

UN METODO PARA LA CARACTERIZACION OPTICA DE PELICULAS
DELGADAS METALICA Y SU MODIFICACION SUPERFICIAL

POR

BIBLIOTECA
C. I. F. - U. S.
UNIVERSIDAD DE SONORA

RAUL GARCIA LLAMAS
LIC. FISICA, U.A.S.

R-051

T E S I S

PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS
EN EL CENTRO DE INVESTIGACION EN FISICA

TM048.1

SUPERVISADA POR: DR. LUIS EFRAIN REGALADO

14- Junio - 91

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

AGRADECIMIENTOS.

Al Dr. Luis Efrain Regalado quien asesoró y dirigió este trabajo.

Al M. en C. Manuel A. Leyva Lucero por la ayuda y el apoyo que me brindó durante el desarrollo de esta Tesis.

Al P.L.F. Mario Flores Acosta por la ayuda brindada en la elaboración de las películas que se estudiaron, trabajo que no se manifiesta en esta Tesis.

A Todo el equipo humano del Laboratorio de Elipsometría del IFUNAM-Ensenada, en especial a los Drs. Roberto Machorro Mejía y Jesús Siqueiros B., por su valiosa colaboración.

A Todas y cada una de las personas que laboran en el CIF-US, que de una u otra forma colaboraron en este trabajo, en especial para Maricruz, Sandra y Susana.

DEDICATORIA.

A mis dos familias:

La que formaron mis padres Raúl y Laya, y hermanos Chayo, Chelo,
* Paty, Jesús, Betty y Rosa.

La que yo he formado, mi esposa Olga y mi ahora pequeña hija
Itzel.

Contenido

1.	Introducción	1
2.	Optica de metales	6
2.1	Las ecuaciones de Maxwell	6
2.2	El modelo de Drude	7
2.3	Propagación de ondas en un conductor	8
2.4	Reflexión de luz por una superficie y una película metálica	10
2.5	Los Plasmones de Superficie: Propiedades fundamentales	12
2.6	La técnica de Reflexión Total Atenuada	19
2.7	Tratamiento Cuantitativo	23
3.	El método	27
3.1	Los parámetros experimentales θ_B y θ_A	28
3.2	El programa FITRTA	32
4.	La aplicación	39
4.1	El problema simulado	39
5.	Resultados y conclusiones	46
5.1	Resultados	46
5.2	Conclusiones	47
	Referencias	48
	Apéndices	49

CAPITULO I

Introducción.

Luego del descubrimiento del electrón en 1897 (J. J. Thompson), P. H. Drude, en 1900, propuso un modelo para los metales: "los electrones en un metal se comportan como un gas de electrones libres", el cual explicó con las leyes de la teoría cinética clásica de los gases. Este modelo da cuenta de algunas propiedades de conducción tanto térmicas como eléctricas y su relación con las propiedades ópticas de estos materiales.

Este modelo ha sobrevivido hasta nuestra época, no sin haber sufrido fuertes modificaciones, por la sencillez de sus resultados que explican de manera cualitativa las propiedades de los metales reales.

Desde esos tiempos se ha supuesto que los electrones en un metal forman un fluido de alta densidad, alrededor de 10^{23} cm^{-3} . Con este esquema se explicó, a finales de los cincuentas⁽¹⁾, la existencia de las oscilaciones longitudinales de la densidad de carga electrónica.

El movimiento colectivo de electrones posee una frecuencia angular de oscilación $\omega_p = (4\pi n e^2 / m)^{1/2}$, donde n es el número de electrones por unidad de volumen, e es la carga electrónica y m su masa. El cuanto de energía o plasmón posee un valor típico del orden de 10 eV, correspondiente a una frecuencia en la región ultravioleta.

En la superficie del metal también existen oscilaciones de la densidad electrónica superficial de carga con una frecuencia cuyo valor límite es $\omega = \omega_p / \sqrt{2}$, los llamados Plasmones de Superficie (PS).

La inclusión de las ondas electromagnéticas de plasma, tanto de volumen como de superficie, a la óptica de metales, condujo a una generalización de la óptica de Fresnel, la cual sólo predecía modos transversales.

Los modos longitudinales aparecen como soluciones de las ecuaciones de Maxwell, si suponemos que la función dieléctrica del medio depende tanto de la frecuencia como del vector de onda, es decir, medios con dispersión espacial o no locales.

Los plasmones de superficie son ondas electromagnéticas que se propagan a lo largo de la superficie del metal y decaen exponencialmente a medida que se alejan de ella. Estos han sido estudiados con electrones, en la región de vectores de onda grandes, y además con luz, para vectores de onda pequeños. La excitación de las ondas superficiales de plasma se logra únicamente con luz p-polarizada, es decir, con un campo electromagnético donde la componente del campo eléctrico normal a la superficie es finita.

Los modos transversales y longitudinales surgen como soluciones a las singularidades de los coeficientes de reflexión o transmisión, calculados a través de las ecuaciones de Maxwell y de condiciones de frontera apropiadas, cuando no hay campo electromagnético incidente.

Estudios teóricos y experimentales han demostrado que la relación de dispersión $\omega(\mathbf{k})$ de los PS se encuentra a la derecha de la línea de luz en el vacío ($\omega = c k$), lo que significa que, la magnitud del vector de onda de los PS es mayor que el de la luz de la misma frecuencia, por lo que no es posible excitarlos directamente con luz.

A. Otto⁽²⁾ fue el primero en utilizar un arreglo óptico conocido como Reflexión Total Atenuada (RTA) para excitar con luz a los PS en la interfaz metal/aire. El hizo que luz p-polarizada atravesara un prisma recto, incidiendo por una de sus caras, con lo cual disminuyó la longitud de onda de la luz incidente, aumentando la magnitud del vector de onda, para crear ondas evanescentes en la hipotenusa del mismo y lograr el acoplamiento con los PS en ángulos mayores que el ángulo crítico, el ángulo a partir del cual toda la intensidad de la luz incidente en la superficie prisma/aire es reflejada, detectando la excitación como un mínimo en la intensidad de la luz reflejada en un barrido en ángulo. La configuración Otto fue diseñada para el estudio de metales en bulto, pero existe la configuración Kretschmann-Raether⁽³⁾ que, usando el mismo principio, se utiliza para la excitación de PS en películas metálicas.

Este método se ha empleado para el estudio de los PS en el

intervalo espectral visible e infrarrojo y aplicado con bastante éxito para el estudio de superficie e interfaces, particularmente ha sido ampliamente usado para la determinación de las propiedades ópticas superficiales y espesores de películas metálicas.

Dado el carácter superficial de los PS el método RTA es muy sensible a las modificaciones que sufre la densidad de carga electrónica superficial del metal, inducidas ya sea por aplicar corrientes, por la presencia de campos magnéticos o por el recubrimiento de la superficie con otros materiales. Ha sido posible detectar capas superficiales del orden de 5 Å de espesor o mayores^(4,5). El método puede implementarse en el vacío para un mayor control de la muestra a estudiar.

Los metales son materiales que reaccionan químicamente con los elementos que componen el aire atmosférico, se oxidan, se sulfatan, o en general se contaminan. La velocidad de esas reacciones son altas, principalmente la oxidación, así que una película metálica crecida en vacío puede llegar a tener una sobrecapa de óxido del orden de algunas decenas de Å, después de media hora de exposición al medio ambiente⁽⁶⁾. Esta es una de las principales dificultades del estudio de metales en condiciones diferentes a las de vacío.

En este trabajo se propone un método para determinar las propiedades ópticas y los espesores de películas metálicas, así como los correspondientes parámetros de su óxido crecido en condiciones naturales. El método se divide en dos partes.

Después de depositar al metal sobre la hipotenusa de un prisma y/o un sustrato de vidrio, se cubre una parte y se evapora una sobrecapa dieléctrica en forma de escalón.

Se estudia el sistema metal/dieléctrico con RTA, y a partir de las curvas obtenidas se determinan simultáneamente los parámetros de la película metálica y de la sobrecapa dieléctrica, para lo cual se utilizan dos nuevos parámetros experimentales, $(\theta_B^{(7)} \text{ y } \theta_A^{(8)})$ y la información proporcionada por las características de la curva experimental RTA.

Enseguida se estudia el sistema metal+óxido y a partir de las curvas experimentales RTA se obtienen, empleando los valores de la constante dieléctrica y el espesor del metal obtenidos anteriormente,

los parámetros correspondientes al óxido.

En el capítulo 2, de la sección 2.1 a la 2.4, trataremos la óptica de metales, donde se analizan las ecuaciones de Maxwell para este tipo de medios, la propagación de ondas electromagnéticas, se deducen las ecuaciones de Fresnel en casos de interés y se discute el comportamiento de la función dieléctrica según el modelo de Drude.

En la sección 2.5 se obtiene la condición de existencia de los PS propagándose en la frontera de dos medios de superficies suaves y se discuten algunas de sus propiedades más importantes como relación de dispersión, longitud de extensión y de penetración, además de las modificaciones que sufren esas propiedades en sistemas de dos interfaces, como por ejemplo dieléctrico/metal/dieléctrico y se muestra la existencia de dos modos, donde cada uno de los modos es asociado a cada una de las dos interfaces.

En la sección 2.6 se desarrollan los principios para la excitación de los PS con el método RTA, se analizan las modificaciones que surgen debido a que el método introduce un sistema de dos interfaces. Además se discuten las relaciones entre las modificaciones de la anchura y el cambio de posición del mínimo de reflexión en la curva experimental y la presencia de una sobrecapa dieléctrica en la superficie del metal.

En la sección 2.7 presentamos algunas formas para la obtención cuantitativa de los parámetros de la película metálica a partir de la curva experimental, el ajuste teórico-experimental y las relaciones entre las características de la curva y los parámetros de la película metálica. Se muestra que no es posible encontrar relaciones, en general, entre las características de la curva y los parámetros de las películas cuando el metal se cubre con una sobrecapa dieléctrica.

En el capítulo 3 se desarrolla el método propuesto. En la sección 3.1 se discuten algunas consecuencias que surgen de analizar la reflectancia del sistema metal/dieléctrico, se demuestra la invariancia de la reflectancia en dos ángulos θ_B y θ_A , parámetros cuya determinación experimental nos permitirán conocer el índice y el espesor de una sobrecapa protectora no absorbente.

En la sección 3.2 se describe el programa de ajuste FITRTA, en la primera subsección 3.2.1 se describe el método de mínimos cuadrados

multiparamétrico(MMCM), en la 3.2.2 se analiza el procedimiento iterativo del MMCM cuando la función es no lineal en los parámetros de ajuste y se muestran algunos algoritmos para realizar este procedimiento, particularizando en el algoritmo empleado: Expansión del gradiente. En la última subsección tratamos el subprograma para el cálculo de la reflectancia y sus derivadas.

En el capítulo 4 se aplica el método a un problema simulado, donde el metal seleccionado es el cobre y su óxido, con el fin de probar la eficacia del mismo y discutir el procedimiento empleado para la obtención de la información deseada, así como discutir los errores propios del método y la propagación de los mismos a través de los cálculos realizados.

En la primera sección del último capítulo, 5, se resumen los resultados obtenidos, para en la segunda y última establecer las conclusiones surgidas del presente trabajo.

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = 0 \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (2.4)$$

El vector \mathbf{D} es un vector complejo que absorbe a la densidad de corriente \mathbf{J} , cuando los campos son temporalmente armónicos.

La respuesta del medio se introduce a través de las relaciones constitutivas

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad \text{y} \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (2.5)$$

donde la función dieléctrica ϵ es compleja y cuya parte imaginaria se relaciona con la conductividad óptica del medio mediante la siguiente relación

$$\epsilon_i = 4\pi\sigma/\omega \quad (2.6)$$

Otra forma de describir este tipos de medios es a través del índice de refracción complejo \hat{n} , su relación con ϵ es

$$\hat{n} = \epsilon^{1/2} \quad (2.7)$$

Si igualamos parte real con parte imaginaria obtenemos

$$\epsilon_r = n^2 - k^2 \quad \text{y} \quad \epsilon_i = 2 n k \quad (2.8)$$

o de manera inversa obtenemos

$$2 n^2 = (\epsilon_r^2 + \epsilon_i^2)^{1/2} + \epsilon_r \quad (2.9)$$

$$2 k^2 = (\epsilon_r^2 + \epsilon_i^2)^{1/2} - \epsilon_r \quad (2.10)$$

donde n es el índice de refracción del metal y k es el índice de de extinción, y como veremos más adelante está relacionado con el coeficiente de absorción del medio.

2.2 El modelo de Drude.

El modelo de Drude es un modelo clásico que nos permite encontrar una relación entre la constante dieléctrica del metal y la frecuencia, esa relación es

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau)} \quad (2.11)$$

donde $\omega_p = (4\pi n_0 e^2 / m^*)^{1/2}$ es la frecuencia del plasma, n_0 es la densidad de portadores, e la carga electrónica, m^* es la masa efectiva y τ es el tiempo de relajación. Al inverso de τ , $\nu = 1/\tau$, se le llama la frecuencia de colisión, es el número promedio de colisiones que sufre el electrón en la unidad de tiempo. La frecuencia angular de colisión es $\omega_c = 2\pi\nu$. El valor típico de ν para metales es del orden de 10^{14} s^{-1} .

El comportamiento de la parte real ϵ_r y la parte imaginaria ϵ_i de la constante dieléctrica como función de la frecuencia según el modelo de Drude se muestra en la Fig. 2.1.

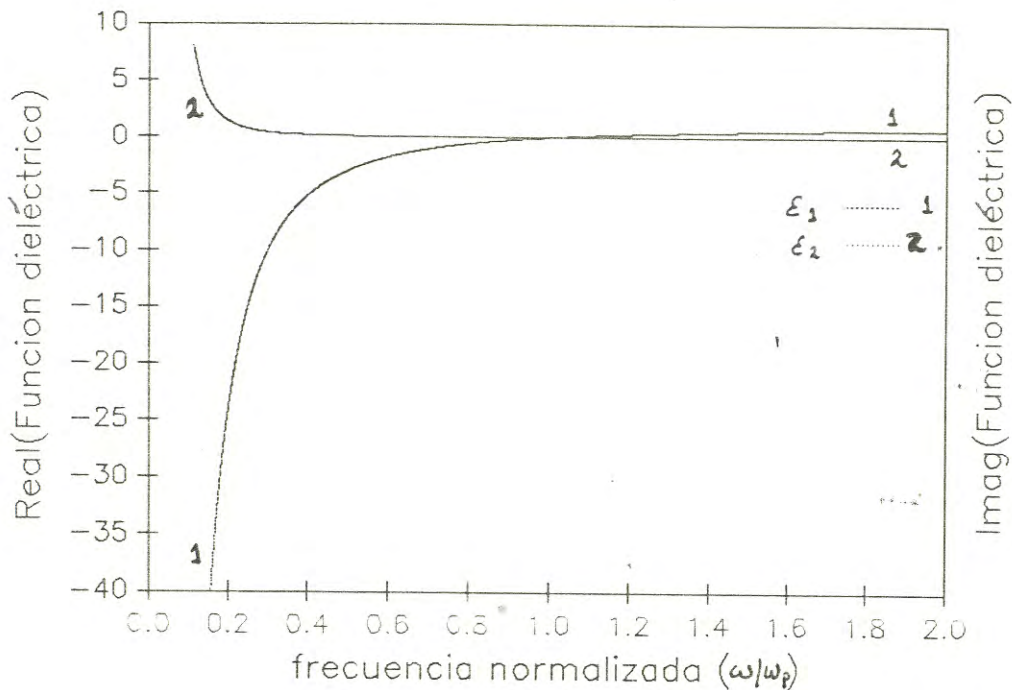


Fig.2.1. Parte real ϵ_r y parte imaginaria ϵ_i de la función dieléctrica Drude. El cambio de signo de ϵ_i de negativo a positivo sucede en la vecindad de la frecuencia del Plasma. $\omega_c = 0.1 \omega_p$.

2.3 Propagación de ondas en un conductor.

Si tomamos el rotacional de la ec. 2.4 y utilizamos las ecuaciones 2.2 y 2.5 en el resultado anterior, observamos que el campo eléctrico satisface la ecuación de onda

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\mu \epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2.12)$$

una solución de la ec. 2.12 es de la forma

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (2.13)$$

la magnitud de \mathbf{q} está determinado por las propiedades del medio

$$q^2 = \mu \epsilon \frac{\omega^2}{c^2} \quad (2.14)$$

donde μ es la permitividad del medio y ϵ es la función dieléctrica del material, y ya que esta última es compleja también \mathbf{q} es complejo, cuya parte real y parte imaginaria están dadas por

$$q_1 = \frac{\omega}{c} n \quad \text{y} \quad q_2 = \frac{\omega}{c} k \quad (2.15)$$

cuando el material es no magnético ($\mu=1$).

La onda electromagnética se propaga en la dirección de la parte real de \mathbf{q} y se amortigua en la dirección de la parte imaginaria de \mathbf{q} .

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(-\frac{\omega}{c} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \exp[i \frac{\omega}{c} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (2.16)$$

Los planos de fase constante y de amplitud constante no son paralelos en general, a este tipo de ondas se les llama inhomogéneas.

La densidad de energía es proporcional al módulo cuadrado del campo eléctrico

$$w \propto \exp(-\alpha \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.17)$$

donde α se le conoce como el coeficiente de absorción y su relación con el índice de extinción k es

$$\alpha = \frac{4\pi}{\lambda} k \quad (2.18)$$

La densidad de energía se reduce en $1/e$ de su valor después de que ha recorrido una distancia δ ,

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\lambda}{4\pi k} \quad (2.19)$$

a δ se le conoce como longitud de penetración.

2.4 Reflexión de luz por una superficie y una película metálica.

Consideremos la propagación de una onda plana p-polarizada, el vector magnético es paralelo a la interfaz, de un dieléctrico hacia un conductor, supondremos que los medios son semiinfinitos, la superficie de contacto entre los medios se encuentra en el plano $z = 0$ y es ópticamente plana, como se muestra en la Fig. 2.2.

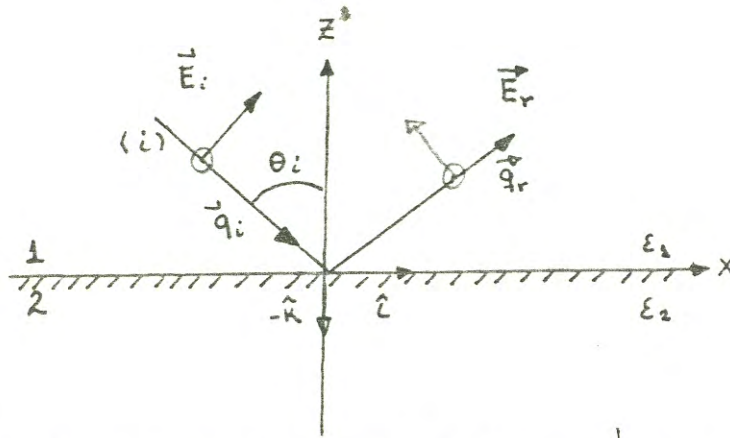


Fig 2.2 Geometría empleada para el sistema de una interfaz

Los campos deben satisfacer las ecuaciones de Maxwell (ECM), además de las condiciones de frontera usuales: las componentes normales de D y B son continuas en $z=0$, y las componentes tangenciales de E y H son continuas en $z=0$. La razón entre las magnitudes de los campos incidente y reflejado es

$$r_{12} = \frac{E_r}{E_i} = \frac{Z_2 - Z_1}{Z_2 + Z_1} \quad (2.20)$$

donde

$$Z_j = \frac{\omega}{c} \frac{\epsilon_j}{k_{zj}}, \quad k_{zj}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_j - k_x^2, \quad j = 1, 2. \quad (2.21)$$

y

$$k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1 \sin^2 \theta, \quad \epsilon_1 \text{ real} \quad (2.22)$$

La reflectancia se define como la razón entre la intensidad del haz incidente al reflejado, y de acuerdo a la ec. 2.20 al módulo cuadrado de r_{12} , que en forma explícita es

$$R = \left| \frac{\epsilon_2 \epsilon_1^{1/2} \cos\theta - \epsilon_1 (\epsilon_2 - \epsilon_1 \sin^2\theta)^{1/2}}{\epsilon_2 \epsilon_1^{1/2} \cos\theta + \epsilon_1 (\epsilon_2 - \epsilon_1 \sin^2\theta)^{1/2}} \right|^2 \quad (2.23)$$

La ec. 2.23 muestra que la reflectancia depende tanto de la frecuencia a través de las funciones dieléctricas de ambos medios así como del ángulo de incidencia.

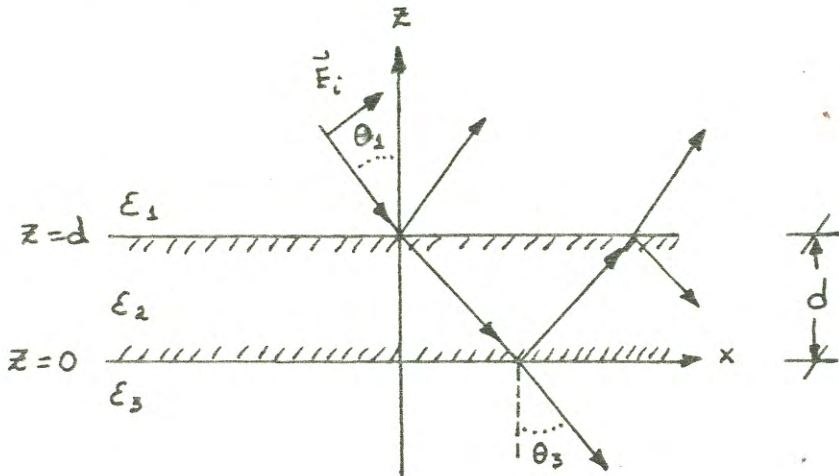


Fig 2.3 Geometría del sistema de dos interfaces.

Ahora calcularemos la reflectancia de un medio de longitud finita entre dos medios infinitos, supondremos que una onda plana p-polalizada incide de cualquiera de los dos medios de extensión infinita, los cuales supondremos que son no disipativos. La frontera entre el medio 1/2 se encuentra en el plano $z = d$ y entre 2/3 en $z = 0$ (Fig. 2.3).

El haz se refleja parcialmente en la interfaz 1/2, parcialmente se transmite a través de interfaz 2/3 y parte se refleja de nuevo hacia 2/1, etc. Tomando en cuenta estos efectos el coeficiente de reflexión, que en este caso denotaremos por ρ , es

$$\rho = \frac{E_r}{E_i} = \frac{r_{12} + r_{23} \exp(2i\beta_2 d)}{1 + r_{12} r_{23} \exp(2i\beta_2 d)} \quad (2.24)$$

donde el coeficiente r_{1j} es el coeficiente de Fresnel para la interfaz i/j y β_2 es el espesor en fase de la película

$$\beta_2 = k_{z2} d \quad (2.25)$$

k_{z2} esta dado por la ec. 2.21 y d es el espesor de la película.

Omitiremos la expresión para la reflectancia en este caso y discutiremos el comportamiento de la reflectancia en los dos casos como función de la frecuencia, en el primer caso el medio de contacto es el vacío y el segundo una película no soportada también en vacío, de acuerdo al modelo de Drude ec. 2.11 y según la gráfica Fig. 2.4.

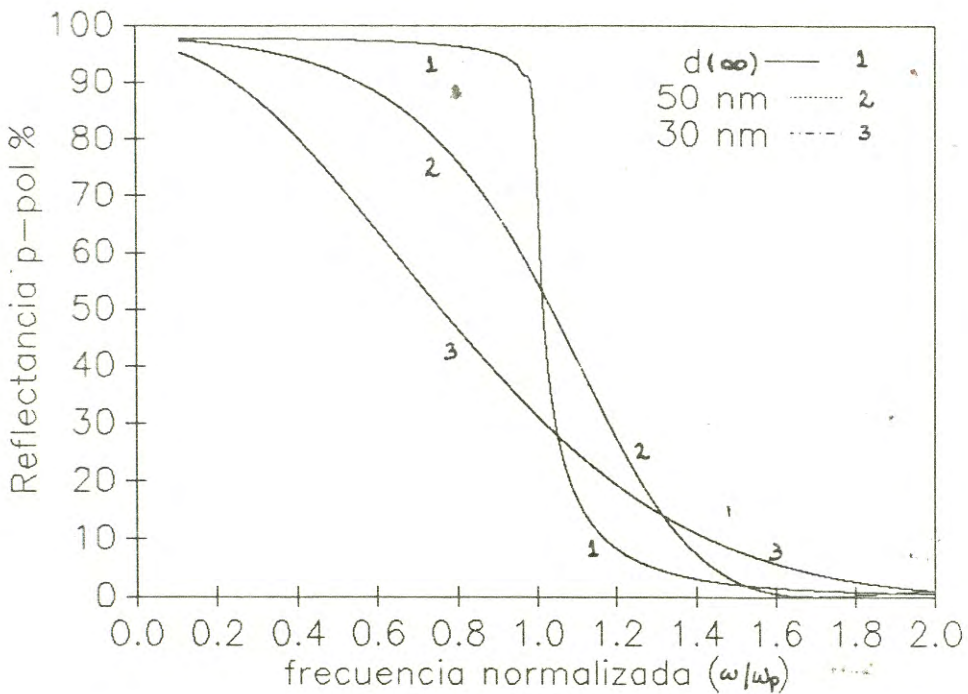


Fig. 2.4 Reflectancia p-pol .vs. (ω/ω_p) de una superficie y de películas metálicas tipo Drude, Fig. P2.1, se observa una drástica caída en la reflectancia para el caso de la superficie lo cual identifica la frecuencia de plasma, a medida que el espesor de la película aumenta su reflectancia tiende a la de una superficie.

2.5 Los plasmones de superficie: Propiedades fundamentales.

Los PS son campos electromagnéticos que se propagan a lo largo de la superficie del metal como onda y decaen exponencialmente a medida que se alejan de ella. Existe un gran cantidad de literatura donde se revisan las propiedades fundamentales de los PS^(1,2,3,4): Condición de existencia, profundidad de penetración, longitud de extensión, etc., las cuales veremos más adelante.

Tomando como base esas referencias. En la siguiente sección analizaremos algunas de las propiedades más importantes de las PS propagándose en interfaces ópticamente planas que separan medios de diferentes propiedades ópticas.

2.5.1 Propiedades fundamentales.

Relación de dispersión

Los PS son campos electromagnéticos que se propagan a lo largo de una interfaz como onda y decaen exponencialmente a medida que se alejan de la superficie, tienen un carácter Transversal Magnético (TM). Estas ondas representan fluctuaciones de la densidad de carga superficial⁽⁵⁾.

Consideremos la propagación de los PS en un interfaz ópticamente plana que separa dos medios infinitos, homogéneos e isotrópicos de diferentes propiedades ópticas. Estos medios están caracterizados por funciones dieléctricas dependientes únicamente de la frecuencia $\epsilon_1(\omega)$ y $\epsilon_2(\omega)$ respectivamente, por ejemplo para el dieléctrico/metal (Fig. 2.2.). Suponemos que los medios son no magnéticos ($\mu_1=1$), su respuesta es lineal y no se consideran efectos no locales

A pesar de que el modelo es muy restrictivo, esas suposiciones explican muchas de las propiedades fundamentales de los PS.

Con estas consideraciones los campos están descritos por

$$E_1(\mathbf{r}, t) = (E_{1x}, E_{1y}, E_{1z}) \exp[i(k_{1x}x + k_{1z}z - \omega t)] \quad (2.26)$$

$$H_1(\mathbf{r}, t) = (H_{1x}, H_{1y}, H_{1z}) \exp[i(k_{1x}x + k_{1z}z - \omega t)] \quad (2.27)$$

para $Z > 0$.

$$E_2(\mathbf{r}, t) = (E_{2x}, E_{2y}, E_{2z}) \exp[i(k_{2x}x - k_{2z}z - \omega t)] \quad (2.28)$$

$$H_1(\mathbf{r}, t) = (H_{2x}, H_{2y}, H_{2z}) \exp[i(k_{2x}x - k_{2z}z - \omega t)] \quad (2.29)$$

para $Z < 0$.

Las cuales deben satisfacer la ecuaciones de Maxwell 2.1-4 y las condiciones en la frontera en $z = 0$.

$$E_{1t} = E_{2t} \quad (2.30)$$

$$H_{1t} = H_{2t} \quad (2.31)$$

$$\epsilon_1 E_{1z} = \epsilon_2 E_{2z} \quad (2.32)$$

$$\mu_1 H_{1z} = \mu_2 H_{2z} \quad (2.33)$$

A fin de que sean satisfechas la condiciones de frontera debemos tener que

$$k_{1x} = k_{2x} = k_x \quad (2.34)$$

sustituyendo las expresiones de los campos, ecs. 2.26-29, en la ecuaciones de Maxwell 2.1-4 y utilizando las relaciones 2.30-33 y la ec. 2.34, obtenemos que

$$\epsilon_2 k_{1z} = -\epsilon_1 k_{2z} \quad (2.35)$$

y además

$$H_{1z} = 0, \quad H_{1x} = 0 \quad \text{y} \quad E_{1y} = 0 \quad (2.36)$$

este resultado muestra el caracter transversal magnético (TM) de los PS, el vector magnético paralelo a la superficie.

Sintetizando los resultado obtenidos reescribiendo la expresiones de los campos ecs. 2.26-2.29

$$E_1 = \frac{E}{k_{1z}} (k_{1z}, 0, -k_x) \exp[i(k_x x + k_{1z} z - \omega t)] \quad (2.37)$$

$$H_1 = \epsilon_1 \frac{\omega}{c} \frac{E}{k_{1z}} (0, 1, 0) \exp[i(k_x x + k_{1z} z - \omega t)] \quad (2.38)$$

$$E_2 = \frac{E}{k_{2z}} (k_{2z}, 0, k_x) \exp[i(k_x x - k_{2z} z - \omega t)] \quad (2.39)$$

y

$$H_2 = \epsilon_2 \frac{\omega}{c} \frac{E}{k_{2z}} (0, -1, 0) \exp[i(k_x x - k_{2z} z - \omega t)] \quad (2.40)$$

Tomando el rotacional de la ecuación 2.4 y utilizando las

ec. 2.1 y 2.3 obtenemos

$$\nabla^2 \mathbf{E}_i - \epsilon_i \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_i}{\partial t^2} = 0, \quad i = 1, 2 \quad (2.41)$$

Los PS deben satisfacer la ecuación de onda, ec. 2.41, en sus respectivos medios, al sustituir las expresiones 2.37 y 2.39 en 2.41 obtenemos relaciones para las componentes z del vector de onda

$$k_x^2 + k_{z1}^2 = \epsilon_1 \frac{\omega^2}{c^2}, \quad i = 1, 2 \quad (2.42)$$

de esta relación y la ecuación 2.35 encontramos la relación de dispersión de los PS esta dada por

$$k_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \quad (2.43)$$

De esta ecuación y de 2.43 obtenemos

$$k_{z1}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\epsilon_1^2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \quad (2.44)$$

$$k_{z2}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\epsilon_2^2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \quad (2.45)$$

Condición de existencia.

En general las constantes dieléctricas ϵ_1 y ϵ_2 pueden ser complejas. Consideremos que ϵ_1 es real y positiva, y que ϵ_2 es en general compleja, representa un medio absorbente: $\epsilon_2 = \epsilon_{2r} + \epsilon_{2i}$.

Para simplificar el análisis despreciaremos totalmente la parte imaginaria de ϵ_2 .

Ya que buscamos ondas ligadas a la interfaz y que se propagen a lo largo de ésta, debemos encontrar las condiciones en la cuales k_x sea real y k_{z1} imaginario. De un análisis de las ec. 2.43-45 encontramos que las condiciones son satisfechas si

$$\epsilon_2 < 0 \quad \text{y} \quad |\epsilon_2| > \epsilon_1 \quad (2.46)$$

Esta condición puede ser satisfecha por los metales, semiconductores contaminados y por cristales iónicos⁽⁶⁾ en diferentes regiones espectrales. Al medio que satisface que $\epsilon_r < 0$, se le llama medio activo.

La constante dieléctrica de los metales, según el modelo de Drude, ec. 2.11, para frecuencias tales que $\omega\tau \gg 1$, es

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.47)$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma.

Con este modelo la relación de dispersión es la mostrada en la Fig. 2.5. Para valores grandes de k_x la frecuencia de los PSs tiende a

$$\omega_{ps}^2 = \frac{\omega_p^2}{1 + \epsilon_1} \quad (2.48)$$

mientras que para valores pequeños de k_x se aproxima a la relación de dispersión de la luz en el vacío.

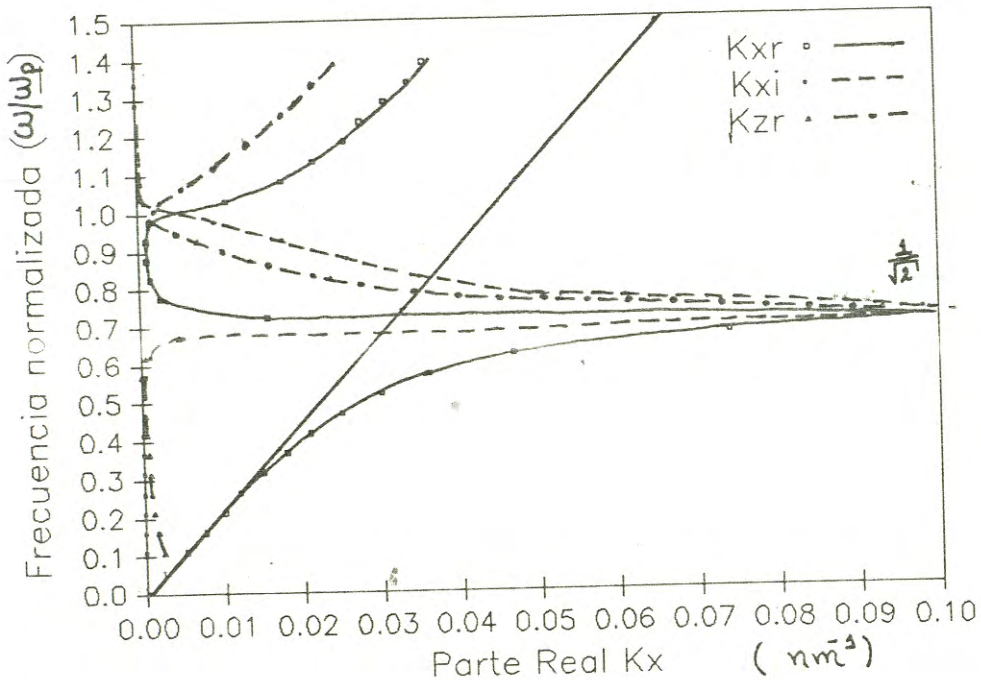


Fig. 2.5 Relación de dispersión de los PS en aire, según el modelo de Drude y la ec. 2.43. K_{xr} y K_{xi} parte real e imaginaria de la componente del PS paralela a la superficie.

Longitud de propagación y profundidad de penetración.

En el análisis anterior despreciamos completamente la parte imaginaria de la constante dieléctrica del metal. Generalmente en los metales su valor no es despreciable, pero en un cierto intervalo espectral se cumple que $\epsilon_{2i} < |\epsilon_{2r}|$ con esta condición encontramos que k_x es complejo, donde su parte real y su parte imaginaria están dadas por las ecuaciones,

$$k_{xr} = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon_1 \epsilon_{2r}}{\epsilon_1 + \epsilon_{2r}} \right)^{1/2} \quad (2.49)$$

$$k_{xi} = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon_1 \epsilon_{2r}}{\epsilon_1 + \epsilon_{2r}} \right)^{3/2} \frac{\epsilon_{2i}}{2 \epsilon_{2r}^2} \quad (2.50)$$

La relación de dispersión está asociada a la parte real de la componente x del vector de onda del PS, dado por la ec. 2.49, mientras que 2.50 representa un mecanismo intrínseco de amortiguamiento.

De acuerdo a la ec. 2.50 la intensidad de los PSs decrece a lo largo de la dirección de propagación como $\exp[-2k_{xi} x]$. La longitud de propagación es la distancia que recorre después de la cual la intensidad decrece en 1/e de su valor inicial, cuya expresión está dada por

$$x_p = 2 \frac{c}{\omega} \left(\frac{\epsilon_1 + \epsilon_{2r}}{\epsilon_1 \epsilon_{2r}} \right)^{3/2} \frac{2 \epsilon_{2r}^2}{\epsilon_{2i}} \quad (2.51)$$

La longitud de propagación x_p alcanza, en el visible, algunas micras, aumentando su valor a longitudes de onda mayores.

Otra propiedad importante es la profundidad de penetración z_p , la amplitud del campo de los PS decrece como $\exp[-k_{zk} z]$, la cual está relacionada con la parte imaginaria de la componente z del vector de onda, cuyo valor para el metal es,

$$z_p = \frac{c}{\omega} \left(\frac{\epsilon_1 + |\epsilon_{2r}|}{\epsilon_{2r}^2} \right)^{1/2} \quad (2.52)$$

La profundidad de penetración en el metal z_p alcanza algunas decenas de Å, lo cual indica una fuerte concentración del campo electromagnético en la superficie.

Sintetizando, los PS poseen un caracter transversal magnético, se amortiguan en la dirección de propagación y en la dirección normal a la superficie de acuerdo a 2.51 y 2.52 respectivamente, se encuentran confinadas en una región de decenas de angstroms y se propagan oblicuamente a lo largo de la interfaz.

2.5.2 Plasmones de Superficie en películas metálicas delgadas.

Los PS también existen en películas metálicas, sus propiedades dependen de la función dieléctrica y el espesor de la película, así como de las de los medios que la limitan.

En películas existen dos modos, cada uno de ellos asociado a cada una de las interfaces. Si el espesor de la película es suficientemente delgado, cuando el promedio geométrico de las profundidades de penetración en ambas interfaces son del orden del espesor de la misma, dichos modos pueden llegar a interactuar, siempre y cuando los medios que la rodean sean iguales. En este caso se dice que la envoltura es simétrica.

Para obtener la relación de dispersión se debe proceder como en el caso anterior. Otra forma de obtenerla es tomando las singularidad del coeficiente de reflexión de la película, así de la ec. 2.24 obtenemos

$$(Z_2 + Z_1)(Z_3 + Z_2) + (Z_2 - Z_1)(Z_3 - Z_2) \exp[i(2k_{z2}d)] = 0 \quad (2.53)$$

donde
$$Z_i = \frac{\omega \epsilon_i}{c k_{zi}}, \quad k_{zi} = \left(\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_i - k_x^2 \right)^{1/2}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.54)$$

La ec. 2.53 tiene dos soluciones que no pueden ser obtenidas analíticamente, pero podemos encontrar, bajo ciertas condiciones, la relación de dispersión en una interfaz, por ejemplo la 2/3.

Podemos aproximar k_x , si $\epsilon_{21} \ll |\epsilon_{2r}|$, por la siguiente ecuación

$$k_x = k_x^0 + \Delta k_x \quad (2.55)$$

k_x^0 satisface la ec. 2.43 para la interfaz 2/3 y Δk_x está dado por

$$\Delta k_x = 2 \frac{\omega}{c} r_{12} \left(\frac{\epsilon_{2r} \epsilon_3}{\epsilon_{2r} + \epsilon_3} \right)^{3/2} \frac{1}{\epsilon_3 + |\epsilon_{2r}|} \exp[-\phi d] \quad (2.56)$$

con

$$\Gamma_{12} = \frac{\epsilon_o - i \epsilon_1}{\epsilon_o + i \epsilon_1} \quad (2.57)$$

$$\phi = \frac{4 \pi}{\lambda} \frac{|\epsilon_{2r}|}{(\epsilon_3 + |\epsilon_{2r}|)^{1/2}} \quad (2.58)$$

$$y \quad \epsilon_o^2 = \epsilon_1 (|\epsilon_{2r}| + \epsilon_3) - |\epsilon_2| \epsilon_3 \quad (2.59)$$

donde d es el espesor de la película metálica, ϵ_{2r} es la parte real de la constante dieléctrica del metal, al cual se le llama medio activo, $\epsilon_1 > 0$ es la del medio 1 y $\epsilon_3 > 0$ la del medio 3.

La parte real de la ec. 2.56 modifica la relación de dispersión, mientras que la parte imaginaria produce un amortiguamiento adicional. Ambas partes producen respectivos cambios en la longitud de propagación x_p y la profundidad de penetración z_p .

2.6 La técnica de Reflexión Total Atenuada (RTA):

2.6.1. Excitación de los PS con luz.

La excitación de los PS con luz presenta la dificultad de que la relación de dispersión se encuentra a la derecha de la línea de luz en el vacío, ver Fig. 2.5, por esta razón para lograr la excitación de los PSs con luz, es necesario incrementar el valor de su vector de onda. Dado el carácter TM de los PSs únicamente se excitan con luz polarizada en el plano de incidencia.

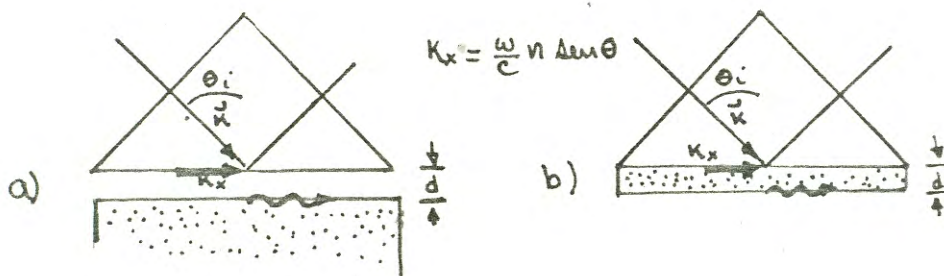


Fig. 2.6 Las configuraciones originales para RTA, (a) Otto y (b) Kretschmann-Raether.

A. Otto⁽⁷⁾ fué el primero en utilizar este método, con la configuración mostrada en la Fig. 2.6a.

Cuando la luz se propaga de un medio más denso a uno menos denso, existe un ángulo, el llamado ángulo crítico, a partir del cual se presenta el fenómeno de reflexión total, no habiendo flujo de energía hacia el medio menos denso⁽⁸⁾. A pesar de este hecho existe un campo electromagnético en el medio menos denso, éste se propaga a lo largo de la superficie y decae exponencialmente a medida que se aleja de ella, en forma de ondas evanescentes, el cual, para luz P-polarizada, tiene las mismas características que los PS.

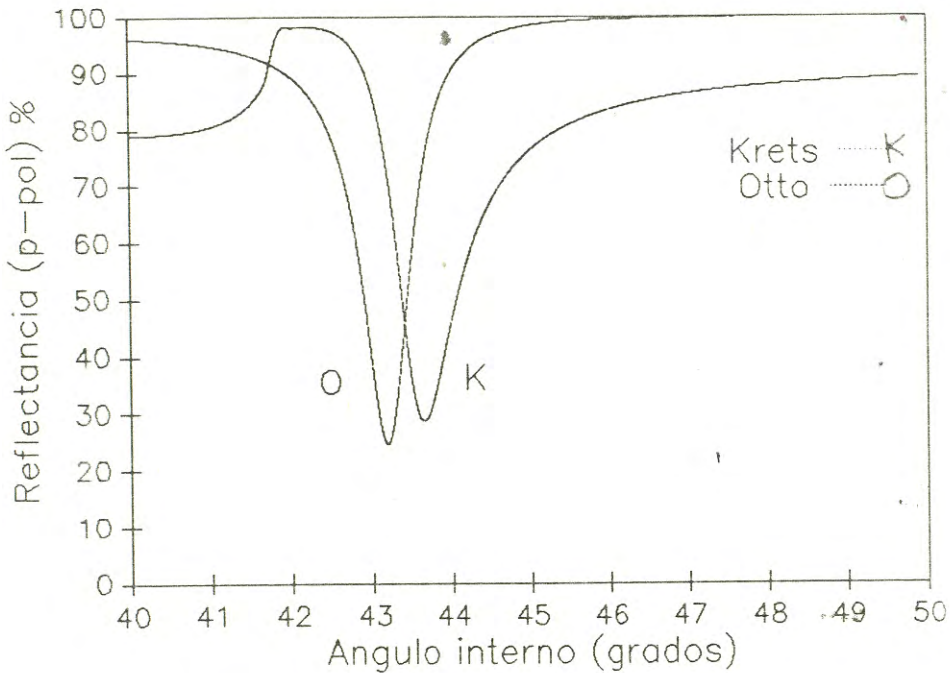


Fig. 2.7. La reflectancia p-pol como función del ángulo de incidencia (frecuencia constante) para las configuraciones (a) Otto y (b) Kretschmann.

El acoplamiento se logra por dos razones, la primera es que la relación de dispersión ec. 2.49 puede ser satisfecha para algún valor de θ , el ángulo de incidencia

$$k_x = \frac{\omega}{c} n \text{ sen}\theta \quad (2.60)$$

La segunda es que el caracter TM de los dos campos, el campo evanescente creado por reflexión total y del PS, es el mismo.

Un comentario final es que la región entre el prisma y el metal puede ser llenado con un dieléctrico o con aire, y debe ser de un ancho del orden de la longitud de onda de la luz incidente, para lograr un acoplamiento óptimo.

La configuración Kretschmann-Raether⁽⁹⁾ introduce una variante en la anterior, ver Fig. 2.6b., la cual permite el estudio de películas delgadas metálicas.

Esta configuración fué la empleada en el presente trabajo y de aquí en adelante, cuando se hable de la técnica RTA, daremos por supuesto que es la configuración Kretschmann-Raether.

En ambas configuraciones la excitación se detecta como un mínimo en la gráfica de la reflectancia R_p contra el ángulo interno, el ángulo medido a partir de la normal de la hipotenusa del prisma, como se observa en la Fig. 2.7.

La configuración presenta un sistema de dos interfaces, debido a la presencia del prisma, prisma/metal/dieléctrico, lo que modifica la relación de dispersión obtenida para una superficie, ec. 2.43, la cual debemos remplazar por relación de dispersión de una película, ec. 2.55, dando lugar a lo que se conoce como la relación de dispersión de espesor, ver la Fig. 2.8.

Como se observa en la Fig. 2.8, para espesores menores que d_m , el espesor para el cual la reflectancia es cero, a una longitud de onda dada, la posición del ángulo del PS, el ángulo para el cual la reflectancia es mínima, se recorre hacia ángulos mayores, mientras que su anchura media crece. Para espesores mayores la posición del ángulo del PS es invariante, pero se observa un ligero adelgazamiento de la anchura media y una disminución de la intensidad del mínimo de reflexión.

La parte real de la ec. 2.36 cambia el valor de la parte real de la ec. 2.23 y con ello la posición del ángulo del plasmón. La parte imaginaria de 2.36 es un parámetro de amortiguamiento adicional que se suma al anterior, el cual está asociado al ensanchamiento y la disminución de la intensidad del mínimo de reflectancia en la curva experimental, aunque todos no son efectos independientes.

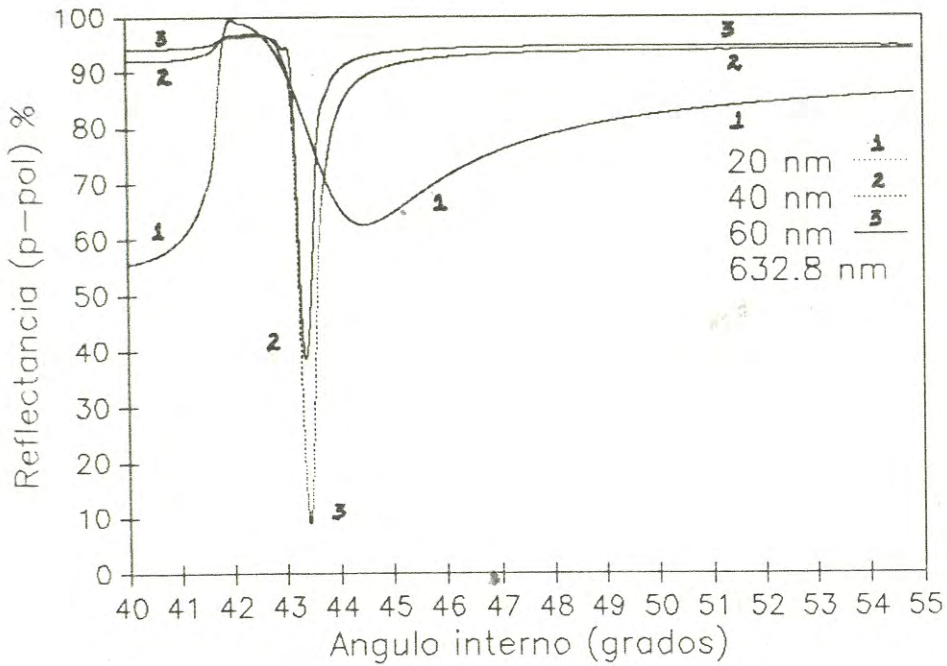


Fig. 2.8. Excitación de los PS a una longitud de onda fija para diferentes espesores de la película metálica.

2.6.2. Modificación de la relación de dispersión debido a la Presencia de una capa dieléctrica.

En muchos casos es necesario recubrir la película metálica con una sobrecapa dieléctrica, generalmente para resguardar la superficie de modificaciones naturales.

La capa produce cambios significativos en la relación de dispersión de la película metálica libre (sin sobrecapa), los cuales están dados por la ec. 2.61.

Como podemos observar en la Fig. 2.9, hay un cambio en la posición del mínimo de reflectancia, se desplaza hacia ángulos mayores cuanto mayor es el espesor de la sobrecapa dieléctrica, de donde se puede inferir que existe una correlación entre esos cambios y el espesor de la sobrecapa dieléctrica y también su anchura media aumenta en una pequeña proporción.

Podemos encontrar, para pequeños espesores de la sobrecapa⁽¹⁰⁾, no absorbente, el cambio en la posición está dado por

$$\Delta k_x^d = \frac{\omega}{c} \frac{\epsilon_3^{-1}}{\epsilon_3} \left(\frac{\epsilon_{2r}}{\epsilon_{2r} + 1} \right)^2 \frac{\epsilon_{2r} + \epsilon_3}{\epsilon_{2r} + 1} \frac{2 \pi d_3}{\lambda |\epsilon_{2r}|^{1/2}} \quad (2.61)$$

es decir el comportamiento del cambio es lineal para pequeños espesores de la sobrecapa, esta cantidad es real y solo cambia la posición del mínimo de resonancia sin crear ningun mecanismo adicional de amortiguamiento, lo cual se manifiesta en una fuerte disminución del mínimo, fenómeno que no sucede cuando la película es metálica, es decir interfaz metal/metal, o semiconductor, metal/semiconductor, donde aparece un amortiguamiento adicional dado el caracter disipativo de estos materiales^(9,10).

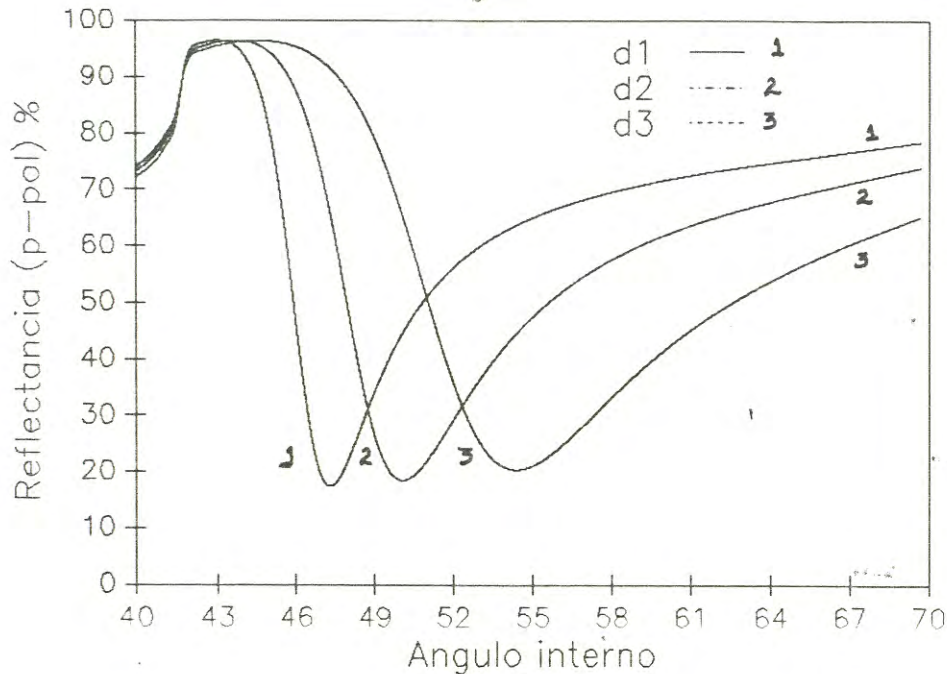


Fig 2.9. Variación de la posición del mínimo de Reflectancia debido a los diferentes espesores de la capa dieléctrica.

2.7. Tratamiento cuantitativo.

Como mencionábamos anteriormente la excitación de los PSs se manifiesta como un pérdida de energía en la curva experimental de reflectancia contra el ángulo interno.

La descripción cuantitativa de las curvas de reflexión la proporcionan las ecuaciones de Fresnel para el sistema deseado⁽⁸⁾.

Estas ecuaciones describen la propagación de luz en medios finitos separados por superficies ópticamente planas.

Una forma de proceder es definir el sistema, ejemplo prisma/metal/aire, dando las constantes dieléctricas de los medios y el espesor de la película a una frecuencia dada, así de las ecuaciones de Fresnel para este sistema, se puede obtener la curva teórica.

El ajuste se puede realizar por el método de superposición, que consiste en obtener una serie de curvas teóricas para distintos valores de la constante dieléctrica y el espesor del metal y comparar con la curva experimental hasta obtener el resultado deseado.

Otra forma de obtener la información es empleando algún método de ajuste de curvas mediante un programa de computadora. En particular hemos implementado un programa⁽¹¹⁾ de ajuste de curvas empleando el método de mínimos cuadrados no lineales multiparamétrico^(12,13). Del programa hablaremos más extensamente en el siguiente capítulo.

Con ambos métodos, el de Superposición y el de Mínimos, obtenemos los valores de la constante dieléctrica y el espesor de la película a una frecuencia dada, y procediendo de manera análoga con curvas obtenidas a otras frecuencias permite caracterizar el metal en el rango espectral visible. La otra forma de proceder es explotar las características de la curva RTA: La posición del mínimo de resonancia, la profundidad del mínimo de reflectancia y su anchura media. Las expresiones analíticas entre $k_{x\min}$, R_{\min} , Δk_x y $\epsilon_2 = \epsilon_{2r} + i\epsilon_{2i}$ y d , no pueden ser obtenidas exactamente, pero es posible obtener, a partir de las ecuaciones de Fresnel, expresiones aproximadas, como las de Kretschmann.

Podemos aproximar el mínimo de resonancia por una curva de carácter Lorentziano y tomar de ésta las características antes mencionadas, la aproximación está dada por

$$R_{\min}^a = 1 - \frac{4 k_{xi}^0 \Delta k_{xi}}{(k_x - k_{xr}^0 - \Delta k_{xr})^2 + (k_{xi}^0 + \Delta k_{xi})^2} \quad (2.62)$$

El mínimo de reflectancia está dado por

$$R_{\min}^a = 1 - \frac{4 k_{x1}^0 \Delta k_{x1}}{(k_{x1}^0 + \Delta k_{x1})^2} \quad (2.63)$$

La posición del mínimo

$$k_{x\min} = n_1 \frac{\omega}{c} \operatorname{sen} \theta_{\min} = k_{xr}^0 + \Delta k_{xr} \quad (2.64)$$

Y el ancho medio

$$\Delta k = 2 (k_{x1}^0 + \Delta k_{x1}) \quad (2.65)$$

Podemos invertir estas tres ecuaciones para encontrar expresiones de los tres parámetros de la película⁽¹⁴⁾

$$d = -\frac{1}{\phi} \ln \left\{ \frac{\Delta k}{4 B} [1 \mp \sqrt{R_{\min}}] \right\} \quad (2.66)$$

$$\epsilon_{2i} = \frac{\Delta k}{4 A} [1 \mp \sqrt{R_{\min}}] \quad (2.67)$$

$$\epsilon_{2r} = \frac{k_{x\min}^2}{2 k_{x\min} - \frac{\omega}{c} \epsilon_1} \quad (2.68)$$

donde A, B están dadas por las expresiones

$$A = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon_3 \epsilon_{2r}}{\epsilon_{2r} + \epsilon_3} \right)^{3/2} \frac{1}{2 \epsilon_{2r}^2} \quad (2.69)$$

$$B = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon_{2r} \epsilon_3}{\epsilon_{2r} + \epsilon_3} \right)^{3/2} \frac{2}{\epsilon_3 - \epsilon_{2r}} \operatorname{Im}(r_{12}) \quad (2.70)$$

r_{12} y ϕ está dado por la ecs. 2.57 y 2.58 respectivamente.

Con estas ecuaciones aproximadas y los valores experimentales podemos conocer los valores de estas tres cantidades. Las expresiones dadas para d , ϵ_{2r} y ϵ_{2i} son restrictivas y no intentaremos discutir los errores inherentes en la aproximación.

Por la parte experimental se sabe que los parámetros de la película dependen fuertemente de las condiciones de crecimiento, y es posible encontrar comportamientos ligeramente diferentes para películas preparadas bajo las mismas condiciones de crecimiento, ya

que para algunos materiales, plata, oro, aluminio etc., se encuentran reportados diferentes valores de las constantes dieléctricas por distintos autores (ver apéndice de ref(3)).

Otro detalle experimental importante es que las películas no son ópticamente planas del todo, sino que presentan microrugosidades aleatorias y que no se contemplan en el modelo, por lo que se debe modificar el modelo para que incluya el efecto de las rugosidades, en lo que trabajaremos en el futuro inmediato.

Además casi todos los metales tienden a reaccionar químicamente con los compuestos que componen el aire, forman óxidos, sulfatos etc., creando capas de transición que no se consideran y cuyos efectos pueden ser importantes.

2.7.1. Tratamiento de la sobrecapa

Cuando agregamos una sobrecapa dieléctrica a la película metálica, con el objeto de minimizar los efectos superficiales del metal, necesitamos para la determinación de los índices de refracción y los espesores de las películas, otros dos parámetros, ya que un experimento RTA nos proporcionan sólo tres características experimentales.

Uno de ellos es el desplazamiento del mínimo de reflectancia el cual, como encontramos anteriormente, cumple una relación lineal con el espesor de acuerdo a la ecuación 2.61. Sin embargo, esa relación es muy restrictiva, ya que solamente es válida para pequeños espesores de la sobrecapa, y para su determinación necesitamos conocer el índice de ésta, el cual en principio desconocemos.

En el siguiente capítulo desarrollaremos un método para la caracterización simultánea de ambas capas, y poder salvar las restricciones antes mencionadas.

EL METODO.

En el capítulo anterior se mostró que, en un experimento para la excitación de los PS, cuando una película metálica se cubre con una sobrecapa dieléctrica, la capa superficial produce un cambio en la posición del mínimo y una ampliación en el ancho medio de la curva resonante de reflexión, los cuales están correlacionados con los cambios de las propiedades de los PSs.

La sobrecapa introduce dos nuevas incógnitas, que son su constante dieléctrica y su espesor, además de los parámetros correspondientes a la película metálica.

Aunque el cambio de posición y el ensanchamiento de la resonancia en la curva de reflexión son causadas por la presencia del dieléctrico, no podemos obtener relaciones analíticas entre los parámetros de la sobrecapa y las características de la curva RTA.

Para poder obtener ese tipo de relaciones, necesitamos conocer los parámetros del metal libre (sin sobrecapa), por lo que se requiere estudiar la respuesta de los PSs en la superficie libre del metal (en vacío), ya que en condiciones diferentes puede, por ejemplo, oxidarse, lo cual proporciona información diferente a la esperada.

En otros casos se suponen conocidas los parámetro del dieléctrico y tratamos de deducir las propiedades de la película metálica bajo estudio.

Por tanto en cualquiera de los casos mencionados es imposible determinar simultáneamente los parámetros de la película metálica y la sobrecapa dieléctrica, ya que tenemos 5 incógnitas para 3 características de la curva experimental en un experimento RTA.

La determinación de dos nuevos parámetros experimentales y la información usual de la curva nos permitirán determinar

simultáneamente los parámetros de la sobrecapa no absorbente y los del metal, información que nos servirá para obtener las propiedades y el espesor del óxido formado sobre la superficie metálica. En la siguiente sección describiremos el método propuesto en este trabajo para la caracterización de las dos capas.

3.1 Los parámetros experimentales θ_A y θ_B .

3.1.1 La capa dieléctrica no absorbente.

La función de la sobrecapa es la de minimizar los efectos que sufre la superficie del metal expuesta al medio ambiente.

Como mencionamos en el capítulo anterior la descripción cuantitativa de las curvas de reflexión nos la proporciona las ecuaciones de Fresnel, generalización⁽¹⁾ de la ec. 2.24.

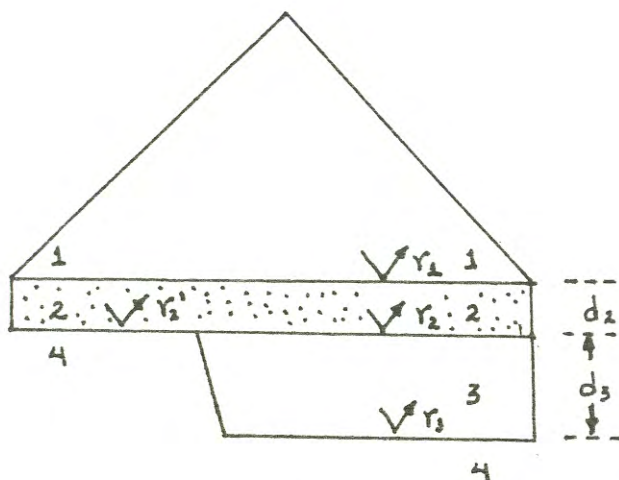


Fig. 3.1 Sistema de dos capas metal/dieléctrico que se propone estudiar con RTA.

Analizaremos las ecuaciones de Fresnel para el sistema mostrado en la Fig. 3.1.

$$\rho_1 = \frac{r_1 + \rho_2 \exp(2i\beta_2)}{1 + r_1 \rho_2 \exp(2i\beta_2)} \quad (3.1)$$

$$\rho_2 = \frac{r_2 + r_3 \exp(2i\beta_3)}{1 + r_2 r_3 \exp(2i\beta_3)} \quad (3.2)$$

donde r_i es el coeficiente de Fresnel para la interfaz entre los medios i/j , y $\beta_k = 2 \pi d_k (\epsilon_k - \epsilon_1 \sin^2 \theta)^{1/2} / \lambda$ es el espesor en fase del

medio k y θ es en ángulo de incidencia.

La reflectancia se define como el módulo cuadrado del coeficiente de reflexión ρ_1 , es decir

$$R = \rho_1 \rho_1^* \quad (3.3)$$

Consideremos brevemente algunas de las implicaciones de las fórmulas 3.1-3.

Ya que experimentalmente se usa luz linealmente polarizada TM, entonces el coeficiente r_3 es igual con cero en el llamado ángulo pseudo-Brewster (θ_B), así de la ec. 3.2 tenemos que ρ_2 toma el valor de r_2 y la reflectancia se comporta como si el sistema fuera compuesto por el sistema prisma/metal/dieléctrico.

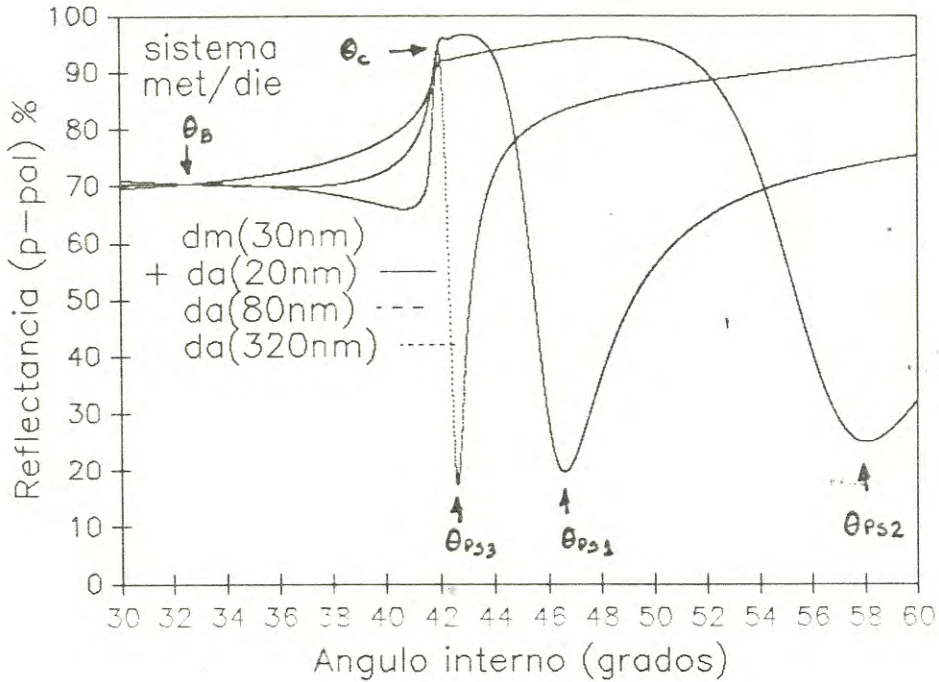


Fig 3.2. Reflectancia p-pol. .vs. ángulo interno del sistema metal/dieléctrico para tres espesores arbitrarios de la capa dieléctrica. Se observa la intersección de las tres curvas a un ángulo menor que el ángulo crítico, el cual define el θ_B . El espesor de la capa metálica se mantiene constante.

Por lo anterior podemos concluir que la reflectancia toma un mismo valor sin importar el espesor de la película dieléctrica en ese ángulo, como se muestra en la Fig. 3.2.

Lo cual nos conduce, como se observa en la Fig. 3.2., a que en un experimento RTA existe una intersección, para diferentes espesores del dieléctrico, en dicho ángulo. Así de la condición $r_3 = 0$ encontramos que

$$n_3 = \frac{n_1 \operatorname{sen} \theta_B}{(1 - n_1^2 \operatorname{sen}^2 \theta_B)^{1/2}} \quad (3.4)$$

La ec. 3.4 nos dice que si conocemos el ángulo de intersección, para dos o más curvas RTA, nos permitirá conocer el índice de refracción de la capa dieléctrica. En la Fig. 3.3. se muestra el comportamiento del índice de refracción de la capa dieléctrica como función del ángulo θ_B , se observa que el límite superior lo determina el ángulo crítico y a medida que se acerca a ese valor notamos que un cambio pequeño en el ángulo da lugar a grandes cambios en el índice.

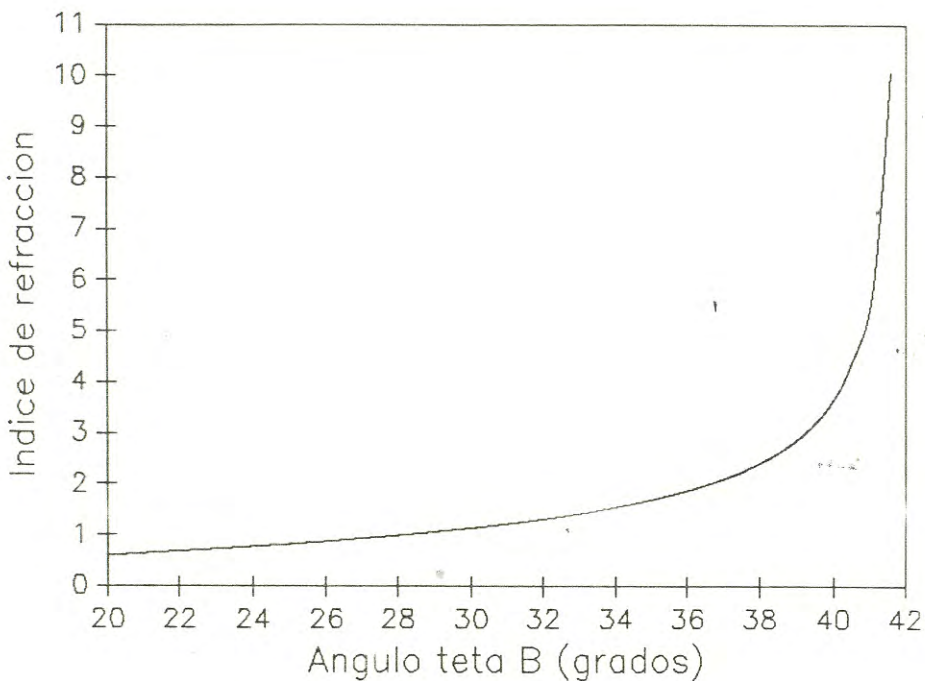


Fig. 3.3 El índice de refracción de la sobrecapa dieléctrica como función del ángulo θ_B , $n_1 = 1.5$ es el índice del prisma.

Notemos, además, que si el argumento de la exponencial en la ec. 3.2 es imaginario, o $2\beta_3$ es real, la ec. 3.2 permanece inalterada cuando el espesor en fase β_3 se reemplaza por $\beta_3 \pm m\pi$, β_3 es real

siempre que $\epsilon_3 - \epsilon_1 \sin^2 \theta > 0$, es decir si el espesor de la capa dieléctrica se reemplaza por $d_3 + d'_3$ donde d'_3 esta dado por

$$d'_3 = \frac{\lambda}{2 n_{3e}} , \quad n_{3e} = (\epsilon_3 - \epsilon_1 \sin^2 \theta)^{1/2} \quad (3.5)$$

para $m = 1$, a n_{3e} le llamaremos el índice efectivo del medio.

En principio el ángulo puede variar entre 0 y 90 grados, pero en un barrido en ángulo, como lo es el experimento RTA, dicha condición se satisface para algun ángulo el cual denotaremos por θ_A .

Por lo tanto, la reflectancia tendrá el mismo valor en θ_A para dos o más curvas correspondientes a un espesor d_3 y otra que exceda en d'_3 (o un múltiplo entero) el espesor de la primera película dieléctrica. Se demuestra que existe un nuevo ángulo θ_A donde las curvas RTA se intersectan, ver Fig 3.3., lo cual nos permitirá conocer la diferencia de espesor d'_3 de acuerdo con la ec. 3.5 una vez que halla sido determinado el índice de la sobrecapa, así de las ecuaciones 3.4 y 3.5 obtenemos

$$d'_3 = \frac{\lambda}{2 n_1} \left(\frac{1 - n_1^2 \sin^2 \theta_B}{\sin^2 \theta_B - \sin^2 \theta_A + n_1^2 \sin^2 \theta_A \sin^2 \theta_B} \right)^{1/2} \quad (3.6)$$

La ecuación 3.6 nos permitirá conocer el espesor de la película dieléctrica siempre y cuando podamos encontrar los ángulos donde se realizan dichas intersecciones.

Estos dos parámetros experimentales nos permiten determinar el índice y el espesor de la sobrecapa dieléctrica, faltando por determinar los correspondientes de la película metálica, para lo cual contamos con la información usual de alguna de las curvas RTA, además como se han relizado sobrecapas con diferentes espesores para el mismo espesor de la capa metálica podemos obtener la información de cualquiera de ellas.

Dado a que las relaciones cuasianalíticas entre la constante dieléctrica, el espesor del metal y los parámetros experimentales de la curva de resonancia son complicadas de manejar y las aproximaciones empleadas para llegar a ellas limitan el uso de éstas en ciertos casos e intervalos espectrales, ver ec. 2.61, realizamos un ajuste teórico-experimental usando el método de mínimos cuadrados no lineales

multiparamétrico, donde el índice de refracción, el de absorción y el espesor n_2 , k_2 y d_2 del metal son usados como parámetros y fijamos n_3 y d_3 del dieléctrico, según los valores calculados con las ecs. 3.5 y 3.6, para obtener el índice complejo y el espesor de la película metálica .

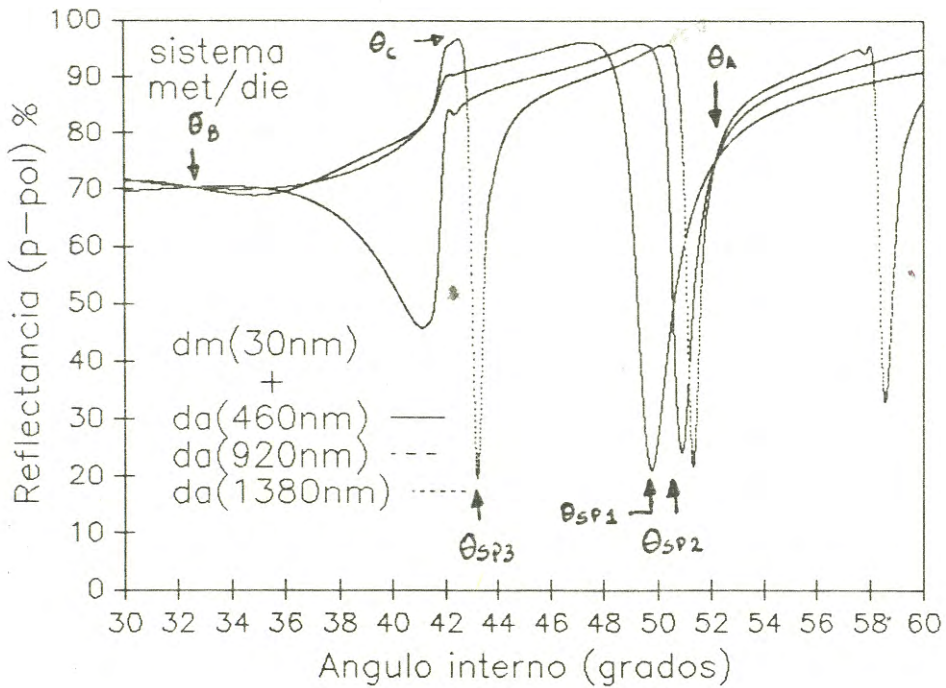


Fig. 3.4 Curvas RTA para el sistema mostrado en la Fig. 2.1 se observa un intersección a un ángulo mayor que el ángulo crítico, el ángulo θ_A .

3.2 El programa.

3.2.1 El método de mínimos cuadrados no lineales multiparamétrico: El método de mínimos cuadrados.

Uno de los métodos más populares para realizar un ajuste, y el que usaremos en este trabajo, es el de mínimos cuadrados. Este consiste en la minimización de la llamada función mérito, la cual se define como la suma de las desviaciones cuadráticas entre los datos experimentales y la función modelo, dividido entre la desviación estandar,

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - y(x_i, \mathbf{a})]^2 / \sigma_i^2 \quad (3.7)$$

donde n es el número de datos experimentales, y_i es el i-ésimo dato experimental, $y(x_i, \mathbf{a})$ es la función modelo evaluada en el punto de medición x_i , \mathbf{a} son los M parámetros de los cuales depende la función modelo y σ_i son las incertidumbres de los y_i datos experimentales.

Entonces nos enfrentamos al problema matemático de minimizar una función en un espacio de M dimensiones, es decir queremos encontrar

$$\nabla \chi^2 = 0 \quad (3.8)$$

En esta etapa existen dos casos generales los cuales tienen diferente tratamiento, el primero cuando la función modelo depende linealmente con respecto a los M parámetros y la solución puede ser obtenida directamente de la ec. 3.8, el otro cuando la función es no lineal, en la Tabla 3.1., se muestra un cuadro sinóptico.

Método de Mínimos Cuadrados Multiparámetro		
Función	Método	Forma
Lineal	Directo	Inversión
No lineal	Indirecto	Iteración

Tabla 3.1 Cuadro sinóptico del método de mínimos cuadrados multiparamétrico, cuando la función modelo depende linealmente o no con respecto de los parámetros.

3.2.2 Función no lineal en los parámetros.

Si la función es lineal en los parámetros podemos, de acuerdo a la ec. 3.8, encontrar un sistema de M ecuaciones lineales, donde las incógnitas son los M parámetros, que podemos invertir para encontrar la solución del problema.

Cuando la función es no lineal en los parámetros las M ecuaciones que obtenemos de la ec 3.8 no pueden ser invertidas en general, como en el caso anterior, y lo que procede es encontrar numéricamente los

ceros de esas M ecuaciones simultáneamente. Otra forma de encontrar el mínimo es emplear una forma iterativa, dicha forma iterativa podemos resumirlas en algunos pasos.

Receta 1.

- 1.- Primero damos valores apropiados de entrada a los parámetros.
- 2.- Proporcionamos o calculamos los incrementos para cada uno de los parámetros, y tenemos los nuevos a's $a \rightarrow a + \Delta a$ (Existen varios algoritmos para este paso).
- 3.- Si $\chi^2(a+\Delta a) < \chi^2(a)$ entonces tomamos los nuevos a's como $a+\Delta a$ y volvemos al paso (2).
- 4.- Si $\chi^2(a+\Delta a) > \chi^2(a)$ conservamos los a's y volvemos a (2).
- 5.- Condición de finalización.

Para encontrar la dirección correcta de la búsqueda existen algunos algoritmos, ver ref. 2.12, con marcadas diferencias, como la búsqueda GRIDLS, el PASO MAS PROFUNDO, la LINEALIZACION DE χ^2 , LA EXPANSION DEL GRADIENTE o el método LEVENBERG-MARQUARDT.

El método empleado en el programa es el de expansión del gradiente, pero a fin de poder entender dicho método describiremos primeramente y de manera somera los dos anteriores a éste.

a) **El método del paso más profundo.**

El método consiste en buscar el mínimo de χ^2 en la dirección inversa de su gradiente y comienza incrementando todos los parámetros simultáneamente por una cantidad δa dada por

$$\delta a_j = - \gamma_j \Delta a_j \quad (3.9)$$

donde γ_j es la componente j-ésima del gradiente adimensional de χ^2 , así la búsqueda se realiza en dirección negativa a la de máximo cambio.

Este método resulta efectivo cuando los valores iniciales se encuentran en una región alejada del mínimo, pero tiene la desventaja de que debemos proporcionarle el incremento del paso para la búsqueda de las cantidades ajustadas.

b) **El método de linealización.**

Como su nombre lo indica el método consiste en linealizar la función mérito

$$\chi^2(a_j + \delta a_j) = \chi^2(a_j) + \sum_{j=1}^M (\partial \chi^2 / \partial a_j) \delta a_j \quad (3.10)$$

Sustituyendo esta ecuación en la ec. 3.8 obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones para los δa 's.

$$\sum_{j=1}^M \alpha_{jk} \delta a_j = \beta_k \quad (3.11)$$

donde los β 's y α 's están dadas por las siguientes relaciones

$$\beta_k = - \frac{1}{2} \partial \chi^2 / \partial a_k \quad (3.12)$$

y

$$\alpha_{jk} = \frac{1}{2} \partial^2 \chi^2 / \partial a_j \partial a_k \quad (3.13)$$

donde α_{jk} es un elemento de la matriz curvatura.

Resolviendo para el sistema de ecuaciones dadas por la ec. 3.11 encontramos los incrementos, que sumados a los a_j nos proporciona la nueva aproximación.

El método resulta efectivo cuando los valores iniciales se encuentran en una región cercana a la del mínimo.

c) **El método de expansión del gradiente.**

Algoritmo de Levenberg-Maquardt.

Este método toma las mejores características de los dos métodos, expuestos anteriormente, para interpolar la búsqueda entre ellos.

Definimos un nuevo sistema de ecuaciones análogo al dado por la ec. 3.11 de la forma siguiente

$$\sum_{i=1}^M \alpha'_{ik} \delta a_i = \beta_k \quad (3.14)$$

donde

$$\alpha'_{ii} = \alpha_{ii} (1 + \lambda) \quad (3.15)$$

y

$$\alpha'_{ik} = \alpha_{ik} \quad (i \neq k) \quad (3.16)$$

donde β_j y α_{ij} están dados por las ecuaciones 3.13 y 3.14

respectivamente y λ es un parámetro que nos permitirá la interpolación entre los dos últimos métodos.

Si el valor de λ es grande comparado con 1, el sistema dado por la ec. 3.14 se torna diagonalmente dominante y los incrementos son de la forma

$$\delta a_k = \beta_k / \lambda \alpha_{kk} \quad (3.17)$$

así la ec. 3.17 converge hacia la ec. 3.9, el método del paso más profundo, pero pesados por los elementos recíprocos de la diagonal de la matriz curvatura, que como podemos constatar de su definición poseen las dimensiones apropiadas para ser constante de proporcionalidad, es decir, α_{kk} es la segunda derivada de χ^2 por lo que posee dimensión a_k^{-2} , mientras que β_k es la primera derivada de χ^2 por lo que su dimensión es a_k^{-1} , de donde se deduce lo dicho anteriormente.

Por otro lado si λ toma un valor muy pequeño la ec. 3.14 converge hacia la ec. 3.11, el método de linealización de la función mérito.

Este algoritmo consiste en alterar los elementos de la diagonal de la ec. 3.14 introduciendo un parámetro λ que ayuda a converger, según el valor de λ , a los dos métodos anteriores.

Esta característica hace que el método de búsqueda sea convergente aunque los valores iniciales se encuentren en una región cercana o no del punto donde existe un mínimo. El algoritmo podemos resumirlo en los siguientes pasos:

Receta 2.

- 1.- Encontramos el valor de $\chi^2(a)$.
- 2.- Damos un valor para λ , por ejemplo $\lambda = 0.001$.
- 3.- Resolvemos el sistema de ecuaciones dado por 3.14 para los δa 's y evaluamos $\chi^2(a+\delta a)$.
- 4.- Si $\chi^2(a+\delta a) \geq \chi^2(a)$, aumentamos λ por un factor de 10 y volvemos a (3).
- 5.- Si $\chi^2(a+\delta a) < \chi^2(a)$, disminuimos λ por un factor de 10 y ahora la nueva solución es $a = a + \delta a$ y volvemos a (3).
- 6.- La condición de finalización podemos requerirla cuando χ^2 disminuya por una cantidad despreciable, pero antes hacemos $\lambda = 0$

y calculamos la matriz $\bar{\alpha}^{-1}$, la cual nos proporciona la matriz de covarianza para los parámetros ajustados \mathbf{a} .

En la Tabla 3.2., se muestra en resumen los métodos para obtener la información a partir de la curva RTA, cuando tenemos un sistema de una capa y de dos capas.

Sistema	inversión	iteración		
	Ref _{RTA}	Met.	Min. Cuad.	Multi.
	$R_{\min}, k_{\min}, \Delta k$	(a)	(b)	(c)
v/m/a	1	1	1	1
v/m/d/a	0	1	1	1

Tabla 3.2 Formas de obtener la información a través de las curvas RTA para los sistemas de una (v/m/a) y dos (v/m/d/a) capas. Vidrio; Metal ; Dieléctrico y Aire. 1 → Posible y 0 → Imposible.

3.2.3 Los subprogramas para la reflectancia y sus derivadas.

Para realizar el programa (FORTRAN 77) tomamos varias subrutinas del libro Numerical Recipes (ref. 2.13), una calcula el valor de χ^2 , otra nos sirve para invertir la ec. 3.14, la siguiente para encontrar la matriz de covarianza y la última para llevar a cabo los pasos 4 y 5 de la receta 2.

Además es necesario calcular el valor de la función modelo, en este caso la reflectancia de un sistema multicapas, así como las derivadas de las mismas con respecto a los parámetros.

Para realizar esa subprograma se tomó como base el artículo de Dupoisot et al., (ref. 3.2). Básicamente consiste en la generalización de la ec. 3.1 con lo cual tenemos que el coeficiente de reflexión para luz p-pol esta dado por

$$\rho_{j-1} = \frac{r_{j-1} + \rho_j \cdot ss_j}{1 + r_{j-1} \rho_j \cdot ss_j} = \frac{u_j}{v_j} \quad (3.18)$$

r_{j-1} es el coeficiente de Fresnel de la interfaz de los medios $j-1/j$, ρ_j es la contribución de las $j-2$ capas restantes, y ss_j es el exponente del espesor en fase multiplicado por 2 i de la j -ésima capa.

$$r_{j-1} = \frac{\epsilon_j k_{z(j-1)} - \epsilon_{j-1} k_{z(j)}}{\epsilon_j k_{z(j-1)} + \epsilon_{j-1} k_{z(j)}} \quad (3.19)$$

$$k_{zj} = \frac{\omega}{c} (\epsilon_1 - \epsilon_1 \sin^2 \theta)^{1/2} \quad (3.20)$$

$$ss_j = \exp(2id_j k_{zj}) \quad (3.21)$$

Donde j puede tomar los valores $n, n-1, \dots, 1$, n es el número de capas del sistema y la condición de inicio $\rho_n = r_n$.

La reflectancia se calcula como el módulo cuadrado de ρ_1 , procediendo iterativamente de acuerdo a la ec. 3.18 y las ec. 3.19-21.

Para encontrar la derivada de la reflectancia, derivamos la ec. 3.18 con lo cual obtenemos

$$\frac{\partial \rho_{j-1}}{\partial a_i} = \left(\frac{\partial u_j}{\partial a_i} - \rho_{j-1} \frac{\partial v_j}{\partial a_i} \right) \frac{1}{v_j} = \frac{u_{j1}}{v_j} \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial a_i} = \frac{\partial r_{j-1}}{\partial a_i} + \frac{\partial \rho_j}{\partial a_i} ss_j + \rho_j \frac{\partial ss_i}{\partial a_i} \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial v_j}{\partial a_i} = \frac{\partial r_{j-1}}{\partial a_i} \rho_j ss_j + r_{j-1} \frac{\partial \rho_j}{\partial a_i} ss_j + r_{j-1} \rho_j \frac{\partial ss_j}{\partial a_i} \quad (3.24)$$

Con las ec. 3.22-24 podemos encontrar las derivadas del coeficiente de reflexión del sistema ρ , donde a_i representa algunos de los parámetros del ajuste.

Derivando la ec. 3.3 obtenemos la derivada de la Reflectancia,

$$\frac{\partial R}{\partial a_i} = \rho_1^* \frac{\partial \rho_1}{\partial a_i} + \rho_1 \frac{\partial \rho_1^*}{\partial a_i} \quad (3.25)$$

La ec. 3.22 tiene la misma forma que la ec. 3.18, es el cociente de dos cantidades, así derivadas de orden mayor pueden ser obtenidas de la ec. 3.22 haciendo las respectivas analogías. Si tomamos derivadas de orden mayor basta con tomar las derivadas de las ec. 3.22 y 3.25 hasta el orden deseado.

Capítulo IV

LA APLICACION

En el capítulo anterior establecimos el método para la caracterización de películas metálicas y de su modificación superficial, pensada, por ejemplo, como la oxidación que sufre el cobre o la sulfatación de la plata.

El método requiere el recubrimiento de una película metálica, manteniendo constante su espesor, con una sobrecapa dieléctrica, por lo menos con dos espesores distintos, para inhibir los efectos antes mencionados, ver Fig 3.1, y de su medición con RTA, de donde se extrae simultáneamente la información deseada de ambas películas, usando θ_B , θ_A y las características de las curvas; para posteriormente determinar los parámetros del óxido metálico a partir de los datos experimentales RTA, obtenidos para el metal más óxido.

En este capítulo aplicaremos el método a un "experimento" simulado con el fin de demostrar la funcionalidad del mismo y, así dar cuenta de la propagación de errores introducidos por la determinación de los parámetros θ_B y θ_A a partir de las curvas y de la propagación de los errores en la determinación de los parámetros de la película metálica y su óxido, a través del programa.

4.1 El problema simulado.

Las curvas teóricas se obtuvieron de un programa que simula la reflectancia p-pol, para el modelo de capas lisas, de un experimento RTA a una longitud de onda dada. Las constantes dieléctricas las calcula interpolando los datos experimentales⁽¹⁾, para los materiales seleccionados y se le proporcionan los espesores de las película. Estos programas fueron realizados por el Dr. Roberto

Machorro M. Los materiales seleccionados fueron Cobre y Sulfuro de Zinc.

a) Caracterización de la capa dieléctrica.

En la Fig. 4.1, se muestran las tres curvas correspondientes a el sistema prisma/Cu/ZnS/aire, para 3 diferentes espesores del ZnS, se observa la aparición de dos mínimos en una de las curvas, fenómeno que se debe al acoplamiento de los PS con los modos de onda guiada (GWSP)^(2,3) que aparecen en la sobrecapa dieléctrica, y además de las diferentes posiciones de los mínimos, debido a los distintos espesores de la sobrecapa dieléctrica. Notemos que existen una serie de intersecciones a diferentes ángulos, pero solamente en dos de ellos la reflectancia permanece invariante para las tres curvas. Esas intersecciones definen los ángulo Pseudo-Brewster o θ_B y el θ_A .

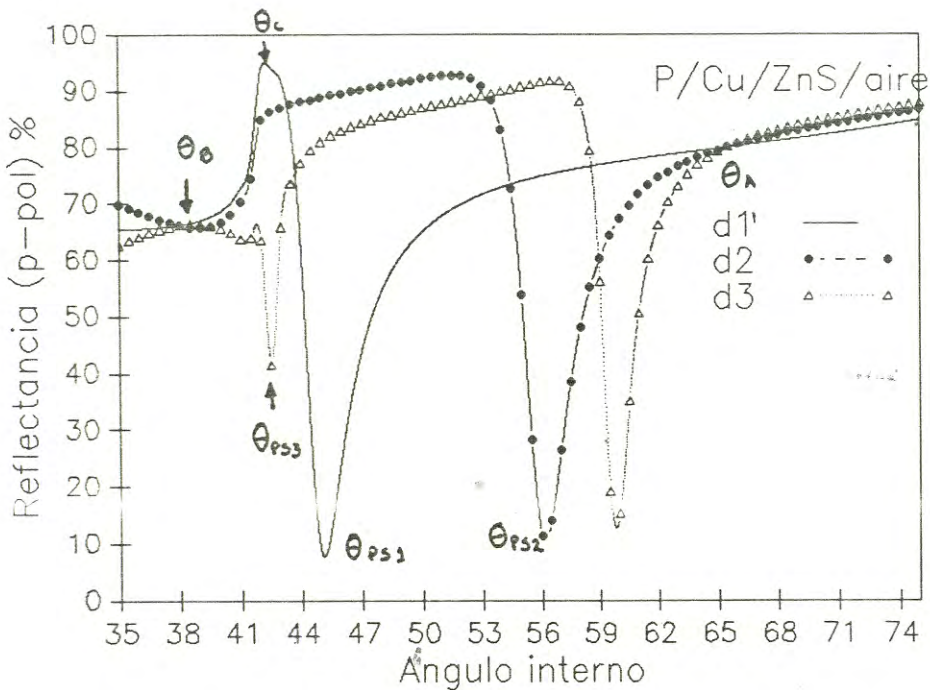


Fig. 4.1 En las curvas simuladas se observan los ángulos teta B, teta A y los desplazamientos debido a los diferentes espesores de la capa de Sulfuro de Zinc, sobre una película de Cobre del mismo espesor.

La obtención de los valores numéricos de esos parámetros nos permiten calcular los valores del índice de refracción y el espesor de

la sobrecapa empleando las ecuaciones 3.4 y 3.6. Es necesario recordar que la ec. 3.6 debe contener un número entero como factor multiplicativo.

Los valores encontrados para los parámetros θ_A y θ_B a partir de la Fig. 4.1 y los valores calculados para el índice de refracción y la diferencia de espesor entre las películas dieléctrica se muestran en la Tabla 4.1.

$\theta_B = 37.88^\circ \pm 0.1^\circ$	$\theta_A = 65.44^\circ \pm 0.1^\circ$
$n_3 = 2.36 \pm 0.04$	$d_3 \text{ (nm)} = 163.84 \pm 3.6$

Tabla 4.1. Valores en grados de los ángulos teta A y teta B medidos en los puntos donde las tres curva se intersectan, ver Fig. 4.1. Los valores calculados para el índice n_3 y la diferencia de espesor d_3 entre las películas dieléctricas.

Las incertidumbres fueron calculadas a partir de las siguientes ecuaciones

$$\sigma_{n_3} = \sigma_{\theta_B} n_3 (1 + n_3^2) \cot \theta_B \quad (4.1)$$

donde σ_{θ_B} es la incertidumbre, en radianes, en la medida del ángulo θ_B .

$$\sigma_{d_3}^2 = \frac{16 \sigma_{\theta_B}^2 d_3^6}{\lambda^4} \left(n_3^4 (1 + n_3^2)^2 \cot^2 \theta_B + n_1^4 \sin^2 \theta_A \cos^2 \theta_A \right) \quad (4.2)$$

Para obtener menores incertidumbres en la determinación del índice y el espesor de la sobrecapa dieléctrica, debemos reducir la incertidumbre en la medición de los ángulos, digamos a un centésima de grado, lo cual las disminuiría en un orden de magnitud.

b) Caracterización de la película metálica.

Una vez obtenidos los valores para el índice de refracción y el espesor del ZnS, tomamos las tres curvas, una a la vez, y utilizamos el programa de ajuste FITRTA para encontrar el índice de refracción complejo y el espesor del cobre, que actúan como variables, fijando todos los demás parámetros, para lo cual hay que proporcionarle los

valores de inicio y el programa da los valores finales obtenidos del mejor ajuste. El tiempo promedio por ajuste fue de aproximadamente 15 min., en una PC CompuAdd 386. En la primera curva se varió, además el espesor de la película dieléctrica. Los resultados obtenidos del primer ajuste se muestran en la Tabla 4.2.

	A1	E1
n_2	0.250	0.004
k_2	3.412	0.08
d_2 (nm)	34.960	1.02
d_3 (nm)	151.380	0.50

Tabla 4.2. Valores encontrados para el ajuste realizado sobre la primera curva variando los parámetros correspondientes al metal y además el espesor de la película dieléctrica, A1 valores del ajuste a la primera curva y sus errores E1.

En los ajustes a las dos curvas restantes también se mantuvo fijo el espesor del dieléctrico, los cuales fueron calculados de acuerdo con la ec. $d_3 = d_3 + m d_3'$ los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 4.3., de donde se observa que el espesor de la segunda película corresponde a la suma del espesor de la primera más 4 veces d_3' y el de la tercera a 8 veces.

	A2	E2	A3	E3	Prom.
n_2	0.240	0.002	0.230	0.002	0.240
k_2	3.206	0.007	3.100	0.009	3.240
d_2 (nm)	37.470	0.240	39.630	0.230	37.350
d_3 (nm)	806.74	14.41	1462.21	28.80	

Tabla 4.3. Valores para el índice complejo y el espesor del metal obtenidos de los ajustes realizados sobre la segunda y tercera curva (Fig. 4.1). Además se muestran los espesores de las sobrecapas dieléctricas. A representa los valores obtenidos en los ajuste y E los errores, el número que les precede se refiere a la curva. La última columna son los valores obtenidos de promediar los valores en A1, A2 y A3.

En la Fig. 4.2. se muestran las curvas simuladas y sus respectivos ajustes, se observa que existen ligeras desviaciones entre

las simulada y las ajustadas. Esta desviaciones se deben a que para encontrar las curvas ajustadas se tomaron como los parámetros de la película de cobre, los valores promedios mostrados en la última columna de la Tabla 4.3.

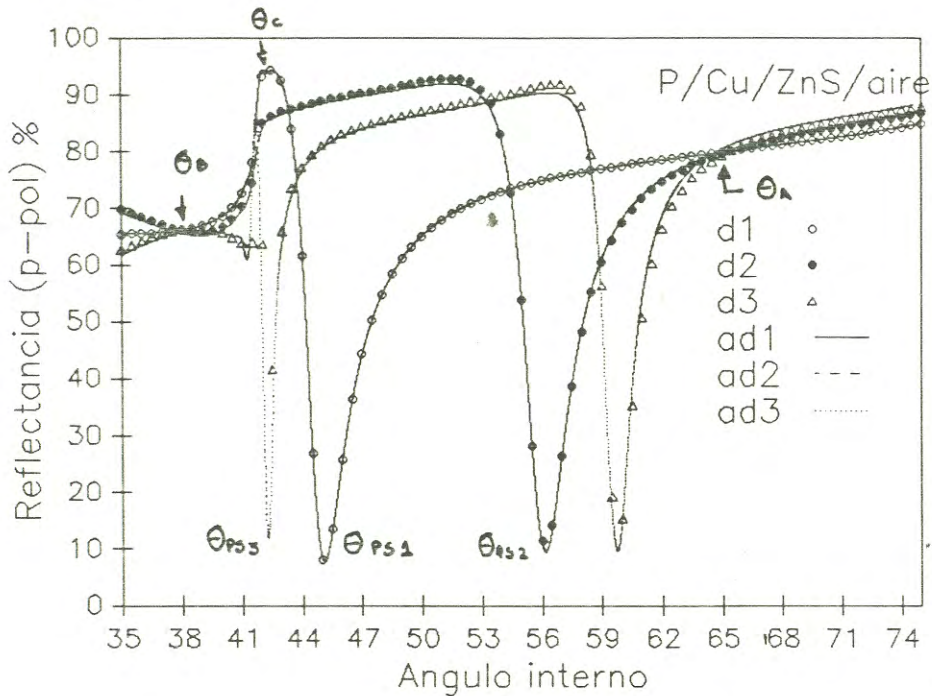


Fig. 4.2 Las curvas simuladas y sus respectivos ajuste según los valores que se muestran en las Tablas 4.2 y 4.3, para el cobre se tomaron los valores promedio de la última columna de la Tabla 4.2.

Cabe mencionar que la información redundante, para la película metálica, que ofrecen las tres curvas obtenidas con diferentes espesores del dieléctrico, nos sirven para discriminar alguna doble solución, ya que podemos elegir aquellas soluciones coincidentes de los tres ajuste, restando además las medidas a otras frecuencias.

c) Caracterización de la sobrecapa natural.

Para el estudio de la modificación superficial se toman los valores promedios obtenidos para el cobre y a través del programa, fijando esos valores y variando el índice complejo y el espesor de la capa de óxido, obtener la información requerida del óxido. Los valores obtenidos para el óxido se muestran en la Tabla 4.4.

En este caso no es posible encontrar directamente, a partir de la medición de θ_A , los espesores de las capas aislantes, solamente podemos encontrar sus diferencias como múltiplos del valor calculado a partir de este ángulo, en este caso, esos múltiplos corresponden a 4 y 8 veces esa cantidad.

Lo más importante es que fue posible deducir la respuesta de la película metálica limpia, ya que se determinó su índice complejo y su espesor, lo que permitió a su vez encontrar la constante dieléctrica y el espesor de su óxido.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En el capítulo anterior aplicamos el método a un problema simulado, en el cual es posible determinar el índice de refracción de la sobrecapa y la diferencia de espesor entre las películas dieléctricas. Para conocer los espesores absolutos de las mismas se requiere conocer además el de la primera.

La deducción del índice de refracción complejo y el espesor de la película metálica fue posible. Estos datos fueron utilizados para encontrar los parámetros de una sobrecapa formada naturalmente sobre la superficie del metal.

En la siguiente sección puntualizaremos los resultados obtenidos en el capítulo anterior y en la segunda daremos las conclusiones surgidas en el presente trabajo.

5.1 Resultados.

En la primera parte obtuvimos el índice de refracción y la diferencia entre los espesores de las sobrecapas dieléctricas protectoras, a partir de la medición de los ángulos θ_B y θ_A , y tuvimos que deducir el espesor de la primera a fin de determinar los espesores absolutos de las mismas.

Como se observa en la Tabla 4.3 la propagación del error es multiplicativo, siendo mayor para mayores espesores de la capa.

Las incertidumbres en la determinación del índice y la diferencia de los espesores pueden ser reducidas minimizando la incertidumbre en la medición de los dos ángulos experimentales; lo cual disminuiría las diferencias entre los valores del índice complejo y el espesor de la película metálica arrojados por los ajustes realizados a las tres curvas de la Fig. 4.1.

Fue posible deducir el índice de refracción complejo y el espesor del metal limpio, para lo cual realizamos un ajuste teórico-experimental, empleando el programa FITRTA, a cada una de las curvas de la Fig. 4.1, pero como se observa en la Tabla 4.3 con ligeras diferencias, diferencias que pueden ser minimizadas disminuyendo el error en la determinación de los ángulos.

Los datos obtenidos para la película metálica libre son empleados para obtener el índice de refracción complejo y el espesor del óxido, cuyo espesor pequeño, crecido de manera "natural", produce cambios muy significativos en la respuesta del metal libre, ver Fig. 4.3.

5.2 Conclusiones.

Se presenta un método que permite caracterizar simultáneamente, a partir de las curvas RTA, una película metálica en presencia de una sobrecapa dieléctrica. Los valores así obtenidos nos permiten obtener la reflectancia RTA del metal libre. El mismo método permite estudiar las modificaciones que sufre la superficie cuando se expone al ambiente, supuesta en este trabajo como la oxidación de una película de cobre.

El método amplía los tipos de materiales que se pueden estudiar con RTA, dieléctricos y semiconductores en la parte visible del espectro, ya que podemos obtener los índices de refracción y los espesores de los mismos.

En el presente trabajo se demuestra que las modificaciones que sufre la película metálica, cuando se expone al ambiente, alteran considerablemente la respuesta del metal libre, y no tomarlas en cuenta nos lleva a obtener valores muy diferentes con respecto a los obtenidos de la respuesta libre.

Existen capas de transición en las interfaces que tiene una respuesta propia y que no son contempladas en el presente modelo, las cuales pueden ser incluidas desarrollando modelos de medios compuestos.

Las películas no son ópticamente planas sino que presentan microrugosidades aleatorias que producen efectos adicionales que no podemos simular con el modelo de capas lisas.

Referencias

No existe
probablemente
sea 85
pag 338

Capítulo 1

- 1.1 Pines, D. y Bohm, D: Phys. Rev. **76**, 336 (1952)
- 1.2 Otto, A.: Z. Physik, **216**, 398 (1968)
- 1.3 Kretschmann, Z. Physik., **221**, 346 (1969)
- 1.4 Pockrand, I.: Surface Sci. **72**, 577 (1978)
- 1.5 Lopez-Rios, T.: Surface Sci. **81**, 529 (1979)
- 1.6 Fromhold, A. T.: "Theory of metal oxidation", vol. II (North Holland, 1982)
- 1.7 Regalado, L.E., Machorro, R: Proc. ICO-14, Agosto 24-28, Quebec, Canada, p 221-222.

Capítulo 2

- 2.1 Burstein, E., De Martini, F.(eds.): Polaritons, Proceeding of the first Taormina Research Conference on the Structure of Matter, Taormina, Italy (Pergamon Press Inc. 1974).
- 2.2 Agranovich, V. M., Mills, D. L.(eds.): Surface Polaritons (North Holland Co., 1982)
- 2.3 Raether, H: "Surface Plasmons on smooth and rough surfaces and on Grating" (Springer-Verlag, Berlin 1986).
- 2.4 Halevi, P: Rev. Mex. Fis., **27**, 97 (1980)
- 2.5 Ritchie, R. H.: Phys. Rev. **106**, 374 (1957)
- 2.6 Lopez-Rios, T.: Tesis (Paris) (1980)
- 2.7 Idem. ref.1.2
- 2.8 Born, M. y Wolf, E.: "Principles of Optics", (Pergamon Press 1980).
- 2.9 Idem. ref 1.3
- 2.10 idem. ref. 1.4 y 1.5
- 2.11 Garcia-LLamas, R., y Posada, A.: Reporte interno, CIF-US (1990)
- 2.12 Bevington, P. R.: "Data reduction and error analysis for the Physical Sciences", McGraw-Hill (1969).
- 2.13 Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., y Vetterlin, W. E.: "Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing" (Cambridge, U. P., New York 1986).

- 2.14 De Bruijn, H.E., Kooyman, R.P.H., y Greve Jan: Appl. Opt. 29 (13), 1974 (1990).

Capítulo 3

- 3.1 Macleod, A.: "Thin-Film Optical Filters", (Adam Hilger, Bristol, 1986)
- 3.2 Dupoisot, H. y Morizet, H.: Appl. Opt. 18 (15), 2701 (1979)

Capítulo 4

- 4.1 Palik, E.(ed.): Handbook of optical constants of solids, (Academic Press, 1985)
- * 4.2 Tomaš, M. S., y Lenac, Z.: Optics Comm., 55 (4), 267 (1985)
- 4.3 Herminghaus, S., y Leiderer, P.: Appl. Phys. Lett 54 (12), 99 (1989)

AGRADECIMIENTOS:

1205. 783
NIS 140183

Al CONACYT por el apoyo que me brindó durante dos años.

Al CIF-US por las facilidades prestadas para la culminación de este trabajo.

Al Depto. de Recursos Humanos de la Universidad de Sonora por los apoyos económicos otorgados.