Analisis en las propiedades de la reflectancia de 4 tipos de materiales: Al, Cu, CuO, Si

Gustavo A. Castrillón¹

Instituto de física. Universidad de Antioquia

(*Electronic mail: gadolfo.castrillon@udea.edu.co)

En este artículo se realizo un análisis de las propiedades físicas: reflectancia, indice de refracción y coeficiente de extinción, para 4 diferentes materiales: Al, Cu, CuO y Si. Se midió el espectro usando un espectrómetro y una fuente halógena de HgAr, y partir de este, se calcula los valores de la reflectancia de los 4, por ultimo se usan las relaciones de Kramers-Koning para determinar como cambia el indice de refracción y el coeficiente de extinción conforme se varía la longitud de onda, se compararon estos resultados a partir de los resultados teóricos y pese a que se encontraron grandes divergencias para 3 de los 4 materiales, el último promete tener una similitud entre la teoría y el experimento.

I. INTRODUCCIÓN

En el presente trabajo se realiza un estudio de como se ve afectada la reflectancia conforme se incremente la longitud de onda para materiales como el aluminio, el cobre, el dióxido de cobre y el silicio.

Para calcular la reflectancia, primero se debe medir experimentalmente la intensidad del espectro generado al someter el material con una lampara y por medio de este espectro generador se puede calcular la reflectancia en función de la longitud de onda; como los valores pueden verse modificados por el entorno al cual se somete el experimento, se debe medir los espectros en referencia a un objeto en particular y de la oscuridad dada en el sistema que se trata.

Se debe proceder, por tanto, a medir el espectro de referencia, el espectro de la oscuridad y el espectro de los materiales a examinar. Para medir el espectro oscuro lo que se hace es colocar la fuente UV/Vis apagada sobre el instrumento de medición, debajo del soporte de la sonda colocamos el estándar especular, y se procede a tomar los datos de la intensidad vs la longitud de onda para este fenómeno, luego se debe realizar exactamente el mismo proceso para medir el espectro de referencia con la única diferencia que, la fuente UV/Vis esta encendida, a su vez, se hace el mismo proceso para medir el espectro de cada material ubicándolo en el sitio de medición.

Si bien, lo ideal es medir para cada material su oscuro, su referencia y el espectro del mismo, debido a las condiciones del laboratorio, estas modificaciones en la intensidad de luz no varían demasiado y se puede considerar que el espectro de referencia y el oscuro es el mismo para todos los materiales.

Para el experimento se utiliza una fuente UV/Vis, la cual es una lampara halógena de Mercurio-Argón, esta posee según la empresa desarrolladora un espectro desde los 250 nm hasta los 920 nm.

II. CALCULO DE LA REFLECTANCIA³.

Teóricamente se puede calcular la reflectancia a partir de un unos valores de referencia por medio de la ecuación:

$$R = \frac{I_m \check{I}_d}{I_s \check{I}_d} \tag{1}$$

Siendo I_m la intensidad del espectro generado por el material a medir su reflectancia, I_d la intensidad del espectro del oscuro y I_s la intensidad del espectro de referencia, a estos valores de reflectancia se le conoce como reflectancia relativa.

Cuando un material se ve sometido a una longitud de onda en especifico, la absorción de esta longitud esta acompañada por un cambio en el índice de refracción, ademas también dependiendo del tipo de material su coeficiente de extinción se vera sometido a un cambio.

Existe una forma de relacionar estos cambios en el indice de refracción y el coeficiente de extinción con los valores de reflectancia dados en el material y es por medio de las relaciones de Kramers-Kroning; estas relaciones son transformaciones que permiten relacionar la parte real y imaginaria de una función compleja.

Supongase tenemos una función compleja $f(\omega)$, tal que $f(\omega) = f_1(\omega) + i f_2(\omega)$. Considerando f_1 y f_2 funciones reales, por medio de las relaciones de Kramers-Koning podemos decir que:

$$f_1(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\Omega f_2(\Omega)}{\omega^2 - \Omega^2} d\Omega \tag{2}$$

$$f_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{f_1(\Omega)}{\omega^2 - \Omega^2} d\Omega \tag{3}$$

para los diferentes materiales, podemos considerar, a partir de la función de permitividad eléctrica como una función compleja con dos funciones reales, tal que, $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = (n+ik)^2$ con n el indice de refracción y k el coeficiente de extinción del material. Dado estos 2 parámetros podemos deducir que:

$$n(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega_0 k(\omega_0)}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega_0 \tag{4}$$

$$k(\boldsymbol{\omega}) = -\frac{2\boldsymbol{\omega}}{\pi} \int_0^\infty \frac{n(\boldsymbol{\omega}_0)}{\boldsymbol{\omega}_0^2 - \boldsymbol{\omega}^2} d\boldsymbol{\omega}_0 \tag{5}$$

Ademas se sabe, que debido a la incidencia normal, el indice de la onda reflejada esta relacionado con estos coeficientes por: $r_s = \frac{1-n-ik}{1+n+ik} = \sqrt{(R)expi\theta}$, de aquí se puede concluir que:

$$lnr(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega_0 \theta(\omega_0)}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega_0$$
 (6)

$$\theta(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_0^\infty \frac{lnr(\omega_0)}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega_0 \tag{7}$$

$$lnR = 2lnr (8)$$

Se pueden usar estas ecuaciones 6, 7 y 8 para escribir el índice de refracción y el coeficiente de extinción en terminos de la reflectancia del sistema, llegando así a:

$$n = \frac{1 - r^2}{1 + r^2 - 2r\cos\theta} \tag{9}$$

$$k = \frac{2r\sin\theta}{1 + r^2 - 2r\cos\theta} \tag{10}$$

III. ANÁLISIS DEL ESPECTRO DE LA LÁMPARA HALÓGENA.

Para poder conocer las limitaciones para analizar en nuestro experimento, primero debemos calibrar la lámpara UV/Vis, por esto se procedió a medir el espectro de la lampara con el espectrómetro y comparar este con el espectro dado por la empresa.

Como se puede ver en Fig 1, las intensidades validas para nuestro experimento debido a la lámpara halógena comienzan a partir de 250nm y que, por ejemplo, el espectrómetro no detecta valores superiores a 850 nm. Debido a lo anterior, se establece que, nuestros rangos de medida en la reflectancia se harán entre longitudes de onda de 280 nm y 850 nm, esto ya que por debajo y por encima de estos valores respectivamente la información de la intensidad del espectro será solamente ruido, así que no generara información física importante.

Por otro lado, es de notar que, algunas intensidades medidas por el sensor, comparadas con las intensidades marcadas por la empresa desarrolladora de la lámpara varían, como se puede ver en Fig 1, las líneas azules (espectro reportado) en su escala vertical en muchos de los casos no alcanzan los mismos valores que los puntos negros (datos obtenidos por el sensor).

IV. CALCULO DE LA REFLECTANCIA RELATIVA

A partir de los visto en el análisis del espectro de la lampara, se realiza sobre los espectros medidos los respectivos ajustes como lo es, eliminar longitudes de onda no necesarias y un filtrado al mismo para eliminar posibles ruidos relacionados a objetos de medición como lo es la fibra optica, la lampara y demas.

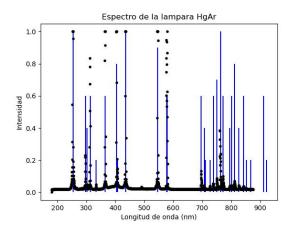


FIG. 1. Comparación entre los datos tomados por el espectrometro y la lámpara halógena, las líneas azules son el espectro dado por la empresa mientras que los puntos negros son los valores tomados por el espectrometro. Los valores de espectro aproximadamente seran entre 250 nm y 850 nm

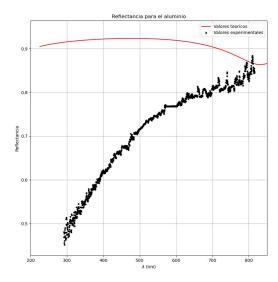


FIG. 2. Gráfico de la reflectancia para el aluminio, la linea roja corresponde valores teoricos y los puntos negro son los datos experimentales. Es bastante notable como, los datos experimentales no se asemejan a los valores teóricos, esto puede deberse a la construcción del material en cuestión y también en el desgaste del mismo.

A partir de este nuevo espectro se procede a usar la ecuación 1 para determinar la reflectancia para cada uno de los materiales, cobre, dioxido de cobre, aluminio y silicio.

Como puede verse en fig 2, los puntos negros dan cuenta de los datos tomados por el sensor, para este caso el aluminio en cuestión presenta grandes valores de reflectancia a partir de los 500 nm, colores del verde al rojo, para el cual se posee un 70% de la reflectancia total y sigue incrementando, mientras que para valores inferiores a 500 nm, colores mas fríos como

lo son los azules tendremos una disminución de la reflectancia. Es de notar que, si bien, se sometieron nuestro datos a un filtro, para eliminar errores, al comparar los datos experimentales con los valores teóricos, estos difieren en gran cantidad, como se puede ver en la imagen, el aluminio tiene un porcentaje muy alto de reflectancia (casi superior al 90% para todo el espectro entre 300 y 900 nm), esta variación entre los valores teóricos y los experimentales puede deberse a que el aluminio utilizado, este compuesto por algunas impurezas, a su vez, a la hora de medir, la superficie este cubierta de polvo, esto puede modificar su medida y por otro lado, pueden existir diferentes aleaciones de aluminio haciendo que, su porcentaje difiera del teórico al experimental.

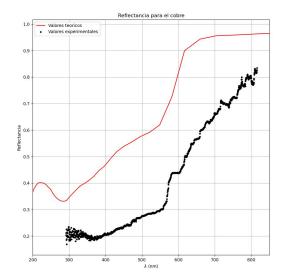


FIG. 3. Gráfico de la reflectancia para el cobre, al igual que para el aluminio, la linea roja corresponder a los valores teóricos mientras que los puntos negros a los datos experimentales, se puede notar como para el cobre tenemos un crecimiento en el porcentaje de reflectancia incrementando conforme aumentamos la longitud de onda, si bien los datos teóricos y experimentales no se asemejan en su totalidad, si tienen un comportamiento de forma similar.

Al ver la figura 3, podemos notar como, el cobre presenta poca reflexión para longitudes de onda por debajo de 600 nm, colores que corresponden a la gamma de verdes y azules; era de esperarse, debido al color rojizo anaranjado que presenta el cobre, si miramos la grafica teórica a diferencia de los datos experimentales, es en 600 nm donde la reflectancia aumenta consideradamente a un valor porcentual superior a 90%, este aumento se logra ver en menor medida en los datos experimentales con una curva un poco mas alargada que los teóricos, una explicación para esto puede ser debido a la posible oxidación del cobre usado en el experimento, esta oxidación superficial hace que, los datos teóricos y experimentales difieran en gran medida.

En fig 4 se puede ver los porcentajes de reflectancia para el dióxido de cobre, se nota como, mientras que la línea roja, correspondiente a los valores teóricos expuestos por R. David

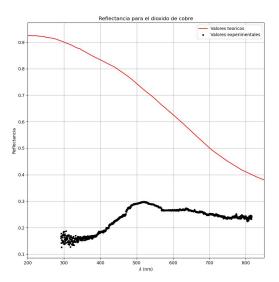


FIG. 4. Figura 4. Se realiza una comparación entre la reflectancia teórica² y experimental para el dióxido de cobre, como podemos notar, los valores experimentales difieren en gran cantidad de los valores teóricos.

Prabu1, S. Valanarasu, et al² en su experimento, los datos experimentales adquiridos por nuestro sensor (puntos negros) no se aproximan a estos, el cambio en este comportamiento puede deberse a que, como hablamos de dioxido de cobre, el usado para el experimento puede ser un dióxido de cobre no en su totalidad compuesto por cobre oxigeno, sino por otros materiales al cual halla sido sometido este material, materiales los cuales desconocemos en su totalidad.

En fig 5, donde tenemos el comportamiento de la reflectancia del silicio, podemos notar como, conforme la longitud de onda es mas pequeña, este material presenta mayor reflectancia, llegando así a tener un máximo local cercano al azul y luego seguir incrementando a valores cercanos a la luz ultravioleta, que, debido a las limitaciones de nuestro espectro no podemos medir, pero teóricamente podemos ver como el material tienden a tener una gran porcentaje en el ultravioleta. En algunas imágenes del internet, se puede ver como el material tiene un color azul ennegrecido, esto nos podría dar razón entorno a la discusión del máximo local que tenemos cercano al color azul.

Ademas se puede mencionar que la poca variación entre los datos experimentales y los teóricos en comparación con los otros gráficos, debe ser debido a la poca interacción que tiene con grandes longitudes de onda y debido a esto, no se ve afectada la medida, mientras que, con el aluminio y el cobre, esto si tenían mayor reflectancia para valores alto y se afectaba su medida.

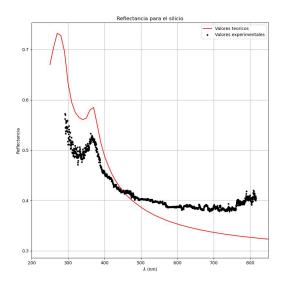


FIG. 5. De las 4 figuras de la longitud de onda vs la reflectancia para los materiales, esta es la que mejor comportamiento poseen acorde a los resultados teóricos, como sería de esperar el silicio, cuyo color al natural es similar a colores oscuros o ennegrecidos, este debe tener menor reflectancia para longitudes de onda grandes, mientras que para valores altos pequeños presente grandes valores de reflectancia, se puede ver como en el gráfico se posee un máximo local alrededor de 400 nm, correspondiente a un color azulado.

V. ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE LOS MATERIALES

Como ya se menciono en la teoría, para cada material tenemos un indice de refracción y un coeficiente de extinción, los cuales se verán afectados según la longitud de onda incidente sobre estos; esto se debe a que por su estructura molecular, al reflejarse la luz sobre el material, los diferentes rayos de los cuales esta compuesto nuestro espectro tomen un camino diferente. Por ejemplo, si tenemos valores pequeños del coeficiente de extinción, entonces tendremos menor absorción por parte de esa longitud de onda , mientras que el indice de refracción nos describirá los cambios de las velocidades de la luz al pasar del aire y entrar en el material para esa longitud de onda en especifico.

En fig 6, es de observar que, los datos experimentales difieren de los teóricos, si bien esto seria lo esperado por lo tratado en el anterior apartado para el aluminio, se puede sacar algunas conclusiones a partir de estas graficas, por ejemplo, el material presenta cambios notables para ambas graficas en una longitud de onda alrededor los 800 nm, esto nos da pie a decir que, para valores cercanos al infrarrojo el aluminio presenta su mayor absorción en la longitud de onda y su mayor variación en la velocidad de la onda que penetra el material. Sin embargo, en la gráfica superior también podemos ver, que conforme se aumenta la longitud de onda esta crece linealmente entre los rangos de 300 a 700 nm, tendremos entonces un incremento lineal en la velocidad de la luz al penetrar el

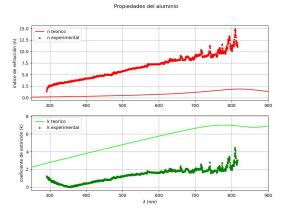


FIG. 6. Propiedades del aluminio, teniendo en la parte superior una comparación entre los datos experimentales y los teóricos para el indice de refracción y en la parte inferior una comparación entre los datos experimentales y teóricos del coeficiente de extinción, se puede observar como para ambas gráficas se presenta una gran variación entre una línea y la otra, una de las principales causas de esta variación es lo mencionado antes de las impurezas o el trabajo arduo con este aluminio.

material conforme se aumente λ . En la grafica inferior un punto de interés sería entre 300 y 400 nm donde, poseemos un punto en el cual el indice de extinción es casi nulo y esto nos podría referir a una mínima o nula absorción de la luz del material para esa longitud de onda.

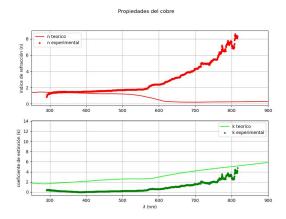


FIG. 7. Propiedades del cobre, en la parte superior se hace una comparativa entre los valores teórico/experimental para el indice de refracción mientras que en la inferior es la misma comparativa pero para el coeficiente de extinción. A diferencia del Aluminio, estas dos comparativas tienen valores entre los cuales se asemejan teórico y experimental.

En la grafica del cobre (fig 7), podemos notar como, para el indice de refracción tenemos valores similares para longitudes de onda por debajo de los 500 nm, mientras que, para valores demasiado altos como los 700 nm las dos graficas varia drásticamente, este fenómeno podría explicarse por medio de alguna suciedad, polvo o regado de algún otro material sobre el cobre, esto ya que si fuera oxidación del cobre, como se

puede percibir en fig 8, el indice de refracción caería, como también se observa en lo teórico, pero los datos experimentales nos indican que, en vez de caer, crece. Por otro lado, se observa que el coeficiente de extinción se mantiene en valores pequeños y no tiende a tener un incremento alto sino a partir de una longitud de onda de los 700 nm.

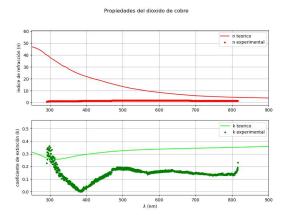


FIG. 8. Comparativas del indice de refracción y el coeficiente de extinción para el dióxido de cobre, se puede observar un comportamiento particular para el indice de refracción, en longitudes altas, similar al mismo indice de refracción para el cobre puro; ademas, podemos observar como los cambios en el coeficiente de extinción son muy pequeños.

Observemos como en la fig 8, los indices de refracción para longitudes de onda del orden de los 500 nm o inferiores difieren; mientras que el teórico desciende, en el experimental parece mantenerse constante o tener un incremento muy pequeño, solo en una longitud de onda de los 700 nm ya se puede hablar que ambos indices son "similares". En la gráfica inferior se puede observar como tenemos valores inferiores a 1 para el coeficiente de extinción, tanto para el teórico como el experimental, y esto nos da a entender que, el dióxido de cobre es un material el cual absorbe poca luz.

En Fig 9 tenemos unas características interesantes a la hora de hablar de la absorción de la longitud de la luz, debido a que a partir de 400 nm, tenemos valores muy cercanos a 0, por lo que para el silicio a partir de los 400 nm este casi no absorbe la luz, mientras que, a partir del mismo valor pero para el índice de refracción, podríamos hablar de un comportamiento constante para este mismo.

VI. CONCLUSIONES

En base a los resultados presentados anteriormente, podemos concluir por inicio que, los datos mas similares entre lo

teórico y lo experimental, sería para el silicio, mientras que, para objetos como el cobre o dióxido de cobre, tenemos valores muy diferentes, esto debido a posibles modificaciones en la estructura o componente químico del material que analizamos, una posible explicación para las variaciones del aluminio podría ser el desgaste en el material o suciedades del mismo material en cuestión.

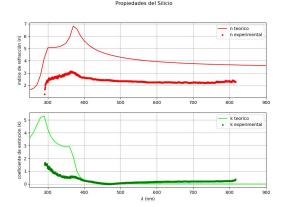


FIG. 9. Características del Silicio, tenemos 2 comparativas para el índice de refracción y el coeficiente de extinción, en su estructura la gráfica inferior tiene mayor semejanza entre los valores teóricos y experimentales a partir de los 400 nm, sin embargo, los datos experimentales en el indice de refracción también tienen un comportamiento similar al teórico.

Es importante saber que si bien, el experimento es detallado, se podría considerar mejorar las condiciones del entorno o por lo menos, cambiar la lámpara que se usa, que, como vimos en la primer parte esta varia del espectro medido al espectro generado y también es probable este generando algunos fallos a la hora de generar mediciones.

Este experimento sirve en gran medida para conocer las propiedades físicas de los materiales a partir de la espectroscopia, conocer por ejemplo, las cantidades de absorción de longitudes de onda para diferentes materiales y usar estas mismas características analizadas aquí para aplicaciones en la física.

VII. REFERENCIAS

¹Indices de refracción https://refractiveindex.info/ Universidad de Orebro, (Usado Abril 17 del 2023)

²R. David Prabu1,S. Valanarasu1, I. Kulandaisamy,et al. (2017) Studies on copper oxide thin films prepared by simple nebulizer spray technique

³Velez Zea A. *Material de clase*