



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

MODIFICACIÓN DE NANO PARTÍCULAS DE
Au EN ZAFIRO SINTÉTICO POR MEDIO DE
PULSOS DE LÁSER DE NANOSEGUNDOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
FÍSICA

PRESENTA:
DULCE VITELIA GUILLÉN ÁNGELES

DIRECTOR DE TESIS:
DR. ALEJANDRO CRESPO SOSA



CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX.

AGOSTO, 2020



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.

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno

Guillén

Ángeles

Dulce Vitelia

56 04 79 34

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

307167396

2. Datos del asesor

Dr.

Alejandro

Crespo

Sosa

3. Datos del sinodal 1

Dra.

Sandra Elizabeth

Rodil

Posada

4. Datos del sinodal 2

Dr.

Alejandro

Reyes

Coronado

5. Datos del sinodal 3

Dra.

Rosalba

Castañeda

Guzmán

6. Datos del sinodal 4

Dr.

Luis

Rodríguez

Fernández

7. Datos del trabajo escrito

Modificación de nano partículas de Au en zafiro sintético por medio de pulsos de láser de nanosegundos

102 páginas

2020

Con todo mi amor y cariño dedico este trabajo a la persona más dulce que me ha cobijado con toda su ternura y enseñado que la paciencia y el amor son lo más valioso que tiene el ser humano, de quien llevo su nombre con orgullo y honor y sus enseñanzas siempre conmigo.

Vitelia Ángeles

Agradecimientos

A mi padre: Miguel A. Guillén por tu comprensión y la paciencia para hacer las cosas. Por compartir momentos juntos y estar conmigo siempre, por la confianza.

A mi madre: Mirna López por la fortaleza en momentos difíciles, por todo el apoyo y los ánimos para salir adelante, por los consejos de vida, por estar ahí cuando lo he necesitado.

A Karen Guillén por todos los momentos compartidos que hemos vivido, incluyendo los momentos difíciles, por tu empatía y por recordarme que la sensibilidad también forma parte de la vida.

A Palomita, siempre negra y linda, por todos esos años de infinita paciencia que me tuviste y aquellas veces en que a mi hermana y a mi nos protegías de cualquier cosa. Todavía recuerdo el primer día que llegaste a nuestras vidas. Gracias por habernos acompañado en este camino lleno de aprendizajes llamado vida.

A mi tía Norma Ángeles por su comprensión y apoyo en todos los sentidos. Por enseñarme con su ejemplo a ser siempre noble e independiente. Por ver la vida de manera sencilla y disfrutarla.

A mis tíos Jorge Gómez y Raúl López por ser mis dos colosales ejemplos de formación intelectual y académica. Sé que no es fácil llegar a donde han llegado, pero todos los días trabajo para caminar por la vida y dar grandes pasos como ustedes. Los admiro mucho.

A mi tía Martha Darina por enseñarme a ser fuerte en momentos difíciles, por los momentos de convivencia compartidos en la sobremesa, por la similitud de carácter.

A Catalina Apolinar por su invaluable amistad y sinceridad a lo largo de estos años. El gusto compartido por las matemáticas. La modestia y sencillez tan características de ti para ver las cosas siempre tienen algo que enseñarme.

A Alejandro Jaramillo por los valiosísimos años de amistad en los que siempre me tiendes la mano incondicionalmente cada vez que lo necesito. Por compartir el interés por el conocimiento y mostrarme el compromiso y esfuerzo por el trabajo. La rectitud inquebrantable para hacer siempre lo correcto y la serenidad ante la vida.

A Milton J. Santibáñez por su sinceridad, amabilidad y calidez en los momentos en que más lo he necesitado. Tus palabras me han abierto los ojos y me han dado mucha claridad.

A Eumir Alejandro A. por enseñarme que lo más importante es disfrutar de esta vida y recordarme que pese a las dificultades e imperfecciones que tiene la vida bien vale la pena luchar y no rendirse nunca sólo para ver salir el sol de nuevo cada día.

A Anamallery De la Cruz por todos los momentos divertidos que hemos tenido y por el gusto de descubrir y aprender juntas todo lo que este mundo nos puede mostrar. Por la solidez de tu compañía, el apoyo y la complicidad mutua para atrevernos a conocernos a nosotras mismas.

A Christian Sánchez por su gran amistad y por compartir ese gusto en general por el conocimiento, por los ánimos

para seguir adelante y tu optimismo.

A Valente Vázquez, Miguel Ramos y Magdiel Juárez por los viajes que van desde estrellas y fogatas hasta momentos de diversión y bromas cuyos recuerdos quedan plasmados en fotografías y constantemente me hacen pensar en lo mucho que hemos disfrutado de todo este tiempo de amistad. Por la diversidad de pensamientos y personalidades que nos diferencia y al mismo tiempo nos une.

A mi profesora de ruso Iana Suchkova por abrirme las puertas y enseñarme el apasionante mundo del idioma ruso y su cultura del que cada día sigo enamorándome más y más.

Agradezco en gran manera a mi asesor de tesis, el Dr. Alejandro Crespo Sosa por el gran apoyo que me brindó a lo largo de este proyecto, por guiarme en esta tesis, por su dedicación y paciencia.

A Juan González y Román Velasquillo por su gran ayuda, confianza y apoyo dentro del laboratorio, de quienes he aprendido mucho experimentalmente.

A todos mis profesores que han contribuido con sus enseñanzas, dedicación y experiencia a lo largo de mi formación académica, en especial a la Dra. María de los Ángeles Ortiz Flores, al Dr. José Julio Emilio Herrera Velázquez y al Fís. Antonio González Guzmán.

A la UNAM por todo lo que me ha brindado como institución pública para mi aprendizaje y formación académica, sin ella no podría ser lo que soy ahora. Sé que tengo mucho que retribuirle y siempre estaré orgullosa de pertenecer a ella: mi segunda casa.

Quiero agradecer el apoyo del personal del acelerador Pelletron del Instituto de Física de la UNAM: Karim López Guzmán, Francisco Jaimes Beristain y Mauricio Escobar Reyes así como de Samuel Tehuacanero Cuapa por la preparación de las muestras de zafiro utilizadas para este trabajo.

La realización de este trabajo fue posible gracias al proyecto REF-PROY:CB-2012/178141 con Núm. de registro: 23961, de CONACYT.

Resumen

La nanociencia es un campo multidisciplinario mediante el cual se estudian las propiedades de la materia en estructuras pequeñas, del orden de nanómetros. Su importancia radica en que, a escala nanométrica, los materiales presentan propiedades diferentes a las que se tienen a escala macroscópica. Por tanto, su objetivo es manipular y controlar el comportamiento de la materia a esta escala para generar aplicaciones tecnológicas.

Mediante este trabajo se pretende estudiar la modificación del tamaño de nanopartículas de oro implantadas en zafiro sintético al irradiarse con láser de longitud de onda de 1,064 nm y 532 nm. El estudio de la modificación del tamaño de las nanopartículas de oro resulta importante ya que se obtendría un método alternativo para modificar las propiedades ópticas de las nanopartículas permitiendo su aplicación en dispositivos tecnológicos en el área de optoelectrónica que funcionen con señales de luz, capaces de almacenar y transmitir una mayor cantidad de información.

Las nanopartículas de oro para este trabajo se formaron en sustratos de zafiro sintético, monocristalino ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) debido a que se trata de un material dieléctrico, transparente en la región UV-Vis-NIR y principalmente porque su estructura cristalina y sus enlaces iónicos y covalentes entre el aluminio y el oxígeno hacen del zafiro un material resistente a fracturas y dislocaciones, proporcionándole una dureza de 2,000 Kg/mm. Estas características lo hacen particularmente interesante para ser usado como sustrato en la implantación y formación de nanopartículas metálicas de oro.

En este trabajo, lo primero que se hizo fue implantar iones de oro en tres muestras de zafiro sintético: A, B y C. La muestra A fue irradiada con láser de 1,064 nm con el objetivo de formar nanopartículas de oro debido al calor suministrado por la irradiación láser como un método alternativo al proceso de tratamiento térmico. Las otras dos muestras: B y C, fueron sometidas a un tratamiento térmico que permitió la formación de las nanopartículas. Tanto la muestra B como la C fueron irradiadas con láser de 532 nm cuyo objetivo principal fue la disminución del tamaño de las nanopartículas. En este proceso de irradiación láser, la parte central de esta tesis, se variaron parámetros como el número de pulsos del láser así como la energía y el área de irradiación sobre diferentes puntos de las muestras de zafiro sintético y que están relacionadas con la densidad de energía.

Las técnicas de absorción óptica y de microscopía de barrido electrónico permitieron caracterizar las nanopartículas, es decir, se determinó su presencia en las muestras, la profundidad a la que se encontraban en los sustratos así como el cálculo de la distribución de tamaños de las mismas. Mediante la técnica de retrodispersión de Rutherford se obtuvo la concentración de oro dentro de las muestras así como la profundidad a la que se encontraron las nanopartículas, lo que permitió comparar estos valores con los obtenidos mediante las imágenes de microscopía de barrido electrónico. La caracterización de las nanopartículas de oro a través de todas estas técnicas se realizaron antes y después del proceso de irradiación.

Debido a que la irradiación láser causó daños a las muestras de zafiro que afectaron a los resultados obtenidos para modificar el tamaño de las nanopartículas, se hizo un estudio de la superficie de los puntos irradiados en las muestras B y C mediante la técnica de microscopía de fuerza atómica. A través de las imágenes de fuerza atómica se midió la rugosidad en la superficie de irradiación de las muestras permitiendo caracterizar el daño por irradiación láser.

Este trabajo de tesis está dividido en cinco capítulos principales: en el primer capítulo se revisan conceptos básicos teóricos de interacción de iones con materiales como el factor cinemático y la sección eficaz de dispersión. Se revisan también conceptos relacionados con la implantación de iones como el poder de frenado nuclear, electrónico y el alcance así como la sección eficaz de frenado. La última sección de este capítulo explica los conceptos en los que se basa la técnica experimental de espectrometría de retrodispersión de Rutherford, la cual permite caracterizar a los materiales determinando su estructura y composición cuando se analiza la retrodispersión de un haz de iones que impacta sobre una muestra. En el capítulo dos se estudian los fenómenos de dispersión y absorción de la luz como resultado de la interacción con partículas inmersas en un medio homogéneo, se hace una descripción detallada de los campos electromagnéticos que interactúan con nanopartículas así como el comportamiento de los electrones de partículas inmersas en un medio dieléctrico. En el capítulo tres se presenta la ecuación de difusión del calor y se muestran las soluciones para el caso de un plano infinito y en el caso esférico, se estudia de manera teórica cómo se comporta y propaga el calor en un material irradiado con pulsos cortos de láser. El desarrollo del procedimiento experimental se presenta en el capítulo cuatro. En este capítulo se explica el funcionamiento de los equipos utilizados y la descripción de los arreglos experimentales así como los programas que se usaron para la captura y manipulación de los datos experimentales. Finalmente en el capítulo cinco, se presentan los resultados y la discusión de los mismos. Primeramente se muestran las condiciones iniciales de las muestras de zafiro sintético A, B y C antes de ser irradiadas. Posteriormente dentro del apartado de irradiación, se muestran los resultados para la muestra A y dos secciones más: en la primera sección se muestran los resultados después de irradiar la muestra B variando el número de pulsos y en la segunda sección se muestran los resultados después de variar el área de irradiación para las muestras B y C. En cada uno de estos apartados se presentan los valores de la absorción, la fluencia, el radio y la profundidad de las nanopartículas así como un apartado en el que se caracteriza el daño a la superficie del material por ablación láser. En la última sección de este capítulo se presentan las conclusiones de este trabajo.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	V
1. Interacción de iones con materiales	1
1.1. Retrodispersión de Rutherford	1
1.1.1. Factor cinemático de dispersión	1
1.1.2. Sección eficaz de dispersión	3
1.2. Poder de frenado	11
1.2.1. Poder de frenado nuclear	12
1.2.2. Poder de frenado electrónico	15
1.3. Alcance	17
1.4. Sección eficaz de frenado	20
1.4.1. Regla de Bragg	20
1.5. Técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford	21
1.5.1. Aproximación de la energía	22
1.5.2. Escala de profundidad	23
1.5.3. Altura del espectro	26
1.5.4. Muestras multicomponentes	28
2. Interacción de luz con nanopartículas	31
2.1. Teoría de Mie	31
2.1.1. Resolución de las ecuaciones de Maxwell para la teoría de Mie	31
2.2. Aproximación dipolar	36
2.3. Modelo de Drude	40
2.4. Sección eficaz de absorción, extinción y dispersión	43
2.4.1. Absorbancia	46
3. Interacción de pulsos cortos de láser con materia	48
3.1. Ecuación de difusión del calor	48

3.1.1.	Solución de la ecuación de difusión del calor para el plano infinito	49
3.1.2.	Solución de la ecuación de difusión del calor para el caso esférico	50
3.2.	Aplicación de la ecuación de difusión del calor a la interacción de pulsos cortos de láser con materia	51
4.	Procedimiento Experimental	52
4.1.	Implantación de iones	52
4.2.	Espectrometría de Retrodispersión de Rutherford	54
4.3.	Tratamiento Térmico	55
4.4.	Espectroscopía por extinción óptica	56
4.5.	Irradiación de pulsos de 6 nanosegundos de láser	57
4.6.	Microscopía de barrido electrónico	58
4.7.	Microscopía de Fuerza Atómica	60
5.	Resultados y discusión	62
5.1.	Implantación de iones de Au	62
5.1.1.	Estudio de la superficie en la muestra antes de irradiar con láser	66
5.2.	Irradiación	68
5.2.1.	Variación del número de pulsos	69
5.2.2.	Variación del área	73
5.2.3.	Variación de la densidad de energía	76
5.3.	Conclusiones	87
Referencias		87

Índice de tablas

5-1. Afluencias de las muestras A, B y C iniciales y su profundidad de implantación.	63
5-2. Radio de las nanopartículas de oro en las muestras B y C después del tratamiento térmico.	64
5-3. Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie de la muestra antes de implantar.	67
5-4. Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie del material después de implantar.	68
5-5. Variación del número de pulsos en el modo de energía $E01$, en un área de $3 \times 3 \text{ mm}^2$ en los puntos M18, M10 y M19 de la muestra B.	70
5-6. Afluencia de oro en los puntos de irradiación M18, M10 y M19 de la muestra B.	73
5-7. Radio de las nanopartículas de oro después de irradiar en modo de energía $E01$ a 30 pulsos, en distintos puntos con diferentes áreas en la muestra B y su densidad de energía.	73
5-8. Afluencia de la concentración de oro en tres puntos con diferentes áreas, en modo de energía $E01$, a 30 pulsos de la muestra B.	74
5-9. Radio de las nanopartículas de oro después de ser irradiadas, en diferentes puntos, variando el modo de energía en áreas de $4 \times 4 \text{ mm}^2$, en la muestra C.	76
5-10. Afluencia de la concentración de oro en seis puntos diferentes, cada uno con un área de $4 \times 4 \text{ mm}^2$ a diferentes modos de energía, a 30 pulsos, en la muestra B.	77
5-11. Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie del punto P5 irradiado a una energía $E23$ en un área 4×4 en la muestra C.	79
5-12. Rugosidad en la superficie de los puntos irradiados desde P1 hasta P6 en la muestra C.	80
5-13. Radio de las nanopartículas de oro después de irradiar, en diferentes puntos variando el modo de energía en áreas de $4 \times 6 \text{ mm}^2$ en la muestra C.	81
5-14. Afluencia de la concentración de oro en tres puntos diferentes, cada uno con un área de $4 \times 6 \text{ mm}^2$ a diferentes modos de energía, a 30 pulsos, en la muestra C.	83
5-15. Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie del punto P9 irradiado a una energía $E23$ en un área $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$ en la muestra C.	85
5-16. Rugosidad en la superficie de los puntos irradiados desde P7 hasta P9 en la muestra C.	85

Índice de figuras

1-1. Proyectil de energía E_0 que colisiona elásticamente con algún átomo de un blanco en reposo. . . .	1
1-2. Experimento de dispersión de un haz de partículas N_{inc} que incide sobre un material de grosor Δx	3
1-3. Diagrama de un proyectil que se dirige hacia un núcleo con un parámetro de impacto b y es desviado a un ángulo θ siguiendo una trayectoria hiperbólica.	4
1-4. Forma general del potencial de interacción $V(r)$ entre dos cuerpos en unidades atómicas u.a. . . .	6
1-5. Proyectil con parámetro de impacto nulo que se acerca a un núcleo en el origen.	8
1-6. Diagrama de la sección eficaz diferencial $dN(\theta)_{dis}$ donde el parámetro de impacto está entre b y $b + db$ y las partículas son dispersadas entre un ángulo θ y $\theta + d\theta$	9
1-7. Gráficas del comportamiento del inverso del cuadrado de la energía E_0 de un proyectil y de la sección eficaz al aumentar el ángulo de dispersión.	10
1-8. Proyectil que atraviesa un material de espesor Δx que, al interactuar con los átomos del material, pierde una energía ΔE	11
1-9. Colisión entre el proyectil y un núcleo del blanco visto desde el sistema de referencia de laboratorio y centro de masas.	12
1-10. Sección eficaz de frenado reducida nuclear $S_n(E^*)$ en función de la energía reducida E^*	14
1-11. Comparación del poder de frenado electrónico S_e y el poder de frenado nuclear S_n en función del alcance.	15
1-12. Poder de frenado electrónico como función de la energía.	16
1-13. Diagrama en el que se muestra el alcance proyectado R_p y el alcance transversal R_t de un proyectil que penetra un material.	17
1-14. Distribución del número de proyectiles implantados en un material, en experimentos ideal y real. . . .	18
1-15. Curvas que muestran el número de partículas en función de la distancia recorrida.	18
1-16. Distribución gaussiana de los proyectiles que penetran un material.	19
1-17. Diagrama de partículas que colisionan con los átomos de un material y salen retrodispersadas. . . .	21
1-18. Gráfica de $(\frac{dE}{dx})^{-1}$ en función de la energía E	22
1-19. Gráfica de la aproximación de energía de superficie.	23
1-20. Gráfica de la relación entre las energías media de salida y entrada con el recíproco de la pérdida de energía por unidad de longitud.	25

1-21. Espectro de retrodispersión de Rutherford para una muestra en donde la energía detectada en la superficie del material es kE_0	26
1-22. Diferencia de energías δE y $\delta E'$ de dos partículas retrodispersadas con una diferencia infinitesimal de profundidad.	28
1-23. Espectro de una muestra homogénea y compuesta de dos elementos A y B	30
2-1. Una onda plana polarizada en la dirección del eje X, se propaga en la dirección del eje Z hacia una esfera de radio a para producir dispersión.	34
2-2. Esfera dieléctrica inmersa en un medio homogéneo de permitividad ϵ_m a la que se le aplica un campo eléctrico uniforme \mathbf{E}_0	37
2-3. Extinción de un campo electromagnético incidente $(\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0)$ debido a una partícula esférica de radio a	44
3-1. Gráfica que muestra el comportamiento gaussiano de la temperatura para diferentes valores del argumento $\theta' = \alpha dt$	50
4-1. Sistema del acelerador del Pelletron [®] en el Instituto de Física de la UNAM.	53
4-2. Sistema de aceleración en dos etapas del Pelletron [®]	53
4-3. Cámara de análisis de retrodispersión de Rutherford y diagrama de iones de helio retrodispersados.	54
4-4. Arreglo experimental para la obtención de los espectros de absorción óptica.	56
4-5. Esquema de los componentes en el interior del espectrómetro.	57
4-6. Arreglo experimental del proceso de irradiación con el láser Nd:YAG.	58
4-7. Diagrama de los principales componentes del microscopio de barrido electrónico.	59
4-8. Diagrama del corte perpendicular a la implantación en uno de los sustratos de zafiro.	60
4-9. Diagrama del funcionamiento de un microscopio de fuerza atómica.	61
5-1. Espectros de retrodispersión de referencia para las muestras A, B y C.	63
5-2. Espectros de absorción después del proceso de implantación y tratamiento térmico para las muestras A, B y C.	64
5-3. Micrografías e histogramas de las muestras B y C antes de irradiar.	65
5-4. Imágenes de fuerza atómica de la superficie de la muestra de zafiro antes de implantar.	66
5-5. Imagen de la superficie de la muestra antes de la implantación vista de perfil y su diferencia de alturas.	67
5-6. Imágenes de fuerza atómica de la superficie de la muestra de zafiro después de implantar.	67
5-7. Imagen de la superficie de la muestra después de la implantación vista de perfil y su diferencia de alturas.	68
5-8. Comparación de la absorbancia antes y después de irradiar con 1,064 nm en la muestra A.	69

5-9. Diagramas de los puntos de irradiación con sus características de área, energía y pulsos de irradiación de las muestras B y C.	69
5-10. Disminución de la curva de plasmón de superficie y su radio debido a la variación de pulsos, en un área de $3 \times 3 \text{ mm}^2$ para los puntos M18, M10 y M19 en la muestra B.	70
5-11. Micrografías de barrido electrónico que muestran el daño causado por el láser en la muestra B e histograma.	71
5-12. Espectros de retrodispersión para los puntos de irradiación M18, M10 y M19 de la muestra B. . . .	72
5-13. Espectros de absorción a 30 pulsos, en modo de energía $E01$, en la muestra B en áreas de $2 \times 2 \text{ mm}^2$, $3 \times 3 \text{ mm}^2$ y $4 \times 4 \text{ mm}^2$ respectivamente.	74
5-14. Espectros de retrodispersión para las áreas $2 \times 2 \text{ mm}^2$, $3 \times 3 \text{ mm}^2$ y $4 \times 4 \text{ mm}^2$ en la muestra B. . . .	75
5-15. Disminución de los espectros de absorción y el radio de las nanopartículas a 30 pulsos, para diferentes modos de energía, en áreas de $4 \times 4 \text{ mm}^2$ en la muestra C.	77
5-16. Espectros de retrodispersión desde el punto P1 hasta el P6 de áreas de irradiación de $4 \times 4 \text{ mm}^2$ cada uno en la muestra C.	78
5-17. Imágenes de fuerza atómica de la superficie de irradiación del punto P5, de área $4 \times 4 \text{ mm}^2$, a modo de energía $E23$ y a 30 pulsos en la muestra C.	79
5-18. Imagen de la superficie irradiada vista de perfil del punto P5, irradiado a una energía $E23$, en un área $4 \times 4 \text{ mm}^2$ en la muestra C y su diferencia de alturas.	79
5-19. Gráfica de rugosidad de los puntos P1 hasta P6, con áreas de irradiación de $4 \times 4 \text{ mm}^2$ en la muestra C.	81
5-20. Disminución de los espectros de absorción y el radio de las nanopartículas a 30 pulsos, para diferentes modos de energía, en áreas de $4 \times 6 \text{ mm}^2$ en la muestra C.	82
5-21. Micrografía e histograma de la muestra C después de irradiar.	82
5-22. Espectros de retrodispersión desde el punto P7 hasta el P9 de áreas de irradiación de $4 \times 6 \text{ mm}^2$ cada uno en la muestra C.	83
5-23. Imágenes de fuerza atómica de la superficie de irradiación del punto P9, de área $4 \times 6 \text{ mm}^2$, a modo de energía $E01$ y a 30 pulsos en la muestra C.	84
5-24. Imagen de la superficie irradiada vista de perfil del punto P9, irradiado a una energía $E23$, en un área $4 \times 6 \text{ mm}^2$ en la muestra C.	84
5-25. Gráfica de rugosidad de los puntos P7 hasta P9, con áreas de irradiación de $4 \times 6 \text{ mm}^2$ en la muestra C.	86

1. Interacción de iones con materiales

1.1. Retrodispersión de Rutherford

Cuando un haz de partículas incide en un material, los proyectiles experimentan una serie de colisiones con los átomos que constituyen el material dando lugar a diferentes procesos entre los que se encuentra la dispersión de los proyectiles. La dispersión de Rutherford ocurre debido a la interacción de las fuerzas eléctricas entre el proyectil y los átomos del material considerando el potencial de Coulomb. En este proceso de dispersión la energía que adquiere el proyectil después de la colisión, se describe mediante el factor cinemático de dispersión y como se verá en la siguiente sección, proporciona información sobre las masas de los elementos que componen el material del blanco [1].

1.1.1. Factor cinemático de dispersión

En interacción de proyectiles con materiales un haz de partículas incide sobre un material denominado blanco. Al penetrar en el material, los proyectiles del haz colisionan con los átomos del blanco transfiriéndoles energía.

Sea un proyectil de masa m_1 con velocidad v y energía E_0 iniciales que penetra y colisiona con un átomo de masa m_2 dentro de un material. Se considera que la energía inicial del proyectil E_0 es mucho mayor a la energía de ligadura de los átomos del material y que no ocurren reacciones nucleares, es decir, que el proyectil y el núcleo atómico del blanco no se transforman en otros núcleos después de la colisión [1].

En una colisión elástica en la que la masa del proyectil es menor a la masa del átomo del blanco $m_1 < m_2$, después de la colisión, el átomo del material sale dispersado a un ángulo φ_r llamado ángulo de retroceso adquiriendo una nueva velocidad denotada como v_2 mientras que el proyectil alcanza una velocidad v_1 a un ángulo θ conocido como ángulo de dispersión, tal como se muestra en la Fig. 1-1.

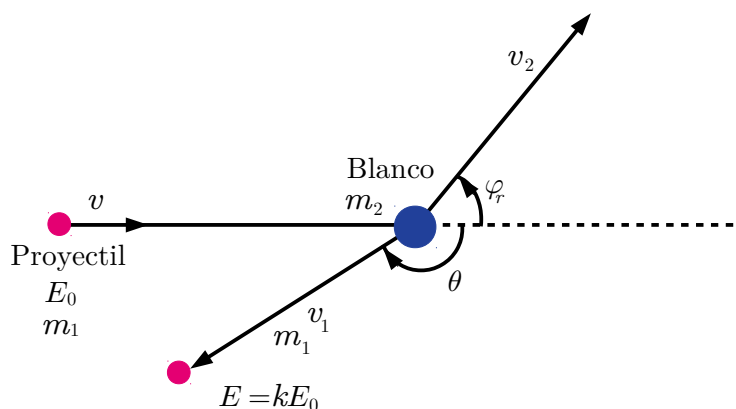


Fig. 1-1: Un proyectil de energía E_0 colisiona elásticamente con algún átomo de un blanco que se encuentra en reposo.

Tanto la energía como el momento lineal antes y después de la colisión se conservan [1]. En el sistema de laboratorio, el proyectil va a una velocidad v_0 mientras que el átomo del blanco se encuentra en reposo y por lo tanto, $v_2 = 0$ antes de colisionar. Por conservación de la energía se tiene:

$$\frac{1}{2}m_1v^2 = \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2. \quad (1-1)$$

Por conservación de momento lineal, las componentes en el eje horizontal y vertical, respectivamente, son:

$$m_1v = m_1v_1 \cos \theta + m_2v_2 \cos \varphi_r, \quad (1-2)$$

y

$$0 = -m_1v_1 \sin \theta + m_2v_2 \sin \varphi_r. \quad (1-3)$$

Al despejar $\sin \varphi_r$ de la Ec. (1-3) y elevar al cuadrado, se llega a:

$$\sin^2 \varphi_r = \frac{m_1^2 v_1^2 \sin^2 \theta}{m_2^2 v_2^2}. \quad (1-4)$$

Si se sustituye la Ec. (1-4) en la identidad trigonométrica $\cos^2 \varphi_r = 1 - \sin^2 \varphi_r$, se llega a:

$$\cos \varphi_r = \frac{(m_2^2 v_2^2 - m_1^2 v_1^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}}{m_2 v_2}. \quad (1-5)$$

Sustituyendo la Ec. (1-5) en la Ec. (1-2), se obtiene:

$$m_2^2 v_2^2 - m_1^2 v_1^2 \sin^2 \theta - m_1^2 v^2 + 2m_1^2 v v_1 \cos \theta - m_1^2 v_1^2 \cos^2 \theta = 0. \quad (1-6)$$

Por otro lado, al despejar el término v_2^2 de la Ec. (1-1), sustituirla en la Ec. (1-6), se llega a la expresión de la forma:

$$(m_2 m_1 + m_1^2) v_1^2 - (2m_1^2 v \cos \theta) v_1 + (m_1^2 v^2 - m_2 m_1 v^2), \quad (1-7)$$

con solución:

$$v_1 = \frac{2m_1^2 v \cos \theta \pm \sqrt{4m_1 v^2 \cos^2 \theta - (4m_2 m_1 + 4m_1^2)(m_1^2 v^2 - m_2 m_1 v^2)}}{2(m_2 m_1 + m_1^2)}.$$

Al desarrollar los términos dentro de la raíz y usando la identidad trigonométrica $\cos^2 \varphi_r = 1 - \sin^2 \varphi_r$ y multiplicando tanto en el denominador como en el numerador por $\frac{1}{m_1}$, se obtiene:

$$m_1 v_1^2 = m_1 v^2 \left(\frac{m_1 \cos \theta \pm \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta}}{(m_2 + m_1)} \right)^2.$$

Se define entonces el factor cinemático como [1]:

$$k = \frac{E}{E_0} = \frac{m_1 v_1^2}{m_1 v^2} = \left(\frac{m_1 \cos \theta \pm \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta}}{(m_2 + m_1)} \right)^2. \quad (1-8)$$

Como la energía del proyectil E_0 siempre es mayor a la energía E que adquiere después de la colisión, el factor cinemático, de acuerdo con la expresión anterior, es menor a uno y es una cantidad escalar que no tiene unidades [1].

De manera similar, también es posible calcular el factor cinemático k' para el átomo que retrocede después de la colisión. Al despejar el término $\sin^2 \theta$ de la Ec. (1-4) y el término v_1^2 de la Ec. (1-1), se llega a la ecuación de segundo grado:

$$(m_2 + m_1 m_2) v_2^2 - (2m_1 m_2 v_0 \cos \varphi_r) v_2 = 0. \quad (1-9)$$

Al resolver la Ec. (1-9) y multiplicar todo por m_2 , se llega a:

$$m_2 v_2^2 = m_1 v^2 \left(\frac{4m_1 m_2 \cos^2 \varphi_r}{(m_1 + m_2)^2} \right),$$

de donde se obtiene el factor cinemático k' expresado como [1]:

$$k' = \frac{E_2}{E_0} = \frac{m_2 v_2^2}{m_1 v^2} = \frac{4m_1 m_2 \cos^2 \varphi_r}{(m_1 + m_2)^2}. \quad (1-10)$$

La energía para el átomo que retrocede está dada por $E_2 = k' E_0$ y es la energía transferida al átomo después de la colisión, si $\varphi_r = \frac{\pi}{2}$, la energía para el átomo que retrocede será cero y si $\varphi_r = 0$, entonces la energía para el átomo que retrocede será máxima, de acuerdo con la Ec. (1-10).

Por conservación de energía, se tiene que:

$$E_2 = E_0 - E.$$

Al dividir todo por E_0 , se encuentra que los factores cinemáticos están relacionados entre sí de la forma:

$$k' = 1 - k. \quad (1-11)$$

Los factores cinemáticos k y k' dados por las Ecs. (1-8) y (1-10) dependen del cociente entre las masas y de los ángulos de dispersión y retroceso respectivamente, en otras palabras, dependen del factor geométrico [1]. De donde se deduce que las Ecs. (1-8) y (1-10) contienen la información esencial que permite diferenciar las masas de los distintos elementos que componen el material [1].

1.1.2. Sección eficaz de dispersión

En un experimento de dispersión de partículas como el que se muestra en la Fig. 1-2, se tiene un número de partículas N_{inc} que inciden sobre un material de grosor Δx y con una densidad de área de centros dispersores N_a . Un detector que abarca un ángulo sólido Ω se encuentra a una distancia d de la muestra. Cuando un número de partículas N_{inc} incidan sobre el material, un cierto número de éstas, denotado como $N_{dis}(\theta)$, serán dispersadas hacia el detector, a un ángulo de dispersión θ con respecto a la dirección del haz incidente.

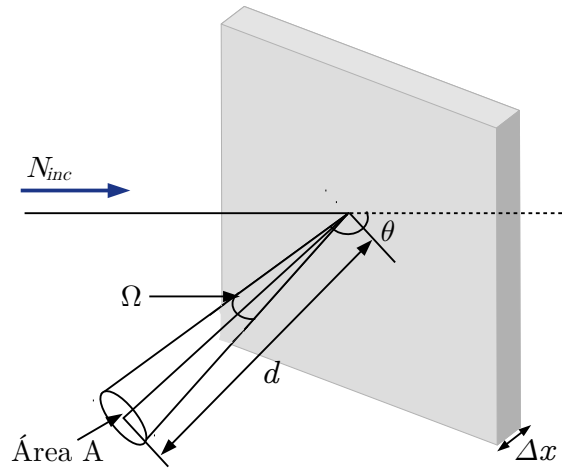


Fig. 1-2: Experimento de dispersión de un haz de partículas N_{inc} que incide sobre un material de grosor Δx , algunas de ellas dispersadas y detectadas a un ángulo θ .

La relación $N_{dis}(\theta)/N_{inc}$ es proporcional al ángulo sólido, a la cantidad de partículas incidentes N_{inc} , a la densidad de centros dispersores por área N_a en el material y a una cantidad que depende del ángulo θ denotada como σ [2]. Esta cantidad representa la probabilidad de que cada centro dispersor produzca una dispersión en la dirección θ y se llama sección eficaz diferencial, en donde [2]:

$$\frac{N_{dis}(\theta)}{N_{inc}} = \sigma N_a \Omega. \quad (1-12)$$

El ángulo sólido es medido en stereoradianes, N_a tiene unidades de centros dispersores/cm² y la sección eficaz σ tiene unidades de cm².

La sección eficaz σ es una característica propia de cada tipo de proceso o centro dispersor, depende del tipo y la energía de los proyectiles (pero no de la corriente o densidad del haz) así como del sistema de referencia que se utilice, es decir, que para cada proceso distinto ya sea que se trate de una dispersión elástica, inelástica, reacción nuclear, ionización, o cualquier otra, se define una sección diferencial en particular [2]. La sección eficaz diferencial depende del ángulo θ al que se encuentra el detector, esto significa que si el detector se colocara a otro ángulo, la probabilidad de dispersión sería diferente.

La sección eficaz total es aquella que se da en todas las direcciones posibles para las partículas dispersadas y que corresponde a un ángulo sólido 4π , lo que significa que se integra sobre todos los ángulos posibles de θ , esto es [2]:

$$\sigma_T = \int_{4\pi} \sigma d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma \sin \theta d\theta, \tag{1-13}$$

donde el factor 2π es el resultado de integrar sobre el ángulo azimutal en coordenadas esféricas.

Ernest Rutherford encontró una fórmula para la dispersión de partículas cargadas [3]. Si se considera un proyectil que colisiona con un núcleo atómico de algún material, como la mayor parte de la masa del átomo del material se encuentra en el núcleo, la colisión se considera tomando en cuenta solamente el núcleo del átomo y no el átomo en sí. Se asume la masa del núcleo del material como mucho mayor a la del proyectil, pues de esta forma no existe un retroceso importante del núcleo durante la colisión.

La colisión es de tipo elástica, por lo que tanto el proyectil como el núcleo son los mismos antes y después de la colisión, ambos se consideran esféricos y de carga positiva.

Si el número atómico del proyectil es Z_1 y el del núcleo es Z_2 , e la carga del electrón y la distancia de separación entre sus centros es r , entonces el potencial coulombiano está dado por [2]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \tag{1-14}$$

De acuerdo con la Fig. 1-3, entre menor sea la distancia b , mayor es el ángulo de dispersión θ [2].

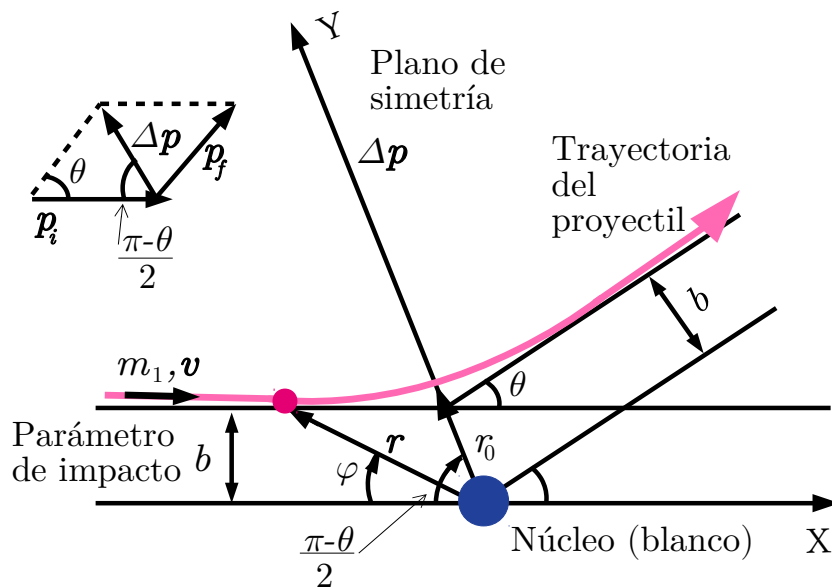


Fig. 1-3: Un proyectil se dirige hacia un núcleo con un parámetro de impacto b . Por repulsión coulombiana el proyectil es desviado a un ángulo θ siguiendo una trayectoria hiperbólica [2].

La distancia b se llama parámetro de impacto y se define como la distancia mínima perpendicular de la trayectoria del proyectil hacia el centro del núcleo como si el proyectil no fuera desviado [2]. Si el proyectil y el núcleo tuvieran la misma carga, entonces, por repulsión coulombiana, el proyectil se desviaría siguiendo una trayectoria hiperbólica.

En general, el momento angular \mathbf{L} para el proyectil de masa m_1 , se define como [2]:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m_1 \mathbf{v} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (1-15)$$

donde \mathbf{r} es el vector de posición de la partícula, \mathbf{v} su velocidad inicial y \mathbf{p} es el momento lineal.

Por otro lado, la fuerza \mathbf{F} coulombiana que actúa sobre el proyectil es una fuerza central, por lo que no depende de ningún ángulo en coordenadas esféricas. Los vectores \mathbf{F} y \mathbf{r} son paralelos y, en consecuencia, la torca $\mathbf{r} \times \mathbf{F}$ es igual a cero, lo que implica que el momento angular \mathbf{L} no cambia y permanece constante durante el movimiento del proyectil, es decir [2]:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{r} \times m_1 \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{0}, \quad (1-16)$$

si la velocidad \mathbf{v} de la Ec. (1-16) se escribe en coordenadas polares como:

$$\mathbf{v} = \frac{dr}{dt} \hat{\mathbf{r}} + r \frac{d\varphi}{dt} \hat{\boldsymbol{\varphi}}, \quad (1-17)$$

de donde se obtiene:

$$v^2 = \sqrt{\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \left(r \frac{d\varphi}{dt}\right)^2}. \quad (1-18)$$

El momento angular \mathbf{L} del proyectil es perpendicular al plano de movimiento y su magnitud es $L = m_1 v b$ [2]. Al utilizar coordenadas cilíndricas, para la magnitud del momento angular L y considerando la Ec. (1-17), se tiene:

$$L = |\mathbf{r} \times m_1 \mathbf{v}| = \left| \mathbf{r} \times m_1 \left(\frac{dr}{dt} \hat{\mathbf{r}} + r \frac{d\varphi}{dt} \hat{\boldsymbol{\varphi}} \right) \right| = m_1 r^2 \frac{d\varphi}{dt}, \quad (1-19)$$

por lo que de la Ec. (1-19) y considerando que $L = m_1 v b$, se llega a:

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{m_1 v b}{m_1 r^2} = \frac{L}{m_1 r^2}. \quad (1-20)$$

Si la energía del proyectil se considera como:

$$E_0 = \frac{1}{2} m_1 v^2 + V(r), \quad (1-21)$$

al sustituir la Ec. (1-18) en la Ec. (1-21) y despejar el término $\frac{dr}{dt}$, se llega a [2]:

$$\frac{dr}{dt} = \pm \left[\frac{2}{m_1} \left(E_0 - V(r) - \frac{L^2}{2m_1 r^2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1-22)$$

El término $\frac{L^2}{2m_1 r^2}$ se refiere a la barrera centrífuga [2], para $L \neq 0$, la barrera centrífuga puede considerarse como una contribución repulsiva sobre un potencial efectivo V_{ef} , es decir [2]:

$$V_{ef}(r) = V(r) + \frac{L^2}{2m_1 r^2}. \quad (1-23)$$

Tanto la raíz positiva como la negativa en la Ec. (1-22) son válidas pero se elige la raíz negativa porque se considera la coordenada radial del proyectil como decreciente con el tiempo hasta el punto de máximo acercamiento con el núcleo del blanco [2]. Al factorizar el término de barrera centrífuga $\frac{L^2}{2m_1 r^2}$ de la Ec. (1-22), se llega a:

$$\frac{dr}{dt} = - \left(\frac{2}{m_1} \frac{L^2}{2m_1 r^2} \left[\frac{2m_1 E_0 r^2}{L^2} \left(1 - \frac{V(r)}{E_0} \right) - 1 \right] \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1-24)$$

De la energía cinética del proyectil, se tiene que $v = \pm\sqrt{\frac{2E_0}{m}}$ y considerando que $L = m_1vb$, se obtiene:

$$\frac{1}{b^2} = \frac{2m_1E_0}{L^2}, \quad (1-25)$$

por lo que al sustituir la Ec. (1-25) en la Ec. (1-24) y simplificar los términos, se llega a [2]:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{-L}{m_1rb} \left[r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E_0} \right) - b^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1-26)$$

sustituyendo la Ec. (1-20) en la Ec. (1-26), se obtiene:

$$\int_0^{\varphi_0} d\varphi = - \int_{\infty}^{r_0} \frac{bdr}{r \left[r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E_0} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}, \quad (1-27)$$

donde φ_0 es el ángulo que corresponde al punto de máximo acercamiento r_0 , por lo que se tiene:

$$\varphi_0 = b \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r \left[r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E_0} \right) \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (1-28)$$

A partir de la Ec. (1-28) y considerando que $\varphi_0 = \frac{\pi-\theta}{2}$, de acuerdo con la Fig. 1-3, se llega a [2]:

$$\theta = \pi - 2\varphi_0 = \pi - 2b \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r \left[r^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E_0} \right) - b^2 \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (1-29)$$

La Ec. (1-29) es conocida como la integral de dispersión y es una función del potencial de interacción $V(r)$. Es posible resolverla si se conoce el potencial [2], su forma general se muestra en la Fig. 1-4.

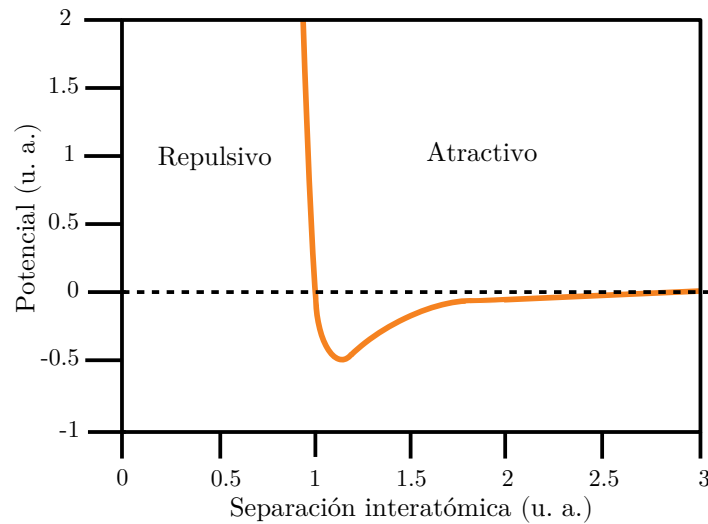


Fig. 1-4: Forma general del potencial de interacción $V(r)$ entre dos cuerpos en unidades atómicas u.a.

Para resolver la Ec. (1-29) para el caso en que $V(r)$ es el potencial de Coulomb, dado por la Ec. (1-14), se define una nueva variable χ como [2]:

$$\chi = \frac{1}{r}, \quad (1-30)$$

donde $d\chi = -\frac{dr}{r^2}$, por lo que usando nuevamente la Ec. (1-30), se tiene:

$$dr = -\frac{d\chi}{\chi^2}. \quad (1-31)$$

En términos de la nueva variable χ y sustituyendo el potencial de Coulomb, Ec. (1-14), en la Ec. (1-29), se obtiene:

$$\theta = \pi - 2b \int_{\chi_0}^0 \left(-\frac{d\chi}{\chi^2} \right) \frac{\chi}{\left[\frac{1}{\chi^2} \left(1 - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E_0} \chi \right) - b^2 \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (1-32)$$

Al reacomodar los términos dentro de la raíz en la Ec. (1-32), se llega a:

$$\theta = \pi + 2b \int_{\chi_0}^0 \frac{d\chi}{\left[1 - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E_0} \chi - b^2 \chi^2 \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (1-33)$$

La integral de la Ec. (1-33) se puede resolver mediante tablas de integrales, donde [2]:

$$\int \frac{dx}{\sqrt{\alpha + \beta x + \gamma x^2}} = \frac{1}{\sqrt{-\gamma}} \cos^{-1} \left(\frac{-\beta + 2\gamma x}{\sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}} \right), \quad (1-34)$$

por lo que para la integral de la Ec. (1-33), se tiene [2]:

$$\theta = \pi + 2 \cos^{-1} \left[\frac{1 + \frac{2b^2 4\pi\epsilon_0 E_0}{Z_1 Z_2 e^2} \chi}{\sqrt{1 + 4b^2 \left(\frac{4\pi\epsilon_0 E_0}{Z_1 Z_2 e^2} \right)^2}} \right] \Bigg|_{\chi_0}^0. \quad (1-35)$$

Al evaluar la Ec. (1-35) en $\chi = 0$ y $\chi = \chi_0$, se obtiene:

$$\theta = \pi + 2 \cos^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + 4b^2 \left(\frac{4\pi\epsilon_0 E_0}{Z_1 Z_2 e^2} \right)^2}} \right]. \quad (1-36)$$

Si se despeja \cos^{-1} de la Ec. (1-36), se eleva al cuadrado y se considera que $\cos^2 \left(\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{2} \right) = \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)$, se llega a:

$$\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{1 + 4b^2 \left(\frac{4\pi\epsilon_0 E_0}{Z_1 Z_2 e^2} \right)^2}, \quad (1-37)$$

considerando que $\sin \beta = \frac{1}{\csc \beta}$ y la relación $\csc^2 \beta - \cot^2 \beta = 1$ en la Ec. (1-37), se obtiene:

$$\cot \frac{\theta}{2} = \frac{4\pi\epsilon_0 (2E_0)}{Z_1 Z_2 e^2} b, \quad (1-38)$$

por lo que el parámetro de impacto b es [2]:

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2E_0)} \cot \frac{\theta}{2}. \quad (1-39)$$

A medida que el proyectil se acerca al núcleo del átomo desde el infinito, su velocidad disminuye (suponiendo que el potencial es repulsivo) hasta el punto de máximo acercamiento, esto es cuando $r = r_0$, más allá de este punto, la velocidad del proyectil aumenta nuevamente, en consecuencia, tanto la velocidad radial como la absoluta alcanzan su mínimo cuando $r = r_0$, es decir [2]:

$$\left. \frac{dr}{dt} \right|_{r=r_0} = 0. \quad (1-40)$$

Si se sustituye el potencial coulombiano, Ec. (1-14), en la Ec. (1-26) y considerando la Ec. (1-40), se obtiene [2]:

$$r_0^2 - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E_0} r_0 - b^2 = 0, \quad (1-41)$$

la Ec. (1-41) es una ecuación de segundo grado, cuya solución es:

$$r_0 = \frac{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E_0} \pm \sqrt{\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E_0}\right)^2 + 4b^2}}{2}. \quad (1-42)$$

Si el parámetro de impacto tuviera un valor igual a cero, entonces el proyectil se acercaría al núcleo con una velocidad v hasta detenerse a la distancia de máximo acercamiento $r = r_0$ [2]. En este punto toda la energía cinética se transformaría en energía potencial mecánica y por repulsión coulombiana, el proyectil retrocedería con una velocidad v en dirección contraria a su velocidad inicial, tal como se muestra en la Fig. 1-5.

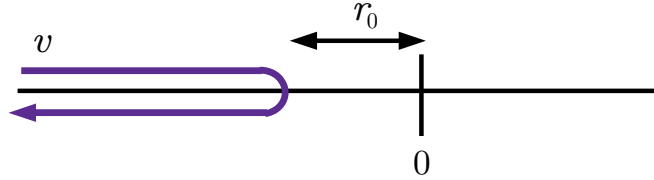


Fig. 1-5: Un proyectil con parámetro de impacto nulo se acerca a un núcleo en el origen 0 llevando una velocidad v hasta detenerse a cierta distancia r_0 transformando su energía cinética en potencial. Después, por repulsión coulombiana, el proyectil retrocede con velocidad v en dirección contraria a su velocidad inicial [2].

Por lo que al hacer $b = 0$ en la Ec. (1-42) o igualando la energía cinética $E_0 = \frac{1}{2}m_1v^2$ con la energía potencial dada por la Ec. (1-14), se obtiene [2]:

$$r_0 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E_0}, \quad (1-43)$$

en consecuencia, al sustituir la Ec. (1-43) en la Ec. (1-39), se obtiene una relación entre el parámetro de impacto b y la distancia de máximo acercamiento r_0 , es decir:

$$b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2E_0)} \cot \frac{\theta}{2} = \frac{r_0}{2} \cot \frac{\theta}{2}. \quad (1-44)$$

De la Ec. (1-44) se puede observar que el parámetro de impacto b disminuye cuando θ aumenta, dicho de otra forma, para un ángulo grande de dispersión, el parámetro de impacto debe ser menor que $\cot \frac{\theta}{2}$ [2].

El proyectil debe pasar por un disco de radio centrado en el centro del núcleo dispersor que es perpendicular a la dirección de la velocidad de la partícula incidente [2]. El área σ_t se llama sección eficaz transversal y representa el área del núcleo para dispersar al proyectil un ángulo mayor a θ . Esta área es el área de la circunferencia con radio igual al parámetro de impacto b , de forma que [2]:

$$\sigma_t = \pi b^2 = \pi \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2E_0)} \right)^2 \cot^2 \frac{\theta}{2}. \quad (1-45)$$

Considerando que el número de centros dispersores por unidad de área en el material es N_a , entonces un haz de partículas que incidan sobre el material, en un área A encontrará $N_a A$ centros dispersores.

La sección eficaz para producir dispersiones con ángulos θ o mayores es igual al número de centros dispersores por unidad de área, por la sección eficaz transversal de cada centro dispersor, esto es $N_a A \sigma_t$.

El número de partículas $N(\theta)_{dis}$ que son dispersadas a un ángulo θ o mayor a éste respecto de un número de partículas N_{inc} por unidad de área A , y considerando la Ec. (1-45), es:

$$N_{dis}(\theta) = \frac{N_{inc} N_a A \sigma_t}{A} = N_{inc} N_a \pi b^2, \quad (1-46)$$

por lo tanto [4]:

$$N(\theta)_{dis} = N_{inc} N_a \pi \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2E_0)} \right)^2 \cot^2 \frac{\theta}{2}. \quad (1-47)$$

En los experimentos se miden partículas dispersadas entre θ y $\theta + d\theta$, por lo que es necesario encontrar una expresión para la sección eficaz diferencial [2]. De la Ec. (1-47), se tiene:

$$dN(\theta)_{dis} = -N_{inc} N_a \pi \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2E_0)} \right)^2 \cot \frac{\theta}{2} \csc^2 \frac{\theta}{2} d\theta. \quad (1-48)$$

Geoméricamente, si se tiene que r es el radio de una esfera y $r \sin \theta$ es el radio de la circunferencia, tal como se muestra en la Fig. 1-6, entonces la circunferencia del anillo se calcula como la integral del radio de la circunferencia sobre el ángulo azimutal ϕ , en coordenadas esféricas, esto es:

$$\int_0^{2\pi} r \sin \theta d\phi = 2\pi r \sin \theta.$$

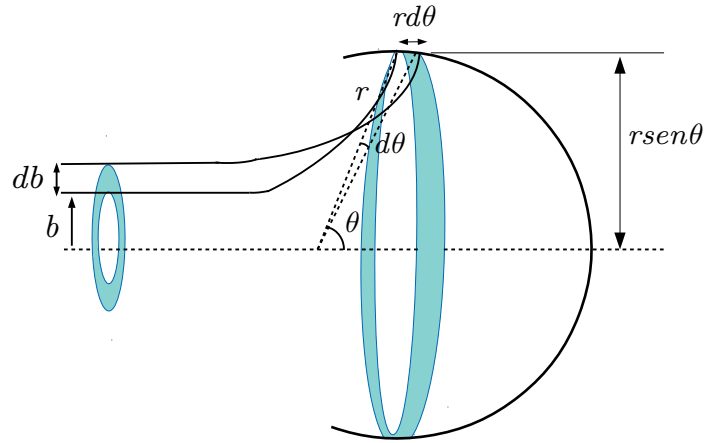


Fig. 1-6: Para la sección eficaz diferencial $dN(\theta)_{dis}$ el parámetro de impacto está entre b y $b + db$ y las partículas serán dispersadas entre un ángulo θ y $\theta + d\theta$, por lo que sus trayectorias estarán comprendidas en un anillo de radio $r \sin \theta$ y ancho $r d\theta$ [2].

Por lo que el elemento diferencial de superficie es $ds = (2\pi r \sin \theta)(r d\theta) = 2\pi r^2 \sin \theta d\theta$ y en consecuencia, para la diferencial del ángulo sólido $d\Omega$, se tiene [2]:

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta. \quad (1-49)$$

Al usar la identidad $\sin 2\beta = 2 \sin \beta \cos \beta$ en la Ec. (1-49), se llega a:

$$d\Omega = 4\pi \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta. \quad (1-50)$$

Para N_{inc} partículas que incidan en el material, el número de partículas dispersadas entre θ y $\theta + d\theta$, de acuerdo con las Ecs. (1-48) y (1-50), es [2]:

$$N(\theta)_{dis} = \frac{|dN(\theta)_{dis}|}{d\Omega} = N_{inc} N_a \pi \left(\frac{\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 (2E_0)} \right)^2 \cot \frac{\theta}{2} \csc^2 \frac{\theta}{2} d\theta}{4\pi \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta} \right). \quad (1-51)$$

Simplificando los términos se obtiene que el número de partículas dispersadas a un ángulo θ es:

$$N(\theta)_{dis} = N_{inc} N_a \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 4E_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1-52)$$

De esta manera se obtiene la sección eficaz de dispersión que se conoce como la ecuación de dispersión de Rutherford [2]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N_a} \left(\frac{N(\theta)_{dis}}{N_{inc}} \right) \frac{1}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 4E_0} \right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (1-53)$$

De la Ec. (1-53) se puede observar que la sección eficaz diferencial es proporcional al cuadrado de los números atómicos del proyectil, del núcleo del blanco y de la carga [4]. Esto significa que si el proyectil o el núcleo del blanco fueran de carga negativa, la fuerza sería de atracción y la trayectoria del proyectil sería diferente, sin embargo, la sección eficaz seguiría siendo la misma pues en la Ec. (1-53) el valor de la carga está al cuadrado.

Por otra parte, la sección eficaz diferencial es inversamente proporcional al cuadrado de la energía cinética del proyectil. Entre mayor sea la energía cinética, menor será la sección eficaz de dispersión [2]. El comportamiento del inverso del cuadrado de la energía E_0 se observa en la Fig. 1-7(a).

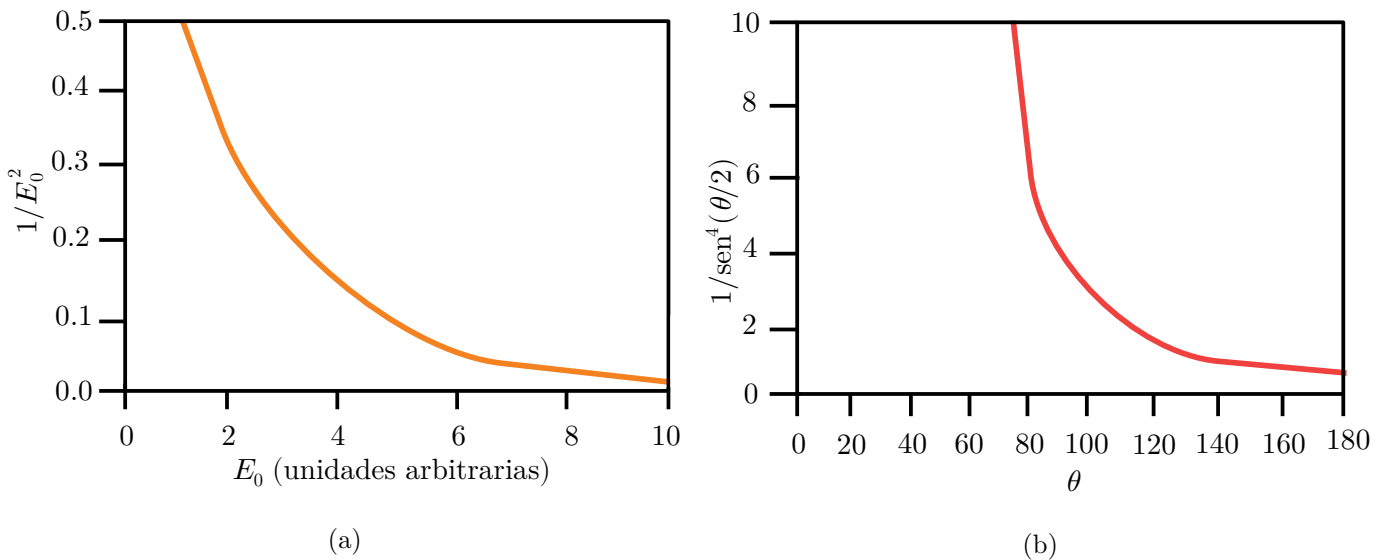


Fig. 1-7: (a) Gráfica del comportamiento del inverso del cuadrado de la energía E_0 del proyectil; (b) Al aumentar el ángulo de dispersión θ , el término $\frac{1}{\text{sen}^4 \frac{\theta}{2}}$ disminuye y por lo tanto también la sección eficaz alcanzando su valor mínimo cuando $\theta = 180^\circ$.

En la Fig. 1-7(b) se observa que la sección eficaz de la Ec. (1-53) es inversamente proporcional a la cuarta potencia del seno de la mitad del ángulo de dispersión [4]. Al aumentar el ángulo de dispersión θ , el factor $\frac{1}{\text{sen}^4 \frac{\theta}{2}}$ disminuye y por lo tanto la sección eficaz también disminuye, su valor es mínimo cuando $\theta = 180^\circ$.

La ecuación de dispersión de Rutherford presenta limitaciones: cuando la energía de bombardeo es mayor a la energía de la barrera coulombiana, la fuerza sobre el proyectil ya no es solamente coulombiana y aparecen fuerzas nucleares, de manera que se requiere considerar un tratamiento cuántico en donde ya no es posible usar la fórmula de dispersión de Rutherford clásica [5].

Si un número de proyectiles pasan por un anillo con parámetro de impacto entre b y $b + db$ entonces serán dispersados en un ángulo entre θ y $\theta + d\theta$ a partir de eso se puede encontrar otra forma de obtener la sección eficaz diferencial en términos del parámetro de impacto y del ángulo de dispersión, de forma que [2]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\text{sen} \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|. \quad (1-54)$$

Otra limitación de la fórmula de Rutherford se puede ver en la Ec. (1-54) en la que, para ángulos de dispersión pequeños, el parámetro de impacto se vuelve más grande. Esto puede traer como consecuencia que los electrones de la capa k puedan apantallar, aún parcialmente, al potencial del núcleo por lo que el potencial dejaría de ser coulombiano y la sección eficaz tendría un comportamiento diferente [5].

La Ec. (1-53) de dispersión de Rutherford deducida aquí está dada en el sistema de centro de masas, sin embargo, con ayuda del factor cinemático de la Ec. (1-8) de la subsección 1.1.1 es posible expresarla en el sistema de laboratorio [2]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 4E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2 \frac{[m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta}]^2}{m_2 (m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}}. \quad (1-55)$$

Para obtener la sección eficaz sobre todos los ángulos, entonces se tendría que integrar sobre el ángulo sólido $d\Omega$, esto es [2]:

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right), \quad (1-56)$$

si el ángulo sólido Ω del detector es suficientemente pequeño, entonces:

$$\sigma = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 4E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2, \quad (1-57)$$

que coincide con la Ec. (1-53) de Rutherford dada en el centro de masas [2].

1.2. Poder de frenado

Un proyectil que atraviesa un medio material interacciona con los átomos de éste. Considerando que el ángulo de dispersión es grande, la probabilidad de que el proyectil salga retrodispersado es baja [1]. Cuando el proyectil colisiona con los átomos del material les transfiere parte de su energía [1]. Esto ocurre principalmente en procesos de ionización y excitación, de manera que el proyectil va perdiendo energía en forma casi continua a lo largo de su trayectoria dentro del material.

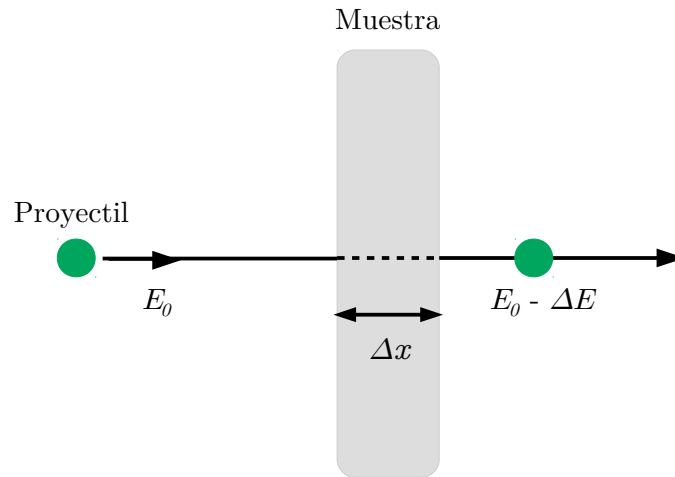


Fig. 1-8: Un proyectil atraviesa un material de espesor Δx , al interactuar con los átomos del material pierde una energía ΔE .

A partir de la interacción de partículas con materia es posible determinar la cantidad de energía que pierde el proyectil. La cantidad de energía cinética que va perdiendo a lo largo de su trayectoria dentro del material depende en gran medida del tipo de proyectil del que se trate, de la densidad y composición del material en el que incide, así como de la velocidad o de la energía del proyectil [1]. Para caracterizar la interacción se suele usar un parámetro denominado poder de frenado S que se define como la pérdida de energía de un proyectil por unidad de longitud [1]:

$$S = -\frac{\Delta E}{\Delta x}. \quad (1-58)$$

Considerando un proyectil que incide con energía E_0 que atraviesa un material cuyo espesor es Δx y suponiendo que su trayectoria es rectilínea, entonces el proyectil pierde una energía ΔE , como se muestra en la Fig. 1-8

En el límite cuando $\Delta x \rightarrow 0$ para un proyectil específico a cierta energía incidente, el poder de frenado se expresa como [1]:

$$S = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} -\frac{\Delta E}{\Delta x} = -\frac{dE}{dx}(E). \quad (1-59)$$

El poder de frenado tiene unidades de energía por unidad de longitud, que el SI corresponde a [J/m], no obstante, las unidades más comunes que se suelen utilizar son [MeV/cm] [1].

1.2.1. Poder de frenado nuclear

Cuando un proyectil penetra en un material y se mueve a través de este, el proyectil pierde energía debido a la interacción con los núcleos de los átomos del material [6].

En una colisión entre el proyectil y el núcleo de uno de los átomos del material, tal y como se muestra en la Fig. 1-9(a), el proyectil tiene una masa comparable al núcleo de un átomo del material utilizado como blanco, entonces el proyectil será desviado de su trayectoria original con un ángulo θ . Durante la colisión el proyectil le transferirá una energía ΔE al núcleo del blanco haciéndolo retroceder con un ángulo φ_r , las masas m_1 y m_2 corresponden al proyectil y al núcleo, respectivamente. El resultado de este proceso es que los átomos del material podrían ser desplazados de sus posiciones originales teniendo como consecuencia daños estructurales en el material [6].

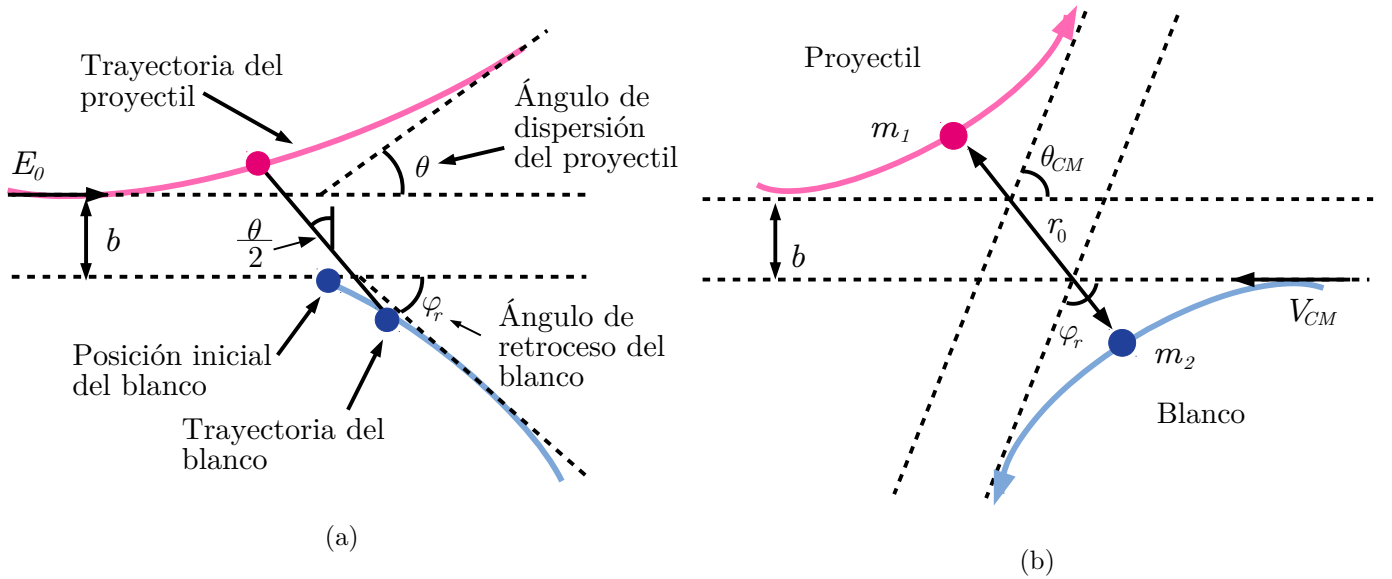


Fig. 1-9: Colisión entre el proyectil y un núcleo del blanco visto desde (a) sistema de referencia de laboratorio; (b) sistema de referencia de centro de masas [6].

La energía cinética T que es transferida a los núcleos del blanco es [6]:

$$T = \frac{1}{2}m_2v_2^2 = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2}E_0 \cos^2 \varphi_r = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2}E_0 \sin^2 \frac{\theta_{CM}}{2}, \quad (1-60)$$

donde v_2 es la velocidad del núcleo del blanco, $E_0 = \frac{1}{2}m_1v$ es la energía cinética inicial del proyectil y están dadas en el sistema de laboratorio, θ_{CM} es el ángulo de colisión en el sistema de centro de masas. Cuando $\theta_{CM} = \pi$ se obtiene la energía máxima transferida T_{max} en una colisión frontal [6].

Al considerar la densidad volumétrica atómica del material como N_v , entonces en una capa de grosor Δx habrá $N_v\Delta x$ centros dispersores. De esta manera, el cambio en la energía dentro del material será el producto de $N_v\Delta x$ centros dispersores por unidad de área por la integral de la energía transferida por colisión T sobre la diferencial de sección eficaz transversal de dispersión σ_t , es decir [6]:

$$\Delta E = -N_v\Delta x \int_0^\infty T d\sigma_t. \quad (1-61)$$

De la Ec. (1-61) se obtiene el frenado nuclear o la pérdida de energía por unidad de longitud debido a las colisiones con los núcleos de los átomos del material, esto es [6]:

$$S_n = - \left(\frac{dE}{dx} \right)_n = N_v \int_{T_{min}}^{T_{max}} T d\sigma_t. \quad (1-62)$$

La sección eficaz transversal σ_t se puede relacionar con el parámetro de impacto b , de acuerdo con la Ec. (1-45), su diferencial es $d\sigma_t = 2\pi b db$. A una distancia perpendicular a la trayectoria del proyectil, entre b y $b + db$, habrá $2\pi b db N_v dx$ centros dispersores, de manera que para la integral sobre todos los parámetros de impacto en la Ec. (1-62), se obtiene:

$$S_n = - \left(\frac{dE}{dx} \right)_n = 2\pi N_v \int_0^{b_{max}} T b db. \quad (1-63)$$

Al sustituir la energía transferida T al núcleo del átomo del material de la Ec. (1-60) en la Ec. (1-63), el poder de frenado nuclear S_n se reescribe como [6]:

$$S_n = 2\pi N_v \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E_0 \int_0^{b_{max}} \sin^2 \frac{\theta_{CM}}{2} b db. \quad (1-64)$$

La relación entre la transferencia de energía T y el parámetro de impacto b depende de la interacción potencial [6]. Para poder resolver la Ec. (1-64) se requieren hacer algunas aproximaciones. La primera aproximación unificada del poder de frenado nuclear fue hecha en 1963 por Lindhard, Scharff y Schiøtt y se conoce como Teoría LSS [7].

El ángulo θ_{CM} se obtiene mediante la integral de dispersión, Ec. (1-29) en el sistema de centro de masas, donde la energía cinética es $E_{CM} = \frac{1}{2}\mu v_1^2$ y $\mu = \frac{4m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ es la masa reducida. Al considerar el potencial de Coulomb dado por la Ec. (1-14) y de forma similar a la Ec. (1-43), se obtiene r_0 :

$$r_0 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \frac{1}{2}\mu v_1^2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 E_{CM}}, \quad (1-65)$$

por lo que para la sección eficaz de dispersión diferencial de transferencia de energía $d\sigma$, se obtiene:

$$d\sigma = \frac{1}{4}\pi r_0^2 \frac{T_{max}}{T^2} dT, \quad (1-66)$$

que al sustituirse en la Ec. (1-62), se obtiene [6]:

$$S_n = \frac{1}{4}\pi N_v r_0^2 T_{max} \int_{T_{min}}^{T_{max}} \frac{dT}{T}, \quad (1-67)$$

es decir [6]:

$$S_n = \frac{1}{4}\pi N_v r_0^2 T_{max} \ln \left(\frac{T_{max}}{T_{min}} \right), \quad (1-68)$$

donde T_{min} es la mínima transferencia de energía posible que está determinada según el modelo que se utilice y está relacionado con el espacio interatómico que existe en el blanco [6].

Por el contrario, si la energía del proyectil es lo suficientemente baja entonces el potencial de interacción se escribe de acuerdo con el modelo estadístico del átomo de Thomas-Fermi como el potencial de Coulomb *apantallado* por una función $\Phi_a(x^*)$ [8]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi_a(x^*), \quad (1-69)$$

donde $x^* = \frac{r}{a_F}$ se conoce como el radio reducido y a la vez, el parámetro a_F se conoce como radio de apantallamiento de Firsov para la colisión y que en términos del radio de Bohr $a_0 = 5.291 \times 10^{-11}$ m, es [8]:

$$a_F = \frac{0.855 a_0}{(Z_1^{\frac{1}{2}} + Z_2^{\frac{1}{2}})^{\frac{2}{3}}}. \quad (1-70)$$

Como una primera aproximación, el término $\Phi_a \left(\frac{r}{a_F} \right)$ se puede considerar como $\frac{a_F}{2r}$, con lo que se llega a una expresión para S_n , que aunque no se observa la dependencia con la energía del proyectil, sí determina el orden de magnitud. Sin embargo, se pueden hacer cálculos más exactos si se considera el potencial de Thomas-Fermi o la aproximación empírica de Moliere, esto es [9]:

$$\Phi_a \left(\frac{r}{a_F} \right) = 0.35e^{-0.3\frac{r}{a_F}} + 0.55e^{-1.2\frac{r}{a_F}} + 0.1e^{-6\frac{r}{a_F}}. \quad (1-71)$$

De manera análoga, se define el parámetro de impacto reducido como $b^* = \frac{b}{a_F}$ y la energía reducida E^* como [6]:

$$E^* = \frac{E_0 a_F m_2}{Z_1 Z_2 e^2 (m_1 + m_2)}, \quad (1-72)$$

de esta manera, al sustituir las Ecs. (1-69) y (1-72) en la Ec. (1-29), se obtiene [6]:

$$\theta = \pi - 2 \int_0^\infty \frac{b^* dx^*}{(x^*)^2 \left[1 - \frac{\Phi_A(x^*)}{x^* E^*} - \left(\frac{b^*}{x^*} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (1-73)$$

También se puede definir la sección de frenado reducida $S_n(E^*)$ como [6]:

$$S_n(E^*) = \frac{E^*}{\pi a_F^2 T_{max}} S_n, \quad (1-74)$$

tanto la energía reducida E^* , como la sección de frenado reducida $S_n(E^*)$, dadas por las Ecs. (1-72) y (1-74), no tienen unidades.

Mediante la Ec. (1-74) y al calcular la integral de la Ec. (1-64), Ziegler, Biersack y Littmark obtuvieron una expresión de $S_n(E^*)$ con respecto a E^* que se ajusta para $E^* \leq 30$, por lo que se obtiene [10]:

$$S_n(E^*) = \frac{\ln(1 + 1.1383E^*)}{2[E^* + 0.01321(E^*)^{0.21226} + 0.19593(E^*)^{0.5}]}, \quad (1-75)$$

si $E^* > 30$, se obtiene:

$$S_n(E^*) = \frac{\ln E^*}{2E^*}. \quad (1-76)$$

La sección de frenado reducida nuclear $S_n(E^*)$ en función de la energía reducida E^* calculada a partir de las Ecs. (1-75) y (1-76) se muestra en la Fig. 1-10.

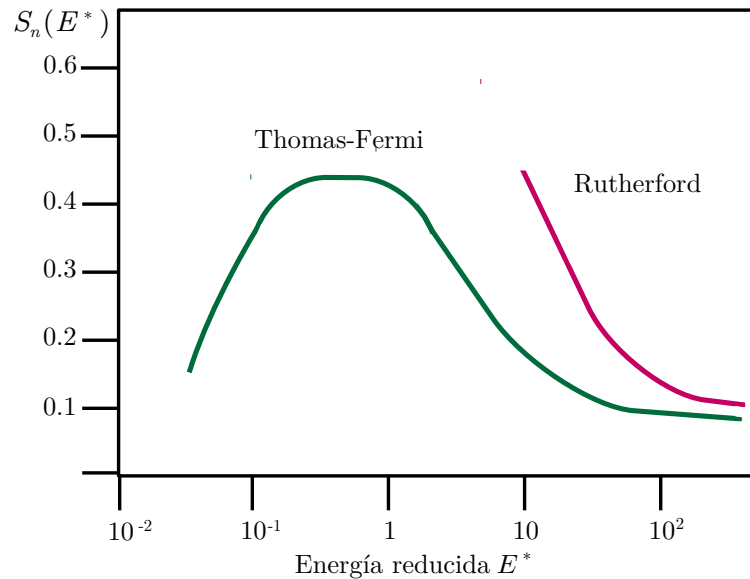


Fig. 1-10: Sección eficaz de frenado reducida nuclear $S_n(E^*)$ en función de la energía reducida E^* .

Una vez que se obtiene $S_n(E^*)$, se puede calcular S_n mediante la Ec. (1-77), es decir [6]:

$$S_n = \frac{8.462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2 m_1}{(m_1 + m_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} S_n(E^*), \quad (1-77)$$

donde la Ec. (1-77) tiene unidades de $\text{eVcm}^2/\text{átomo}$.

1.2.2. Poder de frenado electrónico

Las colisiones que se dan entre los proyectiles y los átomos de un material cuando éste es bombardeado, no sólo se dan con los núcleos de los átomos si no también puede haber interacción con los electrones de los átomos del blanco [1]. De hecho, debido a que las dimensiones del núcleo son mucho menores comparadas con el radio del átomo en cuestión (entre 10,000 y 100,000 más pequeño que el átomo), el poder de frenado causado por los electrones puede resultar mucho más importante que el poder de frenado nuclear cuando las energías de proyectiles con masas ligeras resultan ser altas (desde algunos cientos de keV hasta algunos MeV, dependiendo del proyectil) [9].

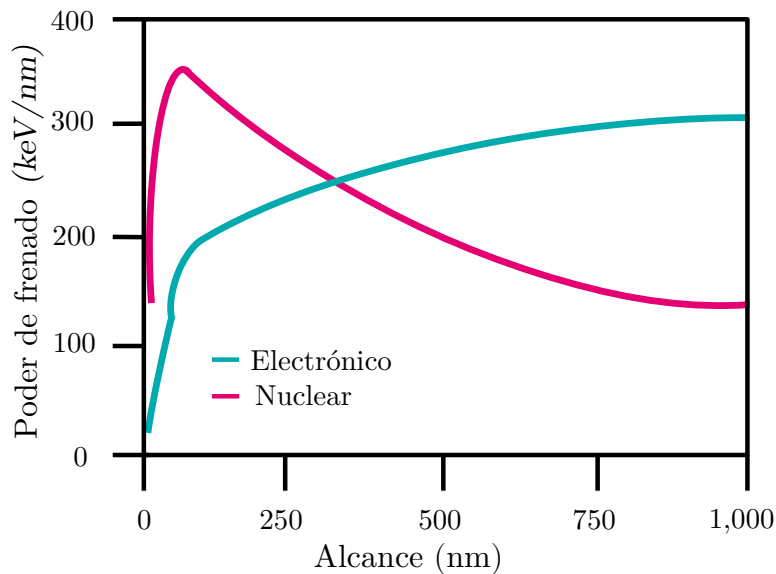


Fig. 1-11: Comparación del poder de frenado electrónico S_e y el poder de frenado nuclear S_n en función del alcance bombardeando con oro una muestra de aluminio.

Similarmente al frenado nuclear S_n , el poder de frenado electrónico S_e se define como la pérdida de energía por unidad de longitud del proyectil debido a las colisiones que tiene con los electrones de los átomos del material [1]. Pero a diferencia del frenado nuclear, el frenado electrónico se caracteriza por las trayectorias casi rectas de los proyectiles debido a que los electrones, que tienen poca masa, no alcanzan a desviar al proyectil como lo haría si los proyectiles colisionaran con los núcleos. Además, la transferencia de energía del proyectil a los electrones del material en cada colisión resulta ser pequeña por lo que se necesita una gran cantidad de colisiones para producir el frenado y en consecuencia el frenado tiene forma de función continua [1].

En general, en el poder de frenado electrónico como función de la energía se pueden distinguir cuatro regiones como las que se observan en la Fig. 1-12. Los límites de estas regiones dependen del proyectil y del material utilizado como blanco. Para cada región se utilizan diferentes modelos que explican el frenado electrónico.

La región I corresponde al caso en el que las velocidades de los proyectiles son bajas comparadas con las de los electrones del blanco [1]. El límite que determina si las velocidades de los proyectiles se consideran altas o bajas está dado por la velocidad de Bohr $v_B = \frac{Z_1 e^2}{h} = 2.19 \times 10^8 \text{ cm/s}$, que es la velocidad del electrón en la primera órbita del átomo de hidrógeno y $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ es la constante de Plank [1]. Así, para la región I, las velocidades de los proyectiles se encuentran por debajo de la velocidad de Bohr y experimentalmente se observa que el poder de frenado electrónico S_e para la región I es proporcional a la velocidad del proyectil [1].

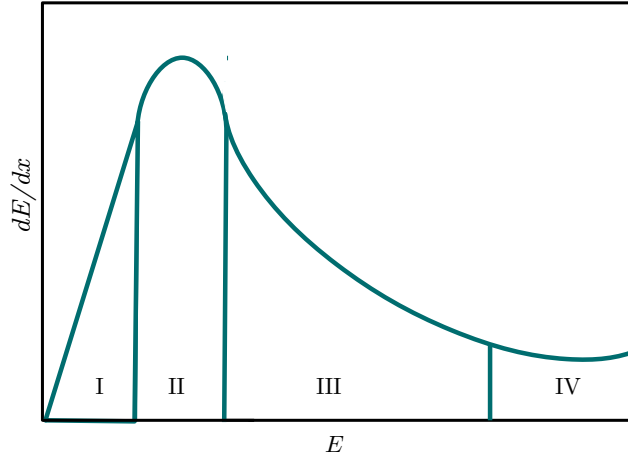


Fig. 1-12: Poder de frenado electrónico como función de la energía.

A partir del modelo de Tomas-Fermi, Lindhard y Scharff propusieron, para un proyectil con número atómico Z_1 y para el número atómico del átomo del blanco Z_2 , una expresión para el frenado electrónico S_e dado como [11]:

$$S_e = Z_1^{\frac{1}{6}} 8\pi e^2 N_v a_0 \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}})^{\frac{3}{2}}} \frac{v}{v_B}, \quad (1-78)$$

donde a_0 y v_B son el radio y la velocidad de Bohr, respectivamente.

Firsov, por su parte, dedujo para bajas energías una expresión similar [12]:

$$S_e = 0.2347\pi^2 e^2 N_v a_0 (Z_1 + Z_2) \frac{v}{v_B}. \quad (1-79)$$

La Ec. (1-79) está basada en la cantidad de movimiento transferida entre electrones a través de un plano hipotético perpendicular a la línea que une al proyectil con el blanco. Al transferirle al electrón una cantidad de movimiento Δp perpendicular a la trayectoria del proyectil expresado en términos del parámetro de impacto b , se integra sobre todos valores posibles del parámetro de impacto y al considerar la cantidad de movimiento total transferida, se obtiene [1]:

$$B = \ln \left(\frac{2m_e v^2}{\langle I_{exc} \rangle} \right), \quad (1-80)$$

donde B es conocido como el número de frenado y $\langle I_{exc} \rangle$ es la energía promedio de excitación de los electrones del blanco [1]. La energía de excitación I_{exc} es proporcional a un parámetro empírico conocido como constante de Bloch c_B , esto es: $I_{exc} = c_B Z_2$, siendo c_B del orden de 10 eV [1].

La región II es una región de transición en donde se encuentra el máximo valor del frenado electrónico que corresponde a velocidades del proyectil que son del orden de la velocidad de los electrones. El poder de frenado S_e en la zona II es muy sensible tanto a teorías y aproximaciones hechas en la región I como las de la región III [1].

En el caso de la región III, la velocidad de los proyectiles resultan ser mayores a la velocidad de Bohr [1]. Dada esta situación, es posible hacer la aproximación de que los electrones del material permanecen en reposo respecto de los proyectiles. Aquí la energía perdida por el proyectil es la energía que se transfiere a los electrones individuales. Bethe Bloch hizo el cálculo de manera cuántica considerando el número de frenado B de la Ec. (1-80), por lo que para el poder de frenado S_e en la región III, se obtiene [1]:

$$S_e = \left(-\frac{dE}{dx} \right)_e = \frac{4\pi Z_1^2 Z_2 e^4 N_v}{m_e v^2} B. \quad (1-81)$$

De acuerdo con la Ec. (1-81), al aumentar la energía del proyectil, el poder de frenado electrónico disminuye pues cuando la velocidad del proyectil es mayor, el proyectil permanece menos tiempo cerca del átomo del blanco.

Por último, en la región IV, las velocidades del proyectil son tan altas que es necesario hacer correcciones relativistas para el poder de frenado S_e de la Ec. (1-81). El número de frenado B con correcciones relativistas se expresa como [13]:

$$B = \left[\ln \left(\frac{2m_e v^2}{\langle I_{exc} \rangle} \right) - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 \right], \quad (1-82)$$

en donde $\beta = \frac{v}{c}$ da lugar al incremento gradual del poder de frenado cuando se aumenta la energía de los proyectiles.

1.3. Alcance

Debido a las colisiones que tiene un proyectil de energía inicial E_0 con los átomos de un material cuando incide en él, el proyectil va perdiendo energía en cada colisión y por lo tanto su velocidad va disminuyendo hasta ser cero y detenerse por completo dentro del material, si es que éste es lo suficientemente grueso [14]. De esta manera, el proyectil queda implantado a una cierta distancia dentro del material. La trayectoria es intrincada y tridimensional y como el proceso de frenado es aleatorio ninguna trayectoria es igual a otra para dos o más proyectiles. A la distancia total recorrida sobre la trayectoria desde que la partícula incide en el material hasta que se detiene por completo se llama alcance proyectado R_p y está expresado como [14]:

$$R_p = \int_{E_0}^0 \left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1} dE. \quad (1-83)$$

Las unidades de medida del alcance son las de longitud aunque en ocasiones se puede encontrar expresado en unidades de masa por unidad de área, esto es porque el alcance se multiplicó por la densidad del material [14].

El alcance proyectado R_p depende de la energía de incidencia del proyectil E_0 , por lo que cuanto mayor sea la energía de incidencia, mayor será la distancia de penetración del proyectil y por lo tanto mayor será el alcance proyectado [14]. El alcance proyectado y la energía de incidencia están relacionados de manera que, si se conoce el alcance proyectado R_p y el poder de frenado S , entonces es posible determinar la energía de incidencia del proyectil, esto es [14]:

$$E_0 = \int_0^{R_p} \left(\frac{dE}{dx} \right) dx. \quad (1-84)$$

Cuando los proyectiles son suficientemente pesados comparados con los núcleos de los átomos del material, el alcance R_p coincide con la longitud de la trayectoria ya que ésta es prácticamente rectilínea, sin embargo, no sucede con proyectiles ligeros, como los electrones.

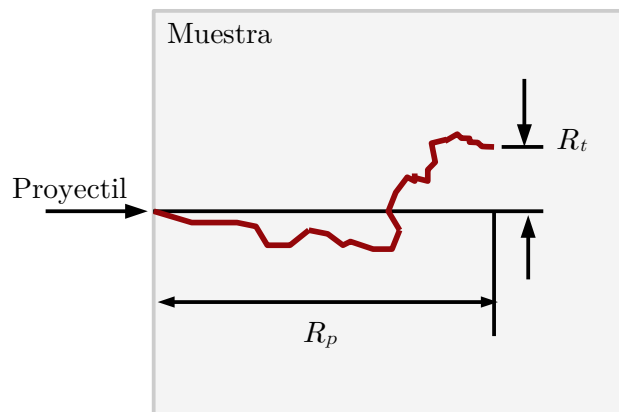


Fig. 1-13: Diagrama en el que se muestra el alcance proyectado R_p y el alcance transversal R_t de un proyectil que penetra un material hasta detenerse dentro de él [14].

Además del alcance proyectado, también existe el alcance transversal R_t que es la proyección en dirección perpendicular al alcance proyectado R_p , tal como se muestra en la Fig. 1-13.

En un experimento ideal, las interacciones de todos los proyectiles serían trayectorias perfectamente rectilíneas y paralelas entre sí. Esto significa que si se representara el número de proyectiles N que se implantan en un material de espesor Δx , se obtendría una distribución rectangular porque la penetración para cada proyectil sería la misma, tal como se muestra en la Fig. 1-14(a).

Sin embargo, en un caso real, un proyectil colisiona con los átomos del material de manera independiente a como lo hacen los demás proyectiles, razón por la cual, se presentan fluctuaciones estadísticas en la pérdida de energía [14]. Esto se ve reflejado en la distribución de proyectiles que penetran en el material, pues la distribución deja de ser rectangular y pasa a tener un tramo descendente como se muestra en la Fig. 1-14(b).

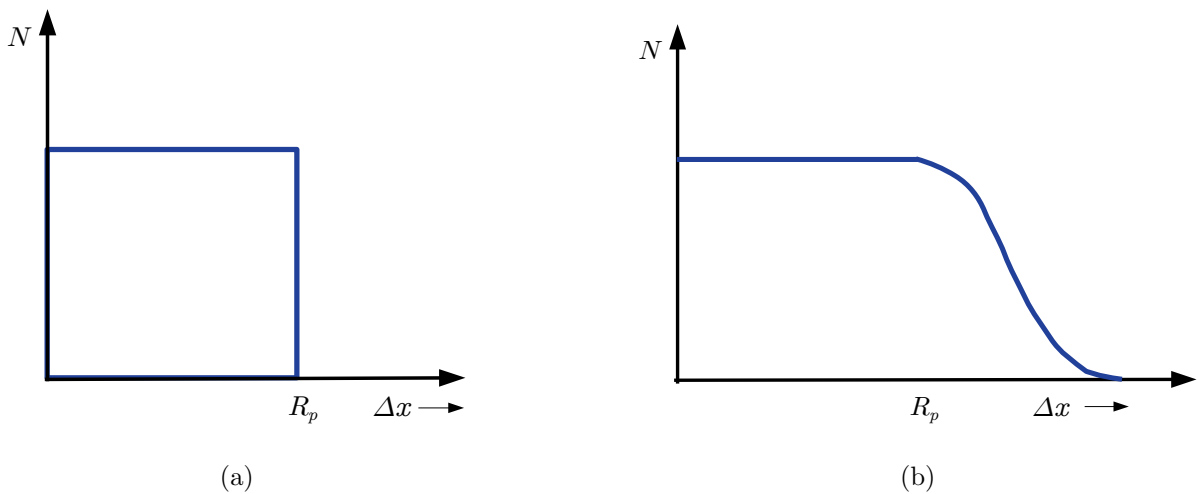


Fig. 1-14: (a) Distribución del número de proyectiles implantados en un material de espesor Δx en un experimento ideal; b) Distribución del número de proyectiles implantados en un experimento real. La distribución presenta un tramo descendente debido a las fluctuaciones estadísticas de la pérdida de energía por las colisiones con los átomos del material.

La manera de calcular el alcance medio proyectado R_p es a partir de la curva derivada con respecto a la distancia para obtener el número de proyectiles N en función de dicha distancia. Esta curva se llama curva diferencial de los alcances y se muestra en la Fig. 1-15. La curva B proporciona información sobre el número de proyectiles frenados a una distancia dada en función de la distancia a la fuente. El punto máximo de la curva B corresponde al alcance medio proyectado R_p .

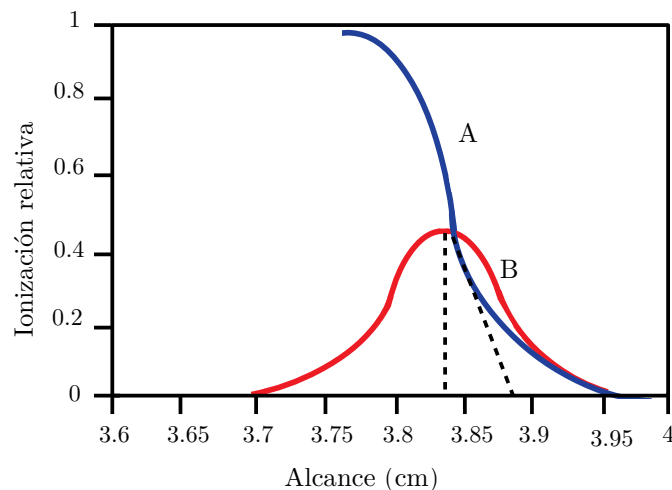


Fig. 1-15: La curva A corresponde al número de proyectiles en función de la distancia recorrida mientras que la curva B es la curva diferencial de alcances con un alcance medio $R_p = 3.84$ cm.

El proceso de frenado es estocástico y el alcance R_p representa la distancia media a la que quedan implantados los proyectiles [14]. La distribución que se obtiene es una curva gaussiana cuyo centro es R_p como se muestra en la Fig. 1-16.

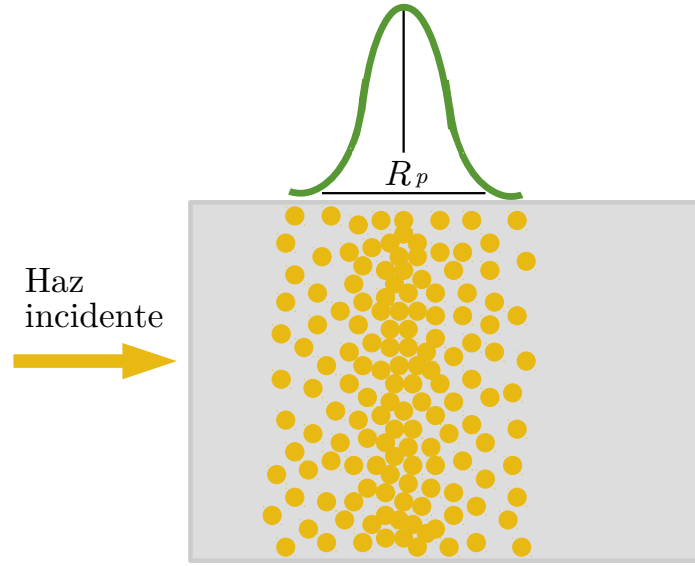


Fig. 1-16: Los proyectiles que penetran en un material forman una distribución gaussiana cuyo centro representa la distancia media R_p a la que quedan implantados los proyectiles.

La expresión para el alcance medio proyectado $\langle R_p \rangle$, desde el proyectil $i = 1$ hasta $i = N$, es [14]:

$$\langle R_p \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R_{pi}. \quad (1-85)$$

En el caso del alcance medio transversal $\langle R_t \rangle$ se considera el promedio de los valores absolutos de cada alcance transversal desde el proyectil $i = 1$ hasta N , pues de no ser así y por la simetría cilíndrica se tendría que el promedio sin los valores absolutos resultaría ser cero, por lo tanto [14]:

$$\langle R_t \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |R_{ti}|. \quad (1-86)$$

De la curva gaussiana se puede obtener la concentración de proyectiles por unidad de volumen $C(x)$ implantados en el material como función de la profundidad, esto es [14]:

$$C(x) = \frac{\Phi_0}{\sqrt{2\pi}\sigma_d} e^{-\frac{(x-R_p)^2}{2\sigma_d^2}}, \quad (1-87)$$

donde Φ_0 es la cantidad total de proyectiles implantados por unidad de área o afluencia y σ_d es la desviación estándar de la curva de distribución, dada como [14]:

$$\sigma_d = \sqrt{\sigma_d^2} = \langle (\Delta R_p)^2 \rangle^{\frac{1}{2}}. \quad (1-88)$$

A la desviación estándar σ_d de la Ec. (1-88) se le denomina esparcimiento, en inglés se le conoce como *straggling* y es una medida del ensanchamiento de la distribución de los alcances [14].

La varianza de la distribución, que es el cuadrado de la desviación estándar σ_d^2 , es [14]:

$$\sigma_d^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (R_{pi} - \langle R_p \rangle)^2 = \langle (R_p - \langle R_p \rangle)^2 \rangle = \langle (\Delta R_p)^2 \rangle. \quad (1-89)$$

1.4. Sección eficaz de frenado

La pérdida de energía es el resultado de un gran número de eventos tratados estadísticamente y depende de la energía incidente del proyectil [1]. Sin embargo, también depende de la densidad del material en el que penetra el proyectil por lo que para eliminar esta dependencia es conveniente multiplicar el poder de frenado por la densidad del medio ρ_0 . A esta cantidad se le denomina poder de frenado de densidad ε^* , es decir [1]:

$$\varepsilon^* = \frac{1}{\rho_0} \left(-\frac{dE}{dx} \right). \quad (1-90)$$

Las unidades para el poder de frenado de densidad son [MeV cm²/g].

Si en vez de multiplicar el poder de frenado por el inverso de la densidad del material, se multiplica por N_v , siendo N_v la densidad atómica del material por volumen, entonces lo que se obtiene es la sección eficaz atómica de frenado ε [1]:

$$\varepsilon = \frac{1}{N_v} \left(-\frac{dE}{dx} \right), \quad (1-91)$$

cuyas unidades son [MeV cm²].

De acuerdo con la Ec. 1-91, la sección eficaz atómica de frenado ε es inversamente proporcional a dx , por lo que para un mayor número de átomos en el material, la distancia que recorrerá el proyectil será menor.

La sección eficaz de frenado ε es una constante de proporcionalidad que da información sobre la contribución de cada átomo a la pérdida de energía del proyectil incidente [1].

Si la densidad del material ρ_0 está dada por [1]:

$$\rho_0 = N_v \left(\frac{M}{N_0} \right), \quad (1-92)$$

donde M es el peso atómico en gramos por mol y $N_0 = 6.025 \times 10^{23}$ átomos/mol es el número de Avogadro.

La sección eficaz atómica de frenado ε y el poder de frenado de densidad ε^* están relacionados por [1]:

$$\varepsilon^* = \varepsilon \frac{N_0}{M}. \quad (1-93)$$

1.4.1. Regla de Bragg

Muchas veces el medio que atraviesa el proyectil es un material compuesto por dos o más elementos. Si se considera que el proyectil interactúa con los átomos del blanco a lo largo de su trayectoria, uno a la vez [1], entonces la pérdida de energía en un medio compuesto es la suma de la pérdida de energía que ocasiona cada elemento constituyente del material de acuerdo a su proporción en el mismo. Este principio, basado en la interacción proyectil-átomo uno a uno, se conoce como regla de Bragg y afirma que la sección eficaz de frenado $\varepsilon(A_m B_n)$ de un material compuesto por más de un elemento atómico cuya fórmula es $A_m B_n$, está dada por [1]:

$$\varepsilon(A_m B_n) = m\varepsilon(A) + n\varepsilon(B), \quad (1-94)$$

donde $\varepsilon(A)$ y $\varepsilon(B)$ son las secciones eficaces de frenado de los componentes atómicos A y B del material.

De manera similar para la sección eficaz de frenado de densidad $\varepsilon^*(A_m B_n)$, se tiene [1]:

$$\varepsilon^*(A_m B_n) = m\varepsilon^*(A) + n\varepsilon^*(B). \quad (1-95)$$

Si $N(A_m B_n)$ es la densidad de volumen de las unidades moleculares $A_m B_n$ y de manera análoga a la Ec. (1-91), la relación entre la sección eficaz de frenado atómica y la pérdida de energía es [1]:

$$\varepsilon(A_m B_n) = \frac{1}{N(A_m B_n)} \left[-\frac{dE(A_m B_n)}{dx} \right]. \quad (1-96)$$

Por lo que la pérdida de energía del proyectil es proporcional al número de unidades moleculares AB que el proyectil encuentra sobre su trayectoria (las cuales contribuyen a la pérdida de energía), a una distancia Δx por la sección eficaz de frenado atómica ε [1].

En general, si un material se compone de A_k elementos diferentes, se tiene:

$$\varepsilon(A_1 A_2 \dots A_k) = \sum_{i=1}^k n_i \varepsilon(A_i), \quad (1-97)$$

con

$$\sum_{i=1}^k n_i = 1.$$

La forma para la sección eficaz de frenado de densidad ε^* es similar a la Ec. (1-97), es decir:

$$\varepsilon^*(A_1 A_2 \dots A_k) = \sum_{i=1}^k n_i \varepsilon^*(A_i). \quad (1-98)$$

1.5. Técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford

La Técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford (RBS por sus siglas en inglés) es un método experimental de análisis de materiales no destructivo que proporciona información sobre los elementos y su concentración contenidos en un material [1]. En términos generales, consiste en irradiar una muestra con un haz de partículas y medir la energía cinética de las partículas que son retrodispersadas cuando colisionan con los átomos de la muestra.

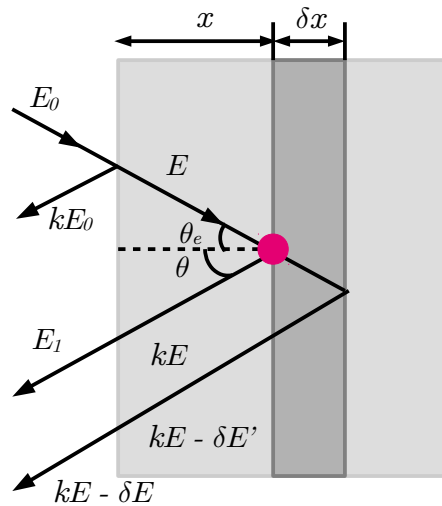


Fig. 1-17: Un haz de partículas incide en un material con una energía E_0 . Algunas de las partículas colisionan en la superficie del material y salen retrodispersadas a una energía kE_0 pero aquellas que logran entrar al material son retrodispersadas a una distancia x y se detectan a una energía E_1 .

Experimentalmente y mediante un acelerador de partículas, se hace incidir un haz sobre una muestra, como se muestra en la Fig. 1-17. Suponiendo que la energía del haz incidente es E_0 , al llegar al material las partículas del haz incidente colisionan con los átomos de la muestra en la superficie y son retrodispersadas con una energía kE_0 donde k es el factor cinemático dado por la Ec. (1-8). Algunas de las partículas logran entrar al material con una

energía E y colisionan con los átomos de la muestra a una distancia x . Las partículas son retrodispersadas con una energía kE y al salir del material llegan al detector con una energía E_1 . Las partículas retrodispersadas son detectadas y generan una señal que es proporcional a su energía. La señal pasa por un preamplificador y después por un amplificador. Una vez que la señal es amplificada se envía a un analizador multicanal.

En el analizador multicanal se separan las señales y son enviadas a diferentes canales dependiendo de la energía de cada señal [1]. Los canales admiten solo un determinado intervalo de energía por lo que una señal de cierta energía que llega al multicanal, se le asocia un canal mientras que para otra señal de menor energía se le asocia un número de canal menor. Si el ancho del intervalo de energía δE por canal resulta ser el mismo para todos los canales, entonces existe una relación lineal entre la energía y su correspondiente canal [1].

Por último y como resultado, se genera un espectro cuyo análisis es lo que proporciona información sobre la concentración de elementos contenidos en la muestra [1].

1.5.1. Aproximación de la energía

Si se asume que se conoce el valor del poder de frenado S así como la energía E_0 con la que incide el proyectil al material y se requiere conocer su energía a cualquier profundidad x dentro del material, entonces, considerando la Ec. (1-59), se tiene [1]:

$$E(x) = E_0 - \int_{x_0}^x \left(\frac{dE}{dx} \right) dx. \quad (1-99)$$

Sin embargo, de acuerdo con la Ec. (1-59), el poder de frenado depende de la energía del proyectil, pero esta energía se desconoce por lo que la integral de la Ec. (1-99) no puede ser evaluada sin conocer E . La manera más conveniente de solucionar este problema es expresar la profundidad x en función de la energía, esto es:

$$\Delta x = \int_E^{E_0} - \left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1} dE = \int_E^{E_0} - \left(\frac{dx}{dE} \right) dE, \quad (1-100)$$

donde $\Delta x = x - x_0$. Al considerar $x_0 = 0$ tanto en la Ec. (1-99) como en la Ec. (1-100) se encuentra la profundidad como función de la energía cuando se integra sobre la función $\frac{dx}{dE}$, en donde el límite superior E_0 es fijo y el límite inferior E varía. Al graficar $\left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1}$ contra la energía E se obtiene la curva mostrada en la Fig. 1-18.

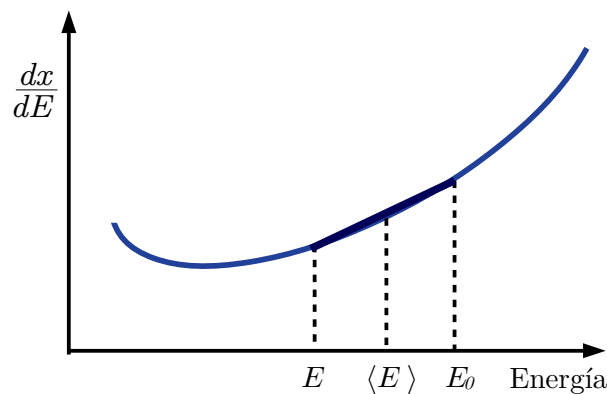


Fig. 1-18: Gráfica de $\left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1}$ en función de la energía E . El área bajo la curva representa la distancia recorrida por la partícula [1].

El valor de la integral de la Ec. (1-100) es el área bajo la curva de la gráfica de la Fig. 1-18 y representa la distancia recorrida por la partícula.

Para el valor de $\left(\frac{dE}{dx} \right)$ frecuentemente lo que se hace es reemplazarlo por la energía E_0 de la partícula incidente, como una forma de aproximación por lo que a partir de las Ecs. (1-99) y (1-100), se tiene [1]:

$$E = E_0 - \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} x \tag{1-101}$$

y

$$x = (E - E_0) - \left. \left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1} \right|_{E_0} . \tag{1-102}$$

A esta aproximación se le conoce como aproximación de energía superficial [1]. Su gráfica se ilustra en la Fig. 1-19.

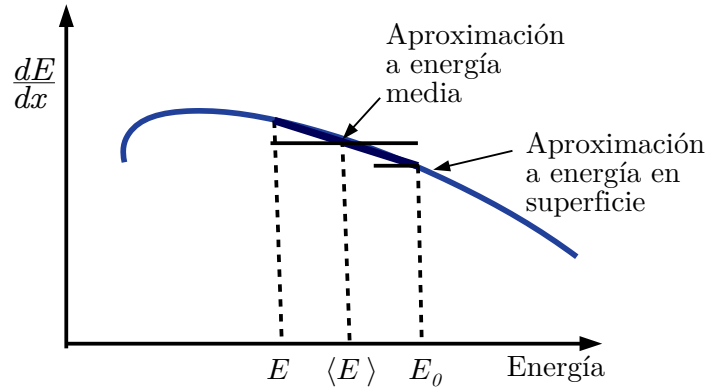


Fig. 1-19: Gráfica de $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ en función de la energía en la que se muestra la aproximación de energía de superficie [1].

Otro tipo de aproximación es reemplazar el valor de $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ por el valor promedio de la energía $\langle E \rangle = \frac{1}{2}(E + E_0)$, por lo que se tiene [1]:

$$E = E_0 - \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\langle E \rangle} x \tag{1-103}$$

y

$$x = (E - E_0) - \left. \left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1} \right|_{\langle E \rangle} . \tag{1-104}$$

Este tipo de procedimiento se llama aproximación de energía media [1] y también se muestra en la Fig. 1-19.

El significado de la aproximación de la energía proporciona una buena estimación intermedia de la profundidad de penetración, lo cual es importante en técnicas de análisis de materiales como en la técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford [1].

1.5.2. Escala de profundidad

De la Fig. 1-17 se observa que para un haz con energía E_0 , algunas partículas colisionarán con los átomos de la superficie del material retrodispersándose a una energía kE_0 , donde k es el factor cinemático dado por la Ec. (1-8). Sin embargo no todas las partículas incidentes serán retrodispersadas por átomos que se encuentran en la superficie del blanco. Un proyectil que logre atravesar la superficie del material será retrodispersado por un átomo que se encuentre a una distancia x , cuya energía después de la retrodispersión será kE . La energía con la que la partícula sale a la superficie del material y que es la que se registra en el multicanal, es E_1 y es menor a kE_0 . El hecho de que $E < E_0$ y $E_1 < kE_0$ se debe a que las interacciones con los átomos del material van frenando al proyectil a lo largo de su trayectoria, lo cual involucra al poder de frenado por lo que se requiere relacionar el poder de frenado con la energía y la profundidad a la que colisiona el proyectil dentro del material [1].

De acuerdo con el diagrama mostrado en la Fig. 1-17, al momento de entrar el proyectil en la muestra, la trayectoria que sigue forma un ángulo θ_e con respecto al eje horizontal; y después de que el proyectil es retrodispersado, la trayectoria forma un ángulo θ con respecto al eje horizontal, donde x es la profundidad a la que colisiona el proyectil. Tomando en cuenta que el factor que altera la energía con la que se detectan las partículas es la pérdida de energía por unidad de longitud que sufren los proyectiles dentro del material y haciendo uso de la definición de poder de frenado de la Ec. (1-59) e integrando de E_0 a E , se tiene [1]:

$$\frac{x}{\cos \theta_e} = \int_{E_0}^E \frac{dE}{S(E)} = - \int_{E_0}^E \frac{dE}{\frac{dE}{dx}}. \quad (1-105)$$

Suponiendo que el poder de frenado es constante antes de la retrodispersión y está evaluado a la entrada del material [1]:

$$\frac{x}{\cos \theta_e} = - \left. \frac{dx}{dE} \right|_{ent} \int_{E_0}^E dE = - \left. \frac{dx}{dE} \right|_{ent} (E - E_0).$$

Por tanto, la energía que adquiere el proyectil cuando entra al material en función del ángulo θ_e y de la distancia x a la que colisiona está dada por la Ec. (1-106):

$$E = E_0 - \frac{x}{\cos \theta_e} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{ent}, \quad (1-106)$$

análogamente, la energía de salida, en donde el poder de frenado es evaluado a la salida del material y se supone constante, es:

$$\frac{x}{\cos \theta} = - \int_{kE}^{E_1} \frac{dE}{\frac{dE}{dx}} = - \left. \frac{dx}{dE} \right|_{sal} (E_1 - kE), \quad (1-107)$$

entonces la expresión que se tiene para la energía del proyectil cuando sale del material es:

$$E_1 = kE - \frac{x}{\cos \theta} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{sal}, \quad (1-108)$$

sin embargo E y kE son dos cantidades que no pueden determinarse experimentalmente, por lo que para eliminarlas de las Ecs. (1-106) y (1-108) se forma un sistema de ecuaciones del cual, al sustituir la Ec. (1-106) en la Ec. (1-108), se obtiene [1]:

$$kE_0 - E_1 = k \left[- \frac{x}{\cos \theta_e} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{ent} \right] - \frac{x}{\cos \theta} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{sal}. \quad (1-109)$$

El término $kE_0 - E_1$ es la diferencia entre la energía que adquiere el proyectil después de la retrodispersión en la superficie menos la energía del proyectil cuando sale del material luego de haber sido retrodispersado en el interior de la muestra, por lo que se puede escribir como $\Delta E = kE_0 - E_1$ y la Ec. (1-109) queda como [1]:

$$\Delta E = [S]x, \quad (1-110)$$

donde $[S]$ es [1]:

$$[S] = - \left[\frac{k}{\cos \theta_e} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{ent} + \frac{1}{\cos \theta} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{sal} \right]. \quad (1-111)$$

El término $[S]$ es el factor de pérdida de energía. De acuerdo con la definición de la sección eficaz de frenado $\varepsilon = \frac{1}{N_v} \left(- \frac{dE}{dx} \right)$ mostrada en la Ec. (1-91), se tiene que [1]:

$$\varepsilon_{ent} = \frac{1}{N_v} \left(- \left. \frac{dE}{dx} \right|_{ent} \right), \quad (1-112)$$

$$\varepsilon_{sal} = \frac{1}{N_v} \left(-\frac{dE}{dx} \right)_{sal}, \quad (1-113)$$

entonces:

$$[\varepsilon] = \frac{k}{\cos \theta_e} \varepsilon_{ent} + \frac{1}{\cos \theta} \varepsilon_{sal}, \quad (1-114)$$

por lo que la diferencia de energía ΔE en la Ec. (1-110) en términos de la sección eficaz de frenado ε queda como [1]:

$$\Delta E = [\varepsilon] N_v x. \quad (1-115)$$

La expresión de $[S]$ en la Ec. (1-111) relaciona la pérdida de energía en función de la profundidad. En sentido estricto, la relación entre la profundidad a la que se dispersa el proyectil y la diferencia de energía no es lineal. No obstante, considerarla lineal resulta ser una buena aproximación en la práctica [1]. Esto implica que $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ se considere constante pero el valor que deberá tomar debe estar en un valor intermedio entre E_0 y E a la entrada y entre kE y E_1 a la salida, es decir [1]:

$$\langle E_{ent} \rangle = \frac{E + E_0}{2} \quad (1-116)$$

y

$$\langle E_{sal} \rangle = \frac{kE + E_1}{2}. \quad (1-117)$$

Los valores de $\langle E_{ent} \rangle$, $\langle E_{sal} \rangle$ y su relación con la pérdida de la energía se muestra en la Fig. 1-20.

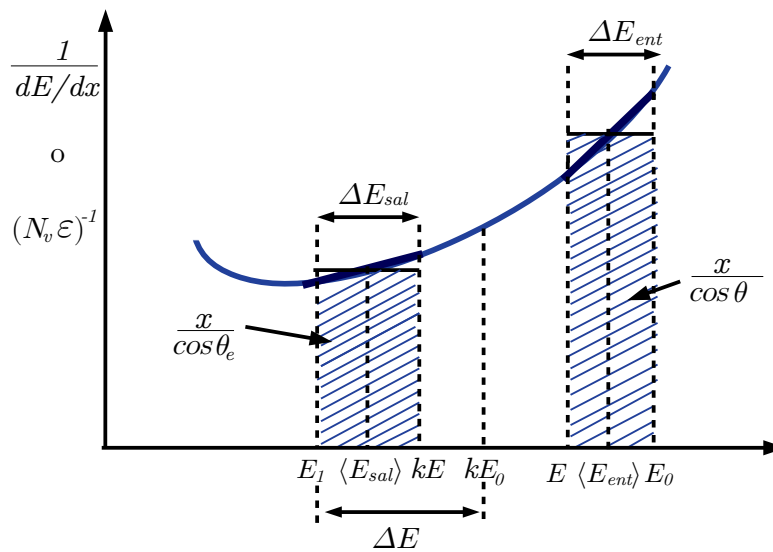


Fig. 1-20: Gráfica de la relación entre las energías media de entrada $\langle E_{ent} \rangle$ y salida $\langle E_{sal} \rangle$ con el recíproco de la pérdida de energía por unidad de longitud [1].

La mitad de la pérdida de energía ΔE se pierde cuando las partículas entran a la muestra y la otra mitad de la energía se pierde a la salida. La expresión para la energía E es aproximadamente [1]:

$$E = E_0 - \frac{1}{2} \Delta E, \quad (1-118)$$

entonces las Ecs. (1-116) y (1-117) dan como resultado [1]:

$$\langle E_{ent} \rangle = E_0 - \frac{\Delta E}{4} \quad (1-119)$$

y

$$\langle E_{sal} \rangle = E_1 + \frac{1}{4} \Delta E. \quad (1-120)$$

Usando estos valores para evaluar $\left(\frac{dE}{dx}\right)$, se obtiene $[S]$. A esta aproximación se le conoce como aproximación de la energía media [1], la cual fue descrita de forma general en la subsección 1.5.1. Si los valores de x son pequeños, se emplea la aproximación de la energía superficial y el factor de pérdida de energía queda como [1]:

$$[S_0] = - \left[\frac{k}{\cos \theta_e} \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{1}{\cos \theta} \frac{dE}{dx} \Big|_{kE_0} \right] \quad (1-121)$$

y para la sección eficaz de frenado [1]:

$$[\varepsilon_0] = \frac{k}{\cos \theta_e} \varepsilon(E_0) + \frac{1}{\cos \theta} \varepsilon(kE_0). \quad (1-122)$$

Cuando el cambio en la energía es apreciable se emplea la aproximación de energía media, entonces [1]:

$$\langle S \rangle = - \left[\frac{k}{\cos \theta_e} \frac{dE}{dx} \Big|_{\langle E_{ent} \rangle} + \frac{1}{\cos \theta} \frac{dE}{dx} \Big|_{\langle E_{sal} \rangle} \right] \quad (1-123)$$

y

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{k}{\cos \theta_e} \varepsilon(\langle E_{ent} \rangle) + \frac{1}{\cos \theta} \varepsilon(\langle E_{sal} \rangle). \quad (1-124)$$

1.5.3. Altura del espectro

El espectro que se observa en la técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford es una gráfica con el número de partículas detectadas en el eje vertical y la energía o número de canal en el eje horizontal. Su altura proporciona información sobre la concentración de elementos que constituyen una muestra y relacionada con el número de centros dispersores por unidad de área N_a en donde ocurrió la dispersión [1].

Si la muestra se trata de un sustrato que está compuesto por un solo elemento, el espectro que se observa es como el de la Fig. 1-21.

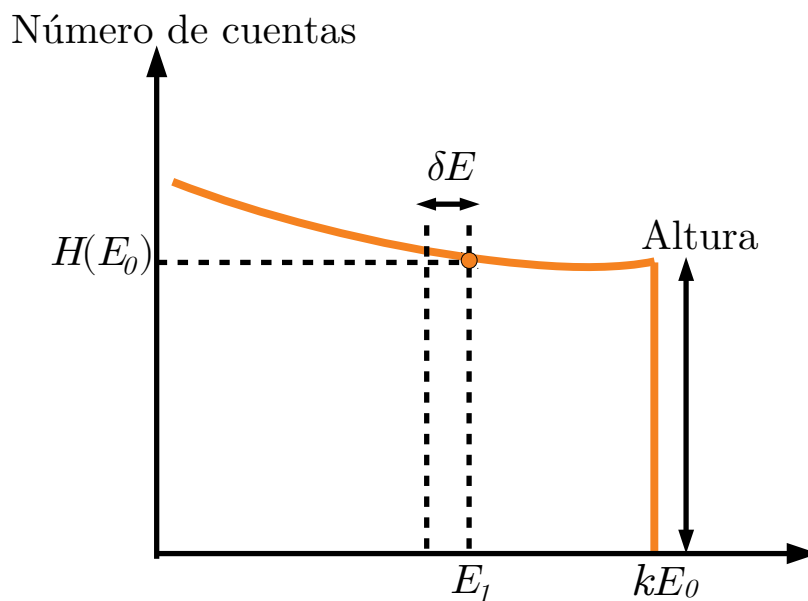


Fig. 1-21: Espectro de retrodispersión de Rutherford para una muestra en donde la energía detectada en la superficie del material es kE_0 [1].

El espectro muestra retrodispersión a profundidades cada vez mayores hasta llegar a la energía asociada al primer canal, después de eso las partículas retrodispersadas no tienen la energía suficiente para salir del material [1].

El intervalo de energías δE de un canal corresponde al espesor δx de una capa de la muestra. La altura para el intervalo δE depende del espesor δx , de la densidad atómica por volumen N_v del material, del ángulo sólido Ω que se forma con el detector, de la corriente I o del número de partículas N_{inc} que inciden sobre la muestra así como de la sección eficaz de dispersión σ promediada en todo el ángulo sólido Ω y promediada en la energía antes de la colisión [1]. Además, también depende de un ángulo θ_e que forma el haz de partículas incidentes con respecto a la normal a la superficie de la muestra. Si la altura se expresa como $H(E_1)$, entonces [1]:

$$H(E_1) = \frac{\sigma(E)\Omega N_{inc} N_v \delta x}{\cos \theta_e}. \quad (1-125)$$

Si la incidencia de las partículas es normal a la superficie, se tiene:

$$H(E_1) = \sigma(E)\Omega N_{inc} N_v \delta x. \quad (1-126)$$

La altura del espectro es un parámetro que indica el número de partículas que son retrodispersadas por los núcleos del material. Como la altura depende de la sección eficaz de dispersión de acuerdo con la Ec. (1-125) y si en el espectro la altura se muestra constante, significaría que la muestra es homogénea porque la probabilidad de retrodispersión en la dirección del detector sería la misma a cualquier profundidad [1]. Aún así, la altura del espectro puede presentar una ligera variación pues la sección eficaz de dispersión aumenta cuando la energía incidente disminuye [1].

Para la capa de espesor δx que se encuentra a una profundidad x , se considera $\delta E'$ como la diferencia de energía entre las partículas que fueron retrodispersadas en la primera y segunda cara de la capa de material, lo cual se muestra en la Fig. 1-17.

De manera similar a la Ec. (1-115), para la capa de espesor δx , en términos de la sección eficaz de frenado $[\varepsilon]$, se obtiene la expresión [1]:

$$\delta E' = [\varepsilon] N_v \delta x, \quad (1-127)$$

donde

$$[\varepsilon] = \frac{k}{\cos \theta_e} \varepsilon(E) + \frac{1}{\cos \theta} \varepsilon(kE), \quad (1-128)$$

por lo que la altura para esta capa de espesor δx queda como [1]:

$$H(E_1) = \sigma(E)\Omega N_{inc} \frac{\delta E'}{[\varepsilon] \cos \theta_e}. \quad (1-129)$$

La Fig. 1-21 muestra la altura $H(E_0)$ asociada a un intervalo de energía δE de un canal donde E_1 es la energía del proyectil detectada.

Para relacionar la diferencia de energía entre la dispersión en la cara frontal y la posterior con el intervalo de energía δE por canal, se toma en cuenta que la pérdida de energía en la trayectoria de salida, de acuerdo con la Ec. (1-105), es:

$$N_v \frac{x}{\cos \theta} = -N_v \int_{kE}^{E_1} \frac{dE}{dx}$$

y usando la relación $\varepsilon = \frac{1}{N_v} \left(-\frac{dE}{dx}\right)$, se obtiene [1]:

$$N_v \frac{x}{\cos \theta} = \int_{kE}^{E_1} \frac{dE}{\varepsilon}. \quad (1-130)$$

El espesor δx de la capa se considera menor a la profundidad x , por lo que la trayectoria de salida para la cara

frontal y posterior del espesor δx es, para fines prácticos, la misma. En consecuencia, es posible escribir [1]:

$$\int_{kE}^{E_1} \frac{dE}{\varepsilon} = - \int_{kE-\delta E'}^{E_1-\delta E} \frac{dE}{\varepsilon}. \quad (1-131)$$

Si δE y $\delta E'$ resultan ser mucho más pequeños que los valores E y kE , como se muestra en la Fig. 1-22, se pueden escribir como diferenciales, por lo que [1]:

$$\frac{\delta E'}{\delta E} = \frac{\varepsilon(kE)}{\varepsilon(E_1)}. \quad (1-132)$$

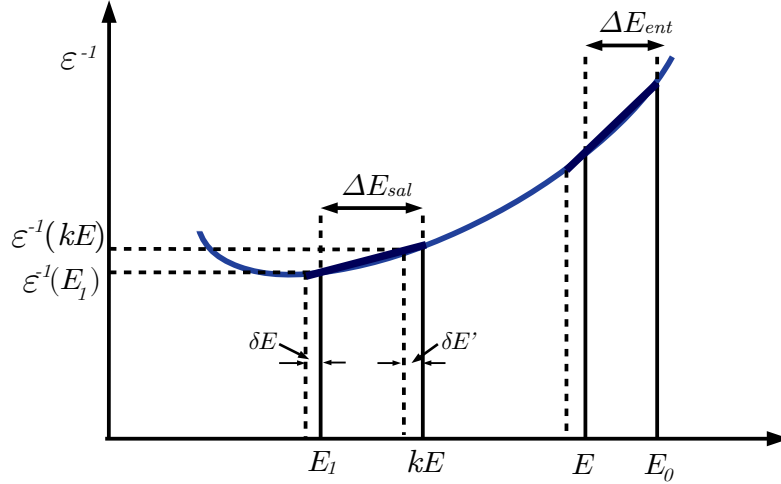


Fig. 1-22: Gráfica de la diferencia de energías δE y $\delta E'$ de dos partículas retrodispersadas con una diferencia infinitesimal de profundidad [1].

Al despejar $\delta E'$ y al sustituirla en la Ec. (1-129), para la altura de la capa de espesor δx , se tiene [1]:

$$H(E_1) = \sigma(E)\Omega N_{inc} \left[\frac{\delta E}{\varepsilon(E) \cos \theta_e} \right] \left[\frac{\varepsilon(kE)}{\varepsilon(E_1)} \right]. \quad (1-133)$$

En la superficie de la muestra se tiene $E = E_0$, entonces $E_1 = kE_0$, por lo que de la Ec. (1-133), se tiene:

$$H_0 = \sigma(E_0)\Omega N_{inc} \frac{\delta E}{\varepsilon_0 \cos \theta_e}. \quad (1-134)$$

1.5.4. Muestras multicomponentes

La mayoría de los materiales están constituidos por dos o más elementos, por lo que al realizar un análisis de los espectros para este tipo de materiales es necesario tomar en cuenta que las partículas que inciden en el material interactúan con más de un elemento. Esto modifica la sección eficaz de frenado pues depende de la composición de la muestra [1].

Al suponer, por simplicidad, que se tiene un material compuesto de dos elementos A y B en proporción $\frac{m}{n}$. Los proyectiles que penetran en el material pueden colisionar tanto con los átomos del elemento A como con los átomos del elemento B . A una misma profundidad x , la pérdida de energía dependiendo del átomo con el cual un proyectil haya colisionado es [1]:

$$\Delta E_A = [\varepsilon]_A m x \quad (1-135)$$

y

$$\Delta E_B = [\varepsilon]_B n x, \quad (1-136)$$

por lo que la sección eficaz de frenado para cada elemento quedan expresadas como:

$$[\varepsilon]_A = \frac{k_A}{\cos \theta_e} \varepsilon_{ent} + \frac{1}{\cos \theta} \varepsilon_{sal} \quad (1-137)$$

y

$$[\varepsilon]_B = \frac{k_B}{\cos \theta_e} \varepsilon_{ent} + \frac{1}{\cos \theta} \varepsilon_{sal}. \quad (1-138)$$

Usando la aproximación de energía media se obtienen expresiones similares a las Ecs. (1-119) y (1-120) para cada elemento, es decir [1]:

$$\langle (E_{ent}) \rangle_A = E_0 - \frac{\Delta E_A}{4}, \quad (1-139)$$

$$\langle (E_{sal}) \rangle_A = E_1 + \frac{\Delta E_A}{4}, \quad (1-140)$$

y para el elemento B :

$$\langle (E_{ent}) \rangle_B = E_0 - \frac{\Delta E_B}{4} \quad (1-141)$$

y

$$\langle (E_{sal}) \rangle_B = E_1 + \frac{\Delta E_B}{4}. \quad (1-142)$$

El poder de frenado del material compuesto por los elementos A y B sigue la regla de Bragg $\varepsilon = \varepsilon(A_m B_n)$, descrita en la subsección 1.4.1.

Las alturas de cada espectro debido al elemento A y al elemento B están expresadas como [1]:

$$H_A(x) = \sigma(E)_A \Omega N_{inc} m \frac{\delta E}{[S]_A} \quad (1-143)$$

y para el elemento B :

$$H_B(x) = \sigma(E)_B \Omega N_{inc} n \frac{\delta E}{[S]_B}. \quad (1-144)$$

En términos de la sección eficaz de frenado [1]:

$$H_A(E_1) = \sigma(E)_A \Omega N_{inc} m \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_A(E) \cos \theta_e} \right] \left[\frac{\varepsilon_A(k_A E)}{\varepsilon(E_1)} \right] \quad (1-145)$$

y

$$H_B(E_1) = \sigma(E)_B \Omega N_{inc} n \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_B(E) \cos \theta_e} \right] \left[\frac{\varepsilon_B(k_B E)}{\varepsilon(E_1)} \right], \quad (1-146)$$

donde $E_1 < k_A E_0$ y $E_1 < k_B E_0$ y es igual a cero cuando $E > k E_0$. Según el caso, la sección eficaz de dispersión es similar a la Ec. (1-57):

$$\sigma(E)_i = \left(\frac{Z_i Z_1 e^2}{4\pi \epsilon_0 4E \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2, \quad (1-147)$$

donde el subíndice i se refiere al elemento A o B , según sea el elemento del que se trate, y Z_1 se refiere al número atómico del proyectil [1].

Al considerar el cociente entre las dos alturas, dadas por las Ecs. (1-143) y (1-144), la concentración relativa es [1]:

$$\frac{H_A(x)}{H_B(x)} = \frac{Z_A^2 m [S]_B}{Z_B n [S]_A}. \quad (1-148)$$

El detector no puede distinguir si el proyectil colisionó con un núcleo del elemento A o B , sólo detecta la energía de retrodispersión del proyectil, así que el espectro generado es el resultado de los dos tipos de interacción de manera simultánea. El espectro para una muestra diatómica y homogénea se muestra en la Fig. 1-23.

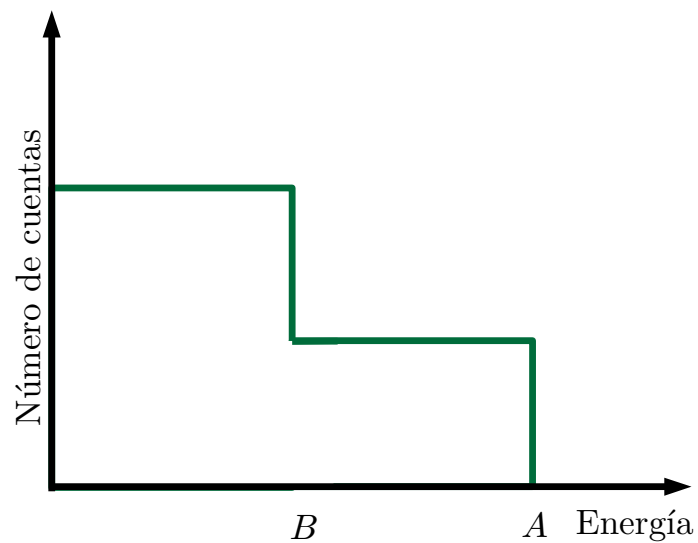


Fig. 1-23: Espectro de una muestra homogénea y compuesta de dos elementos A y B .

Cabe observar que aún cuando haya colisiones con los elementos A y B en la superficie, la energía de retrodispersión es diferente debido a la diferencia de masas de los elementos del material [1].

2. Interacción de luz con nanopartículas

2.1. Teoría de Mie

Para poder estudiar el fenómeno de dispersión de la luz por una nanopartícula es necesario determinar los campos eléctricos y magnéticos producidos durante la dispersión. Mediante la teoría de Mie se calculan los campos electromagnéticos a partir de resolver las ecuaciones de Maxwell [15]. Al suponer que la luz incidente es una onda plana y monocromática, la cual es dispersada por una partícula esférica de radio arbitrario a , que se encuentra en un medio lineal, isótropo y homogéneo, los campos eléctrico \mathbf{E} y magnético \mathbf{H} satisfacen las siguientes ecuaciones [15]:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k_v^2 \mathbf{E} = 0. \quad (2-1)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k_v^2 \mathbf{H} = 0, \quad (2-2)$$

donde k_v^2 es la magnitud del vector de onda.

De acuerdo con el teorema de Helmholtz, si se conoce la divergencia y el rotacional de un campo se puede determinar el campo vectorial, para que sea de forma única en todo el espacio también es necesario que el campo tienda a cero en el infinito [16].

2.1.1. Resolución de las ecuaciones de Maxwell para la teoría de Mie

Las expresiones para el campo eléctrico y magnético que satisfacen la ecuación de onda vectorial, se escriben en términos de dos funciones vectoriales \mathbf{M} y \mathbf{N} [15]. Estas funciones, a su vez, se construyen mediante una función escalar Ψ y un vector arbitrario \mathbf{r} . La función vectorial \mathbf{M} y \mathbf{N} se proponen como [15]:

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\Psi). \quad (2-3)$$

$$\mathbf{N} = \frac{1}{k_v} \nabla \times \mathbf{M}. \quad (2-4)$$

Como $\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\Psi)$ también se puede construir $\mathbf{M} = -\mathbf{c} \times \nabla\Psi$, lo que muestra que \mathbf{M} es perpendicular a \mathbf{c} .

La divergencia para \mathbf{N} se anula y cumple con la función de onda $\nabla^2 \mathbf{N} + k_v^2 \mathbf{N} = 0$ y lo mismo ocurre para \mathbf{M} cuya divergencia es $\nabla \cdot \mathbf{M} = \nabla \cdot (\nabla \times (\mathbf{r}\Psi)) = 0$, por lo que la ecuación de onda vectorial para \mathbf{M} queda como [15]:

$$\nabla^2 \mathbf{M} + k_v^2 \mathbf{M} = \nabla \times [\mathbf{r}(\nabla^2 \Psi + k_v^2 \Psi)] = 0. \quad (2-5)$$

Las soluciones a la Ec. (2-5) se pueden encontrar si Ψ satisface la Ec. (2-6) de onda escalar [15]:

$$\nabla^2 \Psi + k_v^2 \Psi = 0, \quad (2-6)$$

además \mathbf{M} y \mathbf{N} están relacionados por:

$$\mathbf{M} = \frac{1}{k_v} \nabla \times \mathbf{N}. \quad (2-7)$$

Tanto \mathbf{M} como \mathbf{N} tienen divergencia nula y el rotacional de una es proporcional a otra, es decir, poseen todas las características necesarias para que cada función vectorial forme un campo. Ambas funciones satisfacen la ecuación

de onda vectorial y como han sido construidas a partir de Ψ , de acuerdo con las Ecs. (2-5) y (2-3), si se encuentran soluciones para Ψ , se podrán construir \mathbf{M} y \mathbf{N} [15].

Para encontrar las soluciones a la ecuación $\nabla^2\Psi + k_v^2\Psi = 0$ y dada la simetría del problema se utilizan coordenadas esféricas para el laplaciano en la Ec. (2-6). Esta ecuación escalar se resuelve usando el método de separación de variables. Se propone una solución para la ecuación de onda cuyo propósito es la de separar la parte radial de la parte angular en la forma [15]:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi), \quad (2-8)$$

por lo que al sustituir en la Ec. (2-6), se obtiene una expresión que se puede separar en dos ecuaciones. Al ser independientes una de la otra, se igualan a una constante, tal que [15]:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + r^2 k_v^2 = n(n+1) \quad (2-9)$$

y

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} + Yn(n+1) = 0. \quad (2-10)$$

Al resolver primero la parte angular, nuevamente se tiene una separación de variables, tal que:

$$Y(\theta, \phi) = P(\theta)Q(\phi). \quad (2-11)$$

El término $Y(\theta, \phi)$ se conoce como la función armónica esférica [15]. Si se sustituye la Ec. (2-11) en la Ec. (2-10) se obtiene una ecuación para ϕ y otra que depende de θ [15]. La ecuación que depende de ϕ se puede igualar a una constante $-m^2$ que se escoge así para garantizar soluciones armónicas en ϕ , de manera que el ángulo varíe entre 0 y 2π , es decir:

$$\frac{1}{Q} \frac{d^2 Q}{d\phi^2} = -m^2, \quad (2-12)$$

proponiendo una solución de la forma [15]:

$$Q(\phi) = e^{im\phi}, \quad (2-13)$$

donde $i = \sqrt{-1}$. Al sustituir en la Ec. (2-12) y resolver la ecuación diferencial, se encuentra la solución para la parte que depende de ϕ .

Al considerar la Ec. (2-12) para la parte angular θ en la Ec. (2-10) y multiplicar la ecuación por $\frac{1}{\sin^2 \theta}$ tomando en cuenta que $\sin \theta d\theta = -d(\cos \theta)$, se llega a la siguiente expresión:

$$n(n+1) + \frac{1}{P} \frac{d}{d(\cos \theta)} \left(\sin^2 \theta \frac{dP}{d(\cos \theta)} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = 0. \quad (2-14)$$

Al hacer el cambio de variable $x = \cos \theta$ en la Ec. (2-14) y multiplicar todo por $P(\theta)$, se llega a [15]:

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dP}{dx} \right] - \frac{m^2 P}{(1-x^2)} + n(n+1)P = 0. \quad (2-15)$$

Al tomar en cuenta el cambio de variable $x = \cos \theta$ queda implícito que los valores que puede tomar x están entre 1 y -1 pues $0 \leq \theta \leq \pi$. Esto implica que para garantizar una solución no trivial que converja, es necesario que n sea entero positivo [15]. La Ec. (2-15) es la ecuación de Legendre que al resolverla por el método de series de potencias tiene como solución los polinomios asociados de Legendre [16].

$$P(\theta) = AP_n^m(\cos \theta) + BQ_n^m(\cos \theta). \quad (2-16)$$

Para $m \neq 0$, P_n^m es la función asociada de Legendre de orden m , grado n y de primera especie, mientras que Q_n^m es la función asociada de Legendre de segunda especie, de orden m y grado n . Las funciones Q_n^m divergen para

$x = \pm 1$ por lo que, en general, toda solución física implica $B = 0$ [16].

Falta resolver la Ec. (2-9) para la parte radial. Al derivar el producto dentro del paréntesis de la Ec. (2-9), se obtiene la ecuación diferencial de Bessel [15]:

$$r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + 2r \frac{dR}{dr} + [r^2 k_v^2 - n(n+1)]R = 0, \quad (2-17)$$

cuya solución general son las funciones esféricas de Bessel linealmente independientes de la forma [15]:

$$R(r) = C_1 j_n(k_v r) + C_2 y_n(k_v r), \quad (2-18)$$

siendo

$$j_n(k_v r) = \sqrt{\frac{\pi}{2k_v r}} J_{n+\frac{1}{2}}(k_v r) \quad (2-19)$$

y

$$y_n(k_v r) = \sqrt{\frac{\pi}{2k_v r}} Y_{n+\frac{1}{2}}(k_v r). \quad (2-20)$$

Los términos $J_{n+\frac{1}{2}}(k_v r)$ y $Y_{n+\frac{1}{2}}(k_v r)$ son las funciones de Bessel ordinarias. Sin embargo, otra manera de expresar la solución general de la Ec (2-18) es la siguiente [15]:

$$R(r) = C_1 h_n^{(1)}(k_v r) + C_2 h_n^{(2)}(k_v r), \quad (2-21)$$

donde $h_n^{(1)}(k_v r)$ y $h_n^{(2)}(k_v r)$ se llaman funciones de Bessel de tercera clase o también funciones de Hankel de orden n , cuya relación con las funciones de Bessel esféricas son [15]:

$$h_n^{(1)}(k_v r) = j_n(k_v r) + i y_n(k_v r) \quad (2-22)$$

y

$$h_n^{(2)}(k_v r) = j_n(k_v r) - i y_n(k_v r). \quad (2-23)$$

Finalmente, la ecuación de onda tiene una parte radial cuya solución son las funciones de Bessel y una parte angular con solución en los armónicos esféricos. La función Ψ se puede separar en sus componentes par e impar [15]:

$$\Psi_{pmn} = \cos m\phi P_n^m(\cos \theta) Z_n(k_v r) \quad (2-24)$$

y

$$\Psi_{imn} = \sin m\phi P_n^m(\cos \theta) Z_n(k_v r). \quad (2-25)$$

donde $Z_n(k_v r)$ puede ser cualquiera de las funciones esféricas de Bessel $j_n(k_v r)$ y $y_n(k_v r)$ dadas por las Ecs. (2-19) y (2-20) o las funciones de Hankel $h_n^{(1)}(k_v r)$ y $h_n^{(2)}(k_v r)$ de las Ecs. (2-22) y (2-23).

Encontradas las soluciones para Ψ y de acuerdo con las Ecs. (2-3) y (2-4) se puede determinar la forma de los campos vectoriales \mathbf{M} y \mathbf{N} para la parte par e impar de cada una de ellas [15].

$$\mathbf{M}_{pmn} = \nabla \times (\mathbf{r} \Psi_{pmn}), \quad (2-26)$$

$$\mathbf{M}_{imn} = \nabla \times (\mathbf{r} \Psi_{imn}), \quad (2-27)$$

$$\mathbf{N}_{pmn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{pmn}}{k_v}, \quad (2-28)$$

$$\mathbf{N}_{imn} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{imn}}{k_v}. \quad (2-29)$$

es decir [15]:

$$\mathbf{M}_{pmn} = \frac{-m}{\sin \theta} \sin m\phi P_n^m(\theta) Z_n(k_v r) \hat{\boldsymbol{\theta}} - \cos m\phi \frac{dP_n^m(\theta)}{d\theta} Z_n(k_v r) \hat{\boldsymbol{\phi}}. \quad (2-30)$$

$$\mathbf{M}_{imn} = \frac{m}{\sin \theta} \cos m\phi P_n^m(\theta) Z_n(k_v r) \hat{\boldsymbol{\theta}} - \sin m\phi \frac{dP_n^m(\theta)}{d\theta} Z_n(k_v r) \hat{\boldsymbol{\phi}}. \quad (2-31)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{pmn} = \frac{Z_n(\varrho)}{\varrho} \cos m\phi n(n+1) P_n^m(\theta) \hat{\mathbf{r}} + \cos m\phi \left(\frac{dP_n^m(\theta)}{d\theta} \frac{1}{\varrho} \frac{d[\varrho Z_n(\varrho)]}{d\varrho} \right) \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ - m \sin m\phi \left(\frac{P_n^m(\theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\varrho} \frac{d[\varrho Z_n(\varrho)]}{d\varrho} \right) \hat{\boldsymbol{\phi}}. \end{aligned} \quad (2-32)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{imn} = \frac{Z_n(\varrho)}{\varrho} \sin m\phi n(n+1) P_n^m(\theta) \hat{\mathbf{r}} + \sin m\phi \left(\frac{dP_n^m(\theta)}{d\theta} \frac{1}{\varrho} \frac{d[\varrho Z_n(\varrho)]}{d\varrho} \right) \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ + m \cos m\phi \left(\frac{P_n^m(\theta)}{\sin \theta} \frac{1}{\varrho} \frac{d[\varrho Z_n(\varrho)]}{d\varrho} \right) \hat{\boldsymbol{\phi}}, \end{aligned} \quad (2-33)$$

donde $\varrho = k_v r$.

A partir de los armónicos esféricos vectoriales es posible encontrar la forma de los campos electromagnéticos en todo el espacio cuando se hace incidir un haz monocromático sobre una esfera. Al suponer el haz monocromático como una onda plana, polarizada en la dirección del eje X, que se propaga en dirección del eje Z y que incide sobre una esfera de radio a inmersa en un medio lineal, homogéneo e isótropo, tal como se observa en la Fig. 2-1, entonces la onda plana incidente \mathbf{E}_i se puede escribir como [15]:

$$\mathbf{E}_i = E_0 e^{ik_v r \cos \theta} \hat{\mathbf{x}}, \quad (2-34)$$

donde E_0 es su amplitud. Los campos electromagnéticos incidentes se pueden escribir como $(\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i)$ mientras que los campos dentro de la esfera se expresan como $(\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1)$ y finalmente, los campos que son dispersados se escriben en la forma $(\mathbf{E}_d, \mathbf{H}_d)$.

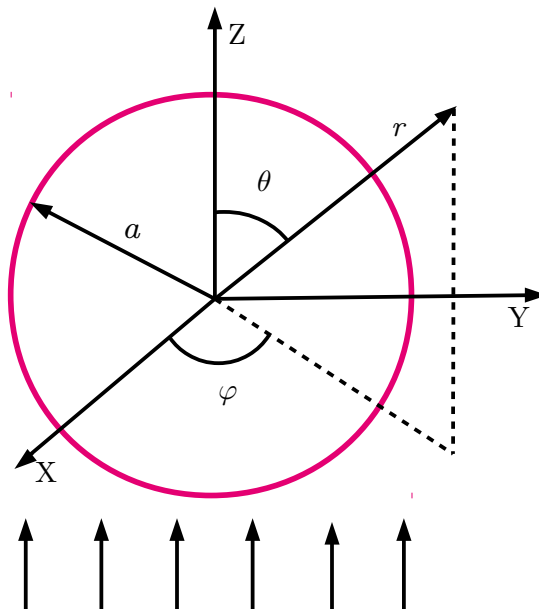


Fig. 2-1: Una onda plana polarizada en la dirección del eje X, se propaga en la dirección del eje Z hacia una esfera de radio a para producir dispersión [15].

El primer paso para encontrar la forma de los campos electromagnéticos en todo el espacio es expandir la onda plana en armónicos esféricos vectoriales, es decir [15]:

$$\mathbf{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} (B_{pmn} \mathbf{M}_{pmn} + B_{imn} \mathbf{M}_{imn} + A_{pmn} \mathbf{N}_{pmn} + A_{imn} \mathbf{N}_{imn}). \quad (2-35)$$

Los armónicos esféricos vectoriales contienen términos como $\sin m\theta$ que son ortogonales a los términos $\cos m'\theta$ para toda m y m' , esto implica que [15]:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \mathbf{M}_{pmn} \cdot \mathbf{M}_{imn} \sin \theta d\theta d\phi = 0, \quad (2-36)$$

para toda m, m' y n, n' . Similarmente las parejas $(\mathbf{M}_{pmn}, \mathbf{M}_{imn}), (\mathbf{N}_{imn}, \mathbf{N}_{pmn}), (\mathbf{M}_{imn}, \mathbf{N}_{imn})$ y $(\mathbf{M}_{pmn}, \mathbf{N}_{pmn})$ son ortogonales siempre que $m \neq m'$.

Cuando $n \neq n'$ y $m \neq 1$ las parejas $(\mathbf{M}_{pmn'}, \mathbf{M}_{pmn}), (\mathbf{M}_{imn'}, \mathbf{M}_{imn}), (\mathbf{N}_{pmn'}, \mathbf{N}_{pmn})$ y $(\mathbf{N}_{imn'}, \mathbf{N}_{imn})$ se vuelven ortogonales para $m \neq m'$ [15].

Los coeficientes de la Ec. (2-35) B_{pmn} y A_{imn} se anulan para toda m y n mientras que los demás coeficientes se anulan excepto para $m = 1$. Además el campo incidente es finito en el origen por lo se hace $C_2 = 0$ en la Ec. (2-18), debido a que Y_n diverge en el origen. Escritos los vectores \mathbf{M} y \mathbf{N} con un superíndice (1), se tiene que la Ec. (2-35) se convierte en [15]:

$$\mathbf{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} (B_{i1n} \mathbf{M}_{i1n}^{(1)} + A_{p1n} \mathbf{N}_{p1n}^{(1)}), \quad (2-37)$$

donde el coeficiente de expansión B_{i1n} se expresa en la forma [15]:

$$B_{i1n} = \frac{\int_0^{\pi} \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{M}_{i1n}^{(1)} d\theta}{\int_0^{\pi} |\mathbf{M}_{i1n}^{(1)}|^2 d\theta}. \quad (2-38)$$

Para calcularlo se utiliza la integral de Poisson, Ec. (2-43), de forma que [15]:

$$j_n(\varrho) = \frac{i^{-n}}{2} \int_0^{\pi} e^{i\varrho \cos \theta} P_n \sin \theta d\theta, \quad (2-39)$$

y considerando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre [15]:

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_{n'}(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{n,n'}, \quad (2-40)$$

se llega a [15]:

$$B_{i1n} = i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)}. \quad (2-41)$$

El coeficiente de expansión A_{p1n} de la Ec. (2-37), se expresa como:

$$A_{p1n} = \frac{\int_0^{\pi} \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{N}_{p1n}^{(1)} d\theta}{\int_0^{\pi} |\mathbf{N}_{p1n}^{(1)}|^2 d\theta}. \quad (2-42)$$

Al integrar por partes y usando la integral de Poisson, Ec. (2-39), en el numerador, se llega a [15]:

$$A_{p1n} = -i E_0 i^n \frac{2n+1}{n(n+1)}, \quad (2-43)$$

sustituyendo en la Ec. (2-37), el campo incidente \mathbf{E}_i queda escrito en términos de los armónicos esféricos vectoriales como [15]:

$$\mathbf{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\mathbf{M}_{i1n}^{(1)} - i\mathbf{N}_{p1n}^{(1)} \right). \quad (2-44)$$

Para determinar el campo magnético incidente \mathbf{H}_i se utiliza la ley de Faraday. Para una onda electromagnética se tiene: $\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu_m\mathbf{H}$, donde $i = \sqrt{-1}$, ω es la frecuencia angular y μ_m es la permeabilidad magnética [15].

$$\nabla \times \mathbf{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\nabla \times \mathbf{M}_{i1n}^{(1)} - i\nabla \times \mathbf{N}_{p1n}^{(1)} \right) = i\omega\mu_m\mathbf{H}_i, \quad (2-45)$$

usando las Ecs. (2-4) y (2-7), se obtiene:

$$\nabla \times \mathbf{E}_i = E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(k_v \mathbf{N}_{i1n}^{(1)} - ik_v \mathbf{M}_{p1n}^{(1)} \right) = i\omega\mu_m\mathbf{H}_i,$$

por lo tanto [15]:

$$\mathbf{H}_i = \frac{-k_v}{\omega\mu_m} E_0 \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(\mathbf{M}_{p1n}^{(1)} + i\mathbf{N}_{i1n}^{(1)} \right). \quad (2-46)$$

Para poder expandir de igual forma en armónicos esféricos vectoriales el campo electromagnético, se satisface la siguiente condición de contorno [15]:

$$(\mathbf{E}_i + \mathbf{E}_d - \mathbf{E}_1) \times \hat{\mathbf{r}} = (\mathbf{H}_i + \mathbf{H}_d - \mathbf{H}_1) \times \hat{\mathbf{r}} = \mathbf{0}, \quad (2-47)$$

Por lo que, dentro de la esfera, el campo eléctrico \mathbf{E}_1 es de la forma [15]:

$$\mathbf{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(C_n \mathbf{M}_{i1n}^{(1)} - iD_n \mathbf{N}_{p1n}^{(1)} \right) \quad (2-48)$$

y para el campo magnético \mathbf{H}_1 , se tiene [15]:

$$\mathbf{H}_1 = \frac{-k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(D_n \mathbf{M}_{p1n}^{(1)} + iC_n \mathbf{N}_{i1n}^{(1)} \right), \quad (2-49)$$

donde k_1 es el número de onda en la esfera y μ_1 su permeabilidad.

La expansión en armónicos esféricos vectoriales para el campo eléctrico dispersado E_d , es por lo tanto [15]:

$$\mathbf{E}_d = \sum_{n=1}^{\infty} i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(iF_n \mathbf{N}_{p1n}^{(3)} - G_n \mathbf{M}_{i1n}^{(3)} \right) \quad (2-50)$$

y para el campo magnético \mathbf{H}_d :

$$\mathbf{H}_d = \frac{k_v}{\omega\mu_m} \sum_{n=1}^{\infty} i^n E_0 \frac{2n+1}{n(n+1)} \left(iG_n \mathbf{N}_{i1n}^{(3)} + F_n \mathbf{M}_{p1n}^{(3)} \right), \quad (2-51)$$

donde el superíndice (3) hace referencia a las funciones de Hankel como base para los armónicos esféricos vectoriales [15].

2.2. Aproximación dipolar

Al interactuar la luz con partículas, con forma arbitraria y que se encuentran inmersas en un medio homogéneo, se modifica la intensidad de la luz. Parte de la energía de la luz incidente es absorbida y la intensidad de luz que es transmitida se puede medir mediante su espectro óptico. La intensidad de luz que es absorbida depende de la geometría de cada tipo de partícula así como del material con que están hechas e incluso también se puede

distinguir la orientación y la forma de la partícula con respecto al campo electromagnético de la luz incidente [17].

Un método con el que se estudian los fenómenos de dispersión y absorción de la luz como resultado de su interacción con partículas de forma arbitraria inmersas en un medio homogéneo es la aproximación del dipolo discreto (DDA) [18]. La respuesta de un sistema a un campo electromagnético, se obtiene resolviendo la ecuación de Laplace para una esfera dieléctrica de radio a [16]. La esfera tiene permitividad ϵ_1 y se encuentra en un medio homogéneo de permitividad ϵ_m al que se le aplica un campo eléctrico externo uniforme \mathbf{E}_0 paralelo al eje Z de un sistema de coordenadas, como se muestra en la Fig. 2-2.

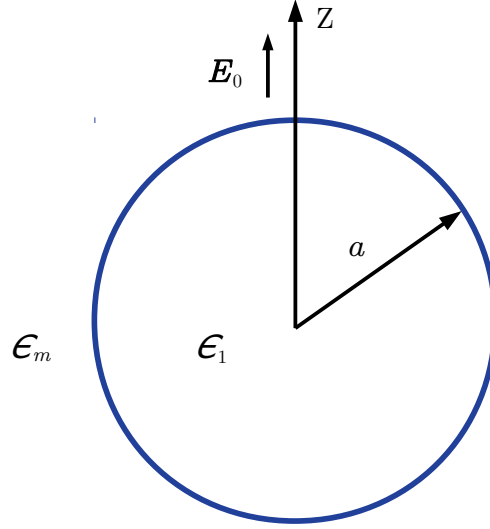


Fig. 2-2: Esfera dieléctrica de radio a y permitividad ϵ_1 inmersa en un medio homogéneo de permitividad ϵ_m a la que se le aplica un campo eléctrico uniforme \mathbf{E}_0 en la dirección del eje Z positivo.

La ecuación de Laplace en coordenadas esféricas es [16]:

$$\nabla^2 \Phi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = 0. \quad (2-52)$$

La Ec. (2-52) se resuelve a partir del método de separación de variables y, dado que el problema tiene simetría sobre el ángulo φ , la solución al potencial para la región al interior de la esfera Φ_i es [16]:

$$\Phi_i = \sum_{l=0}^{\infty} (A_{il} r^l + B_{il} r^{-(l+1)}) P_l(x). \quad (2-53)$$

donde $P_l(x)$ son los polinomios de Legendre de primer orden y grado l . Análogamente para el potencial fuera de la esfera Φ_e [16]:

$$\Phi_e = \sum_{l=0}^{\infty} (A_{el} r^l + B_{el} r^{-(l+1)}) P_l(x). \quad (2-54)$$

Al aplicar el campo eléctrico uniforme \mathbf{E}_0 a la esfera, ésta se polariza adquiriendo un momento dipolar. Se considera la aproximación donde sólo sobreviven los términos con $l = 1$ y entonces las Ecs. (2-53) y (2-54) se convierten en:

$$\Phi_i = \left(-A_i r + \frac{B_i}{r^2} \right) \cos \theta \quad (2-55)$$

y

$$\Phi_e = \left(-A_e r + \frac{B_e}{r^2} \right) \cos \theta. \quad (2-56)$$

Cuando la esfera se polariza, genera un campo eléctrico que afecta al campo eléctrico exterior. Sin embargo a

distancias lejanas de la esfera el campo sigue siendo uniforme, es decir, a medida que $r \rightarrow \infty$, $\mathbf{E}(r, \theta) = E_0 \hat{z}$ pero dado que $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ entonces significa que $E_z = E_0 = -\frac{\partial\Phi}{\partial z}$ de donde se obtiene que $\Phi = -E_0 z$ de ahí que la condición de frontera que se debe de cumplir es [16]:

$$\Phi_e \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -E_z = -E_0 r \cos \theta. \quad (2-57)$$

Como la superficie de la esfera resulta ser una superficie de discontinuidad entre el medio y el material dieléctrico de la esfera, las componentes tangenciales de \mathbf{E} y las componentes normales del vector de desplazamiento eléctrico \mathbf{D} son continuas, por lo que en función de \mathbf{E} , las condiciones de frontera resultan ser $\mathbf{n} \cdot (\epsilon_2 \mathbf{E}_2 - \epsilon_1 \mathbf{E}_1) = \sigma_f$ y $E_{2t} - E_{1t} = 0$, donde ϵ_2 y ϵ_1 son las permitividades de los medios 2 y 1, respectivamente, \mathbf{n} es un vector normal a la superficie de la esfera, E_{2t} y E_{1t} son las componentes tangenciales de los campos eléctricos \mathbf{E}_2 y \mathbf{E}_1 en los medios 2 y 1, respectivamente, y σ_f es la densidad superficial de carga libre [16].

Para este problema se tiene $\sigma_f = 0$ y si E_r y E_θ son las componentes normal y tangencial respectivamente, en términos de las derivadas de Φ y considerando la región 2 como la exterior y la 1 como la interior, las condiciones de frontera anteriores quedan expresadas como [16]:

$$-\epsilon_m \frac{\partial\Phi_e}{\partial r} \Big|_{r=a} = -\epsilon_1 \frac{\partial\Phi_i}{\partial r} \Big|_{r=a} \quad (2-58)$$

y

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial\Phi_e}{\partial\theta} \Big|_{r=a} = -\frac{1}{r} \frac{\partial\Phi_i}{\partial\theta} \Big|_{r=a}. \quad (2-59)$$

Falta encontrar los valores de las constantes A_i , B_i , A_e y B_e en las expresiones de los potenciales exterior e interior, Ecs. (2-55) y (2-56), lo que se obtiene aplicando las condiciones de frontera [16]. Usando la condición de frontera dada por la Ec. (2-57) para el potencial de la Ec. (2-56) y considerando que $r \rightarrow \infty$ el término $\frac{B_e}{r}$ tiende a cero, por lo que:

$$A_e = E_0. \quad (2-60)$$

Por lo que el potencial exterior Φ_e es:

$$\Phi_e = (-E_0 r + B_e r^{-2}) \cos \theta. \quad (2-61)$$

Para evitar la divergencia de la Ec. (2-55) cuando $r \rightarrow 0$, se escoge $B_i = 0$, por lo que [16]:

$$\Phi_i = -A_i r \cos \theta. \quad (2-62)$$

Aplicando la condición de frontera dada por la Ec. (2-58), se obtiene:

$$E_0 + 2B_e a^{-3} = \epsilon_r A_i, \quad (2-63)$$

donde $\epsilon_r = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_m}$ es la permitividad relativa.

Sustituyendo las Ecs. (2-61) y (2-62) en la condición a la frontera, Ec. (2-59), se tiene [16]:

$$E_0 - B_e a^{-3} = A_i. \quad (2-64)$$

De las Ecs. (2-63) y (2-64) se obtiene un sistema de ecuaciones que al despejar A_i de la Ec. (2-63) e igualarla con la Ec. (2-64), se tiene:

$$B_e = a^3 E_0 \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right). \quad (2-65)$$

Para encontrar el valor de A_i se multiplica la Ec. (2-64) por -2 se suma a la Ec. (2-63), por lo que se obtiene [16]:

$$A_i = \frac{3E_0}{\epsilon_r + 2}. \quad (2-66)$$

Los valores de las constantes A_i y B_e dados por las Ecs.(2-66) y (2-65), respectivamente, se sustituyen en las expresiones para los potenciales Φ_i y Φ_e dados por las Ecs. (2-62) y (2-61).

$$\Phi_e = -E_0 r \cos \theta + \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right) \frac{a^3 E_0}{r^2} \cos \theta \quad (2-67)$$

y

$$\Phi_i = - \left(\frac{3E_0}{\epsilon_r + 2} \right) r \cos \theta. \quad (2-68)$$

Las Ecs. (2-67) y (2-68) son los potenciales exterior Φ_e e interior Φ_i , de una esfera dieléctrica de radio a inmersa en un medio homogéneo, al que se le aplica un campo eléctrico uniforme \mathbf{E}_0 [16]. Mediante la relación $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ se puede calcular el campo eléctrico de la esfera. En particular para el campo eléctrico al interior de la esfera \mathbf{E}_i , se tiene:

$$\mathbf{E}_i = E_i \hat{\mathbf{z}} = -\nabla\Phi_i, \quad (2-69)$$

como $r \cos \theta = z$, entonces se obtiene [16]:

$$\mathbf{E}_i = \left(\frac{3}{\epsilon_r + 2} \right) \mathbf{E}_0. \quad (2-70)$$

donde $|\mathbf{E}_i| < |\mathbf{E}_0|$ pues $\epsilon_r > 1$. El campo eléctrico \mathbf{E}_i en el interior de la esfera es constante y paralelo al campo \mathbf{E}_0 , de manera que la esfera estará uniformemente polarizada [16].

Debido a la polarización de la esfera, el campo eléctrico exterior \mathbf{E}_e , se puede escribir en términos del momento dipolar [16]. La polarización se puede escribir como $\mathbf{P} = \chi_e \epsilon_0 \mathbf{E}$, donde la susceptibilidad eléctrica χ_e se relaciona con la permitividad relativa como $\epsilon_r = 1 + \chi_e$. En este caso se utiliza E_i de la Ec. (2-70) y la permitividad del medio ϵ_m , de donde resulta que la polarización \mathbf{P} es [16]:

$$\mathbf{P} = \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right) 3\epsilon_m \mathbf{E}_0. \quad (2-71)$$

La magnitud del momento dipolar total se obtiene al multiplicar la magnitud de la polarización por el volumen de la esfera $V = \frac{4\pi}{3}a^3$, esto es [16]:

$$p = 4\pi \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right) a^3 \epsilon_m E_0. \quad (2-72)$$

La Ec. (2-72) es el momento dipolar inducido en la esfera y es proporcional al campo eléctrico E_0 . El potencial exterior Φ_e dado por la Ec. (2-67) en términos del momento dipolar inducido p queda como [16]:

$$\Phi_e = -E_0 r \cos \theta + \frac{p}{4\pi\epsilon_m r^2} \cos \theta. \quad (2-73)$$

De acuerdo con la relación $\mathbf{E}_e = -\nabla\Phi_e$, al aplicar el gradiente en coordenadas esféricas, se llega a:

$$\mathbf{E}_e = E_0 \left(\cos \theta \hat{\mathbf{r}} - \sin \theta \hat{\boldsymbol{\theta}} \right) + \frac{1}{4\pi\epsilon_m} \left(\frac{2p \cos \theta}{r^3} \hat{\mathbf{r}} + \frac{p \sin \theta}{r^3} \hat{\boldsymbol{\theta}} \right). \quad (2-74)$$

El primer término del miembro derecho de la igualdad, en la Ec. (2-74) se refiere a las componentes del campo eléctrico uniforme \mathbf{E}_0 en coordenadas esféricas, mientras que los términos que están dentro del segundo paréntesis pertenecen al campo eléctrico de un dipolo, por lo que la expresión para el campo eléctrico exterior se puede reescribir como [16]:

$$\mathbf{E}_e = \mathbf{E}_0 + \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) - \mathbf{p}}{4\pi\epsilon_m r^3}. \quad (2-75)$$

Por tanto, al aplicar un campo uniforme \mathbf{E}_0 sobre una esfera, la esfera se polariza y crea un campo eléctrico como respuesta a \mathbf{E}_0 comportándose como un dipolo. En consecuencia, el campo externo \mathbf{E}_e es la superposición del

campo \mathbf{E}_0 más el campo de un dipolo eléctrico [16].

Ya que la esfera se comporta como un dipolo eléctrico entonces se puede suponer que oscila con una frecuencia angular $\omega = 2\pi\nu$, donde ν es la frecuencia por unidad de tiempo. Un dipolo eléctrico que oscila en movimiento armónico simple, es visto como un par de cargas positiva y negativa que aceleran y desaceleran [16]. De acuerdo con la teoría de Maxwell, al acelerar una carga eléctrica genera perturbaciones eléctricas y magnéticas en su medio, lo que se conoce como radiación electromagnética. Este es el mecanismo más sencillo de producción de una onda electromagnética. Por tanto, si los campos eléctrico y magnético que emite un dipolo se propagan a velocidad c , se escriben en el SI como [16]:

$$\mathbf{E} = -\frac{\mu_m p \omega^2}{4\pi} \left(\frac{\text{sen } \theta}{r} \right) \hat{\theta} \quad (2-76)$$

y para el campo \mathbf{H} [16]:

$$\mathbf{H} = -\frac{p \omega^2}{4\pi c} \left(\frac{\text{sen } \theta}{r} \right) \hat{\phi}. \quad (2-77)$$

Las Ecs. (2-76) y (2-77) son válidas a distancias lejanas del dipolo, cuando $k_v r \gg 1$, μ_m es la permeabilidad del medio y p es la magnitud del momento dipolar [16].

La energía que transporta la onda electromagnética dada por los dos campos eléctrico \mathbf{E} y magnético \mathbf{H} , Ecs. (2-76) y (2-77), se describe en términos del vector de Poynting \mathbf{S} , que se define como flujo de energía por unidad de tiempo por unidad de área y es perpendicular a la dirección en la que viaja la onda electromagnética, también se describe como potencia por unidad de área. El vector de Poynting se obtiene mediante el producto vectorial del campo eléctrico y magnético $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ y se expresa en unidades de J/m²s o W/m² del SI, donde la magnitud del vector de Poynting es la intensidad de la onda electromagnética [16].

Por tanto, la energía irradiada por un dipolo es [16]:

$$\mathbf{S} = \frac{\mu_m}{c} \left[\frac{p \omega^2}{4\pi} \left(\frac{\text{sen } \theta}{r} \right) \right]^2 \hat{r}. \quad (2-78)$$

Al promediar el vector de Poynting en el tiempo durante un ciclo completo, se obtiene su intensidad, es decir [16]:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \left(\frac{\mu_m p^2 \omega^4}{32\pi^2 c} \right) \frac{\text{sen}^2 \theta}{r^2} \hat{r}. \quad (2-79)$$

2.3. Modelo de Drude

Para determinar las propiedades ópticas de las nanopartículas, es necesario primero determinar la función dieléctrica para una partícula [15]. En el caso de los conductores, tienen una banda de valencia solapada con la de conducción, lo que les permite tener una mejor reflectancia y absorción de la luz para ciertas frecuencias comparados con los aislantes. Una de las características importantes de los conductores son los electrones libres que tienen [15].

Drude calculó la función dieléctrica de un material sólido partiendo del modelo del oscilador armónico amortiguado [15]. Cuando una onda electromagnética incide sobre un material, los electrones de los átomos son atraídos por el campo electromagnético en un sentido y los iones en sentido contrario. Pero como los iones son mucho más pesados que los electrones se puede suponer que permanecen inmóviles en un punto de equilibrio siendo únicamente los electrones los que se mueven (respecto del punto de equilibrio) y oscilando con cierta frecuencia. De la segunda ley de Newton la fuerza F_j para un j-ésimo electrón de carga e_j y masa m_{ej} , se tiene [15]:

$$F_j = m_{ej} a_j = m_{ej} \frac{d^2 X_j(t)}{dt^2}, \quad (2-80)$$

donde a_j es la aceleración y $X_j(t)$ es una función de la posición del j-ésimo electrón con respecto del tiempo. Por

otro lado, la fuerza total F_j asociada al j -ésimo electrón e_j , está dada por [15]:

$$F_j = F_{res} + F_a + F_e, \quad (2-81)$$

donde F_{res} es la fuerza de restitución o de un modelo de resorte de un oscilador armónico cuya constante es k_r . Si ω_j es la frecuencia de oscilación (o de resonancia) del electrón de carga e_j , entonces se tiene [15]:

$$F_{res} = -k_r X_j(t) = -m_{ej}\omega_j^2 X_j(t). \quad (2-82)$$

La fuerza de amortiguamiento F_a de la Ec. (2-81), está dada por [15]:

$$F_a = -m_{ej}\gamma_j \frac{dX_j(t)}{dt}, \quad (2-83)$$

donde γ_j es la constante de amortiguamiento para el electrón e_j .

Finalmente, la fuerza eléctrica F_e de la Ec. (2-81), está dada por [15]:

$$F_e = e_j E_0 \cos(\omega t), \quad (2-84)$$

donde E_0 es la amplitud del campo eléctrico de la onda incidente y ω es su frecuencia, por lo que para la Ec. (2-81), se obtiene [15]:

$$m_{ej} \frac{d^2 X_j(t)}{dt^2} = -m_{ej}\omega_j^2 X_j(t) - m_{ej}\gamma_j \frac{dX_j(t)}{dt} + e_j E_0 e^{-i\omega t}. \quad (2-85)$$

La Ec. (2-85) es la ecuación diferencial de movimiento que describe el desplazamiento de los electrones ligados a los átomos del material que se produce al aplicar un campo eléctrico incidente E_0 . La solución a esta ecuación diferencial que se propone es [15]:

$$X_j(t) = X_{0j} e^{-i\omega t}, \quad (2-86)$$

donde X_{0j} es la posición inicial del electrón j -ésimo ligado. Al sustituir la Ec. (2-86) en la Ec. (2-85) y despejar el valor de X_{0j} se encuentra que [15]:

$$X_{0j} = \frac{e_j}{m_{ej}(-\omega^2 - i\omega\gamma_j + \omega_j^2)} E_0. \quad (2-87)$$

El electrón, que tiene un movimiento de oscilador armónico mientras permanece fijo el núcleo positivo del átomo y forma un dipolo eléctrico oscilante cuyo momento dipolar eléctrico, de acuerdo con las Ecs. (2-86) y (2-87), es [15]:

$$p_j(t) = e_j X_j(t) = \frac{e_j^2}{m_{ej}(-\omega^2 - i\omega\gamma_j + \omega_j^2)} E_0 e^{-i\omega t}. \quad (2-88)$$

La polarización neta macroscópica P , para N cargas en un volumen V es [15]:

$$P = \frac{N}{V} \sum_{j=1} p_j = \frac{1}{V} \sum_{j=1} N_j e_j X_j(t) = \frac{1}{V} \sum_{j=1} N_j \frac{e_j^2}{m_{ej}(-\omega^2 - i\omega\gamma_j + \omega_j^2)} E_0 e^{-i\omega t}. \quad (2-89)$$

Por otra parte, por definición, se tiene que [16]:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E}. \quad (2-90)$$

De manera que la susceptibilidad eléctrica relacionada a los electrones ligados χ_{eb} , es [15]:

$$\chi_{eb} = \frac{1}{V} \sum_{j=1} \frac{N_j}{\epsilon_0 m_{ej}} \left(\frac{e_j^2}{-\omega^2 - i\omega\gamma_j + \omega_j^2} \right). \quad (2-91)$$

Por definición $\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi\chi_e$ y usando la Ec. (2-91), la función dieléctrica para los electrones ligados $\epsilon_b(\omega)$ es [15]:

$$\epsilon_b(\omega) = 1 + 4\pi\chi_{eb} = 1 + \frac{1}{V} \sum_{j=1} \frac{4\pi N_j e_j^2}{m_{ej}} \left(\frac{1}{-\omega^2 - i\omega\gamma_j + \omega_j^2} \right). \quad (2-92)$$

Definiendo el cuadrado de la frecuencia de plasma ω^2 como [15]:

$$\omega_{pj}^2 = \frac{4\pi N_j e_j^2}{Vm_{ej}}. \quad (2-93)$$

Al sustituir la Ec. (2-93) en la Ec. (2-92), la función dieléctrica $\epsilon_b(\omega)$ queda entonces de la forma [15]:

$$\epsilon_b(\omega) = 1 + \sum_{j=1} \frac{\omega_{pj}^2}{(-\omega^2 - i\gamma_j\omega + \omega_j^2)}. \quad (2-94)$$

La función dieléctrica de la Ec. (2-94) está relacionada con los electrones ligados a los átomos (también llamada función dieléctrica intrabanda). Sin embargo los metales se caracterizan por tener una banda de conducción parcialmente llena de electrones libres. Por este motivo es importante tomar en cuenta su contribución para la función dieléctrica [15].

De manera similar a como se calculó la función dieléctrica para los electrones ligados $\epsilon_b(\omega)$, se tiene una ecuación de movimiento como en la Ec. (2-85). Por tratarse de electrones libres la constante de restitución k_r es igual a cero y la ecuación de movimiento se escribe como [15]:

$$\frac{d^2 X(t)}{dt^2} + \gamma_f \frac{dX(t)}{dt} = \frac{e}{m_e} E_0 e^{-i\omega t}. \quad (2-95)$$

Al proponer una solución de la forma [15]:

$$X(t) = X_0 e^{-i\omega t}, \quad (2-96)$$

y sustituyendo en la Ec. (2-95), se encuentra que la susceptibilidad eléctrica relacionada a los electrones libres χ_{ef} es [15]:

$$\chi_{ef} = -\frac{Ne^2}{Vm_e} \left(\frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma_f} \right). \quad (2-97)$$

Por tanto $\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi\chi_e$ y usando la Ec.(2-97), se tiene [15]:

$$\epsilon_f(\omega) = 1 + 4\pi\chi_{ef} = 1 - \frac{4\pi Ne^2}{Vm_e} \left(\frac{1}{\omega^2 + i\omega\gamma_f} \right), \quad (2-98)$$

y usando la definición de frecuencia de plasma, Ec. (2-93), entonces [15]:

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi Ne^2}{Vm_e}. \quad (2-99)$$

Por lo tanto, al sustituir la Ec. (2-99) en la Ec. (2-98) para la función dieléctrica para electrones libres $\epsilon_f(\omega)$, se obtiene [15]:

$$\epsilon_f(\omega) = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma_f\omega} \right). \quad (2-100)$$

La Ec. 2-100 tiene una parte real y una imaginaria [15]:

$$\epsilon_f(\omega) = \epsilon'_f(\omega) + i\epsilon''_f(\omega), \quad (2-101)$$

donde

$$\epsilon'_f(\omega) = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma_f^2} \right). \quad (2-102)$$

La parte imaginaria de la función $\epsilon_f(\omega)$ en la Ec. (2-101) está relacionada con la absorción del metal expresada como [15]:

$$\epsilon_f''(\omega) = \frac{\omega_p^2 \gamma_f}{\omega(\omega^2 + \gamma_f^2)}. \quad (2-103)$$

La función dieléctrica general $\epsilon(\omega)$ se compone de un término que es la contribución de los electrones libres y otro término que se refiere a la contribución de los electrones ligados, esto es:

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi\chi_e = 1 + 4\pi(\chi_{ef} + \chi_{eb}), \quad (2-104)$$

es decir [15]:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \left(\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma_f} \right) + \sum_{j=1} \frac{\omega_{pj}^2}{(-\omega^2 - i\gamma_j\omega + \omega_j^2)}. \quad (2-105)$$

Si el tamaño de la nanopartícula es menor que el camino libre medio del electrón, los electrones colisionan con los bordes de la partícula reduciendo su camino libre medio. La constante de amortiguamiento para electrones libres γ_f está relacionada con el camino libre medio y se ve afectada por el tamaño de la nanopartícula [15]. Por esta razón se hace una corrección de tamaño para la parte de la función dieléctrica en la que contribuyen los electrones libres que depende del tamaño de la esfera. Para nanopartículas esféricas de radio a , se tiene [15]:

$$\gamma_f = \gamma_{macro} + \gamma(a). \quad (2-106)$$

El término γ_{macro} se refiere al mismo factor que en el sistema macroscópico mientras que $\gamma(a)$ es el factor de amortiguamiento que depende del radio de la esfera expresado por [15]:

$$\gamma(a) = \frac{3v_F}{4a}, \quad (2-107)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi del metal.

La función dieléctrica $\epsilon(\omega)$, que depende del tamaño de la nanopartícula, se puede escribir como [15]:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \left(\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega[\gamma_{macro} + \gamma(a)]} \right) + \sum_{j=1} \frac{\omega_{pj}^2}{(-\omega^2 - i\gamma_j\omega + \omega_j^2)}. \quad (2-108)$$

Al disminuir el radio de la nanopartícula, mayor es el amortiguamiento y en consecuencia el camino libre medio disminuye dando una mayor contribución a la parte de los espectros de absorción [15].

2.4. Sección eficaz de absorción, extinción y dispersión

Cuando incide un haz de luz sobre un medio, esta puede ser dispersada por las partículas que hay dentro del material. Si las partículas se consideran esféricas y dependiendo de su tamaño con respecto a la longitud de onda incidente, el campo electromagnético del haz de luz incidente puede inducir un momento dipolar en cada partícula. Los dipolos oscilarán a la misma frecuencia de oscilación del campo electromagnético de la luz incidente emitiendo radiación electromagnética en todas direcciones, lo que genera un campo electromagnético [16]. El campo total en una dirección específica se obtiene a partir de la superposición de los campos causados por la radiación de cada dipolo y del campo externo. Al campo emitido por la radiación de los dipolos se le llama onda dispersada [15].

Cuando la separación de las partículas es lo suficientemente grande, el campo total dispersado es la suma de los campos dispersados por las partículas individuales, sin que el campo de cada partícula se vea afectado por el campo de las partículas vecinas. A esto se le llama dispersión independiente [15]. Para que se considere dispersión independiente, la distancia entre partículas debe ser de por lo menos tres veces el radio de la partícula [15].

Para que las partículas esféricas del medio puedan polarizarse cuando se hace incidir un campo electromagnético en el material, se requiere que haya movimiento de las cargas eléctricas que conforman a la partícula esférica, de

esta manera, existe un efecto disipativo o efecto Joule que origina una pérdida de energía con respecto a la energía de la luz incidente. Este proceso se denomina absorción disipativa [15].

Como los dipolos oscilan a la misma frecuencia que los campos electromagnéticos de la luz incidente, entonces la frecuencia de la luz dispersada es la misma que la de la luz incidente, lo que se conoce como dispersión coherente [15].

Aquella luz que atraviesa un medio homogéneo no sufre dispersión (en la práctica ningún material es perfectamente homogéneo, por lo que al referirse a este término se quiere decir que la heterogeneidad de las partículas es pequeña comparada con la longitud de onda incidente), es decir, la dispersión se debe a la heterogeneidad del material [15]. Por el contrario, para la luz que sí sufre dispersión en un material, esta puede ir acompañada de la absorción. Tanto el proceso de absorción como el de dispersión restan energía del haz de luz original atenuándolo. A esta atenuación se le llama extinción [15].

$$\text{Extinción} = \text{Dispersión} + \text{Absorción}.$$

Si se considera la luz como un campo eléctrico \mathbf{E}_0 y magnético \mathbf{H}_0 que incide en un medio no absorbente y en el cual se encuentra inmersa una partícula esférica de radio a , se puede construir una esfera imaginaria de radio r alrededor de la partícula, tal como se muestra en la Fig. 2-3.

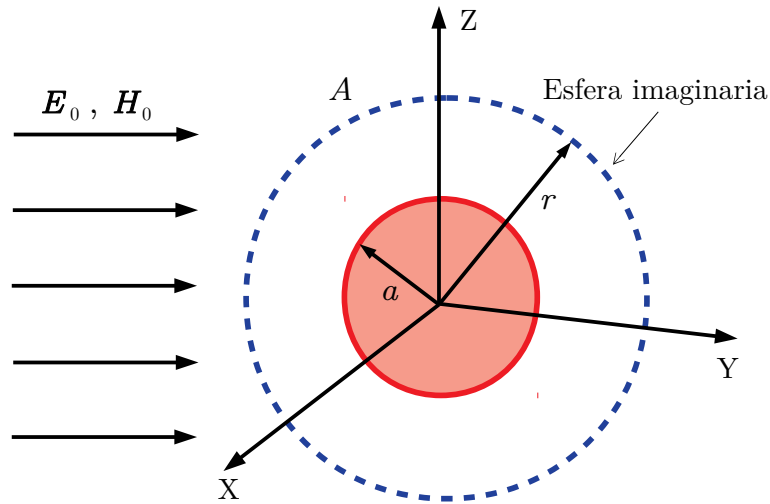


Fig. 2-3: Extinción de un campo electromagnético incidente (\mathbf{E}_0 , \mathbf{H}_0) debido a una partícula esférica de radio a [15].

De acuerdo con el teorema de Poynting, la energía W por unidad de tiempo es igual al flujo del vector de Poynting que pasa por una superficie arbitraria A , por lo que se tiene [15]:

$$W_0 = - \oint_A \langle \mathbf{S}_0 \rangle \cdot d\mathbf{a}, \quad (2-109)$$

$$W_{dis} = - \oint_A \langle \mathbf{S}_{dis} \rangle \cdot d\mathbf{a}, \quad (2-110)$$

$$W_{ext} = - \oint_A \langle \mathbf{S}_{ext} \rangle \cdot d\mathbf{a}, \quad (2-111)$$

donde W_0 , W_{dis} y W_{ext} son las energías por unidad de tiempo incidente, de dispersión y de extinción, respectivamente. El vector de Poynting promediado en el tiempo para el campo incidente, dispersado y de extinción, están dados por [15]:

$$\langle \mathbf{S}_0 \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} (\mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0^*), \quad (2-112)$$

$$\langle \mathbf{S}_{dis} \rangle = \frac{1}{2} Re(\mathbf{E}_{dis} \times \mathbf{H}_{dis}^*), \quad (2-113)$$

$$\langle \mathbf{S}_{ext} \rangle = \frac{1}{2} Re(\mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_{dis}^*) + \frac{1}{2} Re(\mathbf{E}_{dis} \times \mathbf{H}_0^*), \quad (2-114)$$

donde \mathbf{E}_{dis} y \mathbf{H}_{dis} son los campos eléctrico y magnético de la luz dispersada por la partícula.

Si W_{abs} es la energía que es absorbida dentro de la esfera entonces se puede escribir como [15]:

$$W_{abs} = W_0 - W_{dis} + W_{ext}, \quad (2-115)$$

donde $W_{abs} > 0$ y significa que la energía es absorbida dentro de la esfera. Sin embargo al sustituir las integrales de las Ecs. (2-109), (2-110) y (2-111) en la Ec. (2-115), la integral de $\langle \mathbf{S}_0 \rangle$ se anula puesto que la fuente que origina el campo incidente no se encuentra en el interior de la superficie. En consecuencia la Ec. (2-115) queda expresada como:

$$W_{abs} = \left(- \oint_A \langle \mathbf{S}_{ext} \rangle \cdot d\mathbf{a} \right) + \left(\oint_A \langle \mathbf{S}_{dis} \rangle \cdot d\mathbf{a} \right), \quad (2-116)$$

en consecuencia [15]:

$$W_{abs} = W_{ext} - W_{dis}. \quad (2-117)$$

Los términos de la Ec. (2-117) son positivos. Si cada uno de ellos se divide entre la intensidad I_0 de la onda electromagnética incidente, donde $I_0 = \langle \mathbf{S}_0 \rangle$, se tiene [15]:

$$C_{abs} = \frac{W_{abs}}{I_0}, \quad (2-118)$$

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_0}, \quad (2-119)$$

$$C_{dis} = \frac{W_{dis}}{I_0}. \quad (2-120)$$

Las cantidades C_{abs} , C_{ext} y C_{dis} son la sección eficaz de absorción, extinción y dispersión, respectivamente. De acuerdo con la Ec. (2-117) y por conservación de la energía, los tres términos anteriores se relacionan como sigue [15]:

$$C_{abs} = C_{ext} - C_{dis}. \quad (2-121)$$

Las secciones eficaces tienen dimensiones de área y en general dependen de la orientación de la partícula y del estado de polarización de la luz incidente, pero si la partícula es esférica, las secciones eficaces son totalmente independientes de la orientación y del estado de polarización. Cuando no hay absorción de la luz por las partículas entonces $C_{ext} = C_{disp}$ [15].

En el caso de las partículas esféricas inmersas un material dieléctrico cuyos campos magnéticos y eléctricos radiados por ellas están dados por las Ecs. (2-76) y (2-77) de la sección 2.2, las secciones eficaces de absorción C_{abs} , extinción C_{ext} y dispersión C_{dis} , son [15]:

$$C_{abs} = k_v Im[\alpha] = 4\pi a^3 k_v Im \left[\frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \right], \quad (2-122)$$

$$C_{ext} = k_v Im[\alpha] = 4\pi a^3 k_v Im \left[\frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \right], \quad (2-123)$$

$$C_{dis} = \frac{k_v^4}{6\pi} |\alpha|^2 = \frac{8\pi}{3} k_v^4 a^6 \left[\frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \right]^2, \quad (2-124)$$

donde k_v es el número de onda $k_v = \frac{2\pi}{\lambda}$, a el radio de la partícula esférica y α es la polarizabilidad. De la Ec. (2-72) y al comparar con $\mathbf{p} = \alpha\epsilon_m\mathbf{E}_0$, entonces la polarizabilidad α es [15]:

$$\alpha = 4\pi a^3 \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_m}{\epsilon_1 + 2\epsilon_m} \right). \quad (2-125)$$

Es importante mencionar que el máximo de la sección se encuentra cuando la polarizabilidad es máxima, es decir, cuando $\epsilon_1 = -2\epsilon_m$ [15].

Al dividir las secciones eficaces entre la sección geométrica transversal G de la partícula dispersora, se obtienen los factores de eficiencia de absorción, extinción y dispersión. Para una partícula esférica de radio a , se tiene que $G = \pi a^2$, donde los factores de eficiencia de absorción Q_{abs} , extinción Q_{ext} y dispersión Q_{dis} , son [15]:

$$Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{G} = \frac{C_{abs}}{\pi a^2}, \quad (2-126)$$

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{G} = \frac{C_{ext}}{\pi a^2}, \quad (2-127)$$

$$Q_{dis} = \frac{C_{dis}}{G} = \frac{C_{dis}}{\pi a^2}. \quad (2-128)$$

2.4.1. Absorbancia

Una vez que se hace pasar un haz de luz de intensidad I_0 a través de un material transparente de grosor x y que ocurren los procesos de dispersión y absorción, la luz sale atenuada (extinción) y experimentalmente, a través de un detector, se mide la intensidad I de la luz transmitida.

La ley de Lambert-Beer establece que la cantidad de energía, luz absorbida o transmitida por un material es función exponencial de la concentración de un material absorbente presente y de la longitud de la trayectoria hacia la muestra. Matemáticamente se escribe [14]:

$$\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = -\mu_{ext} x c_{abs}, \quad (2-129)$$

donde c_{abs} es la concentración de especies absorbentes en el material, μ_{ext} es el coeficiente de extinción y es característica de cada especie absorbente evaluada a una longitud de onda determinada y x es el grosor del material.

De la Ec. (2-129) se define el término de transmitancia τ como la razón entre la intensidad de la luz transmitida I y la luz incidente I_0 , esto es [14]:

$$\tau = \frac{I}{I_0}. \quad (2-130)$$

La absorbancia η se define como el logaritmo de la intensidad incidente I_0 entre la intensidad transmitida I o de la relación inversa de la transmitancia τ , esto es [14]:

$$\eta = \log_{10} \left(\frac{I_0}{I} \right) = \mu_{ext} x c_{abs}. \quad (2-131)$$

Al graficar la absorbancia η o la transmitancia τ en función de la longitud de onda λ , se obtiene un espectro de absorción. Es preferible emplear la Ec. (2-131) de la absorbancia en vez de la transmitancia, ya que la absorbancia está relacionada linealmente con la concentración y la densidad óptica [14].

La intensidad de luz transmitida I se expresa como [14]:

$$I = I_0 e^{-\mu_{ext} x}. \quad (2-132)$$

Es importante mencionar que tanto la transmitancia τ como la absorbancia η no tienen unidades y además el coeficiente de extinción μ_{ext} depende de la longitud de la onda de radiación así como de la estructura electrónica

de la muestra; por lo que al analizar el coeficiente de extinción en función de la energía del haz incidente, es posible obtener información sobre la estructura electrónica del material [14].

En caso de que la luz atravesase un material dieléctrico que contenga partículas esféricas metálicas de radio a en su interior, es posible asociar el coeficiente de atenuación lineal o de extinción óptica μ_{ext} con las secciones eficaces a partir de la Ec. (2-121).

$$\mu_{ext} = N_a C_{ext} = N_a (C_{abs} + C_{dis}), \quad (2-133)$$

donde N_a es el número de partículas esféricas por unidad de área [14]. Según la ley de Lambert-Beer, la intensidad de luz ΔI_{ext} perdida al atravesar el material dieléctrico está dado por [14]:

$$\Delta I_{ext} = I_0 (1 - e^{-N_a C_{ext} x}). \quad (2-134)$$

Si además en cada partícula esférica existen N átomos, entonces [9]:

$$N = N_v \frac{4}{3} \pi a^3, \quad (2-135)$$

donde N_v es la densidad atómica del material por unidad de volumen. Al hacer el producto de N con N_a , se obtiene [14]:

$$\Phi_0 = N N_a, \quad (2-136)$$

donde Φ_0 es la afluencia y se define como el número total de átomos implantados por unidad de área para alguna muestra.

3. Interacción de pulsos cortos de láser con materia

En el capítulo anterior se hizo una descripción sobre los campos electromagnéticos de la luz incidente y dispersada por una partícula esférica inmersa en un medio lineal, isotrópico y homogéneo. Sin embargo una parte de la energía de la luz incidente es absorbida por el material. Cuando la energía es lo suficientemente alta, se difunde y puede causar modificaciones en el material. Una forma de describir el proceso de difusión de la energía absorbida es a través de la ecuación de difusión del calor.

3.1. Ecuación de difusión del calor

El matemático francés Joseph Fourier encontró que la manera en que se distribuye el flujo de calor en una región de un material sólido a lo largo del tiempo puede ser descrita a través de la ecuación de difusión del calor [19]. La ecuación de difusión del calor es una ecuación diferencial parcial de segundo orden que permite determinar la temperatura de un cuerpo conociendo la temperatura en su frontera [19].

Sea $T(x, y, z, t)$ una función de clase C^2 la cual representa la temperatura de un cuerpo al tiempo t . De acuerdo con la ley de Fourier el vector de flujo de energía es proporcional al gradiente de la temperatura T , esto es [19]:

$$\mathbf{J} = -\kappa \nabla T. \quad (3-1)$$

En general, el gradiente de cualquier función (en este caso ∇T) siempre apunta en la dirección de máximo crecimiento de la función. Sin embargo, puesto que el calor fluye de zonas de mayor temperatura a zonas de menor temperatura, se le agrega un signo menos a la Ec. (3-1) y en donde κ es una constante llamada conductividad térmica [19].

Si el cuerpo del que se quiere describir su temperatura es homogéneo e isotrópico entonces la densidad de masa ρ_0 es constante y la energía por unidad de volumen, es decir, su densidad de energía ρ estaría dada por [19]:

$$\rho = c_p \rho_0 T, \quad (3-2)$$

donde c_p es el calor específico a presión constante.

La tasa de cambio de la energía total sobre el volumen V que encierra una superficie A del cuerpo es igual a la energía que fluye hacia dentro de V por unidad de área y por unidad de tiempo, es decir [16]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = - \oint_A \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (3-3)$$

donde la integral del miembro derecho de la ecuación se denomina flujo de \mathbf{J} y lleva signo negativo porque va hacia dentro de la superficie A [16]. No obstante, se puede reescribir el miembro izquierdo de la ecuación anterior de la siguiente manera:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV. \quad (3-4)$$

Usando el teorema de la divergencia en el miembro derecho de la Ec. (3-3), se tiene [16]:

$$\oint_A \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} dA = \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} dV. \quad (3-5)$$

Al sustituir las Ecs. (3-4) y (3-5) en la Ec. (3-3), se obtiene:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} dV.$$

entonces:

$$\oint_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} \right) dV = 0.$$

Es decir, se obtiene la ecuación de continuidad [16]:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (3-6)$$

Al sustituir el flujo de energía \mathbf{J} dado por la Ec. (3-1) y la densidad de energía ρ constante dada por la Ec. (3-2) en la Ec. (3-6) de continuidad, se obtiene [19]:

$$\nabla(-\kappa \nabla T) + \frac{\partial(c_p \rho_0 T)}{\partial t} = 0.$$

entonces:

$$c_p \rho_0 \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T.$$

En consecuencia [19]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_d \nabla^2 T, \quad (3-7)$$

donde $\alpha_d = \frac{\kappa}{c_p \rho_0}$ es el coeficiente de difusividad y se expresa en unidades de m^2/s del SI. La Ec. (3-7) es la ecuación de difusión del calor [19]. Para diferencias finitas de calor y de temperatura, se tiene [19]:

$$\Delta Q = m c_p \Delta T, \quad (3-8)$$

donde m es la masa del material.

Para el caso estacionario, en donde T no cambia con el tiempo, la ecuación de difusión $\nabla^2 T = 0$ se convierte en la ecuación de Laplace [19].

3.1.1. Solución de la ecuación de difusión del calor para el plano infinito

Mediante la ecuación de difusión del calor puede obtenerse la distribución de temperaturas T en función del tiempo t cuando se tiene una fuente que suministra calor a una superficie de plano infinito, por lo que la Ec. (3-7) en coordenadas cartesianas se expresa como [20]:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_d} \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (3-9)$$

Para un punto x' que pertenece al plano infinito, la solución está dada por [20]:

$$T(x, x', t) = \frac{Q}{8(\pi \alpha_d t)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4\alpha_d t}}. \quad (3-10)$$

donde Q es la cantidad de calor suministrado. En la región infinita la cantidad total de calor en el eje X está dada por:

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_0 c_p T(x, x', t) dx = \frac{Q \rho_0 c_p}{8(\pi \alpha_d t)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x')^2}{4\alpha_d t}} dx = \rho c_p. \quad (3-11)$$

Para un depósito finito de calor instantáneo, entonces $t \rightarrow 0$ en la Ec. (3-10) y por tanto $T(x, x', t)$ tiende a cero en todos los puntos excepto en x' , en donde se vuelve infinita, es decir:

$$T(x, x', 0) = \frac{Q}{\rho_0 c_p} \delta(x - x'). \quad (3-12)$$

La Ec. (3-10) se puede reescribir en términos del argumento $\theta' = \alpha_d t$, de donde se obtiene [20]:

$$T(x, x', \theta') = \frac{1}{2\sqrt{\pi\theta'}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4\theta'}}. \quad (3-13)$$

Al graficar la temperatura de la Ec. (3-13) como función de $x - x'$, se obtiene una gráfica con curvas cuyo comportamiento es gaussiano cuando se tiene un depósito instantáneo de energía, para diferentes valores del argumento θ' . La gráfica se muestra en la Fig. 3-1.

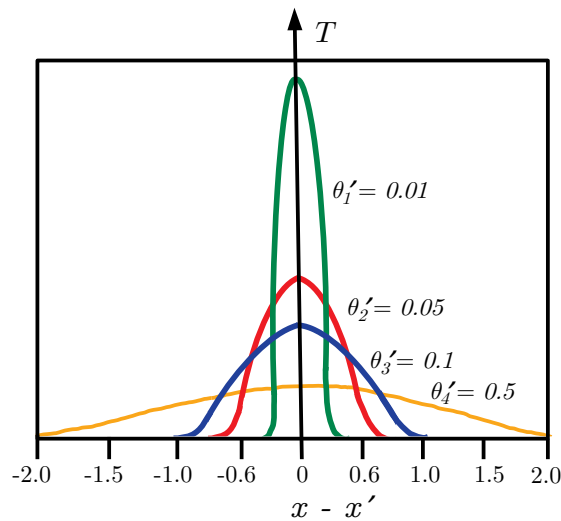


Fig. 3-1: Gráfica que muestra el comportamiento gaussiano de la temperatura T como función de $x - x'$ para diferentes valores del argumento $\theta' = \alpha_d t$, en el caso de un depósito finito instantáneo de energía.

3.1.2. Solución de la ecuación de difusión del calor para el caso esférico

Si lo que se tiene es una superficie esférica, con una fuente de calor Q al tiempo t , la ecuación de difusión del calor expresada en coordenadas esféricas es [20]:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \kappa \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \rho_0 c_p \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (3-14)$$

En este caso por tener simetría angular, se anulan los términos del laplaciano que dependen de las coordenadas ϕ y θ [20].

Al proponer T de la forma $T(r, r', t) = \frac{U(r, r', t)}{r}$ y sustituirla en la Ec. (3-14), se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = \frac{1}{\alpha_d} \frac{\partial U}{\partial t}, \quad (3-15)$$

donde $\frac{1}{\alpha_d} = \frac{\rho_0 c_p}{\kappa}$. La Ec. (3-15) es de la misma forma que la Ec. (3-9), por lo que la solución para el punto r' está dada por:

$$T(r, r', t) = \frac{U(r, r', t)}{r} = \frac{Q}{8r(\pi\alpha_d t)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(r-r')^2}{4\alpha_d t}}. \quad (3-16)$$

La Ec. (3-16) también tiene un comportamiento gaussiano. Para un depósito finito de calor instantáneo $t \rightarrow 0$, por lo que T también tiende a cero excepto en r' donde se vuelve infinita, de manera que lo que se obtiene es una delta de Dirac, es decir [20]:

$$T(r, r', 0) = \frac{U(r, r', 0)}{r} = \frac{Q}{r\rho_0c_p}\delta(r - r'). \quad (3-17)$$

3.2. Aplicación de la ecuación de difusión del calor a la interacción de pulsos cortos de láser con materia

De las Ecs. (3-10) y (3-16) se obtiene el ancho de la distribución de la temperatura dado por l [21]:

$$l = \sqrt{\frac{\kappa t}{\rho_0 c_p}}, \quad (3-18)$$

donde l es el parámetro conocido como longitud de difusión térmica y mide cuánto ha viajado el calor después de un tiempo t , es decir, es el que caracteriza todo el proceso de difusión.

En particular, cuando el calor es depositado a través de pulsos cortos de láser resulta importante calcular la longitud de difusión, en donde el tiempo es igual a la duración del pulso. Por ejemplo, la conductividad térmica para el zafiro es [22] $\kappa = 40$ W/mK, el calor específico del zafiro es $c_p = 750$ J/KgK y su densidad $\rho_0 = 3,985$ Kg/m³, entonces para un pulso de láser cuyo tiempo de duración es de 6 ns y de acuerdo con la Ec. (3-18) se tiene una longitud de difusión térmica de 283 nm. Esta longitud de difusión térmica resulta ser mucho mayor que la separación entre las nanopartículas formadas en las muestras de zafiro sintético para esta tesis, por lo que resultaría más conveniente utilizar la Ec. (3-9) de difusión del calor unidimensional para el plano infinito en vez de la Ec. (3-14) de difusión del calor esférica. Además es importante recordar que la conductividad térmica y la capacidad calorífica son parámetros que dependen de la temperatura, por lo que un tratamiento más apropiado sería la solución numérica de las ecuaciones, lo cual resulta más allá del alcance de esta tesis.

4. Procedimiento Experimental

4.1. Implantación de iones

Para poder producir nanopartículas de oro en las muestras de zafiro sintético se utilizó la técnica de implantación iónica. Esta técnica consiste en acelerar los iones de un haz hasta alcanzar una energía suficientemente alta que permita que los iones penetren en el interior de una muestra o sustrato a la que se denomina matriz.

Para acelerar los iones se requiere de un acelerador. En este caso se utilizó el acelerador que se encuentra en el Instituto de Física de la UNAM, el Pelletron[®] de 3MV tipo tándem, modelo 9SDH-2 construido por la National Electrostatic Corp (NEC) [23]. Este equipo consta de tres partes: una fuente generadora de iones, un tubo de aceleración y la salida que se divide en dos: una es la cámara de implantación y la otra es la línea de análisis [23].

La fuente que se utiliza para generar iones de cualquier elemento sólido se llama SNICS (Secondary Negative Ion by Cesium Sputtering). Para ello se coloca en un electrodo (cátodo) el material cuyos iones se desean obtener. Entre este electrodo y una superficie ionizante a alta temperatura se introduce vapor de cesio cuyos átomos son ionizados por la superficie de alta temperatura. Una vez ionizados, los átomos son atraídos hacia el cátodo. Las colisiones de los iones de cesio con los átomos de la superficie del material que se encuentra en el cátodo provocan que éstos últimos se desprendan del material, es decir, los iones de cesio erosionan el material que se encuentra en el cátodo [23].

Los iones expulsados del cátodo recogen electrones del vapor de cesio emergiendo con carga negativa. Estos iones se extraen de la fuente mediante una diferencia de potencial de entre 50 a 60 keV. Para poder pasar al tubo de aceleración se requiere que antes se haga una selección de los iones. Mediante un electroimán inyector se dirige el haz de iones y se focaliza mediante dos placas deflectoras en un plano XY perpendicular a la dirección del haz mientras en la consola de control con un BPM (Beam Profile Monitor) se monitorea y se realiza la selección del haz. A través de una caja de Faraday es posible medir la intensidad de corriente antes de permitir que el haz entre al tubo acelerador del Pelletron[®] [23]. El diagrama del sistema del Pelletron[®] se muestra en la Fig. 4-1.

Una vez seleccionado el haz, los iones se inyectan al tubo acelerador por un extremo en el que se encuentran un conjunto de anillos equipotenciales. Las diferencias de potencial con valores positivos que se generan en los anillos equipotenciales van aumentando conforme el haz va entrando al interior del tubo. Tomando en cuenta que los iones están cargados negativamente y que el alto voltaje del acelerador es positivo, los iones tienen una primera etapa de aceleración.

La terminal de alto voltaje se carga mediante pequeñas barras de metal llamadas *pellets*, de ahí el nombre Pelletron del acelerador, cuya función es almacenar carga eléctrica. Los *pellets* son transportados por cadenas y tienen la misma función que las bandas aislantes de los aceleradores Van der Graaff pero con mayor eficiencia, debido a que la diferencia de potencial en la terminal es más estable [23].

Dentro del tanque acelerador hay una región que atraviesan los iones y que contiene gas nitrógeno conocida como *stripping* [23]. Ahí los iones son desprovistos de sus cargas negativas convirtiéndose en iones positivos. En consecuencia los iones, ahora cargados positivamente, son repelidos por la terminal de alto voltaje y entran a una segunda etapa de aceleración.

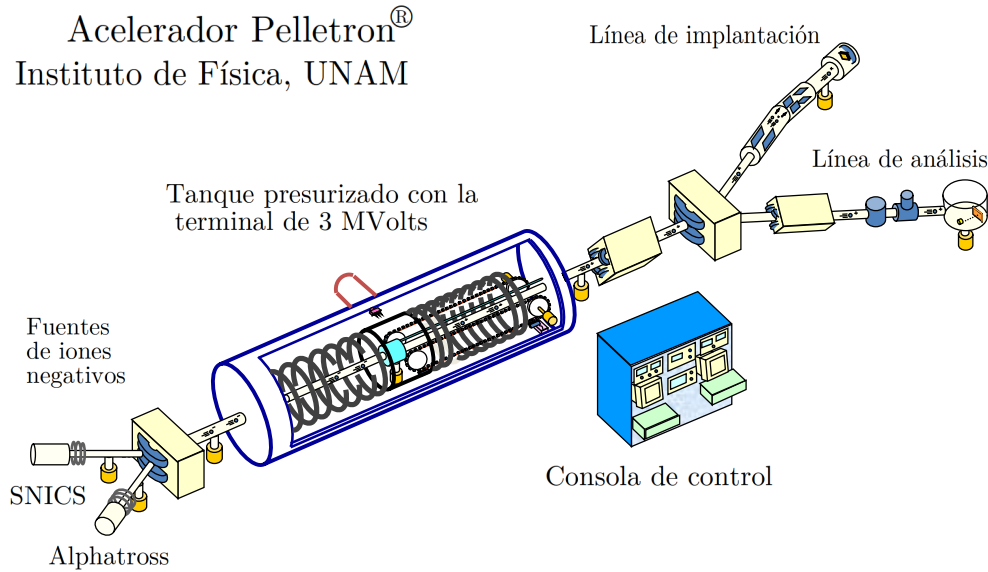


Fig. 4-1: Sistema del acelerador del Pelletron[®] en el Instituto de Física de la UNAM utilizado en procesos de implantación y técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford.

En la primera etapa de aceleración, la terminal tiene una diferencia de potencial denotada como V y si los iones negativos que llegan a ella tienen carga $-e$, entonces su energía cinética será eV . Sin embargo en la segunda etapa de aceleración, si n es el número de cargas positivas de los iones, entonces su energía cinética es neV . Por lo tanto, la energía cinética total es la suma de las energías cinéticas de las dos etapas, resultando ser $(1 + n)eV$.

El esquema del sistema de aceleración en dos etapas se muestra en la Fig. 4-2.

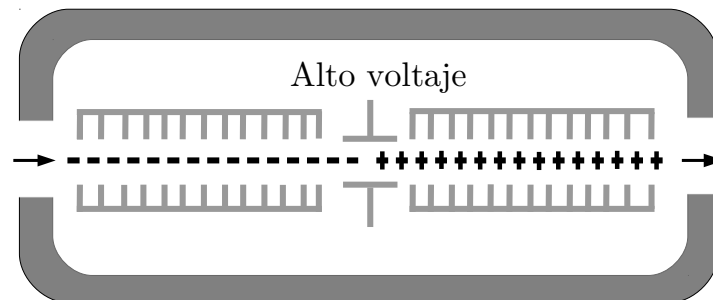


Fig. 4-2: Sistema de aceleración en dos etapas del acelerador Pelletron[®]. En la primera etapa los iones son negativos y son atraídos hacia una región de la terminal positiva. Ahí, los iones se convierten en positivos y son repelidos por la terminal, lo que origina la segunda etapa de aceleración.

Después de ser acelerados por segunda ocasión, los iones pasan por otro conjunto de anillos equipotenciales con diferencias de potencial que van disminuyendo hasta que salen del tanque con una energía del doble de la inicial. Aún así, el haz puede contener iones de varias energías de acuerdo con su velocidad. Es por ello que se necesita seleccionar el haz deseado por medio de un campo magnético selector. Así, en esta parte del acelerador, también se cuenta con una caja de Faraday y un electroimán. La selección del haz garantiza que llegue a bombardear la muestra sin impurezas.

Mediante un cuadrupolo y el imán selector, el haz es dirigido 15° hacia la línea de implantación, tal como se muestra en la Fig. 4-1. El área máxima que puede llegar a formar el haz para implantar una muestra es un círculo de 10 cm de diámetro [23]. Sin embargo para este trabajo se utilizó un colimador de $3 \times 3 \text{ cm}^2$ sobre el cual, el haz de iones es barrido por medio de dos pares de placas deflectoras para garantizar una implantación homogénea

sobre toda la superficie.

Dentro de la cámara de implantación, el portablancos está conectado a un circuito de circulación de agua para mantener la temperatura constante a temperatura ambiente. Simultáneamente se mide la corriente, utilizando voltajes supresores de electrones e iones secundarios para estimar (típicamente $\pm 50\%$ de precisión) la afluencia de iones implantados.

Finalmente, cabe mencionar que la longitud de todo el sistema de vacío es de 20 metros aproximadamente y la presión es alrededor de 10^{-8} Torr, lo cual es posible a partir de 6 sistemas de bombeo. Las bombas que se utilizan son bombas turbomoleculares con sus respectivas bombas mecánicas de apoyo, válvulas, medidores y sistemas de enfriamiento. El generador completo se encuentra dentro de un tanque blindado en cuyo interior se encuentra un gas aislante SF_6 a alta presión [23].

Para este trabajo, se utilizaron tres sustratos de zafiro sintético C-zafiro monocristalino ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ de Guild Optical Associates Inc.) con áreas de $4.0 \pm 0.2 \text{ cm}^2$ y de $1 \pm 0.5 \text{ mm}$ de grosor cada una denominadas como A, B y C, a las que se les implantaron iones de Au^{2+} a una energía de 1.5 MeV y cuyo haz de iones incidentes estaba a 8° con respecto al eje óptico para prevenir efectos de channeling (este efecto se produce cuando los iones entran directamente a los canales formados debido a la estructura cristalina del zafiro). La corriente se mantuvo por debajo de $1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ con la finalidad de evitar el sobrecalentamiento de los sustratos.

4.2. Espectrometría de Retrodispersión de Rutherford

Las muestras fueron analizadas por la técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford (RBS) utilizada para determinar la distribución de iones implantados y con ello caracterizar el proceso de implantación. El equipo utilizado fue el acelerador Pelletron[®]. No obstante, la fuente que se usa para el análisis de materiales por retrodispersión nuclear es la fuente de radiofrecuencia Alphasross que se ilustra en la Fig. 4-1. Ambas fuentes: Alphasross y la SNICS, se encuentran a 30° respecto del eje del acelerador [23].

La fuente Alphasross produce iones negativos de helio, es decir, de una descarga gaseosa se obtienen iones positivos de helio que al pasar por vapor de Rb alcalino atraen electrones convirtiéndolos en iones negativos [23]. Posteriormente, los iones se extraen y se inyectan en el generador de alto voltaje cuyo mecanismo de aceleración es el mismo que el descrito para el proceso de implantación. Finalmente el haz se desvía hacia la línea de análisis hasta llegar a la cámara. El haz de iones positivos de helio se alinea mediante un colimador y se dirige hacia la superficie del material formando un ángulo de 8° respecto de la normal de la superficie para evitar efectos de channeling.

Todo el sistema que se encuentra dentro de la cámara de análisis está al alto vacío (10^{-6} mbar) [23]. Los iones de helio colisionan con los átomos del sustrato y son retrodispersados hacia un detector que se encuentra a 13° con respecto del eje que pasa por el haz incidente, tal como se muestra en la Fig. 4-3.

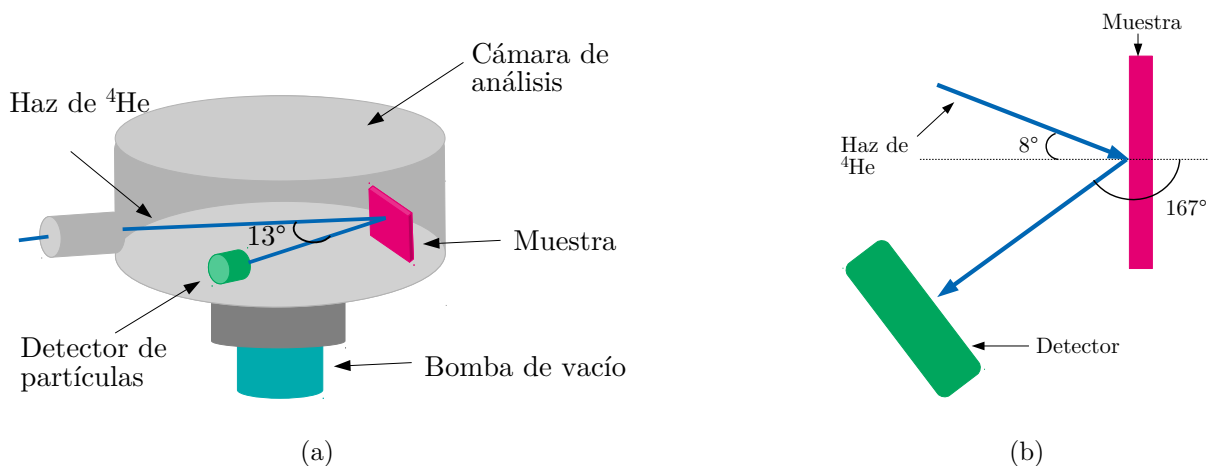


Fig. 4-3: (a) Cámara de análisis de retrodispersión de Rutherford; (b) Los iones de helio colisionan con los átomos de la muestra y son retrodispersados hacia el detector.

El detector está hecho de un cristal de silicio que forma una unión p-n. Cuando el ion de helio incide sobre el detector provoca una cantidad de pares electrón-hueco, los cuales se desplazan en sentido contrario al aplicarles una diferencia de potencial produciendo un pulso eléctrico [23]. El detector de barrera tiene un diámetro de 0.5 cm y tiene una capacidad de detección de hasta 10 mil cuentas o número de partículas retrodispersadas. La ventaja de este tipo de detectores es que la energía que se requiere para crear los pares electrón-hueco es 10 veces más pequeña que la que se requiere para otro tipo de detectores. Además, el hecho de que la cantidad de ionización producida, según la energía dada, sea un orden de magnitud más grande se traduce en un incremento en la resolución. Aún así, el pulso es muy pequeño por lo que se requiere que pase por un pre-amplificador y después por un amplificador que manda la señal a un analizador multicanal [23].

En el analizador multicanal se cuenta el número de pulsos que llegan y los relaciona a un cierto canal dependiendo de la energía del pulso. De esta manera se obtiene una gráfica que tiene el número de cuentas o partículas que fueron retrodispersadas en función del número de canal. Este es el espectro de retrodispersión.

El espectro de retrodispersión se calibra para obtener un espectro con el número de cuentas en función de la energía y no del número de canal. Del espectro no calibrado se buscan los valores de las coordenadas del número de canal en la superficie de la muestra tanto para el oxígeno como para el aluminio, que son los dos elementos que componen la matriz de zafiro sintético. Con estos dos valores y usando la Ec. (1-8) de la subsección 1.1.1 se obtiene la energía E en la superficie tanto para el oxígeno como para el aluminio, donde $E_0 = 2,000$ keV es la energía incidente del haz antes de penetrar en la muestra de zafiro y $\theta = 167^\circ$ es el ángulo complementario al cual se encontraba el detector con respecto al haz incidente.

Tomando en cuenta que existe una relación lineal entre la energía y su correspondiente canal y encontrados estos dos puntos, es posible hallar una recta de la energía en función del número de canales, cuya ecuación es:

$$E = mN + b_0, \quad (4-1)$$

donde N representa el número de canal, b_0 es la ordenada al origen y m es la pendiente de la recta que proporciona el intervalo de energía de cada canal, por lo que tiene unidades de [keV/canal].

Con estos datos es posible graficar la energía en función del número de cuentas. Para cada muestra se obtuvo un espectro calibrado.

Todo el procedimiento de calibración y análisis de los espectros se realizó mediante un programa llamado RUMP 0.950 [24], el cual, además de calibrar el espectro, permite ajustar varios parámetros como la afluencia a partir del ajuste teórico de una distribución gaussiana.

4.3. Tratamiento Térmico

A las muestras B y C se les realizó un tratamiento térmico que consiste en calentarlas en un horno durante cierto tiempo. El horno que se utilizó para este trabajo fue el horno tubular Thermolyne modelo F9300 que se encuentra en el Laboratorio de Preparación de Muestras I del Instituto de Física de la UNAM.

El horno posee un sistema de calentamiento conformado por un tubo de cuarzo rodeado de varias resistencias que están dentro de un material refractario. En su interior se coloca la muestra que se quiere calentar [25]. El tubo de cuarzo puede tener dimensiones de 1, 2 o hasta 3 pulgadas de diámetro y se coloca dentro de otro tubo mayor como si se tratara de un portaobjetos. La finalidad es evitar el contacto de contaminantes o impurezas dentro del horno. También se cuenta con otras entradas por las que se introducen varios gases hacia las tapas del tubo de cuarzo, dentro del horno [25]. Estos gases constituyen la atmósfera al interior del horno. Si las entradas se abren, se tiene un contacto directo con el aire, por lo que se trata de una atmósfera oxidante, pero si las entradas se conectan a un Multicontrolador de Gas (MGC) de tipo 647B, que permite elegir y controlar el tipo de gas, entonces se trata de una atmósfera reductora.

Una vez alcanzada la temperatura requerida para calentar la muestra, la cual es elegida en la consola de programación, un termopar se encarga de mantener la temperatura constante durante el proceso de calentamiento [25]. A partir de entonces se comienza a medir el tiempo que se requiere para calentar la muestra.

Varias tuberías pequeñas conforman el sistema de enfriamiento por las que pasa agua y en consecuencia evitan rupturas por las altas temperaturas alcanzadas. También se tiene un sistema de aislamiento de temperatura en el que dos abrazaderas sostienen el tubo que está dentro del horno y está sellado con dos tapas metálicas [25].

En este trabajo a las muestras B y C se les realizó un tratamiento térmico con atmósfera reductora con 50 % de N_2 y 50 % de H_2 a una temperatura de $950^\circ C$ durante 90 minutos, con una rampa de calentamiento de 20 minutos.

4.4. Espectroscopía por extinción óptica

El equipo que se utilizó para medir los espectros de absorción óptica de las muestras pertenece al laboratorio de Óptica Lineal del Instituto de Física de la UNAM. Mediante una fuente se ilumina la muestra y posteriormente se detecta la luz que pasa a través de ella. La fuente que se utilizó es una fuente de luz DH-2000-BAL fabricada por Ocean Optics, Inc. Está compuesta por una fuente de Halógeno y otra de Deuterio. Con la fuente de Halógeno se emite luz en el visible mientras que con la de Deuterio se emite luz en ultravioleta. En consecuencia, el rango de la longitud de onda en el que emite la fuente comprende de los 230 nm a los 2,500 nm [26].

La luz que sale de la fuente de Halógeno-Deuterio viaja a través de una fibra óptica QP600-1-UV/VIS de $600\ \mu m$ de diámetro. Al término de la fibra óptica, la luz sale y atraviesa la muestra, la cual se encuentra previamente montada en un soporte y debidamente alineada con la luz de la fibra óptica, para luego pasar a través de otra fibra óptica QP400-1-UV/VIS de $400\ \mu m$ de diámetro. El diámetro del haz del espectrómetro es de 2 mm. El diagrama del arreglo experimental se muestra en la Fig. 4-4.

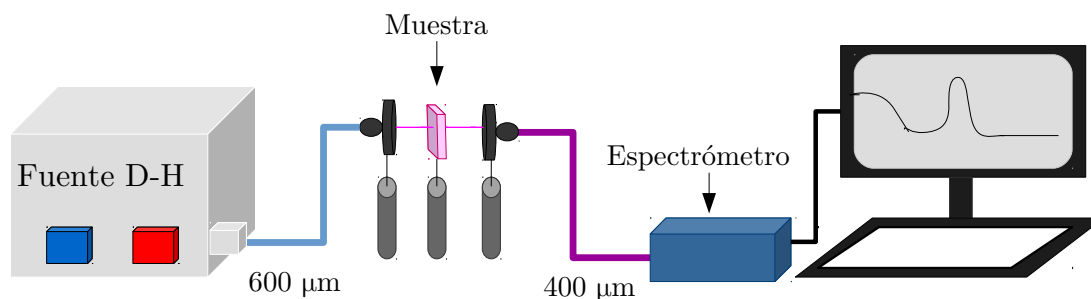


Fig. 4-4: Arreglo experimental utilizado para la obtención de los espectros de absorción óptica. Entre los principales elementos se encuentran la fuente Halógeno-Deuterio, las fibras ópticas de $600\ \mu m$ y $400\ \mu m$, respectivamente y el espectrómetro HR2000+CG-UV-NIR.

La fibra óptica de $400\ \mu m$ transporta la luz hacia un espectrómetro HR2000+CG-UV-NIR fabricado por Ocean Optics, la cual está asegurada al interior del espectrómetro mediante un conector SMA (1) [26]. El diagrama de los componentes del espectrómetro se puede ver en la Fig. 4-5.

Dentro del espectrómetro, la luz pasa por una rendija rectangular (2) y después por un filtro (3). La rendija se encarga de regular la cantidad de luz que entra al espectrómetro mientras que el filtro restringe la luz a ciertas longitudes de onda. Enseguida, la luz se dirige hacia un espejo colimador (4) que refleja la luz y la enfoca hacia la rejilla (5) del espectrómetro. La rejilla se encarga de difractar la luz y la manda hacia un espejo convergente (6). Finalmente, se recibe la luz proveniente de la rejilla y se manda al detector CCD (8). Cada pixel del detector responde a la longitud de onda de la luz incidente generando una señal digital [26].

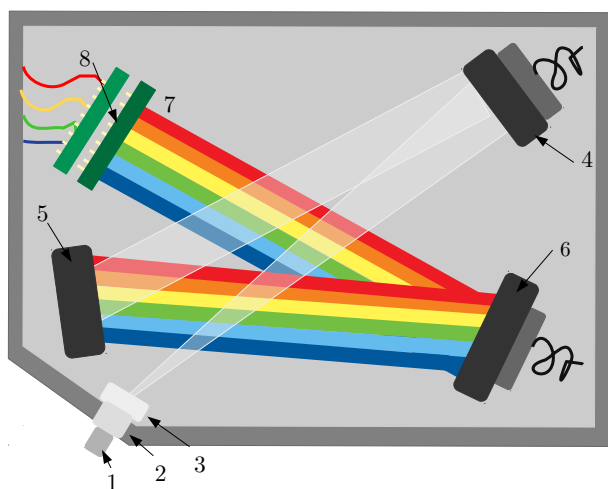


Fig. 4-5: Esquema de los componentes en el interior del espectrómetro: Conector SMA (1). Rendija (2). Filtro (3). Espejo colimador (4). Rejilla (5). Espejo convergente (6). Detector CCD (8) [26].

El espectrómetro está conectado a la computadora. El programa que permite leer los datos que llegan del espectrómetro se llama Spectra-Suite que genera el espectro de absorbancia de la muestra iluminada comparándola con una calibración previa en la que se mide la cantidad de luz que emite la fuente sin la muestra y tomando en cuenta el ruido del ambiente.

Entre las cosas que hay que tomar en cuenta al momento de iniciar el programa Spectra-Suite son algunos parámetros como el tiempo de integración (Intg) que se refiere al tiempo que toma el espectrómetro para mostrar los datos; a mayor tiempo de integración, la cantidad de luz que le llega al sensor es mayor. El otro parámetro es el Boxcar y se refiere al promedio entre datos vecinos que suavizan la curva. Para la obtención de los espectros de absorción óptica de las muestras de este trabajo se utilizó un tiempo de integración de 10 ms y un valor de 0 en promedio para el Boxcar.

Los datos se guardan, y mediante un programa llamado MieLab 0.2.1 se analizan los espectros de extinción óptica de cada una de las muestras. A partir de la teoría de Mie, el programa es capaz de ajustar una curva teórica al espectro experimental introduciendo valores específicos de parámetros como el índice de refracción de la matriz, el radio promedio de las nanopartículas, la dispersión de los radios, el material de las nanopartículas implantadas en la matriz así como su afluencia (aunque la afluencia no entra en la teoría de Mie, es necesario considerarla como un factor de normalización para comparar con el espectro experimental).

4.5. Irradiación de pulsos de 6 nanosegundos de láser

Con la finalidad de modificar las nanopartículas de oro implantadas en los sustratos de zafiro sintético, las muestras A, B y C fueron sometidas a un proceso de irradiación con láser de pulsos cortos de 6 ns. Este proceso de irradiación se llevó a cabo en el Laboratorio de Óptica Lineal que se encuentra en el Instituto de Física de la UNAM.

La muestra A fue irradiada con longitud de onda de 1,064 nm mientras que las muestras B y C fueron irradiadas con longitud de onda de 532 nm. En ambos casos se utilizó el mismo arreglo experimental, el cual se describe a continuación.

La fuente de irradiación utilizada para este arreglo experimental fue un láser Nd:YAG NL313 de la marca EKSPILA de pulsos cortos de nanosegundos [27]. La luz que se emite es generada, dentro del láser, por una cavidad resonante con ayuda de una fuente de alimentación de alto voltaje y una o dos lámparas de flash que bombean ópticamente una varilla de Nd:YAG. El haz que sale de la cavidad es reflejado por dos espejos M1 y M2 que se encuentran cada uno a 45° respecto del haz. El diámetro del haz es de 8 mm aproximadamente, no obstante se requiere que el diámetro sea de 12 mm para que coincida con la apertura del medio de amplificación. Para aumentar el diámetro se utilizan entonces dos lentes L1 y L2 antes de pasar al amplificador [27].

El amplificador del láser está basado en varillas birrefringentes con un polarizador PR que controla la energía que sale, lo que asegura la divergencia constante del haz de acuerdo a los distintos niveles de energía requeridos.

Una vez que el haz sale del amplificador, la longitud de onda de la luz del láser se puede duplicar, triplicar y cuadruplicar, esto se logra a partir de cristales no lineales llamados “generadores armónicos”. La longitud de onda de 1,064 nm es la fundamental y no pasa por ningún generador armónico, sin embargo pasa por un espejo, el M3, que lo dirige hacia la salida del láser. Para generar el haz de 532 nm se utiliza el segundo armónico y se usan los espejos M7 y M8 [27].

El diagrama del arreglo experimental se muestra en la Fig. 4-6.

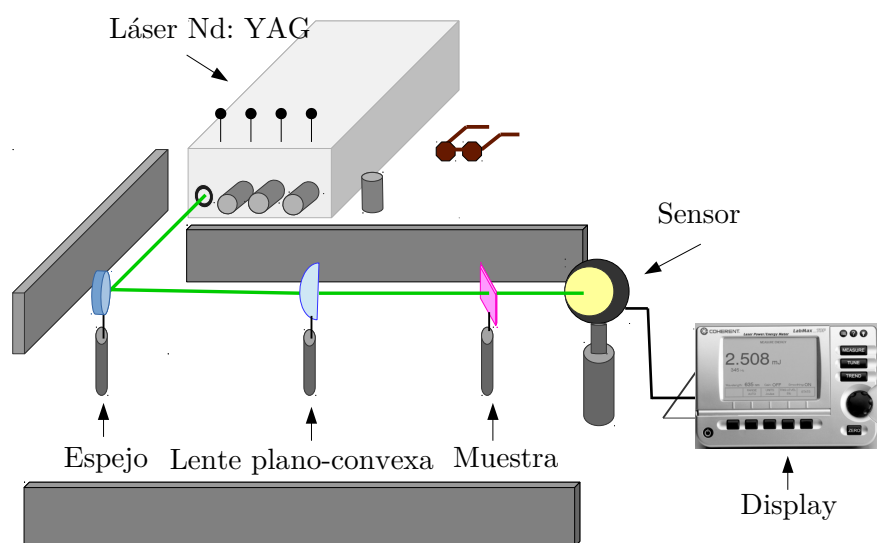


Fig. 4-6: Arreglo experimental del proceso de irradiación con el láser Nd:YAG.

El haz de pulsos cortos que sale del láser se refleja en un espejo a 45° que lo dirige hacia una lente de policarbonato plano-convexa, cuya distancia focal es $15 \text{ cm} \pm 0.05 \text{ cm}$. La lente enfoca el haz y lo manda hacia el sustrato. Entre la lente y el sustrato se midió una distancia de $23.05 \text{ cm} \pm 0.05 \text{ cm}$. El haz atraviesa el sustrato y llega hasta un sensor J-50MB-YAG de la marca COHERENT [28]. Finalmente, la energía es medida con un display LabMax-TOP Laser Power/Energy Meter de la misma marca [29].

4.6. Microscopía de barrido electrónico

Como método complementario al de absorción óptica para determinar el radio de las nanopartículas de oro implantadas en las muestras B y C se utilizó la técnica de Microscopía de Barrido Electrónico (SEM) en la que se obtuvieron imágenes de dichas nanopartículas mediante el microscopio de barrido electrónico de alta resolución JSM-7800, que se encuentra en el Laboratorio Central de Microscopía (LCM) en el Instituto de Física de la UNAM.

Antes de meter las muestras al microscopio fue necesario cortar un fragmento de ellas y prepararlas. Para cortarlas se utilizó una cortadora BUEHLER modelo Isomet 1000. Los sustratos se fijaron en un soporte y con un disco especial para zafiro sintético las muestras se cortaron a una velocidad de 300 rev/min. De los fragmentos obtenidos como resultado del corte, se eligieron los que ofrecían una forma más óptima para ser vistos en el microscopio.

Para preparar los fragmentos de las muestras B y C, sobre pequeños cilindros de metal se adhirieron trozos de cinta adhesiva de carbón y sobre éstos trozos de cinta se colocaron cada uno de los fragmentos de las muestras cortadas. Ya que las imágenes de microscopía se crean a través de la emisión de electrones sobre el material, para materiales dieléctricos, como lo es el zafiro sintético, es necesario colocarles una rejilla de cobre, tinta de carbón y

depositarles una película delgada también de carbón. La rejilla, la cinta adhesiva, la tinta y la película de carbón sirven para aterrizar el fragmento al cilindro metálico, pues de otra manera la carga se acumula en la superficie del fragmento provocando que ciertas zonas en las imágenes salgan excesivamente brillosas. No obstante, para este trabajo y dadas las formas de los fragmentos de las muestras, las rejillas y la tinta no fueron necesarias y simplemente se les colocaron una película delgada de carbón.

La película delgada de carbón que se les colocó a cada fragmento de muestra fue mediante la técnica de evaporación térmica en la que, dentro de una cámara, se hace vacío con la muestra dentro de ella y se aplica una diferencia de potencial en un hilo de grafito. El hilo de grafito actúa como una resistencia que se calienta ocasionando que se desprendan átomos de carbono del hilo de grafito que se depositan sobre la muestra recubriéndola.

Una vez cortada y preparada, la muestra se mete al microscopio de barrido electrónico en donde se comienza a hacer vacío alcanzando valores de 9.6×10^{-5} Pa [30].

La Fig. 4-7 muestra los elementos principales del microscopio electrónico de barrido [30].

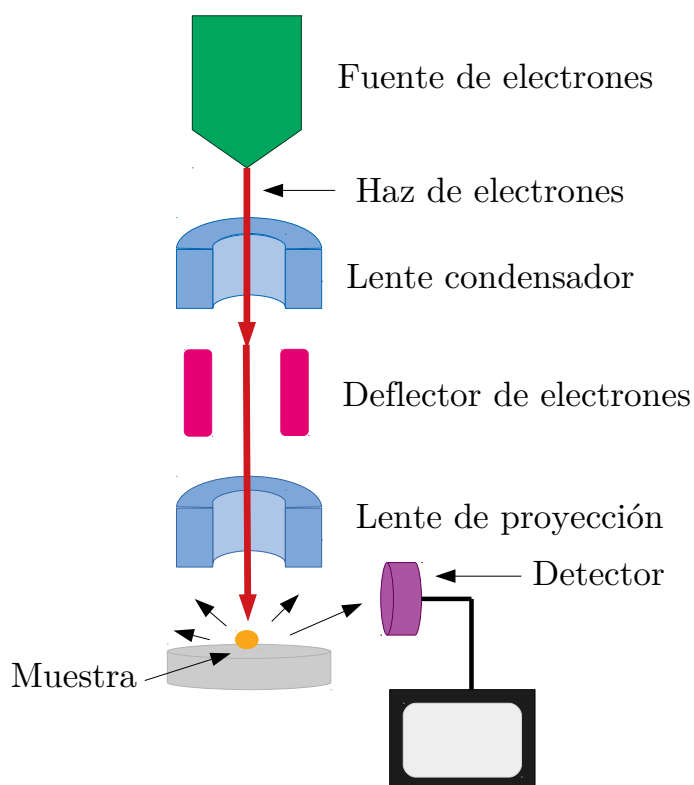


Fig. 4-7: Diagrama de los principales componentes del microscopio de barrido electrónico.

Los electrones que son acelerados, se dirigen hacia un sistema de lentes condensadoras y un sistema de lentes de proyección. Al tratarse de un haz de electrones, ambos sistemas de lentes son magnéticos. El sistema de lentes condensadores dirige el haz de electrones hacia el sistema de lentes de proyección cuya función es reducir lo mejor posible el haz para obtener una mejor resolución en la imagen. La resolución de este aparato es de 1 nm aunque también esto depende de la naturaleza de la muestra [30].

En este tipo de microscopios el haz no atraviesa la muestra, sino que simplemente barre su superficie mediante dos pares de bobinas reflectoras [30]. Considerando un plano imaginario perpendicular a la dirección del haz, uno de los pares de bobinas reflectoras desvía el haz en una dirección X mientras que el otro par lo desvía en la dirección Y. El control del barrido se lleva a cabo al mandar una señal eléctrica a uno de los pares de bobinas haciendo que el haz llegue a la muestra a uno de los lados del eje central que se forma en el sistema de lentes. Variar la señal eléctrica que llega a uno de los pares de bobinas ocasiona que el haz se mueva en línea recta a lo largo de

la superficie de la muestra y regrese a su posición inicial, de manera similar ocurre con el otro par de bobinas reflectoras en la otra dirección [30].

Pueden ocurrir muchos tipos de interacciones con los átomos de la muestra cuando los electrones llegan a su superficie, entre ellos es posible que los electrones del haz colisionen elásticamente y salgan retrodispersados [30]. También puede suceder que algunos electrones del haz transfieren su energía a los electrones de las capas más externas de los átomos cuando colisionan con ellos en la superficie del material, ocasionando su desprendimiento. Los electrones desprendidos son dirigidos hacia un detector y se conocen como electrones secundarios [30]. Con los dos tipos de electrones se forma una imagen de micrografía electrónica, sin embargo los electrones retrodispersados tienen mayor energía [30]. Para las imágenes de microscopía de barrido electrónico de este trabajo se utilizaron electrones retrodispersados.

El tipo de detector que se utiliza tanto para electrones retrodispersados como para electrones secundarios son detectores de barrera superficial y la señal que emite el detector es producida en una posición particular en la superficie de la muestra. La señal está relacionada con un punto correspondiente de una pantalla de rayos catódicos, de esta manera, se forma una imagen de la muestra. La señal es amplificada y modulada para obtener una imagen aumentada [30].

El microscopio cuenta con un goniómetro que permite mover la muestra dentro del microscopio en un eje X, Y y Z además también es posible rotar la muestra de manera que el haz de electrones forme un ángulo con respecto a la superficie de la muestra. En consecuencia, la producción de electrones que se detectan depende de este ángulo [30].

Las muestras de este trabajo fueron cortadas y preparadas de tal manera que la implantación fue perpendicular al haz de electrones, tal como se muestra en la Fig. 4-8.

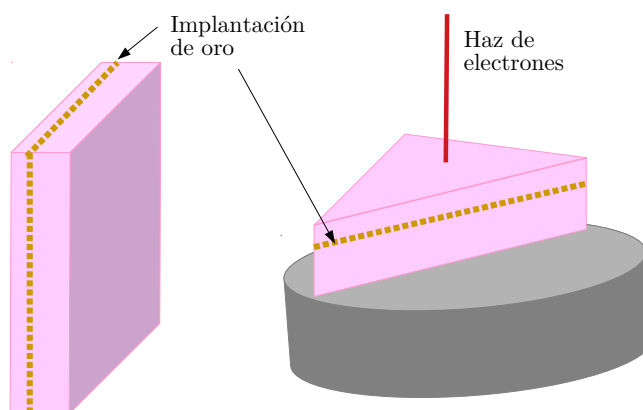


Fig. 4-8: Diagrama que muestra el corte perpendicular a la implantación en uno de los sustratos de zafiro.

4.7. Microscopía de Fuerza Atómica

Entre las técnicas de caracterización de materiales utilizadas en este trabajo se encuentra la obtención de imágenes a través del Microscopio Electrónico de Fuerza Atómica y de Tunelamiento JSPM-4210 en el Laboratorio Central de Microscopía del Instituto de Física de la UNAM.

Este tipo de microscopio forma imágenes de la superficie de alguna muestra usando una punta, generalmente hecha de silicio, que recorre su superficie escaneándola línea por línea [31]. La punta mantiene una fuerza de interacción y el movimiento de barrido se realiza mediante un escáner piezo-eléctrico en un plano XY. La punta de silicio está montada en una micropalanca a la cual se le hace incidir láser. La interacción de la punta con la superficie de la muestra hace que la punta varíe su altura con respecto a la superficie de la muestra haciendo que la micropalanca también se mueva y en consecuencia también el láser que incide en la micropalanca. El reflejo del láser se recoge en un fotodetector que se encuentra dividido en cuatro segmentos. La diferencia de potencial de cada uno de los segmentos determinan los cambios en la inclinación y la amplitud de oscilación de la punta [31]. El diagrama que

ilustra el funcionamiento de un microscopio de fuerza atómica se puede ver en la Fig. 4-9.

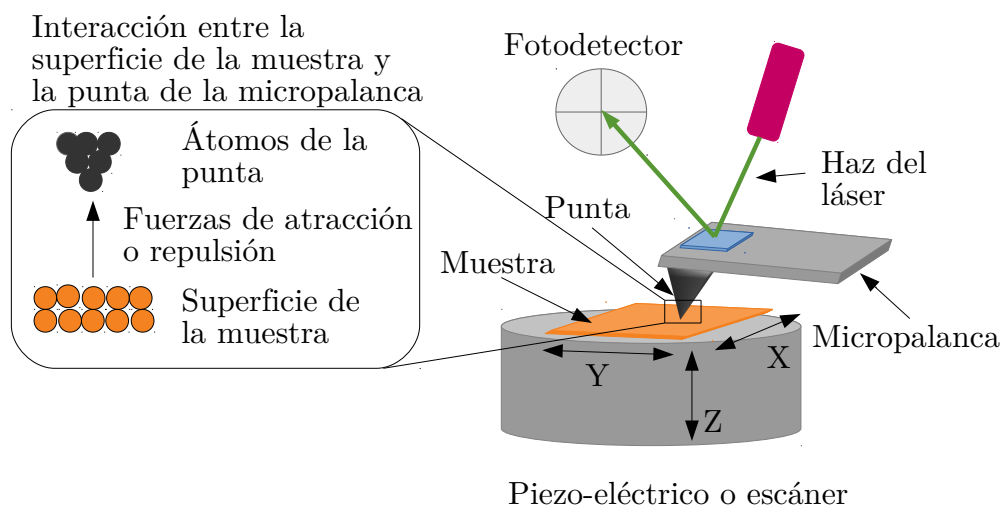


Fig. 4-9: Diagrama del funcionamiento de un microscopio de fuerza atómica.

Las señales del fotodetector son interpretadas por un software que genera las imágenes. Estas imágenes se generan en dos y tres dimensiones y pueden ser topográficas, de fase o de amplitud [31].

Las ventajas de trabajar con este tipo de técnica es que no se requiere preparar la muestra antes de meterla al microscopio, como ocurre con el microscopio de barrido electrónico (SEM), ni tampoco se requiere trabajar con condiciones de vacío [31]. Para este trabajo se obtuvieron imágenes topográficas de área de barrido de $10 \times 10 \mu\text{m}$ y se usaron dos puntas diferentes, la primera NSC15/AL BS y otra punta modelo NSC19/AL BS ambas de la marca μmash .

5. Resultados y discusión

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en este trabajo. En la sección “Implantación de iones” se presentan las características iniciales de preparación e implantación de las muestras de zafiro sintético con iones de oro. A dos de las muestras: B y C, se les realizó tratamiento térmico para la formación de las nanopartículas de oro. La afluencia, el tamaño de las nanopartículas, la profundidad y el espectro de absorción óptica también se presentan en la primera sección.

Mediante la irradiación láser con longitud de onda de 1,064 nm en la muestra A (previamente implantada con iones de oro) se buscó la formación de nanopartículas como un método alternativo al tratamiento térmico. Los resultados se muestran en la primera parte de la sección de irradiación.

En la parte central de la tesis se muestran los resultados de la irradiación de las muestras B y C con longitud de onda de 532 nm, con lo que se buscó la disolución de las nanopartículas mediante ablación láser, para ello se variaron parámetros de irradiación como el número de pulsos, el área y la densidad de energía. Por medio de las técnicas de absorción óptica, retrodispersión de Rutherford y microscopía de barrido electrónico se caracterizaron los efectos que produce la modificación de nanopartículas por irradiación láser como el radio de las nanopartículas, la afluencia y la profundidad.

Debido a que la ablación láser afectó los resultados aquí presentados, se incluye un estudio en el que se caracteriza el daño a la superficie de las muestras a través de la medición de la rugosidad en la superficie, antes y después de irradiar.

Finalmente, en la sección “Optimización de la densidad de energía”, se presentan los resultados en los que se busca optimizar la densidad de energía de irradiación para tratar de minimizar el daño en la superficie de las muestras y con ello afectar lo menos posible los resultados de absorción óptica, retrodispersión de Rutherford, microscopía de barrido electrónico y fuerza atómica.

5.1. Implantación de iones de Au

Tres muestras denominadas como A, B y C de C-zafiro monocristalino (α -Al₂O₃ de Guild Optical Associates Inc.) de área 4.0 ± 0.2 cm² y de 1.0 ± 0.5 mm de grosor cada una, fueron implantadas con iones de Au²⁺ en el acelerador de iones Pelletron[®] NEC 9SDH-2 del Instituto de Física de la UNAM. Cada una de las muestras se implantó a una energía de 1.5 MeV, a 8° del eje óptico para prevenir efectos de channeling. Además, para evitar el sobrecalentamiento de la muestra, la corriente se mantuvo por debajo de 1 μ A/cm².

Mediante la técnica de espectrometría de retrodispersión de Rutherford (RBS) se obtuvieron espectros de retrodispersión de cada matriz implantada y después del tratamiento térmico en el caso de las muestras B y C. Los espectros fueron analizados mediante el programa RUMP 0.950 con el que se hicieron ajustes a cada espectro de referencia y son mostrados en color rojo en la Fig. 5-1. En la parte superior de cada una de las gráficas, se puede apreciar el perfil de concentración de oro en cada matriz de acuerdo a la profundidad medida en nanómetros en el material, es decir, con el análisis del espectro de retrodispersión se determinó la cantidad de iones de oro implantado en cada una de las muestras. Estos valores quedan expresados como la afluencia de oro en el material.

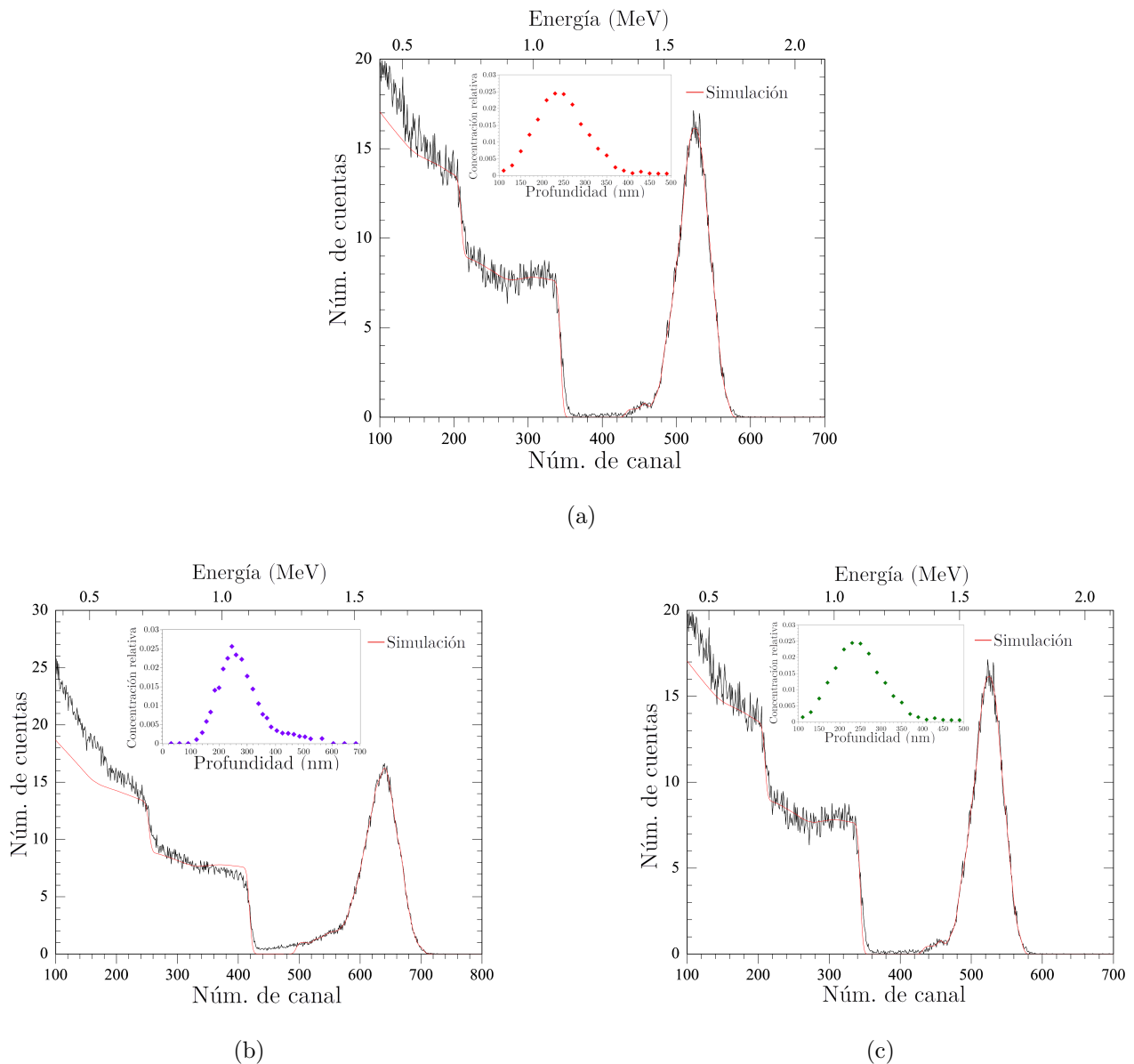


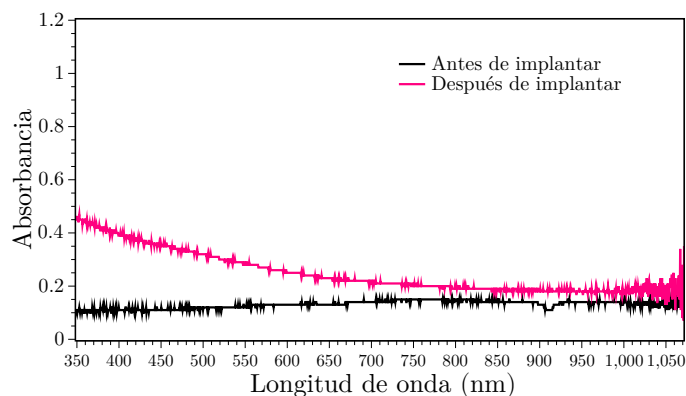
Fig. 5-1: Espectros de referencia de retrodispersión. En la parte superior se muestra el perfil de concentración de oro de acuerdo a la profundidad medida en nanómetros. (a) Muestra A. La afluencia para esta muestra es $\Phi_0 = 4.3 \times 10^{16}$ iones/cm², a 238.3 ± 4.8 nm; (b) Muestra B cuya afluencia es $\Phi_0 = 4.4 \times 10^{16}$ iones/cm², a 248.7 ± 3.3 nm; (c) Muestra C. Su afluencia es $\Phi_0 = 4.3 \times 10^{16}$ iones/cm², a 236.6 ± 5.3 nm.

En la tabla 5-1 se muestran las afluencias obtenidas a partir de los perfiles de concentración así como la profundidad de los iones de oro implantados en los sustratos de zafiro.

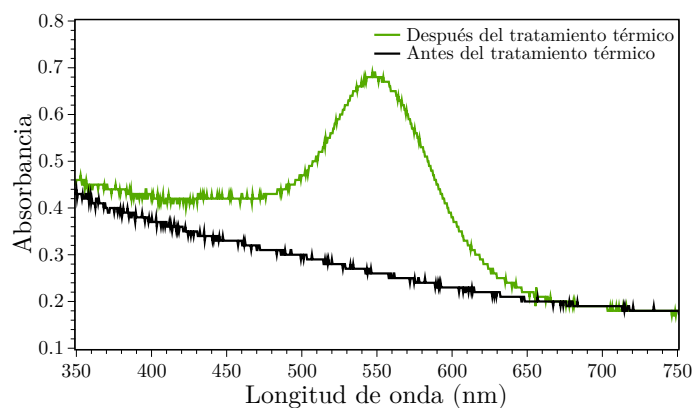
Tabla 5-1: Afluencias de las muestras A, B y C iniciales y la profundidad de implantación de los iones de Au, a 1.5 MeV.

Muestra	Profundidad [R_p] (nm)	Afluencia [Φ_0] (10^{16} iones/cm ²)
A	238 ± 4.8	4.3
B	248 ± 3.3	4.4
C	236 ± 5.3	4.3

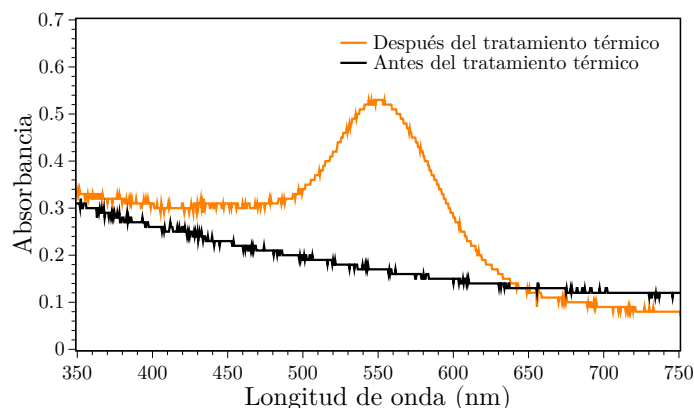
Una vez que se implantaron las muestras, se obtuvo el espectro de absorción de cada una, y posteriormente las muestras B y C fueron sometidas a un tratamiento térmico a una atmósfera reductora (50% N₂ y 50% H₂) durante 90 minutos a una temperatura de 950 °C. Los espectros de absorción se muestran en la Fig. 5-2.



(a)



(b)



(c)

Fig. 5-2: (a) Espectros de absorción antes y después de la implantación en la muestra A. Las figuras (b) y (c) muestran los espectros de absorción (posteriores a un proceso de implantación) para las muestras B y C, respectivamente; antes y después de pasar por un tratamiento térmico de 90 minutos a una temperatura de 950 °C, en una atmósfera reductora (50 % N₂ y 50 % H₂).

Las muestras B y C, sometidas a un tratamiento térmico, presentan una curva de resonancia de plasmón de superficie, Figs. 5-2(b) y (c), a diferencia de la muestra A, Fig. 5-2(a). Esto significa que el tratamiento térmico en las muestras B y C permitió un proceso de nucleación así como de redistribución y aglomeración de los iones implantados para la formación de las nanopartículas de oro.

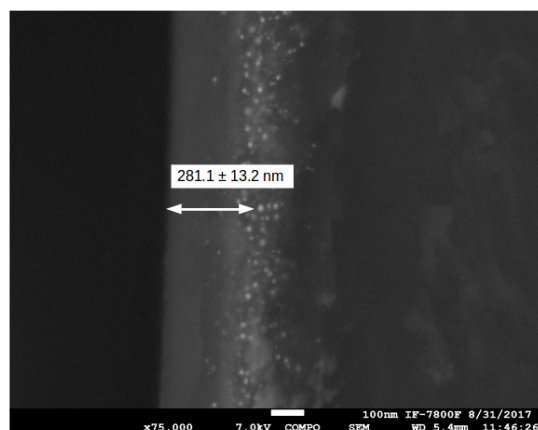
A partir de los espectros de absorción, Fig. 5-2, y mediante el programa MieLab 0.2.1 se calculó el radio de las nanopartículas de cada muestra cuyos valores se muestran en la tabla 5-2.

Tabla 5-2: Radio de las nanopartículas de oro en las muestras B y C después del tratamiento térmico de 90 minutos a una temperatura de 950 °C, en una atmósfera reductora.

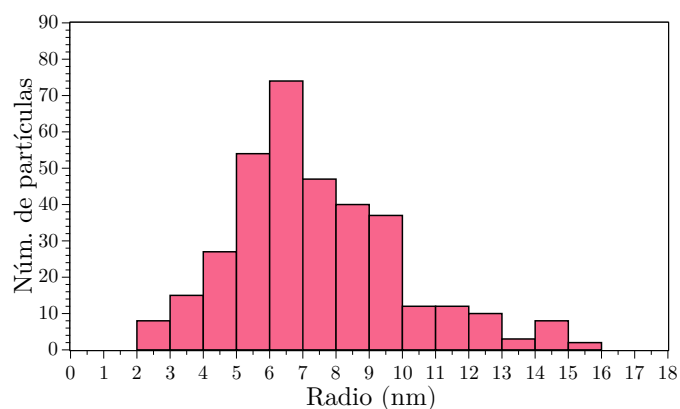
Muestra	Radio [r_i] (nm)
A	-
B	5.4 ± 2.0
C	4.2 ± 1.3

Los sustratos B y C fueron cortados y de los fragmentos que se obtuvieron se prepararon para ser vistos en el microscopio de barrido electrónico (SEM). Las Figs. 5-3(a) y (c) muestran las imágenes de microscopía de la sección transversal de los fragmentos de los sustratos B y C, obtenidas a partir de electrones retrodispersados con aumentos de 75,000 y de 100,000, respectivamente. En las imágenes de las Figs. 5-3(a) y (c) se pueden apreciar las nanopartículas de oro formadas dentro de los sustratos así como su profundidad de implantación, los

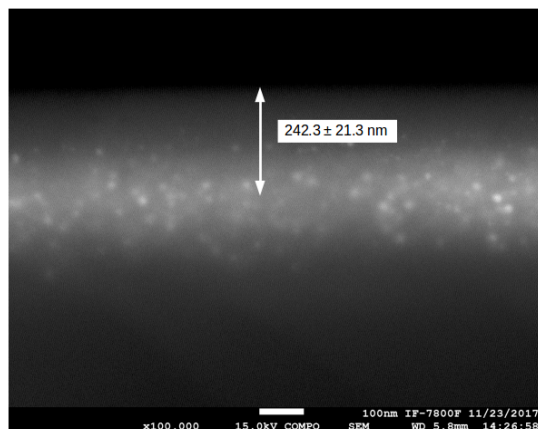
electrones retrodispersados van de izquierda a derecha en el caso de la Fig. 5-3(a) y de arriba hacia abajo en el caso de la Fig. 5-3(c). Las Figs. 5-3(b) y (d) muestran el histograma de distribución del radio de las nanopartículas pertenecientes a los sustratos B y C, respectivamente.



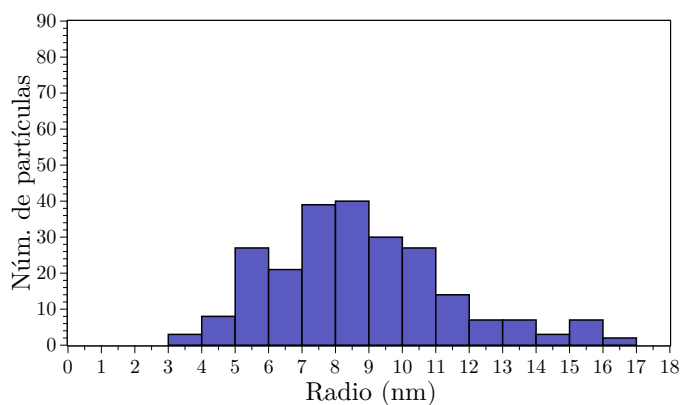
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig. 5-3: (a) Micrografía de barrido electrónico de la muestra B, a 75,000 aumentos. La profundidad de las nanopartículas es de 281.1 ± 13.2 nm; (b) Histograma de distribución de tamaños del radio de las nanopartículas formadas de la muestra B; (c) Micrografía de barrido electrónico de la muestra C, a 100,000 aumentos. La profundidad de las nanopartículas es de 242.3 ± 21.3 nm; (d) Histograma de distribución de tamaños del radio de las nanopartículas formadas de la muestra C.

En la micrografía de la Fig. 5-3(a) se observa que la distribución de nanopartículas de oro formadas en la muestra B se encuentran a una profundidad de 281.1 ± 13.2 nm respecto de la superficie del material. Mientras que para la muestra C, Fig. 5-3(c), la distribución de nanopartículas de oro en el material se encuentra a una profundidad de 242.3 ± 21.3 nm.

A través del programa ImageJ 1.51 p y de manera estadística se calculó el radio de las nanopartículas de las micrografías electrónicas de las muestras de zafiro, de donde se obtuvieron los histogramas que se muestran en las Figs. 5-3(b) y (d) para las muestras B y C, respectivamente.

Los histogramas de las Figs. 5-3(b) y (c), muestran que la distribución de tamaños de las nanopartículas formadas tienen un comportamiento que se puede aproximar por una curva gaussiana. En ambos casos, el número de partículas va aumentando conforme aumenta el radio hasta llegar a un máximo valor del radio después del cual el número de nanopartículas con radios mayores empieza a decrecer.

Tomando en cuenta que el radio promedio y su incertidumbre para la muestra B es de 5.4 ± 2.0 nm de acuerdo con la tabla 5-2 y el histograma de la Fig. 5-3(b), los valores coinciden para nanopartículas que tienen un radio

entre 6 y 7 nm, sin embargo en el caso de la muestra C, cuyo radio promedio es de 4.2 ± 1.3 nm, según la tabla 5-2 no coincide tan bien con los valores del histograma de la Fig. 5-3(b). Esto sugiere que existen zonas donde hay nanopartículas con un radio más grande que otras, en donde pudieron ser tomadas las micrografías y por lo tanto obtener el valor del radio más alto en el histograma que el del programa MieLab 0.2.1.

La diferencia de resultados obtenidos mediante la técnica de absorción y la técnica de microscopía de barrido electrónico puede entenderse tomando en cuenta la naturaleza misma de ambas técnicas. En la técnica de absorción óptica se tiene un promedio sobre un área de 3.2 mm^2 , mientras que la técnica de microscopía de barrido electrónico se limita a ver nanopartículas de manera local, es decir, en áreas menores a micras cuadradas y aún cuando se analizaron varias imágenes para obtener los histogramas (entre 5 y 8), es posible tener sesgos estadísticos. La técnica de absorción óptica abarca un área de medición mayor a la técnica de microscopía de barrido electrónico, sin embargo es importante mencionar que ambas técnicas son complementarias.

También hay que tener en cuenta que las nanopartículas especialmente pequeñas no se pueden ver muy bien en las imágenes por falta de resolución.

Por otra parte, el espectro de absorción óptica también tiene fuentes de incertidumbre que no son posibles de evaluar completamente con el programa MieLab 0.2.1. Sin embargo, los resultados, tanto de la técnica de microscopía de barrido electrónico como la de absorción óptica, son razonables en relación a la incertidumbre experimental de cada técnica.

5.1.1. Estudio de la superficie en la muestra antes de irradiar con láser

Como se verá más adelante, la irradiación láser causó daños a las muestras de zafiro sintético de forma que se vieron afectados los resultados de este trabajo, por lo que se incluye un apartado en el que se pretende caracterizar el daño por ablación láser a la superficie de las muestras de zafiro a través de la medición de la rugosidad. En esta sección se presentan las características de la rugosidad en la superficie de las muestras antes de ser irradiadas para, posteriormente, poder compararlas con los resultados de la rugosidad después de irradiarse las muestras de zafiro sintético.

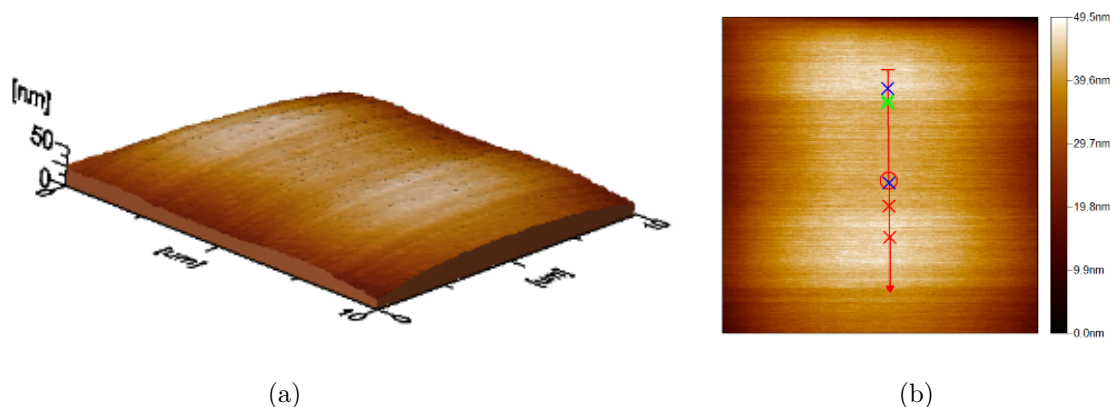


Fig. 5-4: Imágenes de fuerza atómica con áreas de barrido de $10 \times 10 \mu\text{m}$ que muestran la rugosidad en la superficie de una muestra de zafiro antes de implantar; (a) Imagen topográfica en tres dimensiones; (b) Imagen topográfica en dos dimensiones. En ambas imágenes las zonas más claras representan mayor altura.

Para caracterizar la rugosidad de la superficie de las muestras antes de ser irradiadas con láser, se obtuvieron imágenes topográficas mediante el microscopio de fuerza atómica. Las imágenes, en tres y dos dimensiones, se muestran en las Figs. 5-4(a) y (b), respectivamente. La superficie pertenece a la muestra de zafiro antes de implantar y tiene un área de barrido de $10 \times 10 \mu\text{m}$.

A partir de las imágenes de la Fig. 5-4, se obtuvo la vista de perfil de la superficie de la muestra antes de implantar. Mediante marcadores de color rojo, verde y azul, es posible medir la variación de la altura de la superficie, es decir, se midió la rugosidad de la superficie medida en nanómetros. Tal como se muestra en la Fig. 5-5. En la tabla 5-3

se observan los datos registrados de las alturas de acuerdo a la posición de los marcadores.

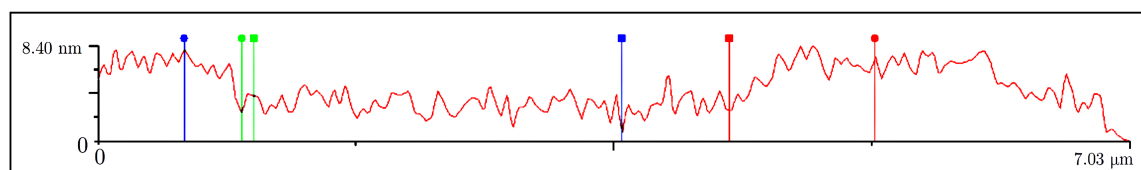


Fig. 5-5: Imagen de la superficie de la muestra antes de la implantación vista de perfil.

Tabla 5-3: Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie de la muestra antes de implantar.

Punto	Símbolo	Altura (nm)		
Z1	●	7.1	2.9	8.4
Z2	■	3.1	4.3	2.1
Z2-Z1	-	4.0	1.4	6.3

En la Fig. 5-5 se aprecia la imagen de la superficie de la muestra antes de implantar vista de perfil. Los diferentes marcadores que ahí se muestran permiten calcular la altura en la superficie del material. Estos datos se muestran en la tabla 5-3 en donde el primer renglón de Z1 muestra las alturas de los marcadores etiquetados con un círculo en rojo, verde y azul respectivamente. En el segundo renglón, para Z2, se muestran las alturas medidas en nanómetros de los marcadores etiquetados con un cuadrado y en el tercer renglón se muestra el valor absoluto de la diferencia de alturas entre los marcadores Z1 y Z2 correspondientes. La tercera columna se refiere a los marcadores en rojo, la cuarta a los marcadores en verde y finalmente la quinta columna está relacionada a las alturas de los marcadores en azul.

Cabe señalar que el programa WinSPM System 2.00 no muestra las incertidumbres de las diferentes alturas en la superficie de irradiación de los puntos, por lo que no se presentan en los valores de la tabla 5-3.

Después del proceso de implantación de las muestras A, B y C, se obtuvieron sus imágenes topográficas en la superficie, en tres y dos dimensiones y en un área de barrido de $10 \times 10 \mu\text{m}$, que muestran la rugosidad en su superficie y se pueden apreciar en la Fig. 5-6.

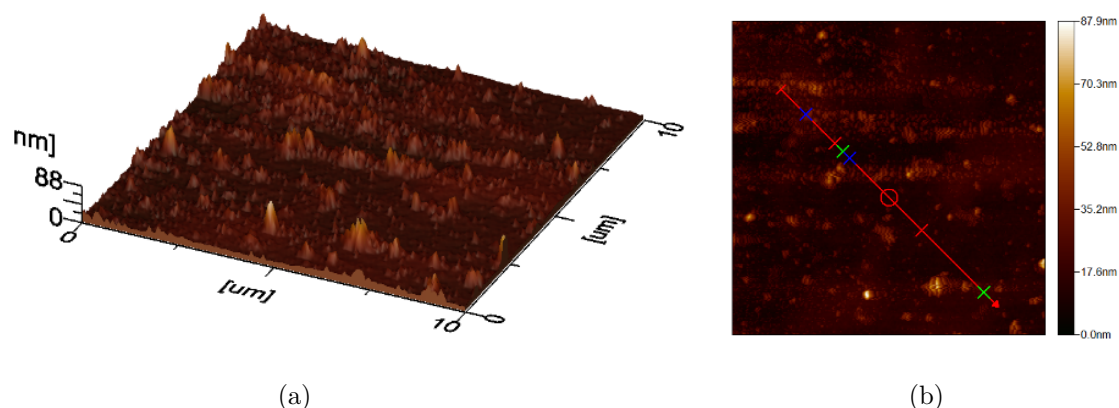


Fig. 5-6: Imágenes de fuerza atómica con áreas de barrido de $10 \times 10 \mu\text{m}$ que muestran la rugosidad en la superficie de una muestra de zafiro después de implantar; (a) Imagen topográfica en tres dimensiones; (b) Imagen topográfica en dos dimensiones. En ambas imágenes las zonas más claras representan mayor altura.

Para estas imágenes también se obtuvo su imagen de superficie vista de perfil, en la que se puede observar la variación en la altura después de que la muestra fuera implantada y se puede ver en la Fig. 5-7. Las alturas y la diferencia entre ellas se muestran en la tabla 5-4.

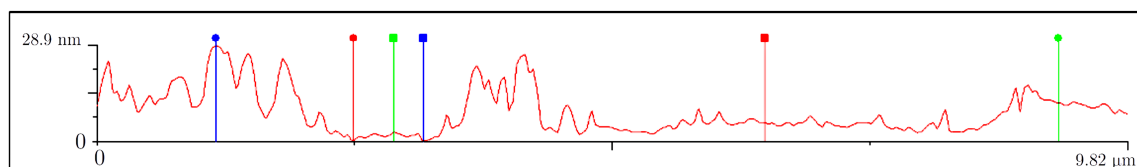


Fig. 5-7: Imagen de la superficie de la muestra después de la implantación vista de perfil.

Tabla 5-4: Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie del material después de implantar.

Punto	Símbolo	Altura (nm)		
Z1	●	0	11.46	28.96
Z2	■	5.46	2.69	0.02
Z2-Z1	-	5.46	8.77	28.94

Las imágenes de la superficie de la muestra de zafiro antes de implantar de la Fig. 5-4 no presentan picos en su superficie, a diferencia de la Fig. 5-6. No se observan escalones o valles en su superficie que permitan presentar una rugosidad relevante. Lo que sí puede notarse son dos zonas muy claras, lo que nos dice que la superficie presenta cambios de altura muy ligeros u ondulaciones. Esto puede verse más claramente en la Fig. 5-5. En donde los marcadores en azul muestran que la altura de esas ondulaciones es de 28.94 nm.

Después de que las muestras de zafiro fueron implantadas, las muestras presentaron una superficie más irregular, como se ve en la Fig. 5-6. En este caso no se observan ondulaciones como las imágenes antes de implantar, pero sí algunos picos en algunas zonas, que de acuerdo a la Fig. 5-7 y por el marcador en azul, el pico más alto llega a medir 28.94 nm. La imagen también muestra partes relativamente planas, como las que se ven con el marcador cuadrado en rojo y cuya diferencia de altura con el marcador circular del mismo color, llega a ser de 5.46 nm.

En general podemos decir que antes y después del proceso de implantación, la rugosidad de la superficie en la muestra no varía mucho en comparación con lo que se verá más adelante debido a la irradiación láser.

5.2. Irradiación

Las tres muestras A, B y C fueron irradiadas con láser con pulsos de 6 ns, para las cuales se utilizaron colimadores que permitieron hacer varios puntos de irradiación en los que se varió el número de pulsos así como la energía y el área de irradiación.

La muestra A se irradió con luz láser de longitud de onda de 1,064 nm, a un modo de energía E_{23} en un área de $3 \times 3 \pm 0.3 \text{ mm}^2$ a 2,000 pulsos, con una densidad de energía de irradiación de $132.2 \pm 4.7 \text{ mJ/mm}^2$. Posteriormente se obtuvo su espectro de absorción óptica, el cual se muestra en la Fig. 5-8.

Como puede verse de la Fig. 5-8, no se observa ninguna curva de resonancia de plasmón de superficie. Esto confirma que no hay nanopartículas de oro formadas en la muestra puesto que no pasó por un tratamiento térmico que permitiera la nucleación y formación de las mismas. En el proceso de nucleación de las nanopartículas, la temperatura juega un papel importante. De acuerdo con la Ec. (3-8), para una energía de 70.4 mJ que es aproximadamente la energía absorbida por pulso, en un volumen de 9 mm^3 , en donde se consideró la constante de calor específico a presión constante de $750 \times 10^3 \text{ mJ/Kg}^\circ\text{C}$ y la densidad del zafiro como $3,985 \times 10^{-9} \text{ Kg/mm}^3$, se estimó que el aumento de temperatura fue de 2.6°C por pulso. Aunque hubo un aumento de temperatura, generado por la irradiación de láser, éste valor no resultó ser suficiente para la formación de las nanopartículas de oro dentro de la muestra. Si bien, después de varios pulsos el efecto aumenta, la disipación de calor se vuelve mucho más importante y los resultados anteriores muestran que de ninguna manera la muestra alcanzó una temperatura

suficiente para promover la nucleación de nanopartículas.

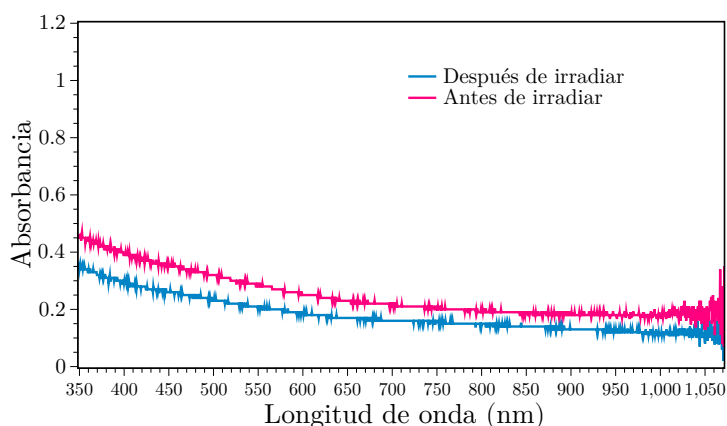


Fig. 5-8: Comparación de la absorbancia antes y después de irradiar la muestra A con láser de longitud de onda de 1,064 nm, a un modo de energía E_{23} , a 2,000 pulsos, en un área de $3 \times 3 \pm 0.3 \text{ mm}^2$.

De la misma gráfica de absorción 5-8 se observa que el espectro de absorbancia disminuye después de irradiar. Este efecto se atribuye al desprendimiento del carbono superficial que muchas veces se deposita mediante la implantación.

5.2.1. Variación del número de pulsos

Las muestras B y C también fueron irradiadas con el láser Nd:YAG NL313 de pulsos cortos de 6 ns. A diferencia de la muestra A, éstas muestras fueron irradiadas con luz láser de 532 nm. Los diagramas de los puntos de irradiación así como sus características de área de irradiación, modo de energía y número de pulsos se muestran en la Fig. 5-9.

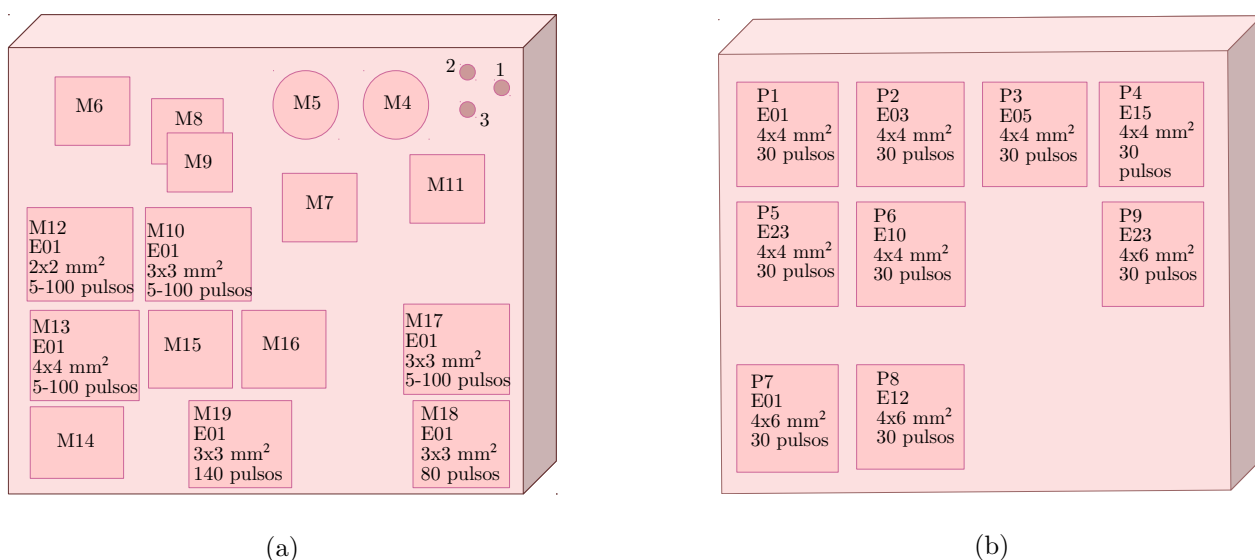


Fig. 5-9: Diagramas que muestran los puntos de irradiación con sus características de área, modo de energía y pulsos de irradiación. (a) Muestra B; (b) Muestra C.

El diagrama de la Fig. 5-9(a) pertenece a la muestra B, en él se observa un punto de irradiación M10 en el que se varió el número de pulsos desde 5 hasta 100 a un modo de energía E_{01} que corresponde a un valor de $44.5 \pm 7.2 \text{ mJ}$, en un área de $3 \times 3 \pm 0.3 \text{ mm}^2$. Los puntos M18 y M19 con 80 y 140 pulsos respectivamente se agregaron posteriormente. Los valores del radio de las nanopartículas de acuerdo al número de pulsos se muestran en la tabla 5-5.

Tabla 5-5: Variación del número de pulsos en el modo de energía $E01$, que corresponde a 44.5 ± 7.2 mJ, en un área de $3 \times 3 \pm 0.3$ mm² en los puntos M18, M10 y M19 de la muestra B.

Núm. de pulsos	Radio [r] (nm)
0	5.4 ± 2.0
5	4.7 ± 1.0
10	4.4 ± 1.0
15	4.3 ± 1.0
20	3.9 ± 0.8
30	3.0 ± 0.9
40	2.4 ± 1.0
50	2.2 ± 1.2
60	1.7 ± 1.1
80	1.9 ± 1.5
100	1.6 ± 0.9
140	1.7 ± 1.4

Los espectros de absorción en función de la longitud de onda y la variación del radio de acuerdo al número de pulsos para los puntos M18, M10 y M19 se muestran en las Figs. 5-10(a) y (b), respectivamente.

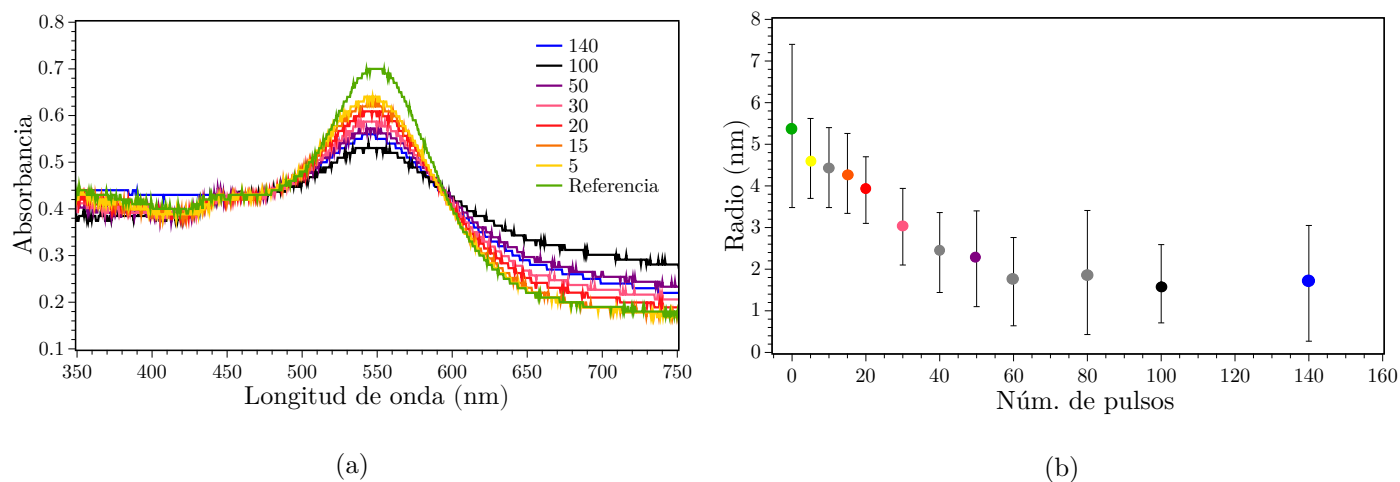


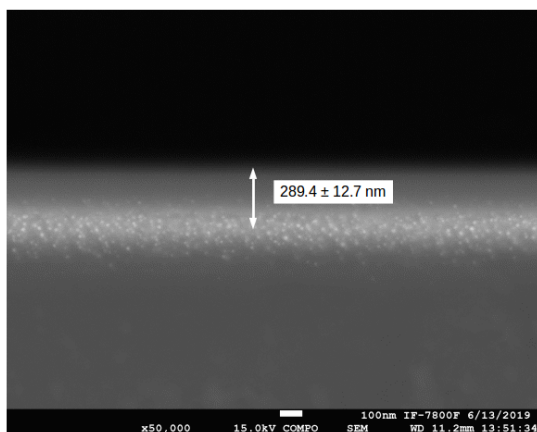
Fig. 5-10: (a) Disminución de la curva de resonancia de plasmón de superficie debido a la variación desde 5 a 140 pulsos de irradiación a 532 nm; en el modo de energía $E01$ que corresponde a un valor de 44.5 ± 7.2 mJ, en un área de $3 \times 3 \pm 0.3$ mm² para los puntos M18, M10 y M19 de la muestra B; (b) Disminución del radio de las nanopartículas conforme aumenta el número de pulsos.

La Fig. 5-10(a) muestra que las nanopartículas de oro formadas en la muestra de zafiro sintético B presentan una curva de resonancia de plasmón de superficie que se encuentra alrededor de los 550 nm. Estos espectros de absorción están asociados con los modos de polarización de las nanopartículas, que en este caso son esféricas, Fig. 5-11(a), y se deben al desplazamiento de las nubes de electrones excitados respecto de los núcleos, además dependen del radio de las nanopartículas, de acuerdo con la Ec. (2-122). Esto es lo que se observa en la Fig. 5-10 en donde, de acuerdo con la tabla 5-5, el radio asociado a la curva de resonancia de plasmón de superficie de referencia tiene un valor de 5.4 ± 2.0 nm, de donde se puede ver la disminución del radio conforme aumenta el número de pulsos del láser hasta llegar a un valor de 1.7 ± 1.4 nm para 140 pulsos a un modo de energía $E01$ de valor de 44.5 ± 7.2 mJ. Es importante mencionar que a partir de los 100 pulsos el valor del radio de las nanopartículas deja de disminuir considerablemente y que al disminuir el radio, la absorbancia también disminuye al aumentar el número de pulsos.

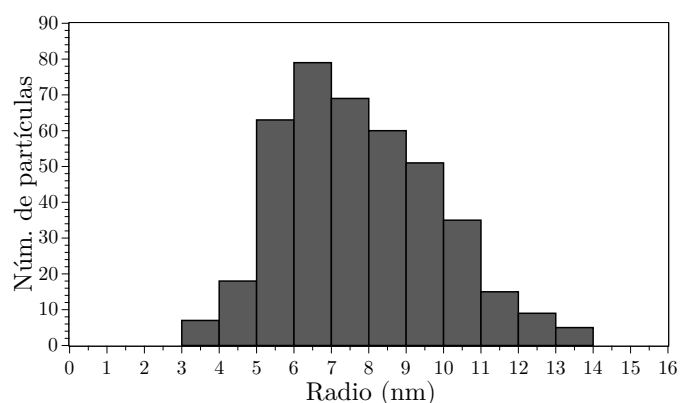
También es posible notar que los espectros no se desplazan y son simétricos. Para cada espectro sólo hay una resonancia, lo cual ocurre cuando no hay distribución de carga en la superficie de las nanopartículas que genere

efectos multipolares mayores al dipolar que sean notorios.

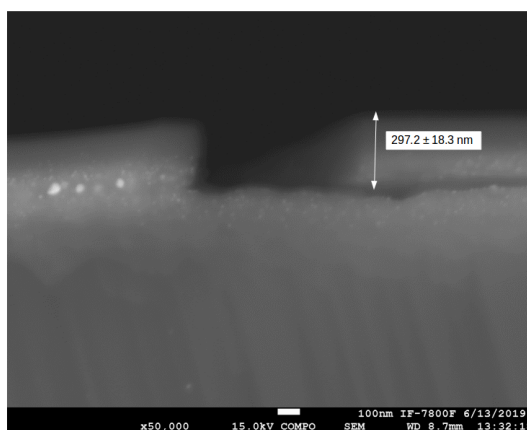
Una vez que los puntos M18, M10 y M19 de la muestra B fueron irradiados y analizados mediante espectrometría de retrodispersión, fueron cortados fragmentos de éstos y preparados para ser vistos en el microscopio de barrido electrónico con la finalidad de comparar el tamaño de las nanopartículas de oro después de su irradiación. Las micrografías que se obtuvieron fueron con electrones retrodispersados con aumento de 50,000, en las que se midió la profundidad de las nanopartículas dentro del material y se observan en la Figs. 5-11(a) y (c). El histograma de distribución de tamaños del radio de las nanopartículas se puede ver en la Fig. 5-11(b).



(a)



(b)



(c)

Fig. 5-11: (a) Micrografía de barrido electrónico a 50,000 para el punto M18. La profundidad de las nanopartículas es de 289.4 ± 12.7 nm; (b) Histograma de distribución de tamaños del radio de las nanopartículas irradiadas; (c) Micrografía de barrido electrónico a 50,000 aumentos. En esta micrografía se observa que parte del material de zafiro es desprendido formando un hueco cuadrado cuya profundidad es de 297.2 ± 18.3 nm.

La profundidad de las nanopartículas para la muestra B, de acuerdo con la Fig. 5-11(a) es de 289.4 ± 12.7 nm. En cuanto al histograma de distribución de tamaño del radio, se observa que el mayor número de nanopartículas tiene un radio entre 6 y 7 nm. Al comparar con los resultados obtenidos del histograma de distribución de tamaños de la Fig. 5-3(b), se ve que el valor del radio que mayoritariamente tienen las nanopartículas no cambia. En este caso, el histograma de distribución presenta una disminución del número de nanopartículas que tienen un radio mayor después del máximo.

La micrografía de la Fig. 5-11(c) muestra claramente el daño que le causa el láser a la superficie de los puntos de irradiación de la muestra B. En esta imagen se observa un hueco cuadrado que corresponde al desprendimiento

del material cuya profundidad es de 297.2 ± 18.3 nm y coincide con la profundidad a la que se encuentran las nanopartículas, además es similar a la profundidad medida en la micrografía de la Fig. 5-11(a) de valor 289.4 ± 12.7 nm, mientras que la profundidad encontrada mediante el espectro de retrodispersión de la Fig. 5-12(a) y de la tabla 5-6 es de 360 nm.

De los puntos M18, M10 y M19 de áreas de $3 \times 3 \pm 0.3$ mm² se obtuvieron sus espectros de retrodispersión y sus perfiles de concentración después de haber sido irradiados a 80, 100 y 140 pulsos, respectivamente, a modo de energía E01 correspondiente a 44.5 ± 7.2 mJ, los cuales se muestran en la Fig. 5-12.

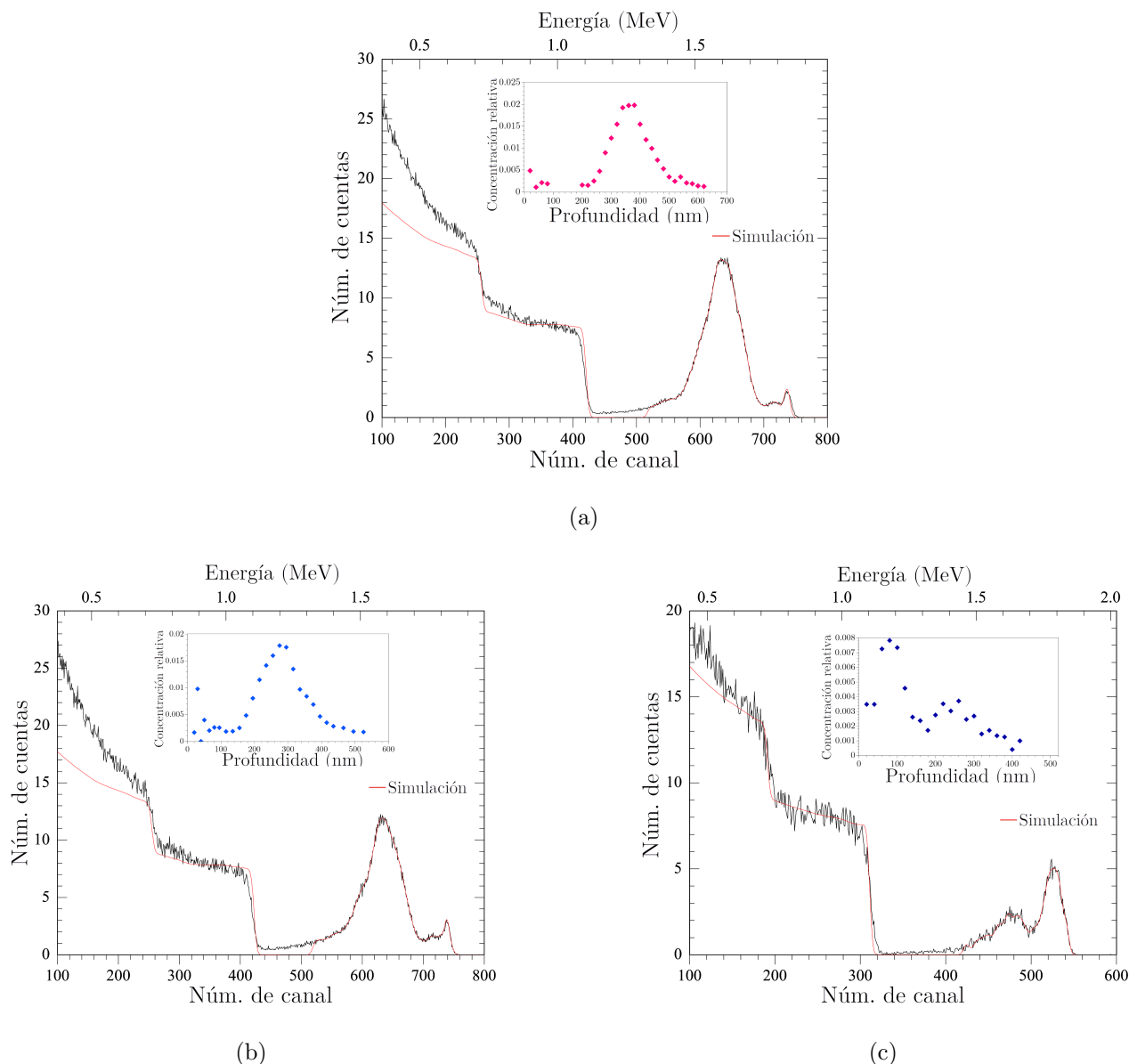


Fig. 5-12: Espectros de retrodispersión para los puntos de irradiación M18, M10 y M19 de la muestra B. En la parte superior se muestra el perfil de concentración de oro de acuerdo a la profundidad medida en nanómetros. (a) Para el punto M18 la fluencia es $\Phi_0 = 4.2 \times 10^{16}$ iones/cm², a 360 nm de profundidad de implantación; (b) Para el punto M10 la fluencia es $\Phi_0 = 4.0 \times 10^{16}$ iones/cm², a 275 nm de profundidad de implantación; (c) Para el punto M19 la fluencia es $\Phi_0 = 1.5 \times 10^{16}$ iones/cm², a 260 nm de profundidad de implantación.

La Fig. 5-12 muestra que en cada espectro de retrodispersión se forman dos picos a diferencia de los espectros de retrodispersión antes de irradiar de la Fig. 5-1. La superficie de los puntos irradiados no es uniforme (como se verá más adelante en el estudio de la superficie por rugosidad) y presenta huecos donde parte del material es desprendido por la irradiación láser, por lo que en la técnica de retrodispersión de Rutherford, algunos de los iones de He⁴⁺ son retrodispersados a profundidades mayores y por lo tanto se detectan con energías diferentes dando lugar a los dos picos que se observan en los espectros de retrodispersión de Rutherford.

La concentración de oro de los puntos M18, M10 y M19 se muestra en la tabla 5-6.

De acuerdo con la tabla 5-1 la afluencia de oro para la muestra B fue de 4.4×10^{16} iones/cm² antes de irradiar. Esta afluencia puede ser comparada con las afluencias de los puntos M18, M10 y M19 mostradas en la tabla 5-6, las cuales resultan ser menores al de referencia, por lo que se tiene una pérdida de la cantidad de oro al irradiar la muestra B. Además, cabe señalar que conforme el número de pulsos aumenta, la cantidad de oro que se pierde en el material es mayor. Así se tiene que, para 80 pulsos, la afluencia en el punto M18 es de 4.2×10^{16} iones/cm² que es menor al de referencia, pero mayor que la afluencia de valor 1.5×10^{16} iones/cm² correspondiente al punto M19 que fue irradiado a 140 pulsos de láser.

Tabla 5-6: Afluencia de oro para los puntos M18, M10 y M19 de la muestra B a modo de energía E_{01} de valor 44.5 ± 7.2 mJ, en áreas de $3 \times 3 \pm 0.3$ mm².

Punto	Núm. de pulsos	Profundidad [R_p] (nm)	Afluencia [Φ_0] (10^{16} iones/cm ²)
M18	80	360	4.2
M10	100	275	4.0
M19	140	260	1.5

La variación de pulsos disminuye la curva de resonancia del plasmón de superficie y con ello el radio de las nanopartículas también disminuye, sin embargo, más allá de los 100 pulsos el radio de las nanopartículas deja de disminuir, como se observa en la Fig. 5-10(b), por lo que las nanopartículas no se disuelven por completo en el sustrato. Tal como se muestra en la Fig. 5-11(c), la ablación láser causa desprendimiento de material de la muestra irradiada cuya profundidad es similar a la profundidad de las nanopartículas. Las afluencias de la tabla 5-6 indican que hay una pérdida de oro después de irradiar. Por lo tanto, en la ablación láser al variar el número de pulsos, no solo no se disuelven por completo las nanopartículas, si no que se desprende material del sustrato junto nanopartículas afectando a los resultados para su modificación.

5.2.2. Variación del área

Una vez que se varió el número de pulsos del láser con el que se irradiaron los puntos M18, M10 y M19 en una área de $3 \times 3 \pm 0.3$ mm² de la muestra B, se procedió a variar el área con la que fueron irradiadas las muestras B y C en otros puntos. Se dejó fijo el valor de la energía de irradiación láser y el número de pulsos siendo este valor de 30 pulsos para todas las áreas. En este caso se trabajó con tres áreas: $2 \times 2 \pm 0.2$ mm², $3 \times 3 \pm 0.3$ mm² y $4 \times 4 \pm 0.4$ mm² para los puntos M12, M17 y M13, respectivamente, de la muestra B, a modo de energía E_{01} . Las áreas de irradiación se consiguieron mediante unos colimadores cuadrados que fueron colocados entre la muestra a irradiar y el láser.

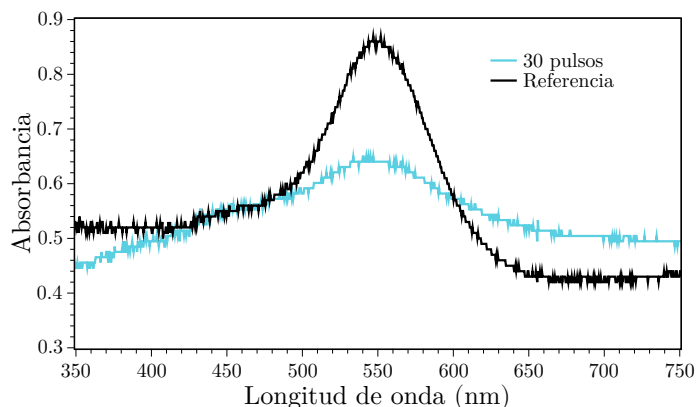
La tabla 5-7 muestra los puntos con sus respectivas áreas que se irradiaron en la muestra B así como el valor del radio de las nanopartículas después de irradiar. La energía de irradiación fue detectada y medida con un display, de donde se obtuvo la densidad. Éstas cantidades también se muestran en la tabla 5-7.

Tabla 5-7: Radio de las nanopartículas de oro después de irradiar con 532 nm en modo de energía E_{01} , a 30 pulsos y en distintos puntos con diferentes áreas en la muestra B y su densidad de energía.

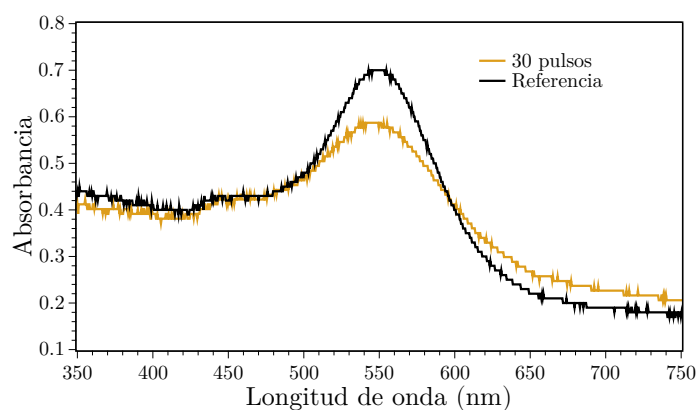
Punto	Radio [r] (nm)	Energía [E] (mJ)	Área [A] (mm ²)	Densidad [ρ] (mJ/mm ²)
M12	2.1 ± 0.4	12.7 ± 1.6	$2 \times 2 \pm 0.2$	3.2 ± 0.6
M17	3.0 ± 0.9	44.5 ± 7.2	$3 \times 3 \pm 0.3$	4.9 ± 1.0
M13	2.5 ± 0.8	63.8 ± 7.5	$4 \times 4 \pm 0.4$	4.0 ± 0.6

Los espectros de absorción de los tres puntos de irradiación M12, M17 y M13 se muestran en la Fig. 5-13.

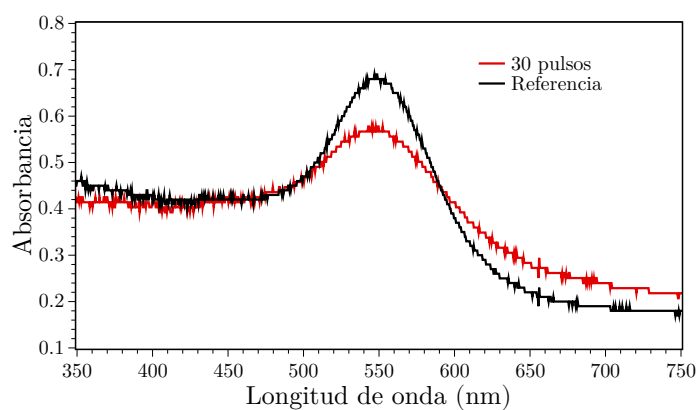
De la Fig. 5-13 se puede observar que el máximo de la curva de resonancia de plasmón de superficie se mantiene en 550 nm en cada una de las gráficas. La absorbancia de estos espectros disminuye considerablemente después de los 30 pulsos de irradiación. De las tres gráficas la que muestra la mayor absorbancia es la del punto M12 que pertenece a un área de $2 \times 2 \pm 0.2 \text{ mm}^2$ mostrada en la Fig. 5-13(a), sin embargo, de acuerdo con la tabla 5-7 presenta el menor valor del radio de los tres puntos.



(a)



(b)



(c)

Fig. 5-13: Espectros de absorción a 30 pulsos, en modo de energía $E01$, en la muestra B; (a) en un área de $2 \times 2 \pm 0.2 \text{ mm}^2$ en el punto M12; (b) en un área de $3 \times 3 \pm 0.3 \text{ mm}^2$ en el punto M17; (c) en un área de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$, en el punto M13.

En la tabla 5-8 se muestran las afluencias de oro para los puntos M12, M17 y M13.

Tabla 5-8: Afluencia de la concentración de oro en tres puntos con diferentes áreas, en modo de energía $E01$, a 30 pulsos de la muestra B.

Punto	Área $[A]$ (mm^2)	Profundidad $[R_p]$ (nm)	Afluencia $[\Phi_0]$ (10^{16} iones/ cm^2)	Densidad $[\rho]$ (mJ/mm^2)
M12	$2 \times 2 \pm 0.2$	280	1.8	3.2 ± 0.6
M17	$3 \times 3 \pm 0.3$	260	2.8	4.9 ± 1.0
M13	$4 \times 4 \pm 0.4$	240	3.9	4.0 ± 0.6

Los datos registrados en la tabla 5-1 señalan que inicialmente la cantidad de oro en la muestra B era de $\Phi_0 = 4.4 \times 10^{16}$ iones/ cm^2 mientras que después de ser irradiada la muestra a diferentes áreas, los valores de las afluencias cambian. Estos valores se muestran en la tabla 5-8. Las afluencias para estos puntos disminuyen

comparados con el de referencia, por lo tanto hay una pérdida de oro dentro del material. El punto que presentó la mayor pérdida de oro después de irradiarse, fue el punto M12 cuya afluencia es de $\Phi_0 = 1.8 \times 10^{16}$ iones/cm².

Los espectros de retrodispersión se muestran en la Fig. 5-14.

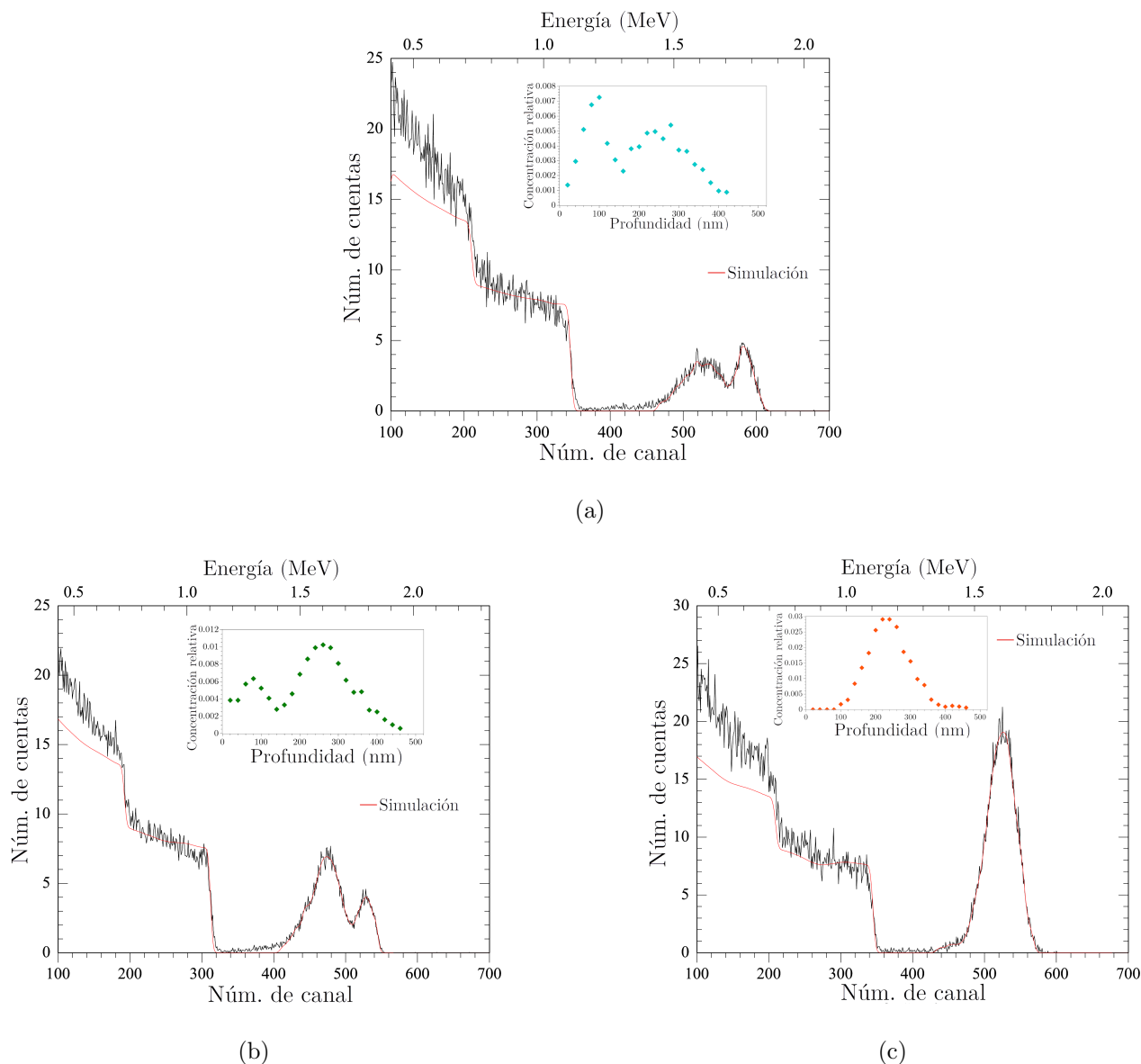


Fig. 5-14: Espectros de retrodispersión para diferentes áreas de la muestra B. En la parte superior se muestra el perfil de concentración de oro de acuerdo a la profundidad medida en nanómetros después de irradiar a 30 pulsos en modo de energía $E01$. (a) para un área de $2 \times 2 \pm 0.2$ mm² en el punto M12 cuya afluencia es $\Phi_0 = 1.8 \times 10^{16}$ iones/cm², a 280 nm; (b) para un área de $3 \times 3 \pm 0.3$ mm² en el punto M17, con una afluencia de $\Phi_0 = 2.8 \times 10^{16}$ iones/cm², a 260 nm; (c) para un área de $4 \times 4 \pm 0.4$ mm² en el punto M13, con una afluencia de $\Phi_0 = 3.9 \times 10^{16}$ iones/cm², a 240 nm.

Los resultados muestran que aunque los tres puntos mencionados tienen una densidad de energía similar, el efecto de irradiación en la muestra con el área menor es considerablemente mayor tanto en la reducción de radio como de concentración de oro contenido, mientras que en los puntos en que se irradió con un área mayor, los espectros de absorción y de retrodispersión también reflejan que el cambio fue menor.

Estas diferencias en los resultados pueden deberse que había zonas de mayor irradiación que otras dentro del área de un mismo punto, es decir, el proceso de irradiación parecía tener una componente no homogénea producida

por el espejo y la lente que conforman el sistema del proceso de irradiación.

5.2.3. Variación de la densidad de energía

A continuación se mantuvo el área constante y se varió la energía del láser con la que se irradió la muestra. El número de pulsos con el que se irradió la muestra se mantuvo en 30 y en este caso se seleccionaron áreas fijas de una de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$.

En el caso del área de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$ se obtuvieron 6 puntos de irradiación sobre la muestra C. El diagrama de los puntos de irradiación se puede ver en la Fig. 5-9(b). Los puntos fueron irradiados desde el modo de energía $E01$ hasta el modo máximo del láser $E23$. En la tabla 5-9 se muestran la energía, la densidad de energía y el radio de las nanopartículas correspondientes a los seis puntos de irradiación.

Tabla 5-9: Radio de las nanopartículas de oro, en diferentes puntos de irradiación, variando el modo de energía para áreas de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$, en la muestra C.

Punto	Modo de Energía	Energía [E] (mJ)	Densidad [ρ] (mJ/mm ²)	Radio [r] (nm)
P1	$E01$	63.8 ± 7.5	4.0 ± 0.6	3.0 ± 0.1
P2	$E03$	65.7 ± 8.0	4.1 ± 0.6	2.9 ± 0.1
P3	$E05$	65.2 ± 10.5	4.1 ± 0.8	2.6 ± 0.7
P6	$E10$	62.3 ± 16.6	3.9 ± 1.1	2.6 ± 0.8
P4	$E15$	74.2 ± 15.5	4.6 ± 1.2	2.2 ± 0.5
P5	$E23$	82.2 ± 13.3	5.1 ± 1.0	2.2 ± 1.0

De la tabla 5-2 se puede ver que el radio promedio de las nanopartículas de oro antes de irradiar, para la muestra C es de $4.2 \pm 1.3 \text{ nm}$. Después de irradiar la muestra C en áreas de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ nm}$ el radio de las nanopartículas va disminuyendo. Estos valores se muestran en la tabla 5-9, en donde el punto irradiado a menor modo de energía $E01$ de valor $63.8 \pm 7.5 \text{ mJ}$, fue P1. Para este punto se obtuvo que el radio de las nanopartículas es de $3.0 \pm 0.1 \text{ nm}$, mientras que el punto P5, fue irradiado al máximo modo de energía $E23$ y le corresponde un radio de $2.2 \pm 0.1 \text{ nm}$.

Los espectros de absorción variando el modo de energía para cada punto de la muestra C, a 30 pulsos y en un área de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$, así como la gráfica de variación del radio de acuerdo con la densidad de energía de cada punto, se muestran en la Fig. 5-15(a) y (b), respectivamente.

Los espectros de absorción que se muestran en la Fig. 5-15(a) se obtuvieron para cada punto, es decir, se obtuvieron seis espectros de absorción, más el de referencia. En la Fig. 5-15(a) solo se visualizan los espectros de aquellos puntos que se irradiaron a modo de energía $E01$, $E10$, $E15$ y el de referencia los cuales pertenecen a los puntos P1, P6 y P4 respectivamente, los demás espectros no aparecen porque las curvas de resonancia de los plasmones de superficie son muy similares a las presentadas en la Fig. 5-15(a).

Los espectros de absorción presentados tienen su máximo en 550 nm. Ninguno de ellos está desplazado, son simétricos y cada uno de ellos tiene sólo una resonancia, por lo que no existen efectos multipolares mayores al dipolar que sean notorios.

La disminución de la absorbancia está relacionada con la disminución del radio de las nanopartículas pues de la Fig. 5-15(b) se puede ver que el radio decrece conforme la densidad de energía aumenta, es decir, para un área

fija de $4 \times 4 \pm 0.4$ nm al aumentar el modo de energía, aumenta la densidad y con ello disminuye la absorbancia de los puntos de irradiación de la muestra C presentada en la Fig. 5-15(a).

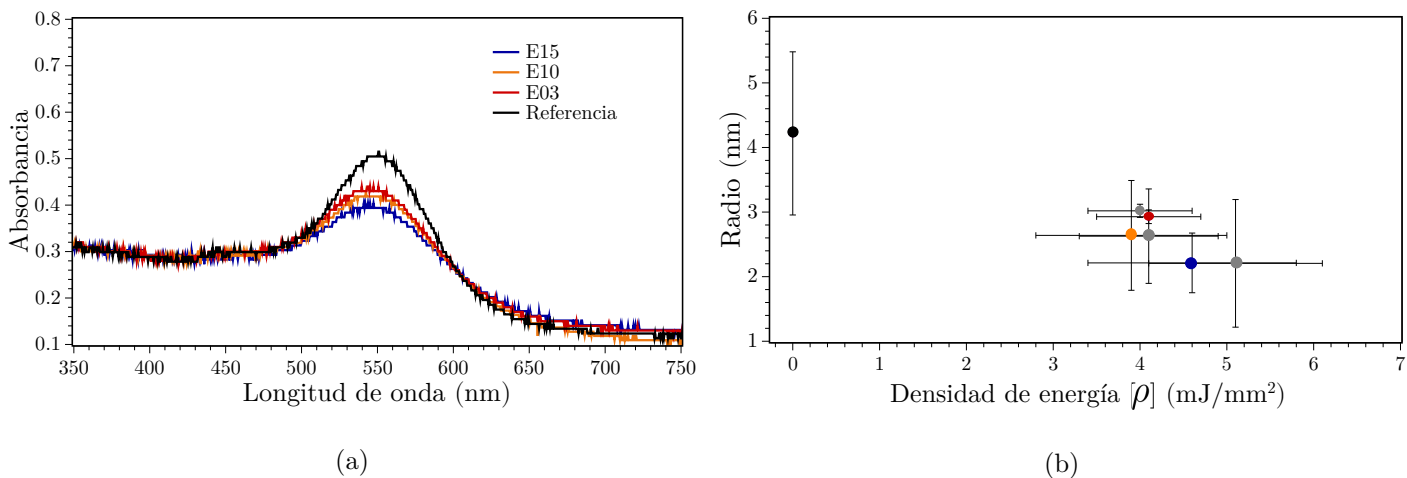


Fig. 5-15: Disminución de los espectros de absorción a 30 pulsos, a diferentes modos de energía, en diferentes puntos de la muestra C y de área de $4 \times 4 \pm 0.4$ mm² para cada punto; (b) Disminución del radio de las nanopartículas de oro como función de la densidad de energía ρ .

Las afluencias de los seis puntos de irradiación se muestran en la tabla 5-10.

Tabla 5-10: Afluencia de la concentración de oro en seis puntos diferentes, cada uno con un área de $4 \times 4 \pm 0.4$ mm², a diferentes modos de energía, a 30 pulsos, en la muestra C.

Punto	Modo de energía	Energía [E] (mJ)	Profundidad [R_p] (nm)	Afluencia [Φ_0] (10^{16} iones/cm ²)	Densidad [ρ] (mJ/mm ²)
P1	<i>E01</i>	63.8 ± 7.5	230	3.5	4.0 ± 0.6
P2	<i>E03</i>	65.7 ± 8.0	230	3.3	4.1 ± 0.6
P3	<i>E05</i>	65.2 ± 10.5	250	3.3	4.1 ± 0.8
P6	<i>E10</i>	62.3 ± 16.6	230	3.2	3.9 ± 1.1
P4	<i>E15</i>	74.2 ± 15.5	270	3.2	4.6 ± 1.2
P5	<i>E23</i>	82.2 ± 13.3	218	2.8	5.1 ± 1.0

El valor de la afluencia del punto de referencia para la muestra C, el cual se puede observar en la tabla 5-1 es de $\Phi_0 = 4.3 \times 10^2$ iones/cm² que comparado con las afluencias de la tabla 5-10 se muestra una disminución de la afluencia. La menor afluencia que se obtuvo fue para el punto P5, siendo ésta de 2.8×10^{16} iones/cm² a un modo de energía máximo *E23* correspondiente a 82.2 ± 13.3 mJ y una densidad de energía de 5.1 ± 1.0 mJ/mm².

Los espectros de retrodispersión de los seis puntos irradiados se muestran en la Fig. 5-16. Al igual que en espectros de retrodispersión anteriores, las Figs. 5-16(e) y (f) presentan dos picos.

Es importante señalar que al aumentar el modo de energía para áreas de $4 \times 4 \pm 0.4$ mm² en los puntos de irradiación en la muestra C, la densidad de energía aumenta. Al aumentar la densidad de energía sobre la superficie de la muestra de zafiro, el daño que el láser le causa a la superficie del material es mayor. Esto se ve reflejado en la disminución de los valores de la afluencia, como se muestra en la tabla 5-10, es decir, se tiene una mayor pérdida del material.

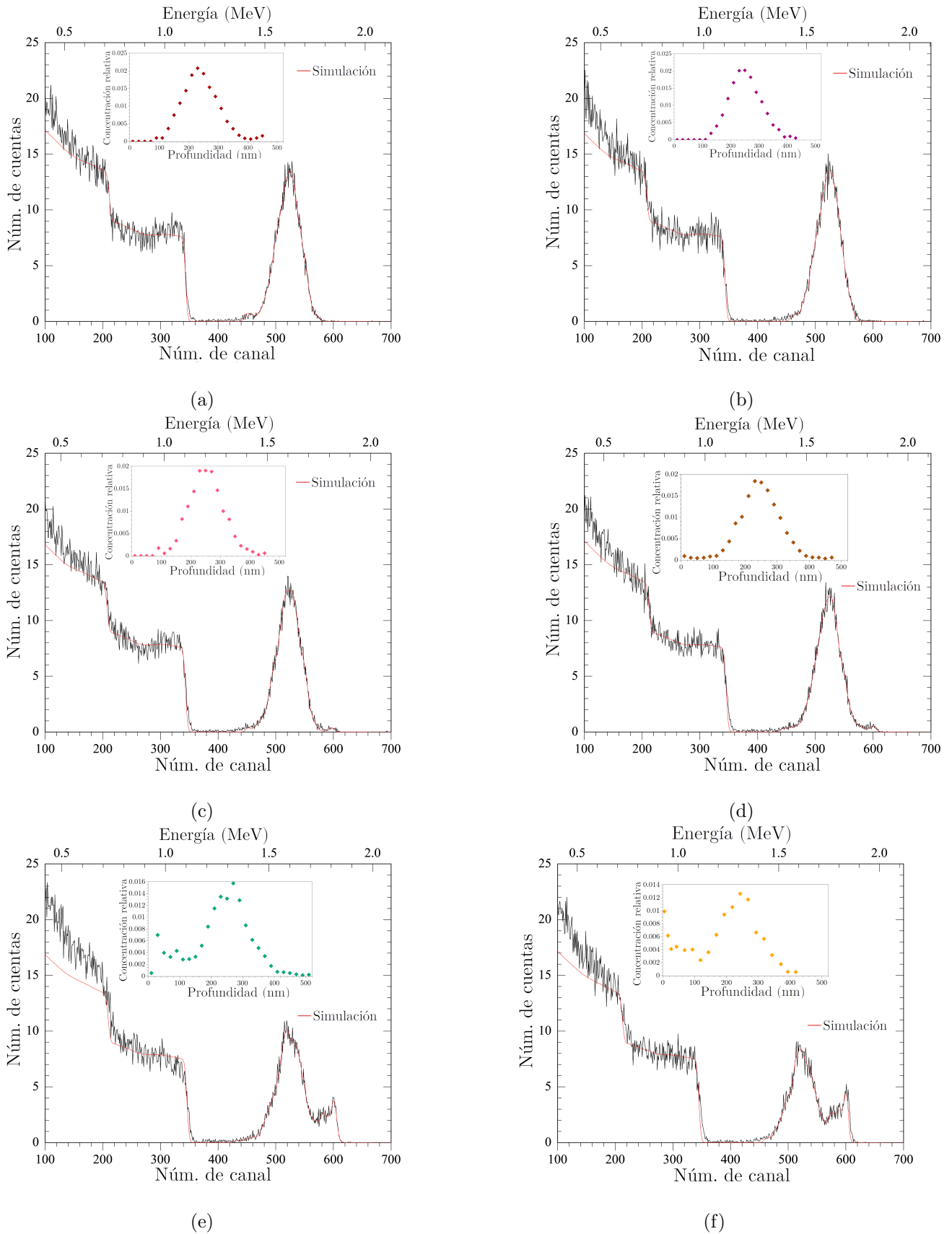


Fig. 5-16: Espectros de retrodispersión para diferentes puntos de áreas de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$ cada uno, en la muestra C. En la parte superior se muestra el perfil de concentración de oro de acuerdo a la profundidad medida en nanómetros después de irradiar cada punto a 30 pulsos. (a) para el punto P1, a modo de energía E01 cuya afluencia es $\Phi_0 = 3.5 \times 10^{16}$ iones/cm² a 230 nm; (b) punto P2, modo de energía E03, con una afluencia de $\Phi_0 = 3.3 \times 10^{16}$ iones/cm², a 230 nm; (c) punto P3, modo de energía E05, con una afluencia de $\Phi_0 = 3.3 \times 10^{16}$ iones/cm², a 250 nm; (d) punto P6, modo de energía E10, con una afluencia de $\Phi_0 = 3.2 \times 10^{16}$ iones/cm², a 230 nm; (e) punto P4, modo de energía E15, con una afluencia de $\Phi_0 = 3.2 \times 10^{16}$ iones/cm², a 270 nm; (f) punto P5, modo de energía E23, con una afluencia de $\Phi_0 = 2.8 \times 10^{16}$ iones/cm², a 218 nm.

Estudio de la superficie irradiada en áreas de 4x4 mm²

Mediante el microscopio electrónico de fuerza atómica, se obtuvieron imágenes topográficas con áreas de barrido de 10x10 μm en dos y tres dimensiones de la superficie del punto P5 irradiado a modo de energía E23 de valor 82.2 ± 13.3 mJ, en un área de 4x4 ± 0.4 mm² y a 30 pulsos, en la muestra C. Estas imágenes se muestran en la Fig. 5-17.

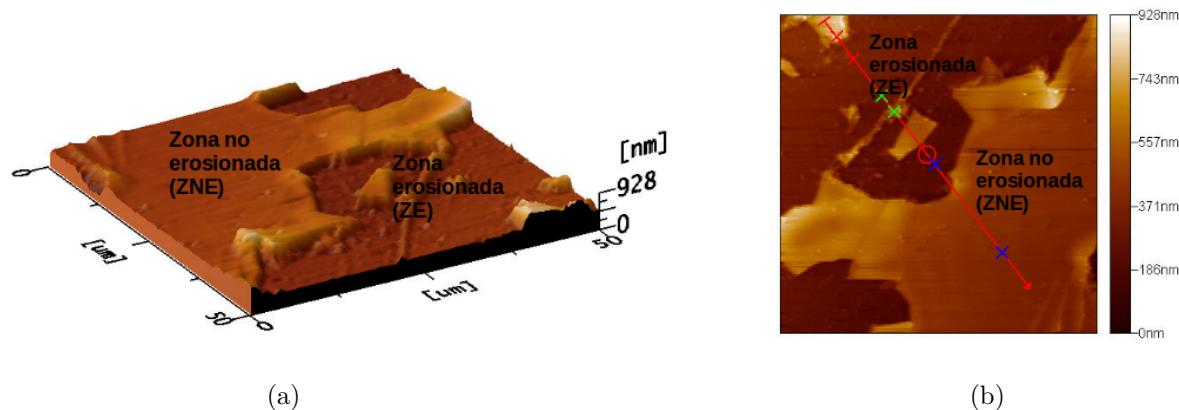


Fig. 5-17: Imágenes de fuerza atómica con áreas de barrido de 10x10 μm que muestran la rugosidad en la superficie de irradiación del punto P5, en un área de 4x4 ± 0.4 mm², a modo de energía E23 de valor 82.2 ± 13.3 mJ, y a 30 pulsos de láser en la muestra C; (a) Imagen topográfica en tres dimensiones; (b) Imagen topográfica en dos dimensiones. En ambas imágenes las zonas más claras representan mayor altura.

En la Fig. 5-17(a) y (b) se muestran las imagen topográficas de la superficie en tres dimensiones y en dos dimensiones, respectivamente. En ambas imágenes, las zonas más claras representan las de mayor altura.

Dado que la irradiación del láser no resultó ser homogénea en toda la superficie de cada uno de los puntos de irradiación, se encontraron zonas en las que el zafiro fue desprendido y zonas en las que no hubo desprendimiento, como se observa en la Fig. 5-17. A las primeras zonas se les denominó zonas erosionadas mientras que a las segundas se les denominó como zonas no erosionadas.

De las imágenes de la Fig. 5-17 se obtuvo la vista de perfil de la superficie del punto P5 irradiado en donde se analizó la diferencia de alturas en la superficie del material. Esto permitió ver la rugosidad en la superficie irradiada. La superficie irradiada vista de perfil se puede observar en la Fig. 5-18 y los correspondientes valores de las alturas y sus diferencias se muestran en la tabla 5-11.

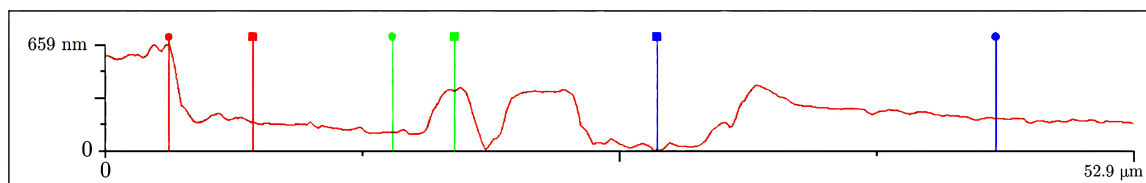


Fig. 5-18: Imagen de la superficie irradiada, vista de perfil correspondiente al punto P5, irradiado a una energía E23 de valor 82.2 ± 13.3 mJ, en un área 4x4 ± 0.4 mm² en la muestra C.

Tabla 5-11: Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie del punto P5 irradiado a una energía E23 de valor 82.2 ± 13.3 mJ, en un área 4x4 ± 0.4 mm² en la muestra C.

Punto	Símbolo	Altura (nm)		
Z1	●	658	115	202
Z2	■	177	372	0
Z2-Z1	-	481	257	202

La superficie del punto P5 irradiado muestra escalones debido al desprendimiento de material por irradiación. Las alturas de los picos en la superficie más altos que se tenían antes de irradiar fueron del orden de 28.94 nm de acuerdo con la diferencia entre los marcadores en azul de los datos de la tabla 5-4 y la Fig. 5-7 mientras que, después de irradiar la superficie del punto P5 en la muestra C, se observa que la diferencia entre los marcadores rojos en un punto promedio y el punto más alto de la imagen es de 481 nm. De la misma tabla se observa que la diferencia entre un punto bajo y uno de altura intermedia es de 202 nm, pertenecientes a los marcadores en azul.

La diferencia de alturas de 481 nm entre los marcadores en rojo es el valor más cercano a la profundidad de las nanopartículas obtenida de la micrografía que se muestra en la Fig. 5-21(a) cuyo valor es de 331.6 ± 27.1 nm, comparado con la profundidad medida en el espectro de retrodispersión de la Fig. 5-16(a) y de la tabla 5-10 se ve que la profundidad es de 218 nm.

Para cada uno de los puntos P1 hasta P6, con áreas de $4 \times 4 \pm 0.4$ mm² se obtuvieron sus imágenes topográficas similares a las imágenes de la Fig. 5-17 para el punto P5, de donde se obtuvieron la rugosidad promedio en la zona erosionada (σ_{ZE}) y la rugosidad promedio en la zona no erosionada (σ_{ZNE}). Estos valores así como la energía a la que fueron irradiados los puntos, se muestran en la tabla 5-12.

Tabla 5-12: Rugosidad en la superficie erosionada y no erosionada de los puntos irradiados desde P1 hasta P6 en la muestra C de áreas $4 \times 4 \pm 0.4$ mm², a diferentes modos de energía y 30 pulsos de irradiación láser.

Punto	Modo de energía	Energía [<i>E</i>] (mJ)	Densidad de Energía [ρ] (mJ/mm ²)	Rugosidad [σ_{ZE}] (nm)	Rugosidad [σ_{ZNE}] (nm)
P1	<i>E01</i>	63.8 ± 7.5	4.0 ± 0.6	1.99	1.59
P2	<i>E03</i>	65.7 ± 8.0	4.1 ± 0.6	2.62	1.81
P3	<i>E05</i>	65.2 ± 10.5	4.1 ± 0.8	4.30	6.26
P6	<i>E10</i>	62.3 ± 16.6	3.9 ± 1.1	9.24	4.49
P4	<i>E15</i>	74.2 ± 15.5	4.6 ± 1.2	12.9	7.33
P5	<i>E23</i>	82.2 ± 13.3	5.1 ± 1.0	15.2	9.14

De acuerdo con la tabla 5-12 se observa que los valores de la rugosidad tanto para las zonas erosionadas como las no erosionadas aumentan conforme aumenta la densidad de energía. Así, para el punto P1, el cual fue irradiado al modo de energía mínimo *E01* correspondiente a 63.8 ± 7.5 mJ, su rugosidad en la zona erosionada fue de 1.99 nm, mayor al valor de su rugosidad en la zona no erosionada cuyo valor es de 1.59 nm. En el caso del punto P5, se irradió al máximo modo de energía *E23* correspondiente a 82.2 ± 13.3 mJ, cuya rugosidad en la zona erosionada es de 15.2 nm, que es mayor tanto a la rugosidad del punto P1 en la zona erosionada como a su propia rugosidad en la zona no erosionada de valor 9.14 nm.

En la Fig. 5-19 se grafican los valores de la rugosidad promedio con respecto a la energía de irradiación de los puntos P1 al P6 tanto para las zonas no erosionadas como para las zonas erosionadas.

En la Fig. 5-19 se observa que la rugosidad aumenta conforme aumenta la densidad de energía, tanto para las zonas no erosionadas como las zonas erosionadas de los puntos P1 al P6. Además la rugosidad es mayor en las zonas erosionadas que en las zonas no erosionadas, por lo que se puede decir que al aumentar la densidad de energía de irradiación, mayor daño se causa al material y en consecuencia la rugosidad en el material también aumenta.

En el caso de la irradiación láser variando la densidad de energía, la concentración de oro de la tabla 5-10 muestra que se está perdiendo oro después de irradiar. Mediante la medición de la rugosidad de la tabla 5-11, se observa que

la profundidad del desprendimiento de material es similar a la profundidad de las nanopartículas y es mayor en las zonas de desprendimiento que en las zonas donde no hay desprendimiento, por tanto, la irradiación láser remueve material junto con nanopartículas a medida que la densidad de energía crece, sin embargo las nanopartículas no se disuelven completamente, de acuerdo con los valores del radio de la tabla 5-9.

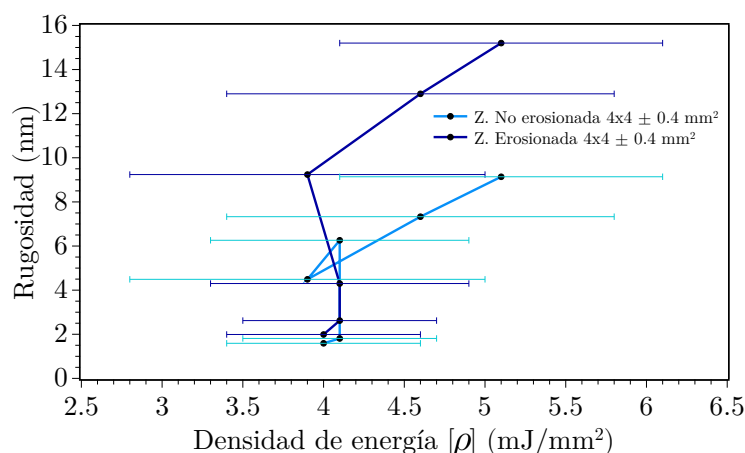


Fig. 5-19: Gráfica de rugosidad de la superficie erosionada y no erosionada con respecto a la energía de los puntos P1 hasta P6, con áreas de irradiación de $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$ y a 30 pulsos de irradiación en la muestra C.

Optimización de la densidad de energía

Los siguientes puntos que se irradiaron en la muestra C se hicieron con la finalidad de optimizar la densidad de energía y con ello generar el menor daño posible por irradiación a las muestras de zafiro. Para ello se trabajó con áreas de $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$, a 30 pulsos y variando el modo de energía. En este caso sólo se realizaron tres puntos de irradiación P7, P8 y P9. Los valores del radio de las nanopartículas después de irradiar, el modo de energía a la que se irradiaron y el valor de la densidad de energía se muestran en la tabla 5-13.

Tabla 5-13: Radio de las nanopartículas de oro después de irradiar, en diferentes puntos variando el modo de energía para áreas de $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$ en la muestra C.

Punto	Modo de Energía	Energía [E] (mJ)	Densidad [ρ] (mJ/mm²)	Radio [r] (nm)
P7	E01	98.4 ± 12.1	4.1 ± 0.6	3.7 ± 0.1
P8	E12	115.0 ± 19.2	4.8 ± 0.9	3.2 ± 0.1
P9	E23	122.0 ± 19.9	5.1 ± 0.9	2.8 ± 1.1

Para el punto P7 mostrado en la tabla 5-13 el valor del radio de las nanopartículas es de $3.7 \pm 0.1 \text{ nm}$ a modo de energía E01 que corresponde a un valor de $98.4 \pm 12.1 \text{ mJ}$, mientras que el punto P9 presenta el menor valor del radio de los tres puntos, con un valor de $2.8 \pm 1.1 \text{ nm}$ a una energía máxima de E23 de valor $122.0 \pm 19.9 \text{ mJ}$.

Los espectros de absorción así como la variación del radio en función de la densidad de energía para los puntos P7, P8 y P9 se muestran en la Fig. 5-20.

Para los tres puntos de irradiación P7, P8 y P9 se utilizaron modos de energía E0, E12 y E23, respectivamente. De la Fig. 5-20(a) se observa que los espectros de absorbancia van disminuyendo conforme aumenta la energía. Todos los espectros de absorbancia tienen su máximo en 550 nm, son simétricos y no están desplazados.

En la tabla 5-13 se puede ver que el radio de las nanopartículas disminuye conforme aumenta la densidad de

energía, lo cual se ve reflejado en la disminución de la absorbancia de la Fig. 5-20(a). Mientras la cantidad de energía va aumentando por punto irradiado, el radio disminuye y al mantener el valor del área fija, la densidad de energía aumenta, tal como se observa en la Fig. 5-20(b).

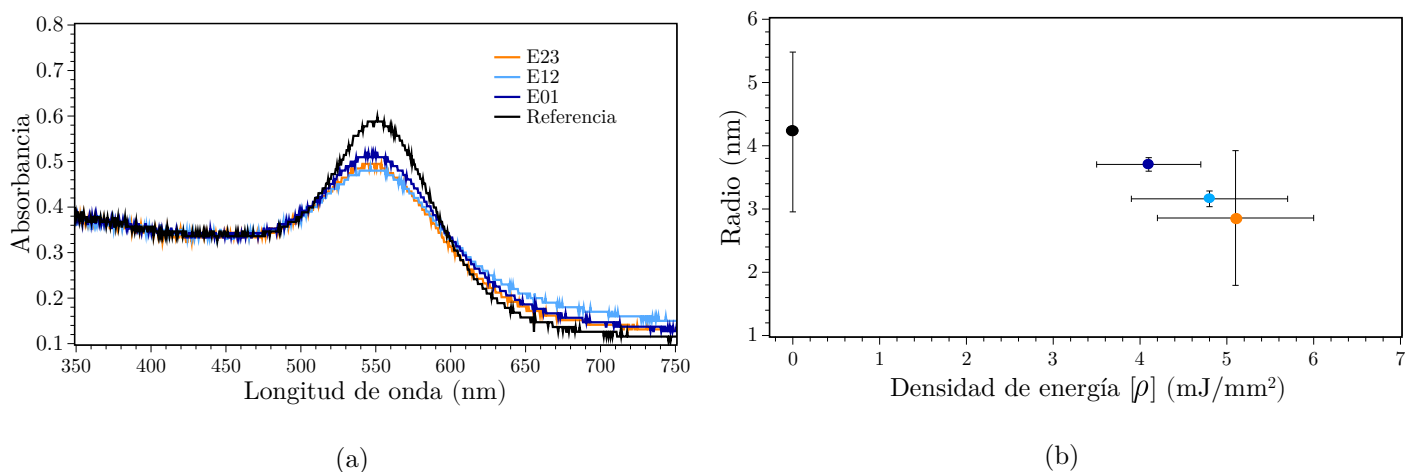


Fig. 5-20: (a) Disminución de los espectros de absorción a 30 pulsos, a diferentes modos de energía, en diferentes puntos de la muestra C y de área de $4 \times 6 \pm 0.5$ mm² para cada punto; (b) Disminución del radio de las nanopartículas de oro como función de la densidad de energía ρ .

La Fig. 5-21 muestra la micrografía de barrido electrónico a 50,000 aumentos y el histograma que pertenecen al punto P8, irradiado en un área de $4 \times 6 \pm 0.5$ mm², a modo de energía E_{12} de valor 115.0 ± 19.2 mJ, a 30 pulsos, en la muestra C.

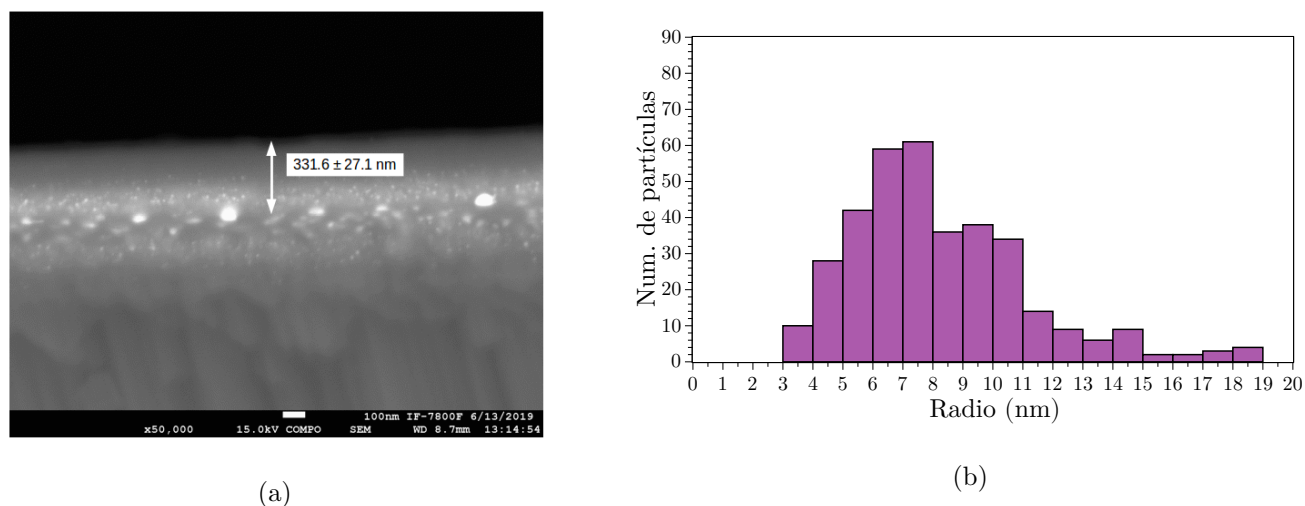


Fig. 5-21: Micrografía e histograma de la muestra C, para el punto P8. El histograma fue obtenido a partir de las micrografías de barrido electrónico y mediante el programa Imagej 1.51 p después de irradiar; (a) Micrografía de barrido electrónico a 50,000 aumentos, para esta muestra la profundidad de las nanopartículas es de 331.6 ± 27.1 nm; (b) Histograma de distribución de tamaños del radio de las nanopartículas irradiadas.

En la micrografía de la Fig. 5-21(a) se observa que la profundidad a la que se encuentran las nanopartículas es de 331.6 ± 27.1 nm. Mientras que el histograma de distribución del radio muestra que la mayoría de las nanopartículas en esa zona tiene un radio que se encuentra entre los 7 y 8 nm. Si se compara con los resultados obtenidos del histograma de distribución de tamaños de la Fig. 5-3, se observa que el radio disminuye después de ser irradiada la muestra, lo que coincide con los espectros de absorción de la Fig. 5-20. Además también se puede observar que la distribución de tamaños de las nanopartículas se puede aproximar por una curva gaussiana, sin embargo también se ve que la distribución de tamaños no es uniforme en profundidad y que aparecen nanopartículas particularmente grandes.

Los espectros de retrodispersión de los tres puntos de irradiación se muestran en la Fig. 5-22.

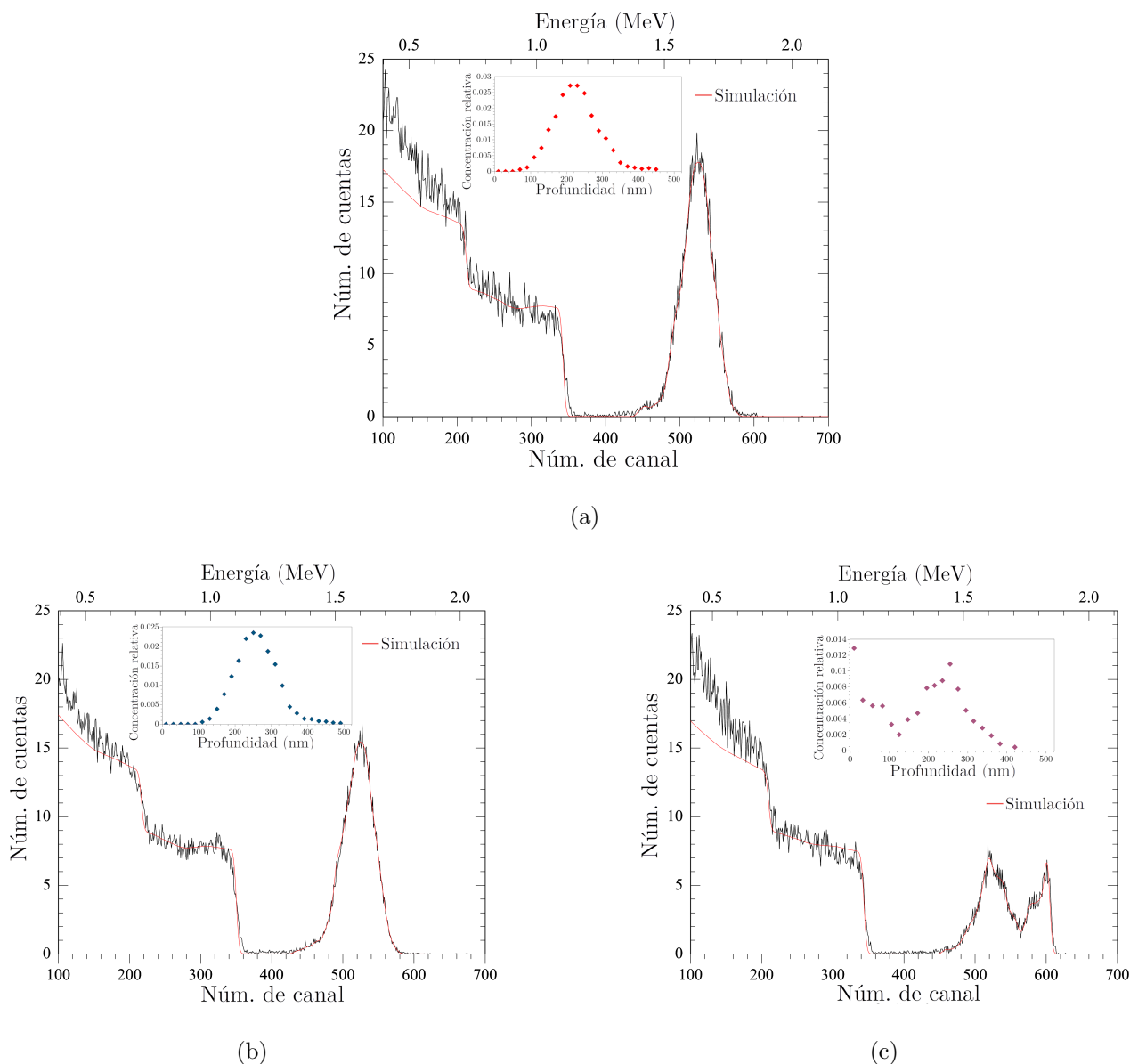


Fig. 5-22: Espectros de retrodispersión para diferentes puntos de áreas de $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$ cada uno, en la muestra C. En la parte superior se muestra el perfil de concentración de oro de acuerdo a la profundidad medida en nanómetros después de irradiar cada punto a 30 pulsos. (a) para el punto P7, a modo de energía E_{01} cuya afluencia es $\Phi_0 = 4.1 \times 10^{16}$ iones/ cm^2 , a una profundidad de 230 nm; (b) punto P8, modo de energía E_{12} , con una afluencia de $\Phi_0 = 2.6 \times 10^{16}$ iones/ cm^2 , a una profundidad de 250 nm; (c) punto P9, modo de energía E_{23} , con una afluencia de $\Phi_0 = 3.9 \times 10^{16}$ iones/ cm^2 , a una profundidad de 255 nm.

Las afluencias de oro de los puntos P7, P8 y P9 se muestran en la tabla 5-14.

Tabla 5-14: Afluencia de la concentración de oro en tres puntos diferentes, cada uno con un área de $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$, a diferentes modos de energía, a 30 pulsos, en la muestra C.

Punto	Modo de energía	Energía [E] (mJ)	Profundidad [R_p] (nm)	Afluencia [Φ_0] (10^{16} iones/ cm^2)	Densidad [ρ] (mJ/ mm^2)
P7	E_{01}	98.4 ± 12.1	230	4.1	4.1 ± 0.6
P8	E_{12}	115.0 ± 19.2	250	3.9	4.8 ± 0.9
P9	E_{23}	122.0 ± 19.9	255	2.6	5.1 ± 0.9

La afluencia de oro en la muestra C antes de irradiar registrada es de 4.3×10^{16} iones/cm² mostrada en la tabla 5-1. Sin embargo después de irradiar los puntos de la muestra C, el valor de las afluencias disminuye, tal como se observa en la tabla 5-14. El punto de menor densidad es el punto P7, al que le corresponde una afluencia menor que el de referencia pero mayor que las afluencias de los otros dos puntos de irradiación, con un valor de 4.1×10^{16} iones/cm². En cambio, para el punto P9 que tiene la densidad de energía más alta, su afluencia es de 2.6×10^{16} iones/cm² siendo éste valor el más bajo de las afluencias de los tres puntos.

Aún cuando en este caso se tomaron áreas de $4 \times 6 \pm 0.5$ mm², al igual que en el caso de los puntos irradiados con áreas de $4 \times 4 \pm 0.4$ mm², se observa que al aumentar la densidad de energía mediante el aumento de la energía, el daño que el láser causa al material es mayor, pues a mayor densidad de energía resulta ser menor el valor de la afluencia, lo que significa una mayor pérdida de oro en la muestra.

Estudio de la superficie irradiada en áreas de 4×6 mm²

Para los puntos de irradiación P7 a P9, también se obtuvieron imágenes de fuerza atómica de la superficie de irradiación. La Fig. 5-23 muestra las imágenes topográficas en dos y tres dimensiones con áreas de barrido de 10×10 μm pertenecientes al punto P9, de área de irradiación de $4 \times 6 \pm 0.5$ mm², irradiado a energía E23 correspondiente a 122.0 ± 19.9 mJ, a 30 pulsos, de la muestra C.

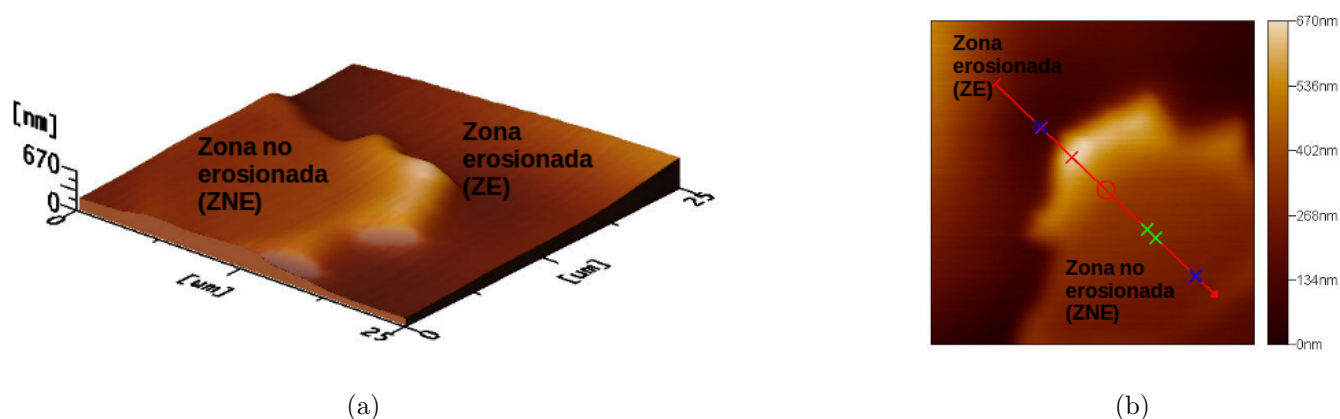


Fig. 5-23: Imágenes de fuerza atómica con áreas de barrido 10×10 μm que muestran la rugosidad en la superficie de irradiación del punto P9, en un área de $4 \times 6 \pm 0.5$ mm², a modo de energía E23 de valor 122.0 ± 19.9 mJ y a 30 pulsos de láser en la muestra C; (a) Imagen topográfica en tres dimensiones; (b) Imagen topográfica en dos dimensiones. En ambas imágenes las zonas más claras representan las de mayor altura.

En las imágenes topográficas de la Fig. 5-23 puede observarse que las zonas de mayor altura son más claras y que además se observa un escalón.

A continuación, en la Fig. 5-24 se presenta la imagen vista de perfil de la superficie que corresponde a las imágenes topográficas de la Fig. 5-23. En la tabla 5-15 se muestran los datos de las alturas y sus diferencias medidas para analizar la rugosidad en el punto de irradiación P9 de la muestra C.

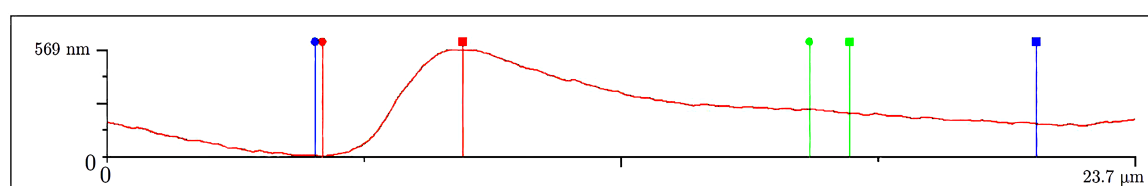


Fig. 5-24: Imagen de la superficie irradiada, vista de perfil correspondiente al punto P9, irradiado a una energía E23 de valor 122.0 ± 19.9 mJ, en un área $4 \times 6 \pm 0.5$ mm² en la muestra C.

Tabla 5-15: Alturas y sus diferencias de los marcadores para medir la rugosidad en la superficie del punto P9 irradiado a una energía $E23$ de valor 122.0 ± 19.9 mJ, en un área $4 \times 6 \pm 0.5$ mm² en la muestra C.

Punto	Símbolo	Altura (nm)		
Z1	●	0	249.9	6.7
Z2	■	567.9	228.9	173.9
Z2-Z1	-	567.9	21	167.2

La Fig. 5-24 muestra un escalón formado por el desprendimiento de material por irradiación láser. De la tabla 5-15 se ve que la diferencia de alturas de los marcadores en rojo señala que la altura del escalón es de 567.9 nm, en tanto que la diferencia de altura entre los marcadores en azul muestran un valor de 167.2 nm. Ambos valores son mucho mayores si los comparamos con las alturas de la Fig. 5-7 pertenecientes a los picos más altos en la superficie de la muestra antes de irradiar.

Al comparar la altura del escalón de 567.9 nm con la profundidad de las nanopartículas irradiadas obtenidas de la micrografía de la Fig. 5-21(a) que es de 331.6 ± 27.1 nm, se observa que la diferencia de altura medida por rugosidad es menor que la mostrada en la micrografía. Si ahora se compara este resultado con la profundidad medida a partir del espectro de retrodispersión de la Fig. 5-22(a) y la tabla 5-14 cuyo valor es de 230 nm. Esto quiere decir que el daño debido a la irradiación láser en la superficie de la muestra no es homogéneo, por lo que en algunas zonas la diferencia de altura es mayor que en otras.

Los puntos P7, P8 y P9 también mostraron una rugosidad promedio tanto en las zonas erosionadas como en las zonas no erosionadas. Los valores de la energía así como de la rugosidad en dichas zonas se muestran en la tabla 5-16.

Tabla 5-16: Rugosidad en la superficie erosionada y no erosionada de los puntos irradiados desde P7 hasta P9 en la muestra C de áreas $4 \times 6 \pm 0.5$ mm², a diferentes modos de energía y 30 pulsos de irradiación láser.

Punto	Modo de energía	Energía [E] (mJ)	Densidad de Energía [ρ] (mJ/mm ²)	Rugosidad [σ_{ZE}] (nm)	Rugosidad [σ_{ZNE}] (nm)
P7	$E01$	98.4 ± 12.1	4.1 ± 0.6	3.35	2.01
P8	$E12$	115.0 ± 19.2	4.8 ± 0.9	6.55	5.34
P9	$E23$	122.0 ± 19.9	5.1 ± 0.9	7.46	5.41

En la tabla 5-16 se observa que el punto P7, al modo mínimo de energía $E01$ que corresponde al valor de 98.4 ± 12.1 mJ presenta una rugosidad en la zona erosionada de 3.35 nm, que es mayor que en la zona no erosionada de valor 2.01 nm. El punto irradiado con el mayor modo de energía $E23$ de valor 122.0 ± 19.9 mJ, fue P9. Para este punto en la zona erosionada alcanzó un valor de la rugosidad de 7.46 nm que es mayor a la rugosidad del punto P7 en la zona erosionada y al mismo tiempo también es mayor que su propia rugosidad en la zona no erosionada de valor 5.41 nm.

La gráfica de rugosidad promedio tanto de la superficie erosionada como de la no erosionada para los puntos P7, P8 y P9, de áreas de $4 \times 6 \pm 0.5$ mm² irradiadas a 30 pulsos y a diferentes energías de la muestra C, se aprecia en la Fig. 5-25.

En la Fig. 5-25 se pueden observar que tanto para las zonas erosionadas como para las zonas no erosionadas la rugosidad crece al aumentar la densidad de energía. Además, como era de esperarse, la rugosidad en las zonas erosionadas es mayor que en las zonas no erosionadas de los tres puntos en la muestra C. En general se observa que a mayor densidad de energía, mayor es el daño causado en el material, por lo que la rugosidad en las áreas de

irradiación aumenta.

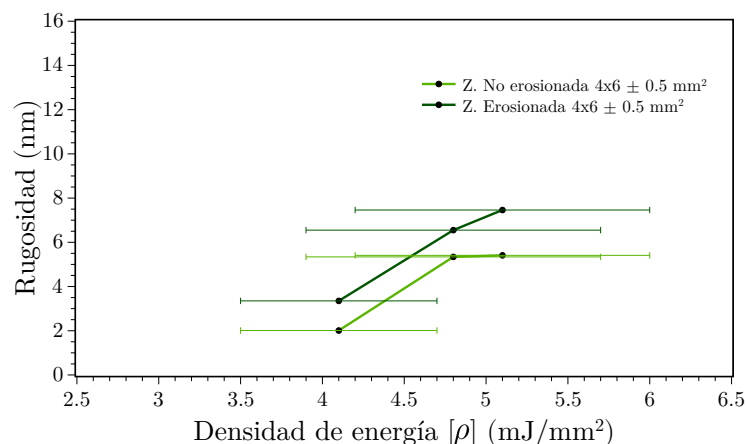


Fig. 5-25: Gráfica de rugosidad de la superficie erosionada y no erosionada con respecto a la densidad de energía de los puntos P7 hasta P9, con áreas de irradiación de $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$ y a 30 pulsos de irradiación en la muestra C.

Al buscar optimizarse la irradiación láser mediante un área de $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$ se encuentra que el radio de las nanopartículas disminuye conforme aumenta la densidad de energía. Sin embargo, por la curva de resonancia de plasmón de superficie perteneciente al punto P9, irradiado al máximo modo de energía E_{23} del láser de la Fig. 5-20(a) y por el radio de la tabla 5-13, se sabe que aún hay nanopartículas que no se disolvieron completamente dentro de la muestra C. Las afluencias de la tabla 5-14 indican que hay una pérdida de oro en la muestra irradiada, aún después de optimizar la ablación láser mediante el área. La profundidad a la que se desprende parte del material irradiado, es similar a la profundidad de las nanopartículas, de acuerdo con la tabla 5-15 de rugosidad. En este caso también se observa que la rugosidad aumenta conforme aumenta la densidad de energía y es mayor en las zonas donde hay desprendimiento de material que en las zonas donde no hay desprendimiento.

5.3. Conclusiones

En este trabajo se estudiaron los efectos de irradiación láser sobre nanopartículas de oro producidas por el método de implantación de iones, en tres muestras de zafiro: A, B y C. La muestra A fue irradiada con longitud de onda de 1,064 nm, con lo que se buscó la formación de nanopartículas de oro mientras que las muestras B y C fueron sometidas a un tratamiento térmico y posteriormente irradiadas con longitud de onda de 532 nm buscando disolverlas mediante ablación láser.

La irradiación con 2,000 pulsos láser de longitud de onda de 1,064 nm sobre un área de $3 \times 3 \pm 0.3 \text{ mm}^2$, con densidad de energía $132.2 \pm 4.7 \text{ mJ/mm}^2$, al máximo modo de energía *E23* generó un aumento de temperatura de 2.6°C por pulso en la muestra A. El aumento de temperatura de 2.6°C por pulso no alcanzó las condiciones de temperatura suficientes para la formación de las nanopartículas de oro, tal como se muestra en la gráfica de absorbancia de la Fig. 5-8. El único cambio observado fue la disminución del espectro de absorción debido al desprendimiento del carbono superficial depositado en el proceso de implantación.

Para las nanopartículas de oro formadas después del tratamiento térmico de 90 minutos, a una temperatura de 950°C y en una atmósfera reductora, los radios que se obtuvieron fueron de $5.4 \pm 2.0 \text{ nm}$ y $4.2 \pm 1.3 \text{ nm}$ para las muestras B y C, respectivamente y de acuerdo con la tabla 5-2. La variación de parámetros como el número de pulsos desde 5 hasta 140, la variación de áreas de irradiación de $2 \times 2 \pm 0.2 \text{ mm}^2$, $3 \times 3 \pm 0.3 \text{ mm}^2$ y $4 \times 4 \pm 0.4 \text{ mm}^2$, así como la densidad de energía de irradiación relacionada a los modos de energía *E01* hasta el modo máximo *E23* con longitud de onda de 532 nm, provocaron la disminución del radio de las nanopartículas llegando a valores del radio de $1.7 \pm 1.4 \text{ nm}$, $2.5 \pm 0.8 \text{ nm}$ y $2.2 \pm 1.0 \text{ nm}$, de acuerdo con las tablas 5-5, 5-7 y 5-9, sin embargo las nanopartículas no se disolvieron por completo en las muestras de zafiro.

La afluencia de oro antes de irradiar las muestras B y C fueron de $4.4 \times 10^{16} \text{ iones/cm}^2$ y $4.3 \times 10^{16} \text{ iones/cm}^2$, de acuerdo con la tabla 5-1, sin embargo, después de la irradiación láser variando parámetros como el número de pulsos, el área de irradiación y la densidad de energía, se observa una disminución de la afluencia, con valores de $1.5 \times 10^{16} \text{ iones/cm}^2$ y $2.8 \times 10^{16} \text{ iones/cm}^2$ tanto para el caso de la variación del área como de la variación de la densidad de energía, de acuerdo con las tablas 5-6, 5-8 y 5-10. La disminución de la afluencia indica que hay una pérdida de oro después de irradiar.

La irradiación láser provoca daños en la muestra como el desprendimiento de material, como puede verse en la Fig. 5-11(c). De acuerdo con la micrografía de la Fig. 5-21(a), la profundidad de las nanopartículas de oro irradiadas es de $331.6 \pm 27.1 \text{ nm}$ y es similar a los valores de rugosidad de la superficie de los puntos irradiados de la tabla 5-11, siendo el valor más cercano de 257 nm, lo que indica que parte de las nanopartículas que se pierden, se desprenden junto con material de zafiro irradiado provocando la disminución de la afluencia de oro en las muestras después de la irradiación.

Aún buscando optimizar el área de irradiación, para áreas de $4 \times 6 \pm 0.5 \text{ mm}^2$, a 30 pulsos, con longitud de onda de 532 nm, en la muestra C, las nanopartículas de oro no se disolvieron por completo, pues inicialmente tenían un radio de $4.2 \pm 1.3 \text{ nm}$ y después del proceso de irradiación alcanzaron un valor de $2.8 \pm 1.1 \text{ nm}$, de acuerdo con las tablas 5-2 y 5-13. La profundidad de las nanopartículas de oro en la muestra C es de $331.6 \pm 27.1 \text{ nm}$, de acuerdo con la micrografía de la Fig. 5-21(a), mientras que, de la tabla de rugosidad 5-15, el valor más cercano a la profundidad de las nanopartículas es de 167.2 nm. En este caso también el daño por irradiación provocó el desprendimiento de material junto con nanopartículas de oro, lo cual se ve reflejado en la disminución de la afluencia de oro, pues inicialmente se tenía una afluencia de $4.3 \times 10^{16} \text{ iones/cm}^2$ y después de irradiar, el valor más bajo que se obtuvo fue de $2.8 \times 10^{16} \text{ iones/cm}^2$, de acuerdo con las tablas 5-1 y 5-14.

En el futuro sería deseable realizar más experimentos que complementen los resultados actuales así como un análisis profundo de los efectos térmicos por medio de la ecuación de difusión del calor.

Referencias

- [1] W. K. Chu, J. M. Mayer, M. A. Nicolet. *Backscattering Spectrometry*. Academic Press. New York, 1978.
- [2] A. Das, T. Ferbel. *Introduction Nuclear and Particle Physics*. World Scientific, 2005.
- [3] E. Rutherford. “The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom”. *Phil. Mag.* **21**, 669-688 (1911).
- [4] H. Geiger, E. Marsden. “The Laws of deflexion of α particles through large angles”. *Phil. Mag.* **25**, 604-623 (1913).
- [5] B. R. Martin. *Nuclear and Particle Physics*. John Wiley and Sons Inc. Inglaterra, 2006.
- [6] P. Sigmund. *Particle Penetration and Radiation Effects*. Springer Science and Business Media, 2006.
- [7] J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiøtt. “Range concepts and heavy ion ranges”. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **33**, 1-42 (1963).
- [8] J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff. “Approximation method in classical scattering by screened coulomb fields”. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **36**, 1-32 (1968).
- [9] A. Crespo Sosa. *Estudio de películas de NdF_3 , por haces iónicos*. Tesis de licenciatura. Facultad de Ciencias, UNAM. México, 1991.
- [10] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark. *In the Stopping and Range of Ions in Matter*. Pergamon Press, New York, 1985.
- [11] J. Lindhard, M. Scharff. “Energy Dissipation by Ions in the keV Region”. *Phys. Rev.* **124**, 1-128 (1961).
- [12] O. B. Firsov. “A qualitative interpretation of the mean electron excitation energy in atomic collisions”. *Sov. Phys.* **36**, 1076-1080 (1959).
- [13] N. Bohr. “On the decrease of velocity of swiftly moving electrified particles in passing through matter”. *Phil. Mag.* **30**, 581-612 (1915).
- [14] P. D. Townsend, P. J. Chandler, L. Zhang. *Optical Effects of Ion Implantation*. Cambridge University Press, 1994.
- [15] C. F. Bohren, D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley-VCH Inc. New York, 1998.
- [16] D. J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Prentice Hall. New Jersey, 1999.
- [17] C. Noguez. “Optical Properties of Isolated and Supported Metal Nanoparticles”. *Opt. Mat.* **27**, 1204-1211 (2005).
- [18] B. T. Draine, P. J. Flatau. “Discrete-dipole approximation for scattering calculations”. *J. Opt. Soc. Am.* **11**, 1491-1499 (1994).
- [19] F. P. Incropera, D. P. Dewitt. *Fundamentos de transferencia de calor*. Prentice Hall, México, 1999.
- [20] A. N. Tikhonov, A. A. Samarskii. *Equations of Mathematical Physics*. Clarendon Laboratory Oxford, 1963.

- [21] M. v. Allmen, A. Blatter. *Laser-Beam Interactions with materials*. Springer Science and Business Media, 2da. Edic. New York, 2013.
- [22] Propiedades del zafiro. <https://www.guildoptics.com/sapphire-properties/sapphire-properties/>.
- [23] Página del acelerador Pelletron[®]. <http://www.pelletron.com>.
- [24] Manual de operación del programa RUMP. *RUMP and Genplot Manual*. El Paso Texas: Computer Graphic Service, Ltd., 2007. Página web: <http://www.genplot.com/doc/rump.htm>.
- [25] Manual de operación del horno. *Thermolyne*.
- [26] Manual de operación del espectrómetro. *HR2000+ Spectrometer Installation and Operation Manual, Ocean Optics, Inc.*
- [27] Manual de operación del láser. *NL310 Series Laser Technical description & user's manual*.
- [28] Manual de operación del sensor. *User Manual EnergyMaxTM Sensors. COHERENT*.
- [29] Manual de operación del display. *User Manual LabMaxTM-TOP Laser Power/EnergyMeter*.
- [30] J. I. Goldstein, D. E. Newbury, et al. *Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis*. Springer Science and Business Media, 4ta. Edic. New York, 2018.
- [31] G. Cao. *Nanostructures & Nanomaterials*. Imperial College Press, Londres, 2004.