

UNIVERSIDAD DE COSTA RICA
SISTEMA DE ESTUDIOS DE POSGRADO

DISEÑO DE UN ENFRIADOR DE TIPO
ZEEMAN PARA ÁTOMOS DE
ESTRONCIO: HACIA LA APLICACIÓN
DE REDES ÓPTICAS EN LA FÍSICA
DEL ESTADO SÓLIDO

Tesis sometida a la consideración de la comisión del Programa de
Estudios de Posgrado en Física para optar por el grado y título de
Maestría académica en física

MILENA GUEVARA BERTSCH

Ciudad Universitaria Rodrigo Facio, Costa Rica
2016

“Todo lo que puede ser imaginado... es real”

Pablo Picasso

Agradecimientos

Durante mis años de colegio descubrí que existía una profesión en la que uno se podía dedicar literalmente a estudiar el tiempo, desde ese día fue inevitable ingresar a la carrera de física. Me obsesionaba la idea de poder estudiar cosas que aparentan ser sencillas, como el movimiento de una hoja al caer de un árbol, pero que en realidad esconden un alto grado de complejidad. Fue sólo hasta mi primer año de maestría que descubrí que: ¡Estos fenómenos se pueden medir! Por medio de experimentos es posible observar cosas tan increíbles como el movimiento de los átomos en un cristal o realizar experimentos tan increíbles como los condensados de Bose-Einstein y hasta medir con increíble precisión el tiempo! Andrey me abrió las puertas a un mundo que no tenía idea que existía y desde ese día compartió conmigo sus ideas y su forma de entender la física. Esta tesis es un resumen de una parte del trabajo que hemos realizado juntos durante los últimos tres años. Estoy sumamente agradecida por haber compartido conmigo esta experiencia, por haber estado constantemente a mi lado, por buscar llevarme siempre a dar lo mejor de mí (aunque a veces duela) y ayudarme a desarrollar mis propias ideas. No hay palabras para expresar el agradecimiento que siento. Esta experiencia cambió por completo mi vida y espero que sigamos trabajando juntos por mucho tiempo.

A pesar de que en ciencia se escribe de forma impersonal, para poder llevar a cabo una investigación se requiere la colaboración de muchas personas. Estoy muy agradecida por la ayuda que nos ha dado Victor Rodríguez (Gato), literalmente en cada capítulo de esta tesis hay al menos una pieza que fue construida por él. Gracias por la paciencia y el excelente trabajo. Durante una gran parte de este proyecto tuve la suerte de trabajar con una estudiante de intercambio de Alemania, Lena no sólo me ayudó en partes claves del diseño del Zeeman Slower sino que además me llevó a profundizar y madurar mis conocimientos en física. Gustavo es también uno de los personajes clave en esta investigación, gracias a él fue posible el desarrollo del software para estudiar patrones de LEED, aunque él no lo admita no todo lo que dice es trama. Estoy muy agradecida también con los asistentes que nos han ayudado durante estos últimos años: Andrés, Luis, Steven, Ari, Luis Carlos,

Alex, Felipe, Antony, Fabian, Edwin, Berny y Santiago, han estado con nosotros en procesos tan sencillos como atornillar partes en la campana hasta en el largo análisis de las imágenes de LEED. No hay mejor forma de explicar una idea que por medio de una buena ilustración, gracias a Felo por la paciencia de escuchar y entender nuestras ideas y finalmente plasmarlas de una manera tan hermosa.

Quiero agradecer muy especialmente el apoyo que he recibido de los lectores de esta tesis: Gian y Esteban. Durante este ultimo periodo de la investigación me han ayudado a ver este proyecto desde otras perspectivas y puntos de vista. Quiero agradecer también a todos los miembros del CICIMA que han contribuido de alguna forma con el desarrollo de este proyecto y a los profesores que me han acompañado a lo largo de la carrera. Muy especialmente a Manu que me introdujo al fascinante mundo de la historia de las ideas y del que aprendí el inevitable entrelazamiento que existe entre la ciencia y la sociedad.

Quiero agradecer profundamente a mi familia por el apoyo infinito que me dan todos los días. A mi papá que desde que tengo uso de palabra y razón trata de contestar de la mejor manera cualquier duda que tengo y enseñarme que yo puedo alcanzar todas las respuestas. A petrosky por escuchar y apoyarme en todas mis locuras y compartir conmigo una visión única del mundo. A Erica por acompañarme a la distancia, a pesar de que estamos separadas por miles de kilómetros es una de las persona que mejor me conoce y con la que puedo contar en cualquier circunstancia. Finalmente quiero agradecer a Isa por ser un unicornio en un mundo de seres humanos incomprensibles que me ha acompañado y escuchado a lo largo de esta aventura que es la vida.

“Esta Tesis fue aceptada por la Comisión del Programa de Estudios de Posgrado en Física de la Universidad de Costa Rica, como requisito parcial para optar al grado de Maestría Académica en Física”.



Dr.rer.nat. Rodrigo Carboni Méndez
**Representante de la Decana
Sistema de Estudios de Posgrado**



Dr.rer.nat. Oscar Andrey Herrera Sancho
Director de Tesis



Ph.D. Gian Giacomo Guzmán Verri
Asesor



Ph.D. Jorge Arturo Gutiérrez Camacho
Director del Programa de Posgrado en Física



Milena Guevara Bertsch
Candidata

Resumen

Esta tesis se centra en la primera fase de un proyecto que busca el desarrollo de un nuevo enfoque para el estudio de la difracción de electrones de baja energía (LEED por sus siglas en inglés) por medio de la construcción de estructuras periódicas de átomos ultra-fríos atrapados en redes ópticas. Se busca introducir una nueva forma de estudiar el proceso de difracción de electrones de baja energía en un ambiente controlado. Con la implementación de este nuevo enfoque se pretende desacoplar la complejidad del proceso de medición de las dificultades inherentes al estudio de superficies. Por un lado se instala un montaje experimental para el estudio de superficies cristalinas por medio de LEED y por el otro la primera sección de un montaje experimental para el desarrollo de átomos ultra-fríos. Para lo anterior se diseñó, construyó y caracterizó un enfriador Zeeman para átomos de estroncio.

La primera fase de esta tesis describe el desarrollo así como la implementación del LEED. Se instala el montaje experimental aunado a un sistema de adquisición y procesamiento de imágenes. Este sistema permitió el desarrollo de un nuevo método que permite estudiar el proceso de adsorción de las moléculas de agua sobre una superficie cristalina de óxido de magnesio por medio del estudio de las variaciones de la frecuencia de oscilación en la red cristalina obtenidos a partir de LEED. En esta sección se describen las características y el funcionamiento del método implementado así como los resultados obtenidos. Los resultados obtenidos son presentados en una publicación sometida a la revista indexada AIP Advances [1].

La segunda fase de esta tesis se centra en el desarrollo del *Zeeman Slower*. Se introduce un método que permite por un lado facilitar el diseño y la construcción, y por otro, mejorar la eficiencia de captura de átomos del *Zeeman Slower*. A partir del nuevo método introducido en la tesis se diseña y construye un *Zeeman Slower* para enfriar átomos de estroncio. A partir de la caracterización del perfil de intensidades del campo magnético se desarrolla un modelo que permite predecir la variación de la rapidez de los átomos a lo largo del mismo. Utilizando este modelo se obtiene una eficiencia teórica de captura del dispositivo de $\approx 2 \times 10^9$ átomos por segundo la cual se encuentra en el mismo orden de magnitud de la mayor eficiencia reportada para

átomos de estroncio actualmente de $\approx 6 \times 10^9$ átomos por segundo [2]. Se introduce, además, el diseño y construcción de un sistema para calcular la rapidez de los átomos al salir del *Zeeman Slower* por medio de una microbalanza de cuarzo. El método desarrollado para el diseño y construcción del *Zeeman Slower* se encuentra publicado en la Revista Mexicana de Física [3].

Índice de cuadros

4.1. Especificaciones para el diseño del desacelerador Zeeman	56
4.2. Propiedades necesarias para determinar la tasa de enfriamiento del <i>Zeeman Slower</i> diseñado	70
5.1. Propiedades de los elementos: cobre, molibdeno, tungsteno	80

Índice de figuras

1.1. Fotografía de Clinton Davisson y Lester Germer	5
1.2. Esquema ilustrativo de la ley de Bragg	6
1.3. Esquema resumen del funcionamiento del LEED	7
1.4. Esquema del proceso de enfriamiento de un haz de átomos por medio de la interacción con la radiación electromagnética	10
1.5. Esquema del desdoblamiento del estado energético debido al efecto Zeeman.	11
1.6. Esquema del montaje experimental proyectado	13
2.1. Esquema ilustrativo del LEED	18
2.2. Representación artística del montaje experimental.	19
2.3. Fotografía de un patrón de LEED de una muestra cristalina de óxido de magnesio fcc en su plano (100)	20
2.4. Esquema ilustrativo del funcionamiento del programa para análisis de imágenes de LEED.	21
3.1. Fotografía y representación ilustrativa de la estructura cristalina del MgO	26
3.2. Dispersión elástica coherente de rayos-X de un cristal de MgO (100) .	32
3.3. Dependencia térmica de la intensidad de un punto difractado	34
3.4. Dependencia térmica de la intensidad de un punto difractado para dos fases distintas del agua	37
3.5. Temperatura efectiva de Debye de las tres primeras monocapas de un cristal de MgO en función de la energía de los electrones incidentes	39
3.6. Temperatura efectiva de Debye de las tres primeras monocapas de un cristal de MgO en función de la energía de los electrones incidentes para tres tratamientos térmicos diferentes	41

3.7.	Variación de la intensidad de un punto difractado en función de la energía incidente de los electrones.	43
3.8.	Comparación entre las variaciones de la Temperatura de Debye efectiva en función de la energía para tres tiempos de recocimiento y las variaciones observadas en la superficie libre de agua.	45
4.1.	Esquema de la sección frontal de la fuente de átomos	53
4.2.	Variación de la intensidad del campo magnético en función de la distancia a lo largo del enfriador Zeeman	56
4.3.	Diagrama del método utilizado para optimizar la eficiencia de captura de átomos del desacelerador Zeeman.	58
4.4.	Representación artística del enfriamiento de átomos a través del desacelerador Zeeman.	61
4.5.	Esquema del solenoide diseñado.	62
4.6.	Fotografía del <i>Zeeman Slower</i>	63
4.7.	Comparación entre el perfil de intensidades medido y el modelado	65
4.8.	Variación de la intensidad del campo magnético en función de la corriente en un punto fijo.	66
4.9.	Comparación de las variaciones térmicas al utilizar el sistema de enfriamiento	68
4.10.	Rapideces de los átomos en función de la distancia en el desacelerador Zeeman, utilizando una corriente de 6 A, para diferentes rapideces iniciales. Las líneas negras delimitan la Sección del embobinado. Las partes sombreadas corresponden a las tres secciones descritas en la Figura 4.4 y en la 4.7.	69
5.1.	Esquema del montaje experimental para determinar la rapidez de los átomos al final del <i>Zeeman Slower</i>	73
5.2.	Esquema del diseño de la fuente de átomos	74
5.3.	Fotografía de la fuente de átomos	75
5.4.	Esquema del funcionamiento de una microbalanza de cristal de cuarzo.	77
5.5.	Variación de la frecuencia de oscilación del cristal de cuarzo en función de la masa depositada.	79
5.6.	Representación artística del montaje experimental.	81

5.7. Medición de la variación de la frecuencia de oscilación del cristal de cuarzo en función del tiempo durante la evaporación de Tungsteno . .	83
5.8. Variaciones de la rapidez en función de la tasa de evaporación para tres elementos: cobre, tungsteno y molibdeno.	84
5.9. Distribución de velocidades de Maxwell para los tres elementos: Cobre, Tungsteno y Molibdeno	85
5.10. Modelo de los cambios de frecuencia Δf de la oscilación del cristal de cuarzo en función de la rapidez de los átomos de estroncio.	87
A.1. Variación de la intensidad del campo magnético en función de la distancia a lo largo del enfriador Zeeman	105
A.2. Comparación del perfil de intensidades del campo magnético necesario con la intensidad generada en cada bobina.	110

Índice general

1. Introducción	1
1.1. El arte de medir las propiedades superficiales	1
1.2. Cristalografía de superficies	3
1.3. Difracción de electrones de baja energía	5
1.4. Aplicación de átomos ultra-fríos para el estudio de la física del estado sólido	8
1.5. Enfriamiento de átomos	9
1.6. Estructura de la tesis	12
2. Instalación y optimización de un sistema de difracción de electrones de baja energía	15
2.1. Desarrollo experimental de la implementación de LEED para el estudio de superficies cristalinas	15
2.2. Montaje experimental	17
2.3. Adquisición y procesamiento de imágenes del LEED	20
3. Detección de la adsorción de monocapas de agua a través de la frecuencia de oscilación en una red de óxido de magnesio por medio de difracción de electrones de baja energía	25
3.1. Cristales de óxido de magnesio: interacción con moléculas de agua	26
3.2. Determinación de la frecuencia de oscilación de los átomos en una red cristalina por medio del modelo de Debye	27
3.3. Caracterización de los sustratos de MgO mediante difracción de rayos-X	32
3.4. Variación de los patrones de LEED con la temperatura	33
3.5. Observación de un cambio de fase de las monocapas de agua que recubren el cristal de MgO	35

3.6. Determinación de la temperatura de Debye superficial por medio de LEED	38
3.7. Variación de la temperatura de Debye en función del procesamiento térmico	40
3.8. Discusión	48
4. Diseño y construcción de un enfriador de átomos de estroncio tipo “Zeeman Slower”	50
4.1. Primera fase del enfriamiento de átomos de estroncio	50
4.2. Modelado del campo magnético	52
4.3. Diseño de modelo para la determinación del embobinado	57
4.4. Construcción y montaje experimental	60
4.5. Caracterización del perfil de intensidades de campo magnético del <i>Zeeman Slower</i>	63
4.6. Variaciones de la temperatura del dispositivo experimental	67
4.7. Modelado de la rapidez de los átomos a lo largo del <i>Zeeman Slower</i> .	69
4.8. Discusión	70
5. Desarrollo de un montaje experimental para caracterizar la rapidez media de un haz colimado de átomos por medio de una microbalanza de cuarzo	71
5.1. Montaje experimental para determinar la rapidez de los átomos de estroncio al salir del <i>Zeeman Slower</i>	72
5.2. Diseño y construcción de la fuente de átomos	72
5.3. Desarrollo de un método para la determinación de la rapidez de los átomos por medio de una microbalanza de cristal de cuarzo	76
5.4. Montaje experimental	80
5.5. Rapidez media de los átomos de Cobre, Tungsteno y Molibdeno evaporados por medio de un haz de electrones	80
5.6. Implementación de la técnica en la caracterización de la rapidez de los átomos de Estroncio	86
6. Conclusiones y proyectos futuros	88
Bibliografía	91

Apéndices	102
A. Modelo para determinar el embobinado de un <i>Zeeman Slower</i> realizado en Mathematica™	103
A.1. Modelado del campo magnético teórico	103
A.1.1. Constantes	103
A.1.2. Determinación de la rapidez inicial en función de la rapidez inicial, la longitud y la aceleración	104
A.1.3. Modelado del perfil de intensidades teórico	104
A.2. Modelado del embobinado total del Zeeman Slower	105
A.2.1. Constantes	105
A.2.2. Distribución del número de vueltas en cada bobina	106
A.2.3. Distribución de la dirección del campo magnético por bobinas	106
A.2.4. Intensidad del campo magnético en cada bobina	107
A.2.5. Graficación del perfil total de intensidad del campo magnético generado por las bobinas en comparación con el perfil teórico necesario para enfriar los átomos	110

Capítulo 1

Introducción

“God made the bulk, the surface was invented by the devil”

Wolfgang Pauli

1.1. El arte de medir las propiedades superficiales

Wolfgang Pauli solía referirse en sus charlas al emocionante reto que consiste en estudiar las primeras monocapas de una muestra [4]. Él solía explicar que la complejidad de las propiedades de las superficies es originada por el hecho de que el ambiente en el que se encuentran los átomos en la superficie no es isotrópico; los átomos en la superficie interactúan con tres tipos de átomos diferentes: (1) los que se encuentran en el interior del sólido, en el llamado “*bulk*”, (2) los que se encuentran en la superficie y (3) los átomos externos a la muestra.

En sus charlas, Pauli debió de agregar que la superficie de un material no es solamente difícil de entender sino que el simple hecho de realizar mediciones superficiales es sumamente complejo. El proceso de medición de las propiedades de cualquier sólido se puede descomponer de forma simplificada en: 1) una señal emitida que, por ejemplo, puede provenir de una fuente radiación electromagnética, 2) los átomos, 3) la señal generada a partir de la interacción de 1 y 2. A partir del análisis y la interpretación de la señal generada (3) se puede inferir y estudiar las características de los átomos en el sólido (2). Es así como las propiedades de la señal emitida (3) van a determinar el tipo de interacción y por lo tanto el tipo de medición que se pueda realizar. La energía de la señal emitida por la fuente (1) va a determinar la profundidad de penetración de la medición, consecuentemente a mayores

energías las interacciones se dan a un nivel más profundo en la estructura estudiada. De esta forma cuando se quiere limitar el objeto de estudio a las primeras monocapas superficiales de un sólido una de las soluciones posibles consiste en utilizar una menor energía. Es a partir de este momento que surge el verdadero reto: reducir la energía de la señal emitida (1), implica que se da una expansión en la magnitud de la longitud de onda y por lo tanto un incremento en la deslocalización de la señal ocasionado por la disminución en la probabilidad de encontrar la función de onda (3). Debido a esto las técnicas de medición superficial suelen verse afectadas por fenómenos de dispersión múltiple. Al no tener la posibilidad de definir con precisión la localización de la señal resultante de la interacción de (1) y (2), el análisis de la señal generada (3) se vuelve mucho más complejo. Esto se traduce en que al realizar el análisis de la señal generada (3) se obtengan múltiples soluciones posibles.

Es así como el proceso de medición de la superficie de un sólido es en realidad un arte. Implica lidiar con el entrelazamiento simultáneo de dos sistemas complejos: por un lado la anisotropía del sólido y por otro la dificultad de análisis de la señal generada. Históricamente este reto ha sido enfrentado partiendo de dos enfoques distintos: por un lado el del enfoque cinemático (1) en el cual se parte de una reducción de las interacciones a primer orden y por el otro lado el enfoque dinámico (2) que busca por medio de modelos computacionales simular las interacciones superficiales. Esta tesis forma parte de un proyecto de investigación que propone un nuevo enfoque el cual consiste en desacoplar el estudio de la señal generada del estudio de la superficie del sólido por medio de la construcción controlada de la superficie del sólido. Para llevar a cabo lo anterior se propone la implementación de sistemas de átomos ultra-fríos atrapados en una red óptica para imitar, de forma controlada, las propiedades de la red superficial. Es decir, que a partir de la simulación experimental de las propiedades de la superficie de un sólido se estudiaría la respuesta de la señal generada por la interacción entre la fuente y el sólido.

El proyecto se centra en el estudio de la técnica de difracción de electrones de baja energía (LEED por sus siglas en inglés) para el estudio cristalográfico de superficies. A largo plazo el objetivo final de este proyecto consiste en simular experimentalmente estructuras cristalinas a partir de un gas atómico para el estudio de LEED. El trabajo de investigación realizado en esta tesis es la primera fase del proyecto de investigación descrito anteriormente. La tesis se centra primero en el estudio de la implementación "clásica" de la técnica LEED y de sus alcances en el estudio de estructuras cristalinas superficiales y en una segunda parte en el diseño de la primera sección del montaje

experimental necesario en un sistema de átomos ultra-fríos.

1.2. Cristalografía de superficies

Se puede pensar que la superficie de un material es el puente de comunicación entre el *bulk* y el medio externo. Esto le da, por lo tanto, un rol central en la comprensión y estudio de las propiedades de un material. Es así como en las últimas décadas han surgido una gran cantidad de investigaciones y desarrollos tecnológicos centrados únicamente en las propiedades de las primeras capas atómicas de los sólidos. Desde la disminución cada vez mayor del tamaño de los dispositivos electrónicos hasta la comprensión de fenómenos biológicos, la superficie es, sin lugar a duda, de fundamental importancia [5, 6, 7, 8].

La posición relativa de los átomos en la superficie de la estructura cristalina, representa una de las claves en el entendimiento de los procesos físicos y químicos que ocurren de la interacción o acoplamiento entre el material y el medio externo [9]. Se ha demostrado que la región superficial de un sólido en una interfaz de tipo sólido-gas, sólido-líquido o sólido-sólido puede llegar a tener una estructura geométrica completamente distinta de la estructura del *bulk*. Consecuentemente el carácter eléctrico y vibracional de la superficie puede diferir considerablemente de las propiedades del interior del arreglo cristalino lo cual hace que las propiedades tanto físicas como químicas de la superficie adquieran características únicas.

Si se consideran, por ejemplo, las propiedades eléctricas del sólido, la presencia de estados superficiales, en los cuales se concentran altas densidades de electrones, está íntimamente relacionada con el estado de relajación de la red cristalina [10]. Otro claro ejemplo que ilustra la diferencia entre el comportamiento del *bulk* y la superficie, se observa en el comportamiento de las vibraciones superficiales en la red. Estas determinan las propiedades físicas del sólido, tales como la conductividad térmica o eléctrica. Como es de esperarse las vibraciones en la red están estrechamente correlacionadas a la posición de los átomos y a las variación de las fuerzas interatómicas de la estructura cristalina. La simetría de la red se ve afectada por las interacciones con la superficie, esto produce, que en las primeras capas del sólido se observen fuerzas que no llegan a afectar el interior del cristal. Para poder entender con claridad este rompimiento de simetría es de fundamental importancia estudiar la posición de los átomos en la red superficial. Las variaciones en la

estructura geométrica de la superficie se ven reflejadas directamente en el comportamiento vibracional de la red. Estas vibraciones afectan directamente propiedades de la muestra tales como el factor de Debye-Waller, el cual está relacionado con el movimiento dinámico de los átomos y es de extrema importancia en la observación de las nuevas propiedades que surgen al presentarse rompimientos en la simetría traslacional de un sólido [11, 12].

Así mismo, cualquier perturbación externa, como por ejemplo una variación en la temperatura o en la presión, que afecte al cristal, se va a ver reflejada en cambios en las propiedades intrínsecas de la superficie (carácter eléctrico y vibracional). La adsorción de moléculas en la superficie influirá, por ejemplo, en cambios en el factor de Debye-Waller superficial [13, 14]. Es así como a partir del estudio de la cristalografía superficial es posible, tener una mayor comprensión del acoplamiento entre la estructura cristalina y el ambiente externo.

Al ser las superficies tan sensibles al ambiente externo, el desarrollo de la física de superficies e interfaces está íntimamente relacionado con los avances en las técnicas de ultra-alto vacío. La palabra “vacío” coloquialmente designa un espacio en donde no hay literalmente absolutamente nada, sin embargo las técnicas de vacío están muy lejos de alcanzar la obtención de espacios con ausencia de materia. Aún a las presiones más bajas alcanzadas utilizando los mejores sistemas de bombeo siguen estando presentes cientos de moléculas por centímetro cúbico del espacio evacuado. Lo anterior hace que sea de fundamental importancia tener control de las presiones implementadas al estudiar cualquier tipo de interacción superficial [15].

“Desde en procesos tan complejos como el fenómeno biológico de ósmosis en las plantas hasta en el cotidiano chorreador de café”, explica el primer libro de filtración industrial en 1923, “las superficies tienen un papel fundamental en nuestras vidas” [16]. En la física del estado sólido la superficie es una ventana al interior del material que nos permite observar como interactúa este con el entorno. Es así como a través de los años se han desarrollado diversas técnicas y métodos para poder afrontar el desafiante reto de estudiar las primeras capas atómicas de una estructura cristalina. A continuación se describe uno de ellos: la difracción de electrones de baja energía.



Figura 1.1: Clinton Davisson y Lester Germer, ganadores del premio Nobel de 1937 por el descubrimiento experimental del fenómeno de difracción de electrones en cristales. Reprinted with the permission of Alcatel-Lucent USA Inc.

1.3. Difracción de electrones de baja energía

La difracción de electrones de baja energía es una de las técnicas centrales en el estudio de la física de superficies. El famoso experimento realizado por Davisson y Germer (ver Figura 1.1), puso en evidencia el carácter dual de la materia posibilitando la observación del fenómeno de difracción en partículas [17]. En un principio, este fenómeno participó directamente en la consolidación de la mecánica cuántica pero con el paso de los años permitió el desarrollo del estudio de la cristalografía de superficies. La ley de Bragg desarrollada en 1913 permitió no sólo la confirmación de partículas a nivel atómico sino que consolidó una técnica para el estudio de las estructuras cristalinas [18]. Brevemente, esta técnica consiste en la medición de la interacción de la radiación electromagnética con la estructura periódica de un cristal. Al incidir radiación electromagnética sobre una red periódica esta es dispersada por los átomos en la red. Si la radiación dispersada por cada átomo interfiere constructivamente con la de cada átomo adyacente se crea un patrón de interferencia, el cual se puede describir en primera aproximación a partir de la siguiente ecuación:

$$n\lambda = 2d\sin(\theta), \quad (1.1)$$

donde n es un número entero, λ la longitud de onda de la radiación incidente, d la

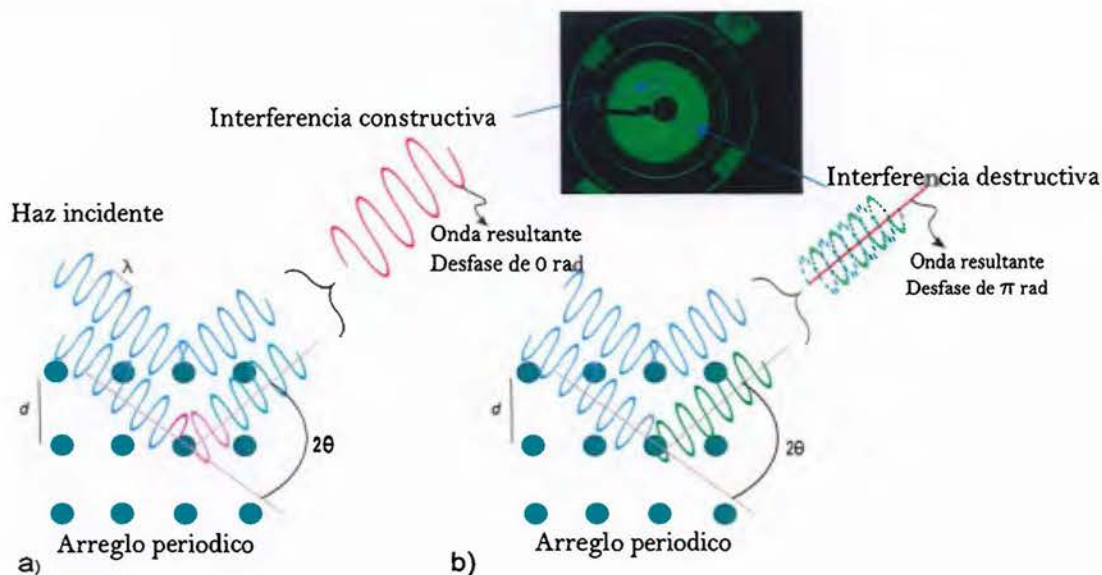


Figura 1.2: Esquema ilustrativo de la ley de Bragg. La radiación incidente llega a los átomos con un ligero desfase. La radiación dispersada por un átomo interfiere con la radiación dispersada por átomos adyacentes. La interferencia puede ser de acuerdo a la Ecuación 1.1: a) constructiva o b) destructiva. La interferencia constructiva se observa en la pantalla de fósforo en la forma de un punto brillante mientras que la interferencia destructiva se vislumbra en el fondo de color verde.

distancia entre los planos de la red cristalina y θ el ángulo entre los rayos incidentes y los planos de dispersión, (ver Figura 1.2). A partir de la ecuación anterior se puede inferir el arreglo cristalino del material que se quiera estudiar. Esta técnica fue desarrollada utilizando rayos-X cuya energía ($\approx 0,1 - 100$ keV) permite penetrar a grandes profundidades del material o lo que comúnmente se denomina *bulk*. El estudio de la superficie de los materiales fue únicamente posible con la introducción de electrones monoenergéticos de baja energía los cuales penetran solamente las primeras capas del material. Como mencionamos anteriormente el estudio de las capas superficiales es de fundamental importancia debido a que es en esta sección en la que se presentan las interacciones con el ambiente.

Para observar patrones de interferencia utilizando LEED es fundamental hacerlo en condiciones de ultra-alto vacío ($\approx 10^{-9}$ Torr, $1 \text{ Torr} \equiv 133,322 \text{ Pa}$) ya que cualquier contaminante afecta el patrón observado. Se calcula que en condiciones de ultra-alto vacío se da la formación de una monocapa contaminante cada 10^4 segundos. Se bombardea la superficie del sólido con un haz de electrones monoenergéticos

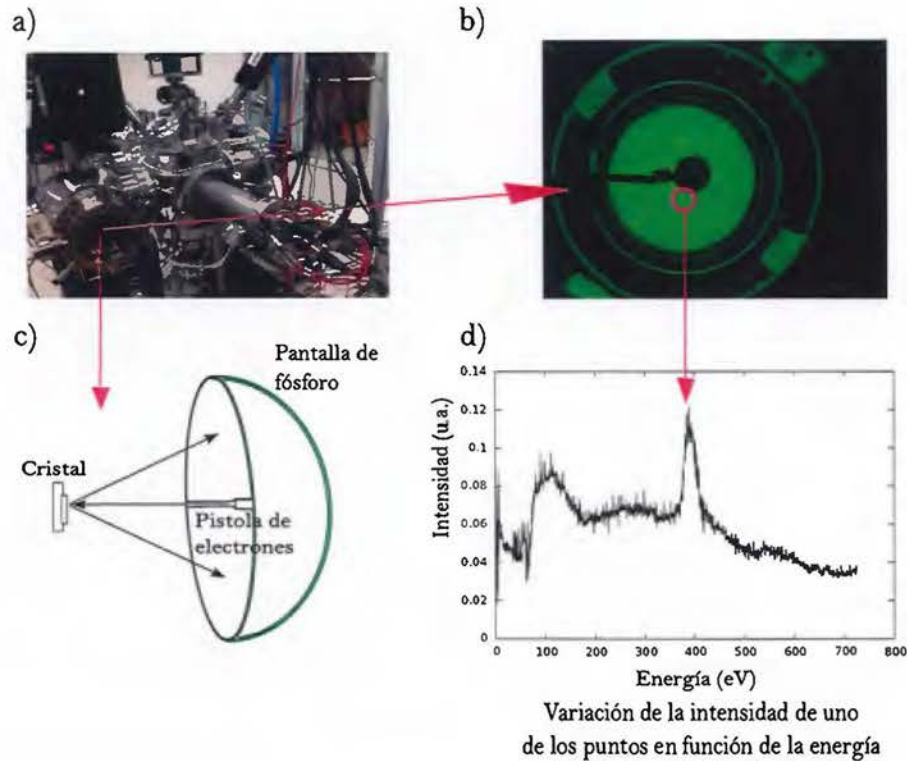


Figura 1.3: a) Fotografía del aparato experimental donde se muestra LEED acoplado a un sistema de ultra-alto vacío. b) Los electrones inciden sobre la superficie cristalina y son dispersados, al interferir entre ellos se observa un patrón de interferencia en c) la pantalla de fósforo, los puntos brillantes corresponden a la interferencia constructiva explicados en la figura 1.2. d) Variación de la intensidad de los puntos brillantes (interferencia constructiva en la pantalla en función de la energía de los electrones incidentes sobre una muestra de MgO (100)).

colimados a bajas energías típicamente entre 0 eV a 1000 eV y por medio de una pantalla fluorescente de fósforo se observa el patrón de interferencia que estos generan al difractarse, como se observa en la parte superior de la Figura 1.2.a y Figura 1.2.b partir de este patrón se puede obtener información cualitativa, es decir, sobre la simetría de la estructura cristalina o información cuantitativa, como por ejemplo, observar las variaciones de la intensidad de los puntos difractados en función de la energía de los electrones emitidos.

Como fue mencionado anteriormente, la utilización de haces de electrones de bajas energías incrementa la probabilidad de que estos interactúen con los átomos de la superficie. Este efecto hace que para obtener mayores grados de precisión en los estudios de LEED sea necesario tomar en cuenta los efectos de dispersión

múltiple, lo cual representa un verdadero reto al analizar los patrones de LEED. Se han desarrollado distintas técnicas para sobrellevar esta dificultad [19, 20, 21]. Estas técnicas parten de un enfoque dinámico, el problema central reside en la multiplicidad de soluciones posibles que se pueden obtener a partir de un sólo patrón. De forma general se parte de una estructura conocida a la cual se aplica un modelo de difracción y a partir del cual se realizan pequeñas variaciones hasta obtener un equivalente a los resultados experimentales. Sin embargo el costo computacional y de tiempo es enorme debido a la gran cantidad de pruebas que pueden ser necesarias hasta encontrar la estructura que cumple con los parámetros buscados. A pesar del increíble éxito obtenido a través de los años, no se ha alcanzado un entendimiento de carácter fundamental de la interacción de los electrones con la superficie.

Esta dificultad aunada a la altísima complejidad del estudio de superficies nos llevó a pensar en formas para mejorar nuestra comprensión del proceso de LEED. De ahí que la posibilidad de tener un sistema experimental en el cual se pueda controlar por completo la posición de los átomos en la estructura abriría las puertas a un enfoque completamente distinto para resolver el problema. Al controlar la estructura se podría estudiar con mayor claridad el comportamiento de los electrones al incidir sobre la red.

1.4. Aplicación de átomos ultra-fríos para el estudio de la física del estado sólido

La síntesis experimental de cristales a partir de un gas atómico representa la culminación de uno de los sueños más grandes en el estudio de la física del estado sólido. Es así como la posibilidad de acomodar los átomos de la forma que se desee para estudiar su comportamiento abre las puertas a una nueva forma de entender los materiales [22, 23]. La idea anterior fue plausible únicamente a partir de la obtención experimental de sistemas de átomos ultra-fríos, es decir a partir del momento que se logra llevar los átomos a sus niveles más bajos de energía [24, 25]. El desarrollo experimental anterior permitió, por ejemplo, la obtención de condensados de Bose-Einstein, así como la observación de fenómenos cuánticos predichos teóricamente en las primeras décadas del siglo XX, como es descrito en las Refs. [26, 27]. Los átomos, al tener una energía cinética reducida, pueden ser atrapados en una red óptica, con lo cual se adquiere la libertad de ordenarlos en cualquier posición que

se desee [28, 29, 30]. En principio los desarrollos anteriores permitirían generar, de forma controlada, cualquier arreglo periódico de átomos que se desee estudiar.

La aplicación de átomos ultra-fríos a la rama de la física del estado sólido, conlleva, sin embargo, como es explicado en las Refs. [31, 32], un nuevo reto experimental: para poder realizar simulaciones de materiales con átomos ultra-fríos se requiere que el cristal formado tenga una densidad de átomos muy elevada. Esta densidad tiene que ser tal que los átomos capturados en la red óptica interactúen en un sistema entrelazado cuántico en vez de una colección de partículas aisladas. Para poder alcanzar la formación de un sistema entrelazado se busca alcanzar el caso ideal en el cual la cantidad de átomos atrapados sea igual o mayor que la cantidad de sitios disponibles en la red óptica. La proporción de átomos atrapados con respecto a la cantidad de espacios en la red es denominada como la ocupación de átomos en la red [33]. Hasta la fecha, la mayor ocupación de átomos en una red tridimensional reportada es de aproximadamente 0.3 [31]. Para poder alcanzar la alta densidad del cristal mencionada, el primer paso consiste en lograr atrapar y enfriar la mayor cantidad de átomos posible. Por lo tanto, es esencial, desde el punto de vista experimental, optimizar cada una de las etapas del sistema de enfriamiento de átomos.

1.5. Enfriamiento de átomos

El desarrollo experimental para el enfriamiento de átomos, implica llevar los átomos a una temperatura un millón de veces inferior a la temperatura más baja encontrada en el universo ($\approx 10^{-9}$ K). Es hasta finales del siglo XX que se desarrollaron una serie de métodos y técnicas que permiten en la actualidad la obtención de las condiciones adecuadas para poder llevar a cabo sistemas de átomos ultra-fríos [34, 27]. El proceso necesario para poder reducir la energía cinética de los átomos a sus niveles más bajos, de forma general, se realiza en cuatro etapas: (i) desaceleración de un haz atómico, (ii) enfriamiento sub-Doppler y captura en una trampa magneto-óptica, (iii) transferencia a un potencial conservativo y (iv) enfriamiento evaporativo [24, 23]. En la etapa (i) se busca reducir la rapidez de los átomos a un orden de magnitud de alrededor de $10^{\frac{m}{s}}$ para que puedan ser atrapados (etapa (ii)) y transferidos (etapa (iii)) a la trampa magneto-óptica y finalmente enfriados por evaporación (etapa (iv)). Usualmente, para resolver el problema anterior se utiliza un sistema de enfriamiento de átomos por medio de un campo magnético variable

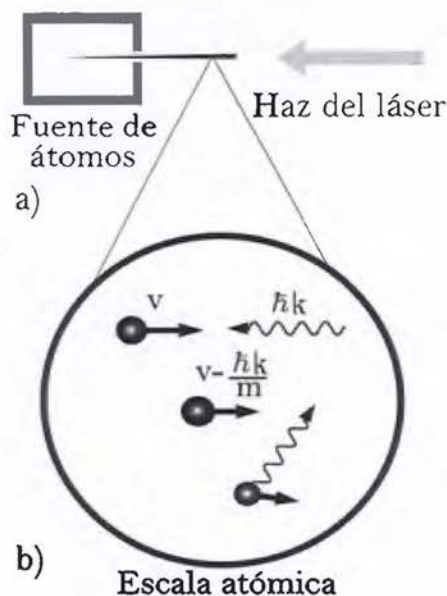


Figura 1.4: Esquema del proceso de enfriamiento de un haz de átomos por medio de la interacción con la radiación electromagnética. En a) la fuente genera un haz colimado de átomos que interactúan con el haz del láser. A nivel atómico en b) se observa cómo un átomo absorbe un fotón provenientes del láser, se excita y finalmente decae emitiendo un fotón.

llamado *Zeeman Slower* [35].

El principio de funcionamiento de un *Zeeman Slower* consiste, como su nombre lo indica, en la implementación del efecto Zeeman para reducir la rapidez de los átomos. Al salir de la fuente (evaporador), los átomos tienen una energía cinética muy elevada, debido a esta razón el primer paso del sistema de enfriamiento consiste en reducir su rapidez en al menos un orden de magnitud. La desaceleración de un haz de átomos se realiza [24], resumidamente, de la siguiente forma: se dirige un haz colimado de átomos en dirección opuesta al haz de un láser cuya frecuencia está en resonancia con la transición atómica de los átomos a enfriar. Los fotones provenientes del láser son absorbidos y rápidamente emitidos aleatoriamente por los átomos incidentes, como se observa en la Figura 1.4. Este efecto, en promedio, genera una disminución de energía cinética y por ende la rapidez de los átomos. Sin embargo, debido al efecto Doppler conforme los átomos reducen su rapidez, la frecuencia de resonancia con el láser se pierde y consecuentemente dejan de emitir fotones y por lo tanto dejan de perder energía. Así, sin ayuda externa, los átomos seguirían a través del láser con rapidez constante. Lo anterior se puede resolver de dos

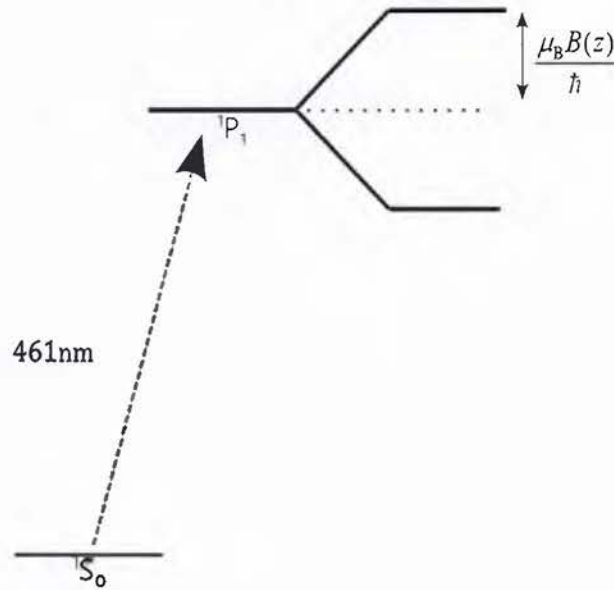


Figura 1.5: Esquema del desdoblamiento del estado energético debido al efecto Zeeman, generado al aplicar un campo magnético. La magnitud del desdoblamiento depende de la intensidad del campo magnético aplicado.

formas distintas. La primera consiste en variar continuamente la frecuencia del láser por medio del método de enfriamiento “chirping” [36]. La segunda técnica, consiste en la aplicación de un campo magnético variable que genere una perturbación de los niveles de energía de los átomos, debido al efecto Zeeman (ver Figura 1.5), cambiando la energía de la transición atómica de forma tal que la frecuencia del láser se encuentre en constante resonancia a lo largo del recorrido de los átomos. La técnica anterior es conocida como “*Zeeman Slower*”.

El *Zeeman Slower* permite disminuir la velocidad de los átomos aproximadamente un orden de magnitud con lo que pueden ser capturados en una trampa óptica magnética (MOT, por sus siglas en inglés) [24]. A partir de este momento se pasa a la siguiente fase del sistema en la que se utiliza un método de enfriamiento por evaporación. El MOT empleado es lo suficientemente fuerte para dejar escapar únicamente los átomos de mayor energía, aplicando el mismo principio que utilizamos cuando esperamos que se enfríe el café dejando que salga el vapor, hasta alcanzar a la temperatura deseada. Finalmente se capturan los átomos, una vez enfriados, en una red óptica. Lo anterior permite acomodar cada átomo en un lugar preciso, generando así el control buscado [22].

Recientemente, las investigaciones basadas en el enfriamiento de átomos alcali-

notérreos han atraído particularmente la atención [37, 38]. Como es presentado en las Refs. [39, 40] estos elementos, al tener dos electrones en su capa externa, tienen la ventaja que sus isótopos bosónicos cuentan con un estado base cuyo momento magnético es cero y además presentan tripletes metaestables, lo cual es una ventaja debido a que facilita el uso de transiciones con anchos de línea pequeño [41]. Al tener estas propiedades, estos elementos son buenos candidatos para el estudio de experimentos de sistemas de muchos cuerpos altamente correlacionados. Actualmente, debido a estas propiedades, el estroncio se está convirtiendo en uno de los elementos más estudiados para la formación de condensados de Bose Einstein, en la construcción de relojes ópticos, el estudio de las variaciones de constantes fundamentales, así como en simulaciones y computadores cuánticos [42, 43].

1.6. Estructura de la tesis

Como fue mencionado anteriormente esta investigación de tesis es el inicio de un proyecto de investigación a más largo plazo que busca el desarrollo de un mayor entendimiento de la técnica LEED. Para ello se propone la implementación de cristales hechos a partir de átomos de estroncio ultra-fríos atrapados en redes ópticas. A largo plazo el proyecto tiene dos grandes vertientes, por un lado requiere el diseño de enfriamiento y captura de los átomos y por el otro la implementación de un sistema de LEED. La Figura 1.6 muestra el montaje experimental proyectado. El objetivo central del trabajo de investigación de esta tesis pretende por un lado incorporar el sistema de LEED y por otro lado desarrollar la primera fase del sistema de enfriamiento y captura de átomos, es decir, el diseño, construcción y caracterización de un *Zeeman Slower* para átomos de estroncio.

El trabajo de investigación está dividido en dos partes: la primera está enfocada en la implementación de LEED en el estudio de superficies cristalinas y la segunda parte está centrada en el desarrollo de un sistema de enfriamiento de átomos por medio del efecto Zeeman. La primera fase responde al primer objetivo propuesto en esta investigación es decir en la instalación y sistematización de un montaje para la toma de datos del difractómetro de electrones de baja energía. La fase anterior es descrita en los Capítulos 2 y 3. El Capítulo 2 se centra en la instalación y sistematización de un LEED. Se incluye además el desarrollo de un programa que permite el procesamiento de imágenes de LEED. El Capítulo 3 presenta la implementación del

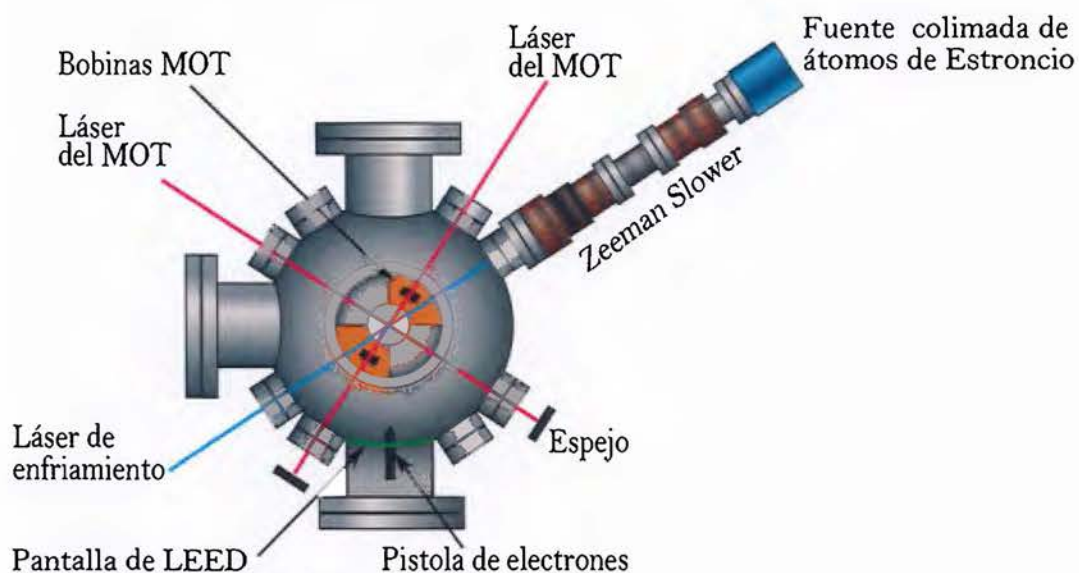


Figura 1.6: Esquema del montaje experimental proyectado. Se incorpora el Zeeman Slower y el LEED a una cámara de ultra-alto vacío. El cristal es formado en el centro de la cámara donde se encuentra localizado el MOT. Una vez formado el cristal se efectúan mediciones de LEED, el patrón de interferencia es observado directamente en la pantalla.

difractómetro y del programa desarrollado en el estudio del proceso de adsorción de monocapas de agua sobre una estructura cristalina de óxido de magnesio. La segunda fase reúne los tres objetivos siguientes propuestos en la tesis, es decir en el diseño, construcción y caracterización de un *Zeeman Slower* para el enfriamiento de átomos de estroncio. Esta siguiente fase es descrita en los Capítulos 4 y 5. El Capítulo 4 se centra en el diseño y construcción de un *Zeeman Slower*. Presenta el desarrollo de un método que permite optimizar la realización de cualquier diseño de *Zeeman Slower* por medio de la utilización simultánea de dos modelos matemáticos. Este capítulo describe además la caracterización del *Zeeman Slower* construido. Se muestran los resultados de las mediciones del perfil de intensidad de campo magnético y se comparan con los resultados de las simulaciones. Se presentan además las variaciones térmicas a lo largo del *Zeeman Slower* en función de la corriente. Finalmente el Capítulo 5 presenta un modelado de las rapideces de los átomos a partir de las mediciones del campo magnético obtenidas así como la introducción de un diseño para determinar la rapidez de un haz de átomos por medio de una microbalanza de cristal de cuarzo. Por último, el capítulo 6 presenta las conclusiones y el panorama del experimento con respecto a los siguientes pasos experimentales.

Capítulo 2

Instalación y optimización de un sistema de difracción de electrones de baja energía

En este capítulo se presenta la primera fase del desarrollo de un sistema para el estudio de superficies por medio de difracción de electrones de baja energía (LEED). Después de una breve reseña histórica sobre el LEED, se describe el montaje experimental implementado para la medición de LEED. Se describe en una primera parte el desarrollo histórico de la técnica experimental. Seguidamente se describen las distintas secciones del equipo instalado en el laboratorio así como la incorporación de un sistema regulador de temperatura. Se introduce además la implementación de un sistema de adquisición y procesamiento de los patrones obtenidos a partir del difractómetro, el cual incluye el desarrollo de un *software* para el análisis de imágenes.

2.1. Desarrollo experimental de la implementación de LEED para el estudio de superficies cristalinas

El descubrimiento de Davisson y Germer sentó las bases de una nueva forma de estudiar las superficies cristalinas, a raíz de la observación del fenómeno de difracción de electrones surgió un gran desarrollo experimental jamás imaginado por los dos

científicos [9]. Pasaron 40 años antes que LEED fuera implementado para realizar investigaciones sobre la posición de los átomos en una red cristalina. El mayor reto para poder analizar las estructuras cristalinas residía en la dificultad para observar y cuantificar el patrón de interferencia generado durante el proceso de difracción de los electrones. Fue sólo hasta la década de 1960 con la introducción de un sistema de post-aceleración de los electrones que permitió la implementación de una pantalla de fósforo [44, 45]. Con lo anterior fue posible observar con claridad los patrones de difracción. Seguidamente con la introducción de la copa de Faraday [46] que permite cuantificar la intensidad de estos patrones, empezaron a desarrollarse los experimentos que utilizamos hoy en día. El desarrollo de esta técnica está íntimamente ligado al desarrollo experimental de las técnicas de ultra-alto vacío. La implementación de LEED en los laboratorios fue únicamente posible a partir de la comercialización de las bombas iónicas para sistemas de ultra-alto vacío. Al alcanzar la capacidad para observar los patrones de LEED el siguiente paso consiste en analizarlos y poder extraer información precisa a partir de los puntos difractados que se observan en la pantalla de fósforo.

El desarrollo teórico del LEED tuvo su auge en la década de 1960 a 1970 a partir del cual se establecen los diferentes parámetros que caracterizan la técnica actualmente. Se empieza a vislumbrar el increíble alcance de la técnica a partir de la cual se puede no sólo conocer la posición de los átomos en un sólido sino también los efectos de las perturbaciones externas sobre la red cristalina superficial [47, 48]. Se establecen distintos modelos teóricos que por medio del enfoque cinemático permiten analizar los patrones sin tomar en cuenta los efectos de dispersión múltiple. Los efectos de dispersión múltiple se dan cuando los electrones interactúan con más de un átomo antes de dejar la superficie y ser detectados. Se empiezan a explorar otras variables tales como los efectos en la intensidad de los puntos difractados con respecto al ángulo de incidencia de los electrones, o el voltaje de aceleración entre otros [49]. Sin embargo la importancia de tomar en cuenta los efectos de dispersión múltiple adquieren cada vez más importancia con lo que se desarrolla el acercamiento dinámico [50, 51]. De 1980 a la primera década del siglo XXI el LEED se ha ido perfeccionando y ha permitido el estudio de estructuras superficiales cada vez más complejas. Se han desarrollado modelos computacionales cada vez más sofisticados para poder llevar a cabo un análisis dinámico de las estructuras de forma más eficiente.

En la actualidad el LEED permite realizar dos tipos de mediciones:

1. Cualitativas: las cuales se basan en estudiar la posición relativa de los puntos de intensidad del patrón de difracción en la pantalla de fósforo.
2. Cuantitativas: se estudia la variación de la intensidad de los puntos observado en el patrón de difracción en función de otros parámetros físicos tales como la energía de los electrones incidentes, el ángulo del haz de electrones con respecto a la superficie del sólido o la temperatura de la superficie.

A partir del tipo de experimento realizado se puede obtener información de las propiedades de la superficie cristalina y de su interacción con el ambiente externo, tales como la estructura del cristal, la temperatura de Debye, la observación de cambios de fase o la energía de ligadura, entre otras.

La técnica LEED es comúnmente implementada en los laboratorios en conjunto con otras técnicas de análisis superficial para realizar estudios cada vez más profundos y complejos de las intrigantes primeras capas superficiales de los sólidos. En las secciones siguientes se presenta el equipo instalado en nuestro laboratorio así como el diseño de un sistema de adquisición y procesamiento de imágenes de LEED.

2.2. Montaje experimental

Se utilizó un sistema de difracción de electrones de baja energía modelo ErLEED 1000-A de la compañía SPECS (ver Figura 2.1). De forma resumida, el equipo está compuesto de dos secciones principales: i) un cañón de electrones y ii) el arreglo óptico constituido por la pantalla de fósforo y las rejillas. El cañón de electrones tiene un diámetro de 15 mm y está constituida por el cátodo, el cilindro Wehnelt, un doble ánodo, un lente electrostático y el tubo de deriva. Los cátodos están compuestos por un filamento en forma de horquilla de torio recubierto con iridio. El voltaje de aceleración de la pistola se puede variar de 0 eV a 1000 eV. La sección óptica está constituida por la pantalla de fósforo y las rejillas. Las rejillas están hechas a base de molibdeno y recubiertas de oro para evitar cualquier variación en los potenciales debido a diferencias en la función de trabajo. Las rejillas y la pantalla tienen forma de semi esferas arregladas concéntricamente alrededor de un mismo punto, en el cual se tiene que localizar la estructura cristalina que se desee estudiar para la medición de difracción y espectroscopía. El lado interno de la pantalla está recubierto homogéneamente de ITO (un óxido conductor de indio-estaño) revestido de fósforo libre de cadmio.

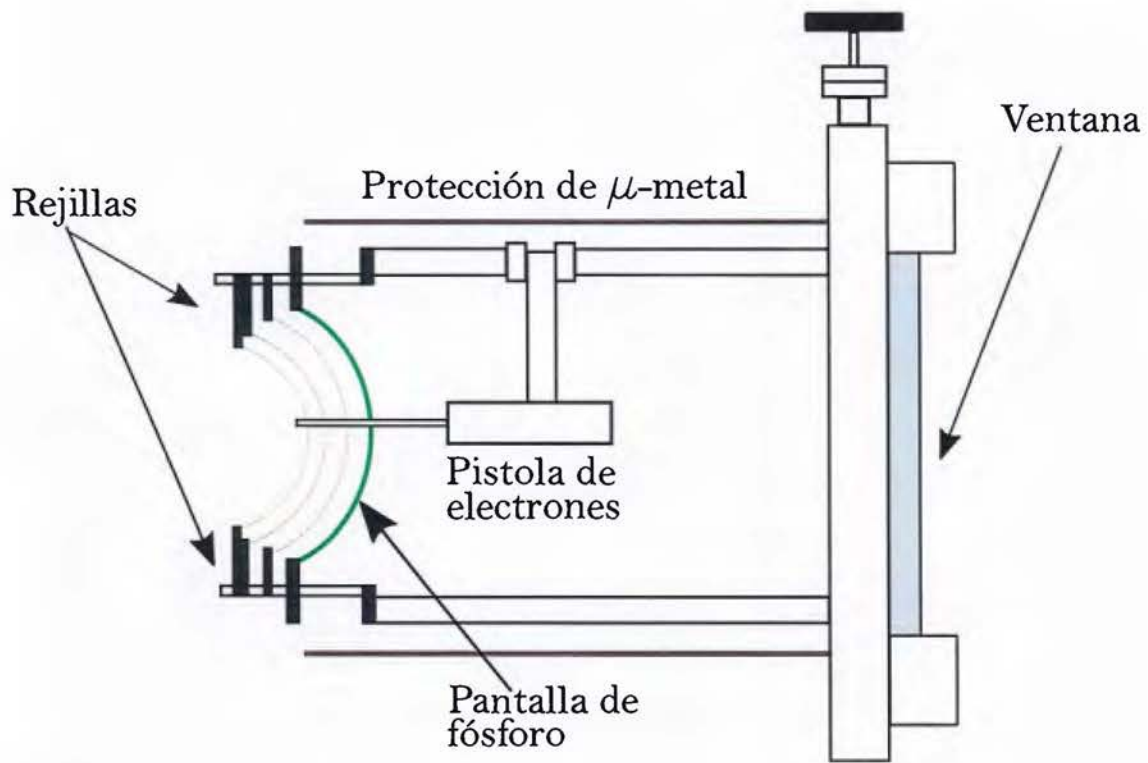


Figura 2.1: Esquema ilustrativo del LEED. El sistema está compuesto de dos secciones principales: la pistola de electrones y el arreglo óptico constituido por la pantalla de fósforo y las rejillas.

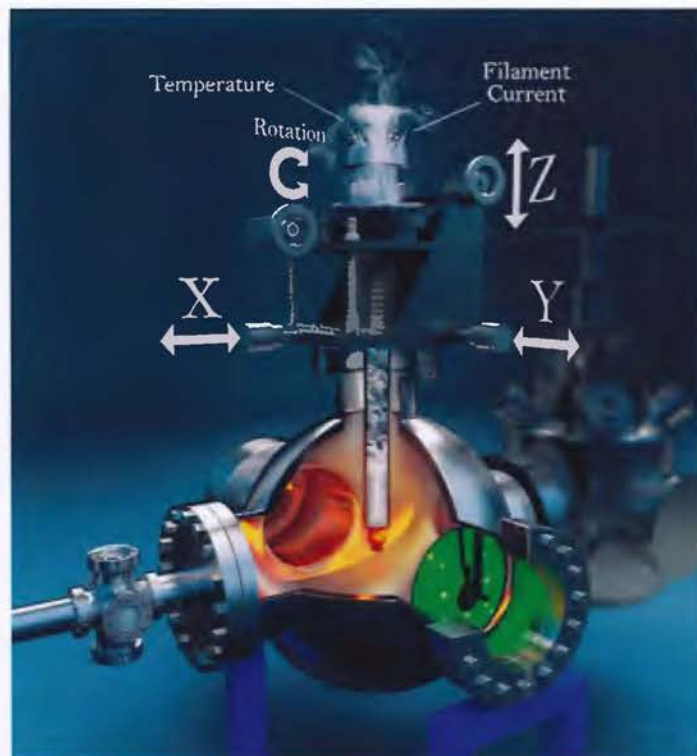


Figura 2.2: Representación artística del montaje experimental. Las flechas muestran los grados de libertad traslacional y rotacional accesibles para el porta muestras. Se utiliza un sistema de multipín para medir la temperatura y otro para aplicar corriente al filamento. La barra central que sostiene el porta muestras puede ser calentada por medio de electrones provenientes de un filamento o puede ser enfriada utilizando nitrógeno líquido.

El equipo es incorporado al sistema de ultra-alto vacío descrito en la Ref. [52], el cual es constantemente mantenido a una presión promedio de aproximadamente $\approx 5 \times 10^{-9}$ Torr. Se incorpora además, un sistema de enfriamiento/calentamiento en contacto directo con la muestra para poder variar in situ la temperatura del cristal estudiado. Dicho sistema está constituido por un filamento de tungsteno y un reservorio de nitrógeno líquido, ambos permiten realizar variaciones de 110 K a 820 K. La temperatura es precisamente controlada con la ayuda de una termocupla de cobre-constantán en contacto directo con el porta muestras (ver Figura 2.2). Las variaciones en la temperatura oscilan en $\pm 0,01$ K



Figura 2.3: Fotografía de un patrón de LEED de una muestra cristalina fcc (cúbico centrado en la cara) de óxido de magnesio MgO en su plano (100). Las flechas en la imagen indican la posición de los iones de Mg^{2+} y O^{2-} . Los iones O^{2-} se localizan en la sección fcc del octaedro de la red y los iones Mg^{2+} se encuentran ubicados en los huecos del octaedro.

2.3. Adquisición y procesamiento de imágenes del LEED

La adquisición de los patrones de LEED se hace a partir de una cámara de vídeo y fotografía comercial de marca Sony localizada en el exterior del sistema de vacío. La cámara está orientada directamente hacia la pantalla de fósforo y permite grabar cualquier variación que se observe en los patrones. Al ajustar adecuadamente los parámetros del difractómetro, dependiendo del tipo de muestra y del voltaje de aceleración se obtienen imágenes similares a la presentada en la Figura 2.3.

A partir de los patrones de LEED se puede extraer una gran cantidad de información sobre la estructura cristalina. De acuerdo al tipo del tratamiento que se le haga a los patrones obtenidos se puede obtener información cualitativa o cuantita-

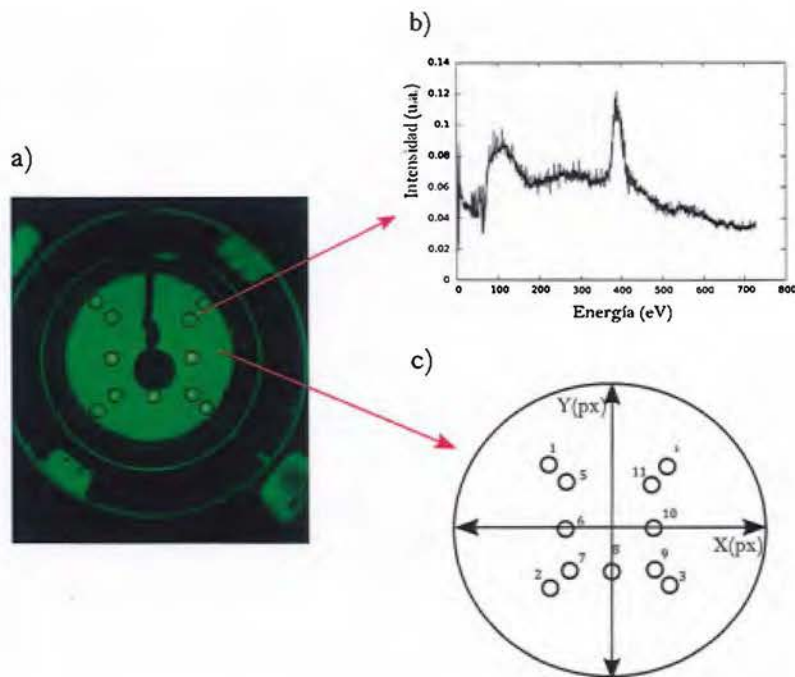


Figura 2.4: Esquema ilustrativo del funcionamiento del programa para análisis de imágenes de LEED. En el primer paso a) el usuario especifica la región que quiere estudiar por medio de un círculo que rodean los puntos difractados. En el siguiente paso b), el programa cuenta la cantidad de píxeles en cada cuadro para cada región determinada en el primer paso. Finalmente en c) el programa determina la posición de los puntos difractados a partir de un eje coordenado situado en el centro de la imagen.

tiva. Se puede, por ejemplo, obtener información cualitativa sobre la posición de los átomos en la estructura cristalina a través del análisis de la posición de los puntos difractados en el patrón. La información cuantitativa se puede extraer a partir de las variaciones de la intensidad de los puntos difractados en función de perturbaciones externas [53]. Esta investigación se centró en el desarrollo de un sistema de procesamiento de imágenes para estudiar las variaciones de la intensidad de los puntos difractados en los patrones.

A partir de la medición de la intensidad en los patrones, se pueden realizar distintos tipos de experimentos. [9], dependiendo de la variable que se desee estudiar. Es posible, por ejemplo, realizar mediciones de la intensidad en función del voltaje de aceleración de los electrones (curvas I-V) para realizar estudios de la estructura

superficial del sólido. Se pueden obtener además mediciones de la intensidad en función del ángulo polar de emergencia de los electrones (curvas I-e) para el análisis de la respuesta instrumental o mediciones de la intensidad en función de la temperatura del cristal (curvas I-T) para la determinación de la temperatura de Debye del cristal.

Este tipo de experimento requiere del análisis de una gran cantidad de patrones. El análisis de las imágenes obtenidas tiene que ser además de muy alta precisión y resolución. Para satisfacer estas dos necesidades se diseñó un programa computacional basado en lenguajes Python y Bash. El programa permite realizar el análisis de una gran cantidad de imágenes en un corto periodo de tiempo y permite además tener control de los parámetros medidos, como por ejemplo del ruido de fondo. Estas propiedades son de difícil acceso por medio de programas comerciales. El programa, de manera sencilla, funciona de la siguiente manera:

- En una primera parte el usuario dibuja círculos alrededor de los puntos difractados conforme van apareciendo en el vídeo, como se observa en la sección a) de la Figura 2.4.
- Una vez que se han definido todas las regiones de estudio, el programa mide la cantidad de píxeles en cada círculo para cada cuadro del vídeo.
- Finalmente el programa entrega al usuario la información sobre las coordenadas “*x*” e “*y*” de los puntos estudiados y la intensidad promedio de cada punto en cada cuadro.
- Para una mejor visualización la información es guardada (en un directorio específico) en dos formas: (1) como un gráfico en dos dimensiones de la posición de los puntos y (2) como un gráfico de la variación de la intensidad de los puntos difractados en función del tiempo. Esta información es generada para cada círculo especificado por el usuario, ver Figura 2.4.b y 2.4.c).

El programa tiene la versatilidad para procesar los vídeos en dos modos diferentes, los cuales se adecuan al experimento que se desee realizar: modo *Full* y *Segmented*. El modo *Full* procesa un vídeo completo especificado por el usuario sin aplicar ninguna modificación. Este modo es utilizado cuando el experimento requiere el análisis de un solo vídeo, por ejemplo, para medir la variación de la intensidad en función del voltaje de aceleración. El modo *Segmented* es utilizado cuando es

necesario procesar un conjunto de vídeos diferentes, por ejemplo, para determinar la variación de la intensidad a diferentes temperaturas; en este caso, para cada temperatura se toma un vídeo de la misma longitud. El programa toma un cuadro representativo de cada vídeo y luego fusiona todos los vídeos en uno solo. En el modo *Segmented*, la extracción representativa del cuadro en cada vídeo se hace de dos maneras distintas: modo *Middle* y *Average*. En el modo *Middle* el cuadro representativo es simplemente el cuadro central de cada vídeo; en el modo *Average* el cuadro corresponde a la intensidad promedio de cada píxel para el set completo de cuadros del vídeo. Finalmente el vídeo fusionado es analizado en el modo *Full*.

Para reducir los efectos del ruido de fondo, el programa cuantifica la intensidad de un anillo que rodea al área dibujada y luego sustrae este valor al de la intensidad del punto. El programa fue desarrollado por completo utilizando herramientas gratuitas y de libre acceso. Para corroborar el buen funcionamiento del software diseñado se realizaron las mismas pruebas utilizando el software comercial IcyTM y se compararon los resultados con los obtenidos con el programa. Los resultados obtenidos en ambos programas son equivalentes exceptuando una mayor rapidez de procesamiento y precisión para el software desarrollado. El programa puede ser accedido en la siguiente página https://github.com/Gustavroot/LEED_CICIMA, está abierto a modificaciones y mejoras.

La incorporación del sistema de adquisición y procesamiento de imágenes al montaje experimental del LEED posibilita la investigación de cristalografía superficial. Como fue descrito en el Capítulo 1 la estructura superficial de un cristal tiene un rol fundamental en las propiedades intrínsecas de un material. En las últimas décadas la técnica ha evolucionado considerablemente, las investigaciones varían desde estudios de adsorción de gases hasta la reconstrucción de superficies de semi-conductores y metales, entre muchos otros ejemplos [19]. Sin embargo esta técnica está abierta a mejoras, el nivel de sofisticación de los análisis que se pueden obtener por medio de la difracción de electrones de baja energía no ha sido aún completamente explotado.

Nosotros implementamos el montaje experimental instalado en el estudio del delicado fenómeno de la adsorción de monocapas de agua en una superficie cristalina de óxido de magnesio. Para ello se desarrolló una nueva técnica que relaciona la adsorción de las moléculas de agua con las variaciones en la frecuencia de oscilación de la red cristalina. A partir del modelo de Debye se puede establecer una correlación entre la intensidad de los puntos difractados y las variaciones en la frecuencia de oscilación en la red. El desarrollo de esta técnica, descrito en el Capítulo 3, permite

además demostrar el alcance y el potencial de las mediciones de LEED.

Capítulo 3

Detección de la adsorción de monocapas de agua a través de la frecuencia de oscilación en una red de óxido de magnesio por medio de difracción de electrones de baja energía

El capítulo se centra en la investigación de las variaciones en la frecuencia de oscilación de los iones de Mg^{+2} y O^{-2} , de una red de óxido de magnesio. Estas son generadas como consecuencia de la interacción de la superficie cristalina con moléculas de agua, utilizando difracción de electrones de baja energía. Se implementa el montaje experimental y el sistema de adquisición y procesamiento de datos descrito en el capítulo 2. El resultado principal consiste en el desarrollo de una técnica que permite determinar las vibraciones generadas en el proceso de adsorción de las moléculas de agua sobre la red superficial a través de la observación de las variaciones inducidas en la temperatura de Debye superficial y el corrimiento químico. La técnica fue implementada sistemáticamente para diferentes tiempos de recocimiento (*annealing*, en inglés) y por medio de la aplicación de perturbaciones térmicas constantes en el rango de 110 K a 300 K con el fin de observar la adsorción o desadsorción de las monocapas de agua sobre la red superficial.

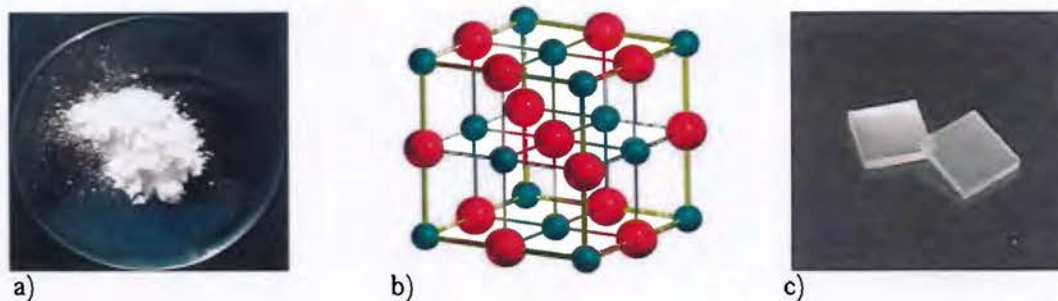


Figura 3.1: a) Fotografía del MgO en polvo. b) Representación esquemática de la estructura cristalina del MgO. Las esferas azules corresponden a los iones Mg^{2+} y las rojas a los iones O^{2-} . c) Fotografía de sustratos de MgO utilizados en esta investigación.

3.1. Cristales de óxido de magnesio: interacción con moléculas de agua

El óxido de magnesio (MgO) es un sólido mineral higroscópico de color blanco (ver Figura 3.1(a)). A nivel microscópico está compuesto por una red cristalina de iones de Mg^{+2} y O^{-2} unidos por medio de enlaces iónicos (ver Figura 3.1(b)). El MgO tiene un coeficiente de Poisson elevado (0.35) y una baja energía de Gibbs (-596.3 kJ/mol) [54], estas propiedades hacen que sea un candidato ideal como modelo en investigaciones en física de superficies. Los mono-cristales de MgO, similares a los presentados en la Figura 3.1 (c), han sido ampliamente utilizados como material de sustrato para la deposición epitaxial de películas delgadas [55]. En este proceso, se hace crecer una capa uniforme y de poco espesor sobre una de las caras del cristal, buscando conservar el ordenamiento cristalino del sustrato. La calidad de las películas depositadas está fuertemente correlacionada con la calidad del sustrato de MgO. Debido a esta razón el estudio y la comprensión de los procedimientos necesarios para la preparación de superficies de MgO de muy alta calidad han adquirido una gran importancia en distintas áreas de la ciencia de superficies. Es importante resaltar, además, que el MgO es un sólido único debido a que tiene un carácter altamente iónico, una estequiometría simple, así como una estructura de tipo sal cristalina, un estado monovalente y una orientación única, estable, y de bajo índice (100) [56].

Al ser un material higroscópico, la interacción entre el MgO y el agua se ha convertido en uno de los focos centrales al caracterizar este tipo de sustratos. El

estudio de la reacción del vapor de agua con óxidos metálicos es una de las claves centrales en el desarrollo de dispositivos multifuncionales tales como super estructuras a base de pozos cuánticos, transistores de alta movilidad o diodos láser, entre otras aplicaciones [57]. El MgO tiene una estructura cúbica centrada en las caras (fcc) y no posee electrones en el orbital- d , estas dos propiedades hacen que sea un excelente modelo en el estudio de este tipo de interacciones. Durante los últimos años se han desarrollado una gran variedad de técnicas para caracterizar el proceso de adsorción de películas de agua sobre la superficie de los substratos de MgO [58]. No hay que dejar de lado que un claro entendimiento del proceso químico que ocurre en la interfaz agua-sólido es esencial en el estudio de muchos fenómenos presentes en distintas áreas tales como: la protección ambiental, la geología, la química atmosférica, la arqueología, la corrosión, así como en el desarrollo de sensores y sistemas electrónicos entre muchos otros [59].

Esta investigación busca implementar una nueva técnica que facilite el estudio de las interacciones que ocurren en la interfaz de la superficie del MgO y el agua. Al someter el cristal de MgO a una perturbación externa ocurre una variación en la frecuencia de oscilación de los iones en la estructura cristalina. La perturbación genera, asimismo, una modificación en el Hamiltoniano de la red cristalina el cual afecta directamente los autovalores y las autofunciones asociados a la frecuencia de oscilación de los iones alrededor del punto de equilibrio. La observación de las variaciones en la frecuencia de oscilación de la red cristalina facilitan el acceso a la información física relacionada con las interacciones que ocurren en la superficie del cristal.

3.2. Determinación de la frecuencia de oscilación de los átomos en una red cristalina por medio del modelo de Debye

Al pensar en un red regular de átomos en un material sólido es de esperarse que exista una energía asociada a las vibraciones de cada uno de estos átomos. Sin embargo al estar enlazados, los átomos en la red no vibran de forma independiente. Estas vibraciones toman la forma de modos colectivos que se propagan a lo largo del material. Estos modos vibracionales pueden modelarse como ondas sonoras, cuya

rapidez corresponde, por lo tanto, a la rapidez del sonido en el material.

La energía vibracional generada en una molécula está cuantizada y puede ser tratada aproximadamente como un oscilador armónico isotrópico. Los estados energéticos están separados por valores correspondientes a $\Delta E = h\nu$, donde h es la constante de Plack y ν la frecuencia de oscilación. El oscilador puede, por lo tanto, aceptar o perder energía únicamente en unidades discretas de energía $h\nu$. Si consideramos ahora los átomos en una red en un material sólido, los modos vibracionales colectivos siguen un comportamiento similar, estos aceptan o pierden energía en cantidades discretas, denominadas “fonones”. Al igual que los fotones, los fonones obedecen la estadística de Bose-Einstein [60].

El modelo de Debye desarrollado por Peter Debye en 1912 busca dar una estimación de la contribución de los fonones al calor específico de un sólido [61]. Este modelo considera las vibraciones de una red atómica como fonones en una caja. De manera sencilla [62], si consideramos que el material que se busca estudiar está compuesto por N átomos contenidos en una caja cúbica de lado L , la longitud de onda λ_n de las perturbaciones sonoras en el interior del cristal se pueden modelar, en una dimensión, a partir de la siguiente ecuación:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}, \quad (3.1)$$

donde n es un entero el cual corresponde al modo vibracional. Si se considera la energía del fonón como $E_n = h\nu_n$, y se aproxima la frecuencia de oscilación como inversamente proporcional a la longitud de onda (asumiendo que la rapidez del sonido en el sólido es constante) se obtiene para una dimensión:

$$E_n = \frac{hC_s}{\lambda_n} = \frac{hC_s n}{2L}, \quad (3.2)$$

donde C_s corresponde a la rapidez del sonido en el sólido. Asumiendo que el fonón se mueve en tres dimensiones, entonces la energía es:

$$E_n^2 = E_{nx}^2 + E_{ny}^2 + E_{nz}^2 = \left(\frac{hC_s}{2L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (3.3)$$

A partir de la expresión anterior se puede obtener la energía total del sistema en la caja:

$$U = \sum_{n_x} \sum_{n_y} \sum_{n_z} E_n \bar{N}(E_n), \quad (3.4)$$

donde $\bar{N}(E_n)$ corresponde a la cantidad media de átomos cuya energía es E_n . La frecuencia de un fonón está limitada por el medio en el que se propaga, en este caso por la red atómica. Por lo tanto existe un número finito de estados energéticos posibles en la caja. Al asumir una forma cúbica el modelo tiene una longitud de onda mínima λ_{\min} correspondiente a:

$$\lambda_{\min} = \frac{2L}{\sqrt[3]{N}}, \quad (3.5)$$

y por lo tanto un modo cuyo orden máximo n_{\max} es equivalente a:

$$n_{\max} = \sqrt[3]{N}, \quad (3.6)$$

el cual corresponde al límite de la sumatoria correspondiente a la energía total del sistema:

$$U = \sum_{n_x}^{\sqrt[3]{N}} \sum_{n_y}^{\sqrt[3]{N}} \sum_{n_z}^{\sqrt[3]{N}} E_n \bar{N}(E_n). \quad (3.7)$$

Si se aplica el modelo a funciones suaves y de variación lenta [63], la sumatoria puede ser reemplazada por la integral:

$$U \approx \int_{n_x}^{\sqrt[3]{N}} \int_{n_y}^{\sqrt[3]{N}} \int_{n_z}^{\sqrt[3]{N}} E_n \bar{N}(E_n) dn_x dn_y dn_z. \quad (3.8)$$

Utilizando la estadística de Bose-Einstein se obtiene que la distribución media de los fonones con energía E_n es:

$$\bar{N}(E_n) = \frac{3}{e^{\frac{E_n}{k_B T}} - 1}, \quad (3.9)$$

donde k_B corresponde a la constante de Boltzman y T a la temperatura del sistema. Reemplazando la Ecuación 3.9 en la 3.8 se obtiene la expresión correspondiente a la energía del sistema, a partir de la cual se puede deducir una expresión que liga la contribución de los fonones a la capacidad calorífica C_v del sistema:

$$C_v = 9 \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx, \quad (3.10)$$

donde x corresponde a la variable de integración $x = \frac{hC_s n}{2Lk_B T}$ y la constante θ_D corresponde a la temperatura de Debye del sistema:

$$\theta_D = \frac{hC_s}{2k_B} \sqrt[3]{\frac{6N}{\pi V}}, \quad (3.11)$$

en la cual V es el volumen total de la caja. La temperatura de Debye θ_D de un sólido determina el valor de la rigidez de los enlaces internos del cristal y esta relacionado con la frecuencia de Debye ν_D :

$$\nu_D = \sqrt[3]{\frac{3N}{4\pi V}} C_s, \quad (3.12)$$

la cual corresponde al valor máximo de la frecuencia de oscilación de los átomos que constituyen el cristal. Por lo tanto reemplazando la Ecuación 3.12 en la Ecuación 3.11 obtenemos una relación entre la frecuencia y la temperatura de Debye:

$$\theta_D = \frac{h\nu_D}{k_B}. \quad (3.13)$$

El modelo predice de forma bastante precisa las propiedades térmicas de los materiales a bajas y altas temperaturas. Sin embargo la aproximación utilizada en la Ecuación 3.2, en la cual supone que la frecuencia es inversamente proporcional a la longitud de onda, es únicamente válida para fonones acústicos de baja energía. Esta aproximación induce a que el modelo presente imprecisiones al ser aplicado a temperaturas intermedias. A pesar de eso el modelo de Debye es una excelente herramienta para estudiar las variaciones de la frecuencia de oscilación de la red cristalina y su relación con perturbaciones externas.

Como fue descrito en la Sección 1.2 el *bulk* corresponde a la zona más estable del sólido, en esta zona los átomos se encuentran más ordenados, por lo tanto la rigidez del sólido es muy estable y alcanza su valor máximo. Lo anterior hace que la temperatura de Debye tiene a su vez un valor estable y máximo en el *bulk*. Si nos alejamos del interior del sólido conforme nos acercamos a la superficie, el arreglo empieza a ser más desordenado y las fuerzas de enlazamiento de los átomos empiezan a ser cada vez menos fuertes. Esto hace que la rigidez de la red disminuya en las capas superficiales. Por lo tanto la temperatura de Debye es mínima en la superficie e

incrementa conforme se penetra más en el interior de la muestra hasta alcanzar un valor estable y máximo en el *bulk* [64]. Se considera la temperatura de Debye efectiva superficial como el valor obtenido en la primer monocapa del sólido. En los estudios superficiales por medio de LEED se considera la capa superficial hasta una penetración de aproximadamente 500 eV, a partir de este valor es difícil separar los efectos superficiales de los generados en el *bulk* [9]. Experimentalmente se ha observado que la temperatura de Debye en la superficie es equivalente a aproximadamente $\frac{1}{\sqrt{2}}$ el valor determinado para el *bulk* [9, 65]. Este comportamiento se ha estudiado teóricamente por medio de modelos que establecen una relación entre las fuerzas centrales cercanas experimentadas por los átomos en cada capa del sólido y las variaciones en la frecuencia de oscilación en la red cristalina [66, 67, 11]. Estas investigaciones especifican, sin embargo, la dificultad de modelar con precisión el complejo sistema de fuerzas presentes en las capas superficial. A pesar de las dificultades anteriores, las investigaciones subrayan el gran éxito del modelo para estudiar cualitativamente las variaciones de la frecuencia de oscilación en la red superficial.

Esta investigación propone implementar un método a partir del cual se estudian las interacciones de la red superficial con el medio externo por medio de las variaciones de la frecuencia de oscilación en la red cristalina superficial. La temperatura de Debye θ_D es entonces utilizada como un parámetro de comparación para observar estas variaciones y así poder estudiar las interacciones entre la superficie y el medio externo. Tal es el caso del proceso de adsorción de moléculas de agua, las cuales al ser adheridas a la superficie cristalina generan un rompimiento en la simetría translacional de la estructura. Este rompimiento va a provocar consecutivamente una variación en el movimiento de los átomos el cual va a ser reflejado en variaciones en la temperatura de Debye superficial [12]. Es así como el método novedoso propuesto en esta tesis consiste en utilizar las variaciones en la temperatura de Debye superficial, determinadas por medio de LEED, para observar las variaciones en la frecuencia de oscilación de la red cristalina generadas durante el proceso de adsorción de moléculas de agua.

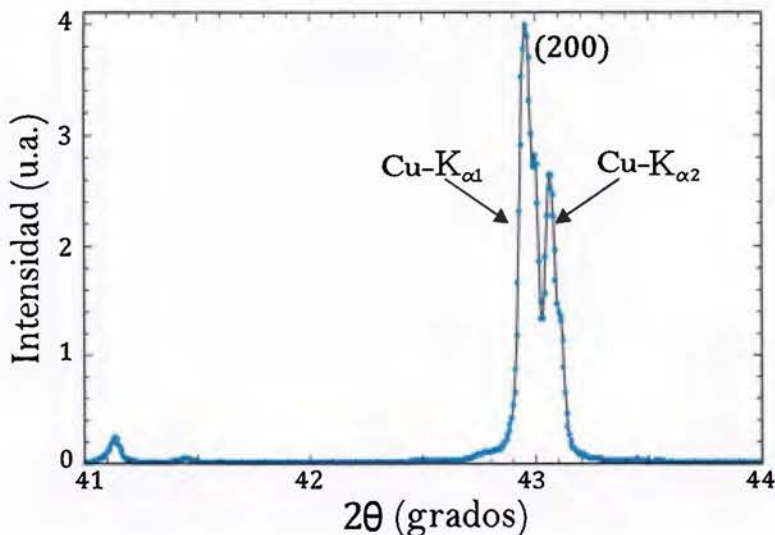


Figura 3.2: Dispersión elástica coherente de rayos-X de un cristal de MgO (100). El doblete de picos en (200) corresponde a las transiciones energéticas Cu-K_{α1} y Cu-K_{α2} de la fuente de rayos-X. Leer el texto para mayor detalle.

3.3. Caracterización de los substratos de MgO mediante difracción de rayos-X

Antes de ingresar los cristales de MgO a presiones de ultra-alto vacío se tomaron mediciones de patrones de difracción de rayos-X para obtener la información cristalográfica. La Figura 3.2 presenta un patrón típico de difracción de rayos-X con una orientación de tipo (hkl). La orientación del cristal obtenida en nuestras mediciones concuerda con los resultados obtenidos en la Ref. [68] con un error de 1%. La reflexión de Bragg de segundo orden del doblete de la fuente de radiación Cu-K_{α1} y Cu-K_{α2} en la orientación (200) del cristal, es decir $2\theta \approx 43^\circ$, está en acuerdo con la tasa de la fuente de energía del difractómetro en un 0.02%. Al realizar un barrido utilizando la totalidad del ámbito del difractómetro no se observa ningún pico de dispersión elástica coherente con intensidades mayores a las reportadas en la Figura 3.2. Sin embargo, fue imposible la identificación del pico pequeño observado en la posición $2\theta \approx 41^\circ$, se supone que puede estar relacionado a la presencia de SiO₂ o a otras impurezas presentes en el cristal de MgO [69].

3.4. Variación de los patrones de LEED con la temperatura

Por medio de LEED es posible observar las variaciones en la dinámica de movimiento de los átomos en la red cristalina. Como es explicado en la Sección 2.3 se diseñó un sistema de adquisición y procesamiento de imágenes que permite determinar la variación de la intensidad de los puntos difractados en función de una perturbación externa. En este caso el experimento consiste en someter los cristales de MgO a una variación de sus posiciones de equilibrio por medio de perturbaciones térmicas externas con una tasa de calentamiento constante. Para observar estas variaciones se toman imágenes de LEED, similares a la presentada en la Figura 2.3, en función de la temperatura, manteniendo un gradiente constante correspondiente a 0.7 K/min, asegurando así un equilibrio entre los elementos térmicos y el cristal. Para eliminar los efectos de carga generados en la superficie resistiva del MgO se estableció una conexión directa entre el sustrato y la tierra. Estos patrones son a continuación procesados y analizados con ayuda del programa descrito en la Sección 2.3.

La Figura 3.3 presenta las variaciones de la intensidad de un punto difractado en función de la temperatura. Como es esperado, al incrementar la temperatura del sistema, existe una menor probabilidad que las autofunciones de los electrones dispersados interactúen en fase de forma coherente, generando un patrón de interferencia constructiva. Consecuentemente la intensidad del brillo de los puntos difractados disminuye en función de la temperatura. En la Figura 3.3 el eje "y" es calculado a partir de la siguiente ecuación: $\ln \left[\frac{I(T) - I_{fondo}}{I_{max}} \right]$, donde $I(T)$ corresponde a la intensidad de un punto difractado en función de la temperatura, I_{fondo} es la intensidad del contorno alrededor del punto difractado y I_{max} es la intensidad máxima obtenida en el experimento. Para obtener los resultados más precisos de las variaciones de la intensidad en función de la temperatura se sustrajo, de forma sistemática, la intensidad del brillo de fondo observada en la pantalla del LEED a los valores de intensidad de los puntos estudiados. La pendiente de la recta de mejor ajuste de la intensidad del punto difractado en función de la temperatura diverge en tres órdenes de magnitud con respecto a las variaciones de la intensidad del brillo de fondo. Lo anterior demuestra que los resultados obtenidos corresponden efectivamente a variaciones de las propiedades intrínsecas de la red cristalina al

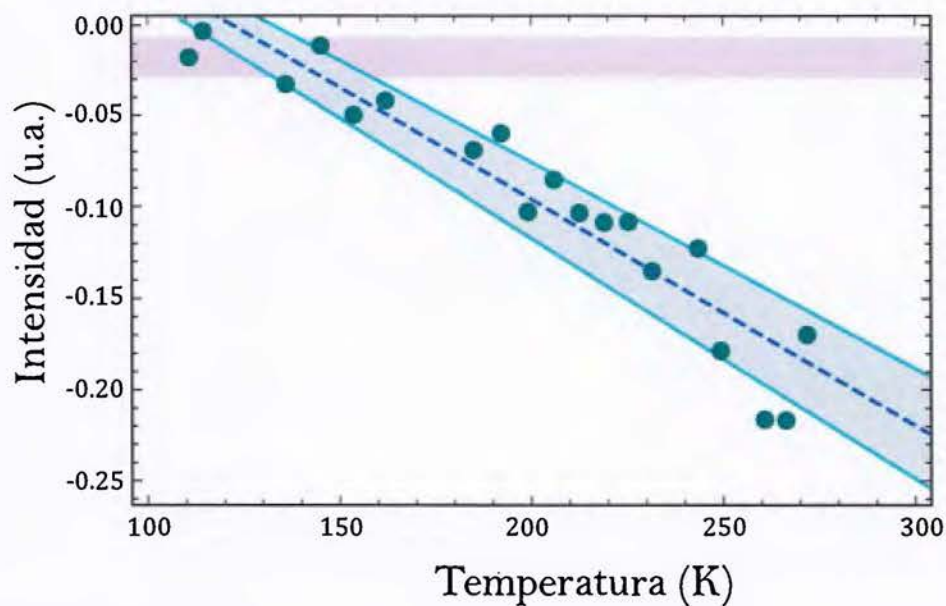


Figura 3.3: Dependencia térmica de la intensidad de un punto difractado. La energía de los electrones incidentes corresponde a 207 eV. Para mejorar la facilidad de visualización, se aplica el logaritmo natural a la intensidad de los puntos difractados. Cada punto en la gráfica corresponde a un vídeo de 10 s de duración durante el cual se realizan un promedio de 150 mediciones. El área de color celeste corresponde a la desviación estándar del ajuste lineal realizado a los datos. La curva de las variaciones de la intensidad del ruido de fondo corresponden a un área aleatoria sobre la pantalla de fósforo externa al punto difractado.

aplicar el calentamiento externo. El punto difractado a partir del cual se obtienen los resultados de la Figura 3.3 corresponde al punto (10) el cual es asignado a la posición del ion O^{2-} en la Figura 2.3. Al aplicar el mismo procedimiento al resto de los puntos difractados se obtienen resultado similares. A partir de estas mediciones es posible deducir de forma sencilla el valor de la temperatura de Debye para cada punto difractado.

3.5. Observación de un cambio de fase de las monocapas de agua que recubren el cristal de MgO

Se observó, en algunos puntos difractados, un cambio abrupto en la pendiente de las variaciones de la intensidad en función de la temperatura. Como se observa en la Figura 3.4 la pendiente de la recta del ajuste lineal varía a partir de una temperatura en el cristal de MgO de aproximadamente 185 K. Esta temperatura coincide con el valor reportado en dos estudios distintos, los cuales observan un cambio de fase en las monocapas de agua adheridas en la superficie. En la Ref. [13], por medio de dispersión de átomos de helio y la Ref. [70] por medio de la aplicación de LEED que a una temperatura de aproximadamente 185 k un cambio de fase de la denominada fase a baja-temperatura cuya simetría es de $c(4 \times 2)$ a la fase del agua de alta-temperatura cuya simetría es, en este caso, $p(3 \times 2)$. Para describir ambas fases se utiliza la notación de *Wood*. La notación anterior describe la relación entre la celda unitaria de la estructura cristalina del sustrato compuesta por los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 y la celda unitaria de la estructura del adsorbato \vec{b}_1 y \vec{b}_2 siguiendo la siguiente forma $(\frac{|b_1|}{|a_1|} \times \frac{|b_2|}{|a_2|})$. En la notación de *Wood* la letra p se traduce en un arreglo donde la celda del adsorbato mantiene la forma de la celda primitiva del sustrato y c el caso en que es centrado con respecto a la celda del sustrato [71]. Estos resultados son confirmados teóricamente en la fase de alta-temperatura para el caso de monocapas de agua depositadas sobre superficies de MgO (100), las cuales se disocian debido a la interacción entre las moléculas adsorbidas [72]. Se ha predicho, además, que los cambios de fase en las estructuras sobrepuestas en este tipo de experimentos pueden estar relacionados a la adsorción de energía de las diferentes simetrías las cuales difieren por no más de 13 kJ/mol [73]. Adicionalmente, los autores en la Ref. [74]

estiman que la cantidad de moléculas por celda unitaria con una simetría $c(4 \times 2)$ en la fase de baja-temperatura y para la fase a altas temperaturas con simetría $p(3 \times 2)$, equivale a diez y seis moléculas respectivamente. Deducen además que la fase a altas temperaturas es la más estable, y que ambas estructuras experimentan una disociación parcial.

En nuestros experimentos, los cristales de MgO fueron siempre recocidos a aproximadamente 820 K durante periodos de tiempo de varias horas. Debido a este proceso fue posible revertir la formación de hidróxido de magnesio, el cual se puede describir de forma simplificada a partir de la siguiente reacción química:



Fue posible, entonces, separar la humedad presente en el cristal. Una vez finalizado el calentamiento, los cristales fueron enfriados durante varias horas a una temperatura de aproximadamente 110 K. Este proceso conlleva a la adsorción de las moléculas de agua residual en el sistema de vacío cuya densidad a una presión de 10^9 Torr es del orden de 10^7 moléculas/cm³ y un 80 % está compuesto por moléculas de agua.

Los resultados presentados en esta investigación se concentran en la fase del agua a alta-temperatura. Para ello se tomó la mayor pendiente observada en las curvas de variación de la intensidad en función de la temperatura. Estos resultados no impactan de forma negativa los análisis realizados aplicando la temperatura de Debye, ya que la desviación estandar cubre la sobre estimación de la temperatura de Debye. Sin embargo, estamos llevando a cabo una serie de experimentos para obtener información adicional de la fase de baja-temperatura del agua, a partir de la cual se podría resolver claramente el cambio de fase en las monocapas adheridas a la superficie del MgO [75]. Estos resultados son muy importantes debido a que a través de una mayor comprensión de los cambios de fase de las monocapas de agua adheridas a la superficie de los cristales de MgO esperamos que el momento dipolar total de estas moléculas se acople a la red de MgO conformada por los iones de Mg^{2+} y O^{2-} y por lo tanto afecte sus posiciones en la red.

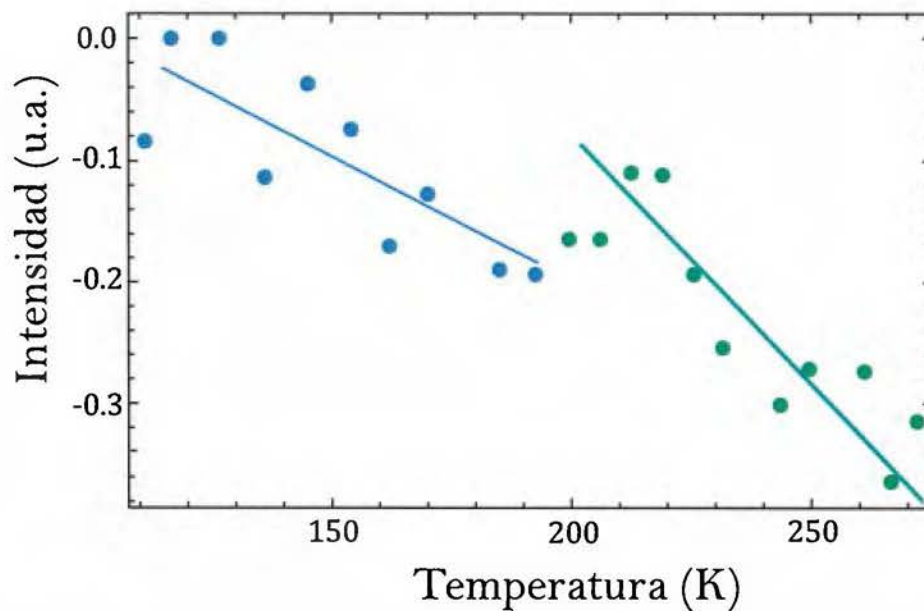


Figura 3.4: Dependencia térmica de la intensidad de un punto difractado para dos fases distintas del agua. Los puntos azules corresponden a las variaciones de la intensidad para la fase de bajas temperaturas cuya simetría corresponde a $c(4 \times 2)$ mientras que los puntos verdes corresponden a la fase de altas temperaturas cuya simetría es $p(3 \times 2)$. Se aplica un ajuste lineal en cada sección y se observa un cambio en la pendiente alrededor de 185 K.

3.6. Determinación de la temperatura de Debye superficial por medio de LEED

Para poder analizar las variaciones de la intensidad de los puntos difractados en función de la temperatura observadas en la Sección 3.4 se parte de la aproximación cinemática de la difracción de electrones de baja energía. Este enfoque teórico reduce la dispersión de los electrones a un único evento. Es decir que se supone que al chocar contra la red cristalina los electrones son dispersados una sola vez, dejando de lado cualquier efecto ocasionado por la dispersión múltiple. Esta aproximación permite modelar de forma sencilla la variación de la intensidad observada en los puntos difractados en función de la temperatura por medio de la determinación del factor de Debye-Waller [9]. De forma sencilla, cualquier perturbación externa en la red superficial se ve reflejada a través de una modificación en la frecuencia de oscilación de los átomos en la red. Esta perturbación genera consecuentemente una variación en la función de onda del haz difractado y por lo tanto reduce la probabilidad de que los electrones interfieran de forma coherente, lo que se traduce en una disminución de la intensidad del brillo del punto difractado. Este efecto se ve intensificado si la perturbación vibracional es mayor. El disminución en la intensidad de los puntos difractados es cuantificado por medio del factor de Debye-Waller $M(T)$ a partir de la siguiente ecuación:

$$I(T) = I_o e^{-2M(T)}, \quad (3.15)$$

donde $I(T)$ corresponde a la variación de la intensidad de los puntos difractados en función de la temperatura e I_o al valor de la intensidad máxima. El factor de Debye-Waller es obtenido a partir de la pendiente del ajuste lineal utilizado en la curva de la Figura 3.3 el cual es equivalente a:

$$2M(T) = 24 m T \frac{(E \cos^2 \theta + V_o)}{m_a k_B (\theta_D^2)} \quad (3.16)$$

donde m corresponde a la masa del electron, m_a a la masa del átomo en la superficie, k_B es la constante de Boltzamn, V_o el potencial interno, E la energía de los electrones incidentes, θ corresponde al ángulo de incidencia con respecto a la superficie normal y θ_D es la temperatura efectiva de Debye [9]. Para poder comparar las variaciones del factor de Debye-Waller en función de diferentes parámetros se tomó como refe-

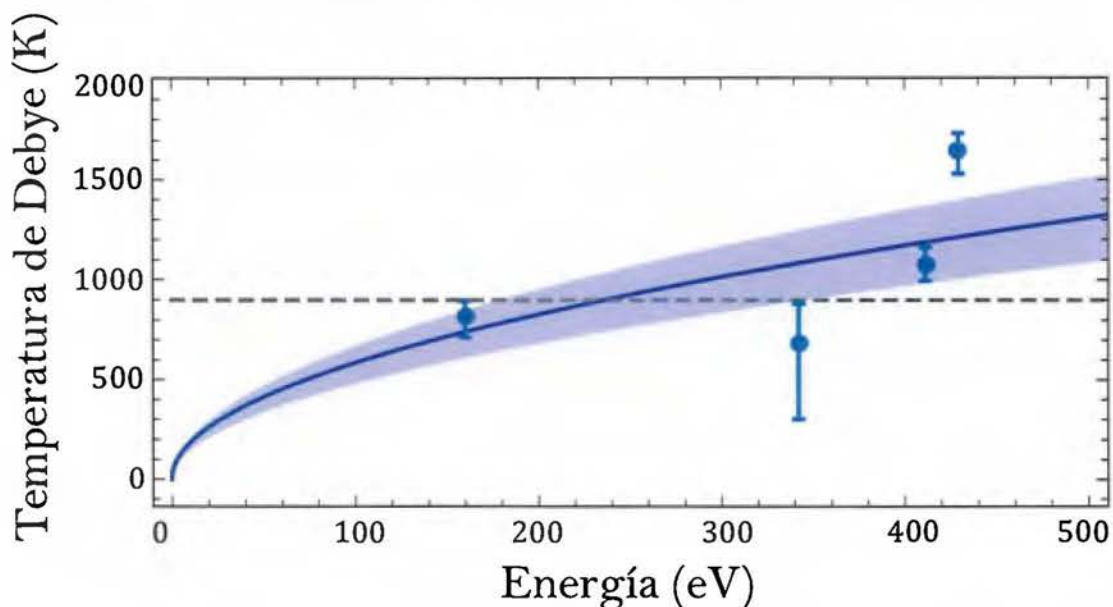


Figura 3.5: Temperatura efectiva de Debye de las tres primeras monocapas de un cristal de MgO en función de la energía de los electrones incidentes. La línea horizontal corresponde a la temperatura de Debye del *bulk* reportada en la Ref. [78]. Cada punto en la gráfica corresponde a la pendiente del ajuste lineal aplicado a las variaciones de intensidad en función de la temperatura de un punto difractado como es mostrado en la Figura 3.3. Las barras de error se obtuvieron utilizando la desviación máxima y mínima del ajuste lineal.

rencia un valor constante del potencial de 10 eV, el cual ha sido reportado en las Refs. [76, 14, 77]. Por lo tanto, a partir de la Ecuación 3.15 y los datos experimentales representados en la Figura 3.3, se deriva la temperatura efectiva de Debye θ_D en función de la energía de los electrones incidentes. A partir de estos datos es posible generar un mapeo de las variaciones de la temperatura de Debye en la superficie de la muestra cristalina.

La Figura 3.5 muestra la variación de la temperatura de Debye en función de la energía en las primeras monocapas de la superficie de un cristal de MgO. Como es descrito en la Sección 2.2 el equipo utilizado permite efectuar variaciones de la energía de los electrones incidentes de 0 eV a 1000 eV en pasos de ± 1 eV. En este experimento decidimos centrarnos en un rango de energías hasta 440 eV, ya que a mayores energías la información de las primeras capas superficiales se vuelve despreciable. Como se puede observar en la Figura 3.5, la temperatura efectiva de Debye es mayor conforme se incrementa la energía, lo cual es esperado, si se toman

en cuenta las consideraciones teóricas. Lo anterior es debido a que las penetraciones elásticas de los electrones incidentes en la red cristalina incrementan en función de la energía lo cual hace que el efecto generado por los efectos de dispersión múltiple en el interior del cristal se vea amplificado.

El valor para la temperatura de Debye mínimo se derivó a partir del patrón obtenido utilizando la menor energía posible, es decir a 108 eV. Este valor corresponde a la temperatura de Debye superficial de los cristales utilizados en el experimento. No fue posible utilizar valores menores para la energía de los electrones incidentes debido a que en las capas más superficiales justo en la interfaz entre el cristal y el ambiente se observa una pérdida de la coherencia observada en los patrones de LEED. La falta de definición en estos patrones es probablemente generada debido a que en estas capas es mucho más difícil cancelar los efectos de carga. Por otro lado, al utilizar el mayor rango de energía de los electrones incidentes, el valor de θ_D se aproxima, como es de esperarse, a los valores reportados para el *bulk*. En la Figura 3.5 la línea horizontal constante corresponde al valor de referencia de la temperatura de Debye en el *bulk* [78], obtenida por medio de la aplicación de la técnica LEED con un gradiente de altas a bajas temperaturas.

Estas mediciones permiten generar un mapeo de las variaciones en la frecuencia de oscilación de la red al ser sometida a perturbaciones térmicas externas. A partir de esta técnica es posible, entonces, inferir las interacciones que ocurren en la superficie del cristal por medio de la observación de las variaciones en la frecuencia de oscilación de la red cristalina.

3.7. Variación de la temperatura de Debye en función del procesamiento térmico

Es bien conocido que al efectuar tratamientos térmicos la calidad de la superficie de los cristales de MgO mejora considerablemente. Con el objetivo de establecer una relación entre la temperatura de Debye y la duración de los tiempos de recocido y por lo tanto con la calidad de la superficie del cristal se efectuaron una serie de experimentos. Se calentó el cristal de MgO a una temperatura de aproximadamente 820 K en presiones de ultra-alto vacío. Se utilizaron tres tiempos de recocimiento diferentes, respectivamente: 4, 8 y 12 horas (ver Figura 3.8). Una vez efectuado el proceso de calentamiento, el cristal se enfrió a una temperatura de aproximadamente

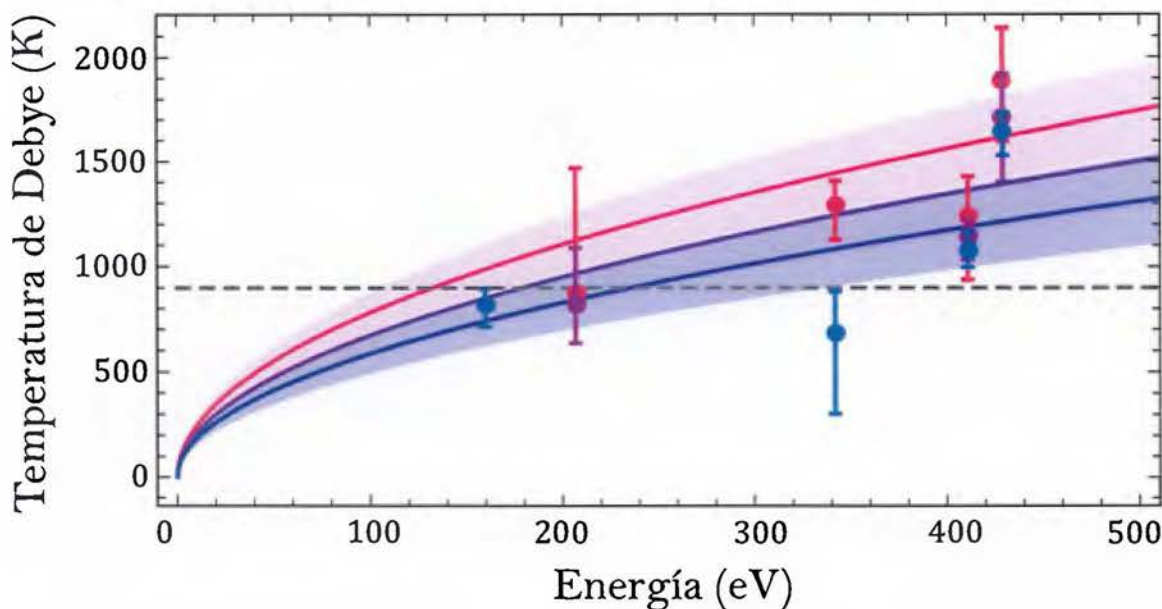


Figura 3.6: Temperatura efectiva de Debye de las tres primeras monocapas de un cristal de MgO en función de la energía de los electrones incidentes para tres tratamientos térmicos diferentes. La curva celeste corresponde a un recocimiento de 12 horas, la morada a 8 horas y la roja a 4 horas de recocimiento. La línea horizontal corresponde a la temperatura de Debye del *bulk* reportada en la Ref. [78]. Cada punto en la gráfica corresponde a la pendiente del ajuste lineal aplicado las variaciones de intensidad en función de la temperatura de un punto difractado como es mostrado en la Figura 3.3. Las barras de error se obtuvieron utilizando la desviación máxima y mínima del ajuste lineal para cada curva obtenida.

110 K y seguidamente, se calentó uniformemente manteniendo una tasa constante de 0.7 K/min lo cual permite asegurar un equilibrio entre los elementos térmicos y el cristal.

Para poder extraer una relación entre los tratamientos térmicos aplicados y la temperatura de Debye θ_D , aplicamos ajustes lineales de tipo $\theta_D \propto E^{1/2}$ para cada uno de los tiempos de recocimiento aplicados, ver Ecuación 3.15. De esta forma fue posible comparar los resultados obtenidos para los diferentes tiempos de recocimiento. Como fue observado en los experimentos previos, se encontró que para mayores tiempos de recocimiento los valores correspondientes a la temperatura de Debye disminuyen. Tomando como referencia central el experimento correspondiente a una duración de recocimiento de 8 horas, se observa que para $\Delta t = \pm 4$ horas se obtiene

una variación del valor de θ_D de aproximadamente 15 %. Notamos que para tiempos mayores de calentamiento, es decir $\Delta t = +8$ horas, el valor de θ_D tiende a aumentar. Esta observación está en acuerdo con los resultados reportados en la Ref. [79] en la cual los cristales de MgO son recocidos a presiones atmosféricas a diferentes temperaturas que van desde 770 K hasta 2000 K. Los autores de este artículo encuentran que al recocer los cristales a temperaturas superiores a 1200 K se genera un crecimiento de los granos de MgO como consecuencia de la disminución en la energía superficial de los granos, lo cual favorece la formación de una superficie más rugosa.

Al realizar los experimentos anteriores, observamos un corrimiento en el valor de la energía del pico máximo de intensidad de los puntos difractados al incrementar la temperatura del cristal. Para poder medir con mayor precisión esta observación, para cada una de las mediciones de LEED en función de la temperatura se realizó un barrido de energías. Para el procesamiento de estos vídeos se utilizó el modo *FULL* del programa descrito en la Sección 2.3. Para poder analizar los resultados obtenidos se aplicó un ajuste Lorentziano a cada barrido de energías obtenido para cada punto difractado en función de la temperatura. Se utilizó un ajuste de tipo Lorentziano ya que es el que mejor describe la forma de los resultados obtenidos. Así mismo la distribución de Lorentz es usualmente utilizada en espectroscopía para describir la forma de las líneas espectrales y estudiar los diversos mecanismos de ensanchamiento por colisión los cuales se asemejan a los fenómenos observados en nuestro experimento.

En espectroscopia describe la forma de las líneas espectrales que son ampliadas por diversos mecanismos, en particular, el mecanismo de ensanchamiento por colisión.

En la Figura 3.7 se puede observar, efectivamente, un corrimiento en el valor de la energía correspondiente al pico máximo del ajuste Lorentziano conforme incrementa la temperatura. Este resultado es una evidencia experimental de la posibilidad de realizar mediciones de corrimientos químicos por medio de LEED. Como se puede observar en la gráfica, cuando el sistema (cristal de MgO + monocapa de agua) se encuentra en la fase de baja-temperatura del agua, cuya simetría corresponde a $c(4 \times 2)$, es necesario, para poder observar un patrón de interferencia definido, que los electrones incidentes tengan una mayor energía. Esto es esperado, ya que al permanecer durante periodos de tiempo mayores en la fase de baja-temperatura del agua, se adhieren una mayor cantidad de monocapas de agua a la superficie. Conforme se incrementa la energía, manteniendo una tasa de calentamiento constante,

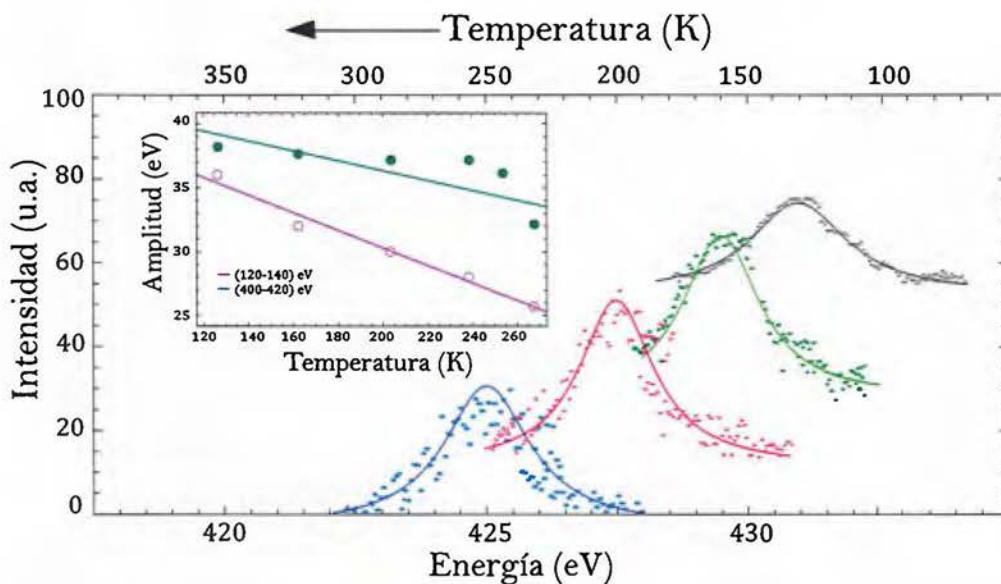


Figura 3.7: Variación de la intensidad de un punto difractado en función de la energía incidente de los electrones para un tiempo de recocido de 8 horas. El gráfico insertado muestra la variación de la FWHM (anchura) para un punto difractado en función de la temperatura (la curva morada corresponde al ámbito de energías de 120–140 eV mientras que la verde varía de 425–432 eV). La escala superior crece de derecha a izquierda y corresponden a las variaciones de la temperatura del cristal. Las líneas sólidas corresponden a ajustes Lorentzianos de los datos medidos.

observamos que la energía del pico de mayor intensidad del punto difractado sufre un corrimiento de aproximadamente -6 eV. Esta observación experimental está en acuerdo con el valor correspondiente al corrimiento químico (5.2 eV) reportado para la capa $O-2p$ en la Ref [80] durante el proceso teóricamente predicho de la hidroxilación de la interfaz MgO (100)-agua. El resultado anterior permite confirmar el argumento según el cual el agua se puede disociar de la interfaz MgO(100)-agua en el momento en que ocurre la transformación natural, descrita en la Ecuación 3.14, de la periclasa (MgO) a una forma termodinámicamente más favorable de brucita ($Mg(OH)_2$). Este corrimiento químico ha sido igualmente reportado por medio de la utilización de otras técnicas, como por ejemplo, por medio de espectroscopía electrónica de alta resolución de pérdidas de energía, espectroscopía de fotoelectrones ultravioleta, espectroscopía de fotoelectrones de rayos-X, y microscopía de efecto tunel a baja-temperatura, ver Refs. [81, 74, 82]. A partir de nuestros resultados experimentales, observamos que al adsorberse una monocapa de agua el espectro completo se corre hacia valores mayores en la energía de ligadura de los electrones, lo cual ya ha sido explicado en experimentos anteriores [83]. El resultado anterior es esperado, ya que es consecuencia del potencial electrostático positivo inducido en el sistema por la presencia de un protón en las cercanías de la red de MgO. Para nuestro conocimiento, la medición de este corrimiento químico por medio de difracción de electrones de baja energía no ha sido nunca antes reportada.

Utilizando el procesamiento de imágenes descrito anteriormente, repetimos las mediciones descritas en la Figura 3.5 para un tiempo de recocimiento de 8 horas (curva morada) del cristal de MgO, sólo que en este caso tomamos el valor de la intensidad máxima del punto difractado en vez de utilizar parámetros fijos de la electrónica del LEED. Los resultados experimentales se pueden observar en la Figura 3.8 a partir de la curva de color verde. El porcentaje de diferencia entre ambas curvas es de aproximadamente 70 %. A partir de este experimento obtenemos también un valor para la temperatura de Debye superficial bajo de aproximadamente (177 ± 10) K este concuerda con el valor reportado en la Ref. [76] equivalente a 190 K. Este valor es bastante inusual ya que usualmente se espera que la temperatura de Debye en la superficie sea $\frac{1}{\sqrt{2}}$ del valor obtenido en el *bulk* [84]. Sin embargo esta regla se basa en la premisa de que los átomos en el cristal pueden ser descritos como un oscilador armónico lo cual no se cumple para la red de MgO debido a la ausencia de electrones en el orbital- d .

Es importante mencionar que las observaciones experimentales reportadas en la

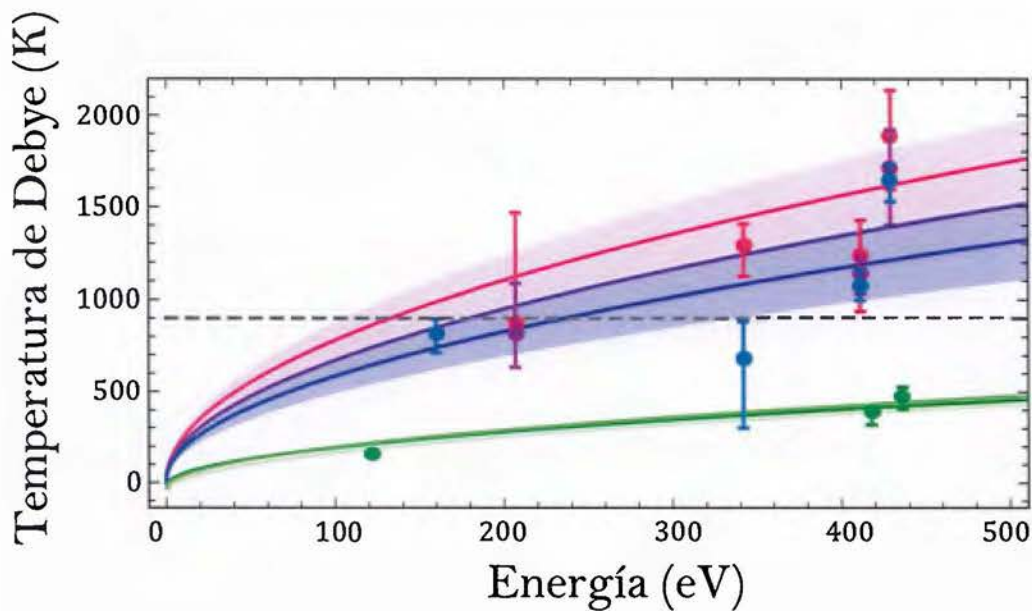


Figura 3.8: Comparación entre las variaciones de la Temperatura de Debye efectiva en función de la energía para tres tiempos de recocimiento y las variaciones observadas en la superficie libre de agua. Las curvas de color rojo, morado y azul corresponden a las mismas observadas en la Figura 3.5. La curva verde es equivalente a las anteriores excepto que las variaciones son obtenidas utilizando el valor de energía del punto máximo de la lorentziana obtenida a partir de los barridos de energía descritos en la Figura 3.7

Ref. [78] y en otras investigaciones, el valor de θ_D en el *bulk*, a diferencia de los experimentos realizados en esta investigación fueron hechos llevando el cristal de altas temperatura a bajas temperaturas. Esto afecta los valores correspondientes a θ_D ya que, como fue mencionado anteriormente, se observa un marcado cambio de fase al ir de la fase de baja-temperatura del agua a la fase de alta-temperatura del agua. Adicionalmente para los experimentos descritos en la Figura 3.8 las condiciones iniciales son diferentes si se considera que al iniciar el experimento se observa la presencia de varias monocapas de agua adheridas a la superficie del cristal de MgO. Para corroborar estas variaciones se llevaron a cabo experimentos similares (llevando el cristal de MgO de altas temperaturas a bajas temperaturas) tal como es reportado en Ref. [78] y obtuvimos un valor de θ_D en el *bulk* de aproximadamente (327 ± 30) eV lo cual está en acuerdo con los resultados obtenidos en las mediciones previas.

A partir de estas mediciones es posible, además, determinar las variaciones en el corrimiento químico (es decir la energía de ligadura) originada por la adsorción de las monocapas de agua en los tres experimentos con diferente tratamiento térmico descritos en la Figura 3.8. En este experimento, asumimos inicialmente, que las monocapas de agua adheridas son simétricas y uniformemente distribuidas sobre la superficie del MgO. Se puede deducir entonces, que para 4, 8 y 12 horas de recocimiento, los corrimientos de energía son respectivamente 9.2, 9.0 y 8.6 eV. Se infiere entonces que la probabilidad de que la superficie de MgO adsorba una monocapa de agua incrementa para menores tiempos de recocimiento. Se calcula que el tamaño de las monocapas de agua disminuye su tamaño en aproximadamente 3 nm en el momento que el cristal es recocido durante 8 horas en vez de 4 horas. Este resultado es esperado, ya que al utilizar tiempos de recocimiento mayores, la superficie de MgO se encuentra, químicamente hablando menos activa, es decir que se encuentra energéticamente más estable. Lo anterior permite asumir que una interacción entre la red de iones y las moléculas presentes a ultra-bajas presiones se vuelve improbable, es decir que se observe una reducción de la cantidad de monocapas de agua adheridas sobre la superficie. Este resultado está en acuerdo con la investigaciones hechas por medio de microscopía de fuerza atómica y la teoría de densidad-funcional en las cuales fueron calculados los cambios de la energía de adsorción para seis moléculas de agua a altas temperaturas cuya simetría corresponde a $p(3 \times 2)$ [85].

En el gráfico insertado en la Figura 3.7 se obtiene además el ancho medio a la máxima altura (FWHM, por sus siglas en inglés) de la curva Lorentziana al realizar los barridos de energía de los electrones incidentes para el punto difractado

(10). Gráficamos el ancho obtenido en función de la temperatura para dos energías de penetración de los electrones incidentes. Sabemos a partir de los estudios de difracción que:

$$\left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2 = \frac{\sin^2\theta}{h^2 + k^2 + l^2}, \quad (3.17)$$

donde λ corresponde a la longitud de onda de la radiación incidente, a al espaciamiento de la red cúbica del cristal, y θ al ángulo de dispersión. Por lo tanto, en nuestro caso, observamos una variación en el ancho (λ en la ecuación previa), esta es equivalente a la sobreposición de las monocapas de agua sobre la superficie del MgO, asumiendo que la red de MgO en el *bulk* no sufre ninguna variación durante las observaciones experimentales. Por lo tanto, al asumir que la red de MgO está completamente recubierta por una capa simétrica y uniforme de monocapas de agua, podemos estimar que la cantidad de agua adherida a la superficie de MgO reduce su tamaño original en aproximadamente 2 monocapas al incrementar la temperatura de 110 K a 300 K. Por otro lado, en el experimento en el que se disminuyó la temperatura de 300 K a 110 K observamos que la cantidad de agua en la superficie del MgO incrementa su tamaño original en aproximadamente una monocapa. Esto es de esperarse, ya que en el primer experimento se enfría el sistema durante 3 horas a 110 K antes de realizar las mediciones. Por lo tanto existe una mayor probabilidad que los iones de Mg^{2+} y O^{2-} interactúen con el H_2O y por lo tanto formen una monocapa sobre la superficie del MgO. En el caso contrario, cuando la superficie de MgO es enfriada desde 300 K a 110 K la probabilidad disminuye, debido al hecho de que la superficie se encuentra relativamente caliente. Los resultados anteriores se encuentran en concordancia con el muy bien conocido hecho que a presiones de ultra-alto vacío las superficies limpias son recubiertas por una monocapa completa de adsorbato en aproximadamente 10^4 s, valor que corresponde con la escala de temporal implementada en nuestras tasas de calentamiento (2×10^4 s). Adicionalmente, en el gráfico insertado en la Figura 3.7 se comparan dos energías de penetración distintas para los electrones incidentes. Como era de esperarse, para una menor energía de los electrones incidentes la pendiente del ajuste lineal es mucho mayor, ya que a 100 eV el haz de electrones es una fuente muy precisa que permite medir los efectos más cercanos a la superficies lo que lo hace mucho más sensible a cualquier cambio. Notamos también que al comparar las variaciones en puntos difractados correspondientes a iones de Mg^{2+} con los iones de O^{2-} se obtiene un valor distinto

en la cantidad de monocapas adheridas. Esto puede ser explicado por el hecho que los iones de O^{2-} de la molécula de H_2O van a interactuar con el Mg^{2+} en la red de MgO y por lo tanto las energías de ligadura observadas en el patrón de LEED van a ser distintas.

3.8. Discusión

Al finalizar esta primera fase de la investigación, se comprobó la eficiencia y precisión del sistema automatizado de adquisición y procesamiento de datos descrito en el Capítulo 2. Se demostró que, al implementar este sistema, por medio del estudio de LEED es posible observar el proceso de adsorción o desadsorción de monocapas de agua sobre la red superficial de un cristal de óxido de magnesio (100) al someterlo a una perturbación externa en un rango de 110-300 K. A partir de este estudio se pudo demostrar además una correlación entre el tiempo de recocimiento, el corrimiento químico de la capa O-2p y la temperatura de Debye superficial del MgO . Comprobamos que estos resultados están en acuerdo con el suavizamiento esperado de los fonones en la superficie. El experimento permite además la determinación de un valor sorprendentemente bajo de la temperatura de Debye superficial del MgO alrededor (177 ± 10) K, el cual corresponde al reportado en la Ref. [76]. Estos resultados son una ventana a la riqueza que ofrece la técnica LEED en la realización de estudios de la superficie.

Otras técnicas de análisis superficial desarrolladas paralelas a LEED han alcanzado buenos resultados en el estudio de estructuras superficiales. Por ejemplo la técnica de Espectroscopía de Absorción de Estructura Fina de Rayos X Extendida de Superficies (SEXAFS por su siglas en inglés), ver Refs. [86, 87, 88, 89] utiliza rayos-X de muy alta intensidad, generados a partir de un sincrotrón para monitorear la fotoabsorción por medio de la detección de la intensidad de los electrones Auger en función de la energía de los fotones incidentes. Otro ejemplo, corresponde igualmente la técnica de Espectroscopía de Pérdida de Energía de Electrones de estructura Fina Superficial (SEELFS por sus siglas en inglés), ver Refs. [90, 91] la cual es una derivación de SEXAFS la cual utiliza electrones en vez de rayos-X para realizar el análisis, evitando así el uso del sincrotrón. En ambas técnicas la estructura del sólido es obtenida por medio de análisis de la transformada de Fourier de las curvas de intensidad de los electrones Auger en función de la energía incidente. Este

tipo de análisis tiene una solución única asociada a cada curva estudiada, lo cual representa una gran ventaja en comparación al gran trabajo computacional requerido en la interpretación de los patrones de LEED debido a los efectos de dispersión múltiple [92]. Tienen la ventaja además de que permiten el estudio de estructuras con un rango de orden bajo, lo cual amplía considerablemente el espectro de estructuras que pueden ser estudiadas. Sin embargo esto implica que la técnica se vea limitada a estudios que no superan la primera capa de coordinación de la superficie del átomo. Estas técnicas tienen además una gran dificultad para diferenciar los átomos de la superficie y del *bulk* de una misma especie, por lo que son usualmente implementadas en estudios de adsorción donde la carga atómica del adsorbato y del sustrato son distintas. Debido a lo anterior a pesar de las grandes ventajas que ofrecen estas técnicas presentan dificultades intrínsecas al proceso de medición: hay un entrelazamiento entre la técnica de medición y el objeto de medición. Lo anterior hace que siempre sea necesario la implementación de diversas técnicas para complementar una investigación.

Para poder tener un claro entendimiento del análisis de superficies por medio de LEED es esencial poder desenlazar el objeto de estudio de la técnica de medición. Como fue descrito en la Sección 1.4 en esta investigación proponemos una posible forma de reconstrucción la estructura cristalina y su medio ambiente por medio de la formación experimental de cristales a partir de un gas atómico. Al implementar este desarrollo experimental se adquiere un control sobre la localización de los átomos en la red cristalina y por lo tanto sobre el objeto de estudio. Al aislar el objeto de estudio se simplifica considerablemente el estudio y análisis de la difracción de electrones de baja energía. Es por esto que la segunda fase de esta investigación esta consagrada a la primera parte de un montaje experimental para la realización de átomos ultrafríos para el desarrollo de cristales a partir de un gas atómico. Es decir en el desarrollo, construcción y caracterización de un enfriador de átomos de tipo *Zeeman Slower*.

Capítulo 4

Diseño y construcción de un enfriador de átomos de estroncio tipo “*Zeeman Slower*”

La siguiente fase de la investigación de la tesis consiste en el desarrollo de un sistema de enfriamiento de tipo *Zeeman Slower* para ser implementado en la generación de simulaciones de sistemas cristalinos a partir de átomos ultra-fríos. Este capítulo se centra en el desarrollo de un método que permite determinar, de forma sencilla y precisa, la configuración óptima del *Zeeman Slower*. Se aplica el método en el diseño y la construcción de un enfriador de átomos de estroncio.

4.1. Primera fase del enfriamiento de átomos de estroncio

El principio de funcionamiento del *Zeeman Slower* consiste en la aplicación de un campo magnético variable que genere una perturbación controlada de los niveles de energía de los átomos, cambiando la energía de la transición atómica de forma tal que la frecuencia del láser se encuentre en constante resonancia a lo largo del recorrido de los átomos.

Como fue descrito en la Sección 3 para poder llevar a cabo simulaciones de sistemas cristalinos es necesario que la densidad de ocupación de los átomos enfriados en la red sea muy elevada. Para alcanzar este objetivo es necesario optimizar cada una de las etapas del proceso de enfriamiento. Para lograr frenar la mayor cantidad

de átomos es necesario que el campo magnético generado se adecúe lo más posible a las variaciones de la rapidez de los átomos a lo largo del interior del enfriador y que además, los átomos no sufran ninguna interferencia con el campo magnético una vez que salen de este. Para resolver este problema existen diversos tipos de diseños de enfriadores Zeeman, cuyas características varían de acuerdo a las necesidades requeridas por el experimento [23]. Las investigaciones reportan modificaciones en los diseños, entre las cuales se encuentran: variación de la longitud, diferentes tipos de materiales utilizados, variaciones en el tipo de embobinado y la utilización de campos simétricos de tipo “*Spin-Flip*” [93, 94, 95]. No obstante, no fue posible encontrar en la literatura algún método o técnica sistemática que facilite la elección de las propiedades idóneas del diseño. Por lo tanto, este capítulo desarrolla un método que permite determinar, de forma sencilla y precisa, la configuración óptima de cualquier diseño de desacelerador Zeeman.

El primer paso en este método consiste en determinar el perfil de variaciones en la intensidad del campo magnético necesario para enfriar los átomos deseados. La fuerza de dispersión necesaria para desacelerar los átomos es determinada por la tasa de fotones absorbidos que imparten momentum al átomo, $F_{dis} = \frac{\hbar k \Gamma}{2}$, donde \hbar es la constante de Planck h , dividida entre 2π , k el número de onda y Γ el ancho de banda natural de la transición utilizada. [96]. Esta fuerza determina la magnitud de la aceleración, α , con la cual son frenados los átomos:

$$\alpha = \frac{\hbar \Gamma k}{2m}, \quad (4.1)$$

donde m es la masa de los átomos que se desean enfriar. Por lo tanto la rapidez de los átomos en cada punto del dispositivo experimental $v(z)$ se puede obtener simplemente a partir de la siguiente ecuación:

$$v(z) = \sqrt{v_0^2 - 2\alpha z}, \quad (4.2)$$

donde v_0 es la rapidez inicial con la cual ingresan los átomos en el enfriador y z la posición de los átomos lo largo del enfriador. Para asegurar absorción continua de los fotones por los átomos se aplica un campo magnético $B(z)$, el cual genera una perturbación a los estados energéticos del átomo. De esta forma, se busca que el campo magnético varíe de acuerdo a los cambios en la rapidez de los átomos $v(z)$ y así contrarrestar el efecto Doppler, es decir que varíe de acuerdo a la siguiente

ecuación:

$$\omega_0 + \frac{\mu_B B(z)}{\hbar} = \omega + kv(z), \quad (4.3)$$

donde ω_0 corresponde a la frecuencia de la transición del átomo en reposo, ω la frecuencia del láser, μ es el magnetrón de Bohr y $v(z)$ corresponde a la rapidez de los átomos a lo largo de la dirección z (escogida como la dirección de propagación a través del desacelerador Zeeman). Se reemplaza la Ecuación 4.2 en la 4.3 y se obtienen las variaciones del campo magnético a lo largo del enfriador en la dirección z :

$$B(z) = \frac{\hbar}{\mu} \left(\Delta_0 + k\sqrt{v_0^2 - 2\alpha z} \right), \quad (4.4)$$

donde Δ_0 corresponde a la diferencia entre la frecuencia del láser y la frecuencia en resonancia de la transición del átomo en reposo (i.e. $\Delta_0 = \omega - \omega_0$). Las propiedades específicas del diseño experimental del enfriador de átomos dependen del átomo que se desee enfriar, pues como se observa en la Ecuación 4.4 es función de las propiedades atómicas de los niveles energéticos. A partir de la Ecuación 4.4 es posible, entonces, determinar el perfil de intensidades del campo magnético necesario en función del experimento que se desee realizar.

4.2. Modelado del campo magnético

El primer paso en la realización del diseño de un enfriador Zeeman consiste en determinar el perfil de intensidades de campo magnético que se requiere para poder desacelerar un haz de átomos. A partir del desarrollo teórico presentado en la sección anterior obtuvimos que el perfil de intensidades se puede obtener de manera sencilla a partir de la Ecuación 4.4.

Para determinar el diseño óptimo del desacelerador, el método propuesto inicia con la caracterización del perfil de intensidades del campo magnético necesario. Para ello se establecen las propiedades específicas del átomo que se desee enfriar: masa " m ", ancho de banda natural de la transición " Γ ", la rapidez inicial " v_0 " a la que van a ingresar los átomos al enfriador y la rapidez final " $v(z=l)$ ", a la que se desea llevar a los átomos al final del enfriador de longitud " l ". En esta sección del modelo se puede incorporar, de ser necesario, un corrimiento Δ_0 en la frecuencia. A partir de

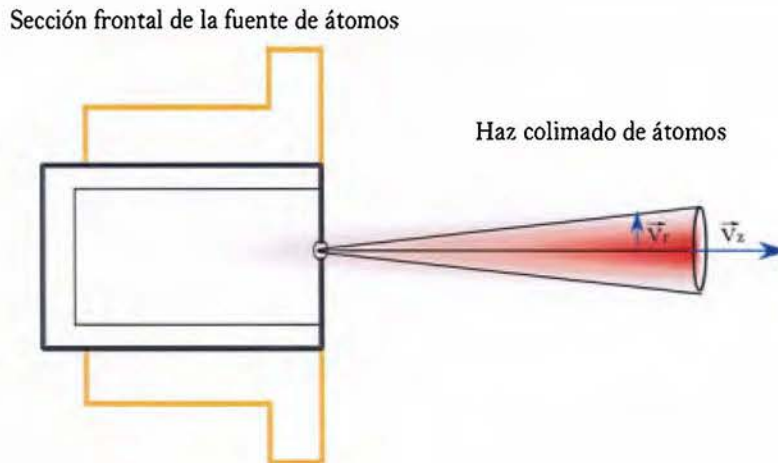


Figura 4.1: Esquema de la sección frontal de la fuente de átomos. La rapidez de los átomos se puede tomar en dos direcciones: v_r y v_z .

estas especificaciones se modela en Mathematica de forma sencilla la Ecuación 4.4 y se obtiene un gráfico de la variación del campo magnético en función de la posición a lo largo del enfriador.

Se aplica la primera fase del método propuesto al caso del enfriamiento de átomos de estroncio. Para este elemento la transición, entre el estado base 1S_0 y el primer estado excitado 1P_1 , puede ser utilizada para reducir la rapidez del haz de átomos en el interior del desacelerador pues es una transición de tipo dipolo que tiene una probabilidad de transición muy alta. La notación espectroscópica para los niveles energéticos es la siguiente: $^{2S+1}L_J$, donde L es el momento angular orbital cuántico, S es el momentum angular de spin total y J el momento angular total cuántico. Dicha transición tiene una longitud de onda $\lambda = 461 \text{ nm}$ y la transición tiene un ancho de banda natural de $\Gamma = 2\pi \times 32 \text{ MHz}$ [97]. La longitud del enfriador y el perfil de intensidad del campo magnético dependen de la rapidez máxima de los átomos al salir del horno y de la rapidez final a la que se busca llevarlos. En nuestro caso la fuente de átomos utilizada mantiene el material a una temperatura de $500 \text{ }^\circ\text{C}$, en la cual la presión de vapor es del orden de 10^{-4} Torr esto hace la rapidez de escape sea equivalente a aproximadamente $420 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, buscamos reducir la rapidez a una magnitud de aproximadamente $30 \frac{\text{m}}{\text{s}}$.

La eficiencia del *Zeeman Slower* está ligada a la cantidad de átomos que puedan ser atrapados en el MOT. Como se observa en la Figura 4.1 al salir de la fuente el haz de átomos sufre una ligera desviación en la dirección radial v_r . Si la desviación

incrementa los átomos son dispersados, lo cual dificulta la probabilidad de que sean capturados en el MOT. La eficiencia de captura está determinada por un lado por la capacidad de reducir la rapidez en la dirección del eje central v_z evitando que haya un incremento considerable en v_r .

La tasa de captura del MOT depende por supuesto de la fuente de átomos utilizada para realizar las mediciones. Para nuestro sistema se diseñó y construyó un evaporador para átomos de estroncio, la cual va a ser descrita en el Capítulo 5 cuya tasa de evaporación N corresponde a un valor de $\approx 10^{13}$ átomos por segundo. El número de átomos $\dot{N}_{v_\theta, \phi}$ que salen de la fuente de átomos por segundo en la dirección θ y ϕ (ángulos polares) a una rapidez v se puede obtener a partir de la siguiente ecuación [98]:

$$dN_{v_\theta, \phi} = \frac{n_o A}{\pi^{3/2} \beta^3} v \frac{v^2}{\beta} \cos\theta v^2 \sin\theta dv d\theta d\phi, \quad (4.5)$$

donde n_o corresponde a la densidad de átomos a la presión de vapor de la fuente de átomos, A el área de la apertura del horno, $\beta = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$. Se aplica un cambio de variable para pasar a coordenadas de v_z que corresponde a la rapidez longitudinal de los átomos y v_r a la rapidez radial y se integra en ϕ , con lo que se obtiene:

$$dN_{v_r, v_z} = \frac{2n_o A}{\pi^{1/2} \beta^3} v_r e^{\frac{v_r^2}{\beta^2}} v_z e^{\frac{v_z^2}{\beta^2}} dv_r dv_z. \quad (4.6)$$

Para obtener N_{v_r, v_z} se integra tomando los límites para las rapidezces v_z y v_r . Para el caso de v_z el valor máximo $v_{z_{max}}$ corresponde a la rapidez máxima de átomos que pueden ser desacelerados. La velocidad v_r depende del tiempo de vuelo de los átomos a lo largo y del radio de captura r_o del MOT. El tiempo de vuelo está compuesto por tres partes: t_a corresponde al tiempo antes de ingresar, t_b al tiempo al cruzar y t_d al tiempo después de cruzar el *Zeeman Slower*:

$$t_a = \frac{d_a}{v_{z_{max}}}, \quad (4.7)$$

donde d_a corresponde a la distancia de la salida del horno al *Zeeman Slower*.

$$t_b = \frac{v_{z_{max}} - v_f}{\alpha}, \quad (4.8)$$

donde v_f la rapidez final de los átomos y α es la magnitud de la desaceleración de los átomos a lo largo del enfriador, y finalmente,

$$t_d = \frac{d_d}{v_f}, \quad (4.9)$$

donde d_d es la distancia del *Zeeman Slower* al MOT. A partir de esto se obtiene la rapidez radial máxima:

$$v_{r_{max}} = \frac{r_o}{t_a + t_b + t_d}. \quad (4.10)$$

Con esto se integra la Ecuación 4.6 y se obtiene que la tasa de captura de átomos en el MOT que en primera aproximación es [98]:

$$R = N[1 - e^{-\frac{v_{r_{max}}^2}{\beta^2}}][1 - e^{-\frac{v_{r_{max}}^2}{\beta^2}}]. \quad (4.11)$$

Se busca entonces determinar los parámetros necesarios para obtener la mayor tasa de átomos capturados R . Se estimó maximizando el valor de R a partir de los parámetros especificados a partir de la ecuación 4.4 que, para reducir la rapidez de la mayor cantidad de átomos de estroncio, es necesario generar una intensidad de campo magnético que varía en un ambito máximo de 600 G ($1 \text{ G} = 10^{-4} \text{ T}$), el cual concuerda con los valores reportados en Ref. [97]. Para facilitar el embobinado y reducir los efectos de calentamiento Joule se eligió utilizar un arreglo de campo bipolar, es decir se separó el perfil de intensidad del campo magnético en dos secciones que generan campos magnéticos opuestos de igual magnitud, es decir $|B_{min}| \approx |B_{max}|$, para esto es necesario aplicar un corrimiento en la frecuencia $\Delta_0 = -2\pi \times 500 \text{ MHz}$. Este tipo de arreglo tiene además la ventaja de que permite reducir el campo magnético en los extremos del desacelerador Zeeman, así mismo permite disminuir los efectos del campo magnético en los átomos una vez que salen del desacelerador Zeeman. Al reducir los efectos del campo magnético en la salida del desacelerador Zeeman es posible acercar el MOT al desacelerador, lo que permite reducir el valor de t_d y por lo tanto incrementar la tasa de captura R . Las especificaciones del diseño se resumen en el Cuadro 4.1.

Se obtiene el perfil de campo magnético requerido para reducir la rapidez de los átomos de estroncio (ver Figura A.2)

Una vez obtenido el perfil de campo magnético requerido se procede con la segunda parte del método, la cual consiste en determinar las propiedades del enfriador necesarias para generar dicho campo.

Longitud	0.6 m
Ancho de banda	201 MHz
Detuning del laser	-3141 MHz
Rapidez de captura	420 m/s
Rapidez final	32 m/s

Cuadro 4.1: Especificaciones para el diseño del desacelerador Zeeman

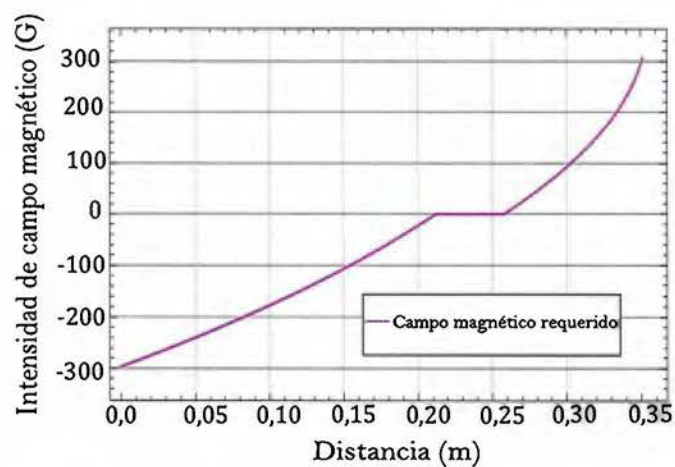


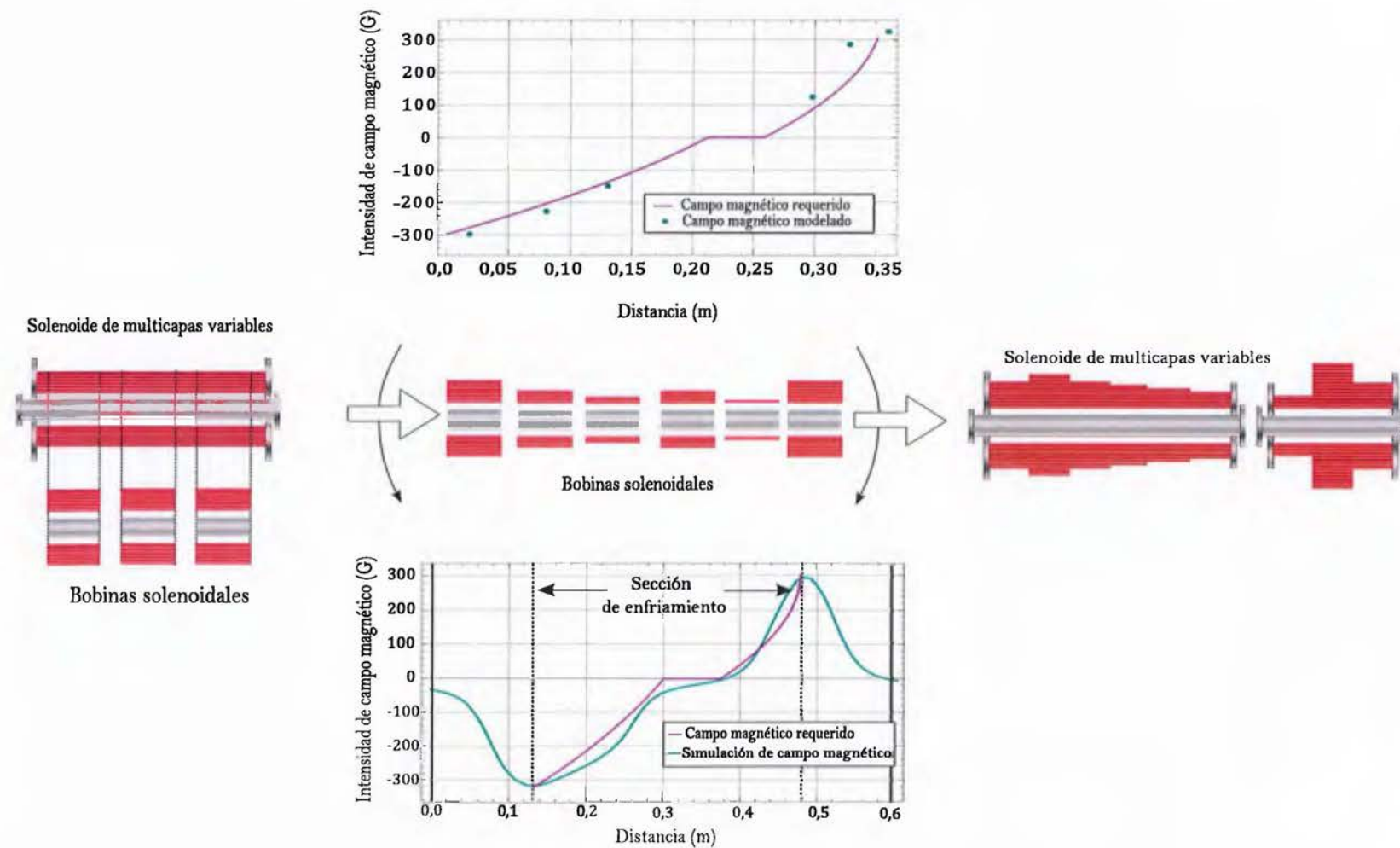
Figura 4.2: Variación de la intensidad del campo magnético en función de la distancia a lo largo del enfriador Zeeman.

4.3. Diseño de modelo para la determinación del embobinado

La segunda parte del método consiste en determinar la configuración del diseño para generar el campo magnético requerido. El método se aplica para el caso de un diseño de tipo solenoide con multicapas variables, similar al empleado en Refs. [99, 100, 101]. La utilización de un solenoide tiene varias ventajas con respecto a la utilización de un imán permanente. Una de las ventajas consiste en que este tipo de diseño permite encender y apagar la intensidad del campo magnético en cualquier momento [93]. La utilización de un solenoide ofrece además, la posibilidad de modificar el perfil de intensidades generado variando únicamente la corriente utilizada. El perfil de intensidad del campo magnético generado por el solenoide depende de la corriente empleada y de la distribución de las capas a lo largo del desacelerador pues una mayor cantidad de capas en un punto dado genera una intensidad de campo magnético mayor.

Para determinar la distribución óptima del número de capas en función de la distancia se utilizaron dos modelos. El primer modelo calcula teóricamente la distribución del número de capas para obtener el perfil de intensidades buscado. El segundo modelo realiza una simulación por medio de elementos finitos de la intensidad del campo magnético generada a partir de la distribución de capas especificada en el primer modelo. Como se observa en la Figura 4.3, en A) se comienza fraccionando la bobina solenoidal de multicapas en una serie de bobinas solenoidales consecutivas de igual longitud cuyo número de capas es variable. Antes de iniciar el modelo es necesario especificar: el número de bobinas, la longitud y el diámetro del solenoide, así como el diámetro y el material del cable que será utilizado para realizar el embobinado. Estos parámetros pueden ser variados y así obtener distintas configuraciones finales. Luego en B) se procede a determinar la distribución del número de capas a partir de los dos modelos. Finalmente se obtiene en C) la configuración final del diseño experimental del desacelerador Zeeman. El modelo escrito en el software Mathematica se encuentra adjunto en el Anexo ATM y el modelo escrito en Comsol MultiphysicsTM se puede descargar en la siguiente página https://github.com/Gustavroot/zeeman_slower.

Se comienza por determinar un valor para la tasa de átomos capturados R en el MOT, a partir del cual se determinan las propiedades óptimas del campo magnético



A) Fragmentación del sistema en bobinas solenoidales de igual longitud

B) Aplicación de los modelos para la determinación de la distribución del número de capas de las bobinas solenoidales

C) Configuración final del Zeeman Slower

Figura 4.3: Diagrama del método utilizado para optimizar la eficiencia de captura de átomos del desacelerador Zeeman. A) Se divide el solenoide en una serie de bobinas solenoidales de igual longitud. B) Se busca encontrar la distribución del número de capas por bobina aplicando los dos modelos simultáneamente. C) Se obtiene la configuración final del número de capas en el desacelerador Zeeman.

desdeado. El primer modelo, calcula teóricamente la contribución al campo magnético de cada bobina en función del número de capas y compara el perfil de intensidad de campo magnético obtenido con el perfil de intensidad de campo magnético requerido obtenido anteriormente. A partir de esto se obtiene el número de capas necesario en cada bobina. Esto se observa en el gráfico superior de la Figura 4.3, en B): cada punto verde corresponde al campo generado por una bobina del solenoide con un número de capas específico. Para obtener la mayor eficiencia posible se iteran hasta lograr obtener el mayor valor de R posible. Este modelo es similar al reportado en Ref. [96]. El aporte novedoso propuesto en esta investigación, con el cual se puede aumentar la eficiencia del desacelerador así como la captura en la trampa magnética, corresponde a la implementación del segundo modelo.

El segundo modelo, desarrollado en el software Comsol, simula por elementos finitos el perfil de intensidad de campo magnético generado a partir de la distribución de capas por bobina determinada anteriormente. En este modelo es necesario especificar las variables físicas experimentales propias del diseño: distribución del número de vueltas por bobina, materiales utilizados, corriente y las dimensiones de cada sección. El modelo simula el comportamiento de un solenoide de capas variables. A partir de los parámetros definidos se obtiene una simulación muy cercana a la realidad del perfil de intensidades del campo magnético en función de la distancia a lo largo del solenoide, es decir $B(z)$ en la Ecuación 4.3. El gráfico inferior de la Figura 4.3 en B) ilustra el perfil simulado utilizando el segundo modelo.

Para obtener la distribución del número de capas en cada bobina se iteran ambos modelos variando los diferentes parámetros. Se busca obtener la mejor concordancia posible entre el modelo teórico y la simulación, esto hasta lograr obtener el perfil de intensidad de campo magnético simulado más cercano al perfil de intensidad de campo magnético requerido. A partir de estos dos modelos se obtiene finalmente en C) la configuración final de la distribución de capas a lo largo del desacelerador Zeeman. Una de las mayores ventajas observadas al aplicar este método es que permite controlar de forma muy sencilla la variación del campo en los extremos del enfriador. Las simulaciones por medio de elementos finitos ofrecen además la increíble ventaja de que es posible conocer de una forma más cercana a la realidad el comportamiento de un diseño experimental.

Como observamos en los gráficos de la Sección B) de la Figura 4.3, la aplicación de ambos modelos permitió obtener una distribución del embobinado que resuelve simultáneamente dos necesidades: la generación de un perfil de intensidad de campo

magnético que se ajuste al perfil necesario para contrarrestar el efecto Doppler y que paralelamente se cancele en los extremos del desacelerador.

4.4. Construcción y montaje experimental

A partir de los resultados obtenidos con la aplicación del método descrito en la Sección 4.2 se construyó el diseño propuesto para el enfriamiento de átomos de estroncio. La intensidad del campo magnético en un punto dado es directamente proporcional al número de espiras o capas que rodean circularmente ese punto. Manteniendo una corriente constante, las secciones con mayor cantidad de capas generan un campo magnético mayor y al disminuir el número de capas disminuye, consecuentemente, la intensidad del campo magnético. El embobinado se realizó con cable de cobre # 13 (1,845 mm de diámetro), sobre un tubo de cobre de 12,5 cm de diámetro exterior y 1,5 mm de espesor. Para contener las espiras se soldaron dos bridas de conexión de bronce a cada extremo de 15 cm de diámetro y 3 cm de espesor.

Para la obtención de la rapidez final de los átomos deseada, el desacelerador Zeeman se diseñó en tres secciones distintas a lo largo del eje central: A) una Sección de campo magnético creciente, B) una Sección de “*Spin-Flip*” o de campo magnético cero y C) una Sección de campo magnético decreciente (ver Figura 4.4 y Figura 4.5) (un sistema similar se puede encontrar en Ref. [93]). La Sección A) tiene una longitud total de aproximadamente 25 cm. Esta Sección está diseñada de forma tal que, al aplicar una corriente de 6 A, la intensidad del campo magnético inicia en 0 G hasta alcanzar un valor máximo negativo de -300 G y luego decrezca hasta retornar a 0 G. El embobinado de esta Sección se realizó en 6 segmentos de igual longitud (4 cm) cuyo número de capas varía en función del campo magnético requerido. El primer segmento está constituido por 8 capas, el segundo por 10 capas, el tercero tiene igualmente 8 capas y a partir de este en cada segmento el número de capas decrece en una unidad hasta llegar al último segmento con 5 capas (ver sección A) de la Figura 4.5). La Sección B) está constituida únicamente por una junta de expansión de tipo fuelle de acero inoxidable de 10 cm de largo esto para absorber cualquier vibración del sistema (ver sección B) de la Figura 4.5). La Sección C), con una longitud de 15 cm, está diseñada para alcanzar una intensidad de campo magnético máxima de +300 G y luego decrecer lentamente hasta 0 G. En este caso el embobinado se repartió en tres segmentos de igual longitud (5 cm), el primero

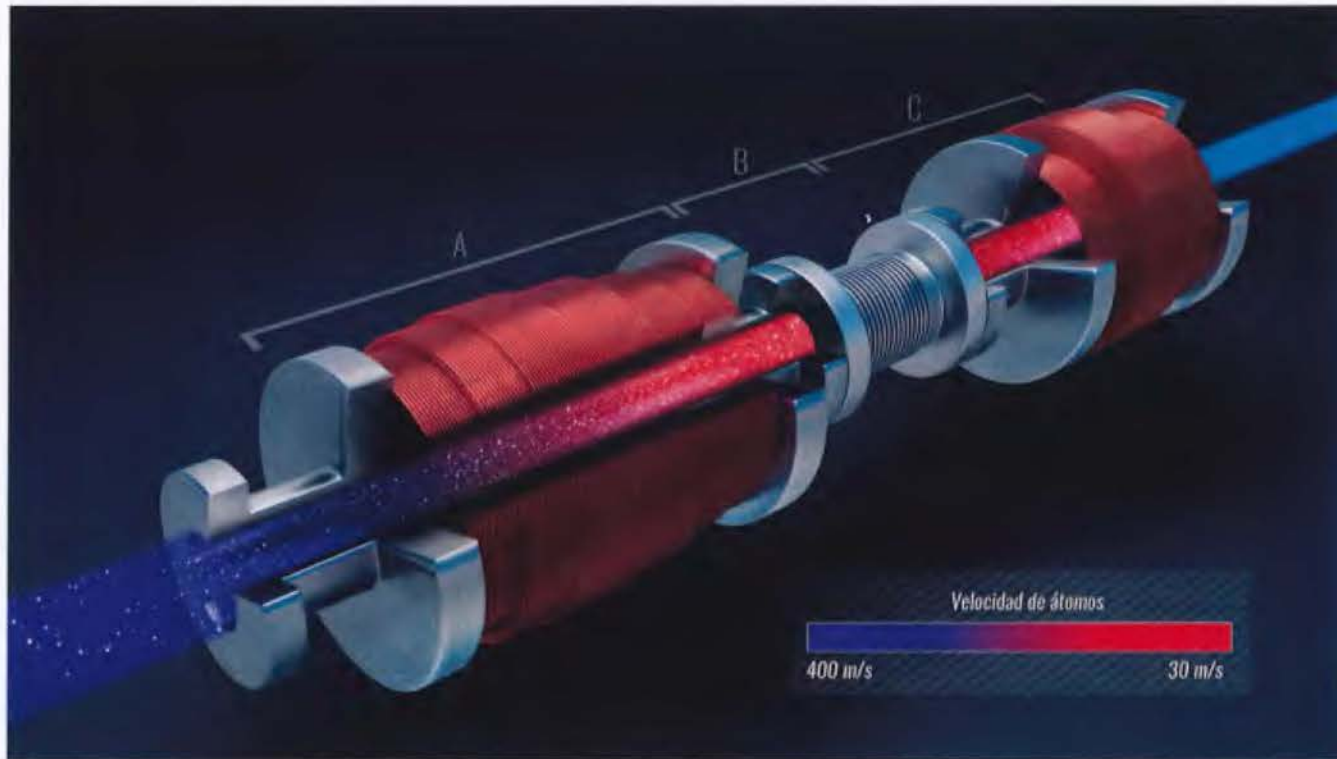


Figura 4.4: Representación artística del enfriamiento de átomos a través del desacelerador Zeeman. Un haz colimado de átomos es emitido con una rapidez de aproximadamente $400 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, los átomos son frenados hasta alcanzar una rapidez de aproximadamente $30 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ por medio de la interacción de la radiación electromagnética de un láser y un campo magnético variable distribuido en tres secciones. La Sección A) alcanza una intensidad de campo magnético de un máximo de -300 G , la Sección B) se mantiene en 0 G y la Sección C) alcanza un máximo de $+300 \text{ G}$.

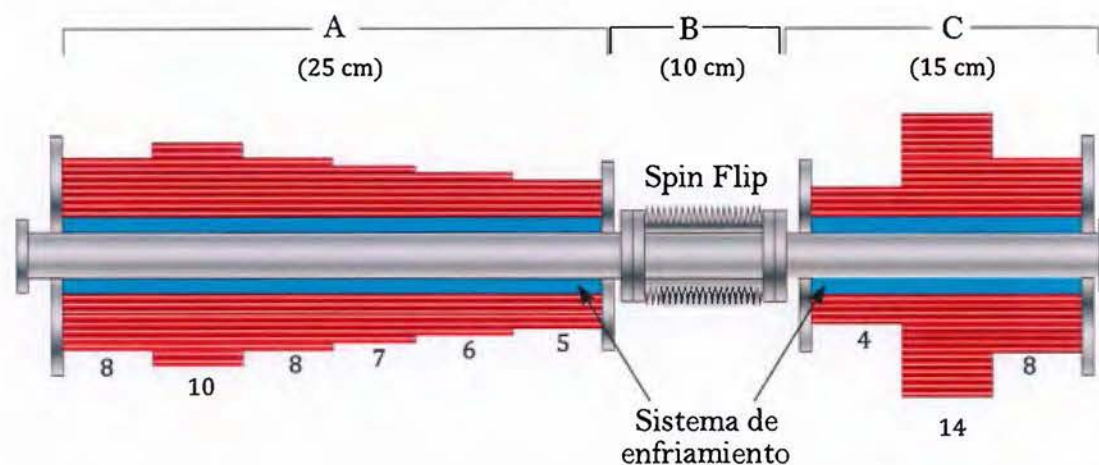


Figura 4.5: Las secciones A, B y C corresponden a las indicadas en la Figura 4.4. Se indica la longitud de cada Sección así como el número de capas en cada segmento del embobinado.

consta de 4 capas, el segundo 14 capas y el tercero 8 capas (ver sección C) de la Figura 4.5). Para el proceso de embobinado se fijó el tubo de cobre a un torno, asegurando así que el cable fuera enrollado lo más uniformemente posible. Durante todo el proceso de embobinado se controló que el cable no tuviera ningún contacto directo con el tubo de cobre para asegurar que no hubiera corto circuito entre el cable y el tubo de cobre.

La potencia máxima generada por calentamiento Joule debido a la corriente que circula por todo el sistema es de aproximadamente 160 W. Para controlar el calentamiento generado por esta potencia se incorporó un sistema de enfriamiento por medio de circulación de agua. Para determinar las propiedades necesarias en el sistema de enfriamiento realizamos un modelo. Dicho modelo inicia con la simulación de los incrementos térmicos generados a lo largo del *Zeeman Slower* en función de la corriente utilizada. Una vez obtenido el aumento de la temperatura se determina las variaciones térmicas al implementar un sistema de convección forzada por medio de un flujo de agua en contacto directo con el solenoide [102, 103]. La Figura 4.5 muestra el sistema implementado, el cual está constituido por un tubo de cobre de un diámetro exterior menor de 10 cm y 1,5 mm de espesor, soldado a las bridas de bronce de conexión del embobinado. A este tubo se acoplan dos conectores en los extremos, los cuales son conectados a un flujo constante de agua. Esto permite mantener una cámara de enfriamiento, que separa el embobinado de la sección interna por la cual viajan los átomos, asegurando una temperatura inferior a 30 °C.

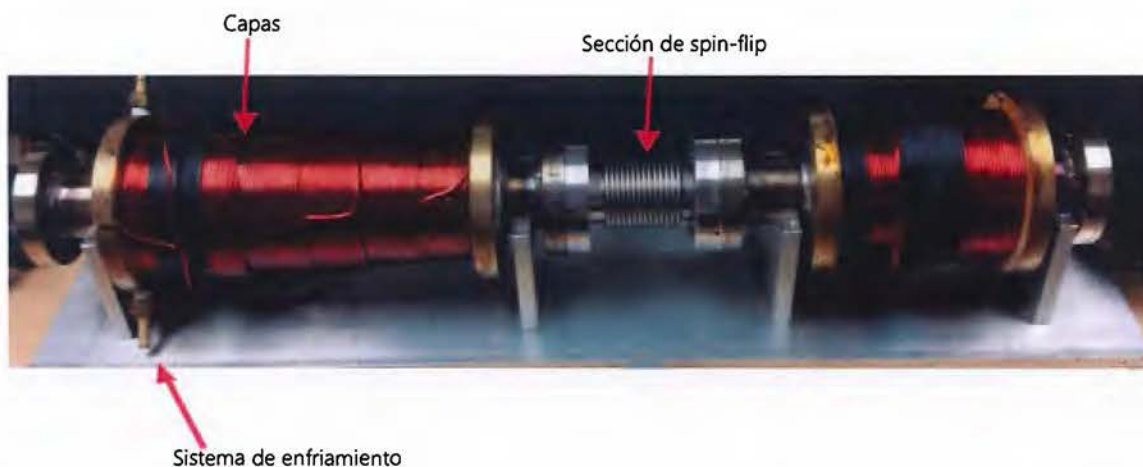


Figura 4.6: Fotografía del *Zeeman Slower*

En la Figura 4.5 se observa como sección en la cual interactúa el haz colimado de átomos con el láser es separada del embobinado por un tubo de acero inoxidable de 8 cm de diámetro y 15 mm de espesor que pasa por el centro del desacelerador Zeeman. Esta sección se acopla al sistema de vacío por medio de dos bridas de conexión de acero inoxidable de 10 cm de diámetro y 2 mm de espesor.

La Figura 4.6 presenta una fotografía del diseño construido. Se observan las distintas secciones descritas en la Figura 4.5. Para asegurar la estabilidad mecánica del equipo se construyó un sistema de soporte con una base de aluminio.

Para poder corroborar la eficiencia y precisión del método desarrollado y del diseño realizado el siguiente paso en la investigación consiste en caracterizar el *Zeeman Slower* construido (ver Figura 4.6). En una primera fase se va a medir el campo magnético generado por el dispositivo. Se busca corroborar que el perfil de intensidades de campo magnético coincida con el perfil modelado necesario para desacelerar los átomos de estroncio. La segunda fase consiste en medir las variaciones de la temperatura a lo largo del enfriador. Esto para corroborar la reducción de cualquier efecto de calentamiento Joule.

4.5. Caracterización del perfil de intensidades de campo magnético del *Zeeman Slower*

La caracterización del perfil de intensidades del campo magnético va a determinar la eficiencia del enfriador. Para asegurar que la mayor cantidad de átomos sean

enfriados es esencial asegurar que las variaciones del perfil de intensidades coincidan lo más posible con el modelo teórico descrito en la Sección 4.2. Estos resultados permiten además caracterizar el método de diseño propuesto en el capítulo anterior.

Se realizaron mediciones de la intensidad del campo magnético en función de la distancia a través del desacelerador Zeeman. Las mediciones de intensidad del campo magnético se llevaron a cabo utilizando una corriente de 1.5 A con la cual se alcanza, según el modelo, un campo máximo de ± 80 G (ver Figura 4.7), lo anterior debido a que este valor concuerda con el rango de medición del sensor utilizado. Se realizaron tres repeticiones de la mediciones y se obtuvieron coeficientes de variación inferiores al 2 % con lo cual se comprueba la estabilidad del campo. La Figura 4.7 muestra la buena coincidencia entre el modelo descrito en la Sección 4.2 y los resultados experimentales. Las diferencias encontradas no superan el 7,5 %, este valor, a pesar de ser elevado, es esperado debido a las dificultades presentes al ensamblar el embobinado de forma uniforme. Los datos experimentales muestran en la Figura 4.7 que, efectivamente, en la Sección A) la intensidad de campo magnético inicia en 0 G y disminuye hasta alcanzar un máximo negativo de -80 G y luego crece hasta alcanzar un valor de 0 G. En la Sección B) el campo se mantiene cercano a 0 G. Finalmente, la Sección C) mantiene igualmente la tendencia deseada, un incremento hasta un máximo de $+80$ G seguido por una disminución del campo magnético hasta alcanzar un valor cercano a 0 G.

Los resultados obtenidos nos permiten corroborar las ventajas del método desarrollado en esta investigación. Se observa, en la Figura 4.7, como la simulación por medio de elementos finitos permite predecir con mucha precisión el comportamiento del campo magnético generado por el diseño del desacelerador Zeeman. Lo anterior permite hacer cualquier ajuste que sea necesario en el diseño antes de llevar a cabo su construcción. Por otro lado, otras investigaciones utilizan únicamente un modelo matemático para determinar la configuración del embobinado [93, 96]. Las investigaciones anteriores a pesar de que reportan resultados satisfactorios deben implementar modificaciones adicionales en el diseño construido, tales como, variaciones en el embobinado, implementación de más bobinas o de un escudo magnético.

Para comprobar que la intensidad del campo magnético en el exterior del desacelerador tiende a 0 G conforme se aleja de los extremos (inicio de Sección A) y final de Sección C)), se realizaron mediciones de la intensidad del campo magnético en función de la distancia al alejarse de ambos extremos del desacelerador. En ambos casos se comprobó que la intensidad del campo magnético cerca de los extremos

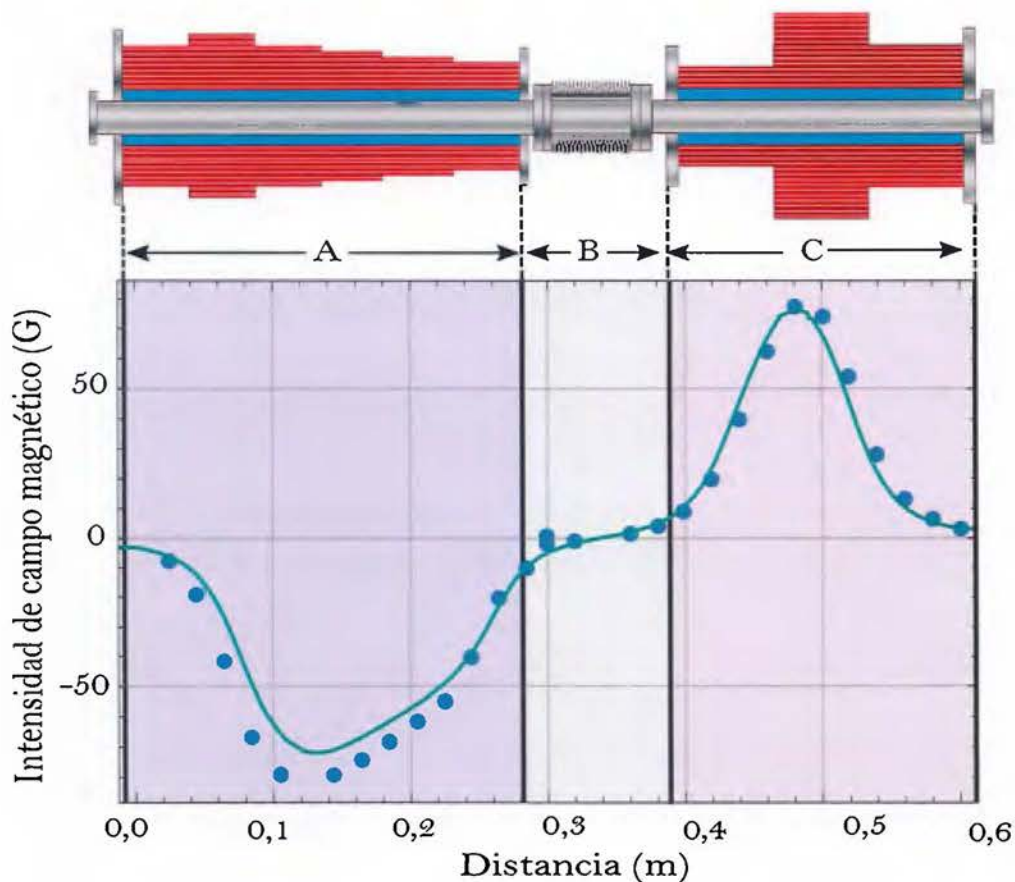


Figura 4.7: Comparación de la intensidad de campo magnético medida en el desacelerador Zeeman en función de la distancia con los valores determinados por el modelo descrito en la Sección II utilizando una corriente de 1,5 A. Los puntos experimentales corresponden a los valores de la intensidad de campo magnético medidos

y la línea sólida corresponde a la variación de la intensidad del campo magnético en función de la distancia generada por el modelo. Las líneas negras delimitan las secciones del embobinado. Las partes sombreadas corresponden a las tres secciones descritas en la Figura 4.4 y en la Figura 4.5. El tamaño de los puntos determina el porcentaje de error obtenido en las mediciones.

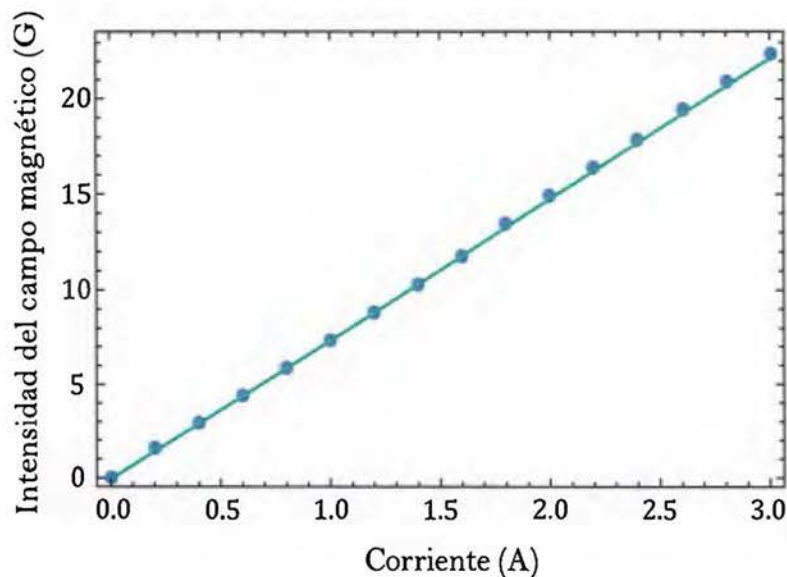


Figura 4.8: Variación de la intensidad del campo magnético en función de la corriente en un punto fijo.

alcanza un valor máximo de aproximadamente 5 G y cae rápidamente a valores cercanos a 0 G al alcanzar una distancia de 5 cm de ambos extremos. Estos resultados son conformes con la simulación realizada, lo cual, permite confirmar una vez más las ventajas del método propuesto.

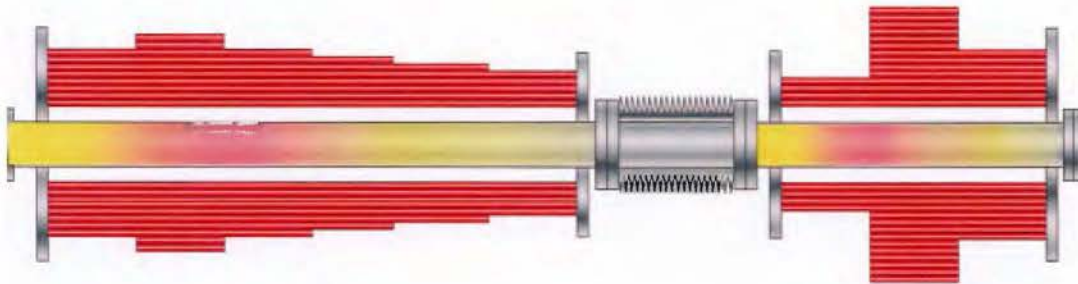
Para el caso de reducir la rapidez de los átomos de estroncio alrededor de un orden de magnitud es necesario suministrarle al desacelerador una corriente de 6 A para obtener, según el modelo desarrollado, intensidades de campo magnético de ± 300 G. Debido a las limitaciones del sensor de intensidad de campo magnético utilizado es necesario comprobar qué tipo de relación existe entre el incremento de la corriente y la intensidad del campo magnético obtenido. Por lo tanto, se realizaron mediciones de la variación del campo en un punto específico en función de la corriente y se observa en la Figura 4.8, efectivamente, un comportamiento lineal, la intensidad del campo magnético incrementa proporcionalmente al aumento de la corriente. Se puede afirmar que, al utilizar una corriente de 6 A se obtiene una intensidad de campo magnético 4 veces mayor que la medida con una corriente de 1,5 A. Estos valores concuerdan con el perfil de campo magnético necesario para realizar el enfriamiento de los átomos de estroncio.

4.6. Variaciones de la temperatura del dispositivo experimental

Como fue descrito en el Capítulo 4, para poder generar la intensidad de campo magnético requerida en el *Zeeman Slower* ciertas secciones del diseño requieren que el embobinado este constituido por muchas capas de cobre. Lo anterior podría generar un incremento en la temperatura a lo largo del *Zeeman Slower* originado por el efecto Joule. Un elevado incremento en la dispersión del haz de átomos. Lo anterior puede, por un lado, generar la desorción de contaminantes provenientes del calentamiento de las paredes del sistema y por otro ocasionar un incremento indeseado de la temperatura de los átomos que se busca enfriar. Como fue explicado en la Sección 4.2 para poder reducir los efectos de calentamiento se incorporó al diseño un sistema de enfriamiento. Dicho sistema fue diseñado a partir de un modelo matemático, el cual predice que sin el sistema de enfriamiento la temperatura puede incrementar en al menos un orden de magnitud al utilizar una corriente máxima de aproximadamente 10 A. El modelo predice un incremento máximo de 30 K al utilizar la misma corriente con el sistema de enfriamiento activado.

Para comprobar el funcionamiento del sistema de enfriamiento, se realizaron mediciones de la temperatura a lo largo del *Zeeman Slower*. Las mediciones se hicieron situando una serie de termopares de tipo T (Cobre-Constantan) a lo largo del *Zeeman Slower*. Los resultados en la Figura 4.9(a) se observó que, cuando el sistema de enfriamiento no está activado, la temperatura en el interior del *Zeeman Slower* varía de aproximadamente 330 K en los bordes del enfriador hasta valores máximos de aproximadamente 473 K en las zonas donde el embobinado es más grueso. Al activar el sistema de enfriamiento, se observa en la Figura 4.9(b) que en este caso la temperatura es uniforme a lo largo del enfriador y no supera los 300 K. Al utilizar corrientes menores de 10 A manteniendo encendido el sistema de enfriamiento la temperatura no sobrepasa la temperatura del medio ambiente, es decir 290 K. Estos datos nos permiten comprobar la eficiencia del sistema de enfriamiento, ya que en las condiciones de trabajo el diseño experimental no requiere la utilización de una corriente mayor de 6 A. Los resultados obtenidos coinciden con los valores predichos por el modelo propuesto. Al utilizar el sistema de enfriamiento es posible, por lo tanto, reducir considerablemente cualquier calentamiento originado por el efecto Joule y evitar cualquier perturbación en el proceso de enfriamiento de los átomos.

a) Sin sistema de enfriamiento



b) Con sistema de enfriamiento

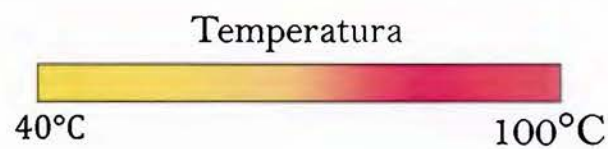
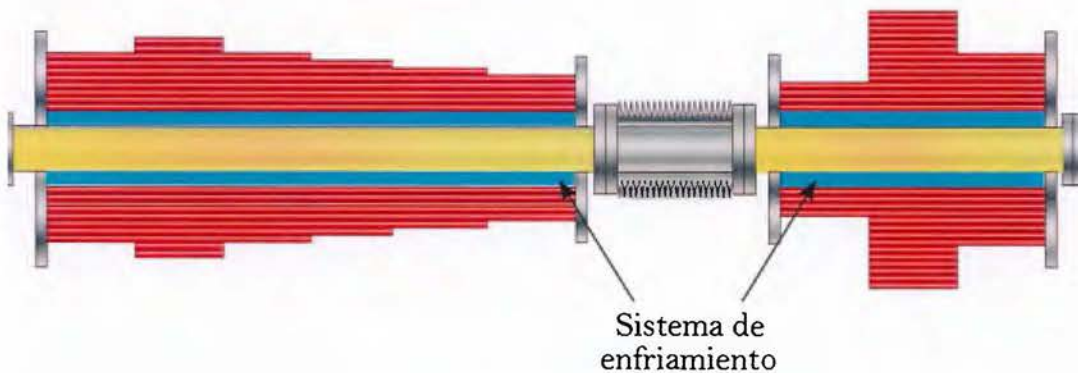


Figura 4.9: Comparación de las variaciones térmicas al utilizar el sistema de enfriamiento. Se midieron las variaciones de la temperatura en función de la posición a lo largo del *Zeeman Slower* al utilizar una corriente de 10 A. Se repitieron las mediciones en dos condiciones diferentes: a) presenta las variaciones cuando no se emplea el sistema de enfriamiento y b) cuando se enciende el sistema de enfriamiento.

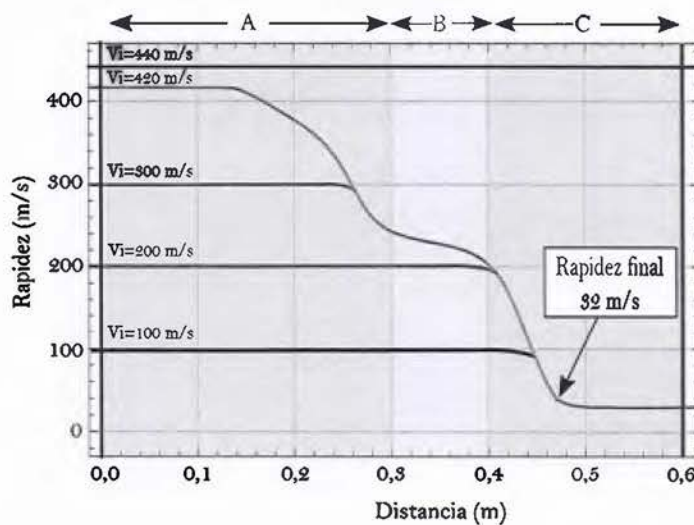


Figura 4.10: Rapideces de los átomos en función de la distancia en el desacelerador Zeeman, utilizando una corriente de 6 A, para diferentes rapideces iniciales. Las líneas negras delimitan la Sección del embobinado. Las partes sombreadas corresponden a las tres secciones descritas en la Figura 4.4 y en la 4.7.

4.7. Modelado de la rapidez de los átomos a lo largo del *Zeeman Slower*

A partir de las mediciones del perfil de intensidades del campo magnético en función de la distancia, utilizando una corriente de 6 A se puede modelar la variación de la rapidez de los átomos de estroncio a lo largo del *Zeeman Slower* [97]. Utilizando de la Ecuación 4.4 se deduce la variación de la rapidez de los átomos en función de la intensidad de campo magnético a lo largo del *Zeeman Slower*. La Figura 4.10 muestra la variación de la rapidez de los átomos en función de la posición en el desacelerador para diferentes rapideces iniciales, es decir a la velocidad v_0 en la Ecuación 4.2, utilizando una corriente de 6 A. El sistema está diseñado para frenar átomos con una rapidez inicial máxima de $420 \frac{m}{s}$. Átomos con rapideces iniciales inferiores empiezan a ser frenados más adelante en la sección de enfriamiento (ver Figura 4.10), esto ocurre a partir del momento en que entran en resonancia con la frecuencia del láser. Los átomos son frenados en la Sección C) del desacelerador a la cual llegan con una rapidez final de aproximadamente $32 \frac{m}{s}$.

La tasa de captura de átomos en el MOT se obtiene a partir de la Ecuación 4.11 y de los valores descritos en el Cuadro 4.2. Se obtiene que la tasa de captura de átomos

$v_{rmax} (m/s)$	7
$v_{zmax} (m/s)$	429
$v_f (m/s)$	30
Temperatura de evaporación (K)	800
Cantida de átomos que salen de la fuente por segundo N	5×10^{13}

Cuadro 4.2: Propiedades necesarias para determinar la tasa de enfriamiento del *Zeeman Slower* diseñado.

en el MOT obtenida a partir del diseño realizado tiene un valor de aproximadamente 2×10^9 átomos por segundo. El mayor valor reportado experimentalmente corresponde a 6×10^9 átomos por segundo, ver referencia [2]. Por lo que la tasa de captura modelada a partir del diseño construido es muy satisfactoria.

4.8. Discusión

Los resultados obtenidos en este capítulo demuestran las ventajas de la aplicación del método descrito en el Capítulo 4. Por un lado el perfil de intensidades del campo magnético del *Zeeman Slower* está en acuerdo a los valores predichos por el modelo. El sistema de enfriamiento propuesto permite además reducir practicamente por completo los efectos térmicos generados por el efecto Joule. Las propiedades del diseño construido permiten, por otro lado, obtener una tasa de captura del MOT cercana al valor máximo reportado en la literatura. Es importante recalcar además que para alcanzar este valor de eficiencia no fue necesario realizar ninguna modificación en el dispositivo construido. El siguiente paso consiste en el desarrollo de un montaje experimental para caracterizar la rapidez media del haz colimado de átomos al pasa por el *Zeeman Slower*

Capítulo 5

Desarrollo de un montaje experimental para caracterizar la rapidez media de un haz colimado de átomos por medio de una microbalanza de cuarzo

En los capítulos anteriores se presentó el diseño, construcción y caracterización de un *Zeeman Slower* para átomos de estroncio. El siguiente paso consiste en el diseño de un montaje experimental para poder medir las variaciones de la rapidez de los átomos al salir del *Zeeman Slower*. Se inicia con el diseño de una fuente que permite generar un haz colimado de átomos de estroncio seguida del diseño de un método para determinar la rapidez de los átomos a la salida del *Zeeman Slower* utilizando una microbalanza de cristal de cuarzo. Se establece una relación entre la rapidez de los átomos al chocar contra la superficie del cristal de cuarzo y las variaciones observadas en la frecuencia de oscilación. El método es aplicado para determinar la rapidez media de tres elementos: cobre, tungsteno y molibdeno, al ser evaporados por medio de un haz de electrones. Los resultados obtenidos son satisfactorios ya que concuerdan con los predichos por la teoría y mediciones reportadas en otras publicaciones. El sistema es desarrollado para ser implementado en la determinación de la rapidez de los átomos de estroncio al salir del *Zeeman Slower*.

5.1. Montaje experimental para determinar la rapidez de los átomos de estroncio al salir del *Zeeman Slower*.

Como fue explicado en la Sección 4.1 la primera fase del sistema de enfriamiento se da a por medio de la interacción entre el haz colimado de átomos y la radiación proveniente de un láser dirigido en dirección opuesta. El *Zeeman Slower* permite asegurar que la frecuencia del láser utilizado se encuentre en resonancia con la transición atómica de los átomos hasta alcanzar reducir la rapidez de los átomos en al menos un orden de magnitud. En el Capítulo 4 se caracterizaron las distintas propiedades del *Zeeman Slower* construido. Como se muestra en la Figura 5.1 para poder determinar la capacidad de enfriamiento del *Zeeman Slower* es necesario desarrollar un nuevo montaje experimental. El montaje consta de cuatro partes principales: a) una fuente colimada de átomos, b) el *Zeeman Slower*, c) un sistema que permita medir la rapidez de los átomos y d) un laser. Este Capítulo presenta el diseño y construcción de una fuente colimada para átomos de estroncio (a) y el desarrollo de un método que permite determinar la rapidez de los átomos de estroncio al salir del *Zeeman Slower* (c). Para poder enfriar los átomos se requiere un láser azul (d) cuya longitud de onda coincida con la requerida para excitar la transición es decir de 461 nm. El montaje experimental tiene que ser instalado en un sistema de ultrar-alto vacío para evitar cualquier contaminación ambiental.

5.2. Diseño y construcción de la fuente de átomos

Para poder caracterizar la capacidad de enfriamiento de átomos de estroncio del enfriador Zeeman es necesario generar un haz colimado de átomos. El diseño de la fuente de átomos tiene que ser lo suficientemente estable para alcanzar la temperatura de fusión necesaria del material que se desea enfriar y que mantenga esta temperatura por periodos largos de tiempo. Para cumplir con estas dos propiedades se diseñó de un horno de tipo radiativo. Como se observa en la Figura 5.2 el sistema esta separado en dos secciones: la primera a) consta de un cilindro de cobre con una cavidad a través de la cual se coloca un filamento de tungsteno; la segunda parte b) esta constituida por un crisol de molibdeno de 2,0 cm de longitud y 1,5 cm de diámetro rodeado por un cilindro de cobre. La parte trasera del crisol se encuen-

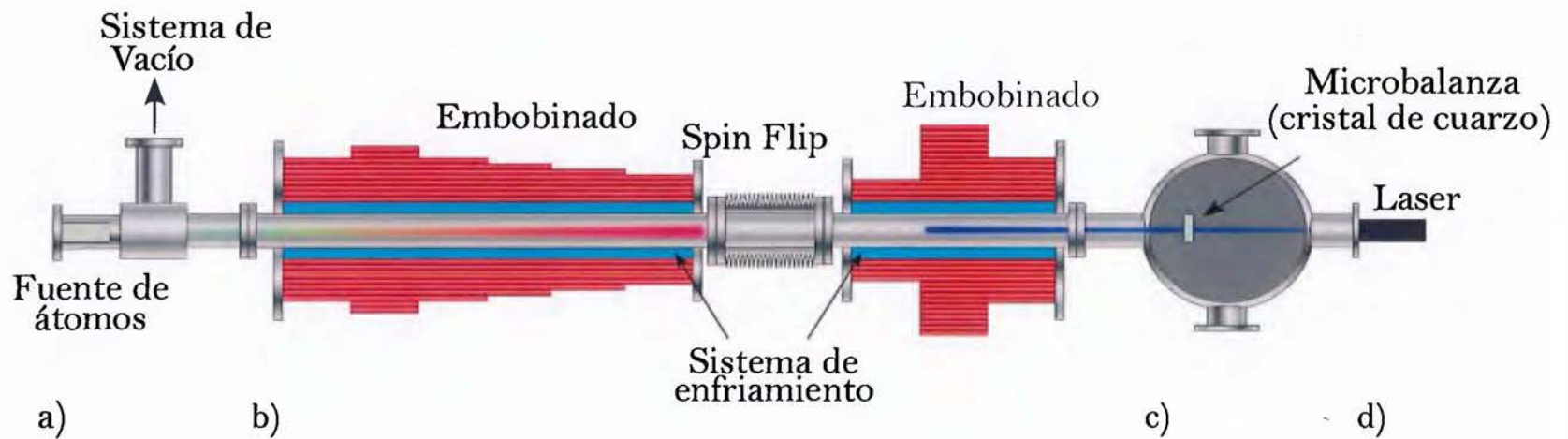


Figura 5.1: Esquema del montaje experimental para determinar la rapidez de los átomos al final del *Zeeman Slower*. El montaje está constituido por cuatro partes principales: a) la fuente de átomos, b) el *Zeeman Slower*, c) una microbalanza de cristal de cuarzo y d) un láser.

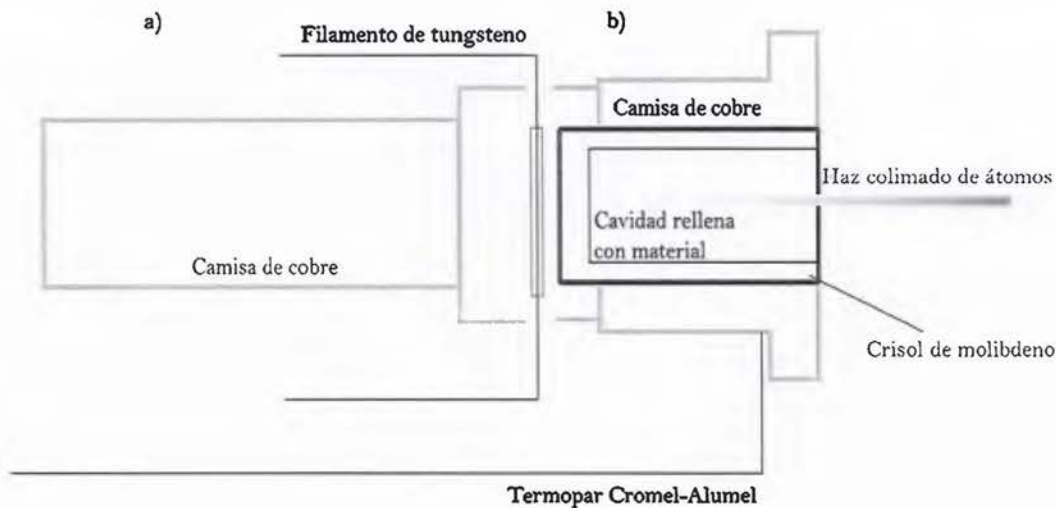


Figura 5.2: Esquema del diseño de la fuente de átomos. La sección a) describe el sistema de calentamiento de la fuente a partir de un filamento de tungsteno y un cilindro de cobre. El material que se desea evaporar es colocado en la sección b) en un crisol de molibdeno rodeado por un cilindro de cobre. La parte frontal del sistema tiene una abertura de 1 mm de radio a partir de la cual se genera un haz colimado de átomos.

tra muy cerca del filamento. La parte frontal del reservorio está terminada por una apertura de 1,0 mm de radio, lo que permite generar un haz colimado de átomos. Para poder medir la temperatura durante la evaporación se utiliza un termopar de Chromel-Alumel (tipo K) ajustado a la base de la fuente.

El horno construido (ver Figura 5.3) tiene un conector externo a partir del cual es posible introducir corriente a la fuente y determinar el potencial medido por el termopar. El sistema permite alcanzar una temperatura estable de aproximadamente 900 K y genera un haz de átomos con una rapidez media de aproximadamente $500 \frac{m}{s}$. Este diseño es similar al descrito en la Ref. [104].

La tasa de átomos que salen por segundo \dot{N} de la fuente se obtiene a partir de la siguiente ecuación:

$$\dot{N} = \phi A, \quad (5.1)$$

donde A es el área superficial del orificio de salida de los átomos y ϕ el flujo, el cual se obtiene a partir de:



Figura 5.3: Fotografía de la fuente de átomos. Se observan las distintas secciones presentadas en la Figura 5.2. El filamento de tungsteno, en contacto con el crisol de molibdeno permite alcanzar temperaturas estables de 500°C.

$$\phi = \frac{n_o \bar{v}}{4}, \quad (5.2)$$

donde \bar{v} corresponde a la rapidez media de los átomos al salir de la fuente y n_o corresponde a la densidad de vapor de los átomos. La anterior se calcula a partir de la siguiente :

$$n_o = \frac{P_v}{k_B T}, \quad (5.3)$$

donde T es la temperatura de evaporación y P_v la presión de vapor de los átomos a la temperatura definida por el horno, la cual se obtiene para el estroncio a partir de la Ref. [15]:

$$\log_{10}[P_{vap}] = 10,71 - \frac{7,83 \times 10^3}{T}. \quad (5.4)$$

Utilizando las ecuaciones anteriores, para la fuente de átomos de estroncio diseñada y utilizando una temperatura de $T \approx 530^\circ\text{C}$ se obtiene una densidad n_o de $\approx 10^{16}$ átomos/cm³. A partir de la cual se obtiene para la fuente de átomos construida una tasa \dot{N} de $\approx 5 \times 10^{13}$ átomos/s.

La fuente de átomos diseñada ofrece la versatilidad de ser utilizada para diferentes tipos de materiales intercambiando el crisol utilizado y rellenándolo con un material diferente.

5.3. Desarrollo de un método para la determinación de la rapidez de los átomos por medio de una microbalanza de cristal de cuarzo

Usualmente para medir la eficiencia de un *Zeeman Slower* se utiliza una sonda láser, localizada a la salida del *Zeeman Slower*, con la cual se realiza un barrido alrededor de la transición de interés. La rapidez y el flujo de átomos se determina a partir de la medición del espectro de absorción. En esta tesis proponemos la implementación de un novedoso sistema para determinar la rapidez de los átomos por medio de una microbalanza de cristal de cuarzo.

Las microblanzas de cristal de cuarzo (QCM, por sus siglas en inglés), como su nombre lo indica, son usualmente utilizadas para realizar mediciones de masa de alta precisión y de bajo orden de magnitud ($\approx 10^{-12}$ kg). De forma sencilla, la balanza mide los cambios de frecuencia de un cristal de cuarzo piezoeléctrico al ser perturbados debido a la adición de una pequeña masa [105, 106]. La ecuación de Sauerbrey [107] relaciona la frecuencia de oscilación del cristal con las variaciones de la masa depositada:

$$f_{ev} = f_o - \frac{2f_o^2 \Delta m}{A\sqrt{\rho\mu}}, \quad (5.5)$$

donde f_{ev} corresponde a la frecuencia de oscilación del cristal durante la deposición, f_o la frecuencia de resonancia propia del cristal, Δm la masa total, A el área, ρ a la densidad y μ al modulo de rigidez del cristal. La Ecuación 5.5 es usualmente utilizada en física de superficies para determinar la tasa de deposición durante la evaporación de algún material dado en el crecimiento de películas delgadas. Sin embargo en la actualidad esta técnica es implementada en una gran cantidad de áreas que van desde investigaciones del suelo marciano hasta en el estudio de microorganismos biológicos [108, 109]. En esta investigación la técnica se implementa el mismo principio de funcionamiento para la determinación de la rapidez media de un haz de átomos [110].

Es bien sabido que al chocar los átomos contra la superficie del cristal, debido al cambio de momentum lineal, se observa una variación en la frecuencia de oscilación. Al realizar las usuales mediciones de tasas de deposición esta variación no es tomada en cuenta ya que se consideran únicamente los cambios en la frecuencia entre dos

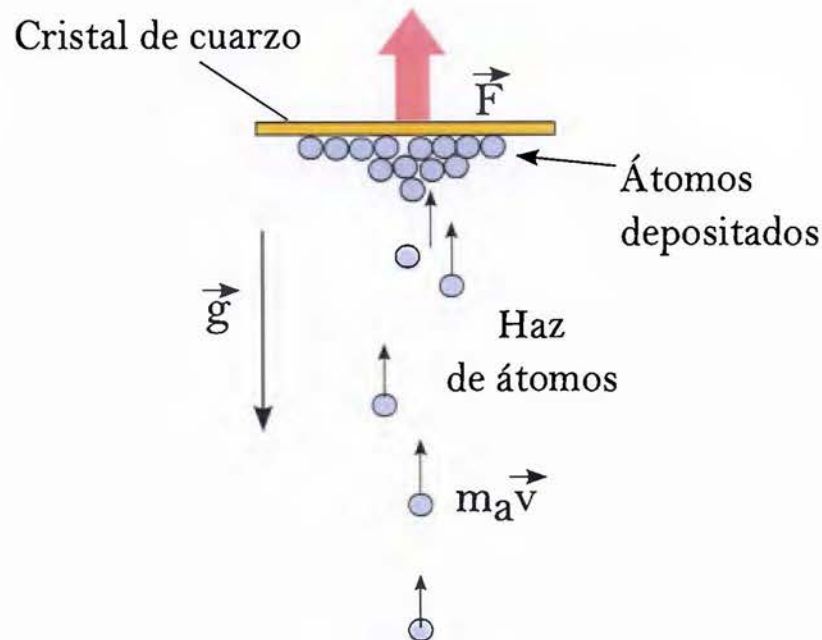


Figura 5.4: Esquema del funcionamiento de una microbalanza de cristal de cuarzo. Al depositarse sobre el cristal, los átomos con masa m_a chocan contra la placa a una velocidad v , generando un cambio de momentum $m_a v$, el cual puede ser observado a través de las variaciones en la frecuencia de oscilación del cristal. A primera aproximación, en el vacío, la única fuerza a la que se encuentran sometidos los átomos es a la fuerza de atracción gravitacional.

puntos fijos. Sin embargo, en nuestro caso, la magnitud de esta perturbación en la frecuencia, es de fundamental importancia ya que está asociada a la rapidez de los átomos al chocar contra la superficie del cristal. Buscamos, entonces, encontrar una relación entre esta “masa virtual” y la rapidez de los átomos. La masa total Δm en la Ecuación 5.5 corresponde a:

$$\Delta m = m_p + Nm_a - m_v, \quad (5.6)$$

donde m_p es la masa del cristal de cuarzo, N la tasa de átomos depositados por segundo, m_a la masa atómica del elemento evaporado y m_v la masa virtual. Como se observa en la Figura 5.4 a través de un sencillo análisis de fuerza se puede determinar a primera aproximación la rapidez de los átomos al chocar contra la superficie.

La variación del momentum total de los átomos al golpear la placa es equivalente a la fuerza ejercida, es decir:

$$m_v g = \frac{dp}{dt} = N v m_a, \quad (5.7)$$

donde g corresponde a la constante de aceleración gravitacional. A partir de esta ecuación se despeja el valor de la rapidez media de los átomos en función de la masa virtual m_v :

$$v = \frac{m_v g}{N m_a}. \quad (5.8)$$

Por lo tanto a partir de esta ecuación se puede deducir la rapidez de los átomos a partir de la masa virtual. Como se observa en la Figura 5.5 la frecuencia de oscilación disminuye conforme se depositan los átomos sobre el cristal de cuarzo. En el momento que se detiene el flujo de átomos, por medio de un obturador (usualmente denominado en inglés *shutter*), se deja de observar el efecto de la fuerza de los átomos y por lo tanto la frecuencia del cristal disminuye abruptamente antes de estabilizarse por completo. Al volver a abrir el *shutter* se observa, en este caso, un salto en la frecuencia de oscilación. La variación en la frecuencia Δf que se observa en el cristal en el momento que se activa y desactiva el *shutter* corresponde a la masa virtual generada por el choque de los átomos contra la superficie del cristal, la cual se puede modelar por medio de la siguiente ecuación:

$$\Delta f = \frac{2f_o^2 m_v}{A\sqrt{\rho\mu}}. \quad (5.9)$$

Despejando la masa virtual de la Ecuación 5.8 y reemplazandola en al Ecuación 5.9 se obtiene una relación directa entre el cambio de frecuencia y la rapidez media de los átomos:

$$\Delta f = \frac{2f_o^2}{A\sqrt{\rho\mu}} \frac{N v m_a}{g} \quad (5.10)$$

Para comprobar el funcionamiento de la técnica propuesta se realizaron mediciones de la rapidez media de tres tipos de átomos durante el proceso de deposición física de vapor por haz de electrones.

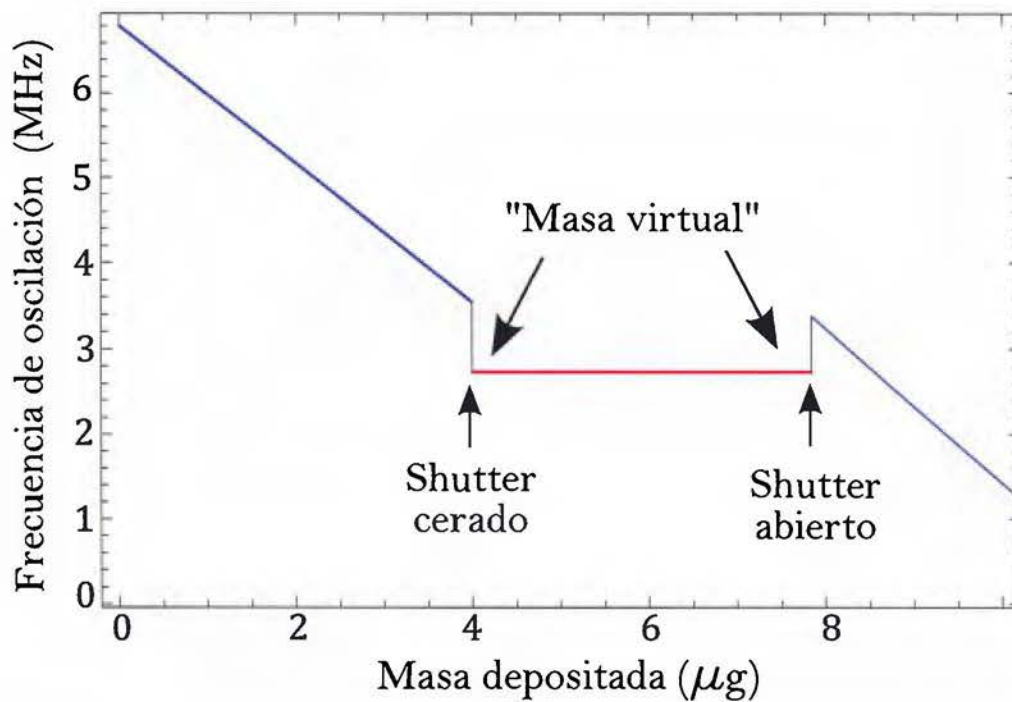


Figura 5.5: Variación de la frecuencia de oscilación del cristal de cuarzo en función de la masa depositada. Al detener el flujo de átomos con el *shutter* la frecuencia de oscilación cae abruptamente. Al abrir el *shutter* nuevamente se observa un incremento de la misma magnitud en la frecuencia. La magnitud de la variación de la frecuencia en ambos saltos es originada por el efecto de la masa virtual m_v de los átomos al chocar contra la superficie del cristal.

Elemento	Masa atómica (u)	Temperatura de fusión (K)	Rapidez media (m/s)
Cobre	63.5	1357	600
Molibdeno	95.93	2896	700
Tungsteno	183.8	3695	450

Cuadro 5.1: Propiedades de los elementos: cobre, molibdeno, tungsteno [111]. Los valores para la rapidez media corresponden aproximadamente al valor máximo de la distribución de velocidades obtenida durante el experimento las cuales son graficadas en la Figura 5.9

5.4. Montaje experimental

La deposición física de vapor por haz de electrones (EBPVD por sus siglas en inglés) se hizo utilizando un sistema de evaporación mediante un cañón de electrones, modelo Thermionics 150-0040 que permite variar la corriente de emisión de los electrones de 0 mA a 70 mA. Como es presentando en la Figura 5.6 el sistema es instalado en una campana de alto vacío la cual permite alcanzar presiones mínimas de ($\approx 10^{-7}$ Torr). La presión es constantemente monitoreada por medio de un sensor de presión, de la compañía MKS modelo 354 MICRO-ION. Se utilizó una microbalanza de cristal de cuarzo acoplado a un monitor de espesores de la compañía Maxtek, modelo TM-400. La temperatura del cristal es regulada por medio de un sistema de enfriamiento por medio de un circuito cerrado de agua. Para detener el flujo de átomos se utilizó un *shutter*, el cual consiste en un fuelle translacional a partir del cual se puede cubrir o descubrir el material por medio de una placa metálica. Las mediciones de la frecuencia del cristal se obtuvieron por medio de un sistema integrado a la computadora modelo Keysight 53 220A el cual permite tomar distintas mediciones simultáneamente en tiempo real.

5.5. Rapidez media de los átomos de Cobre, Tungsteno y Molibdeno evaporados por medio de un haz de electrones

El experimento descrito en la Sección 5.4 se repitió para tres elementos distintos: cobre, tungsteno y molibdeno. El Cuadro 5.1 presenta una tabla con las propiedades relevantes para nuestra investigación de cada uno de los elementos.

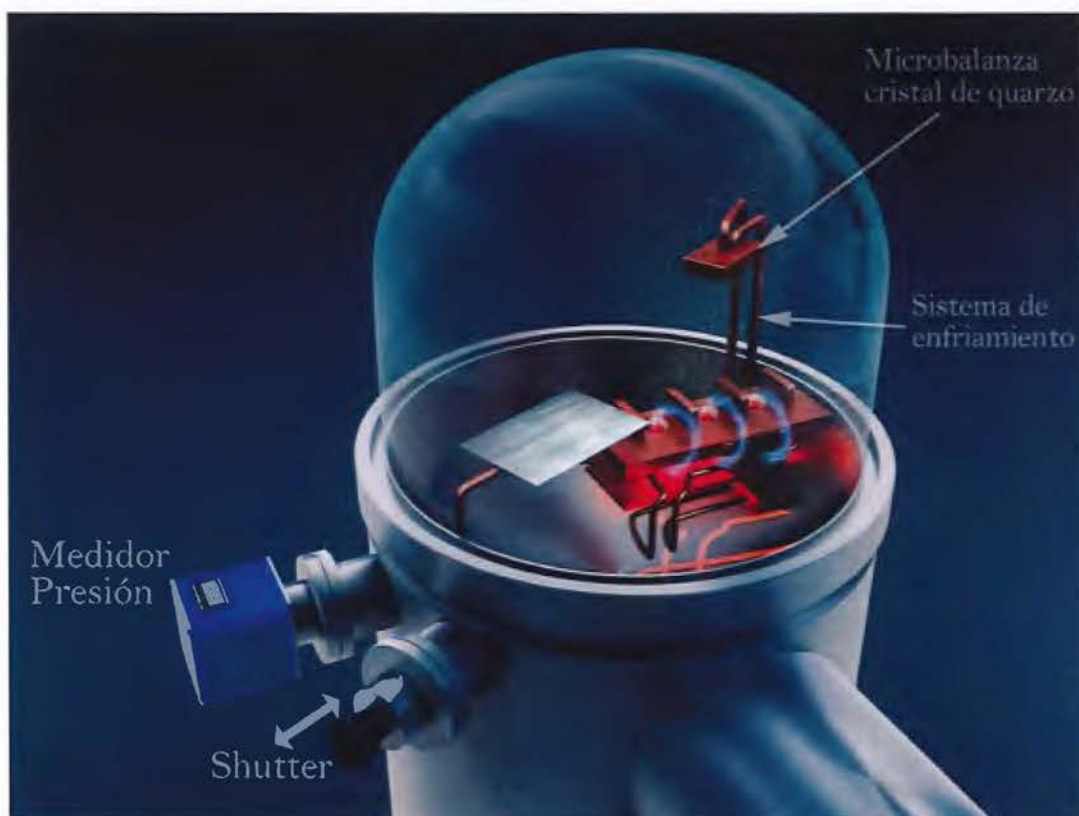


Figura 5.6: Representación artística del montaje experimental. Se pone el material que se desea evaporar en el crisol. Los electrones son acelerados y direccionados hacia el material que se desea evaporar. Al alcanzar la temperatura adecuada para poder evaporar el material se genera un haz de átomos. La microbalanza de cristal de cuarzo está localizada justo encima del haz detectando. Por medio de las variaciones de la frecuencia de oscilación del cristal de cuarzo es posible inferir la masa depositada y la rapidez de los átomos al ser evaporados. El *shutter* permite frenar el proceso de evaporación en cualquier momento que se desee. La presión es constantemente monitoreada con ayuda del medidor de presión.

Para cada uno de los elementos se aplica el método descrito en la Sección 5.3 utilizando tres tasas de evaporación distintas, obtenidas al incrementar la corriente de aceleración. El aumento de la tasa de evaporación al aumentar la corriente de emisión tiene como efecto el aumento del área del material fundido. Durante el proceso de evaporación se monitorea constantemente las variaciones en la presión en la campana, a partir de las cuales se deduce la temperatura de evaporación [15]. Para cada una de las tasas de evaporación utilizadas no se observan mayores variaciones en la temperatura, por lo que no se espera observar cambios en la rapidez media de los átomos en función de la tasa de evaporación.

Cada medición consta de tres pasos:

1. Se evapora el material manteniendo una tasa fija durante 2 minutos.
2. Se cierra el *shutter* durante 40 segundos.
3. Se abre nuevamente el *shutter*.

Para cada tasa de evaporación se hicieron 2 repeticiones. La Figura 5.7 presenta los resultados obtenidos al implementar el procedimiento en la determinación de la rapidez media de los átomos de tungsteno al ser evaporados. Las mediciones concuerdan con el modelo descrito en la Figura 5.5. Como se observa en la Figura en el paso 1) la frecuencia disminuye paulatinamente debido a la deposición constante de los átomos sobre la superficie del cristal. A partir de la pendiente obtenida en esta sección de la gráfica es posible obtener la tasa de deposición \dot{N} de los átomos sobre el cristal por medio de la Ecuación 5.5. Al aplicar el paso 2) la frecuencia cae abruptamente ya que se cancela el efecto de la masa virtual de los átomos al golpear el cristal. Seguidamente la frecuencia se estabiliza ya que la masa sobre el cristal es constante y finalmente al aplicar el paso 3) hay un incremento abrupto de la frecuencia debido a que se vuelve a activar el efecto de la masa virtual, seguido nuevamente por la disminución paulatina observada en 1). La masa virtual es calculada a partir de la variación de la frecuencia en los saltos observados en 2) y 3). Para cada tasa de evaporación se tienen, por lo tanto, 4 valores de la masa virtual. Para cada uno de estos valores se aplica la ecuación 5.10 con lo que se obtiene un valor de la rapidez media para cada medición. Estos resultados son promediados con lo cual se determina la rapidez media de los átomos para cada tasa de evaporación utilizada. El porcentaje de error en cada medición es obtenido a partir de la desviación estándar de las cuatro repeticiones.

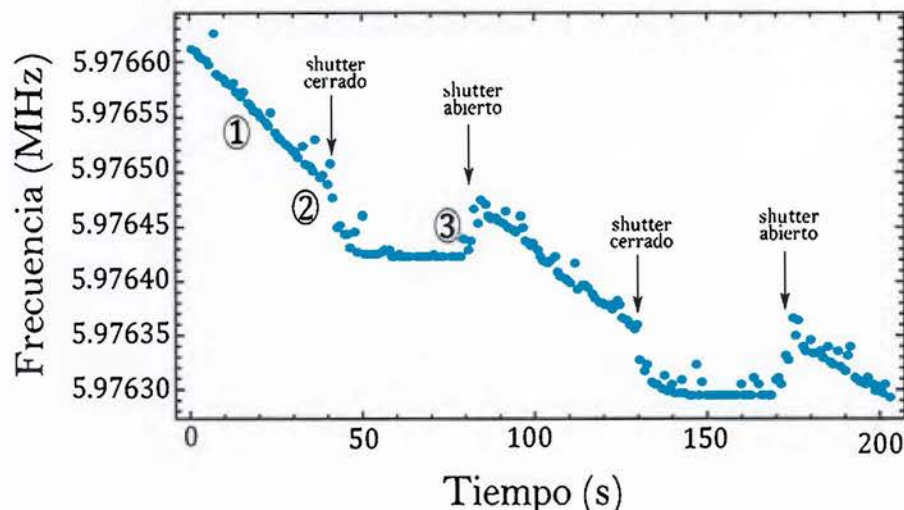


Figura 5.7: Medición de la variación de la frecuencia de oscilación del cristal de cuarzo en función del tiempo durante la evaporación de Tungsteno. Se aplican los pasos descritos en la Sección 5.5. A partir de los “saltos” en la frecuencia observados en los pasos 1 y 3 se determina la masa virtual a partir de la cual se deduce la rapidez media de los átomos al chocar contra el cristal por medio de la Ecuación 5.10.

La Figura 5.8 muestra la rapidez media obtenida en función de las diferentes tasas de evaporación para los tres elementos. Como era esperado, al no haber una variación en la temperatura durante la evaporación no se observan cambio en la magnitud de la rapidez medida para cada elemento. La Figura 5.9 presenta la distribución de velocidades de Maxwell para cada uno de los elementos utilizando la temperatura de evaporación determinada durante el experimento. Las líneas sólidas corresponden a la rapidez media más probable en cada una de las distribuciones y las zonas sombreadas al ámbito de rapidezes alrededor de este valor. Estos valores son graficados en la Figura 5.8. Las líneas horizontales en la figura corresponden a las rapidezes medias más probables y las zonas sombreadas a sus respectivos ámbitos. Observamos entonces como los resultados obtenidos en las mediciones están en acuerdo a los valores esperados obtenidos a partir de las distribuciones de Maxwell.

Los resultados obtenidos son, por lo tanto, satisfactorios y permiten corroborar el buen funcionamiento de la técnica desarrollada. Esta técnica puede ser entonces implementada para determinar la rapidez media de un haz de átomos. En esta investigación la técnica diseñada tiene como objetivo central el estudio de las variaciones de la rapidez de los átomos de estroncio una vez que atraviesan el *Zeeman Slower*.

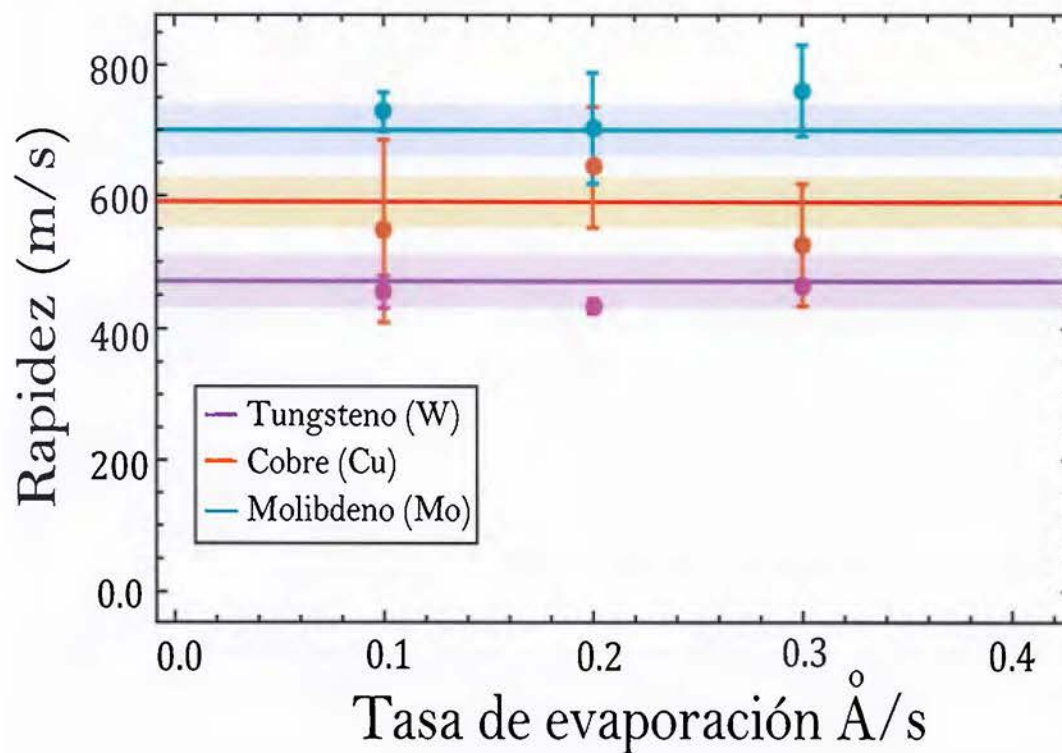


Figura 5.8: Variaciones de la rapidez en función de la tasa de evaporación para tres elementos: cobre, tungsteno y molibdeno. Se asigna cada elemento un color distinto, anaranjado para el cobre, morado para el tungsteno y celeste para el molibdeno. La línea de color sólido corresponde a la rapidez media máxima de los átomos obtenida a partir de la presión de vapor medida durante la evaporación. La línea sombreada corresponde al ámbito de velocidades que se midió para cada distribución, las cuales son descritas con mayor detalle en la Figura 5.9. Las barras de error fueron determinadas a partir de la desviación estándar de la serie de datos obtenidos para cada medición.

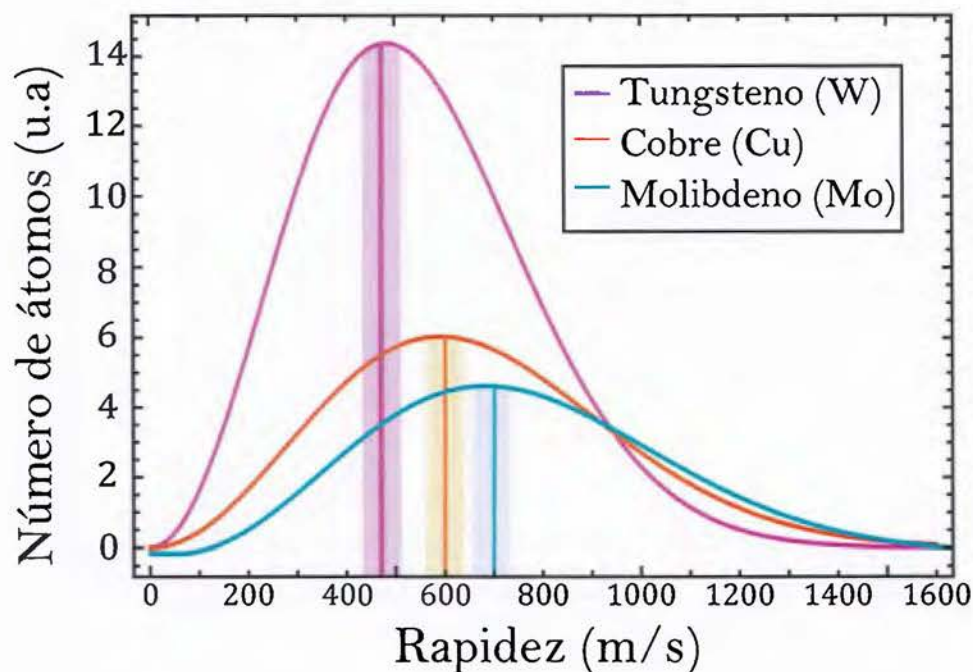


Figura 5.9: Distribución de velocidades de Maxwell de los tres elementos: Cobre, Tungsteno y Molibdeno, determinadas a partir de la temperatura de evaporación obtenida a partir de las presiones de vapor medidas durante cada experimento. Para el Cobre $\approx 10^{-6}$ Torr, para el Tungsteno $\approx 10^{-7}$ Torr y para el Molibdeno $\approx 10^{-7}$ Torr, las cuales corresponden respectivamente a temperaturas de aproximadamente 1142 K, 2300 K y 2167 K [15]. Para cada distribución la parte sombreada corresponde al ámbito de velocidades que se van a medir en el experimento, los cuales corresponden a las partes sombreadas de la Figura 5.8

5.6. Implementación de la técnica en la caracterización de la rapidez de los átomos de Estroncio

Para poder comprobar que la técnica desarrollada puede ser implementada para detectar las variaciones de la rapidez de los átomos al salir del *Zeeman Slower* es necesario determinar si las variaciones en la frecuencia pueden ser detectadas por el montaje experimental. Se comienza por determinar la tasa de átomos que van a ser depositados por segundo sobre la microbalanza. Retomando los cálculos de la Sección 4.2 para la tasa de captura, a partir de la Ecuación 4.11 se puede obtener la tasa de átomos enfriados por segundo. Sólo que en este caso al poder instalar la microbalanza justo a la salida del *Zeeman Slower* los efectos de dispersión son despreciables. Se obtiene que la tasa de átomos detectados por la balanza R_b puede ser calculada a partir de la siguiente ecuación:

$$R_b = N \left[1 - e^{-\frac{v_{r,max}^2}{B^2}} \right], \quad (5.11)$$

las variables fueron definidas en la Sección 4.2. Utilizando al tasa de evaporación definida en la Sección 5.2 ($N \approx 5 \times 10^{13}$) se obtiene un valor de R_b de $\approx 4 \times 10^{13}$ átomos por segundo. A partir de este valor se busca determinar las variaciones en la frecuencia del cristal para diferentes rapidezces. Se realiza un modelo sencillo, por medio de Ecuación 5.10 el cual permite predecir cuales son las variaciones en la frecuencia que se van a observar al variar la rapidez de los átomos de estroncio. La Figura 5.10 muestra como estas variaciones están ligadas a la tasa de átomos enfriados. Como es de esperarse las variaciones en la frecuencia de oscilación del cristal de cuarzo son mucho menores para tasas de evaporación bajas e incrementan conforme la tasa de evaporación aumenta. A partir del modelo se espera que las variaciones en la frecuencia esten el ámbito de (0 – 35) Hz. Estos valores pueden ser medidos a partir del diseño experimental descrito en la sección anterior. La técnica desarrollada ofrece además la ventaja de que puede ser implementada simultáneamente en la determinación de la tasa de átomos desacelerados y la rapidez media de estos al salir del *Zeeman Slower*.

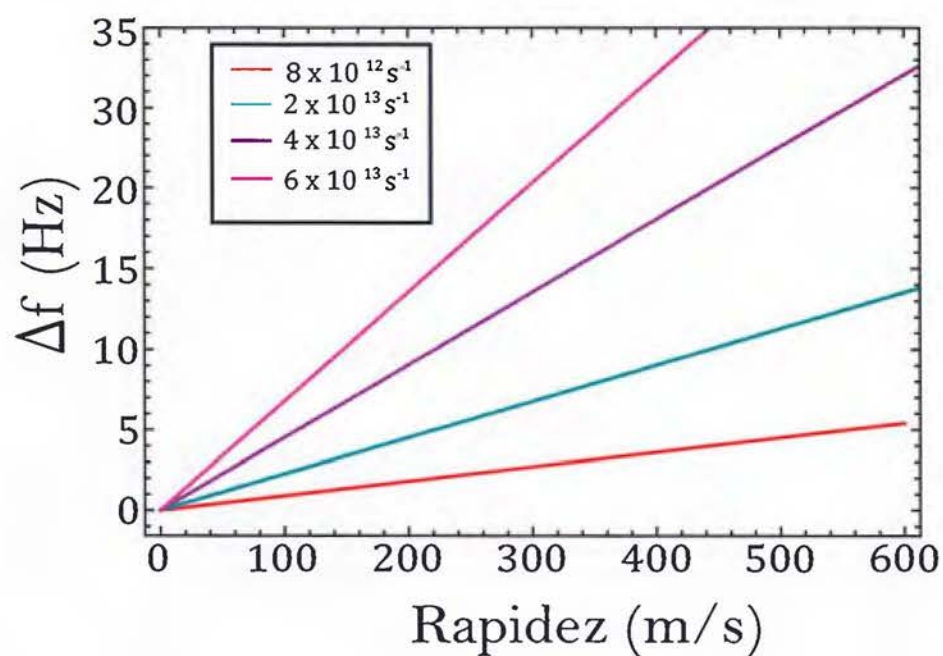


Figura 5.10: Modelo de los cambios de frecuencia Δf de la oscilación del cristal de cuarzo en función de la rapidez de los átomos de estroncio para diferentes tasas de evaporación. Cada línea de color corresponde a las variaciones para una tasa específica.

Capítulo 6

Conclusiones y proyectos futuros

La idea central de la investigación de esta tesis surge del interés de adquirir un mayor entendimiento del proceso de medición en el estudio de las propiedades superficiales de un sólido. Esta tesis es el inicio de un proyecto que introduce una nueva forma de estudiar la difracción de electrones de baja energía por medio de la construcción de estructuras periódicas de átomos ultra-fríos. Es así como esta investigación abre las puertas al desarrollo de nuevos proyectos.

El proyecto de investigación de esta tesis está centrado en la implementación de un sistema de caracterización estructural de tipo superficial para nanoestructuras por medio de difracción de electrones de baja energía en conjunto con el desarrollo, construcción y caracterización de un enfriador, de tipo Zeeman, para átomos de estroncio. Para alcanzar este objetivo central el trabajo está dividido en dos grandes fases: 1) al desarrollo e implementación de la técnica LEED y 2) en el diseño, construcción y caracterización de un *Zeeman Slower*.

La primera fase fue desarrollada en su totalidad con éxito. Se instaló un equipo para el estudio de estructuras superficiales por medio de la técnica LEED. Se introdujo un sistema para la adquisición y el procesamiento de datos por medio del desarrollo de un software que ofrece una gran versatilidad en el estudio de los patrones obtenidos de LEED. El montaje experimental instalado fue implementado en un estudio del proceso de adsorción de las moléculas de agua sobre una superficie cristalina de MgO. Dicho estudio se basa en el desarrollo de un método que establece una relación entre las variaciones de la intensidad de los patrones de LEED en función de perturbaciones externas. El método permite observar tanto los enlaces químicos formados entre las moléculas de agua y la superficie así como determinar el

espesor de las capas depositadas. Resultados concuerdan con los obtenidos en otras publicaciones utilizando otras técnicas en las Refs. [74, 73, 79, 80] pero nunca antes han sido reportados por medio del método propuesto a través de la implementación de la técnica LEED.

En la segunda fase de la investigación se alcanzaron los objetivos propuestos. Se desarrolló un método novedoso que permite optimizar el diseño de un Zeeman Slower. Dicho método permite determinar con mucha precisión la composición del embobinado necesario para asegurar la obtención del perfil de intensidades de campo magnético necesario para el enfriamiento de átomos de estroncio. Lo anterior permite la obtención de una alta eficiencia de captura de los átomos por el MOT. A partir del diseño se construyó el *Zeeman Slower*. Se realizó una caracterización del sistema a partir de la cual se determina una eficiencia de captura de 2×10^9 átomos por segundo la cual es muy cercana a la mayor eficiencia reportada en la literatura. Finalmente para poder medir la eficiencia del *Zeeman Slower* se diseñó un sistema que permite medir la rapidez de los átomos por medio de una microbalanza de cristal de cuarzo. El funcionamiento del sistema fue comprobado con éxito para tres elementos distintos: cobre, tungsteno y molibdeno. El sistema quedó listo para ser implementado en la segunda fase del proceso de enfriamiento de átomos, es decir, en el diseño y construcción de un MOT.

Proyectos Futuros

Con respecto al desarrollo de la técnica LEED en estos momentos se están realizando mediciones para entender la diferencia entre la aplicación de una tasa de calentamiento positiva o negativa y estudiando simultáneamente, de forma controlada, los efectos de la presencia inicial de monocapas de agua recubriendo el cristal de MgO [75]. Diseñamos un sistema, a través del cual sería posible aplicar un campo magnético para así evitar que el sistema interactúe de forma caótica durante la realización simultánea de mediciones con tasas positivas y negativas. Este sistema posibilita, como es descrito en Ref. [112], la medición experimental de la entropía por medio de la dispersión elástica coherente de la difracción de electrones.

Con respecto al sistema de enfriamiento la fase siguiente consiste en el montaje experimental de un MOT. Desde un punto de vista teórico surge la necesidad del desarrollar modelos para el estudio del proceso de difracción múltiple a partir de

una estructura controlada. Este proyecto marca el inicio del desarrollo de una nueva forma de estudiar la superficie de los materiales.

Bibliografía

- [1] M. Guevara-Bertsch, G. Ramírez-Hidalgo, A. Chavarría-Sibaja, E. Avendaño, J. Araya-Pochet, and O. Herrera-Sancho, "Detection of the adsorption of water monolayers through the ion oscillation frequency in the magnesium oxide lattice by means of low energy electron diffraction," *arXiv preprint arXiv:1511.05074*, 2015.
- [2] T. Yang, K. Pandey, M. Pramod, F. Leroux, C. Kwong, E. Hajiyev, Z. Chia, B. Fang, and D. Wilkowski, "A high flux source of cold strontium atoms," *arXiv preprint arXiv:1505.04507*, 2015.
- [3] M. Guevara-Bertsch, L. Salfenmosser, A. Chavarría-Sibaja, J. Avendaño, E. Araya-Pochet, and O. Herrera-Sancho, "Diseño y caracterización de un zeeman slower," *Revista Mexicana de Física*, 2015.
- [4] M. Grote and M. Stadler, *Membranes Surfaces Boundaries*, vol. 420. Max-Planck-Inst. für Wissenschaftsgeschichte, 2011.
- [5] B. Kasemo, "Biological surface science," *Surface science*, vol. 500, no. 1, pp. 656–677, 2002.
- [6] C. Campos-Fernández, D. E. Azofeifa, M. Hernández-Jiménez, A. Ruiz-Ruiz, and W. E. Vargas, "Visible light reflection spectra from cuticle layered materials," *Optical Materials Express*, vol. 1, no. 1, pp. 85–100, 2011.
- [7] R. Fink, C. Ballentine, J. Erskine, and J. A. Araya-Pochet, "Experimental probe for thin-film magnetism in p (1× 1) pd and v on ag (100)," *Physical Review B*, vol. 41, no. 14, p. 10175, 1990.
- [8] O. A. Herrera-Sancho, "Growth and characterization of two-dimensional nanostructures," Master's thesis, University of Costa Rica, 2008.

-
- [9] M. A. VanHove, W. H. Weinberg, and C.-M. Chan, *Low-energy electron diffraction: experiment, theory and surface structure determination*, vol. 6. Springer Science & Business Media, 2012.
- [10] M. L. Cohen and S. Louic, "Electronic properties of surfaces," *Annual Review of Physical Chemistry*, vol. 35, no. 1, pp. 537–562, 1984.
- [11] D. Jackson, "Approximate calculation of surface debye temperatures," *Surface Science*, vol. 43, no. 2, pp. 431–440, 1974.
- [12] H. Brune, "Thermal dynamics at surfaces," *Annalen der Physik*, vol. 18, no. 10-11, pp. 675–698, 2009.
- [13] D. Ferry, A. Glebov, V. Senz, J. Suzanne, J. Toennies, and H. Weiss, "Observation of the second ordered phase of water on the mgo (100) surface: Low energy electron diffraction and helium atom scattering studies," *The Journal of chemical physics*, vol. 105, no. 4, pp. 1697–1701, 1996.
- [14] D. Ferry, S. Picaud, P. Hoang, C. Girardet, L. Giordano, B. Demirdjian, and J. Suzanne, "Water monolayers on mgo (100): structural investigations by leed experiments, tensor leed dynamical analysis and potential calculations," *Surface science*, vol. 409, no. 1, pp. 101–116, 1998.
- [15] A. Roth, *Vacuum technology*. Elsevier, 2012.
- [16] C. Bryden and G. Dickey, "A textbook of filtration," *Easton, Pennsylvania*, 1923.
- [17] C. Davisson and L. Germer, "Reflection of electrons by a crystal of nickel," *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, vol. 14, no. 4, p. 317, 1928.
- [18] W. Bragg and W. Bragg, "The reflection of x-rays by crystals," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, pp. 428–438. 1913.
- [19] K. Heinz, "Leed and dleed as modern tools for quantitative surface structure determination," *Reports on Progress in Physics*, vol. 58, no. 6, p. 637, 1995.

-
- [20] V. Blum and K. Heinz, "Fast leed intensity calculations for surface crystallography using tensor leed," *Computer physics communications*, vol. 134, no. 3, pp. 392–425, 2001.
- [21] J. Pendry, "Leed and the crystallography of surfaces," *Surface science reports*, vol. 19, no. 3, pp. 87–97, 1993.
- [22] O. Morsch and M. Oberthaler, "Dynamics of bose-einstein condensates in optical lattices," *Reviews of modern physics*, vol. 78, no. 1, p. 179, 2006.
- [23] H. Lewandowski, D. Harber, D. Whitaker, and E. Cornell, "Simplified system for creating a bose-einstein condensate," *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 132, no. 5-6, pp. 309–367, 2003.
- [24] W. D. Phillips, "Nobel lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms," *Reviews of Modern Physics*, vol. 70, no. 3, p. 721, 1998.
- [25] J. Barry, E. Shuman, E. Norrgard, and D. DeMille, "Laser radiation pressure slowing of a molecular beam," *Physical review letters*, vol. 108, no. 10, p. 103002, 2012.
- [26] E. A. Cornell and C. E. Wieman, "Nobel lecture: Bose-einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments," *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, no. 3, p. 875, 2002.
- [27] W. Ketterle, "Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-einstein condensation and the atom laser," *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, no. 4, p. 1131, 2002.
- [28] K. Petsas, A. Coates, and G. Grynberg, "Crystallography of optical lattices," *Physical review A*, vol. 50, no. 6, p. 5173, 1994.
- [29] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, "Exploring phase coherence in a 2d lattice of bose-einstein condensates," *Physical Review Letters*, vol. 87, no. 16, p. 160405, 2001.
- [30] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, "Many-body physics with ultracold gases," *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, no. 3, p. 885, 2008.

-
- [31] S. A. Moses, J. P. Covey, M. T. Miecnikowski, B. Yan, B. Gadway, J. Ye, and D. S. Jin, "Creation of a low-entropy quantum gas of polar molecules in an optical lattice," *Science*, vol. 350, no. 6261, pp. 659–662, 2015.
- [32] B. Yan, S. A. Moses, B. Gadway, J. P. Covey, K. R. Hazzard, A. M. Rey, D. S. Jin, and J. Ye, "Observation of dipolar spin-exchange interactions with lattice-confined polar molecules," *Nature*, vol. 501, no. 7468, pp. 521–525, 2013.
- [33] A. Hemmerich, M. Weidemüller, T. Esslinger, C. Zimmermann, and T. Hänsch, "Trapping atoms in a dark optical lattice," *Physical review letters*, vol. 75, no. 1, p. 37, 1995.
- [34] C. N. Cohen-Tannoudji, "Nobel lecture: Manipulating atoms with photons," *Reviews of Modern Physics*, vol. 70, no. 3, p. 707, 1998.
- [35] W. D. Phillips, J. V. Prodan, and H. J. Metcalf, "Laser cooling and electromagnetic trapping of neutral atoms," *JOSA B*, vol. 2, no. 11, pp. 1751–1767, 1985.
- [36] V. Balykin, V. Letokhov, and V. Mushin, "Observation of the cooling of free sodium atoms in a resonance laser field with a scanning frequency," *JETP lett*, vol. 29, no. 10, pp. 560–564, 1979.
- [37] M. M. Boyd, *High precision spectroscopy of strontium in an optical lattice: Towards a new standard for frequency and time*. ProQuest, 2007.
- [38] X. Xu, T. H. Loftus, J. L. Hall, A. Gallagher, and J. Ye, "Cooling and trapping of atomic strontium," *JOSA B*, vol. 20, no. 5, pp. 968–976, 2003.
- [39] S. Stellmer, F. Schreck, and T. C. Killian, "Degenerate quantum gases of strontium," tech. rep., World Scientific, 2013.
- [40] Y. M. de Escobar, P. Mickelson, M. Yan, B. DeSalvo, S. Nagel, and T. Killian, "Bose-einstein condensation of sr 84," *Physical review letters*, vol. 103, no. 20, p. 200402, 2009.
- [41] S. Stellmer, M. K. Tey, B. Huang, R. Grimm, and F. Schreck, "Bose-einstein condensation of strontium," *Physical review letters*, vol. 103, no. 20, p. 200401, 2009.

-
- [42] A. J. Daley, M. M. Boyd, J. Ye, and P. Zoller, "Quantum computing with alkaline-earth-metal atoms," *Physical review letters*, vol. 101, no. 17, p. 170504, 2008.
- [43] A. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. Lukin, and A. Rey, "Two-orbital su (n) magnetism with ultracold alkaline-earth atoms," *Nature Physics*, vol. 6, no. 4, pp. 289–295, 2010.
- [44] W. Ehrenberg, "Lxxxiii. a new method of investigating the diffraction of slow electrons by crystals," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 18, no. 122, pp. 878–901, 1934.
- [45] E. Scheibner, L. Germer, and C. Hartman, "Apparatus for direct observation of low-energy electron diffraction patterns," *Review of Scientific Instruments*, vol. 31, no. 2, pp. 112–114, 1960.
- [46] R. L. Park and H. Farnsworth, "Pulsed-beam low energy electron diffraction system for rapid precision measurements," *Review of Scientific Instruments*, vol. 35, no. 11, pp. 1592–1596, 1964.
- [47] B. Holland, "A simple model for temperature effects in leed," *Surface Science*, vol. 28, no. 1, pp. 258–266, 1971.
- [48] K. Hirabayashi, "Pseudopotential approach to diffraction intensity of low-energy electrons by crystals," *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 24, no. 4, pp. 846–854, 1968.
- [49] S. Y. Tong, "Theory of low-energy electron diffraction," *Progress in surface science*, vol. 7, no. 1, pp. 1–48, 1975.
- [50] E. McRae and C. Caldwell, "Low-energy electron diffraction study of lithium fluoride (100) surface," *Surface Science*, vol. 2, pp. 509–515, 1964.
- [51] E. McRae, "Multiple-scattering treatment of low-energy electron-diffraction intensities," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 45, no. 9, pp. 3258–3276, 1966.
- [52] O. Herrera-Sancho, D. Castro-González, J. Araya-Pochet, and W. Vargas-Castro, "Ultra thin films of gadolinium deposited by evaporation in ultra high

-
- vacuum conditions: Composition, growth and morphology,” *Applied Surface Science*, vol. 257, pp. 3510–3518, Feb. 2011.
- [53] J. C. Vickerman and I. S. Gilmore, *Surface analysis: the principal techniques*, vol. 2. Wiley Online Library, 2009.
- [54] O. Madelung, U. Rössler, and M. Schulz, eds., *Magnesium oxide (MgO) Young’s, shear and bulk moduli, Poisson’s ratio*, vol. 41B of *Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter*. Springer Berlin Heidelberg, 1999.
- [55] A. M. E. Raj, M. Jayachandran, and C. Sanjeeviraja, “Fabrication techniques and material properties of dielectric mgo thin films—a status review,” *CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology*, vol. 2, no. 2, pp. 92–113, 2010.
- [56] V. Henrich and P. Cox, “The surface science of metal oxides, 1994.”
- [57] B. E. Gaddy, E. A. Paisley, J.-P. Maria, and D. L. Irving, “Overcoming the polarization catastrophe in the rocksalt oxides mgo and cao,” *Physical Review B*, vol. 90, no. 12, p. 125403, 2014.
- [58] J. Coulomb, B. Demirdjian, D. Ferry, and M. Trabelsi, “Thermodynamic and structural properties of water adsorbed film on mgo (100) ionic surface,” *Adsorption*, vol. 19, no. 2-4, pp. 861–867, 2013.
- [59] H.-J. Freund, H. Kühlenbeck, and V. Staemmler, “Oxide surfaces,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 59, no. 3, p. 283, 1996.
- [60] K. Huang, “Statistical mechanics,” 1987.
- [61] P. Debye, “Zur theorie der spezifischen wärmen,” *Annalen der Physik*, vol. 344, no. 14, pp. 789–839, 1912.
- [62] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “Solid state physics (saunders college, philadelphia, 1976).” *Appendix N*, 2010.
- [63] G. B. Arfken, *Mathematical methods for physicists*. Academic press, 2013.
- [64] J. T. Yates Jr, “Surface debye temperature,” in *Experimental Innovations in Surface Science*, pp. 337–339, Springer, 2015.

-
- [65] M. Michailov and I. Avramov, "Surface energy, surface debye temperature and specific heat of nanocrystals," in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 398, p. 012008, IOP Publishing, 2012.
- [66] B. Clark, R. Herman, and R. Wallis, "Theoretical mean-square displacements for surface atoms in face-centered cubic lattices with applications to nickel," *Physical Review*, vol. 139, no. 3A, p. A860, 1965.
- [67] L. Kothari, "Effective debye temperature for surface vibrations of a crystal," *Physics Letters A*, vol. 24, no. 7, p. 382, 1967.
- [68] P. A. Stampe and R. J. Kennedy, "X-ray characterization of mgo thin films grown by laser ablation on yttria-stabilized zirconia," *Journal of crystal growth*, vol. 191, no. 3, pp. 472–477, 1998.
- [69] D. C. Harris, L. R. Cambrea, L. F. Johnson, R. T. Seaver, M. Baronowski, R. Gentilman, C. Scott Nordahl, T. Gattuso, S. Silberstein, P. Rogan, *et al.*, "Properties of an infrared-transparent mgo: Y₂O₃ nanocomposite," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 96, no. 12, pp. 3828–3835, 2013.
- [70] J. Heidberg, B. Redlich, and D. Wetter, "Adsorption of water vapor on the mgo (100) single crystal surface," *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, vol. 99, no. 11, pp. 1333–1337, 1995.
- [71] E. A. Wood, "Vocabulary of surface crystallography," *Journal of applied physics*, vol. 35, no. 4, pp. 1306–1312, 1964.
- [72] L. Giordano, J. Goniakowski, and J. Suzanne, "Partial dissociation of water molecules in the (3× 2) water monolayer deposited on the mgo (100) surface," *Physical review letters*, vol. 81, no. 6, p. 1271, 1998.
- [73] K. Jug, B. Heidberg, and T. Bredow, "Cyclic cluster study of water adsorption structures on the mgo (100) surface," *Surface science*, vol. 601, no. 6, pp. 1529–1535, 2007.
- [74] R. Włodarczyk, M. Sierka, K. Kwapien, J. Sauer, E. Carrasco, A. Aumer, J. F. Gomes, M. Sterrer, and H.-J. Freund, "Structures of the ordered water monolayer on mgo (001)," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 115, no. 14, pp. 6764–6774, 2011.

-
- [75] M. Guevara-Bertsche and et al, "To be publish," 2016.
- [76] M. Welton-Cook and W. Berndt, "A leed study of the mgo (100) surface: identification of a finite rumple," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 15, no. 27, p. 5691, 1982.
- [77] D. Blanchard, D. Lessor, J. LaFemina, D. Baer, W. Ford, and T. Guo, "A low-energy electron diffraction study of the mgo (001) surface structure," *Journal of Vacuum Science & Technology A*, vol. 9, no. 3, pp. 1814–1819, 1991.
- [78] N. M. Alford, J. Breeze, X. Wang, S. Penn, S. Dalla, S. Webb, N. Ljepojevic, and X. Aupi, "Dielectric loss of oxide single crystals and polycrystalline analogues from 10 to 320 k," *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 21, no. 15, pp. 2605–2611, 2001.
- [79] D. Aswal, K. Muthe, S. Tawde, S. Chodhury, N. Bagkar, A. Singh, S. Gupta, and J. Yakhmi, "Xps and afm investigations of annealing induced surface modifications of mgo single crystals," *Journal of crystal growth*, vol. 236, no. 4, pp. 661–666, 2002.
- [80] M. A. Johnson, E. V. Stefanovich, T. N. Truong, J. Günster, and D. Goodman, "Dissociation of water at the mgo (100)-water interface: Comparison of theory with experiment," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 103, no. 17, pp. 3391–3398, 1999.
- [81] Y. Yu, Q. Guo, S. Liu, E. Wang, and P. J. Møller, "Partial dissociation of water on a mgo (100) film," *Physical Review B*, vol. 68, no. 11, p. 115414, 2003.
- [82] H.-J. Shin, J. Jung, K. Motobayashi, S. Yanagisawa, Y. Morikawa, Y. Kim, and M. Kawai, "State-selective dissociation of a single water molecule on an ultrathin mgo film," *Nature materials*, vol. 9, no. 5, pp. 442–447, 2010.
- [83] J. Goniakowski and C. Noguera, "Theoretical investigation of hydroxylated oxide surfaces," *Surface science*, vol. 330, no. 3, pp. 337–349, 1995.
- [84] L. J. Clarke, *Surface crystallography: an introduction to low energy electron diffraction*. Wiley New York, 1985.

-
- [85] P. Thissen, V. Thissen, S. Wippermann, Y. J. Chabal, G. Grundmeier, and W. G. Schmidt, "ph-dependent structure and energetics of h₂o/mgo (100)," *Surface Science*, vol. 606, no. 11, pp. 902–907, 2012.
- [86] E. Stern, D. Sayers, and F. Lytle, "Extended x-ray-absorption fine-structure technique. iii. determination of physical parameters," *Physical Review B*, vol. 11, no. 12, p. 4836, 1975.
- [87] U. Landman and D. L. Adams, "Extended x-ray-absorption fine structure—auger process for surface structure analysis: Theoretical considerations of a proposed experiment," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 73, no. 8, pp. 2550–2553, 1976.
- [88] P. Citrin, "An overview of sexafs during the past decade," *Le Journal de Physique Colloques*, vol. 47, no. C8, pp. C8–437, 1986.
- [89] P. Lee, "Possibility of adsorbate position determination using final-state interference effects," *Physical Review B*, vol. 13, no. 12, p. 5261, 1976.
- [90] H. Ibach and D. L. Mills, *Electron energy loss spectroscopy and surface vibrations*. Academic Press, 2013.
- [91] D. Woodruff, "From sexafs to seelfs," *Surface and Interface Analysis*, vol. 11, no. 1-2, pp. 25–35, 1988.
- [92] P. R. Watson, "Critical compilation of surface structures determined by surface extended x-ray absorption fine structure (sexafs) and surface extended electron energy loss spectroscopy (seelfs)," *Journal of physical and chemical reference data*, vol. 21, no. 1, pp. 123–156, 1992.
- [93] L. Zhao, J. Jiang, and Y. Liu, "Optimizing a spin-flip Zeeman slower," *ArXiv e-prints*, Jan. 2014.
- [94] I. Courtillot, A. Quessada, R. P. Kovacich, J.-J. Zondy, A. Landragin, A. Clairon, and P. Lemonde, "Efficient cooling and trapping of strontium atoms," *Opt. Lett.*, vol. 28, pp. 468–470, Mar 2003.
- [95] P. Cheiney, O. Carraz, D. Bartoszek-Bober, S. Faure, F. Vermersch, C. M. Fabre, G. L. Gattobigio, T. Lahaye, D. Guéry-Odelin, and R. Mathevet. "A

-
- zeeman slower design with permanent magnets in a halbach configuration,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 82, no. 6, pp. 1–4, 2011.
- [96] M. L. Harris, “Design and construction of an improved zeeman slower,” Master’s thesis, Duke University, 2003.
- [97] M. Bober, J. Zachorowski, and W. Gawlik, “Designing Zeeman slower for strontium atoms - towards optical atomic clock,” *ArXiv e-prints*, June 2010.
- [98] G. Scoles, D. Bassi, U. Buck, and D. Lainé, *Atomic and molecular beam methods*, vol. 1. Oxford university press New York, 1988.
- [99] Y. Kondo, M. Saito, M. Yamashita, T. Tako, and A. Morinaga, “Influence of the magnetic field gradient on the extraction of slow sodium atoms outside the solenoid in the zeeman slower,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 36, no. 2R, p. 905, 1997.
- [100] J. V. Prodan, W. D. Phillips, and H. Metcalf, “Laser production of a very slow monoenergetic atomic beam,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, pp. 1149–1153, Oct 1982.
- [101] W. D. Phillips and H. Metcalf, “Laser deceleration of an atomic beam,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 48, pp. 596–599, Mar 1982.
- [102] R. S. Laramee, C. Garth, H. Doleisch, J. Schneider, H. Hauser, and H. Hagen, “Visual analysis and exploration of fluid flow in a cooling jacket,” in *Visualization, 2005. VIS 05. IEEE*, pp. 623–630, IEEE, 2005.
- [103] Y. A. Cengel, S. Klein, and W. Beckman, *Heat transfer: a practical approach*. WBC McGraw-Hill Boston, 1998.
- [104] C. B. Lucas, *Atomic and Molecular Beams: Production and Collimation*. CRC Press, 2013.
- [105] C. Lu and A. W. Czanderna, *Applications of piezoelectric quartz crystal microbalances*. Elsevier, 2012.
- [106] H. Pettersson, “Experiments with a new micro-balance,” *Proceedings of the Physical Society of London*, vol. 32, no. 1, p. 209, 1919.

-
- [107] G. Sauerbrey, "Verwendung von schwingquarzen zur wägung dünner schichten und zur mikrowägung," *Zeitschrift für physik*, vol. 155, no. 2, pp. 206–222, 1959.
- [108] D. Johannsmann, *The Quartz Crystal Microbalance in Soft Matter Research*. Springer, 2014.
- [109] G. Landis, P. P. Jenkins, *et al.*, "Dust on mars: Materials adherence experiment results from mars pathfinder," in *Photovoltaic Specialists Conference, 1997., Conference Record of the Twenty-Sixth IEEE*, pp. 865–869, IEEE, 1997.
- [110] T. Asano, N. Uetake, and K. Suzuki, "Mean atomic velocities of uranium, titanium and copper during electron beam evaporation," *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 29, no. 12, pp. 1194–1200, 1992.
- [111] W. M. Haynes, *CRC handbook of chemistry and physics*. CRC press, 2014.
- [112] T. Batalhao, A. Souza, R. Sarthour, I. Oliveira, M. Paternostro, E. Lutz, and R. Serra, "Irreversibility and the arrow of time in a quenched quantum system," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 115, p. 190601, 2015.

Apéndices

Apéndice A

Modelo para determinar el embobinado de un *Zeeman Slower* realizado en MathematicaTM

A.1. Modelado del campo magnético teórico

A.1.1. Constantes

Las constantes son definidas de acuerdo al elemento que se desea enfriar. En nuestro caso buscamos reducir la rapidez de átomos de estroncio, por lo que se utilizaron los valores presentados en el Cuadro 4.1.

$$h = 6,626 * 10^{-34}; (*Constante de Planck (m^2kg/s)*)$$

$$\hbar = h/(2 * Pi);$$

$$u = 1,661 * 10^{-27}; (*Unidad de masa atómica (kg)*)$$

$$\delta = -2 * Pi * 500 * 10^6; (*Detuning del láser (Hz)*)$$

$$\lambda = 461,0 * 10^{-9}; (*Longitud de onda (m)*)$$

$$\mu_B = 9,27 * 10^{-28}; (*Magnetón de Bohr (J/G)*)$$

$$\alpha = 0,6; (*Parametro de seguridad*)$$

$$\Gamma = 32 * Pi * 10^6; (*Ancho de banda de la transición (Hz)*)$$

$m = 88 * u;$ (*Masa del estroncio (kg)*)
 $k = 2 * \text{Pi}/\text{lambda};$ (*Número de onda (1/m*)*)
 $a = \alpha * \hbar * \Gamma * k/(2 * m);$ (*Aceleración experimentada por los átomos (m/s²*)*)
 $vf = 40;$ (*Rapidez final (m/s*)*)
 $l = 0,3;$ (*Longitud (m)*)*)
 $vi = 450;$ (*Rapidez inicial (m/s*)*)

A.1.2. Determinación de la rapidez inicial en función de la rapidez inicial, la longitud y la aceleración

A partir de la rapidez inicial y la longitud determinadas en la Subsección A.1.1 se determina la rapidez de captura inicial.

$\text{InitV}[vf, l, a] := \text{Sqrt}[vf^2 - l * 2 * -a]$

A.1.3. Modelado del perfil de intensidades teorico

A partir de los valores definidos en las Subsecciones A.1.1 y A.1.2 se modela el perfil de insidades del campo magnético necesario para enfriar los átomos utilizando la Ecuación 4.4.

$\text{bz}[z.] := (\hbar/\mu_B) * (-\delta - (2 * \text{Pi}/\lambda) * \text{Sqrt}[\text{InitV}[vf, l, a]^2 - (2 * a * z)] +$
 $\Gamma/2 * \text{Sqrt}[(4,72 * (1 - \alpha)/\alpha)])$
 $\text{data} = \text{Table}[\{z, \text{bz}[z]\}, \{z, 0, 0,3, .01\}];$

$\text{Solve}[(\hbar/\mu_B) * (-\delta - (2 * \text{Pi}/\lambda) * \text{Sqrt}[\text{InitV}[vf, l, a]^2 - (2 * a * z)] +$
 $\Gamma/2 * \text{Sqrt}[(4,72 * (1 - \alpha)/\alpha)]) == 0, z]$

$$\begin{aligned}
b_z[z_]:= & \text{Piecewise}\left[\left\{\left\{\left(\frac{\hbar}{\mu_B}\right) * \left(-\delta - \left(2 * \text{Pi}/\lambda\right) * \text{Sqrt}\left[\text{InitV}\left[\text{vf}, l, a\right]^2 - \left(2 * a * z\right)\right]\right) + \right. \right. \\
& \left. \left. \Gamma/2 * \text{Sqrt}\left[\left(4,72 * \left(1 - \alpha\right)/\alpha\right)\right]\right\}, z < 0,212148\right\}, \left\{0, 0,207964 \leq z \leq 0,257964\right\}, \right. \\
& \left. \left(\frac{\hbar}{\mu_B}\right) * \left(-\delta - \left(2 * \text{Pi}/\lambda\right) * \text{Sqrt}\left[\text{InitV}\left[\text{vf}, l, a\right]^2 - \left(2 * a * \left(z - 0,05\right)\right)\right]\right) + \right. \\
& \left. \Gamma/2 * \text{Sqrt}\left[\left(4,72 * \left(1 - \alpha\right)/\alpha\right)\right]\right\}, 0,212148 < z\right\}
\end{aligned}$$

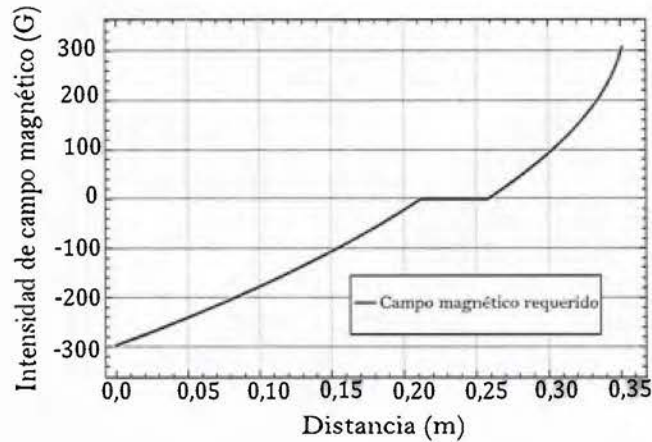


Figura A.1: Variación de la intensidad del campo magnético en función de la distancia a lo largo del enfriador Zeeman, presentado en la Sección 4.2.

A.2. Modelado del embobinado total del Zeeman Slower

La segunda parte del modelo permite determinar la cantidad de vueltas que se requiere en cada bobina para obtener el perfil de intensidades definido en la Sección A.1.

A.2.1. Constantes

Para obtener la intensidad del campo en cada bobina, se inicia definiendo las características comunes del conjunto de bobinas diferentes componentes de las bobinas.

$SRad = 0,026987$; (*Radio de la bobina (m)*)
 $RInc = ,000912$; (*Radio del cable de cobre(m)*)
 $SZInc = ,00912$; (*Valor al que inicia el embobinado (m)*)
 $SZTurn = 17$; (*Cantidad de vueltas en la dirección z*)
 $SF = 0,167$; (*Posición del punto central en el Zeeman Slower (m)*)
 $Current = 6$; (*Corriente que circula por el cable*)
 $\mu_0 = 4 * 3,1415 * 10^{-4}$; (*Permeabilidad magnética (10⁻⁴ H/m*)
 $IS = SZTurn * 2 * RInc$; (*Espesor de la bobina (m)*)

A.2.2. Distribución del número de vueltas en cada bobina

A partir de las propiedades definidas en la Subsección A.2.1 se determina la cantidad de vueltas en cada bobina necesarias para obtener el perfil de intensidad de campo magnético. La función $q[n]$ determina el número de vueltas correspondiente a la bobina n . Las bobinas están numeradas de acuerdo a su posición a lo largo del Zeeman Slower.

$q[0] = 8; q[1] = 10; q[2] = 8; q[3] = 7; q[4] = 6; q[5] = 5; q[6] = 4; q[7] = 14; q[8] = 8;$

A.2.3. Distribución de la dirección del campo magnético por bobinas

Para poder utilizar un sistema de tipo “*Spin-Flip*” es necesario determinar la dirección de la corriente para cada bobina, $qVz[n]$ define la dirección positiva 1 o negativa -1 para la bobina número n . $qSF[n]$ designa con 0 las bobinas de la primera sección y con 1 las de la segunda sección después del “*Spin-Flip*” .

$$\begin{aligned} qVZ[0] = -1; qVZ[1] = -1; qVZ[2] = -1; qVZ[3] = -1; qVZ[4] = -1; qVZ[5] = -1; \\ qVZ[6] = 1; qVZ[7] = 1; qVZ[8] = 1; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} qSF[0] = 0; qSF[1] = 0; qSF[2] = 0; qSF[3] = 0; qSF[4] = 0; qSF[5] = 0; qSF[6] = 1; \\ qSF[7] = 1; qSF[8] = 1; \end{aligned}$$

A.2.4. Intensidad del campo magnético en cada bobina

A partir de las propiedades definidas para cada bobina, se calcula la contribución a la intensidad del campo magnético de cada vuelta i con lo que se obtiene la intensidad total b_{xx} de la bobina xx .

$$\begin{aligned} b_{00} = \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * qVZ[i]/(2 * lS)) * \\ ((lS/2 - ((-0,5 - i) * lS - qSF[i] * SF)) / ((lS/2 - ((-0,5 - i) * lS - qSF[i] * SF))^2 \\ + (SRad + j * RInc)^2)^{0,5} + (lS/2 + ((-0,5 - i) * lS \\ - qSF[i] * SF)) / ((lS/2 \\ + ((-0,5 - i) * lS - qSF[i] * SF))^2 + (SRad + j * RInc)^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\}]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{11} = \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * qVZ[i]/(2 * lS)) * \\ ((lS/2 - ((0,5 - i) * lS - qSF[i] * SF)) / ((lS/2 - ((0,5 - i) * lS - qSF[i] * SF))^2 \\ + (SRad + j * RInc)^2)^{0,5} + (lS/2 + ((0,5 - i) * lS \\ - qSF[i] * SF)) / ((lS/2 \\ + ((0,5 - i) * lS - qSF[i] * SF))^2 + (SRad + j * RInc)^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\}]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_{22} = \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * qVZ[i]/(2 * lS)) * \\ ((lS/2 - ((1,5 - i) * lS - qSF[i] * SF)) / ((lS/2 - ((1,5 - i) * lS - qSF[i] * SF))^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +(\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5} + (\text{IS}/2 + ((1,5 - i) * \text{IS} \\
& - \text{qSF}[i] * \text{SF})) / ((\text{IS}/2 \\
& + ((1,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{33} = & \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * \text{qVZ}[i] / (2 * \text{IS})) * \\
& ((\text{IS}/2 - ((2,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF})) / ((\text{IS}/2 - ((2,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 \\
& + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5} + (\text{IS}/2 + ((2,5 - i) * \text{IS} \\
& - \text{qSF}[i] * \text{SF})) / ((\text{IS}/2 \\
& + ((2,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{44} = & \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * \text{qVZ}[i] / (2 * \text{IS})) * \\
& ((\text{IS}/2 - ((3,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF})) / ((\text{IS}/2 - ((3,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 \\
& + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5} + (\text{IS}/2 + ((3,5 - i) * \text{IS} \\
& - \text{qSF}[i] * \text{SF})) / ((\text{IS}/2 \\
& + ((3,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{55} = & \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * \text{qVZ}[i] / (2 * \text{IS})) * \\
& ((\text{IS}/2 - ((4,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF})) / ((\text{IS}/2 - ((4,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 \\
& + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5} + (\text{IS}/2 + ((4,5 - i) * \text{IS} \\
& - \text{qSF}[i] * \text{SF})) / ((\text{IS}/2 \\
& + ((4,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{66} = & \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * \text{qVZ}[i]/(2 * \text{IS})) * \\
& ((\text{IS}/2 - ((5,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))/((\text{IS}/2 - ((5,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 \\
& + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5} + (\text{IS}/2 + ((5,5 - i) * \text{IS} \\
& - \text{qSF}[i] * \text{SF}))/((\text{IS}/2 \\
& + ((5,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\}];
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{77} = & \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * \text{qVZ}[i]/(2 * \text{IS})) * \\
& ((\text{IS}/2 - ((5,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))/((\text{IS}/2 - ((5,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 \\
& + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5} + (\text{IS}/2 + ((6,5 - i) * \text{IS} \\
& - \text{qSF}[i] * \text{SF}))/((\text{IS}/2 \\
& + ((6,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\}];
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{88} = & \text{Sum}[(\mu_0 * \text{Current} * \text{SZTurn} * \text{qVZ}[i]/(2 * \text{IS})) * \\
& ((\text{IS}/2 - ((7,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))/((\text{IS}/2 - ((7,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 \\
& + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5} + (\text{IS}/2 + ((7,5 - i) * \text{IS} \\
& - \text{qSF}[i] * \text{SF}))/((\text{IS}/2 \\
& + ((7,5 - i) * \text{IS} - \text{qSF}[i] * \text{SF}))^2 + (\text{SRad} + j * \text{RInc})^2)^{0,5}), \{i, 0, 8\}, \{j, 1, q[i]\}];
\end{aligned}$$

A.2.5. Graficación del perfil total de intensidad del campo magnético generado por las bobinas en comparación con el perfil teórico necesario para enfriar los átomos

Para comprobar que las bobinas utilizadas permiten generar el perfil de campo magnético necesario, se gráfica simultáneamente perfil teórico y la intensidad en cada bobina de todo el sistema.

$z_{\text{Beg}} = -0,055;$

```
Show[ListPlot[{{zBeg, b00}, {zBeg + 1 * lS, b11}, {zBeg + 2 * lS, b22}, {zBeg + 3 * lS, b33},
{zBeg + 4 * lS, b44}, {zBeg + 5 * lS, b55}, {zBeg + 6 * lS + SF, b66}, {zBeg + 7 * lS + SF, b77},
{zBeg + 8 * lS + SF, b88}}, PlotStyle -> Red], Plot[bz[z], {z, 0, 0,35}]]
```

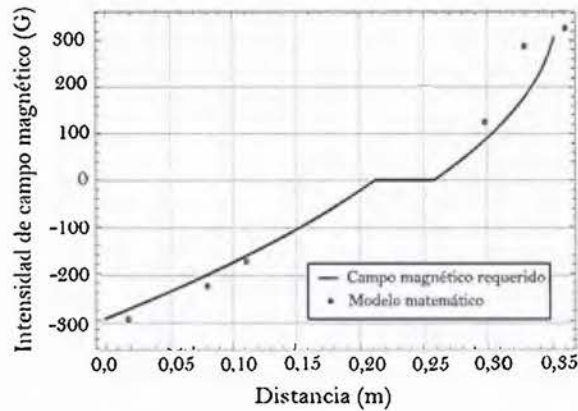


Figura A.2: Comparación del perfil de intensidades del campo magnético necesario con la intensidad generada en cada bobina. La línea morada corresponde al perfil necesario y los puntos rojos al valor obtenido en cada bobina.