

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



**DETERMINACIÓN DE LAS CONSTANTES OPTICAS Y EL
ESPESOR DE PELÍCULAS DELGADAS SEMICONDUCTORAS
DEPOSITADAS POR PULVERIZACIÓN CATÓDICA DE RADIO
FRECUENCIASOBRE SUBSTRATOS LIGERAMENTE
ABSORBENTES EN LA REGIÓN VISIBLE**

Tesis para optar el Título de Licenciada en Física que presenta el bachiller:

Karem Yoli Tucto Salinas

ASESOR: Dr. Roland Weingärtner

Lima, Diciembre del 2012

RESUMEN

En este trabajo se describe el método de Swanepoel (1983) [1] y el método propuesto por Guerra J A (2010) [2] para caracterizar películas delgadas usando sólo el espectro de transmitancia óptica. La película es caracterizada al quedar determinadas las constantes ópticas y el espesor.

Esta tesis presenta una modificación al método de Guerra, a fin de considerar en los cálculos el efecto de la absorción del sustrato. La ecuación de transmitancia del sistema película sustrato es descrita y obtenida siguiendo la teoría matricial de sistemas multicapas cuya base se encuentra en la teoría electromagnética. Usando el software Wolfram *Mathematica v.8.0* se implementa un programa con el método propuesto en el presente trabajo para sustratos absorbentes.

Este programa es puesto a prueba usando datos de transmitancia óptica simulados y reales. Las medidas son realizadas usando un espectrofotómetro que mide la transmitancia de películas delgadas, en este caso carburo de silicio amorfo hidrogenado (a-SiC:H) depositadas sobre sustratos de vidrio ligeramente absorbentes (B270) y fluoruro de calcio (CaF₂). Las películas delgadas se fabricaron en el Laboratorio de Ciencias de los materiales de la Sección Física de la Pontificia Universidad Católica del Perú. Las constantes ópticas obtenidas de aplicar el método propuesto por Guerra a la película sobre sustrato de CaF₂, y aquellas obtenidas aplicando el presente método propuesto para películas sobre sustratos de vidrio, son comparadas.



TEMA DE TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA

Título:

“Determinación de las constantes ópticas y el espesor de películas delgadas semiconductoras depositadas por pulverización catódica de radio frecuencia sobre sustratos ligeramente absorbentes en la región visible” # 37

Propuesto por: Roland Weingärtner

Asesor: Roland Weingärtner. rweingartner@pucp.edu.pe

Candidato a Licenciado: Karem Yoli Tucto Salinas.

Código 20062339



Introducción

Las películas delgadas semiconductoras con banda ancha son materiales cuyas aplicaciones en dispositivos fotovoltaicos, luminiscentes, recubrimientos ópticos, etc., siempre han sido señaladas en la literatura. Estudiar su comportamiento como semiconductor implica determinar su principal característica: el ancho de banda óptico o banda prohibida. El ancho de banda puede extraerse de la región de absorción óptica fundamental [1] al incidir radiación sobre el sólido. Las constantes ópticas como el índice de refracción y el coeficiente de absorción dependen de la energía de los fotones incidentes, además de poseer información del ancho de banda, también determinan las propiedades ópticas y de portadores de carga; por lo que son requeridos en el diseño y modelación de componentes o recubrimientos ópticos.

Los métodos establecidos para determinar las constantes ópticas y el espesor de una película delgada sobre un sustrato transparente, son numerosos. El método de la envolvente desarrollado por Swanepoel [5] y basado en las ideas de Manifacier et al [4], usa las franjas de interferencia del espectro de transmisión. Es un método poderoso pues con sólo una medida de transmitancia en incidencia normal logra encontrar el espesor, el índice de refracción y el coeficiente de absorción de la película con cálculos sencillos y una exactitud cerca de 1%. Posteriormente se incorporó el efecto de la absorción del sustrato, debido a las pérdidas significativas en la región óptica espectral que presentan los vidrios más comerciales como los denominados portaobjetos de microscopio y la sílice fundida. Los resultados muestran mejoras notables en la exactitud y la precisión del espesor y las constantes [6,7].

En el laboratorio de Ciencias de los Materiales de la Pontificia Universidad Católica del Perú, se elaboran películas delgadas semiconductoras depositadas sobre sustratos de vidrio (B270) y CaF_2 a través de la técnica de pulverización catódica por radiofrecuencia. Además, se ha desarrollado un método iterativo que aporta mejoras al método de la envolvente y emplea rutinas recursivas para encontrar valores acertados del espesor, índice de refracción y coeficiente de absorción. Sin embargo, el método viene funcionando bajo la suposición de un sustrato transparente. Por tanto su aplicación se restringe al caso de películas sobre sustratos de CaF_2 que presentan absorción casi nula en la región de interés. Una desventaja dado el alto costo del CaF_2 comparado con el vidrio común (B270)

R. Weingärtner
Vº Bº
F. de Zele

Descripción del tema y objetivos

El presente trabajo tiene por objetivo entregar un método iterativo para determinar las constantes ópticas y el espesor de películas delgadas depositadas sobre un sustrato grueso ligeramente absorbente, usando sólo medidas de transmisión. Se desarrolla la expresión analítica del espectro de transmitancia de la película y del sustrato para el caso de incidencia normal de luz. Luego, se presenta un procedimiento que extraiga la absorbancia del sustrato a partir de sus valores de transmisión. Para asegurar que nuestros cálculos no dependan del número de franjas de interferencia del espectro, usaremos la expresión de transmisión sin interferencias en lugar de las envolventes para determinar las constantes ópticas de la película. Modelando el índice de refracción se calcula el coeficiente de absorción a través de la ecuación de transmisión, por medio de un ajuste de curva que estime los parámetros del índice de refracción y el espesor de la película. Finalmente, se presentan los resultados obtenidos usando simulaciones y medidas reales en gráficas y tablas comparativas para comparar la exactitud del método propuesto.

Plan de trabajo

Empezaremos revisando la teoría electromagnética básica detrás de la teoría matricial de un arreglo de películas delgadas. Plantearemos la matriz característica y resolveremos la expresión final de la transmitancia para los casos que nos interesan: sustrato absorbente y película delgada depositada sobre sustrato absorbente.

A partir de las ecuaciones obtenidas se buscará la expresión de la absorbancia del sustrato y de la película. Necesitaremos en el caso del sustrato, recopilar información del índice de refracción en las hojas técnicas de los vidrios ópticos.

La siguiente tarea consiste en desarrollar en Mathematica un método iterativo que realice un ajuste de curva al espectro de transmisión mediante la estimación de los parámetros del índice de refracción, el espesor y el coeficiente de absorción de la película, de forma tal que el estimador χ^2 sea minimizado.

Se elaborarán muestras de películas delgadas de SiC en sustratos de vidrio (B270) y CaF₂, y se tomarán medidas del espectro de transmisión utilizando un espectrofotómetro de la marca Perkin Elmer disponible en la Sección de Química de la PUCP. Finalmente, se pondrá a prueba el método propuesto mediante el cálculo de las constantes ópticas a partir del espectro medido.

Máximo: 100 páginas

Bibliografía básica

- [1] Peter Y. Yu Cardona. Fundamentals of Semiconductors. Springer. 3rd edición. 2005
- [2] Maclaeod, H. A. Thin-film optical filters, 2da edición. Bristol: Adam Hilger. 1986
- [3] Griffiths, David J. Introduction to electrodynamics. 3rd edición. Prentice-Hall, Inc. 1999
- [4] Manificier et al., J. Phys. E: Sci. Instrum. 9, (1976) 1002-4
- [5] R. Swanepoel, Journal of Physics E: Sci. Instrum. 16, (1983) 1214
- [6] J M. Gonzales-Leal et al., Appl. Optics. Vol.41, No. 34, (2002)
- [7] D.D Strbac et al., Thin Solid Films. 518 (2010) 5679-5682
- [8] D. Poelman, P, Frederic Smet, J Phys D Appl Phys. 36, (2003) 1850

Dr. Víctor J. ...
F. de Zele

A mis padres Joel y Otilia, mis tíos Rosario y Vidal, y mis abuelos Santiago y Julia
Son ustedes las estrellas que alumbran siempre mis noches más oscuras

Sin olvidar el amor fiel de Amín, Laly y Locky quienes llenaron de alegrías y juegos cada
retorno a casa.

AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a todas las personas que de una u otra manera me han ayudado a lo largo de la realización de esta tesis.

En primer lugar, quiero dar las gracias a mi asesor de tesis, el Dr. Roland Weingärtner de la universidad Erlangen-Nürnberg de Alemania, por aceptarme para realizar esta tesis bajo su dirección. Este trabajo no se hubiera concebido sin su inestimable ayuda y su aportación siempre oportuna.

También quiero agradecer de manera especial al MSc. Jorge Andrés Guerra por haber estado disponible para ayudarme siempre que se lo he pedido y cuando no se lo he pedido también. Así mismo siempre estaré agradecida por sus consejos y amistad brindados para llevar a cabo todas las actividades propuestas durante el desarrollo de esta tesis.

Tampoco puedo olvidar a todos mis maestros de la Sección de Física quienes a lo largo de mis años de pregrado han enriquecido mi vida académica con sus clases, su exigencia y su ejemplo.

ÍNDICE

RESUMEN.....	ii
APROBACIÓN DEL TEMARIO DE TESIS.....	iii
DEDICATORIA.....	v
AGRADECIMIENTOS.....	vi
I. INTRODUCCIÓN.....	3
II. MARCO TEÓRICO.....	6
2.1. Teoría Matricial de sistemas multicapas.....	6
2.1.1. Ecuaciones de Maxwell y ondas electromagnéticas planas.....	6
2.1.2. El Vector de <i>Poynting</i>	7
2.1.3. Reflexión y transmisión en una interface.....	8
2.1.4. Reflectancia de una película delgada.....	12
2.1.5. Reflectancia de un arreglo de películas delgadas.....	15
2.1.6. Reflectancia, transmitancia y absorbancia.....	16
2.2. Transmisión de un sustrato grueso.....	17
2.2.1. Reflectancia, transmitancia y absorbancia.....	17
2.2.2. Resolución espectral del monocromador.....	20
2.3. Transmitancia de una película delgada sobre sustrato.....	23
2.3.1. Película delgada sobre sustrato absorbente.....	23
2.3.2. Película delgada sobre sustrato transparente.....	28
III. MÉTODO ÓPTICO DE CARACTERIZACIÓN.....	29
3.1. Método de Swanepoel.....	29
3.2. Método de Gonzales Leal.....	33
3.3. Método propuesto por Guerra J A (2010).....	34
3.4. Método de Guerra extendido: propuesta de la presente tesis.....	39

IV.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	42
4.1.	Simulación numérica	42
4.2.	Resultados experimentales.....	52
V.	CONCLUSIONES.....	61
	REFERENCIAS.....	63
	APÉNDICES	64
	APÉNDICE A: Incidencia oblicua en medios transparentes	64
	APÉNDICE B: Transmitancia de un sustrato grueso.....	67
	APÉNDICE C: Transmitancia de una película delgada sobre sustrato.....	71
	APÉNDICE D: Índices de refracción de algunos vidrios ópticos	76

CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN

El avance científico y tecnológico de nuestros días requiere del estudio y desarrollo de nuevos materiales. Estudiar y caracterizar las películas delgadas no sólo brinda mayor conocimiento científico, también define sus aplicaciones en la búsqueda de nuevos materiales para el desarrollo de dispositivos tecnológicos innovadores [1-3].

En el laboratorio de Ciencias de los Materiales de la Pontificia Universidad Católica del Perú, se elaboran películas delgadas semiconductoras depositadas sobre sustratos usando la técnica de pulverización catódica por radiofrecuencia (*sputtering*). Estudiar el comportamiento de un semiconductor implica determinar una de sus principales características: la energía de ancho de banda óptico. Ésta es la energía necesaria para generar transiciones electrónicas entre las bandas de valencia y conducción del material.

La espectrofotometría es una técnica no destructiva que consiste en incidir luz sobre un material con energías que van desde el UV hasta el IR cercano (190 a 1100 nm). El espectro de luz transmitido revela la excitación de los electrones y la región de absorción fundamental del material. Determinar el coeficiente de absorción en función de la longitud de onda es importante para el cálculo del ancho de banda.

Se han desarrollado numerosos métodos para determinar las constantes ópticas de películas delgadas. Una herramienta de fácil manejo es el método de Swanepoel (1983), basado en las ideas de Manifacier *et al.* (1976) [4]. Posteriormente, mejorado y extendido en diversas publicaciones [5,6]. Esta técnica usa las franjas de interferencia del espectro de transmisión para extraer las constantes ópticas. El método de Swanepoel depende críticamente del número de franjas de interferencia en el espectro. Como veremos en los próximos capítulos de este trabajo, existe un compromiso fuerte entre la determinación del coeficiente de absorción en la región fundamental, el número de franjas disponibles y el espesor de la película.

En el grupo de Ciencias de los Materiales de la PUCP se ha desarrollado un método iterativo computacional propuesto por Guerra J A (2010). Éste método introduce mejoras a los problemas presentes en el método de Swanepoel. Por medio de un ajuste de la

ecuación de transmisión al espectro medido se hallan valores más precisos del espesor, índice de refracción y coeficiente de absorción de la película [7].

El método propuesto por Guerra viene funcionando bajo el supuesto de un sustrato transparente. Sin embargo, muchos sustratos de vidrio comerciales muestran una ligera absorción en ciertas regiones espectrales (ver figura 1.1). Un ejemplo es el borosilicato (porta muestra para microscopio óptico), la sílice fundida o el vidrio común. El rol que desempeña la absorción del sustrato juega un papel significativo en la determinación del espesor y las constantes ópticas.

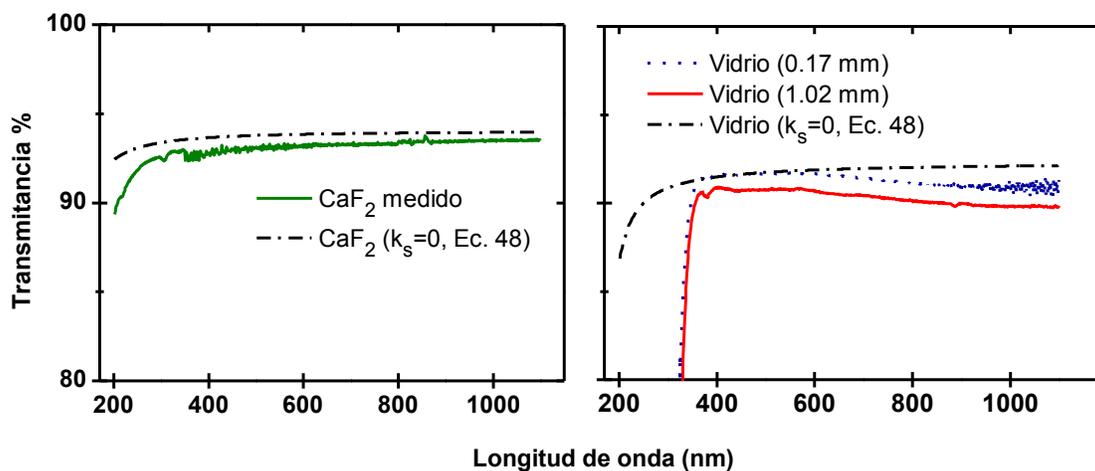


Figura 1.1. Espectros de transmitancia de dos tipos de sustratos. La línea punteada representa el caso ideal de un sustrato sin absorción. Nótese que las medidas reales siempre presentan absorción en ciertas regiones del espectro.

En este panorama se enmarca la presente tesis, cuyos objetivos son:

- Desarrollar la teoría que proporciona las ecuaciones de transmitancia de una película delgada sobre un sustrato absorbente.
- Modificar el método de Guerra para encontrar las constantes ópticas y el espesor de la película delgada tomando en cuenta la absorción del sustrato. Implementar dicho método en un programa usando Wolfram Mathematica.

- Se fabricarán películas delgadas de $a\text{-SiC:H}$ sobre vidrio y fluoruro de calcio CaF_2 . Luego se medirán los respectivos espectros de transmitancia de las muestras.
- Someter a prueba el método de Guerra modificado para sustratos absorbentes. Se compararán los parámetros ópticos obtenidos al usar el método de Guerra con los resultados hallados por el método modificado cuando el sustrato presenta absorción.

El Capítulo 2, presenta el marco teórico de la teoría matricial para estructuras multicapas. Ésta está basada en la física detrás de las ecuaciones de Maxwell. Se detallará al respecto de la ecuación de transmitancia para los casos de dos sistemas importantes: un sustrato absorbente y un sistema película delgada-sustrato. Discutiremos brevemente algunos modelos de transmitancia y la forma en que se promedia las oscilaciones rápidas no resueltas por el espectrofotómetro.

En el Capítulo 3, describimos el método de Swanepoel y su modificación para sustratos absorbentes según Gonzales Leal. Así mismo se describirá el método propuesto en Guerra (2010) [2] y se desarrollará una modificación al mismo para tomar en cuenta la absorción del sustrato en la determinación de las constantes ópticas.

Los resultados obtenidos usando el método propuesto por Guerra y el método modificado serán expuestos y discutidos en el Capítulo 4. A través de espectros de transmitancia medidos y simulados serán comparados el método de Guerra modificado y el método de Swanepoel también modificado para sustratos absorbentes (Gonzales-Leal *et al* [5]).

Por último, en el capítulo final se elaboraran las conclusiones del trabajo.

CAPÍTULO 2

MARCO TEÓRICO

2.1. Teoría Matricial de sistemas multicapas

En el presente capítulo se desarrolla el fundamento teórico del cual se deriva la ecuación de transmitancia. Se sigue en adelante el desarrollo presente en Macleod [8]

2.1.1. Ecuaciones de Maxwell y ondas electromagnéticas planas

Una de las implicaciones importantes de las ecuaciones de Maxwell es la existencia de ondas electromagnéticas. En un medio homogéneo e isotrópico de permitividad ε , permeabilidad μ y sin cargas libres ($\rho = 0$) las leyes de Maxwell son:

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (1.a)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1.b)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad (1.c)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \sigma \vec{E} + \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.d)$$

La velocidad de la luz en el vacío es c y se relaciona con la permitividad y la permeabilidad en el vacío por la relación $c^{-1} = \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$.

A partir de las ecuaciones de Maxwell se plantea la ecuación del campo eléctrico:

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

Una solución es la onda armónica plana polarizada dada por la ecuación (3) con propagación en el eje x , velocidad v en el medio, frecuencia angular ω y vector amplitud $\vec{\xi}$.

$$\vec{E} = \vec{\xi} \text{Exp} \left[i\omega \left(t - \frac{x}{v} \right) \right] \quad (3)$$

Reemplazando (3) en (2), se encuentra la condición que debe cumplirse para que (3) sea solución de la ecuación (2). Esta condición es la relación de dispersión (4):

$$N = \sqrt{\frac{\varepsilon\mu}{\varepsilon_0\mu_0} - i \frac{\mu\sigma}{\omega\varepsilon_0\mu_0}} = n - ik \quad (4)$$

Aquí N es el índice de refracción complejo, donde n es el índice de refracción a secas y k es el coeficiente de extinción. Reemplazando (4) en (3) y usando: $\omega = 2\pi c/\lambda$, entonces:

$$\vec{E} = \vec{\xi} \text{Exp}\left[-\frac{2\pi k}{\lambda} x\right] \text{Exp}\left[i\left(\omega t - \frac{2\pi n}{\lambda} x\right)\right] \quad (5)$$

Aparece un factor atenuante del campo en el medio. Y $\lambda/2\pi k$ es la distancia en la cual la amplitud de la onda decae en $1/e$ respecto a su valor inicial.

Para una propagación en dirección arbitraria $\hat{s} = \alpha\hat{i} + \beta\hat{j} + \gamma\hat{k}$ con vector posición $\vec{r} = (x, y, z)$, la ecuación (3) se escribe:

$$\vec{E} = \vec{\xi} \text{Exp}\left[i\left(\omega t - \frac{2\pi N}{\lambda} \hat{s} \cdot \vec{r}\right)\right] \quad (6)$$

Por la relación mutuamente perpendicular entre los campos E , H y la dirección de propagación \hat{s} se tiene:

$$\vec{H} = \frac{N}{c\mu} (\hat{s} \times \vec{E}) \quad (7)$$

Definimos $\eta = N/c\mu$ como la admitancia óptica característica del medio. Para frecuencias ópticas $\mu = \mu_0$; la admitancia óptica en el vacío es $\wp = (\varepsilon_0/\mu_0)^{1/2} = 2.6544 \times 10^{-3} S$.

En un medio diferente del vacío:

$$\eta = N \wp \quad (8)$$

Entonces:

$$\vec{H} = \eta (\hat{s} \times \vec{E}) = N \wp (\hat{s} \times \vec{E}) \quad (9)$$

2.1.2. El Vector de Poynting

Es la intensidad instantánea de energía electromagnética que fluye a través de una unidad de área superficial perpendicular a la dirección de propagación. Se define como el producto vectorial del campo eléctrico y magnético resultante.

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} = \frac{1}{\mu} \vec{E} \times \vec{B} \quad (10)$$

Los campos electromagnéticos oscilan, variando en el tiempo la frecuencia y magnitud del vector de *Poynting*. Con $\langle \rangle$ denotamos el promedio (en el tiempo) sobre un ciclo completo.

La potencia promedio por unidad de área transportada en la onda electromagnética se denomina intensidad.

$$\bar{I} = \langle \vec{S} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}(\vec{E} \times \vec{H}^*) \quad (11)$$

Por la relación (9):

$$I = \frac{1}{2} n \wp (EE^*) \wp$$

Donde E es la magnitud escalar del campo eléctrico.

Entonces:

$$I = \frac{1}{2} n \wp |\xi|^2 \text{Exp} \left[-\frac{4\pi k}{\lambda} (\alpha x + \beta y + \gamma z) \right]$$

La intensidad decae en $1/e$ respecto a su valor inicial cuando se ha recorrido una distancia de $\lambda/4\pi k$.

Este factor de atenuación se le define como el coeficiente de absorción (α):

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (12)$$

2.1.3. Reflexión y transmisión en una interface

Las estructuras de películas delgadas involucran un número de interfaces entre varios medios.

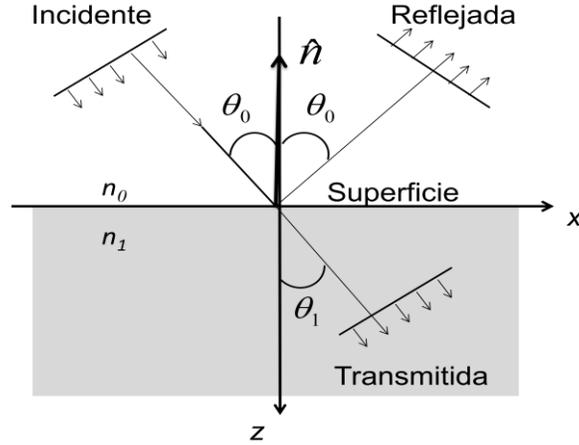


Figura 2.1. Plano de incidencia. Ondas incidente, transmitida y reflejada.

Una onda armónica plana polarizada incide de un medio con índice de refracción n_0 a otro medio con n_1 , ambos transparentes. El ángulo de incidencia es θ_0 . La frontera está en $z = 0$ y el plano de incidencia es el plano formado por la dirección de propagación de la onda incidente y el vector \hat{n} normal a la superficie.

En la interface entre dos medios, la onda incidente se refleja y transmite con vectores de propagación: $\hat{s}_r = (\alpha_r, \beta_r, \gamma_r)$ y $\hat{s}_t = (\alpha_t, \beta_t, \gamma_t)$ respectivamente.

$$\vec{E}_i = \vec{\xi}_i \text{Exp} \left[i \left(\omega_i t - \left(\frac{2\pi n_0}{\lambda} \right) (x \text{ Sin } \theta_0 + z \text{ Cos } \theta_0) \right) \right] \quad (\text{Onda incidente})$$

$$\vec{E}_r = \vec{\xi}_r \text{Exp} \left[i \left(\omega_r t - \left(\frac{2\pi n_0}{\lambda} \right) (\alpha_r x + \beta_r y + \gamma_r z) \right) \right] \quad (\text{Onda reflejada})$$

$$\vec{E}_t = \vec{\xi}_t \text{Exp} \left[i \left(\omega_t t - \left(\frac{2\pi n_1}{\lambda} \right) (\alpha_t x + \beta_t y + \gamma_t z) \right) \right] \quad (\text{Onda transmitida})$$

La condición de frontera entre medios dieléctricos asegura la continuidad de las componentes de los campos tangenciales a la superficie.

$$\vec{E}_{i//} + \vec{E}_{r//} = \vec{E}_{t//} \quad (13)$$

Por esta continuidad para todo $x, y,$ y t la frecuencia de la onda queda inalterada.

$$\omega_i = \omega_r = \omega_t \quad (14)$$

Es decir, la dirección de propagación queda confinada al plano de incidencia xz . Y se cumplen las relaciones:

Ley de Reflexión: $\theta_0 = \theta_r$

Ley de Snell: $n_0 \text{Sen } \theta_0 = n_1 \text{Sen } \theta_1$

- **Incidencia normal en medios transparentes**

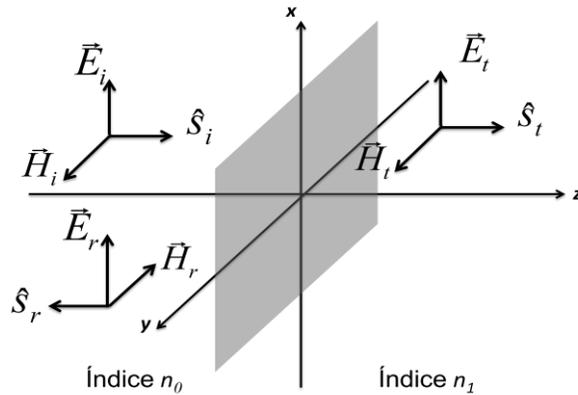


Figura 2.2. Incidencia normal de ondas electromagnéticas planas

Las admitancias ópticas de los medios son: $\eta_0 = n_0 \wp$ y $\eta_1 = n_1 \wp$ y los respectivos número de onda: $k_0 = 2\pi n_0 / \lambda$ y $k_1 = 2\pi n_1 / \lambda$.

Onda incidente: $\vec{E}_i = \xi_i e^{i(\omega t - k_0 z)} \hat{x}$ $\vec{H}_i = \eta_0 \xi_i e^{i(\omega t - k_0 z)} \hat{y}$

Onda reflejada: $\vec{E}_r = \xi_r e^{i(\omega t + k_0 z)} \hat{x}$ $\vec{H}_r = -\eta_0 \xi_r e^{i(\omega t + k_0 z)} \hat{y}$

Onda transmitida: $\vec{E}_t = \xi_t e^{i(\omega t - k_1 z)} \hat{x}$ $\vec{H}_t = \eta_1 \xi_t e^{i(\omega t - k_1 z)} \hat{y}$

En incidencia normal, los campos \vec{E} y \vec{H} son tangenciales a la superficie, entonces:

a) $\xi_i + \xi_r = \xi_t$ (15.a)

b) $n_0 \wp \xi_i - n_0 \wp \xi_r = n_1 \wp \xi_t$ (15.b)

De a) y b) se calculan las relaciones ξ_r / ξ_i y ξ_t / ξ_i , que representan el coeficiente de reflexión ρ y de transmisión τ de Fresnel respectivamente.

$$\rho = (n_0 - n_1)/(n_0 + n_1) \quad (16.a)$$

$$\tau = 2n_0/(n_0 + n_1) \quad (16.b)$$

La onda transmitida e incidente están en fase ya que τ es un número real y positivo. Si ρ es real y positivo ($n_0 > n_1$) las ondas reflejada e incidente están en fase. Y si ρ es negativo ($n_1 > n_0$) están desfasadas en π .

La reflectancia R se define:

$$R = \frac{I_r}{I_i} = |\xi_r|^2 / |\xi_i|^2 = (n_0 - n_1)^2 / (n_0 + n_1)^2 \quad (17.a)$$

La transmitancia T se define:

$$T = \frac{I_t}{I_i} = n_1 |\xi_t|^2 / n_0 |\xi_i|^2 = 4n_0 n_1 / (n_0 + n_1)^2 \quad (17.b)$$

La energía se conserva y la intensidad de la onda incidente es igual a la suma de las intensidades reflejada y transmitida en la frontera. Se cumple $T + R = 1$

Estas ecuaciones también se cumplen en caso de incidencia oblicua. Pero ahora las expresiones dependerán del ángulo de incidencia θ . Para tal efecto se consideran dos posibles polarizaciones: el vector campo eléctrico paralelo al plano de incidencia (*polarización - p*) o el vector campo eléctrico normal al plano de incidencia (*polarización - s*). El cálculo detallado se presenta en el apéndice A.

Admitancia óptica modificada

Por conveniencia en la notación se introduce la admitancia óptica modificada:

$$\eta = H/E \quad (18)$$

Incidencia normal: $\eta = N\varphi$

Incidencia oblicua: $\eta = N\varphi/\cos\theta$ (polarización-p) y $\eta = N\varphi\cos\theta$ (polarización-s)

Medios sin absorción: $\eta = N$

Usando esta notación, cualquier caso de incidencia se expresa:

$$R = (\eta_0 - \eta_1)^2 / (\eta_0 + \eta_1)^2 \quad T = 4\eta_0 \eta_1 / (\eta_0 + \eta_1)^2$$

- **Incidencia normal en medios absorbentes**

En medios son absorbentes, el índice de refracción es complejo. Luego:

$$\rho = \frac{N_0 - N_1}{N_0 + N_1} = \frac{(n_0 - n_1) - i(k_0 - k_1)}{(n_0 + n_1) + i(k_0 + k_1)} \quad (19.a)$$

$$\tau = \frac{2N_0}{N_0 + N_1} = \frac{2(n_0 - ik_0)}{(n_0 + n_1) + i(k_0 + k_1)} \quad (19.b)$$

Los campos resultantes en la interface entre dos medios se escriben:

Para el medio 0: $E_i + E_r = (1 - \rho)E_i$ $H_i + H_r = N_0 \rho (1 - \rho) E_i$

Para el medio 1: $E_t = \tau E_i$ $H_t = N_1 \rho \tau E_i$

Igualando la intensidad neta a cada lado de la interface:

$$\text{Re}\left(\frac{1}{2}(1 + \rho)E_i N_0^* \rho (1 + \rho)^* E_i^*\right) = \text{Re}\left(\frac{1}{2}\tau E_i N_1^* \rho \tau^* E_i^*\right)$$

Y se llega a la expresión: $(1 - R) + i \frac{k_0}{n_0} (\rho - \rho^*) = T$

La relación $R + T = 1$ se cumple exigiendo que $k_0 = 0$. Esto condiciona la transparencia del primer medio de incidencia $\eta_0 = n_0 \rho$.

2.1.4. Reflectancia de una película delgada

Típicamente las películas delgadas son depositadas sobre substratos sólidos. Este tándem constituye lo que se denomina un sistema de varias capas. La onda incidente presenta múltiples reflexiones entre las interfaces.

En el esquema de la figura 2.4 se introduce la siguiente notación:

- Las ondas que se propagan en la dirección de incidencia se denotarán con el superíndice + (dirección positiva)
- Las ondas que viajan en sentido opuesto a la dirección de incidencia se denotarán con el superíndice – (dirección negativa).

Al ser el substrato el medio final no presenta ondas viajando en dirección negativa.

Interface b

Las componentes tangenciales de los campos se escriben:

$$E_b = E_{1b}^+ + E_{1b}^-$$

$$H_b = H_{1b}^+ + H_{1b}^- = \eta_1 E_{1b}^+ - \eta_1 E_{1b}^-$$

Donde E_b y H_b representan los campos resultantes y la admitancia óptica de la película delgada (η_1) depende del caso de incidencia.

Podemos expresar E_{1b}^+ , E_{1b}^- , H_{1b}^+ y H_{1b}^- en términos de los campos resultantes.

$$E_{1b}^+ = \frac{1}{2} (H_b / \eta_1 + E_b) \quad (20.a)$$

$$E_{1b}^- = \frac{1}{2} (-H_b / \eta_1 + E_b) \quad (20.b)$$

$$H_{1b}^+ = \eta_1 E_{1b}^+ = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b) \quad (20.c)$$

$$H_{1b}^- = -\eta_1 E_{1b}^- = \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b) \quad (20.d)$$

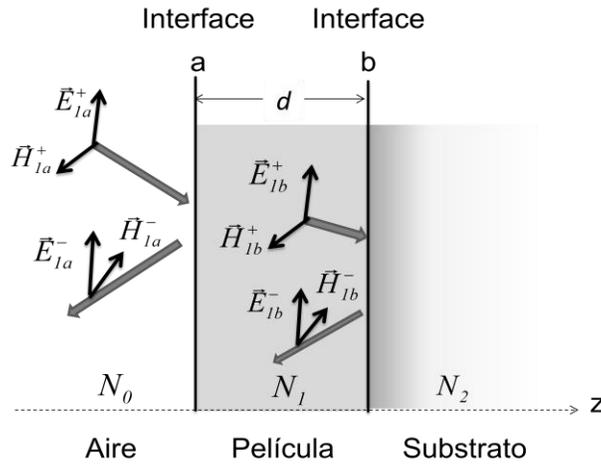


Figura 2.4. Onda electromagnética incidente en película delgada.

Interface a

En la interface a la onda tiene fase ϕ_a y en la interface b tiene fase ϕ_b , el desfase $\delta = \phi_b - \phi_a$ es igual al número de onda en el medio por la diferencia de camino.

$$\delta = 2\pi N_1 d \cos \theta_1 / \lambda \quad (21)$$

Las ondas en dirección positiva (+) quedan afectadas por el factor de desfase $e^{i\delta}$, y las ondas en dirección negativa (-) por el factor $e^{-i\delta}$:

$$\mathbf{E}_{1a}^+ = \mathbf{E}_{1b}^+ e^{i\delta} = \frac{1}{2} (\mathbf{H}_b / \eta_1 + \mathbf{E}_b) e^{i\delta} \quad (22.a)$$

$$\mathbf{E}_{1a}^- = \mathbf{E}_{1b}^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} (-\mathbf{H}_b / \eta_1 + \mathbf{E}_b) e^{-i\delta} \quad (22.b)$$

$$\mathbf{H}_{1a}^+ = \mathbf{H}_{1b}^+ e^{i\delta} = \frac{1}{2} (\mathbf{H}_b + \eta_1 \mathbf{E}_b) e^{i\delta} \quad (22.c)$$

$$\mathbf{H}_{1a}^- = \mathbf{H}_{1b}^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} (\mathbf{H}_b - \eta_1 \mathbf{E}_b) e^{-i\delta} \quad (22.d)$$

Y las componentes tangenciales \mathbf{E}_a y \mathbf{H}_a resultantes en la interface a se escriben:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_a &= \mathbf{E}_{1a}^+ + \mathbf{E}_{1a}^- \\ \mathbf{E}_a &= \mathbf{E}_b \cos \delta_1 + \mathbf{H}_b i \sin \delta_1 / \eta_1 \end{aligned} \quad (23.a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_a &= \mathbf{H}_{1a}^+ + \mathbf{H}_{1a}^- \\ \mathbf{H}_a &= \mathbf{E}_b i \eta_1 \sin \delta_1 + \mathbf{H}_b \cos \delta_1 \end{aligned} \quad (23.b)$$

En notación matricial:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{E}_a \\ \mathbf{H}_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & \frac{i \sin \delta}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_b \\ \mathbf{H}_b \end{bmatrix} \quad (24)$$

La matriz 2x2 es la matriz característica de la película delgada y relaciona las componentes de los campos en la entrada y salida del sistema. Y la admitancia óptica a la entrada del arreglo es $Y = \mathbf{H}_a / \mathbf{E}_a$.

Normalizado con respecto a \mathbf{E}_b :

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & \frac{i \sin \delta}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} \quad (25)$$

Donde: $B = \mathbf{E}_a / \mathbf{E}_b$ y $C = \mathbf{H}_a / \mathbf{E}_b$. La admitancia del substrato es $\eta_2 = \mathbf{H}_b / \mathbf{E}_b$ y la admitancia de entrada del sistema es $Y = C/B$:

$$Y = (\eta_2 \cos \delta_1 + i \eta_1 \sin \delta_1) / (\cos \delta_1 + i (\eta_2 / \eta_1) \sin \delta_1)$$

La reflectancia se reduce así al caso de una interface simple entre dos medio con admitancias η_0 e Y :

$$R = \rho\rho^* = \left(\frac{\eta_o - Y}{\eta_o + Y} \right) \left(\frac{\eta_o - Y}{\eta_o + Y} \right)^* \quad (26)$$

2.1.5. Reflectancia de un arreglo de películas delgadas

Análogamente a las ecuaciones (23.a) y (23.b) escribimos los campos tangenciales entre la interface b y la interface c .

$$E_b = E_{1b}^+ + E_{1b}^- = E_c \cos\delta_2 + H_c \frac{i \operatorname{Sen} \delta_2}{\eta_2}$$

$$H_b = H_{1b}^+ + H_{1b}^- = E_c i \eta_2 \operatorname{Sen} \delta_2 + H_c \cos\delta_2$$

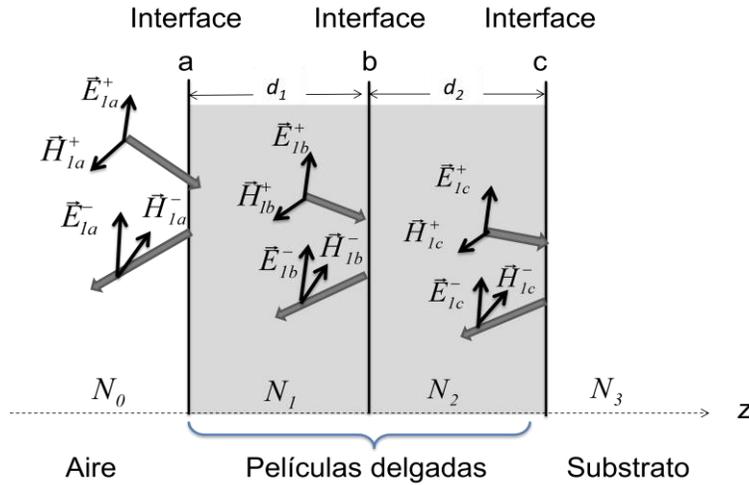


Figura 2.5. Estructura con dos películas delgadas sobre sustrato.

La matriz característica de la segunda película (ver figura 2.5) se escribe:

$$\begin{bmatrix} E_b \\ H_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\delta_2 & \frac{i \operatorname{Sen} \delta_2}{\eta_2} \\ i \eta_2 \operatorname{Sen} \delta_2 & \cos\delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_c \\ H_c \end{bmatrix}$$

El sistema completo es el producto de las matrices individuales:

$$\begin{bmatrix} E_a \\ H_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\delta & \frac{i \operatorname{Sen} \delta}{\eta_1} \\ i \eta_1 \operatorname{Sen} \delta & \cos\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\delta_2 & \frac{i \operatorname{Sen} \delta_2}{\eta_2} \\ i \eta_2 \operatorname{Sen} \delta_2 & \cos\delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_c \\ H_c \end{bmatrix}$$

Normalizado con respecto a E_c :

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\delta & \frac{i\text{Sen}\delta}{\eta_1} \\ i\eta_1\text{Sen}\delta & \cos\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\delta_2 & \frac{i\text{Sen}\delta_2}{\eta_2} \\ i\eta_2\text{Sen}\delta_2 & \cos\delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_3 \end{bmatrix} \quad (27)$$

Los resultados obtenidos pueden extenderse para el caso de un arreglo con N películas delgadas sobre un sustrato:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \prod_{k=1}^N \begin{bmatrix} \cos\delta_k & \frac{i\text{Sen}\delta_k}{\eta_k} \\ i\eta_k\text{Sen}\delta_k & \cos\delta_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix} \quad (28)$$

Donde:

- η_m es la admitancia en el medio final.
- $\delta_k = 2\pi N_k d_k \cos\theta_k / \lambda$ es la fase en el k -ésimo medio.
- η_k es la admitancia óptica del k -ésimo medio.

2.1.6. Reflectancia, transmitancia y absorbancia

La absorción implica pérdida de la energía incidente al interior del material. La absorbancia A debe satisfacer la relación de conservación: $R + T + A = 1$.

- **Reflectancia de una estructura multicapas:**

$$R = \left(\frac{\eta_o B - C}{\eta_o B + C} \right) \left(\frac{\eta_o B - C}{\eta_o B + C} \right)^* \quad (29)$$

- **Transmitancia de una estructura multicapas:**

La intensidad emergente en la k -ésima interface y la intensidad entrante al sistema son respectivamente: $I_a = \frac{1}{2} \text{Re}(E_a H_a^*)$ y $I_k = \frac{1}{2} \text{Re}(\eta_m) E_k H_k^*$. Además $B = E_a / E_k$ y $C = H_a / E_k$ reemplazados en I_a se tiene:

$$I_a = \frac{1}{2} \text{Re}(BC^*) E_k E_k^*$$

I_r es la intensidad reflejada en la entrada y I_i es la intensidad incidente en la frontera, entonces:

$$I_a = I_i - I_r = (1 - R)I_i$$

$$I_i = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(BC^*) E_k E_k^* / (1 - R)$$

Por la definición de transmitancia:

$$T = \frac{I_k}{I_i} = \frac{\operatorname{Re}(\eta_m)(1 - R)}{\operatorname{Re}(BC^*)}$$

Con R dado por la ecuación (29), se obtiene la expresión de la transmitancia:

$$T = \frac{4\eta_0 \operatorname{Re}(\eta_m)}{(\eta_0 B + C)(\eta_0 B + C)^*} \quad (30)$$

- **Absorbancia de una estructura multicapas:**

Por la relación $R + T + A = 1$, se halla la absorbancia:

$$A = \frac{4\eta_0 \operatorname{Re}(BC^* - \eta_m)}{(\eta_0 B + C)(\eta_0 B + C)^*} \quad (31)$$

En medios transparentes, las ecuaciones anteriores son válidas y consistentes. Por ellas también se obtiene $A = 0$ y $R + T = 1$.

2.2. Transmisión de un sustrato grueso

Se aplica la teoría matricial desarrollada en la sección anterior para formular la ecuación del espectro de transmitancia $T(\lambda)$ en función de las constantes ópticas de los medios involucrados.

2.2.1. Reflectancia, transmitancia y absorbancia

Se tiene el caso de luz monocromática incidiendo normalmente sobre un sustrato con superficies pulidas y planas paralelas.

Se plantea la matriz característica correspondiente (ver figura 2.6):

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname{Cos}(\delta_s) & \frac{i}{\eta_s} \operatorname{Sen}(\delta_s) \\ i\eta_s \operatorname{Sen}(\delta_s) & \operatorname{Cos}(\delta_s) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix}$$

Aquí $\delta_s = 2\pi N_s d_s / \lambda$ y $\eta_s = \wp N_s$. Si el medio inicial es aire, entonces: $\eta_0 = \eta_m = \wp$.

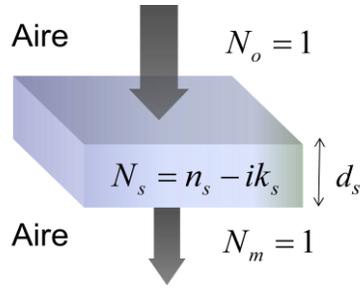


Figura 2.6. Incidencia normal sobre un substrato absorbente

Los elementos matriciales son:

$$B = \eta_m \text{Cos} \delta_s + \frac{i\eta_m}{\eta_s} \text{Sen} \delta_s$$

$$C = i\eta_s \eta_m \text{Sen} \delta_s + \eta_m \text{Cos} \delta_s$$

Se reemplazan B y C en la ecuación (30) (ver apéndice B), y se obtiene la expresión de la transmitancia del substrato, llamada ecuación de Airy:

$$T_s = \frac{(1 - R_1)^2 x_s}{1 + R_1^2 x_s^2 - 2R_1 x_s \text{Cos} \phi_s} \quad (32)$$

Los parámetros son:

$$\alpha_s = 4\pi k_s / \lambda \quad (\text{Coeficiente de absorción}) \quad (33.a)$$

$$x_s = \text{Exp}(-\alpha_s d_s) \quad (\text{Absorbancia}) \quad (33.b)$$

$$\phi_s = 4\pi n_s d_s / \lambda_m \quad (\text{Desfase de la onda}) \quad (33.c)$$

$$R_1 = \frac{(1-s)^2 + k_s^2}{(1+s)^2 + k_s^2} \quad (\text{Coeficiente de reflexión de Fresnel en la interface aire-substrato}) \quad (33.d)$$

Los cálculos fueron realizados bajo los siguientes supuestos:

- i. Volumen absorbente en la región óptica, inmerso en aire.
- ii. Índice de refracción mucho mayor que el coeficiente de extinción ($s \gg k_s$)

Por la definición (33.c) del desfase ϕ_s de la onda en el volumen se deriva la expresión de la distancia entre extremos consecutivos $\Delta\lambda_e$.

$$\Delta\lambda_e = \lambda^2 / 4sd_s \quad (34)$$

La distancia entre extremos consecutivos presenta los siguientes casos:

- Si el espesor del substrato es lo suficiente delgado, entonces $\Delta\lambda_e \gg 1nm$.
- Si el espesor del substrato es lo suficiente grueso, entonces $\Delta\lambda_e \ll 1nm$.

El espesor típico de un substrato se encuentra alrededor de $0.5mm$ y el rango espectral UV/VIS/NIR es de entre 200 y $3000 nm$ típicamente, mientras que s tiene valores entre 1 y 3 . Esto sugiere $\Delta\lambda_e \ll 1nm$. Por lo tanto, la ecuación (32) presenta oscilaciones rápidas entre máximos y mínimos en la transmitancia. Estas oscilaciones rápidas no pueden ser resueltas por el instrumento. Los espectrofotómetros típicos poseen una resolución con ancho espectral no menor a $0.5 nm$ [9] En la siguiente sección serán desarrollados los conceptos sobre la resolución espectral con el fin de encontrar una expresión matemática que describa la transmitancia óptica tomando en cuenta el problema del instrumento.

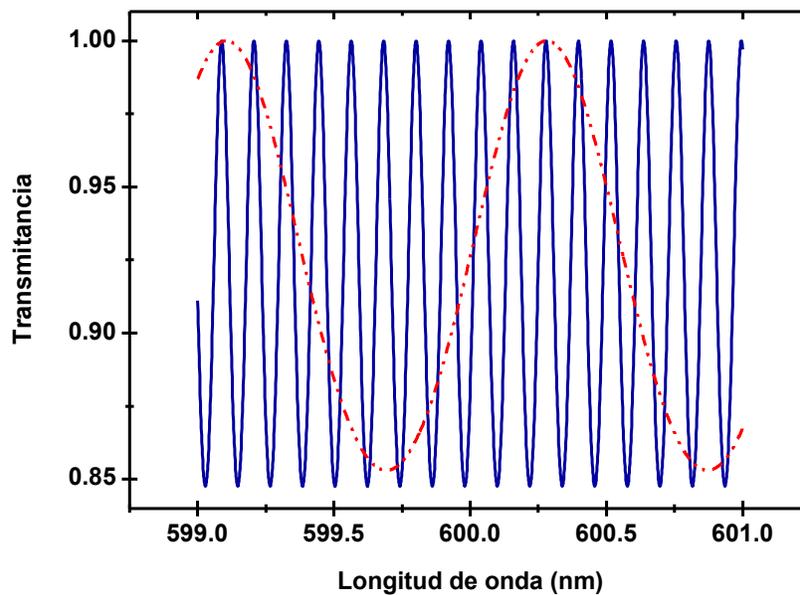


Figura 2.7. Transmitancia de un volumen de acuerdo a la ecuación (32) con índice de refracción $s = 1.51$ y coeficiente de extinción $k_s = 0$. La línea cortada corresponde a un espesor de $d = 0.1mm$ y la línea sólida a un espesor $d = 1mm$. Notar el dominio de la selección $\lambda \in [599, 601]nm$.

2.2.2. Resolución espectral del monocromador

El espectro de transmitancia se obtiene usando un espectrofotómetro. Al interior de este instrumento se encuentra un monocromador. Este sistema debe entregar luz de una longitud de onda central λ y un ancho de banda espectral $\Delta\lambda$. Se define el ancho de banda espectral como el intervalo de longitudes de onda entre dos puntos en los que la intensidad máxima ha caído en un 50% [10] (ver figura 2.8.b).

La calidad del monocromador depende de tres factores relacionados: la rejilla de difracción, el poder de resolución y la sensibilidad. El tamaño y las características dispersivas de la rejilla determinan la resolución del sistema. El poder de resolución es la capacidad del monocromador para distinguir dos longitudes de onda adyacentes. La componente final del monocromador es su rendija de salida de ancho variable. Si se reduce el ancho de la rendija de salida disminuye el ancho de banda espectral $\Delta\lambda$ y parece mejorar la resolución. Sin embargo, cuanto más estrecha es la rendija la energía radiante que pasa a través de ella es débil. Esto afecta negativamente la relación señal-ruido.

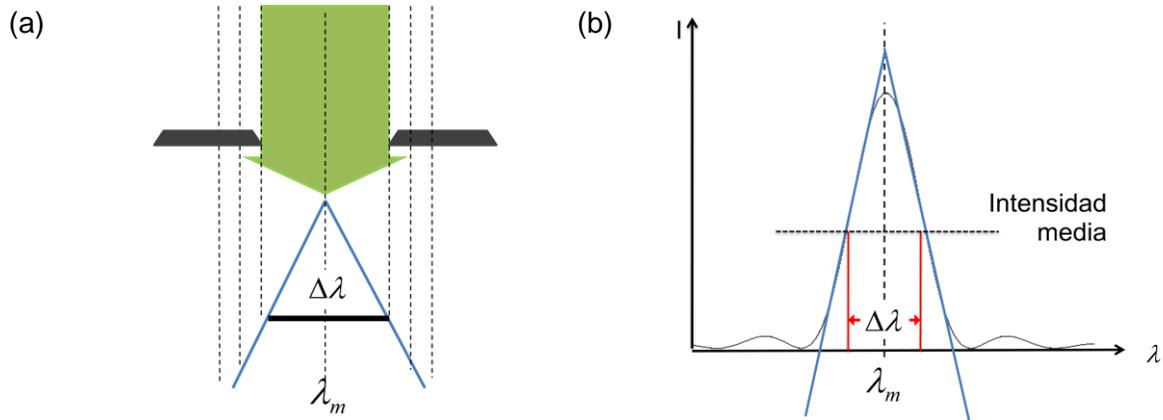


Figura 2.8. Luz atravesando la rendija de salida (a). Patrón de difracción de Fraunhofer por una rendija. Aparecen señalados la longitud de onda nominal λ_m y el ancho de banda espectral $\Delta\lambda$ (b).

El poder de resolución del monocromador es limitado. No entrega luz perfectamente monocromática, sino un rango de longitudes de onda (e. g. $\lambda_m - \Delta\lambda/2 < \lambda < \lambda_m + \Delta\lambda/2$. Ver figura 2.8). Si ocurre que $\Delta\lambda_e \ll 1nm$, la distancia entre extremos es menor al ancho

de banda espectral ($\Delta\lambda_e < \Delta\lambda$) y por lo tanto el instrumento no puede resolver las oscilaciones rápidas en la transmitancia. Esto se puede interpretar como un promedio realizado por el espectrofotómetro. Este promedio puede ser introducido matemáticamente a través de la ecuación (35).

$$T(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} T(\lambda')w(\lambda')d\lambda' \quad (35)$$

Aquí w es la función que define la ponderación.

La luz que emerge del monocromador posee una distribución de intensidad de longitudes de onda conocida como patrón de difracción de Fraunhofer (ver figura 2.8 (b)). Esta distribución lleva cerca del 85% de la energía en el máximo central. La energía restante se distribuye en los máximos laterales que se encuentran desplazados entre sí cuanto mayor es la longitud de onda [9]. Para fines de simplicidad en el tratamiento de los cálculos se puede aproximar el patrón de Fraunhofer a una distribución Gaussiana con media λ y desviación estándar $\Delta\lambda/2$. Esta distribución cumple el rol de función de peso w para promediar la transmitancia en una estrecha región espectral que incide sobre la muestra.

La integración propuesta en la ecuación (35) no tiene solución analítica. Sin embargo es posible resolverla numéricamente con el fin de considerar apropiadamente la física detrás de los espectros medidos. Posteriormente se realizarán simulaciones de espectros de transmitancia utilizando el acercamiento expuesto.

Siguiendo el acercamiento de Manifacier y Swanepoel, es posible encontrar una ecuación que se aproxime a la curva descrita por (35). Esta ecuación se obtiene tomando el valor medio de la transmitancia sobre la diferencia de fase de la luz debido al substrato (i.e. ϕ_s):

$$T = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} T(\phi_s) d\phi_s = \frac{(1 - R_1)^2 x_s}{1 - R_1^2 x_s^2} \quad (36)$$

La ecuación (36) representa la transmitancia del sustrato absorbente cuando el espesor es lo suficientemente grueso de manera que el espectrofotómetro no puede resolver las oscilaciones rápidas.

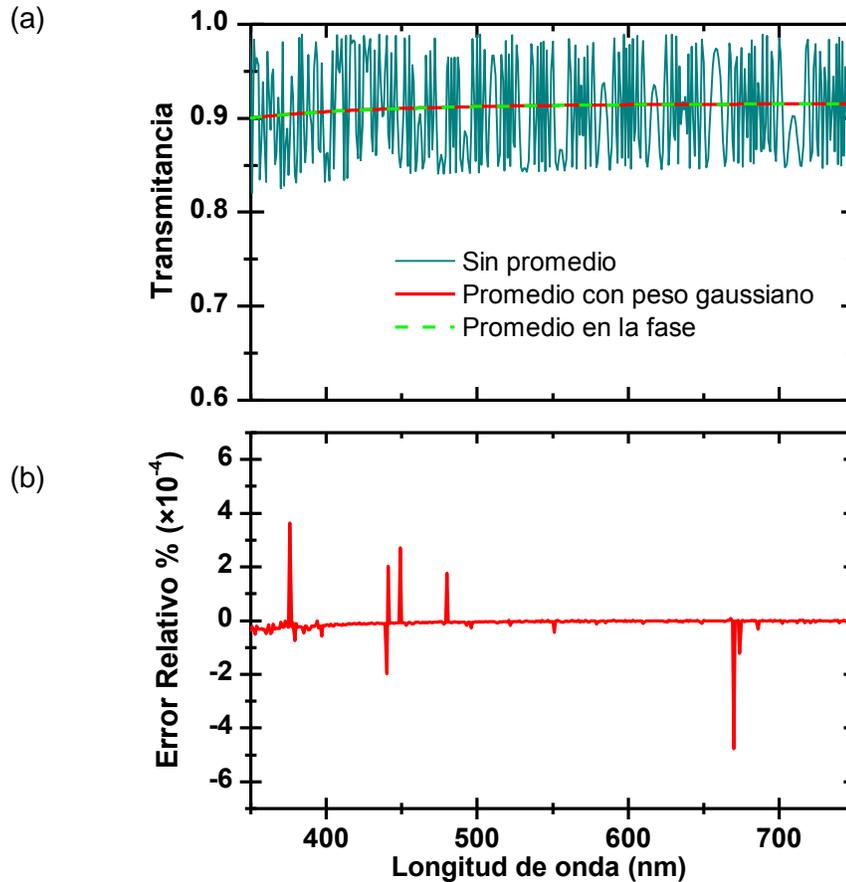


Figura 2.9. Transmitancia simulada de un volumen con $1mm$ de espesor usando la ecuación (35). La línea sólida fina es la transmitancia de un sustrato con perfecta resolución instrumental, la línea cortada es el promedio en la fase debida al volumen, y la línea sólida gruesa es el promedio usando la función de peso gaussiano (a). El ancho de banda espectral se aproxima a una Gaussiana con desviación estándar $\Delta\lambda/2 = 0.5 \text{ nm}$ (FWHM=1.177nm). El error relativo entre los promedios esta cerca del 0% (b).

El promedio de la ecuación (36) es una aproximación muy buena de la ecuación (35). Porque al integrar en una región donde la fase debida al sustrato cambia de 0 a 2π , la distancia entre extremos es suficientemente pequeña y las constantes ópticas cambian lentamente. Por esta razón es posible considerar las constantes ópticas como constantes en la integración.

2.3. Transmitancia de una película delgada sobre sustrato

En la sección anterior fue presentada la ecuación de Airy y se introdujo el problema de la resolución espectral. En la presente sección se aborda el caso de un sistema película delgada-sustrato grueso. Se planteará la ecuación de transmitancia siguiendo el acercamiento matricial; y se promediará sobre las oscilaciones rápidas con el fin de describir el espectro de transmitancia.

2.3.1. Película delgada sobre sustrato absorbente

El objetivo principal es encontrar una ecuación de transmitancia $T(\lambda)$ del sistema película-sustrato para emplearla en el método de caracterización. Dicha ecuación debe derivarse de un modelo que describe correctamente los fenómenos físicos ocurridos cuando se incide luz al sistema. También es importante que la ecuación sea sucinta, para hacer sencilla su interpretación física y los cálculos computacionales.

Para incidencia normal de luz, la ecuación de transmitancia del sistema mostrado en la figura 2.10 empieza por el planteamiento de la matriz característica correspondiente.

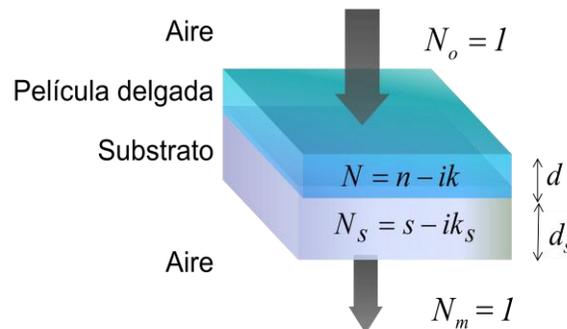


Figura 2.10. Incidencia normal en una película delgada sobre sustrato

Parámetros de la película:

- n (índice de refracción)
- k (coeficiente de extinción)
- d (espesor)

Parámetros del sustrato:

- s (índice de refracción)
- k_s (coeficiente de extinción)
- d_s (espesor)

Y N_o y N_m son el índice de refracción del aire del medio inicial y final respectivamente.

La matriz característica del sistema es:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\delta) & \frac{i}{\eta} \sin(\delta) \\ i\eta \sin(\delta) & \cos(\delta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\delta_s) & \frac{i}{\eta_s} \sin(\delta_s) \\ \eta_s \sin(\delta_s) & \cos(\delta_s) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix} \quad (37)$$

Aquí:

$$\delta = 2\pi N d / \lambda \quad (\text{Factor de fase de la película})$$

$$\delta_s = 2\pi N_s d_s / \lambda \quad (\text{Factor de fase del sustrato})$$

$$\eta_0 = \eta_m = \wp \quad (\text{Admitancia óptica del aire})$$

Los elementos de la matriz son:

$$B = \cos(\delta) \cos(\delta_s) - \frac{N_s}{N} \sin(\delta) \sin(\delta_s) + \frac{i}{N_s} \sin(\delta_s) \cos(\delta) + \frac{i}{N} \sin(\delta) \cos(\delta_s) \quad (38.a)$$

$$C = iN \wp \sin(\delta) \cos(\delta_s) + iN_s \wp \sin(\delta_s) \cos(\delta) - \frac{N_s}{N} \wp \sin(\delta) \sin(\delta_s) + \wp \cos(\delta) \cos(\delta_s) \quad (38.b)$$

Reemplazando B y C en la ecuación (30) se obtiene la transmitancia del sistema (El desarrollo de las ecuaciones a detalle se presentan en el Apéndice C).

La transmitancia sin el promedio en las oscilaciones rápidas es la ecuación (C.11). Se presenta aquí como la ecuación (39).

$$T = \frac{4}{A \cos^2(\varphi_s) + B \sin^2(\varphi_s) + C \sin(\varphi_s) \cos(\varphi_s) + D} \quad (39)$$

Notar que $\delta_s = 2\pi(s - ik_s)d_s/\lambda$. Se definen las variables $\varphi_s = 2\pi s d_s/\lambda$ (parte real) y $\alpha_s d_s = 2\pi k_s d_s/\lambda$ (parte imaginaria). Las variables A, B, C, D dependen de las constantes ópticas de la película y del sustrato según las expresiones (ver ecuaciones C.7-C.10):

$$\begin{aligned} A &= a a^* \cosh^2(\alpha_s d_s) + b b^* \sinh^2(\alpha_s d_s) & C &= a^* b + a b^* \\ B &= a a^* \sinh^2(\alpha_s d_s) + b b^* \cosh^2(\alpha_s d_s) & D &= i(a b^* - a^* b) \sinh(\alpha_s d_s) \cosh(\alpha_s d_s) \end{aligned}$$

Con a y b definidos según las ecuaciones (ver ecuaciones C-4 y C-5):

$$a = 2 \cos(\delta) + i \left(N + \frac{1}{N} \right) \sin(\delta)$$

$$b = -\left(\frac{N_s}{N} + \frac{N}{N_s}\right) \text{Sen}(\delta) + i\left(N_s + \frac{1}{N_s}\right) \text{Cos}(\delta)$$

Promediando en la fase debido al sustrato, al igual que la ecuación (36), se obtiene:

$$T = \frac{8}{\sqrt{4(A+D)(B+D) - C^2}} \quad (40)$$

Usando la aproximación $k/n \ll 1$ válida para toda la región espectral en estudio se obtiene la ecuación (41). Ésta ecuación está presente en Gonzales Leal *et al* (2002) [5] y representa la transmitancia de una película delgada sobre un sustrato absorbente.

$$T = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)(1 - R_3)x_s x}{1 + R_1 R_2 x^2 - R_1 R_3 x^2 x_s^2 - R_2 R_3 x_s^2 - 2\sqrt{R_1}\sqrt{R_2}(1 - R_3 x_s^2) \text{Cos}(\phi)x} \quad (41)$$

$$x = \text{Exp}(-\alpha d) \quad (\text{Absorbancia de la película}) \quad (42.a)$$

$$\alpha = 4\pi k/\lambda \quad (\text{coeficiente de absorción de la película}) \quad (42.b)$$

$$x_s = \text{Exp}(-\alpha_s d_s) \quad (\text{Absorbancia del sustrato}) \quad (42.c)$$

$$\alpha_s = 4\pi k_s/\lambda \quad (\text{Coeficiente de absorción del sustrato}) \quad (42.d)$$

$$\phi = 4\pi n d/\lambda \quad (\text{Fase de la película}) \quad (42.e)$$

$$R_1 = \left(\frac{1-n}{1+n}\right)^2 \quad (\text{Coeficiente de reflexión de Fresnel en la interface aire-película}) \quad (42.f)$$

$$R_2 = \left(\frac{n-s}{n+s}\right)^2 \quad (\text{Coeficiente de reflexión de Fresnel en la interface película-sustrato}) \quad (42.g)$$

$$R_3 = \left(\frac{s-1}{s+1}\right)^2 \quad (\text{Coeficiente de reflexión de Fresnel en la interface sustrato-aire}) \quad (42.h)$$

En los métodos de caracterización óptica se pueden usar distintos modelos de reflectancia y transmitancia. Algunos modelos resaltan por su brevedad y sencillez. Al respecto, Barybin y Shapovalov (2010) [11] dudan de la correcta obtención de la ecuación (41) (presentada en el artículo de Swanepoel para el caso de $x_s = 1$ y $k_s = 0$). En su trabajo Barybin y Shapovalov (B&S) desarrollan una teoría matricial para estructuras multicapas, basada en la teoría electromagnética. Ésta teoría es la misma que se encuentra en Macleod [8] diferenciándose únicamente en la notación empleada.

B&S encuentran la siguiente ecuación para la transmitancia (ver ecuación 43 en la referencia [11]):

$$T = \frac{16n_0n_3|\tilde{n}_1|^2|\tilde{n}_2|^2}{L_+ + MCos(2\beta_1d_1 - \varphi_+) + F_+(\beta_2d_2)} \quad (43)$$

B&S aplican el llamado *promedio del instrumento* de la siguiente forma: señalan al término $F_+(\beta_2d_2)$ como responsable de las oscilaciones rápidas debidas al substrato grueso y estiman su valor medio. Ya que el valor medio del término $F_+(\beta_2d_2)$, es encontrado despreciable, la transmitancia final queda expresada por la ecuación (44). (Ver ecuaciones 43 a 59 en la referencia [11]).

$$T = \frac{16n_0n_3|\tilde{n}_1|^2|\tilde{n}_2|^2}{L_+ + MCos(2\beta_1d_1 - \varphi_+)} \quad (44)$$

La ecuación (43) es idéntica a la ecuación (39). Por tanto la diferencia principal entre las ecuaciones (41) y (44) radica en la forma tomar el promedio del instrumento sobre las oscilaciones rápidas.

La figura 2.11 presenta gráficas comparativas de las curvas de transmitancia simuladas usando las ecuaciones (41), (44) y la curva obtenida con el promedio usando una función de peso gaussiano (ver ecuación 35) para un ancho de banda espectral $\Delta\lambda = 1nm$. Los parámetros usados en la simulación corresponden a la tabla 2.1.

Tabla 2.1. Parámetros seleccionados para la simulación.

Substrato		Película delgada	
Series de Cauchy	Absorción	Sellmeier	Cauchy- Urbach
$s(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}$ $A = 1.49$ $B = 0$ $C = 10^9 nm^4$	$\alpha_s = 0$	$n(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - E}}$ $D = 4.5$ $E = 5 \times 10^4 nm^2$	$\alpha(E) = \alpha_0 E e^{\beta(E-E_0)}$ $\alpha_0 = 1.2 \times 10^4 cm^{-1} eV^{-1}$ $E = 3.5 eV$ $\beta = 2 eV^{-1}$
Espesor: $d = 1mm$		Espesor: $250 nm$	

Para una mejor comparación se grafica el error relativo de los promedios (ecuaciones 41 y 44) con respecto a la curva obtenida con el promedio gaussiano. Se considera el

promedio gaussiano como el mejor acercamiento que describe la física detrás de la falta de resolución del instrumento.

El error relativo porcentual estimado para la transmitancia de Barybin y Shapovalov es aproximadamente 2.5%, con un error sistemático alrededor del 1%. Mientras que la transmitancia obtenida promediando en la fase (ecuación 41) presenta un error relativo menor a 1%. Ambos promedios son muy cercanos. Sin embargo el promedio en la fase es mejor.

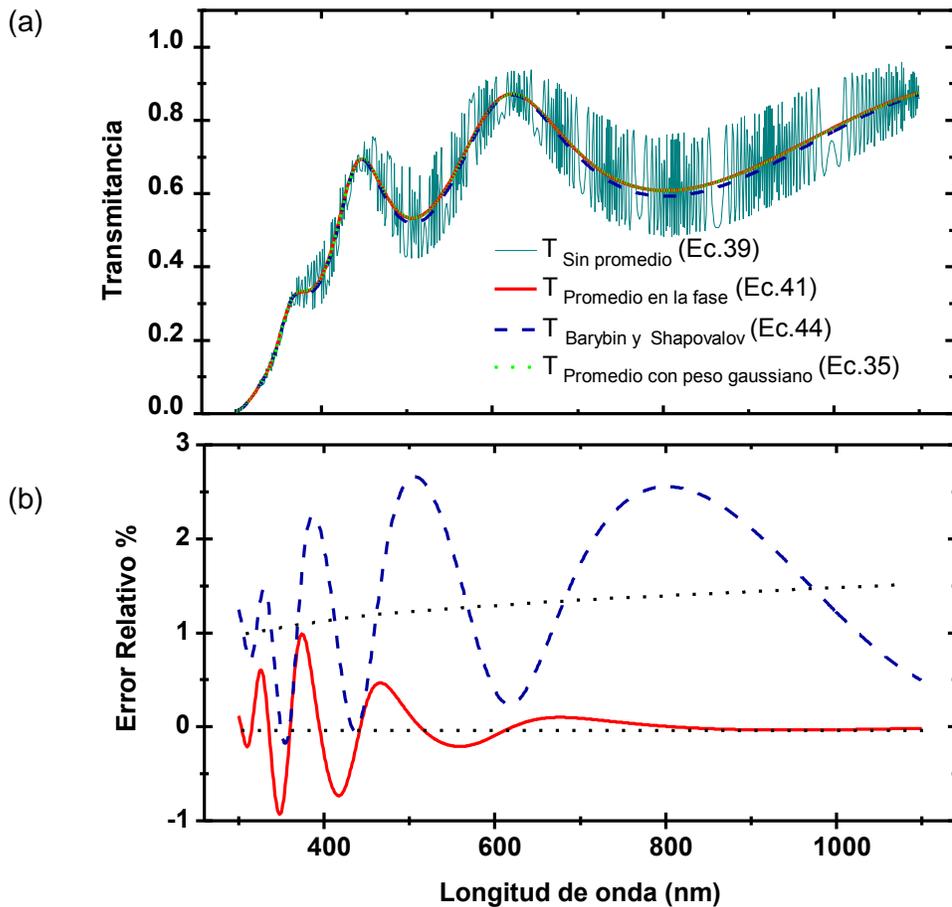


Figura 2.11. Espectros de transmitancias simulados. Los distintos promedios son graficados para su comparación (a). Error relativo porcentual de los promedios respecto al promedio con peso gaussiano. El error sistemático sigue la línea punteada como guía para los ojos(b)

2.3.2. Película delgada sobre sustrato transparente

En el caso de un sustrato transparente ($k_s = 0$) el índice de refracción del sustrato sólo posee parte real $N_s = s$. Por lo tanto la fase es también un número real.

$$\delta_s = 2\pi s d_s / \lambda = \phi_s \quad (45)$$

Si el sustrato no absorbe entonces $x_s = 1$ en la ecuación (41) y de este modo se obtiene la expresión (46) presente en Swanepoel (1983) [1]. Dicha ecuación representa la transmitancia de una película delgada sobre un sustrato transparente.

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos \phi + Dx^2} \quad (46)$$

Las variables presentes se definen:

$$A = 16n^2 s \quad (47.a)$$

$$B = (n+1)^3 (n+s^2) \quad (47.b)$$

$$C = 2(n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (47.c)$$

$$D = (n-1)^3 (n-s^2) \quad (47.d)$$

$$\phi = 4\pi n d / \lambda \quad (\text{Fase de la película}) \quad (47.e)$$

$$x = \text{Exp}(-\alpha d) \quad (\text{Absorbancia de la película}) \quad (47.f)$$

$$\alpha = 4\pi k / \lambda \quad (\text{Coeficiente de absorción de la película}) \quad (47.g)$$

CAPÍTULO 3

MÉTODO ÓPTICO DE CARACTERIZACIÓN

En el presente capítulo describiremos el método de caracterización de Swanepoel. Luego, como una mejora a este método, expondremos los planteamientos del método propuesto por Guerra J A [2] para sustratos transparentes. Esta técnica será extendida utilizando las ecuaciones desarrolladas anteriormente para el caso del sistema película delgada sobre sustrato ligeramente absorbente.

3.1. Método de Swanepoel

Fue desarrollado por Swanepoel (1983) basado en el trabajo previo de Manifacier *et al* (1976). Es un método comúnmente usado que determina el índice de refracción $n(\lambda)$, el coeficiente de absorción $\alpha(\lambda)$ y el espesor d de una película delgada a partir de envolventes del espectro de transmitancia. Éstas envolventes son la herramienta clave del método y se obtienen de las franjas de interferencia en el espectro. Un aspecto importante de este método es la sencillez con que se calculan las constantes ópticas. Esto es posible porque Swanepoel reduce la expresión de transmitancia usando la aproximación $k/n \ll 1$ válida dentro del rango en estudio.

Swanepoel plantea un cálculo directo que resuelva las constantes ópticas a partir del espectro de transmitancia de la película delgada descrita en la ecuación (46):

$$T = T(\lambda, s, n, \alpha, d)$$

El sustrato es considerado transparente y su transmitancia $T_s(\lambda)$ se define por la ecuación (48).

$$T_s = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (48)$$

Ahora se despeja el índice de refracción del sustrato $s(\lambda)$ y se tiene:

$$s = \frac{1}{T_s} + \left(\frac{1}{T_s^2} - 1 \right)^{1/2} \quad (49)$$

Pero el espectro de transmisión del sistema película-sustrato no resuelve por sí solo los parámetros $n(\lambda)$, $\alpha(\lambda)$ y d desconocidos. Esto se aprecia en la ecuación (50) donde

$T^{medido}(\lambda)$ es la transmitancia medida y $T(\lambda; n, \alpha, d)$ su correspondiente expresión analítica.

$$T^{medido}(\lambda) - T(\lambda; n, \alpha, d) = 0 \quad (50)$$

Se necesitan dos ecuaciones más para completar el sistema de ecuaciones que resuelva todos los parámetros desconocidos. Swanepoel completa el sistema con la ecuación de la envolvente máxima (51.a) y mínima (51.b). Los valores $T_M^{medido}(\lambda)$ y $T_m^{medido}(\lambda)$ son *medidas virtuales* (expresión introducida por Swanepoel) que se obtienen construyendo las envolventes del espectro para cada longitud de onda. Las envolventes son construidas mediante interpolación de los puntos extremos de las franjas de interferencia.

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (51.a)$$

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (51.b)$$

Swanepoel divide el espectro de transmitancia en tres regiones: transparente, débil y media y de absorción fuerte (ver figura 3.1). En cada una de ellas calcula las constantes ópticas como se describe a continuación.

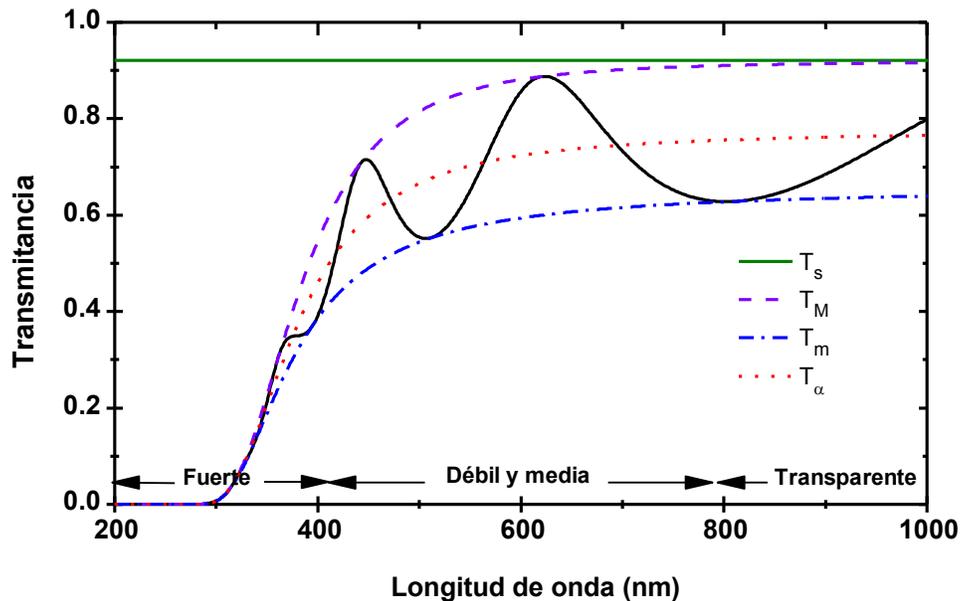


Figura 3.1. Espectro de transmisión simulado con los parámetros de la tabla 2.1. Acompañan la gráfica las curvas envolventes $T_m(\lambda)$ y $T_M(\lambda)$ y la curva de transmitancia libre de interferencias $T_\alpha(\lambda)$.

I. Región transparente

Se caracteriza porque en ella el coeficiente de absorción es prácticamente nulo, entonces $\alpha = 0$ y $x = 1$. Las envolventes en esta región se expresan:

$$T_M = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (52.a)$$

$$T_m = \frac{4n^2 s}{n^4 + n^2(s^2 + 1) + s^2} \quad (52.b)$$

En esta región, los máximos de las franjas de interferencia coinciden con los valores de $T_s(\lambda)$. Así lo indica la equivalencia entre (48) y (52.a).

De la ecuación (52.b) se despeja el índice de refracción de la película en función de $s(\lambda)$ y $T_m(\lambda)$, obteniéndose:

$$M = 2s/T_m - (s^2 + 1)/2$$
$$n = \left[M + (M^2 - s^2)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (53)$$

II. Región de absorción débil y media

En esta región el coeficiente de absorción ya no es despreciable $\alpha \neq 0$ y $x < 1$. Swanepoel propone un artificio para deshacerse de la absorbancia $x(\lambda)$: sustraer las inversas de las envolventes mínima y máxima según la ecuación (54).

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A} \quad (54)$$

Con C y A definidas en las ecuaciones (47.c) y (47.a) respectivamente.

De la ecuación (54) se calcula el índice de refracción de la película:

$$V = 2s \frac{(T_M - T_m)}{T_M T_m} + \frac{(s^2 + 1)}{2}$$
$$n = \left[V + (V^2 - s^2)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (55)$$

El espesor también se calcula a partir de las franjas de interferencia. Para esto se usa la ecuación (56):

$$2nd = m\lambda \quad (56)$$

Entre dos máximos (o mínimos) adyacentes con índices n_1 y n_2 y longitud de onda λ_1 y λ_2 respectivamente, el espesor tiene la siguiente expresión:

$$d = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1} \right) \quad (57)$$

Sin embargo, la ecuación (57) es sensible a errores en el índice de refracción. Por esta razón, Swanepoel corrige el cálculo del espesor usando un método gráfico. Este método consiste en graficar los puntos $l/2$ versus n/λ (ver ecuación 58). La gráfica se aproxima a una recta con pendiente igual a $2d$ y corta al eje y en el punto m_1 .

$$l/2 = 2d(n/\lambda) - m_1 \quad l = 1, 2, 3, \dots \quad (58)$$

La absorbancia $x(\lambda)$ se despeja de la forma cuadrática de las expresiones de las envolventes $T_M(\lambda), T_m(\lambda)$, la curva que pasa por los puntos de inflexión $T_i(\lambda)$ o la curva de transmitancia sin interferencias $T_\alpha(\lambda)$. En el presente estudio, revisaremos dos caminos para resolver $x(\lambda)$: usando $T_M(\lambda)$ y $T_\alpha(\lambda)$. La primera según Swanepoel es la mejor curva para el cálculo del coeficiente de absorción. Mientras que Guerra (2010) considera la segunda curva como la más robusta para hallar el coeficiente de absorción.

Resolviendo la forma cuadrática de la ecuación (51.a) se obtiene la expresión (59) de la absorbancia.

$$E_M = \frac{8n^2 s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - s^2)$$

$$x = \frac{E_M - \left[E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - s^2)} \quad (59)$$

La transmitancia libre de interferencias $T_\alpha(\lambda)$ es el valor medio de la ecuación (46) en la fase ϕ de 0 a 2π .

$$T_\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{Ax}{B - Cx \cos \phi + Dx^2} d\phi$$

$$T_\alpha = \frac{Ax}{\left[(B - Cx \cos \phi + Dx^2)(B + Cx \cos \phi + Dx^2) \right]^{1/2}} \quad (60)$$

Despejando $x(\lambda)$ se obtiene:

$$G = \frac{128n^4s^2}{T_\alpha^2} + n^2(n^2-1)^2(s^2-1)^2 + (n^2-1)^2(n^2-s^2)^2$$

$$x = \frac{\left[G - \left[G^2 - (n^2-1)^6(n^2-s^4)^2 \right]^{1/2} \right]^{1/2}}{(n-1)^3(n-s^2)} \quad (61)$$

Por último se calcula el coeficiente de absorción $\alpha(\lambda)$ de su definición, reemplazando en (47.f) la absorbancia $x(\lambda)$ y el espesor obtenidos.

III Región de Absorción Fuerte

En esta región las franjas del patrón de interferencia desaparecen y hace imposible la obtención de n y x independientemente. Swanepoel estima el índice de refracción extrapolando los valores calculados en las otras regiones del espectro. Se calcula la absorbancia usando las ecuaciones (59) o (61).

3.2. Método de Gonzales Leal

Swanepoel en su trabajo desarrolla un método que determina las constantes ópticas de películas delgadas de forma directa y elegante. El método, sin embargo, depende del número de franjas de interferencia en su espectro y hace los cálculos suponiendo al sustrato totalmente transparente. Gonzales Leal *et al* (2002) [5] señala la importancia de considerar la absorción debida al sustrato. Por este motivo desarrolla la ecuación de transmitancia y las expresiones de las envolventes para el caso de una película delgada sobre un sustrato ligeramente absorbente. Sus resultados muestran mejoras en el cálculo del índice de refracción y del espesor.

La transmitancia de una película delgada sobre un sustrato absorbente está dada por la ecuación (41).

$$T = T(\lambda; s, x_s, n, \alpha, d)$$

Una forma de conocer el índice de refracción $s(\lambda)$ y la absorbancia $x_s(\lambda)$ del sustrato consiste en resolver el sistema (62):

$$T_s^{medido}(\lambda) - T_s(\lambda; s, x_s) = 0$$

$$R_s^{medido}(\lambda) - R_s(\lambda; s, x_s) = 0$$
(62)

Aquí $T_s(\lambda, s, x_s)$ y $R_s(\lambda, s, x_s)$ son las expresiones de transmitancia y reflectancia del sustrato (ver ecuación 2 y 3 en la referencia [5]).

Las envolventes cuando el sustrato presenta absorción están dadas por las ecuaciones (63.a) y (63.b).

$$T_M = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)(1 - R_3)x_s x}{1 + R_1 R_2 x^2 - R_1 R_3 x^2 x_s^2 - R_2 R_3 x_s^2 + 2r_1 r_2 (1 - R_3 x_s^2)x}$$
(63.a)

$$T_m = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)(1 - R_3)x_s x}{1 + R_1 R_2 x^2 - R_1 R_3 x^2 x_s^2 - R_2 R_3 x_s^2 - 2r_1 r_2 (1 - R_3 x_s^2)x}$$
(63.b)

El índice de refracción $n(\lambda)$ se calcula restando las inversas de las envolventes.

$$N = \frac{1}{2} \left[\frac{4s(T_M - T_m)}{T_M T_m} \left(\frac{[1 - (s - 1/s + 1)^2] x_s}{1 - (s - 1/s + 1)^2 x_s^2} \right) + (1 + s^2) \right]$$

$$n = [N + (N^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2}$$
(64)

El coeficiente de absorción $\alpha(\lambda)$ se despeja de la definición (42.a), donde la absorbancia se halla resolviendo la forma cuadrática en $x(\lambda)$ de las curva $T_M(\lambda)$.

3.3. Método propuesto por Guerra J A (2010)

En la sección anterior fue presentado el método de Swanepoel y su modificación para sustratos absorbentes. Vimos que el acercamiento para extraer las constantes ópticas de la película delgada depende críticamente de la existencia de un número considerable de franjas de interferencia en el espectro. A partir de la propuesta de Swanepoel de usar las envolventes, Guerra [2] sigue un camino diferente para calcular las constantes ópticas. Los principales problemas del método de Swanepoel constituyen la motivación detrás del método desarrollado por Guerra. Con su planteamiento, el cual detallaremos a continuación, Guerra consigue dar un método que no depende críticamente del número de franjas y logra calcular adecuadamente las constantes ópticas.

Algunos problemas presentes en el método de Swanepoel son:

- Construir las envolventes requiere de suficientes máximos y mínimos en el espectro. Pero cuanto más delgada es la película (alrededor de los 300nm) el número de franjas de interferencia disminuyen y la distancia entre extremos aumenta.

D. Poelman y P. F. Smet (2003) [12] señalan la dificultad de realizar una interpolación que construya las envolventes cuando los extremos aparecen cada vez más distanciados. Las envolventes así construidas no son las correctas dada la inherente elección arbitraria que implica interpolar puntos cada vez más separados.

- Las envolventes y la curva de transmitancia se tocan en puntos tangentes y no necesariamente en los extremos de las franjas de interferencia. Este efecto se acentúa en la región de absorción fuerte (ver figura 3.2).
- El cálculo del índice de refracción es sensible a variaciones en las envolventes usando el método de Swanepoel.
- Aumentar el espesor de la película incrementa el número de franjas de interferencia en el espectro. Sin embargo, cuanto mayor es el espesor, el espectro sufre un corrimiento en la región del UV o región fundamental (ver figura 3.3). Este corrimiento es debido al límite de captación de señal por parte del detector. Es decir, cuando el espesor de la película crece y con él la absorción, la intensidad transmitida es reducida hasta el límite y el detector pierde información.

Este es el compromiso fuerte (mencionado en el Capítulo 1) entre la determinación del coeficiente de absorción en la región fundamental, el número de franjas disponibles y el espesor de la película. Y dice que aumentar el espesor de la película genera mayor número de franjas de interferencia, pero al mismo tiempo se pierde información de la transmitancia en la región de altas energías. Con la información perdida, no se puede seguir con los cálculos que determinan el coeficiente de absorción en dicha región.

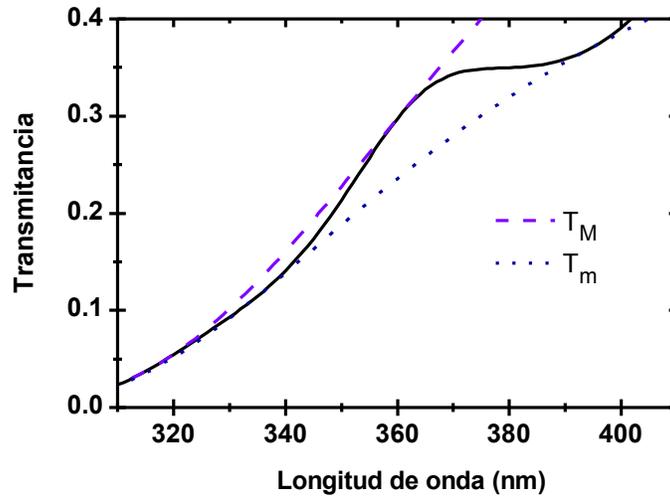


Figura 3.2. Las envolventes tocan el espectro de transmitancia tangencialmente. Este efecto es visible con mayor énfasis en la región de absorción fuerte.

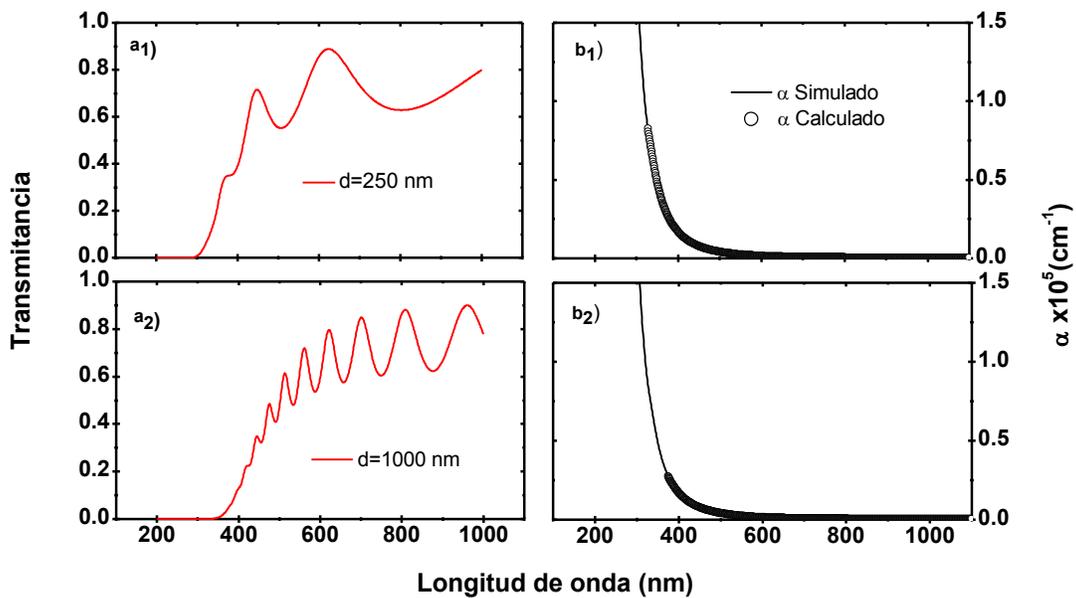


Figura 3.3. Transmitancias simuladas para distintos espesores y sus respectivos coeficientes de absorción. El rango del coeficiente de absorción estimado se reduce al mismo tiempo que se incrementa el espesor de la película.

El método que Guerra presenta se limita al caso de una película delgada sobre substrato transparente. Como se mencionó anteriormente, este método usa las envolventes pero supera la dependencia en las franjas de interferencia. Para caracterizar a la película,

Guerra sigue además un camino basado en las ideas de Chambouleyron y E. Birgin [13] que propone usar información *a priori* sobre el índice de refracción y realizar un ajuste de curva para hallar las constantes ópticas.

En su propuesta, Guerra modela el índice de refracción usando las series de Cauchy (65). Por su parte, la absorbancia $x(\lambda)$ es expresada en función del índice de refracción y de la curva $T_\alpha(\lambda)$ según la ecuación (67).

$$n(\lambda) = A_n + \frac{B_n}{\lambda^2} + \frac{C_n}{\lambda^4} \quad (65)$$

La ecuación (66) presente en Connell y Lewis (1973) [14] representa también la transmitancia sin interferencias. Sin embargo, esta expresión no es equivalente a la expresión de $T_\alpha(\lambda)$ presente en Swanepoel (ver ecuación 60). Mientras la ecuación (60) se obtiene tomando el valor medio de $T(\lambda, s, n, \alpha, \phi)$ sobre ϕ , la ecuación (66) suma las intensidades de los rayos transmitidos y reflejados sin tener en cuenta la interferencia de las múltiples reflexiones.

$$T_\alpha = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)(1 - R_3)x}{1 - R_1R_2x^2 - R_2R_3 - R_1R_3(1 - 2R_2)x^2} \quad (66)$$

$$R_1 = \left[\frac{(1-n)}{(1+n)} \right]^2 \quad (\text{reflectancia aire-película})$$

$$R_2 = \left[\frac{(n-s)}{(n+s)} \right]^2 \quad (\text{reflectancia película-substrato})$$

$$R_3 = \left[\frac{(s-1)}{(s+1)} \right]^2 \quad (\text{reflectancia substrato-aire})$$

Despejando $x(\lambda)$ se obtiene:

$$\begin{aligned} P &= (R_1 - 1)(R_2 - 1)(R_3 - 1) \\ Q &= 2T_\alpha(R_1R_2 + R_1R_3 - 2R_1R_2R_3) \\ x &= \frac{\left[P + \left[P^2 + 2QT_\alpha(1 - R_2R_3) \right]^{1/2} \right]}{Q} \end{aligned} \quad (67)$$

El coeficiente de absorción se deriva de la absorbancia $x(\lambda)$. Guerra propone utilizar la curva de la transmitancia libre de interferencias para el cálculo de $x(\lambda)$ y no las curvas envolventes $T_M(\lambda)$ y $T_m(\lambda)$. Ésta elección no es arbitraria sino que está basado en el cálculo del error de la absorbancia Δx :

$$\Delta x = \left. \frac{\partial x}{\partial n} \right|_{\lambda, T_j} \Delta n + \left. \frac{\partial x}{\partial T_j} \right|_{\lambda, n} \Delta T_j$$

El error Δx se evalúa derivando $x(\lambda)$ respecto al índice de refracción $n(\lambda)$ y multiplicando por el error Δn de la variable, luego se deriva respecto a la curva $T_j(\lambda)$ y se multiplica por el error ΔT_j (con $j = M, m, \alpha$). Así, para una longitud de onda dada, el error en el cálculo de la absorbancia Δx depende del error del índice de refracción Δn y del error ΔT_j . Una gráfica al respecto muestra que el menor error en Δx es alcanzado cuando su cálculo depende de la curva de transmitancia sin interferencias (ver figura 3.3).

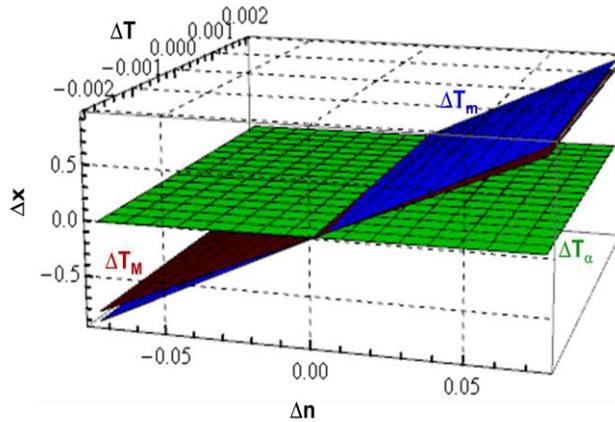


Figura 3.3. La gráfica muestra Δx en función del error del índice de refracción Δn y del error en la curva ΔT para una longitud de onda de $500nm$. El menor error en la absorbancia se alcanza con la curva T_α .

Continuando con la descripción del método propuesto por Guerra, el índice de refracción (65) y la absorbancia (67) son reemplazadas en la expresión de la transmitancia (ver ecuación 46). Ahora la transmitancia se escribe:

$$T = T(\lambda; A_n, B_n, C_n, d, T_\alpha)$$

Los parámetros desconocidos A_n, B_n, C_n y d son estimados por medio de un ajuste no lineal tal que sea satisfecha la siguiente condición:

$$\text{Minimizar } \sum_{i=1}^N \left[T^{\text{medido}}(\lambda_i) - T(\lambda_i, A_n(\lambda_i), B_n(\lambda_i), C_n(\lambda_i), d(\lambda_i), T_\alpha(\lambda_i)) \right]^2$$

Sin embargo, realizar un ajuste de mínimos cuadrados usando un modelo no lineal como es la ecuación de transmitancia, requiere de un método iterativo que encuentre los parámetros A_n, B_n, C_n y d óptimos que ajusten la curva a los datos medidos. Para garantizar que se ha llegado a satisfacer la condición de mínimo global y no local, se

inician las iteraciones a partir de valores iniciales apropiados. Esto permite un mejor ajuste pues el mínimo global es alcanzado con menor dificultad.

De esta forma el problema ha sido reducido a la obtención de los parámetros A_n, B_n, C_n y d por medio de un ajuste de la curva de transmitancia al espectro medido. Con los parámetros se determina el índice de refracción y el espesor. La absorbancia se calcula reemplazando los parámetros encontrados en la ecuación (68).

$$x(\lambda) = \frac{\left[A^2 - (2BC - C^2)T_\alpha^2 \right] - \sqrt{\left[A^2 - (2BC - C^2)T_\alpha^2 \right]^2 - 4D^2 B^2 T_\alpha^4}}{2D^2 T_\alpha^2} \quad (68)$$

La ecuación (68) es equivalente a la ecuación (61) porque ambas surgen de despejar $x(\lambda)$ de la expresión de la transmitancia sin interferencia (ver ecuación 60). Las variables A, B, C y D son funciones de $n(\lambda)$ y $s(\lambda)$ definidos según (47.a), (47.b), (47.c) y (47.d) respectivamente.

Finalmente se calcula el coeficiente de absorción a partir de la absorbancia y el espesor calculados:

$$\alpha(\lambda) = -\text{Log}[x(\lambda)]/d \quad (69)$$

3.4. Método de Guerra extendido: propuesta de la presente tesis

El método directo y elegante que propuso Swanepoel (1983) [1] para determina las constantes ópticas fue mejorado por Guerra (2010) [2]. En su trabajo, Guerra supera las limitaciones de Swanepoel pero todavía no toma en cuenta en sus cálculos la absorción debida al sustrato. Muchos sustratos comerciales como el vidrio presentan cierta absorción en la región espectral. Cuando los cálculos no consideran esta absorción, conllevan a errores en las constantes ópticas estimadas.

La intención del presente trabajo es extender el método de Guerra de modo que los cálculos consideren la absorción debida al sustrato. Se propone un acercamiento para conocer las constantes del sustrato absorbente y se plantea una rutina recursiva que halle los valores correctos del espesor, índice de refracción y coeficiente de absorción.

Caracterización del sustrato absorbente

La transmitancia dada por la ecuación (41) depende de los parámetros:

$$T = T(\lambda; s, x_s, n, \alpha, d)$$

El índice de refracción $s(\lambda)$ y la absorbancia $x_s(\lambda)$ del sustrato no pueden ser resueltos con una sola medida de transmitancia del sustrato. Es necesaria una medida de reflectancia para completar el sistema según la ecuación (62) y poder despejar los parámetros.

Si no se dispone de una medida de reflectancia, el presente método propone obtener información de $s(\lambda)$ a partir de las ecuaciones de dispersión de los vidrios ópticos. Éstos se pueden encontrar en las hojas de datos del fabricante (ver Apéndice D).

La transmitancia del sustrato solo está dada por la ecuación (36):

$$T_s = \frac{(1 - R_1)^2 x_s}{1 - R_1^2 x_s^2}$$

Usando la aproximación: $k_s \ll s$:

$$R_1 \approx (s - 1)^2 / (s + 1)^2$$

Conociendo la ecuación de dispersión para $s(\lambda)$ y la transmitancia medida $T_s(\lambda)$, la absorbancia del sustrato se despeja obteniéndose:

$$x_s = \frac{-(1 - R_1)^2 + \sqrt{(1 - R_1)^4 + 4R_1^2 T_s^2}}{2R_1^2 T_s} \quad (70)$$

Cálculo de las constantes ópticas

Siguiendo el acercamiento propuesto por Guerra (2010), se modela el índice de refracción usando las series de Cauchy (65). En caso de una película delgada depositada sobre un sustrato absorbente, la expresión de la absorbancia $x(\lambda)$ depende del índice de refracción, de la curva $T_\alpha(\lambda)$ y de la absorbancia debida al sustrato $x_s(\lambda)$.

La transmitancia libre de interferencia según la ecuación (71) fue obtenida siguiendo el cálculo propuesto en Connell y Lewis (1973) [14] extendido para el caso de un substrato absorbente. A partir de ella se despeja la expresión de la absorbancia $x(\lambda)$ y se obtiene la ecuación (72).

$$T_{\alpha} = \frac{(1-R_1)(1-R_2)(1-R_3)x_s x}{(1-R_3R_2x_s^2) - (R_1R_2 + R_1R_3(1-2R_2)x_s^2)x^2} \quad (71)$$

$$P = (R_1 - 1)(R_2 - 1)(R_3 - 1)x_s$$

$$Q = 2T_{\alpha}(R_1R_2 + R_1R_3x_s^2 - 2R_1R_2R_3x_s^2)$$

$$x(\lambda) = \frac{P + \sqrt{P^2 + 2QT_{\alpha}(1 - R_2R_3x_s^2)}}{Q} \quad (72)$$

Reemplazando (65) y (72) en (41) se obtiene la transmitancia en función de los parámetros del ajuste:

$$T = T(\lambda; A_n, B_n, C_n, d, T_{\alpha})$$

El problema se reduce a encontrar los parámetros A_n , B_n , C_n y d que ajusten la ecuación de transmitancia a los datos medidos.

Con los valores hallados para los parámetros del índice de refracción, se calcula la absorbancia por la ecuación (60) de la transmitancia libre de interferencias. Luego, conociendo la absorbancia para cada longitud de onda y el espesor hallado en el ajuste, se halla el coeficiente de absorción por la ecuación (69).

Los pasos descritos para el método de Guerra fueron seguidos para el cálculo de las constantes ópticas. Pero ahora las ecuaciones han sido extendidas para considerar el término de la absorción del substrato en los cálculos. El método de Guerra extendido con las ecuaciones presentes en esta sección, ha sido implementado en Wolfram Mathematica. El ajuste de la curvase logra a través del comando *NonlinearModelFit*, cuyo algoritmo de ajuste halla los valores finales de las variables A_n , B_n , C_n y d que mejor ajustan las curvas. Este comando posee entradas que permiten elegir que algoritmo de ajuste utilizar, así como el número de iteraciones y la precisión numérica.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Guerra (2010) plantea un método para extraer las constantes ópticas del espectro de transmitancia. En este trabajo se modificó el método propuesto por Guerra introduciendo en las ecuaciones la absorbancia del sustrato que sostiene a la película delgada. Ahora será puesto a prueba el funcionamiento del método de Guerra extendido para calcular las constantes ópticas. Este capítulo se divide en dos secciones. Primero se muestran los resultados obtenidos de aplicar el método a un espectro de transmisión simulado. Se comparan las constantes ópticas calculadas con aquellas halladas usando los métodos de Gonzales Leal y Guerra sin modificar. En segundo lugar se presentan los resultados obtenidos de la caracterización de películas delgadas amorfas de SiC:H producidas en el laboratorio.

4.1. Simulación numérica

Para poner a prueba el método de Guerra extendido se simularon espectros de transmitancia de dos sistemas: una película depositada sobre sustrato transparente y una película depositada sobre sustrato ligeramente absorbente. La resolución espectral fue simulada con una función de peso de tipo Gaussiano con desviación estándar $\sigma = \Delta\lambda/2 = 0.5 \text{ nm}$. Los límites de la integral numérica se tomaron mayor o igual al rango $[-3\sigma, 3\sigma]$ ya que dentro de él se encuentra el 99.7% de la distribución Gaussiana.

Los parámetros ópticos usados en la simulación se muestran en la tabla 4.1. Los valores de la película en la simulación son típicos de materiales semiconductores amorfos con un amplio ancho de banda como SiC, SiN, AlN [15]. Para el sustrato ligeramente absorbente el índice de refracción fue extraído de los datos del vidrio B270, obtenidos de la hoja técnica del fabricante (ver Anexo D). La absorbancia del sustrato se obtiene de reemplazar el índice de refracción y la transmitancia medida $T_s(\lambda)$ en la ecuación (70). El sustrato transparente se asumió de fluoruro de calcio CaF₂ cuyas medidas de $T_s(\lambda)$ se conocen y cuyo índice de refracción se extrae de los datos de la hoja técnica (ver Anexo D). La absorbancia del CaF₂ se obtiene por la ecuación (70) al reemplazar la transmitancia medida y el índice de refracción del mismo.

Tabla 4.1. Parámetros usados en la simulación.

Substrato Absorbente		Substrato Transparente	
Índice de refracción	Absorción	Índice de refracción	Absorción
Series de Laurent*		Sellmeier	
$s^2(\lambda) = A_0 + A_1\lambda^2 + \frac{A_2}{\lambda^2} + \frac{A_3}{\lambda^4} + \frac{A_4}{\lambda^6} + \frac{A_5}{\lambda^8}$		$N^2 = 1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2 - C_3}$	
$A_0 = 2.2878$ $A_1 = -9.3149 \times 10^{-3}$ $A_2 = 1.0986 \times 10^{-2}$ $A_3 = 4.8465 \times 10^{-4}$ $A_4 = -3.3945 \times 10^{-5}$ $A_5 = 1.6959 \times 10^{-6}$		$B_1 = 5.6758 \times 10^{-1}$ $B_2 = 4.7109 \times 10^{-1}$ $B_3 = 3.8484$ $C_1 = 2.5264 \times 10^{-3}$ $C_2 = 1.0078 \times 10^{-2}$ $C_3 = 1.2005 \times 10^{-3}$	
Datos T_s Ec. (70)		Datos T_s Ec. (70) $x_s \approx 1$	
Película (Espesor: $d = 250nm$)			
Índice de refracción		Coeficiente de absorción	
Sellmeier	Series de Cauchy	Cauchy-Urbach	
$n(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1}}$ $B_1 = 1.49$ $C_1 = 5 \times 10^4 nm^2$	$n(\lambda) = A_n + \frac{B_n}{\lambda^2} + \frac{C_n}{\lambda^4}$ $A_n = 2.34$ $B_n = 4.79 \times 10^4 nm^2$ $C_n = 2.15 \times 10^9 nm^4$	$\alpha(\lambda) = \alpha_0 e^{\beta(E-E_0)}$ $\alpha_0 = 1.2 \times 10^4 cm^{-1} eV^{-1}$ $E_0 = 3.5 eV$ $\beta = 2 eV^{-1}$	

* Constantes de dispersión de la serie de Laurent (ver apéndice D).

Los índices de refracción pueden ser típicamente descritos usando series de Laurent, Cauchy o la ecuación de Sellmeier. En el caso de la película, se modeló el índice de refracción con la ecuación de Sellmeier. Sin embargo, esta ecuación puede ser expandida en series de Cauchy hasta el término con λ^{-4} (ver tabla 4.1). Ambas formas de expresar el mismo parámetro óptico son correctas. En el método de Guerra extendido, el índice de refracción se recupera usando el modelo de la serie de Cauchy.

El espectro de transmisión simulado para el caso de la película sobre un substrato absorbente fue usado para aplicar los métodos y recuperar las constantes ópticas. Se emplearon el método de Gonzales Leal y el método de Guerra extendido.

Para emplear el método de Gonzales Leal, se construyeron las envolventes del espectro usando un algoritmo de interpolación en los valores extremos de las franjas de interferencia. Con las envolventes construidas, se hicieron los cálculos para hallar el

índice de refracción y el coeficiente de absorción de la película para cada longitud de onda.

El método de Guerra extendido también fue aplicado para extraer las constantes ópticas del espectro simulado. Fueron usadas las envolventes construidas anteriormente y con ellas se calculó la curva $T_{\alpha}(\lambda)$. Por medio de un ajuste se hallan los parámetros A_n, B_n, C_n de la serie de Cauchy que modelan el índice de refracción, se halló el espesor d y se calculó el coeficiente de absorción. El método de iteración usado en el ajuste fue de Gauss-Newton.

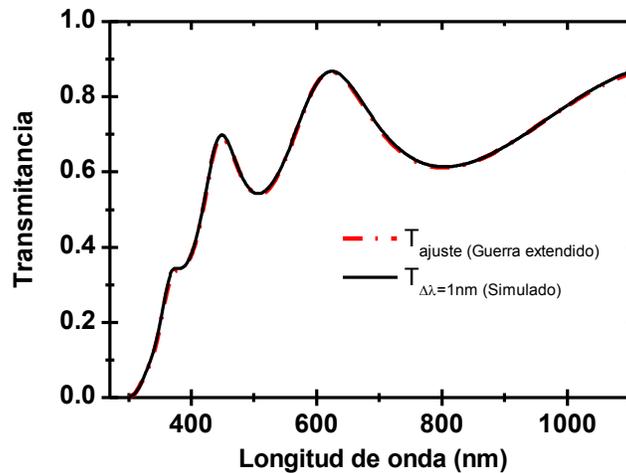


Figura 4.1. Transmitancia simulada para una película delgada sobre sustrato ligeramente absorbente (línea sólida) y su correspondiente ajuste usando el método de Guerra extendido (línea cortada).

Las constantes ópticas halladas por ambos métodos fueron graficadas en función de la longitud de onda. Para una mejor comparación de los resultados obtenidos, se graficó junto a los parámetros recuperados tanto el índice de refracción y el coeficiente de absorción empleados en la simulación (ver figuras 4.2 y 4.3).

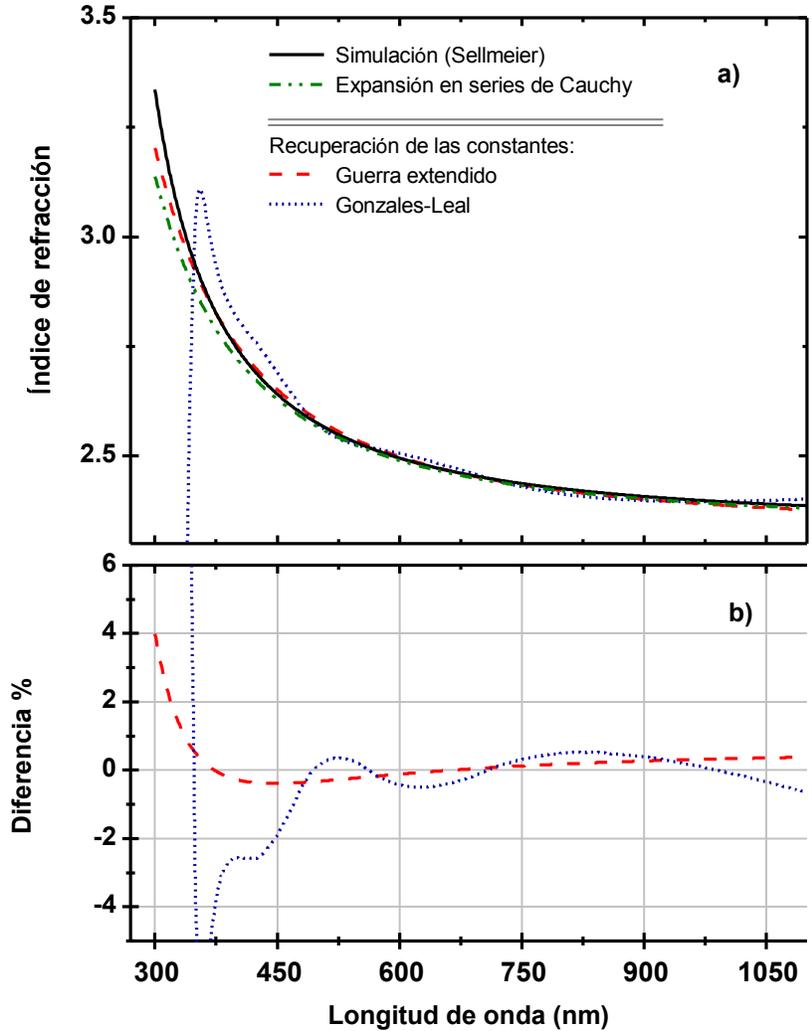


Figura 4.2. Índice de refracción calculado por el método de Guerra extendido y el método de Gonzales-Leal. La línea sólida es el modelo de Sellmeier usado en la simulación. También está la curva de su correspondiente expansión en series de Cauchy (a). Diferencia relativa porcentual entre los índices de refracción obtenidos y Sellmeier (b).

En la figura 4.2 se aprecia la superioridad del acercamiento planteado por Guerra frente al método de Swanepoel (o su modificación por Gonzales Leal) para recuperar el índice de refracción. Mientras que Gonzales Leal tiene un error sistemático superior a 4% y luego oscila llegando hasta el 1% de error en la región VIS-NIR, el método de Guerra extendido logra recuperar el índice de refracción en la región de absorción fuerte. Para longitudes de onda cortas (menores a los 450 nm) el método extendido tiene un error sistemático máximo de 4% respecto al valor teórico, el cual disminuye para toda la región VIS-NIR y se hace menor a 0.5%.

El error cometido es sistemático y se debe a la difícil tarea de recuperar las constantes ópticas en la región de absorción fuerte donde desaparecen las franjas del espectro. A diferencia de Gonzales Leal que comete un mayor error, el método de Guerra extendido posee el menor error sistemático. Esto sugiere entonces la existencia de un límite en el cual Gonzales Leal no funciona correctamente ya que para un mejor cálculo requiere de suficientes franjas de interferencia en la región de absorción fuerte.

Siguiendo la sugerencia presente en Swanepoel [1] para hallar el índice de refracción en la región de absorción fuerte, se extrapolan los valores del índice de refracción calculados en la región de 500 a 1100 nm usando Gonzales Leal. Esto se realiza con una función de extrapolación que sigue el modelo de Cauchy y cuyos parámetros se estiman por el método de mínimos cuadrados. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 4.2.

Para calcular el espesor se usaron los máximos y mínimos de las franjas de interferencias como se detalló en la sección 3.1. El error cometido se redujo aplicando el método gráfico.

El espesor promedio obtenido es:

$$d_{Gonzales\ Leal} = 251.42 \pm 3.10\ nm \text{ (Error relativo 1.24\%)}$$

Tabla 4.2. Índice de refracción obtenido usando el método de Gonzales Leal. Para su comparación se muestran los valores usados en la simulación.

	Valores simulados	Resultados del ajuste	Intervalo de confianza al 95%
A_n	2.34	2.33 ± 0.006	[2.319, 2342]
B_n	$4.79 \times 10^4\ nm^2$	$5.43 \times 10^4 \pm 0.37 \times 10^4\ nm^2$	[4.69×10^4 , 3.61×10^4]
C_n	$2.15 \times 10^9\ nm^4$	$3.15 \times 10^9 \pm 0.46 \times 10^9\ nm^4$	[2.24×10^9 , 4.06×10^9]

Para efectos comparativos, se presentan en la tabla 4.3 el espesor y el índice de refracción hallados por el método de Guerra extendido. Aparecen los parámetros de Cauchy hallados en el ajuste, y los parámetros correspondientes a la extensión de la ecuación de Sellmeier en series de Cauchy. La estimación presenta un nivel de confianza del 95 %. Nótese el gran parecido entre los valores simulados y los resultados del ajuste.

Tabla 4.3. Comparación entre los parámetros simulados y los obtenidos por el método de Guerra extendido.

	Valores simulados	Resultados del ajuste	Intervalo de confianza al 95%
d	250 nm	250.04 ± 0.10 nm	[249.84, 250.24]
A_n	2.34	2.33 ± 0.001	[2.328, 2333]
B_n	$4.79 \times 10^4 \text{ nm}^2$	$5.30 \times 10^4 \pm 0.07 \times 10^4 \text{ nm}^2$	$[5.26 \times 10^4, 5.54 \times 10^4]$
C_n	$2.15 \times 10^9 \text{ nm}^4$	$2.18 \times 10^9 \pm 0.10 \times 10^9 \text{ nm}^4$	$[2.19 \times 10^9, 2.38 \times 10^9]$

Los parámetros A_n, B_n, C_n hallados por el método de Guerra extendido son los que más se parecen a los valores simulados. Por otro lado, el espesor calculado por el método de Gonzales Leal difiere en 1.42 nm del valor simulado y tiene un error relativo de 1.24%. Mientras que el espesor calculado por el método de Guerra extendido difiere en 0.04 nm valor teórico de la simulación y tiene un error relativo 0.04%.

En la figura 4.3 se presentan el coeficiente de absorción obtenido por ambos métodos. Se incluye la gráfica el coeficiente de absorción simulado por la ecuación de Cauchy-Urbach. La escala usada es logarítmica para evidenciar mejor las diferencias entre las curvas obtenidas por ambos métodos.

En la región de 300 a 700 nm se aprecia la concordancia entre los coeficientes de absorción estimados y el valor teórico. Sin embargo, alrededor de los 700 nm en adelante las diferencias se hacen notables y los valores estimados se alejan del valor teórico. Nótese además que el error en el coeficiente de absorción no guarda correspondencia con el error sistemático del índice de refracción. Ambos errores ocurren en distintas regiones de longitudes de onda.

Tanto el método de Guerra extendido como el método de Gonzales Leal obtienen resultados similares para el coeficiente de absorción. Este hecho se resalta si se aprecian las curvas en una gráfica en escala lineal (ver figura 4.4). Por tanto, la diferencia sólo es apreciable en escala logarítmica.

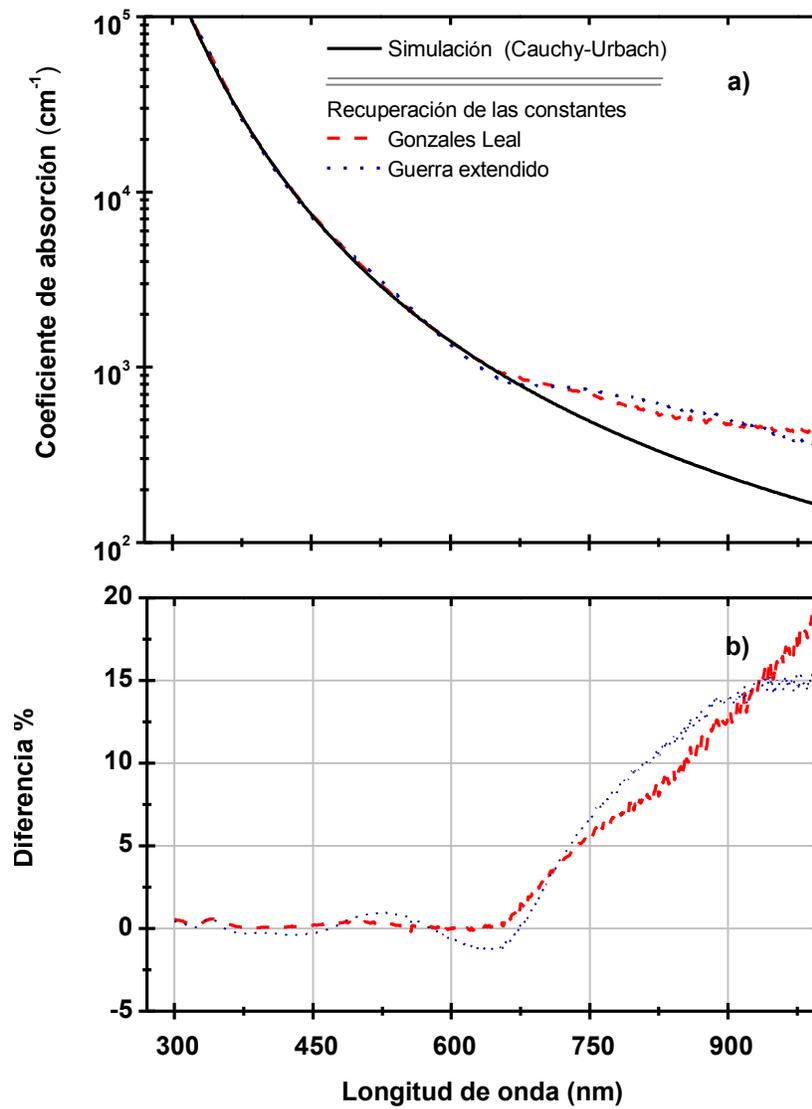


Figura 4.3. Coeficientes de absorción obtenidos por el método de Guerra extendido y el método de Gonzales-Leal (a). Diferencia relativa porcentual entre los logaritmos de las curvas obtenidas y el logaritmo del coeficiente de absorción usado simulación (b).

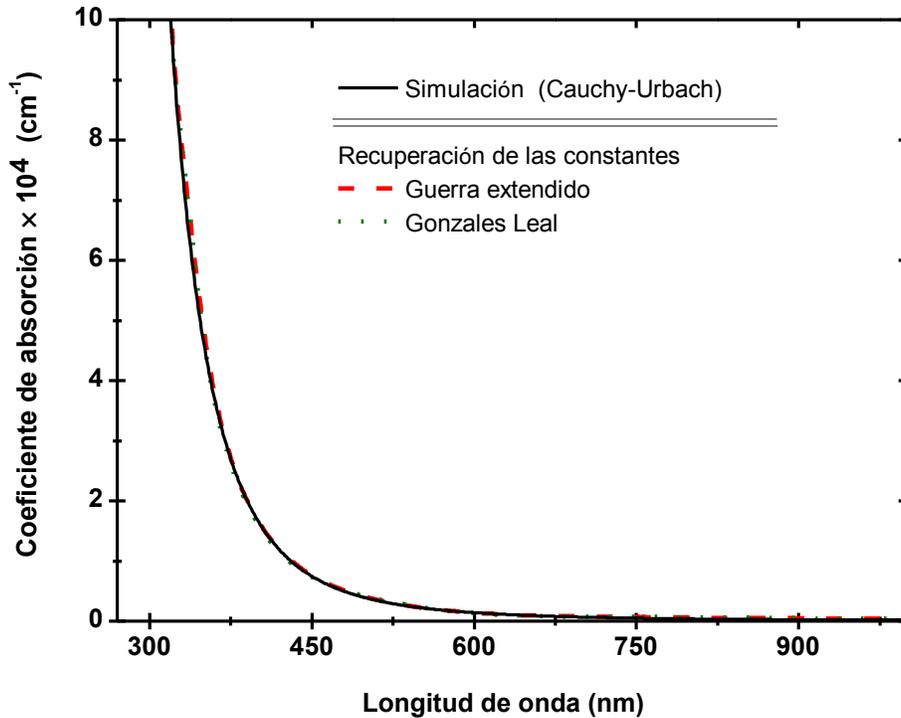


Figura 4.4. Coeficientes de absorción obtenidos por ambos métodos en escala lineal.

A continuación se comparan el método propuesto por Guerra y la extensión que del mismo se presenta para el caso de un sustrato absorbente.

Fueron simulados dos espectros de transmisión: uno correspondiente al caso de una película delgada sobre sustrato ligeramente absorbente (vidrio-B270), y otro correspondiente al caso de la misma película delgada sobre un sustrato transparente (CaF_2). Las simulaciones fueron realizadas usando los parámetros ópticos definidos en la tabla 4.1. Posteriormente, tanto el método de Guerra como su extensión presentada en este trabajo, fueron aplicados a los espectros simulados. La figura 4.5 muestra las gráficas del índice de refracción y el coeficiente de absorción hallados en cada caso.

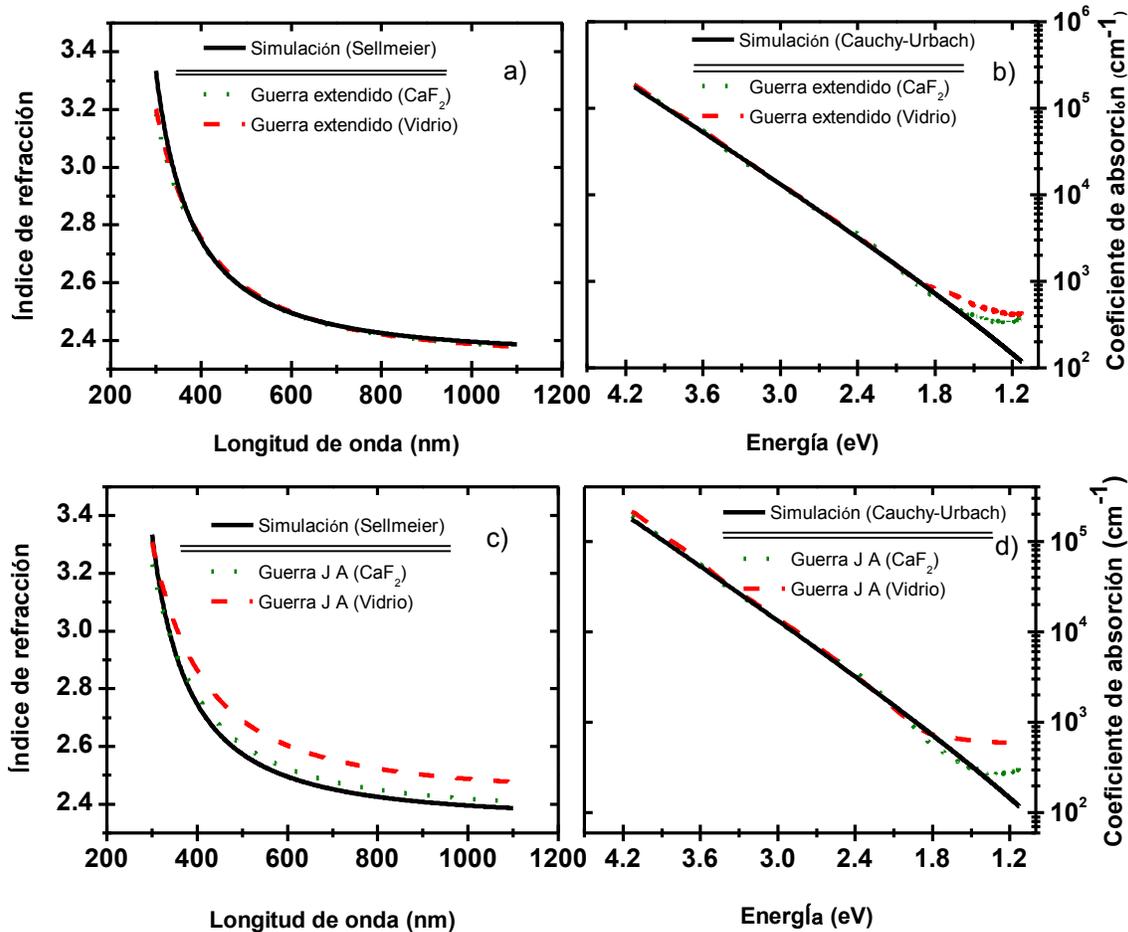


Figura 4.5. Comparación de las constantes ópticas obtenidas al aplicar el método de Guerra (línea punteada) y el método de Guerra extendido (línea cortada). Se muestra también el valor usado en la simulación (línea sólida).

Las figuras c) y d) presentan las constantes ópticas obtenidas usando el método sin considerar la absorción debida al sustrato. El método de Guerra fue aplicado a ambos espectros simulados: película delgada-vidrio B270 y película delgada-CaF₂.

Si bien no hay diferencias relevantes entre los coeficientes de absorción obtenidos para ambos espectros con respecto al valor simulado, el índice de refracción sí presenta diferencias que deben discutirse. La figura c) muestra para el caso de la película delgada sobre vidrio B270, que el índice de refracción obtenido por el método de Guerra presenta valores sobreestimados con respecto al índice de refracción usado en la simulación. En el

caso de la película delgada sobre CaF_2 , el índice de refracción obtenido es muy cercano al valor usado en la simulación, pero todavía se aprecia una leve diferencia.

Por otro lado, el espesor que Guerra estima para la película delgada sobre CaF_2 es 2.81 nm menor que el valor teórico (250 nm), y para la película delgada sobre vidrio B270, el espesor hallado es 10.04 nm menor que el valor teórico:

$$d_{\text{Guerra}}(\text{vidrio}) = 239.96 \pm 0.10 \text{ nm}$$

$$d_{\text{Guerra}}(\text{CaF}_2) = 247.19 \pm 0.12 \text{ nm}$$

En las figuras a) y b) se presentan el índice de refracción y el coeficiente de absorción hallados usando el método extendido. Este método fue aplicado en los dos espectros simulados: película delgada - vidrio B270 y película delgada - CaF_2 .

La figura a) muestra una gran similitud entre los índices de refracción obtenidos para ambos espectros. Este resultado concuerda con el hecho de haber usado los mismos parámetros ópticos para la película delgada en ambas simulaciones. Además los índices de refracción estimados corresponden excelentemente con el modelo de Sellmeier usado en la simulación. La figura b) presenta en escala logarítmica los coeficientes de absorción el coeficiente de absorción usado en la simulación. En la región de bajas energías aparece una diferencia entre los valores estimados y el valor teórico. Este es un error sistemático que se presenta en el método de Guerra y por estar en la región transparente del espectro no es crítico para el cálculo de la región de absorción fundamental.

El espesor obtenido usando el método de Guerra extendido es:

$$d_{\text{Guerra extendido}}(\text{vidrio}) = 250.04 \pm 0.10 \text{ nm}$$

$$d_{\text{Guerra extendido}}(\text{CaF}_2) = 250.33 \pm 0.12 \text{ nm}$$

El método sin considerar la absorción del sustrato comete un error de hasta 10.04 nm en la estimación del espesor de la película delgada cuando ésta se halla sobre un sustrato que presenta absorción. El error cometido en caso de la película sobre CaF_2 es mucho menor.

A diferencia del método anterior, los espesores hallados por el método extendido se diferencian del valor usado en la simulación en 0.04 nm cuando el sustrato es vidrio y 0.33 nm cuando el sustrato es CaF_2 . El error cometido es menor a 1 nm .

Los resultados obtenidos indican que cuando el método no toma en cuenta la absorción debida al sustrato, se obtienen valores sobreestimados del índice de refracción y valores desestimados del espesor de la película. A partir de las gráficas y de los valores del espesor obtenidos, se aprecia que el sustrato de CaF_2 no es completamente transparente. Sin embargo, para este caso, el método de Guerra que considera al sustrato transparente es válido. Los resultados se aceptan porque el error en la estimación de los parámetros es mínimo respecto al valor teórico y también porque la absorción del CaF_2 es pequeña.

Entonces, tomar en cuenta la absorción del sustrato en los cálculos es importante para evitar errores en el cálculo del índice de refracción y del espesor. La diferencia en los coeficientes de absorción obtenidos es mínima en todos los casos, ya sea que el sustrato posea absorción o no. Los resultados de la simulación muestran que el método de Guerra extendido funciona y alcanza una mejora en la recuperación de las constantes ópticas de la película, sea que ésta se halle sobre un sustrato de vidrio absorbente o de CaF_2 casi transparente.

4.2. Resultados experimentales

En adelante se probará la extensión del método de Guerra propuesta en la tesis para caracterizar películas delgadas producidas en el laboratorio. Se aplicará también el método que no toma en cuenta la absorción del sustrato para comparar los resultados.

Muestras de películas delgadas de carburo de silicio hidrogenado $a\text{-SiC:H}$ fueron preparadas usando la técnica de pulverización catódica de radio frecuencia. La presión base fue de $\sim 10^{-6} \text{ mbar}$. Se usaron targets de SiC de alta pureza de 51 mm de diámetro, en una atmósfera de argón e hidrógeno de ultra alta pureza (99.999%). Las películas delgadas fueron depositadas en un solo experimento sobre tres diferentes sustratos: vidrio de 1.02 mm de espesor, vidrio de 0.17 mm de espesor y CaF_2 de 1.01 mm de espesor.

Los espectros de transmitancia se obtuvieron con un espectrofotómetro Perkin Elmer de doble haz, modelo Lambda 2 UV/VIS/NIR. Las medidas se tomaron a temperatura ambiente y en incidencia normal de luz en el rango de 190 a 1100 nm. La resolución fue de 1nm. También se midieron las transmitancias de los substratos solos para obtener sus parámetros.

El espectro de transmitancia de cada substrato se muestra en la figura 4.6. Nótese que la transmitancia del substrato de vidrio de 1.02 mm y 0.17 mm de espesor presenta atenuación a lo largo de la región de 700 a 1100 nm, a diferencia del CaF₂. Por esto se dice que el vidrio no es un substrato transparente. Obsérvese además que la atenuación en la transmitancia es mayor para el substrato de vidrio con 1.02 mm de espesor y levemente menor para el vidrio con 0.17 mm de espesor.

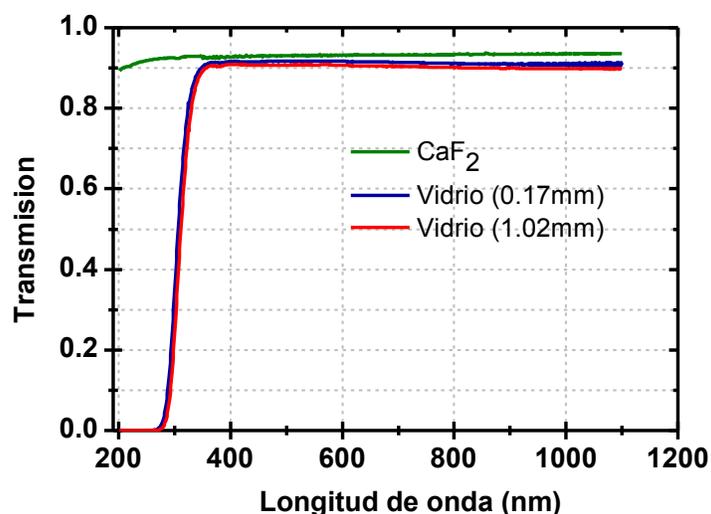


Figura 4.6. Espectros de transmisión óptica de substratos de vidrio grueso y delgado ligeramente absorbentes y un substrato transparente de CaF₂.

En las figuras 4.7, 4.8 y 4.9 se muestran los espectros de transmitancia medidos de las muestras de: película delgada de a-SiC:H depositada sobre vidrio delgado (0.17 mm), vidrio grueso (1.02 mm) y CaF₂ (1.01mm) respectivamente. También se graficaron las curvas de transmitancia obtenidas en el ajuste de la ecuación a los datos. Las figuras 4.7 y 4.8 presentan la curva de ajuste que realiza el método de Guerra extendido para el espectro de transmitancia de la película depositada sobre vidrio. La figura 4.9 muestra la

curva de ajuste obtenida por el método de Guerra para el espectro transmitancia de la película sobre substrato de CaF_2 .

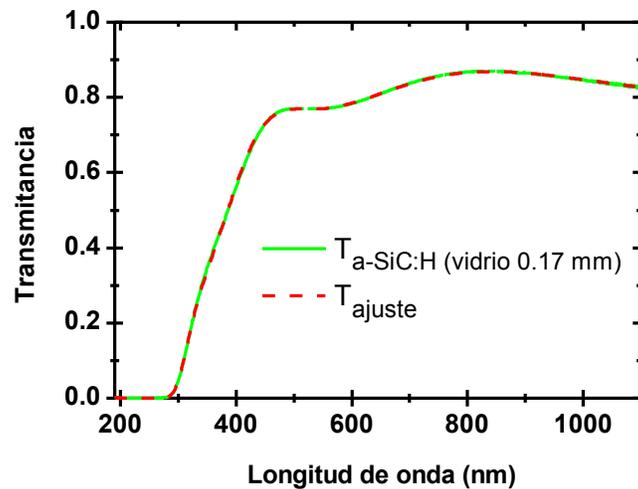


Figura 4.7. Transmitancia medida de $a\text{-SiC:H}$ sobre vidrio delgado de 0.17 mm (línea sólida) y la curva obtenida en el ajuste usando el método de Guerra extendido (línea punteada).

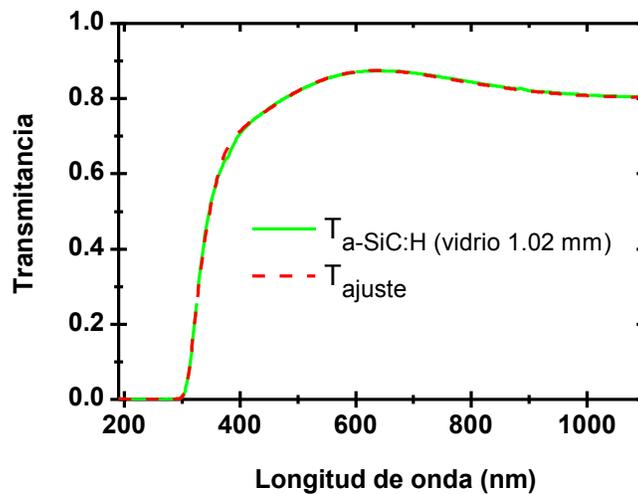


Figura 4.8. Transmitancia medida de $a\text{-SiC:H}$ sobre vidrio grueso de 1.02 mm (línea sólida) y la curva de obtenida en el ajuste usando el método de Guerra extendido (línea punteada).

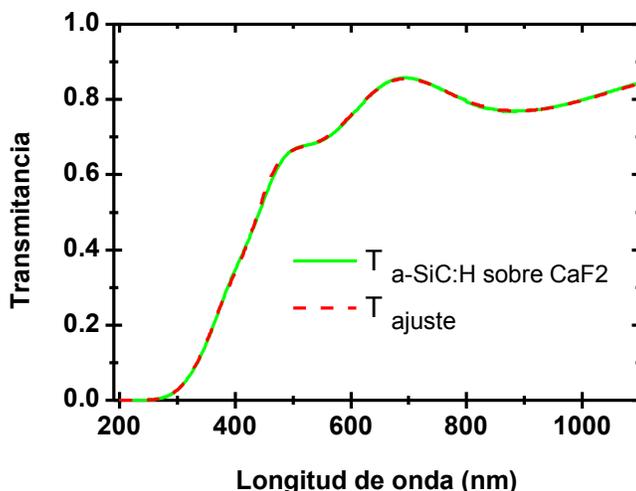


Figura 4.9. Transmitancia medida de *a*-SiC:H sobre CaF₂ (línea sólida) y la curva obtenida en el ajuste por el método propuesto por Guerra (línea punteada).

Las películas delgadas producidas en el laboratorio fueron caracterizadas mediante ambos métodos en estudio. El espesor y el índice de refracción obtenidos por el ajuste de la curva a los datos medidos del espectro de transmitancia, se presentan en la tabla 4.3.

a-SiC:H	Método	Resultados del ajuste		
		Espesor d (nm)	A_n	B_n (nm ²)
CaF ₂	Guerra [4]	378.74 ± 0.29 [378.15, 379.33]*	1.79 ± 0.001 [1.789, 1.793]*	$6.39 \times 10^3 \pm 0.06 \times 10^3$ [6.26 $\times 10^3$, 6.52 $\times 10^3$]*
	Guerra extendido	383.86 ± 0.31 [383.24, 384.47]*	1.77 ± 0.001 [1.767, 1.782]*	$5.34 \times 10^3 \pm 0.02 \times 10^3$ [5.29 $\times 10^3$, 5.39 $\times 10^3$]*
Vidrio 0.17 mm	Guerra [4]	223.02 ± 0.20 [222.62, 223.43]*	1.88 ± 0.001 [1.886, 1.891]*	—
	Guerra extendido	234.59 ± 0.13 [234.32, 234.86]*	1.79 ± 0.001 [1.788, 1.791]*	$6.53 \times 10^3 \pm 0.32 \times 10^3$ [5.89 $\times 10^3$, 7.18 $\times 10^3$]*
Vidrio 1.02 mm	Guerra extendido	169.11 ± 0.18 [168.74, 169.48]*	1.79 ± 0.002 [1.788, 1.796]*	$6.23 \times 10^3 \pm 0.65 \times 10^3$ [4.92 $\times 10^3$, 7.55 $\times 10^3$]*

Tabla 4.3. Valores estimados del espesor y el índice de refracción para cada muestra usando los métodos de Guerra y Guerra extendido. (*) Intervalo de confianza al 95%.

Espesor obtenido para la película de a -SiC:H sobre CaF_2 :

$$d_{\text{Guerra}} = 378.74 \pm 0.29 \text{ nm}$$

$$d_{\text{Guerra extendido}} = 383.86 \pm 0.31 \text{ nm}$$

Espesor obtenido para la película de a -SiC:H sobre vidrio de 0.17 mm :

$$d_{\text{Guerra}} = 223.02 \pm 0.20 \text{ nm}$$

$$d_{\text{Guerra extendido}} = 234.59 \pm 0.13 \text{ nm}$$

Para estimar la diferencia relativa entre los espesores obtenidos por ambos métodos, el valor hallado por el método de Guerra extendido se consideró la medida más cercana a la realidad ya que su cálculo considera la absorción del sustrato. En el caso de la película sobre CaF_2 la diferencia relativa entre los espesores es de 1.33%, mientras que para la película sobre vidrio de 0.17 mm la diferencia relativa es de 4.93%. Nótese que la diferencia relativa aumenta cuando el sustrato absorbe más. La comparación nuevamente muestra que se obtuvieron valores desestimados del espesor cuando el método no considera la absorción del sustrato.

Los parámetros del modelo de Cauchy obtenidos en la caracterización de las películas delgadas se muestran en la tabla 4.3. Estos parámetros A_n y B_n son parecidos en todos los casos excepto para la película de a -SiC:H depositada sobre vidrio (0.17 mm) y caracterizada con el método de Guerra para sustratos transparentes. En este caso, el parámetro A_n está sobreestimado con respecto a los valores hallados por el método de Guerra extendido y el parámetro B_n fue excluido por tener un error de estimación grande.

En la figura 4.10 se muestran el índice de refracción y el coeficiente de absorción obtenido para la película delgada de a -SiC:H. Las gráficas a) y b) muestran los resultados del método de Guerra que no toma en cuenta la absorción del sustrato. Éste es utilizado para caracterizar la película delgada sobre CaF_2 y sobre vidrio delgado (0.17 mm). Las gráficas c) y d) presentan los resultados obtenidos utilizando la extensión del método de Guerra para caracterizar a la película delgada en los casos de las tres muestras producidas.

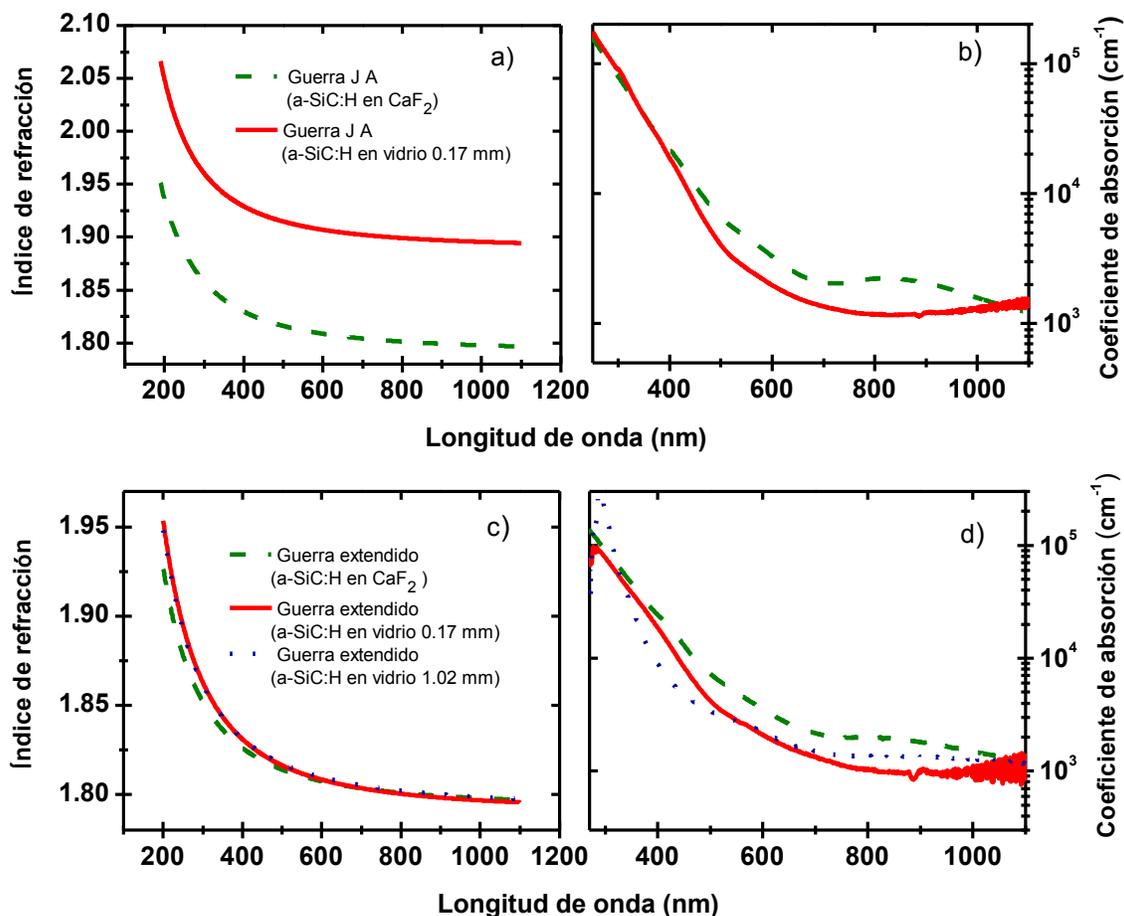


Figura 4.10. Se muestran el índice de refracción y el coeficiente de absorción obtenidos de aplicar ambos métodos en estudio a los espectros medidos de todas las muestras.

También se presenta la figura 4.11 donde comparamos en una gráfica ambos métodos en estudio, a partir de sus resultados cuando se aplican a los datos medidos de una muestra. Las figuras a) y b) presentan el índice de refracción y el coeficiente de absorción obtenidos para la película delgada depositada sobre CaF_2 . En las figuras c) y d) se muestran igualmente las constantes ópticas obtenidas para la película delgada depositada sobre vidrio de 0.17 mm de espesor. Las gráficas se disponen para comparar ambos métodos.

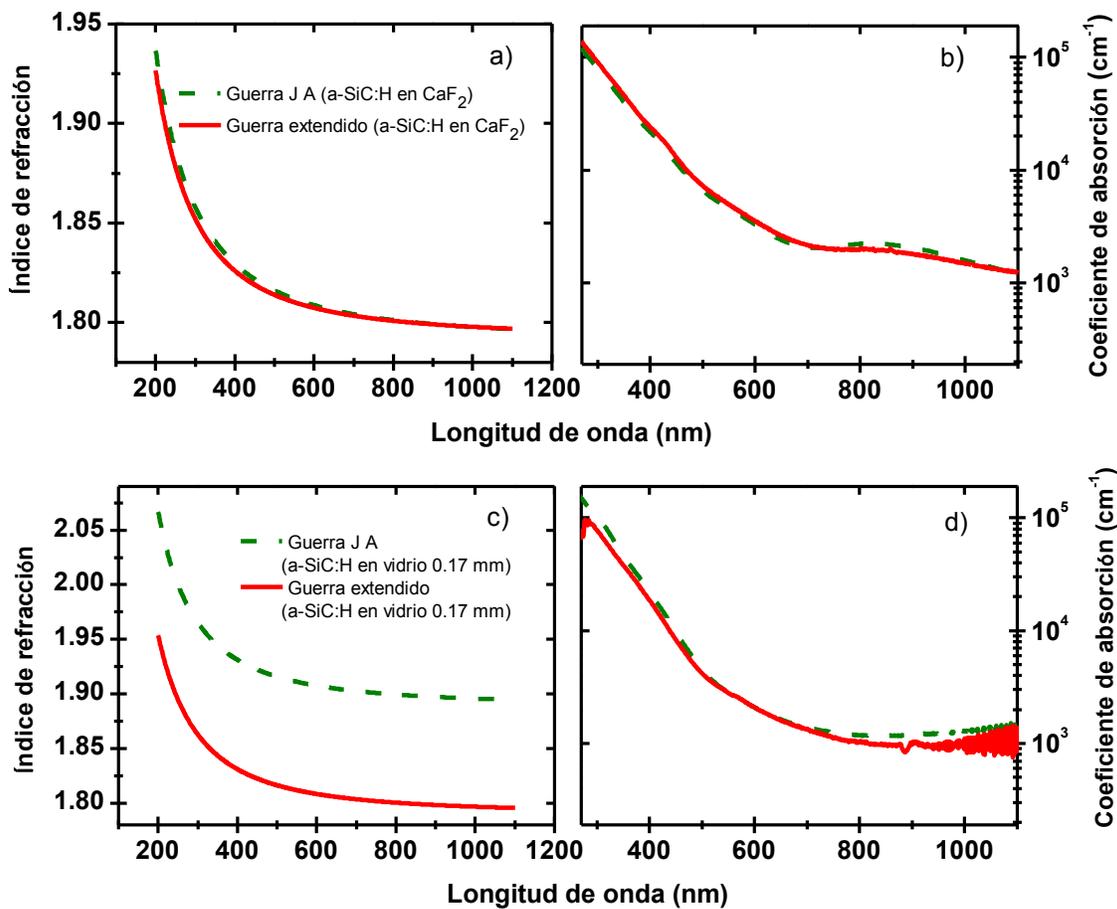


Figura 4.11. Se comparan las constantes ópticas halladas por el método de Guerra y el método de Guerra extendido. En primer lugar para la película de *a*-SiC:H depositada sobre CaF₂, y en segundo lugar para la película de *a*-SiC:H depositada en vidrio delgado.

En el experimento se produjo la misma película delgada de *a*-SiC:H que se depositó al mismo tiempo sobre tres diferentes substratos colocados en diferentes posiciones para la deposición. Por tanto la similitud entre los índices de refracción hallados usando el método de Guerra extendido concuerda con el experimento pues la película delgada es el mismo material en cada muestra. Esto se aprecia en la figura 4.10.c que presenta índices de refracción casi superpuestos unos sobre otros indicando la tendencia a un solo valor.

Por otro lado, los índices de refracción obtenidos para en la película delgada depositada en CaF₂ usando el método de Guerra y la presente extensión también muestran

resultados similares (ver figura 4.11.a). Esto confirma la validez de ambos métodos para determinar el índice de refracción cuando se tiene un sustrato sin absorción significativa.

Cuando la absorción del sustrato no es considerada en los cálculos, los resultados muestran una vez más que se obtendrán valores sobreestimados del índice de refracción (ver las figuras 4.10.a y 4.11.c). Esto concuerda con las conclusiones presentes en la literatura [5,6] respecto a la influencia del sustrato en la caracterización óptica de la película delgada.

La figura 4.10.d muestran los coeficientes de absorción hallados usando el método de Guerra extendido. Las curvas obtenidas sugieren que la película en estudio no presenta un único valor para el coeficiente de absorción, a diferencia del índice de refracción que tiende a un valor único en todas las muestras. Esto puede deberse a un desorden en los estados localizados o impurezas que afectan la estructura del semiconductor. Estos defectos introducen las diferencias en los coeficientes de absorción hallados en la caracterización de la película delgada en las muestras.

Se puede estar seguro de que el método extendido para sustratos transparentes funciona y encuentra los valores adecuados del coeficiente de absorción, ya que para el caso de la película delgada sobre CaF_2 el coeficiente de absorción hallado por ambos métodos es casi idéntico pues se acercan hasta casi superponerse (ver figura 4.11.b). Este resultado concuerda con la equivalencia entre ambos métodos cuando las muestras consideran el caso de sustratos transparentes. La figura 4.11 también muestra que no hay diferencia relevante entre los coeficientes de absorción estimados para una misma muestra. Esto concuerda con el resultado visto en las simulaciones que muestra que ambos métodos son capaces de hallar adecuadamente el coeficiente de absorción aunque estimen distintos valores para el índice de refracción y el espesor.

Cuando los métodos fueron comparados usando espectros de transmitancia simulados se encontró que el método de Gonzales Leal calculó el espesor de la película delgada con 0.5% de error y los parámetros de Cauchy con 0.4% , 14% y 4.6% de error. Mientras que el espesor obtenido usando el método de Guerra extendido tiene un margen de error de 0.002% respecto al valor usado en la simulación. Similarmente con la extensión propuesta se recuperaron los parámetros del índice de refracción con un error de 0.4% , 10% y 1.3%

respecto al valor usado en la simulación. A partir de los resultados observados se sigue que el método de Guerra extendido es mejor para el cálculo de las constantes ópticas y el espesor de la película delgada.

Si se comparan el método de Guerra para sustratos transparentes con el método extendido para sustratos con absorción, se encuentra que son el índice de refracción y el espesor los parámetros más afectados cuando no se tiene en cuenta la absorción debida al sustrato. El método sin extender estimó el espesor la película delgada sobre vidrio con un error de 4% respecto al valor teórico, mientras que el método de Guerra extendido obtuvo para el espesor un error de 0.02%. En caso del método de Guerra, no solo se incrementa el error en la estimación de los parámetros. También se hallan valores del espesor desestimados y valores del índice de refracción sobreestimados respecto a los valores obtenidos cuando se considera la absorción del sustrato. Sin embargo, la corrección introducida no cambia drásticamente el coeficiente de absorción estimado para la película.

Usando muestras producidas en el laboratorio se obtuvieron espectros de transmisión medidos. Se empleó el método de Guerra extendido para caracterizar la película delgada a partir de los espectros. El espesor y el índice de refracción fueron los parámetros que más se beneficiaron con la corrección introducida al método de Guerra. Mientras que el coeficiente de absorción se halló casi invariable frente a las influencias debidas a la absorción del sustrato.

CAPITULO 5

CONCLUSIONES

En la presente tesis se propuso una extensión al método de Guerra J A (2010) para determinar las constantes ópticas y el espesor de películas delgadas depositadas sobre sustratos ligeramente absorbentes. El presente método ha sido implementado en un programa desarrollado en Wolfram Mathematica y toma en cuenta el efecto de la absorción de luz debido al sustrato que sujeta la película delgada. A diferencia del método de Gonzales Leal *et al* (2002) para casos de sustratos absorbentes, el método de Guerra extendido no depende críticamente de las franjas de interferencia del espectro de transmitancia. Esto constituye una gran ventaja ya que puede aplicarse a espectros de transmitancia de películas delgadas con espesores tales que el espectro de transmitancia presenta pocas franjas de interferencia.

El método propuesto fue puesto a prueba usando espectros de transmitancia simulados de una película delgada sobre distintos sustratos. A partir de estas simulaciones se compararon los métodos de Gonzales Leal, Guerra y la extensión del método de Guerra propuesta en este trabajo. El método de Guerra extendido demostró ser superior al método de Gonzales Leal, el cual presenta un límite en la región de absorción fuerte para calcular valores adecuados del índice de refracción. Por otro lado, ambos métodos lograron estimar el coeficiente de absorción apropiadamente (ver figuras 4.3 y 4.4). El método de Guerra aplicado en el espectro de la película delgada sobre sustratos no transparentes, obtiene valores sobre estimados del índice de refracción y por lo tanto valores desestimados del espesor. Cuando la película delgada está sobre un sustrato absorbente, es el método de Guerra extendido en la presente tesis el que recupera adecuadamente las constantes ópticas, aun cuando el espectro de transmitancia presenta pocas franjas de interferencia.

Con el fin de poner a prueba los métodos presentados en esta tesis fueron producidas películas delgadas de a -SiC:H sobre vidrio delgado (0.17 mm), vidrio grueso (1.02 mm) y CaF_2 (1.01 mm). Posteriormente, se midió el espectro de transmitancia de estas muestras. A partir de los cálculos realizados sobre estos espectros utilizando los diferentes métodos,

se calcularon las constantes ópticas concluyendo lo predicho en las simulaciones previas (ver figuras 4.10 y 4.11).

A la luz del presente trabajo se concluye que la extensión que se hizo al método de Guerra para caracterizar películas delgadas depositadas sobre sustratos con ligera absorción, ha demostrado su efectividad para estimar de forma adecuada el índice de refracción, el coeficiente de absorción y el espesor. Es importante recalcar que con el fin de determinar el ancho de banda de un semiconductor es necesaria una medida precisa del coeficiente de absorción.

REFERENCIAS

- [1] R. Swanepoel R., J. Phys E: Sci Instrum. Vol. 16, (1983) 1214-1222
- [2] Guerra J A, Determination of the optical bandgap of thin amorphous $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ films produced by radio frequency dual magnetron sputtering. Tesis, Facultad de Ciencias, PUCP (2010)
- [3] J. A. Guerra, A Wintersein, O. Erlenbach, G. Galvez, F. De Zela, R. Weingärtner, A. Winnacker, Materials Science Forum Vols. 645-648, (2010) 263-266
- [4] Manificier *et al*, J.Phys. E: Sci. Instrum. Vol. 9 (1976) 1002-4
- [5] Gonzales Leal, *et al*. Appl. Opt. 34. Vol. 41, (2002) 7300-7308
- [6] D. D. Strbac *et al.*, Thin Solid Films, 518 (2010) 5679-5682
- [7] Guerra J A *et al*, J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (2012) (*por publicar*)
- [8] Maclaeod, H. A. Thin-film optical filters, 2^{da} edición. Bristol: Adam Hilger. (1986)
- [9] Technical Note 51721. Thermo Scientific
- [10] Alzate López H, Física de las ondas. 1era edición. Ude. Medellín Colombia (2007).
- [11] A. Barybin & V. Shapovalov, International Journal of Optics, Vol. 2010. Article ID 137572 (2010)
- [12] D. Poelman, & P. F. Smet, 2003. Phys. Lett., Vol. 77, 8 (2000), 1117
- [13] Chambouleyron *et al* 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 3093-102
- [14] G. A. N. Connel and A. S. Lewis, Phys.Status Solidi B, Vol. 60 (1973), 299
- [15] R. Weingärtner. Material Science and Engineering B, 174 (2010) 114-118

APÉNDICES

APÉNDICE A

Incidencia oblicua en medios transparentes

Existen infinitas posibilidades de polarización para el campo eléctrico. Una onda con polarización arbitraria es igual a la suma de dos ondas polarizadas linealmente con componentes eléctricas ortogonales. El campo eléctrico incidente puede tener polarización perpendicular o paralela al plano de incidencia xz .

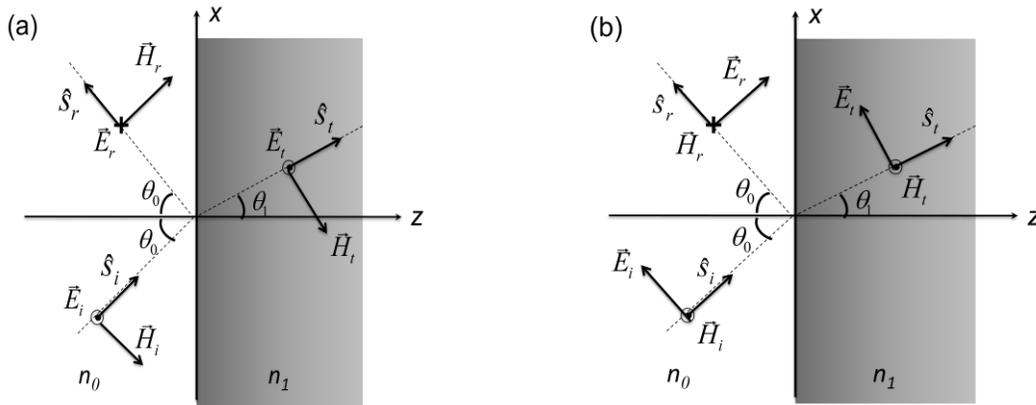


Figura 2.3. (a) Campo eléctrico normal al plano de incidencia (*polarización-s*)
(b) Campo eléctrico paralelo al plano de incidencia (*polarización-p*)

Campo eléctrico paralelo al plano de incidencia (*polarización – p*)

Las amplitudes tangenciales a la superficie son \mathbf{E} y \mathbf{H} respectivamente. Entonces:

$$E_{i,r} = \xi_{i,r} \cos \theta_0 \quad H_{i,r} = n_0 \xi_{i,r} = \frac{n_0 \rho}{\cos \theta_0} E_{i,r}$$

$$E_t = \xi_t \cos \theta_1 \quad H_t = n_1 \xi_t = \frac{n_1 \rho}{\cos \theta_1} E_t$$

Condiciones de frontera en las componentes tangenciales:

1. La componente eléctrica paralela a la superficie es continua.

$$E_i + E_r = E_t \quad (18.a)$$

2. La componente magnética tangente a la superficie es continua

$$H_i - H_r = H_t \quad (18.b)$$

De las condiciones se obtiene:

$$\rho = \frac{E_r}{E_i} = \frac{n_0/\cos\theta_1 - n_1/\cos\theta_0}{(n_0/\cos\theta_0 + n_1/\cos\theta_1)} \quad (19.a)$$

$$\tau = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2n_0/\cos\theta_0}{(n_0/\cos\theta_0 + n_1/\cos\theta_1)} \quad (19.b)$$

$$R = \left[\frac{n_0/\cos\theta_1 - n_1/\cos\theta_0}{(n_0/\cos\theta_0 + n_1/\cos\theta_1)} \right]^2 \quad (20.c)$$

$$T = \frac{4n_1n_0/\cos\theta_0\cos\theta_1}{(n_0/\cos\theta_0 + n_1/\cos\theta_1)^2} \quad (20.d)$$

Verificándose $R + T = 1$.

Campo eléctrico normal al plano de incidencia (*polarización – s*)

Los campos tangentes a la superficie entre ambos medios vienen dados por:

$$\begin{aligned} E_{i,r} &= \xi_{i,r} & H_{i,r} &= n_0 \varphi \xi_{i,r} \cos\theta_0 = n_0 \varphi \cos\theta_0 E_{i,r} \\ E_t &= \xi_t & H_t &= n_1 \varphi \xi_t \cos\theta_1 = n_1 \varphi \cos\theta_1 E_t \end{aligned}$$

Por la condición de frontera:

2. La componente eléctrica paralela a la superficie es continua.

$$E_i + E_r = E_t$$

3. La componente magnética tangente a la superficie es continua.

$$n_0 \cos\theta_0 E_i - n_0 \cos\theta_0 E_r = n_1 \cos\theta_1 E_t$$

De las condiciones se obtiene:

$$\rho = \frac{E_r}{E_i} = \frac{n_0 \cos\theta_0 - n_1 \cos\theta_1}{(n_0 \cos\theta_0 + n_1 \cos\theta_1)} \quad (21.a)$$

$$\tau = \frac{E_t}{E_i} = \frac{2n_0 \cos\theta_0}{(n_0 \cos\theta_0 + n_1 \cos\theta_1)} \quad (21.b)$$

$$R = (n_0 \cos\theta_0 - n_1 \cos\theta_1)^2 / (n_0 \cos\theta_0 + n_1 \cos\theta_1)^2 \quad (22.c)$$

$$T = \frac{n_1}{n_0} \tau^2 = \frac{4n_0 n_1 \cos \theta_0 \cos \theta_1}{(n_0 \cos \theta_0 + n_1 \cos \theta_1)^2} \quad (22.d)$$

Y se verifica $R + T = 1$.

Admitancia óptica modificada

Por conveniencia en la notación se introduce la admitancia óptica modificada:

$$\eta = H/E \quad (23)$$

Incidencia normal: $\eta = N \varphi$

Incidencia oblicua: $\eta = N \varphi / \cos \theta$ (polarización-p) y $\eta = N \varphi \cos \theta$ (polarización-s)

Medios sin absorción: $\eta = N$

Usando esta notación, cualquier caso de incidencia se expresa:

$$R = (\eta_0 - \eta_1)^2 / (\eta_0 + \eta_1)^2 \quad T = 4\eta_0 \eta_1 / (\eta_0 + \eta_1)^2$$

APÉNDICE B

Transmitancia de un substrato grueso

La matriz característica de un volumen rodeado de aire como se presenta en la figura 2.6 es la ecuación (B.1). ;

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\delta_s) & \frac{i}{\eta_s} \text{Sen}(\delta_s) \\ i\eta_s \text{Sen}(\delta_s) & \cos(\delta_s) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

La admitancia óptica del aire está dada por $\eta_o = \eta_m = \wp$. En la transmitancia dada por la ecuación (35) se reemplazan los elementos matriciales B y C y la admitancia óptica del aire. De esta forma se obtiene la expresión (B.4) de la transmitancia del volumen.

$$B = \cos\delta_s + \frac{i}{N_s} \text{Sen}\delta_s \quad (\text{B.2})$$

$$C = iN_s\wp \text{Sen}\delta_s + \wp \cos\delta_s \quad (\text{B.3})$$

$$T_{sm} = \frac{4}{(B' + C')(B' + C')^*} \quad (\text{B.4})$$

El denominador de (B.4) es el producto de $(B' + C')$ por su conjugado dado por la ecuación (A.5).

$$(B' + C')(B' + C')^* = \left[2\cos(\delta_s) + i\left(N_s + \frac{1}{N_s}\right)\text{Sen}(\delta_s) \right] \left[2(\cos(\delta_s))^* - i\left(N_s + \frac{1}{N_s}\right)^* (\text{Sen}(\delta_s))^* \right] \quad (\text{B.5})$$

La fase del volumen es un número complejo de la forma $\delta_s = \varphi_s - i\alpha_s d_s$. Con parte real $\varphi_s = 2\pi s d_s / \lambda$ y parte imaginaria $\alpha_s d_s = 2\pi k_s d_s / \lambda$

Se usan las siguientes relaciones trigonométricas de los ángulos complejos:

$$(\cos(\delta))^* = \cos(\delta^*) \quad \text{Sen}(ix) = i\text{Sinh}(x) \quad \cos(ix) = \text{Cosh}(x)$$

Así, la expresión (B.5) se simplifica y se obtiene:

$$(B+C)(B+C)^* = 2\text{Re}[a]\text{Senh}(2\alpha_s d_s) + 2\text{Im}[a]\text{Sen}(2\phi_s) + \frac{1}{2}\text{Cos}(2\phi_s)(4 - aa^*) + \frac{1}{2}\text{Cosh}(2\alpha_s d_s)(4 + aa^*) \quad (\text{B.6})$$

Aquí la variable a es la expresión (B.7) que depende del índice de refracción del substrato.

$$a = \left(N_s + \frac{1}{N_s} \right) \quad (\text{B.7})$$

Multiplicando el numerador y el denominador de la ecuación (B.4) por $2e^{-\alpha_s d_s}$ entonces:

$$T_{sm} = \frac{8e^{-\alpha_s d_s}}{2e^{-\alpha_s d_s} (B' + C') (B' + C')^*}$$

Con denominador:

$$2e^{-\alpha_s d_s} (B+C)(B+C)^* = 4\text{Re}[a]e^{-\alpha_s d_s} \text{Senh}(2\alpha_s d_s) + 4e^{-\alpha_s d_s} \text{Im}[a]\text{Sen}(2\phi_s) + e^{-\alpha_s d_s} \text{Cos}(2\phi_s - aa^*) + e^{-\alpha_s d_s} \text{Cosh}(2\alpha_s d_s)(4 + aa^*)$$

Usando las relaciones trigonométricas:

$$2e^{-\alpha_s d_s} \text{Senh}(\alpha_s d_s) = (1 - e^{-2\alpha_s d_s}) \quad 2e^{-\alpha_s d_s} \text{Cosh}(\alpha_s d_s) = (1 + e^{-2\alpha_s d_s})$$

El denominador se expresa:

$$2e^{-\alpha_s d_s} (B+C)(B+C)^* = e^{-2\alpha_s d_s} \left(-2\text{Re}[a] + 2 + \frac{1}{2}aa^* \right) + e^{-\alpha_s d_s} \left(\text{Cos}(2\phi_s)(4 - aa^*) + 4\text{Im}[a]\text{Sen}(2\phi_s) \right) + \left(2\text{Re}[a] + 2 + \frac{1}{2}aa^* \right)$$

Reemplazamos la expresión del denominador en la ecuación (B.4). De este modo se obtiene:

$$T_{sm} = \frac{8x}{Ax^2 + Bx + C} \quad (\text{B.8})$$

Las variables A, B, C y x se definen:

$$A = -2 \operatorname{Re}[a] + 2 + \frac{1}{2} a a^* \quad (\text{B.9})$$

$$B = \operatorname{Cos}(2\phi_s)(4 - a a^*) + 4 \operatorname{Im}[a] \operatorname{Sen}(2\phi_s) \quad (\text{B.10})$$

$$C = 2 \operatorname{Re}[a] + 2 + \frac{1}{2} a a^* \quad (\text{B.11})$$

$$x_s = e^{-\alpha_s d_s} \quad (\text{B.12})$$

Las expresiones (B.9-B.11) se simplifican más al desarrollar la variable a en función de la parte real e imaginaria del índice de refracción $N_s = s - i k_s$.

$$a = \left(s + \frac{s}{s^2 + k_s^2} \right) + i \left(\frac{k_s}{s^2 + k_s^2} - k_s \right) \quad (\text{B.13})$$

Reemplazando la ecuación (B.13) en las variables A, B, C y usando la aproximación $k_s/s \ll 1$ se obtiene:

$$A = (s-1)^4 / 2s^2 \quad (\text{B.14})$$

$$B = -(s^2 - 1)^2 \operatorname{Cos}(2\phi_s) / s^2 \quad (\text{B.15})$$

$$C = (s+1)^4 / 2s^2 \quad (\text{B.16})$$

Reemplazando las ecuaciones (B.14-B.16) en la ecuación (B.8) se tiene la expresión:

$$T = \frac{16s^2 x_s}{(s-1)^4 x_s^2 - 2(s^2 - 1)^2 \operatorname{Cos}(2\phi_s) x_s + (s+1)^4} \quad (\text{B.17})$$

Al dividir el numerador y el denominador de (B.17) entre $(s+1)^4$ se tiene la expresión final de la transmitancia de un volumen. Con la finalidad de reducir más la expresión se introduce la variable R_1 como el coeficiente de reflexión de Fresnel en la interface aire-volumen.

$$R_1 = \left(\frac{s-1}{s+1} \right)^2$$

La ecuación (B.18) es conocida como la ecuación de Airy (ver ecuación 37 en la sección 2.2.1).

$$T = \frac{(1 - R_1)^2 x_s}{R_1^2 x_s^2 - 2R_1 x_s \cos(\phi_s) + 1} \quad (\text{B.18})$$

Aquí la fase debida al volumen se renombra como $\phi_s = 4\pi s d_s / \lambda$.

APÉNDICE C

Transmitancia de una película delgada sobre sustrato

La matriz característica del sistema (ver figura 2.10) está dada por la ecuación (42.a) y los elementos B y C están definidos en las ecuaciones (42.b) y (42.c) de la sección 2.1.6. La admitancia óptica del aire está dada por $\eta_o = \eta_m = \rho$. En la ecuación (35) la admitancia óptica se elimina y se obtiene la ecuación (C.1) de la transmitancia del sistema.

$$T_{sm} = \frac{4}{(B' + C')(B' + C')^*} \quad (C.1)$$

Los elementos del denominador se definen por las ecuaciones (C.2) y (C.3).

$$(B' + C') = a \cos(\delta_s) + b \sin(\delta_s) \quad (C.2)$$

$$(B' + C')^* = a^* \cos^*(\delta_s) + b^* \sin^*(\delta_s) \quad (C.3)$$

Y las variables a y b se definen como:

$$a = 2 \cos(\delta) + i \left(N + \frac{1}{N} \right) \sin(\delta) \quad (C.4)$$

$$b = - \left(\frac{N_s}{N} + \frac{N}{N_s} \right) \sin(\delta) + i \left(N_s + \frac{1}{N_s} \right) \cos(\delta) \quad (C.5)$$

La fase del sustrato es un número complejo de la forma $\delta_s = \varphi_s - i\alpha_s d_s$. Con parte real $\varphi_s = 2\pi s d_s / \lambda$ y parte imaginaria $\alpha_s d_s = 2\pi k_s d_s / \lambda$

Usando las relaciones trigonométricas en el caso complejo se simplifica el producto de (C.2) por (C.3) y se obtiene:

$$(B' + C')(B' + C')^* = A \cos^2(\varphi) + B \sin^2(\varphi) + C \sin(\varphi) \cos(\varphi) + D \quad (C.6)$$

Aquí las variables A, B, C, D representan:

$$A = aa^* \text{Cosh}^2(\alpha_s d_s) + bb^* \text{Senh}^2(\alpha_s d_s) \quad (\text{C.7})$$

$$B = aa^* \text{Senh}^2(\alpha_s d_s) + bb^* \text{Cosh}^2(\alpha_s d_s) \quad (\text{C.8})$$

$$C = a^* b + ab^* \quad (\text{C.9})$$

$$D = i(ab^* - a^* b) \text{Senh}(\alpha_s d_s) \text{Cosh}(\alpha_s d_s) \quad (\text{C.10})$$

La transmitancia entonces se expresa en términos de las variables por la ecuación (C.11)

$$T = \frac{4}{A \text{Cos}^2(\varphi_s) + B \text{Sen}^2(\varphi_s) + C \text{Sen}(\varphi_s) \text{Cos}(\varphi_s) + D} \quad (\text{C.11})$$

La integral de la transmitancia sobre la fase debida al substrato de 0 a 2π , es el promedio sobre las oscilaciones rápidas. La solución de esta integral está definida en la ecuación (44) que se representa aquí como la ecuación (C.12).

$$T = \frac{8}{\sqrt{4(A+D)(B+D) - C^2}} \quad (\text{C.12})$$

Desarrollando el denominador de la expresión (B.12) se obtiene:

$$\sqrt{4(A+D)(B+D) - C^2} = 2 \text{Cosh}(2\alpha_s d_s) (\text{Re}[a] \text{Im}[b] - \text{Im}[a] \text{Re}[b]) + \text{Senh}(2\alpha_s d_s) (\text{Re}^2[a] + \text{Im}^2[a] + \text{Re}^2[b] + \text{Im}^2[b])$$

Multiplicando el denominador y numerador de (C.12) por el término $2e^{-\alpha_s d_s}$, y usando las relaciones:

$$2e^{-\alpha_s d_s} \text{Senh}(\alpha_s d_s) = (1 - e^{-2\alpha_s d_s}) \quad 2e^{-\alpha_s d_s} \text{Cosh}(\alpha_s d_s) = (1 + e^{-2\alpha_s d_s})$$

Se llega a la expresión de la transmitancia dada por la ecuación (C.13) y la expresión de sus variables según las ecuaciones (C.14), (C.15) y (C.16) respectivamente.

$$T = \frac{16x_s}{A_1 x_s^2 + B_1} \quad (\text{C.13})$$

$$A_1 = -(\text{Re}[a] - \text{Im}[b])^2 - (\text{Im}[a] + \text{Re}[b])^2 \quad (\text{C.14})$$

$$B_1 = (\text{Re}[a] + \text{Im}[b])^2 + (\text{Re}[b] - \text{Im}[a])^2 \quad (\text{C.15})$$

$$x_s = e^{-2\alpha_s d_s} \quad (\text{C.16})$$

Pero a en (C.4) y b en (C.5), dependen de la fase de la película. Ésta tiene forma compleja $\delta = \phi - i\alpha d$. Con parte real $\phi = 2\pi nd/\lambda$ y parte imaginaria $\alpha d = 2\pi kd/\lambda$. Por tanto las variables A_1 y B_1 poseen términos $Senh(\alpha d)$ y $Cosh(\alpha d)$. Análogamente al caso anterior, se multiplica el numerador y el denominador de la ecuación (C.13) por $2e^{-\alpha d}$ y se usan las relaciones:

$$2e^{-\alpha d} Senh(\alpha d) = (1 - e^{-2\alpha d}) \quad 2e^{-\alpha d} Cosh(\alpha d) = (1 + e^{-2\alpha d})$$

De este modo, es tiene:

$$T = \frac{32x_s x}{(A'x_s^2 + B')} \quad (\text{C.17})$$

$$A' = ax^2 + bx + c \quad (\text{C.18})$$

$$B' = a'x^2 + b'x + c' \quad (\text{C.19})$$

$$x = e^{-2\alpha d} \quad (\text{C.20})$$

Las variables a, b, c y a', b', c' tienen la forma:

$$a = \frac{1}{2} \left[-(\text{Re}[\varepsilon] - \text{Re}[\gamma - \omega])^2 - (\text{Im}[\varepsilon] - \text{Im}[\gamma - \omega])^2 - 4(1 - \text{Re}[\varepsilon] + \text{Re}[\gamma - \omega]) \right] \quad (\text{C.21})$$

$$b = \left[\begin{aligned} &Cos(2\phi) \left(-(\text{Re}^2[\varepsilon] + \text{Im}^2[\varepsilon]) + (\text{Re}^2[\gamma - \omega] + \text{Im}^2[\gamma - \omega]) - 4(1 - \text{Re}[\varepsilon]) \right) \\ &+ Sen(2\phi) (2(\text{Re}[\varepsilon] \text{Im}[\gamma - \omega] - \text{Im}[\varepsilon] \text{Re}[\gamma - \omega]) - 4 \text{Im}[\gamma - \omega]) \end{aligned} \right] \quad (\text{C.22})$$

$$c = \frac{1}{2} \left[(\text{Im}[\varepsilon] + \text{Im}[\gamma - \omega])^2 - (\text{Re}[\varepsilon] + \text{Re}[\gamma - \omega])^2 - 4(1 - \text{Re}[\varepsilon] - \text{Re}[\gamma - \omega]) \right] \quad (\text{C.23})$$

$$a' = \frac{1}{2} \left[(\text{Re}[\varepsilon] - \text{Re}[\gamma + \omega])^2 + (\text{Im}[\varepsilon] - \text{Im}[\gamma + \omega])^2 + 4(1 + \text{Re}[\varepsilon] - \text{Re}[\gamma + \omega]) \right] \quad (\text{C.24})$$

$$b' = \left[\begin{aligned} &Cos(2\phi) \left((\text{Re}^2[\varepsilon] + \text{Im}^2[\varepsilon]) - (\text{Re}^2[\gamma + \omega] + \text{Im}^2[\gamma + \omega]) + 4(1 + \text{Re}[\varepsilon]) \right) \\ &+ Sen(2\phi) (2(\text{Im}[\varepsilon] \text{Im}[\gamma + \omega] - \text{Re}[\varepsilon] \text{Re}[\gamma + \omega]) - 4 \text{Im}[\gamma + \omega]) \end{aligned} \right] \quad (\text{C.25})$$

$$c' = \frac{1}{2} \left[(\text{Im}[\varepsilon] + \text{Im}[\gamma + \omega])^2 + (\text{Re}[\varepsilon] + \text{Re}[\gamma + \omega])^2 + 4(1 + \text{Re}[\varepsilon] + \text{Re}[\gamma + \omega]) \right] \quad (\text{C.26})$$

Por simplicidad se usaron las variables $\varepsilon, \gamma, \omega$. Éstas sin embargo no son otras sino las expresiones con los índices de refracción N y N_s presentes en las ecuaciones (C.4) y (C.5).

$$\omega = \left(N + \frac{1}{N} \right) \quad \varepsilon = \left(N_s + \frac{1}{N_s} \right) \quad \gamma = \left(\frac{N}{N_s} + \frac{N_s}{N} \right)$$

Las expresiones (C.21-C.26) pueden ser aún más sencillas cuando se desarrollan las variables $\varepsilon, \gamma, \omega$ en función de la parte real e imaginaria de los índices de refracción $N = n - ik$ y $N_s = s - ik_s$. Usando las aproximaciones $k/n \ll 1$ y $k_s/s \ll 1$ las variables a, b, c y a', b', c' son:

$$a = -(n-1)^2(s-1)^2(n+s)^2/2n^2s^2 \quad (\text{C.27})$$

$$b = -(n^2-1)(s-1)^2(s^2-n^2)\text{Cos}(2\phi)/n^2s^2 \quad (\text{C.28})$$

$$c = -(n+1)^2(s-1)^2(n-s)^2/2n^2s^2 \quad (\text{C.29})$$

$$a' = (n-1)^2(s+1)^2(n-s)^2/2n^2s^2 \quad (\text{C.30})$$

$$b' = -(n^2-1)(s+1)^2(s^2-n^2)\text{Cos}(2\phi)/n^2s^2 \quad (\text{C.31})$$

$$c' = -(n+1)^2(s+1)^2(n+s)^2/2n^2s^2 \quad (\text{C.32})$$

Al reemplazar las expresiones (C.27-C.32) en la ecuación de transmitancia (C.17) se obtiene la siguiente expresión:

$$T = \frac{32x_2x_1(2n^2s^2)}{\left(\begin{aligned} &(n+1)^2(s+1)^2(n+s)^2 + (n-1)^2(s+1)^2(n-s)^2x_1^2 - (n-1)^2(s-1)^2(n-s)^2x_1^2x_2^2 \\ &- (n+1)^2(n-s)^2(s-1)^2x_2^2 + 2(n^2-1)(s^2-n^2)\left[(s+1)^2 - (s-1)^2x_2^2 \right]x_1\text{Cos}(2\phi) \end{aligned} \right)} \quad (\text{C.33})$$

Cuando se divide el numerador y el denominador de (C.33) por $2n^2s^2/(n+1)^2(n+s)^2(s+1)^2$ se obtiene:

$$T = \frac{(64n^2s^2x_2x_1/(n+1)^2(s+1)^2(n+s)^2)}{\left(\begin{aligned} &1 + R_1R_2x_1^2 - R_1R_3x_1^2x_2^2 - R_2R_3x_2^2 + 2\sqrt{R_1}\sqrt{R_2}\left[1 - R_3x_2^2 \right]x_1\text{Cos}(2\phi) \end{aligned} \right)} \quad (\text{C.34})$$

Aquí las variables R_1, R_2 y R_3 están dadas por los parámetros:

$$R_1 = \left(\frac{1-n}{1+n}\right)^2 \quad R_2 = \left(\frac{n-s}{n+s}\right)^2 \quad R_3 = \left(\frac{s-1}{s+1}\right)^2$$

La ecuación (C.34) se simplifica aún más cuando por simple álgebra se reconoce que el numerador tiene la forma:

$$\frac{64n^2 s^2 x_2 x_1}{(n+1)^2 (s+1)^2 (n+s)^2} = (1-R_1)(1-R_2)(1-R_3)x_2 x_1$$

Finalmente, se demuestra que la transmitancia del sistema película delgada-substrato absorbente tiene la expresión (C.35) (ver ecuaciones 45 al 46 de la sección 2.3.1). Ésta es la ecuación de transmitancia presente en Gonzales Leal (2002) [4].

$$T = \frac{(1-R_1)(1-R_2)(1-R_3)x_s x}{1 + R_1 R_2 x^2 - R_1 R_3 x^2 x_s^2 - R_2 R_3 x_s^2 + 2\sqrt{R_1}\sqrt{R_2}(1-R_3 x_s^2)\text{Cos}(\phi)x} \quad (\text{C.35})$$

Aquí la fase debida a la película se renombra como $\phi = 4\pi n d / \lambda$.

APÉNDICE D

Índices de refracción de algunos vidrios ópticos

Ecuaciones de dispersión

Típicamente los índices de refracción de vidrios ópticos se describen usando las ecuaciones de serie de Laurent o Sellmeier.

La ecuación de series de Sellmeier es:

$$N^2 = 1 + \frac{B_1 \lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2 \lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3 \lambda^2}{\lambda^2 - C_3}$$

Aquí la longitud de onda λ está expresada en μm .

Constantes de la ecuación de dispersión de Sellmeier *

	BK7	Sílice fundida	CaF ₂	Safiro η_e
B_1	1.039612×10^0	6.961663×10^{-1}	5.675888×10^{-1}	1.503975×10^0
B_2	2.317923×10^{-1}	4.079426×10^{-1}	4.710914×10^{-1}	5.506914×10^{-1}
B_3	1.010469×10^0	8.974794×10^{-1}	3.848472×10^0	6.592737×10^0
C_1	6.000698×10^{-3}	4.679148×10^{-3}	2.526429×10^{-3}	5.4804112×10^{-3}
C_2	2.001791×10^{-2}	1.351206×10^{-2}	1.007833×10^{-2}	1.4799428×10^{-2}
C_3	1.035606×10^2	9.793400×10^1	1.200555×10^3	4.028951×10^2

* Ver www.cvmellesqriot.com

La ecuación de series de Laurent es:

$$N^2 = A_0 + A_1 \lambda^2 + \frac{A_2}{\lambda^2} + \frac{A_3}{\lambda^4} + \frac{A_4}{\lambda^6} + \frac{A_5}{\lambda^8}$$

Aquí la longitud de onda λ está expresada en μm .

Constantes de la ecuación de dispersión de Laurent*

	B270**	Cuarzo η_e	Cuarzo η_o
A₀	2.287782×10^0	2.384900×10^{-1}	2.357280×10^0
A₁	-9.314872×10^{-3}	-1.259000×10^{-2}	-1.170000×10^{-2}
A₂	1.098644×10^{-2}	1.079000×10^{-2}	1.054000×10^{-2}
A₃	4.846520×10^{-4}	1.651800×10^{-4}	1.341430×10^{-4}
A₄	-3.394473×10^{-5}	-1.947410×10^{-6}	-4.453680×10^{-7}
A₅	1.695855×10^{-4}	9.364760×10^{-8}	5.923620×10^{-8}

* Ver www.cvmellesqriot.com

** Ver www.crystran.co.uk