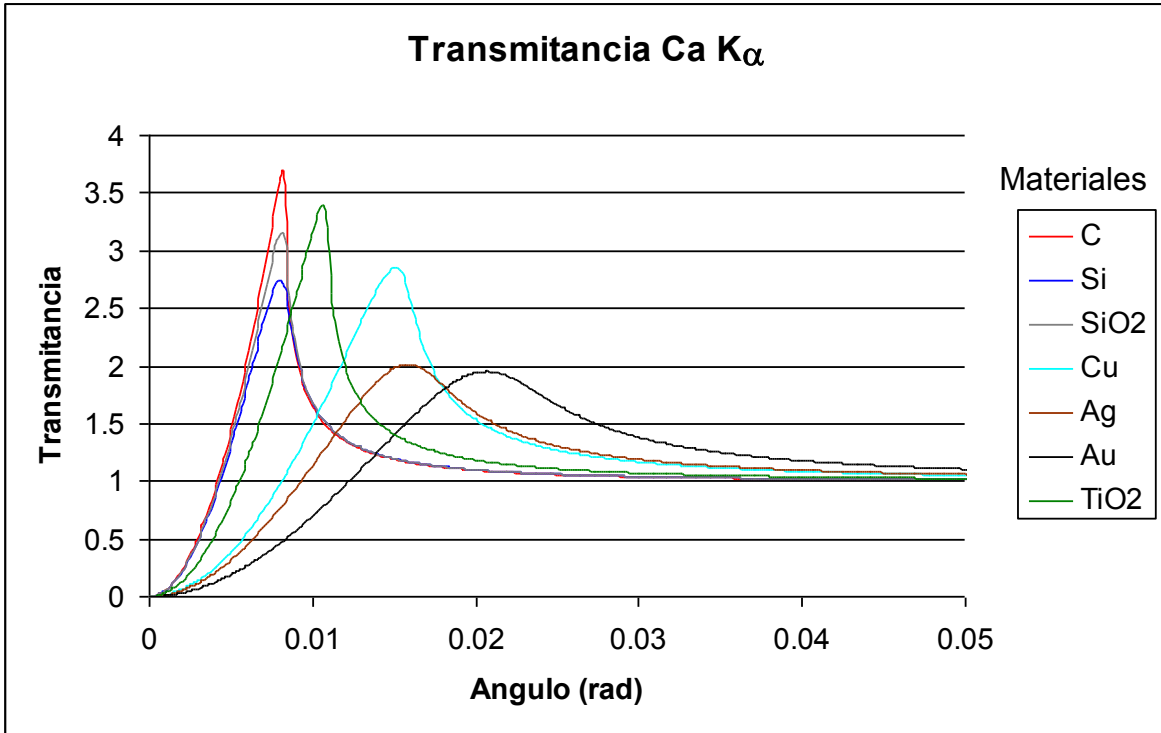


Figura 5.8. Transmitancias $|T_{01}|^2$ para rayos X de Ca $K\alpha$ en diversos materiales.

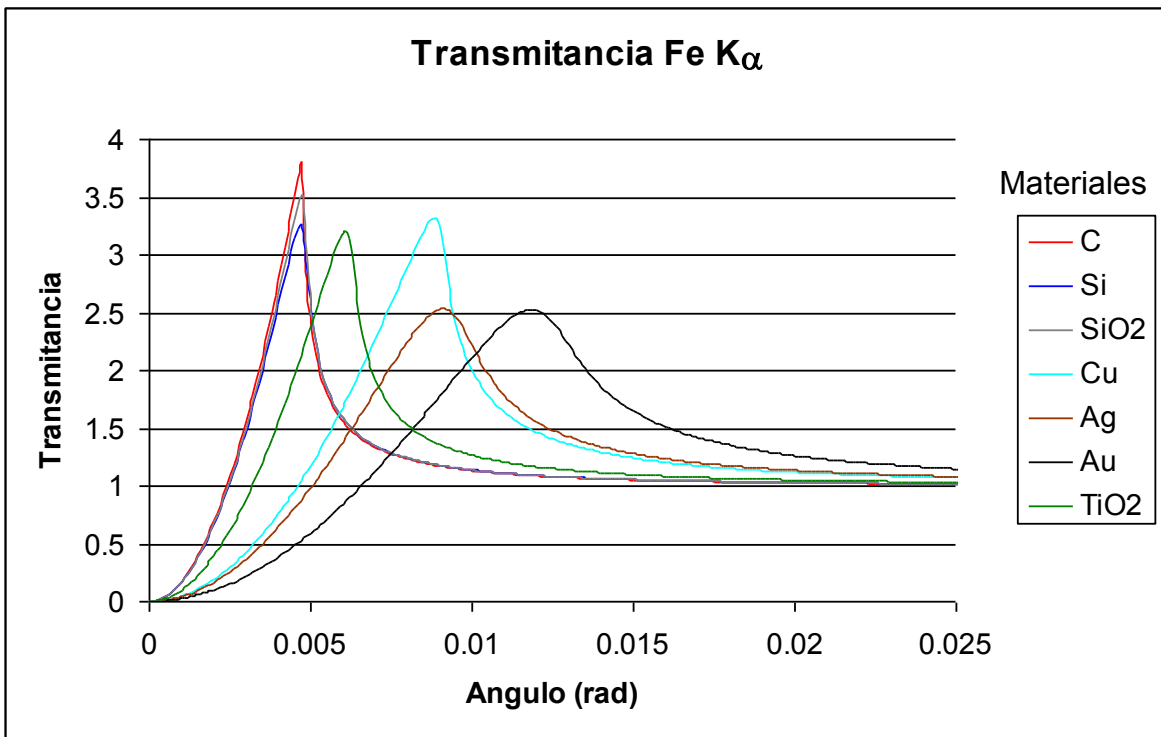


Figura 5.9. Transmitancias $|T_{01}|^2$ para rayos X de Fe $K\alpha$ en diversos materiales.

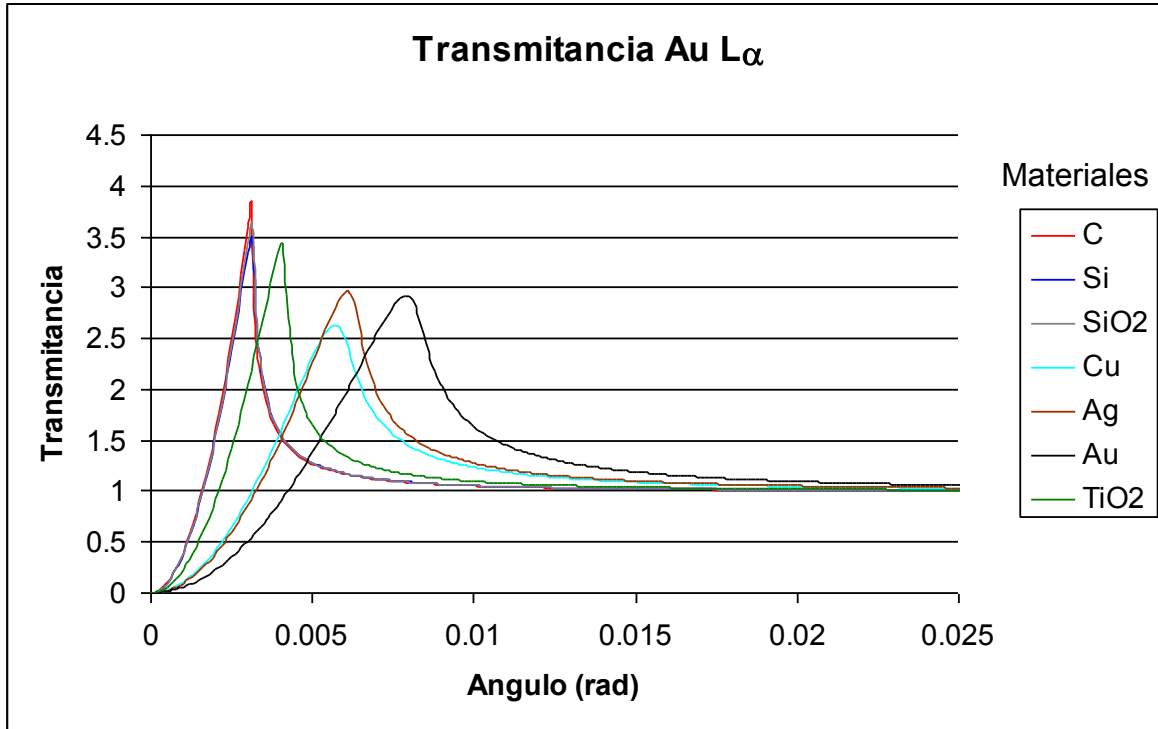


Figura 5.10. Transmitancias $|T_{01}|^2$ para rayos X de Au $L\alpha$ en diversos materiales.

De estas gráficas se observa que la posición del máximo de la transmitancia correspondiente al ángulo crítico, disminuye a medida que aumenta la energía de los rayos X. La posición del máximo de la transmitancia también depende de la densidad electrónica de la película. Para películas de materiales con densidades electrónicas pequeñas como el carbón, el máximo de la transmitancia se encuentra más cercano a cero y va recorriéndose hacia ángulos mayores al ir aumentando la densidad del material hasta llegar al Au con la mayor densidad electrónica. Esto es, la posición de los picos sigue un orden sucesivo con respecto a la densidad electrónica.

La amplitud de los picos en cada material no presenta cambios de una manera continua con la densidad electrónica del material. Estos cambios no tienen un orden continuo porque son originados por el término β del índice de refracción y tienen que ver con los saltos en los coeficientes de absorción μ en las orillas de absorción. La anchura de los picos es mayor a medida que el ángulo crítico aumenta.

En las figuras 5.11 y 5.12 se muestran las transmitancias para varias líneas de rayos X característicos en silicio y oro respectivamente. En estos dos casos el comportamiento de la transmitancia concuerda con lo expresado en los dos párrafos anteriores.

Para poder determinar experimentalmente este efecto, lo más conveniente es tener un sistema, (línea de rayos X- material de la película), de tal manera que tenga las mayores amplitudes y anchuras en los picos de su transmitancia.

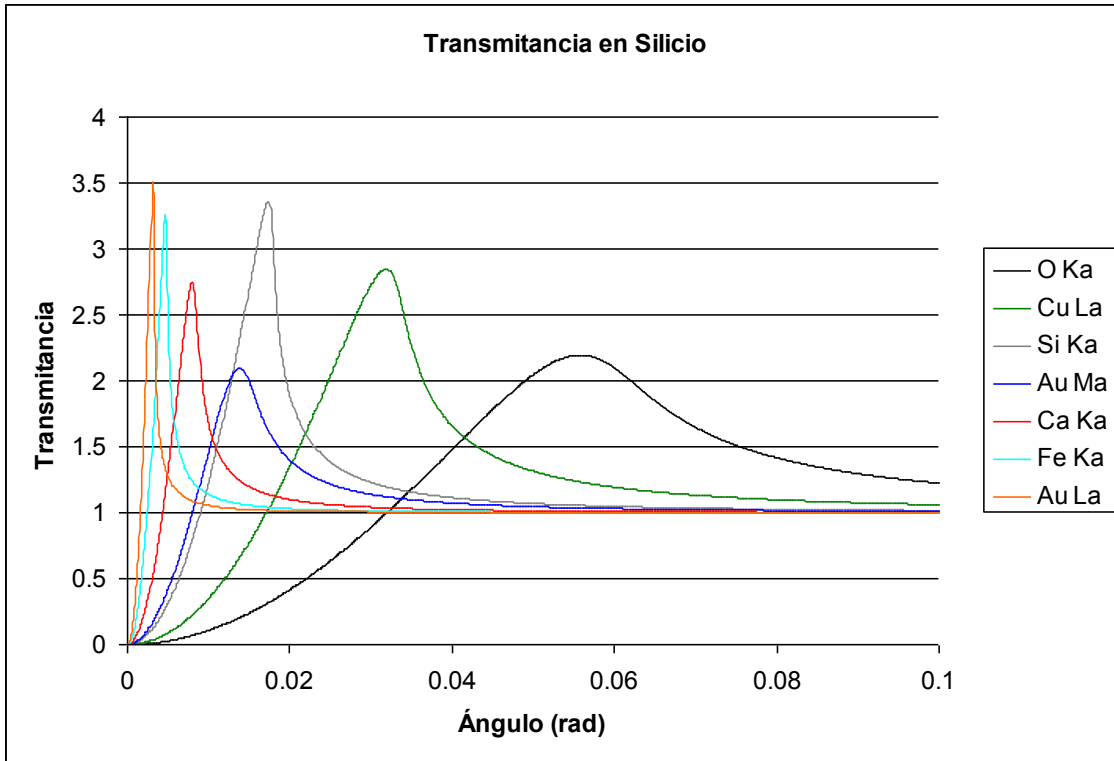


Figura 11. Transmitancia en una película de Silicio para diferentes líneas de rayos X característicos.

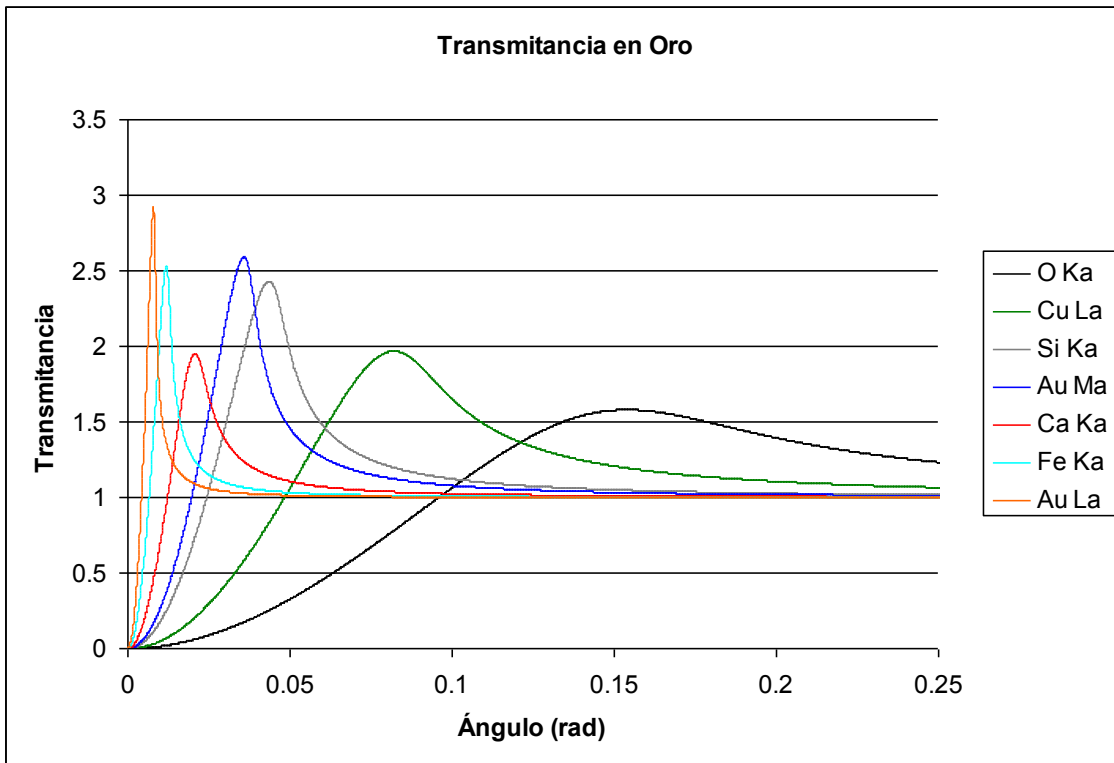


Figura 12. Transmitancia en una película de Oro para diferentes líneas de rayos X característicos.

5.4 Análisis de las reflexiones

A partir de la forma de las ecuaciones (3.34) y (3.36) obtenidas en el capítulo 3, se tiene que el coeficiente de reflexión para una onda electromagnética que viaja a través de un medio material hacia otro queda determinada por la relación

$$R_{i,j} = \frac{(n_i^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} - (n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}{(n_i^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + (n_j^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}, \quad (5.15)$$

en donde el subíndice i hace referencia al índice de refracción del medio material por donde viaja la onda incidente y el subíndice j lo hace para el medio donde se refracta. Para los casos que se analizan en este trabajo el subíndice $i = 0$ corresponde al vacío, el $i = 1$ a la película delgada y el $i = 2$ al sustrato.

Reflexión R_{10} .

Nos enfocaremos primeramente en la condición que tiene un haz de rayos X en la película delgada dirigiéndose hacia la interfase película-vacío, esto es con los subíndices $i = 1$ y $j = 0$. La relación queda como

$$R_{1,0} = \frac{(n_1^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} - \text{sen} \alpha}{(n_1^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + \text{sen} \alpha}. \quad (5.16)$$

Dado que el índice de refracción es complejo, este coeficiente de reflexión tiene una parte real y una imaginaria, de tal manera que

$$\text{Re}\{R_{10}\} = \frac{a_1^{1/2} - \text{sen}^2 \alpha}{\text{sen}^2 \alpha + a_1^{1/2} + 2a_1^{1/4} \text{sen} \alpha \cos \theta_1} \quad (5.17)$$

y

$$\text{Im}\{R_{10}\} = \frac{2a_1^{1/4} \text{sen} \alpha \text{sen} \theta_1}{\text{sen}^2 \alpha + a_1^{1/2} + 2a_1^{1/4} \text{sen} \alpha \cos \theta_1}, \quad (5.18)$$

donde los parámetros a_1 y θ_1 están dados por las ecuaciones 5.13 y 5.14. Así el módulo del coeficiente de reflexión R_{10} está determinado por la raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de la parte real e imaginaria.

Con la finalidad de observar cómo es el comportamiento de estos coeficientes R_{10} hacemos su análisis para diferentes sistemas. Primero se presenta el caso del sistema formado por una película de silicio sobre un sustrato de oro para la línea de emisión Si $K\alpha$.

Para este caso el ángulo crítico es de 17.87 miliradianes. Además, a este ángulo lo denotaremos como ángulo crítico α_1 . La figura 5.13 muestra el módulo del coeficiente de reflexión para este caso. Aquí se observa que inicia con un valor unitario y mantenerse constante antes del ángulo crítico. Posteriormente en un intervalo de aproximadamente 18 miliradianes decae rápidamente hasta valores muy pequeños.

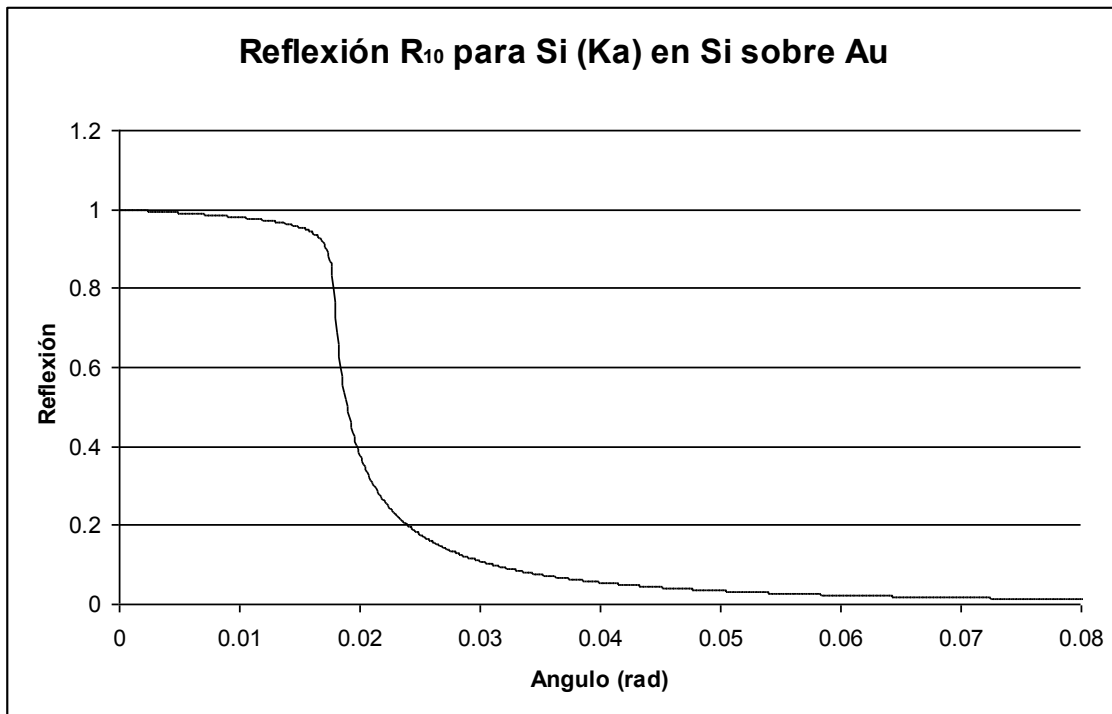


Figura 5.13. Módulo del coeficiente de reflexión R_{10} para la línea de Si $K\alpha$.

En la figura 5.14 se muestran la parte real y la parte imaginaria de la reflexión en este caso. Aquí la parte real comienza en uno y decrece hasta un valor mínimo de -0.8 justamente en el ángulo crítico. Posteriormente se mantiene negativa cercana a cero. Se observa que la parte imaginaria es diferente de cero para ángulos α menores que el ángulo crítico y presenta un máximo alrededor de 13 miliradianes.

En la figura 5.15 se muestran las partes real e imaginaria del R_{10} en el caso de una película de oro sobre un sustrato de silicio para las líneas de rayos X Au $M\alpha$ (2.123 keV) y Au $L\alpha$ (9.7 keV). Los correspondientes ángulos críticos son $\alpha_1 = 37.76$ miliradianes y $\alpha_1 = 8.26$ miliradianes, respectivamente. Se observa que las partes real e imaginaria se comportan de manera análoga al caso anterior. También se encuentra que para mayores energías de los rayos X los cambios importantes en la R_{10} se encuentran cada vez a menores ángulos.

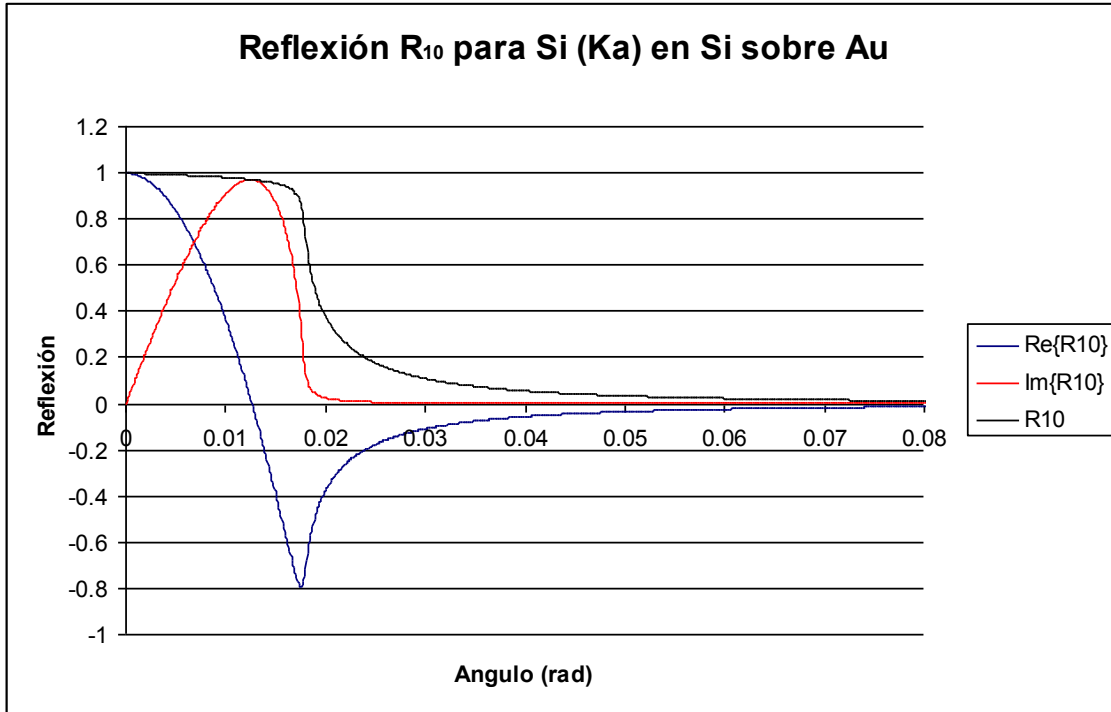


Figura 5.14. Parte real y parte imaginaria del coeficiente de reflexión R_{10} para la línea de Si K_{α} para el sistema formado por una película de silicio sobre un sustrato de oro.

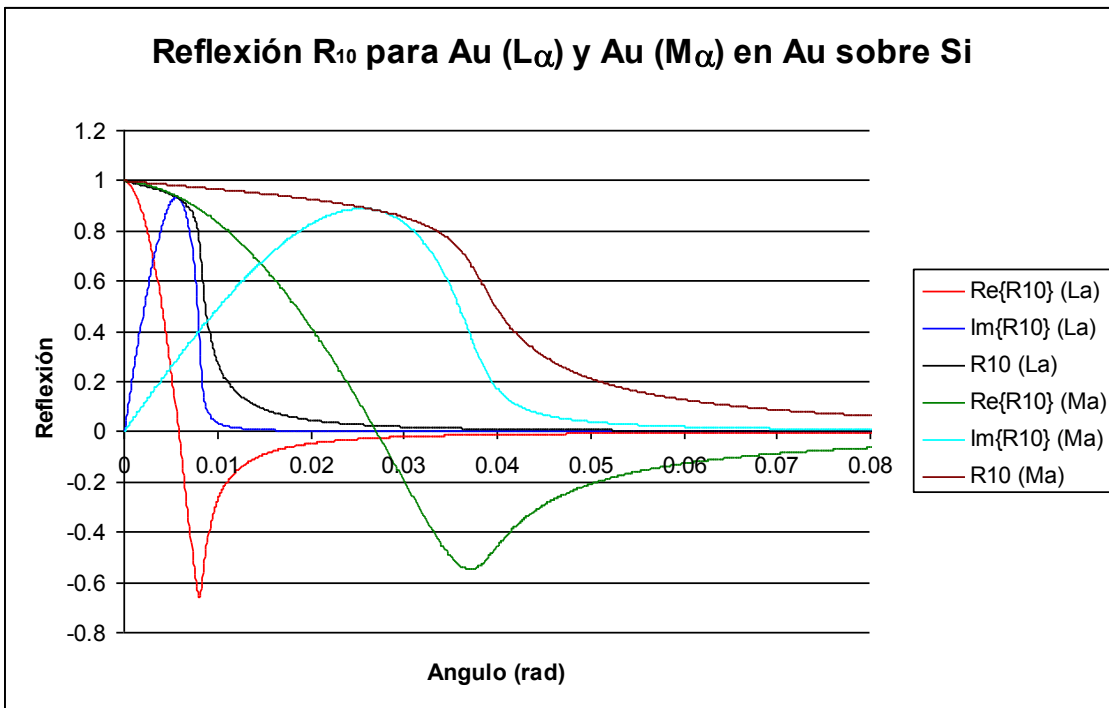


Figura 5.15. Parte real, imaginaria y módulo de los coeficientes de reflexión R_{10} de las líneas de Au M_{α} y Au L_{α} para el sistema formado por una película de oro sobre un sustrato de silicio.

En la figura 5.16 se muestran las partes real e imaginaria del R_{10} en el caso de una película de plata sobre un sustrato de oro para las líneas de rayos X Ag L_α (2.984 keV) y Ag K_α (22.101 keV). Los correspondientes ángulos críticos son $\alpha_1 = 20.65$ miliradianes y $\alpha_1 = 2.78$ miliradianes, respectivamente. Análogamente a los dos casos anteriores, se encuentra el mismo tipo de comportamiento.

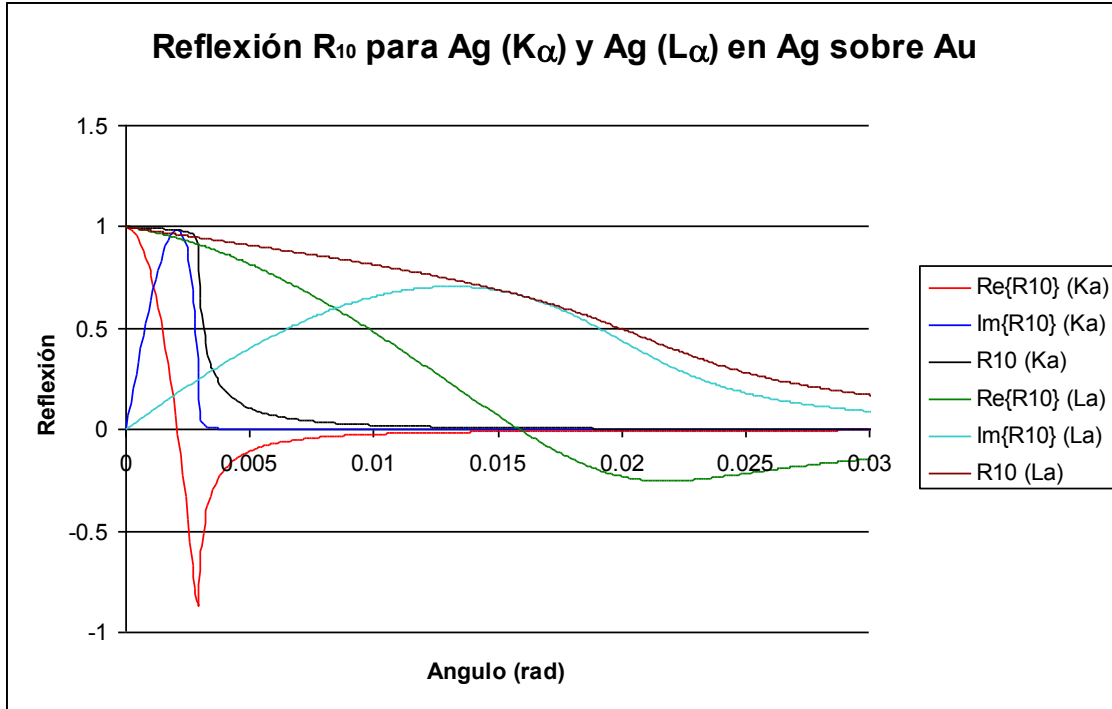


Figura 5.16. Parte real, imaginaria y módulo de los coeficientes de reflexión R_{10} de las líneas de Ag L_α y Ag K_α para el sistema formado por una película de plata sobre un sustrato de oro.

Reflexión R_{12} .

Si los rayos X viajan por la película delgada hacia el sustrato en la ecuación (5.15) se tomarán los subíndices $i=1$ y $j=2$. De esta manera

$$R_{12} = \frac{(n_1^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} - (n_2^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}{(n_1^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2} + (n_2^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}}, \quad (5.19)$$

cuyas componentes real e imaginaria son

$$\text{Re}\{R_{12}\} = \frac{a_1^{1/2} - a_2^{1/2}}{a_1^{1/2} + a_2^{1/2} + 2a_1^{1/4} a_2^{1/4} \cos(\theta_1 - \theta_2)} \quad (5.20)$$

y

$$\text{Im}\{R_{12}\} = \frac{2a_1^{1/4}a_2^{1/4}\text{sen}(\theta_1 - \theta_2)}{a_1^{1/2} + a_2^{1/2} + 2a_1^{1/4}a_2^{1/4}\cos(\theta_1 - \theta_2)}. \quad (5.21)$$

Estos coeficientes los calculamos para los mismos sistemas analizados en la sección anterior. Primeramente en la figura 5.17 se muestra la gráfica del módulo del coeficiente de reflexión R_{12} en el sistema de una película de silicio sobre un sustrato de oro para la línea de emisión Si K_α . El ángulo crítico de los rayos X Si K_α para la interfase silicio sobre oro es 46.079 miliradianes, que denotaremos como ángulo crítico α_2 . En esta figura se observa que el módulo de R_{12} aumenta hasta alcanzar un máximo en el ángulo $\alpha = \alpha_1$ y posteriormente comienza a decrecer drásticamente a partir de $\alpha = \alpha_2$.

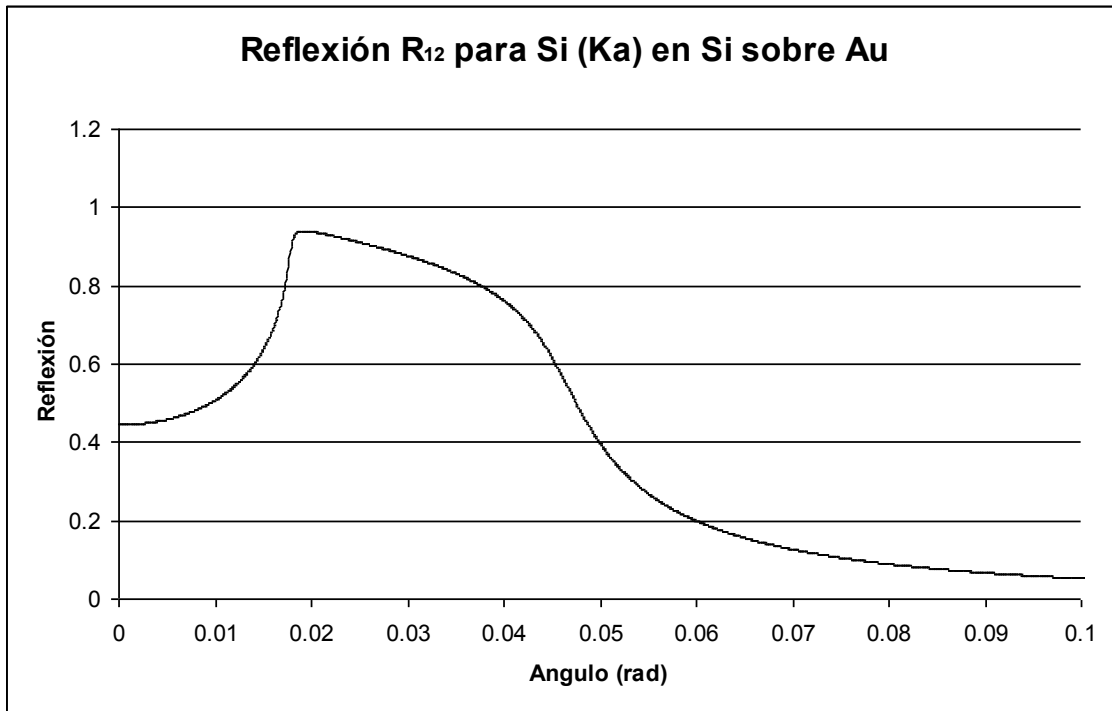


Figura 5.17. Coeficiente de reflexión R_{12} en la interfase de silicio sobre oro para la línea Si K_α .

En la figura 5.18 se muestran las partes real e imaginaria de R_{12} para este mismo caso. Se observa que la parte real comienza siendo negativa para ángulos pequeños alcanzando un mínimo en $\alpha = \alpha_1$ incrementándose posteriormente hasta un máximo en $\alpha = \alpha_2$ y decreciendo a cero. La parte imaginaria tiene valores significativos sólo en el intervalo entre α_1 y α_2 .

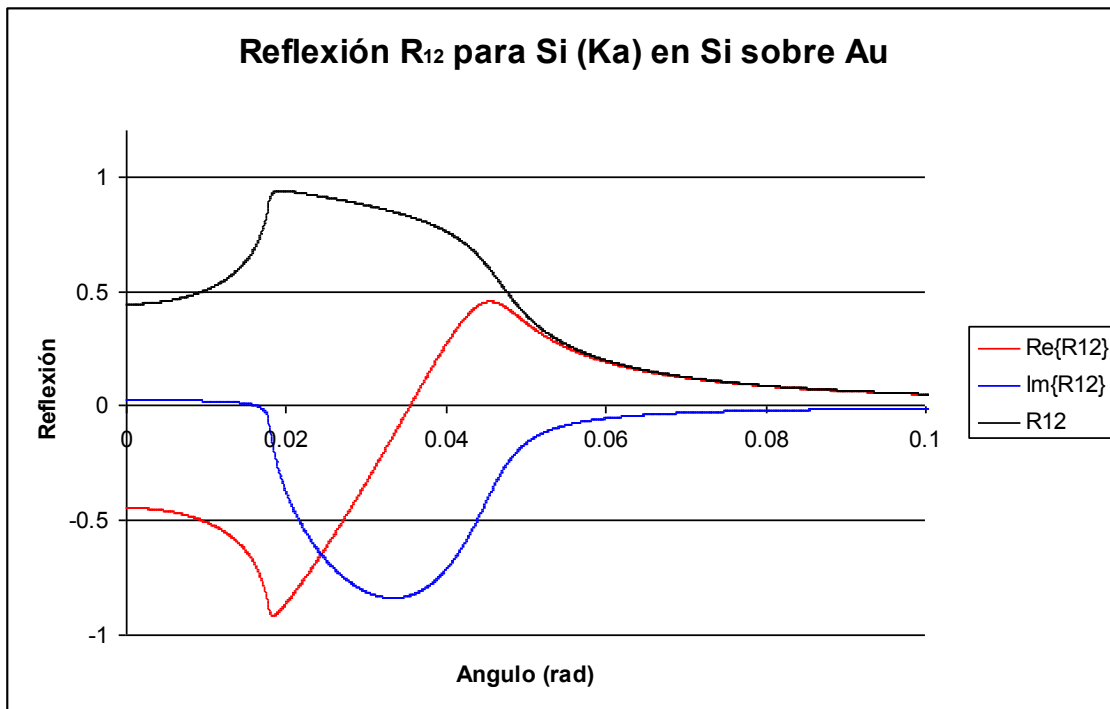


Figura 5.18. Parte real y parte imaginaria del coeficiente de reflexión R_{12} para la línea de Si K_{α} en la superficie silicio-oro.

En la figura 5.19 se muestran las partes real e imaginaria del R_{12} en el caso de una película de oro sobre un sustrato de silicio para las líneas de rayos X Au M_{α} (2.123 keV) y Au L_{α} (9.7 keV). Los correspondientes ángulos críticos son $\alpha_2 = 14.628$ miliradianes y $\alpha_2 = 3.201$ miliradianes, respectivamente. Se observa que las partes real e imaginaria se comportan de manera análoga al caso de la figura 5.18, en donde las variaciones importantes se presentan entre α_1 y α_2 , pero en este caso se presenta una inversión en el signo de estas partes. Esta inversión entre los dos sistemas mostrados es debida a que en un caso se pasa de un medio menos denso a uno mayor en el primer caso y de un medio denso a uno menor en el segundo caso. También se encuentra que para mayores energías de los rayos X los cambios importantes en la R_{12} se encuentran cada vez a menores ángulos.

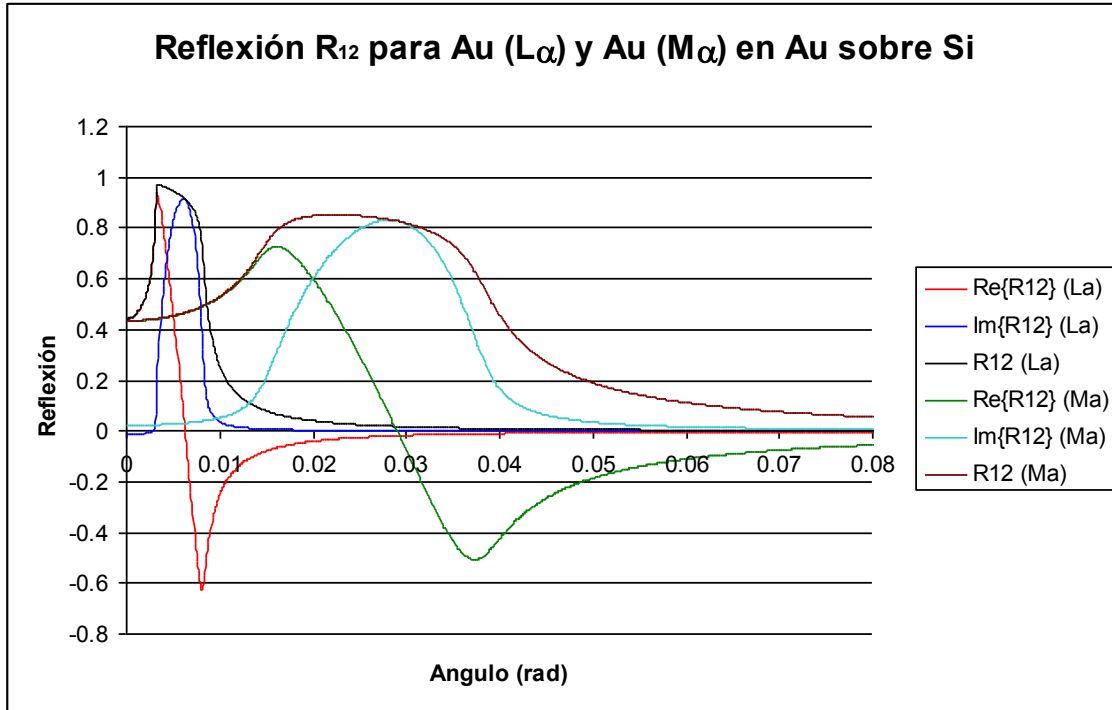


Figura 5.19. Coeficiente de reflexión R_{12} para las líneas de emisión Au L_{α} y Au M_{α} en la superficie oro-silicio, mostrando parte real y parte imaginaria.

En la figura 5.20 se muestran las partes real e imaginaria de R_{12} en el caso de una película de plata sobre un sustrato de oro para las líneas de rayos X Ag L_{α} (2.984 keV) y Ag K_{α} (22.101 keV). Los correspondientes ángulos críticos son $\alpha_2 = 26.869$ miliradianes y $\alpha_2 = 3.627$ miliradianes, respectivamente. Análogamente a las dos figuras anteriores, se encuentra el mismo tipo de comportamiento anterior, en donde las variaciones significativas en las partes real e imaginaria ocurren en el intervalo entre α_1 y α_2 . Pero en este caso este intervalo es mucho más pequeño y se estrecha más con la energía de los rayos X.

En la figura 5.21 se muestran las partes real e imaginaria de R_{12} en el caso de una película de oro sobre un sustrato de plata para las líneas de rayos X Au M_{α} (2.123 keV) y Au L_{α} (9.7 keV). Los correspondientes ángulos críticos son $\alpha_2 = 29.032$ miliradianes y $\alpha_2 = 6.354$ miliradianes, respectivamente. Análogamente a las tres figuras anteriores, se encuentra el mismo tipo de comportamiento anterior, en donde las variaciones significativas en las partes real e imaginaria ocurren en el intervalo entre α_1 y α_2 . Pero aquí se observa el mismo efecto de inversión en el signo de las partes real e imaginaria debido a la diferencia de densidades de la interfase.

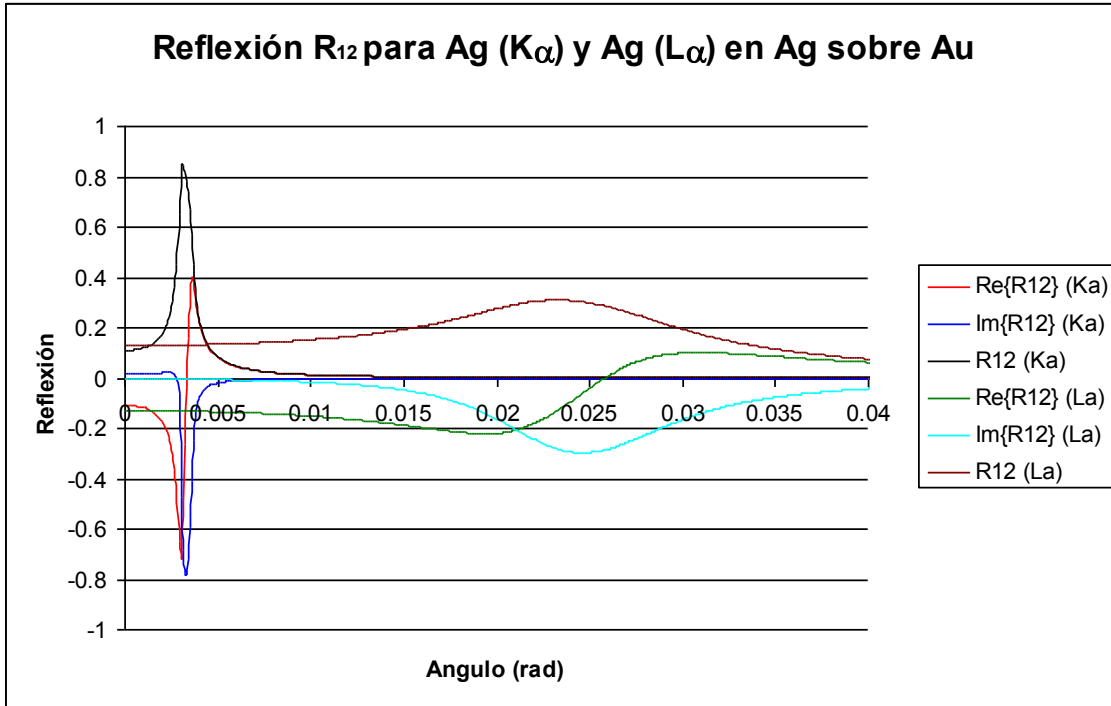


Figura 5.20. Coeficiente de reflexión R_{12} para las líneas de emisión Ag K_{α} y Ag L_{α} en la interfase de plata – oro, mostrando parte real y parte imaginaria.

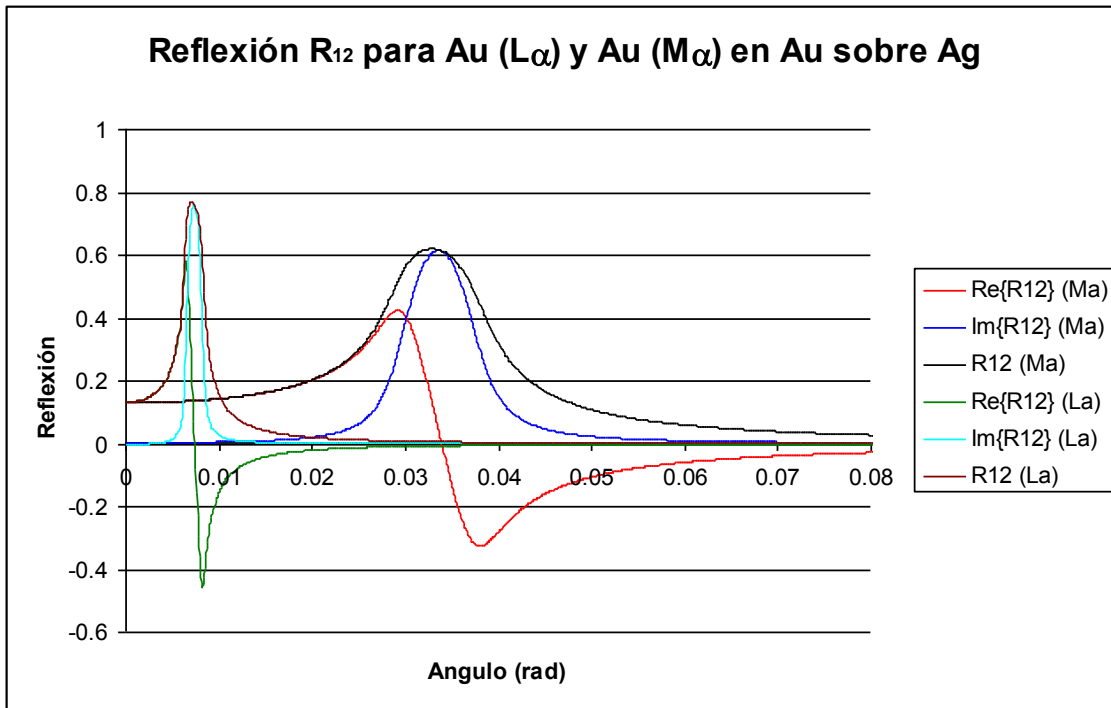


Figura 5.21. Coeficiente de reflexión R_{12} para las líneas de emisión Au L_{α} y Au M_{α} en la interfase oro-plata, mostrando parte real y parte imaginaria.

De los coeficientes calculados en esta sección se determina que las variaciones importantes o significativas de la R_{12} , así como sus partes real e imaginaria, ocurren entre los ángulos α_1 y α_2 . El orden de estos ángulos, así como los signos de las partes real e imaginaria dependen de las densidades de los medios que forman la interfase.

También se encuentra que la intersección (el producto) de R_{10} y R_{12} nos determina la zona en donde será más importante la generación de interferencia por haces múltiples. Así tanto más ancho sea este intervalo entre α_1 y α_2 y más amplios sean estos coeficientes tendremos que mayor será su efecto en la intensidad de los rayos X emitidos en ángulos rasantes a la superficie de las películas, como se puede determinar de las ecuaciones 5.8 y 5.9. Esto es, en la zona definida entre α_1 y α_2 será donde puede la intensidad $I(\alpha)$ presentar un aumento considerable y oscilaciones.

5.5 Efectos de la absorción

En la relación de la intensidad de los rayos X en función del ángulo de salida hay un parámetro muy importante: la parte imaginaria del vector de propagación. Este parámetro representa la absorción de los fotones de rayos X en el material de la película delgada y se vuelve importante para ángulos rasantes.

En la ecuación (5.6) de la intensidad $I(\alpha)$ tenemos que la función exponencial dependiente de la parte imaginaria de la componente z del vector de propagación \mathbf{k} , se puede expresar como

$$\text{Exp}\{-2 \text{Im}\{k_{z1}\}(z_0 - z_1)\} = \text{Exp}\{-2(z_0 - z_1)ka_1^{1/4} \text{sen}\theta_1\}, \quad (5.22)$$

en donde $k = 2\pi/\lambda$ es el número de onda y por tanto $k_{z1} = k(n_1^2 - \cos^2 \alpha)^{1/2}$. El grosor de la película es $(z_0 - z_1)$, en tanto que a_1 y θ_1 están dados por las ecuaciones (5.13) y (5.14), respectivamente. Antes del primer ángulo crítico esta función exponencial es prácticamente nula, indicando que la absorción es muy grande. La exponencial crece rápidamente después del primer ángulo crítico para, posteriormente, tomar un valor casi constante inferior a la unidad. Dado que esta función exponencial depende del grosor de la película delgada, habrá más absorción conforme se incrementa este grosor. Este es un resultado esperado, pues a medida que se reduce el camino de los fotones en la película disminuye su absorción.

En la figura 5.22 se muestra la función exponencial dada por la ec. (5.22) en términos del ángulo α para rayos X K_α de Si (1.74 keV) generados en una película de silicio de diversos espesores. Este caso correspondería al de una película hecha de un material con baja densidad electrónica.

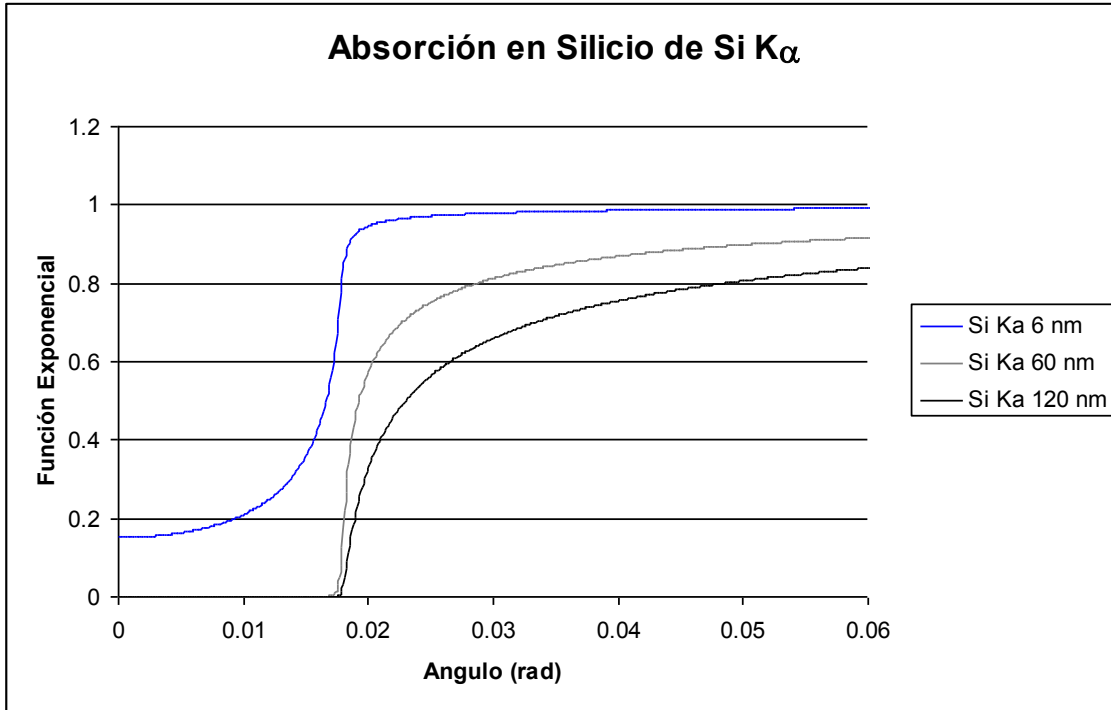


Figura 5.22. Función exponencial para rayos X de Si K_{α} generados en una película de silicio. Se muestran los efectos para tres diferentes grosores de la película delgada: 6 nm, 60 nm y 120 nm.

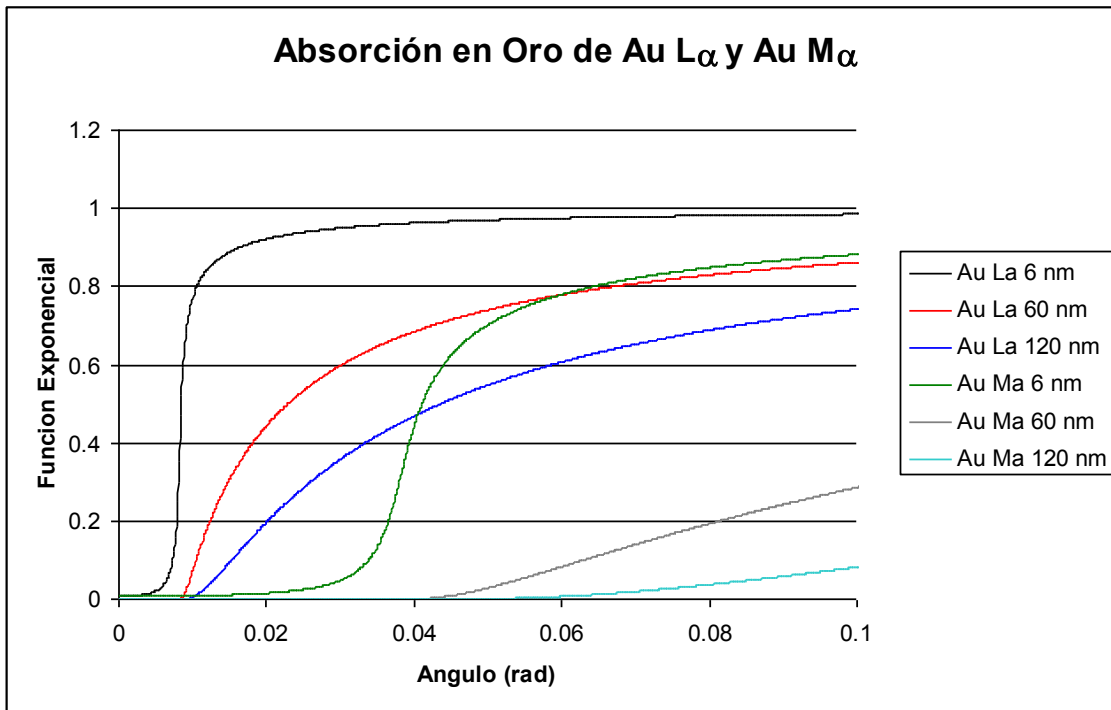


Figura 5.23. Función exponencial para rayos X Au L_{α} y Au M_{α} en una película de oro. Se muestran los efectos para tres diferentes grosores de la película delgada: 6 nm, 60 nm y 120 nm

En la figura 5.23 se muestra la función exponencial en términos del ángulo α para los rayos X Au L_α (9.7 keV) y Au M_α (2.123 keV) generados en una película de oro de diversos espesores. Este caso correspondería al de una película hecha con un material de alta densidad electrónica. Considerando estas dos líneas características del Au, la M_α y la L_α se observan los efectos en cuanto a la energía de los rayos X. Como era de esperarse los fotones de menor energía sufren mayor absorción y por tanto su intensidad decrece más rápidamente.

En la figura 5.24 se analizan los rayos X K_α del Cu (8.04 keV) generados en una película de cobre de diversos espesores. Esta película delgada correspondería a un material mediano en cuanto a su densidad electrónica, comparado con el silicio y el oro, y la energía de los rayos X es parecida a la del oro Au L_α . De esta manera se puede comparar con la figura 5.23 en cuanto a la absorción de los fotones de rayos X con una energía relativamente alta que viaja sobre un material menos denso. Aquí se observa que la absorción disminuye muy rápido para ángulos mayores al ángulo crítico.

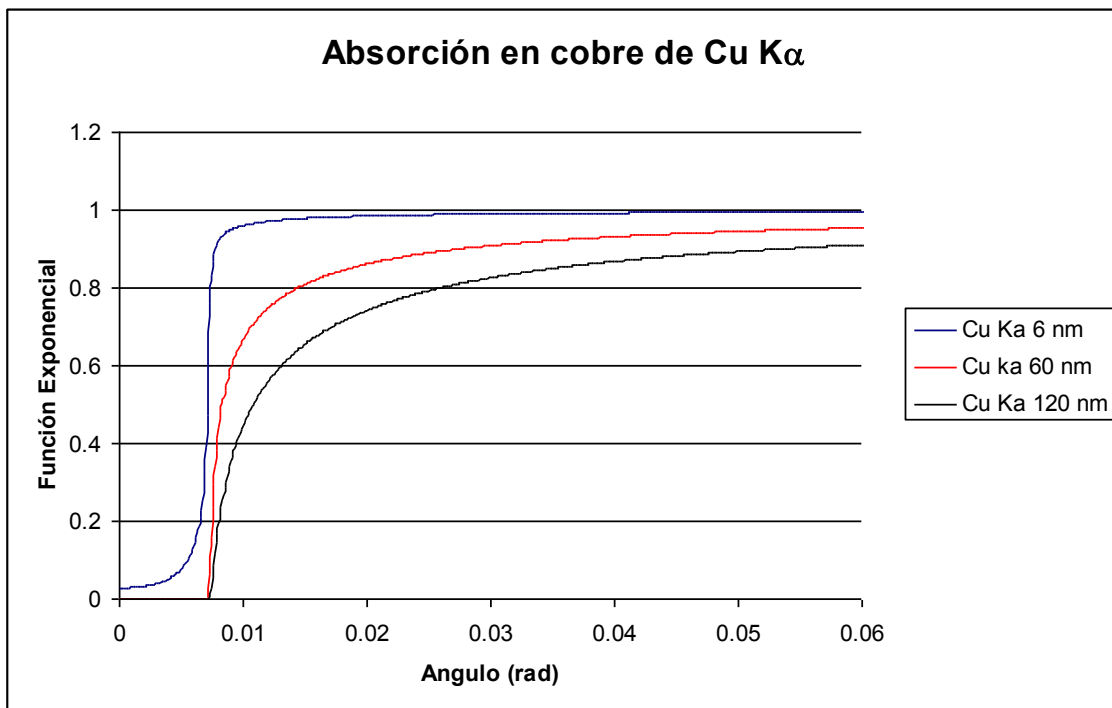


Figura 5.24. Función exponencial para Cu K_α en una película de cobre. Se muestran los efectos para tres diferentes grosores de la película delgada: 6 nm, 60 nm y 120 nm.

En conclusión, tenemos que la absorción depende en gran medida del grosor de la película delgada, de su densidad y de la energía de la línea de emisión de los rayos X. Se encuentra que para poder observar un espectro de intensidad en el experimento, lo más conveniente es trabajar con películas delgadas cuyos grosores sean a lo más de 120 nm y líneas de rayos X suficientemente energéticas. Del perfil de esta función exponencial corresponderá la forma que tendrá, posterior al primer ángulo crítico, la intensidad $I(\alpha)$, en la zona de ángulos rasantes en los cuales se presenten oscilaciones por la interferencia de haces múltiples.

5.6 Intensidad de los rayos X rasantes en función del ángulo α

Hasta el momento, se han analizado por separado los términos importantes que intervienen en la intensidad $I(\alpha)$ de los rayos X generados en una película delgada. Ahora toca el turno al análisis de la $I(\alpha)$. Para esto, debido a la gran variedad de sistemas de películas delgadas-sustratos con los cuales se puede trabajar, aquí se han clasificado cuatro tipos diferentes de sistemas para analizar y facilitar el estudio de los espectros. Así, clasificamos a los sistemas en términos de su densidad como: a) película ligera sobre sustrato pesado, b) película pesada sobre sustrato ligero, c) película ligera sobre sustrato ligero y finalmente, d) película pesada sobre sustrato pesado. Estos sistemas los vamos a denotar como: símbolo de la película / símbolo del sustrato y entre paréntesis la línea de rayos X inducida en la película y que será considerada. Por ejemplo: Si/Au (Si K_α) hará referencia a los rayos X del Si K_α generados en una película de Si sobre el sustrato de Au. El cálculo de la $I(\alpha)$ para los correspondientes rayos X inducidos en las películas se efectúa a partir de la ecuación (5.6) con ayuda de las ecuaciones (5.8), (5.9) y (5.12).

En la condición a) tomamos los sistemas de Al/Au (Al K_α), Si/Au (Si K_α), Si/Pb (Si K_α), Si/Cu (Si K_α) y CaF₂/Au (Ca K_α). En las figuras 5.25 a 5.29 se muestran respectivamente, las intensidades $I(\alpha)$ para cada caso y tomando películas de diferentes espesores. De estas figuras se encuentran los siguientes resultados. Para películas muy delgadas con grosores menores de 10 nm no se presentan efectos de interferencia. Esto es debido a que las longitudes de onda son más grandes que los espesores de las películas. Para películas con grosores mayores a los 200 nm los efectos de absorción son dominantes y no permiten la observación de un pico de emisión de rayos X. Los efectos notables de interferencia y un máximo de emisión se observan en un intervalo que se va reduciendo con el aumento en la energía de los rayos X. Así tenemos que este intervalo varía de los 40 mrad para la Al K_α (1.486 keV) a 15 mrad para la Ca K_α (3.69 keV).

En la condición b) tomamos los sistemas de Au/Si (Au M_α), Au/Si (Au L_α), Pb/Si (Pb M_α), Ag/Si (Ag L_α), Ag/Si (Ag K_α) y Cu/Si (Cu K_α). En las figuras 5.30 a 5.35 se muestran, respectivamente, las intensidades $I(\alpha)$ para cada caso y tomando películas de diferentes espesores. De estas figuras se encuentran los siguientes resultados. Los efectos de la absorción son muy notorios para las películas más pesadas de Ag, Au y Pb. Prácticamente

para espesores mayores de 10 nm no es posible observar un máximo de emisión de rayos X. Esto reduce su aplicabilidad a películas muy delgadas y donde además los efectos de absorción no permiten observar notoriamente los efectos de interferencia. Las intensidades de los máximos son más pequeñas que las del caso anterior. Solamente cuando se tienen fotones de energías muy grandes como la $\text{Ag } K_{\alpha}$ (22.1 keV) es posible reducir la absorción, sin embargo el intervalo en el que tienen lugar los efectos se reduce a menos de 2 mrad. Este intervalo es tan pequeño que resulta ser muy difícil de controlar experimentalmente. Por otro lado, si la película es menos pesada, como en el caso de Cu/Si ($\text{Cu } K_{\alpha}$), tenemos que los efectos de absorción se reducen como era de esperarse. Sin embargo los intervalos de interés para los efectos son todavía muy pequeños, de menos de 10 mrad.

En la condición c) tomamos los sistemas de CaF_2/C ($\text{Ca } K_{\alpha}$), CaF_2/Si ($\text{Ca } K_{\alpha}$), Si/CaF_2 ($\text{Si } K_{\alpha}$) y Al/Si ($\text{Al } K_{\alpha}$). En las figuras 5.36 a 5.39 se muestran respectivamente las intensidades $I(\alpha)$ para cada caso y tomando películas de diferentes espesores. De estas figuras observamos los siguientes resultados. Los efectos de la absorción no son dominantes como en el caso anterior. Solamente para películas con espesores mayores a 120 nm los efectos de absorción comienzan a ser dominantes. Para las películas más delgadas tenemos que los efectos del aumento en la transmitancia se presentan en un intervalo de 10 a 15 mrad en películas con espesores menores a 10 nm. Por otro lado, para las películas con espesores de 6 nm a 120 nm tenemos que el intervalo de ángulos donde se observa la interferencia es de unos 5 mrad.

En la condición d) se tienen los sistemas de Au/Ag ($\text{Au } M_{\alpha}$), Au/Ag ($\text{Au } L_{\alpha}$), Ag/Au ($\text{Ag } L_{\alpha}$), Ag/Au ($\text{Ag } K_{\alpha}$), Pb/Au ($\text{Pb } M_{\alpha}$), Au/Cu ($\text{Au } M_{\alpha}$), Au/Cu ($\text{Au } L_{\alpha}$) y Cu/Au ($\text{Cu } K_{\alpha}$). En las figuras 5.40 a 5.47 se muestran respectivamente las intensidades $I(\alpha)$ para cada caso y tomando películas de diferentes espesores. De estas figuras observamos los siguientes resultados. Nuevamente para películas muy densas tenemos que la absorción es dominante. Únicamente para películas muy delgadas, de menos de 5 nm de espesor, es posible notar el incremento en la transmitancia. Solamente los efectos de interferencia se observan cuando la energía de los rayos X es muy grande, como se ve de la figura 5.43 y 5.47 para los rayos X K_{α} de la plata y cobre respectivamente. Sin embargo estos últimos efectos de interferencia ocurren en un intervalo de ángulos α muy pequeño de poco menos de 3 mrad en el caso de la $\text{Ag } K_{\alpha}$ y de 5 mrad para el $\text{Cu } K_{\alpha}$. Estos intervalos son muy reducidos y por lo cual son muy difíciles de observar experimentalmente.

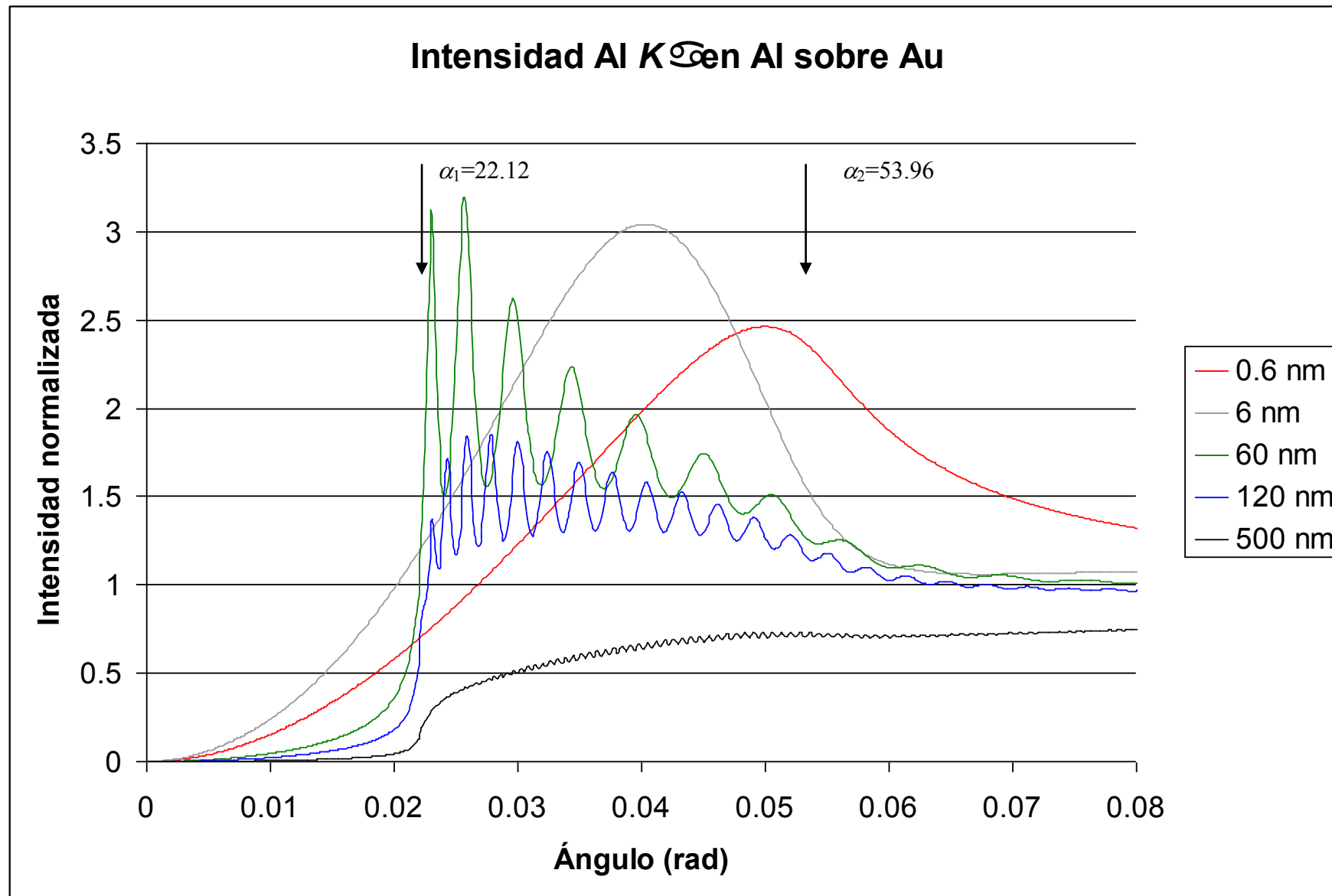


Figura 5.25

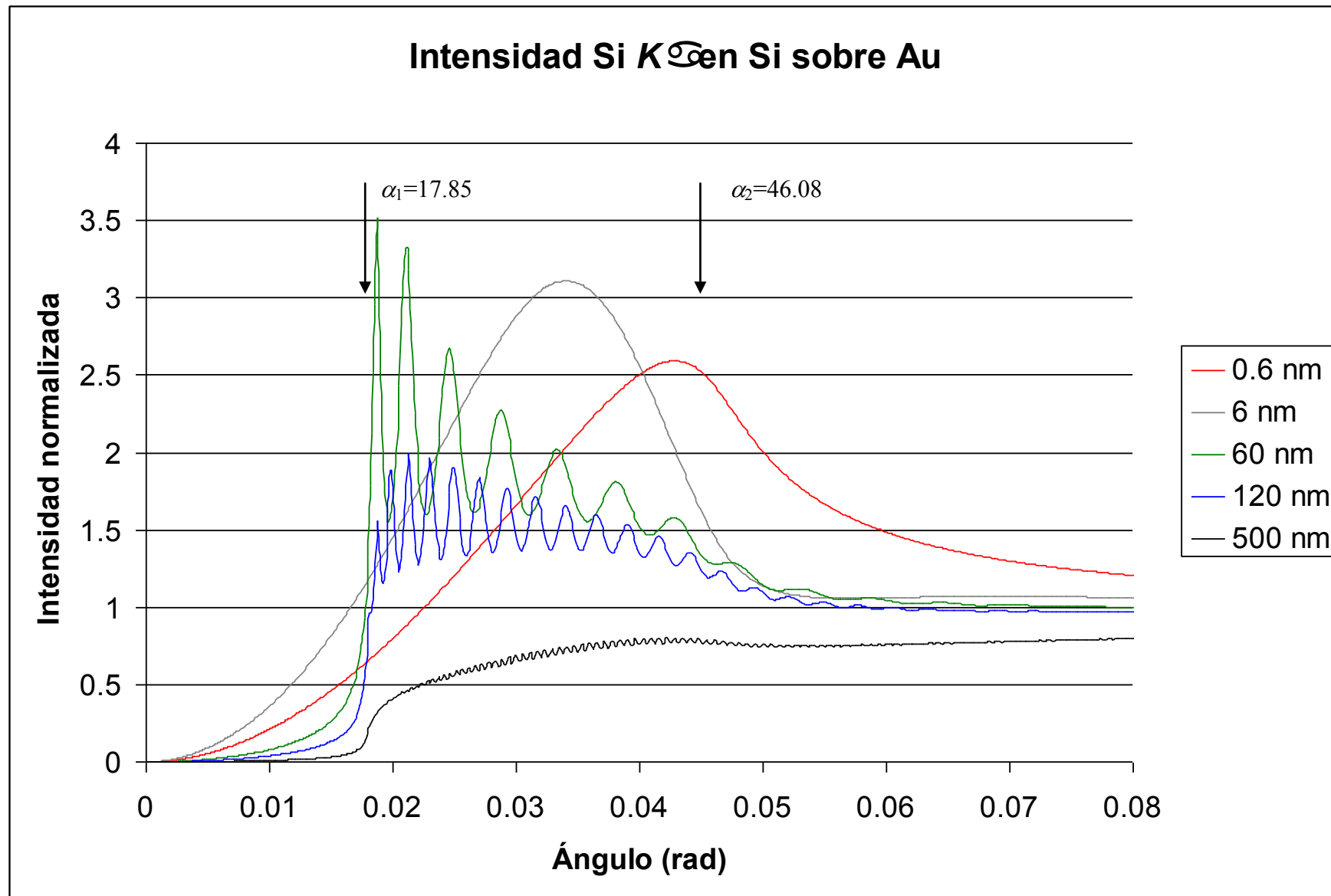


Figura 5.26

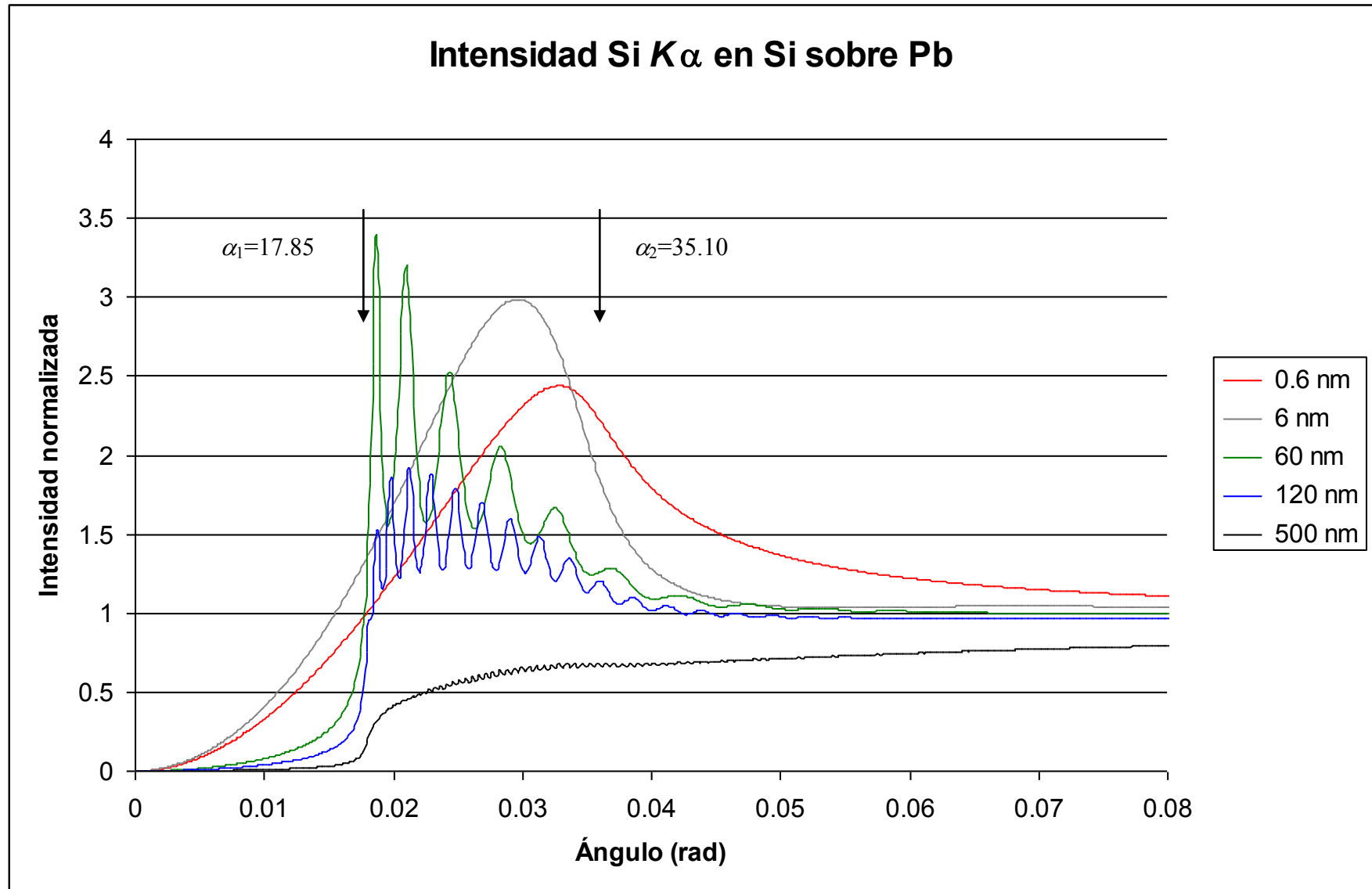


Figura 5.27

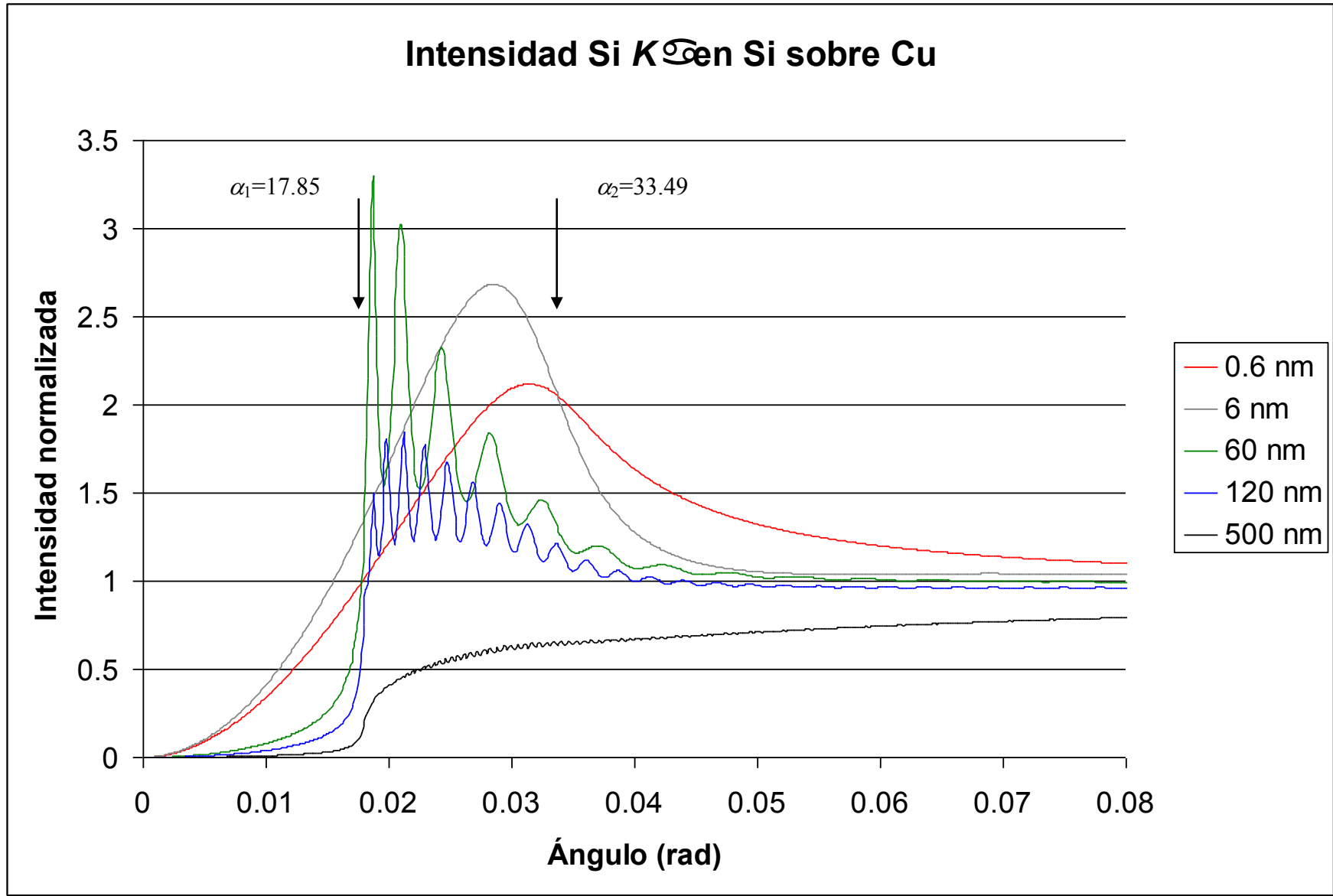


Figura 5.28

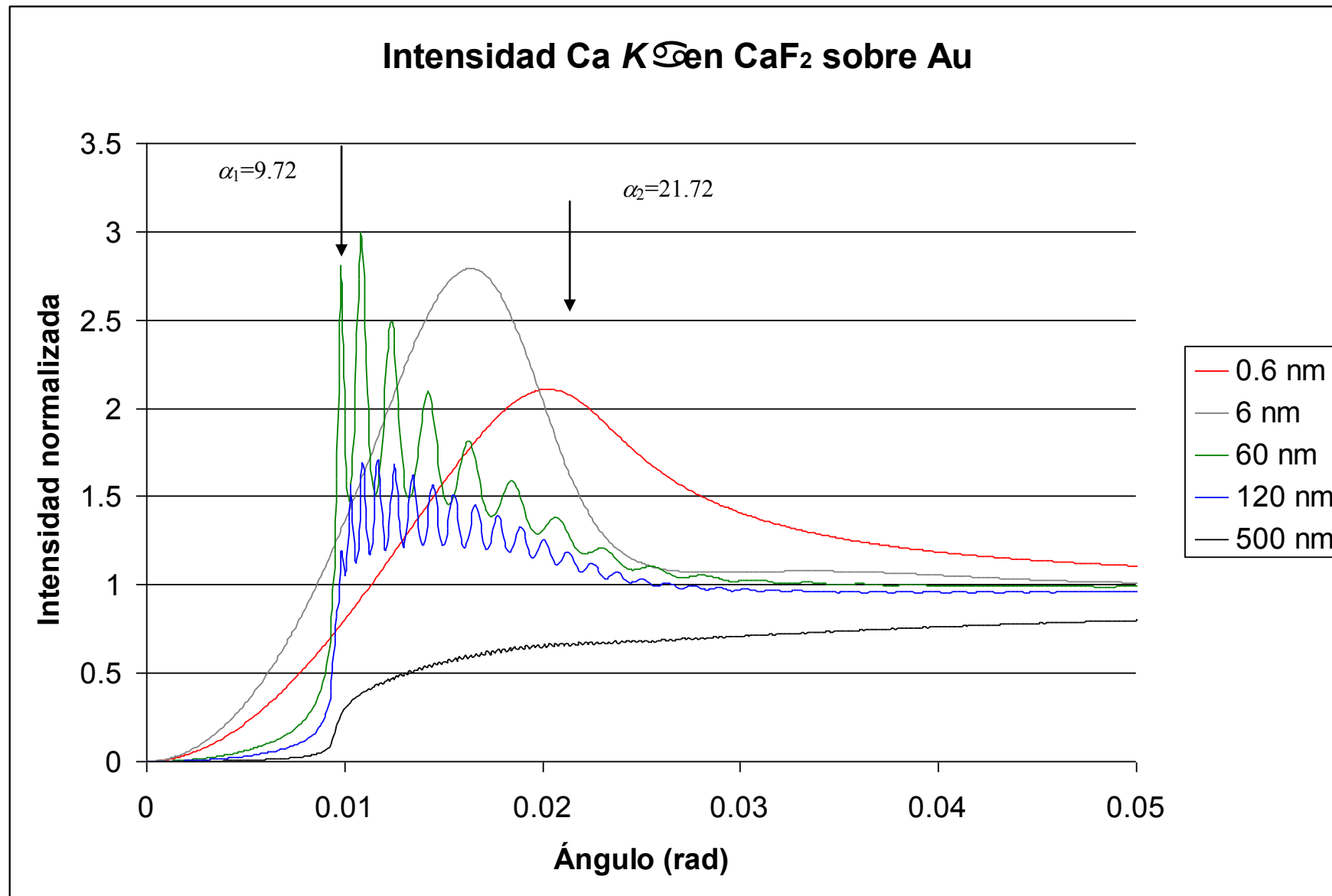


Figura 5.29

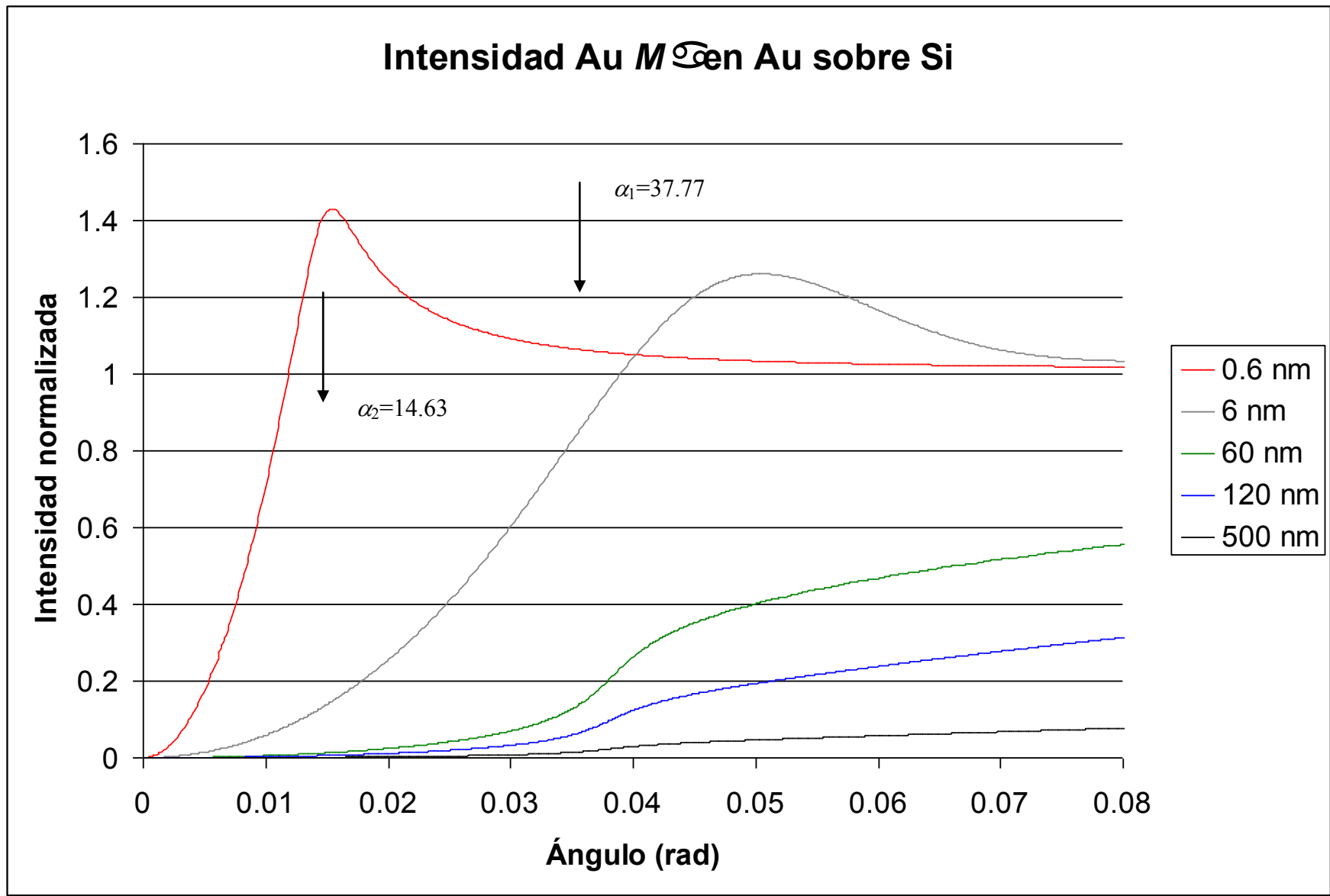


Figura 5.30

Intensidad Au L_{sen} Au sobre Si

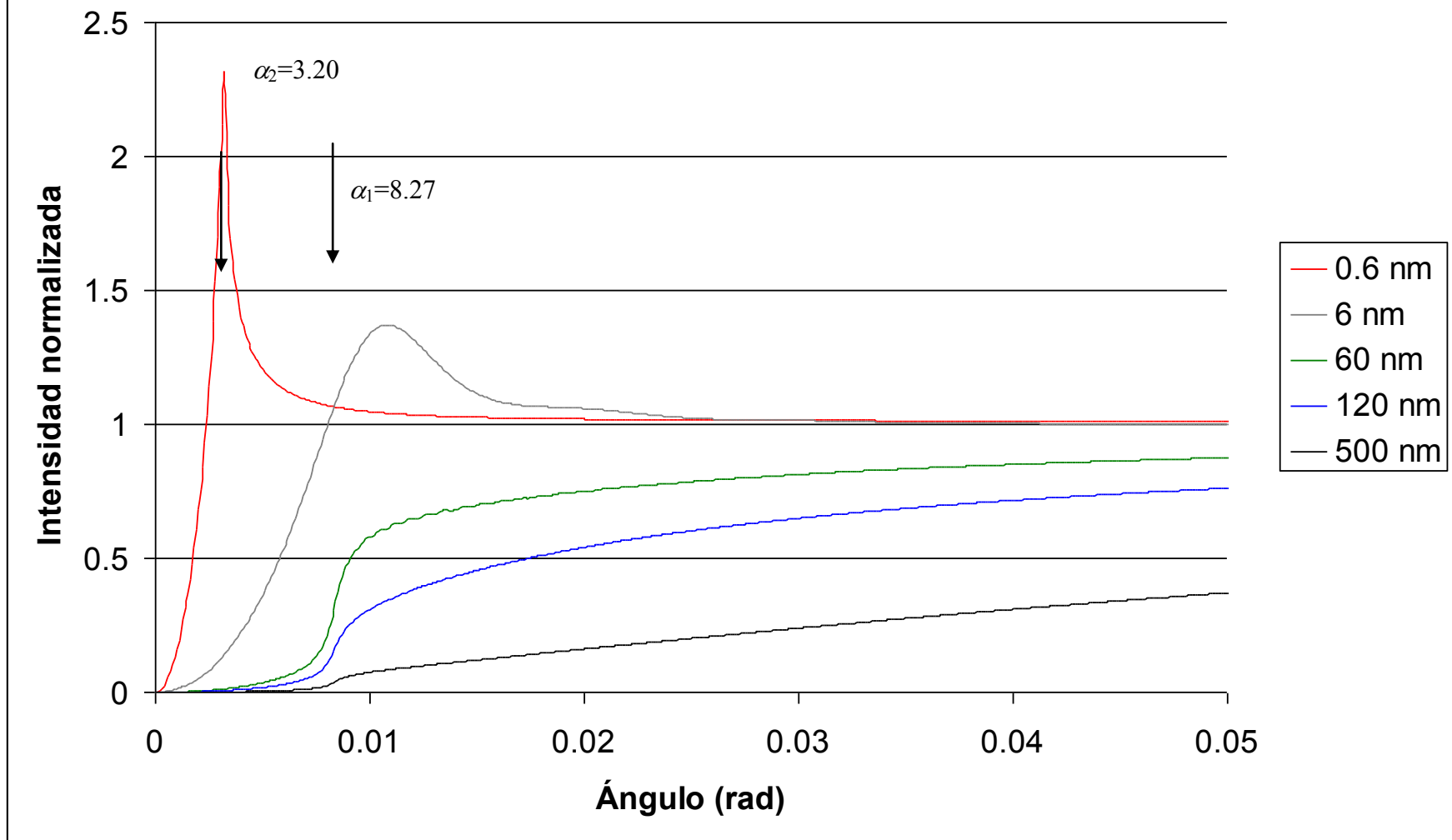


Figura 5.31

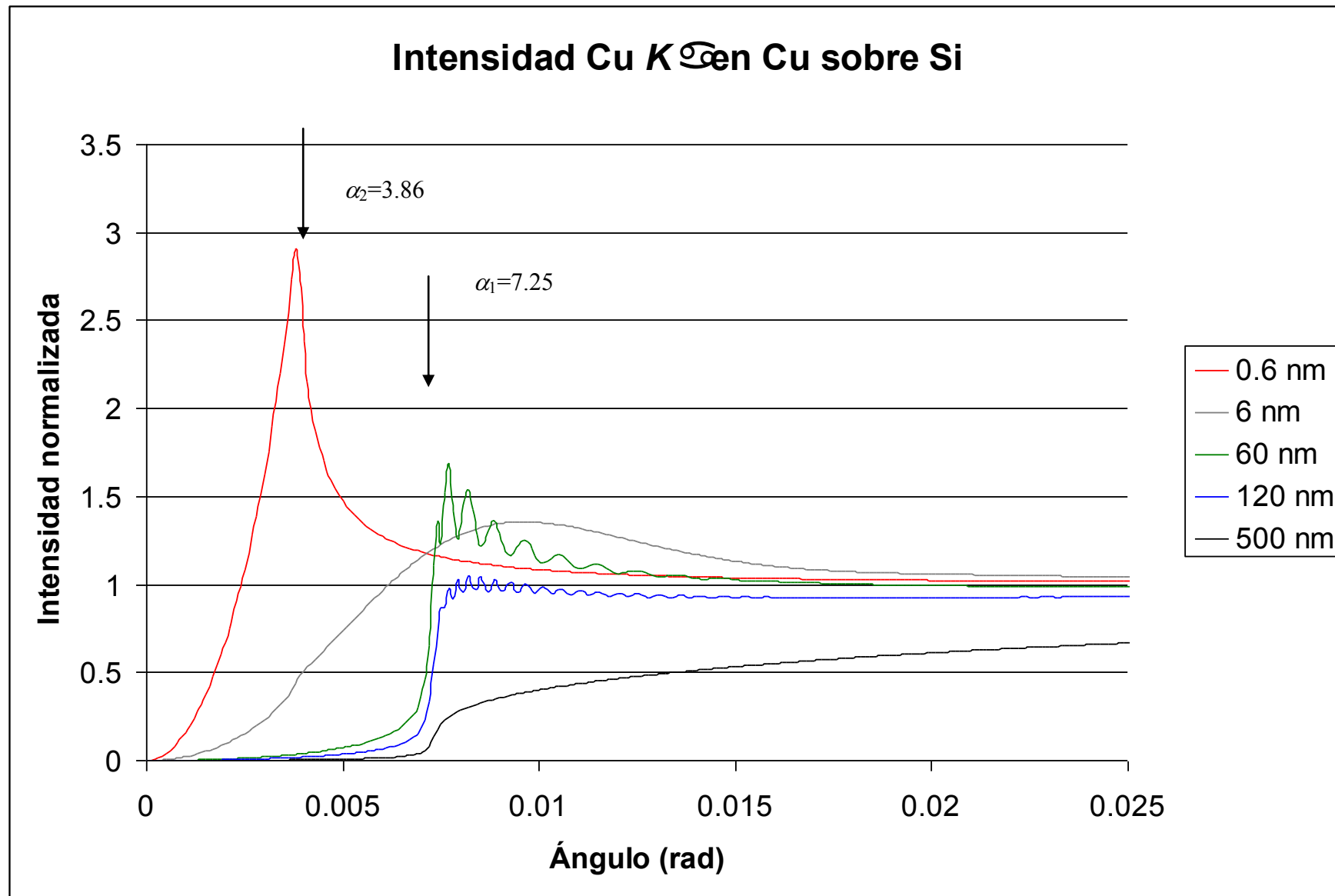


Figura 5.32

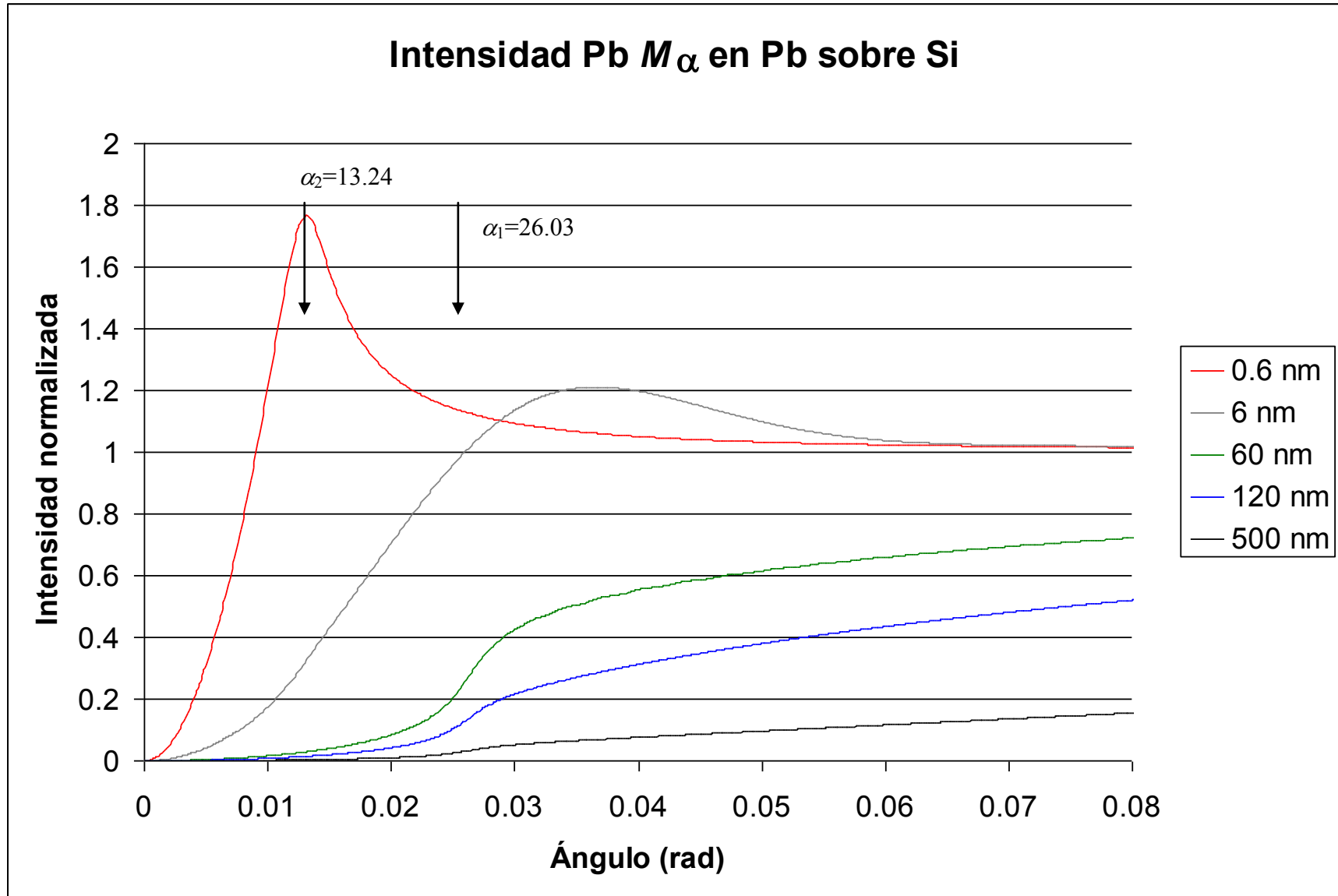


Figura 5.33

Intensidad Ag L_{α} en Ag sobre Si

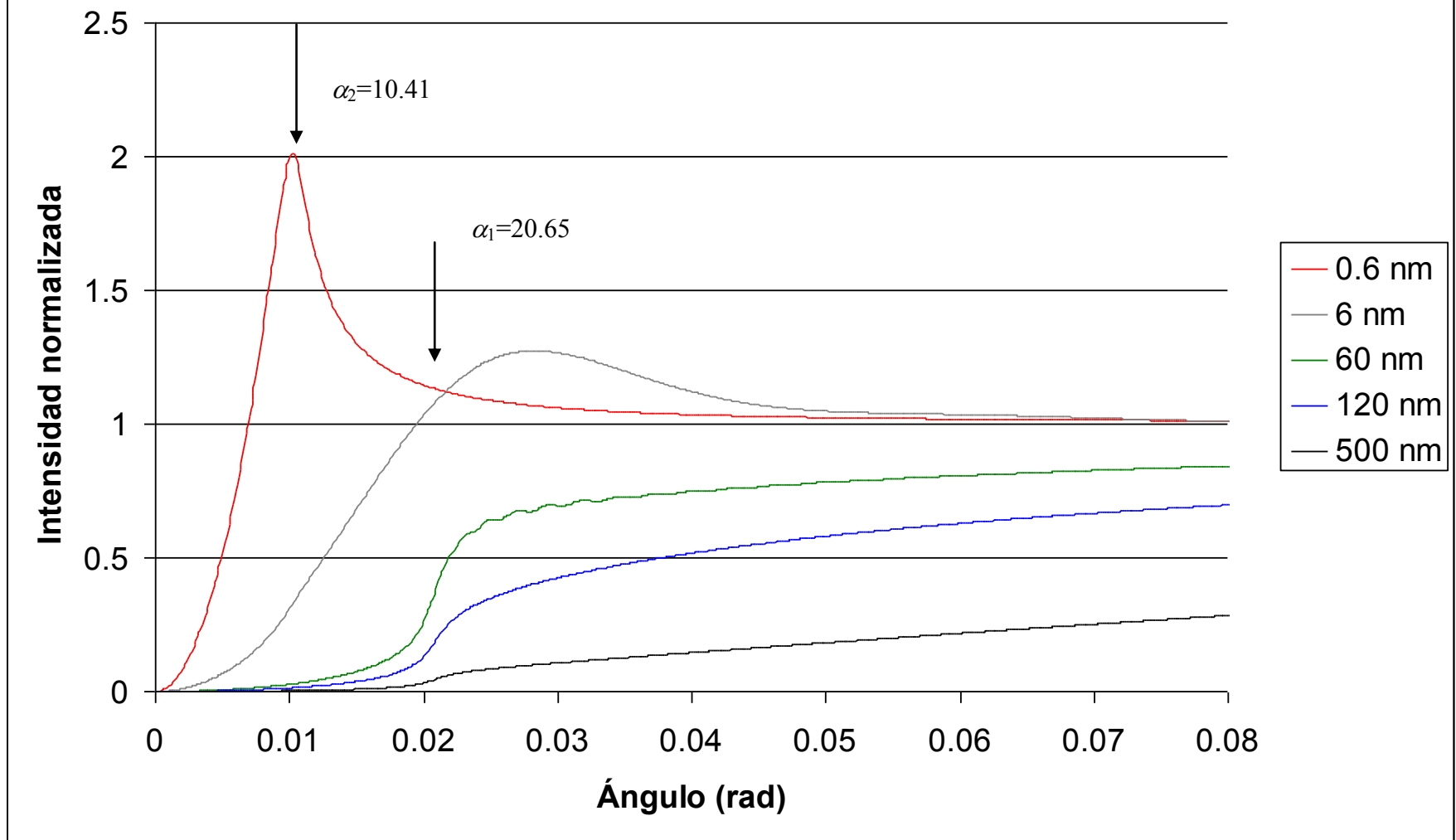


Figura 5.34

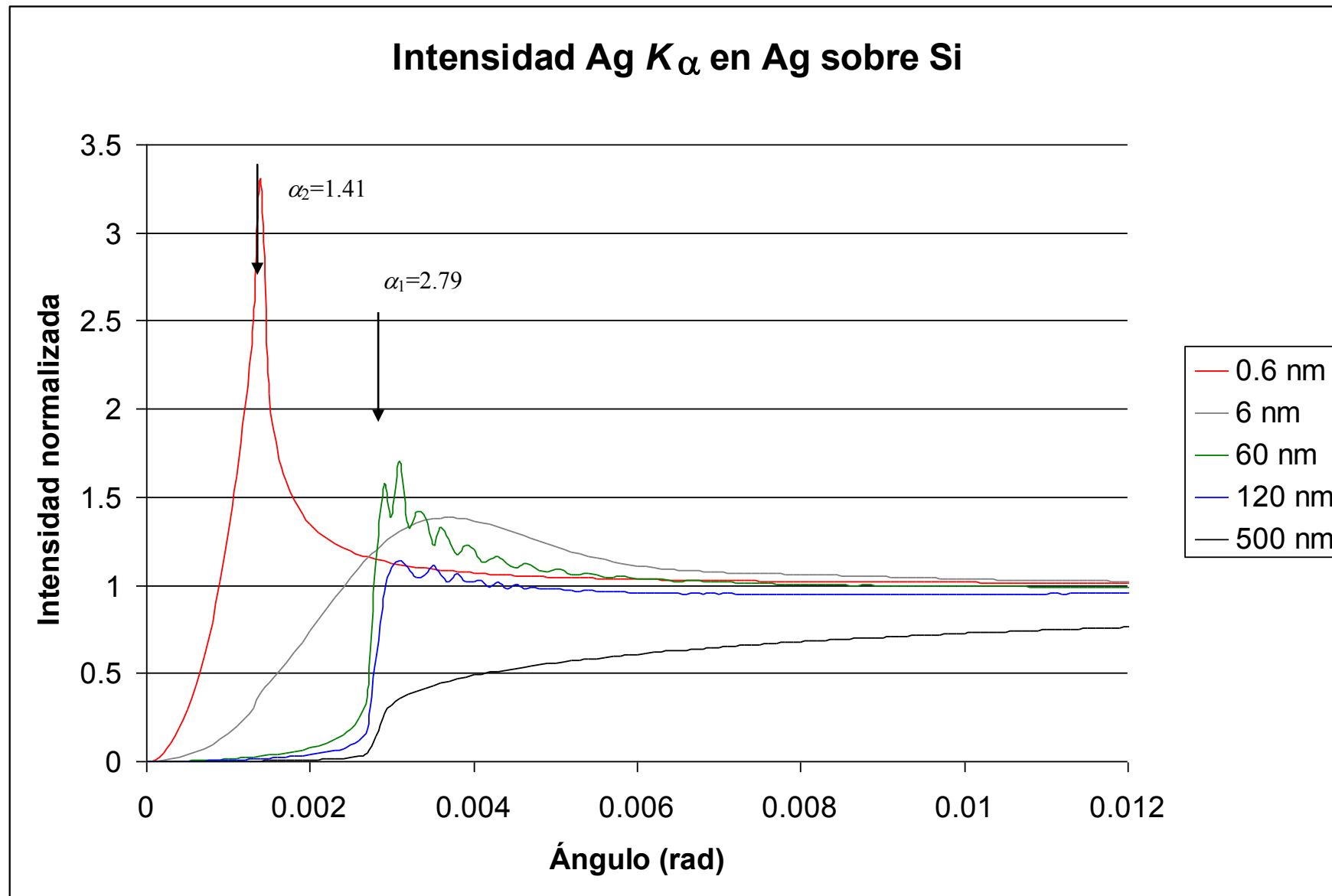


Figura 5.35

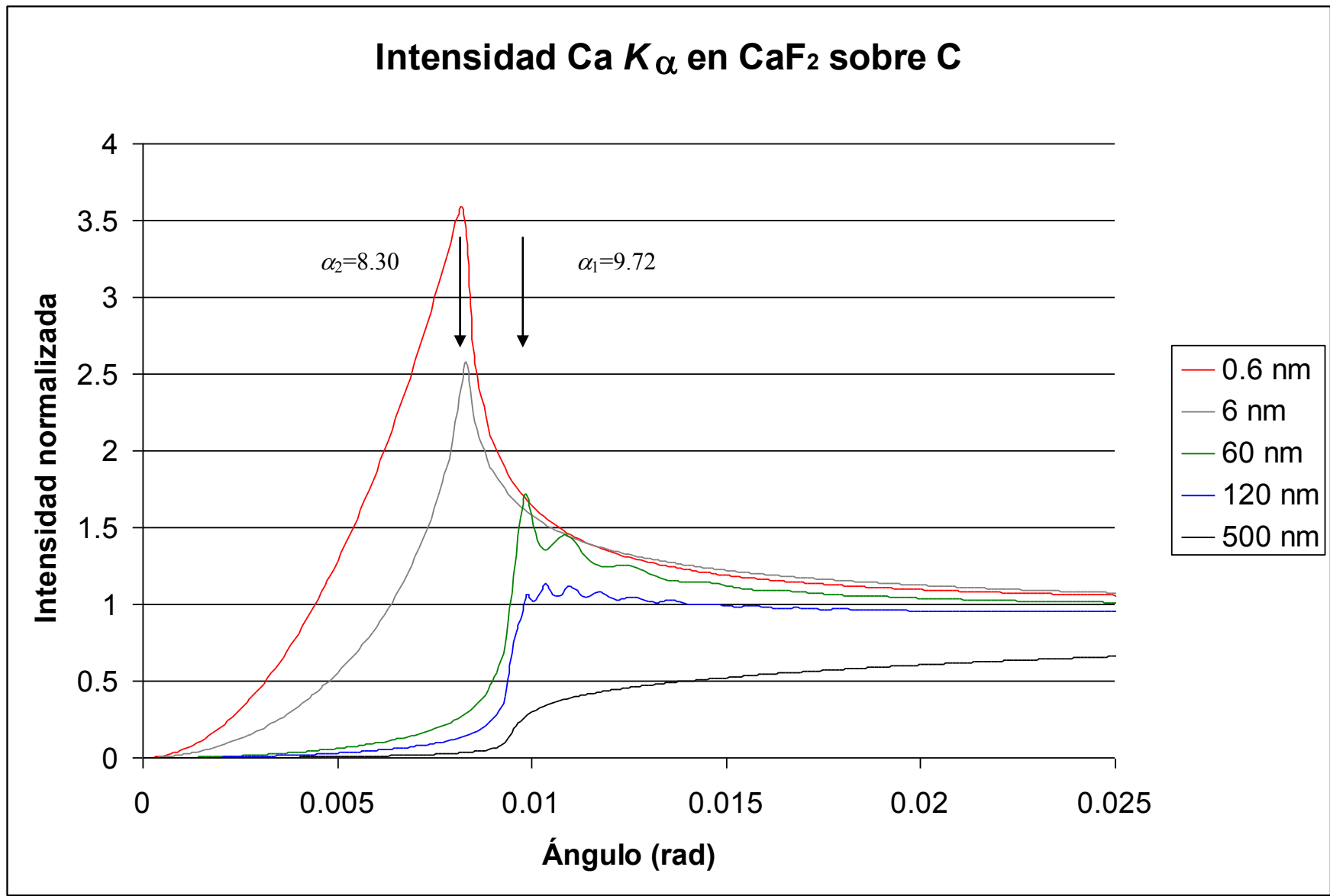


Figura 5.36

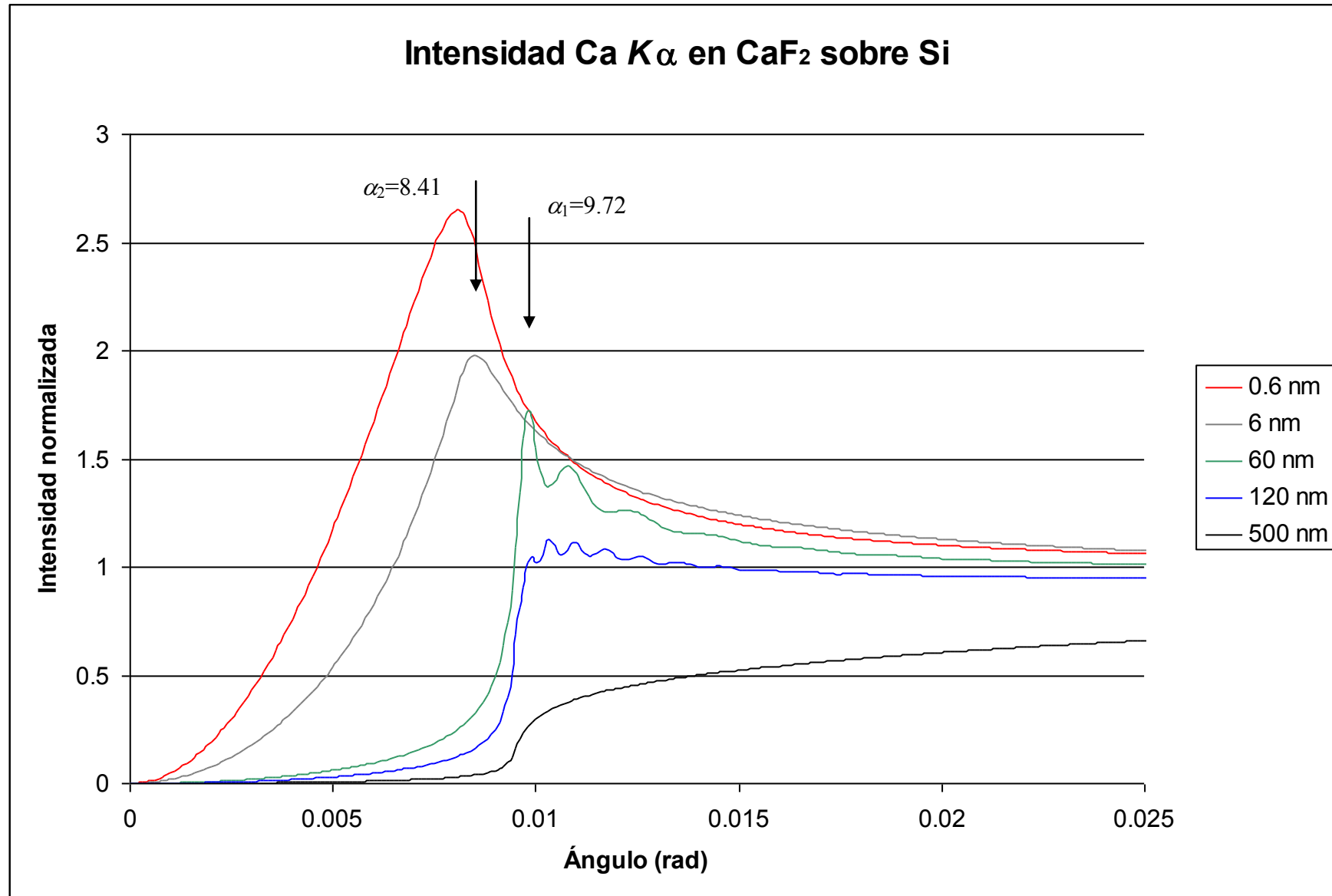


Figura 5.37

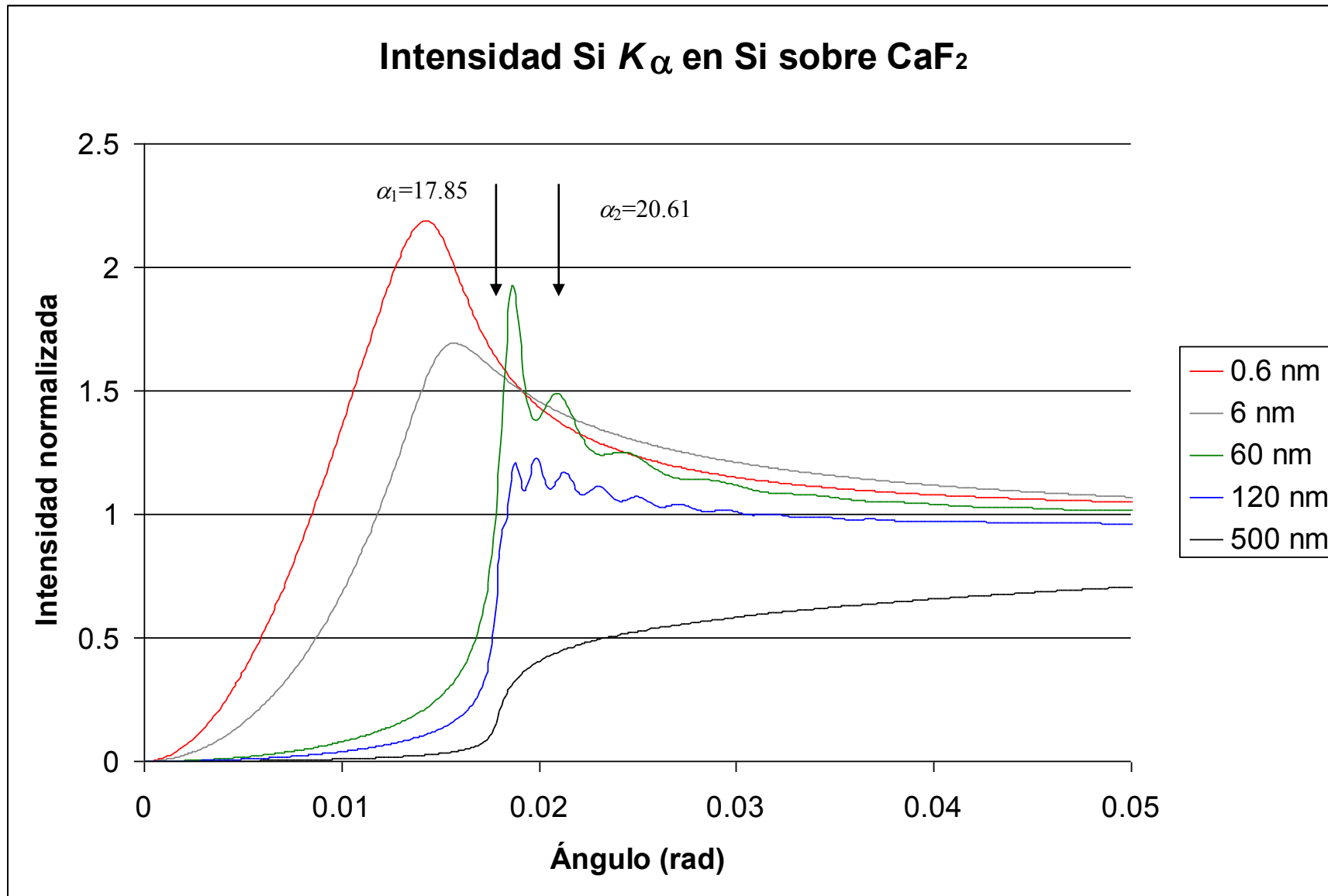


Figura 5.38

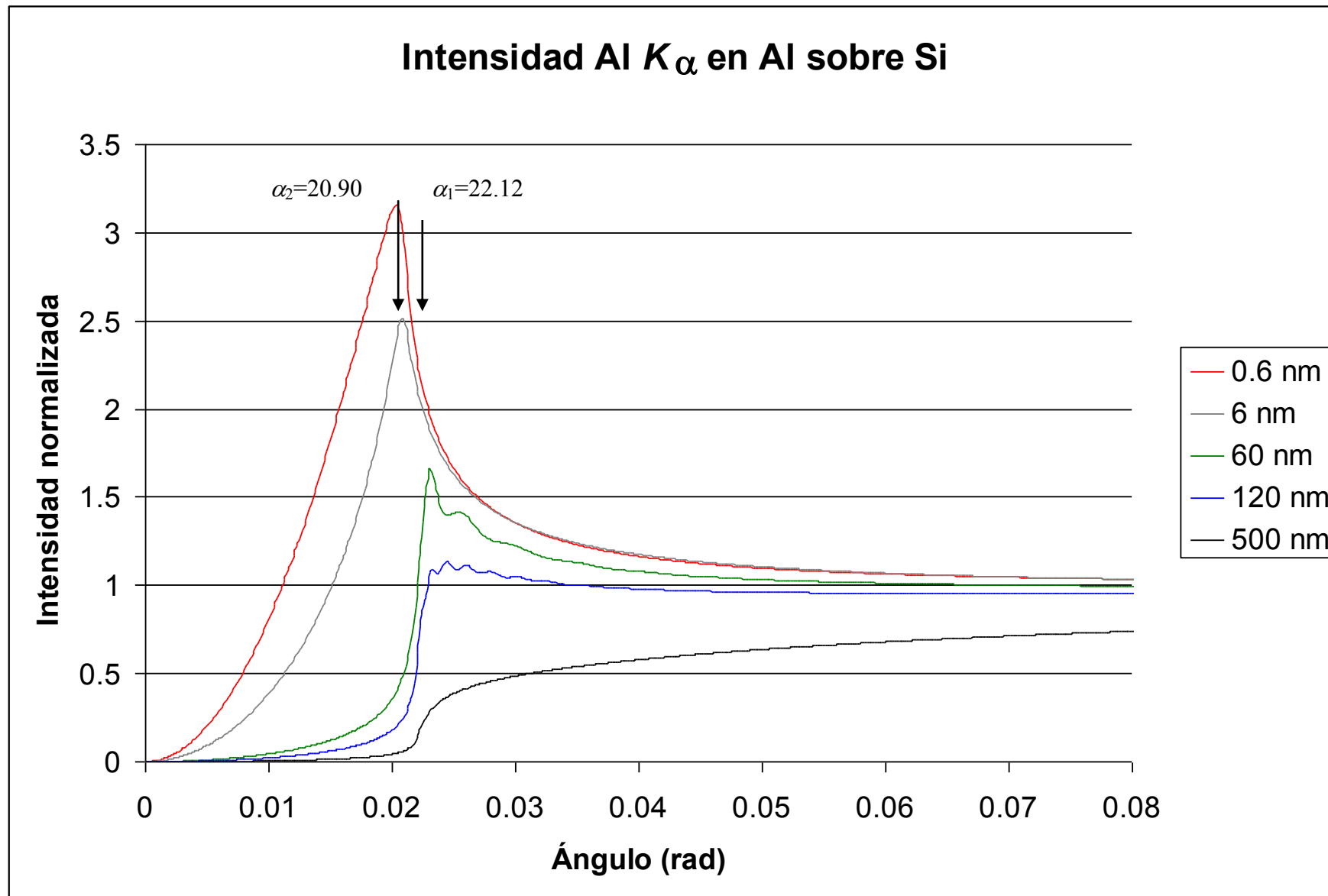


Figura 5.39

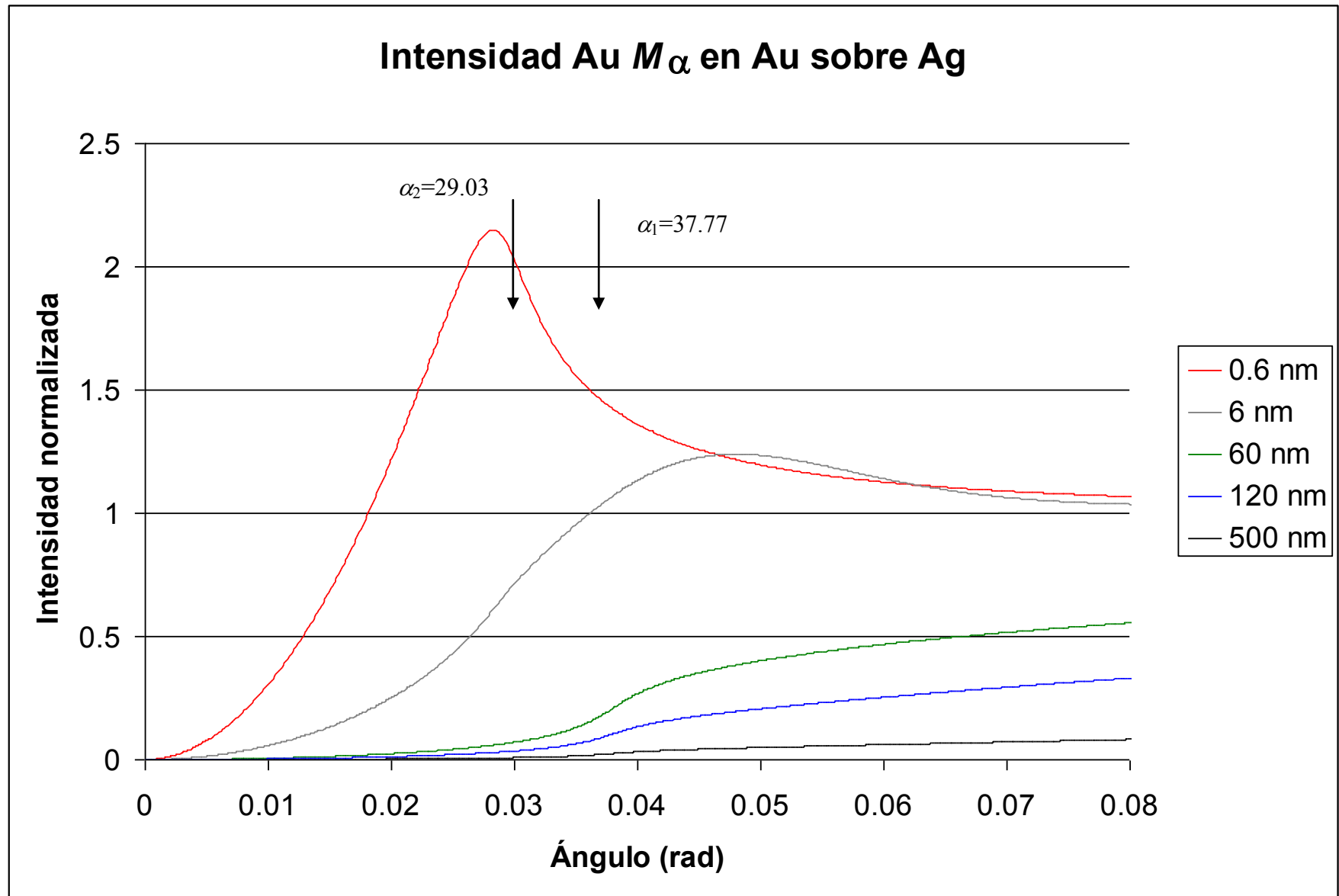


Figura 5.40

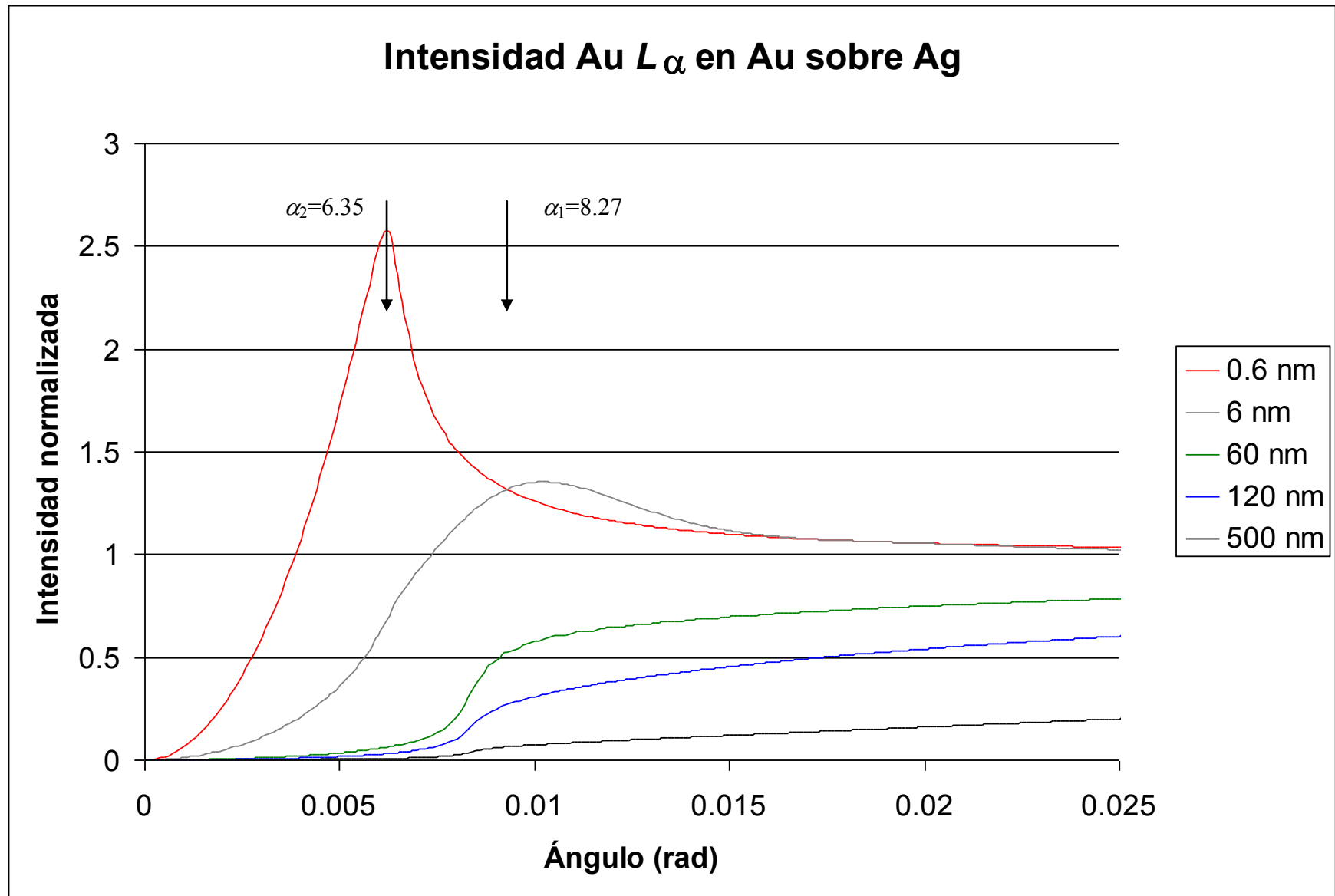


Figura 5.41

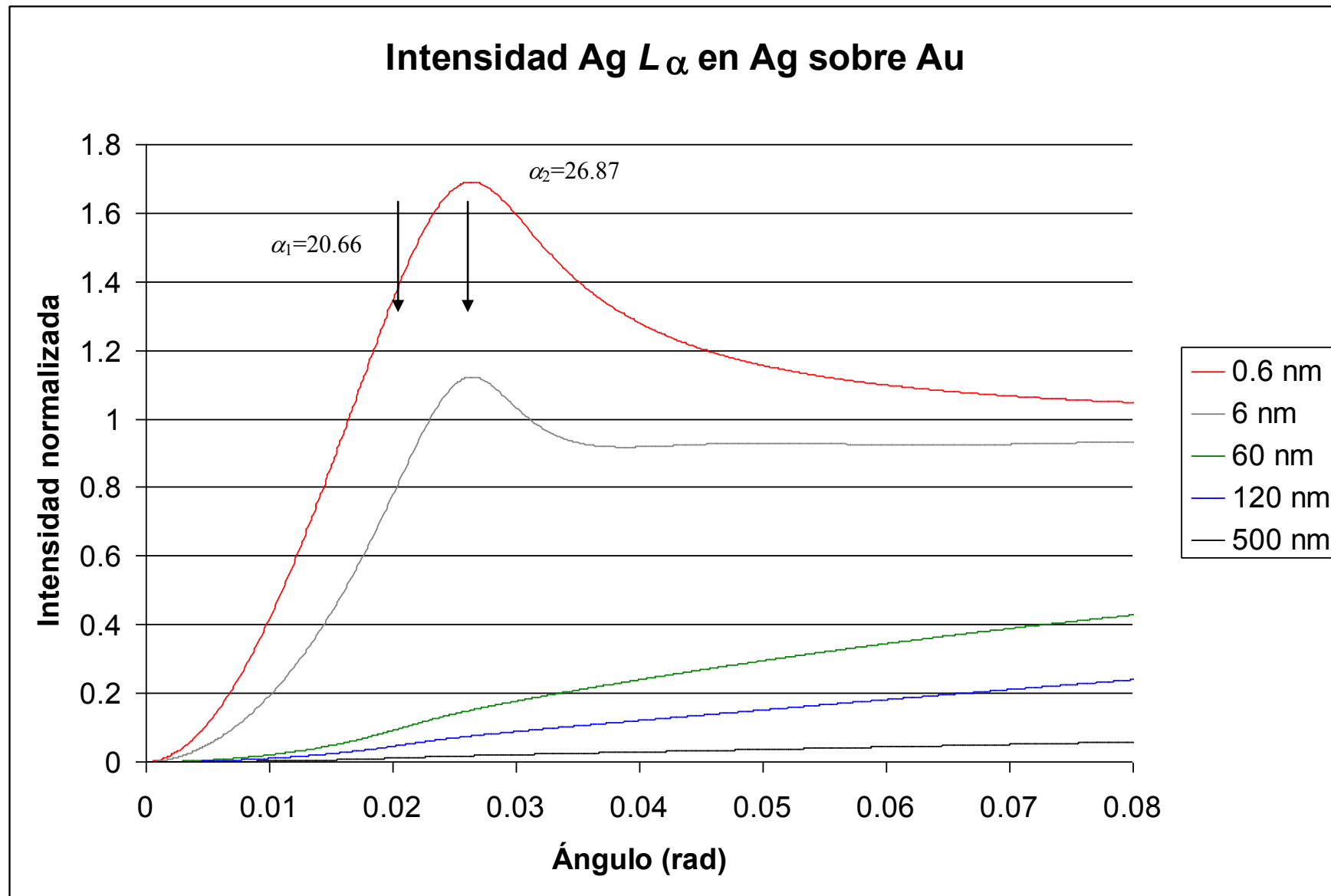


Figura 5.42

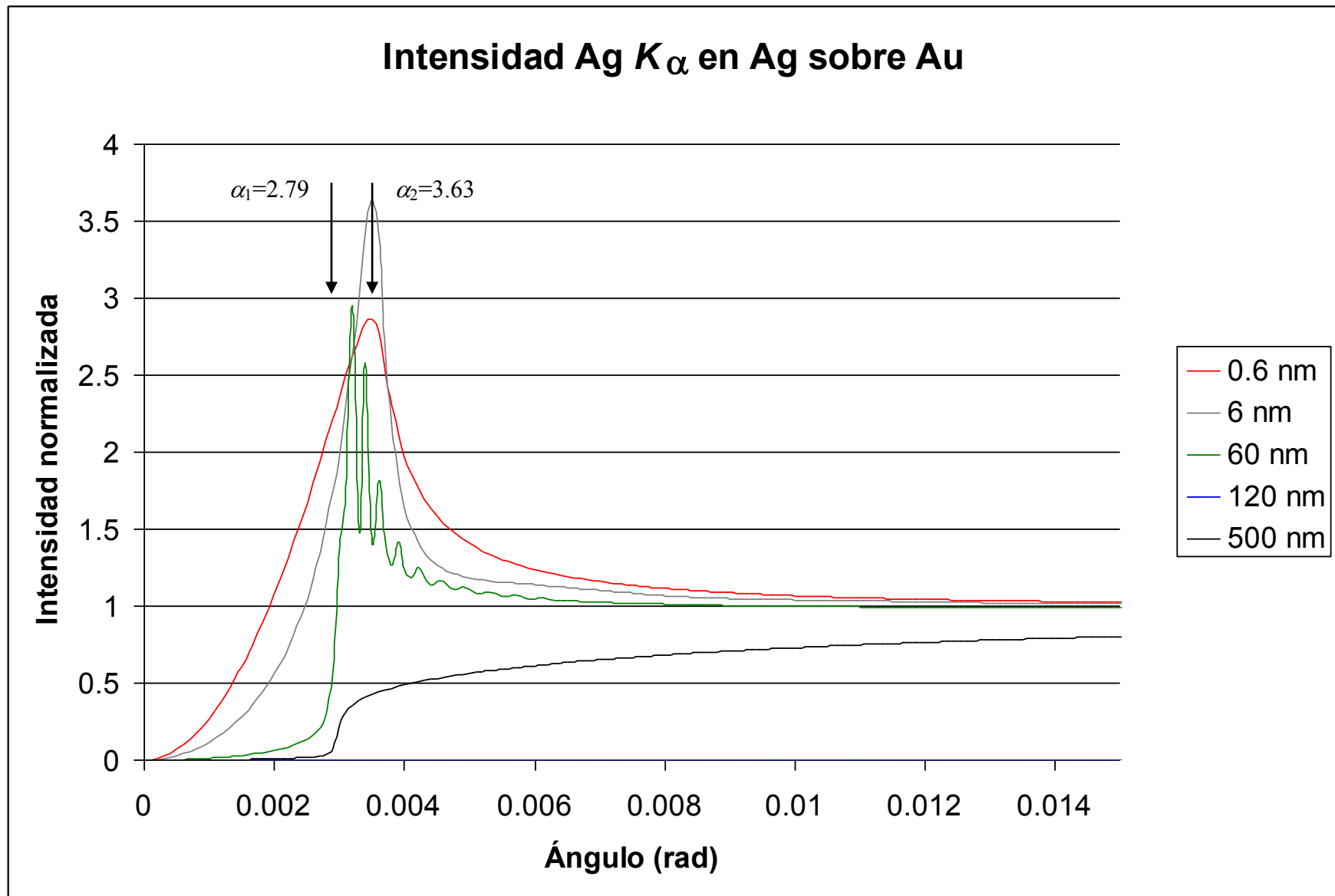


Figura 5.43

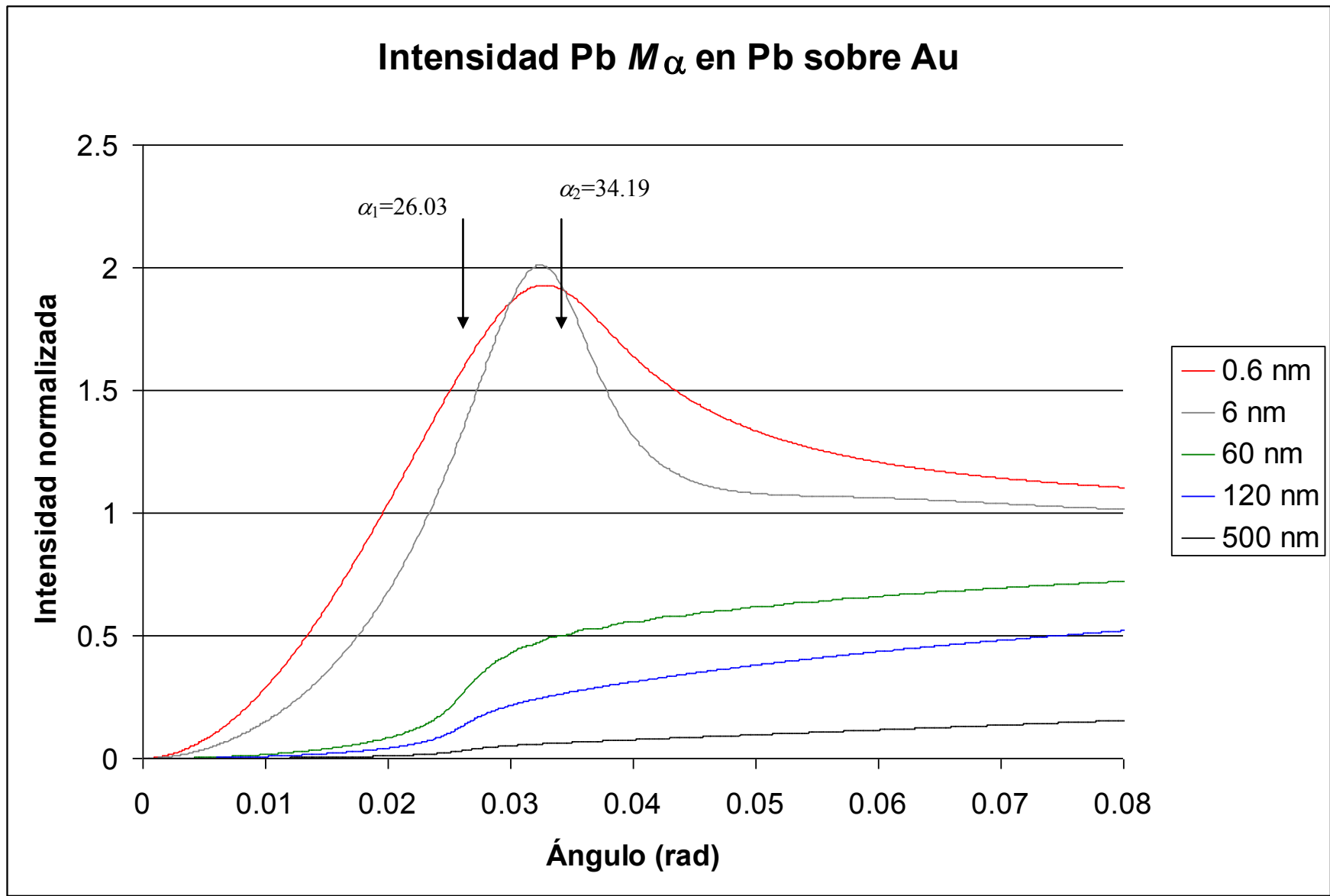


Figura 5.44

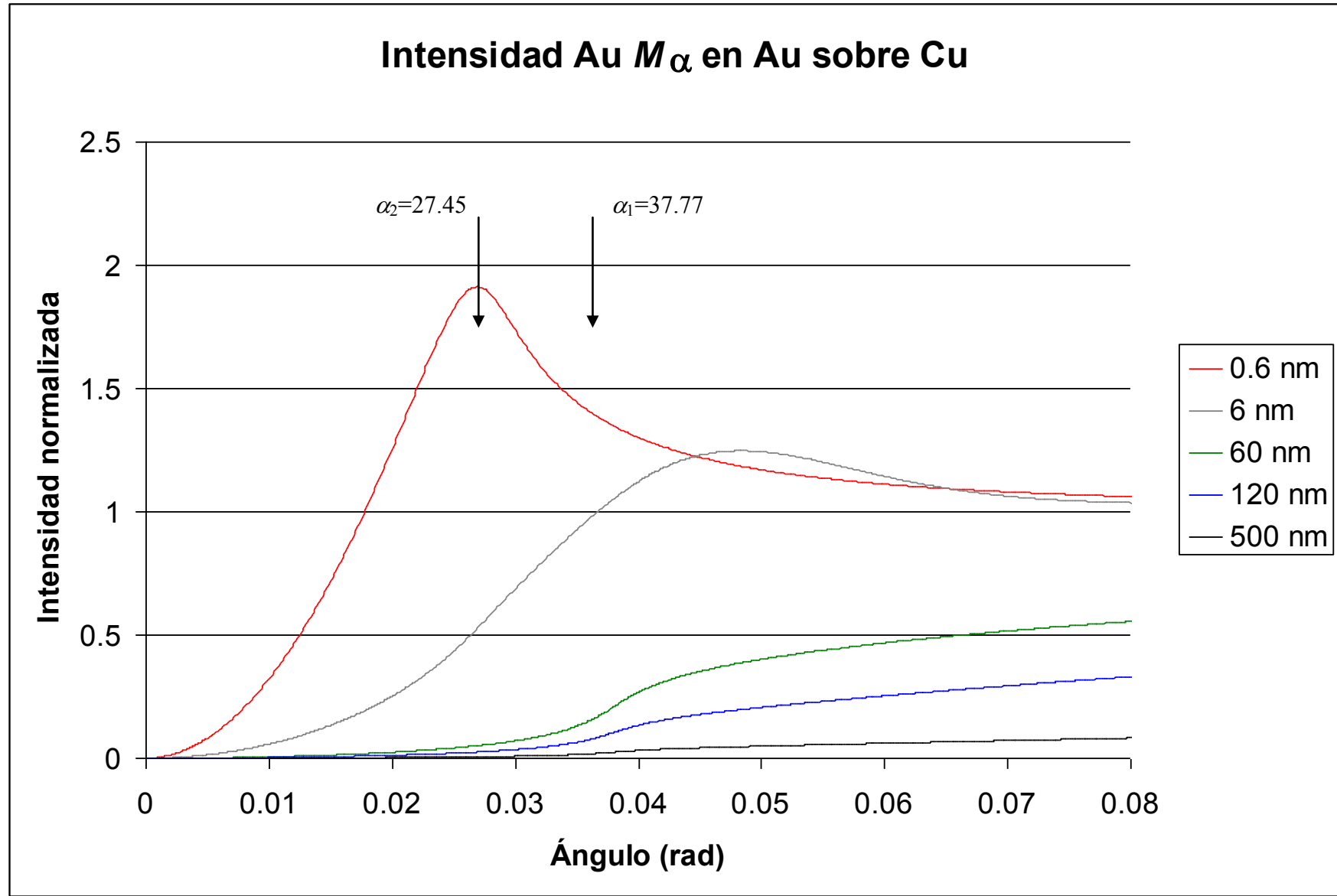


Figura 5.45

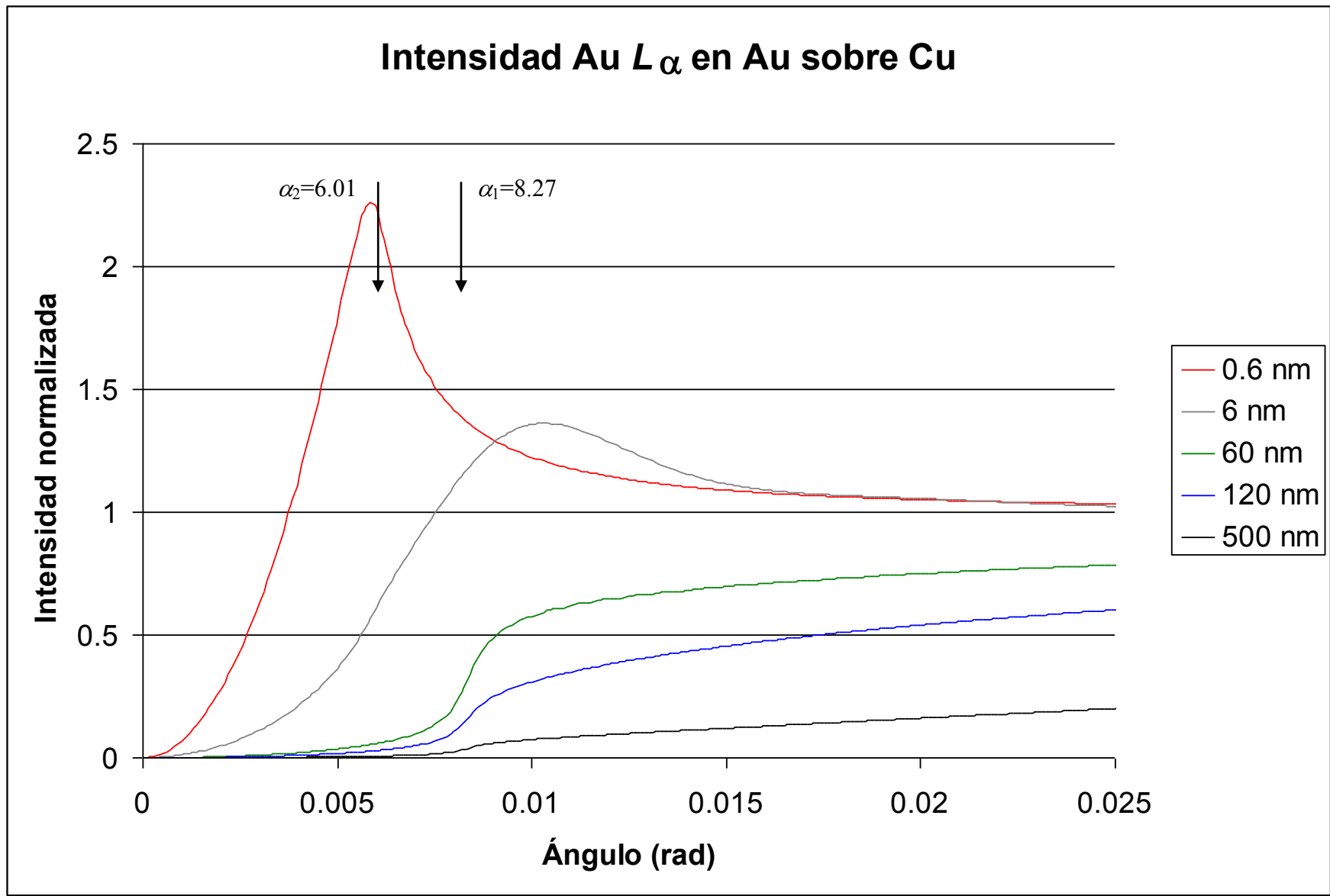


Figura 5.46

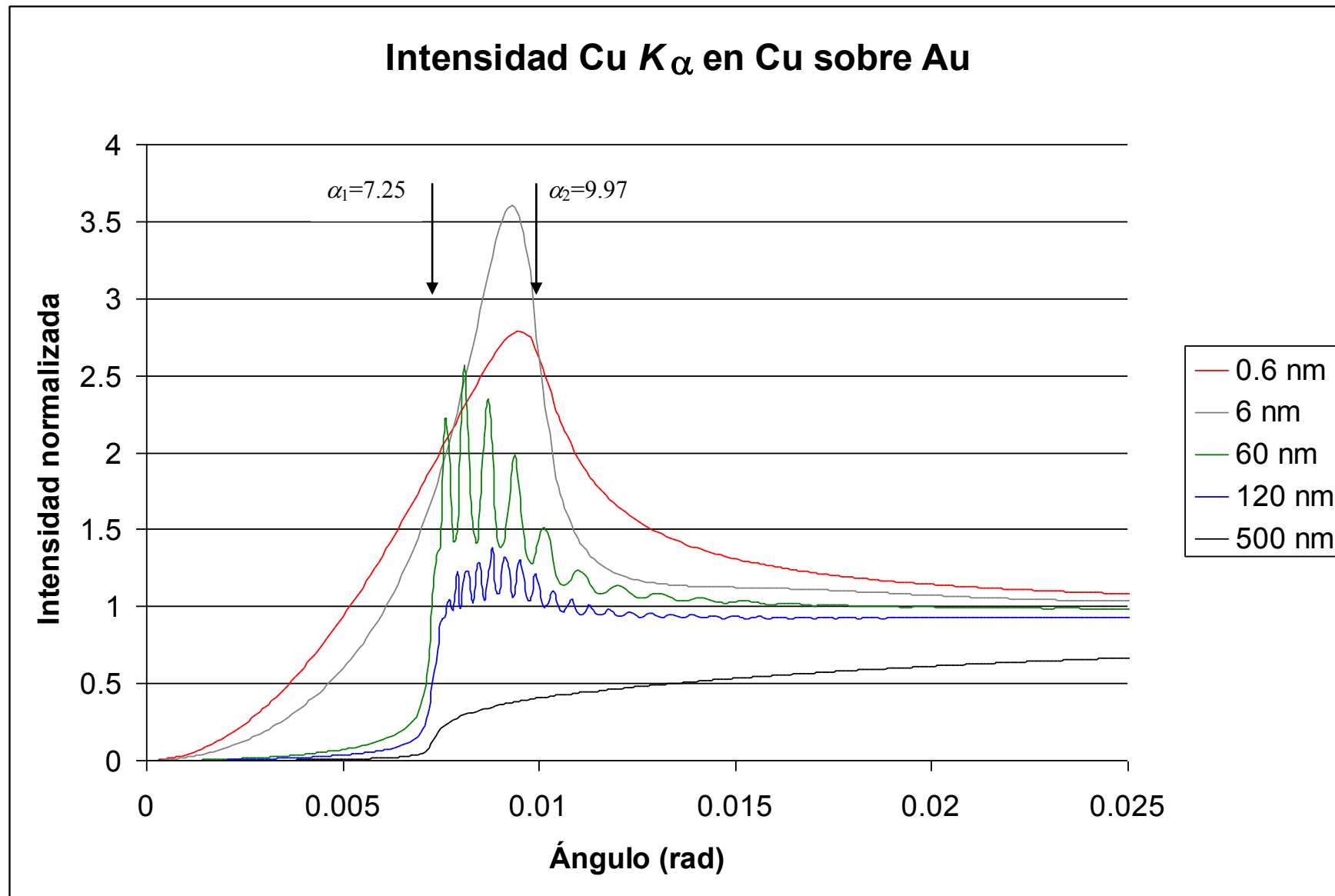


Figura 5.47

Casos especiales

Debido a que la intensidad depende de muchos parámetros, se tienen una gran cantidad de variantes en cuanto a la forma de la gráfica. Después de varios cálculos se encontró que los efectos de interferencia y de transmitancia son más notorios cuando el sustrato es de oro. Este sustrato correspondería al caso de mayor densidad electrónica posible para un elemento puro. Por este motivo, se efectúan cálculos de la intensidad $I(\alpha)$ con este tipo de sustrato para determinar cuándo estos efectos en el incremento de la transmitancia son más notorios. A continuación se presentan las gráficas de intensidades más destacadas y sus características. Esto es, una optimización de la intensidad con respecto al grosor de la película delgada con el fin de obtener la mayor intensidad que pueda ser capturada en el laboratorio. Estos sistemas ideales aquí presentados podemos considerarlos de interés para iniciar los estudios experimentales.

En la figura 5.48 se presenta el sistema cobre sobre oro para la línea de emisión de rayos X $\text{Cu } K_\alpha$ en una película delgada de 20 nm. La característica principal de este sistema es la altura del pico máximo de intensidad. Este es de 6 veces mayor que la intensidad que se tiene para ángulos no rasantes. Otra característica importante de este sistema es que sólo tiene dos picos de intensidad en un intervalo α bastante reducido. Esto se traduce en una emisión de rayos X muy localizada en el ángulo de 7.5 miliradianes.

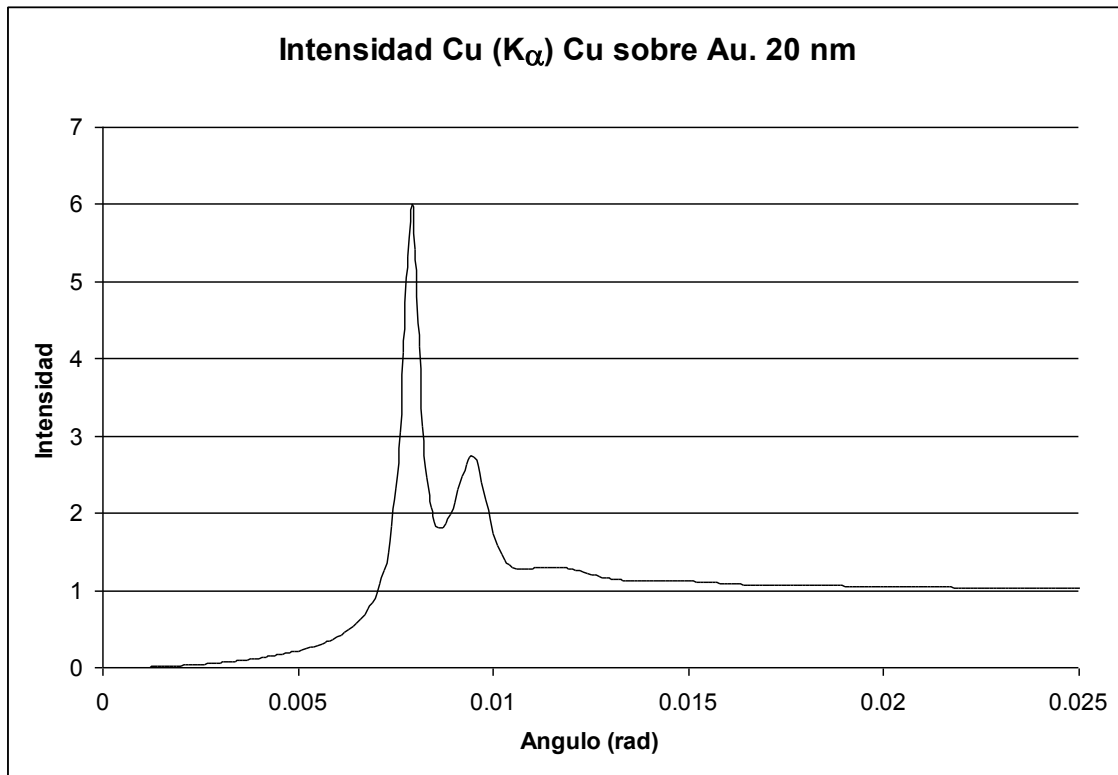


Figura 5.48. Sistema cobre sobre oro para la línea $\text{Cu } K_\alpha$ en una película de 20 nanómetros

En la figura 5.49 se presenta el sistema silicio sobre oro para la línea de emisión de rayos X Si K_α en una película delgada de 35 nanómetros. Su característica principal es la presencia de varios picos muy marcados dentro de un intervalo α bastante amplio, esto es de 35 miliradianes, muy adecuado desde el punto de vista experimental. La ganancia de intensidad de los rayos X en el pico máximo es de cinco veces la intensidad capturada a ángulos mayores. El segundo pico es también muy grande. Otra característica importante es que la separación entre picos que es de 6 miliradianes, lo cual facilitaría su observación experimental.

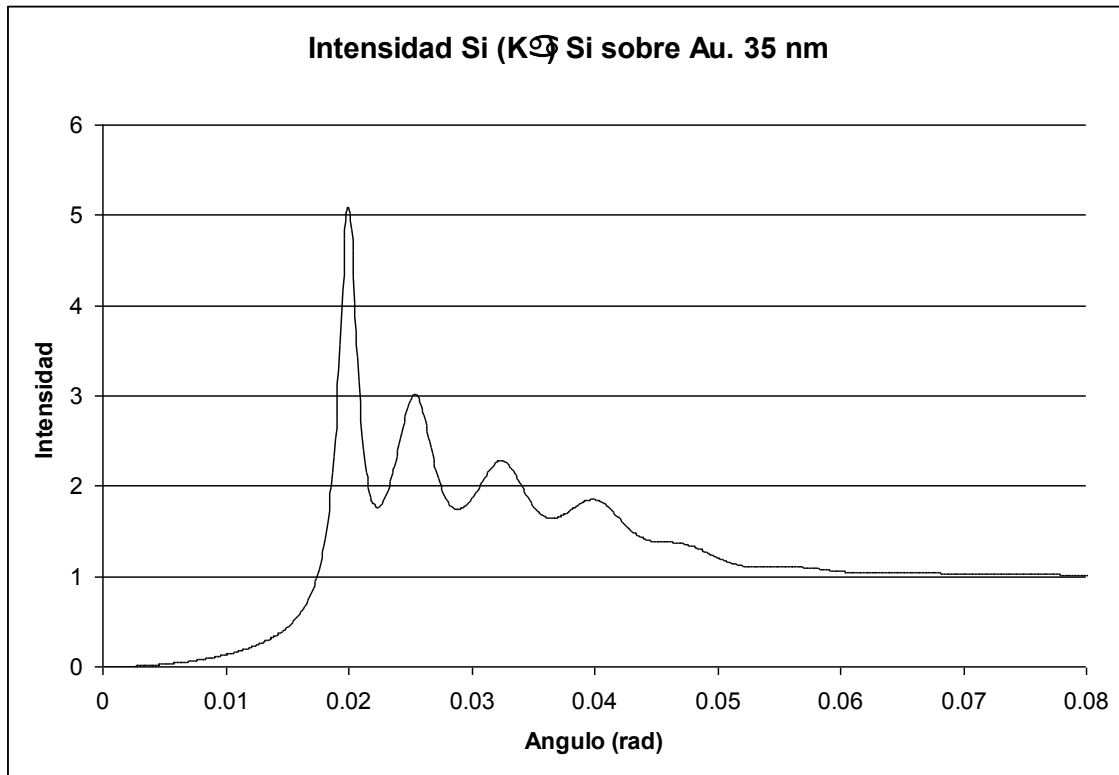


Figura 5.49. Sistema silicio sobre oro para la línea Si K_α en una película de 20 nanómetros

En la figura 5.50 se presenta el sistema aluminio sobre oro para la línea de emisión de rayos X Al K_α en una película delgada de 32 nanómetros. Los resultados son muy similares al anterior del silicio, como era de esperarse.

En la figura 5.51 se presenta el sistema de óxido de calcio sobre oro para la línea de emisión de rayos X Ca K_α en una película delgada de 30 nanómetros. En este caso el intervalo de las oscilaciones se reduce a 15 mrad, pero aún así la intensidad de los máximos es grande.

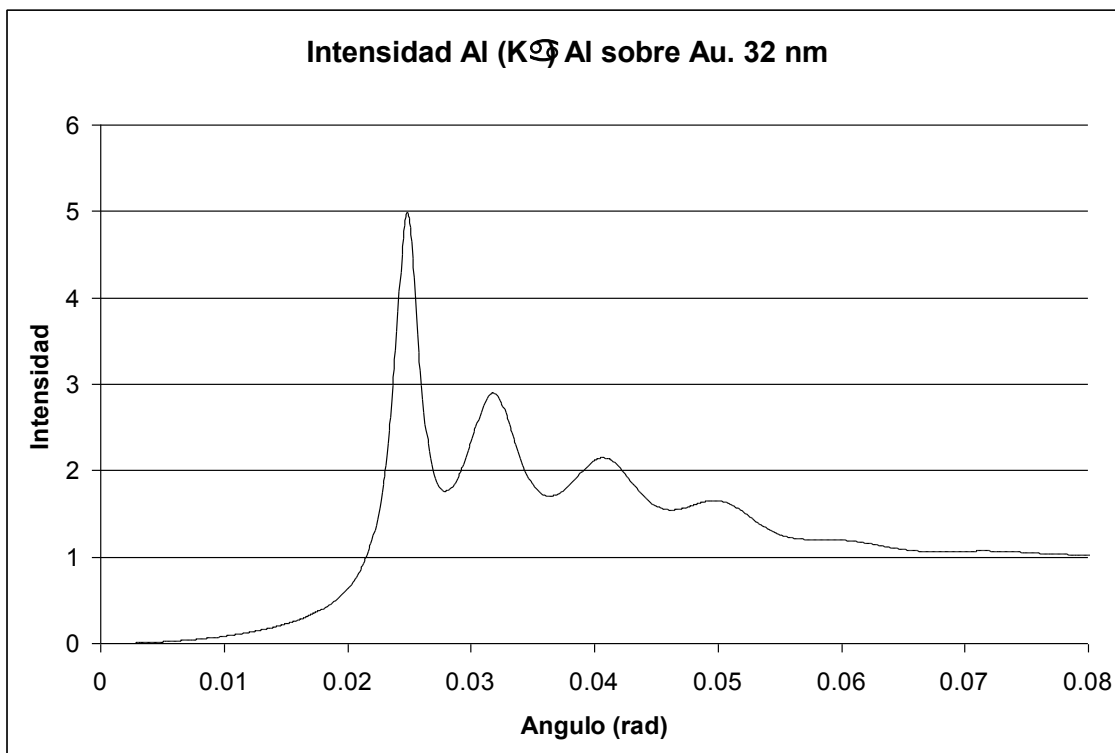


Figura 5.50. Sistema aluminio sobre oro para la línea Al K_{α} en una película de 32 nanómetros

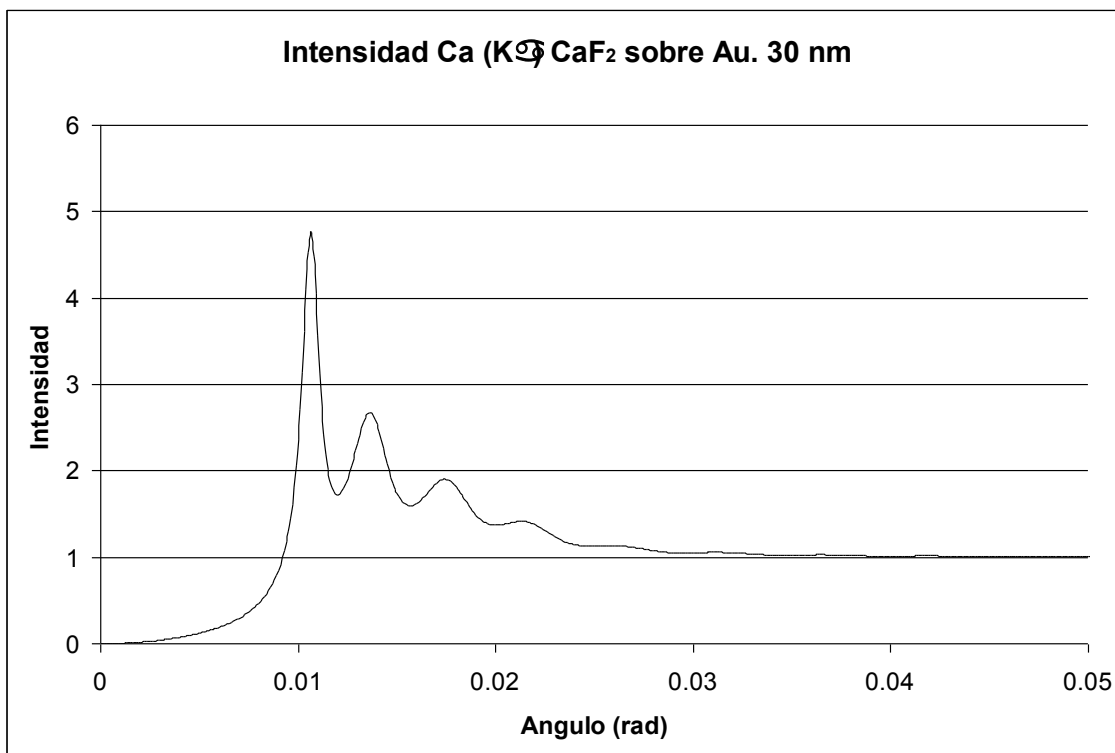


Figura 5.51. Sistema difloruro de calcio sobre oro para la línea Ca K_{α} en una película de 30 nanómetros.

En la figura 5.52 se presenta el sistema plata sobre oro para la línea de emisión de rayos X $Ag K_{\alpha}$ en una película delgada de 23 nanómetros. La característica más importante de este sistema es la amplitud de la intensidad de los rayos X en el máximo, pues esta es siete veces mayor que la amplitud para ángulos mayores. Esto quiere decir que si capturamos rayos X a un ángulo de 3.2 miliradianes, estaremos captando siete veces mas que en ángulos mayores a 10 miliradianes. El inconveniente que tiene es que la zona donde se observa este incremento es de solamente 1.5 mrad y sus oscilaciones resultarán ser difíciles de observar.

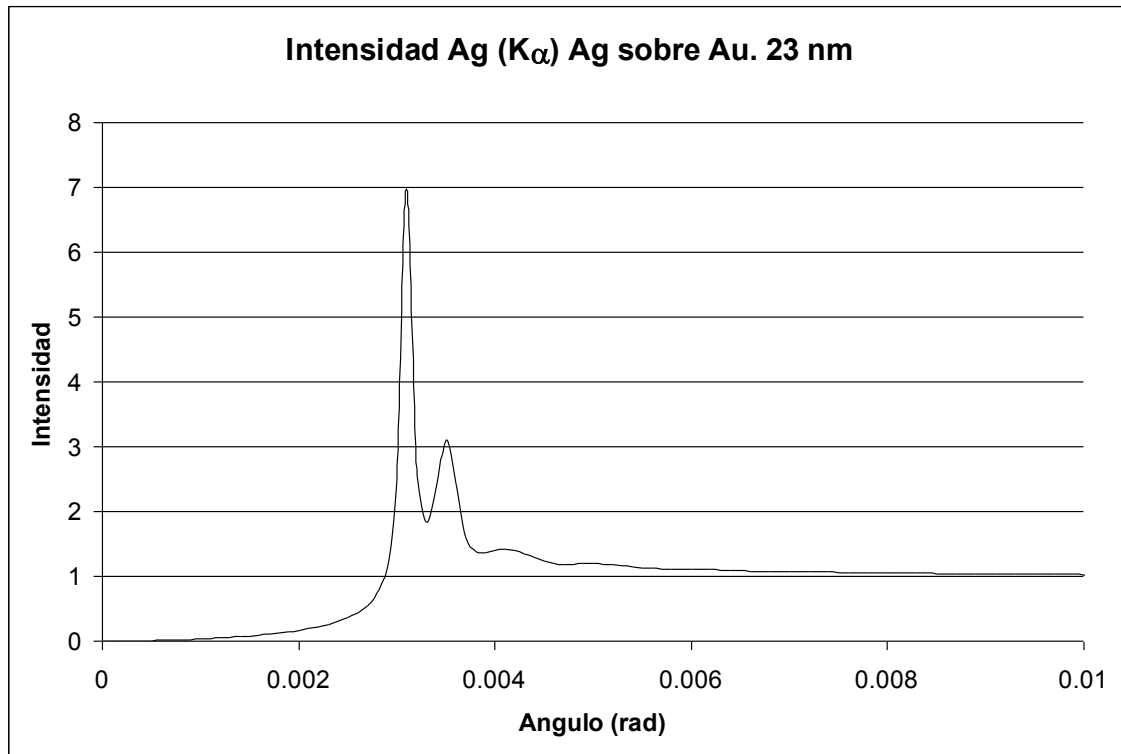


Figura 5.52. Sistema plata sobre oro para la línea $Ag K_{\alpha}$ en una película de 23 nanómetros

5.7 Efecto debido al área de un detector real

Espectro Silicio sobre Oro utilizando un detector no puntual (real)

Todo lo anterior se ha realizado sin ninguna restricción en cuanto al tamaño del detector de los rayos X, esto es, no se manejaron dimensiones ni para el detector ni para su posición. Ahora la tarea es encontrar cómo sería un espectro de intensidad de rayos X teniendo en cuenta las dimensiones del detector y su colocación en un arreglo experimental idealizado. En la figura 5.53 se muestra el arreglo experimental propuesto utilizando un detector típico para el registro de rayos X característicos.

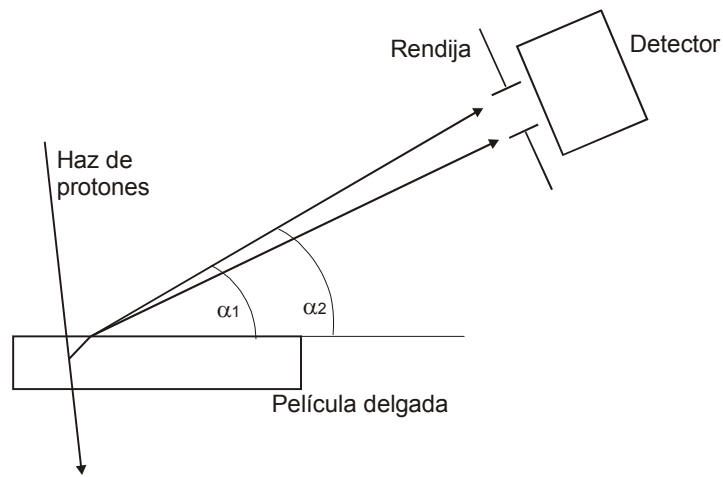


Figura 5.53. Arreglo experimental, discrepancia en el ángulo de salida.

Como se observa en la figura 5.53 el problema principal radica en la discrepancia del ángulo de salida rasante α debido al ángulo sólido que subtiende el detector. Esto es, ahora el registro de los rayos X consistirá en la superposición de fotones emitidos en un intervalo de ángulos $\Delta\alpha = \alpha_2 - \alpha_1$ que coincidan con el ángulo sólido que subtienda el detector.

Los detectores manejados en el laboratorio tienen fundamentalmente dos formas: de cara redonda y de cara cuadrada. Para los de cara cuadrada, como se muestra en la figura 5.54, la simulación consistirá en partir el detector en rebanadas lo más delgadas posible y al final superponer las intensidades observadas en cada una de las rebanadas. Para un detector de cara redonda el cálculo será semejante pero un poco más complicado debido a la curvatura como se ve en la figura 5.55.

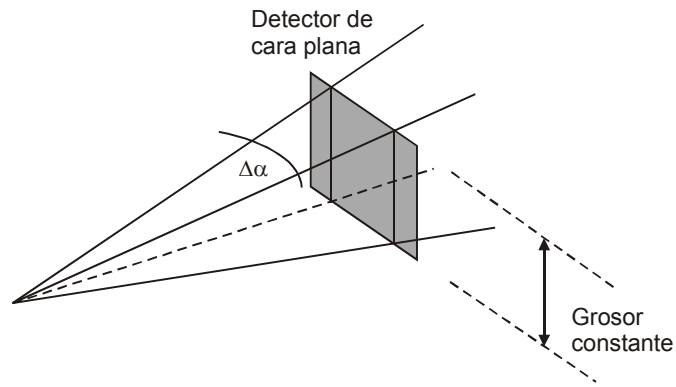


Figura 5.54. Caras de los detectores

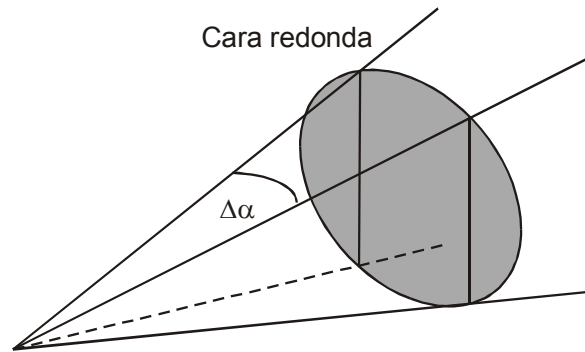


Figura 5.55. Detector de cara redonda

Simulación con un detector de cara rectangular

Para observar cómo sería el efecto debido al tamaño del detector consideraremos uno con área activa cuadrada y con una rendija colimadora enfrente para restringir el área donde puedan incidir los fotones. Esto es, solamente los fotones que entren por la rendija podrán ser registrados y además se delimitará el tamaño del área considerada para la detección. Por lo regular los detectores se colocan a distancias de unos 10 cm. En la figura 5.56 se muestran estos efectos para el sistema de una película de silicio de 60 nm sobre un sustrato de oro para los rayos X del Si K_{α} . De esta figura se observa claramente la pérdida de resolución conforme utilizamos rendijas de mayor apertura. Basándonos en esta figura podemos señalar que el registro experimental de este tipo de efectos será más claro al utilizar rendijas lo más estrechas posibles, de preferencia menores de 0.2 mm. El inconveniente que presenta el uso de rendijas pequeñas es la reducción significativa en el conteo de fotones y por tanto se requerirán de mayores tiempos para la captura de datos en cada posición angular.

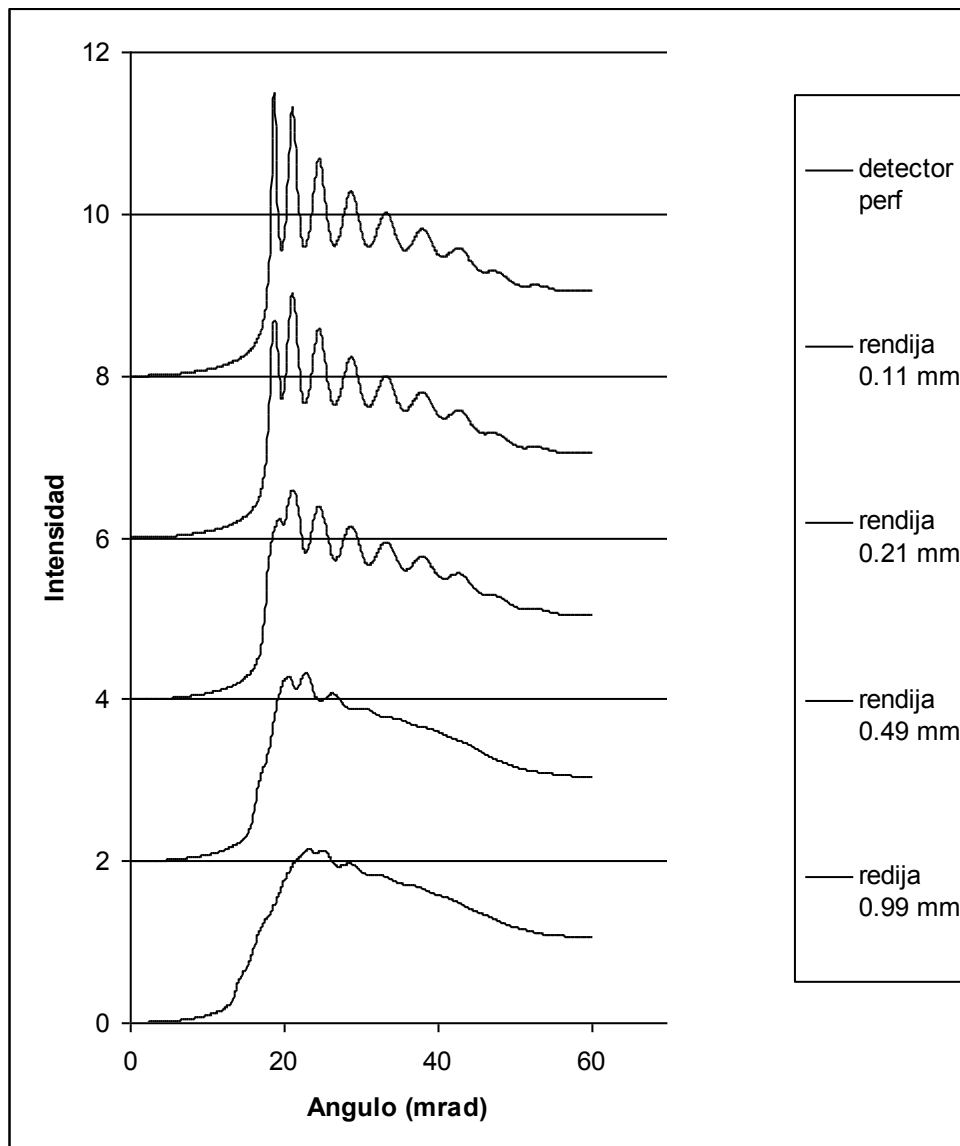


Figura 5.56. Intensidades de rayos X Si K_{α} generadas en una película de silicio sobre oro y observadas con diferentes aperturas de la rendija y localizado a 10 cm.

Referencias

- [1] W.J. Veigele. *At. Data Nucl. Data* 5 (1973) 51.
- [2] E. Storm and H.I. Israel. Photon cross-sections from 1 keV to 100 MeV for elements $Z=1$ to $Z=100$, *Nucl. Data Tables* 7 (1971) 565.
- [3] R. Theisen and D. Vollath. *Tables of X-ray mass attenuation coefficients*, Verla Stahleisen M. B. H. Dusseldorf, 1967.
- [4] B. L. Henke, E.M. Gullikson and J. C. Davies. X-ray interactions: Photoabsorption, scattering, transmission and reflection at $E = 50 - 30,000$ eV, $Z = 1 - 92$, *At. Data Nucl. Data* 54 (1993) 181.
- [5] J. Leroux and T.P. Thinh. Revised tables of X-Ray mass attenuation coefficient, Corporation Scientifique Claisse Inc., Quebec, 1977.
- [6] I. Orlic, K.K. Loh, C.H. Sow, S.M. Tang and P. Thong. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 74 (1993) 352.
- [7] M.J. Berger and J.H. Hubbell. National Bureau of Standard, Report NBSIR 87-3597, 1987.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se ha efectuado el estudio teórico de los efectos en la transmitancia y reflectancia para rayos X inducidos en películas delgadas y detectados en direcciones rasantes a las superficies de las películas. Estas emisiones pueden producir efectos de interferencia y aumentos en la intensidad de los rayos X generados en la película. Los efectos resultantes son peculiares de las características de cada sistema película-sustrato. Estos efectos podrían ser de utilidad para el estudio experimental de películas utilizando técnicas de generación de rayos X como la fluorescencia, la sonda electrónica y el PIXE. De estos estudios se encuentra que hay sistemas más apropiados para ser estudiados con estas técnicas.

Unas de las limitantes experimentales más grandes para observar estos efectos son la del tamaño del detector y la intensidad de los rayos X que se generan en las películas. Así, el tamaño del detector lo que hace es tomar una superposición de los efectos producidos en la película en un intervalo de ángulos $\Delta\alpha$. Esto origina una pérdida de resolución y dependiendo del sistema será posible observar un aumento global en la transmitancia, pero no así los efectos oscilatorios debidos a la interferencia. Una manera de evitar esta pérdida de resolución será con el uso de una rendija enfrente del detector. Esto puede ser de dos maneras, una rendija muy pequeña con el detector cerca de la muestra o una rendija mayor pero con el detector más alejado para mantener el ángulo sólido que brinde una buena resolución.

La otra limitante es la cantidad de rayos X que se generen en la película y que llegan a ser detectados. La cantidad de fotones que se inducen por segundo con los métodos convencionales para producir los rayos X (tubos de rayos X, microscopios electrónicos de barrido o iones en aceleradores de partículas) por lo regular no son suficientemente grandes cuando se está utilizando un detector con una rendija pequeña o que se encuentre muy alejado. Esto origina que los tiempos de conteo deban de ser muy largos para cada posición del ángulo α . Este es un aspecto muy importante para la aplicabilidad de la técnica, la cual no será conveniente si estos tiempos de conteo son muy grandes. Tal vez utilizando fluorescencia con radiación de sincrotrón muy intensa se podría aumentar la generación de rayos X en las películas para dar lugar a tiempos de conteo menores.

Con base en las simulaciones realizadas para diversos sistemas se encuentra que las intensidades emitidas y con efectos notorios ocurren cuando:

- a) Se tiene un sustrato de alta densidad electrónica, como el oro,
- b) Las líneas de rayos X no muy energéticas de tal manera que reduzcan el tamaño de la región de los efectos.
- c) Las líneas de rayos X tampoco correspondan a energías pequeñas que sufran una absorción notoria en la misma película.
- d) Los grosores de las películas deben de ser de unos pocos nanómetros (10nm a 100 nm).

Podemos concluir que el mejor sistema para intentar probar esta técnica en alguno de los aceleradores de iones del Instituto de Física de la UNAM sería el de películas delgadas de aluminio, silicio, o hasta calcio sobre sustratos de oro. El caso límite para intentar observar los efectos sería el de una película de cobre sobre oro.

Por lo pronto ya se cuenta con los programas de cálculo y las simulaciones para estos sistemas. La siguiente etapa deberá de consistir en la realización de experimentos.

Apéndice 1. Ángulos críticos

La siguiente tabla muestra los ángulos críticos α_c para diversas líneas de emisión de rayos X característicos en varios materiales calculados a partir de las ecuaciones (3.9) y (3.10). Cada ángulo crítico depende de la densidad del material ρ (tercera fila), del número atómico Z (segunda fila) del elemento en cuestión, y de la masa atómica M (cuarta fila). En la tercera columna se muestra la longitud de onda correspondiente a cada energía de fotón.

Ejemplo para obtener los ángulos críticos requeridos en algún sistema película-sustrato: si el sistema es Oro sobre Cobre, para la línea de emisión Au $M\alpha$, el primer ángulo crítico α_{c1} corresponderá a la intersección de la fila de Au $M\alpha$ y la columna Au que corresponde al material de la película delgada, esto es 37.766. Para el segundo ángulo crítico α_{c2} , será la intersección de la misma fila Au $M\alpha$ pero ahora con la columna Cu que corresponde al material del sustrato, esto es 27.449.

			C	Al	Si	Ca	Fe	Cu	Ag	Au	CaF2	SiO2	TiO2
		Z =	6	13	14	20	26	29	47	79	38	30	38
		ρ =	2.26	2.7	2.33	1.54	7.87	8.96	10.5	19.3	3.18	2.32	4.1
Elemento	Energía	M =	12.01	26.98	28.09	40.08	55.85	63.55	107.9	197	78.08	60.085	79.88
línea	rayos X	λ	α_c	α_c	α_c	α_c	α_c	α_c	α_c	α_c	α_c	α_c	α_c
Rayos X	[keV]	[Å]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]	[mrad]
O Ka	0.525	23.62	58.3301	62.6134	59.1563	48.1223	105.074	111.002	117.4	152.719	68.292	59.0821	76.6654
Cu La	0.93	13.336	32.9283	35.3463	33.3947	27.1658	59.3162	62.6623	66.2741	86.2125	38.552	33.3528	43.2789
Al Ka	1.486	8.34	20.6079	22.1212	20.8998	17.0015	37.1225	39.2166	41.4771	53.9553	24.1274	20.8736	27.0857
Si Ka	1.74	7.128	17.5996	18.892	17.8489	14.5197	31.7035	33.4919	35.4224	46.0791	20.6054	17.8265	23.1318
Au Ma	2.123	5.84	14.4246	15.4838	14.6288	11.9002	25.984	27.4498	29.032	37.7662	16.888	14.6105	18.9587
Pb Ma	2.345	5.286	13.059	14.0179	13.2439	10.7736	23.5241	24.8511	26.2835	34.1909	15.2893	13.2273	17.1639
Ag La	2.984	4.154	10.2625	11.0161	10.4079	8.46655	18.4866	19.5295	20.6551	26.8692	12.0152	10.3948	13.4884
Ca Ka	3.69	3.359	8.299	8.90841	8.41654	6.84667	14.9496	15.7929	16.7032	21.7283	9.71635	8.406	10.9077
Fe Ka	6.4	1.937	4.78489	5.13626	4.85266	3.94753	8.61939	9.10561	9.63046	12.5278	5.60208	4.84658	6.28896
Cu La	8.04	1.542	3.80887	4.08856	3.86282	3.14231	6.8612	7.24825	7.66603	9.97234	4.45937	3.85798	5.00614
Au La	9.7	1.276	3.15704	3.38887	3.20176	2.60456	5.68702	6.00783	6.35412	8.26573	3.69622	3.19775	4.14942
Ag Ka	22.101	0.561	1.38561	1.48735	1.40523	1.14312	2.496	2.6368	2.78878	3.62778	1.62225	1.40347	1.82115