



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARACTERIZACION DE PELICULAS SEMICONDUCTORAS DE SILICIO AMORFO HIDROGENADO PARA APLICACIONES FOTOVOLTAICAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE :

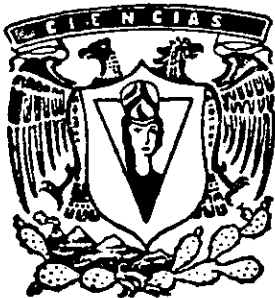
F I S I C O

P R E S E N T A :

ALEJANDRO BARRERA MERCADO

DIRECTOR DE TESIS:

FIS. HECTOR CRUZ MANJARREZ FLORES



287450



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

MAT. MARGARITA ELVIRA CHÁVEZ CANO
Jefa de la División de Estudios Profesionales
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:
"Caracterización de películas semiconductoras de silicio amorfo
hidrogenado para aplicaciones fotovoltaicas"

realizado por BARRERA MERCADO ALEJANDRO

Con número de cuenta 8634864-9, pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de tesis
Propietario

FIS. HECTOR CRUZ MANJARREZ FLORES

Propietario

DR. FERNANDO ALBA ANDRADE

Propietario

FIS. LUCIO ANDRADE BUENDIA

Suplente

DR. JOSE MANUEL SANIGER BLESÁ

Suplente

DR. JORGE RICKARDS CAMPBELL

Consejo Departamental de Física

Patricia Goldstein Menache
DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura



FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

AGRADECIMIENTOS

AL PUEBLO DE MÉXICO, POR COSTEAR EL MANTENIMIENTO DE LA EDUCACIÓN PÚBLICA.

A LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO Y EN PARTICULAR A LA FACULTAD DE CIENCIAS

Por haberme abierto las puertas y mi reconocimiento por la labor que realizan en la formación de tantos jóvenes de excelencia que son el futuro de nuestro país.

AL INSTITUTO DE FÍSICA Y EN PARTICULAR AL DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA Y TECNOLOGÍA AVANZADA

Por apoyarme con una beca y brindarme sus extraordinarias instalaciones y sofisticados instrumentos científicos.

CON ADMIRACIÓN Y RESPETO A MIS MAESTROS Y ASESORES

**DR. FERNANDO ALBA ANDRADE
FIS. HÉCTOR CRUZ-MANJARREZ FLORES**

Por sus consejos y el apoyo brindado incondicionalmente para la elaboración de esta tesis.



DEDICATORIAS

Suscipe, Sancte Pater YHVH, Omnipotens sempiternae Deus, Dominus Iesu Christi et Spiritui Sancto, huec tesis, universam meam libertatem, Accipe memoriam, intellectum atque voluntatem omnem. Quidquid habeo vel possideo, mihi largitus es: id tibi totum restituo, ac tuae prorsus voluntati trado gubernandum. Amorem tui solum cum gratia tua mihi dones, et dives sum satis, nec aliud quidquam ultra posco.

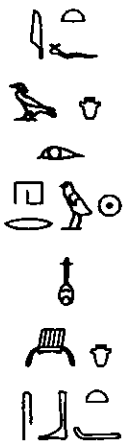


Vere Dignum et justum est, aequum et salutare, nos tibi semper, et ubique gratias agere : Domine Sancte. Pater omnipotens, aeternae Deus. Qui cum unigenitum Filio tuo, et Spiritu Sancto, unus es Deus, unus es Dominus: non in unius singularitate personae, sed in unius Trinitate substantiae. Quod enim de tua gloria, revelante te, credimus, hoc de Filio tuo, hoc de Spiritu Sancto, sine differentia discretionis sentimus.

Consummatum Est.



A mis Padres: **Magdalena Mercado González y Dimas Barrera Osnaya**



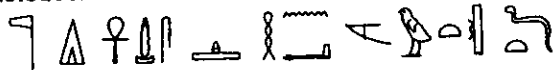
- Por impulsar mi desarrollo y acompañarme en mi gozo de aprender y descubrir las maravillas que el CREADOR comparte con nosotros.
- Por abrirme la posibilidad de tener fe y confianza en mi mismo y no hacerme sentir a prueba, sino pleno de libertad, al saberme amado incondicionalmente.
- Por decirme siempre la verdad, haciéndome sentir digno de confianza y capaz de comprenderlos y comprender el mundo.
- Por ubicarme en la "realidad" e indicarme cuando actúo en forma contraria a lo que digo, pero siempre respetando mi opinión.
- Por marcarme los límites de la vida y no darme lo que yo podía conseguir, posibilitándome a ser independiente.
- Porque con su ejemplo me invitaron a vivir el matrimonio como la máxima expresión de AMAR que existe entre dos seres.
- Por no sentirse superiores a nosotros sus hijos, no imponernos sus ideales y permitimos elegir nuestra vida.
- Por inculcarme que los principios lo son todo.



Por esto y muchas razones más, les dedico esta Tesis.

A mis hermanos: **Carlos, Enrique y Felipe**

Compañeros de juegos en los días de infancia, mis mejores y más cercanos amigos; espero haber sido, ser y seguir siendo un ejemplo digno de ustedes.



Al Señor **Edmundo Stierle Homsy** y su Señora esposa **Angélica Tijerina Carranza**, por distinguir a mi familia con su amistad y apoyarme en momentos difíciles.



A mi Maestra **Haddy Ramón Molas** el primer eslabón que pulió mi alma y modeló mi corazón. Es maravilloso saber que existe una Persona, Maestra y Amiga como usted.

A mis amigos **Miguel Ángel Téllez García, Jorge Luis Alanís, Saúl Jiménez Yllescas y Manuel Muñoz Orozco**, por apreciarme sin juzgarme, criticarme sin herirme, porque con su amistad se multiplicaron mis goces y dividieron mis penas por un factor de 2^{no}.

A ustedes con: $r = 1 - \text{sen}(\theta)$

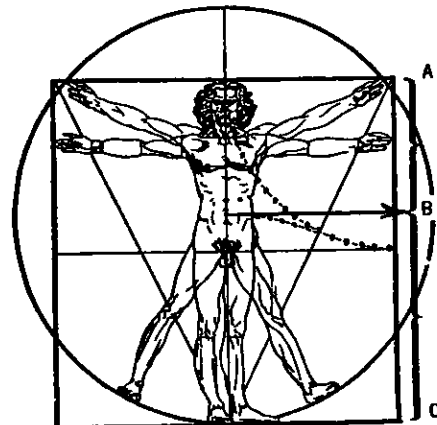
A mis abuelitos maternos y paternos, in memoriam:

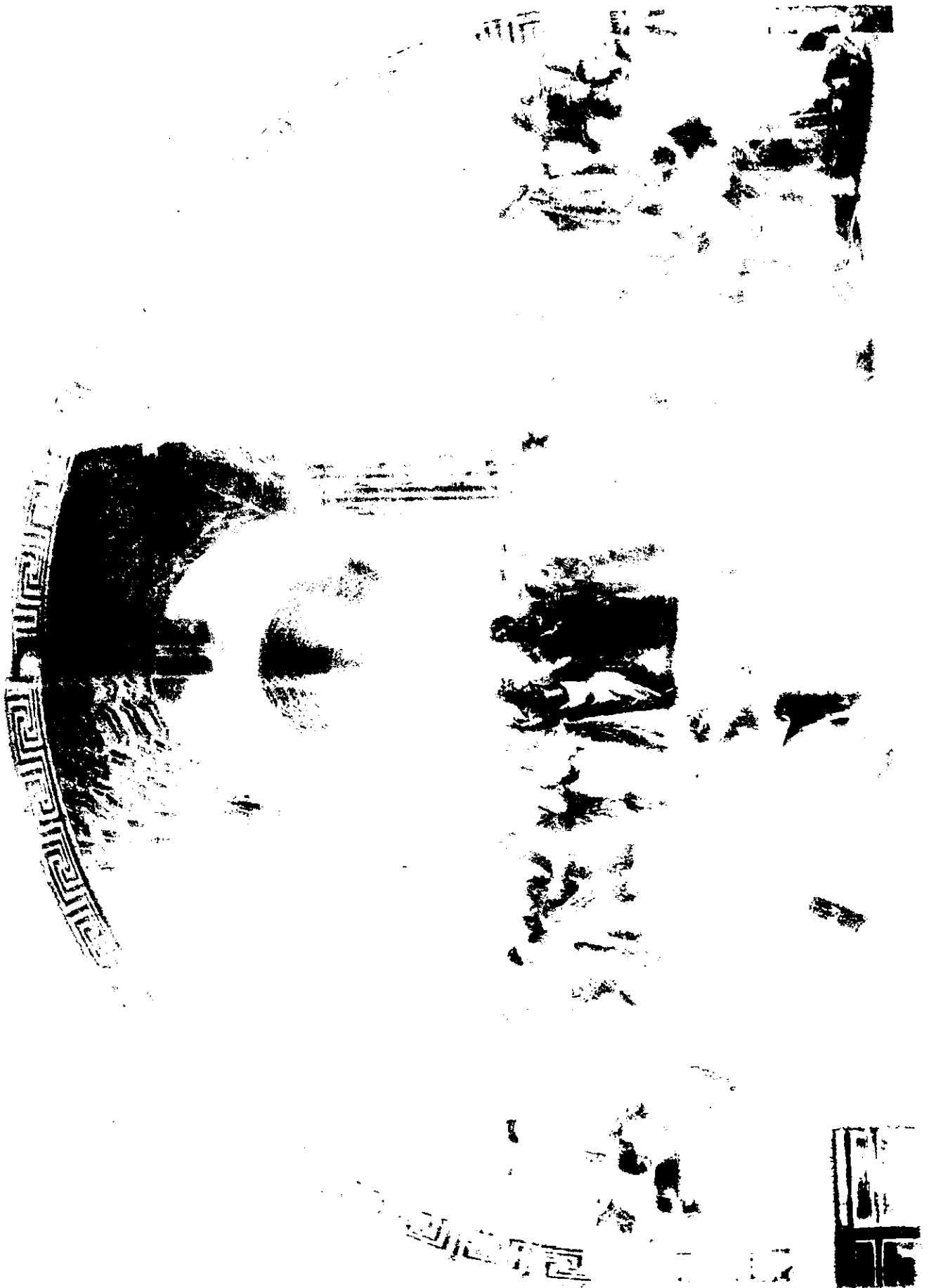
- **Julia González Durán y Felipe Mercado y Lara**
- **Natalia Osnaya Gómez y Dimas Barrera Alanís**

A mis tíos **María Eleazar Barrera Osnaya y Edmundo Mercado y Lara** por su valiosa y sincera amistad que de una u otra manera contribuyeron a mi formación humana y profesional.



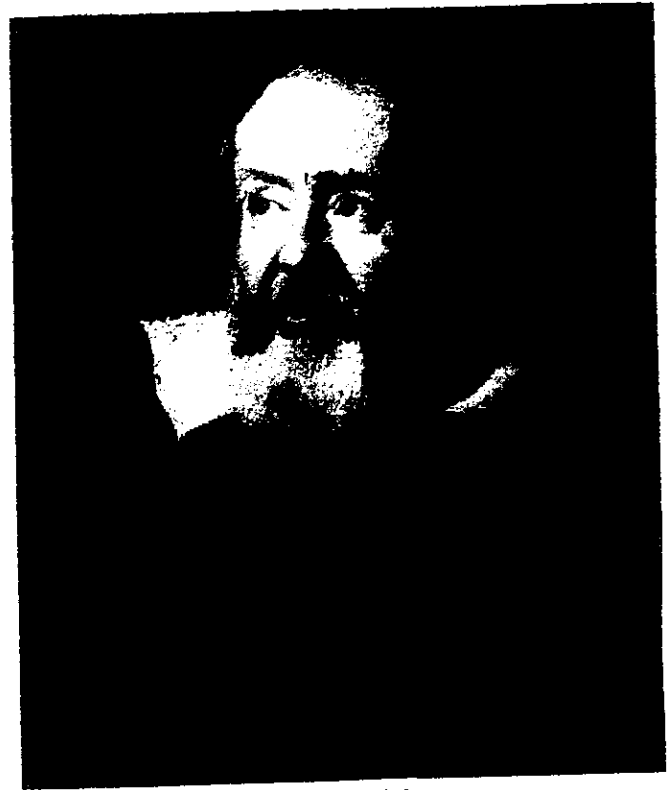
En las páginas siguientes están varios de mis **MAESTROS**, los cuales son padres intelectuales para mí, a ellos les agradezco que indirectamente me enseñaran lo útil, lo verdadero, lo bello, que dieran luz a mis ojos, aliento a mi cerebro, bondad a mi alma, verdad a mis palabras, rectitud a mis actos y porque esta tesis fue posible gracias a que estuve parado sobre sus hombros gigantes.







Nicolás Copérnico



Galileo Galilei



Johannes Kepler



Isaac Newton



Arquimedes



Gauss



Maxwell



Huygens



Lagrange



Descartes



Euler



J. Bernoulli



Leibniz



Lebesgue



Riemann



Cauchy



L'Hôpital



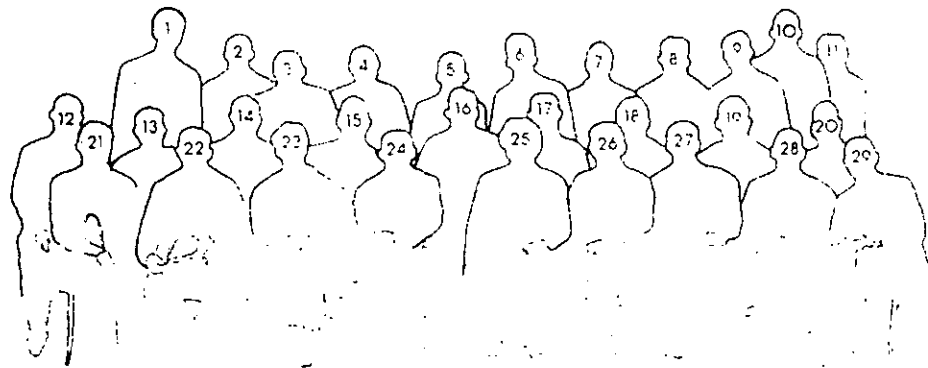
Weierstrass



Pascal



Gibbs



- | | | |
|---------------------|----------------------|---------------------|
| 1. A Piccard | 11. L. Brillouin | 21. I. Langmuir |
| 2. E. Henriot | 12. P. Debye | 22. M. Planck |
| 3. P. Ehrenfest | 13. M. Knudsen | 23. M. Curie |
| 4. E. Herzen | 14. W. L. Bragg | 24. H. A. Lorentz |
| 5. Th de Donder | 15. H.A. Kramers | 25. A. Einstein |
| 6. E. Schoroedinger | 16. P. A. M. Dirac | 26. P. Langevin |
| 7. E Verschaeffelt | 17. A. H. Compton | 27. C. E. Guye |
| 8. W_ Pauli | 18. L. V. de Broglie | 28. C.T.R. Wilson |
| 9. W. Heisenberg | 19. M. Born | 29. O.W. Richardsor |
| 10. R. H. Fowler | 20. N. Bohr | |

Índice

	Página
Prólogo	1
Introducción	2

Capítulo 1

Estructura y Propiedades de los Sólidos

1.1	La red cristalina	5
1.2	Redes tridimensionales	7
1.3	Estructura del diamante y de la Zinc Blenda	8
1.4	La red recíproca	8
1.5	Sólidos cristalinos y amorfos	9
1.5.1	Cristales Covalentes	12
1.6	El enlace metálico	12
1.7	La teoría de bandas de los sólidos	13
1.8	Aisladores, Semiconductores y Metales	24
1.9	Semiconductores Intrínsecos y Semiconductores con impurezas	27
1.10	Estructura de bandas de energía del silicio	30
1.11	Transiciones directas e indirectas	32
1.12	Conductividad en dieléctricos, conductores y semiconductores	33

Silicio Amorfo Hidrogenado

1.13	Primeras investigaciones	35
1.14	Clasificación	37
1.15	Conceptos básicos de los semiconductores amorfos	37
1.15.1	Estructura atómica	38
1.15.2	Estructura electrónica	39
1.15.3	Propiedades electrónicas	40
1.15.4	Localización, borde de movilidad y conducción	41
1.16	Modelos de bandas	43
1.16.1	El modelo de Cohen - Fritzsche - Ovshinsky	43
1.16.2	El modelo de Davis - Mott	43
1.17	Absorción	50
1.18	Modelos de enlaces	46
1.18.1	Los enlaces de hidrógeno	49
1.18.2	Enlaces de silicio - hidrógeno	49
1.19	El proceso de depósito de películas por sputtering	51

Capítulo 2

Propiedades y propagación de la radiación electromagnética

2.1	Una visión general	53
2.2	El espectro electromagnético	54
2.2.1	Infrarrojo	54
2.2.2	Luz	54
2.2.3	ultravioleta	54
2.3	Ondas escalares y vectoriales	55
2.4	Ondas planas monocromáticas en medios no conductores	56
2.5	Fenómenos que ocurren al interaccionar radiación con materia	57
2.5.1	Absorción y Esparcimiento de ondas electromagnéticas	57
2.6	Respuesta de los materiales dieléctricos a los campos electromagnéticos	58
2.6.1	Dispersión	59
2.6.2	Propagación de la luz a través de un medio dieléctrico	62
2.7	Ecuación de Cauchy	62
2.8	Un vistazo al proceso de absorción en sólidos	63
2.9	Absorción de radiación	64
2.9.1	Absorción Atómica	64
2.9.2	Absorción Molecular	65
2.10	Ley de Snell	66
2.10.1	Rayos de luz	66
2.10.2	Ondas en una interfase	67
2.11	Ecuaciones de Fresnel	68
2.11.1	Interpretación de las ecuaciones de Fresnel	70

Espectroscopía de absorción ultravioleta, visible y de infrarrojo cercano

2.12	Consideraciones generales	75
2.12.1	Transmitancia	75
2.12.2	Absorbancia	75
2.12.3	Ley de Bouguer - Lambert	77
2.13	Aplicación del método matricial para la evaluación de la reflectancia y transmitancia de sistemas de películas delgadas	77

Polarización

2.14	La naturaleza de la luz polarizada	79
2.14.1	Polarización lineal	79
2.14.2	Polarización circular	80
2.14.3	Polarización elíptica	82
2.15	Polarizadores	83
2.16	Ley de Malus	83
2.17	Dicroísmo	83
2.17.1	Cristales Dicroicos	84
2.18	Polaroide	84
2.19	Birrefringencia	85
2.19.1	Cristales birrefringentes	86
2.19.2	Polarizadores birrefringentes	87
2.20	Polarización por reflexión	88
2.21	Retardadores	90
2.21.1	Lámina de onda completa	90
2.21.2	Lámina de media onda	90
2.21.3	Lámina de cuarto de onda	91
2.21.4	Compensadores	91

Elipsometría

2.22	Fundamentos e Historia	92
2.23	La ecuación fundamental de la elipsometría	93
2.23.1	Solución de la ecuación fundamental de la elipsometría	95
2.24	Uso de los parámetros ópticos Ψ y Δ para determinar las propiedades de los materiales	96
2.24.1	Trayectorias Δ/Ψ para películas transparentes	97

Capítulo 3

Cálculo del espesor y constantes ópticas en películas uniformes y no uniformes de Silicio Amorfo Hidrogenado

3.1	Introducción	99
3.2	Desarrollo para Películas Uniformes	99
3.2.1	La región transparente en Películas Uniformes	101
3.2.2	Región de absorción débil y media en Películas Uniformes	101
3.2.3	Región de fuerte absorción en Películas Uniformes	101
3.2.4	Aproximación por sustrato infinito en Películas Uniformes	102
3.2.5	Cálculo del índice de refracción del sustrato	102
3.3	Películas no Uniformes	102
3.3.1	Teoría para Películas no Uniformes	102
3.3.2	Región transparente para Películas no Uniformes	104
3.3.3	Región de absorción débil y media para Películas no Uniformes	105
3.3.4	Región de fuerte absorción para Películas no Uniformes	106
3.3.5	Relación con el espectro de una película uniforme	106
3.3.6	Cálculo del espesor $\langle d \rangle$	107
3.3.7	Correcciones para el ancho de rendija del Espectrofotómetro Spectronic GÉNESIS 5	108
3.3.8	Cálculo de $\alpha(\lambda)$	109
3.4	Método del Punto Fijo Multivariable	109

Resultados

♦ a-Si:H 121	117
♦ a-Si:H 122	123
♦ a-Si:H 132	128
♦ a-Si:H 211	134
♦ a-Si:H 134	140
♦ a-Si:H 343	144

Espectros de transmisión en el infrarrojo de transformada de Fourier a-Si:H 121, a-Si:H 211, a-Si:H 314 y del vidrio	148
--	-----

Discusión y Conclusiones

Apéndice A1

Funcionamiento del Espectrofotómetro Milton Roy Spectronic GÉNESIS 5

A1.1	Descripción óptica del Espectrofotómetro Spectronic GÉNESIS 5	157
A1.1.1	Definición de un Espectrofotómetro	157
A1.1.2	Componentes de los monocromadores	158
A1.1.2.1	Monocromadores de red	158
A1.1.2.2	Redes holográficas	159
A1.1.2.3	Rendijas del monocromador	159
A1.1.2.4	Características del funcionamiento de los monocromadores	160
A1.1.2.5	Poder de resolución de los monocromadores	160
A1.1.2.6	Poder de captación de luz de los monocromadores	160
A1.1.3	Efecto de la anchura de rendija en la resolución	161
A1.1.3.1	Selección de anchuras de rendijas	161
A1.1.3.2	Detectores de Diodo de silicio	162
A1.1.4	Datos Técnicos del Espectrofotómetro Spectronic GÉNESIS 5	163

Apéndice A2

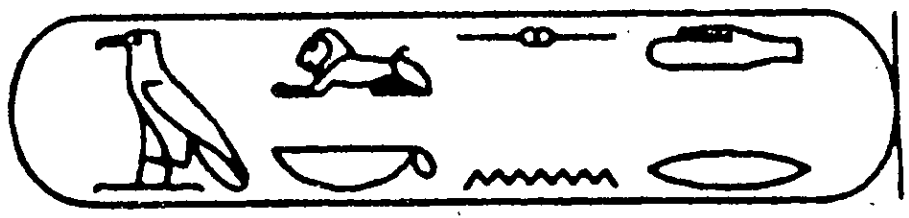
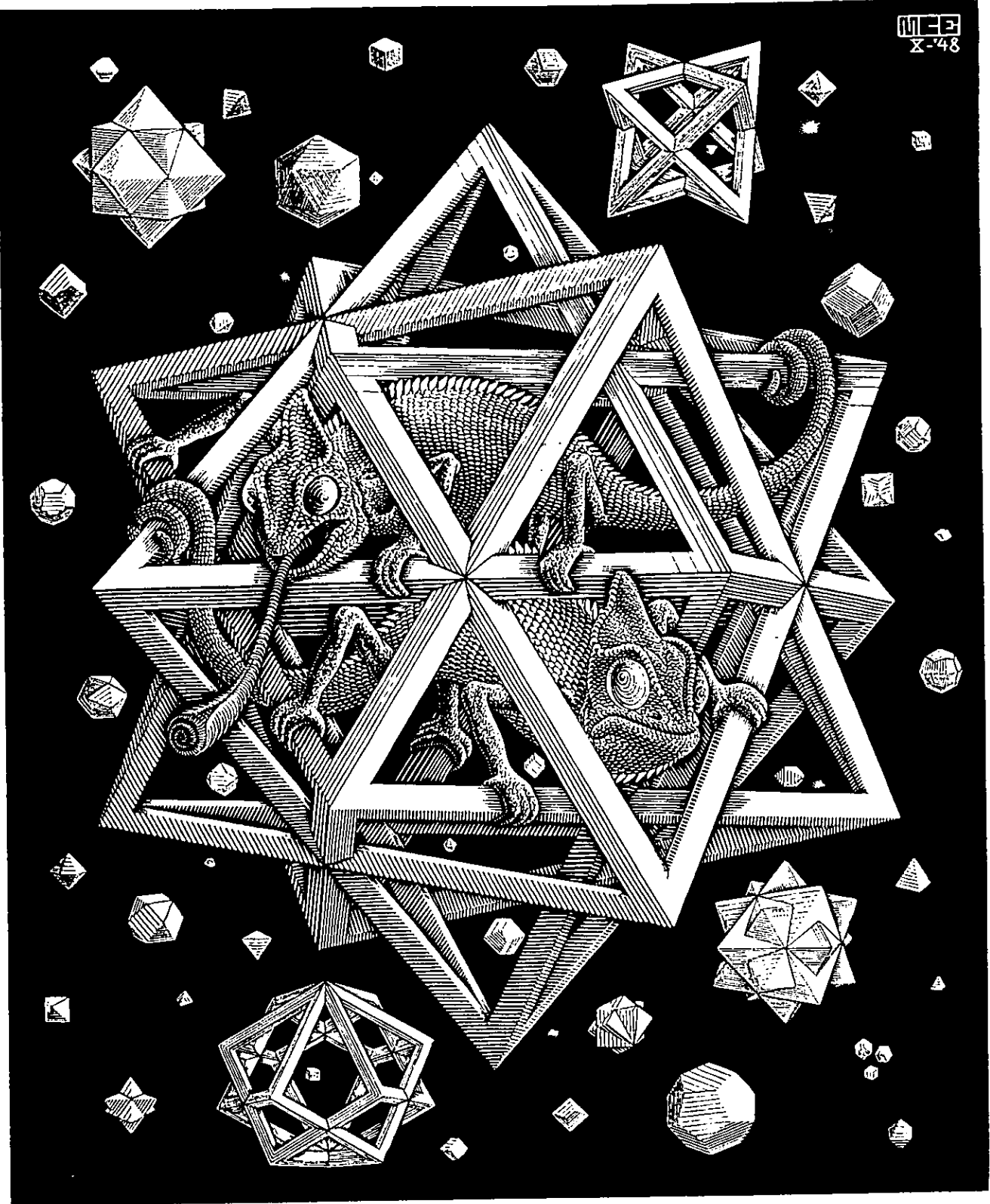
Funcionamiento del Elipsómetro Rudolf AUTOEL II

A2.1	Elipsómetros manuales de anulación de intensidad	166
A2.2	Conceptos	166
A2.3	Procesos Actuales	167
A2.4	Elipsómetros con elementos rotativos automáticos	167
A2.5	Instrucciones de operación del elipsómetro AUTOEL II	168
A2.6	Datos Técnicos del Elipsómetro Milton Roy AUTOEL II	169

Apéndice A3

A3.1	Espectrómetro de infrarrojo de transformada de Fourier	172
------	--	-----

Bibliografía	174
---------------------	-----

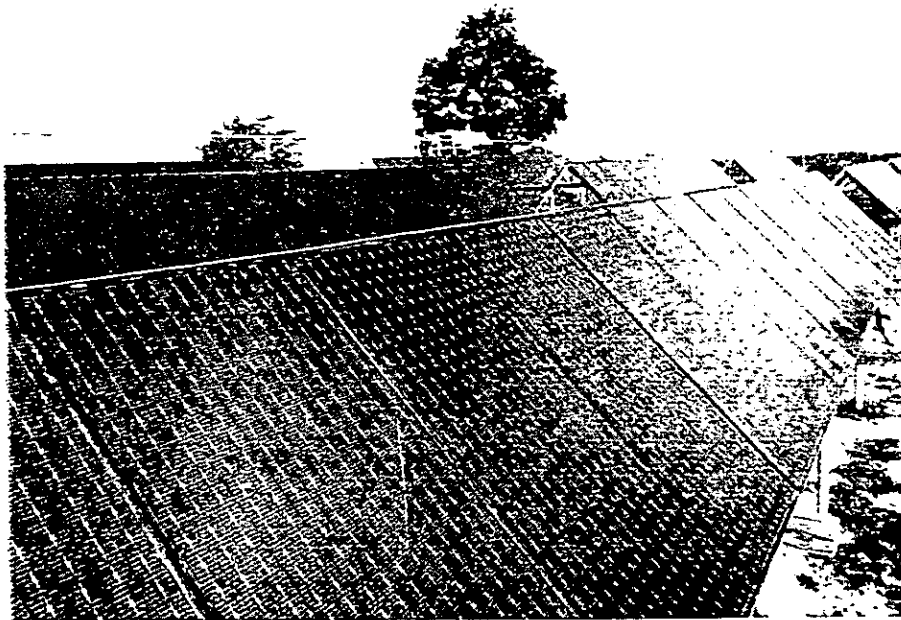


Prólogo

El interés en los semiconductores amorfos ha aumentado debido a las múltiples aplicaciones que presentan tanto en dispositivos electrónicos como en el aprovechamiento térmico y fotovoltaico de la energía solar, (ver Cap 1 Fig. 1.53a y 1.53b, [57]), sin embargo, la dificultad que existe para formular una teoría de sólidos amorfos sin el enfoque de simetría y periodicidad a largo alcance ha hecho más difícil su estudio, no existiendo una teoría adecuada para describir su comportamiento general; a pesar de los grandes progresos realizados en la comprensión y utilización del silicio amorfo, este material presenta todavía problemas de gran complejidad; la contribución de los enlaces libres, por ejemplo, no ha encontrado hasta el momento una explicación satisfactoria.

Actualmente, se distinguen importantes variedades de estructuras amorfas, microcristalinas y policristalinas, así como aleaciones que introducen modificaciones en las propiedades del material, se trata esencialmente de aleaciones de silicio amorfo hidrogenado con carbono, germanio, estaño, flúor o nitrógeno. El dopado del silicio amorfo es una cuestión que ahora se domina mejor a pesar que su aspecto fundamental no está bien comprendido; su reproductividad puede presentar problemas importantes, las impurezas del material intervienen de una manera muy negativa hasta el punto de no permitir comparación alguna entre materiales elaborados por los mismos parámetros; pero el campo peor comprendido es el que se refiere a la formación de la misma película delgada y ello a pesar de brillantes estudios realizados in situ y durante el crecimiento de la película, mediante elipsometría espectroscópica rápida visible y la sonda de Kelvin.

La complejidad de las películas delgadas semiconductoras no impide una continua y segura progresión en la fabricación de fotodiodos, varios laboratorios norteamericanos y japoneses han logrado rendimientos superiores al 10% (RCA, FUJI, SANYO etc.) con celdas de silicio amorfo hidrogenado de pequeñas superficies ($< 1 \text{ cm}^2$), ver Cap 1 Figs. 1.53a y 1.53b, por lo que se refiere a grandes superficies, el récord actual lo detenta ARCO SOLAR (Chatsworth, California) con un 7% en una fotocelda tipo p-i-n de 900 cm^2 . La producción industrial consigue fabricar fotoceldas de grandes superficies de 900 cm^2 con rendimientos de 4% - 5% (Japón) y SOLEMS (Francia) produce celdas de 400 cm^2 con el mismo rendimiento.



Arreglo fotovoltaico de paneles de silicio amorfo de 4kW instalado por el grupo *Detroit Edison* en Auburn Hills, perteneciente al Oakland Community College cerca de Rochester, Michigan. [65]

Introducción

En el Instituto de Física de la U.N.A.M. existe un proyecto de investigación comandado por el Dr. Fernando Alba Andrade y el Fis. Héctor Cruz Manjarrez Flores tendiente a desarrollar fotoceldas solares tipo p-i-n de gran área, a base de silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) por el método de sputtering. Como parte importante del proyecto se incluye la caracterización de películas de a-Si:H de varias maneras, una de ellas es la determinación de sus propiedades ópticas a través de la Espectroscopía UV/VIS/NIR (Ultravioleta, Visible y Cercano Infrarrojo), la Elipsometría y la Espectroscopía de absorción en el infrarrojo.

El primero de los objetivos de esta tesis fue obtener algunas propiedades ópticas de las películas delgadas de a-Si:H con la técnica de Espectroscopía UV/VIS/NIR (ultravioleta, visible y cercano infrarrojo) aplicando el método desarrollado por Swanepoel ([37], [38], [39], [40]), el cual utiliza solamente los espectros de transmisión; dichas propiedades son:

1. El índice de refracción real, (n)
2. El coeficiente de absorción (absortividad = α)
3. El coeficiente de extinción, (k)
4. El espesor de las películas, (d)

las cuales están estrictamente relacionadas con otras características de interés como lo son el ancho de la brecha de movilidad del material (gap), la cual se determinó por el método de Tauc. [28], [34], [38]

El espesor tiene un especial interés calcularlo con precisión porque las fotoceldas deberán tener un espesor total de 600 nm o menor, pues se pretende que tengan la doble función de trabajar como fotocelda y ser transparentes (ver Fig. 2), a diferencia de las celdas fotovoltaicas de silicio monocristalino que generalmente tienen espesores de 0.5 mm (ver Fig. 1).

El segundo de los objetivos fue corroborar con la técnica de Elipsometría el espesor de las películas de a-Si:H obtenido con la Espectroscopía UV/VIS/NIR, y el tercer objetivo fue detectar la presencia de hidrógeno en las películas por medio de la técnica de Espectroscopía Infrarroja de transformada de Fourier. Para cumplir todos estos objetivos fue necesario revisar ciertos aspectos teóricos del estado sólido, la física de los semiconductores, la óptica de las películas delgadas etc.

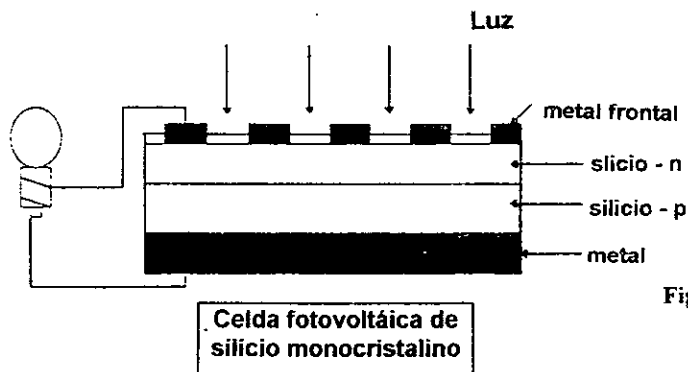


Fig. 1

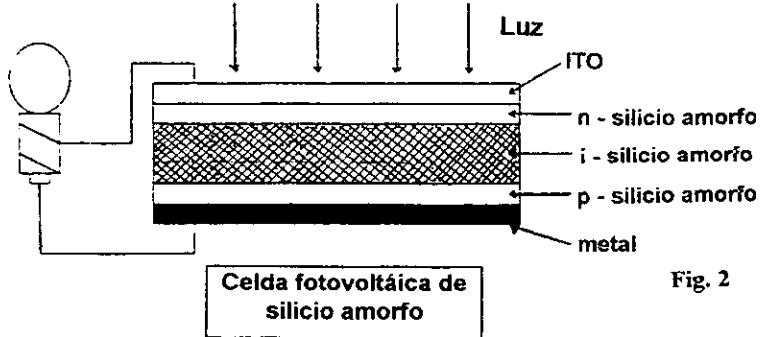


Fig. 2

i - silicio, es silicio no dopado
ITO es óxido de indio estaño

Así, en el capítulo 1 se analizan la estructura y propiedades de los sólidos, por ejemplo las características de las redes cristalinas bi y tridimensionales así como las propiedades de los enlaces atómicos, también se analiza la teoría de bandas de los sólidos y la función de onda de Bloch para el caso de un potencial periódico. A partir de la teoría de bandas se establece la propiedad semiconductor del a-Si:H, caracterizada por la existencia de una banda de valencia y otra de conducción, separados por una brecha de movilidad en la que se encuentran solo estados localizados, por último, dentro de este capítulo se abordan las propiedades particulares del silicio amorfo hidrogenado, remontándose a su descubrimiento y tratando sus aplicaciones tecnológicas; se estudian también su espectro infrarrojo y las características de su estructura.

El capítulo 2 aborda el análisis de la transmisión de la luz al incidir normalmente sobre películas delgadas y los fenómenos que ocurren al interaccionar radiación con materia; esto se hace a la luz de la teoría de propagación de las ondas electromagnéticas en distintos medios y de las ecuaciones de Fresnel, posteriormente se profundiza en el análisis de los conceptos de transmitancia y absorbancia y su relación con la ley exponencial de Bouguer-Lambert; todos estos conceptos son esenciales para la teoría de Espectroscopía UV/VIS/NIR, también dentro de este capítulo se revisa

la teoría de polarización de la luz, que es básica para entender la elipsometría, cuya teoría también se examina, y de la cual se obtiene su ecuación fundamental; a partir de esta ecuación se explica la forma de calcular el espesor y el índice de refracción de las películas delgadas.

El **capítulo 3** expone la teoría a partir de la cual se calculan las propiedades ópticas descritas en el primer objetivo de la tesis, tanto para películas uniformes como no uniformes; así como el algoritmo a partir del cual se diseñó el programa en Turbo Pascal 7.0 que hizo posible obtener todos los parámetros ópticos con mayor rapidez, así como las desviaciones estándar del espesor de las películas analizadas. (Esta relacionado con los capítulos 1 y 2).

En el **apéndice A1** se explican con detalle los principios del funcionamiento del Espectrofotómetro Milton Roy Spectronic GENESIS 5, en el **apéndice A2** se hace lo propio para el Elipsómetro Rudolf AUTOEL II, y en el **apéndice A3** lo mismo para el Espectrómetro Infrarrojo de Transformada de Fourier, de Nicolet Instrument Corp.

1

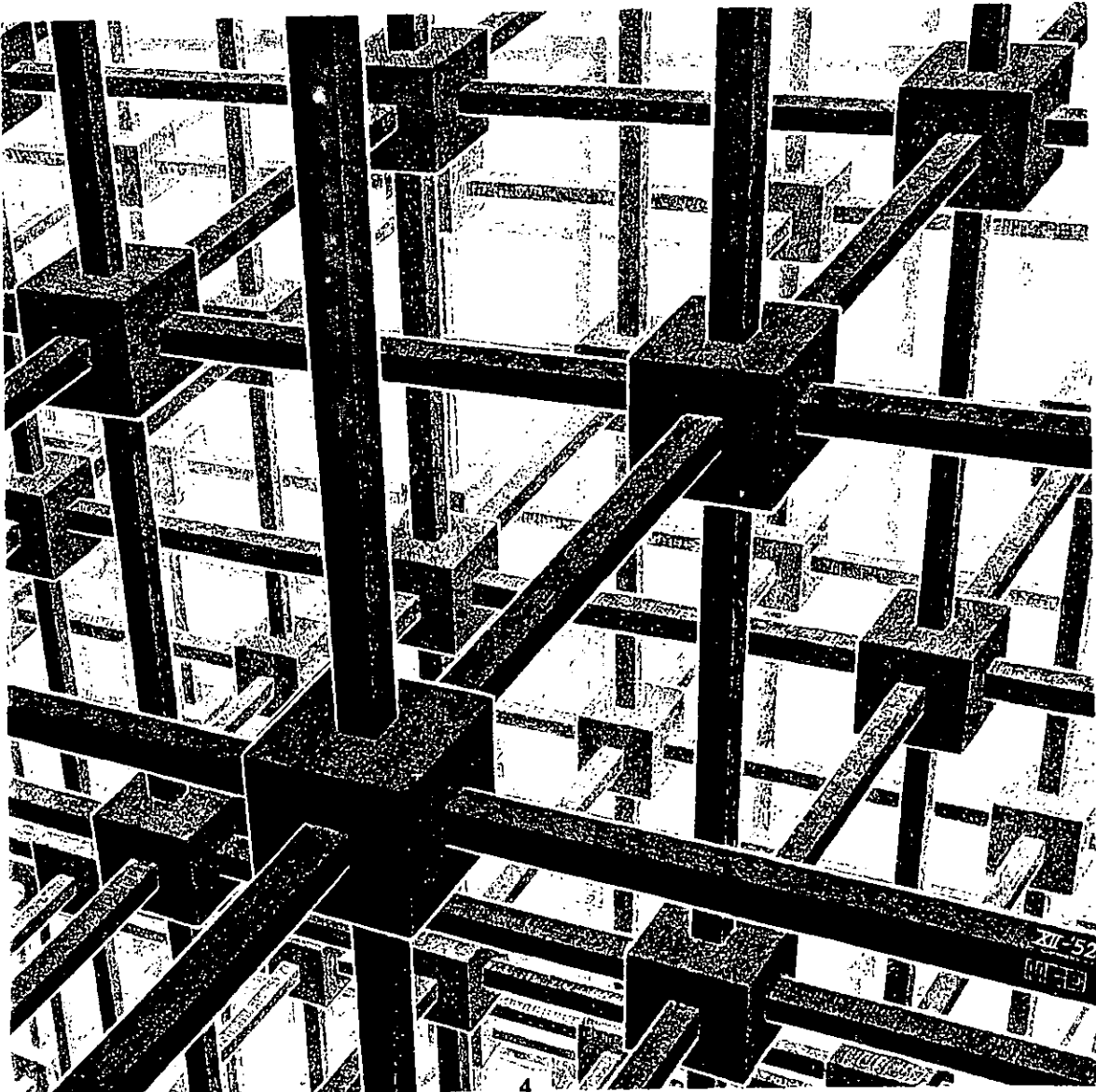
Estructura y Propiedades de los Sólidos

When I started to think about it, I felt that the main problem was to explain how the electrons could sneak by all the ions in a metal... By straight Fourier analysis I found to my delight that the wave differed from the plane wave of free electrons only by a periodic modulation.

F. Bloch

All things are literally better, lovelier and more beloved for the imperfections that have been divinely appointed

John Ruskin



1.1 La red cristalina

La idea de que una estructura cristalina podía construirse a partir de una unidad fundamental se originó mucho antes de la evidencia directa de la difracción de rayos X; ya en 1611 **Johannes Kepler** conjeturó que los cristales deberían tener una estructura interna periódica. Posteriormente, en 1664 el científico inglés **Robert Hooke** escribió sobre la regularidad de la forma de diferentes cristales y especuló sobre el porqué de ello; formuló la hipótesis de que esto era el resultado de un empaquetamiento ordenado de partículas esféricas dentro del cristal. En 1669 el médico danés **Nicolaus Steno** descubrió que aunque las caras del cuarzo presentaban variaciones en su forma y en su tamaño, dependiendo de las condiciones en las cuales el cristal se formó, los ángulos entre las caras correspondientes eran siempre iguales; años después en 1772, el francés **Romé de Lisle**, después de un estudio muy sistemático, descubrió que estos ángulos entre las caras de un cristal son característicos de la sustancia, algo así como la "huella digital" del cristal, (ver Fig. 1.1).

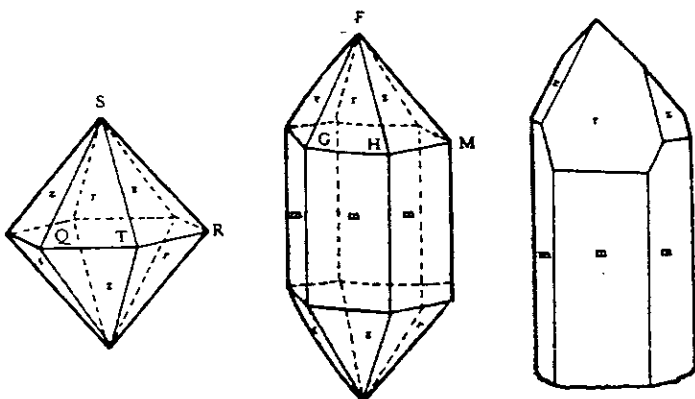


Fig. 1.1 Formas que tienen diversas variedades de cristales de cuarzo.

En 1774 el francés **René Just Haüy** publicó un libro *Essai d'une théorie sur la structure des cristaux*, en el cual hizo ver que la propiedad que tienen los cristales de formar ángulos bien determinados entre sus caras se podría explicar si se supone que internamente están formados por unidades que se repiten, (ver Fig. 1.2).

Hacia mediados del siglo XIX el francés **A. Bravais** formuló la hipótesis de que las moléculas de un cristal formaban un patrón estructural que al repetirse traslacionalmente en tres dimensiones formaba el cristal. Este patrón estructural llamado la celda unitaria, estaría formada por un átomo, una molécula o un complejo de moléculas y sería el "ladrillo" básico con el que se construiría el cristal; sin embargo, hasta principios del siglo XX no hubo manera de demostrar directamente la hipótesis formulada por Bravais. En 1912 la situación cambió radicalmente cuando **Max Von Laue** descubrió que la difracción de rayos X podría proporcionar la clave

para determinación de la estructura interna de los cristales, (ver Figs. 1.3 y 1.4).

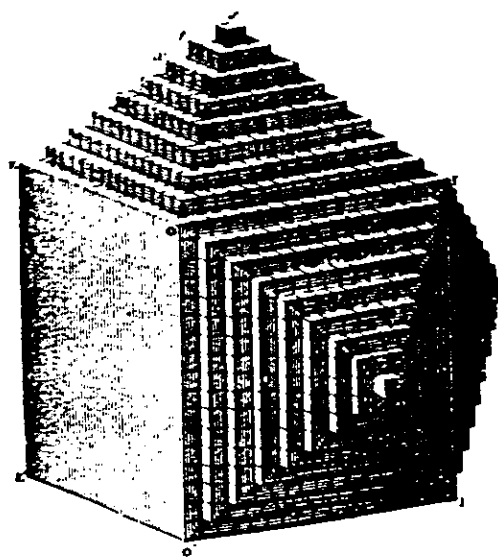
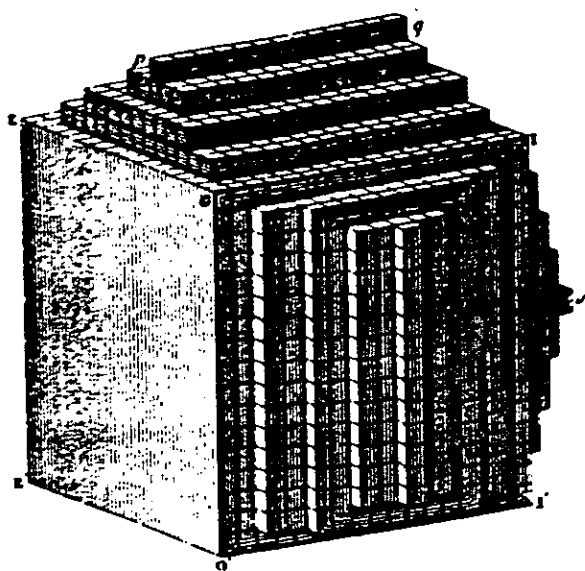


Fig. 1.2 Desarrollo de las caras cristalinas a partir de pequeños cubos elementales.

En general, la celda unitaria es un paralelepípedo definido por los vectores no coplanares a_1, b_1, c_1 [1], y la estructura completa se especifica dando tanto la celda unitaria como su contenido, especificado por los **vectores base** que describen las posiciones atómicas. Si se eligen los vectores de traslación a_1, b_1, c_1 para hacer a la celda unitaria tan pequeña como sea posible, se dice que el conjunto de puntos definidos por todas las combinaciones lineales enteras de los vectores de traslación primitivos, $R_i = ua_1 + vb_1 + wc_1$ se llama **red de Bravais**; es la armazón sobre la cual se construye

cualquier red cristalina. En la Fig. 1.5 se muestra una red de Bravais en dos dimensiones, junto con tres elecciones posibles de la celda unitaria primitiva. Por lo tanto, la celda unitaria primitiva de una red dada no es única; incluso no es necesario que sea un paralelepípedo, como se muestra en las Figs. 1.5b y 1.6.

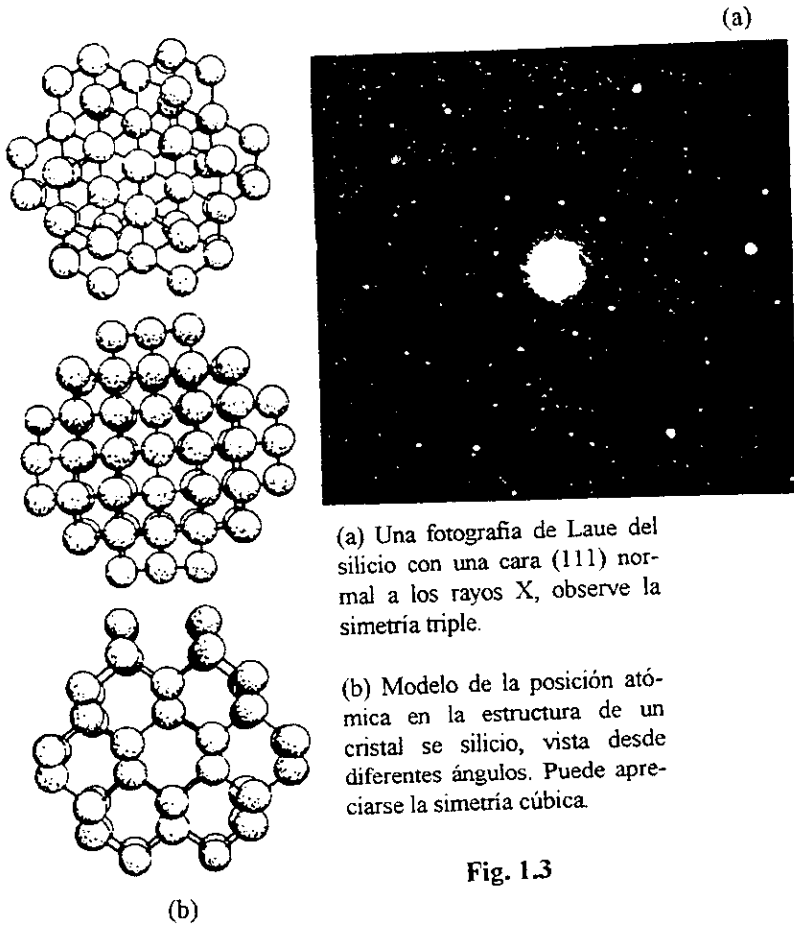


Fig. 1.3

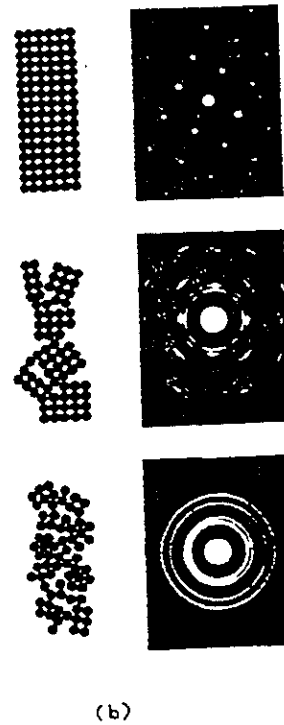
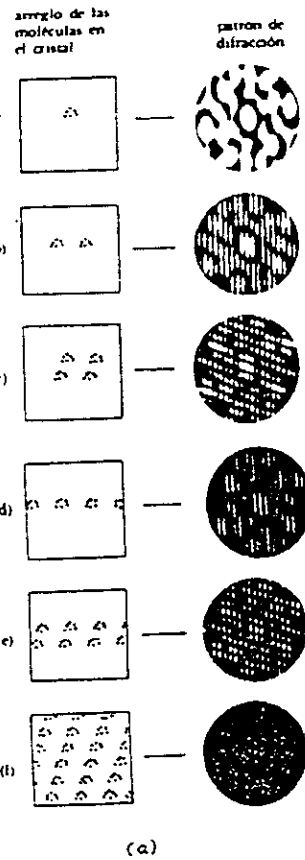


Fig. 1.4 (a) Distintos arreglos de las moléculas en un cristal dan lugar a diferentes patrones de difracción de rayos X. (b) Diagramas de dispersión de electrones de películas cristalinas, policristalinas y orientadas al azar.

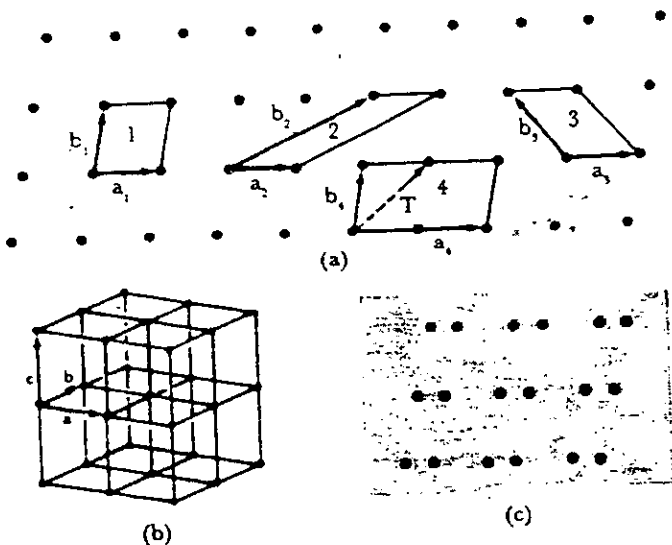


Figura 1.5

En la Fig. 1.6 se muestra una elección de la celda unitaria primitiva que a veces resulta conveniente para nuestra red bidimensional. Se llama celda de **Wigner-Seitz** y es el poliedro de coordinación (polígono en dos dimensiones) de un punto de la red, definido como el poliedro más pequeño limitado por planos que sean las bisectrices perpendiculares de los vectores hacia otros puntos de la red. De la definición, el interior del poliedro de coordinación es el lugar geométrico de aquellos puntos que están más cercanos al punto dado de la red que a cualquier otro. [2]

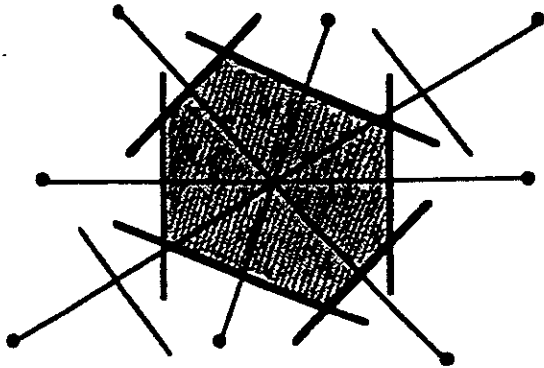


Fig. 1.6: Procedimiento para formar la Celda de Wigner - Seitz

1.2 Redes Tridimensionales

Existen 14 tipos de redes tridimensionales, siendo la red triclinica la más general, donde ($\alpha \neq \beta \neq \gamma$; $a_1 \neq a_2 \neq a_3$) y hay trece redes especiales. En la tabla 1.1 se proveen las propiedades básicas de las redes y en la tabla 1.2 se ilustran cada una de ellas [3]. A partir de aquí se centrará la atención en la red cúbica, la cual es la estructura adoptada por todos los semiconductores y dentro de esta red nos enfocaremos específicamente en la red cúbica centrada en el cuerpo; característica de todos los semiconductores aplicados en la electrónica y optoelectrónica; la forma de crearla se ilustra en la Fig. 1.7 [4].

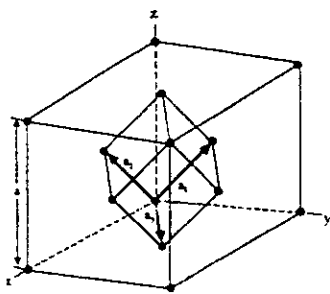


Fig. 1.7: Vectores base primitivos para la red cúbica centrada en la cara.

Tabla 1.1 : Sistemas Cristalinos: Simetrías Reticulares

Sistemas Cristalinos	Parámetros Reticulares	Redes de Bravais
Cúbico o isométrico	$a = b = c$	P
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	I
	(cubo)	F
Hexagonal	$a = b \neq c$	
	$\alpha = \beta = 90^\circ$	R
	$\gamma = 120^\circ$	(prisma hexagonal)
Tetraogonal (cuadrático)	$a = b \neq c$	P
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	I
	(prisma rectangular)	
Trigonal	$a = b \neq c$	
	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	R
	$< 120^\circ$	(romboedro o prisma hexagonal)
Ortorrómico	$a \neq b \neq c$	P
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	C
	(prisma rectangular)	I
		F
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	P
	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	C
	(prisma oblicuo)	
Triclinico	$a \neq b \neq c$	
	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	P

* Notaciones:

P = malla primitiva

F = centrada en las caras

C = Centrada en las bases

Y = Centrada en el cuerpo

R = romboédrica

1.3 Estructuras del Diamante y de la Zinc-Blenda

Todos los semiconductores de interés para la industria electrónica y la optoelectrónica muestran en su estructura un arreglo cúbico centrado en el cuerpo. La Fig. 1.8 muestra detalles de esta importante estructura [5], donde, si los dos átomos de la celda unitaria son iguales, la estructura es la del diamante, esta estructura la muestran el Si, Ge y C; pero si los dos átomos de la celda son diferentes, la estructura es la de la **zinc-blenda**; los semiconductores que muestran este arreglo son GaAs, AlAs y CdS. A los semiconductores que muestran la estructura del diamante se les conoce como semiconductores elementales mientras que los que presentan la estructura de la zinc-blenda son llamados semiconductores compuestos

1.4 La red recíproca

Hasta ahora se han mostrado las redes cristalinas en el espacio real, que es obviamente el espacio físico de interés.

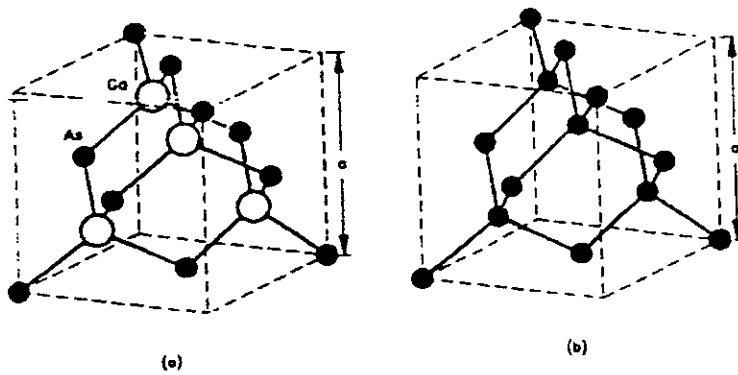


Fig. 1.8: (a) Red Cristalina de la Zinc - Blenda
(b) Red Cristalina del Diamante

Sin embargo, para muchas aplicaciones es muy útil trabajar en el **espacio de momentos k** o **espacio recíproco**; una simple transformación es necesaria para convertir las redes cristalinas discutidas anteriormente en las redes recíprocas y en analogía con las redes directas, en la red recíproca también se tienen celdas unitarias. Una muy importante definición de la celda unitaria es la **zona de Brillouin** la cual es **la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca** [2]. La importancia de la zona de Brillouin se discutirá más adelante cuando se considere la estructura de las bandas de energía.

Debido a la simetría traslacional de un cristal, varias propiedades, como la densidad de electrones o el potencial electrostático, serán los mismos en cada celda unitaria. Estas propiedades se describen por una función multiperíodica que satisface la condición:

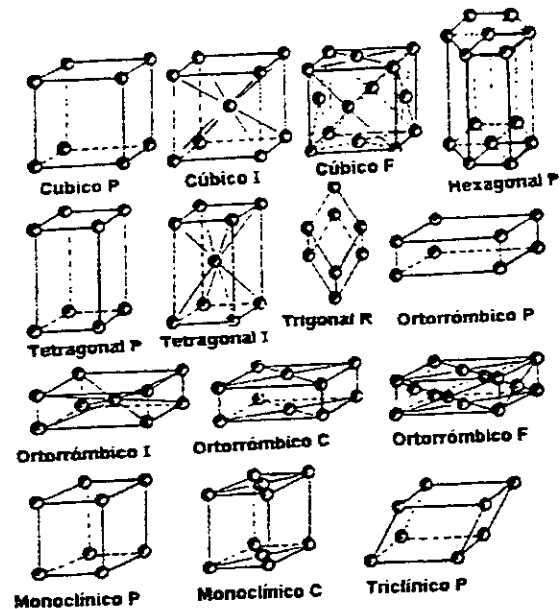
$$F(\mathbf{r}+\mathbf{R}_1) = F(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

para todos los puntos \mathbf{r} en el espacio y todos los vectores \mathbf{R}_i de la red [1]. Los vectores base de la red recíproca son:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3/\Omega; \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1/\Omega; \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2/\Omega$$

donde Ω es el volumen de la celda en la red. Cabe señalar que la red recíproca de la estructura cristalina centrada en el centro es la cúbica centrada en la cara (también conocida como **zona de Brillouin**). Esta zona se muestra en la Fig. 1.9 y su origen es $\mathbf{k} = (0,0,0)$ siendo este el punto Γ . Existen otros puntos en la zona de Brillouin con una gran simetría, estos se señalan con una notación estándar que se muestra en la Fig. 1.9 dichos puntos son importantes porque los límites de las bandas de energía generalmente ocurren para valores de \mathbf{k} correspondientes a estos puntos especiales [3].

Tabla 1.2 Sistemas Cristalinos, Redes de Bravais



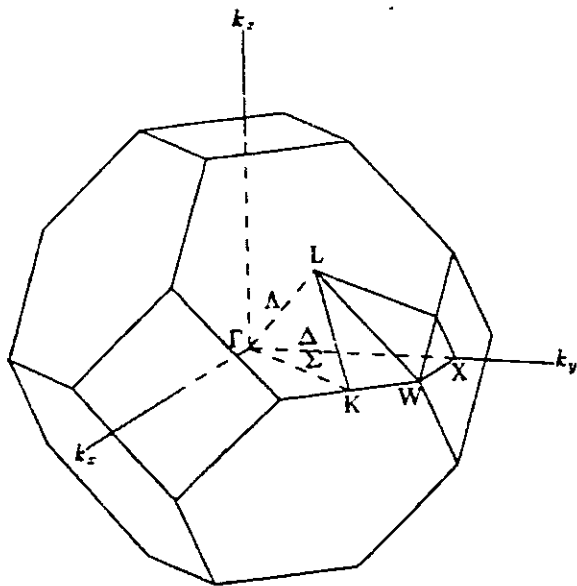


Fig. 1.9 : Zona de Brillouin de la red cristalina centrada en la cara. Esta estructura tan complicada a lo largo de sus ejes de simetría es extremadamente importante en la física de los semiconductores. La figura muestra la localización de ciertos puntos de alta simetría en la zona de Brillouin.

Un sólido consta de átomos, iones o moléculas íntimamente unidos, y esta proximidad es responsable de las propiedades características de este estado de la materia. Los **enlaces covalentes** que participan en la formación de una molécula también se presentan en algunos sólidos. Además, enlaces **iónicos**, de **Van der Waals** y **metálicos** proporcionan las fuerzas de cohesión en sólidos cuyos elementos estructurales son, respectivamente, iones, moléculas y átomos metálicos. Todos estos enlaces implican fuerzas eléctricas, de manera que sus diferencias esenciales residen en la distribución de electrones en torno a las diferentes partículas, cuya disposición regular forma un sólido.

1.5 Sólidos Cristalinos y Amorfos

La mayoría de los sólidos son cristalinos, en ellos, los átomos, iones o moléculas que los componen repiten patrones regulares tridimensionales, la presencia de ordenamiento de largo alcance es, por tanto, definidora de las propiedades de un cristal: otros sólidos carecen de ordenamientos de largo alcance en la disposición de sus partículas constituyentes, por lo que se pueden considerar propiamente como líquidos congelados, cuya dureza se debe a una viscosidad excepcionalmente elevada, el vidrio, la resina y muchos plásticos son ejemplos de estos sólidos amorfos, sin embargo, los sólidos amorfos presentan ordenamientos de **corto alcance** en sus estructuras. La diferencia entre los dos tipos de ordenamientos se ve claramente en el trióxido de boro (B_2O_3), que puede presentarse tanto en forma cristalina como amorfa; en ambos casos cada átomo

de boro está rodeado por tres átomos de oxígeno, lo que representa un ordenamiento de corto alcance. En un cristal de B_2O_3 , los átomos de oxígeno se presentan en formaciones hexagonales, como en la Fig. 1.10b, lo cual es un ordenamiento de largo alcance, mientras que el B_2O_3 , amorfo, sustancia vítrea, carece de esta regularidad adicional, como se ve en la Figs. 1.10a y d [6].

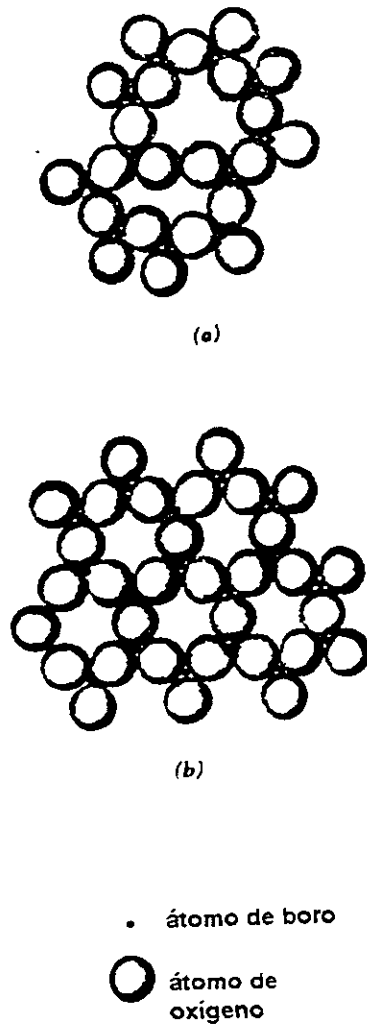


Fig. 1.10 : Dos representaciones bidimensionales del B_2O_3

- (a) El B_2O_3 **amorfo** presenta solo un ordenamiento de corto alcance.
- (b) El B_2O_3 **cristalino** presenta un ordenamiento de largo alcance.

Un ejemplo claro de un ordenamiento de corto alcance lo exhibe el agua, justo por encima del punto de fusión, en ese momento se presenta una densidad más baja que a mayores temperaturas, debido a que las moléculas de H_2O están agrupadas menos estrecha-

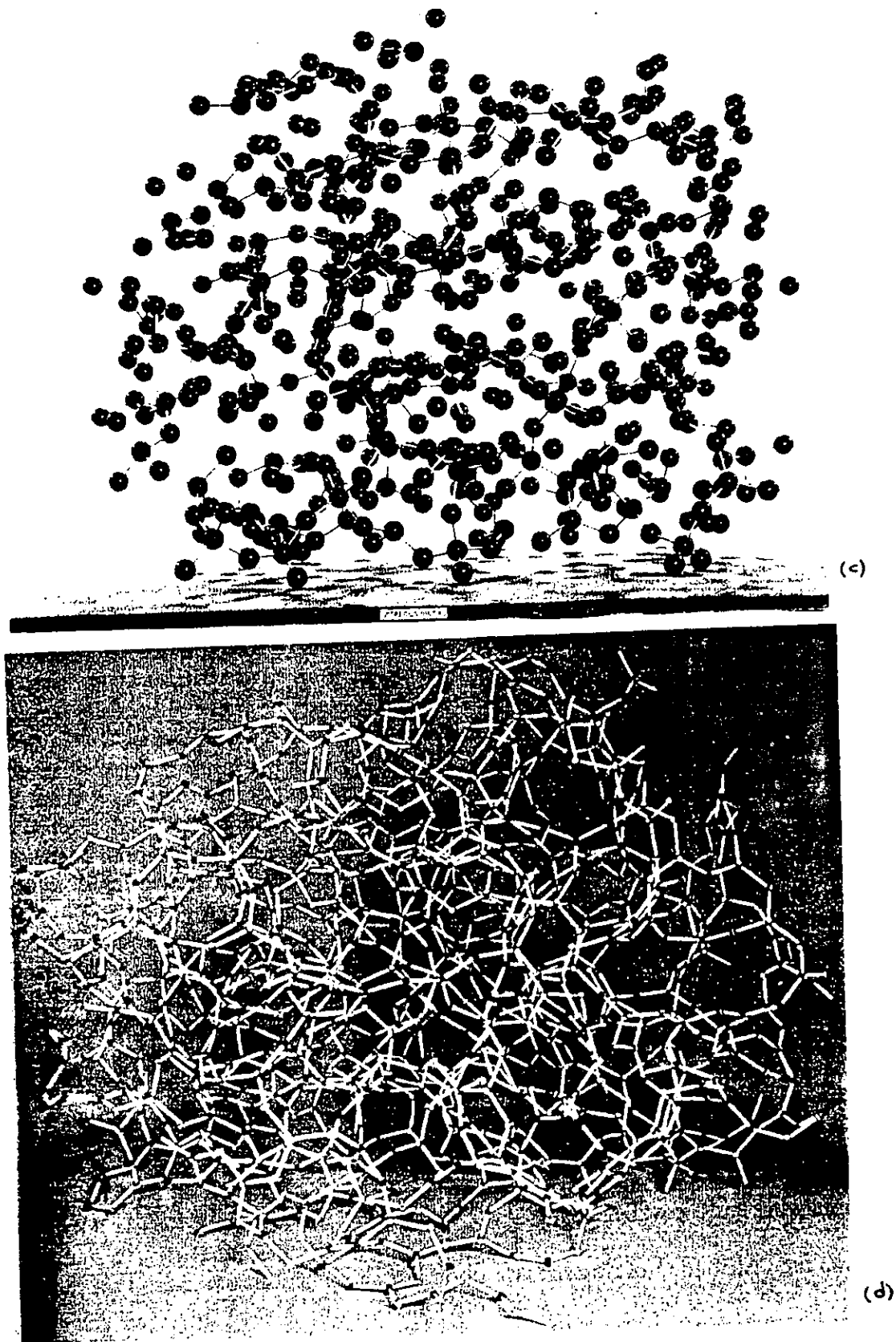


Fig. 1.10

- c) Modelo de una red aleat3ria continua que simula la estructura del SiO₂ amorfo (Bell & Dean 1966) (Crown copyright).
- d) Modelo de una red aleat3ria continua simulando la estructura vitrea del B₂O₃ amorfo, (Elliot 1982).

mente cuando forman cristales que cuando tienen mayor cantidad de movimiento.

Es importante proseguir con la analogía entre un sólido amorfo y un líquido para comprender ambos estados de la materia; generalmente, se considera que los líquidos se parecen más a los gases que a los sólidos; después de todo, tanto líquidos como gases son fluidos y a temperaturas arriba del punto crítico ambos son indistinguibles; sin embargo, desde el punto de vista microscópico, los líquidos y los sólidos también tienen mucho en común. La densidad de un líquido se aproxima generalmente a la del sólido correspondiente; además, la difracción de rayos X indica que muchos líquidos tienen estructuras definidas de corto alcance en cualquier instante, estas estructuras son semejantes a las de los sólidos amorfos, excepto en que las agrupaciones de las moléculas líquidas se desvían continuamente, ver Fig. 1.11 [6].

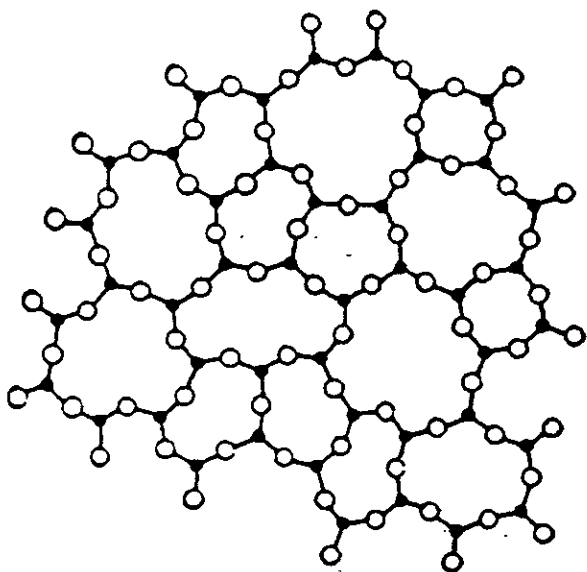


Fig. 1.11 Esquema de la estructura de un líquido.

Debido a que en un líquido no hay orden a largo alcance, entonces tampoco hay seguridad de que a cierta distancia de un átomo esté colocado otro átomo, como ocurre en un cristal. A causa de ello solamente se puede describir la estructura de un líquido en términos de la probabilidad de encontrar un átomo a cierta distancia de otro. Esta probabilidad queda dada por una cantidad que se llama la **función de correlación de posiciones**. La correlación es una medida del grado de dependencia de un átomo con otro colocado a cierta distancia. Esta cantidad es tal que si su valor es distinto a uno, entonces hay correlación entre dos átomos, es decir, en este caso los átomos no son independientes uno del otro. Si su valor es igual a uno, entonces los dos átomos son independientes, es decir no están correlacionados. Por medio de la espectrometría de neutrones se ha podido encontrar la función de co-

relación de diferentes líquidos; en la Fig. 1.12 se muestra, por ejemplo, la función de correlación de posiciones para el **argón líquido** a una temperatura de -125°C , como función de la distancia entre dos átomos. El argón, aún en el estado líquido, no se agrupa en moléculas por lo que únicamente se encuentra con un solo átomo, es claro que esta gráfica tiene varios picos: el primero está centrado a la distancia de 3.8 \AA y el segundo a 7.4 \AA . A medida que la distancia entre los átomos aumenta, después del segundo pico, la correlación oscila muy levemente y se acerca paulatinamente al valor uno. Estos resultados significan que, efectivamente, hay una correlación de corto alcance. A una distancia de 3.8 \AA de cualquier átomo del líquido hay una probabilidad muy alta de que haya otro átomo. Hay también una probabilidad menor, de que haya otro átomo a una distancia de 7.4 \AA del primer átomo mencionado. Este hecho es, por decirlo así, una herencia de la estructura cristalina que tiene la sustancia cuando, habiendo solidificado, forma un cristal; sin embargo, al aumentar la distancia entre los átomos ya casi no hay probabilidad de encontrar otro átomo a una distancia mayor.

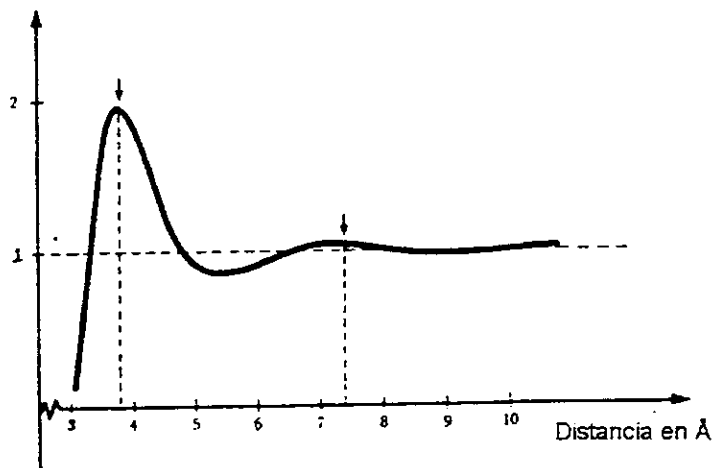


Fig. 1.12 Función de correlación de posiciones del argón líquido a -125°C . Los picos muestran una estructura de corto alcance.

De hecho, para distancias de 8 \AA o mayores, como se ve en la gráfica, los átomos son prácticamente independientes, es decir, ya no hay ni siquiera restos de algún orden en la sustancia. El orden en el argón líquido es entonces de corto alcance ya que se mantiene solamente hasta distancias de alrededor de 8 \AA , que es una distancia microscópica. Otro ejemplo interesante es la función de correlación de posiciones para el **agua** a una temperatura de 20°C , que se muestra en la Fig. 1.13. A diferencia del caso anterior en que tratamos un líquido de un solo átomo, ahora se tiene un líquido compuesto de moléculas, H_2O . La gráfica muestra dos picos muy intensos a las distancias de 1 \AA

y de 2.9 Å; asimismo, hay otros dos picos leves a las distancias de 4.5 Å y de 7 Å. El pico en 1 Å representa la distancia que hay entre cada átomo de hidrógeno y el del oxígeno en la molécula de agua, es decir, es la distancia dentro de la molécula. El pico a la distancia de 2.9 Å representa la distancia entre dos moléculas de agua, este segundo pico implica que hay un orden de corto alcance; los otros dos picos a distancias mayores indican un remanente de la estructura del agua cristalina, o sea del hielo; por lo tanto, se puede decir que el agua en cuestión tiene una estructura como sigue: alrededor de una molécula hay tres capas de moléculas y cualquier molécula situada a distancias mayores de 8 Å es independiente, es decir, a distancias de 8 Å se tiene ya un líquido sin estructura.

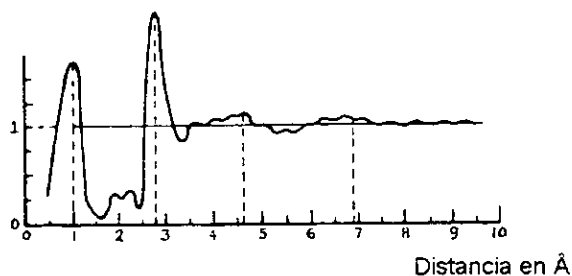


Fig. 1.13 Función de correlación de posiciones de agua a 20°C. El primer pico da la distancia entre los átomos de oxígeno y de hidrógeno dentro de la molécula. Los otros picos muestran estructura microscópica entre las moléculas de agua.

1.5.1 Cristales Covalentes

Las fuerzas de cohesión en los cristales covalentes surgen de la presencia de electrones entre átomos adyacentes, [7] en donde, cada átomo que participa en un enlace covalente contribuye con un electrón al enlace, y estos electrones son compartidos por ambos átomos en lugar de ser propiedad exclusiva de uno de ellos, como en el enlace iónico [6].

El diamante es un ejemplo de cristal cuyos átomos están unidos en enlaces covalentes. La Fig. 1.14 muestra la estructura de un cristal de diamante; la disposición tetraédrica es consecuencia de la capacidad de cada carbono para formar enlaces covalentes con cuatro átomos más.

Los cristales puramente covalentes son relativamente raros, además del diamante, otros ejemplos son el silicio, el germanio y el carburo de silicio; en este último, SiC, cada átomo está rodeado por cuatro átomos del otro tipo en la misma estructura tetraédrica que la del diamante. Todos los cristales covalentes son duros, tienen puntos de fusión elevados y son insolubles

en todos los líquidos ordinarios, comportamiento que refleja la fuerza de los enlaces covalentes.

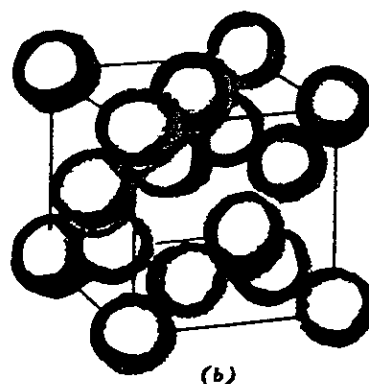
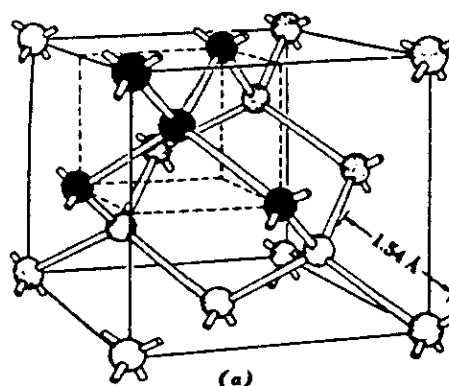


Fig. 1.14 (a) Estructura tetraédrica del diamante. El número de coordinación es 4. (b) Modelo a escala del cristal de diamante

1.6 El enlace metálico

El concepto fundamental en que se basa la teoría de los metales es que los electrones de valencia de los átomos que forman el metal pueden ser comunes al agregado atómico global, de modo que una especie de "gas" de electrones libres lo llena todo. La interacción entre este gas electrónico y los iones positivos del metal da lugar a una gran fuerza de cohesión; la presencia de tales electrones explica con claridad las altas conductividades eléctrica y térmica, la opacidad, el brillo de la superficie y otras propiedades específicas de los metales. Sin duda, tanto en un metal como en cualquier sólido, los electrones no son capaces de moverse en su interior con completa libertad. Siempre están influidos en alguna forma por las otras partículas presentes. Se podría obtener cierto conocimiento sobre la capacidad de los átomos metálicos para enlazarse y formar cristales de tamaño ilimitado, considerando el enlace metálico como un enlace covalente no saturado. Comparando el proceso de unión en dos miembros del grupo I del sistema periódico: el hidrógeno y el litio. Una molécula de hidrógeno (H₂) tiene dos electrones 1s con espines

opuestos; el máximo número de electrones K que puede tener. Esta molécula H_2 está, por tanto, saturada, ya que el principio de exclusión exige que cualquier electrón adicional este en un estado de energía mayor, y la unión estable de cada átomo H adicional no se puede presentar, a menos que sus electrones estén en el estado $1s$. En principio, puede parecer que el litio (Li) está obligado a comportarse de una manera similar teniendo la configuración electrónica $1s^2 2s$. Hay sin embargo, seis estados $2p$ sin llenar en cada átomo de Li , cuyas energías son ligeramente mayores que la de los estados $2s$. [6]

Cuando un átomo de Li se acerca a una molécula de Li_2 se une a ella fácilmente, con un enlace covalente, sin violar el principio de exclusión, y la molécula de Li_3 resultante es estable, ya que todos los electrones de valencia permanecen en capas L . No hay límite para el número de átomos de Li que pueden unirse de esta manera, ya que el litio forma un cristal cúbico centrado en el cuerpo (ver tabla 1.2), en el que cada átomo tiene otros ocho a su alrededor. Con sólo un electrón disponible por átomo para formar enlace, cada uno de éstos supone un cuarto de electrón por término medio, en lugar de los dos que son necesarios en un enlace covalente ordinario, existe así un enlace no saturado. Esto se aplica igualmente para los enlaces de otros metales.

La consecuencia más notoria de los enlaces no saturados en un metal es la capacidad que tienen los electrones de valencia de vagar libremente de átomo en átomo, para comprender intuitivamente este fenómeno, se puede pensar que cada electrón de valencia se mueve constantemente de enlace en enlace. En el sólido Li , cada electrón participa en ocho enlaces, de manera que gasta poco tiempo entre dos pares de iones Li^+ , el electrón no puede recordar (por decirlo así) a cuál de los dos iones pertenece en realidad, y es más fácil que se mueva hacia un enlace que de ninguna manera implique a su ion matriz, por tanto, los electrones de valencia de un metal se comportan de una manera muy similar a las moléculas de un gas.

Como en el caso de cualquier otro sólido, los átomos del metal se adhieren debido a que su energía colectiva es más baja cuando están enlazados que cuando existen como átomos separados. Para comprender por que se presenta esta reducción de energía en un cristal metálico, se nota que, debido a la proximidad de los iones, cada electrón de valencia, en promedio, está más próximo a uno u otro núcleo de lo que estaría si perteneciese a un átomo aislado, en consecuencia, la energía potencial del electrón es menor en el cristal que en el átomo, y la disminución de la energía potencial es la responsable del enlace metálico.

Sin embargo, hay que considerar otro factor, mientras que la energía potencial del electrón se reduce en un cristal metálico, la energía cinética del electrón aumenta. Los electrones libres en un metal constituyen un sistema único de electrones y el principio de exclusión prohíbe que más de dos de ellos (uno por espín) ocupen cada nivel de energía, a primera vista parecería que, utilizando de nuevo al litio como ejemplo, solo

ocho electrones de valencia en todo un cristal de Li ocuparían estados cuánticos $n = 2$; los demás se verían forzados a estados cada vez mayores de energía, de manera que toda la estructura quedaría destruida, lo que ocurre, en realidad, es menos dramático. Los niveles de energía de valencia de los diferentes átomos metálicos se alteran todos por sus interacciones y se produce una **banda de energía** que consta de tantos niveles de energía estrechamente espaciados como número total de niveles de energía de valencia en todos los átomos del cristal. En consecuencia, los electrones libres tienen una energía cinética que oscila entre 0 y un máximo E_F , llamada **energía de Fermi**, como la energía cinética del electrón es una cantidad positiva, su aumento en el metal por encima de su valor en los átomos separados conduce a una repulsión.

El enlace metálico se presenta cuando la atracción entre los iones metálicos positivos y el gas de electrones excede la mutua repulsión de los electrones en este gas, esto es, cuando la reducción de la energía potencial del electrón excede en magnitud al aumento concomitante en la energía cinética del electrón, cuanto mayor es el número de electrones de valencia en el átomo, más elevada es en promedio la energía cinética en un cristal metálico, pero sin que haya una caída proporcional en la energía potencial, por esta razón, los elementos metálicos se encuentran, casi todos, en los primeros tres grupos de la tabla periódica. Algunos elementos que están en la línea de demarcación pueden formar cristales, tanto metálicos como covalentes, el estaño es un ejemplo notable. Por encima de $13.2^\circ C$ se tiene el metal "estaño blanco", cuyos átomos tienen seis vecinos próximos, por debajo de $13.2^\circ C$ tenemos el sólido covalente "estaño gris", cuya estructura es igual a la del diamante. El estaño blanco y el estaño gris son sustancias bien diferentes, el primero tiene la elevada conductividad eléctrica común de un **metal** y el segundo es un **semiconductor**.

En la figura 1.15 se da un resumen de las estructuras básicas de los sólidos.

1.7 La teoría de bandas de los sólidos

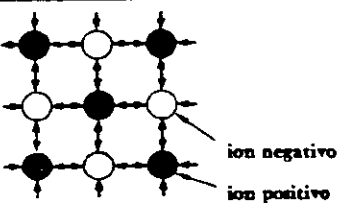
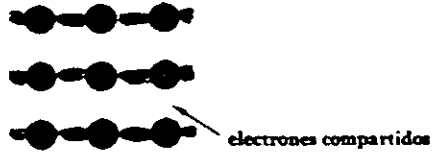
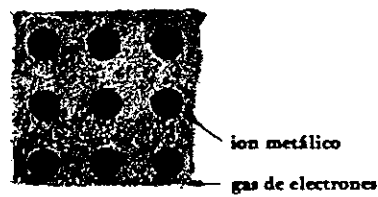
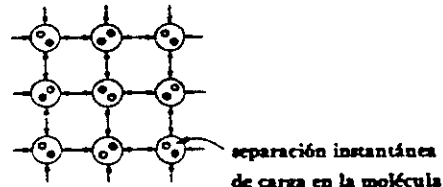
En casi todos los sólidos cristalinos, sean metales o no, los átomos están tan próximos entre sí, que los electrones de valencia constituyen un sistema único de electrones comunes a todo el cristal. Este sistema de electrones cumple el principio de exclusión, puesto que los estados de energía de las capas externas de los átomos están todos alterados de alguna manera por sus interacciones mutuas. En el modelo de metal usado hasta aquí, se ha tomado en cuenta los efectos colectivos de la latiz del cristal sobre los electrones; sin embargo, este modelo tiene la seria desventaja de que no toma en cuenta en ninguna forma la periodicidad de la estructura cristalina, periodicidad que produce efectos fundamentales que son imposibles de entender sin tomarla en cuenta. Para poder entender el efecto de poner muchos átomos muy próximos entre sí en un sólido, primero se considerarán dos átomos que ini-

cialmente se encuentran muy alejados uno del otro. En este sistema de dos átomos, todos los niveles de energía poseen una degeneración por intercambio doble, es decir, para el sistema combinado, la parte espacial de la eigenfunción para los electrones puede contener, ya sea una combinación de eigenfunciones espaciales de los átomos individuales que es simétrica ante un intercambio de pares de marcas de los electrones, o que es antisimétrica ante ese mismo intercambio de marcas. (Desde luego, la eigenfunción total del sistema es antisimétrica ya que la eigenfunción espacial simétrica está asociada con una eigenfunción de espín antisimétrica y viceversa). Cuando los átomos se encuentran bastante separados, los dos tipos diferentes de eigenfunciones conducen a la misma energía y por lo tanto se dice que cada nivel de energía tiene una doble degeneración de intercambio, sin embargo, cuando los átomos se encuentran próximos entre sí, la degeneración por intercambio se elimina. La energía

del sistema depende de la simetría de las eigenfunciones espaciales, porque la densidad electrónica en la importante región interatómica depende de que la eigenfunción espacial sea simétrica o antisimétrica cuando los átomos se encuentran tan próximos que las funciones de onda de los átomos individuales se traslapen, por lo tanto, un nivel de energía dado del sistema se divide en dos niveles de energía distintos cuando empieza el traslape, y la división de niveles aumenta a medida que la separación entre los átomos disminuye. Un ejemplo famoso de este fenómeno se encuentra en el nivel de energía correspondiente al estado base de un sistema que contiene dos átomos de hidrógeno. En la Fig. 1.16 se muestra este desdoblamiento para el nivel del estado base únicamente, pero cada uno de los niveles superiores del sistema se desdobla de la misma forma y por la misma razón cuando los átomos se aproximan entre sí.

Fig. 1.15

Tipos de Cristales

Tipo	Enlace	Ejemplo	Propiedades
 <p>ión negativo ión positivo</p>	Atracción electrostática	Cloruro de sodio NaCl E de cohesión = 3.28 eV/átomo	Duro; puntos de fusión elevado; pueden ser solubles en líquidos polares, como el agua.
 <p>electrones compartidos</p>	Electrones compartidos	Diamante C E de cohesión = 7.4 eV/átomo	Muy duro; puntos de fusión elevados; insoluble en casi todos los solventes.
 <p>ión metálico gas de electrones</p>	Gas de electrones	Sodio Na E de cohesión = 1.1 eV/átomo	Dúctil; brillo metálico; conductividades eléctrica y térmica elevadas.
 <p>separación instantánea de carga en la molécula</p>	Fuerzas de van der Waals	Metano CH ₄ E de cohesión = 0.1 eV/átomo	Blando; puntos de fusión y de ebullición bajos; soluble en líquidos covalentes.

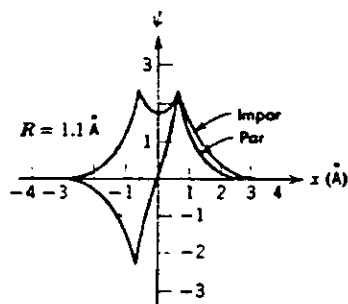
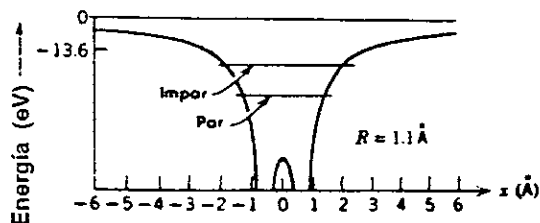


Fig. 1.16

Arriba: Función potencial y los dos niveles de energía más bajos, para un electrón de la molécula de H_2^+ cuya separación internuclear es $R = 1.1 \text{ \AA}$. La función potencial se evalúa a lo largo de la línea que pasa por los dos núcleos. **Abajo:** Eigenfunciones par e impar correspondientes a los dos niveles de energía, calculadas a lo largo de la línea internuclear. En la vecindad de cada núcleo, ambas eigenfunciones tienen magnitudes que son exponenciales decrecientes de la distancia al núcleo, como en el estado base del átomo de hidrógeno

Si se hubiera empezado con tres átomos aislados, se habría tenido una degeneración de intercambio triple de los niveles de energía. Cuando se juntan átomos en una red lineal uniforme, cada uno de los niveles de energía se desdobra en tres niveles distintos, esto se ilustra en la Fig. 1.17, [8] para un nivel de energía típico de un sistema de seis átomos. El desdoblamiento empieza cuando la distancia de separación atómica R , de centro a centro, se vuelve suficientemente pequeña para que los átomos empiecen a traslaparse. A medida que R disminuye de este valor, ocurre una disminución en la energía de los niveles para los cuales la simetría de la eigenfunción espacial conduce a una distribución de carga electrónica favorable (la cual coloca carga electrónica donde los iones ejercen el enlace más fuerte), y un aumento en la energía de los niveles asociado con eigenfunciones espaciales cuya simetría conduce a una distribución de carga no favorable. Entre más o menos favorable sea la distribución de carga, mayor será el aumento o disminución en la energía. Así, los niveles se encuentran separados, por los requisitos cuánticos de indistinguibilidad, con respecto a

una energía promedio que sería igual a la energía que tendría el sistema para una R dada, si dichos requisitos no existieran, obsérvese que esta energía promedio aumenta rápidamente para R suficientemente pequeña, esto se debe a la repulsión de Coulomb que los iones se ejercen entre sí. [8]

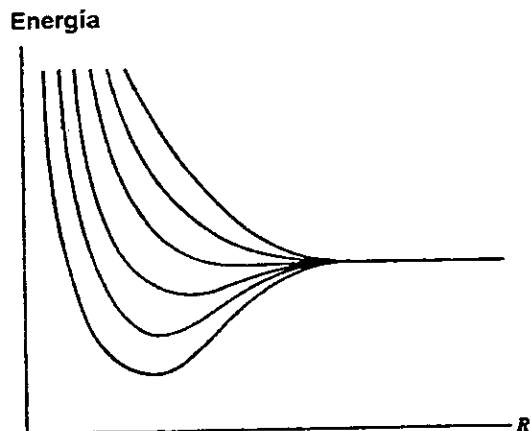


Fig. 1.17 Dibujo esquemático del desdoblamiento de un nivel de energía como función de la distancia de separación R entre los átomos adyacentes en un sistema de seis átomos.

En particular, si se pudiera tener una molécula de seis átomos H_6 , cada estado atómico se separaría como se mencionó antes en seis niveles (Fig. 1.15 y Fig. 1.16).

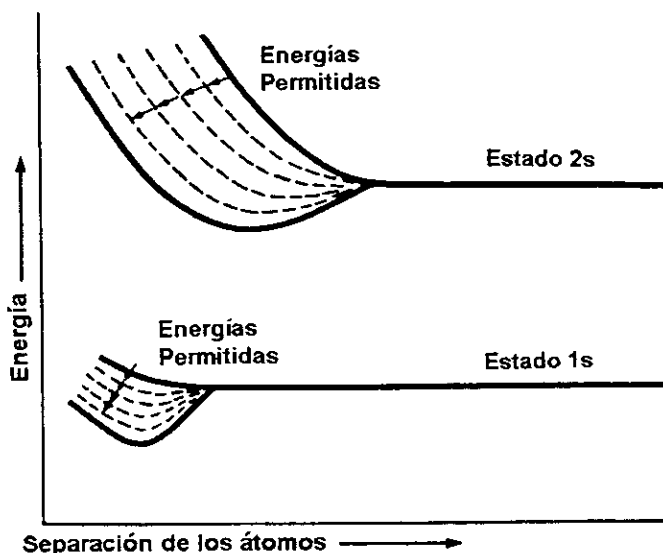


Fig. 1.18 Cuando los seis átomos de hidrógeno se juntan para formar una molécula lineal, el acoplamiento entre átomos aumenta y los niveles de energía se separan.

Con la particularidad de que esta separación afecta a los niveles $1s$ y $2s$, como puede verse en la figura, de ellos, el $1s$, que es el que queda más cerca del núcleo (los electrones en esos estados reciben el nombre de electrones de coraza), se ven afectados después que los que corresponden al $2s$ (los electrones más externos se llaman de valencia). La distancia entre los átomos de H_2 disminuye de derecha a izquierda en la figura, ahí se nota que los niveles del estado $2s$ empiezan a separarse antes de que los $1s$ se vean afectados. Para moléculas con más electrones el comportamiento es similar, los electrones que están más lejos del núcleo son los primeros que sienten la presencia de otro átomo en su vecindad.

Al considerar un sistema que contiene N átomos de una especie dada, cada nivel de uno de estos átomos conduce a un nivel del sistema de degeneración de orden N , cuando los átomos se encuentran bastante separados. Si la separación disminuye, cada uno de estos niveles se desdobra en un conjunto de N niveles. La separación en energía entre el nivel más bajo y el nivel más alto de un conjunto en particular, depende de la distancia de separación R , ya que R especifica la magnitud del traslape que ocasiona el desdoblamiento, sin embargo, no depende de modo significativo del número de átomos en el sistema si se mantiene la misma distancia de separación, por lo tanto, a medida que se agregan más átomos al sistema, cada conjunto de niveles desdoblados contendrá un mayor número de niveles distribuidos en el mismo intervalo de energía a una R particular. Para los valores de R que se encuentran en los sólidos, unos cuantos angstroms, el intervalo de energías es de unos cuantos electrón-volts, si entonces se considera que un sólido tiene algo así como 10^{23} átomos / mol se podrá ver que los niveles de cada conjunto en el sólido se encuentran tan próximos en energía entre sí, que prácticamente forman una **banda de energía continua**. El proceso que se acaba de describir está indicado en la Fig. 1.19. [8]

De esta figura se puede ver que los niveles de energía más bajos se dispersan menos que los niveles más altos, la razón es que los electrones en los niveles más bajos son electrones de subcapas internas de los átomos y que no son alterados significativamente por la presencia de átomos vecinos. Estos electrones se encuentran localizados en átomos particulares aún cuando R es pequeña, ya que las barreras de potencial entre estos átomos para esos electrones son relativamente altas y anchas, por otra parte, los átomos de valencia se encuentran totalmente deslocalizados para R pequeña ya que forman parte del sistema total. El traslape de sus funciones de onda resulta en una separación de sus niveles de energía, debe subrayarse que el nivel $1s$ de un átomo individual se convierte en una banda de N niveles, así como también sucede para el nivel $2s$ si se cuenta de modo tal, para cada uno de estos niveles corresponden dos electrones de espín opuesto, sin embargo, el nivel $2p$ está triplemente degenerado en el número cuántico espacial m_l en el átomo aislado ya

que m_l puede tener cualquiera de los valores $-1, 0, +1$, por lo tanto, el nivel $2p$ en el átomo da lugar a $3N$ niveles en el sólido, esto puede pensarse como la formación de tres bandas de N niveles, cuyos intervalos de energía pueden coincidir o no.

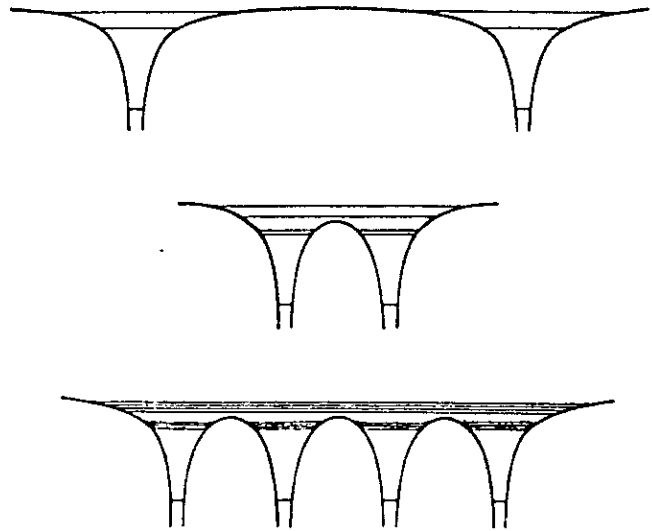


Fig. 1.19 *Arriba:* Esquema de niveles de energía para dos átomos aislados. *Al centro:* Esquema de niveles de energía para los mismos dos átomos en una molécula diatómica. *Abajo:* Esquema de niveles de energía para cuatro de los mismos átomos en un cristal rudimentario unidimensional. Obsérvese que los niveles inferiores no se encuentran apreciablemente desdoblados ya que las eigenfunciones atómicas correspondientes a estos niveles, no se traslapan significativamente.

En la Fig. 1.20 se muestra el caso de **hidrógeno sólido** y se aprecia que los niveles de energía se abren en bandas y que los estados asociados con los electrones que están más alejados del núcleo ($n = 3$) son los que se separan primero cuando se va disminuyendo la distancia entre los átomos, como se mencionó anteriormente para el caso general. Lo que se llamó banda en principio no es diferente al conjunto de niveles que aparecen en la molécula de H_2 , pero en el caso del sólido los niveles están tan juntos que dan el aspecto de una banda continua. En el hidrógeno sólido las bandas de energía no se traslapan, pero en algunos metales, como en el caso del sodio cristalino (ver Fig. 1.21), las bandas sí lo hacen. La Fig. 1.21 muestra la formación de la banda para los niveles más altos del sodio, cuya configuración del estado base atómico es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, en esta figura se muestran algunas características generales de bandas permitidas (bandas continuas de niveles de energía electrónicos) y bandas prohibidas (regiones donde no existen niveles de energía electrónicos). Las bandas permitidas que corresponden a subcapas internas como las $2p$ en el sodio, son extremadamente angostas hasta que la distancia

interatómica se hace más pequeña que la distancia real encontrada en el cristal.

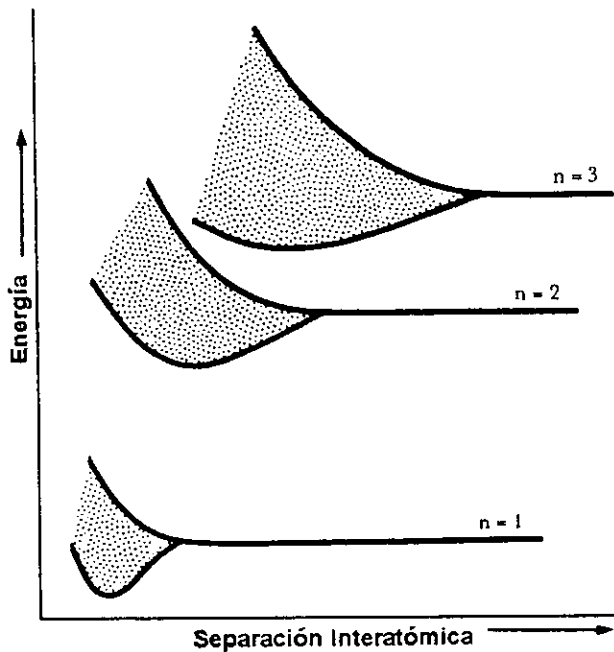


Fig. 1.20 Niveles de energía del hidrógeno sólido.

Con el objeto de profundizar en el estudio de estos efectos, se moldeará el cristal como una sucesión periódica de pozos separados entre sí por barreras, correspondiendo el centro de cada pozo con la posición que ocupa uno de los iones de la red. Para dar al modelo su máxima simplicidad, se estudiará sólo el caso unidimensional y tanto pozos como barreras los considerarán rectangulares, como se ilustra en la Fig. 1.22; este modelo fue propuesto y estudiado por R. de L. Kronig y W. G. Penny (1930). [4]

Es de esperarse que la amplitud de probabilidad del electrón fuera la misma en todas las celdas del cristal porque todas son idénticas. Si el potencial fuera aleatorio, esto no sucedería como se muestra en la Fig. 1.23a).

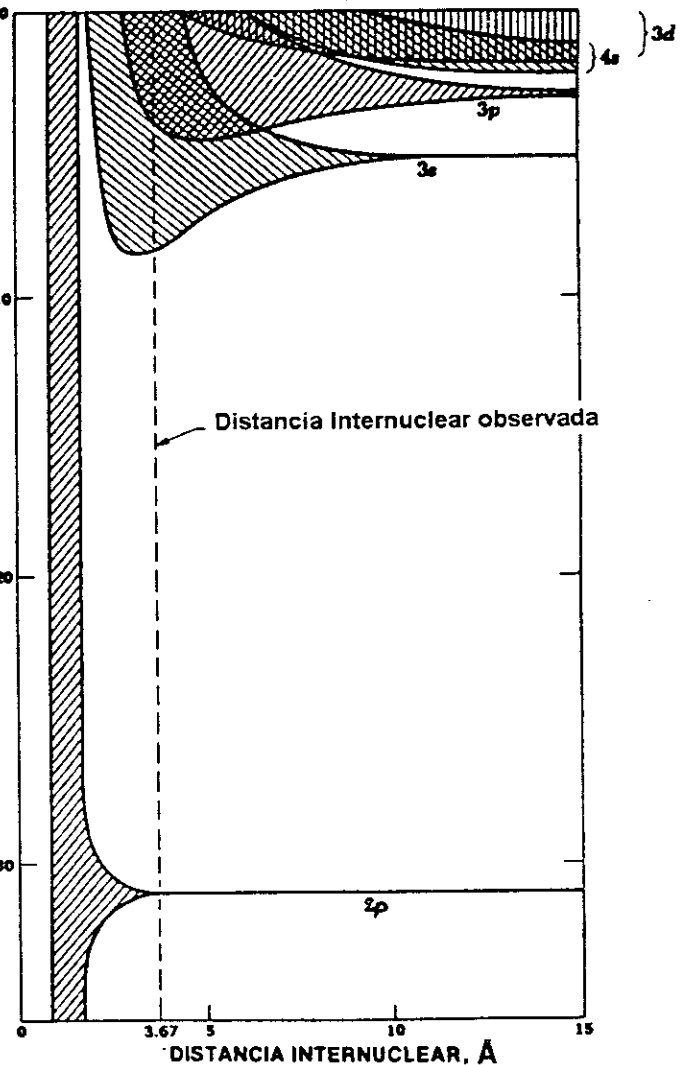
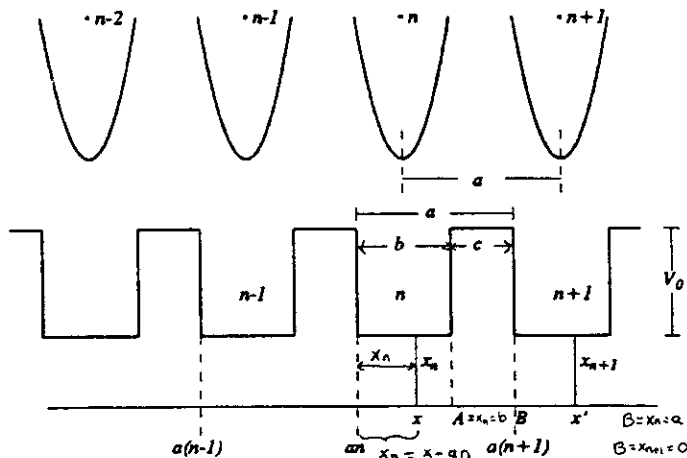


Fig. 1.21 Los niveles de energía del sodio se convierten en bandas a medida que disminuye su distancia internuclear. La distancia internuclear observada en el sodio sólido es 3.67 Å

Fig. 1.22 Modelo de cristal unidimensional infinito de Kronig y Penney. La altura de las barreras es V_0 ; cada pozo tiene el ancho b y cada barrera es de ancho c ; el período del potencial (constante del cristal) es $a = b + c$. El punto x dentro del pozo n tiene coordenada x_n , medida desde la pared izquierda, dada por $x_n = x - na$. En la parte superior de la figura se muestra un potencial más realista y la posición de los iones de la red cristalina.

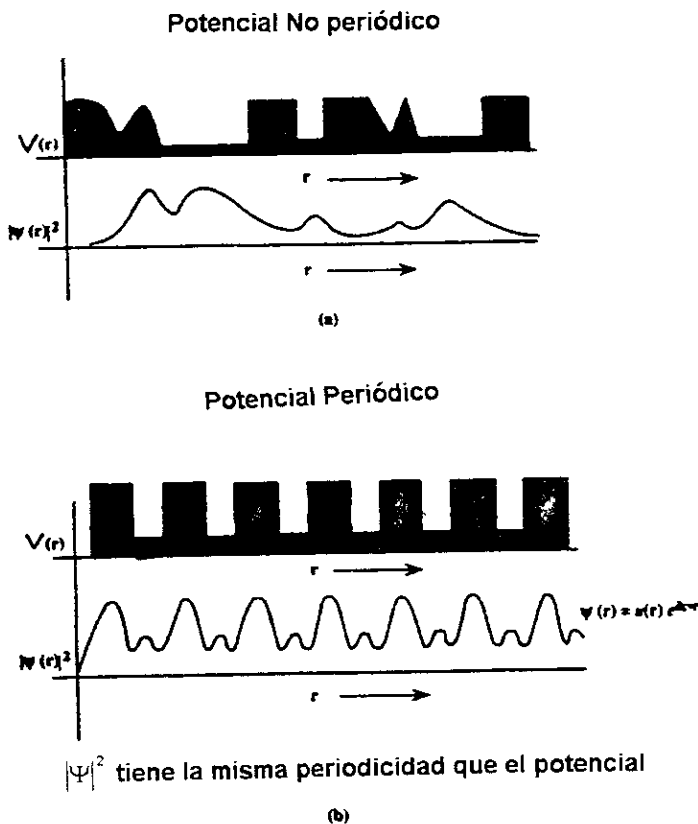


Fig. 1.23 (a) Potencial y valor de la probabilidad de una típica función de onda electrónica en un material aleatorio. (b) El efecto de un potencial periódico sobre una función de onda electrónica. En el caso de un potencial periódico, $|\psi|^2$ tiene la misma periodicidad espacial que el potencial. Esto pone límites especiales sobre $\psi(r)$ de acuerdo con el teorema de Bloch.

Numerando los periodos y utilizando la nomenclatura como se muestra en la Fig. 1.22, en particular, la posición de un punto x en el pozo n está dada por la coordenada x_n medida a partir de la pared interna izquierda de este pozo, [9]

$$x_n = x - na = x \bmod a \quad (1.2)$$

y así sucesivamente. Nótese que el punto B tiene la coordenada $x_n = a$, que equivale a: $x_{n+1} = 0$; a representa la constante del cristal, es decir, la distancia entre una pareja de iones sucesivos de la red. La función de onda dentro del pozo n se puede escribir como (k y q están dadas por):

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{y} \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$$\psi_n = A_n \sin kx_n + B_n \cos kx_n, \quad 0 \leq x_n \leq b \quad (1.3)$$

mientras que dentro de la barrera n se escribe como

$$\psi_n = A'_n \sinh q(a - x_n) + B'_n \cosh q(a - x_n), \quad b \leq x_n \leq a \quad (1.4)$$

Asimismo la función de onda dentro del pozo $n+1$ es, evidentemente,

$$\psi_{n+1} = A_{n+1} \sin kx_{n+1} + B_{n+1} \cos kx_{n+1}, \quad 0 \leq x_{n+1} \leq b \quad (1.5)$$

Las condiciones de continuidad en el punto A dan ($x_n = b$; $a - x_n = c$):

$$A_n \sin kb + B_n \cos kb = A'_n \sinh qc + B'_n \cosh qc \quad (1.6)$$

$$k(A_n \cos kb - B_n \sin kb) = -q(A'_n \cosh qc + B'_n \sinh qc) \quad (1.7)$$

análogamente, las condiciones de continuidad en el punto B dan ($x_r = a$; $x_{n+1} = 0$):

$$B'_n = B_{n+1} \quad (1.8)$$

$$-qA'_n = kA_{n+1} \quad (1.9)$$

Usando estas dos ecuaciones para eliminar A'_n y B'_n de las ecuaciones (1.6) y (1.7), obteniendo:

$$A_n \sin kb + B_n \cos kb = -(k/b)A_{n+1} \sinh qc + B_{n+1} \cosh qc \quad (1.10)$$

$$A_n \cos kb - B_n \sin kb = A_{n+1} \cosh qc - (q/k)B_{n+1} \sinh qc \quad (1.11)$$

Con el objeto de simplificar la solución de este sistema de ecuaciones, se pasará al límite en que $V_0 \rightarrow \infty$ y simultáneamente las barreras se hacen más estrechas, $c \rightarrow 0$, de tal manera que el producto cV_0 permanece constante (este límite es esencialmente el de una sucesión periódica de potenciales delta repulsivos). Con el objeto de simplificar las expresiones que siguen, esta constante se escribirá en la siguiente forma:

$$cV_0 = \frac{\hbar^2 \lambda}{ma} \quad (1.12)$$

en donde λ es un parámetro adimensional real y positivo, por lo demás arbitrario. En este límite se cumple que $kb = ka$, que $qc = \sqrt{2mV_0 c} / \hbar^2 \rightarrow 0$ y, finalmente, que $q^2 c = 2mV_0 c / \hbar^2 = 2\lambda / a$; por otra parte, como qc es muy pequeño, podemos escribir aproximadamente $\sinh qc = qc$ y $\cosh qc = 1$. Con todas estas aproximaciones, el sistema de Ecs. (1.10) y (1.11) se reduce a:

$$A_n \sin ka + B_n \cos ka = B_{n+1} \quad (1.13)$$

$$A_n \cos ka - B_n \sin ka = A_{n+1} - \frac{2\lambda}{ka} B_{n+1} \quad (1.14)$$

Un análisis cuidadoso de este último sistema nos conduce a proponer que la solución se puede escribir en la siguiente forma, en donde f es una función por determinar y C_1 y C_2 son constantes, también por determinar:

$$A_n = C_1 f^n, \quad B_n = C_2 f^n \quad (1.15)$$

en efecto, sustituyendo estas expresiones en el sistema anterior, obtendremos:

$$C_1 = \text{senka} + C_2(\text{coska} - f) = 0 \quad (1.16)$$

$$C_1(\text{coska} - f) - C_2(\text{senka} - \frac{2\lambda}{ka}f) = 0 \quad (1.17)$$

Para que existan soluciones con $C_1, C_2 \neq 0$ se requiere que se anule el determinante del sistema; escribiendo esta condición y reorganizando, queda:

$$f^2 - 2(\text{coska} + \frac{\lambda}{ka} \text{senka})f + 1 = 0 \quad (1.18)$$

Es conveniente en este punto definir un nuevo parámetro κ tal que:

$$\text{cos}\kappa a \equiv \text{coska} + \frac{\lambda}{ka} \text{senka} \quad (1.19)$$

en principio, κ puede ser real o imaginario; sustituyendo en la Ec. (1.18), se obtiene la ecuación que determina f en términos de κ :

$$f^2 - 2f \text{cos}\kappa a - 1 = 0 \quad (1.20)$$

Las soluciones de esta ecuación son:

$$f = e^{\pm i\kappa a} \quad (1.21)$$

sustituyendo en las Ecs. (1.16) y (1.17) obtenemos C_1 y C_2 en la forma:

$$C_1 = A \frac{f - \text{coska}}{\text{senka}} \quad C_2 = A \quad (1.22)$$

donde A es la constante arbitraria de normalización. El doble signo de las soluciones (1.21) proviene del hecho de que los electrones pueden desplazarse hacia la derecha y hacia la izquierda; tomando sólo el signo positivo (no se pierde generalidad si se aceptan valores negativos de κ) determinamos A_n y B_n con ayuda de la Ec. (1.18); se obtiene:

$$A_n = A \frac{f - \text{coska}}{\text{senka}} e^{i\kappa n a} \quad (1.23a)$$

$$B_n = A e^{i\kappa n a} \quad (1.23b)$$

Sustituyendo estos valores en la Ec. (1.3) para ψ y escribiendo el producto $n a$ en términos de la diferencia $x - x_n$, Ec. (1.2), se obtiene, después de algunas transformaciones trigonométricas:

$$\begin{aligned} \psi_n &= A \frac{f - \text{coska}}{\text{senka}} e^{i\kappa n a} \text{sen}\kappa x_n + A e^{i\kappa n a} \text{cos}\kappa x_n \\ &= A e^{i\kappa x} \frac{e^{i\kappa(a-x_n)} \text{sen}\kappa x_n + e^{-i\kappa x_n} \text{sen}\kappa(a-x_n)}{\text{senka}} \end{aligned}$$

$$\text{o sea} \quad \psi_n = A e^{i\kappa x} u_n \quad (1.24)$$

en donde la función u_n está dada por

$$u_n = \left[\frac{e^{i\kappa(a-x_n)} \text{sen}\kappa x_n + e^{-i\kappa x_n} \text{sen}\kappa(a-x_n)}{\text{senka}} \right] \quad (1.25)$$

La ecuación fundamental (1.24), conocida como **función de onda de Bloch**, se obtuvo para el caso particular de pozos rectangulares, pero cualquier potencial periódico produce funciones de onda de esta forma general (**teorema de Floquet**).¹ [9]

La Ec. (1.24) permite concluir que si κ es real, los electrones se mueven libremente en el cristal; en este caso, la energía de los electrones queda determinada por el valor de κ .

Para encontrar los posibles eigenvalores de la energía se estudian las soluciones de la Ec. (1.19) para k real, es decir, para electrones libres; esta condición demanda que ka sea tal, que se cumpla que:

$$-1 \leq \text{coska} + \frac{\lambda}{ka} \text{senka} \leq 1$$

En la Fig. 1.24 se muestra la función $\text{coska} + \lambda/ka$; los valores permitidos de ka (**zonas de Brillouin**) se marcan con línea gruesa en la gráfica; la solución define una sucesión de bandas continuas.

¹ El teorema de Floquet establece que las ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes periódicos aceptan soluciones de la forma $e^{i\kappa x} u(x)$, con $u(x)$ una función periódica en x . Las ondas de Bloch son el caso particular referido a la ecuación de Schrödinger, aun cuando el potencial periódico no sea el de Kronig y Penny.

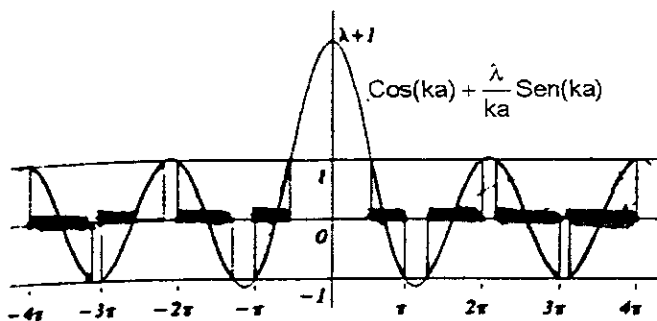


Fig. 1.24 Determinación gráfica de las soluciones de la Ec. (1.22); los valores permitidos de ka corresponden a las regiones marcadas con línea gruesa en el eje de las abscisas; estos valores forman las bandas permitidas. El caso de barreras impenetrables (pozos infinitos aislados) corresponde a las soluciones $ka = n\pi$, mostradas en la gráfica con puntos gruesos.

En la Fig. 1.25 puede verse una ampliación del lado izquierdo de la gráfica anterior. [10]

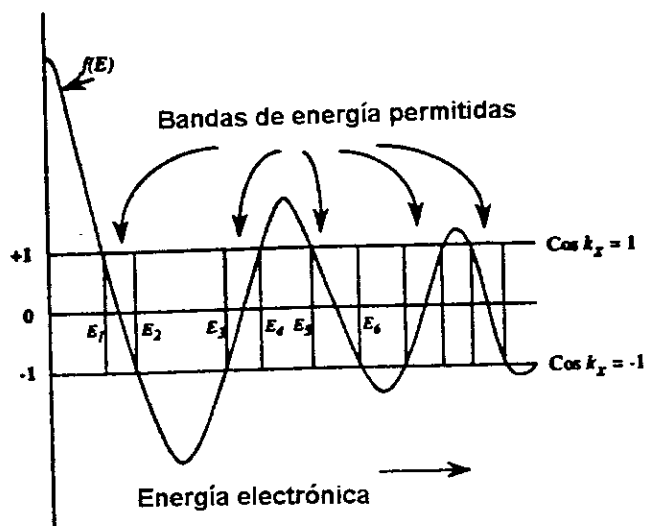


Fig. 1.25 Las regiones no señaladas representan las bandas de energía prohibidas, donde el valor de k es complejo, las regiones señaladas son las bandas de energía permisibles correspondientes a valores reales de k .

El origen y posición de estas bandas se puede entender fácilmente como sigue: si por un momento se piensa en el cristal como un conjunto de pozos aislados por barreras impenetrables, las soluciones de la ecuación de eigenvalores (1.19) serían las que corresponden a un pozo infinito, $ka = n\pi$, pues estos son los valores que siguen de la ecuación $\text{sen}ka = 0$ obtenida al hacer $\lambda = \infty$; los electrones del cristal tendrían entonces el espectro discreto de un pozo infinito (Fig. 1.26a). [9]

Al interconectar N pozos bajando la barrera (λ finita), cada nivel se descompone en N niveles cercanos; como el modelo usado es infinito, esta descomposición produce un número infinito de niveles infinitamente próximos, creándose una sucesión de bandas, cada una con un continuo de niveles alrededor de la solución para un pozo aislado, como se ilustra en la Fig. 1.26b), nótese que las bandas pueden producirse aún en regiones que originalmente corresponden al continuo de uno de los pozos aislados.

En un cristal real las bandas no son estrictamente continuas, sino formadas por una sucesión de niveles discretos muy próximos, ya que el número de iones de la latiz es necesariamente finito, este último es el modelo que se usará en lo que sigue.

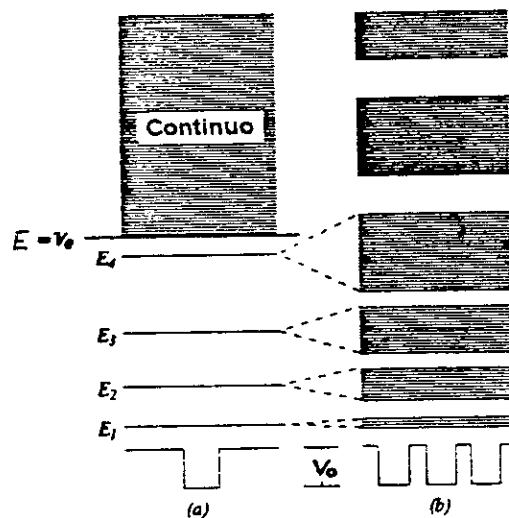


Fig. 1.26 En (a) se muestran los niveles estacionarios discretos de energía para un electrón dentro de un pozo rectangular. $E < V_0$; cuando $E > V_0$, el espectro es continuo. En (b) se muestra la descomposición de estos niveles en bandas cuando un número infinito de pozos iguales se colocan sucesivamente, separados por barreras finitas.

Suponiendo un metal que contiene un electrón de valencia por átomo (por ejemplo un álcali), y como cada estado electrónico puede ser ocupado hasta por dos electrones; en el estado base estos electrones ocupan la mitad de los niveles de la banda inferior (la banda tiene N niveles, siendo N el número de átomos); la mitad de los electrones se mueve en una dirección y la otra mitad, en la dirección opuesta, por lo que no hay flujo neto. Si se aplica una diferencia de potencial al metal, un número mayor de electrones se moverá en la dirección opuesta al campo; como los $N/2$ niveles inferiores están ya ocupados, los electrones del flujo adicional tienen que pasar a niveles de mayor energía, por lo tanto, para que pueda producirse la conducción eléctrica es necesario que la banda inferior:

- ♦ tenga un número suficiente de vacancias (niveles no ocupados), como sucede con el metal alcalino.

♦ o esté en contacto con la segunda banda.

Por esta razón, a la segunda banda se le conoce con el nombre de **banda de conducción**, mientras que a la primera se le llama **banda de valencia**.

En un aislador, todos los niveles de la banda de valencia están ocupados y los de la banda de conducción están vacíos y entre ambas bandas exista una separación de varios electrón-volts; esta separación es suficientemente grande como para impedir que electrones pasen a la banda de conducción al aplicarle un campo eléctrico externo, por lo que no se produce la conducción, en la Fig. 1.27 se muestra esquemáticamente la diferencia básica entre un conductor y un aislador o dieléctrico. [9]

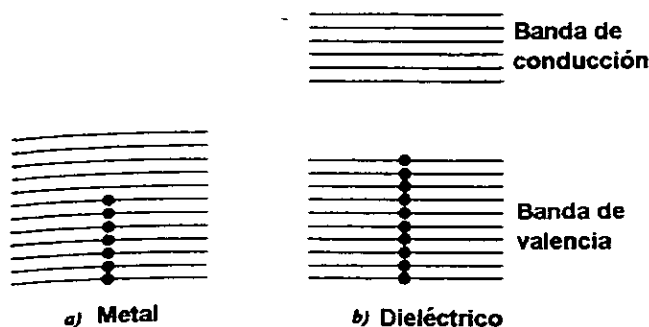


Fig. 1.27 Llenado de los niveles de energía en el estado base de (a) un metal (conductor) y (b) un dieléctrico (aislador). En el segundo caso, la separación entre la banda de conducción y la de valencia es de varios eV.

Nótese el papel esencial que juega el hecho fundamental de que cada nivel electrónico puede ser ocupado por un máximo de dos electrones (con diferente espín); sin esta limitación, todos los cristales serían conductores, por tanto puede decirse que la teoría elemental de la conducción ofrece una excelente verificación de este principio fundamental (o, más en general, del hecho de que los electrones satisfacen la estadística de Fermi - Dirac).

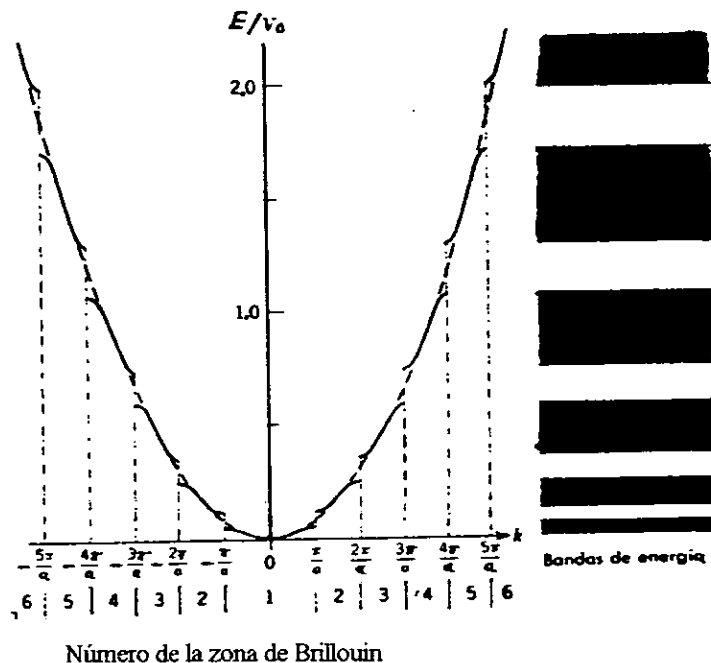
Se puede obtener una imagen de las funciones de onda, dadas por la Ec. 1.27, mostrando algunas de ellas para el caso de una red compuesta de ocho iones en fila. La banda está compuesta de ocho niveles, pero sólo se indican cuatro funciones de onda, cabe notar que, aunque el momentum del electrón descrito por la Ec. (1.27) no es constante, puede decirse que $\hbar k$ es algo así como un **momentum medio** del electrón, sin embargo, la longitud de onda asociada con $\psi(x)$ es $\lambda = 2\pi/k$, y así k es el número de onda del electrón.

La energía del electrón no es totalmente cinética, como en el caso del electrón libre $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$, debido a la energía potencial correspondiente a la red de iones. La expresión para la energía en función de k es complicada y depende de la geometría de la red, el resultado importante es que la energía tiene una discontinuidad para ciertos valores de

k que, para una red lineal de espaciamento a , están dados por:

$$k = n\pi/a \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.26)$$

En la Fig. 1.28 se muestra el gráfico de energías $E(k)$ para este caso, en él, se observa que para valores de k no cercanos a los dados por la Ec. (1.26), la energía se parece mucho a la de una partícula libre (indicada con líneas de trazos). [8]



Número de la zona de Brillouin

Fig. 1.28 Energías permitidas en una red unidimensional de periodicidad a , como función del número de onda k . Para comparación, la curva discontinua proporciona el resultado debido al modelo del electrón libre. Las bandas de energía permitidas y prohibidas que resultan se muestran a la derecha.

En consecuencia la red afecta el movimiento de un electrón sólo cuando k es cercano a $n\pi/a$, y el efecto es producir discontinuidades de energía, para valores intermedios de k , los electrones se mueven libremente a través de la red, las bandas de energía permitidas son las correspondientes a las líneas llenas; estas bandas de energía también se ilustran a la derecha de la figura.

No es sorprendente que un electrón se pueda mover libremente a través de la red sin encontrar ninguna resistencia, excepto, cuando k se acerca a los valores $n\pi/a$. El movimiento de los electrones en la red se puede asimilar a la propagación de una onda electromagnética en un cristal, la dispersión de la onda electromagnética por los átomos de la red da lugar a una onda dispersada que se refuerza cuando se satisface la **condición de Bragg**: esto es:

$$2a \sin \theta = n\lambda$$

donde a es la distancia entre los planos y θ es el ángulo que la dirección de propagación forma con los planos de la red (Fig. 1.29). Para incidencia normal ($\theta = \pi/2$), la condición de Bragg se convierte en $2a = n\lambda$, esta es la condición a aplicar para la propagación de ondas a lo largo de una red lineal. [11]

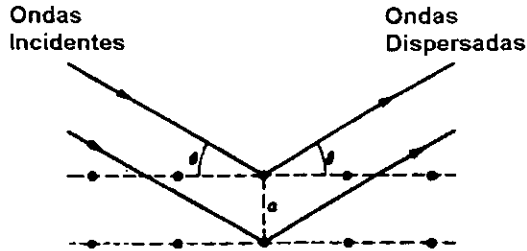


Fig. 1.29 Dispersión de Bragg

Por ejemplo si las ondas 1 y 2 (Fig. 1.30) son reflejadas por iones sucesivos A y A' , los rayos reflejados $1'$ y $2'$ tienen una diferencia de camino de $2a$ y una diferencia de fase $2\pi(2a)/\lambda$, para una intensidad máxima de $1'$ y $2'$, esta diferencia de fase debe ser igual a $2n\pi$, con lo cual resulta $2a = n\lambda$, haciendo $\lambda = 2\pi/k$ se obtiene $k = n\pi/a$, de conformidad con la Ec. (1.26), por consiguiente los valores de k son aquellos para los cuales la red lineal impide el movimiento de los electrones en una dirección dada y los obliga a moverse en la dirección opuesta. El conjunto de los valores de k comprendidos entre $-\pi/a$ y $+\pi/a$ constituyen la **primera zona de Brillouin**, para k comprendido entre $-2\pi/a$ y $-\pi/a$ y entre $+\pi/a$ y $+2\pi/a$, se tiene la **segunda zona de Brillouin**, y así sucesivamente. [11]

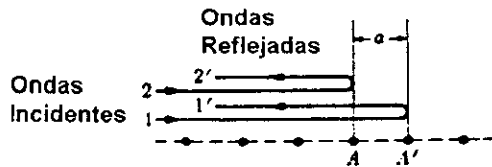
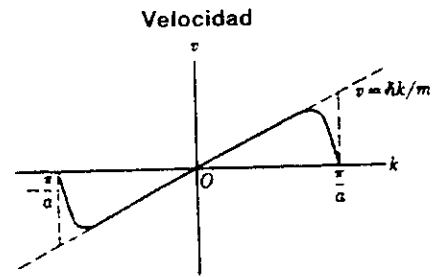
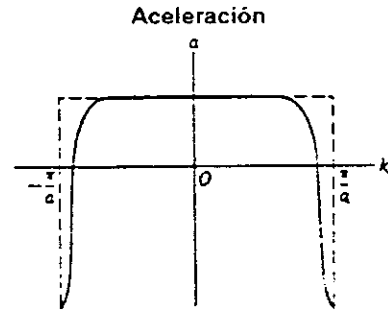


Fig. 1.30 Dispersión de Bragg en una red lineal.



(a)



(b)

Fig. 1.31 Velocidad y aceleración en función de k en la primera zona de Brillouin de una red lineal

Para describir el movimiento de un electrón a través de una red representado por un paquete de ondas bajo la acción de una fuerza, se considerará primero un electrón en la **primera zona de Brillouin** y suponiendo, por ejemplo, que el electrón tiene inicialmente $k = 0$; luego su velocidad es también cero. Cuando se aplica la fuerza F , k aumenta de acuerdo con la Ec. (1.31),

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (1.27)$$

y según la Fig. 1.31 la velocidad (v) también aumenta, lo que implica que el electrón se acelere. Pero cuando k alcanza un cierto valor cercano a π/a , la velocidad comienza a disminuir (esto es, el electrón se frena a pesar de que la fuerza es la misma). Este efecto se debe a la interacción del electrón con la red. Cuando $k = \pi/a$ la velocidad se hace cero, pero el paquete de ondas que representa al electrón sufre una reflexión de Bragg en la red, k se hace igual a $-\pi/a$ y la propagación se efectúa en la dirección opuesta. Evidentemente la velocidad es ahora negativa. Si la fuerza aplicada no varía, la Ec. (1.27) nos dice que k continúa cambiando en la misma dirección y por lo tanto, como es negativa, disminuye en valor absoluto. La Fig. 1.31a indica que la velocidad primero aumenta en dirección opuesta a la fuerza externa, pero muy pronto su módulo comienza a disminuir, ya que la fuerza se opone a la velocidad; esto es el electrón se frena hasta que eventualmente, la velocidad se hace nuevamente cero cuando $k = 0$, a partir de aquí el ciclo se repite. En la Fig. 1.31b se muestra la aceleración del electrón durante el ciclo completo. Representando el estado del electrón por un punto en un gráfico de E en función de k (Fig. 1.32), puede ilustrarse el proceso, moviendo el punto como lo indican las flechas de la figura.

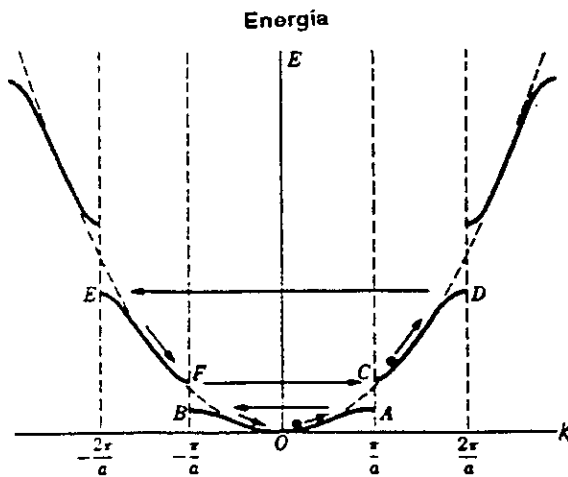


Fig. 1.32 Movimiento electrónico en la primera y segunda zona de Brillouin de una red lineal. Bajo la acción de una fuerza externa, el número de onda y la energía del electrón varían dentro de cada zona, como se ilustra con las flechas.

Si el electrón comienza en cero, su punto representativo se mueve desde O hasta A, entonces salta a B y retrocede hasta O.

Un electrón en la **segunda zona de Brillouin**, que cubre los intervalos $-2\pi/a \leq k \leq -\pi/a$ y $-\pi/a \leq k \leq 2\pi/a$, si el electrón inicialmente tiene un valor k ligeramente superior a π/a , la fuerza aplicada aumenta el valor de k hasta $k = 2\pi/a$, inmediatamente una reflexión de Bragg invierte el momentum y k salta al valor $-2\pi/a$, si la fuerza continúa actuando sobre el electrón, k continúa aumentando (realmente disminuyendo en valor absoluto) hasta que alcanza el valor $-\pi/a$, cuando tiene lugar otra reflexión de Bragg y el momentum se invierte de nuevo, cambiando k al valor π/a , de aquí en adelante el proceso continúa de una manera cíclica. En consecuencia el electrón describe el ciclo $C \rightarrow D \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow C$ (Fig. 1.32). En la Fig. 1.33 se ilustra la variación de la velocidad y de la aceleración del electrón en la **segunda zona de Brillouin**.

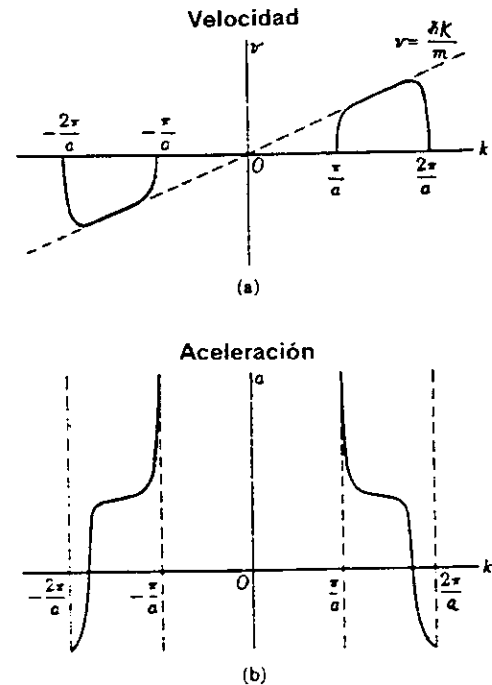


Fig. 1.33 Velocidad y aceleración en función de k en la segunda zona de Brillouin de una red lineal.

De la descripción cinemática anterior se deduce una importante conclusión: una fuerza externa no puede sacar un electrón de una zona de Brillouin; por consiguiente el electrón permanece en la misma banda de energía a menos que en un proceso gane suficiente energía (por ejemplo absorbiendo un fotón) para cruzar la discontinuidad de energía y pasar a la próxima zona. (Hay empero, cierta probabilidad de que un electrón bajo la acción de una fuerza aplicada cruce la discontinuidad en $k = \pm \pi/a$; esto se llama **efecto Zener**.)

Se ha encontrado conveniente definir una **masa efectiva m^*** del electrón de acuerdo a la relación $m^* = F/a$, aquí F es la fuerza externa aplicada al electrón y a la aceleración real debida tanto a F como a la interacción con la red, de este modo no se puede esperar que m^* sea igual a la masa del electrón m , ni que sea una constante, usando la Ec. (1.27) se obtiene:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \quad (1.28)$$

Obsérvese que cuando el electrón es libre y su energía está dada por la Ec. $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$, se tiene $m^* = m$, evidentemente m^* es una función de los parámetros de la red y del momentum $\hbar k$ del electrón en la red. En los gráficos de E en función de k (Fig. 1.28), se ve que m^* es positiva en la base de una banda de energía y negativa en el tope de la misma, se hace muy grande, teóricamente infinita, en el punto de inflexión de la curva de energía, esto es, en el máximo de v en la Fig. 1.31. En la Fig. 1.34 se muestra en forma

esquemática la variación de m^* con k en la primera zona de Brillouin. [11]

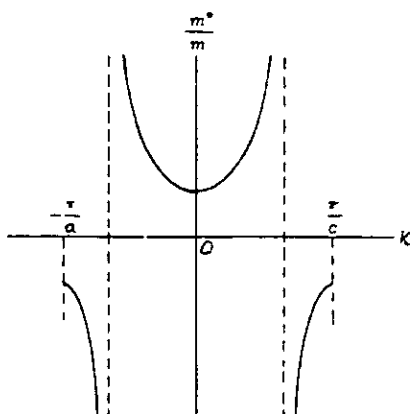


Fig. 1.34 Masa efectiva en función de k

La ampliación a estructuras realmente tridimensionales conduce a las zonas de Brillouin indicadas en la Fig. 1.35.

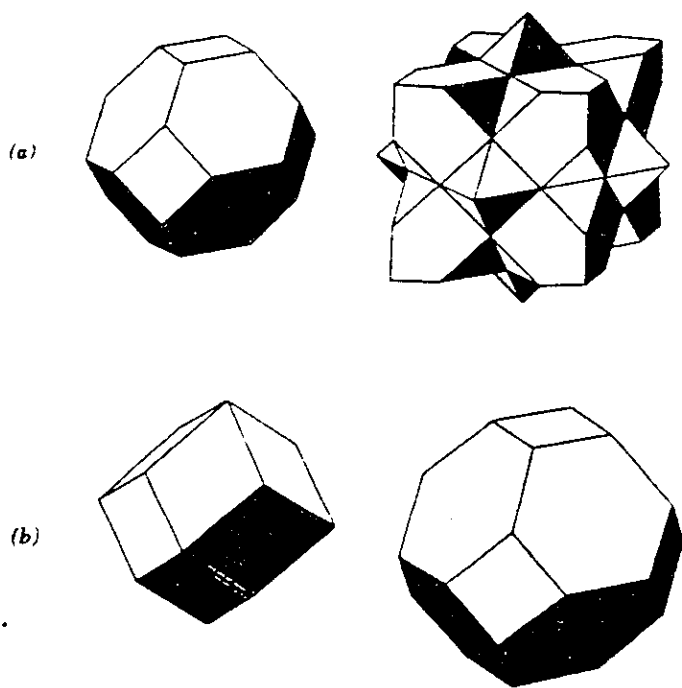


Fig. 1.35 Primera y segunda zonas de Brillouin en: (a) una estructura cúbica centrada en las caras y (b) una estructura cúbica centrada en el cuerpo (ver Figs. 1.11 y 1.12)

1.8 Aisladores, Semiconductores y Metales

Cualquier conductividad que presente un cristal debido al movimiento de electrones libres, se debe al movimiento de electrones dentro de las bandas de energía que están sólo parcialmente llenas, esta observación constituye la base de la diferencia entre los **aisladores**, los **conductores metálicos** y los **semiconductores**.

En un **aislador**, el número de electrones dentro del cristal es apenas el suficiente para llenar completamente cierto número de bandas de energía, sobre estas bandas de energía existe una serie de bandas totalmente llenas; pero entre las bandas totalmente llenas y vacías se encuentra una región de energía prohibida tan ancha que es prácticamente imposible, a temperaturas físicamente posibles, excitar térmicamente un número importante de electrones para que atraviesen esta región desde la parte superior de la banda llena más alta a la base de la banda vacía más baja, entonces, todas las bandas están, ya sea llenas o vacías y no puede fluir una corriente de electrones libres, esta situación se ilustra en la Fig. 1.38a. [10]

Si es muy pequeño el vacío de energía ΔE entre las bandas llenas y vacías en este tipo de cristal, se tiene una probabilidad estadística apreciable de que los electrones puedan excitarse térmicamente de estados cercanos a la parte superior de la banda llena, para atravesar el vacío, hasta los estados cercanos a la base de la banda vacía. Se dispondrá de un número limitado de electrones libres para conducción de corrientes eléctricas en la banda superior casi vacía y, además, los estados electrónicos vacíos que quedan cerca de la parte superior de la banda más baja permiten que esta banda contribuya al flujo de corriente eléctrica a través del mecanismo de **conducción por huecos**. Un material de esta naturaleza se llama **semiconductor**, su conductividad eléctrica es casi siempre mucho menor que la de un metal debido a la concentración limitada de electrones libres y huecos y, además, depende enormemente de la temperatura, que aumenta con gran rapidez al incrementarse ésta, ya que la probabilidad de la excitación térmica se incrementa con la temperatura, por supuesto, la conductividad eléctrica de un semiconductor es también una función del vacío de energía ΔE . La diferencia entre los aisladores y los semiconductores es sólo de grado; todos los semiconductores pueden hacerse aisladores ideales conforme la temperatura se acerca al cero absoluto, debido a que entonces la probabilidad asociada con la excitación térmica se hace tan pequeña que tiende a desaparecer. Del mismo modo, a temperaturas lo suficientemente elevadas (que con frecuencia son imposibles de alcanzar en la práctica debido a que el cristal se funde o se evapora), todos los aisladores presentan propiedades semiconductoras, la estructura de las bandas de un semiconductor aparece ilustrada en la Fig. 1.38b.

El mecanismo físico de la conducción por electrones y huecos en **semiconductores covalentes**, tales como el carbono (diamante), germanio y silicio, que forman cristales con la estructura del diamante de la Fig. 1.36;

se puede entender con mayor claridad en la Fig. 1.37. En esta figura se muestra la estructura calculada de bandas de energía del diamante graficada en función del espaciamiento interatómico, como se hizo en la Fig. 1.21, (los diagramas correspondientes al silicio y al germanio son muy similares) cuando N átomos aislados se combinan en un cristal, los niveles atómicos $2s$ y $2p$ se amplían a bandas de energía; conforme el espaciamiento interatómico disminuye, estas bandas se hacen cada vez más anchas y terminan por superponerse, si la distancia interatómica se hace más pequeña todavía, el continuo de lo que originalmente eran los estados $2s$ y $2p$ se divide una vez más en dos bandas, cada una de las cuales cuenta ahora precisamente con $4N$ estados, a la distancia interatómica de equilibrio a , estas bandas están separadas por un "vacío de energía" o región prohibida cuya anchura es ΔE .

Las estructuras electrónicas de estos semiconductores son:

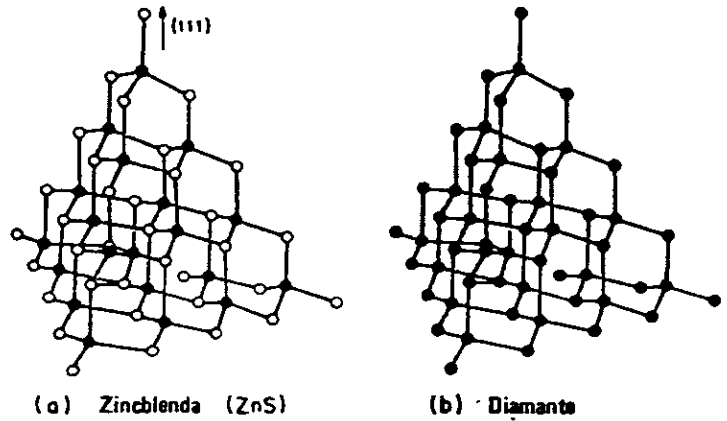
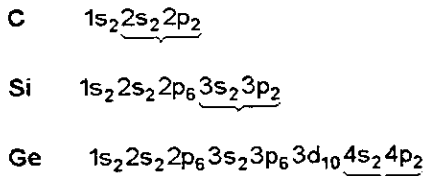


Fig. 1.36 Estructura de la zincblenda y el diamante.

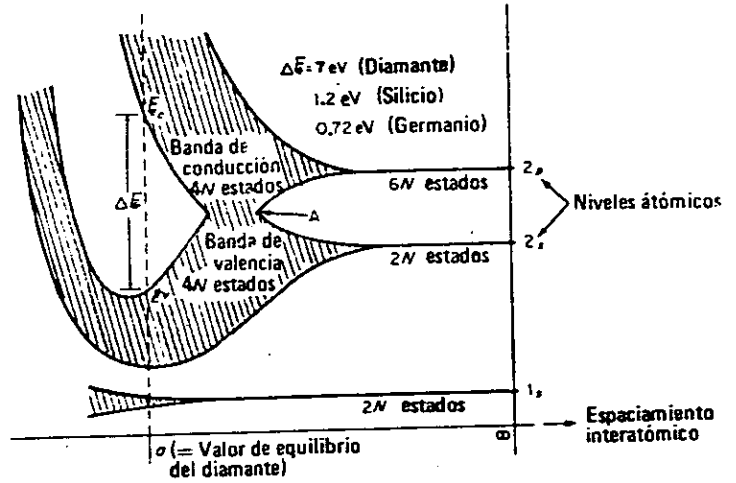


Fig. 1.37 Las bandas que se originan de los estados atómicos $1s$, $2s$, y $2p$ del carbono (diamante) como función de la distancia interatómica.

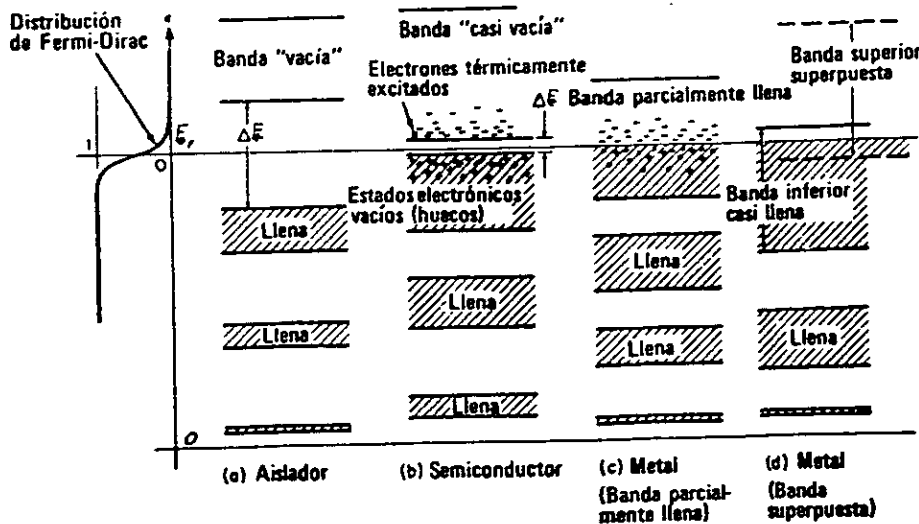


Fig. 1.38 Diagrama de las bandas de energía de (a) un aislador, (b) un semiconductor, (c) un conductor metálico (banda parcialmente llena) y (d) un conductor metálico (bandas superpuestas).

Las llaves debajo de la estructura representan los electrones en las capas más exteriores, los cuales están pobremente unidos al átomo y por tanto son los que determinan las propiedades de los semiconductores. Debido a la estructura electrónica del carbono, se tienen $4N$ electrones de valencia disponibles que bastan exactamente para llenar la más baja de las dos bandas y formar la banda de valencia del cristal, la banda superior se convierte en la de conducción, la región de energía prohibida en condiciones normales tiene una anchura aproximada de 7 eV en el diamante, de 1.124 eV a 1.2 eV en el silicio y de 0.664 eV a 0.7 eV en el germanio. A pesar de que el valor de la función de distribución de Fermi que gobierna las poblaciones relativas de un estado de energía en la banda de conducción respecto a un estado de energía en la banda de valencia, es pequeño puesto que $kT \approx 0.025$ eV a temperatura ambiente, el número de estados disponibles en la banda de conducción es alto, por lo tanto, la excitación térmica de la banda de valencia a la banda de conducción ocurre para un número significativo de electrones, siendo este número el producto del número de electrones por estado cuántico y el número de estados cuánticos por intervalo de energía, además, la conductividad de un semiconductor aumenta rápidamente conforme aumenta la temperatura, por ejemplo, el número de electrones excitados en silicio, aumenta por un factor de aproximadamente 10^9 al duplicarse la temperatura de 300 °K a 600 °K, debido a la expansión térmica en la red, el "vacío de energía" tiene una dependencia débil en función de la temperatura; de acuerdo con la Fig. 1.37, es evidente que el vacío en la energía disminuye conforme se expande el cristal, también es obvio de acuerdo con este diagrama, que ΔE será una función de la presión, haciéndose mayor conforme se reduce el espaciamiento interatómico mediante la aplicación de presión al cristal por algún medio. Más a la izquierda del punto a de la Fig. 1.37, en donde se superponen las bandas $1s$ y $2s$, se pierde el carácter s y p de los estados electrónicos: por tanto, en la banda de valencia del semiconductor, las funciones de onda del electrón son una mezcla de funciones de onda atómicas s y p .

Los electrones de la banda de valencia son los que forman los enlaces covalentes de parejas de electrones tetraédricamente dispuestos entre los átomos, la excitación térmica de un electrón en la banda de valencia a la de conducción corresponde físicamente a la supresión de un electrón de la pareja del enlace covalente por medio de la agitación térmica de la red, por tanto, el electrón se convierte en un electrón libre fuera del enlace covalente de la red, y queda disponible para funcionar como portador de carga a fin de conducir una corriente a través del cristal, este proceso se describe esquemáticamente en la Fig. 1.39a, aunque se debe recordar que el patrón de enlaces usado es una versión bidimensional de lo que en realidad es una red tridimensional de enlaces tetraédricos.

La excitación de un electrón deja un defecto localizado en la estructura del enlace covalente del cristal, que se puede identificar como un estado de banda de

valencia que podría ser ocupado por un electrón; pero que en realidad está vacío, tanto el electrón libre como el hueco son migratorios; el electrón libre puede "vagar" dentro del cristal en una forma aleatoria, impelido por la energía térmica que pueda adquirir de la propia red, del mismo modo, el hueco puede desplazarse porque un electrón de un enlace covalente adyacente al hueco puede moverse con suma facilidad hacia el hueco, completando así la pareja de enlace en el sitio original del hueco; pero transfiriendo la ubicación del hueco al sitio de donde provino el electrón. Esta migración del hueco también puede producirse por una agitación térmica de la red. Los electrones libres y los huecos se moverán también en respuesta a un campo eléctrico y pueden dar origen a una corriente macroscópica que fluye por el cristal. En la Fig. 1.39b se ilustra esta situación. En este caso, todos los electrones del cristal, tanto en la banda de conducción como en la de valencia están sometidos a la fuerza $-eE$ que actúa a la derecha del diagrama. Los electrones libres se mueven hacia la derecha produciendo un flujo de corriente convencional a la izquierda, debido a su carga negativa. [10]

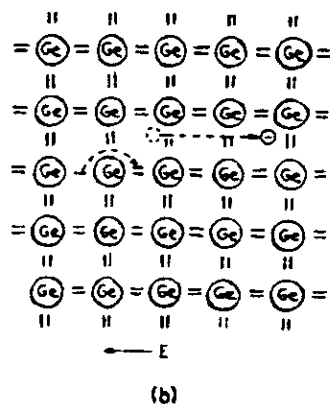
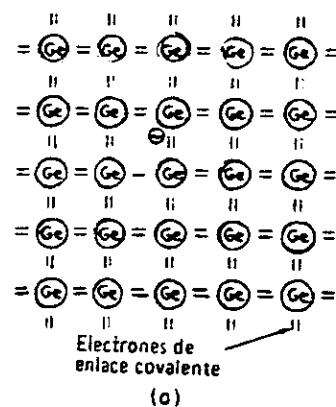


Fig. 1.39 (a) Un electrón libre y un hueco producidos por la ionización térmica de un electrón que originalmente se encontraba en un enlace covalente. (b) Movimiento del electrón libre (ala derecha) y el hueco (a la izquierda) cuando se aplica un campo eléctrico tal y como se indica.

Además un electrón de un enlace covalente adyacente a un hueco se puede desplazar a la derecha hacia el sitio vacío del electrón asociado con él, y el hueco se desplaza hacia la izquierda al sitio de donde provino este electrón; este proceso puede repetirse y el resultado neto es una transferencia neta de un electrón hacia la derecha que va acompañada del movimiento del hueco hacia la izquierda, es decir, en la dirección en que la partícula de carga positiva se movería bajo la influencia de un campo aplicado. La corriente neta de electrones hacia la derecha da origen nuevamente a un flujo convencional de corriente hacia la izquierda que puede representarse como una corriente de huecos positivos en tal dirección, así pues, el flujo de la corriente puede deberse tanto al movimiento de electrones libres como a la migración de electrones de valencia dentro y fuera de estados vacíos de la banda de valencia, que se puede considerar mejor como la migración de huecos positivos.

1.9 Semiconductores Intrínsecos y Semiconductores con Impurezas

Un semiconductor en el que los huecos y los electrones se crean exclusivamente mediante una excitación térmica a través de la banda prohibida de energía, se conoce como semiconductor intrínseco. Los huecos y los electrones creados de esta manera a menudo se denominan portadores intrínsecos de carga y la conductividad originada por estos portadores se llama conductividad intrínseca. En un semiconductor intrínseco, las concentraciones de electrones y huecos siempre deben ser las mismas, ya que la excitación térmica de un electrón origina inevitablemente sólo un hueco.

La población de huecos y electrones en un semiconductor intrínseco se describe estadísticamente de acuerdo con la función de distribución de Fermi-Dirac y las funciones de densidad de estados para las bandas de valencia y conducción, puesto que la parte baja de la banda de conducción y la parte superior de la de valencia muestran una dependencia esencialmente parabólica en su relación E y k , el comportamiento de los electrones y los huecos en estas regiones es fundamentalmente el de una partícula libre, con los factores apropiados de masa efectiva. Los electrones y los huecos se ven raramente excitados hacia las regiones de las bandas de conducción y valencia en donde sus propiedades pueden diferir del comportamiento de una partícula libre a temperaturas físicamente posibles de manera que los efectos de estas excitaciones se pueden desechar para fines prácticos, entonces, las funciones de densidad de estados que se van a usar son en esencia las de partículas libres y la densidad de estados de la banda de conducción está dada por: [12]

$$N_c(E)dE = \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_n^{*3/2} \sqrt{E - E_c} dE \quad (E > E_c) \quad (1.29)$$

y la densidad de estados de la banda de valencia son:

$$N_v(E)dE = \frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3} m_p^{*3/2} \sqrt{E_v - E} dE \quad (E < E_v) \quad (1.30)$$

en donde m_n^* es la masa efectiva de los electrones de la banda de conducción y m_p^* es la masa efectiva de los huecos de la banda de valencia². Por supuesto, la densidad de estados en la región prohibida $E_v < E < E_c$ es cero. En la figura 1.40 aparece una gráfica de la curva de densidad de estados correspondiente a un semiconductor intrínseco.

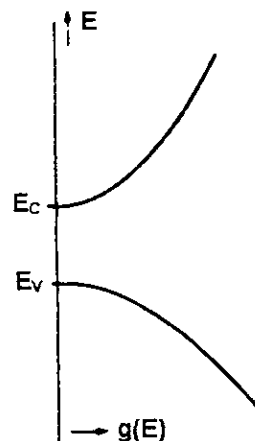


Fig. 1.40 Función de densidad de estados de un semiconductor intrínseco.

Si m_n^* y m_p^* son precisamente iguales, la energía de Fermi debe quedar exactamente en el centro de la región prohibida, esto es lo correcto debido a que, de otra manera, la población de electrones en la banda de conducción y los huecos de la banda de valencia, obtenidos integrando el producto de la función de densidad de estados y el factor de probabilidad $f_0(E)$ para los electrones en la banda de conducción, ó $1-f_0(E)$ para los huecos en la banda de valencia, no sería idéntica. La situación se representa gráficamente en la Fig. 1.41a, si m_n^* y m_p^* no son iguales (y este es el caso general), la energía de Fermi debe sufrir un pequeño ajuste ascendente o descendente, alejándose del centro exacto de la banda prohibida de energía, para igualar las integrales de población y, por tanto, debe quedar cerca pero no en el centro de la región prohibida. En la figura 1.41b se muestra este hecho.

Es muy fácil introducir cantidades muy pequeñas de sustancias tales como arsénico, antimonio u otros elementos pertenecientes al grupo V de la tabla periódica en cristales puros de silicio o germanio, como átomos de impurezas que ocupan sitios de la red que normalmente estarían ocupados por átomos del semiconductor covalente. Los átomos del grupo V tienen cinco electrones de valencia, cuatro de ellos se usan

² Los subíndices n y p se refieren a los portadores de carga negativos y positivos.

para formar enlaces covalentes con átomos circunvecinos del semiconductor y el quinto se enlaza al átomo de impureza sólo mediante fuerzas electrostáticas que son muy débiles y, por ende, se pueden ionizar con facilidad mediante la agitación térmica de la red a temperaturas ordinarias para proporcionar una conducción electrónica adicional, entonces el átomo de impureza que queda se convierte en un ion positivo, que, sin embargo, es inmóvil, en vista de que está fuertemente unido a cuatro átomos vecinos por medio de los enlaces covalentes normales, esta situación se ilustra en la Fig. 1.42a, en cristales que contienen este tipo de impureza existen más electrones que huecos (aunque algunos huecos siguen estando presentes debido a los pares hueco-electrón que se siguen creando térmicamente de vez en cuando). Estos cristales se denominan **semiconductores tipo n**, designados así porque la mayoría de los portadores de carga son electrones *negativos*. La componente de la conductividad eléctrica que se produce por los átomos de impureza se llama **conductividad de impureza**. Una sustancia cuya mayoría de portadores se origina debido a átomos de impureza, se conoce como **semiconductor con impurezas**. Los átomos del grupo V se llaman con frecuencia **donadores**, ya que cada uno de ellos dona un electrón libre adicional al cristal, se requiere tan poca energía para ionizar un átomo de impureza donadora típico del grupo V en Si y Ge, que prácticamente todas las impurezas del grupo V en estos materiales se ionizan a temperaturas superiores a aproximadamente 20 °K.

Si en lugar de los átomos del grupo V se introducen en la red átomos de impurezas del **grupo III** (Al, Ga, In, etc.), se observará un efecto muy distinto, estos átomos tienen sólo tres electrones de valencia que se usan para formar enlaces covalentes con tres átomos cercanos; pero el cuarto enlace siempre carece de un electrón, en efecto, existe un hueco adicional que se crea en la estructura del enlace covalente en el átomo de la impureza. Este hueco puede emigrar fácilmente alejándose del sitio de la impureza debido a que un electrón adicional del enlace covalente cercano puede emigrar al sitio de la impureza y llenar el cuarto enlace del par de electrones (que, por supuesto, representa una carga negativa en el átomo de impureza); a continuación, el hueco se asocia con el átomo cercano que no se puede distinguir de un hueco térmicamente formado. En la Fig. 1.42b se ilustra esta situación. La energía necesaria para la migración del hueco lejos del sitio de la impureza es del orden de la energía que se requiere para eliminar el electrón adicional de un átomo donador. En consecuencia, excepto a temperaturas muy bajas, todos los huecos serán migratorios y todos los átomos de impurezas del grupo III tendrán la naturaleza de iones negativos inmóviles. En cristales que contienen predominantemente este tipo de impureza se tienen más huecos que electrones, aunque siempre habrá algunos electrones que se originan debido a la excitación térmica. Los cristales de esta índole se conocen con el nombre de **semiconductores tipo p**, dado que los portadores de carga mayoritarios son *positivos*. Los áto-

mos de sustitución del grupo III se clasifican casi siempre como **átomos receptores**, debido a que pueden recibir un electrón de la estructura del enlace covalente liberando un hueco móvil. Cuando en un cristal semiconductor existen impurezas de ambos tipos, la conductividad es invariablemente mayor que la referente a un semiconductor puro o intrínseco a la misma temperatura, debido a los portadores de carga adicionales originados por los átomos de impurezas y, en general, mientras más grande es la concentración de impurezas, tanto mayor es la conductividad.

La representación estadística de los semiconductores tipo n y p se caracteriza por la presencia del nivel de Fermi superior (para tipo n) o inferior (para tipo p) a la posición asociada con el cristal puro o intrínseco, por ejemplo, en un cristal tipo n, no puede haber más electrones que huecos, a menos que el nivel de Fermi se ajuste de un modo ascendente en relación con la posición intrínseca, y viceversa para el tipo p, como se ilustra en la Fig. 1.43, conforme varían la temperatura y la concentración de impurezas la posición del nivel de Fermi cambia de un modo muy complejo, ver Fig. 1.44.

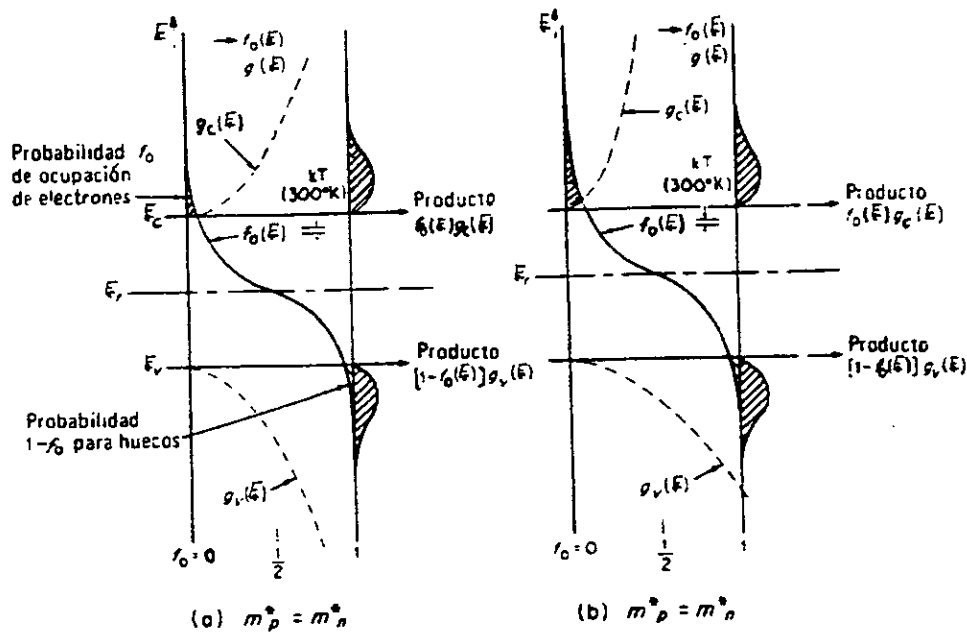


Fig. 1.41 Función de distribución, nivel de Fermi, función de densidad de estados y poblaciones de electrones y huecos de un semiconductor intrínseco (a) en donde $m_p^* = m_n^*$ y (b) en donde $m_p^* > m_n^*$. La "ampliación" de la distribución de Fermi se ha exagerado aquí para ilustrar con mayor claridad; en realidad, a 300 °K, la distribución de Fermi sería más bien como la función "escalón" que se encuentra para $T = 0$.

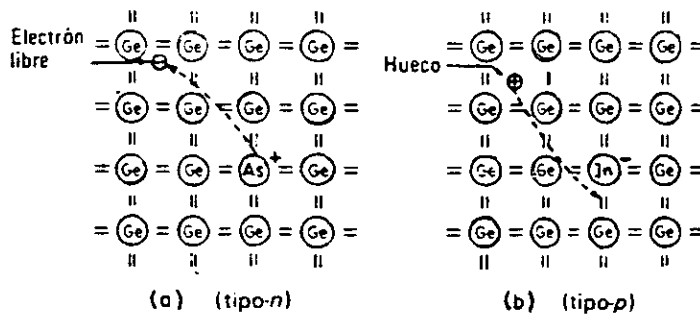


Fig. 1.42 (a) Electrón libre originado por la ionización de un átomo de impureza de arsénico de sustitución, (b) hueco libre producido por la ionización de un átomo de indio de impureza de sustitución.

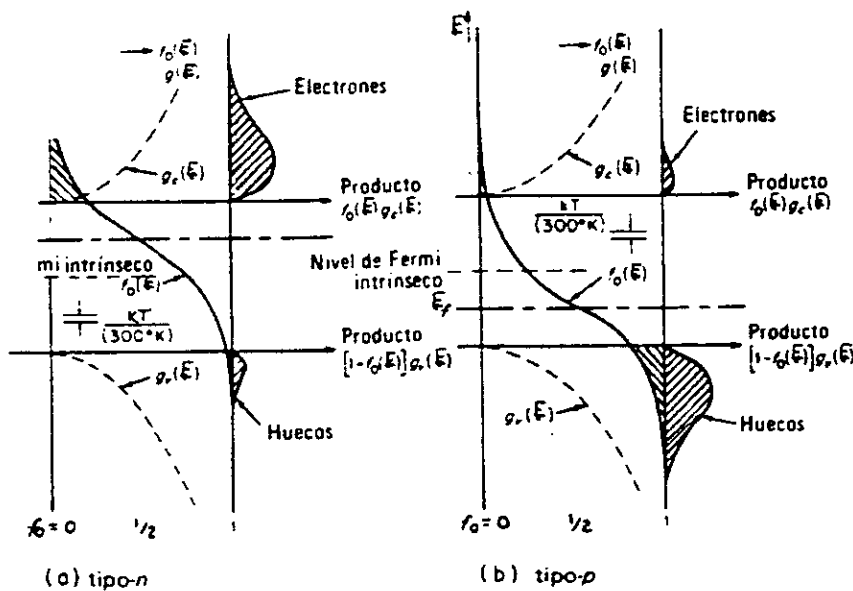


Fig. 1.43 Función de distribución, nivel de Fermi y poblaciones de electrones y huecos para (a) un semiconductor con impurezas tipo n y (b) un semiconductor con impurezas tipo p . Una vez más, como en la Fig. 1.40, la "ampliación" de la distribución de Fermi se exagera con fines ilustrativos.

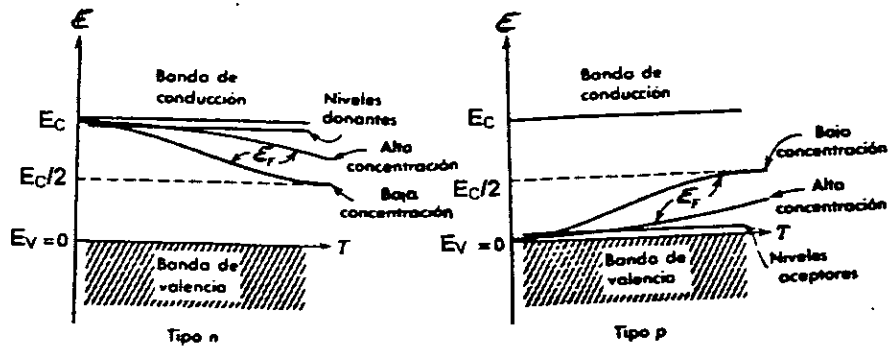


Fig. 1.44 *Izquierda*: La energía de Fermi como función de la temperatura, para un semiconductor tipo n con dos concentraciones de impurezas diferentes. *Derecha*: Para un semiconductor tipo p con dos concentraciones de impurezas diferentes.

1.10 Estructura de bandas de energía del Silicio

El Silicio es el semiconductor más importante para la industria electrónica, su posición privilegiada no se debe de hecho a una especial estructura de banda, sino más bien a otras propiedades como su robustez, disponibilidad en la naturaleza, facilidad para procesarlo y sobre todo la ventaja de que forma un óxido (SiO_2) el cual es un aislador. La interfase Si- SiO_2 puede obtenerse con gran calidad y es muy estable, más que nada, esta interfase es la que le ha dado a la tecnología a base de silicio el empuje necesario para imponerse al germanio, la estructura de bandas del silicio se muestra en la Fig. 1.45 y en una forma más condensada en las Fig. 1.46a y 1.46b.

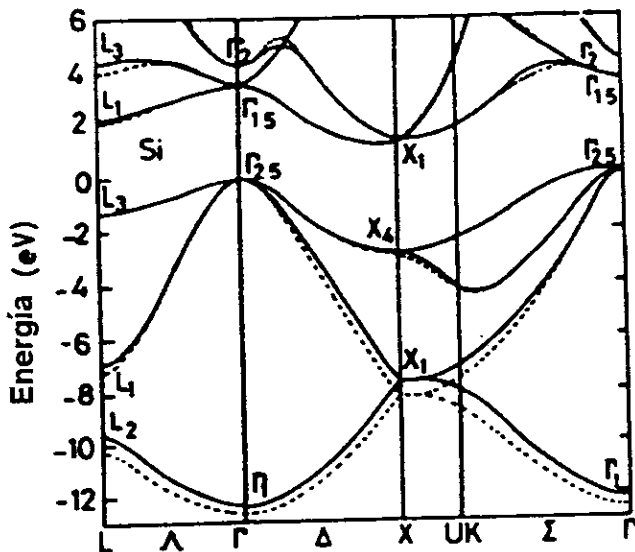


Fig. 1.45 Estructura de bandas del silicio.

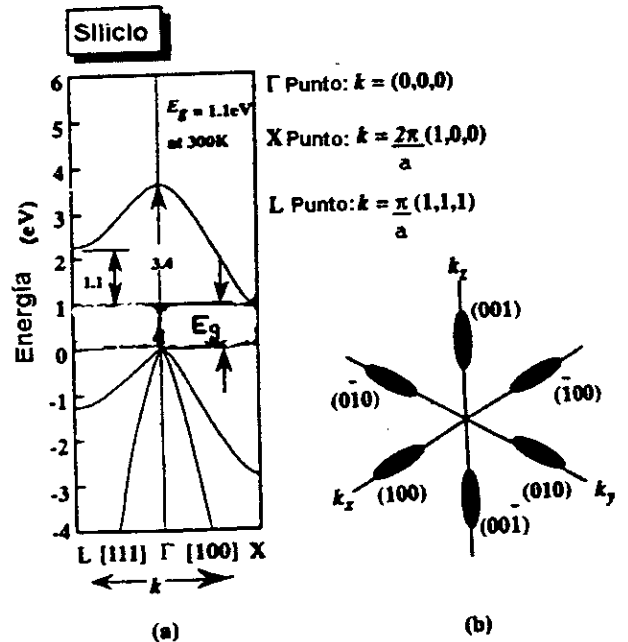


Fig. 1.46a (a) Estructura de banda del silicio. (b) Elipsoides de energía constante para las bandas de conducción del silicio. Existen seis valles equivalentes en el Si.

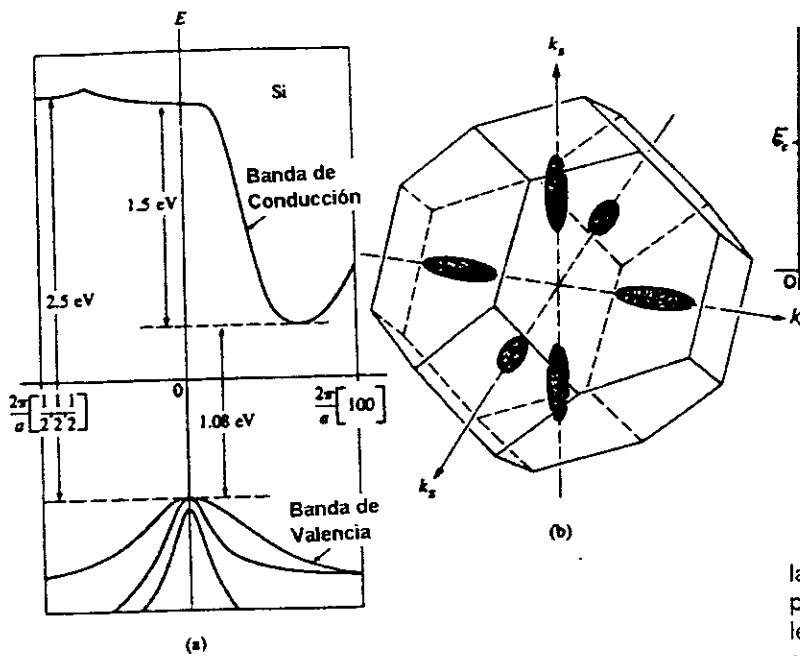


Fig. 1.46b (a) Estructura de bandas del Si dibujadas a lo largo de las direcciones [100] y [111], (b) Elipsoides de energía constante que corresponden a los valles a lo largo de las direcciones $\langle 100 \rangle$.

En ellas puede verse que el silicio tiene una banda indirecta (i.e. que el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción tienen distintos valores de k), este hecho limita grandemente la aplicación del Silicio en los dispositivos ópticos, por lo que con él, por ejemplo, no es posible fabricar láseres. El mínimo de la banda de conducción está cerca del punto X en la zona de Brillouin ($\sim k = (\frac{2\pi}{a})(0.85, 0, 0)$). Debido a la simetría de la red cúbica centrada en la cara, existen seis puntos X degenerados y en consecuencia seis mínimos de la banda de conducción.

En la Fig. 1.47a se muestra una gráfica de E en función de k en la dirección (100), para los electrones de la banda de conducción del silicio. El valor más pequeño de E se alcanza para un valor de k que es aproximadamente $(\frac{2\pi}{a})(0.85)$, este es el valor mínimo absoluto de E dentro de la zona de Brillouin, se pueden tener otras curvas de E en función de k para otras direcciones que presenten otros valores mínimos de E ; pero ninguno será tan bajo como el valor de E_c de la figura. Para energías mayores de E_c , se pueden construir superficies de energía constante alrededor del punto de energía mínima, es obvio que la curva de energía en función de la cantidad de movimiento del cristal de la Fig. 1.47a es aproximadamente parabólica alrededor del punto mínimo, correspondiendo al comportamiento del electrón libre con una masa efectiva apropiada que se denominará $m_{||}^*$.

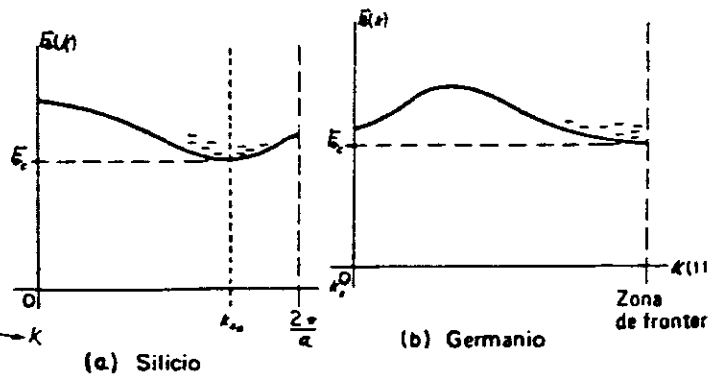


Fig. 1.47 La relación de E en función de k para (a) la banda de conducción del silicio graficada a lo largo de la dirección k , (b) la banda de conducción del Germanio graficada en la dirección (111) dentro del espacio k .

Si se graficara la curva de E en función de k a lo largo de una dirección que pase por el punto mínimo, pero perpendicular al eje k_x (por ejemplo una línea paralela al eje k), también se podría obtener una curva que sería parabólica alrededor del punto mínimo; pero en este caso no se obtiene el aspecto de simetría del cristal que requeriría que la curvatura en esta dirección fuera la misma que se tiene a lo largo de la dirección k_x . (Esta situación se ilustra en la Fig. 1.48).

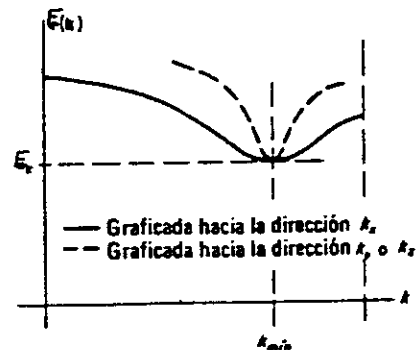


Fig. 1.48 La relación de E en función de k para la banda de conducción del Silicio graficada en la dirección k_x (curva continua) y a lo largo de una línea normal al eje k_x que pasa por el punto k_{min} (curva punteada). Las diferentes curvaturas en el punto mínimo reflejan la anisotropía de la masa efectiva.

Como resultado, la masa efectiva relacionada con los cambios en la componente de la cantidad de movimiento en esta dirección tiene un valor que difiere del que se dio con anterioridad y que se designará como m_{\perp}^* . [12]

La energía que sobrepasa el valor de E_c representa la energía cinética de un electrón libre dentro de la banda de conducción, de donde:

$$E - E_c = \frac{(p_x - p_{x0})^2}{2m_{\parallel}^*} + \frac{(p_y^2 + p_z^2)}{2m_{\perp}^*} \quad (1.31)$$

en donde $p_{x0} = \hbar k_{x0}$ representa el valor de p_x en la base de la banda, como se ilustra en Fig. 1.46a. De acuerdo con esto, la superficie de energía constante de un electrón cuya energía E es ligeramente mayor que E_c , es un **elipsoide de revolución** cuyo centro se localiza en $k_x = k_{x0}$, $k_y = k_z = 0$. no obstante, puesto que las seis direcciones (100) de una red cúbica son cristalográficamente equivalentes, la curva de E en función k en cualquiera de estas seis direcciones debe ser la misma. Entonces deben tenerse seis mínimos de energía a lo largo de seis direcciones (100) y con cada uno de estos mínimos debe asociarse una familia de superficies elipsoidales de energía constante similares a las que se describen en (las Figs. 1.44a y 1.44b), en la Fig. 1.49 se da otra representación de esta situación.

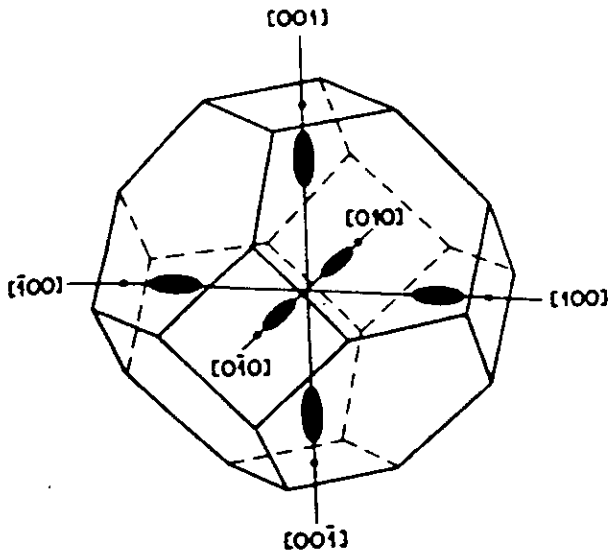


Fig. 1.49 Elipsoides de energía constante para la banda de conducción del Silicio. Existen seis valles equivalentes en el Si en el borde de la banda dando como resultado una muy alta densidad de estados en la misma.

Esto pone en claro por qué los elipsoides deben ser de revolución; las superficies de energía constante deben tener todas las propiedades de simetría de la zona de Brillouin que, a su vez, conserva todas las propiedades de simetría de un cristal cúbico, si los elipsoides no fueran de revolución, la familia de superficies de energía constante ya no sería invariable en todas las operaciones para las que un cristal cúbico permanece invariable.

1.11 Transiciones directas e indirectas

Una de las más importantes características de la estructura de banda de un semiconductor es su **ancho de banda intrínseco** E_g , el cual es la mínima separación de energía entre las bandas de valencia y conducción. El inicio de la absorción óptica en la frecuencia ω_g determina el ancho de banda $E_g = \hbar \omega_g$, como se muestra en las Figs. 1.50a y 1.51a; en el **proceso de absorción directa** un fotón es absorbido por el cristal con la creación de un electrón y un hoyo; en el proceso de **absorción indirecta** que se muestra en las Figs. 1.50b y 1.51b el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción tienen lugar a diferentes valores del vector de onda k_c , aparte de que el valor del vector de onda que los separa es importante. Un hoyo con energía $E_c - E_g$ y un electrón con energía E_c no pueden crearse por absorción directa de un fotón para el cual $\hbar \omega = E_g$, ya que el momento no se conservaría. Bardeen et. al, señalaron que dicha transición "no vertical" podría ocurrir indirectamente; como un proceso de dos pasos, en los cuales se involucra la emisión o absorción de un fonón de la red cristalina para compensar la diferencia en el momento, dicho fonón tiene una energía asociada con él igual a K y una frecuencia Ω , por lo que tenemos:

$$k(\text{fotón}) = k_c + K \cong 0; \quad \hbar \omega = E_g + \hbar \Omega$$

como lo demandan las leyes de conservación. La energía del fonón $\hbar \Omega$ será generalmente más pequeña que E_g , (los rangos de energía característicos de los fonones son ~ 0.01 a 0.03 eV).

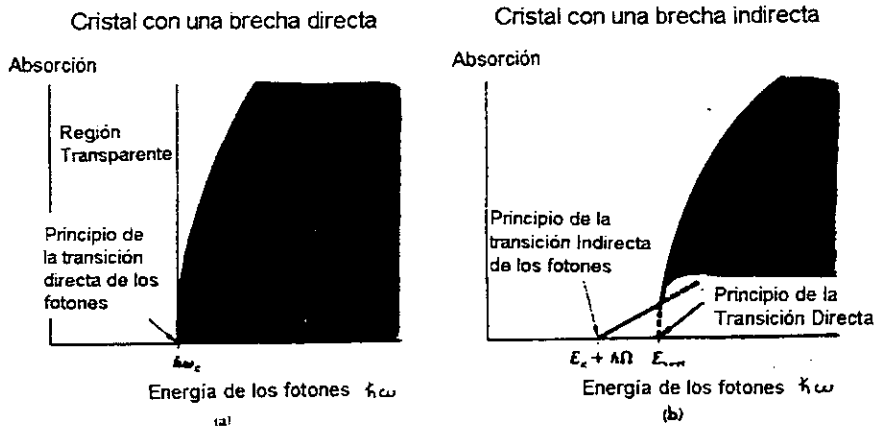


Fig. 1.50 Absorción óptica en aisladores puros. En (a) el inicio de la curva determina la brecha de energía $E_g = \hbar \omega_g$. En (b) la absorción está muy cerca del umbral: en $\hbar \omega = E_g + \hbar \Omega$ un fotón se absorbe con la consecuente creación de tres partículas: un electrón libre, un hoyo libre y un fonón de energía $\hbar \Omega$. En (b) la energía E_{vert} marca el inicio de la creación de un par electrón - hoyo libres, sin involucrar a ningún fonón. Una transición de este tipo se conoce como vertical; es similar a la transición directa en (a). Estos diagramas no muestran las líneas de absorción creados por los pares electrón - hoyo, llamados excitones.

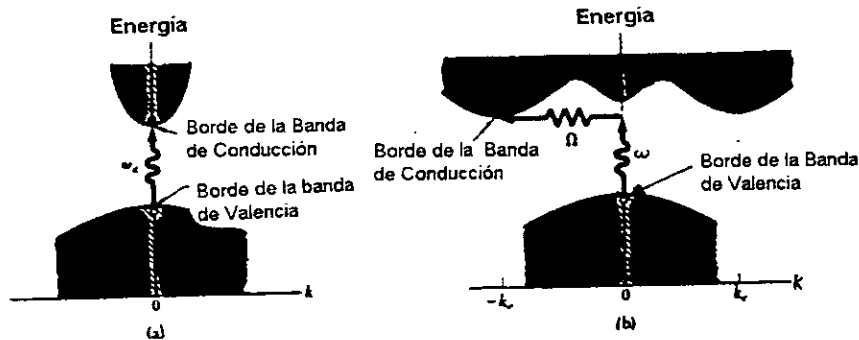


Fig. 1.51 En (a) el punto mínimo de la banda de conducción ocurre al mismo valor de k que el máximo de la banda de valencia. Una transición directa se muestra sin ningún cambio significativo de k , porque el fotón absorbido tiene un vector de onda muy pequeño. La frecuencia umbral ω_g donde tiene lugar la absorción por transición directa determina la brecha de energía $E_g = \hbar \omega_g$. La transición indirecta en (b) involucra al par fotón - fonón porque los límites de las bandas de conducción y de valencia están muy separados en el espacio k . El umbral de energía en el proceso indirecto es mayor que el de la brecha de energía real. El inicio de la absorción en la transición indirecta entre los límites de las bandas tiene lugar en el punto: $\hbar \omega = E_g + \hbar \Omega$, donde Ω es la frecuencia de un fonón emitido con un vector de onda $K \cong -k_c$. A temperaturas más altas los fonones están también presentes; si un fonón es absorbido junto con un fotón, el umbral de energía será: $\hbar \omega = E_g - \hbar \Omega$. Nota: La figura muestra únicamente las transiciones en los límites. Las transiciones ocurren generalmente entre casi todos los puntos de las dos bandas para los cuales los vectores de onda y energía se conservan.

1.12 Conductividad en Dieléctricos, Conductores y Semiconductores

Se ha explicado antes que en un dieléctrico o aislador las cargas están unidas y no son libres de moverse, de manera que la conductividad es idealmente cero: aunque un campo aplicado a un aislador puede que no produzca movimiento de carga, puede producir una polarización, (ver Cap.2 Sec. 2.7 y 2.8.1), es decir, un desplazamiento de los electrones respecto de sus posiciones de equilibrio.

En plasmas, gases y líquidos, se presentan por lo general cargas de ambos signos que tienen libertad de

movimiento, [13] por lo que la conductividad tendrá dos términos:

$$\sigma = \rho_- \mu_- + \rho_+ \mu_+ \quad (\text{Um}^{-1}) \quad (1.32)$$

donde ρ_- = densidad de partículas cargadas negativamente, C m^{-3}
 μ_- = movilidad de partículas cargadas negativamente, $\text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$
 ρ_+ = densidad de partículas (o iones) cargadas positivamente, C m^{-3}
 μ_+ = movilidad de partículas (o iones) cargadas positivamente, $\text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$

El primer término representa la contribución a la conductividad, proveniente de las partículas cargadas negativamente que se mueven en dirección opuesta al campo E , mientras que el segundo término representa la contribución de las partículas cargadas positivamente que se mueven en la dirección de E .

En conductores ordinarios (**metálicos**), como el cobre y el aluminio, los electrones externos, o de valencia, son fácilmente separados de sus átomos por medio de un campo eléctrico aplicado y están libres para moverse, sin embargo, los átomos, permanecen fijos dentro del conductor de manera que sólo los electrones presentan movilidad, en consecuencia, la conductividad para los conductores tiene sólo un término y se da como:

$$\sigma = \rho_e \mu_e \quad (\Omega m^{-1}) \quad (1.33)$$

donde ρ_e = densidad de electrones, Cm^{-3}
 μ_e = movilidad de electrones, $m^2 V^{-1} s^{-1}$

En los **semiconductores** la conducción normal por medio de electrones de valencia es complementada por otro portador de carga llamado *hueco*, como ya se ha explicado, en consecuencia, la conductividad en un semiconductor está dada por:

$$\sigma = \rho_e \mu_e + \rho_h \mu_h \quad (\Omega m^{-1}) \quad (1.34)$$

ρ_e = densidad de carga de electrones, $C m^{-3}$
 μ_e = movilidad de los electrones, $m^2 V^{-1} s^{-1}$
 ρ_h = densidad de carga de los huecos, $C m^{-3}$
 μ_h = movilidad de los huecos, $m^2 V^{-1} s^{-1}$

Como ejemplo de semiconductores típicos están nuevamente el germanio y silicio, en su forma intrínseca o pura, los electrones y los huecos (o pares de electrones-huecos) tienen solamente una corta vida, desapareciendo al recombinarse unos con otros, pero como se ha dicho siempre forman nuevos pares, este comportamiento ante la temperatura es opuesto al de los conductores ordinarios, que disminuyen en conductividad (aumentan en resistencia) con la temperatura.

El procedimiento de introducción de impurezas puede originar concentraciones de menos de una parte por millón que pueden aumentar la conductividad en un factor de casi un millón. En la Fig. 1.52 se ilustran seis condiciones diferentes de conductividad. [13] Estas son para:

1. Dieléctrico o aislador.
2. Plasma, gas o líquido.
3. Conductor ordinario (metálico).
4. Semiconductor puro (o intrínseco).
5. Semiconductor tipo n.
6. Semiconductor tipo p.

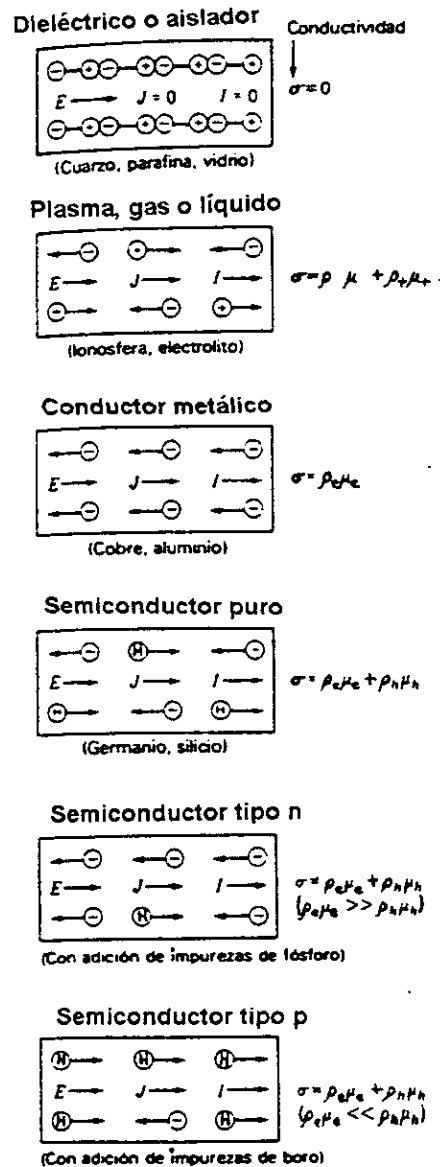


Fig. 1.52 Seis diferentes condiciones de conductividad. Nótese que las partículas cargadas negativamente (electrones) viajan en dirección opuesta a E , mientras que las partículas cargadas positivamente, o huecos, (H) viajan en la dirección de E , pero ambas se suman a la corriente total.

1.13 Primeras Investigaciones sobre el silicio amorfo hidrogenado

Según parece, el material que actualmente se denomina *silicio amorfo hidrogenado* (a-Si:H) se conoce desde hace ya un siglo. En efecto, en 1879, J. Ogier publicó un trabajo [58] en el que se indicaba que "el gas silano, SiH_4 , sometido a una descarga eléctrica, da lugar a un depósito sólido constituido esencialmente por Si_2H_3 ". Desde entonces se han realizado numerosos trabajos en los que se menciona la formación de capas delgadas de silicio no solamente en descargas eléctricas, sino también en procesos de pulverización catódica (sputtering), evaporación en el vacío o en CVD (chemical vapor deposition), sin embargo, todos estos depósitos eran entonces considerados como subproductos, las investigaciones sobre las propiedades del silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) son relativamente recientes en comparación con los hechos sobre los semiconductores amorfos, que florecieron durante las décadas de los cincuenta y sesenta.

El interés en los semiconductores amorfos se centró al principio en los compuestos calcógenos, los cuales son materiales que contienen elementos como el Azufre, Selenio y Telurio, por ejemplo: As_2Se_3 , GeS_2 , As_2Te_3 , los compuestos formados por los calcógenos son vidrios con estructuras similares a los vidrios formados por óxidos pero con brechas de energía más pequeñas, las investigaciones hechas en estos semiconductores amorfos clarificaron las ideas sobre la influencia del desorden en las estructuras no cristalinas y su influencia sobre las propiedades eléctricas. El estudio de los compuestos calcógenos tomó todavía más impulso al desarrollarse las copadoras xerográficas.

Anteriormente las investigaciones se hacían con Silicio Amorfo sin hidrógeno (a-Si), preparado con la técnica de sputtering o por evaporación térmica, en particular ocurre que el Silicio Amorfo obtenido en una pulverización catódica pura no presenta interés alguno en el sentido de que no tiene ninguna propiedad semiconductor, en efecto, las muestras son eléctricamente inertes, con una alta densidad de defectos en su estructura, lo que impide el dopaje, la fotoconductividad y otras características deseables para cualquier semiconductor útil.

Chittick y sus colegas en Inglaterra [59] fueron los primeros en fabricar en 1969 el a-Si:H usando la técnica de depósito por descarga gaseosa. En dicha técnica el gas Silano (SiH_4) es excitado por un plasma, ocasionando que las moléculas del gas se disocien y depositen sobre substratos calientes, actualmente se utiliza básicamente la misma técnica, sólo que los sistemas de depósito se han modernizado. El primer reactor fue inductivo: el cual excitaba el plasma a través de una bobina colocada por fuera de una cámara de cuarzo, la mayoría de los reactores actuales son capacitivos, consistiendo en dos electrodos paralelos colocados dentro de una cámara de acero, pero el mecanismo de depósito no es substancialmente diferente.

Pero el actual interés por este material se despierta en 1975 con los célebres trabajos de Spear y Le Comber [60] de la Universidad de Dundee en Escocia, se constata entonces que el silano descompuesto en un plasma permite obtener una película de un silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) con propiedades similares a las de los semiconductores cristalinos intrínsecos. En los años siguientes su grupo de investigación describió en detalle las propiedades superiores del silicio amorfo obtenido con este método, las investigaciones mostraron que el material tenía una buena respuesta eléctrica con una muy alta movilidad de transportadores de carga, así como una fuerte fotoconductividad, resultado de una muy baja densidad de defectos, un punto importante en el desarrollo del a-Si:H fue cuando se consiguieron compuestos dopados *n* y *p* al agregarse fosfina y diborano al silano obteniéndose un aumento de la conductividad de 10 órdenes de magnitud, se realizan entonces uniones p-n con curvas características $J(V)$ similares a las de los diodos normales [61].

El papel esencial del hidrógeno en el a-Si:H fue develado por el grupo de Paul en Harvard el cual se dedicó a estudiar el silicio y germanio amorfos depositados por sputtering desde la década de los sesenta. Ellos entendieron que la alta densidad de defectos del silicio y germanio amorfos impedían que estos materiales fuesen útiles para las aplicaciones electrónicas e intentaron encontrar métodos para eliminarlos, lográndolo al introducir hidrógeno dentro del sistema de sputtering, ello provocó que el material tuviera alta fotoconductividad y una baja densidad de defectos, el grupo de Harvard demostró que la concentración de hidrógeno atómico en las películas era de alrededor de 10 % al observar su espectro infrarrojo característico, el cual presentaba una frecuencia característica alrededor de los 2000 cm^{-1} para los enlaces de Si-H y de 1800 cm^{-1} para los enlaces de Ge-H, el hidrógeno es el responsable de la supresión de los defectos.

La publicación del descubrimiento de las propiedades de este material por los escoceses obligó en cierta forma a los norteamericanos, hasta entonces sumamente discretos sobre la cuestión, a hacer públicos sus conocimientos y a finales del 1976 en la conferencia de Baton Rouge (EE.UU.), los investigadores Calson y Wronsky de los laboratorios de la firma RCA indicaron que en 1974 construyeron con el silicio amorfo procedente del silano, un fotodiodo Schottky con un rendimiento de conversión energética de 0.2% que ya habían conseguido aumentar hasta un 5.5% [62]. En este momento se despierta un considerable interés sobre las posibilidades de este material, en efecto, si se descarta su rendimiento, este semiconductor reúne todas las condiciones idóneas para un desarrollo de la producción eléctrica fotovoltaica solar, en primer lugar se trata de un material considerablemente resistente y que no degenera con el tiempo, permite la fabricación de diodos en capas finas que es el mejor sistema para cubrir grandes superficies. Existen posibilidades de fabricación industrial a partir de una materia prima, el silicio,

que es el elemento más abundante en la naturaleza después del oxígeno, no faltan incluso opiniones optimistas convencidas que en un próximo futuro será posible elaborar celdas solares con un material en capas finas de coste "nulo", es decir despreciable frente a los demás componentes, sólo falta mejorar, por ahora, el rendimiento.

El silicio amorfo hidrogenado no solamente ha despertado el interés de los investigadores a causa de las posibilidades hasta ahora insospechadas de los materiales amorfos sino también de los industriales, la industria japonesa ha dado el ejemplo considerando que celdas con un rendimiento de un 3% son actualmente comercializables gracias a su bajo coste y a la facilidad de fabricación industrial. aunque fue la RCA quien empezó a desarrollar las celdas solares, la compañía SANYO en Japón fue la primera en comercializarlas. SANYO reconoció incluso que fotoceldas hechas de a-Si:H con muy poca eficiencia podían suministrar energía a calculadoras portátiles; también este material se utiliza ya en tubos vidicón y en fotorreceptores para la xerografía [63].

Los estudios sobre las celdas persiguen dos objetivos esenciales:

1. aumentar el rendimiento de conversión energética,
2. aumentar la superficie de las células.

El progreso alcanzado estos últimos cinco años es espectacular y constituye un buen ejemplo de colaboración entre laboratorios universitarios e industriales (ver Fig. 1.53a)

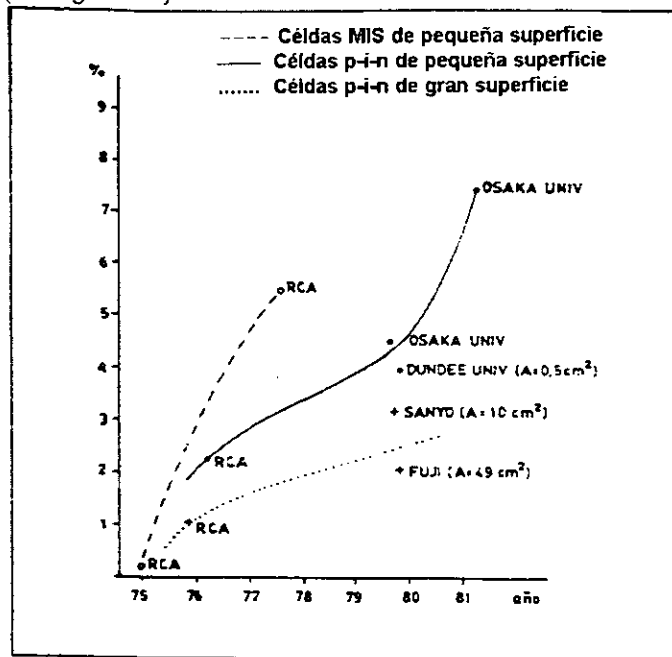


Fig. 1.53a Progresos en los rendimientos de conversión energética fotovoltaica de las principales celdas de a-Si:H desde 1975. El rendimiento se define: $\eta = F J_{sc} V_{oc} / I$, siendo J_{sc} la densidad de corriente cortocircuito, V_{oc} el voltaje circuito abierto, I la potencia que recibe la unidad de superficie de la célula y F el "Fill Factor" que se calcula según la expresión $F = J_m V_m / J_{sc} V_{oc}$. (m indica que la célula trabaja en condiciones máximas de potencia).

Actualmente la variedad de silicio amorfo hidrogenado utilizada y que en realidad es considerada ya perteneciente a una primera generación, ha permitido la elaboración de celdas con un rendimiento en el laboratorio de 7.5%, este rendimiento de conversión es la marca actual y fue obtenida por la universidad de Osaka (Japón) [64]. Los japoneses (Fuji) son los más adelantados en la elaboración de celdas de gran superficie: $A = 49 \text{ cm}^2$, $\eta = 2\%$, (η = eficiencia).

Se hace patente que se está iniciando la comercialización de celdas solares de silicio amorfo hidrogenado, comercialización que sin duda alguna producirá un impacto en la captación fotovoltaica de la energía solar y en el campo de los componentes electrónicos, naturalmente, más interesante sería que las celdas tuviesen un mayor rendimiento de conversión.

No están todos los economistas de acuerdo en la definición del umbral de rendimiento a partir del cual la batalla de la energía fotovoltaica de bajo costo puede considerarse ganada, la mayoría sitúan el mencionado umbral en un valor de 10%, de todas maneras, el material actual, visto su comportamiento absorbivo, no permitirá sobrepasar un 9% de rendimiento, hay que conseguir, por tanto, una segunda generación de silicio amorfo hidrogenado, pero ello implica una inevitable investigación fundamental sobre los procesos de elaboración y sobre las propiedades de los semiconductores amorfos [30].

Basta examinar la curva de la Fig. 1.53b, actualización y complemento de la Fig. 1.53a, para percatarse de los importantes éxitos alcanzados al terminar el año 1984, en el campo de la conversión energética fotovoltaica de celdas de silicio amorfo, esta curva fue presentada por Hamakawa en el 1º Congreso Internacional sobre Ciencia e Ingeniería Fotovoltaica de Kope (Nov. 1984).

A pesar de los grandes progresos realizados en la comprensión y utilización del silicio amorfo, este material aparece todavía con problemas de gran complejidad, la contribución de los enlaces libres, por ejemplo, no ha encontrado hasta el momento una explicación satisfactoria, actualmente se distinguen importantes variedades estructurales amorfas, microcristalinas y policristalinas, así como aleaciones que introducen modificaciones en las propiedades del material; se trata esencialmente de aleaciones del silicio amorfo hidrogenado con carbono, germanio, estaño, fluor o nitrógeno, la aleación de carbono-silicio es un semiconductor con una gran banda prohibida que permite la fabricación de electrodos p+ o n+ muy transparentes, también presenta un gran interés la aleación amorfa germanio-silicio, este material presenta una fuerte absorción en la región roja permitiendo de esta manera una mejor utilización del espectro solar. El dopado del silicio amorfo es una cuestión que ahora se domina mejor a pesar que su aspecto fundamental no está bien comprendido, su reproductividad puede presentar problemas importantes; las impurezas en el material intervienen de una manera muy negativa hasta el punto de no permitir comparación alguna entre materiales elaborados con

los mismos parámetros, pero el campo peor comprendido es el que se refiere a la formación de la misma capa delgada; y ello a pesar de brillantes estudios in situ y durante el crecimiento de la capa, mediante la elipsometría espectroscópica rápida visible y la sonda de Kelvin.

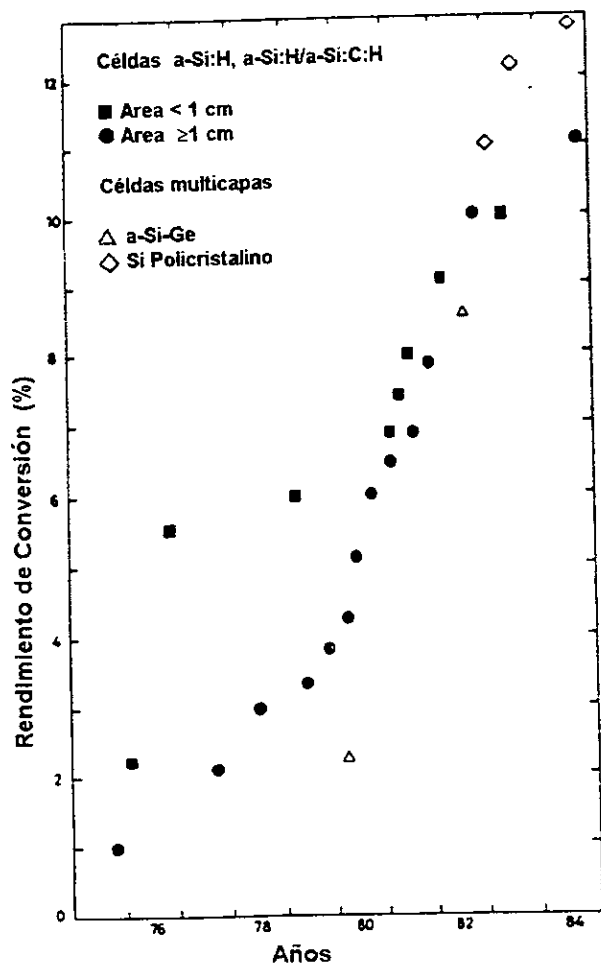


Fig. 1.53b Progresión del rendimiento de conversión de la energía solar fotovoltaica con células de silicio amorfo desde el descubrimiento de las propiedades semiconductoras de este material.

1.14 Clasificación

Es un gran error dar afirmaciones generales sobre los semiconductores amorfos, la tabla 1.3 agrupa los materiales en tres grandes categorías. [28]

1. La categoría número 3 agrupa a las películas dieléctricas, las cuales son aisladores que poseen anchos de banda del orden de 5 eV.
2. El segundo grupo principal contiene vidrios basados en óxidos, los cuales tienen fuertes enlaces iónicos siendo generalmente buenos aisladores. Estos materiales son semiconductores porque poseen iones metálicos en diferentes estados de valencia, la conducción se realiza por transferencia de carga a saltos entre los iones metálicos.

3. El primer grupo involucra a los semiconductores covalentes y dentro del mismo existen varios subgrupos.

- a) En primer lugar se tienen las películas tetraédricas amorfas las cuales pueden prepararse por técnicas químicas o por depósito electrolítico. Las propiedades de estas películas dependen fuertemente de los parámetros de depósito.
- b) Otro subgrupo son los vidrios tetraédricos que conforman una gran familia con una variedad interesante de propiedades, estos poseen brechas ópticas en el rango de 0.5 a 2.3 eV.
- c) El último subgrupo involucra a los compuestos calcógenos.

Tabla 1.3

Clasificación y ejemplos de semiconductores no cristalinos

1. Sólidos covalentes no cristalinos
 - A. Películas Tetrahédricas Amorfas
Si, Ge, SiC, InSb, GaAs, GaSb ...
 - B. Cristales Tetrahédricos $A^{\text{IV}} B^{\text{IV}} C_2^{\text{V}}$
 $\text{CdGe}_2\text{As}_2, \text{CdSi}_2\text{P}_2, \text{ZnSi}_2\text{P}_2, \text{CdSn}_2\text{As}_2 \dots$
 - C. Lone Pair Semiconductors
 - (i) elementos y compuestos
Sb, S, Te, $\text{As}_2\text{Se}_3, \text{As}_2\text{S}_3 \dots$
 - (ii) cross-linked networks
Ge-Sb-Se Si-Ge-As-Te
Ge-As-Se $\text{As}_2\text{Se}_3\text{-As}_2\text{Te}$
As-Se-Te $\text{Ti}_2\text{Se-As}_2\text{Te}_3$
... ...
 - D. Otros
B, As, $(\text{Cu}_{1-x}\text{Au}_x)\text{Te}_2 \dots$

2. Semiconducting Oxide Glasses

$\text{V}_2\text{O}_5\text{-P}_2\text{O}_5$	$\text{MnO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$
$\text{V}_2\text{O}_5\text{-P}_2\text{O}_5\text{-BaO}$	$\text{CoO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$
$\text{V}_2\text{O}_5\text{-GeO}_2\text{-BaO}$	$\text{FeO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$
$\text{V}_2\text{O}_5\text{-PbO-Fe}_2\text{O}_3$	$\text{TiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-BaO}$
...	...

3. Películas Dieléctricas
 $\text{SiO}_2, \text{Al}_2\text{O}_3, \text{ZrO}_2, \text{Ta}_2\text{O}_5, \text{Si}_3\text{N}_4, \text{BN} \dots$

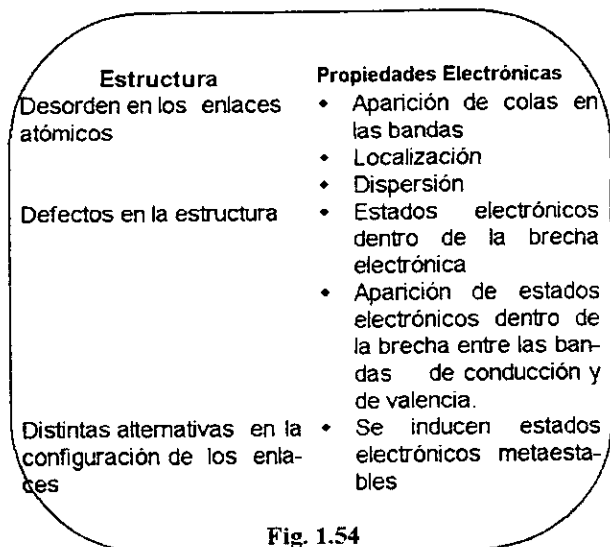
1.15 Conceptos básicos de los semiconductores amorfos

El desorden en su estructura atómica es la principal característica que distingue a los materiales amorfos de los cristalinos, como se mencionó en la sección 1.5, su presencia es de particular importancia en los semiconductores porque la periodicidad de la estructura atómica es central para la teoría de los semiconductores cristalinos, el teorema de Bloch, como se vió, es una consecuencia directa de tal periodicidad y describe el com-

portamiento de los electrones y hoyos con funciones de onda que se extienden a través del espacio con estados cuánticos definidos por el momentum k , la ausencia de orden en la estructura atómica de los semiconductores amorfos necesita de una aproximación teórica distinta.

La descripción de estos materiales se hace no a través de los enlaces químicos vistos en la sección 1.5 y posteriores, sino a través de los enlaces interactuantes de corto alcance.

El desorden en la estructura atómica influye de diversas maneras en las propiedades electrónicas, las cuales se resumen en la Fig. 1.54



La similitud entre los enlaces covalentes del silicio cristalino y el amorfo hace sospechar que existen analogías en la estructura electrónica entre las fases amorfa y cristalina del mismo material y que por tanto tienen anchos de banda comparables, el desorden se hace patente por las desviaciones tanto en la longitud como en los ángulos de los enlaces, así como en el ensanchamiento de la distribución de los estados electrónicos ocasionando la aparición de fenómenos especiales como la localización de los electrones y huecos así como una fuerte dispersión de los portadores de carga.

A los defectos en la estructura atómica como los enlaces rotos, les corresponden estados localizados dentro del ancho de banda, aparecen también nuevos fenómenos ocasionados por los enlaces químicos en lugar de por la simetría traslacional de largo alcance; la posibilidad de una configuración alterna en la forma de los enlaces atómicos ocasiona una fuerte interacción entre los estados electrónicos y los estructurales provocando fenómenos de metaestabilidad.

El siguiente repaso de las propiedades de los semiconductores amorfos provee la introducción hacia discusiones más detalladas.

1.15.1 Estructura Atómica

Hablando estrictamente los semiconductores amorfos no están completamente desordenados, como puede verse en las figs. 1.12 y 1.13, los enlaces covalentes entre los átomos de silicio son los mismos que se presentan en el silicio cristalino, con el mismo número de vecinos, el mismo promedio en la longitud y ángulos de los enlaces. El desorden se representa por una función de distribución de átomos apareados, que representa la probabilidad de encontrar un átomo a una distancia R de otro. Las funciones de distribución en las fases cristalina, amorfa (o líquida) y gaseosa se ilustran en la Fig. 1.55 [29], (ver también Figs. 1.12 y 1.13).

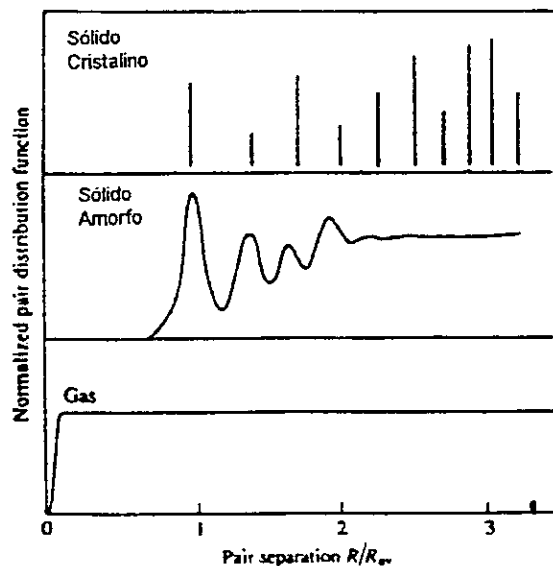


Fig. 1.55 Esquema de la función de distribución atómica apareada para sólidos cristalinos, amorfos y para un gas. La escala se tomó de la separación promedio de los átomos más cercanos R_0 , mostrando los diferentes grados de orden estructural.

Las posiciones relativas de los átomos en los gases muy enrarecidos son aleatorias (excepto para casos muy comprimidos, como se ve en la Fig. 1.12), mientras que en un cristal perfecto los átomos están completamente ordenados, el material amorfo tiene el mismo orden de corto alcance, las propiedades de los semiconductores amorfos son similares a los de sus contrapartes cristalinas porque comparten el mismo orden local.

El orden de corto alcance y el desorden de largo alcance conforman el modelo de red aleatoria continua propuesto por Zachariasen (1932) para describir vidrios como la sílice. La estructura periódica cristalina es reemplazada por una red aleatoria en la cual cada átomo tiene un número específico de enlaces con sus vecinos inmediatos (coordinación). La Fig. 1.56 es un esquema bidimensional que contiene átomos de diferente coordinación (4, 3 y 1). La red aleatoria tiene la propiedad de incorporar fácilmente átomos de diferente coordinación,

incluso en concentraciones pequeñas, esto establece un marcado contraste con la red cristalina, en la cual, las impurezas son generalmente obligadas a tener la misma coordinación que la red huésped debido al orden de largo alcance en la estructura.

Un cristal real contiene defectos como vacancias, espacios vacíos y dislocaciones, la red aleatoria continua contiene también defectos, pero en ella la definición de "defecto" debe modificarse, así los defectos elementales en los semiconductores amorfos son los defectos de coordinación, i.e. cuando un átomo tiene muchos o muy pocos enlaces.

Como se ha indicado, los depósitos micrométricos del silicio puro no presentan interés alguno, el resultado de este desorden es catastrófico puesto que el material presenta unos $10^{20}/\text{cm}^2$ defectos o enlaces no saturados, (ver Fig. 1.76 y Fig. 1.77) lo que significa otros tantos estados en la banda prohibida, y sin banda prohibida no pueden existir propiedades semiconductoras.

Se ha constatado que el a-Si:H presenta propiedades semiconductoras particularmente interesantes, la explicación radica en la presencia del hidrógeno que es capaz de pasivar los enlaces sueltos gracias a la formación de enlaces covalentes con los defectos de la red cristalina, hasta el punto de restaurar la banda prohibida, la importancia del hidrógeno está perfectamente demostrada: una pulverización catódica en presencia de hidrógeno puede dar lugar a un material semiconductor, mientras que sin hidrógeno la película obtenida es inerte, por consiguiente, el material interesante no es el silicio amorfo puro sino el **silicio amorfo hidrogenado**.

En general, la proporción de hidrógeno atómico que se encuentra en el material fabricado a partir del silano oscila entre un 6 y un 30%, pero en realidad basta un 5 o 10% para disminuir considerablemente el número de defectos, saturando los enlaces sueltos y fortaleciendo los enlaces débiles, (ver Fig. 1.76 y Fig. 1.77).

En las Figs. 1.57a y 1.57b se ilustran varios defectos en las estructuras amorfas y cristalinas.

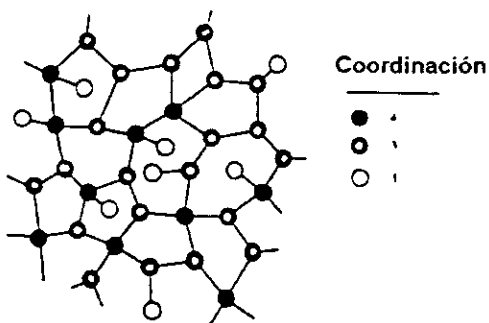


Fig. 1.56 Ejemplo de una red continua aleatoria conteniendo átomos con diferentes números de coordinaciones en sus enlaces.

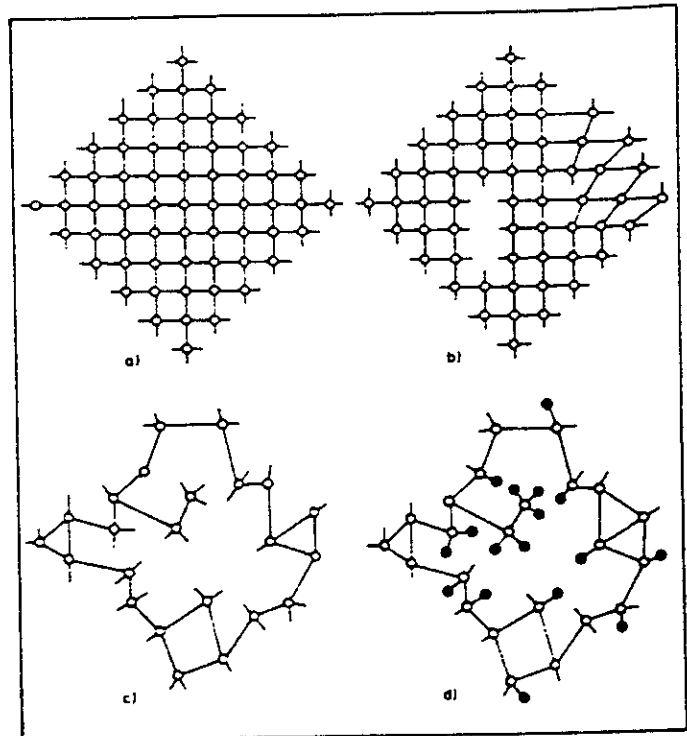


Fig.1.57a Esquemas de las estructuras atómicas de
a) el silicio monocristalino sin defectos
b) silicio monocristalino con defectos
c) el silicio amorfo con defectos
d) el silicio amorfo hidrogenado. El hidrógeno satura cierta cantidad de enlaces sueltos.

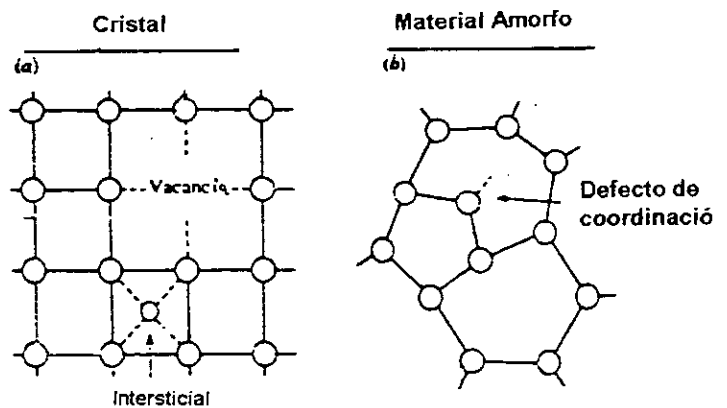


Fig. 1.57b Ilustración donde se contrastan los tipos de defectos en (a) redes cristalinas (b) redes amorfas.

1.15.2 Estructura Electrónica

Una de las propiedades fundamentales de un semiconductor o de un aislante es la presencia de brechas que separan las bandas de valencia ocupadas de los estados desocupados en la banda de conducción. De acuerdo con la teoría del electrón libre, la brecha entre ambas bandas es una consecuencia de la periodicidad

en la red cristalina, en el pasado había grandes debates sobre las causas que originaban que los semiconductores amorfos tuviesen sus brechas entre las bandas de forma similar a sus contrapartes cristalinas. Se supo que las bandas son mayormente influenciadas por el orden de corto alcance el cual es el mismo para el silicio amorfo y cristalino, por lo que la ausencia de periodicidad es una perturbación menor.

Estos resultados fueron esclarecidos mejor por **Wearie y Thorpe** quienes describieron el enlace por un hamiltoniano de enlace fuerte de la forma:

$$H = V_1 \sum_{j \neq i} |\Phi_{ij}\rangle \langle \Phi_{ij}| + V_2 \sum_{i \neq j} |\Phi_{ij}\rangle \langle \Phi_{ij}| \quad (1.35)$$

Las funciones de onda, Φ son los orbitales sp^3 híbridos del enlace tetraédrico del silicio, el primer término en la Ec. (1.35) es una suma sobre las interacciones para las cuales las funciones de onda Φ_{ij} pertenecen al mismo átomo y el segundo término suma las parejas de orbitales que pertenecen al mismo enlace (ver Fig. 1.58). [30]

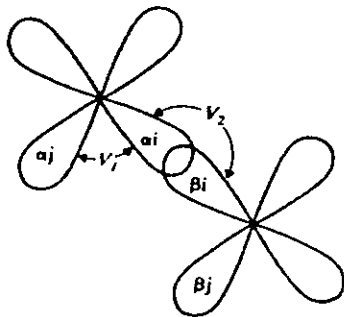


Fig. 1.58 Funciones básicas e interacciones en el Hamiltoniano de Wearie - Thorpe.

Este hamiltoniano describe la información de los enlaces de corto alcance, pero no contiene información sobre el orden de largo alcance y se aplica de igual manera tanto al silicio amorfo como al cristalino. Wearie y Thorpe mostraron que hay niveles en la intensidad de la interacción V_1/V_2 para la cual las bandas de conducción y de valencia están separados por una brecha sin tener en cuenta la estructura de largo alcance.

Las tres principales características de la estructura de los semiconductores amorfos son:

- El orden de corto alcance
- El desorden de largo alcance
- Los defectos de coordinación

La preservación del orden de corto alcance implica un comportamiento en la estructura electrónica global

de un material amorfo similar a la de su contraparte cristalino, los límites estrictos entre las bandas de conducción y de valencia de un cristal son reemplazados por un ensanchamiento en forma de cola de los estados que se extienden dentro de la brecha prohibida, dichas colas se originan en las desviaciones de las longitudes de los enlaces y de los ángulos entre los átomos, derivados del desorden estructural a largo alcance. La prolongación (o extensión) de las bandas de conducción y de valencia es muy importante a pesar de su baja concentración, porque el transporte electrónico tiene lugar en el límite de cada banda, los estados electrónicos localizados dentro de la brecha entre las bandas de conducción y de valencia se originan de desviaciones de la red ideal, como los defectos de coordinación, la estructura electrónica de los semiconductores amorfos (ver Fig. 1.59) comprende:

1. Las bandas de conducción y de valencia
2. Las prolongaciones de éstas
3. Los estados anómalos dentro de la brecha prohibida

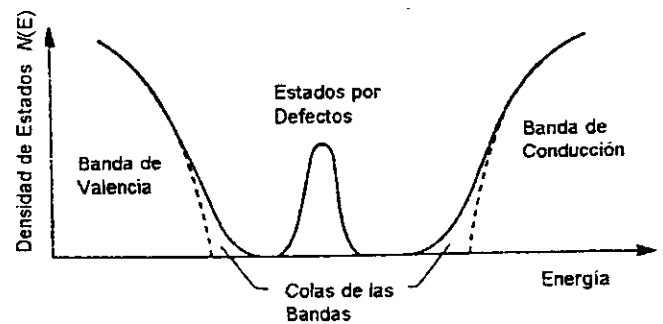


Fig. 1.59 Diagrama de distribución de la densidad de estados para un semiconductor amorfo, en donde se muestra la bandas, las colas de las bandas y los estados defectuosos localizados localizados en la brecha entre las bandas. Las líneas punteadas representan los estados para un cristal.

1.15.3 Propiedades Electrónicas

Las funciones de onda de los estados electrónicos son soluciones de la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi + V(r) \Phi = E \Phi \quad (1.36)$$

donde E es la energía del electrón y $V(r)$ es la energía potencial que se deriva de la estructura atómica, el potencial periódico de los cristales, como se ha visto, son las funciones de onda de Bloch:

$$\Phi(\vec{r}) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})} U_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.37)$$

donde $U_k(r)$ es la periodicidad de la red, hay una relación de fase constante para la función de onda en diferentes lugares de la red, la función de onda tiene un momento bien definido, k , que se extiende a través de todo el cristal, las bandas de energía se describen por relaciones de dispersión de energía-momento (E, k) las cuales determinan la masa efectiva, las excitaciones electrónicas etc., como se mencionó anteriormente en la sección 1.8.

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger no se aplican a los semiconductores amorfos porque el potencial $V(r)$ no es periódico, un potencial de desorden débil origina una perturbación pequeña de la función de onda y tiene el efecto de dispersar el electrón desde un estado de Bloch a otro, el efecto del desorden en un semiconductor amorfo es suficientemente fuerte para causar dispersiones frecuentes sobre la función de onda y obligarla a perder la coherencia de fase sobre una distancia de uno a dos espacios interatómicos.

La Fig. 1.60 ilustra la función de onda de los estados electrónicos extendidos en un semiconductor cristalino y amorfo, mostrando el cambio tan rápido de fase inducido por el desorden.

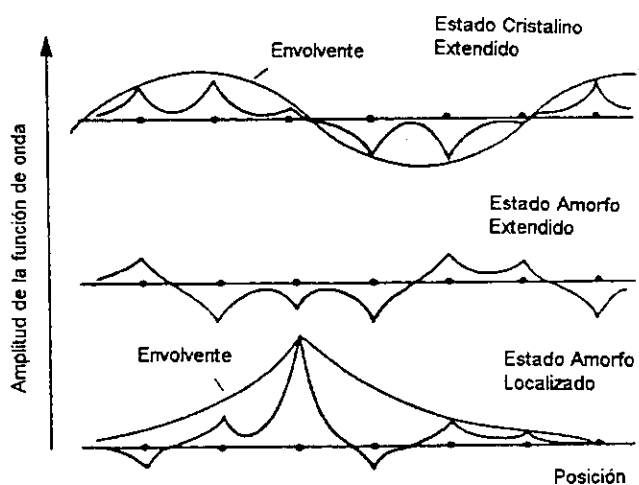


Fig. 1.60 Ilustración de las funciones de onda para los estados extendidos y localizados en un material amorfo comparados con los estados de un cristal.

Una dispersión tan fuerte causa una gran incertidumbre en el momentum del electrón, por el principio de incertidumbre se establece que: $\Delta k = \hbar/\Delta x \approx \hbar/a_0 \approx k$ donde Δx es la longitud de dispersión y a_0 es la distancia interatómica, la incertidumbre en k es similar a la magnitud de k , por lo que el momento no es un número cuántico apropiado ya que no se conserva en las transiciones electrónicas.

La pérdida en la conservación del momento es uno de los resultados más importantes del desorden cambiando mucho las descripciones básicas de los estados

electrónicos, algunas consecuencias de la pérdida de la conservación del momentum son:

1. Las bandas de energía no se describen más por las relaciones de dispersión entre la energía y el momento; en su lugar se considera una función de distribución de densidad de estados $N(E)$, ilustrada en la Fig. 1.59. Las masas efectivas de los electrones y huecos deben redefinirse también.
2. Las reglas de conservación del momento no se aplican a las transiciones ópticas de los semiconductores amorfos, en consecuencia, la distinción entre transiciones directas e indirectas entre las bandas de conducción y de valencia (vistas en la sección 1.11) se pierde, en su lugar, las transiciones ocurren entre estados que se traslapan, esta distinción se hace más patente en el silicio, el cual tiene una brecha entre las bandas indirecta en la fase cristalina pero no en su fase amorfa.
3. El desorden reduce la movilidad de los portadores de carga debido a la frecuente dispersión que sufren, lo que origina un profundo efecto de localización de la función de onda.

1.15.4 Localización, Borde de Movilidad y Conducción

Un incremento en el potencial de desorden ocasiona primero una fuerte dispersión electrónica y eventualmente un confinamiento de los electrones, en el cual su función de onda está restringida a un volumen pequeño del material en lugar de estar extendida, la forma de la función de onda localizada se muestra en la Fig. 1.60, la teoría de la localización se basa en el modelo ilustrado en la Fig. 1.60 (Anderson 1958).

Un cristal se describe, como se ha visto, en la sección 1.8, por un arreglo de potenciales atómicos idénticos, al cual le corresponde una banda de estados electrónicos confinados a una brecha de ancho B .

El estado amorfo se representa por el mismo arreglo solo que se introduce un potencial aleatorio con una amplitud promedio de V_0 . Anderson mostró que cuando V_0/B excede un valor crítico, la probabilidad de que un electrón escape a algún otro lugar es prácticamente cero, el valor crítico de la razón V_0/B para que exista una localización completa es aproximadamente tres.

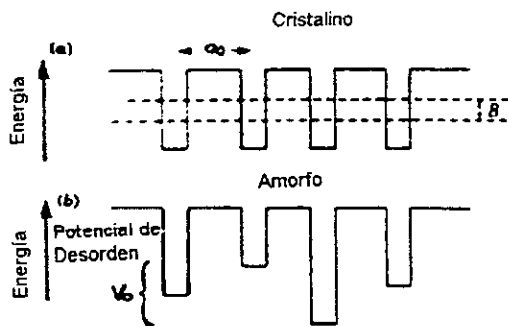


Fig. 1.61 Modelo de Anderson de pozos de potencial para: (a) red cristalina (b) red amorfa. V_0 es el potencial de desorden.

El ancho B entre las bandas es del orden de 5 eV y si existe una gran profundidad en el potencial de desorden V_0 se crea una gran localización de todos los estados electrónicos. Las primeras investigaciones sobre los semiconductores amorfos muestran que la condición de Anderson no se cumple en ellos, los semiconductores amorfos tienen un potencial de desorden V_0 pequeño debido a que el orden de corto alcance en la estructura restringe las distorsiones de los enlaces, sin embargo, aun cuando el desorden de los semiconductores amorfos es insuficiente para alcanzar el criterio de Anderson, algunos de los estados si están localizados, mostrándose en los bordes de las bandas. En el centro de la banda coexisten estados extendidos donde hay una fuerte dispersión mientras que en los bordes de las bandas los estados están localizados.

Los estados extendidos y localizados están separados por un borde de movilidad localizado en la energía E_c , la cual deriva su nombre porque la temperatura de 0° K, únicamente los electrones con energías mayores que E_c se mueven y contribuyen a la conducción. Esta es la esencia del modelo estándar propuesto para los semiconductores amorfos por Mott.

La estructura electrónica se ilustra en la Fig. 1.62

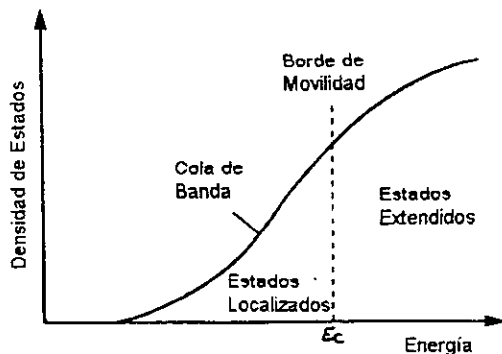


Fig. 1.62 Distribución de densidad de estados cerca del borde de la banda de un semiconductor amorfo, mostrando los estados localizados y extendidos separados por el borde de movilidad.

la energía del borde de movilidad dentro de la banda depende del grado de desorden, teniendo un valor típico de 0.1 eV a 0.5 eV desde el borde de la banda en todos los semiconductores amorfos.

Una característica adicional entre los estados extendidos y localizados es que el desorden también influye la movilidad de los electrones y huecos por encima de los bordes de movilidad, la movilidad de los portadores de carga se reduce por dispersión, la cual está en razón directa con el grado de desorden, bajo condiciones de dispersión débil, la movilidad esta dada por:

$$\mu = \frac{e\tau}{m} = \frac{eL}{m v_c} \quad (1.38)$$

donde τ es el tiempo de dispersión, L el camino libre medio y v_c es la velocidad térmica del electrón.

Hasta ahora ningún semiconductor amorfo ha sido fabricado con energía de Fermi para los estados localizados más allá del borde de movilidad, la energía de Fermi para el a-Si:H se localiza dentro de las colas de las bandas pero nunca se acerca a menos de 0.1 eV del borde de movilidad, no existe conducción metálica, en su lugar existen otros mecanismos de conducción, ilustrados en la Fig. 1.63.

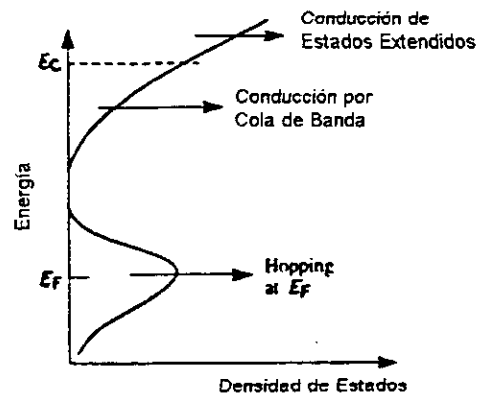


Fig. 1.63 Ilustración de los tres principales mecanismos de conducción esperados en un semiconductor amorfo.

Conducción por medio de los estados localizados

Dicha conducción se realiza por activación térmica de los portadores de carga desde E_f hasta una energía del borde de movilidad y obedece la relación:

$$\sigma_{ext} = \sigma_{oe} e^{-(E_c - E_f)/kT}$$

donde σ_{oe} representa la conductividad promedio por encima del borde de movilidad (cercano a $100 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$). La energía de activación es la separación entre el borde de movilidad y la energía de Fermi, siendo su valor cercano a 1 eV para el a-Si:H no dopado a 0.1 para el a-Si:H tipo n.

● Conducción en las colas de las bandas de valencia y conducción

Aunque los portadores de carga no conducen en los estados localizados a una temperatura de cero grados, la conducción por saltos entre estados a temperaturas elevadas es posible. La conducción por saltos en las prolongaciones de las bandas está dada por:

$$\sigma_{cola} = \sigma_{ot} e^{-(E_{CT} - E_F)/KT}$$

donde E_{CT} es la energía promedio de la prolongación de las bandas. El factor σ_{ot} depende de la densidad de estados y del solapamiento de la función de onda. Dicho factor es menor que σ_{oe} . Por otro lado, E_{CT} está más cercano a E_F que lo que está E_C , por lo que el término exponencial compensa el factor pequeño, particularmente a bajas temperaturas.

● Conducción por tunelaje (saltos) a la energía de Fermi

La conducción a la energía de Fermi ocurre cuando la densidad de estados es grande y permite que exista un tunelaje significativo de electrones, este tipo de conducción depende débilmente de la temperatura por lo que este mecanismo tiende a dominar a temperaturas extremadamente bajas. Los estados localizados en E_F se originan normalmente de los defectos por lo que la conductividad varía grandemente con la densidad de defectos. Por ejemplo, la adición del hidrógeno al silicio amorfo reduce la densidad de defectos y casi suprime completamente la conducción por tunelaje a la energía de Fermi.

1.16 Modelos de Bandas

Basado en la teoría de Anderson, Mott argumentó que las fluctuaciones espaciales en el potencial causadas por el desorden en los materiales amorfos podrían originar la formación de estados localizados, los cuales no ocuparían todas las diferentes energías en la banda, pero formarían colas por encima y por debajo de la banda normal. Mott postuló más adelante que debería existir una frontera muy pronunciada entre las energías de los estados extendidos y localizados. Los estados se llaman localizados en el sentido de que un electrón localizado en una región no se difundirá a una temperatura de cero absoluto a otras regiones.

Muchos han sido los modelos propuestos para explicar la estructura de bandas de los semiconductores amorfos, todos ellos utilizan el concepto de estados localizados en las colas de las bandas, variando las opiniones sobre la extensión de las colas.

1.16.1 El modelo de Cohen - Fritzsche - Ovshinsky

El modelo CFO mostrado en la Fig. 1.64a, asume que los estados en las colas se extienden sobre toda la brecha de movilidad sin una estructura definida, este decrecimiento gradual de los estados localizados des-

truye los límites bien definidos de las bandas de conducción y de valencia, el modelo CFO fue desarrollado ex professo para los vidrios fabricados con elementos calcógenos y últimamente se ha propuesto un modelo similar para explicar la fotoconductividad en el silicio amorfo.

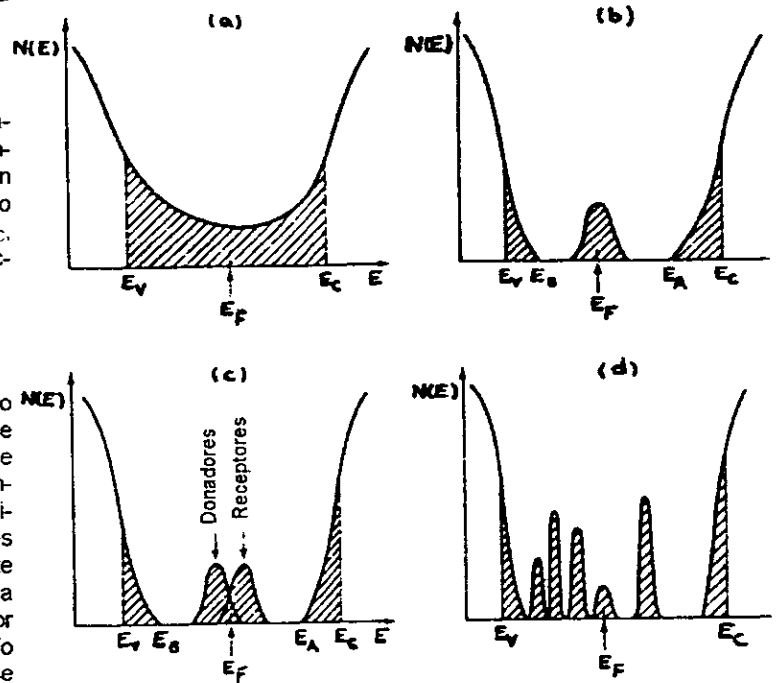


Fig. 1.64 Esquemas de la densidad de estados para los semiconductores. (a) Modelo de Cohen - Fritzsche - Ovshinsky, (b) Modelo de Davis y Mott mostrando una banda de los niveles compensados cerca de la mitad de la brecha, (c) Modelo modificado de Davis - Mott, (d) vidrio "real" con estados defectuosos.

1.16.2 El modelo Davis - Mott

De acuerdo con Davis y Mott las colas de los estados localizados deberían ser algo más angostas y extenderse algunos décimos de electrón . volts dentro de la brecha prohibida, ellos propusieron además la existencia de una banda cerca del centro de la brecha, originada por los defectos de la red, la Fig. 1.64b muestra el modelo de Davis - Mott; donde E_C y E_V representan las energías que separan los estados localizados y extendidos; la banda central debe dividirse en una banda de donadores y receptores en la cual debe situarse la energía de Fermi (Fig. 1.64c). Mott sugirió que en la transición entre los estados extendidos y localizados la movilidad decae en varios órdenes de magnitud, produciéndose un borde de movilidad; en efecto, el concepto de borde de movilidad implica que la movilidad es cero a una temperatura de $T = 0^\circ K$, el intervalo entre las energías E_C y E_V se define como la brecha de movili-

dad. Cohen sugirió una ligera modificación a este modelo; él propuso que la caída de movilidad debería ser continua y el transporte efectuarse como un movimiento Browniano en el cual los portadores de carga estarían bajo la influencia de una dispersión continua.

1.17 Absorción

En esta sección se discute la forma que adopta el borde de absorción óptica en ausencia de campos eléctricos y de los efectos de excitones.

Para materiales que presentan un borde exponencial los resultados serán válidos para energías fotónicas por encima de la cola exponencial, valiéndose de las siguientes hipótesis: [28]

- Los elementos que pertenecen a la matriz para transiciones electrónicas son constantes sobre el intervalo de energías fotónicas de interés.
- La regla para la conservación del número de onda k se invalida. Esta hipótesis tiene su razón de ser en que, cerca del borde de las bandas de conducción y de valencia, por lo menos $\Delta k \sim k$ por lo que como se mencionó antes, k no es un buen parámetro cuántico. En un diagrama $(E - k)$ las transiciones electrónicas no serían verticales, sin embargo, no es necesario recurrir a la absorción de fonones o a procesos de emisión para lograr que el momentum se conserve, sino que toda la energía requerida es provista por los fotones incidentes, tales transiciones son conocidas como no directas para distinguirlas de las directas.

La conductividad a una frecuencia bajo estas condiciones es:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} \int \frac{N(E)N(E+\hbar\omega)|D|^2}{\hbar\omega} dE \quad (1.39)$$

donde Ω es el volumen del espécimen y D la matriz de los elementos asociados con las transiciones los cuales son independientes de la energía.

El correspondiente coeficiente de absorción es:

$$\alpha = \frac{4\pi}{nc} \sigma(\omega) \quad (1.40)$$

donde n es el índice de refracción. Sustituyendo (1.39) en (1.40) obtenemos para las transiciones entre bandas (ignorando la variación de n con $\hbar\omega$).

$$\alpha(\omega) = \frac{8\pi^4 e^2 \hbar a}{ncm^2} \int \frac{N_V(E)N_C(E+\hbar\omega)}{\hbar\omega} dE \quad (1.41)$$

donde la integración se realiza sobre todos los pares de estados entre las bandas de valencia y conducción separados por una energía $\hbar\omega$.

Representando la densidad de estados en el fondo de la banda de conducción por $N_C(E) = \text{const} (E - E_A)^S$ y en la cima de la banda de valencia por $N_V(E) = \text{const} (E_B - E)^P$, y haciendo la sustitución:

$$y = \frac{E_A - \hbar\omega - E}{E_A - \hbar\omega - E_B}$$

y denotando la brecha de energía por $E_0 = E_A - E_B$ obtenemos:

$$\alpha(\omega) = \text{const} \left\{ \int_0^1 (1-y)^P y^S dy \right\} \frac{(\hbar\omega - E_0)^{P+S+1}}{\hbar\omega} \quad (1.42)$$

la cantidad entre llaves es una conocida integral igual a:

$$\frac{\Gamma(S+1)\Gamma(P+1)}{\Gamma(S+P+2)}$$

Sin el conocimiento de la forma de variación de $N(E)$ en el límite de las bandas sería inútil hacer más cálculos. Suponiendo que las bandas varían parabólicamente (Tauc 1970a) $s = p = \frac{1}{2}$ simplificándose la ecuación (1.42) a:

$$\alpha(\omega) = \frac{\text{const}(\hbar\omega - E_g)^2}{\hbar\omega} \quad (1.43)$$

Muchos materiales amorfos obedecen esta relación (como es el caso del Silicio Amorfo Hidrogenado) por encima de la variación exponencial de las colas. En la Fig. 1.65 se dan algunos ejemplos:

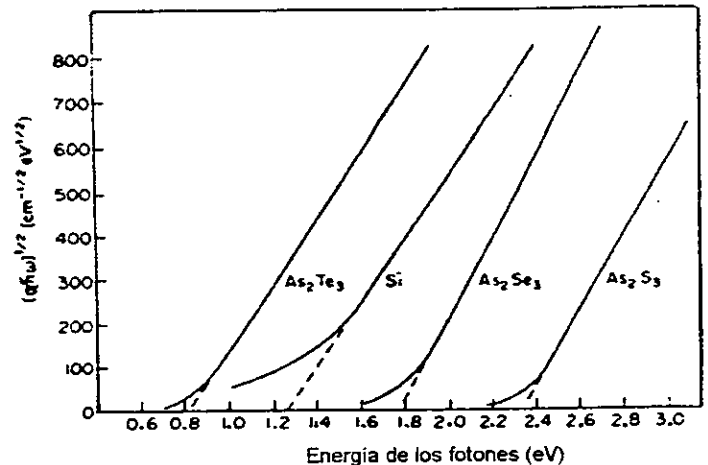


Fig. 1.65 Ejemplos de los bordes de absorción cuya dependencia funcional de la energía de los fotones esta dada por: $\alpha\hbar\omega = B(\hbar\omega - E_g)^2$.

la constante E_g define la brecha. El resultado de esta discusión es que la absorción óptica en los semiconductores amorfos puede separarse en tres regiones mostradas esquemáticamente en la Fig. 1.66

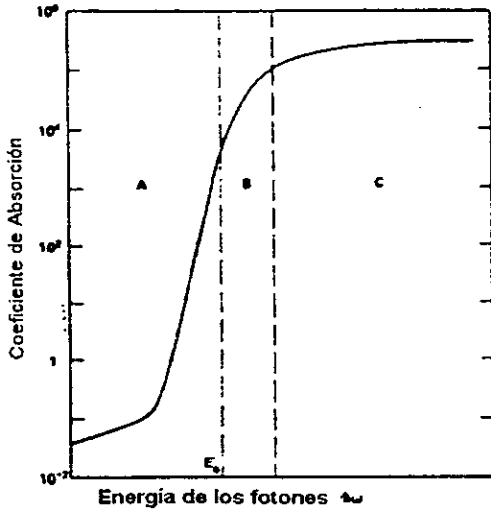


Fig. 1.66 Representación de los espectros de absorción de los semiconductores amorfos.

Las regiones B y C se crean por las transiciones interatómicas del sistema, perturbado hasta cierto punto por los defectos en la red, mientras que la región A se debe a las transiciones debidas a los estados defectuosos directamente. Para energías fotónicas por debajo de E_g encontramos una zona de absorción exponencial, la zona B, esta zona se conoce como la región de Urbach y se atribuye a la existencia de una frontera de absorción debida a los excitones, la cual se modifica por campos internos con intensidades del orden de 5×10^5 V/cm. La región C es muy sensible a la estructura y aparentemente está asociada con la absorción, donde se involucran estados localizados dentro de la brecha óptica.

En las Figs. 1.66 y 1.67 puede verse que todos los materiales exhiben una curvatura en la región de absorción óptica (región A) para $\alpha \leq 1 \text{ cm}^{-1}$, una región exponencial (región B) para $1 \text{ cm}^{-1} \leq \alpha \leq 10^3 \text{ cm}^{-1}$ y una región que varía muy lentamente (región C) para $\alpha \geq 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

En las Figs. 1.68a y 1.68b puede observarse la variación del coeficiente de absorción en función de la longitud de onda del a-Si:H y compararse su comportamiento en relación con otros semiconductores, mostrando la existencia de un umbral de absorción. La mayor parte de la radiación solar de longitud de onda inferior a $0.7 \mu\text{m}$ (700 nm) es absorbida por una capa de una micra en el a-Si:H.

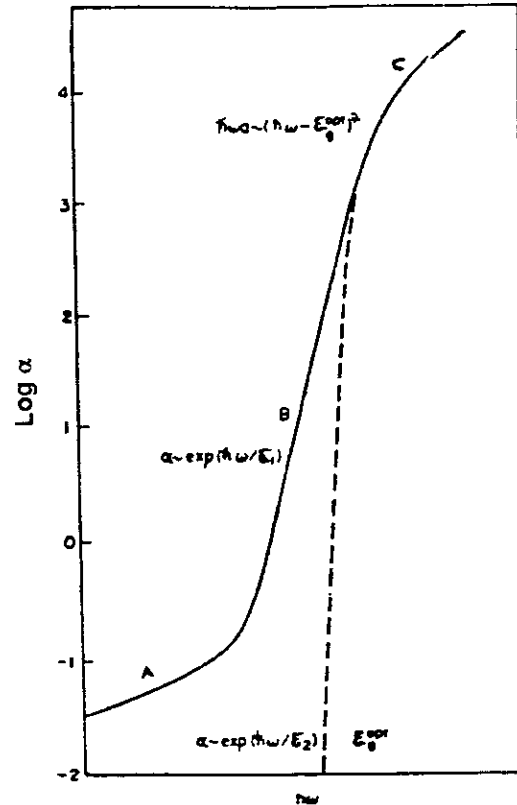


Fig. 1.67 Constante de absorción α en el borde de absorción. A = absorciones entre bandas con $E_g^{\text{opt}} = E_g$, la brecha óptica. B = absorción exponencial. C = La estructura y composición dependen de la región de absorción.

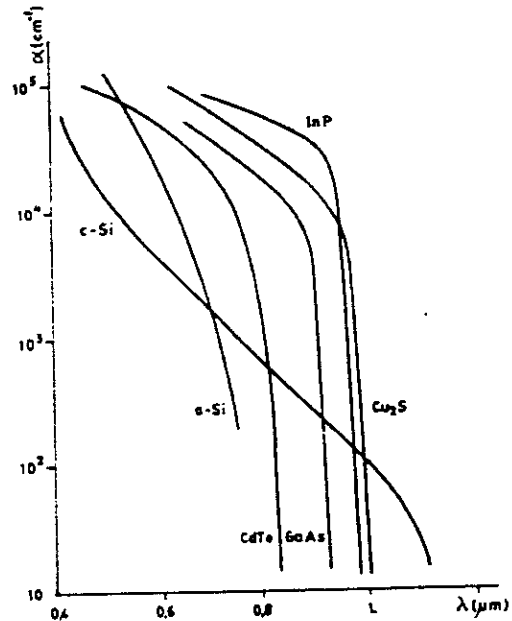


Fig. 1.68a El coeficiente de absorción α vs la longitud de onda λ del silicio amorfo (a-Si) junto con el del silicio monocristalino (c-Si) y de otros semiconductores de interés para las celdas solares.

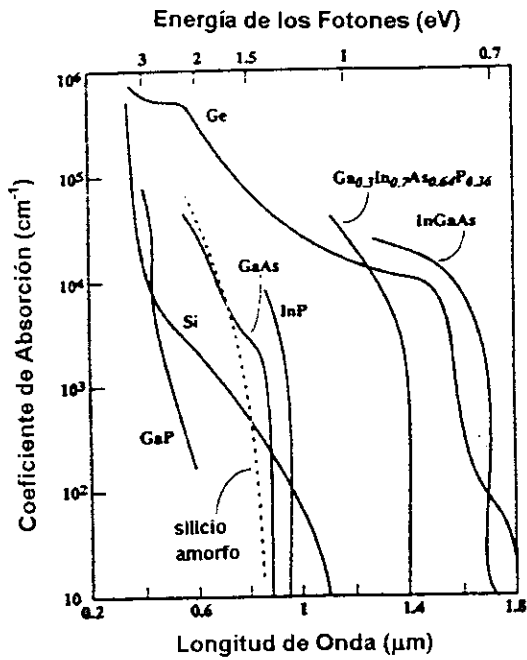


Fig. 1.68b Coeficiente de absorción α para varios semiconductores directos e indirectos. Para los semiconductores directos, el coeficiente de absorción es muy grande una vez que la energía de los fotones excede el ancho de banda. Para los semiconductores indirectos el coeficiente de absorción se incrementa mucho más gradualmente. Una vez que la energía de los fotones rebasa la brecha directa, el coeficiente de absorción se incrementa rápidamente.



Fig. 1.69a Modelo de la estructura del a-Si:H

1.18 Modelos de Enlaces

Los modelos que muestran la estructura del a-Si:H han sido propuestos basados en los estudios hechos sobre la cantidad de hidrógeno de las muestras, análisis infrarrojos y de resonancia magnética nuclear.

Un buen ejemplo es el modelo propuesto por Shanks et al. (1980) mostrado en la Fig. 1.69a, en él se muestran los enlaces Si - Si con longitud constante y ángulos entre ellos variables, su estructura exhibe grupos de átomos de hidrógeno consistentes con las estructuras mostradas en la Fig. 1.69b, en general, las características de este modelo son consistentes con los espectros infrarrojos, el modelo en la Fig. 1.69a contiene alrededor de 20% de H, cabe señalar que conforme la concentración de hidrógeno se incrementa, diferentes modelos en la estructura del silicio se observan; los análisis infrarrojos revelan que las películas que contienen altas concentraciones de hidrógeno poseen extensas cadenas de $(SiH_2)_n$, no presentes en la Fig. 1.69a.

Formas de los enlaces Si - H

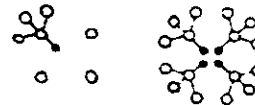


Fig. 1.69b Representación de dos enlaces de Si - H en películas de a-Si:H, en fases distribuidas o en conglomerado. \circ Silicio; \bullet Hidrógeno.

En el a-Si:H real, los estudios muestran que existen importantes inhomogeneidades estructurales, incluso en las muestras del más alto grado de pureza. En el a-Si y en el a-Si:H de baja calidad es común que se presenten espacios vacíos de aproximadamente 10 Å en la estructura atómica.

Los estudios de resonancia magnética nuclear (NMR) muestran que existen dos tipos de inhomogeneidades, en las cuales, los átomos de H interactúan de dos formas con el medio ambiente:

1. Como racimos monohidrados o en racimos múltiples SiH_3 , $(SiH_2)_n$
2. Distribuidos aleatoriamente en monohidrados no interactuantes

Es interesante señalar que la línea ancha observada con NMR debida a los conglomerados de hidrógenos, persisten incluso cuando los rayos X y la dispersión de

neutrones no muestran evidencia de microestructura, la caracterización de la estructura está progresando, aunque se está lejos de completarla; la teoría debe considerar la posible influencia de los vacíos interatómicos, los cuales permiten la adsorción de H; y en las regiones donde existe una gran conexión interatómica se debe incrementar la flexibilidad de la red y tener una influencia importante en las propiedades de transporte. La imagen del a-Si:H ideal como una red aleatoria continua (CRN), esencialmente homogénea es apropiada para modelar la estructura, a la cual pueden agregarse defectos locales como enlaces colgantes o variaciones en los ángulos de los enlaces, aparte de regiones vacías, zonas heterogéneas o regiones con orden cristalino como en la Fig. 1.70

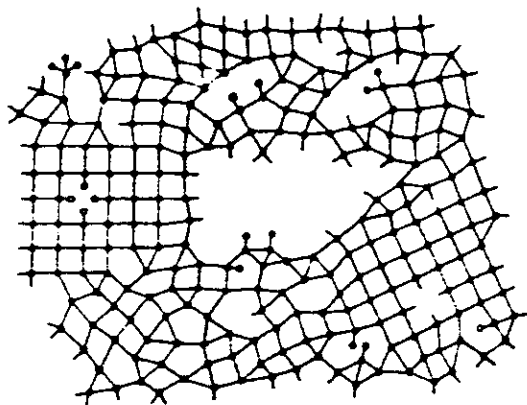


Fig. 1.70 Figura bidimensional de una red aleatoria, donde se incorporan dos regiones microcristalinas, una región vacía, varios enlaces colgantes y enlaces de Si - H en varias configuraciones.

Pero el principal método para determinar la estructura de estos semiconductores son los rayos X o la difracción de electrones, de un análisis de la distribución angular de la intensidad dispersada se puede derivar una función de distribución radial (RDF, por sus siglas en inglés) la cual puede ser comparada con los métodos estructurales creados a mano o por una computadora. Esta función es particularmente útil para describir la estructura de los materiales no cristalinos en cortas distancias (2 - 5 Å). La RDF, $J(r)$, se define como el número de átomos que se encuentran a una distancia r y $r + dr$ del centro de un átomo arbitrario tomado como origen. Esto se puede escribir como:

$$J(r) = 4\pi r^2 \rho(r) \quad (1.44)$$

donde la función de densidad $\rho(r)$, es una función pareada de correlación, lo que significa que es igual a cero para valores de r menores que el promedio de la menor separación interatómica r_1 (donde por definición no puede haber una correlación átomo - átomo) y es igual al valor promedio de la densidad, ρ^0 , para valores muy grandes de r , donde el material se vuelve homogé-

neo. Entre estos dos límites, $\rho(r)$ para un sólido amorfo muestra un comportamiento oscilatorio con máximos en la función de probabilidad, los cuales representan el promedio en la separación interatómica (ver Fig. 1.71)

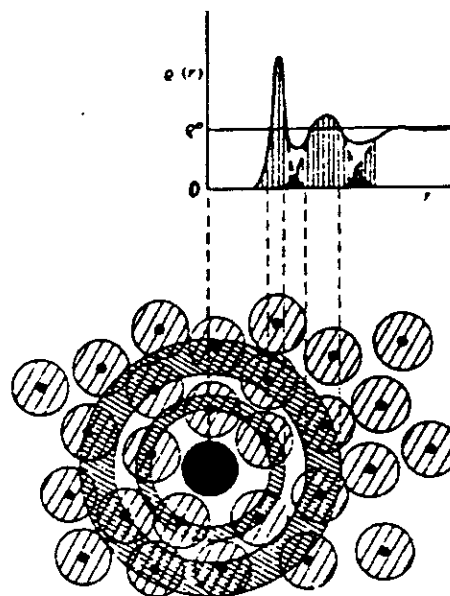


Fig. 1.71 Ilustración del origen estructural de ciertos rasgos de la función de densidad $\rho(r)$ para un sólido amorfo.

Análogamente la función RDF también mostrará oscilaciones alrededor de la parábola de densidad promedio dada por la curva $4\pi r^2 \rho^0$, y será igualmente cero para valores menores de r_1 .

La importancia de la RDF radica en el hecho de que por definición (1.44), el área debajo de un máximo proporciona el número de coordinación efectivo para una coraza particular de átomos (ver Fig. 1.71). El primer pico es generalmente agudo, su ancho promedio cuadrático, σ_1^2 , posee un solo término, dependiendo de las fluctuaciones térmicas de los enlaces para el caso de cristales, pero para el caso de los materiales amorfos debe agregarse un término de ensanchamiento, resultado del desorden en la longitud de los enlaces σ_0^2 , de tal modo que se tiene:

$$\sigma_{am}^2 = \sigma_1^2 + \sigma_0^2 \quad (1.45)$$

La posición del primer pico en la RDF proporciona un promedio de r_1 y análogamente la posición del segundo pico da la distancia promedio r_2 (fig. 1.72)

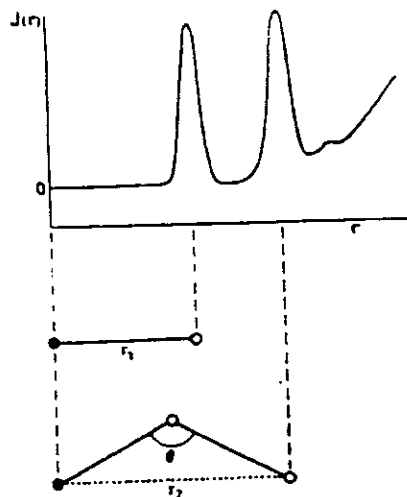


Fig. 1.72 Diagrama que muestra las relaciones entre los parámetros estructurales de corto alcance: primera y segunda longitudes de enlace más cercanas, r_1 y r_2 , y ángulo de enlace θ , para las primera y segunda cubiertas y los dos primeros picos en la RDF.

El conocimiento de ambas distancias inmediatamente da el ángulo de enlace θ , dado por:

$$\theta = 2 \text{Sen}^{-1} \left(\frac{r_2}{2r_1} \right) \quad (1.46)$$

Hay que hacer notar que el segundo pico siempre es más ancho que el primero para los sólidos amorfos covalentes, esto se debe a la presencia de la variación en los ángulos de los enlaces (típicamente de $\pm 10\%$).

En los cristales, por otro lado no existen variaciones entre los ángulos de los enlaces y por tanto los anchos de los primeros dos picos en la RDF son iguales, sin embargo, esto no es generalmente cierto para los materiales amorfos, en los cuales existen contribuciones de alto orden para el área del segundo pico, esto puede ser corroborado en el hecho de que $J(r)$ no decrece a cero para distancias r más allá del segundo pico. Interpretar el tercer y cuarto picos de manera simple es prácticamente imposible, y es ahí donde los modelos estructurales toman gran importancia.

La RDF para el a-Si:H se muestra en la Fig. 1.73, en donde la longitud de los enlaces Si - Si (a) dado por el primer pico en la RDF es igual que en el caso cristalino a 2.35 Å y la intensidad del primer pico confirma el número de coordinación 4 esperado.

El segundo pico, como se mencionó, confirma la distancia promedio de la segunda vecindad de átomos que es de 3.5 Å, la cual es la misma que para el silicio cristalino y de aquí se establece un ángulo promedio de 109° . El ancho del segundo pico es significativamente mayor en el caso amorfo que en el cristalino.

El tercer pico es aún más ancho, su distancia depende del ángulo diedro ϕ , (ver Fig. 1.73) y por tanto una distribución aleatoria de los ángulos de la posición y el ancho del pico.

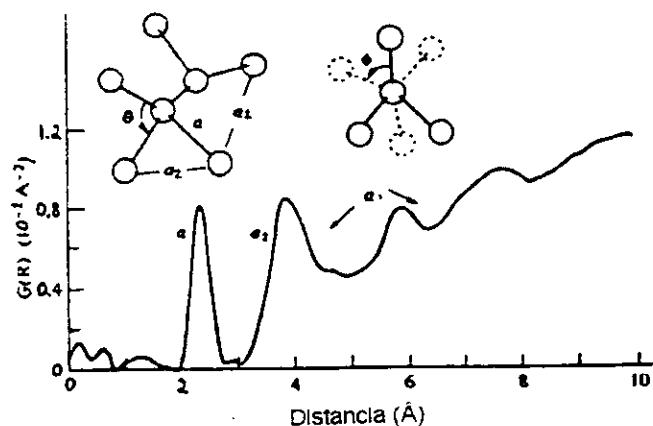


Fig. 1.73 Ejemplo de la función RDF del a-Si:H obtenida por dispersión de rayos X. Los espaciamientos interatómicos que corresponden a los picos de la RDF se indican en la figura.

La RDF revela que los enlaces del a-Si:H son tetraédricos y que existe una aleatoriedad de largo alcance en la red, pero no da mucha información sobre distancias intermedias, los datos de difracción contienen solo promedios direccionales y no pueden invertirse para deducir la topología de la red, la aproximación usual a este problema es construir modelos de redes aleatorias continuas (CRN por sus siglas en inglés) y comparar su difracción calculada con la dispersión experimental de rayos X.

Se han construido muchos modelos del silicio amorfo con y sin hidrógeno, a mano o por computadora por Polk (1971), Connell y Tempkin (1974) y Wooten Winer y Wearie (1985). Los modelos generalmente confirman que los resultados de difracción son completamente consistentes con las estructuras aleatorias continuas (CRN) pero no es posible hacer una determinación única del orden intermedio.

Un aspecto que juega un rol importante en la topología de la estructura es la estadística del anillo, todos los átomos en el silicio cristalino contienen anillos con sus miembros, pero no existe ninguna razón para suponer que esto se cumpla para el silicio amorfo, la mayoría de los modelos contienen cinco, seis o siete miembros por anillo, los enlaces de hidrógeno afectan la estadística de los anillos, porque el hidrógeno cambia la coordinación promedio de la red, pero los rayos X han sido incapaces de resolver los detalles, la presencia del hidrógeno impone que se haga la distinción entre la coordinación atómica y la de la red. Todos los átomos del silicio tienen número de coordinación 4, sin embargo la coordinación de la red se reduce por la presencia del hidrógeno que forma un enlace simple con el silicio y no ayuda a unir la red.

El número de coordinación promedio de la red es:

$$Z_n = 4 - f/(1-f)$$

donde f es la concentración de hidrógeno atómico (e.g. la composición de $\text{Si}_{1-f}\text{H}_f$).

Dentro de los modelos que toman en cuenta la estadística de los anillos esta el propuesto por Polk en 1971, el cual fue la primera red aleatoria continua que prometió tomar en cuenta el ángulo diedro en todos sus valores posibles.

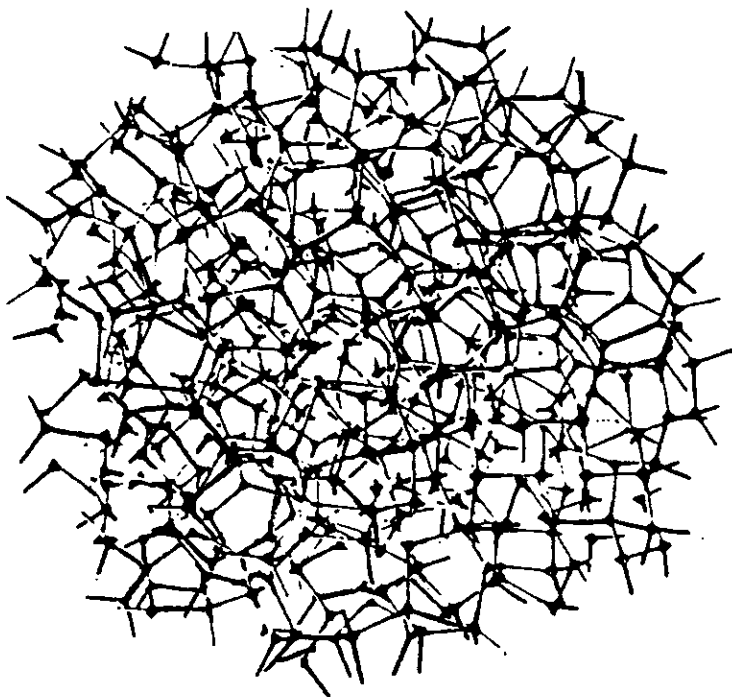


Fig. 1.74 Arreglo de 440 átomos de una red aleatoria continua (CRN), construido por Polk para simular la estructura del Silicio y Germanio Amorfos.

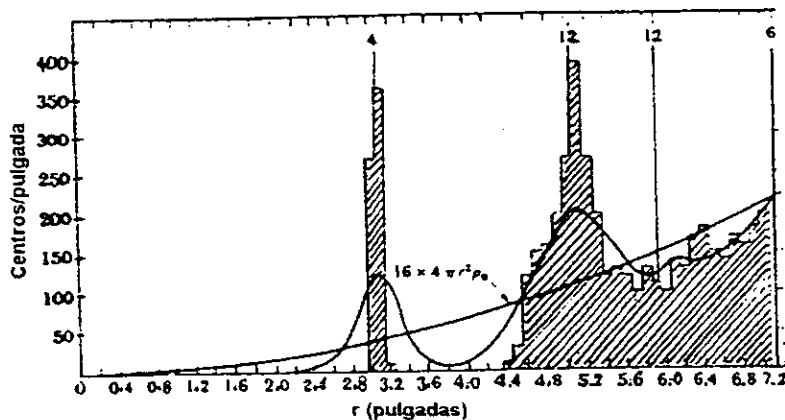


Fig. 1.75 Comparación de la función RDF (histograma) de Polk con la función RDF experimental (curva continua). La Parábola representa el promedio de densidad del modelo y las líneas verticales representan la posición y el número de vecinos en una estructura cristalina diamantina con una longitud de enlace igual al promedio del modelo.

Finalmente, cabe señalar que la RDF es una representación unidimensional de una estructura tridimensional y como está promediada espacialmente (hipótesis que es estrictamente válida para materiales isotrópicos) y solamente puede obtenerse información limitada de la estructura del material, esa es otra razón por la cual los modelos son tan necesarios.

1.18.1 Los enlaces de Hidrógeno

El hidrógeno y el silicio en el a-Si:H tienen diferentes propiedades en sus enlaces, la estructura del silicio tiene la característica de ser una red rígida que posee una gran energía de enlace, la cual aparentemente no sufre modificación después del crecimiento, en contraste, el hidrógeno posee un enlace más débil y puede difundirse dentro del material y a través de él. Los enlaces de hidrógeno son muy sensibles a las condiciones de depósito. el silicio forma una estructura rígida no equilibrada mientras que el hidrógeno posee una estructura de equilibrio más estable.

El hidrógeno puede penetrar parcialmente la red del silicio, las configuraciones estables de los enlaces son representados por los enlaces Si - H y los enlaces no torcidos de Si - Si los cuales son lo suficientemente fuertes como para no ser rotos por el hidrógeno. Los enlaces altamente torcidos de Si - Si tienen energías suficientemente cercanas al potencial químico del hidrógeno y pueden romperse o permanecer como enlaces Si - H, o reconstituirse como enlaces fuertes de Si - Si, así, el hidrógeno limpia la película de sus enlaces débiles, lo cual resulta en una estructura reticular más ordenada. Tal proceso ocurre cuando existe suficiente hidrógeno para difundirse a través de la superficie de la película en el proceso de depósito, esa es la razón por la cual se necesitan altas temperaturas para obtener mejores películas.

Esto puede confirmarse en los diagramas de densidad de estados (ver Figs. 1.76 y 1.77). En ellos se puede observar que las películas de silicio amorfo hidrogenado son más puras electrónicamente hablando que las películas de silicio amorfo; en el a-Si:H la densidad de estados se aproxima a los del silicio cristalino, la anchura de la banda prohibida aumenta con la cantidad de hidrógeno de 1.6 eV a 1.9 eV (la del silicio monocristalino es de 1.12 eV, ver Fig. 1.65) [2], [4].

1.18.2 Enlaces de Silicio - Hidrógeno

Mucha información sobre los enlaces Si - H viene de la absorción infrarroja IR, el hidrógeno es un átomo ligero y dado que la frecuencia fonónica está dada por $(k/m)^{1/2}$, donde k es la constante de la fuerza y m es la masa reducida, las frecuencias de los modos del hidrógeno están por encima de las de la red de silicio, por lo que son fácilmente observables. Las vibraciones las realiza casi enteramente el hidrógeno, por lo que el análisis de los modos es relativamente simple.

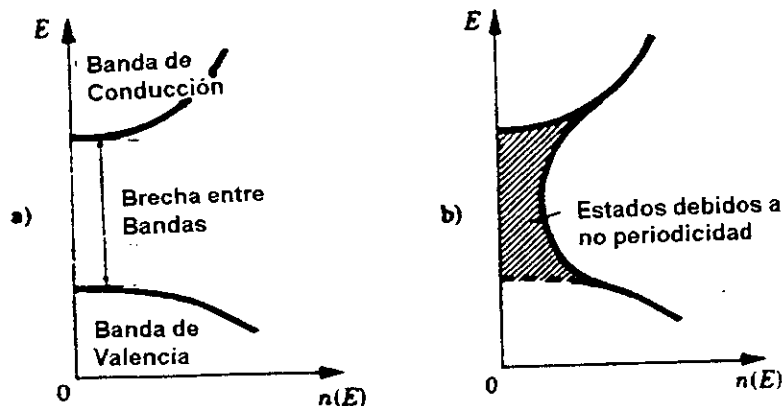


Fig. 1.76 Densidad de estados en los semiconductores (a) Cristalinos y (b) Amorfo, de la misma composición química.

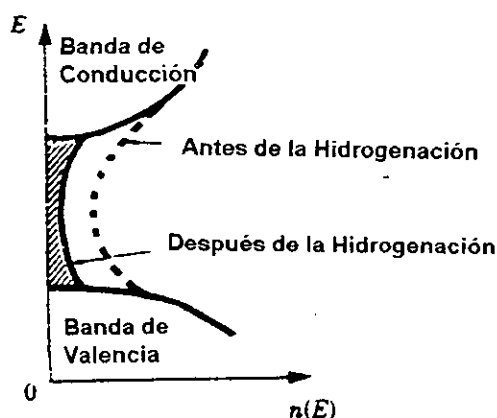


Fig. 1.77 Reducción de la brecha en el espacio entre bandas por la hidrogenación del Silicio Amorfo. La reducción es del orden de $10^{20} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ a alrededor de $10^{15} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$.

Los modos de los fonones ocurren en tres bandas de energía, un pico ancho que siempre está presente ocurre a los 630 cm^{-1} , un grupo de líneas agudas ocurre entre los $800 - 900 \text{ cm}^{-1}$ cuya agudeza e intensidad dependen de las condiciones de depósito, y modos de vibración entre los $2000 - 2200 \text{ cm}^{-1}$ también ocurren con similar dependencia en los parámetros de depósito.

Los modos normales de varias configuraciones de los enlaces Si - H se muestran en la Fig. 1.78

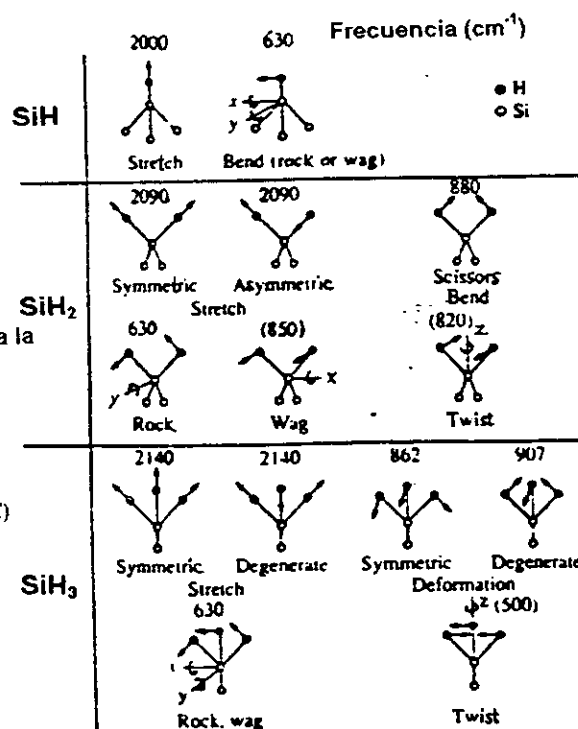


Fig. 1.78 El conjunto de modos vibracionales Si - H para los grupos SiH, SiH₂ y SiH₃ con sus respectivas frecuencias indicadas en cada uno. Las frecuencias entre brackets son estimadas

Un único átomo ligado $\equiv\text{Si-H}$ tiene tres grados de libertad, sus modos vibracionales son: el estiramiento, en el cual el hidrógeno se mueve a lo largo de la dirección del enlace del Si - H y dos enlaces perpendiculares degenerados. El primer modo tiene una frecuencia cercana a los 2000 cm^{-1} y el segundo a los 630 cm^{-1} .

Los modos entre los $800 - 900 \text{ cm}^{-1}$ se originan a partir de los enlaces $\equiv\text{Si=H}_2$ o $-\text{Si=H}_3$. Los grados extra de libertad se deben a los átomos de hidrógeno adicionales, los cuales se muestran en la Fig. 1.78.

El análisis infrarrojo se realizó en esta tesis con un instrumento de transformada de Fourier, del cual pueden conocerse algunos detalles en el apéndice 3

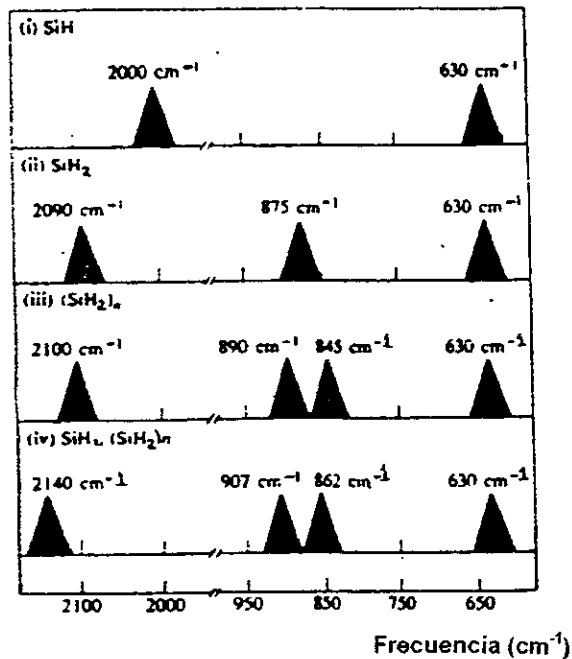


Fig. 1.79 Espectro de Absorción Infrarrojo del a-Si:H para varios grupos de enlaces de Hidrógeno.

1.19 El proceso de depósito de películas por Sputtering

El proceso de sputtering se define como la expulsión de partículas de un blanco sólido por la acción de partículas energéticas usadas como proyectiles, el depósito por sputtering es esencialmente un proceso de recubrimiento en vacío, para llevarlo a cabo, el material fuente que jugará el papel de material de revestimiento, llamado el "blanco" se coloca enfrente de los sustratos en una cámara de vacío, en la cual se baja la presión en un rango de 10^{-5} a 10^{-10} Torr, dependiendo del proceso. El método más común para proveer los iones necesarios para el bombardeo en el proceso de sputtering es insertar en la cámara evacuada un flujo continuo de gas Argón a una presión de 1 a 100 mTorr, y crear una descarga. Se aplica un potencial negativo entre los 0.5 y 5 kV al blanco para provocar un bombardeo de iones positivos en su contra, mientras que el electrodo opuesto (el sustrato) se aterriza. Un sistema como este en el cual el blanco y el sustrato se encuentran entre placas paralelas se conoce como sistema diodo y se muestra esquemáticamente en la Fig. 1.80

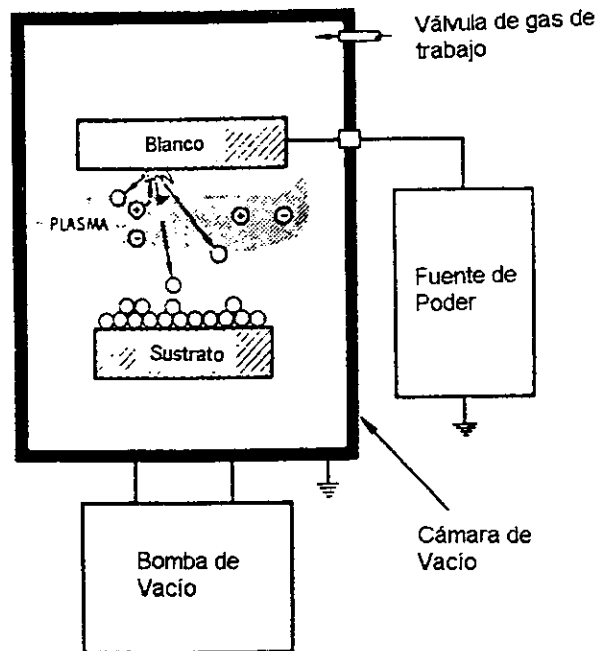


Fig. 1.80 Diagrama de un sistema de depósito por sputtering.

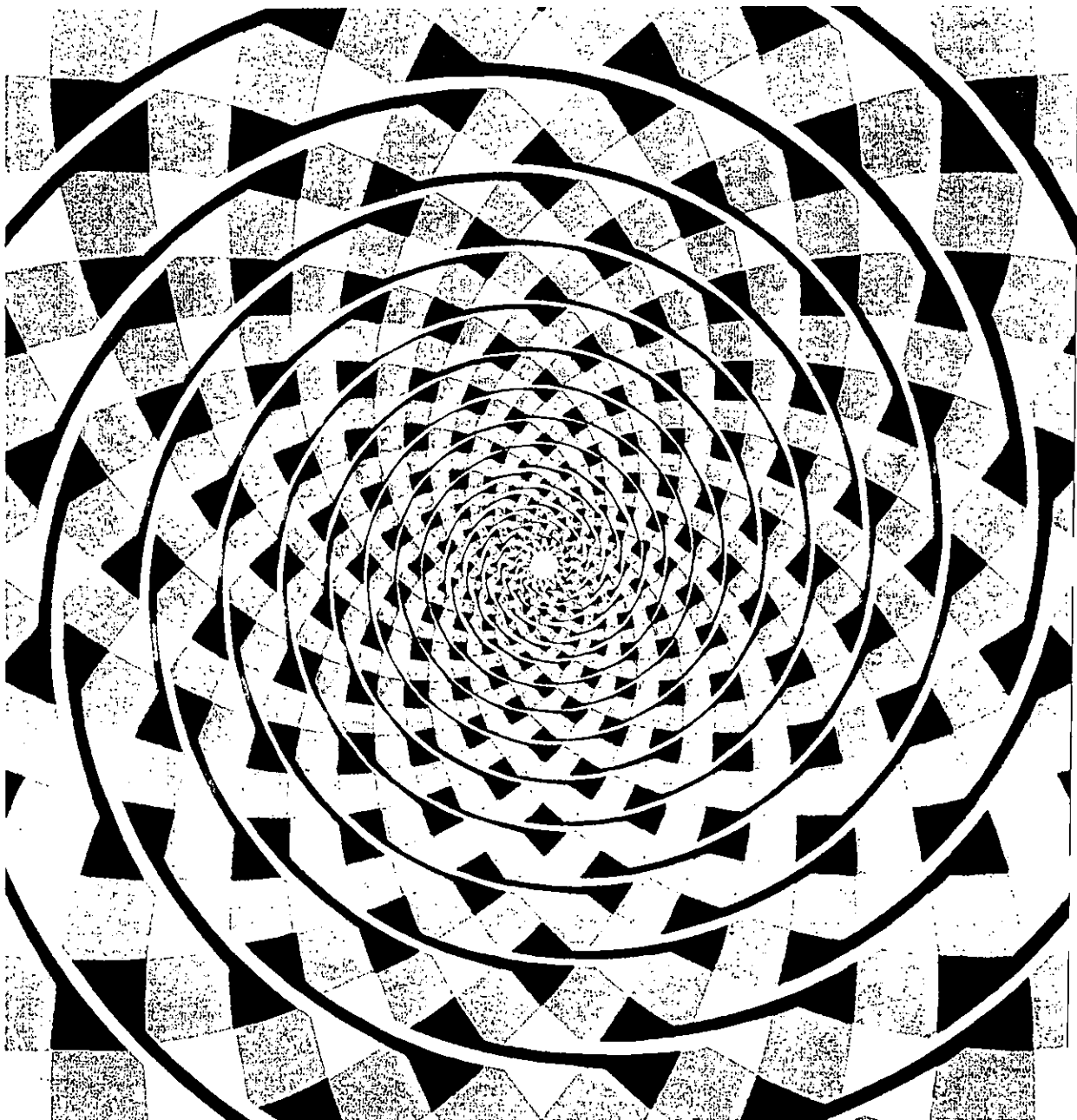
La principal característica del proceso de sputtering es su universalidad, virtualmente cualquier material es candidato para depositarlo por sputtering. Por métodos de DC se pueden depositar metales, mientras que con RF (radio frecuencia) pueden depositarse materiales no conductores.

2

Propiedades y Propagación de la Radiación Electromagnética

Antes de comenzar con el estudio de la electricidad, resolví no leer nada de matemáticas sobre el particular, sino hasta después de terminar de leer las "Investigaciones Experimentales Sobre Electricidad" de Faraday.

James Clerk Maxwell



2.1 Una visión general

El trabajo de J.C. Maxwell y desarrollos posteriores de fines del siglo XIX hicieron evidente que la luz tiene naturaleza electromagnética.



La electrodinámica clásica, invariablemente lleva a la idea de una transferencia continua de energía por medio de ondas electromagnéticas, en contraste, el punto de vista más moderno de la electrodinámica cuántica describe las interacciones electromagnéticas y el transporte de energía en términos de "partículas" elementales sin masa conocidas como *fotones*¹ los cuales están localizados en cuantos de energía. La naturaleza cuántica de la energía radiante no siempre se nota fácilmente, ni tampoco es siempre de interés práctico, hay un rango completo de situaciones en las que el equipo de detección es tal que es imposible, y es lo deseable, distinguir cuantos individuales, existe la tendencia a que el flujo de luz incidente lleve una cantidad relativamente grande de energía y la granularidad se oscurezca en estos casos. [14]

Si la longitud de onda de la luz es pequeña en comparación con el tamaño del aparato, pueden usarse, como primera aproximación, las técnicas de la *óptica geométrica*, un tratamiento bastante más preciso, que es aplicable también cuando las dimensiones del aparato son pequeñas, es el de la *óptica física*. En la óptica física la propiedad dominante de la luz es su naturaleza ondulatoria. Incluso es posible desarrollar la mayor parte del tratamiento sin especificar jamás el tipo de onda con la que uno está tratando, ciertamente por lo

que al estudio clásico de la óptica física se refiere, será suficiente y admirable tratar la luz como una onda electromagnética.

Se puede pensar la luz como otra manifestación de la materia, en efecto, uno de los dogmas básicos de la mecánica cuántica es que tanto la luz como los objetos materiales muestran cada uno propiedades similares de onda - partícula, como Erwin C. Schrödinger, uno de los fundadores de la Mecánica Cuántica lo estableció:

*En el nuevo arreglo de ideas la distinción (entre partículas y ondas) ha desaparecido, porque se descubrió que todas las partículas tienen también propiedades ondulatorias, y viceversa. Ninguno de los dos conceptos se deben desechar, ellos deben amalgamarse. Qué aspecto sobresalga depende no del objeto físico sino del instrumento experimental usado para examinarlo.*²

El tratamiento cuántico asocia una ecuación de onda con una partícula, sea esta fotón, electrón, protón, etc., en el caso de partículas materiales, los aspectos ondulatorios se introducen por medio de la ecuación de campo, conocida como *ecuación de Schrödinger*, para los fotones se tiene una representación de la naturaleza ondulatoria en la forma de las ecuaciones del campo electromagnético clásico de Maxwell, con ellas como punto de partida puede construirse una teoría cuántica de fotones y su interacción con cargas. La naturaleza dual de la luz se evidencia por el hecho de que se propaga en el espacio como lo hace una onda y aún así puede mostrar un comportamiento de partículas durante los procesos de emisión y absorción, la energía radiante electromagnética es creada y destruida en cuantos o fotones y no continuamente como una onda clásica, no obstante, su movimiento a través de una lente, un agujero, o un conjunto de rendijas, está gobernado por sus características ondulatorias, si no nos parece familiar este tipo de comportamiento en el mundo macroscópico es porque la longitud de onda de un objeto varía inversamente con su momentum $\lambda = h/p$ (*longitud de onda de de Broglie*), y aún un grano de arena (que apenas se está moviendo) tiene una longitud de onda tan pequeña que sería imperceptible en cualquier experimento concebible.

El fotón tiene varias propiedades que lo distinguen de todas las otras partículas subatómicas, estas propiedades son de interés considerable, porque son responsables del hecho de que muy a menudo los aspectos cuánticos de la luz sean completamente oscuros, en particular, no hay restricciones en el número de fotones que pueden existir en una región con el mismo momentum lineal y angular, restricciones de este tipo (el principio de exclusión de Pauli) existen en la mayoría de las otras partículas (con excepción, por ejemplo, del aún hipotético cuanto de gravedad, es decir el gravitón, He_2 y mesones π). El fotón tiene cero masa en reposo y por consiguiente puede pensarse que en un haz de luz hay un número sumamente grande de foto-

¹ En 1926 G. W. Ritter llamó *fotones* a los cuantos del campo de radiación.

² Erwin C. Schrödinger, Science theory and Man.

nes de baja energía, dentro de ese modelo, haces muy densos de fotones (muchos de los cuales pueden tener esencialmente el mismo momentum lineal), actúan en promedio para producir campos clásicos bien definidos. La energía transportada por gran número de fotones es, *en promedio*, equivalente a la energía transferida por una onda electromagnética clásica, es por estas razones, que la representación por un campo de los fenómenos electromagnéticos ha sido, y continuará siendo, tan útil. Debe notarse, sin embargo, que cuando se habla de superposición de ondas electromagnéticas, se trata esencialmente de un eufemismo para la interferencia de amplitudes de probabilidad.

2.2 El espectro electromagnético

Cuando Maxwell publicó la primera descripción extensa de su teoría electromagnética en 1867, toda la banda de frecuencias que se conocía se extendía solamente desde el infrarrojo, pasando por el visible, hasta el ultravioleta.

Como se muestra en la figura 2.1 el espectro electromagnético abarca un intervalo enorme de longitudes de onda y de frecuencias, de hecho, el intervalo es tan grande que se necesita una escala logarítmica para abarcarlo, la figura también describe las principales regiones espectrales, las divisiones son función de los métodos que se precisan para generar y detectar las diversas clases de radiación, varios solapamientos son evidentes, a continuación se da una breve explicación de las radiaciones con las que se trabaja en esta Tesis. [14]

2.2.1 Infrarrojo

La región infrarroja se extiende aproximadamente de 3×10^{11} Hz hasta alrededor de 4×10^{14} Hz fue detectada por el renombrado astrónomo Sir William Hershel (1738 - 1822) en 1800. El **infrarrojo**, o IR, a menudo se subdivide en cuatro regiones: el IR cercano, nombrado así porque esta cerca del visible (780 nm, 3000nm), el IR intermedio (3000 nm, 6000 nm), el IR lejano (6000 nm, 15000 nm) y el IR extremo (15000 nm, 1.0 mm). [15]

Esta es una subdivisión bastante ligera y no hay universalidad en la nomenclatura, la energía radiante en el extremo de longitudes de onda grandes se puede generar usando osciladores de microondas o fuentes incandescentes, es decir, osciladores moleculares. —En efecto, cualquier material irradiará o absorberá IR por agitación térmica de sus moléculas constitutivas, además del espectro continuo emitido por gases densos, líquidos y sólidos las moléculas aisladas térmicamente excitadas pueden emitir IR en rangos angostos específicos. Debido a las vibraciones y rotaciones de estas moléculas, las emisiones son características de los enlaces químicos involucrados, ver Fig. 2.1.

2.2.2 Luz

La luz corresponde a la radiación electromagnética en la banda angosta de frecuencias de alrededor de 3.84×10^{14} Hz hasta aproximadamente 7.69×10^{14} Hz (ver Tabla 2.1) cuyos fotones tienen energías en el intervalo que va de 1.65 a 3.1 eV. Se produce generalmente por un reacondo de los electrones exteriores en los átomos, moléculas o sólidos, El espectro continuo se produce por agitación térmica a temperaturas muy elevadas (como la superficie del Sol, los filamentos incandescentes etc.), ver Fig. 2.1.

Tabla 2.1 Frecuencia *aproximada* y rangos de longitud de onda en el vacío para los distintos colores.

Color	λ_0 (nm)	ν (THz)
Rojo	780-622	384-482
Naranja	622-597	482-503
Amarillo	597-577	503-520
Verde	577-492	520-610
Azul	492-455	610-659
Violeta	455-390	659-769

* 1 terahertz (THz) = 10^{12} Hz; 1 nanómetro (nm) = 10^{-9} m.

2.2.3 Ultravioleta

Los experimentos de Hershel sobre "luz infrarroja" impulsaron a J.W. Ritter (1801) a investigar el otro extremo del espectro visible, más allá del violeta: se trataba de los **rayos ultravioleta (UV)**, actualmente, se entiende por UV el intervalo desde $\sim 7.5 \times 10^{14}$ Hz hasta $\sim 3 \times 10^{17}$ Hz (400 nm a 1 nm; 3.1 eV a 1.2 KeV) aproximadamente, distinguiéndose usualmente el UV cercano (400 nm a 200 nm), el medio y el lejano, ya en superposición con los rayos X. La radiación UV se produce en las transiciones electrónicas de átomos y moléculas, así como en la radiación sincrotrónica y en la radiación de frenado. Su detección se basa en este tipo de transiciones: pantallas fluorescentes emulsiones fotográficas, fotomultiplicadores y, en general, procesos de ionización.

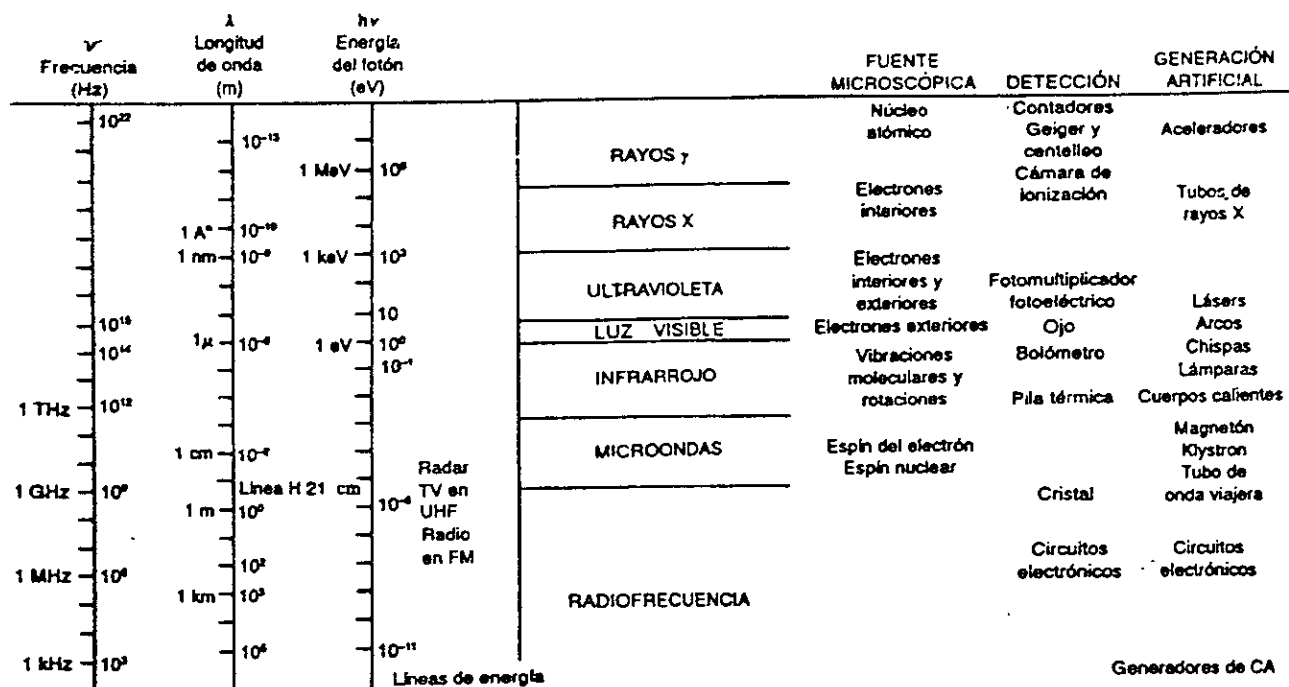


Fig. 2.1 Espectro de ondas electromagnéticas.

2.3 Ondas Escalares y Vectoriales

Hay dos clasificaciones generales de ondas, longitudinales y transversales, la distinción entre las dos proviene de una diferencia entre la dirección a lo largo de la cual ocurre la perturbación y la dirección k/k , en la cual se propaga la perturbación. Esto es más fácil de visualizar cuando se trata de un medio material deformable elástico. Una **onda longitudinal** ocurre cuando las partículas del medio se desplazan de sus posiciones de equilibrio en una dirección paralela a k/k . Se origina una **onda transversal** cuando la perturbación, en este caso el desplazamiento del medio, es perpendicular a la dirección de propagación.

La figura 2.2a muestra una onda transversal que viaja en la dirección z , en este caso, el movimiento ondulatorio está confinado a un plano fijo en el espacio llamado **plano de vibración**, y por lo tanto, se dice que la onda es **linealmente polarizada** o **polarizada plana**. A fin de determinar por completo la onda, debe especificarse la orientación del plano de vibración, y también la dirección de propagación; esto es equivalente a resolver la perturbación en componentes a lo largo de dos ejes mutuamente perpendiculares ambos normales a z , ver figura 2.2b

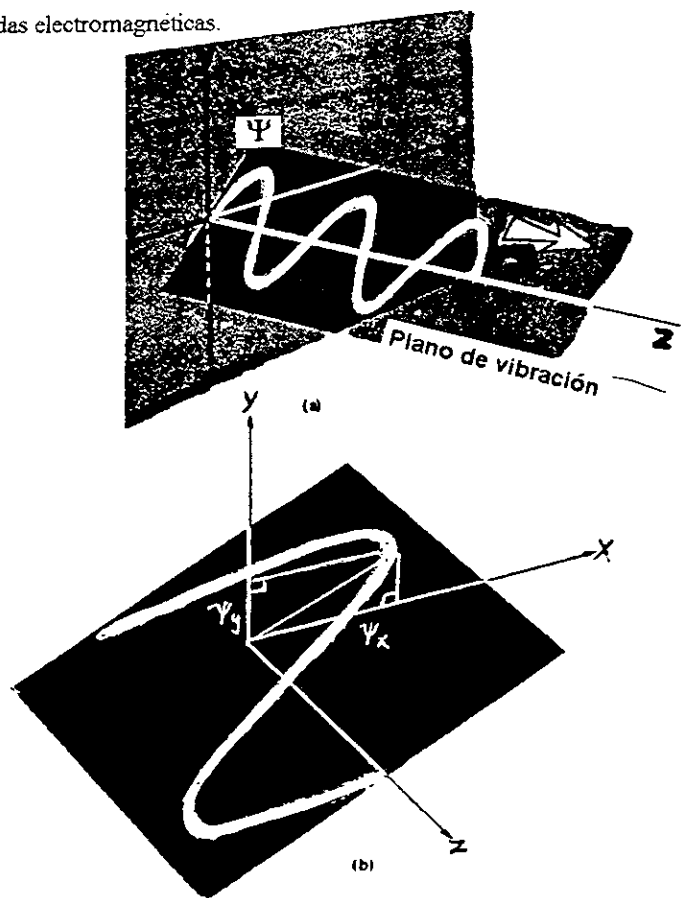


Fig. 2.2 Ondas Polarizadas Linealmente.

El ángulo en el cual está inclinado el plano de vibración es constante, de modo que en cualquier tiempo Ψ_x y Ψ_y difieren de Ψ por una constante multiplicativa y ambas son por lo tanto soluciones de la ecuación diferencial de onda, se presenta un hecho muy significativo: la función de onda, de una onda transversal, se comporta en forma parecida a una cantidad vectorial, con la onda moviéndose a lo largo del eje z , puede escribirse:

$$\Psi(z, t) = \Psi_x(z, t)\mathbf{i} + \Psi_y(z, t)\mathbf{j} \quad (2.1)$$

donde \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} son vectores base unitarios en coordenadas cartesianas, una onda plana armónica escalar está dada por la expresión:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (2.2)$$

Una onda plana armónica **polarizada linealmente** está dada por el vector de onda:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (2.3)$$

Para este caso donde el plano está fijo en el espacio, también lo es la orientación de A . Recuérdese que ψ y A difieren solamente por un escalar y, como tal, son paralelos el uno al otro y perpendiculares a \mathbf{k}/k .

La luz es una onda transversal y es una apreciación de su naturaleza vectorial de gran importancia, los fenómenos de polarización óptica se pueden tratar fácilmente en términos de este tipo de visualización ondulatoria vectorial, para luz no polarizada, donde el vector de onda cambia de dirección al azar y rápidamente, las aproximaciones escalares se hacen útiles.

2.4 Ondas planas monocromáticas en medios no conductores

Las soluciones más fácilmente manejables de la ecuación de onda son las soluciones que se llaman **ondas planas**. Una onda plana se define como aquella onda que, en un instante dado, presenta la misma fase para todos los puntos de cada plano perpendicular a alguna dirección específica; ver Fig. 2.3.

Una onda monocromática transversal plana que se propaga en la dirección \mathbf{k} se escribe como:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= Ee^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= Be^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde k , cuya magnitud es el número de propagación $k=2\pi/\lambda$, se llama **vector de propagación**; ver Fig. 2.4.

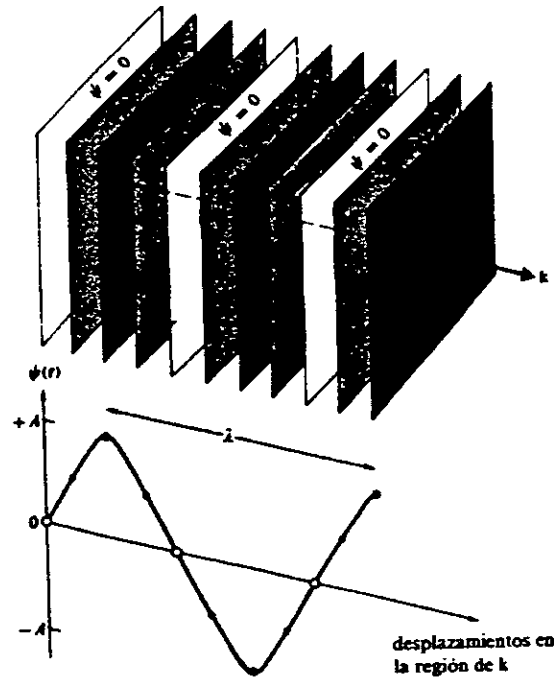


Fig. 2.3 Frentes de onda para una onda plana armónica.

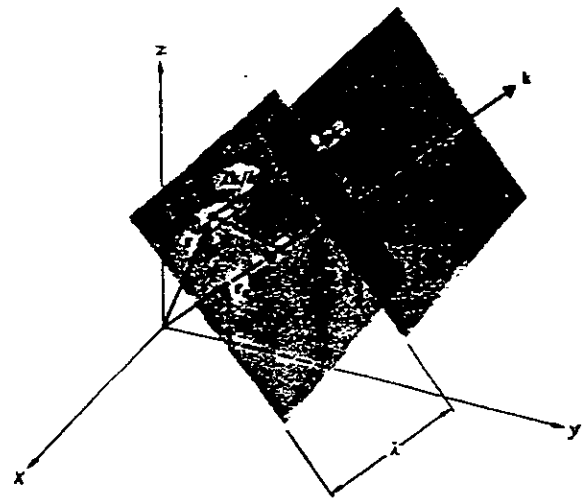


Fig. 2.4 Ondas Planas

Con E , ω y k constantes. A medida que esta perturbación viaja a lo largo de la dirección \mathbf{k} puede asignarse una fase correspondiente en cada punto en el espacio y en el tiempo. En cualquier instante, las superficies que unen todos los puntos de igual fase se conocen como frentes de onda o superficies de onda.

Obsérvese que la función de onda tendrá un valor constante sobre el frente de onda solamente si la ampli-

tud E tiene un valor fijo en el frente, en general, E es una función de r y puede no ser constante sobre todo el espacio o ni siquiera sobre un frente de onda, en el último caso, se dice que la onda es **inhomogénea**.

Se han examinado ondas planas dando énfasis particular a las ondas armónicas, el significado especial de estas ondas es doble: primero, físicamente, las ondas senoidales se pueden generar en forma relativamente simple usando alguna forma de oscilador armónico; segundo, cualquier onda tridimensional se puede expresar como una combinación de ondas planas, cada una con distinta amplitud y dirección de propagación.

2.5 Fenómenos que ocurren al interaccionar radiación con materia

Cuando la energía electromagnética se transmite a través de gases, líquidos y sólidos su intensidad, longitud de onda, dirección de propagación y plano de vibración son afectados por uno o más de los siguientes fenómenos de propagación, ver Fig. 2.5. [15]

- ♦ **Reflexión** de la radiación en la interfase entre los dos medios, en este proceso, parte de la radiación incidente es regresada al medio desde el cual incide.
- ♦ **Refracción** en la interfase entre los dos medios tal que la dirección del haz sufre un cambio discontinuo. La cantidad de deflexión depende de la razón de proporción de las velocidades en los dos medios.
- ♦ **Absorción** mediante la cual, la intensidad de la radiación se reduce más y más conforme se propaga a través del medio absorbente (este fenómeno se analizará con más profundidad y se discutirán las diferentes clases de absorción). En este fenómeno, la energía de la radiación electromagnética se convierte en otras formas, usualmente en calor, pero también en radiación de diferentes longitudes de onda (fluorescencia) o cede energía a los electrones del medio.
- ♦ **Esparcimiento** de la radiación por las partículas dispuestas al azar, esta interacción difunde la radiación incidente pero no cambia su energía o su frecuencia.
- ♦ **Polarización** la cual cambia la dirección de oscilación de los campos eléctricos y magnéticos.

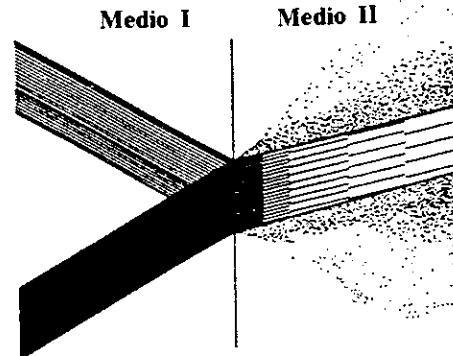


Fig. 2.5 Propagación de la luz en dos medios y su interfase. El diagrama muestra los fenómenos de reflexión, refracción, absorción y esparcimiento.

2.5.1 Absorción y Esparcimiento de Ondas Electromagnéticas

En esta sección se ahondará más en dos de los fenómenos que ocurren al interaccionar las ondas electromagnéticas con la materia.

Antes de continuar es conveniente hacer algunas aclaraciones en relación con la terminología usada en español para el **esparcimiento** (designado en literatura inglesa como **scattering**), puesto que, desafortunadamente, no es única y resulta confusa. A veces se utiliza el término **dispersión**; esta denominación se usa en física de colisiones, tanto para el caso de partículas como para ondas, pero no se ha considerado esta palabra como la más adecuada para describir el fenómeno en cuestión, pues puede confundirse con otro fenómeno físico que lleva el mismo nombre. Dicho fenómeno consiste en la variación del índice de refracción de la luz en un medio material en función de la longitud de onda. A veces se ha usado la palabra **difusión**, pero también corresponde a otro fenómeno físico bien conocido (el humo de un cigarrillo se difunde a través del aire que lo rodea). Aquí se ha elegido la palabra **esparcimiento** que, estando de acuerdo con la denominación aceptada por la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales³, no conduce a confusión. [15]

A nivel microscópico cualquier obstáculo material está constituido por cargas eléctricas, las cuales se ponen en movimiento al ser excitadas por el campo variable de la onda incidente, obviamente, la energía que transporta la onda disminuye en una cantidad igual a la que adquieren las cargas en su movimiento; desde el punto de vista cuántico, esta disminución de energía significa un menor número de fotones en la onda una vez que ésta ha superado el obstáculo (exactamente el mismo número que ha sido absorbido).

La energía obtenida por las cargas que han sido excitadas en el obstáculo puede dar origen a dos pro-

³ Vocabulario Científico y Técnico, Espasa Calpe, Madrid, 1990

cesos diferentes. Por el proceso llamado **esparcimiento**, las cargas reemiten esa energía en forma de radiación electromagnética en direcciones diferentes de la que lleva la onda incidente. Éstas son las ondas secundarias o esparcidas por el obstáculo a partir de la onda incidente. En términos corpusculares, el proceso, tal como se ha definido, incluye tanto las colisiones elásticas e inelásticas entre los fotones incidentes y el medio, como la aniquilación del fotón y creación subsiguiente de otro (fluorescencia y fosforescencia). En las colisiones elásticas no cambia la frecuencia de la radiación (esparcimiento Rayleigh), mientras que en las inelásticas el cambio de frecuencias se debe a que el estado final del obstáculo no coincide con el inicial (esparcimiento Raman y Brillouin). Por el proceso llamado **absorción**, la energía de la onda se transforma en energía potencial dentro del obstáculo y finalmente se disipa en forma de agitación térmica o calentamiento del mismo. En última instancia esta energía disipada también es reemitida en forma de "radiación térmica" durante el proceso de enfriamiento del obstáculo, pero por el retardo con que aparece y por poseer una frecuencia tan diferente de la onda incidente, es más adecuado el nombre de **absorción**. En general el esparcimiento y la absorción ocurren simultáneamente, aunque en ciertos casos puede predominar uno sobre otro de forma clara. La Fig. 2.5 ilustra estas ideas mediante un tubo transparente lleno de humo por el que se hace pasar un haz luminoso. En este caso predomina el esparcimiento sobre la absorción, de modo que, la mayor parte de la energía que queda en el humo al pasar la luz, es devuelta hacia el exterior en forma de luz esparcida, esta luz esparcida es la que llega a nuestros ojos haciendo visible la trayectoria del haz luminoso, que en caso contrario resulta obviamente invisible.

Por otro lado, para designar la pérdida global de intensidad de la onda incidente, después de superar el obstáculo, se utilizará el vocablo **extinción**, la extinción, por tanto, engloba las pérdidas energéticas debidas al esparcimiento y a la disipación en forma de calor (absorción). Es decir,

Extinción = Esparcimiento + Absorción

También en la elección de los términos absorción y extinción existen discrepancias. Debido a que la energía de las ondas esparcidas ha tenido que ser previamente absorbida por el sistema, con frecuencia se llama absorción a lo que aquí se está llamado extinción, y absorción verdadera a lo que aquí se ha llamado absorción.

Las pérdidas de energía de la onda incidente se pueden caracterizar por medio de parámetros microscópicos o macroscópicos adecuados según se indica en la sección. Evidentemente estos parámetros dependen del tipo de ligaduras de las cargas que constituyen el medio, de su distribución y concentración, así como de la frecuencia y polarización de la onda incidente. Establecer un modelo microscópico, que permita obtener los parámetros correspondientes a un medio de-

terminado, puede resultar una tarea bastante compleja, dependiendo del tipo de medio. Además, al igual que ocurre en la emisión de ondas electromagnéticas, los efectos cuánticos también son importantes en bastantes fenómenos de absorción y esparcimiento, por lo que en estos casos también se requiere la cuantización tanto de la materia como la del propio campo electromagnético. Sin embargo el modelo clásico y simple del oscilador de Lorentz resulta extraordinariamente ilustrativo de muchas de las características de estos fenómenos, tal como sucede al estudiar la emisión.

2.6 Respuesta de los materiales dieléctricos a los campos electromagnéticos

La respuesta de los materiales dieléctricos o no conductores a los campos electromagnéticos es de especial interés, pues se manejarán dieléctricos transparentes en la forma de láminas de vidrio, sin mencionar el océano de aire que los rodea.

El efecto neto de introducir un dieléctrico isotrópico homogéneo en una región del espacio libre, es cambiar ϵ_0 a ϵ y μ_0 a μ en las ecuaciones de Maxwell [14]. La velocidad de fase en el medio es:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} \quad (2.5)$$

La razón entre las velocidades de una onda electromagnética en el vacío y en la materia se conoce como **índice de refracción absoluto** n y está dado por:

$$n = \frac{c}{v} = \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0}} \quad (2.6)$$

En términos de la permitividad relativa y la permeabilidad relativa del medio, n queda:

$$n = \sqrt{(K_e K_m)} \quad (2.7)$$

La gran mayoría de las substancias, con la excepción de los materiales ferromagnéticos, son solo muy débilmente magnéticos; ninguno es realmente no magnético, aún así, K_m generalmente no se desvía de uno en más de unos pocas partes en 10^4 . Poniendo $K_m = 1$ en la fórmula para n resulta una expresión conocida como la **relación de Maxwell** o sea:

$$n = \sqrt{K_e} \quad (2.8)$$

Aquí se supone que K_e es la constante dieléctrica estática, aunque esta relación parece ser efectiva solamente para algunos gases simples. La dificultad aparece porque K_e , y por consiguiente n , son en realidad dependientes de la frecuencia. La dependencia de n con la longitud de onda (o color) de la luz es un efecto muy conocido llamado **dispersión**.

2.6.1 Dispersión

Cuando un dieléctrico se somete a un campo eléctrico aplicado, la distribución interna de carga se distorsiona bajo su influencia, esto corresponde a la generación de momentos eléctricos dipolares, los cuales, a su vez contribuyen al campo interno total, de una manera más clara, el campo eléctrico separa las cargas positivas y negativas en el medio (cada par de los cuales es un dipolo) y estas introducen una componente de campo adicional. Como se mencionó antes el momento dipolar resultante por unidad de volumen se denomina **polarización eléctrica P** [14], ver Fig. 2.6.

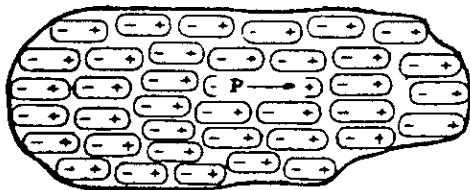


Fig. 2.6 Pedazo de material dieléctrico polarizado. Cada elemento de volumen se representa como un dipolo Δp

Para la mayor parte de los materiales P y E son proporcionales y se pueden relacionar satisfactoriamente por:

$$(\epsilon - \epsilon_0)E = P \quad (2.9)$$

Hay moléculas que tienen un momento dipolar permanente, como resultado de compartir en forma desigual sus electrones de valencia, estas se conocen como **moléculas polares**, de las cuales la molécula no lineal del agua es un ejemplo bastante típico. Figura 2.7

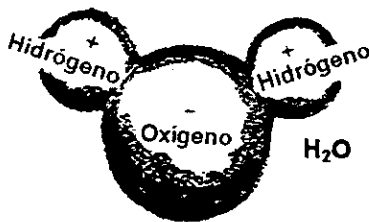


Fig. 2.7 Molécula del Agua.

Cada enlace hidrógeno - oxígeno es covalente polar, con el extremo H positivo con respecto al extremo O. La agitación térmica mantiene los dipolos moleculares orientados al azar. Con la introducción de un campo eléctrico, los dipolos se alinean a sí mismos y el dieléctrico toma una **polarización orientacional**.

En el caso de moléculas y átomos **no polares** el campo aplicado distorsiona la nube de electrones, desplazándola relativamente al núcleo y produciendo por consiguiente un momento dipolar. Ver figura 2.8a.

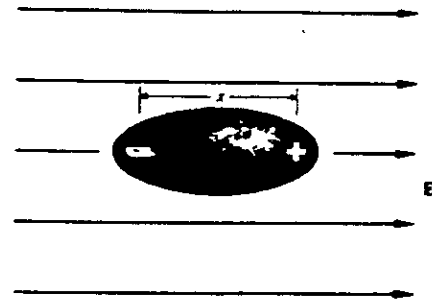


Fig. 2.8a Distorsión de la nube electrónica en respuesta a un campo aplicado E

Si el dieléctrico se somete a una onda electromagnética armónica incidente, la estructura de las cargas eléctricas internas experimentará fuerzas y/o torques variables con el tiempo. Estos serán proporcionales a la componente del campo eléctrico de la onda⁴.

Para dieléctricos polares, las moléculas en realidad sufren rotaciones rápidas, alineándose ellas mismas con el campo $E(t)$, pero estas moléculas son relativamente grandes y tienen momentos de inercia apreciables. A altas frecuencias impulsoras ω , las moléculas polares serán incapaces de seguir las alternaciones del campo. Sus contribuciones a P disminuirán y K_e caerá marcadamente.

En contraste, los electrones tienen poca inercia y pueden continuar siguiendo el campo que contribuye a $K_e(\omega)$ aún a frecuencias ópticas (de alrededor de 5×10^{14} Hz), entonces la dependencia de n en ω está gobernada por el juego interno de los varios mecanismos de polarización que contribuyen a la frecuencia particular. Es posible deducir una expresión analítica para $n(\omega)$ en función de lo que pasa dentro del medio a nivel atómico, aún cuando esto es del dominio de la mecánica cuántica, el tratamiento clásico lleva a resultados muy similares.

Hay que imaginar que los electrones exteriores o de valencia están ligados a los átomos o moléculas respectivas por una fuerza elástica restauradora ($-m_e\omega_0^2 x$) que es proporcional al desplazamiento x de los electrones del punto de equilibrio. El átomo se parece a un oscilador forzado clásico que está siendo impulsado por el campo alterno $E(t)$ el cual se supone se aplica a lo largo de la dirección x . Figura 2.8b

⁴ Las fuerzas que surgen de la componente magnética del campo tienen la forma $F_M = qv \times B$ en comparación con $F = qE$ para la componente eléctrica; pero $v \ll c$ y así se deduce de la expresión $E = cB$ que F_M es generalmente despreciable.

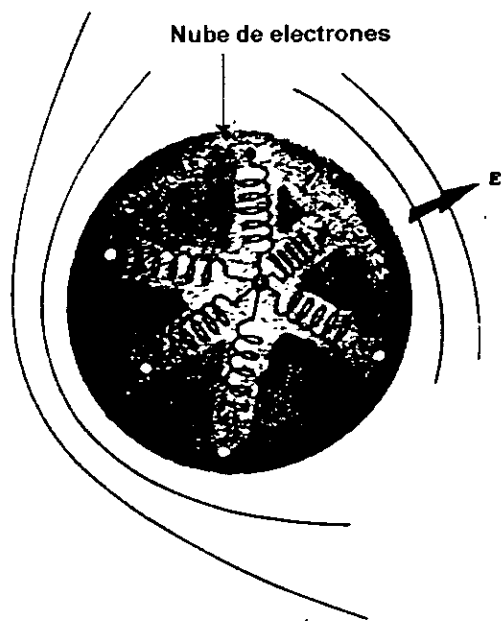


Fig. 2.8b Modelo de oscilador mecánico.

La fuerza (F_e) ejercida sobre un electrón de carga q_e por el campo $E(t)$ de una onda armónica de frecuencia ω es de la forma:

$$F_E = q_e E(t) = q_e E_0 \cos \omega t$$

Consecuentemente, la segunda ley de Newton da la ecuación del movimiento, es decir, la suma de las fuerzas es igual a la masa multiplicada por la aceleración:

$$q_e E_0 \cos \omega t - m_e \omega_0^2 x = m_e \frac{d^2 x}{dt^2}$$

La constante ω_0 es la frecuencia natural del oscilador y es igual a la raíz cuadrada de la razón entre la constante elástica y la masa. Es la frecuencia oscilatoria del sistema no impulsado. La solución de la ecuación es:

$$x(t) = \frac{q_e / m_e}{(\omega_0^2 - \omega^2)} E(t)$$

El momento dipolar es igual a la carga q_e multiplicada por su desplazamiento y si hay N electrones contribuyendo por unidad de volumen, la polarización eléctrica, o densidad de momentos dipolares, es:

$$P = q_e x N$$

Sustituyendo $x(t)$, se obtiene: $P = \frac{q_e N E / m_e}{(\omega_0^2 - \omega^2)}$ y de la ecuación (2.9):

$$\epsilon = \epsilon_0 + \frac{P(t)}{E(t)} = \epsilon_0 + \frac{q_e N / m_e}{(\omega_0^2 - \omega^2)}$$

Usando el hecho de que $n^2 = K_\epsilon = \epsilon / \epsilon_0$ puede llegarse a una expresión para n como función de ω que se conoce como ecuación de dispersión:

$$n^2(\omega) = 1 + \frac{N q_e^2}{\epsilon_0 m_e} \left(\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \right)$$

Hasta ahora se ha supuesto la existencia de sólo una frecuencia natural ω_0 , para explicar la observación de un comportamiento más complicado se generalizaron las cosas suponiendo que hay N moléculas por unidad de volumen, cada una con f_j osciladores que tienen frecuencias naturales ω_{0j} donde $j = 1, 2, 3 \dots$ En ese caso:

$$n^2(\omega) = 1 + \frac{N q_e^2}{\epsilon_0 m_e} \sum_j \left(\frac{f_j}{\omega_{0j}^2 - \omega^2} \right) \quad (2.10)$$

Este es esencialmente el mismo resultado que aparece en el tratamiento cuántico con la excepción de que algunos de los términos deben ser reinterpretados. En efecto, las cantidades ω_{0j} serían entonces las frecuencias características a las cuales un átomo puede absorber o emitir energía radiante, los términos f_j , que satisfacen el requisito de que $\sum_j f_j = 1$, son los factores de peso conocidos como la **intensidad de los osciladores**, los cuales constituyen una medida de la probabilidad de ocurrencia de una transición atómica dada, las f_j se conocen también como probabilidades de transición.

Obsérvese que cuando ω es igual a cualquiera de las frecuencias características, n es discontinua, contrariamente a la observación real, esto es simplemente el resultado de haber despreciado el término de amortiguamiento que debería haber aparecido en el denominador. Incidentalmente el amortiguamiento, en parte, es atribuible a la pérdida de energía cuando los osciladores forzados (los cuales son, por supuesto, cargas aceleradas) reirradian energía electromagnética. En sólidos, líquidos y gases a alta presión ($\approx 10^3$ atm) las distancias interatómicas son aproximadamente 10 veces menores que las de un gas a TPN⁵. Átomos y moléculas en esta proximidad relativamente cercana experimentan fuertes interacciones mutuas y resulta una fuerza "friccional". El efecto es un amortiguamiento de

⁵ Temperatura y presión normal = STP

los osciladores y una disipación de su energía en forma de **calor** (movimiento molecular). Este último proceso, (que se abordará en varias partes de esta tesis) se llama **absorción**.

Si se hubiese incluido una fuerza amortiguadora proporcional a la velocidad (de la forma $\gamma \frac{dx}{dt}$) en la ecuación de movimiento, más aparte, considerando que se esta tratando con sustancias densas en donde a diferencia de los átomos aislados, los que están en un material denso experimentan también el campo inducido por sus compañeros. Consecuentemente un átomo "ve" además del campo aplicado $E(t)$ otro campo⁵ a saber $P(t)/3\epsilon_0$ obteniéndose así:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{Nq_0^2}{3\epsilon_0 m_e} \sum_j \left(\frac{f_j}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma_j \omega} \right) \quad (2.11)$$

Por el momento se limitará, la discusión en su mayor parte a situaciones donde la absorción es despreciable (es decir $\omega_0^2 - \omega^2 \gg \gamma_j \omega$) y n es real tal que:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{Nq_0^2}{3\epsilon_0 m_e} \sum_j \left(\frac{f_j}{\omega_0^2 - \omega^2} \right) \quad (2.12)$$

Los gases transparentes, líquidos y sólidos sin color tienen sus frecuencias características fuera de la región visible del espectro (lo cual es la razón por la que ellos, en efecto, sean incoloros y transparentes), en particular, los vidrios tienen frecuencias naturales efectivas mayores a las del visible, en el ultravioleta, donde se hacen opacos, en los casos en los cuales $\omega_0^2 \gg \omega^2$, ω^2 puede ser despreciada en la Ec.(2.36) dando un índice de refracción esencialmente constante sobre esa región. Obsérvese que cuando ω aumenta hacia ω_0 , $(\omega_0^2 - \omega^2)$ disminuye y n **aumenta gradualmente con la frecuencia** como es claramente evidente en la Fig. 2.9. Esto se llama **Dispersión Normal**.

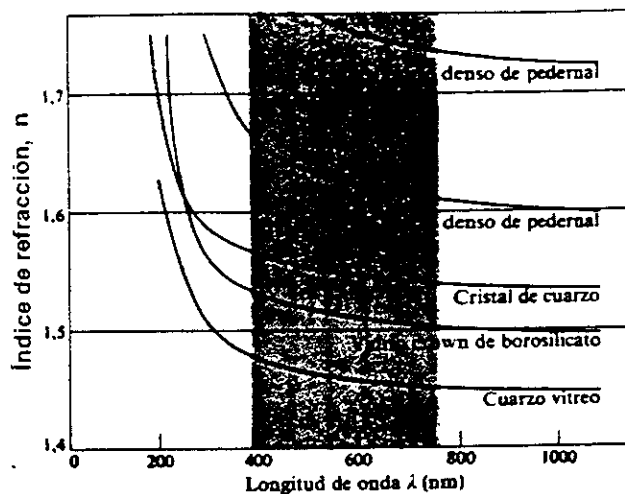


Fig. 2.9 Dependencia del índice de refracción con la longitud de onda para varios materiales.

En la región ultravioleta, cuando ω se aproxima a una frecuencia natural, los osciladores comenzarán a resonar, sus amplitudes aumentarán marcadamente y esto será acompañado por amortiguamiento y una fuerte absorción de energía de la onda incidente. Cuando $\omega_0 = \omega$ en la ecuación 2.35 el término de amortiguamiento obviamente se hace dominante; las regiones cercanas a ω_0 en la figura 2.10 son llamadas **bandas de absorción**.

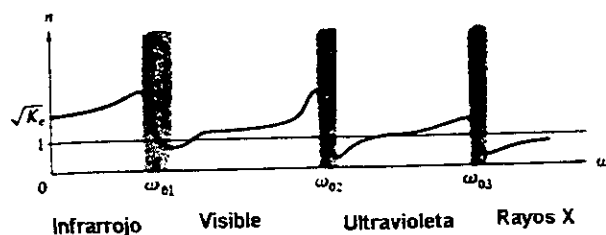


Fig. 2.10 Índice de refracción contra la frecuencia

Ahí $dn/d\omega$ es negativa y se dice que el proceso es **dispersión anómala** (es decir anormal), todas las sustancias poseen bandas de absorción en alguna región del espectro electromagnético de manera que el término *dispersión anómala* es un nombre mal puesto. Más adelante sección 2.7) se verá que los valores experimentales del índice de refracción n_2 se ajustarán por medio de ecuaciones de dispersión de Cauchy de dos y tres términos, las cuales pueden ser usadas para extrapolar los valores del índice de refracción en la región de dispersión normal con alta absorción para el Silicio Amorfo. (Moss 1959); los cuales se usarán a la vez para calcular el coeficiente de absorción (**absortividad**) en dicha región.

⁵ Este resultado se aplica a medios isotrópicos

2.6.2 Propagación de la luz a través de un medio dieléctrico

El proceso mediante el cual la luz se propaga a través de un medio con una velocidad diferente de c es bastante complicado y esta sección está dedicada a hacerlo al menos físicamente razonable.

En el espacio libre la perturbación en algún punto P se puede escribir como:

$$E_p(t) = E_0 \cos \omega t$$

Si P está rodeada por un dieléctrico, habrá un desplazamiento acumulativo de la fase ϵ_p el cual fue formado mientras la onda se movía a través del medio hacia P . El número de crestas de onda que llegan al dieléctrico por segundo debe ser el mismo que el número por segundo que se propaga en él. Esto es la **frecuencia** que debe ser la misma en el vacío que en el dieléctrico, aun cuando la longitud de onda y la rapidez pueden ser diferentes. Una vez más, pero esta vez en el medio, la perturbación en P es:

$$E_p(t) = E_0 \cos(\omega t - \epsilon_p)$$

Un observador en P tendría que esperar un tiempo mayor para que una cresta dada llegue cuando él está en el medio que lo hubiera tenido que esperar en el vacío. En otras palabras, si nos imaginamos dos ondas paralelas de la misma frecuencia, una en el vacío y la otra en un medio material, la onda en el vacío pasará P un tiempo ϵ_p/ω antes que la otra onda. Entonces es claro que un retraso de fase de ϵ_p corresponde a una reducción en la rapidez $v < c$ y $n > 1$. Similarmente, un adelanto de fase produce un aumento en la rapidez, $v > c$ y $n < 1$ (Fig. 2.11).

El proceso de esparcimiento es continuo y así los desplazamientos acumulativos de fase se van sumando conforme la luz penetra en el medio. Es decir, ϵ es una función de la longitud del dieléctrico atravesado; como debe ser si v es constante.

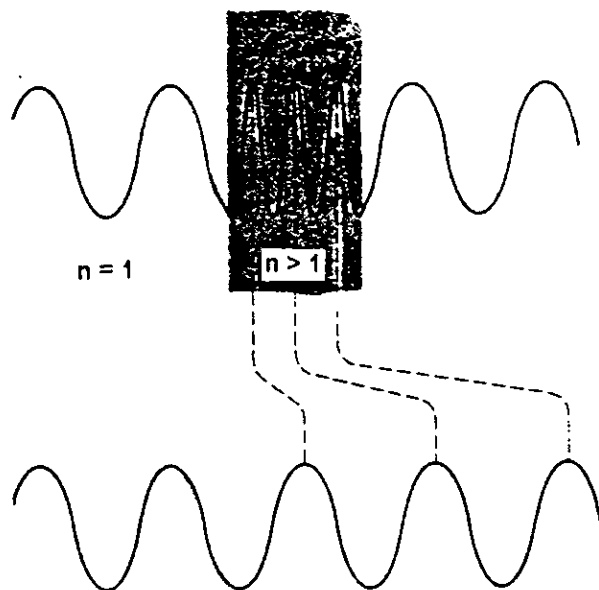


Fig. 2.11 Retraso de una onda en un medio más denso.

2.7 Ecuación de Cauchy

Los primeros experimentos sobre dispersión fueron hechos por **Marcus** (1648) y **Grimaldi** (1665). **Newton** trató de explicar sus observaciones sobre la dispersión, usando un prisma de vidrio, con su modelo de que la luz estaba constituida por partículas pero no tuvo éxito. **Augustin Louis Cauchy** (1798 - 1857), fue el primero en tener éxito al representar la curva de dispersión normal con una ecuación en 1836 [17]. Su ecuación es:

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}$$

donde A, B y C son constantes, las cuales son características de cualquier sustancia, esta ecuación representa las curvas en la región visible, con una precisión considerable. Para encontrar los valores de las tres constantes, es necesario conocer el valor del índice de refracción para las tres longitudes de onda, en la mayoría de los casos, será suficientemente preciso incluir los dos primeros términos de esta expresión y las constantes pueden ser conocidas a partir de los valores de n y solamente dos longitudes de onda. La ecuación de dispersión con dos constantes de Cauchy es:

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} \quad (2.13)$$

para la cual la ecuación de dispersión se convierte diferenciando:

$$\frac{dn}{d\lambda} = -\frac{2B}{\lambda^3} \quad (2.14)$$

Esto muestra que la dispersión varía aproximadamente como el inverso del cubo de la longitud de onda. A 400 nm será aproximadamente 8 veces mayor que a 800 nm. El signo menos corresponde a la usual pendiente negativa de la curva de dispersión.

Las razones teóricas en las cuales Cauchy se basó para obtener su ecuación resultaron más tarde demostradas ser falsas por P. Le Roux (1832 - 1907), así que, se considera que esta ecuación es esencialmente empírica, sin embargo, es muy satisfactoria para los casos de dispersión normal.

Maxwell sugirió que los átomos y las moléculas pueden actuar como osciladores y poseer frecuencias naturales, pero no continuó su idea, Sellmeier (1871) independientemente usó la idea de resonancias naturales para derivar la relación:

$$n^2 = 1 + \frac{a\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2}$$

para explicar los casos simples de dispersión anómala. Una teoría clásica más rigurosa fue desarrollada por Paul Karl Ludwig Drude (1863 - 1906) y W. Voigt (1850 - 1919). La teoría fue extendida hasta su forma presente por Hendrik Antoon Lorentz (1853 - 1928).

2.8 Un vistazo al proceso de absorción en sólidos

La Fig. 2.12 muestra el espectro de absorción de un sólido hipotético: un semiconductor, al cual se le aplica un campo electromagnético y se considera antiferromagnético. Los semiconductores presentan todas las propiedades ópticas de los aisladores y de los metales, solo que por supuesto en menor grado. Las características principales son las siguientes: [30]

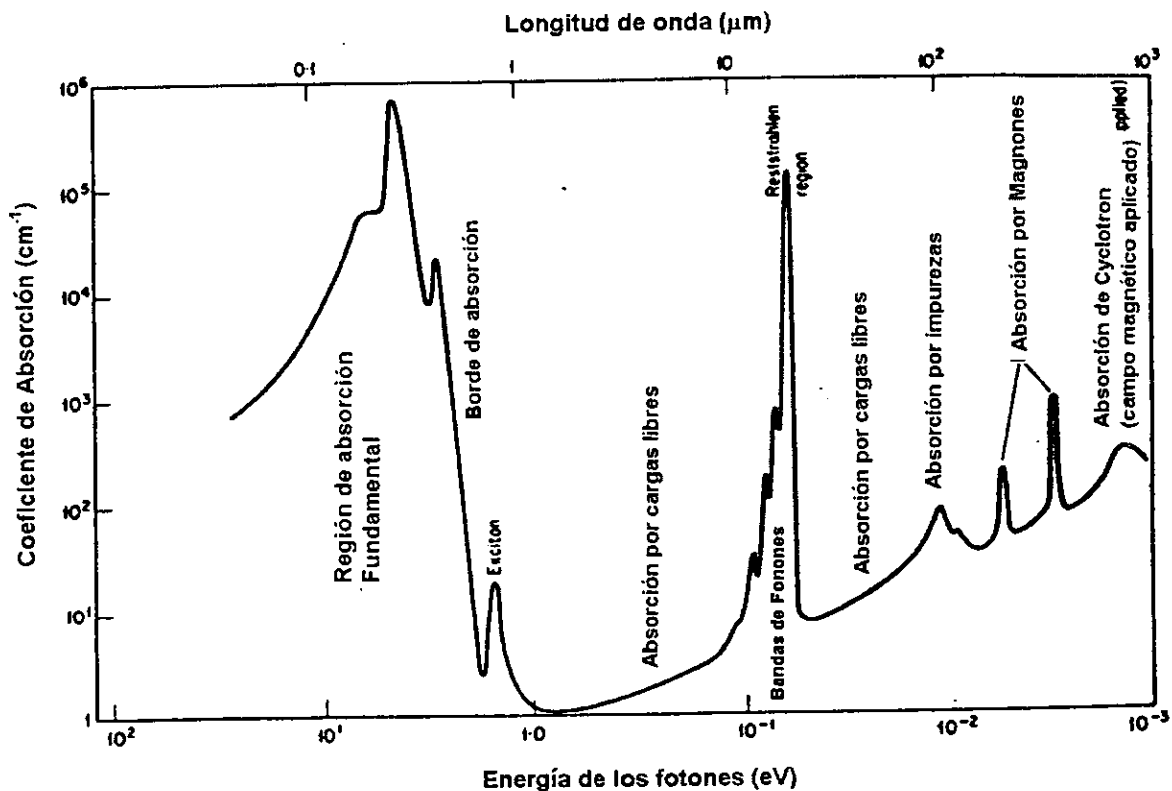


Fig. 2.12 Espectro de Absorción de un semiconductor hipotético.

- En el ultravioleta y algunas veces extendiéndose a las regiones visible e infrarroja, existe una región con una intensa absorción, derivada de las transiciones electrónicas entre las bandas de valencia y conducción. Tales transiciones generan electrones y agujeros móviles, produciendo fotoconductividad. El coeficiente de absorción abarca el rango 10^5 a 10^6 cm^{-1} . En la banda de alta energía (alrededor de los 20 eV) existe una caída suave en la absorción sobre un rango de algunos electrón volts. Por otra parte, en el lado de baja energía el coeficiente de absorción cae muy rápidamente, tanto como seis ordenes de magnitud en solo unas pocas decenas de electrón volts. En los semiconductores este límite de baja energía de la absorción fundamental es la característica más distintiva del espectro y se conoce como el borde de absorción.
- El límite del borde de absorción corresponde a la energía necesaria para que los fotones impulsen a los electrones desde el mínimo de la brecha de energía E_g . La región límite frecuentemente muestra alguna estructura debida principalmente a los excitones; los cuales son el estado ligado de un par electrón - hoyo. La absorción por excitones es más pronunciada en los aisladores, particularmente en los cristales iónicos que en los semiconductores, y puede originar una estrecha línea de absorción en el espectro.
- Cuando la longitud de onda se incrementa más allá del borde de absorción, la absorción comienza nuevamente a crecer en forma lenta. Este incremento se debe a las transiciones electrónicas en las bandas de conducción o de valencia y se conoce como la absorción de cargas libres. Se extiende a través de las regiones infrarroja y de microondas del espectro electromagnético. Su magnitud es por supuesto función de la densidad de los electrones o los hoyos. Su magnitud en los metales es muy grande.
- Cuando los fotones tienen energías entre 0.02 y 0.05 eV (50 a 20 μm de longitud de onda) un nuevo tipo de picos de absorción aparecen. Estos se deben a las interacciones entre los fotones incidentes y los modos vibracionales de la red cristalina (fonones). Si el cristal es iónico, el coeficiente de absorción podría alcanzar los 10^5 cm^{-1} originándose una fuerte reflexión también.
- Las impurezas le dan un aumento adicional a la absorción. Para construir la figura se utilizó una impureza superficial, con una energía de ionización de ~ 0.01 eV. La absorción debida a tales impurezas es observable únicamente a bajas temperaturas.
- La absorción se puede dar en los sólidos debido a la inversión del espín del electrón. Si un sólido contiene impurezas paramagnéticas mostrará líneas de absorción bajo la presencia de un campo magnético externo el cual pone de manifiesto otros estados degenerados de espín. Se requieren campos magnéticos muy intensos para poner de manifiesto los estados que corresponden al espín y los que corresponden a los fotones infrarrojos. Sin embargo en los materiales antiferromagnéticos donde existe un significativo campo interno, los espines se acoplan todos juntos y existe la posibilidad de que se acoplen de forma colectiva. Tales excitaciones colectivas se denominan ondas de espín o

magnones. La absorción debida a la generación de magnones se incluye en la Fig. 2.12, únicamente para no dejar inconcluso el espectro de absorción.

- Finalmente, el pico de absorción localizado en las longitudes de onda largas de la Fig. 2.12, manifiesta el aumento de la absorción debida a la movilidad de los portadores de carga en presencia de un campo magnético. Tal fenómeno se conoce como resonancia de ciclotrón.

2.9 Absorción de radiación

Cuando la radiación pasa a través de un sólido, un líquido o un gas, ciertas frecuencias pueden eliminarse selectivamente por absorción, un proceso en el que la energía electromagnética se transfiere a los átomos, iones o moléculas constitutivas de la muestra, la absorción promueve a estas partículas desde su estado normal a temperatura ambiente, o estado fundamental, a uno o varios estados de energía más elevada, según la teoría cuántica, los átomos, moléculas o iones solo tienen un número limitado de niveles de energía discretos y por tanto para que se produzca la absorción de la radiación, la energía de los fotones excitadores debe coincidir exactamente con la diferencia de energías entre el estado fundamental y uno de los estados excitados de las especies absorbentes, ya que estas diferencias de energía son singulares para cada especie, el estudio de las frecuencias de la radiación absorbida proporciona un medio de caracterizar a los constituyentes de una muestra de materia, con este fin, se representa la absorbancia en función de la longitud de onda o de la frecuencia (*la absorbancia*, una medida de la disminución de la potencia radiante se define con mayor precisión en la sección 2.12.2).

Algunos espectros de absorción típicos se muestran en la figura 2.13, el examen de las cuatro gráficas de la figura 2.13 pone de manifiesto que la apariencia de los espectros de absorción varía ampliamente, algunos poseen numerosos picos agudos, mientras que otros consisten en suaves curvas continuas, en general, la naturaleza de un espectro es influida por variables como la complejidad, el estado físico y el entorno de las especies absorbentes, sin embargo, las diferencias entre los espectros de absorción de los átomos y las moléculas son más profundas.

2.9.1 Absorción Atómica

El paso de radiación ultravioleta o visible a través de un medio constituido por partículas monoatómicas, como mercurio o sodio gaseosos, produce la absorción de solo unas pocas frecuencias bien definidas, véase la figura 2.13a.

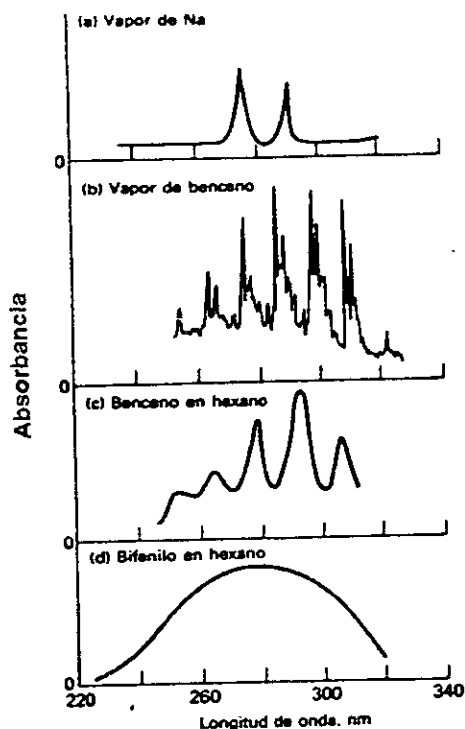


Fig. 2.13 Algunos espectros de absorción ultravioleta característica

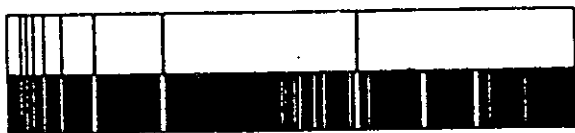


Fig. 2.14 Las líneas oscuras en el espectro de absorción de un elemento corresponden a las líneas claras en su espectro de emisión.

La relativa simplicidad de tales espectros (Figs. 2.14 y 2.15) se debe al pequeño número de posibles estados energéticos de las partículas absorbentes, la excitación solo puede producirse mediante un proceso electrónico en el que uno o varios de los electrones del átomo se transfieren a un nivel de energía más alto.

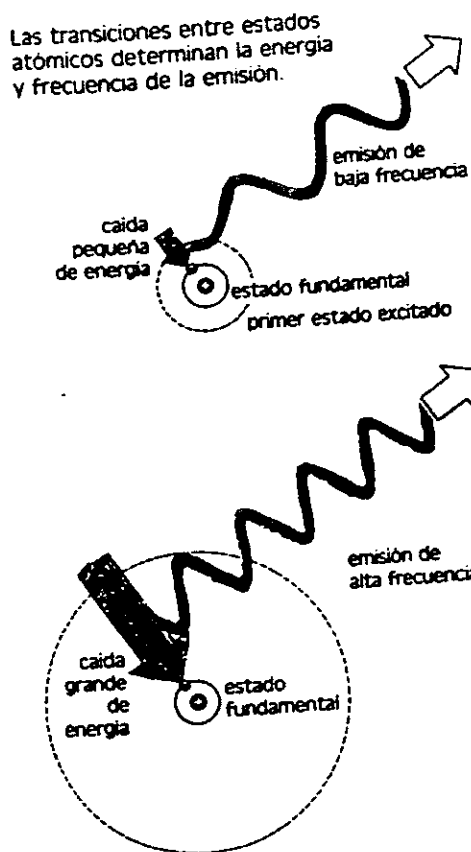


Fig. 2.15

2.9.2 Absorción Molecular

Los espectros de absorción de las moléculas poliatómicas, y en particular en estado condensado, son bastante más complejas que los espectros atómicos, porque el número de estados de energía de las moléculas es, en general, enorme si se compara con el número de átomos aislados. La energía E asociada a las bandas de una molécula viene dada por tres componentes:

$$E = E_{\text{electrónica}} + E_{\text{vibracional}} + E_{\text{rotacional}}$$

donde $E_{\text{electrónica}}$ representa la energía electrónica de la molécula que proviene de los estados energéticos de sus distintos electrones de enlace. El segundo término de la derecha se refiere a la energía total asociada con la multitud de vibraciones interatómicas que están presentes en las especies moleculares, en general, una molécula tiene muchos más niveles cuantizados de energía vibracional que niveles electrónicos, finalmente $E_{\text{rotacional}}$ indica la energía debida a los distintos movimientos rotacionales dentro de una molécula; de nuevo, el número de estados rotacionales es mucho mayor que el número de estados vibracionales, así pues, para cada estado de energía electrónica de una molécula

suelen existir varios estados vibracionales posibles y, a su vez, para cada uno de estos, son posibles numerosos estados rotacionales, en consecuencia, el número de posibles niveles de energía para una molécula suele ser varios órdenes de magnitud mayor que para un átomo.

La figura 2.16 [8] es una representación gráfica de las energías asociadas a unos pocos de los numerosos estados electrónicos, vibracionales y rotacionales de una molécula.

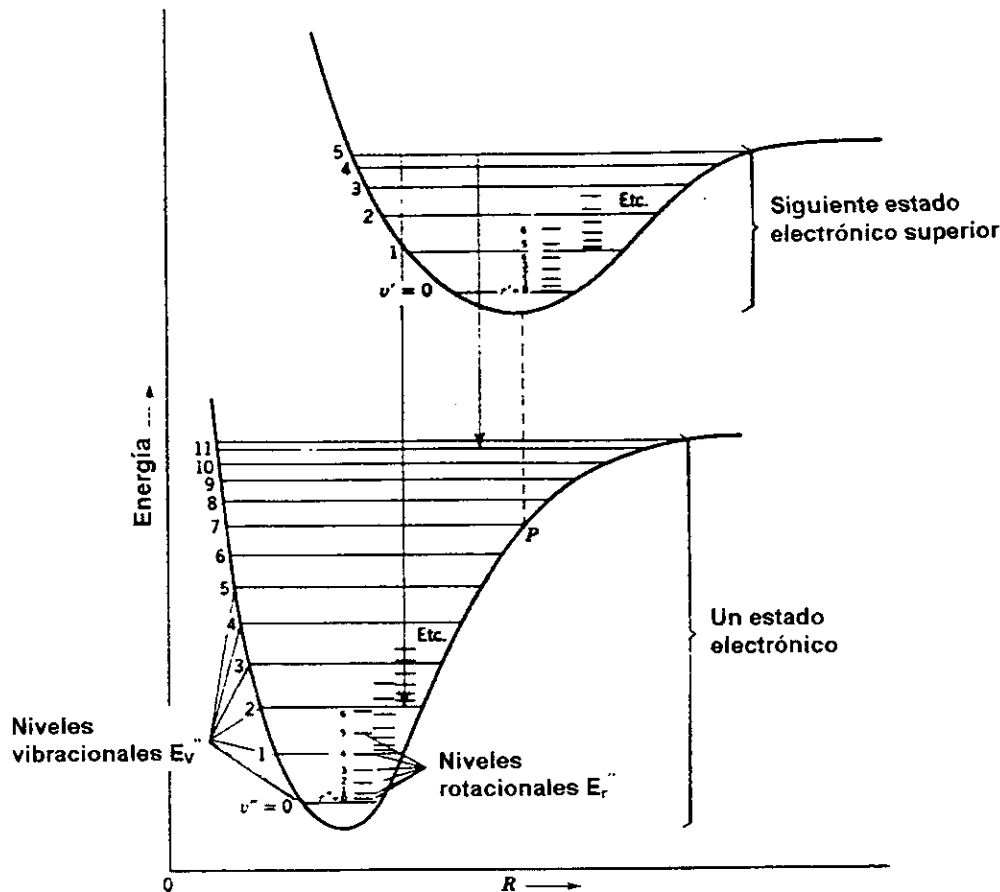


Fig. 2.16 Ilustración de la energía molecular como función de la separación internuclear para dos estados electrónicos. Cada estado electrónico posee su propio conjunto de niveles vibracionales, y cada nivel vibracional posee su propio conjunto de niveles rotacionales.

2.10 Ley de Snell

Suponiendo por el momento, que una onda llega a una interfase que separa dos medios diferentes (por ejemplo, una pieza de vidrio en el aire), se sabe por experiencia diaria que una parte de la densidad de flujo incidente será devuelta en la forma de una onda **reflejada**, mientras que el resto será transmitido a través de la frontera como una onda **refractada**, en escala microscópica se visualiza un conjunto de átomos que esparcen la energía radiante. El proceso de esparcimiento es responsable del índice de refracción tanto

como de las ondas reflejada y refractada resultantes. [14]

2.10.1 Rayos de luz

Un rayo es una línea en el espacio que corresponde a la dirección del flujo de la energía radiante, como tal, es un instrumento matemático más que una entidad física, hay que recordar que en un medio isotrópico, es decir, uno cuyas propiedades son las mismas en todas direcciones, los rayos son trayectorias ortogonales de los frentes de onda i.e. son líneas normales a los frentes

tes de onda en cada punto de intersección, evidentemente, en tal medio un rayo es paralelo al vector de propagación \mathbf{k} , (como podría sospecharse, esto no es verdad en sustancias anisotrópicas). Dentro de **materiales isotrópicos homogéneos** los rayos serán líneas rectas ya que por simetría no se pueden flexionar en ninguna dirección preferente, puesto que no hay ninguna. Además, como resultado del hecho de que la velocidad de propagación es la misma en todas direcciones dentro de un medio dado, la separación espacial entre dos frentes de onda medida a lo largo de los rayos debe ser la misma en todas partes.

Suponiendo que E_0 es constante en el tiempo, es decir que la onda es linealmente polarizada o polarizada en un plano. Además sin hacer suposiciones acerca de sus direcciones, frecuencias, longitudes de onda, fases o amplitudes, podemos escribir las ondas reflejada y transmitida como:

$$E_r = E_{0r} \cos(\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r} - \omega_r t + \varepsilon_r) \quad (2.15)$$

y

$$E_t = E_{0t} \cos(\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r} - \omega_t t + \varepsilon_t) \quad (2.16)$$

Aquí ε_r y ε_t son constantes de fase relativas a E_i que se introduce debido a que la posición del origen no es única. La figura 2.18 muestra las ondas en la vecindad de la interfase plana entre dos medios dieléctricos de índices n_i y n_t .

Las leyes de la teoría electromagnética establecen ciertos requisitos que deben satisfacer los campos, conocidos como **condiciones de frontera**.

2.10.2 Ondas en una interfase

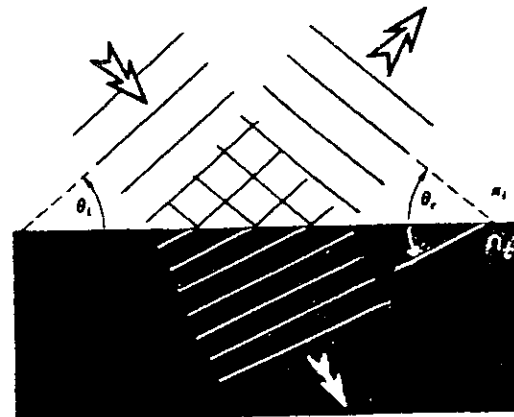
Suponiendo que la onda de luz monocromática incidente es plana y que por tanto tiene la forma:

$$E_i = E_{0i} e^{i(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)} \quad (2.17)$$

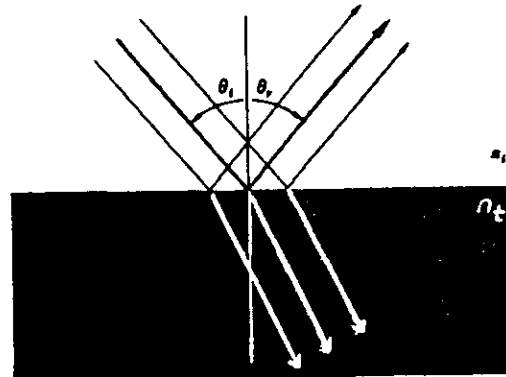
o más simplemente

$$E_i = E_{0i} \cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t) \quad (2.18)$$

Específicamente uno de estos requisitos es que la componente de la intensidad de campo eléctrico E , que es tangente a la interfase, debe ser continua a través de ella. En otras palabras, la componente tangencial total E en un lado de la superficie debe ser igual a la del otro lado.



Representación de la onda



Representación del rayo

Fig. 2.17 La onda y representaciones de rayos de un haz incidente, reflejado y transmitido.

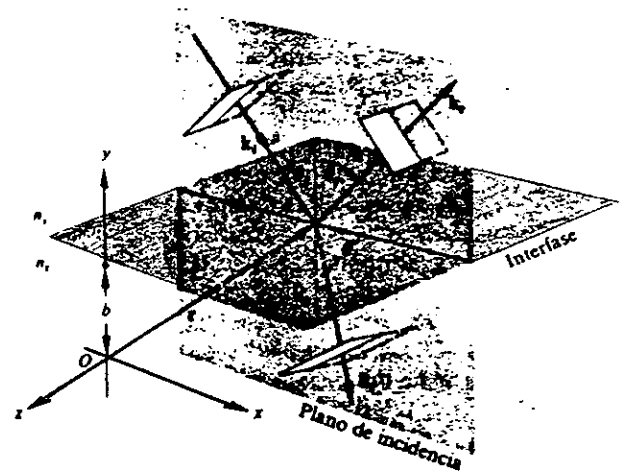


Fig. 2.18 Ondas planas incidentes en la frontera entre dos medios dieléctricos.

Entonces ya que \hat{u}_n es el vector unitario normal a la interfase

$$\hat{u}_n \times E_i + \hat{u}_n \times E_r = \hat{u}_n \times E_t \quad (2.19)$$

$$\hat{u}_n \times E_{0i} \cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t) + \hat{u}_n \times E_{0r} \cos(\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r} - \omega_r t + \varepsilon_r) = \hat{u}_n \times E_{0t} \cos(\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r} - \omega_t t + \varepsilon_t) \quad (2.20)$$

Esta relación se debe mantener en cualquier instante de tiempo y en todo punto de la interfase ($y = b$), consecuentemente, E_i , E_r y E_t deben tener precisamente la misma dependencia funcional de las variables t y r , lo cual quiere decir que:

$$\begin{aligned} (\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t)|_{y=b} + (\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r} - \omega_r t + \varepsilon_r)|_{y=b} &= \\ (\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r} - \omega_t t + \varepsilon_t)|_{y=b} & \end{aligned} \quad (2.21)$$

Con esto, los cosenos en la Ec. (2.20) se anularían dejando una expresión independiente de t y r , como en efecto debe ser. Como esto debe ser cierto para todos los valores del tiempo, los coeficientes de t deben ser iguales, obteniéndose:

$$\omega_i = \omega_r = \omega_t \quad (2.22)$$

Hay que recordar que los electrones dentro del medio están sujetos a vibraciones forzadas (lineales) a la frecuencia de la onda incidente, claramente, cualquier luz que sea esparcida tiene la misma frecuencia, además

$$(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_i t)|_{y=b} = (\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r}_r + \varepsilon_r)|_{y=b} = (\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t + \varepsilon_t)|_{y=b} \quad (2.23)$$

donde r termina en la interfase. Los valores de ε_r y ε_t corresponden a una posición dada de O y entonces ellos permiten que la relación sea válida independientemente de esa ubicación, de los últimos dos términos se obtiene:

$$[(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_t) \cdot \mathbf{r}]|_{y=b} = \varepsilon_t$$

y por consiguiente $(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_t)$ es normal a la interfase, entonces \mathbf{k}_i , \mathbf{k}_r , \mathbf{k}_t y \hat{u}_n son todas coplanares, las componentes tangenciales de \mathbf{k} y \mathbf{k}_t deben ser iguales y consecuentemente:

$$k_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t$$

pero como $\omega_i = \omega_t$, pueden multiplicarse ambos lados por c/ω_i para obtener:

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t$$

conocida como **Ley de Snell**.

2.11 Ecuaciones de Fresnel

Se acaba de encontrar la relación que existe entre las fases de $E_i(r,t)$, $E_r(r,t)$ y $E_t(r,t)$ en la frontera, hay aún una interdependencia compartida por las amplitudes $E_{0i}(r,t)$, $E_{0r}(r,t)$ y $E_{0t}(r,t)$ que ahora se pueden evaluar. Con ese fin hay que suponer que una onda monocromática plana incide en una superficie plana que separa dos medios isotrópicos. Cualquiera que sea la polarización de la onda, hay que resolver sus campos \mathbf{E} y \mathbf{B} en componentes paralelas y perpendiculares al plano de incidencia y tratar esas componentes separadamente.

Caso 1. \mathbf{E} perpendicular al plano de incidencia

Siendo \mathbf{E} perpendicular al plano de incidencia y \mathbf{B} paralelo a él (Fig. 2.19); se usará el hecho de que $\mathbf{E} = v\mathbf{B}$ de modo que:

$$\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E} = v\mathbf{B} \quad (2.24)$$

y por supuesto

$$\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r} = 0$$

es decir \mathbf{E} , \mathbf{B} y el vector de propagación forman un sistema derecho, haciendo uso de nuevo de la continuidad

de las componentes tangenciales del campo \mathbf{E} , se tiene que en la frontera en cualquier tiempo y en cualquier punto:

$$E_{0i} + E_{0r} = E_{0t} \quad (2.25)$$

donde los cosenos se anulan, obsérvese que, mientras E_i y E_r deben ser normales al plano de incidencia, por simetría, se está adivinando que ellos deben apuntar fuera de la interfase, cuando E_t lo hace. Las direcciones de los campos \mathbf{B} se derivan entonces de la Ec. (2.24) se necesita invocar otra de las condiciones en la frontera a fin de obtener una ecuación más, la presencia de sustancias materiales que son polarizadas eléctricamente por la onda tiene un efecto definido en la configuración del campo, entonces, mientras que la componente tangencial de \mathbf{E} es continua al pasar la frontera, su componente normal no lo es; en su lugar, la componente normal del producto $\varepsilon\mathbf{E}$ es la misma en cualquier lado de la interfase, similarmente, la componente normal de \mathbf{B} es continua, como lo es la componente tangencial de $\mu^{-1}\mathbf{B}$, aparece aquí el efecto de los dos medios a través de sus permeabilidades μ y μ_t , entonces, la continuidad de la componente tangencial de \mathbf{B}/μ requiere que:

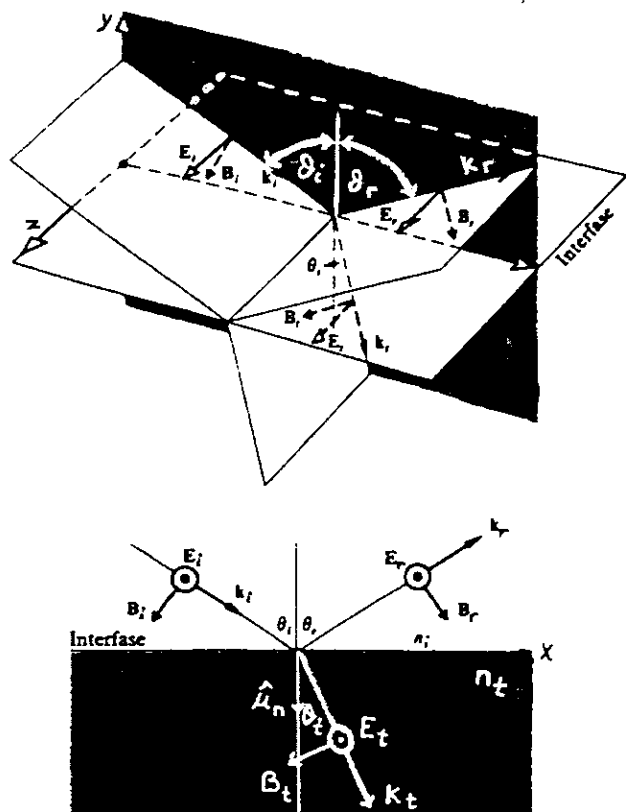


Fig. 2.19 Onda incidente cuyo campo E es normal al plano de incidencia.

$$-\frac{B_i}{\mu_i} \cos \theta_i + \frac{B_r}{\mu_i} \cos \theta_r = -\frac{B_t}{\mu_t} \cos \theta_t \quad (2.26)$$

donde los lados izquierdo y derecho son las magnitudes totales de B/μ paralelas a la interfase en los medios incidente y transmitido, respectivamente. La dirección positiva aquella en la que aumenta x de tal forma que las componentes de B_i y B_t aparecen con signo menos. De la ecuación $E = vB$ se tiene:

$$B_{i,r,t} = \frac{E_{i,r,t}}{v_{i,r,t}}$$

i = incidente; j = reflejado; t = transmitido

Entonces, ya que $v_i = v_r$ y $\theta_i = \theta_r$, la Ec. (2.26) se puede escribir como:

$$\frac{1}{\mu_i v_i} (E_i - E_r) \cos \theta_i = \frac{1}{\mu_t v_t} E_t \cos \theta_t$$

Haciendo uso de las Ecs. (2.18), (2.19) y (2.20) y recordando que los cosenos que aparecen ahí son iguales a uno en $y = 0$, se obtiene:

$$\frac{n_i}{\mu_i} (E_{0i} - E_{0r}) \cos \theta_i = \frac{n_t}{\mu_t} E_t \cos \theta_t$$

Combinando esto con la Ec. (2.25) y recordando que los medios con los que se trabaja son dieléctricos, para los cuales $\mu_i = \mu_t = \mu_0$ se obtiene:

$$r_{\perp} \equiv \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)_{\perp} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad (2.27)$$

y

$$t_{\perp} \equiv \left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right)_{\perp} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad (2.28)$$

El subíndice \perp sirve como recordatorio de que se está tratando el caso en el que E es perpendicular al plano de incidencia, estas dos expresiones, son afirmaciones completamente generales que se aplican a cualquier dieléctrico homogéneo, isotrópico lineal, son dos de las llamadas ecuaciones de Fresnel. [14]

Caso 2. E paralelo al plano de incidencia.

Aquí r_{\perp} denota la amplitud del coeficiente de reflexión, mientras que t_{\perp} es la amplitud del coeficiente de transmisión, se puede deducir un par similar de ecuaciones cuando el campo incidente E_i está en el plano de incidencia como se muestra en la figura 2.20, siendo las expresiones para el caso de un dieléctrico:

$$r_{\parallel} \equiv \left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)_{\parallel} = \frac{n_t \cos \theta_i - n_i \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad (2.29)$$

$$t_{\parallel} \equiv \left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right)_{\parallel} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad (2.30)$$

Usando la ley de Snell se puede hacer una simplificación adicional de la notación, por medio de la cual las ecuaciones de Fresnel para medios dieléctricos son:

$$r_{\perp} = -\frac{\sin(\theta_i - \theta_t)}{\sin(\theta_i + \theta_t)} \quad (2.31)$$

$$r_{\parallel} = +\frac{\tan(\theta_i - \theta_t)}{\tan(\theta_i + \theta_t)} \quad (2.32)$$

$$t_{\perp} = + \frac{2 \operatorname{sen} \theta_i \cos \theta_t}{\operatorname{sen}(\theta_i + \theta_t)} \quad (2.33)$$

$$t_{\parallel} = + \frac{2 \operatorname{sen} \theta_i \cos \theta_i}{\operatorname{sen}(\theta_i + \theta_t) \cos(\theta_i - \theta_t)} \quad (2.34)$$

Los signos que aparecen en las Ecs. (2.31) hasta (2.34), en este caso +, excepto el primero, corresponden al conjunto particular de direcciones de campo seleccionadas, el signo menos, como se verá, solamente significa que no se adivinó correctamente la dirección de E , en la figura 2.19, no obstante, hay que tener presente que la literatura no es uniforme y que se puede encontrar cualquier signo bajo el título de *Ecuaciones de Fresnel*, para evitar confusión, tales ecuaciones deben estar relacionadas con las direcciones específicas de los campos de las que fueron deducidas.

2.11.1 Interpretación de las ecuaciones de Fresnel

1) Coeficientes de Amplitud

Ahora se examinará brevemente la forma de los coeficientes de amplitud sobre el rango completo de valores de θ_i , en especial a incidencia normal.

A incidencia normal ($\theta_i \approx 0$) se obtiene:

$$[r_{\parallel}]_{\theta_i=0} = [-r_{\perp}]_{\theta_i=0} = \left[\frac{n_1 \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \right]_{\theta_i=0} \quad (2.35)$$

la cual se deriva de las Ecs. (2.66) y (2.68). En el límite, cuando $\theta_i \rightarrow 0$, $\cos \theta_i$ y $\cos \theta_t$ se acercan ambos a la unidad y consecuentemente,

$$[r_{\parallel}]_{\theta_i=0} = [-r_{\perp}]_{\theta_i=0} = \frac{n_t - n_i}{n_i + n_t} \quad (2.36)$$

Cuando $n_t > n_i$, se deduce de la ley de Snell que $\theta_t > \theta_i$ y así r_{\perp} es negativa para todos los valores de θ_i (Fig. 2.22), por el contrario, r_{\parallel} comienza siendo positiva en $\theta_i = 0$ y decrece gradualmente hasta que se anula cuando $(\theta_i + \theta_t) = 90^\circ$ ya que $\tan \pi/2$ es infinita, el valor particular para el cual esto ocurre se denota por θ_p y se conoce como el *ángulo de polarización*⁷. Cuando θ_i aumenta más allá de θ_p , r_{\parallel} se hace aún más negativa hasta llegar a -1.0 a los 90° .

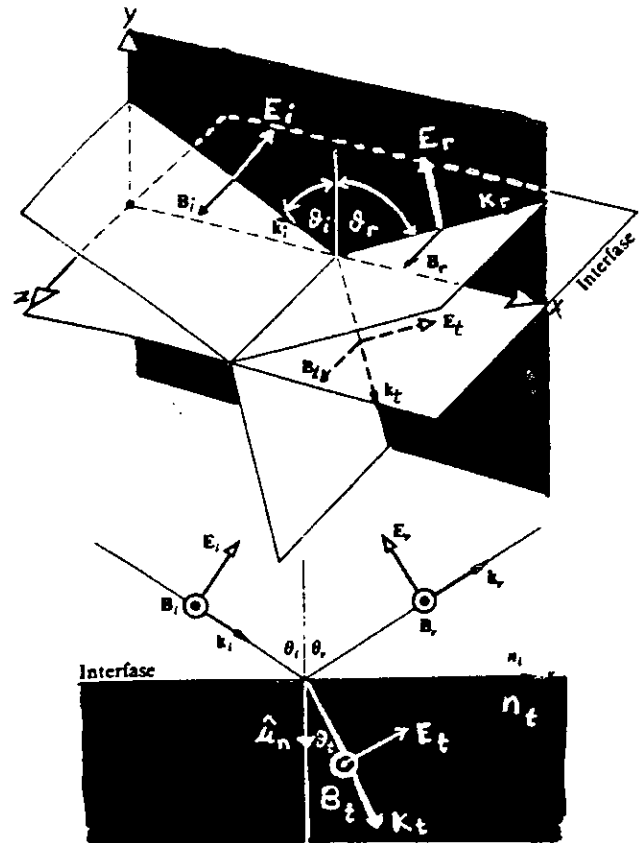


Fig. 2.20 Onda incidente cuyo campo E está en el plano de incidencia.

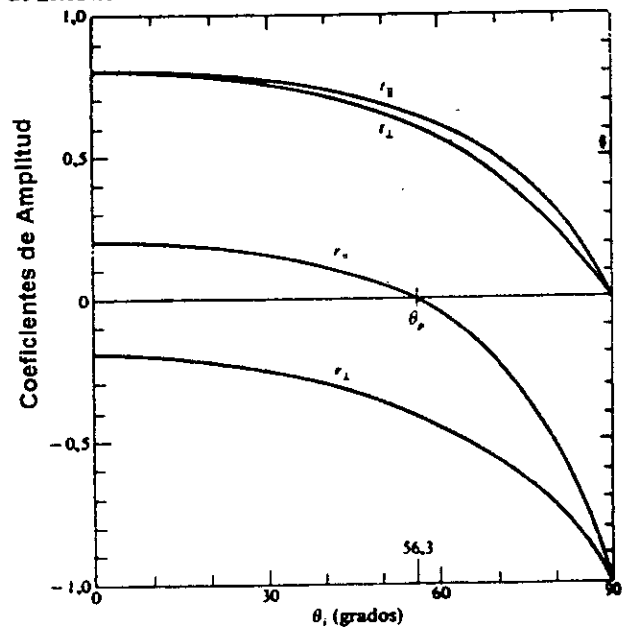


Fig. 2.21 Los coeficientes de amplitud de reflexión y transmisión como una función del ángulo de incidencia. Estos corresponden a reflexión externa $n_t > n_i$ en una interfase aire vidrio ($n_t = 1.5$).

⁷ Este ángulo de polarización se conoce también como ángulo de Brewster

A incidencia normal, las ecuaciones (2.28) y (2.29) llevan directamente, a:

$$[r_{\parallel}]_{\theta=0} = [-r_{\perp}]_{\theta=0} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (2.37)$$

La discusión anterior, en su mayor parte, esta restringida al caso de *reflexión externa* es decir $n_1 > n_2$, la situación opuesta de *reflexión interna* en la cual el medio incidente es más denso ($n_1 > n_2$), es ciertamente de interés, en ese caso $\theta_1 > \theta_2$ y r_{\perp} , como se describe en la Ec. (2.37), será simplemente positiva; r_{\perp} aumenta desde su valor inicial en $\theta_1 = 0$ llegando a más de uno en lo que se llama *ángulo crítico*. Específicamente, θ_c es el valor especial del ángulo de incidencia para el cual $\theta_2 = \pi/2$. En la misma forma, r_{\parallel} comienza negativamente en $\theta_1 = 0$ y después aumenta hasta llegar a más de uno en $\theta_1 = \theta_c$, como es evidente según la ecuación de Fresnel (2.29). Como antes r_{\parallel} pasa por cero en el ángulo de polarización θ_p .

2) Corrimientos de Fase

De la Ec. (2.31) se ve que r_{\perp} es negativa independientemente de θ cuando $n_1 > n_2$, entonces el signo de r_{\perp} está asociado con las direcciones relativas de $[E_{or}]_{\perp}$ y $[E_{or}]_{\perp}$, hay que recordar que una inversión de $[E_{or}]_{\perp}$, es equivalente a introducir un corrimiento de fase, $\Delta\phi_{\perp}$, de π radianes en $[E_{\perp}]_{\perp}$, por consiguiente, en la frontera $[E_{\perp}]_{\perp}$ y $[E_{\perp}]_{\perp}$ serán antiparalelos y por lo tanto fuera de fase en π uno respecto de otro, como lo indica el valor negativo de r_{\perp} . Cuando se consideran las componentes normales al plano de incidencia, no hay confusión sobre si los dos campos están en fase o π radianes fuera de fase; si son paralelos, están en fase; si son antiparalelos están π fuera de fase. Resumiendo entonces, la componente del campo eléctrico normal al plano de incidencia sufre un corrimiento de fase de π bajo reflexión cuando el medio incidente tiene un índice más bajo que el medio transmisor. Similarmente t_{\perp} y t_{\parallel} son siempre positivas y $\Delta\phi = 0$, además, cuando $n_1 > n_2$, no resulta corrimiento de fase en la componente normal al reflejarse, es decir $\Delta\phi_{\perp} = 0$ siempre que $\theta_1 < \theta_c$.

Las cosas son menos obvias cuando se consideran $[E_{\parallel}]_i$, $[E_{\parallel}]_r$ y $[E_{\parallel}]_t$, es necesario ahora definir más explícitamente lo que se quiere decir por *en fase* ya que los vectores de fase son coplanares pero generalmente no colineales. **Dos campos en el plano incidente están en fase si sus componentes son paralelas y fuera de fase si son antiparalelas**, Notese que cuando un par de campos E están fuera de fase, también lo están sus campos asociados B y viceversa, con esta definición, se necesita solamente ver los vectores normales al plano de incidencia, sean ellos E o B , para determinar la fase relativa de los campos acompañantes en el plano incidente, entonces en la figura 2.22 (a), E_i y E_t están en fase como lo están B_i y B_t , mientras que E_r y B_r están fuera de fase junto con B_i y B_r , similarmente,

en la figura 2.22 (b) E_i , E_r y E_t están en fase como lo están B_i , B_r y B_t .

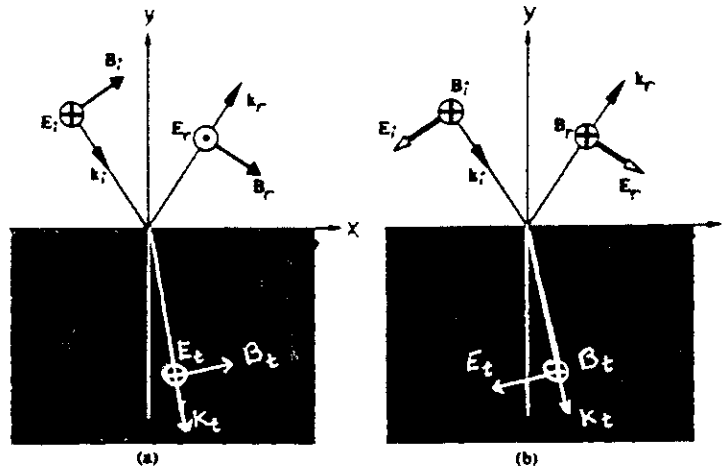


Fig. 2.22 Orientaciones del campo y corrimientos de fase.

Ahora, el coeficiente de amplitud de reflexión para la componente paralela está dado por:

$$r_{\parallel} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}$$

el cual es positivo ($\Delta\phi = 0$) siempre que

$$n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2 > 0$$

es decir, si

$$\sin \theta_1 \cos \theta_2 - \cos \theta_1 \sin \theta_2 > 0$$

o equivalentemente

$$\sin(\theta_1 - \theta_2) \cos(\theta_1 + \theta_2) > 0 \quad (2.38)$$

Este será el caso para el que $n_1 < n_2$ si

$$(\theta_1 + \theta_2) < \pi/2 \quad (2.39)$$

y para $n_1 > n_2$ cuando

$$(\theta_1 + \theta_2) > \pi/2 \quad (2.40)$$

Así, cuando $n_1 < n_2$, $[E_{or}]_{\parallel}$ y $[E_{o}]_{\parallel}$ estarán en fase ($\Delta\phi = 0$) hasta que $\theta_1 = \theta_p$ y fuera de fase en π radianes en de ahí en adelante. La transición no es en realidad discontinua ya que $[E_{or}]_{\parallel}$ va a cero en θ_p , por el contrario, para reflexión interna r_{\parallel} es negativa hasta θ_p , lo cual quiere decir que $\Delta\phi_r = \pi$. Desde θ_p a θ_c , r_{\parallel} es posi-

tiva y $\Delta\phi_{\parallel} = 0$, más allá de θ_c , r_{\parallel} se hace compleja y $\Delta\phi_{\parallel}$ aumenta gradualmente hasta π para $\theta_i = 90^\circ$, en la Fig. 2.23 se resumen estas conclusiones. La Fig. 2.23 (e) es una gráfica de los corrimientos de fase relativos entre las componentes paralela y perpendicular, es decir $\Delta\phi_{\parallel} - \Delta\phi_{\perp}$, finalmente muchas de las características esenciales de esta discusión se pueden mostrar sin ninguna ambigüedad en las figuras 2.25 y 2.26, ahí las amplitudes de los vectores reflejados están de acuerdo con las de la figura 2.21 (recuérdese que esto es para una interfase aire - vidrio) mientras que los corrimientos de fase están de acuerdo con los de la figura 2.23.

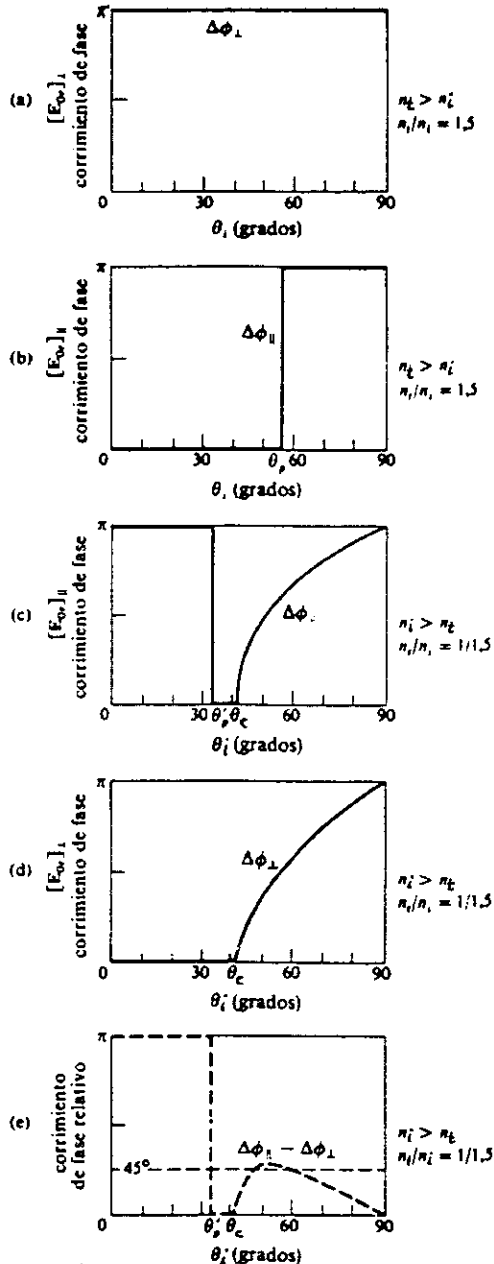


Fig. 2.23 Corrimientos de fase para las componentes paralelas y perpendicular del campo E que corresponden a reflexión interna y externa.

3) Reflectancia y Transmitancia

Estos temas serán tratados de forma recurrente a lo largo de la tesis, sobre todo la transmitancia; aquí se abordarán desde el punto de vista de las ecuaciones de Fresnel.

Recuérdese que la potencia por unidad de área que cruza una superficie en el vacío cuya normal es paralela a \mathbf{S} , está representada por el vector de Pointing, que es igual a:

$$\mathbf{S} = c^2 \epsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (2.41)$$

Además la densidad de flujo radiante (W/m^2) o irradiancia es entonces:

$$I = \langle \mathbf{S} \rangle = \frac{c \epsilon_0}{2} E_0^2 \quad (2.42)$$

Esta es la energía promedio por unidad de tiempo que cruza un área unitaria normal a \mathbf{S} (en medios isotrópicos \mathbf{S} es paralela a \mathbf{k}). En el caso en cuestión Fig. 2.24

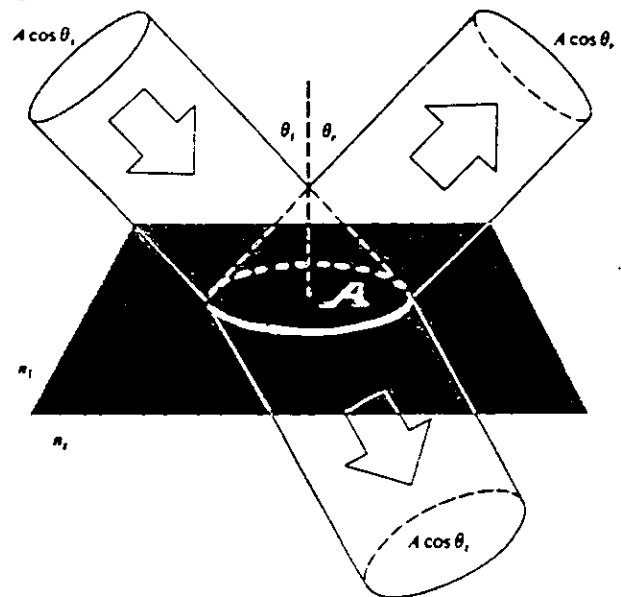


Fig. 2.24 Reflexión y Transmisión de un haz incidente.

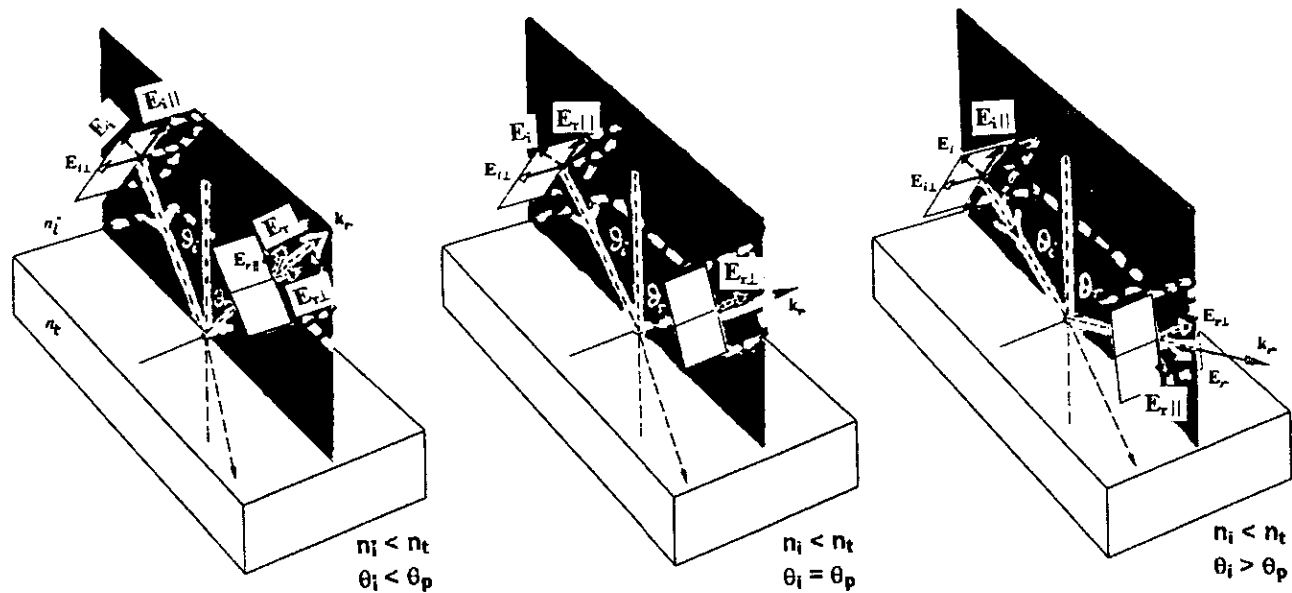


Fig. 2.25 El campo E reflejado con varios ángulos concomitantes con reflexión externa

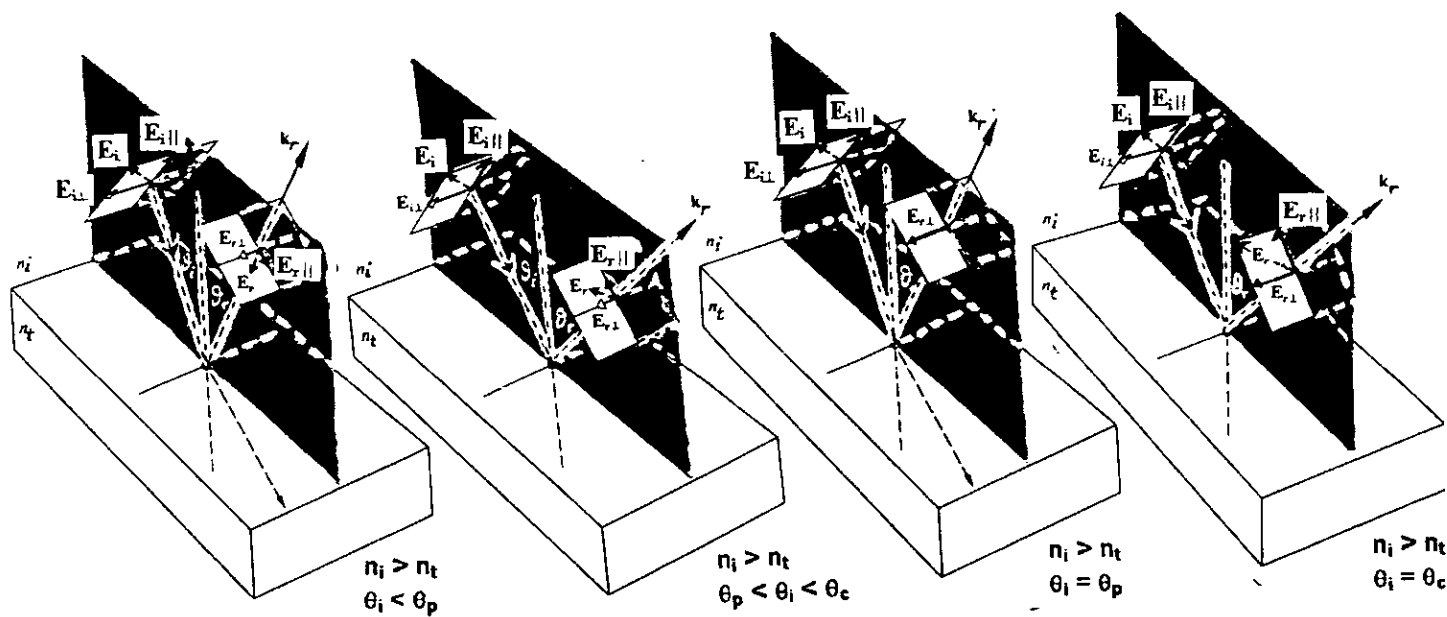


Fig. 2.26 El campo E reflejado con varios ángulos concomitantes con reflexión interna.

Sean I_i , I_r e I_t las densidades de flujo incidente, reflejado y transmitido respectivamente, luego, la porción de energía incidiendo normalmente en un área unitaria de la frontera por segundo es $I_i \cos \theta_i$, similarmente, $I_r \cos \theta_r$ e $I_t \cos \theta_t$ son las energías por segundo que salen de un área unitaria de la frontera normalmente en cada lado, la reflectancia R es la razón del flujo (o potencia) reflejado al incidente, es decir:

$$R = \frac{I_r \cos \theta_r}{I_i \cos \theta_i} = \frac{I_r}{I_i} = \left(\frac{E_{or}}{E_{oi}} \right)^2 = r^2 \quad (2.43)$$

La penúltima igualdad contando de izquierda a derecha se obtuvo debido a que I_r/I_i es igual a $(v_r \epsilon_r E_{or}^2/2)/(v_i \epsilon_i E_{oi}^2/2)$, y ya que las ondas reflejada e incidente están en el mismo medio $v_r = v_i$, $\epsilon_r = \epsilon_i$, mientras que la transmitancia T es la razón del flujo transmitido al incidente y está dada por:

$$T = \frac{I_t \cos \theta_t}{I_i \cos \theta_i} = \frac{I_t}{I_i} = \frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i} \left(\frac{E_{ot}}{E_{oi}} \right)^2 = \left(\frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i} \right) t^2 \quad (2.44)$$

Donde, en el penúltimo término, contando de izquierda a derecha se usó el hecho de que $\mu_o \epsilon_i = 1/v_i^2$ y $\mu_o v_r \epsilon_r = n_r/c$; y se supuso que $\mu_i = \mu_t = \mu_o$.

Ahora, una expresión que representa la conservación de la energía para la configuración que se muestra en la figura 2.24, en otras palabras, la energía total que llega al área A por unidad de tiempo, debe igualar a la energía que fluye fuera de ella por unidad de tiempo:

$$I_i A \cos \theta_i = I_r \cos \theta_r + I_t A \cos \theta_t$$

Es evidente aquí, como en la figura 2.17 que el área transversal del haz transmitido, $A \cos \theta_t$ es más grande que la de los haces incidente o reflejado (que son iguales), multiplicando ambos lados por c , esta expresión queda:

$$n_i E_{oi}^2 \cos \theta_i = n_i E_{or}^2 \cos \theta_i + n_t E_{ot}^2 \cos \theta_t \quad (2.45)$$

o

$$1 = \left(\frac{E_{or}}{E_{oi}} \right)^2 + \left(\frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i} \right) \left(\frac{E_{ot}}{E_{oi}} \right)^2 \quad (2.46)$$

Pero esto es simplemente: $R + T = 1$; donde no hay absorción, es conveniente usar las formas componentes, es decir:

$$R_{\perp} = r_{\perp}^2 \quad (2.47)$$

$$R_{\parallel} = r_{\parallel}^2 \quad (2.48)$$

$$T_{\perp} = \left(\frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i} \right) t_{\perp}^2 \quad (2.49)$$

$$T_{\parallel} = \left(\frac{n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i} \right) t_{\parallel}^2 \quad (2.50)$$

las cuales se ilustran en la figura 2.27. Además se cumple también que: $R_{\parallel} + T_{\parallel} = 1$ y $R_{\perp} + T_{\perp} = 1$.

Una característica interesante de estas curvas se verifica fácilmente, al menos cualitativamente, y ella es que ambas R_{\parallel} y R_{\perp} se acercan a uno cuando $\theta_i \rightarrow 90^\circ$. Esto implica que casi cualquier interfase dieléctrica muy lisa se comportará como un espejo para incidencia rasante.

Cuando $\theta_i = 0$ el plano incidente queda indefinido y cualquier distinción entre las componentes paralela y perpendicular de R y T desaparece. En este caso las Ecs. (2.46) hasta (2.49) junto con (2.36) y (2.37) llevan a:

$$R = R_{\parallel} = R_{\perp} = \left(\frac{n_t - n_i}{n_t + n_i} \right)^2$$

$$T = T_{\parallel} = T_{\perp} = \frac{4n_t n_i}{(n_t + n_i)^2}$$

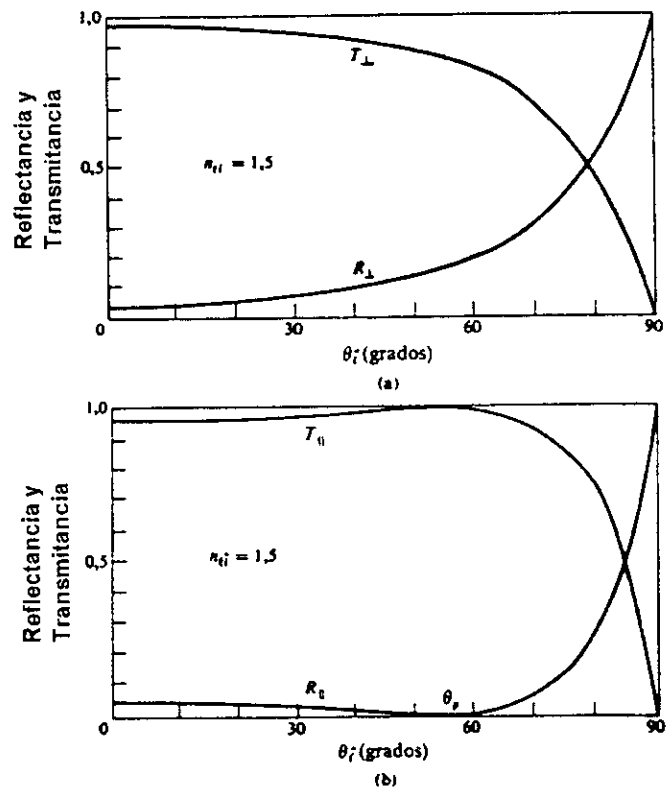


Fig. 2.27 Reflectancia y Transmitancia contra ángulo de incidencia.

2.12 Consideraciones Generales

El campo electromagnético E , varía sumamente rápido en el intervalo UV/VIS/NIR, aproximadamente 4.3×10^{14} Hz a 7.5×10^{14} Hz haciendolo prácticamente indetectable, por otro lado, la Intensidad I puede ser medida directamente usando una gran variedad de sensores (por ejemplo, fotoceldas, emulsiones fotográficas, ojos o como el utilizado en esta tesis con el espectrofotómetro, diodos fotodetectores etc.). Es por eso que al estudiar la **absorción** — y todos los parámetros de interés involucrados — es mejor abordarla desde el punto de vista de la **Intensidad**.

2.12.1 Transmitancia

Si se define como ϕ_0 la cantidad de luz que incide sobre un bloque, (i.e. la **Intensidad** del haz) y ϕ' la cantidad de luz que emerge, Fig. 2.28 [24]; puede especificarse **la razón de la cantidad de luz transmitida a la cantidad de luz incidente, ambas medidas con la misma longitud de onda como la transmitancia T** .

$$T = \frac{\phi}{\phi_0} \quad (2.51)$$

Suponiendo que el bloque se corta en una serie de rebanadas delgadas iguales, cada una de espesor Δx ; como todas son iguales, absorberán el mismo porcentaje de radiación.

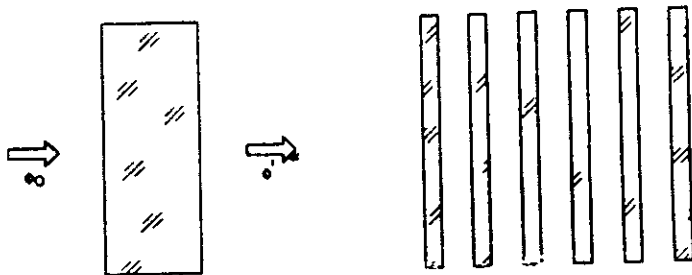


Fig. 2.28 Bloque de material absorbente (izquierda) y el mismo bloque partido en rebanadas delgadas (derecha)

Por simplicidad, se supone que el porcentaje perdido es del 50%; lo que significa que si el 100% de la radiación incide sobre la primera rebanada, solo el 50% emerge de ella para incidir sobre la segunda; si nuevamente 50% de la radiación se pierde, únicamente 25% (de la radiación total original) alcanza la tercera rebanada, 12.5% llega a la cuarta, 6.25% la quinta y así sucesivamente. En resumen, mientras los porcentajes absorbidos en cada rebanada son los mismos, las cantidades de radiación que inciden sobre cada una son progresivamente menores.

Graficando la cantidad de radiación que alcanza cierta profundidad, i.e., graficando la transmitancia como función del espesor, se obtiene la curva mostrada en la figura 2.29.

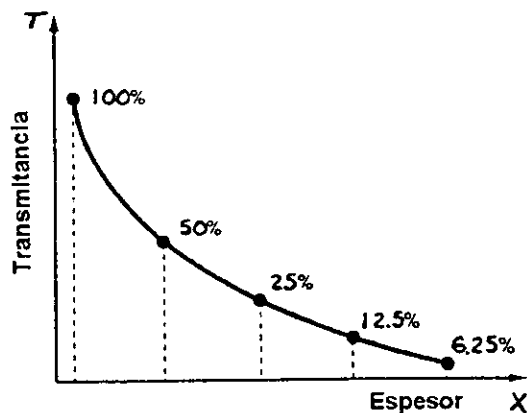


Fig. 2.29 Transmitancia como función del espesor.

2.12.2 Absorbancia

Los términos **Transmitancia y Absorbancia** pueden sonar compatibles, como si uno fuera el opuesto del otro, esto no es así, la transmitancia es un porcentaje, la absorbancia no. [22], [23]

La Absorbancia (antiguamente llamada "Densidad Óptica", término caído en desuso por su posible confusión con "densidad" la cual es masa por unidad de volumen), se define como: **el logaritmo en base 10 del inverso de la transmitancia**

$$A = \log_{10} \left(\frac{1}{T} \right) \quad (2.52)$$

Sustituyendo la ecuación (2.51) en (2.52) se obtiene que la absorbancia también puede definirse como:

$$A = \log_{10} \left(\frac{\phi_0}{\phi'} \right) \quad (2.53)$$

Graficando la absorbancia como función del espesor, se obtiene la curva mostrada en la figura 2.30

Tabla 2.2

Términos y símbolos importantes utilizados en las mediciones de absorción

Término y Símbolo	Definición	Nombre alternativo y símbolo
Potencia P', P _o	Energía (en Joules) de la radiación incidente en el detector, por m ² y por segundo	Intensidad de radiación, I', I _o
Absorbancia: A	$\log \frac{P_o}{P'}$	Densidad Óptica ^[2] , D, extinción E
Transmitancia: T	$\frac{P'}{P_o}$	Transmisión, T
Longitud de la trayectoria de la radiación en cm, mm, nm etc.: x		l, d
Absortividad: α	$\alpha = 23026 \frac{A}{x}$	Absorbancia ^[1] ; Coeficiente de absorción ^[2] , Coeficiente de extinción ^[3] , k;
Absortividad molar ^(a) , ε	$\epsilon = \frac{A}{xc}$	Coeficiente de extinción molar

^(a) c se expresa en unidades de mol/L y x en cm.

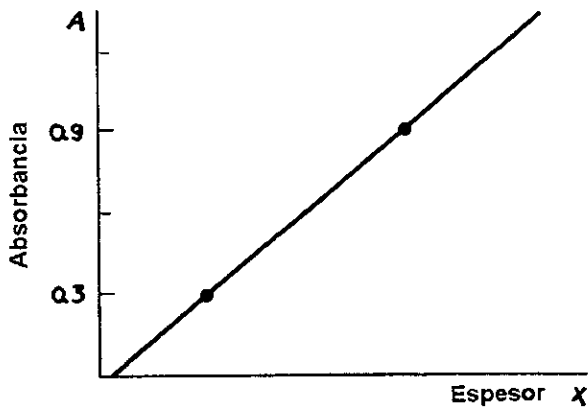


Fig. 2.30 Absorbancia como función del espesor.

La linealidad de la curva de la absorbancia significa que es aditiva mientras que la transmitancia es multiplicativa, juntando varios filtros, la absorbancia total es igual a la suma de sus absorbancias individuales, pero su transmitancia sería igual al producto de sus transmitancias individuales.

En la tabla 2.3 [24] se dan algunas conversiones útiles, obtenidas con la ecuación 2.32

Tabla 2.3

T % Transmitancia	A Absorbancia
100	0.0000
95	0.0223
90	0.0458
85	0.0706
80	0.0969
75	0.1249
70	0.1549
65	0.1871
60	0.2218
55	0.2596
50	0.3010
45	0.3468
40	0.3979
35	0.4559
30	0.5229
25	0.6021
20	0.6990
15	0.8239
10	1.0000
5	1.3010
1	2.0000
0.1	3.0000
0	∞ (opaco)

2.12.3 Ley Exponencial de Bouguer - Lambert

Si el bloque de la figura 2.28 es de estructura uniforme, entonces en cada rebanada una cierta cantidad de radiación se pierde:

$$\phi_0 - \phi' = \Delta\phi$$

La magnitud de la pérdida es proporcional a la cantidad de radiación incidente, ϕ_0 , a una constante de proporcionalidad α llamada **absortividad**, y al espesor de la rebanada Δx :

$$\Delta\phi = -\phi_0\alpha\Delta x \quad (2.54)$$

el signo menos establece que se lleva a cabo una pérdida de radiación. La **absortividad (anteriormente "coeficiente de absorción")** es característico de cada material y a la vez función de la longitud de onda λ , haciendo el espesor Δx tender a cero, la razón $\Delta\phi/\phi_0$ se transforma en:

$$\frac{d\phi}{\phi_0} = -\alpha dx \quad (2.55)$$

para obtener el total de la radiación absorbida (dentro del bloque de espesor x) integrando la ecuación (2.55) entre los límites de ϕ y x , i.e.

$$\int_{\phi_0}^{\phi'} \frac{d\phi}{\phi} = -\alpha \int_0^x dx \quad (2.56)$$

se obtiene: $\log_e \left(\frac{\phi'}{\phi_0} \right) = -\alpha x \quad (2.57)$

y por lo tanto: $\frac{\phi'}{\phi_0} = e^{-\alpha x}$ lo que implica:

$$\phi' = \phi_0 e^{-\alpha x} \quad (2.58)$$

que se conoce como **ley exponencial de la absorción**, encontrada primero por **Bouguer** en 1729 y posteriormente reformada por **Lambert**. Al obtener la ley exponencial, la integración dió como resultado logaritmos naturales o neperianos (en base e), pero la absorción esta definida en función de logaritmos comunes (en base 10), para convertir uno en otro y viceversa se usan las identidades

$$\log_e x = (2.3026\dots) \log_{10} x$$

$$\log_{10} x = (0.4343\dots) \log_e x$$

esto proporciona un conjunto de ecuaciones que se usan con frecuencia:

$$A = \log_{10} \left(\frac{\phi_0}{\phi'} \right)$$

$$A = 0.4343\alpha x \quad (2.59)$$

$$T = \frac{1}{10^A}$$

$$\alpha = 2.3026 \frac{A}{x}$$

2.13 Aplicación del método matricial para la evaluación de la reflectancia y transmitancia de sistemas de películas delgadas

Notación

- Para indicar la dirección de propagación de los campos eléctricos y magnéticos se pondrá un subíndice + ó - si la onda viaja en el sentido positivo o negativo con respecto a una dirección fija (usualmente la normal a la película o sistema de películas).
- Para especificar la dirección del plano de polarización será suficiente especificar si es paralelo o perpendicular al plano de incidencia, para ello, se utilizarán los ya conocidos \perp y \parallel .

En el sistema de n películas mostrado en la figura 2.31, las componentes x y y de E y H en la m -ésima película son:

$$\begin{aligned} E_{mx} &= (E_{m\parallel}^+ e^{-ik_m z} + E_{m\parallel}^- e^{+ik_m z}) \cos \phi_m \\ E_{my} &= E_{m\perp}^+ e^{-ik_m z} + E_{m\perp}^- e^{+ik_m z} \\ H_{mx} &= (-E_{m\perp}^+ e^{-ik_m z} + E_{m\perp}^- e^{+ik_m z}) n_m \cos \phi_m \\ H_{my} &= (E_{m\parallel}^+ e^{-ik_m z} - E_{m\parallel}^- e^{+ik_m z}) n_m \end{aligned} \quad (2.60)$$

donde $\kappa_m = \frac{2\pi n_m \cos \phi_m}{\lambda}$

Escribiendo $c_m = \sum_{i=1}^{m-1} d_i$ se obtiene para la m -ésima superficie que separa la $(m-1)$ -ésima película de la m -ésima película para la componente paralela:

$$\begin{aligned} (E_{m-1\parallel}^+ e^{-ik_{m-1} c_m} + E_{m-1\parallel}^- e^{+ik_{m-1} c_m}) \cos \phi_{m-1} = \\ (E_{m\parallel}^+ e^{-ik_m c_m} + E_{m\parallel}^- e^{+ik_m c_m}) \cos \phi_m \end{aligned} \quad (2.61a)$$

$$\begin{aligned} n_{m-1} (E_{m-1\perp}^+ e^{-ik_{m-1} c_m} - E_{m-1\perp}^- e^{+ik_{m-1} c_m}) = \\ n_m (E_{m\perp}^+ e^{-ik_m c_m} - E_{m\perp}^- e^{+ik_m c_m}) \end{aligned} \quad (2.61b)$$

y para la componente perpendicular.

$$E_{m-1,\perp}^+ e^{-ik_{m-1}c_m} + E_{m-1,\perp}^- e^{+ik_{m-1}c_m} = E_{m,\perp}^+ e^{-ik_m c_m} + E_{m,\perp}^- e^{+ik_m c_m} \quad (2.62a)$$

$$\begin{aligned} & (-E_{m-1,\perp}^+ e^{-ik_{m-1}c_m} + E_{m-1,\perp}^- e^{+ik_{m-1}c_m}) n_{m-1} \cos \phi_{m-1} = \\ & (-E_{m,\perp}^+ e^{-ik_m c_m} + E_{m,\perp}^- e^{+ik_m c_m}) n_m \cos \phi_m \end{aligned} \quad (2.62b)$$

Estas ecuaciones pueden ser reescritas en términos de los coeficientes de Fresnel y así, la forma de las ecuaciones para las componentes perpendicular (\perp) y paralela (\parallel) serán idénticas, por lo que los sufijos (\perp , \parallel) se eliminarán. Debe recordar que el valor de los coeficientes de Fresnel depende del plano de polarización considerado y que el valor apropiado de las ecuaciones 2.27, 2.28, 2.29 y 2.30 es el que debe ser usado.

A partir de las ecuaciones 2.61 y 2.62 usando los valores de r y t definidos en la sección 2.12, se obtienen:

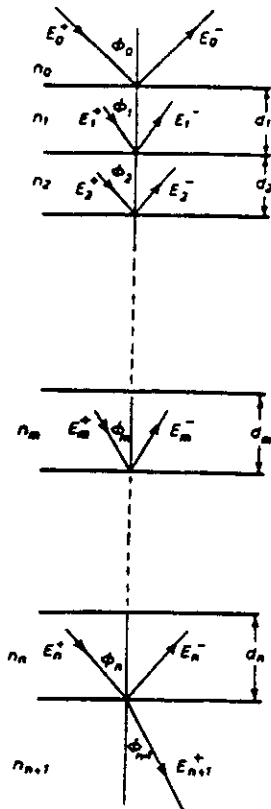


Fig. 2.31

$$E_{m-1}^+ e^{-ik_{m-1}c_m} = \frac{(E_m^+ e^{-ik_m c_m} + r_m E_m^- e^{+ik_m c_m})}{t_m} \quad (2.65)$$

$$E_{m-1}^- e^{+ik_{m-1}c_m} = \frac{(r_m E_m^+ e^{-ik_m c_m} + E_m^- e^{+ik_m c_m})}{t_m}$$

escribiendo $\delta_m = k_m c_m$ y haciendo un cambio de origen, las ecuaciones 2.65 tomarán la forma simplificada:

$$E_{m-1}^+ = \frac{(e^{i\delta_{m-1}} E_m^+ + r_m e^{i\delta_{m-1}} E_m^-)}{t_m} \quad (2.66)$$

$$E_{m-1}^- = \frac{(r_m e^{-i\delta_{m-1}} E_m^+ + e^{-i\delta_{m-1}} E_m^-)}{t_m}$$

y la matriz de recurrencia que relaciona a estas dos ecuaciones es:

$$\begin{pmatrix} E_{m-1}^+ \\ E_{m-1}^- \end{pmatrix} = \frac{1}{t_m} \begin{pmatrix} e^{i\delta_{m-1}} & r_m e^{i\delta_{m-1}} \\ r_m e^{-i\delta_{m-1}} & e^{-i\delta_{m-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_m^+ \\ E_m^- \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

para un sistema de n películas se requiere saber la relación entre E_{n+1}^- y E_0^+ para obtener el coeficiente de transmisión, así como la relación entre E_0^- y E_0^+ para el coeficiente de reflexión, esto se obtendrá a partir de 2.67:

$$\begin{pmatrix} E_0^- \\ E_0^+ \end{pmatrix} = \frac{(C_1)(C_2) \cdots (C_{n+1})}{t_1 t_2 \cdots t_{n+1}} \begin{pmatrix} E_{n+1}^+ \\ E_{n+1}^- \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

donde

$$(C_m) = \begin{pmatrix} e^{i\delta_{m-1}} & r_m e^{i\delta_{m-1}} \\ r_m e^{-i\delta_{m-1}} & e^{-i\delta_{m-1}} \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

Si se expresan E_0^- y E_{n+1}^- en términos de E_0^+ se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión. En primer lugar hay que notar que no existe una onda que vaya en el sentido negativo en el $(n+1)$ medio, así que se igualará $E_{n+1}^- = 0$. Reescribiendo el producto matricial como:

$$(C_1)(C_2) \cdots (C_{n+1}) = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

se obtiene a partir de (2.68)

$$r = \frac{E_0^-}{E_0^+} = \frac{c}{a} \quad \text{y} \quad t = \frac{E_{n+1}^+}{E_0^+} = \frac{t_1 t_2 \cdots t_{n+1}}{a} \quad (2.71)$$

La reflectancia y transmitancia serán entonces:

$$R = \frac{(E_0^-)(E_0^-)^*}{(E_0^+)(E_0^+)^*} \quad \text{y} \quad T = \frac{n_{n+1} (E_{n+1}^+)(E_{n+1}^+)^*}{n_0 (E_0^+)(E_0^+)^*} \quad (2.72)$$

así que:

$$E_y(z,t) = jE_{oy} \cos(kz - \omega t + \varepsilon) \quad (2.79)$$

donde ε es la diferencia de fase relativa entre las ondas, ambas viajando en la dirección z , la perturbación óptica resultante es entonces simplemente:

$$E(z,t) = E_x(z,t) + E_y(z,t) \quad (2.80)$$

Si ε es cero o un entero múltiplo de $\pm 2\pi$, se dice que las ondas están en fase; la onda resultante tiene por consiguiente una amplitud fija igual a $(iE_{ox} + jE_{oy})$, es decir es también linealmente polarizada como se muestra en la figura 2.33. Si ε es un entero impar, múltiplo de π se dice que las ondas están 180° fuera de fase, pero de nuevo, la onda resultante estará linealmente polarizada con el plano de vibración ha rotado en 90° como se indica en la figura 2.34. Este proceso puede llevarse igualmente a cabo a la inversa, es decir, es posible resolver cualquier onda linealmente polarizada en dos componentes ortogonales.

2.14.2 Polarización Circular

Otro caso especial de interés particular aparece cuando ambas ondas constitutivas tienen igual amplitud, es decir, $E_{ox} = E_{oy} = E_o$ y además, su diferencia de fase relativa $\varepsilon = -\pi/2 + 2m\pi$ donde $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ i.e. ($\varepsilon = 0, 3\pi/2, 7\pi/2, \dots$) Por lo tanto

$$E_x(z,t) = iE_o \cos(kz - \omega t) \quad (2.81)$$

y

$$E_y(z,t) = jE_o \sin(kz - \omega t) \quad (2.82)$$

Por consiguiente la onda resultante está dada por:

$$E = E_o[i \cos(kz - \omega t) + j \sin(kz - \omega t)]$$

ver Fig. 2.34

Obsérvese ahora la amplitud escalar de E , la cual es igual a E_o , es una constante, pero la dirección de E es variable con el tiempo y no está restringida como antes a un solo plano. La figura 2.35 muestra lo que está sucediendo en algún punto arbitrario z_o en el eje; el vector del campo eléctrico resultante E está rotando en la dirección de las manecillas del reloj con una frecuencia ω visto por un observador hacia quien la onda se está moviendo, tal onda tiene **polarización circular derecha** (Fig. 2.36) y uno generalmente se refiere simplemente a ella como **luz circular derecha**, el vector E hace una rotación completa cuando la onda avanza una longitud de onda, si por el contrario, E gira en sentido contrario a las manecillas del reloj, la onda tiene **polarización circular izquierda**.

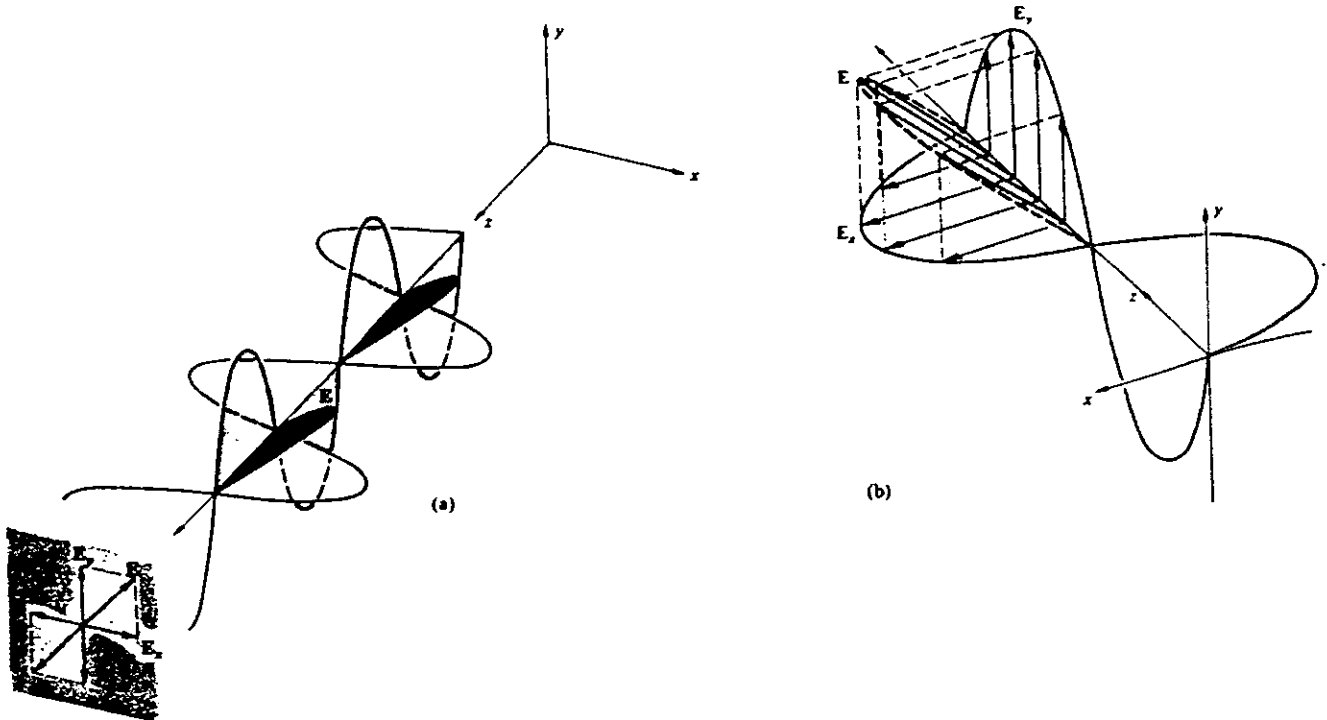


Fig. 2.33 Luz Lineal.

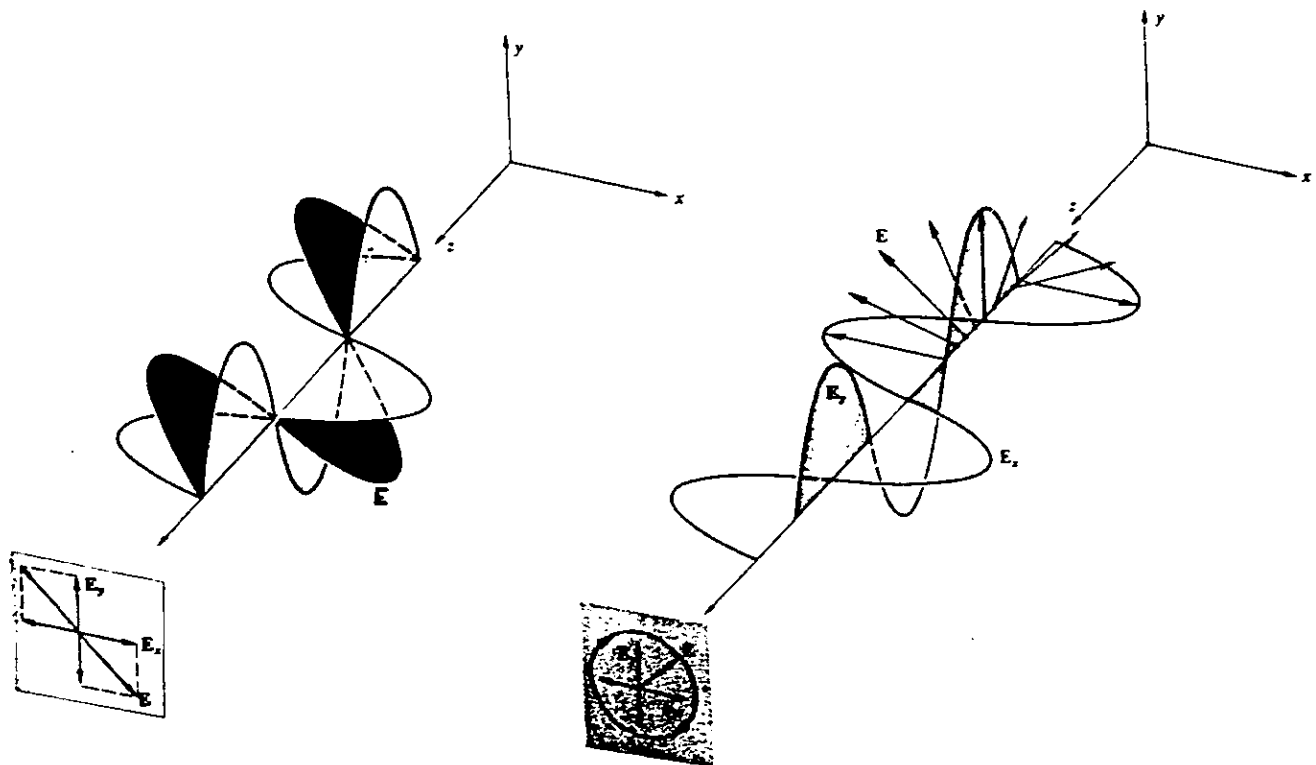


Fig. 2.34 Luz lineal y luz circular derecha.

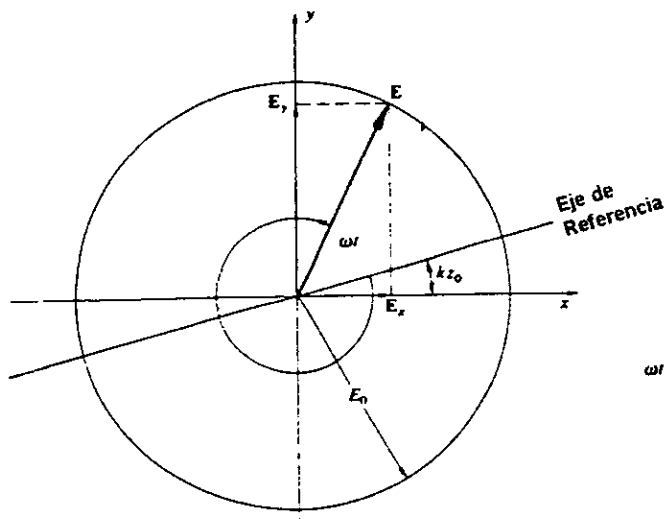


Fig. 2.35 Rotación del vector eléctrico en una onda circular derecha. Obsérvese que la velocidad de rotación es ω y $kz = \pi/4$.

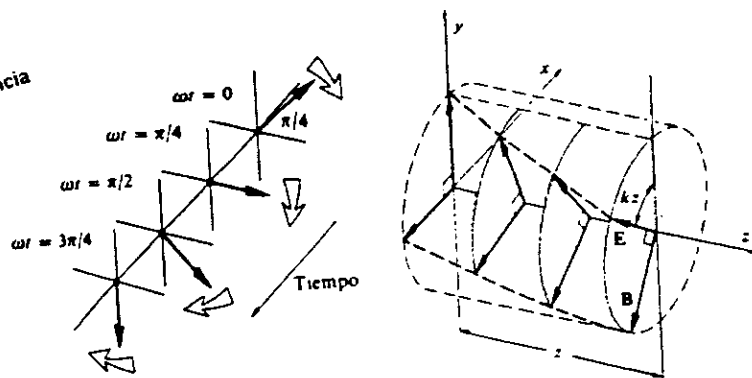


Fig. 2.36 Luz circular derecha.

2.14.3 Polarización Elíptica

Por lo que a la descripción matemática se refiere tanto la luz lineal como circular se pueden considerar como casos especiales de **luz elípticamente polarizada** o más simplemente **luz elíptica**, con esto se quiere decir que, en general, el vector campo eléctrico resultante E rotará y cambiará su magnitud, en tales casos, el extremo de E trazará una elipse, en un plano fijo perpendicular a k , cuando la onda avanza, puede verse mejor esto escribiendo una expresión para la curva trazada por la punta de E , con este fin se tienen:

$$E_x = E_{ox} \cos(kz - \omega t) \quad (2.83)$$

y

$$E_y = E_{oy} \cos(kz - \omega t + \epsilon) \quad (2.84)$$

La ecuación de la curva que se busca después de muchas manipulaciones matemáticas es:

$$\left(\frac{E_y}{E_{oy}}\right)^2 + \left(\frac{E_x}{E_{ox}}\right)^2 - 2\left(\frac{E_x}{E_{ox}}\right)\left(\frac{E_y}{E_{oy}}\right) \cos \epsilon = \sin^2 \epsilon \quad (2.85)$$

Esta es la ecuación de una elipse que hace un ángulo α con el sistema coordenado (E_x, E_y) Fig. 2.37 tal que

$$\tan 2\alpha = \frac{2E_{ox}E_{oy} \cos \epsilon}{E_{ox}^2 - E_{oy}^2} \quad (2.86)$$

La Ec. (2.85) debería ser un poco más reconocible si los ejes principales de la elipse estuvieran alineados con los ejes coordenados, es decir, $\alpha = 0$ o equivalentemente $\epsilon = \pm \pi/2, \pm 3\pi/2, \pm 5\pi/2, \dots$, en cuyos casos se tiene la forma familiar:

$$\frac{E_y^2}{E_{oy}^2} + \frac{E_x^2}{E_{ox}^2} = 1 \quad (2.87)$$

Además, si $E_{oy} = E_{ox} = E_0$ esto se reduce a:

$$E_y^2 + E_x^2 = E_0^2$$

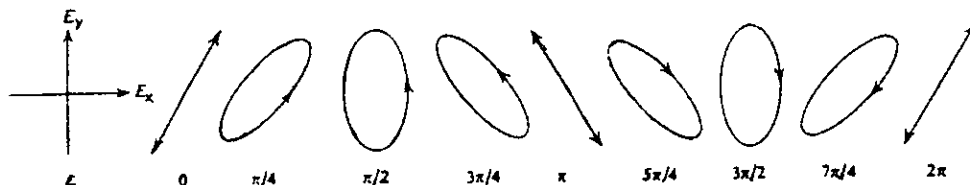
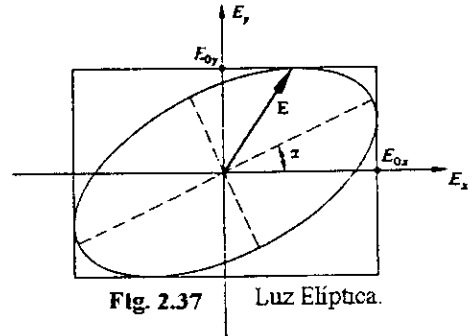


Fig. 2.38 Varias configuraciones de polarización que corresponden a valores específicos de ϵ . Aquí E_x aventaja a E_y en ϵ .

la cual es la ecuación de un círculo, si ϵ es un múltiplo par o impar de π la ecuación (2.85) resulta en

$$E_y = \pm \frac{E_{oy}}{E_{ox}} E_x$$

Ambas son líneas rectas con pendientes $\pm E_{oy}/E_{ox}$ por lo que se tiene luz lineal, la Fig. 2.38 resume mediante un diagrama la mayor parte de estas conclusiones.



Ahora se está en posición de referirse a una onda de luz particular en términos de su **estado específico de polarización**, se dice que la luz lineal o polarizada en un plano está en un estado P , mientras que la luz circular derecha o izquierda está en estado R o L , respectivamente, similarmente, la condición de polarización elíptica corresponde a un estado E , ya se ha visto que un estado P puede representarse como una superposición de estados R y L , lo mismo es cierto para un estado E , en este caso, como se ve en la figura 2.39, las amplitudes de las dos ondas circulares son diferentes.

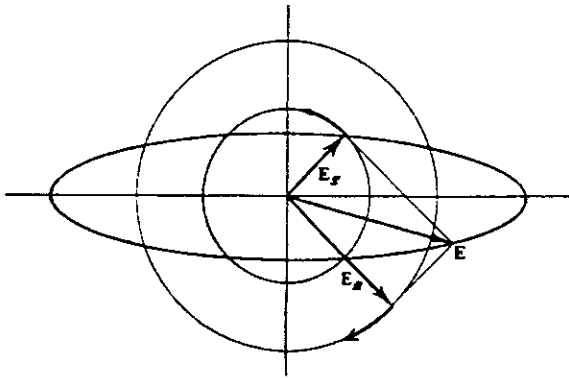


Fig. 2.39 Luz elíptica como superposición de un estado R y uno L.

2.15 Polarizadores

Ahora que se tiene alguna idea de lo que es la luz polarizada, el siguiente paso es desarrollar un entendimiento de las técnicas usadas para generarla, cambiarla y en general manipularla para ajustarla a nuestras necesidades. Un aparato óptico cuya entrada es luz natural y cuya salida es alguna forma de luz polarizada se conoce como **polarizador**. Un instrumento que separa dos componentes, descartando una y dejando pasar la otra, se conoce como **polarizador lineal**. Dependiendo de la forma de la salida podría también tenerse **polarizadores circulares o elípticos**. Todos estos sistemas varían en efectividad hasta lo que podría llamarse polarizadores parciales o con fugas. Los polarizadores toman configuraciones muy diferentes como veremos, pero todos ellos están basados en uno de cuatro mecanismos físicos fundamentales: dicroísmo o absorción selectiva, reflexión, esparcimiento y birrefringencia o doble refracción, hay, sin embargo, una propiedad fundamental que todos comparten y es simplemente que debe haber alguna forma de asimetría asociada con el proceso. Esto es ciertamente comprensible ya que el polarizador debe de alguna manera seleccionar un estado de polarización particular y descartar todos los otros, la asimetría puede ser una sutileza relacionada con el ángulo de visión o de incidencia pero más comúnmente es una anisotropía relacionada en el material del polarizador mismo.

2.16 Ley de Malus

Por definición, si la luz natural incide en un polarizador lineal ideal como el de la Fig. 2.40 solamente la luz en un estado P será transmitida, ese estado P tendrá una orientación paralela específica que se llamará el **eje de transmisión del polarizador**, en otras palabras, solo la componente del campo óptico paralela al eje de transmisión pasará a través del sistema sin afectarse esencialmente; si el polarizador en la

Fig. 2.41 se gira alrededor del eje z, la lectura en el detector (por ejemplo, una fotocelda) permanecerá sin cambio debido a la simetría completa de la luz no polarizada.

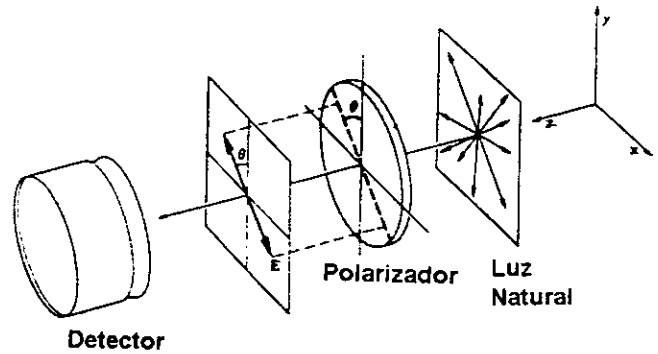


Fig. 2.40 Polarizador Lineal.

Recuérdese que se está tratando con ondas pero debido a la frecuencia tan elevada de la luz, el detector, por razones prácticas medirá sólo la irradiancia incidente, ya que la irradiancia es proporcional al cuadrado de la amplitud del campo eléctrico [Ec. (2.42)] solo hay que preocuparse por la amplitud.

Ahora supongase que se introduce un segundo polarizador ideal idéntico, o **analizador**, cuyo eje de transmisión es vertical Fig. 2.41, si la amplitud del campo eléctrico transmitido por el polarizador es E_0 , solamente su componente $E_0 \cos \theta$, paralela al eje de transmisión del analizador, pasará hacia el detector (suponiendo que no hay absorción). De acuerdo con la Ec. (2.42) la irradiancia que llega al detector está dada por:

$$I(\theta) = \frac{cE_0}{2} E_0^2 \cos^2 \theta \quad (2.88)$$

2.17 Dicroísmo

En un sentido amplio el término dicroísmo se refiere a la absorción selectiva de una de las dos componentes ortogonales en el estado P de un haz incidente. El polarizador dicroico es en sí mismo físicamente anisotrópico, produciendo una fuerte asimetría o absorción preferencial de una componente del campo mientras que es esencialmente para la otra.

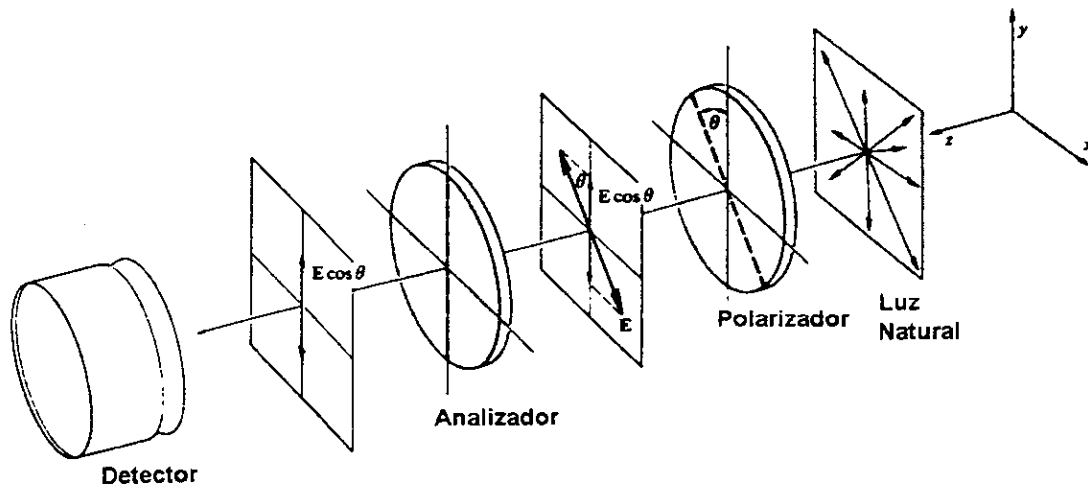


Fig. 2.41 Polarizador Lineal y Analizador. — Ley de Malus.

La irradiancia máxima, $I(0) = c\epsilon_0 E_0^2/2$, ocurre cuando el ángulo θ entre los ejes de transmisión del analizador y el polarizador es cero. Por lo tanto, la Ec. (2.89) se puede escribir como:

$$I(\theta) = I(0) \cos^2 \theta \quad (2.89)$$

Esto se conoce como la *Ley de Malus*, la cual fue publicada por primera vez en 1809 por Etienne Malus, un ingeniero militar y capitán del ejército de Napoleón. Obsérvese que $I(90^\circ) = 0$, esto surge del hecho de que el campo eléctrico que ha pasado a través del polarizador es perpendicular al eje del analizador (las dos componentes así arregladas están *cruzadas*). El campo es por consiguiente paralelo a lo que se llama el *eje de extinción* del analizador y por consiguiente obviamente no tiene componente a lo largo del eje de transmisión.

2.17.1 Cristales Dicroicos

Hay ciertos materiales que son inherentemente dicroicos debido a una anisotropía en sus respectivas estructuras cristalinas; probablemente el más conocido de éstos es el mineral natural *turmalina*, para esta sustancia hay una dirección específica dentro del material que se conoce como *el eje principal* u *óptico* el cual está determinado por su configuración atómica; la componente del campo eléctrico de una onda de luz incidente que es perpendicular al eje principal es fuertemente absorbida por la muestra; mientras más grueso es el cristal, más completa es la absorción (Fig. 2.42)

Al sostener un cristal de turmalina frente a la luz natural blanca, puede parecer verde (viene también en otros colores) cuando se ve normalmente a su eje principal, y, casi negro cuando se ve a lo largo de ese

eje, donde todos los campos E son perpendiculares a él (*de aquí el término dicroico que significa dos colores*).

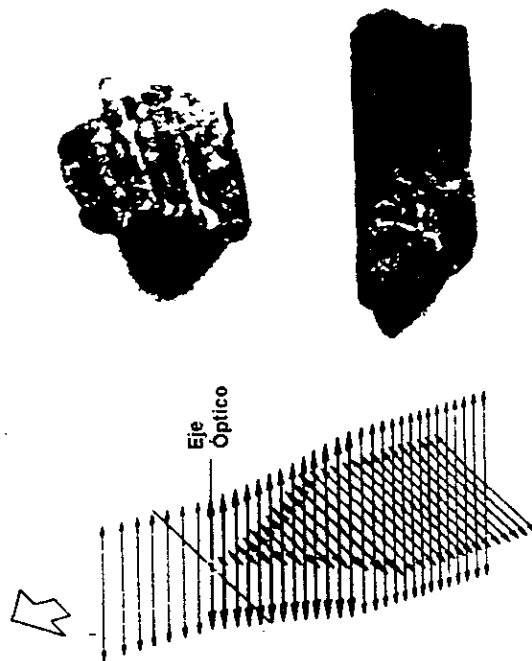


Fig. 2.42 Cristal Dicroico. Los surcos que ocurren naturalmente, son evidentes en la foto de los cristales de turmalina y corresponden al eje óptico.

2.18 Polaroides

En 1928 Edwin Herbert Land inventó el primer polarizador de hoja dicroica conocido comercialmente como la *hoja polaroide J*, ella incorporaba una sustancia llamada *herapatita* o *peryoduro sulfatado de quini-*

na. La hoja J es un cristal dicroico plano largo formado por millones de cristales submicroscópicos que tienen forma de aguja, en 1938 Land inventó la hoja H que es ahora probablemente el polarizador lineal más ampliamente usado, no contiene cristales dicroicos sino que más bien es un análogo molecular de la rejilla de alambre. Una hoja de alcohol de polivinilo claro se calienta y estira en una dirección dada y sus largas moléculas de hidrocarbón quedan alineadas en el proceso. La hoja se sumerge entonces en una solución colorante rica en yodo, el yodo impregna el plástico y se adhiere a las largas y rectas cadenas de moléculas poliméricas formando efectivamente su propia cadena. Los electrones de conducción asociados con el yodo pueden moverse a lo largo de las cadenas como si fueran largos alambres delgados.

HN-50 sería la designación de una hoja H ideal hipotética con un color neutral (N) y transmitiendo el 50% de la luz natural incidente mientras que absorbe el otro 50%, que es la componente de polarización indeseada. Fig. 2.43

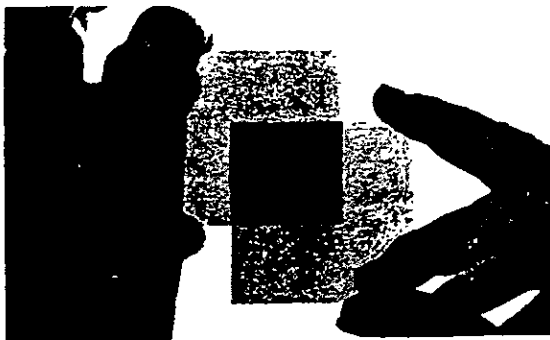


Fig. 2.43 Par de polaroides cruzados. Cada polaroide aparece gris porque absorbe aproximadamente la mitad de la luz incidente.

2.19 Birrefringencia

Muchas sustancias cristalinas son ópticamente anisotrópicas, en otras palabras, sus propiedades ópticas no son las mismas en todas direcciones dentro de una muestra dada, los cristales dicroicos de la sección anterior no son sino un subgrupo especial, antes, en la Fig. 2.8(b), se representó el oscilador isotrópico, usando un modelo mecánico simple de una corteza esférica cargada, atada por resortes idénticos a un punto fijo. Esta era una representación adecuada para las sustancias ópticamente isotrópicas (los sólidos amorfos como el vidrio y el plástico son generalmente isotrópicos, pero no siempre). La Fig. 2.44 muestra una corteza cargada, esta vez por resortes de diferente rigidez, es decir, resortes con diferentes constantes. Un electrón que se desplaza del equilibrio a lo largo de una dirección paralela a un juego de "resortes", evidente-

mente oscilará con una diferente frecuencia característica de aquella con la que lo haría si fuera desplazado en otra dirección; los electrones son impulsados por el campo E y ellos reirradian; estas onditas secundarias se combinan y la onda refractada resultante sigue adelante. La velocidad de la onda, y por consiguiente, el índice de refracción, está determinado por la diferencia entre el campo E y la frecuencia natural o característica de los electrones. Una anisotropía en la frecuencia de enlace se manifestará en una anisotropía en el índice de refracción, por ejemplo, si la luz en estado P se moviera a través de algún cristal hipotético, tal que, encontrara electrones que pudieran ser representados por la Fig. 2.44., su velocidad estaría gobernada por la orientación de E .

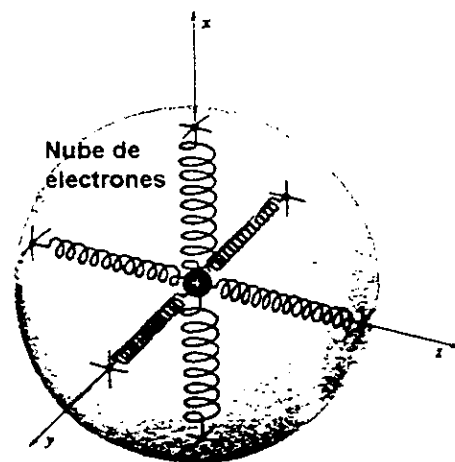


Fig. 2.44 Modelo mecánico que muestra una capa negativamente cargada atada a un núcleo positivo por pares de resortes de rigidez diferentes.

Si E estuviera paralela a los resortes rígidos, es decir, en una dirección de enlace fuerte, aquí a lo largo del eje x , Fig. 2.44, la frecuencia natural del electrón sería alta (proporcional a la raíz cuadrada de la constante del resorte), en contraste, con E a lo largo del eje y , donde la fuerza de enlace es más débil, la frecuencia natural sería algo más baja. Recordando la discusión anterior sobre la dispersión y la curva $n(\omega)$ de la Fig. 2.10, los índices de refracción apropiados se verían como los de la Fig. 2.45.

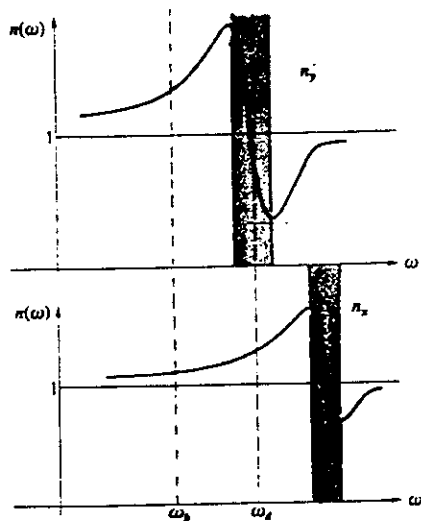


Fig. 2.45 Índice de refracción contra frecuencia a lo largo de dos ejes en un cristal. Las regiones donde $dn/d\omega < 0$ corresponden a bandas de absorción.

Un material de este tipo que exhibe dos índices de refracción es **birrefringente**¹. Si el cristal es tal que la frecuencia de la luz incidente aparece en la vecindad de ω_0 , en la Fig. 2.45 reside en la banda de absorción de $n_y(\omega)$. Un cristal iluminado así, será fuertemente absorbente para una dirección (y) de la polarización y transparente para la otra (x), claramente, un material birrefringente que absorbe uno de los estados **P** ortogonales, dejando pasar el otro, es en efecto dicróico. La Ec. (2.10) muestra que $n(\omega)$ varía inversamente con la frecuencia natural, esto significa que una constante de resorte efectiva grande, es decir, enlace fuerte, corresponde a una polarizabilidad baja, una constante dieléctrica baja y un índice de refracción bajo.

2.19.1 Cristales Birrefringentes

Deteniéndose un momento para relacionar las ideas anteriores con los cristales birrefringentes, de los cuales, la Calcita o carbonato de calcio (CaCO_3) es uno de los más conocidos. La Fig. 2.46 es una representación en forma de diagrama de un haz inicialmente no polarizado que atraviesa una sección principal de un rombo de Calcita. Los puntos y/o flechas que se dibujan a lo largo de cada rayo \mathbf{o} ² tienen su vector de cam-

po eléctrico normal a la sección principal, mientras que el campo del rayo \mathbf{e} es paralelo a la sección principal.

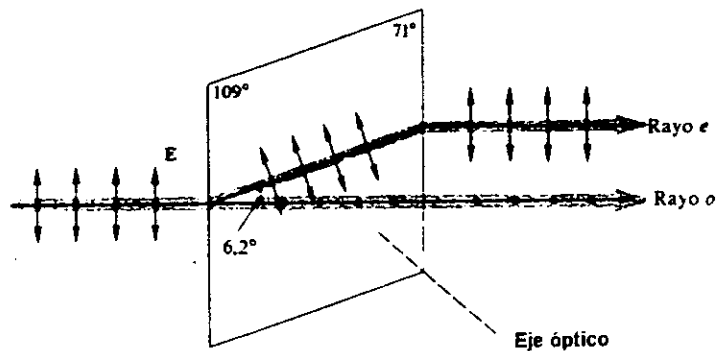


Fig. 2.46 Haz de luz con dos componentes de campo ortogonal atravesando una sección principal de la calcita.

La descripción electromagnética de lo que está sucediendo es bastante complicada, pero vale la pena examinarla, aunque sea sólo superficialmente. Se recordará de secciones anteriores, que el campo incidente **E** polarizará el dieléctrico, es decir, desplazará la distribución de cargas creando dipolos eléctricos. El campo dentro del dieléctrico es alterado por la inclusión de un campo inducido y es ahí donde aparece el **desplazamiento D**, en medios isotrópicos **D** está relacionada con **E** por una cantidad escalar y las dos son paralelas. En cristales anisotrópicos **D** y **E** están relacionados por un tensor y no siempre serán paralelos, si ahora se aplican las ecuaciones de Maxwell al problema de una onda que se mueve en tal medio, se encontrará que los campos que vibran dentro del frente de onda son **D** y **H** y no, como antes, **E** y **B**. En otras palabras, el vector de propagación **k**, que es normal a las superficies de fase constante, es ahora perpendicular a **D** en lugar de a **E**: en efecto **D**, **E** y **k** son coplanares, entonces es claro que la dirección del rayo corresponde a la dirección del vector de Poynting $\mathbf{S} = c^2 \epsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B}$ la que generalmente es diferente a la de **k**; debido a la manera en la que los átomos se distribuyen, **E** y **D**, sin embargo, serán colineales cuando ambas sean perpendiculares o paralelas al eje óptico³. Esto significa que la ondita **o** encontrará un medio efectivamente isotrópico y por lo tanto será esférica, teniendo **S** y **k**

¹ La palabra **refringencia** se usaba mucho en lugar de nuestro término más común **refracción**. Viene del latín *refractus* por medio de una raíz etimológica que comienza con *frangere* que significa quebrar.

² De acuerdo con Bartholinus, los rayos que se comportan como si siempre hubieran pasado por una placa de vidrio se conocen como **rayos o** u **ordinarios**. Los rayos que se comportan en forma tan poco usual se conocen como **rayos e** ó **extraordinarios**.

³ En el modelo del oscilador el caso general corresponde a la situación en la que **E** no es paralela a ninguna de las direcciones de los resortes. El campo impulsará la carga, pero su movimiento resultante no estará en la dirección de **E** debido a la anisotropía de las fuerzas de enlace. La carga será desplazada más, para una componente de fuerza dada, en la dirección de la fuerza de restricción más débil. El campo inducido no tendrá entonces la misma orientación que **E**.

colineales, en contraste, las onditas e tendrán S y k , o equivalentemente E y D , paralelas solo en las direcciones a lo largo o normales al eje óptico, en todos los otros puntos de la ondita, D es tangente al elipsoide y por consiguiente siempre es D la que termina en la envolvente o frente de onda plano compuesto dentro del cristal. (Fig.2.47).

Los cristales cúbicos como el cloruro de sodio tienen arreglados sus átomos en una forma relativamente simple y altamente simétrica, (hay cuatro ejes de simetría triple cada uno de los cuales va de esquina a esquina opuesta, al contrario de la calcita que sólo tiene uno de esos ejes), como con los sólidos amorfos, no habrá direcciones preferenciales en el material, tendrá un único índice de refracción y será ópticamente isotrópico, en ese caso todos los resortes del modelo de oscilador evidentemente serán idénticos.

Los cristales que pertenecen a los sistemas hexagonal, tetragonal y trigonal (ver tabla 2.4) tienen sus átomos arreglados de tal manera que la luz que se propaga en alguna dirección general encontrará una estructura asimétrica, tales sustancias son ópticamente anisotrópicas y birrefringentes, para ellas, el eje óptico corresponde a una dirección alrededor de la cual los átomos están arreglados simétricamente.

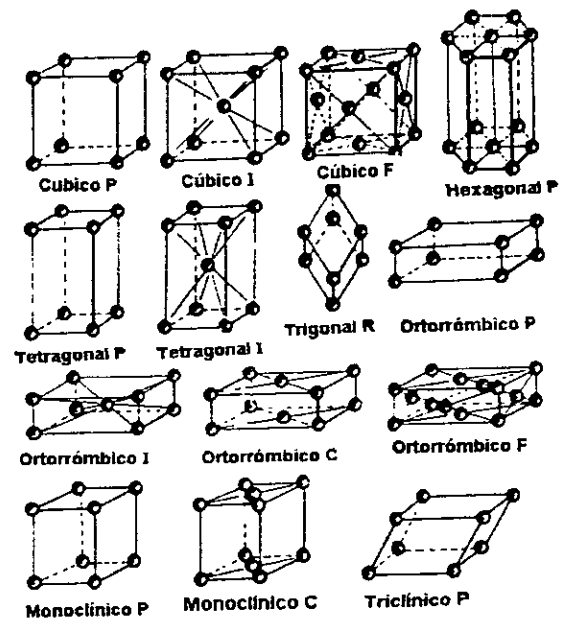


Tabla 2.4 Sistemas Cristalinos.

Estos cristales, para los cuales hay una sola de tales direcciones, se conocen como uniaxiales. Los materiales uniaxiales (como la calcita) tienen dos índices de refracción, $n_o \equiv c/v_{\perp}$ y $n_e \equiv c/v_{\parallel}$. Los sistemas cristalográficos restantes, esto es, ortorrómbicos, monoclinicos y triclinicos, tienen dos ejes ópticos y por consiguiente se dice que son biaxiales, estos sistemas tienen tres índices de refracción principales diferentes.

2.19.2 Polarizadores Birrefringentes

Se analizarán aquí algunos polarizadores birrefringentes lineales, sobre todo porque una parte del mecanismo del elipsómetro utilizado en esta tesis es el prisma Glan-Thompson.

Se han empleado todos los esquemas para separar las ondas o y e , todos ellos, basados en el hecho de que $n_o \neq n_e$.

El prisma de Glan-Foucault (Fig. 2.48) se construye únicamente de calcita, cuya transparencia es de aproximadamente 5000 nm en el infrarrojo hasta alrededor de 230 nm en el ultravioleta, el rayo entrante, incide normalmente en la superficie y E se puede resolver en componentes que son completamente paralelas o perpendiculares al eje óptico. Los dos rayos viajan la primera sección de calcita sin ninguna desviación, obsérvese que si el ángulo de incidencia en la interfase calcita - aire es θ , solamente se necesita arreglar las cosas de tal manera que $n_e < 1/\text{sen}\theta < n_o$ a fin de que refleje interna y totalmente el rayo o y no el rayo e . Si los dos prismas se cementan para unirlos y el ángulo de la interfase se cambia apropiadamente, el dispositivo se conoce como polarizador Glan-Thompson, su campo de vista es

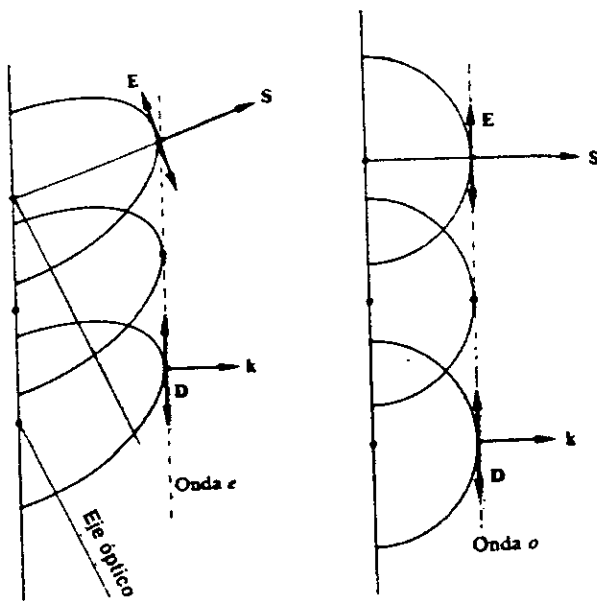


Fig. 2.47 Orientación de los vectores E , D , S y k .

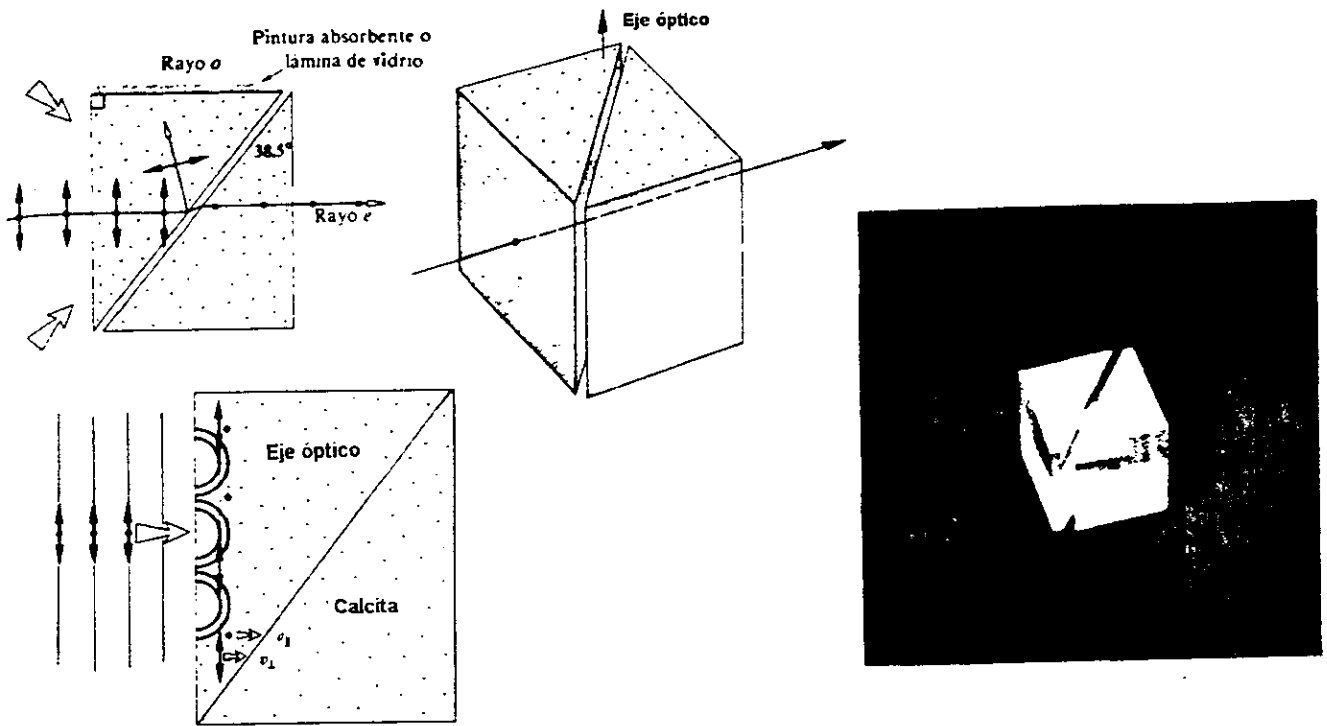


Fig. 2.48 El prisma Glan - Foucault

aproximadamente 30° en comparación con alrededor de 10° para el Glan-Foucault o Glan-aire como se le llama a menudo, el último, sin embargo, tiene la ventaja de ser capaz de manejar los niveles de potencia considerablemente más altos que se encuentran a menudo en los láseres, por ejemplo, mientras que la irradiancia máxima para un Glan-Thompson puede ser alrededor de 1 W/cm^2 (onda continua, en contraposición con pulsada), un Glan-aire típico podría tener un límite superior de 100 W/cm^2 . (Onda continua).

El prisma Wollaston es en realidad un divisor de haz polarizador, porque pasa ambas componentes ortogonalmente polarizadas, se puede hacer de calcita o cuarzo en la forma indicada en la Fig. 2.49

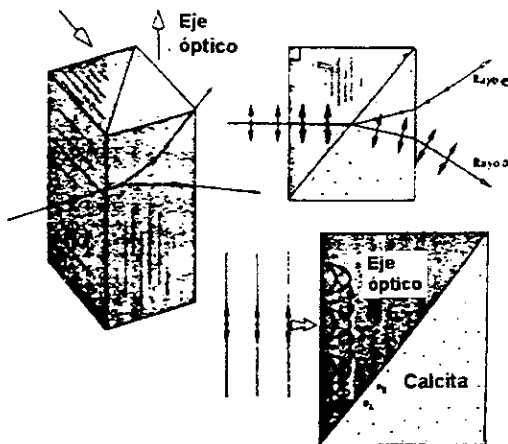


Fig. 2.49 El prisma de Wollaston

2.20 Polarización por reflexión

Una de las fuentes más comunes de luz polarizada es el ubicuo proceso de reflexión en medios dieléctricos, el brillo esparcido sobre un vidrio de ventana, una hoja de papel, o la cabeza de un calvo, el lustre en la superficie de un teléfono, una bola de billar o un forro de un libro, todos son generalmente parcialmente polarizados.

El modelo de oscilador electrónico da una explicación notablemente simple de lo que está sucediendo cuando la luz es polarizada en reflexión, desafortunadamente no es una descripción muy completa, ya que no explica el comportamiento de materiales magnéticos no conductores, no obstante, se considerará una onda plana incidente linealmente polarizada de tal forma que su campo E es perpendicular al plano de incidencia. Fig. 2.50

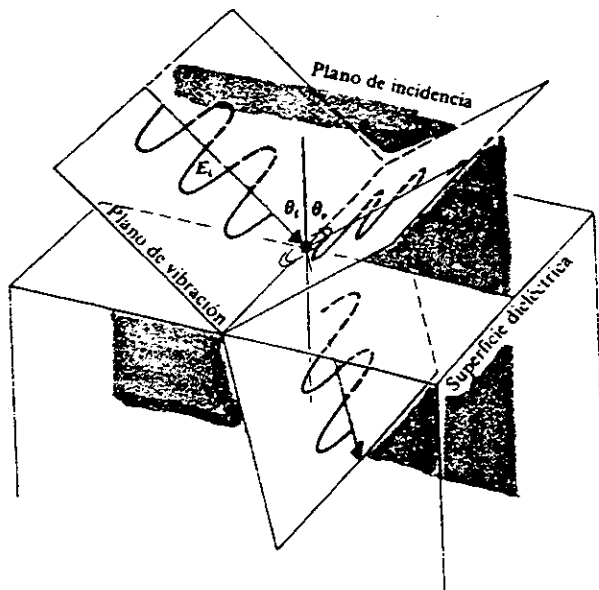


Fig. 2.50 Una onda reflejándose y refractándose en una interfase.

La onda se refracta en la interfase entrando con algún ángulo de transmisión θ_t , su campo eléctrico impulsa a los electrones enlazados, en este caso, normalmente al plano de incidencia y ellos a su vez reirradian. Una porción de esa energía reemitida aparece en la forma de una onda reflejada, entonces, debe quedar claro de la geometría y el patrón de radiación del dipolo que tanto las ondas reflejadas como refractadas también deben tener estados P normales al plano de incidencia, en contraste, si el campo E incidente está en el plano de incidencia, los osciladores electrónicos cerca de la superficie vibran bajo la influencia de la onda refractada como se muestra en la Fig. 2.51, obsérvese que una cosa bastante interesante le está sucediendo a la onda reflejada; su densidad de flujo es ahora relativamente baja porque la dirección del rayo reflejado forma un ángulo θ pequeño con el eje del dipolo.

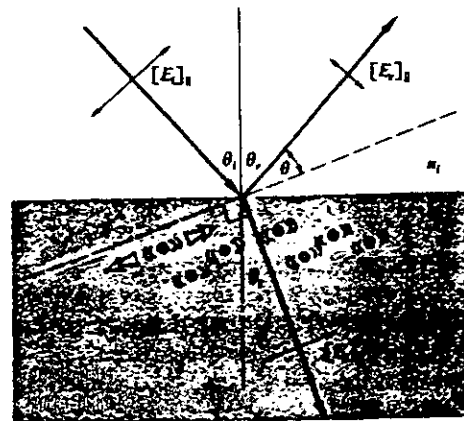


Fig. 2.51 Osciladores electrónicos y la Ley de Brewster.

Si se pudieran arreglar las cosas de tal forma que $\theta = 0$, o equivalentemente $\theta_r + \theta_t = 90^\circ$, la onda reflejada desaparecería completamente, bajo esas circunstancias, para una onda incidente no polarizada conformada por dos estados P ortogonales incoherentes, solamente la componente polarizada normalmente al plano de incidencia, y por consiguiente paralela a la superficie, será reflejada. El ángulo de incidencia particular para el que ocurre esta situación se designa por θ_p y recibe el nombre de ángulo de polarización o ángulo de Brewster, donde $\theta_p + \theta_t = 90^\circ$, por consiguiente, de la ley de Snell, ver Figs. 2.25 y 2.26.

$$n_i \sin \theta_p = n_t \sin \theta_t$$

y del hecho de que $\theta_t = 90^\circ - \theta_p$, se deduce que

$$n_i \sin \theta_p = n_t \cos \theta_p$$

y

$$\tan \theta_p = \frac{n_t}{n_i} \quad (2.90)$$

Esto se conoce como la *ley de Brewster*.

Un esquema, donde se aplica lo anterior, se muestra en la Fig. 2.52 se conoce a menudo como un polarizador de pila de láminas.

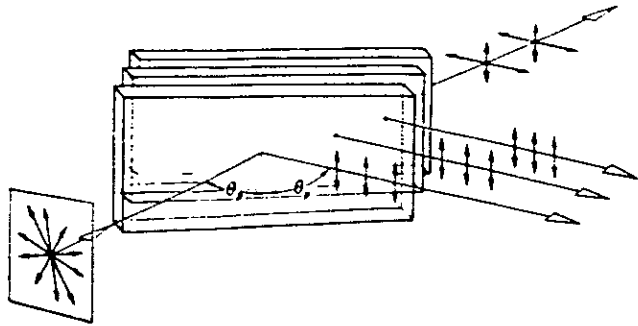


Fig. 2.52 El polarizador de pila de placas.

2.21 Retardadores

Considérese ahora una clase de elementos ópticos conocida como *retardadores*, que sirven para cambiar la polarización de una onda incidente, en principio, la función de un retardador es muy simple, uno de los dos estados P coherentes constitutivos es de alguna manera retrasado en fase respecto al otro en una cantidad predeterminada; al salir del retardador, la fase relativa de las dos componentes es diferente de lo que era inicialmente y entonces el estado de polarización es diferente también, con ellos puede convertirse todo estado de polarización dado en cualquier otro y al hacerlo así se obtendrán también los polarizadores circulares y elípticos.

2.21.1 La lámina de onda completa

Si la diferencia de fase relativa $\Delta\phi$ entre las ondas o y e es igual a 2π , el retraso relativo es una longitud de onda; las ondas e y o están de nuevo en fase y no hay efecto observable en la polarización de un haz monocromático incidente, evidentemente, una lámina de onda completa sólo puede funcionar de la manera discutida para una longitud de onda particular y los retardadores de este tipo son cromáticos, si tal dispositivo se coloca con alguna orientación arbitraria entre polarizadores lineales cruzados, toda luz que entre en él, y en este caso es luz blanca, será lineal, solamente la longitud de onda que satisface la Ec. (2.91)

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda_o} d(|n_o - n_e|) \quad (2.91)$$

donde d es el espesor de la lámina

pasará a través del retardador sin ser afectada, y después será absorbida por el analizador. Todas las otras longitudes de onda sufrirán alguna retardancia y por lo tanto, emergerán de la placa con varias formas de luz elíptica; alguna parte de esta luz procederá a través del analizador, emergiendo finalmente con el color complementario del que fue extinguido.

2.21.2 Lámina de media onda

Una placa retardadora que introduce una diferencia relativa de fase de π radianes o 180° entre las ondas o y e se conoce como lámina de media onda, supóngase que el plano de vibración de un haz incidente de luz lineal forma un ángulo arbitrario θ con el eje rápido como se muestra en la Fig. 2.53

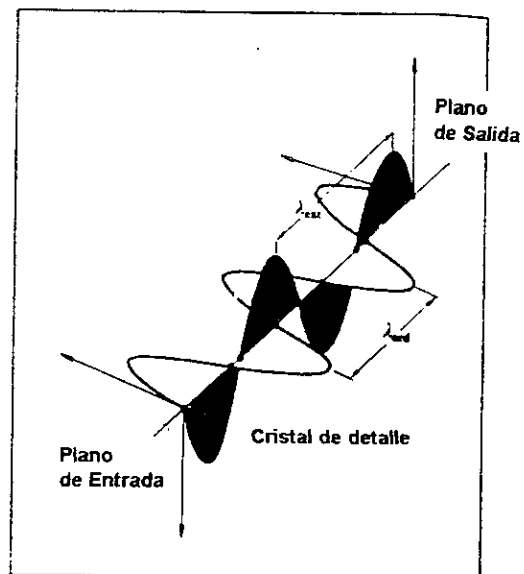
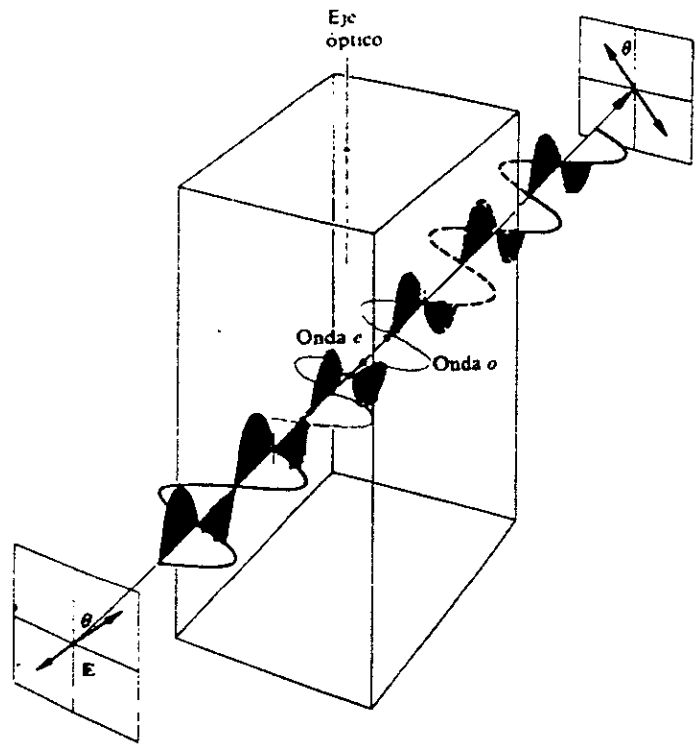


Fig. 2.53 Una lámina de media onda.

Al salir de la placa habrá un corrimiento de fase de $\lambda/2$ (donde λ_0 es la longitud de onda en el vacío), volviendo a la Fig. 2.49 debe ser evidente que una lámina de media onda volteará la luz elíptica en forma similar, en resumen, invertirá el sentido de la luz elíptica o circular, cambiándola de derecha a izquierda o viceversa.

2.21.3 La lámina de cuarto de onda

La lámina de cuarto de onda es un elemento óptico que introduce un corrimiento relativo de fase de $\Delta\phi = \pi/2$ entre las componentes ortogonales o y las constitutivas e de una onda, se deduce una vez más de la Fig. 2.49 que un corrimiento de fase de 90° convertirá la luz lineal a elíptica y viceversa; debe ser evidente que la luz lineal que incide paralelamente a los ejes principales no será afectada por ningún tipo de lámina retardadora. No se puede tener una diferencia relativa de fase sin tener dos componentes, con luz natural incidente los dos estados P constitutivos son incoherentes, es decir, su diferencia de fase relativa cambia al azar y rápidamente. La introducción de un corrimiento de fase al adicional constante por cualquier forma de retardador todavía dará como resultado una diferencia de fase al azar y entonces no tendrá efecto apreciable. Cuando la luz lineal a 45° , con cualquiera de sus ejes principales, es incidente sobre una lámina de cuarto de onda, sus componentes o y e tienen amplitudes iguales. Bajo estas circunstancias especiales un corrimiento de fase de 90° convierte la onda a luz circular, similarmente, un haz circular incidente emergerá linealmente polarizado.

Se muestra una lámina de cuarto de onda en la Fig. 2.54 donde la línea negra indica el eje rápido y la línea suave el eje lento (perpendicular al eje rápido), la figura 2.54a sugiere que cuando el eje rápido es horizontal, la componente horizontal de la onda emerge de la lámina 90° adelante de la componente que esta alineada con el eje lento, la figura 2.54b sugiere que cuando la onda original (antes de ser descompuesta en sus componentes) se alinea con el eje rápido, ambas componentes son retardadas en la misma cantidad y por tanto la onda emerge nuevamente en fase, la Fig. 2.54c indica que cuando el eje rápido es vertical, la componente horizontal de la luz es retardada en un cuarto de longitud de onda con respecto a la componente vertical, la figura 2.54d señala que cuando la onda original se alinea con el eje lento, ambas componentes se retrasan en la misma cantidad, como cuando se alinean con respecto al eje rápido. [24]

Si se usa la componente vertical como referencia, puede describirse el retardo avanzando desde -90° en la figura 2.54a, pasando por cero en la figura 2.64b a $+90^\circ$ en 2.54c y nuevamente a cero en 2.54d. Si las dos componentes fueran de igual amplitud, esto representaría el cambio de luz circularmente polarizada en linealmente polarizada a circularmente polarizada en la dirección opuesta y nuevamente regresar a luz linealmente polarizada.

2.21.4 Compensadores

Un compensador es un dispositivo óptico que puede imprimir una retardancia controlable en una onda. Al contrario que en una lámina de onda donde $\Delta\phi$ está fija, la diferencia de fase relativa que aparece en un compensador se puede variar continuamente, considérense dos de los que se usan más ampliamente, El **compensador de Babinet**, se muestra en la Fig. 2.55, consiste en dos cuñas independientes de calcita o más comúnmente de cuarzo, cuyos ejes ópticos están indicados por las líneas y puntos en la figura.

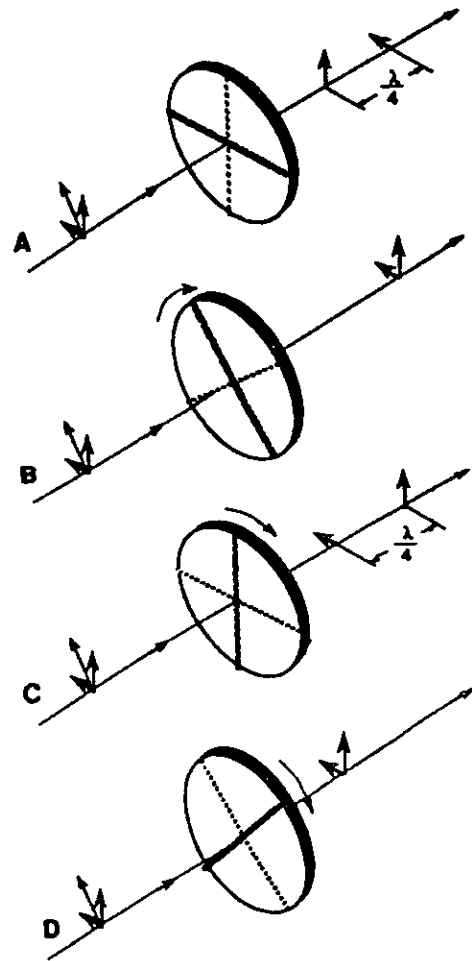


Fig. 2.54 Placa de cuarto de onda. El eje rápido está indicado por la línea gruesa negra y el eje lento por la línea delgada. La componente electromagnética alineada con el eje rápido emerge un cuarto de onda adelante de la componente alineada respecto al eje lento.

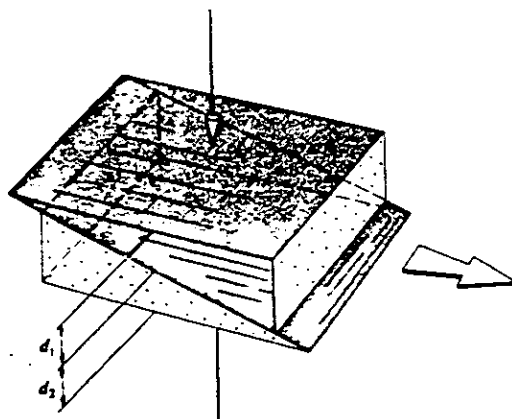


Fig. 2.55 El compensador de Babinet

Un rayo que pasa verticalmente hacia abajo a través del dispositivo en algún punto arbitrario atravesará un espesor d_1 en la cuña superior y d_2 en la inferior. Los rayos o y e en la cuña superior se transforman en los rayos e y o , respectivamente en la cuña inferior. El compensador es delgado (el ángulo en la cuña es típicamente 2.5°) y entonces la separación de los rayos es despreciable. La diferencia total de fase entre las ondas o y e es entonces:

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda_o} (d_1 - d_2) (n_o - n_e) \quad (2.92)$$

El compensador de Soleil que se muestra en la Fig. 2.56 generalmente se hace de cuarzo (aunque también se han usado MgF_2 y CdS en el infrarrojo) y consiste en dos cuñas y una placa plano-paralela cuyos ejes ópticos están orientados como se indica, la cantidad d_1 corresponde ahora al espesor total de ambas cuñas, el cual es constante para cualquier colocación del tornillo micrométrico posicionador.

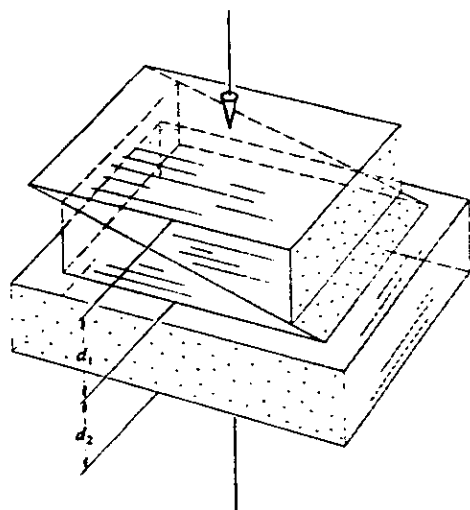


Fig. 2.56 El compensador de Soleil.

2.22 Fundamentos e Historia de la Elipsometría

Algunas aplicaciones importantes de la luz polarizada son:

- Medida del índice de refracción complejo; i.e. el índice de refracción n y el coeficiente de extinción k
- Cálculo del espesor de películas delgadas.

Un campo de la óptica que ha sido desarrollado a través del siglo XX es la elipsometría, en su definición más amplia, la elipsometría es el arte de medir y analizar la polarización elíptica de la luz, los elipsómetros, como se describen aquí, requieren de lo siguiente: [25]

1. Una fuente de luz monocromática.
2. Un instrumento óptico que convierta luz no polarizada en linealmente polarizada.
3. Un instrumento óptico que convierta luz linealmente polarizada en elípticamente polarizada.
4. Reflexión de la luz sobre la película de interés.
5. Un instrumento óptico que determine el estado de polarización de la luz resultante.
6. Un detector que mida la intensidad de la luz (o que determine la presencia de intensidad nula).
7. Un método de cálculo que facilite la interpretación de los resultados bajo un marco teórico acorde al arreglo experimental.

Debe hacerse notar que aunque no se conocía por ese nombre la elipsometría ya se practicaba a finales del siglo XIX, las fuentes de luz monocromática han estado disponibles a lo largo del tiempo en la forma de lámparas de sodio y mercurio, las cuales producen varias longitudes de onda discretas, que son filtradas para aprovechar solo una. Los instrumentos ópticos como polarizadores y láminas de cuarto de onda han estado disponibles también por algún tiempo, en un pequeño tratado sobre polarización de la luz publicado en 1874, Spottiswoode describe como puede obtenerse luz polarizada al hacer pasar luz a través de un prisma Nicol y por reflexión. En la lista anterior los incisos #2 y #5 se refieren básicamente a polarizadores, Spottiswoode distinguía entre el aparato del inciso #2, el polarizador que produce la polarización de la luz (al cual él llamó *el polarizador*) y el #5, el polarizador que determinaba el estado de polarización (al cual llamó *el analizador*). Debe recordarse que en 1874, la luz todavía se consideraba como una perturbación del "éter", que llenaba todo el espacio.

El nombre de elipsometría le fue dado en 1945 en un artículo publicado en *Review of Scientific Instruments* por Alexandre Rothen titulado "The Ellipsometer, an Apparatus to Measure Thicknesses of Thin Films", por muchos años, el único detector disponible capaz de detectar la intensidad nula a través del analizador fue el ojo humano.

Al tiempo en que Lord Raleigh investigaba las propiedades ópticas de la luz reflejada sobre la superficie de los líquidos, Drude investigaba las propiedades

ópticas de la luz reflejada en los sólidos. En dos artículos fundamentales publicados en 1889 y 1890 estableció las bases de la elipsometría, Drude inteligentemente explotó las limitadas cualidades del ojo humano para determinar los parámetros ópticos de una película delgada, se dió cuenta de que los materiales ópticos como los metales se comportaban simultáneamente como polarizadores y como modificadores de fase, así en general, la luz reflejada en la superficie de un metal está elípticamente polarizada; análisis posteriores mostraron que ajustando la amplitud y la fase de la luz incidente, era posible transformar la luz reflejada elípticamente polarizada a linealmente polarizada. Drude hizo esto insertando un polarizador y un compensador entre la fuente de luz y la película. La figura 2.57 muestra un instrumento ilustrado en un libro de Drude publicado en 1901, aunque Drude no le llamó a este instrumento elipsómetro, contaba con un polarizador p, un analizador p', un compensador C, y una superficie de análisis S, la fuente de luz se conectaba al telescopio F y el detector (el ojo) se colocaba en el telescopio K, colocando el compensador a 45° y rotando el polarizador un ángulo P, la luz elíptica reflejada puede transformarse a linealmente polarizada. La luz reflejada linealmente polarizada es analizada después por otro polarizador lineal (el analizador) rotándolo un ángulo Q hasta que se observe la anulación de la luz. Análisis posteriores mostraron que con estos ángulos pueden determinarse los parámetros elipsométricos ϕ y Δ , los cuales describen los cambios de amplitud y de fase de la luz reflejada, posteriormente, se mostró que las ecuaciones de reflexión de Fresnel pueden relacionar ψ y Δ con n , k y d .

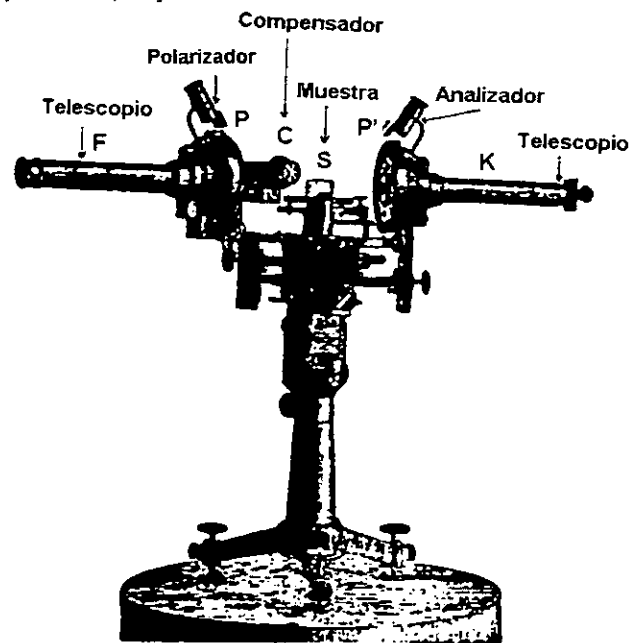


Fig. 2.57 Uno de los primeros instrumentos utilizados para estudiar el cambio en la polarización de la luz por reflexión. Los telescopios son F y K, los polarizadores p y p' el compensador C y la superficie reflectora es S.

2.23 La ecuación fundamental de la elipsometría clásica

En esta sección se deducirá una ecuación que relaciona la amplitud y la fase de la luz incidente y reflejada sobre una película, los llamados parámetros elipsométricos, con el índice de refracción complejo y espesor de la película delgada. La ecuación se llama ecuación fundamental de la elipsometría, para derivar esta ecuación, considere la figura 2.58

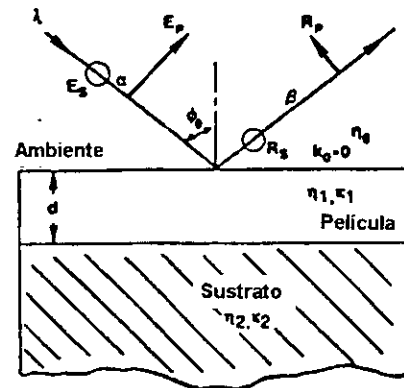


Fig. 2.58 Reflexión de un haz incidente sobre una película de espesor d con un índice de refracción n_1 y un coeficiente de extinción k_1 .

En la figura, E_{\parallel} y E_{\perp} , son las componentes del campo paralelas (\parallel) y perpendicular (\perp) al plano del papel, similarmente, R_{\parallel} y R_{\perp} son las componentes paralela y perpendicular de la reflexión respectivamente.

Para las componentes incidentes del campo puede escribirse:

$$E_{\parallel} = E_{o\parallel} e^{i\alpha_{\parallel}} \quad (2.93a)$$

$$E_{\perp} = E_{o\perp} e^{i\alpha_{\perp}} \quad (2.93b)$$

otro par de ecuaciones puede ser escrito para el campo reflejado:

$$R_{\parallel} = R_{o\parallel} e^{i\beta_{\parallel}} \quad (2.94a)$$

$$R_{\perp} = R_{o\perp} e^{i\beta_{\perp}} \quad (2.94b)$$

en (2.93) y (2.94) el factor de propagación $\omega t - kz$ se ha suprimido. Diversas medidas han mostrado que $R_{\parallel, \perp}$ están directamente relacionados con $E_{\parallel, \perp}$ y, en general, para medios absorbentes, el campo incidente se atenúa y sufrirá un cambio de fase, para describir el comportamiento se introducirán los coeficientes complejos de reflexión, ρ_{\parallel} y ρ_{\perp} .

$$R_{\parallel} = \rho_{\parallel} E_{\parallel} \quad (2.95a)$$

$$R_{\perp} = \rho_{\perp} E_{\perp} \quad (2.95b)$$

o en general,

$$\rho_m = \frac{R_m}{E_m} \quad m = \parallel, \perp \quad (2.96)$$

sustituyendo (2.93) y (2.94) en (2.96) se obtiene:

$$\rho_m = \left(\frac{R_{om}}{E_{om}} \right) e^{i(\beta_m - \alpha_m)} \quad m = \parallel, \perp \quad (2.97)$$

de (2.97) se puede definir un coeficiente de reflexión "normalizado" ρ :

$$\rho = \frac{\rho_{\parallel}}{\rho_{\perp}} = \left(\frac{R_{o\parallel}/E_{o\parallel}}{R_{o\perp}/E_{o\perp}} \right) e^{i(\beta - \alpha)} \quad (2.98)$$

donde $\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$ y $\beta = \beta_{\parallel} - \beta_{\perp}$. Las cantidades β y α describen la fase antes y después de la reflexión respectivamente.

Tradicionalmente, los factores en (2.98) se escriben en términos de la tangente del ángulo ψ ,

$$\tan \psi = \frac{R_{o\parallel}/E_{o\parallel}}{R_{o\perp}/E_{o\perp}} \quad (2.99a)$$

y el ángulo de fase Δ ,

$$\Delta = \beta - \alpha = (\beta_{\parallel} - \beta_{\perp}) - (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}) \quad (2.99b)$$

a partir de (2.99) puede expresarse (2.98) como:

$$\rho = \tan \psi e^{i\Delta} \quad (2.100)$$

Así, la elipsometría involucra la medida de la $\tan \psi$, la razón de cambio de la amplitud y Δ , el cambio en la fase. Las cantidades ψ y Δ son función de las constantes ópticas del medio, de la película delgada, del sustrato la longitud de onda de la luz, el ángulo de incidencia y, para una película depositada sobre un sustrato, del espesor de la película, con todos estos factores en mente, se representa (2.100) como:

$$\rho = \tan \psi e^{i\Delta} = f(n, k, d) \quad (2.101)$$

la ecuación (2.101) se conoce como **ecuación fundamental de la elipsometría**. Idealmente, midiendo ψ y Δ las cantidades n , k y d pueden calcularse, en (2.101), ρ fue expresado en términos de una función general de la forma $f(n, k, d)$, la ecuación (2.101) muestra que el problema básico de la elipsometría es medir ψ y Δ y relacionarlos a $f(n, k, d)$.

Otra forma de demostrar la ecuación fundamental de la elipsometría es utilizando lo visto en la sección 2.14, con los coeficientes de reflexión total para múltiples interfases, muchas situaciones de la vida real

involucran múltiples interfases como la que se muestra en la figura 2.59

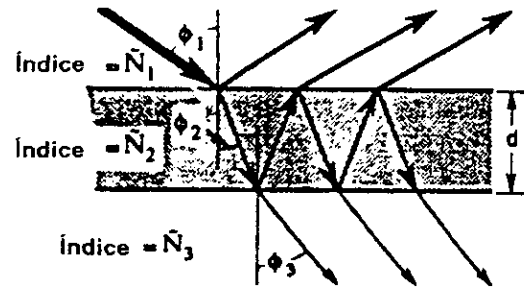


Fig. 2.59 Reflexiones y transmisiones en múltiples interfases

La onda reflejada resultante que regresa al medio 1 está constituida de la luz reflejada directamente en la primera interfase, mas todas las ondas que se transmiten de regreso del medio 2 al 1. Cada onda que se transmite del medio 2 al 1 es mucho mas pequeña en intensidad, la suma de esta serie infinita de ondas da como resultado la onda resultante, ambos **Azzam** y **Heavens** deducen las razones de las amplitudes de las ondas reflejada e incidente (ver sección 2.14), los cuales están dados por los coeficientes de reflexión total, con una pequeña modificación en la notación usada en la sección 2.14, dichos coeficientes son:

$$r_{\parallel} = \frac{r_{12_{\parallel}} + r_{23_{\parallel}} e^{-i2\Delta}}{1 + r_{12_{\parallel}} r_{23_{\parallel}} e^{-i2\Delta}} \quad r_{\perp} = \frac{r_{12_{\perp}} + r_{23_{\perp}} e^{-i2\Delta}}{1 + r_{12_{\perp}} r_{23_{\perp}} e^{-i2\Delta}}$$

donde los subíndices "23" señalan que se está utilizando el coeficiente de Fresnel para la interfase entre el medio 2 y el 3; Δ denota la fase y está dada por

$$\Delta = \frac{2\pi d n_2}{\lambda} \cos \phi_2$$

donde d es el espesor de la película.

Tomando al cantidad ρ como la razón de los coeficientes de reflexión total tal que:

$$\rho = \frac{R_{\parallel}}{R_{\perp}}$$

la ecuación fundamental de la elipsometría será:

$$\rho = \tan \psi e^{i\Delta} = \frac{R_{\parallel}}{R_{\perp}}$$

donde Δ , como se mencionó antes, es el cambio de fase bajo reflexión y toma valores entre 0° y 360° , ψ es

el ángulo cuya tangente es igual a la razón entre los coeficientes de reflexión total, los valores de Ψ están comprendidos entre 0° y 90° .

2.23.1 Solución de la ecuación fundamental de la elipsometría

Regresando al problema de encontrar la solución de la ecuación elipsométrica (2.101), i.e. la función $f(n, k, d)$, el modelo propuesto por Drude, el cual trata con una película homogénea sobre un sustrato, ha tenido gran éxito, en él, un rayo incide sobre la película delgada y después sufre múltiples reflexiones dentro de ella. Conociendo el estado de polarización de los rayos incidentes y reflejados, el índice de refracción, el coeficiente de extinción y el espesor de la película pueden determinarse, para obtener estos parámetros deben atacarse previamente otros problemas; el primero es determinar la relación entre los índices de refracción de dos medios distintos y la reflectividad compleja ρ . En la figura 2.60 se muestra la incidencia, reflexión y transmisión de una onda plana incidiendo sobre una interfase, el subíndice "1" será usado para el medio ambiente, el "3" para el sustrato y el "2" para las propiedades de la película

Las ecuaciones de Fresnel para los coeficientes de reflexión r_{\parallel} y r_{\perp} pueden ser escritos como: (ver sección 2.12)

$$r_{\parallel} = \frac{n_3 \cos \theta_i - n_1 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_3 \cos \theta_t} \quad (2.102a)$$

$$r_{\perp} = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_3 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_3 \cos \theta_t} \quad (2.102b)$$

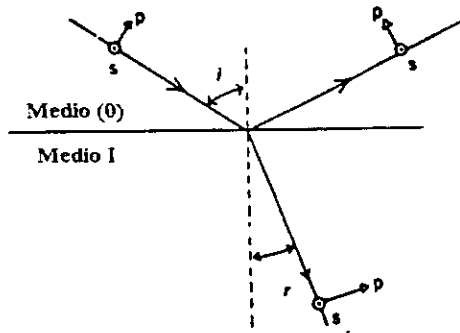


Fig. 2.60 Reflexión y transmisión de una onda plana en una interfase plana colocada entre dos medios semi-infinitos 1 y 2.

el coeficiente complejo ρ se define, como se sabe:

$$\rho = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} \quad (2.103)$$

sustituyendo (2.102) en (2.103), definiendo $x = n_3/n_1$ y eliminando el ángulo de refracción θ_t utilizando la ley de Snell se obtiene que ρ :

$$\rho = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \frac{x^2 \cos \theta_i - \sqrt{x^2 - \text{sen}^2 \theta_i} \cos \theta_i + \sqrt{x^2 - \text{sen}^2 \theta_i}}{x^2 \cos \theta_i + \sqrt{x^2 - \text{sen}^2 \theta_i} \cos \theta_i - \sqrt{x^2 - \text{sen}^2 \theta_i}} \quad (2.104)$$

y si se define $a = \cos \theta_i$ y $b = \sqrt{x^2 - \text{sen}^2 \theta_i}$ (2.104) se convierte en:

$$\rho = \frac{U+V}{U-V} \quad (2.105a)$$

$$\text{donde } U = a^2 x^2 - b^2 \quad (2.105b)$$

$$V = ab(x^2 - 1) \quad (2.105c)$$

Definiendo $f = U/V$ se resuelven (2.105b) y (2.105c) para x^2 encontrando:

$$x^2 = \text{sen}^2 \theta_i \left[1 + \frac{\tan^2 \theta_i}{f^2} \right] \quad (2.106)$$

la ecuación (2.105a) puede resolverse para ρ ,

$$f = \frac{1+\rho}{1-\rho} \quad (2.107)$$

finalmente, a partir de la ley de Snell y (2.107), (2.106) se convierte en:

$$\frac{n_3}{n_1} = \text{sen} \theta_i \sqrt{1 + \left(\frac{1-\rho}{1+\rho} \right)^2 \tan^2 \theta_i} \quad (2.108)$$

la cual es la relación deseada entre n_3 , n_1 y ρ . Una forma diferente en la que puede reescribirse (2.108) utilizando $\tan \theta$, como $(\text{sen} \theta / \cos \theta)$, y algunas manipulaciones algebraicas:

$$\frac{n_3}{n_1} = \tan \theta_i \sqrt{1 - \frac{4\rho}{(1+\rho)^2} \text{sen}^2 \theta_i} \quad (2.109)$$

La eliminación del ángulo de refracción θ tiene muchas ventajas para los cálculos, ya que es más fácil trabajar con (2.108) o (2.109) en términos de ρ que hacerlo con un ángulo complejo.

Si se prefiere utilizar solo números reales, la ecuación anterior puede separarse en dos ecuaciones:

$$n_3^2 - k_3^2 = n_1^2 \sin^2 \theta_1 \left[1 + \frac{\tan^2 \theta_i (\cos^2 2\Psi - \sin^2 \Delta \sin^2 2\Psi)}{(1 + \sin 2\Psi \cos \Delta)^2} \right] \quad (2.110)$$

$$2n_3 k_3 = \frac{n_1^2 \sin^2 \theta_i \tan^2 \theta_i \sin 4\Psi \sin \Delta}{(1 + \sin 2\Psi \cos \Delta)^2} \quad (2.111)$$

Utilizando la teoría expuesta en el capítulo dos para películas múltiples, podemos utilizar la ecuación 4(108a), la cual es válida también cuando la onda incidente es linealmente polarizada ya sea paralela (\parallel) o perpendicular (\perp) al plano de incidencia. Así sumaremos la información sobre la polarización incorporando el subíndice para la onda paralela (\parallel) o perpendicular (\perp) al plano de incidencia como se demuestra:

$$r_{\parallel} = \frac{r_{12_{\parallel}} + r_{23_{\parallel}} e^{-i\Delta}}{1 + r_{12_{\parallel}} r_{23_{\parallel}} e^{-i\Delta}} \quad (2.112a)$$

$$r_{\perp} = \frac{r_{12_{\perp}} + r_{23_{\perp}} e^{-i\Delta}}{1 + r_{12_{\perp}} r_{23_{\perp}} e^{-i\Delta}} \quad (2.112b)$$

donde $\Delta = \frac{4\pi nd}{\lambda} \cos \theta_1$, si $\Delta = 2\pi$, existe interferencia constructiva, i.e. las ondas están en fase una con respecto a la otra, si $\Delta = \pi$ la interferencia es destructiva y las ondas están completamente fuera de fase. La ecuación anterior puede reexpresarse en términos del ángulo incidente θ , utilizando la ley de Snell:

$$\Delta = \frac{4\pi d}{\lambda} \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_1}$$

Para obtener la ecuación que describa la ecuación fundamental de la elipsometría se introduce ρ , que es igual a la razón de r_{\parallel} con r_{\perp} i.e., dividiendo (2.112a) entre (2.112b) se obtiene:

$$\rho = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} = \tan \Psi e^{i\Delta} = \frac{r_{12_{\parallel}} + r_{23_{\parallel}} e^{-i\Delta}}{1 + r_{12_{\parallel}} r_{23_{\parallel}} e^{-i\Delta}} \frac{1 + r_{12_{\perp}} r_{23_{\perp}} e^{-i\Delta}}{r_{12_{\perp}} + r_{23_{\perp}} e^{-i\Delta}} \quad (2.113)$$

La ecuación (2.113) es la ecuación fundamental de la elipsometría, el lado derecho es la forma específica de la función $f(n, k, d)$, puede verse que la función $f(n, k, d)$ es muy complicada. De hecho la solución de (2.113) tuvo que esperar hasta el desarrollo de las computadoras en los años cincuenta y sesenta, en la práctica, los índices de refracción del medio ambiente y del sustrato son casi siempre muy conocidos y las cantidades de interés son el espesor y el índice de refracción de la película (o películas involucradas).

El espesor de las películas está dado por:

$$d = \frac{\lambda}{2} \sqrt{n_2^2 - (n_1 \sin \theta_i)^2} \quad (2.114)$$

2.24 Uso de los parámetros ópticos Ψ y Δ para determinar las propiedades de los materiales

En primer lugar se hablará sobre los sustratos, los puntos Δ/Ψ para los sustratos caen en el tercer cuadrante como se muestra en la figura 2.61, para ellos, se cumple que:

- si $k_3 = 0$ entonces $\Delta \in \{0^\circ, 180^\circ\}$
- si $k_3 \neq 0$ entonces $\Delta \in (0^\circ, 180^\circ)$ y $\Psi \in (0^\circ, 45^\circ)$

como puede verse en las figuras 2.61, 2.62, 2.63.

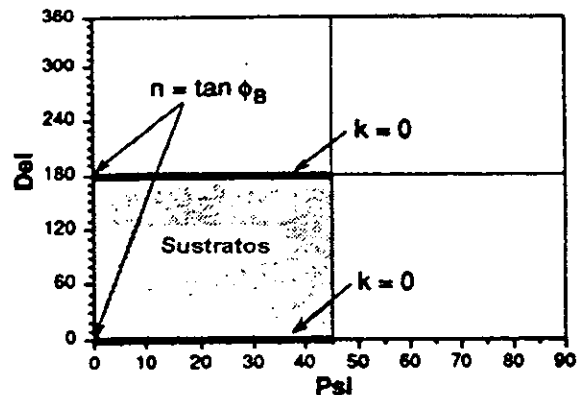


Fig. 2.61 Para los sustratos dieléctricos, $\Delta = 180^\circ$ ó 0° y entre 0° y 180° para no dieléctricos. Ψ estará entre 0° y 45° para ambos.

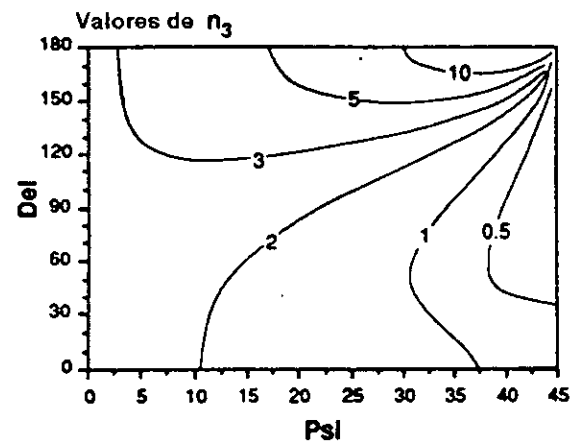


Fig. 2.62 El lugar geométrico de todos los puntos Δ/Ψ que tienen los valores señalados con n_3 .

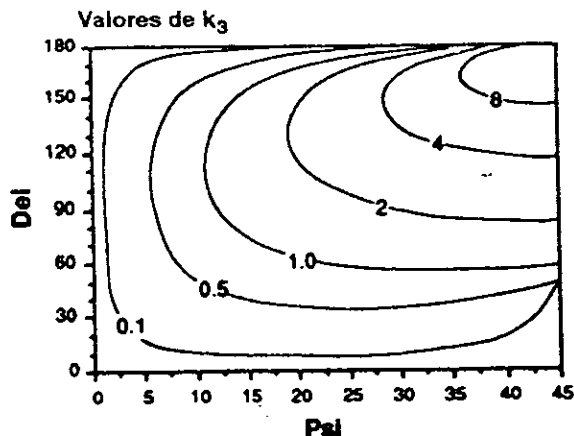


Fig. 2.63 El lugar geométrico de todos los puntos Δ/Ψ que tienen los valores señalados con k_3 .

2.24.1 Trayectorias Δ/Ψ para Películas Transparentes

En la figura 2.64 se muestra una trayectoria sobre el plano Δ/Ψ para una película de dióxido de Silicio (SiO_2) sobre un sustrato de Silicio.

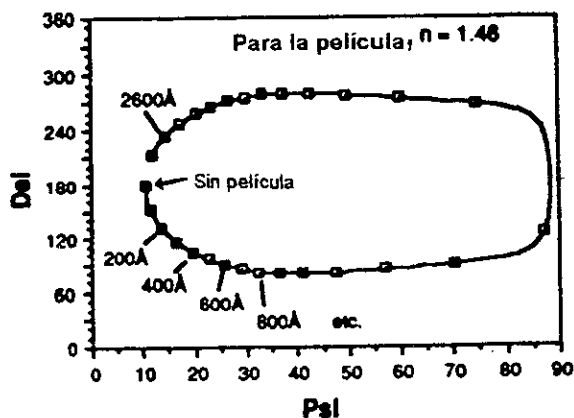


Fig. 2.64 Trayectoria de los puntos Δ/Ψ para el dióxido de Silicio con un ángulo de incidencia de $\phi_1 = 70^\circ$ y longitud de onda de $\lambda = 632.8 \text{ nm}$

La curva empieza en el punto que corresponde al sustrato solo (i.e. antes de depositarse la película) con valores de $\Delta = 178.5^\circ$ y $\Psi = 10.5^\circ$ con un índice de refracción complejo de $n_3 = 3.872 - 0.037i$. Si se añade una película delgada de $n_3 = 1.46$ la trayectoria Δ/Ψ empezará a formarse en el sentido que indica la flecha.

Los valores correspondientes a incrementos de 100 \AA se muestran como puntos enmarcados; si se ignorara el espesor de una película de SiO_2 sobre silicio únicamente tendría que determinarse un par de valores Δ y Ψ y compararlos con sus correspondientes valores en esta curva. Para películas con $k = 0$, la trayectoria es cerrada y el espesor se calculará con la fórmula (2.114), en este caso el espesor d es de alrededor de 2815 \AA .

Cuando la longitud de camino óptico que la luz debe seguir a través de la película es un múltiplo de la longitud de onda de la luz, Δ y Ψ tienen el mismo valor, en otras palabras, Δ y Ψ son funciones cíclicas del espesor de la película; el período completo de espesor es siempre menor que la mitad de la longitud de onda y está dado por:

$$\text{cyc} = \frac{\lambda}{2} \frac{1}{\sqrt{n_2^2 - \sin^2 \theta_i}}$$

el ciclo decrece al incrementarse el índice de refracción de la película y el ángulo de incidencia, por ejemplo, si el AUTOEL mide el espesor de una película de SiO_2 de 600 \AA el espesor puede ser de 600 \AA , $(600 + 2815) \text{ \AA}$, $(600 + 5630) \text{ \AA}$.

La figura 2.65 muestra las trayectorias completas de películas con índices de refracción de 1.46, 1.65 y 2.0 depositadas sobre Silicio cristalino; correspondientes a SiO_2 , una fotoresistencia y a Si_3N_4 respectivamente.

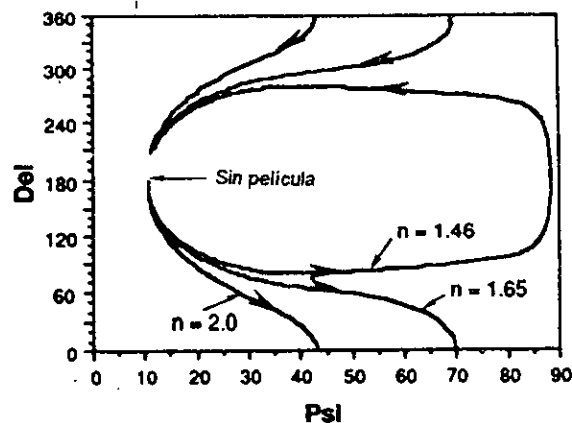


Fig. 2.65 Trayectorias de los puntos Δ/Ψ para películas que tienen índices de refracción 1.46, 1.65 y 2.0 depositadas sobre cristales de Silicio. Aparentemente se muestra un periodo.

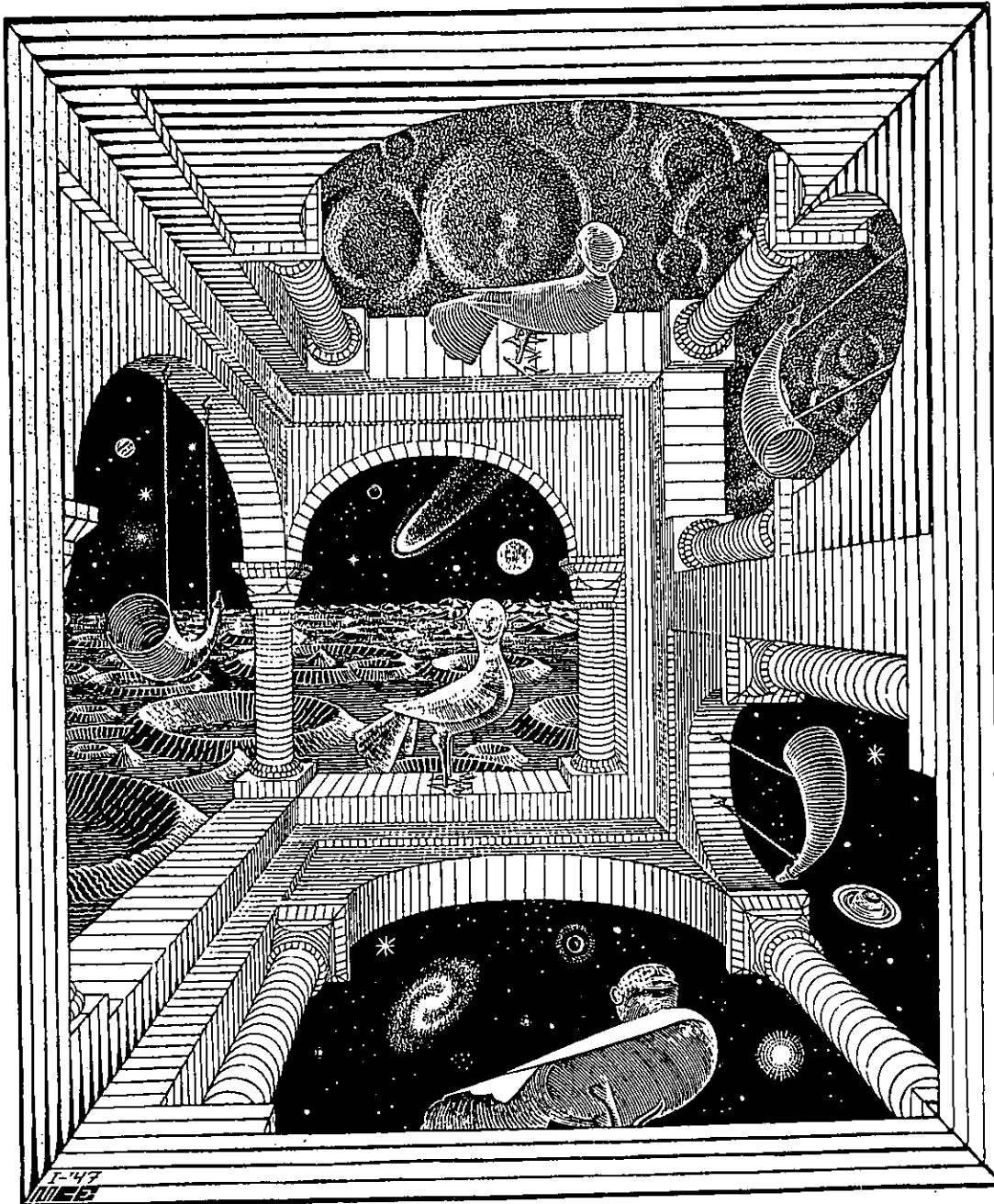
Aunque las trayectorias aparecen discontinuas, debe recordarse que para un valor fijo de Ψ los valores que le corresponden indistintamente son $\Delta = 0^\circ$ y $\Delta = 360^\circ$. Puede compararse este hecho con las proyecciones que de la superficie de la Tierra se hacen en los mapas, ya que todas las películas se depositaron sobre el mismo tipo de sustrato, todas empiezan y terminan en el mismo punto con periodos de 2815 \AA , 2333 \AA y 1792 \AA .

3

Cálculo del Espesor y Constantes Ópticas en Películas uniformes y no uniformes de Silicio Amorfo Hidrogenado

All science is the search of unity in hidden likeness

J. Bronowsky



3.1 Introducción

En este capítulo se desarrolla la teoría que proporciona las expresiones explícitas para calcular:

1. índice de refracción, (n)
2. coeficiente de absorción (absortividad α)
3. coeficiente de extinción, (k)
4. espesor, (d)
5. ancho de banda óptica, (E_0)

de películas de Silicio Amorfo que son perfectamente planas y uniformes, así como de las que no son uniformes y presentan diversas formas de rugosidad [37], [38], [39], [40]. Para películas que presentan alguna rugosidad, los métodos para calcular el espesor y los demás parámetros ópticos son totalmente distintos; aunque tienen su origen en las fórmulas de películas uniformes; en ambos tipos de películas los máximos y mínimos del espectro de transmisión son la clave en la que se basa el método de Swanepoel para obtener las constantes ópticas arriba citadas.

En la figura 3.12 se presenta un diagrama de bloques, donde se hace una recapitulación del proceso empleado por el programa escrito en Turbo Pascal 7 para calcular los parámetros ópticos. [42] ... [56]

3.2 Desarrollo para Películas Uniformes

El arreglo experimental usado se muestra en la figura 3.1.

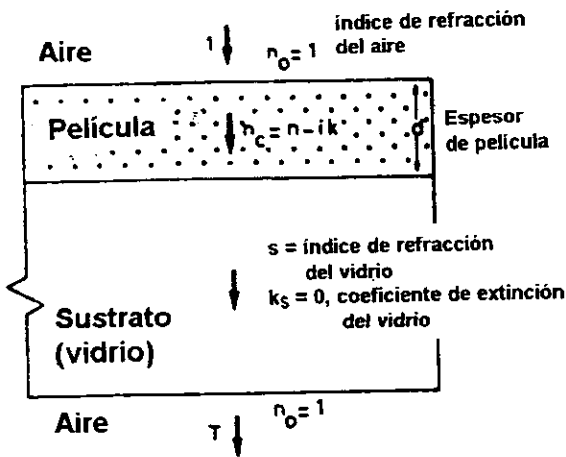


Fig. 3.1 Sistema de una película absorbente sobre un sustrato delgado transparente.

La película tiene un espesor d , un índice de refracción complejo $n_c = n_r - ik$ donde n_r es el índice de refracción real y k el coeficiente de extinción, el cual se puede expresar en términos del coeficiente de absorción α , usando la ecuación (3.7g).

El sustrato en la región UV/VIS/NIR se supone transparente, con un espesor varios órdenes de magni-

tud más grande que d , con un índice de refracción s y un coeficiente de absorción $\alpha_s = 0$.

El índice del aire circundante es $n_0 = 1$; si el espesor d no fuera uniforme o tuviese algunas protuberancias, todos los efectos de interferencia se destruirían y el espectro de transmisión se convertiría en una curva suave, como la curva de puntos T_α en la figura 3.2. El método de Swanepoel se basa en la idea de Manificier et.al. de crear las envolventes para los máximos y mínimos de transmisión, en la región donde se produce la interferencia y que puede apreciarse en las Figuras 3.2 para el caso de una película de a-Si:H de $1\mu\text{m}$ de espesor, o en las figuras 3.2.1 y 3.2.2 para películas de a-As₂S₃ de 410 nm y 915 nm respectivamente.

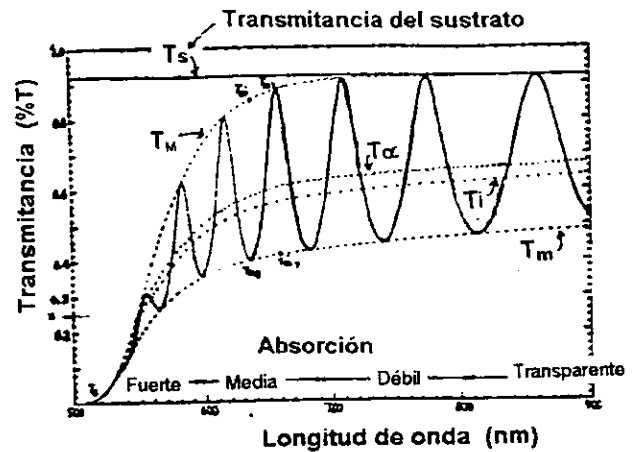


Fig. 3.2 Espectro de transmisión simulada (curva continua) para una película de a-Si:H de $1\mu\text{m}$ de espesor depositada sobre un sustrato de vidrio finito cuya transmisión es T_s .

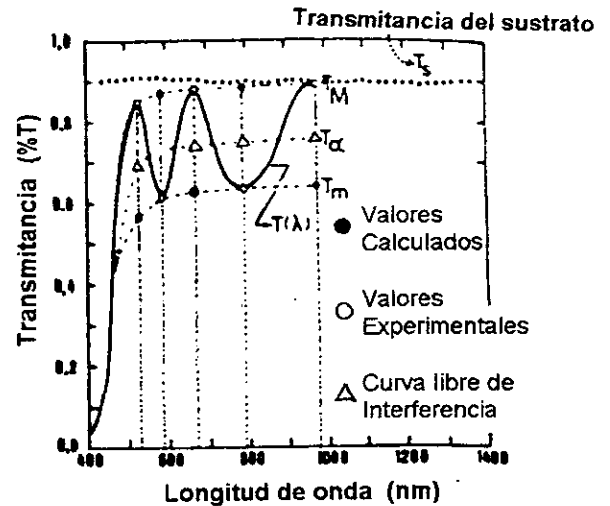


Fig. 3.2.1

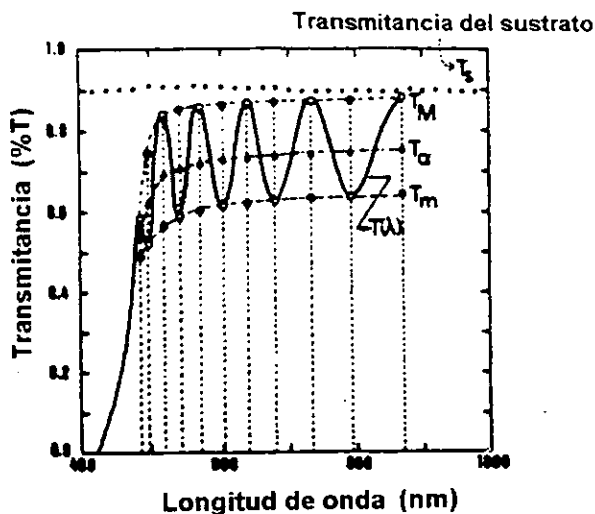


Fig. 3.2.2

El espectro puede ser dividido a grandes rasgos en cuatro regiones (consultar la figura 2.1 del Capítulo 2 para saber aproximadamente a que región del espectro electromagnético corresponde cada una).

- En la **región transparente** $\alpha = 0$ y la transmisión se obtiene a partir de n y s a través de múltiples reflexiones,
- En la región de **absorción débil** α es pequeña, pero la transmisión comienza a reducirse.
- En la región de **absorción media** α es grande y la transmisión decrece debido a α .
- Por último en la región de **fuerte absorción** la transmisión decrece drásticamente.

Si el espesor de la película fuese uniforme, los efectos de interferencia producirían un fenómeno en el espectro de absorción como el mostrado por la curva gruesa de la figura 3.2.

Considerando el sustrato sin película, la transmisión será: (ver sección 2.12.1)

$$T_s = \frac{(1-R)^2}{1-R^2} \quad (3.1)$$

donde

$$R = \left(\frac{s-1}{s+1} \right)^2 \quad (3.2)$$

$$T_s = \frac{2s}{s^2+1} \quad (3.3)$$

$$s = \frac{1}{T_s} + \left(\frac{1}{T_s^2} - 1 \right)^{1/2} \quad (3.4)$$

Además, la ecuación básica para las bandas de interferencia es:

$$2nd = m\lambda \quad (3.5)$$

donde m toma valores enteros para los máximos y $m \in \{1/2, 3/2, \dots\}$ para los mínimos.

La ecuación (3.5) contiene información sobre el producto de n y d pero es imposible obtener información separada de ninguna de ellas, la ecuación para la transmisión T en el caso de la figura 3.2 es una función multivariable bastante compleja $T = T(\lambda, s, n, d, \alpha)$, (Keradec 1973, Mini 1982 [100], [101]), y es igual a:

$$T = \frac{A'x}{B' - C'x - D'x^2} \quad (3.6)$$

donde

$$A' = 16s(n^2 + k^2) \quad (3.7a)$$

$$B' = [(n-1)^2 + k^2][(n-1)(n+s^2) + k^2] \quad (3.7b)$$

$$C' = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) - 2k^2(s^2 + 1)]2\cos\varphi - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + (s^2 + 1)(n^2 - 1 + k^2)]2\sin\varphi \quad (3.7c)$$

$$D' = [(n-1)^2 - k^2][(n-1)(n-s^2) + k^2] \quad (3.7d)$$

$$\varphi = \frac{4\pi nd}{\lambda} \quad (3.7e)$$

$$x = e^{-\alpha d} \quad (3.7f)$$

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3.7g)$$

Si en la ecuación (3.6) se pone $k = 0$, (una aproximación válida sobre la mayor parte del espectro de la figura 3.2) y si el índice de refracción del sustrato se supone conocido (s), (3.6) se transforma en una función de dos variables $T = T(n, x)$ más sencilla:

$$T = \frac{Ax}{B - Cx\cos\varphi + Dx^2} \quad (3.8)$$

donde

$$A = 16n^2s \quad (3.9a)$$

$$B = (n+1)^3(n+s^2) \quad (3.9b)$$

$$C = 2(n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (3.9c)$$

$$D = (n-1)^3(n-s^2) \quad (3.9d)$$

$$\varphi = \frac{4\pi nd}{\lambda} \quad (3.9e)$$

$$x = e^{-\alpha d} \quad (3.9f)$$

Los extremos de interferencia para los máximos y mínimos se escribirán respectivamente como:

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (3.10)$$

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (3.11)$$

Ambas ecuaciones se consideran funciones continuas de las variables λ , n y x (Manificier et.al. 1976) [104], ver Figs. 3.2, 3.2.1 y 3.2.2. A cada máximo de transmisión (T_M) le corresponde un mínimo (T_m).

3.2.1 La región transparente en Películas Uniformes

En esta región se sustituyen los valores $\alpha = 0$ ó $x = 1$ en las ecuaciones de los máximos y mínimos de transmisión (3.10) y (3.11), adicionalmente, en la ecuación de los máximos (3.10) se sustituyen las ecuaciones (3.9a...f) obteniéndose:

$$T_M = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (3.12)$$

La ecuación (3.12) es idéntica a la ecuación (3.3), siendo los máximos de interferencia de la muestra T_M función únicamente del índice de refracción del sustrato, aparte de que ambos espectros coinciden. La ecuación (3.12) puede usarse para calcular el índice de refracción del sustrato en la región transparente, conjuntamente con la ecuación (3.4), cuando los máximos se van apartando de T_s , empieza la absorción.

Por otra parte, para obtener una expresión que represente a los mínimos de transmisión, se sustituye (3.9) en (3.11) con $x = 1$, obteniéndose:

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

ó

$$n = \left[M + (M^2 - s^2)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (3.13)$$

donde

$$M = \frac{2s}{T_m} - \frac{s^2 + 1}{2}$$

Siendo T_m función de n y s ; n puede ser calculada a partir de T_m usando solamente la ecuación (3.13).

3.2.2 Región de absorción débil y media en Películas Uniformes

En esta región $\alpha \neq 0$ y $x < 1$, restando el recíproco de la ecuación (3.10) del recíproco de la ecuación (3.11) obtenemos una expresión que es independiente de x :

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A} \quad (3.14)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.9) en (3.14) y resolviendo para n se obtiene:

$$n = \left[N + (N^2 - s^2)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (3.15)$$

donde

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

La ecuación (3.15) puede usarse para calcular $n(\lambda)$ a partir de los máximos y mínimos de transmisión T_M y T_m . Esta fórmula es idéntica a la deducida por Manificier et.al. [104] usando la aproximación de sustrato infinito.

Una vez que $n(\lambda)$ se conoce, todas las constantes en la ecuación (3.9) son conocidas y x puede calcularse de varias maneras. (Los resultados pueden simplificarse usando las ecuaciones (3.9)). Resolviendo la Ec. (3.10) y simplificando el resultado con las Ecs. (3.9):

$$x = \frac{E_M - \left[E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)} \quad (3.16)$$

donde:

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

Resolviendo la ecuación (3.11) se obtiene:

$$x = \frac{E_m - \left[E_m^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)} \quad (3.17)$$

donde:

$$E_m = \frac{8n^2s}{T_m} - (n^2 - 1)(n^2 - s^2)$$

3.2.3 Región de fuerte absorción en Películas Uniformes

En la región de fuerte absorción las franjas de interferencia desaparecen. No hay manera de calcular n y x independientemente una de la otra. Los valores de n pueden estimarse extrapolando los valores calculados en otras partes del espectro. Los valores de x pueden obtenerse usando las fórmulas (3.16) y (3.17). Para valores muy grandes de α , las curvas T_M y T_m convergen a una sola curva T_0 , ver Figs. 3.2, 3.2.1 y 3.2.2.

Si los efectos de interferencia son ignorados, la ecuación (3.8) puede escribirse para $x \ll 1$ como:

$$T_0 \approx \frac{Ax}{B}$$

$$x \approx \frac{(n+1)^3(n+s^2)}{16n^2s} \quad (3.18)$$

3.2.4 Aproximaciones por sustrato infinito en Películas Uniformes

Si en vez de calcular la transmisión con el arreglo experimental de la figura 3.1, se hubiese hecho suponiendo que el sustrato es infinito, ignorando las múltiples reflexiones que se originan en la parte trasera del sustrato, (como lo han hecho muchos investigadores) [104], se obtendría la siguiente ecuación:

$$T = \frac{A''x}{B'' - C''x + D''x^2} \quad (3.19)$$

$$A'' = 16s(n^2 + k^2) \quad (3.20a)$$

$$B'' = [(n+1)^2 + k^2][(n+s)^2 + k^2] \quad (3.20b)$$

$$C'' = \left[(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) + 4k^2s \right] 2\cos\phi - k \left[2(n^2 - s^2 + k^2) + 2s(s^2 + 1)(n^2 - 1 + k^2) \right] 2\sin\phi \quad (3.20c)$$

$$D'' = [(n-1)^2 + k^2][(n-s)^2 + k^2] \quad (3.20d)$$

En la figura 3.3 se compara el espectro de transmisión calculado con la ecuación (3.19) con un espectro de transmisión obtenido con la ecuación (3.6) (curva punteada)

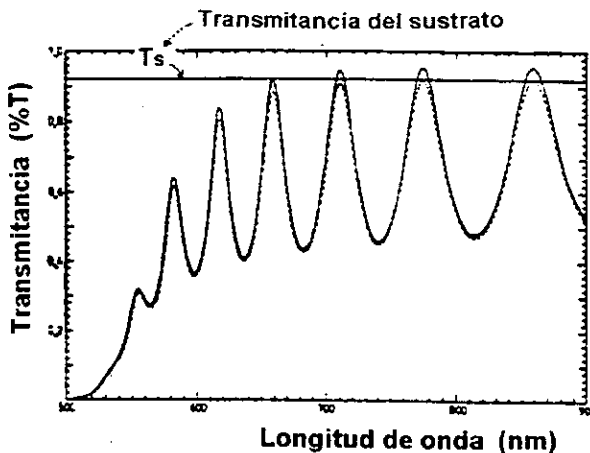


Fig. 3.3 Espectro de transmisión simulada de acuerdo con la teoría de sustrato infinito (curva continua) comparándolo con el espectro de una película depositada sobre un sustrato finito (curva punteada).

En la figura 3.3 se observa que la ecuación 3.19 produce valores más grandes para T_M y T_m que la ecuación 3.6, la cual fue deducida para el arreglo de la figura 3.1. La ecuación 3.19 predice una transmisión en la región transparente de alrededor de 4% más alta que la transmisión del sustrato solo, lo cual es imposible. Con estos resultados se concluye que la ecuación 3.19 no representa una situación física real, la ecuación 3.19 también puede escribirse en la forma de (3.8) y (3.9) para el caso $k = 0$, la única diferencia se da en las expresiones para B y D en (3.9b) y (3.9d) i.e. $B \equiv (n+1)^2(n+s)^2$ y $D \equiv (n-1)^2(n-s)^2$, ya que la ecuación para n , (ecuación 3.15) es independiente de B y D , es válida tanto para 3.6 como para 3.19. La fórmula para x contiene a B y D , y por tanto, será diferente para ambas cosas. Esta es una de las razones por las que se utilizó el arreglo experimental de la figura 3.1.

3.2.5 Cálculo del índice de refracción del sustrato

El índice de refracción del sustrato (s), puede determinarse, a través del espectro de transmisión del sustrato. usando la ecuación (3.4), en este trabajo se asume que (s) es constante con un valor para el índice de refracción de $s = 1.55$ y una transmisión de 0.921 como se muestra en la figura 3.2, para el cálculo de n en la región débil y media, los valores de T_M y T_m a diferentes longitudes de onda deben ser obtenidos; en la figura 3.12 se muestra un diagrama de flujo que ilustra el funcionamiento del programa que calcula las constantes ópticas de las películas uniformes.

3.3 Películas No Uniformes

En esta sección se dan las fórmulas para obtener los parámetros ópticos de películas no uniformes.

Cuando no se producen películas con la uniformidad deseada, la teoría y métodos expuestos en la sección anterior no son aplicables tal cual sino que es necesario hacer un manejo de ellas.

Las inhomogeneidades sobre la superficie de las películas tienen gran influencia sobre los espectros de transmisión de las mismas y es a través de estos fenómenos como puede detectarse su presencia.

3.3.1 Teoría para Películas no Uniformes

Las variaciones de superficies para las que es válida la teoría que se expone a continuación se muestran en la figura 3.4:

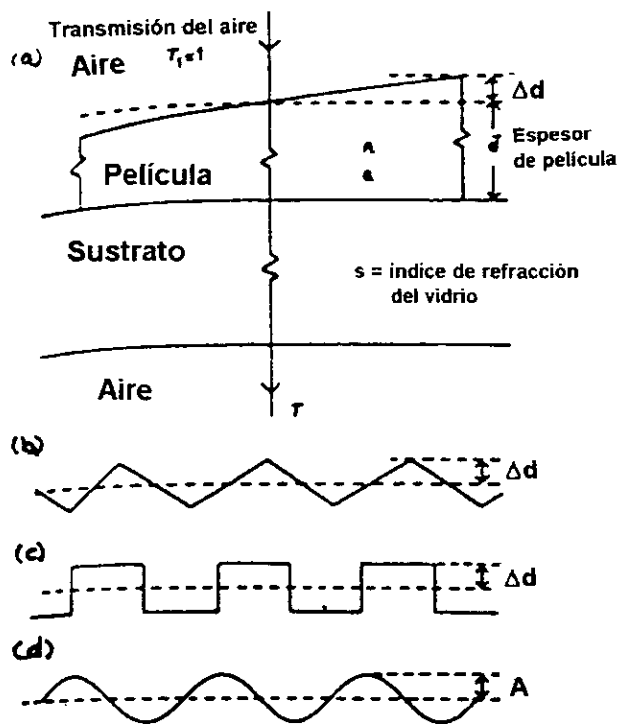


Fig. 3.4 (a) Arreglo de una película absorbente con una variación en su espesor depositada sobre un sustrato transparente finito.; (b) Superficie con una rugosidad triangular; (c) Rugosidad rectangular; (d) Rugosidad Sinusoidal.

Suponiendo que el espesor varía linealmente sobre el área iluminada, con la radiación incidiendo perpendicularmente a la superficie se obtiene:

$$d = \bar{d} \pm \Delta d \quad (3.21)$$

donde Δd está relacionado con la variación en el espesor respecto del promedio del espesor \bar{d} como se muestra en la figura 3.4a.

Tres formas de rugosidad de las superficies en las cuales puede definirse Δd se muestran en las figuras 3.4b a 3.4d. La figura 3.4b muestra una superficie triangular con forma de diente de sierra y la figura 3.4c una superficie con rugosidad cuadrangular, lo que se considera como Δd se muestra muy claramente en cada figura, la figura 3.4d tiene una rugosidad sinusoidal y una amplitud A , pudiéndose aplicar la expresión $\Delta d = 4A/\pi$ en la ecuación (3.21) para abarcar este tipo de rugosidad, la forma de cualquier otra superficie puede ser aproximada por cualquiera de las tres formas expuestas en la figura 3.4.

Los efectos de la variación del espesor sobre un típico espectro de transmisión se muestran en las figuras 3.5 y 3.6. La curva punteada representa el espectro

típico de una película con espesor uniforme, mientras que la curva continua representa el espectro de una película de espesor no uniforme. En este último se observa que el patrón de interferencia se ensancha.

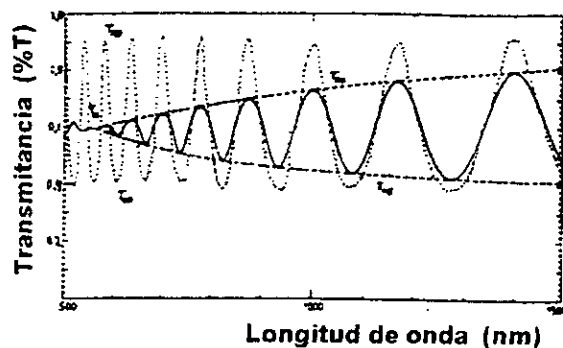


Fig. 3.5 Espectro de transmisión simulada para una película transparente con espesor uniforme de $1 \mu\text{m}$ (curva punteada), comparado con el espectro de transmisión de una película no uniforme que tiene una variación de $\Delta d = 40 \text{ nm}$ en su espesor (curva continua).

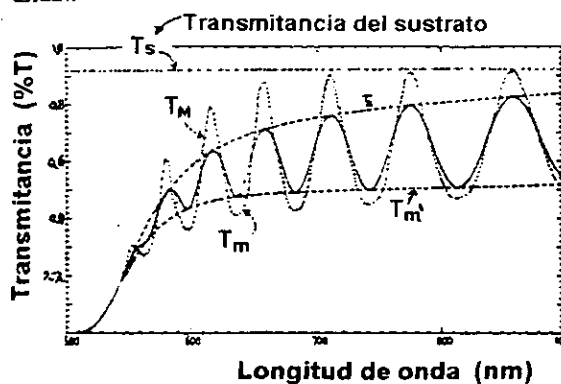


Fig. 3.6 Espectro de transmisión simulada de una película absorbente uniforme de $1 \mu\text{m}$ (curva punteada) comparado con el de una película no uniforme con una variación en el espesor de $\Delta d = 30 \text{ nm}$ (curva continua).

Para empezar el estudio de las películas no uniformes se supondrá que el índice de refracción del sustrato es conocido e igual a $s = 1.55$. La fórmula para la transmisión de las ondas electromagnéticas será función de las siguientes variables:

$$T = T(\Delta d, n, \bar{d}, x) \quad (3.22)$$

Una de las ecuaciones que se aplican tanto a las películas uniformes como a las no uniformes es:

$$2\bar{d} = m\lambda \quad (3.23)$$

donde m es el número de orden entero o semientero. En las ecuaciones (3.21) y (3.22) se involucran cinco parámetros: Δd , n , \bar{d} , x y m , pero desafortunadamente la ecuación (3.22) no puede resolverse analíticamente como la ecuación (3.8) de la sección anterior, así, las cosas, la zona del espectro electromagnético donde se trabajará (UV/VIS/NIR) se dividirá también en cuatro partes, y los métodos para obtener los parámetros ópticos de las películas serán numéricos, los cuales se abordarán en las secciones siguientes.

3.3.2 Región Transparente para Películas no Uniformes

En la región transparente ocurre que $\alpha = 0$ ó $x = 1$ y la ecuación (3.8) del capítulo anterior:

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos \varphi + Dx^2} \quad (3.8)$$

se convierte en:

$$T = \frac{A}{B - C \cos \varphi + D} \quad (3.24)$$

La transmisión $T_{\Delta d}$ para una longitud de onda específica en el caso de películas no uniformes, de acuerdo con la ecuación (3.21) puede obtenerse integrando la ecuación (3.24):

$$T_{\Delta d} = \frac{1}{\varphi_2 - \varphi_1} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \frac{A}{B - C \cos \varphi + D} d\varphi \quad (3.25)$$

con los límites de integración definidos como:

$$\varphi_1 = \frac{4\pi n(\bar{d} - \Delta d)}{\lambda} \quad (3.26a)$$

$$\varphi_2 = \frac{4\pi n(\bar{d} + \Delta d)}{\lambda} \quad (3.26b)$$

El resultado de dicha integral es:

$$T_{\Delta d} = \frac{1}{4\pi n \Delta d} \frac{a}{(1 - b^2)^{1/2}}$$

$$\left[\tan^{-1} \left(\frac{1+b}{(1-b^2)^{1/2}} \tan \frac{\varphi_2}{2} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{1+b}{(1-b^2)^{1/2}} \tan \frac{\varphi_1}{2} \right) \right] \quad (3.27)$$

donde:

$$a = \frac{A}{B+D} \quad (3.28a)$$

$$b = \frac{C}{B+D} \quad (3.28b)$$

Las constantes involucradas en las ecuaciones (3.28) son las mismas que aparecen en la sección anterior, la integración no puede hacerse sobre todo el dominio de la tangente, de una rama a otra, porque las ecuaciones (3.28) no pueden usarse en la región de los mínimos del patrón de interferencia, solamente alrededor de los máximos. Desafortunadamente, la región sobre la que es posible aplicar las ecuaciones (3.28) disminuye al incrementarse Δd y eso hace que la dupla de ecuaciones (3.28) no sean muy útiles.

Fórmulas más prácticas pueden encontrarse al estudiar las envolventes alrededor de los máximos y mínimos del espectro; estas envolventes se toman como funciones continuas en λ y $n(\lambda)$, la ecuación que representa a la curva envolvente de los máximos se obtiene de la siguiente manera: sustituyendo la ecuación (3.26b) en la igualdad trigonométrica para $\tan(\varphi_2/2)$ que aparece en la ecuación (3.28), obteniéndose:

$$\tan \frac{\varphi}{2} = \frac{\tan \left(\frac{2\pi n \bar{d}}{\lambda} \right) + \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right)}{1 + \tan \left(\frac{2\pi n \bar{d}}{\lambda} \right) \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right)} \quad (3.29)$$

De la ecuación (3.8) y (3.9e) se desprende que para los máximos:

$$\frac{2\pi n \bar{d}}{\lambda} = L\pi \quad L = 0, 1, 2, 3, \dots$$

y por tanto en los máximos sucede que:

$$\tan \left(\frac{2\pi n \bar{d}}{\lambda} \right) = 0$$

Si esto es así, la ecuación para $\tan(\varphi_2/2)$ se reduce a:

$$\tan \left(\frac{\varphi_2}{2} \right) = \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right)$$

y análogamente se tiene:

$$\tan \left(\frac{\varphi_1}{2} \right) = -\tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right)$$

Sustituyendo las ecuaciones anteriores en (3.28), se obtiene:

$$T_{\Delta d} = \frac{\lambda}{4\pi n \Delta d} \frac{a}{(1-b^2)^{1/2}} \cdot \tan^{-1} \left[\frac{1+b}{(1-b^2)^{1/2}} \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right) \right] \quad (3.30)$$

La ecuación anterior puede aprovecharse para deducir una expresión para la envolvente de los mínimos, si se cambia el signo de C en la ecuación (3.28b):

$$T_{md} = \frac{\lambda}{2\pi n \Delta d} \frac{a}{(1-b^2)^{1/2}} \cdot \tan^{-1} \left[\frac{1-b}{(1-b^2)^{1/2}} \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right) \right] \quad (3.31)$$

El rango de validez de las expresiones (3.30) y (3.31) es

$$0 < \Delta d < \frac{\lambda}{4\pi} \quad (3.32)$$

El comportamiento de las ecuaciones discutidas anteriormente se muestra en la figura 3.5; en la cual se simulan dos espectros de transmisión: el primero, a partir de la ecuación (3.24) para una película con un espesor uniforme igual a 1000 nm (curva punteada) y el segundo para una película con el mismo espesor pero con una variación en el mismo de $\Delta d = 40$ nm (espectro continuo), en ambas simulaciones se consideró que el índice de refracción de las películas y del sustrato sobre el cual fueron depositadas era de $n = 3.5$ (constante) y $s = 1.51$ respectivamente.

En la sección anterior el valor del espectro de transmisión de los máximos coincide con el espectro de transmisión de los mínimos. Para los máximos la transmisión es:

$$T_{M0} = T_s = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (3.33)$$

y en los mínimos:

$$T_{m0} = \frac{4n^2 s}{n^4 + n^2(s^2 + 1) + s^2} \quad (3.34)$$

La curva discontinua superior que pasa por los máximos del espectro de interferencia corresponde a T_{Md} y la que pasa por los mínimos a T_{md} , ambas son independientes de \bar{d} ; por lo que el encogimiento del espectro se deberá únicamente a Δd . Una película más delgada produciría, por ejemplo, un patrón de franjas más abundante, con máximos y mínimos más unidos

entre sí; (ver Figs 3.2.1 y 3.2.2) pero, si en dicha película se tiene la misma Δd , su espectro estaría acotado por las mismas envolventes.

En el punto donde $\Delta d = \lambda/4n$, las ecuaciones (3.28), (3.30) y (3.31) convergen a un solo punto T_a (ver Figs 3.2, 3.2.1 y 3.2.2), destruyéndose el patrón de interferencia, sucede porque la diferencia de camino óptico es igual a $\lambda/2$ entre la parte más gruesa y la más delgada de la película, para valores pequeños de λ donde $\Delta d > \lambda/4n$, un segundo patrón de interferencia aparece, pero como no pueden sacarse resultados prácticos de él, no se tomará en cuenta.

Cuando en una película uniforme los máximos del espectro de absorción T_{M0} se separan del espectro de transmisión del sustrato (T_s) comienza la absorción, en el caso de películas no uniformes la curva T_{Md} se aproxima a T_s únicamente para longitudes de onda muy entradas en el rango del cercano infrarrojo (780 nm, 3000 nm), y aún cuando la absorptividad sea igual a cero ($\alpha = 0$) la curva seguirá decreciendo. El decremento en los máximos del espectro erróneamente se atribuye a un incremento en el coeficiente de absorción α (o absorptividad) o a la existencia de bandas de absorción. Ese efecto, en realidad, es ocasionado en parte por las inhomogeneidades sobre la superficie de la película. Esto lo avalan investigaciones hechas sobre el efecto de inhomogeneidades en películas delgadas, dichas investigaciones se basan en la hipótesis de que los valores de α disminuyen considerablemente para películas de InAs si los efectos en la rugosidad de la superficie se toman en cuenta.

En la figura 3.5 se aprecia que los mínimos tienen un comportamiento ascendente al disminuir λ , esto nunca sucede en las películas uniformes porque la ecuación (3.34) establece que los mínimos deben permanecer constantes o disminuir al hacerse la longitud de onda más pequeña. El que $\alpha > 0$ ocasiona que T_{m0} disminuya aún más, el efecto en la variación del espesor se opone a que ocurra lo anterior (que T_{m0} disminuya) y por tanto su presencia es una indicación de la existencia de inhomogeneidades en la película analizada.

El ancho de rendija es otro factor que puede ocasionar estos efectos en las películas, y su discusión se hará en la sección 3.3.3.

3.3.3 Región de absorción débil y media para Películas no Uniformes

En esta región $\alpha > 0$ y la integral en la ecuación (9) debe ser hecha sobre Δd y x . Hacer esto analíticamente es sumamente difícil, es mejor tratar de hacer una aproximación y considerar que x tiene un valor promedio sobre el rango de integración respecto a Δd . Esta aproximación es excelente siempre que se cumpla la condición $\Delta d \ll \bar{d}$.

Las constantes a y b se redefinen como:

$$a_x = \frac{Ax}{B + Dx^2} \quad (3.35a)$$

$$b_x = \frac{Cx}{B + Dx^2} \quad (3.35b)$$

$$x = e^{-\alpha \bar{d}} \quad (3.35c)$$

Con esto, las ecuaciones para las dos envolventes se transforman en:

$$T_{Md} = \frac{\lambda}{2\pi n \Delta d} \frac{a_x}{(1 - b_x^2)^{1/2}} \cdot \tan^{-1} \left[\frac{1 + b_x}{(1 - b_x^2)^{1/2}} \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right) \right] \quad (3.36)$$

$$T_{md} = \frac{\lambda}{2\pi n \Delta d} \frac{a_x}{(1 - b_x^2)^{1/2}} \cdot \tan^{-1} \left[\frac{1 - b_x}{(1 - b_x^2)^{1/2}} \tan \left(\frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \right) \right] \quad (3.37)$$

Las ecuaciones (3.36) y (3.37) constituyen un sistema independiente con dos parámetros desconocidos n y x , (ya que Δd puede conocerse resolviendo (3.30) y (3.31) en la región transparente). Estas ecuaciones tienen una única solución para n y x en el rango $0 < x \leq 1$, una vez obtenidos los valores del índice de refracción para los máximos y mínimos del espectro de transmisión con las ecuaciones (3.36) y (3.37), se puede posteriormente obtener una ecuación de Cauchy como la Ec. 2.37 del Capítulo 2; y con ella extrapolar valores del índice de refracción en la región de fuerte absorción; aunque pueden aproximarse mejor los valores si se incluye un término b/λ en la Ec. 2.13 del capítulo 2.

3.3.4 Región de fuerte absorción para Películas no Uniformes

En esta región, las curvas T , T_M y T_m convergen a una sola, como se muestra en la figura 3.6, los mismos procedimientos para películas uniformes pueden aplicarse aquí, sumando los recíprocos de las ecuaciones (3.10) y (3.11), resolviendo para x se obtiene:

$$x = \frac{A - (A^2 - 4T_i^2BD)^{1/2}}{2T_iD} \quad (3.38)$$

donde:

$$T_i = \frac{2T_{M0}T_{m0}}{T_{M0} + T_{m0}} \quad (3.39)$$

la ecuación (3.38) es equivalente a la ecuación (3.16) de la sección de Películas Uniformes.

T_i es la curva que pasa a través de los puntos de inflexión del patrón de interferencia y T_α es la media geométrica de T_M y T_m (ver Fig. 3.2).

3.3.5 Relación con el espectro de una película uniforme

Un proceso alternativo para tratar el espectro teórico en la figura 3.5 y los obtenidos experimentalmente es transformarlos en el espectro de una película uniforme con el mismo promedio en el espesor (\bar{d}), como el mostrado por la curva punteada de la figura 3.6, esto se hace utilizando las envolventes T_M y T_m de la película no uniforme junto con las envolventes T_{M0} y T_{m0} de las películas uniformes.

Sustituyendo (3.9) en (3.35) y a su vez (3.35) en (3.36) y (3.37), y usando (3.10) y (3.11) junto con la expresión (3.23); la relaciones entre las dos envolventes, las de la película no uniforme y la hipotética película uniforme son:

$$T_M' = \frac{T_\alpha}{\theta} \tan^{-1} \left[\frac{T_{M0}}{T_\alpha} \tan(\theta) \right]$$

$$T_m' = \frac{T_\alpha}{\theta} \tan^{-1} \left[\frac{T_{m0}}{T_\alpha} \tan(\theta) \right]$$

o

$$T_M' = \frac{(T_{M0}T_{m0})^{1/2}}{\theta} \tan^{-1} \left[\left(\frac{T_{M0}}{T_{m0}} \right)^{1/2} \tan(\theta) \right] \quad (3.40)$$

$$T_m' = \frac{(T_{M0}T_{m0})^{1/2}}{\theta} \tan^{-1} \left[\left(\frac{T_{m0}}{T_{M0}} \right)^{1/2} \tan(\theta) \right] \quad (3.41)$$

donde

$$\theta = \frac{2\pi n \Delta d}{\lambda} \quad (3.42)$$

$$y \quad 0 < \theta < \frac{\pi}{2}$$

las ecuaciones (3.40) y (3.41) son dos ecuaciones trascendentes en T_{M0} , T_{m0} y θ . En la región transparente $T_{M0} \equiv T_s$; y T_s es conocida a partir de la ecuación (3.33).

Un notable incremento en la determinación de los parámetros ópticos tanto para películas uniformes como no uniformes se logra al calcular exactamente los valores enteros y semienteros de m para cada longitud

de onda λ . Esto se hace fácilmente con el siguiente método que calcula m y d (espesor).

El procedimiento para películas uniformes es el siguiente: se supone que el número m (entero o semientero) del primer extremo es m_1 . La Ecuación 3.5 se reescribe para los máximos y mínimos del espectro de transmisión como:

$$2nd = (m_1 + \frac{L}{2})\lambda \quad L = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.43)$$

reacomodando los términos de (3.43) se tiene:

$$\frac{L}{2} = 2d\left(\frac{n}{\lambda}\right) - m_1 \quad (3.43.1)$$

Esta es la ecuación de una recta, si $L/2$ se grafica contra n/λ la línea tendrá una pendiente de $2d$ y una ordenada al origen de $-m_1$, la figura 3.7 muestra la línea recta para el caso de $L/2$ vs n/λ .

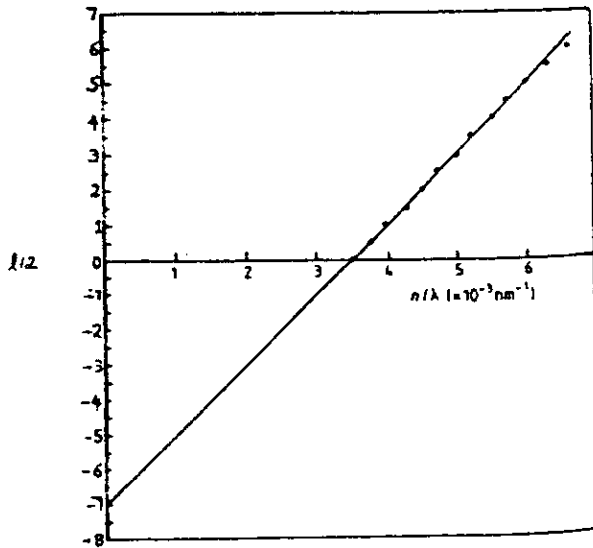


Fig. 3.7 Recta de $L/2$ vs n/λ para determinar el número de orden m y el espesor.

El procedimiento correspondiente para películas no uniformes es similar al descrito anteriormente, sólo que utiliza la ecuación (3.23) reescribiéndola como:

$$\frac{L}{2} = \frac{2n\bar{d}}{\lambda} - m_1 \quad L = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (3.44)$$

donde m_1 es el número de orden del primer extremo ($L = 0$) considerado (entero para un máximo o semientero para un mínimo).

Ahora, sustituyendo la ecuación (3.42) en (3.43) se obtiene:

$$\frac{L}{2} = \left(\frac{\bar{d}}{\pi\Delta d}\right)\theta - m_1 \quad (3.44.1)$$

Por lo que graficando $L/2$ en función de θ para la región transparente, la pendiente y la ordenada al origen m_1 de (3.44.1) pueden obtenerse el espesor y el número de orden como se muestra en la figura 3.8.

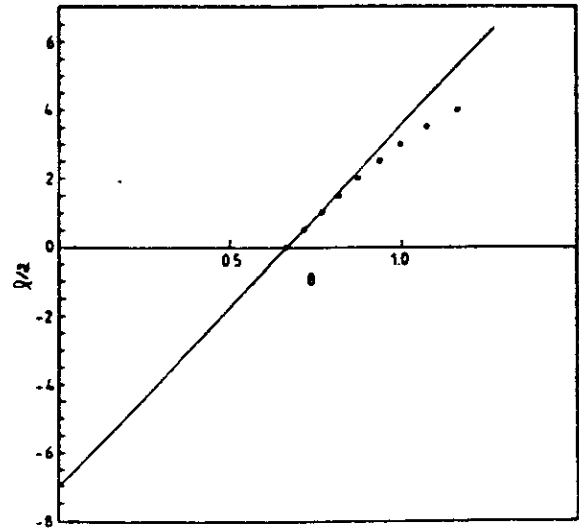


Fig. 3.8 Gráfica de $L/2$ vs θ en la región de absorción.

Sustituyendo los valores de θ , T_M y T_m en (3.40) y (3.41) se obtienen los valores de los máximos y mínimos de transmisión. Los valores así obtenidos, T_{M0} y T_{m0} pueden usarse para calcular \bar{d} y $\alpha(\lambda)$.

3.3.6 Cálculo del espesor $\langle d \rangle$

El método utilizado para calcular el espesor de las películas de silicio amorfo hidrogenado descansa en la teoría de interferencia; en la cual se tiene un haz que incide directamente sobre una placa de caras paralelas que funciona como un interferómetro de Fabry - Perot como se muestra en la Fig. 3.9

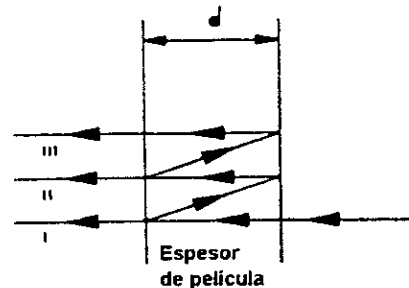


Fig. 3.9 Esquema de la reflexión y transmisión múltiple de un haz de luz sobre las caras internas de placas paralelas.

El haz I se transmite directamente y experimenta un cambio de fase, $\Delta\phi$, después de pasar a través de la placa:

$$\Delta\phi = \frac{n\omega d}{c} \quad (3.45)$$

Donde d es el espesor de la película asumiéndose incidencia casi normal por simplicidad. El rayo transmitido No.2 es el resultado de dos reflexiones internas y tiene un cambio de fase $\Delta\phi' = 3\Delta\phi = 3n\omega d/c$. Análogamente, el rayo III tiene cuatro reflexiones internas con un cambio de fase de $5\Delta\phi$, etc., la interferencia constructiva ocurre si la diferencia de fase entre dos rayos consecutivos es un múltiplo de 2π , i.e.,

$$\frac{2n\omega d}{c} = 2\pi m \quad \text{con } m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

ó

$$2n\omega d = m\lambda$$

De forma similar, la interferencia destructiva ocurre si dos rayos consecutivos tienen un cambio de fase de π o un múltiplo impar de π , i.e.,

$$\frac{2n\omega d}{c} = \left(m + \frac{1}{2}\right)2\pi$$

ó

$$2n\omega d = \left(m + \frac{1}{2}\right)\lambda$$

Por tanto, al cambiar la longitud de onda λ se obtienen las franjas de interferencia (ver Fig. 3.10)

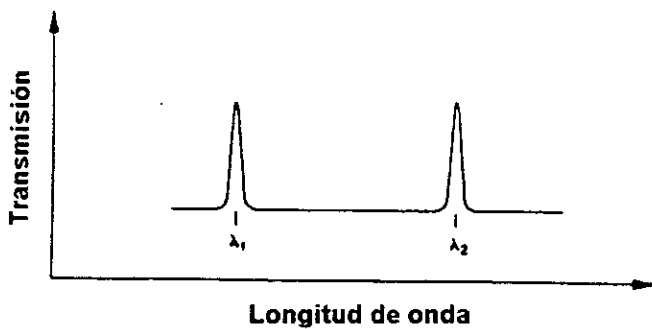


Fig. 3.10 Diagrama de las franjas de transmisión típicas observadas en un arreglo de placas paralelas cuando la frecuencia de la luz se varía.

La separación entre dos máximos (o mínimos) con distinto índice de refracción es:

$$2n_1\omega d = m\lambda_1$$

y

$$2n_2\omega d = (m+1)\lambda_2$$

eliminando m da por resultado:

$$d = \frac{\lambda_1\lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)} \quad (3.46)$$

donde n_1 y n_2 son los índices de refracción entre dos máximos (o mínimos) y λ_1 λ_2 sus respectivas longitudes de onda.

3.3.7 Correcciones para el ancho de rendija del espectrofotómetro

En la práctica un espectrofotómetro siempre tiene un ancho espectral finito (o ancho de rendija S) y una banda en el rango $\lambda \pm S/2$ incide sobre la película, (ver Apéndice 1, Sec. A1.1.2.3). El efecto del ancho de rendija finito sobre el espectro de transmisión es encoger el patrón de franjas de interferencia: los máximos de transmisión T_M se empequeñecen y los mínimos se alargan, el efecto puede minimizarse reduciendo la rendija S , pero al hacerlo aparecen problemas de ruido que reducen la precisión de los valores de transmisión T para valores pequeños de S . El efecto del ancho de rendija S es importante cuando el ancho de las franjas de transmisión son del orden de magnitud de S , como puede darse el caso cuando se trabaja con películas delgadas, como se muestra en la Fig. 3.11.

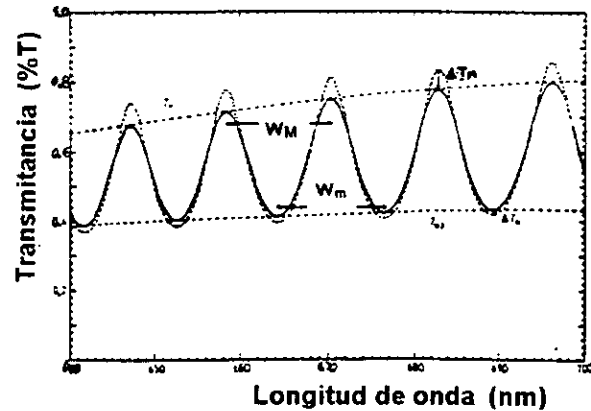


Fig. 3.11 Espectro de transmisión simulado para una apertura de 4 nm de un espectrofotómetro (curva continua) comparada con un espectro de transmisión de un espectrofotómetro con ancho de rendija cero (curva punteada) de una película en ambos casos de 4 μm de espesor.

Los errores sobre el espectro de transmisión debidos al ancho de rendija S son muy serios, pero afortunadamente pueden corregirse; el cambio en T, igual a ΔT , es directamente proporcional a T y a S e inversamente proporcional al ancho de línea, w. Análisis teóricos muestran que la dependencia respecto de estas variables es cuadrática, i.e.,

$$\Delta T \propto \left(\frac{TS}{w}\right)^2 \quad (3.47)$$

La constante de proporcionalidad depende de la forma de definir w, si w se define simplemente como la distancia entre dos extremos inmediatos al primero en consideración, la constante de proporcionalidad será casi 1 para un amplio rango de condiciones, (para máximos y mínimos T_{MS} y T_{ms} de transmisión). Los valores correctos T_M y T_m se calculan a partir de las siguientes ecuaciones:

$$T_M = T_{MS} + \left(\frac{T_{MS}S}{w_M}\right)^2 \quad (3.48a)$$

$$T_m = T_{ms} - \left(\frac{T_{ms}S}{w_m}\right)^2 \quad (3.48b)$$

donde:

$$w_{M(i)} = \lambda_{m(i-1)} - \lambda_{m(i+1)}$$

$$w_{m(i)} = \lambda_{M(i-1)} - \lambda_{M(i+1)}$$

La forma de calcular w se muestra en la Fig. 3.11. El no utilizar estas fórmulas para corregir los errores que introduce el espectrofotómetro en los máximos y mínimos de transmisión hace que se incurra en errores de aproximadamente 50% en el espesor de las películas. Pero al utilizar las fórmulas de corrección, el espesor puede determinarse con una precisión del 0.1% aproximadamente; en la práctica, la anchura de la rendija puede incrementarse para reducir el ruido y las ecuaciones (3.48) utilizarse entonces para corregir los valores de la transmisión, incrementando así la precisión.

3.3.8 Cálculo de $\alpha(\lambda)$

La absorptividad $\alpha(\lambda)$ se determina con la absorción $x(\lambda)$ y el promedio del espesor, la ecuación de transmisión que se utiliza para calcular la absorción $x(\lambda)$ es la número (3.16), que es la mejor ecuación para el cálculo de $\alpha(\lambda)$, sobre el rango UV/VIS/NIR.

3.4 Método del Punto Fijo Multivariable

A continuación se hablará un poco sobre el método numérico utilizado para resolver los sistemas de ecuaciones no lineales: [(3.30) y (3.31)], [(3.36) y (3.37)] y [(3.40) y (3.41)]. Para ser más concisos y evitar nota-

ción complicada, se considerará sólo el caso de dos ecuaciones con dos incógnitas, estas generalmente se combinarán como:

$$f_1(x, y) = 0$$

$$f_2(x, y) = 0 \quad (3.49)$$

siendo el objetivo encontrar pares de valores (x,y) que satisfagan ambas ecuaciones.

Este método, al igual que los métodos de Jacobi y Gauss - Seidel se basa en resolver la ecuación para alguna de las variables x, por ejemplo, y la segunda para y.

$$x = g_1(x, y)$$

$$y = g_2(x, y) \quad (3.50)$$

Al igual que en los métodos mencionados, se tratará de obtener la estimación (k+1)-ésima a partir de la estimación k-ésima con la expresión:

$$x^{k+1} = g_1(x^k, y^k)$$

$$y^{k+1} = g_2(x^k, y^k) \quad (3.51)$$

se comienza con valores iniciales x^0, y^0 , se calculan nuevos valores x^1, y^1 y se repite el proceso, esperando que después de cada iteración los valores de x^k, y^k se aproximen a la raíz buscada x, y, la cual cumple con:

$$\bar{x} = g_1(\bar{x}, \bar{y})$$

$$\bar{y} = g_2(\bar{x}, \bar{y})$$

En el caso de una variable la manera particular de pasar de $f(x) = 0$ a $x = g(x)$ afecta la convergencia del proceso iterativo, entonces debe esperarse que la forma en que se resuelve para $x = g_1(x, y)$ y $y = g_2(x, y)$ afecte la convergencia de las iteraciones (3.51); también es de esperarse que la convergencia dependa de si se despeja x de f_2 o de f_1 .

Finalmente, la convergencia, en caso de existir, es de primer orden. De todas maneras, cualquiera que sea el sistema (3.51) a que se haya llegado y que se vaya a resolver con este método, puede aumentarse la velocidad de convergencia usando desplazamientos sucesivos en lugar de desplazamientos simultáneos del esquema (3.51), es decir, se iteraría mediante:

$$x^{k+1} = g_1(x^k, y^k)$$

$$y^{k+1} = g_2(x^{k+1}, y^k)$$

Si la iteración por desplazamientos simultáneos diverge, generalmente el método por desplazamientos sucesivos divergiría más rápido, es decir, se detecta más rápido la divergencia.

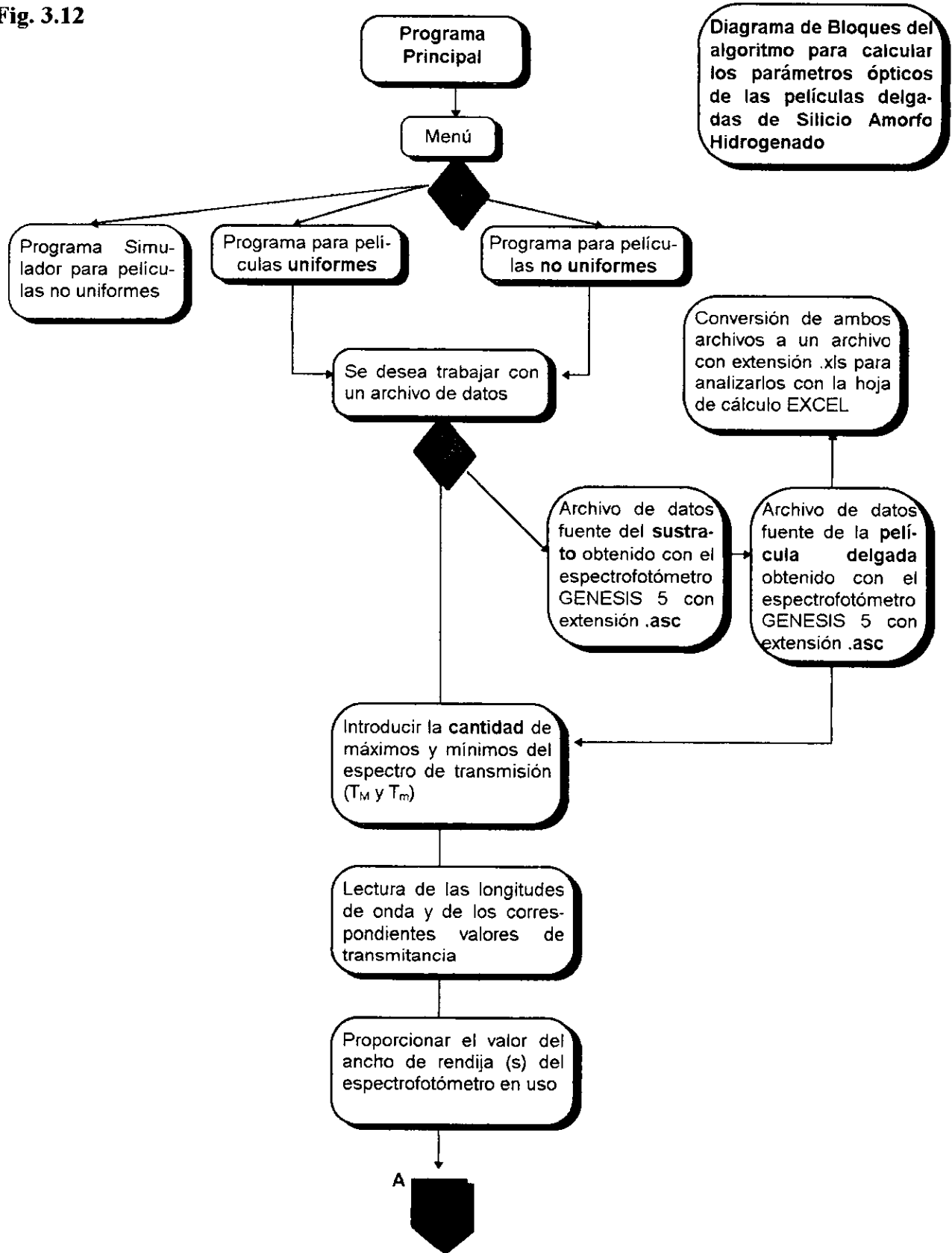
La convergencia se acelera mediante la utilización de procesos de punto fijo anidados, los cuales, por experiencia personal llegan a ser tan eficientes como el algoritmo de Aitken, que es un método de convergencia de segundo orden.

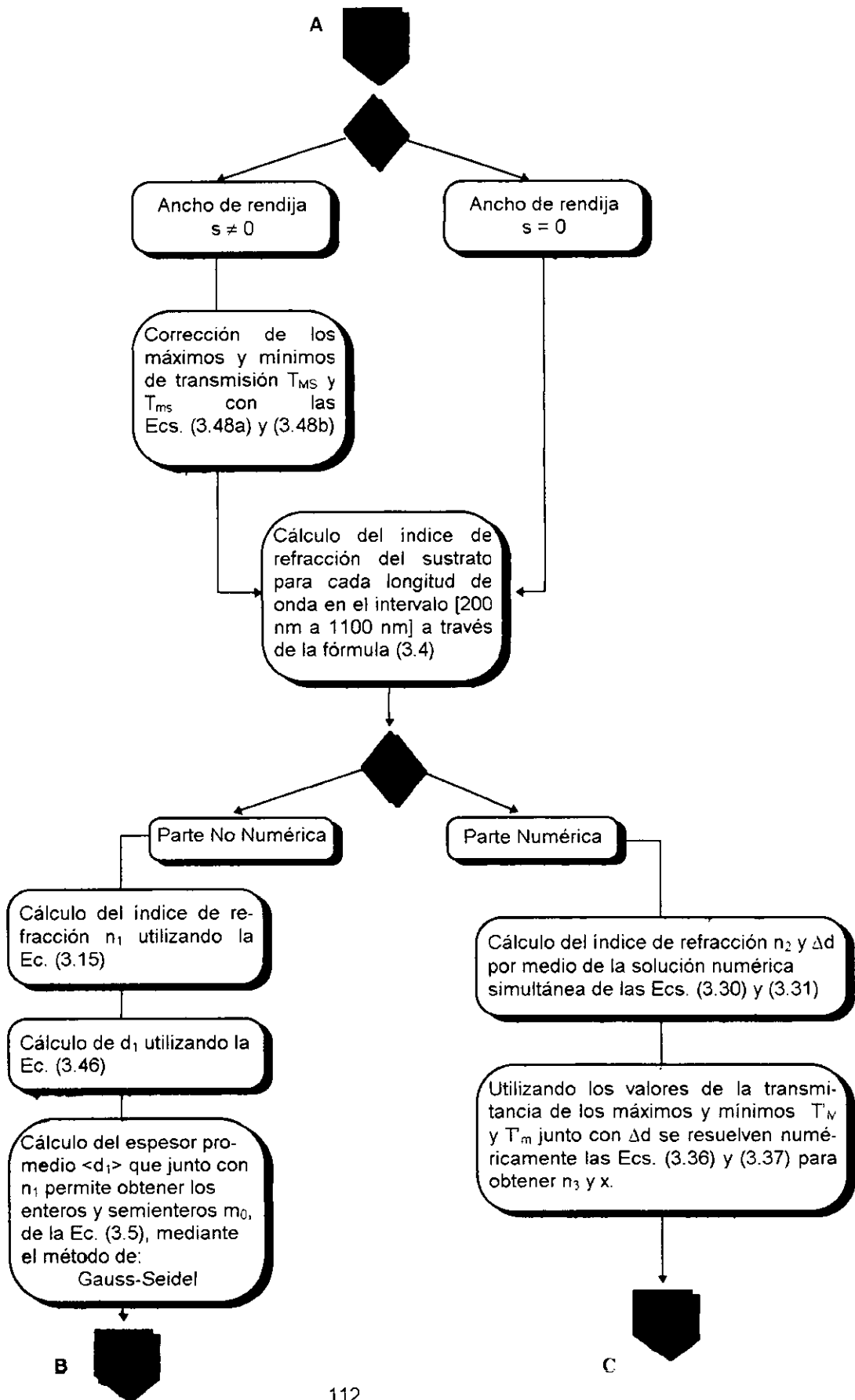
Los procedimientos de paro que se utilizan en los procesos iterativos son los siguientes: se selecciona una tolerancia $|P_N - P_{N-1}| < \varepsilon$, para expresar la incertidumbre relativa se utiliza:

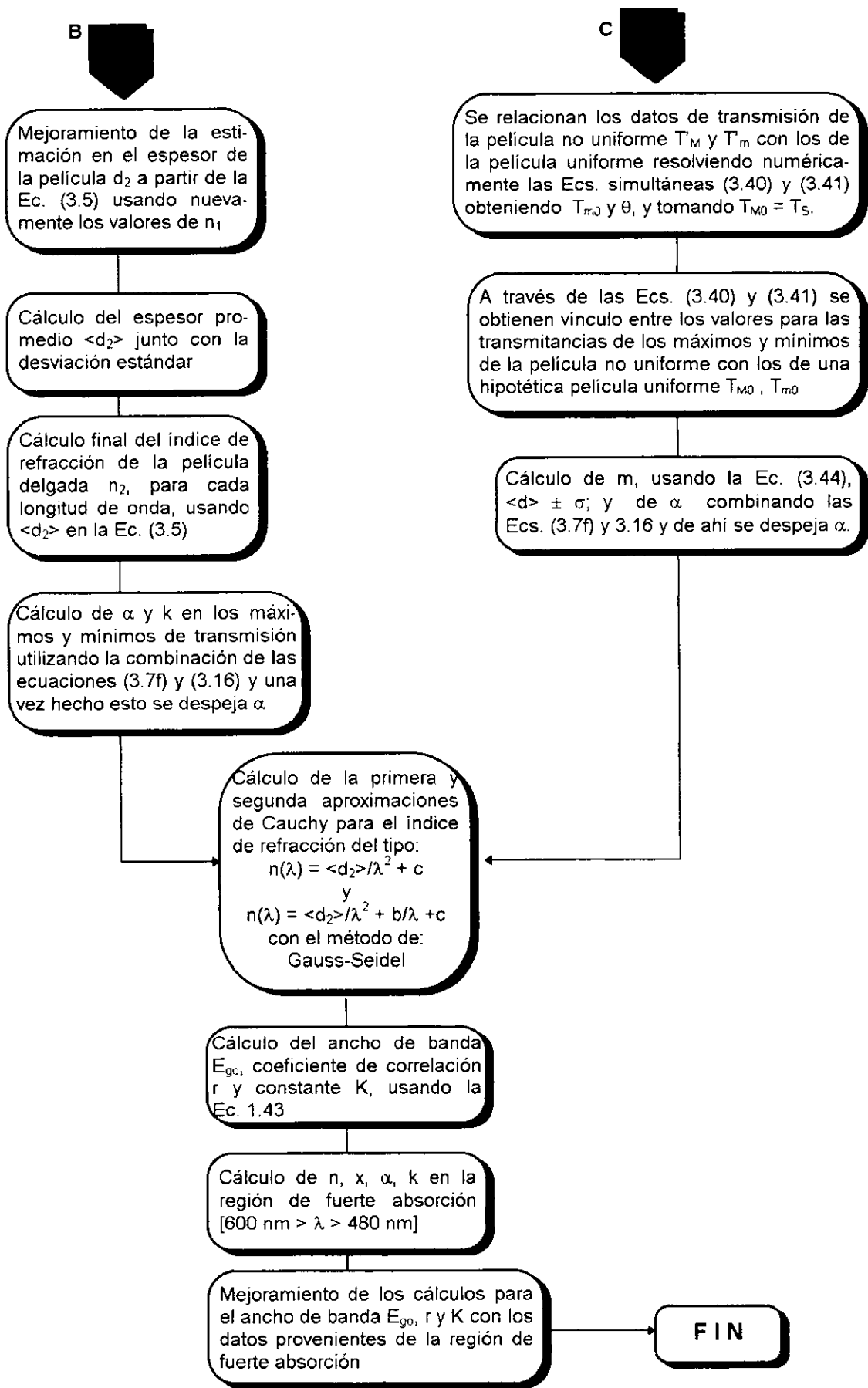
$$|P_N - P_{N-1}| / |P_N| < \varepsilon, \quad P_N \neq 0. \quad (3.52).$$

Por desgracia, al usar cualquiera de estos criterios de paro pueden surgir problemas, por ejemplo, existen sucesiones $\{p_n\}$ con la propiedad de que las diferencias $p_n - p_{n-1}$ convergen a cero, mientras que la sucesión diverge, también es posible que $f(p_n)$ esté cercano a cero, mientras que p_n difiere significativamente de p ; en caso de que no se conozcan f o p , la desigualdad (3.52) es el mejor criterio de paro al que puede recurrirse, ya que verifica el error relativo.

Fig. 3.12



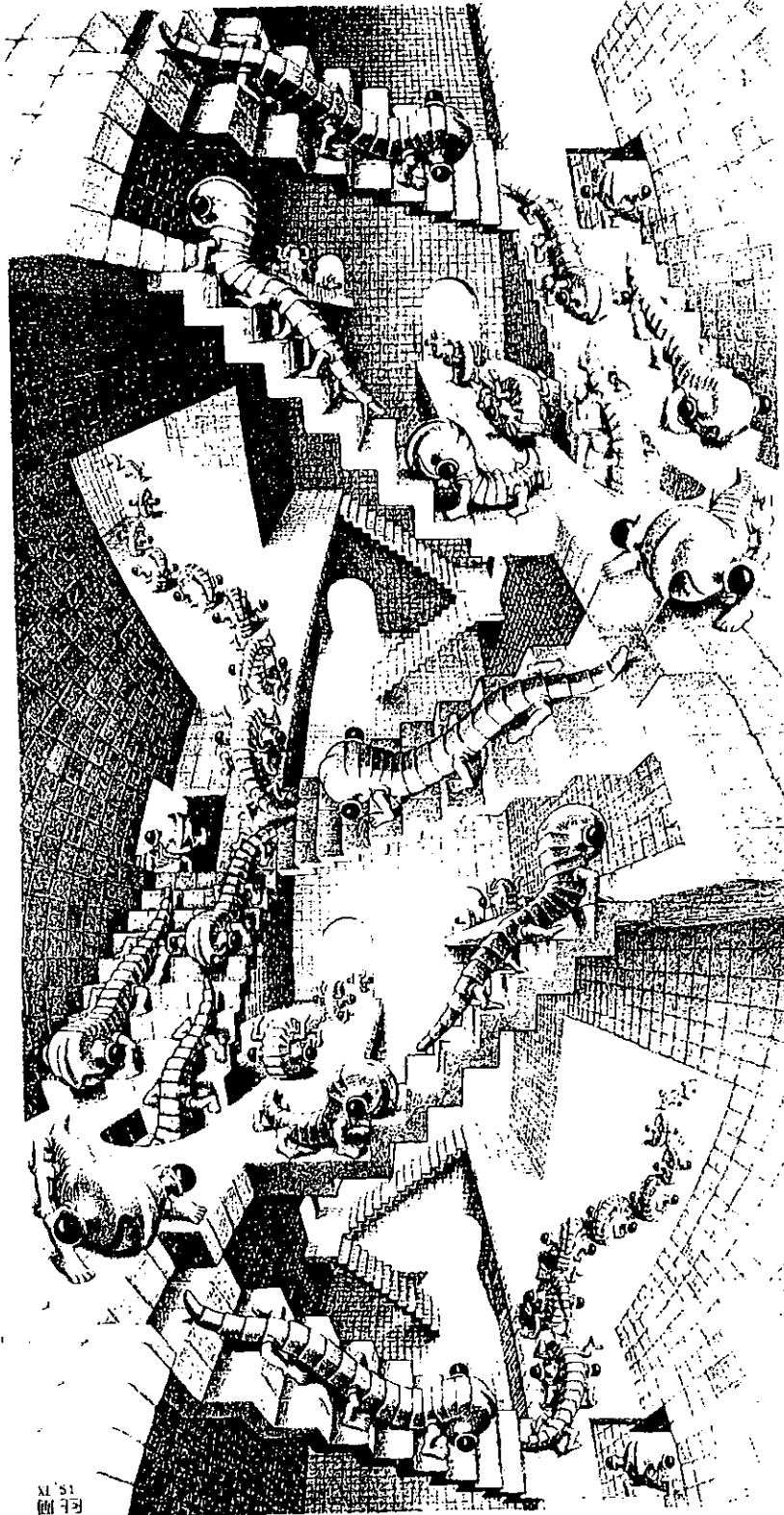




Resultados

When you cannot measure it, when you cannot express it in numbers, your knowledge of it is of a meagre and unsatisfactory kind.

Lord Kelvin



1871
E.F. 11

Como se mencionó en la introducción, el primer objetivo de esta tesis fue obtener algunas propiedades ópticas de las películas delgadas de a-Si:H a través de tres técnicas ópticas. La primera de ellas es la Espectroscopía UV/VIS/NIR aplicando el método desarrollado por Swanepoel (Cap. 7, [37], [38], [39], [40]) para películas uniformes y no uniformes.

A continuación se muestran diversas tablas donde se reportan algunos parámetros ópticos de interés; antes de pasar a los resultados en sí, se explica algo referente al código utilizado con las muestras a fin de que el lector entienda las tablas. En primer lugar las muestras se identificaron con las letras a-Si:H, seguidas de tres números, el primero de ellos indica el número del depósito de que se trató, porque las condiciones de cada depósito dentro de la cámara de vacío se cambiaron, dichas condiciones incluían los parámetros de potencia de las fuentes de poder de radio frecuencia y concentraciones de los gases, el segundo número indica la posición que ocupó la muestra dentro de la cámara de depósito, debido a que las muestras se colocaron en un receptáculo especial hecho de aluminio en forma de flor con siete brazos numerados en el sentido de las manecillas del reloj, el último dígito señala el número del análisis hecho a la muestra con el espectrofotómetro y si se realizó en la parte media o en los extremos izquierdo o derecho de la misma.

Los valores de las longitudes de onda se obtuvieron con una exactitud de ± 1 nm y una precisión de ± 0.5 nm, la incertidumbre porcentual con la que el espectrofotómetro obtuvo la transmitancia es de $\delta T\% = 0.7\%$ en el intervalo de [100%T a 50%T] y de 0.23% en el intervalo de [50%T a 1%T], estos valores se obtuvieron a partir de la expresión $\delta T/T = \ln(10)\delta A$, en la cual se sustituyeron los valores técnicos de la transmitancia reportados en el apéndice 1. Esto arroja un error porcentual del 1% en el índice de refracción (n), sin embargo, este valor puede incrementarse hasta un 15% en las regiones infrarrojas por efectos del proceso de convergencia del método numérico de Punto Fijo Multivariable, ya que dicho proceso está diseñado para ensanchar la ϵ progresivamente después de que se han realizado un cierto número de iteraciones dentro del intervalo de convergencia. El propósito de las ecuaciones (3.30) y (3.31) es únicamente calcular Δd y no el índice de refracción (n); Δd se calculó con un error porcentual aproximado de 10%.

Los valores de T_M y T_m junto con Δd se utilizan en las ecuaciones (3.36) y (3.37) para calcular n y x. Los valores de n y x se obtuvieron con una incertidumbre porcentual promedio de $\pm 5\%$ ya que estos valores varían desde un máximo de $\pm 15\%$ hasta 0.1% por efecto del proceso de convergencia; el espesor promedio $\langle d \rangle$ se reportó con su correspondiente desviación estándar $\pm \sigma$, las cantidades $\langle d \rangle$ y x se utilizaron para encontrar α con la Ec. (3.35c) con una incertidumbre porcentual de $\pm 10\%$ en promedio; el

cálculo de α en la región de fuerte absorción es idéntico al discutido para películas uniformes.

Se ha supuesto que el conjunto de espesores reportados en las tablas T1.1, T2.1, T3.1, T4.1, T5.1 y T6.1 forman muestras con distribución normal, pero como se sabe, en cualquier proceso de muestreo, sin duda alguna, cuanto más grande sea la muestra, tanto más precisas serán nuestras afirmaciones finales. Aunque la precisión de un valor medio aumenta sólo en proporción directa a la raíz cuadrada del número de observaciones de la muestra ($s_m = s/\sqrt{N}$), de todos modos se incrementa, y las muestras más grandes tienen medias más precisas. Para muestras de tamaño menor que 30, llamadas **pequeñas muestras**, esa aproximación no es buena y empeora al decrecer N, (número de integrantes de la muestra) de modo que son necesarias ciertas modificaciones (ver en [92], Cap.11).

El estudio de la distribución de muestreo de estadísticos para pequeñas muestras se llama "teoría de pequeñas muestras", sin embargo, un nombre más apropiado sería **teoría exacta del muestreo**, pues sus resultados son válidos tanto para pequeñas muestras como para grandes. Esta teoría se usó para estimar el espesor promedio y desviación estándar de la muestra, utilizándose la distribución t de Student en el primer caso y la distribución χ^2 (Ji - cuadrada) en el segundo, con dos intervalos de confianza 68% y 95%.

Los datos de depósito de las muestras de tablas T1.1, T2.1 y T3.1.

Técnica de Fabricación:	Sputtering (R.F.)
Presión del Sistema:	7×10^{-5} Torr
Potencia:	120 W
Tiempo de Depósito:	30 min.
Proporción de Gases Aproximada	4 Ar / 1 H ₂

Para la muestra de la tabla T4.1:

Técnica de Fabricación:	Sputtering (R.F.)
Presión del Sistema:	7×10^{-5} Torr
Potencia:	150 W
Tiempo de Depósito:	15 min.
Proporción de Gases Aproximada	2 Ar / 1 H ₂

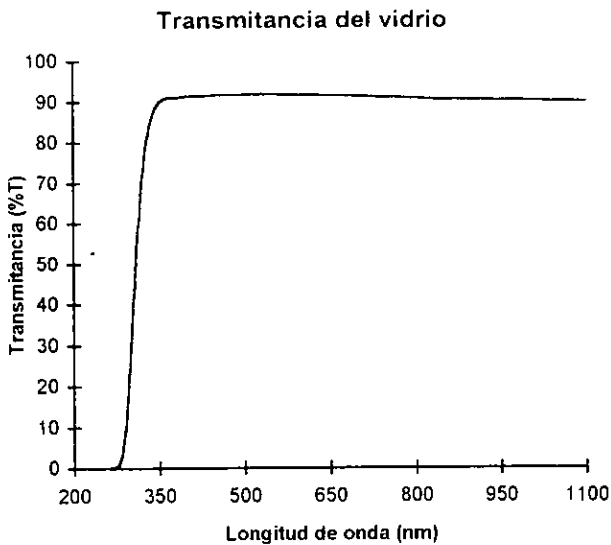
Para las muestras de las tablas T5.1 y T6.1:

Técnica de Fabricación:	Sputtering (R.F.)
Presión del Sistema:	7×10^{-5} Torr
Potencia:	120 W
Tiempo de Depósito:	30 min.
Proporción de Gases Aproximada	4 Ar / 1 H ₂

El índice de refracción promedio del vidrio utilizado como sustrato para la región transparente, según la técnica de espectroscopía, por medio de la Ec. (3.4) es: $\langle n_s \rangle = 1.554 \pm s = 0.024 \pm s_s = 0.0006$, mientras que a la luz de la elipsometría el índice de refracción,

- ♦ $\langle n_s \rangle = 1.487 \pm s = 5.137 \times 10^{-2} \pm s_s = 0.0067$
- ♦ $\langle k_s \rangle = 0.184 \pm s = 2.477 \times 10^{-2} \pm s_s = 2.47 \times 10^{-2}$
- ♦ $\langle \Delta_s \rangle = 13.01^\circ \pm s = 1.68^\circ \pm s_s = 0.222^\circ$
- ♦ $\langle \Psi_s \rangle = 20.99^\circ \pm s = 1.21^\circ \pm s_s = 0.159^\circ$

La gráfica de la transmitancia del vidrio se muestra a continuación, cabe señalar que el espectrofotómetro GENESIS 5 resta el espectro de transmisión del vidrio del espectro de transmisión de la muestra de silicio amorfo hidrogenado, para evitar que ambos espectros se sumen y poder observar así, únicamente, el espectro de la película de a-Si:H.



El espectrofotómetro utilizado, el **SPECTRONIC GENESIS 5**, se muestra a continuación. Las especificaciones técnicas del aparato, pueden consultarse en detalle en el apéndice A1 (Fig. A1 página 157 y en la Tabla A1.1, página 164).

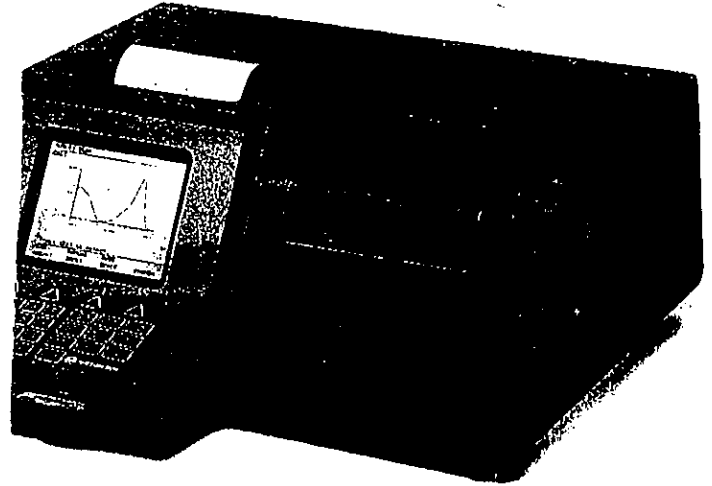


Fig. R-1

El sistema de sputtering utilizado para crear las películas de silicio amorfo hidrogenado se muestra a continuación, junto con la descripción de algunas de sus partes. Para tener una idea del interior de la cámara de vacío, debe consultarse la Fig. 1.80, página 51.

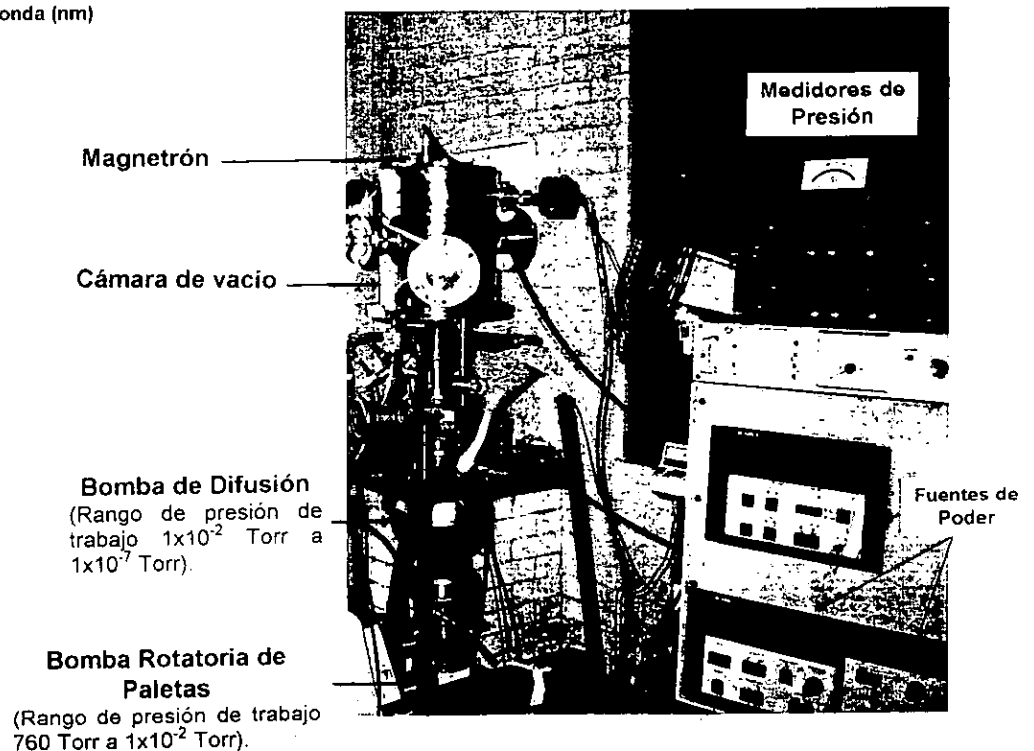


Fig. R-2

Tabla T1.1 a-Si:H 121

Longitud de onda $\pm 1 \text{ nm}$	TM %T	Tm %T	Δd nm	Índice de refracción n	Absorción x	θ rad	T _{MO} %T	T _{mo} %T	m	Espesor d nm	Absortividad α
1096	0.893	0.525	19.51	2.654	0.8976	0.452	0.986	0.521	1.0	206.5	5231.7
893	0.900	0.493		2.690	0.8519	0.395	1.091	0.505	1.5	249.0	6436.8
774	0.850	0.395		3.052	0.7934	0.449	0.927	0.384	2.0	253.6	9125.0
660	0.510	0.288		3.847	0.7107	1.032	0.798	0.216	2.5	214.4	15923.0
620	0.323	0.235		3.850	0.5371	1.231	0.798	0.216	3.0	241.5	25733.2

El espesor promedio de la película a la luz de la teoría de grandes muestras es:

- ♦ $\langle d \rangle = 233 \text{ nm} \pm s = 21 \text{ nm} \pm s_s = 7.5 \text{ nm} \quad \text{ó} \quad \langle d \rangle = 233 \text{ nm} \pm \delta_{r\%} = 9\%$
- ♦ $\langle d \rangle = 233 \text{ nm} \pm s_m = 9.5 \text{ nm}$

y el mismo espesor junto con el intervalo de confianza para la desviación estándar a la luz de la teoría de pequeñas muestras o teoría exacta del muestreo:

- ♦ $\langle d \rangle_{\text{PM } 68\%} = (233 \pm 13.1) \text{ nm} \quad \text{CONF}_{\text{PM } 68\%} = \{16.53 \leq s \leq 34.76\}$
- ♦ $\langle d \rangle_{\text{PM } 95\%} = (233 \pm 29.5) \text{ nm} \quad \text{CONF}_{\text{PM } 95\%} = \{12.71 \leq s \leq 61.25\}$

donde:

- s representa la **desviación estándar** (desviación normal o desviación típica) y significa que existe el 68% de probabilidad de que el promedio del universo, X, este incluido en el intervalo $\bar{x} \pm s$.
- s_m representa la **desviación normal del promedio** en relación con la desviación normal de las lecturas (s), este intervalo es más pequeño a su correspondiente para observaciones aisladas, y proporciona una medida cuantitativa de la precisión mejorada que es posible lograr con el muestreo.
- s_s es la **desviación estándar de la desviación estándar** y representa la amplitud de la distribución de desviaciones estándar de la muestra, la cual está relacionada con su valor central (s) por el factor numérico $1/\sqrt{2(N-1)}$. Como cabría esperar, la exactitud de la desviación estándar de la muestra como mejor estimación del valor del universo depende del tamaño de la muestra.
- $\delta_{r\%}$ representa la incertidumbre porcentual.
- Los subíndices **PM 68%** y **PM 95%** representan el promedio y desviación estándar calculados con la teoría de Pequeñas Muestras con niveles de confianza de 68% y 95% respectivamente, utilizando la distribución t de Student para el caso del promedio y la distribución χ^2 (Ji - cuadrada) para la desviación estándar.
- **CONF** $\{\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2\}$ representa el intervalo de confianza¹ o estimación por intervalo del parámetro desconocido θ . Los valores θ_1 y θ_2 se llaman **límites de confianza inferior y superior** para θ .

Las funciones de Cauchy que aproximan el valor del índice de refracción real en la región del cercano ultravioleta, visible y cercano infrarrojo para la película a-Si:H 121 son:

- ♦ $n = 1.84894319 + 791585.63781 (1/\lambda^2)$
- ♦ $n = 6.859970987 - 8594.13992231 (1/\lambda) + 4361674.2422 (1/\lambda^2)$

Con la última expresión se calcularon los valores del índice de refracción, absortividad, coeficiente de extinción etc., para la región ultravioleta, donde se localiza la zona de fuerte absorción, (ver Cap. 3), ya que los máximos y mínimos de interferencia de los espectros de transmisión no aparecen en dicha región.

En base a los datos de las tablas T1.1 y T1.2 se hicieron varias gráficas; calculándose en una de ellas el valor de la brecha prohibida para la película a-Si:H 121, a partir de la recta obtenida con los datos de $(\alpha h\nu)^{1/2}$ vs $h\nu$, con estos datos se calculó la ordenada al origen (i.e. E_{go} = brecha prohibida), pendiente de la recta (K) y coeficiente de correlación (r).

¹ La teoría moderna y la terminología de intervalos de confianza fueron desarrollados por J. Neyman (1935, 1937). En matemáticas, $\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$ significa que θ se encuentra entre θ_1 y θ_2 y, para evitar falsas interpretaciones, parece conveniente que se caracterice un intervalo de confianza mediante un símbolo especial, tal como CONF.

Al variar el número de datos experimentales tomados en cuenta, variaba E_{g0} y por ende K. De entre los diferentes valores calculados se seleccionó el valor de E_{g0} correspondiente al número de datos para el cual (r) se acercaba más a 1. Como se sabe, (r), (El coeficiente de correlación), indica que tan buena es una relación lineal, de manera que cuanto más se acerca a 1 mejor se cumple la relación (1.43, Cap. 1).

Desde el punto de vista matemático ese es el procedimiento, pero falta hacer alguna consideración de tipo físico, como es ignorar los puntos que no encajaban sobre la recta, correspondientes a una baja absorción.

Los valores calculados fueron:

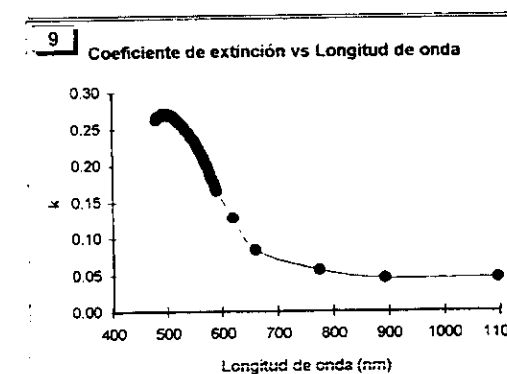
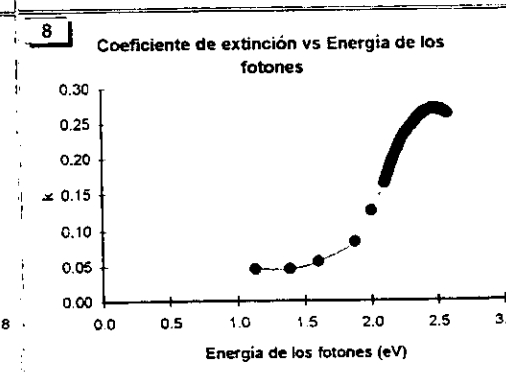
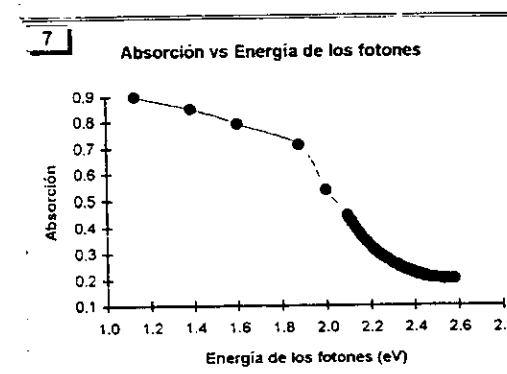
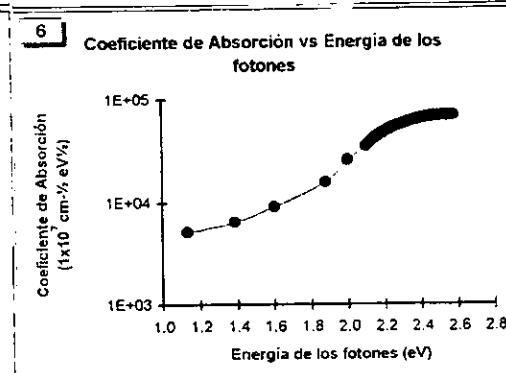
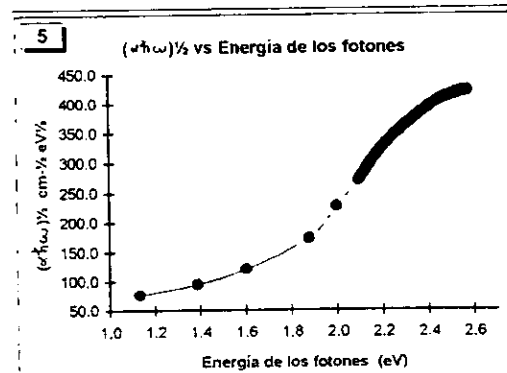
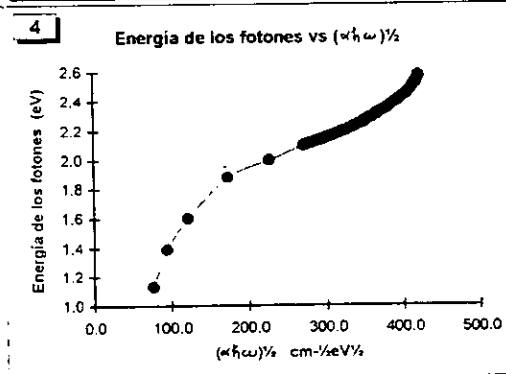
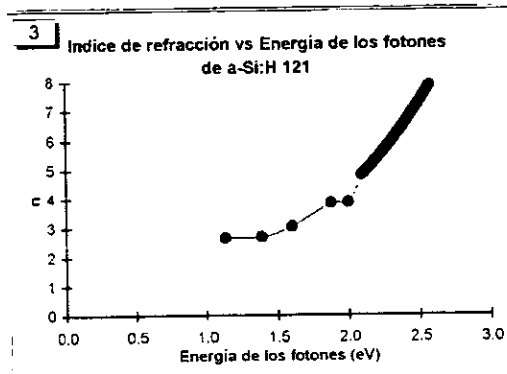
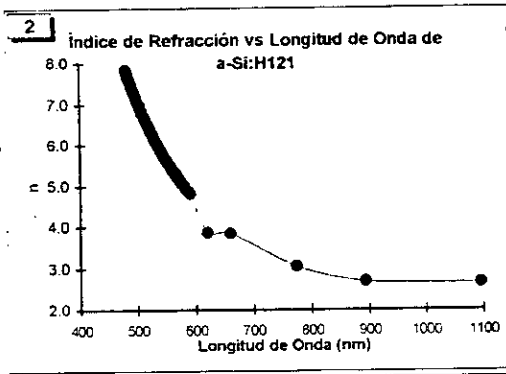
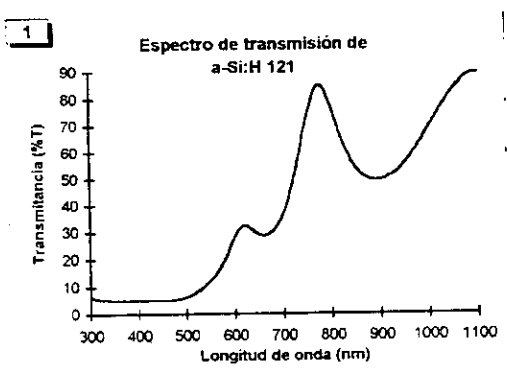
- ♦ $E_{g0} = (1.158 \pm s = 0.022) \text{ eV}$.
- ♦ El valor de la constante $K = 1.17 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$.
- ♦ El coeficiente de correlación de la recta es $r = 0.979$.

Tabla T1.2 a-Si:H 121

Longitud de Onda $\pm 1 \text{ nm}$	Índice de Refracción (n)	$(\alpha \hbar \omega)^{1/2}$ $\text{cm}^{-1/2} \text{ eV}^{1/2}$	$\hbar \omega$ eV	Coefficiente Absorción (α) $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$	x	Coefficiente Extinción (k)
481	7.845	420.758	2.578	68682.07	0.202	0.263
482	7.804	421.033	2.572	68915.01	0.201	0.264
483	7.763	421.306	2.567	69147.37	0.200	0.266
484	7.723	419.613	2.562	68734.92	0.202	0.265
485	7.683	419.881	2.556	68964.96	0.201	0.266
486	7.643	420.146	2.551	69194.42	0.199	0.268
487	7.603	418.484	2.546	68789.13	0.201	0.267
488	7.564	418.745	2.541	69016.29	0.200	0.268
489	7.525	417.112	2.535	68619.52	0.202	0.267
490	7.487	417.368	2.530	68844.41	0.201	0.268
491	7.449	417.622	2.525	69068.71	0.200	0.270
492	7.411	416.017	2.520	68678.41	0.202	0.269
493	7.373	414.441	2.515	68297.58	0.204	0.268
494	7.336	414.689	2.510	68517.98	0.203	0.269
495	7.299	413.139	2.505	68144.61	0.204	0.268
496	7.262	413.353	2.500	68352.81	0.203	0.270
497	7.226	411.859	2.495	67996.58	0.205	0.269
498	7.190	412.098	2.490	68212.59	0.204	0.270
499	7.154	410.599	2.485	67853.22	0.206	0.269
500	7.118	410.834	2.480	68067.06	0.205	0.271
501	7.083	409.359	2.475	67714.25	0.206	0.270
502	7.048	407.908	2.470	67369.28	0.208	0.269
503	7.013	408.138	2.465	67579.43	0.207	0.271
504	6.979	406.709	2.460	67240.49	0.209	0.270
505	6.945	405.302	2.455	66908.83	0.210	0.269
506	6.911	403.918	2.450	66584.19	0.212	0.268
507	6.877	404.141	2.445	66789.25	0.211	0.269
508	6.844	402.776	2.441	66469.90	0.213	0.269
509	6.811	401.433	2.436	66157.10	0.214	0.268
510	6.778	400.109	2.431	65850.62	0.216	0.267
511	6.745	398.804	2.426	65550.22	0.217	0.267
512	6.713	397.519	2.422	65255.71	0.219	0.266
513	6.681	396.251	2.417	64966.88	0.220	0.265
514	6.649	396.462	2.412	65162.79	0.219	0.267
515	6.618	393.769	2.407	64405.52	0.223	0.264
516	6.586	393.976	2.403	64598.69	0.222	0.265
517	6.555	392.759	2.398	64324.44	0.223	0.265
518	6.524	390.169	2.394	63601.59	0.227	0.262
519	6.494	389.000	2.389	63343.13	0.229	0.262

520	6.463	387.846	2.384	63089.17	0.230	0.261
521	6.433	386.706	2.380	62839.57	0.231	0.261
522	6.403	385.580	2.375	62594.19	0.233	0.260
523	6.374	384.469	2.371	62352.92	0.234	0.260
524	6.344	383.370	2.366	62115.61	0.235	0.259
525	6.315	382.284	2.362	61882.15	0.236	0.259
526	6.286	381.211	2.357	61652.42	0.238	0.258
527	6.257	378.911	2.353	61026.65	0.241	0.256
528	6.229	377.876	2.348	60808.67	0.242	0.255
529	6.200	376.851	2.344	60593.99	0.244	0.255
530	6.172	374.650	2.339	60001.29	0.247	0.253
531	6.144	373.660	2.335	59797.11	0.248	0.253
532	6.117	372.679	2.331	59595.85	0.249	0.252
533	6.089	370.567	2.326	59033.03	0.253	0.250
534	6.062	368.498	2.322	58484.93	0.256	0.249
535	6.035	367.568	2.317	58299.35	0.257	0.248
536	6.008	366.648	2.313	58116.22	0.258	0.248
537	5.981	364.657	2.309	57593.90	0.261	0.246
538	5.955	363.764	2.305	57418.82	0.262	0.246
539	5.929	362.878	2.300	57245.92	0.263	0.246
540	5.903	360.959	2.296	56747.09	0.267	0.244
541	5.877	360.099	2.292	56581.47	0.268	0.244
542	5.851	358.230	2.288	56099.32	0.271	0.242
543	5.826	356.394	2.283	55628.20	0.274	0.240
544	5.800	354.590	2.279	55167.68	0.277	0.239
545	5.775	353.782	2.275	55017.73	0.278	0.239
546	5.751	352.022	2.271	54571.52	0.280	0.237
547	5.726	351.235	2.267	54427.27	0.281	0.237
548	5.701	349.517	2.262	53994.51	0.284	0.235
549	5.677	348.748	2.258	53855.55	0.285	0.235
550	5.653	347.070	2.254	53435.46	0.288	0.234
551	5.629	345.417	2.250	53023.86	0.291	0.232
552	5.605	343.788	2.246	52620.46	0.293	0.231
553	5.582	342.184	2.242	52224.93	0.296	0.230
554	5.558	340.603	2.238	51836.99	0.299	0.229
555	5.535	339.044	2.234	51456.36	0.302	0.227
556	5.512	337.507	2.230	51082.78	0.304	0.226
557	5.489	335.991	2.226	50716.00	0.307	0.225
558	5.467	333.680	2.222	50110.56	0.311	0.223
559	5.444	333.020	2.218	50001.91	0.312	0.222
560	5.422	331.564	2.214	49654.15	0.314	0.221
561	5.400	329.340	2.210	49077.93	0.319	0.219
562	5.377	327.158	2.206	48516.10	0.323	0.217
563	5.356	325.774	2.202	48192.06	0.325	0.216
564	5.334	323.657	2.198	47652.24	0.329	0.214
565	5.312	322.314	2.194	47341.38	0.332	0.213
566	5.291	320.258	2.191	46821.94	0.336	0.211
567	5.270	318.953	2.187	46523.27	0.338	0.210
568	5.249	316.953	2.183	46022.76	0.342	0.208
569	5.228	314.986	2.179	45533.26	0.346	0.206
570	5.207	313.050	2.175	45054.31	0.350	0.204
571	5.187	311.144	2.171	44585.48	0.354	0.203
572	5.166	309.268	2.168	44126.36	0.358	0.201
573	5.146	308.077	2.164	43863.72	0.360	0.200
574	5.126	306.245	2.160	43419.48	0.364	0.198

575	5.106	303.801	2.156	42803.55	0.369	0.196
576	5.086	302.030	2.153	42379.63	0.373	0.194
577	5.066	299.664	2.149	41790.60	0.378	0.192
578	5.047	297.949	2.145	41385.27	0.381	0.190
579	5.027	295.655	2.141	40820.95	0.386	0.188
580	5.008	293.400	2.138	40270.08	0.391	0.186
581	4.989	291.183	2.134	39732.05	0.396	0.184
582	4.970	289.001	2.130	39206.30	0.401	0.182
583	4.951	286.854	2.127	38692.29	0.406	0.180
584	4.933	284.740	2.123	38189.52	0.411	0.177
585	4.914	283.206	2.119	37843.80	0.414	0.176
586	4.896	281.689	2.116	37503.40	0.417	0.175
587	4.878	278.585	2.112	36744.04	0.425	0.172
588	4.859	277.117	2.109	36419.69	0.428	0.170
589	4.841	274.625	2.105	35828.60	0.434	0.168
590	4.824	272.685	2.101	35384.21	0.438	0.166
591	4.806	270.771	2.098	34948.25	0.443	0.164
620	3.850	226.848	2.000	25733.20	0.537	0.127
660	3.847	172.955	1.879	15923.60	0.711	0.084
774	3.052	120.901	1.602	9125.00	0.793	0.056
893	2.690	94.535	1.388	6436.80	0.852	0.046
1096	2.654	76.931	1.131	5231.70	0.898	0.046



Los datos de la película a-Si:H 121 obtenidos con el elipsómetro se encuentran en la tabla T1.3

Tabla T1.3 a-Si:H 121

Espesor nm	Ind. Ref.	Delta °	Psi °
242.8	3.706	124.92	22.08
242.1	3.718	124.60	22.12
241.8	3.723	124.68	22.16
241.5	3.729	124.40	22.16
241.8	3.722	124.76	22.16
241.4	3.727	124.84	22.20
242.1	3.718	124.60	22.12
241.4	3.730	124.32	22.16
241.7	3.725	124.60	22.16
241.4	3.729	124.76	22.20
240.9	3.737	124.68	22.24
241.2	3.730	125.08	22.24
241.6	3.725	125.00	22.20
241.6	3.723	125.08	22.20
241.4	3.727	124.84	22.20
241.6	3.723	125.08	22.20
241.8	3.723	124.68	22.16
243.1	3.703	124.68	22.04
242.4	3.712	124.92	22.12
242.3	3.715	124.76	22.12
243.4	3.697	125.00	22.04
243.2	3.700	124.84	22.04
243.5	3.698	124.60	22.00
243.8	3.691	125.00	22.00
243.9	3.688	125.16	22.00
244.4	3.684	124.60	21.92
244.8	3.675	125.16	21.92
244.1	3.688	124.76	21.96
244.4	3.683	124.68	21.92
244.8	3.676	125.08	21.92
244.6	3.677	125.40	21.96
244.7	3.677	125.00	21.92
244.8	3.675	125.16	21.92
244.7	3.674	125.60	21.96
244.7	3.675	125.52	21.96
244.2	3.685	124.92	21.96
244.7	3.674	125.60	21.96
244.3	3.683	125.08	21.96
245.1	3.672	124.92	21.88
246.0	3.656	125.52	21.84
245.2	3.668	125.60	21.92
246.3	3.652	125.32	21.80
244.5	3.681	124.76	21.92
244.9	3.673	125.24	21.92
245.7	3.662	125.16	21.84
244.4	3.683	124.68	21.92
244.8	3.675	125.16	21.92

El espesor, Delta y Psi promedios, junto con el ciclo del espesor de la película son :

- ◆ $\langle d \rangle = 243.4 \text{ nm} \pm s = 1.54 \text{ nm} \pm s_s = 0.22$
- ◆ $\langle n \rangle = 3.697 \pm s = 0.024 \pm s_s = 0.002$
- ◆ $\langle \Delta \rangle = 124.95^\circ \pm s = 0.317^\circ \pm s_s = 4.62 \times 10^{-2}$
- ◆ $\langle \Psi \rangle = 22.03^\circ \pm s = 0.125^\circ \pm s_s = 1.81 \times 10^{-2}$
- ◆ Ciclo = 96.0 nm

La comparación entre el espesor obtenido por el método espectrofotométrico y el elipsométrico, así como las tendencias de los parámetros Delta y Psi se muestran en las siguientes gráficas:

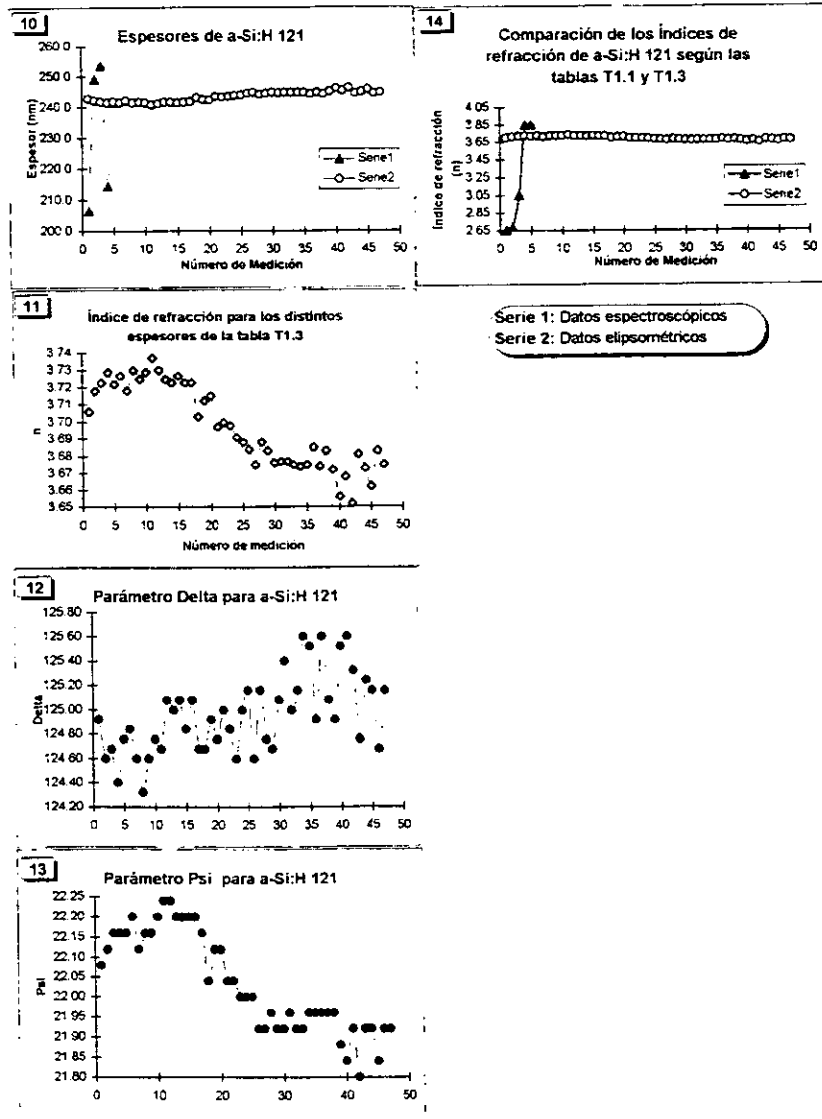


Tabla T2.1 a-Si:H 122

Longitud de onda $\pm 1 \text{ nm}$	TM %T	Tm %T	Δd nm	Índice de refracción n	Absorción x	θ rad	T _{MO} %T	T _{mo} %T	m	Espesor d nm	Absortividad α
1100	0.916	0.536	7.36	2.685	0.9384	0.394	1.059	0.559	1.0	204.9	3103.4
894	0.910	0.499		2.837	0.9241	0.374	1.001	0.509	1.5	263.4	3339.2
776	0.868	0.385		2.868	0.7271	0.375	0.945	0.383	2.0	270.6	11774.9
662	0.520	0.288		3.422	0.5928	1.008	0.841	0.203	2.5	241.8	21621.9
621	0.312	0.210		3.703	0.4756	1.185	0.841	0.203	3.0	251.6	29538.2

El espesor promedio de la película a la luz de la teoría de grandes muestras es:

- ♦ $\langle d \rangle = 241 \text{ nm} \pm s = 24 \text{ nm} \pm s_s = 8.5 \text{ nm}$ ó $\langle d \rangle = 241 \text{ nm} \pm \delta_{r\%} = 13.9\%$
- ♦ $\langle d \rangle = 241 \text{ nm} \pm s_m = 10.7 \text{ nm}$.

y el mismo espesor junto con el intervalo de confianza para la desviación estándar a la luz de la teoría de pequeñas muestras o teoría exacta del muestreo:

- ♦ $\langle d \rangle_{PM 68\%} = (241 \pm 14.9) \text{ nm}$ CONF_{PM 68%} = {18.74 ≤ s ≤ 39.40}
- ♦ $\langle d \rangle_{PM 95\%} = (241 \pm 33.4) \text{ nm}$ CONF_{PM 95%} = {14.41 ≤ s ≤ 69.42}

Las funciones de Cauchy que aproximan el valor del índice de refracción real en las regiones del cercano ultravioleta, visible y cercano infrarrojo para la película a-Si:H 122 son:

- ♦ $n = 2.105736417 + 578731.853888512 (1/\lambda^2)$
- ♦ $n = 4.896126996 - 4547.161572427 (1/\lambda) + 2354602.332466125 (1/\lambda^2)$.

Con la última expresión se calcularon los valores del índice de refracción, absortividad, coeficiente de extinción etc., para la región ultravioleta, donde se localiza la zona de fuerte absorción, (ver Cap 3), ya que los máximos y mínimos de interferencia de los espectros de transmisión no aparecen en dicha región.

En base a los datos de las tablas T2.1 y T2.2 se hicieron varias gráficas; calculándose en una de ellas el valor de la brecha prohibida para la película a-Si:H 122, a partir de la recta obtenida con los datos de $(\alpha h\omega)^{1/2}$ vs $h\omega$. El valor calculado fue:

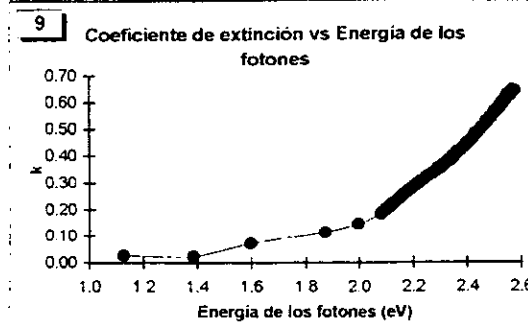
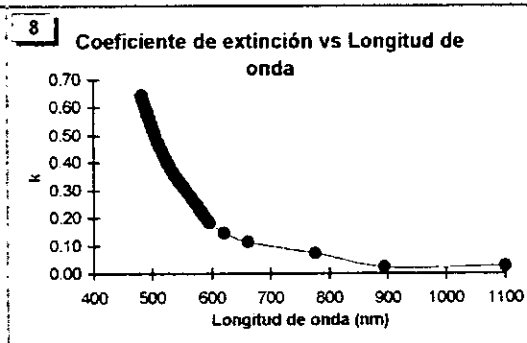
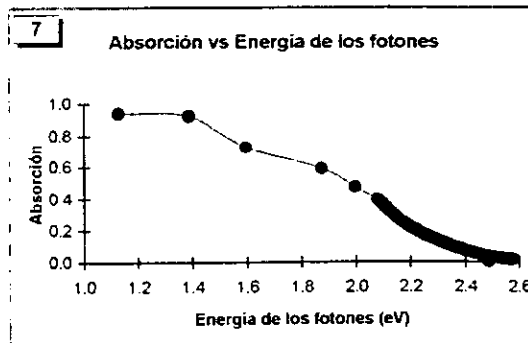
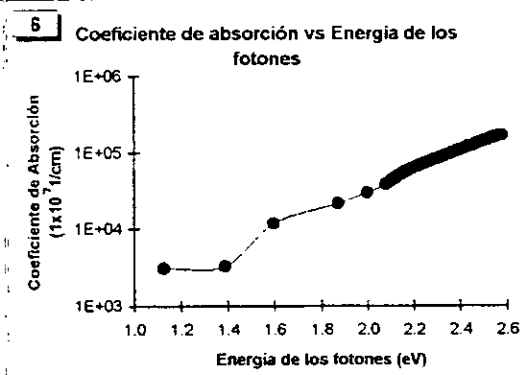
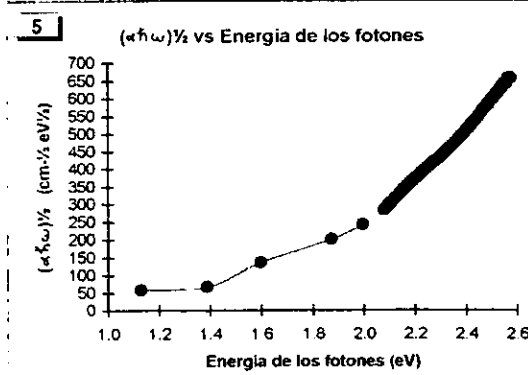
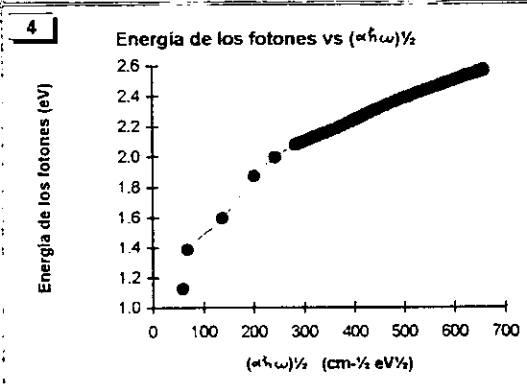
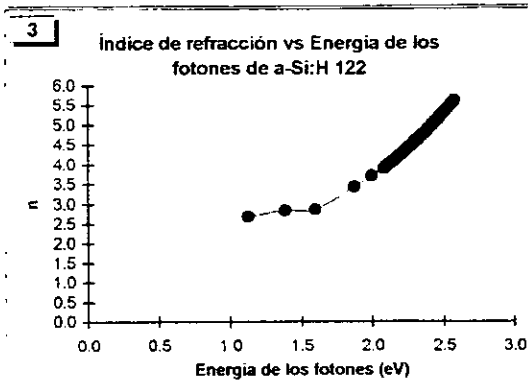
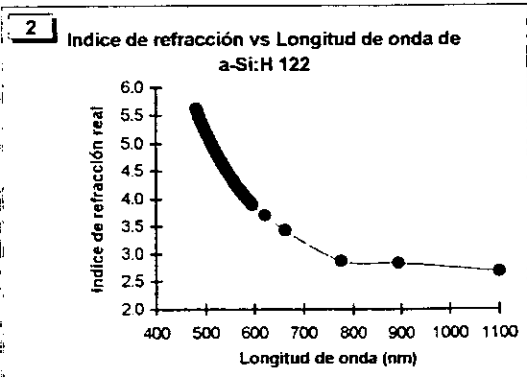
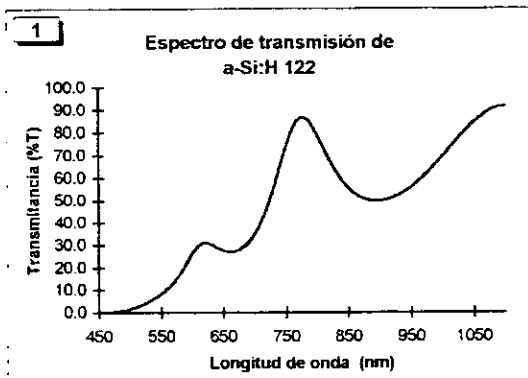
- ♦ $E_{go} = (1.700 \pm s = 2.83 \times 10^{-5}) \text{ eV}$.
- ♦ El valor de la constante K = $5.45 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$.
- ♦ El coeficiente de correlación de la recta es $r = 0.998$.

Tabla T2.2 a-Si:H 122

L. Onda nm	I. Refrac. n	$h\omega$ eV	$(\alpha h\omega)^{1/2}$ $\text{cm}^{-1/2} \text{ eV}^{1/2}$	Coef. Abs. α $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$	x	Coef. Extin. k
481	5.620	2.578	657.481	167704.45	0.018	0.642
482	5.597	2.572	657.195	167907.20	0.017	0.644
483	5.575	2.567	656.909	168108.79	0.017	0.646
484	5.553	2.562	644.204	162003.83	0.020	0.624
485	5.531	2.556	643.933	162202.31	0.020	0.626
486	5.509	2.551	643.662	162399.64	0.020	0.628
487	5.487	2.546	632.509	157143.27	0.023	0.609
488	5.465	2.541	632.251	157337.58	0.023	0.611
489	5.444	2.535	622.287	152729.79	0.025	0.594
490	5.423	2.530	622.041	152921.12	0.025	0.596
491	5.402	2.525	613.026	148824.05	0.028	0.581
492	5.381	2.520	612.790	149012.47	0.028	0.583
493	5.360	2.515	604.553	145327.80	0.030	0.570

494	5.340	2.510	604.326	145513.36	0.030	0.572
495	5.320	2.505	596.736	142168.54	0.032	0.560
496	5.299	2.500	596.517	142351.30	0.032	0.562
497	5.279	2.495	589.477	139291.25	0.035	0.551
498	5.259	2.490	582.901	136474.84	0.004	0.541
499	5.240	2.485	582.697	136653.16	0.037	0.543
500	5.220	2.480	576.532	134044.78	0.040	0.533
501	5.201	2.475	570.720	131618.73	0.042	0.525
502	5.182	2.470	570.528	131792.75	0.042	0.526
503	5.162	2.465	565.036	129525.03	0.044	0.518
504	5.143	2.460	559.823	127398.74	0.046	0.511
505	5.125	2.455	554.860	125398.35	0.049	0.504
506	5.106	2.450	550.124	123510.72	0.051	0.497
507	5.087	2.445	545.593	121724.66	0.053	0.491
508	5.069	2.441	541.249	120030.54	0.055	0.485
509	5.051	2.436	537.077	118420.00	0.058	0.480
510	5.033	2.431	533.064	116885.78	0.060	0.474
511	5.015	2.426	532.908	117046.60	0.060	0.476
512	4.997	2.422	525.462	114021.50	0.064	0.465
513	4.979	2.417	521.855	112680.83	0.066	0.460
514	4.962	2.412	518.364	111395.03	0.068	0.456
515	4.944	2.407	514.982	110160.13	0.070	0.451
516	4.927	2.403	511.702	108972.58	0.072	0.447
517	4.910	2.398	508.518	107829.15	0.074	0.444
518	4.893	2.394	502.543	105514.09	0.079	0.435
519	4.876	2.389	499.612	104487.99	0.081	0.432
520	4.859	2.384	496.756	103495.88	0.083	0.428
521	4.843	2.380	493.972	102535.76	0.084	0.425
522	4.826	2.375	488.722	100560.68	0.089	0.418
523	4.810	2.371	486.130	99687.37	0.090	0.415
524	4.794	2.366	483.596	98839.54	0.092	0.412
525	4.778	2.362	478.805	97075.57	0.096	0.406
526	4.762	2.357	476.429	96297.79	0.098	0.403
527	4.746	2.353	471.929	94666.65	0.102	0.397
528	4.730	2.348	469.692	93949.26	0.104	0.395
529	4.714	2.344	465.447	92433.47	0.108	0.389
530	4.699	2.339	463.332	91768.63	0.109	0.387
531	4.684	2.335	459.314	90353.87	0.113	0.382
532	4.668	2.331	457.308	89735.10	0.115	0.380
533	4.653	2.326	453.492	88409.52	0.119	0.375
534	4.638	2.322	449.798	87138.26	0.122	0.370
535	4.623	2.317	447.948	86585.11	0.124	0.369
536	4.608	2.313	444.424	85387.33	0.128	0.364
537	4.594	2.309	442.657	84867.70	0.129	0.363
538	4.579	2.305	439.286	83735.84	0.133	0.358
539	4.565	2.300	436.010	82644.73	0.136	0.354
540	4.550	2.296	432.822	81591.76	0.140	0.351
541	4.536	2.292	431.219	81138.38	0.141	0.349
542	4.522	2.288	428.156	80137.53	0.145	0.346
543	4.508	2.283	425.169	79169.25	0.148	0.342
544	4.494	2.279	422.255	78231.64	0.152	0.339
545	4.480	2.275	419.410	77322.95	0.155	0.335
546	4.466	2.271	416.631	76441.57	0.158	0.332
547	4.453	2.267	415.228	76066.54	0.160	0.331
548	4.439	2.262	412.542	75222.78	0.163	0.328

549	4.426	2.258	409.913	74402.85	0.166	0.325
550	4.412	2.254	407.340	73605.52	0.170	0.322
551	4.399	2.250	404.820	72829.67	0.173	0.319
552	4.386	2.246	402.350	72074.24	0.176	0.317
553	4.373	2.242	398.769	70925.20	0.181	0.312
554	4.360	2.238	396.415	70217.25	0.184	0.310
555	4.347	2.234	394.105	69526.57	0.187	0.307
556	4.334	2.230	391.837	68852.37	0.190	0.305
557	4.322	2.226	389.609	68193.94	0.193	0.302
558	4.309	2.222	385.329	66823.68	0.200	0.297
559	4.297	2.218	383.211	66209.67	0.203	0.295
560	4.284	2.214	381.128	65608.94	0.206	0.292
561	4.272	2.210	379.078	65020.94	0.209	0.290
562	4.260	2.206	376.092	64114.81	0.213	0.287
563	4.248	2.202	374.120	63557.00	0.216	0.285
564	4.236	2.198	371.245	62695.12	0.221	0.281
565	4.224	2.194	368.432	61858.12	0.225	0.278
566	4.212	2.191	365.678	61044.70	0.230	0.275
567	4.200	2.187	362.981	60253.64	0.234	0.272
568	4.189	2.183	360.337	59483.82	0.238	0.269
569	4.177	2.179	357.744	58734.19	0.243	0.266
570	4.166	2.175	354.381	57736.24	0.249	0.262
571	4.154	2.171	351.899	57030.42	0.253	0.259
572	4.143	2.168	349.462	56341.79	0.257	0.256
573	4.132	2.164	347.068	55669.58	0.261	0.254
574	4.121	2.160	344.715	55013.06	0.266	0.251
575	4.110	2.156	341.654	54134.57	0.271	0.248
576	4.099	2.153	337.932	53053.49	0.278	0.243
577	4.088	2.149	335.727	52454.31	0.282	0.241
578	4.077	2.145	332.854	51649.82	0.288	0.238
579	4.066	2.141	330.038	50867.45	0.293	0.234
580	4.056	2.138	326.605	49900.64	0.300	0.230
581	4.045	2.134	323.251	48965.31	0.307	0.226
582	4.035	2.130	320.614	48252.64	0.313	0.223
583	4.024	2.127	318.023	47557.62	0.318	0.221
584	4.014	2.123	315.477	46879.47	0.323	0.218
585	4.003	2.119	312.974	46217.41	0.328	0.215
586	3.993	2.116	310.511	45570.74	0.333	0.213
587	3.983	2.112	306.909	44595.50	0.341	0.208
588	3.973	2.109	304.542	43984.94	0.346	0.206
589	3.963	2.105	301.641	43224.46	0.353	0.203
590	3.953	2.101	298.793	42484.13	0.359	0.199
591	3.943	2.098	296.544	41917.98	0.364	0.197
592	3.934	2.094	293.246	41060.10	0.372	0.193
593	3.924	2.091	290.543	40374.62	0.378	0.191
594	3.914	2.087	288.405	39849.84	0.383	0.188
595	3.905	2.084	285.780	39193.49	0.389	0.186
596	3.895	2.080	282.689	38414.81	0.396	0.182
621	3.703	1.997	242.845	29538.20	0.476	0.146
662	3.422	1.873	201.234	21621.90	0.593	0.114
776	2.868	1.598	137.161	11774.90	0.727	0.073
894	2.837	1.387	68.051	3339.20	0.924	0.024
1100	2.685	1.127	59.143	3103.40	0.938	0.027



Los datos de la película a-Si:H 122 obtenidos con el elipsómetro se encuentran en la tabla T2.3

Tabla T2.3 a-Si:H 122

Espesor	Ind. Ref.	Delta	Psi
nm			
239.8	3.748		
240.6	3.737		
241.1	3.728	126.04	22.24
240.0	3.747	125.72	22.32
239.9	3.749	125.64	22.32
240.6	3.737	125.92	22.28
239.6	3.753	125.80	22.36
240.3	3.739	126.16	22.32
240.2	3.742	126.00	22.32
240.4	3.737	126.28	22.32
240.4	3.739	126.20	22.32
240.3	3.741	126.08	22.32
240.2	3.742	126.00	22.32
240.1	3.745	125.84	22.32
240.1	3.744	125.92	22.32
240.3	3.741	126.08	22.32

El espesor, Delta y Psi promedios, junto con el ciclo del espesor de la película son :

- ♦ $\langle d \rangle = 240.2 \text{ nm} \pm s = 0.35 \text{ nm} \pm s_s = 0.12$
- ♦ $\langle n \rangle = 3.742 \pm s = 0.183 \pm s_s = 0.033$
- ♦ $\langle \Delta \rangle = 126.00^\circ \pm s = 0.026^\circ \pm s_s = 0.005$
- ♦ $\langle \Psi \rangle = 22.31^\circ \pm s = 0.006 \pm s_s = 0.001$
- ♦ Ciclo = 87.1 nm

La comparación entre el espesor obtenido por el método espectrofotométrico y el elipsométrico, así como las tendencias de los parámetros Delta y Psi se muestran en las siguientes gráficas.

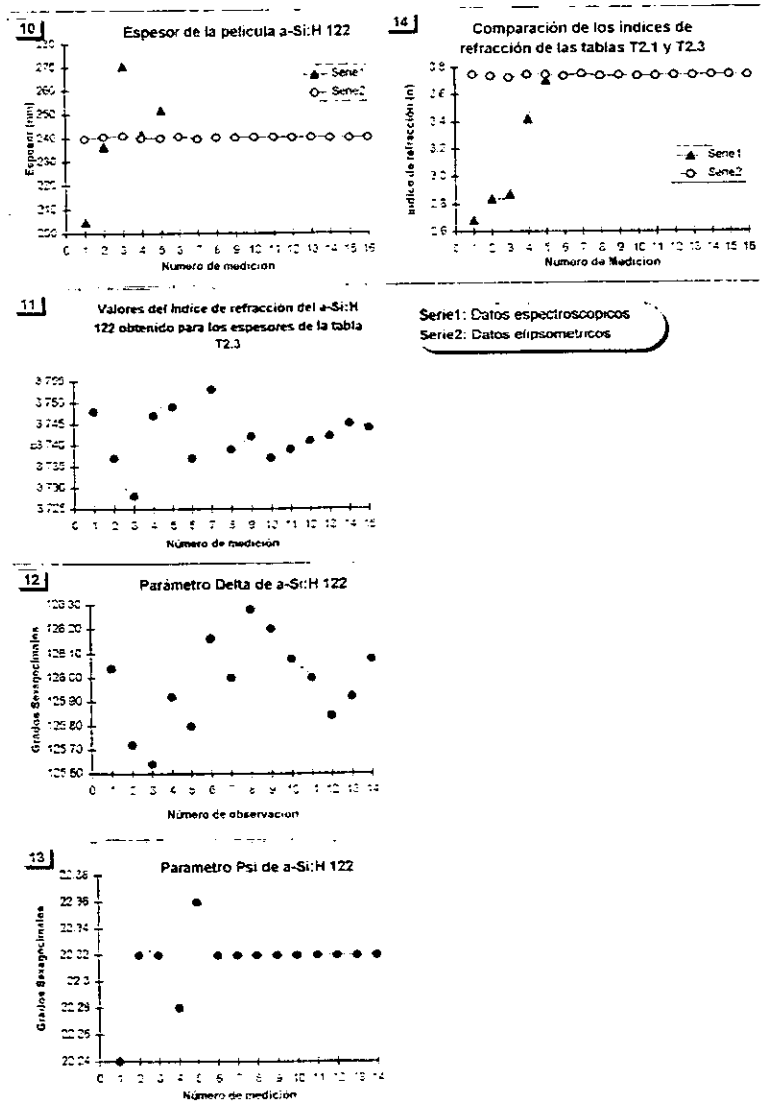


Tabla T3.1 a-Si:H 132

Longitud de onda ± 1 nm	TM %T	Tm %T	Δd nm	Índice de refracción n	Absorción x	θ rad	T _{MO} %T	T _{mo} %T	m	Espesor d nm	Absortividad α
1050	0.990	0.488	15.41	2.758	0.8806	0.194	1.095	0.544	1.0	190.4	6682.3
893	0.931	0.423		2.919	0.8187	0.267	1.010	0.452	1.5	229.4	8717.9
765	0.785	0.341		3.463	0.8115	0.562	0.894	0.314	2.0	220.9	9458.31
689	0.595	0.275		3.993	0.7581	0.837	0.854	0.229	2.5	215.7	12836.8

El espesor promedio de la película a la luz de la teoría de grandes muestras es:

- ♦ $\langle d \rangle = 214 \text{ nm} \pm s = 17 \text{ nm} \pm s_s = 6.8 \text{ nm} \quad \text{ó} \quad \langle d \rangle = 214 \text{ nm} \pm \delta_{r\%} = 7.8\%$
- ♦ $\langle d \rangle = 214 \text{ nm} \pm s_m = 8.4 \text{ nm}$

y el mismo espesor junto con el intervalo de confianza para la desviación estándar a la luz de la teoría de pequeñas muestras o teoría exacta del muestreo:

- ♦ $\langle d \rangle_{PM 68\%} = (214 \pm 12.7) \text{ nm} \quad \text{CONF}_{PM 68\%} = \{12.76 \leq s \leq 30.72\}$
- ♦ $\langle d \rangle_{PM 95\%} = (214 \pm 30.8) \text{ nm} \quad \text{CONF}_{PM 95\%} = \{9.50 \leq s \leq 61.96\}$

Las funciones de Cauchy que aproximan el valor del índice de refracción real en las regiones del cercano ultravioleta, visible y cercano infrarrojo para la película a-Si:H 121 son:

- ♦ $n = 1.706932589 + 1055068.3022 (1/\lambda^2)$
- ♦ $n = 7.667812228 - 10359.177 (1/\lambda) + 5464084.75 (1/\lambda^2)$

Con la última expresión se calcularon los valores del índice de refracción, absorptividad, coeficiente de extinción etc., para la región ultravioleta, donde se localiza la zona de fuerte absorción, (ver Cap. 3), ya que los máximos y mínimos de interferencia de los espectros de transmisión no aparecen en dicha región.

En base en los datos de las tablas T3.1 y T3.2 se hicieron varias gráficas, calculándose el valor de la brecha prohibida para la película a-Si:H 132, a partir de la recta obtenida con los datos de $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ vs $\hbar\omega$. El valor calculado fue:

- ♦ $E_{go} = 1.709 \pm s = 0.003$.
- ♦ El valor de la constante $K = 6.56 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$.
- ♦ El coeficiente de correlación de la recta es $r = 0.989$

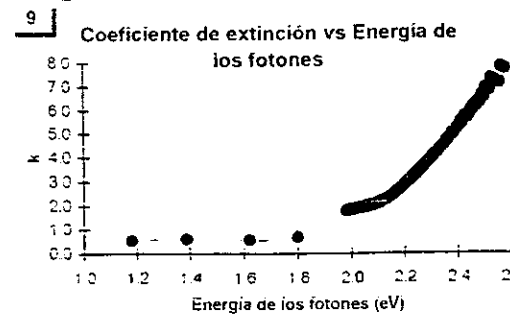
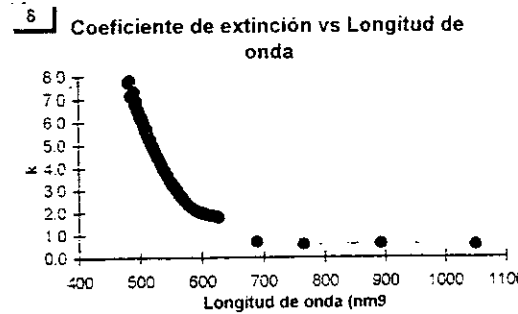
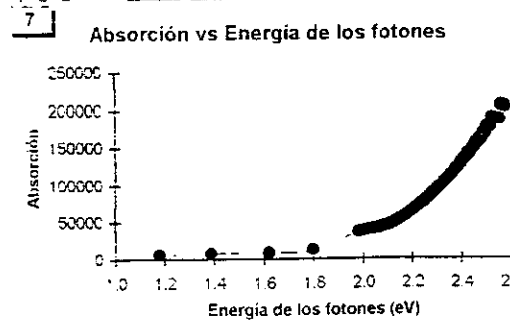
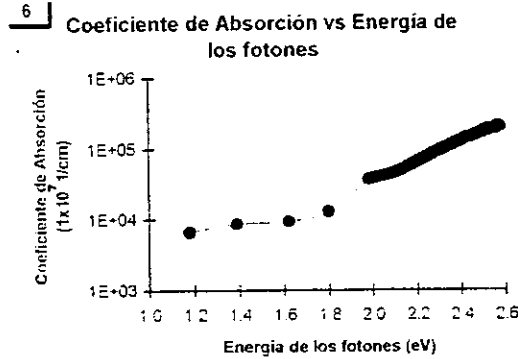
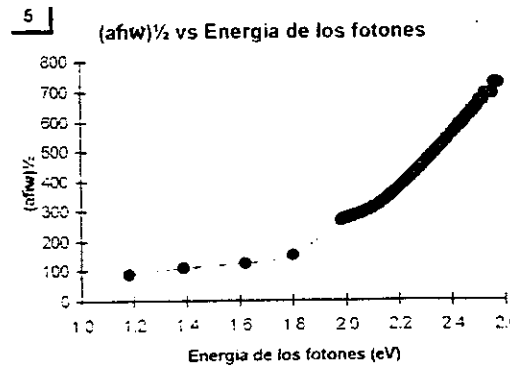
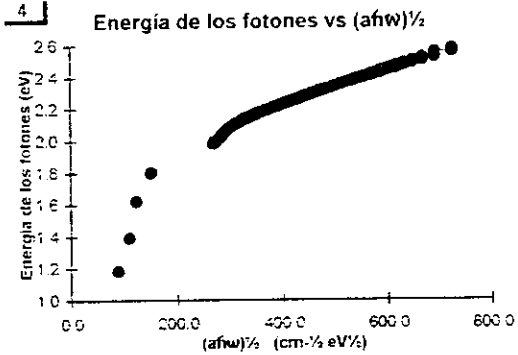
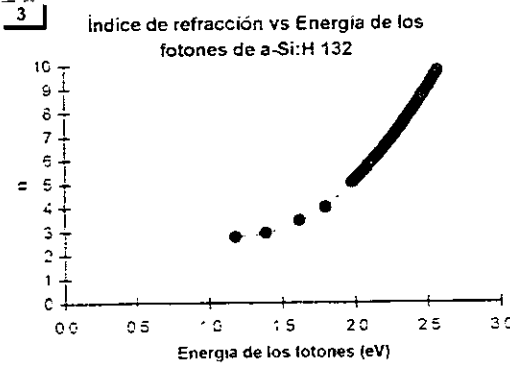
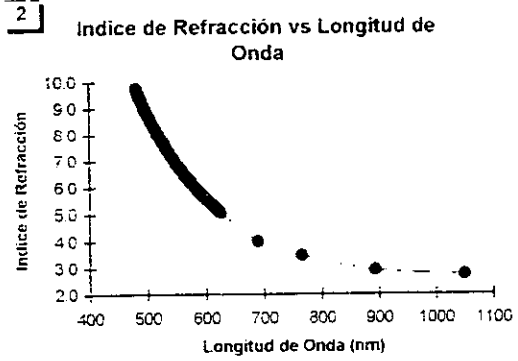
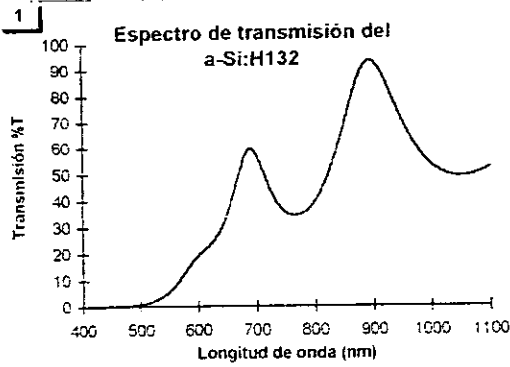
Tabla T3.2 a-Si:H 132

Longitud de Onda nm	Índice de refracción (n)	$\alpha\hbar\omega$ eV	$(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ $\text{cm}^{-1/2} \text{ eV}^{1/2}$	Coefficiente Absorción (α) $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$	x	Coefficiente de Extinción (k)
481	9.748	2.578	725.817	204377.34	0.013	7.721
482	9.695	2.572	725.739	204758.47	0.012	7.751
483	9.642	2.567	725.660	205138.15	0.012	7.782
484	9.590	2.562	725.577	205516.38	0.012	7.812
485	9.538	2.556	691.913	187274.49	0.018	7.134
486	9.486	2.551	691.887	187646.33	0.018	7.163
487	9.435	2.546	691.858	188016.78	0.018	7.191
488	9.384	2.541	691.827	188385.83	0.018	7.220
489	9.334	2.535	691.793	188753.49	0.018	7.249
490	9.284	2.530	691.757	189119.74	0.017	7.278
491	9.235	2.525	691.719	189484.61	0.017	7.307
492	9.185	2.520	667.305	176704.55	0.023	6.828
493	9.137	2.515	667.305	177063.49	0.023	6.856
494	9.088	2.510	667.302	177421.08	0.022	6.884
495	9.040	2.505	667.296	177777.32	0.022	6.911

496	8.993	2.500	648.010	167988.38	0.027	6.544
497	8.945	2.495	648.033	168338.98	0.027	6.571
498	8.898	2.490	648.054	168688.27	0.027	6.598
499	8.852	2.485	632.063	160788.18	0.032	6.302
500	8.806	2.480	632.105	161132.06	0.032	6.328
501	8.760	2.475	632.145	161474.67	0.032	6.354
502	8.715	2.470	618.472	154873.41	0.036	6.106
503	8.669	2.465	618.529	155210.82	0.036	6.132
504	8.625	2.460	618.584	155546.98	0.036	6.157
505	8.580	2.455	606.635	149892.63	0.040	5.945
506	8.536	2.450	606.705	150223.79	0.040	5.970
507	8.492	2.445	596.076	145293.24	0.045	5.786
508	8.449	2.441	596.158	145619.54	0.044	5.810
509	8.406	2.436	586.585	141257.87	0.049	5.647
510	8.363	2.431	586.676	141579.47	0.048	5.671
511	8.321	2.426	586.765	141899.90	0.048	5.695
512	8.279	2.422	578.066	137993.32	0.052	5.549
513	8.237	2.417	570.076	134467.21	0.056	5.418
514	8.196	2.412	570.183	134779.79	0.056	5.441
515	8.155	2.407	562.803	131568.98	0.060	5.322
516	8.114	2.403	555.939	128628.67	0.064	5.213
517	8.073	2.398	556.060	128933.78	0.063	5.235
518	8.033	2.394	549.651	126222.78	0.067	5.135
519	7.993	2.389	543.636	123713.51	0.071	5.043
520	7.954	2.384	537.968	121380.90	0.074	4.957
521	7.914	2.380	538.105	121675.97	0.074	4.979
522	7.876	2.375	532.752	119496.38	0.077	4.899
523	7.837	2.371	527.678	117455.35	0.081	4.825
524	7.798	2.366	522.854	115538.19	0.084	4.755
525	7.760	2.362	518.258	113732.40	0.088	4.690
526	7.723	2.357	513.869	112027.20	0.091	4.628
527	7.685	2.353	509.669	110413.29	0.094	4.570
528	7.648	2.348	505.645	108882.55	0.097	4.515
529	7.611	2.344	501.781	107427.89	0.100	4.463
530	7.574	2.339	498.065	106043.02	0.103	4.414
531	7.538	2.335	494.488	104722.42	0.106	4.367
532	7.502	2.331	491.039	103461.15	0.109	4.323
533	7.466	2.326	484.318	100837.60	0.115	4.221
534	7.430	2.322	481.204	99731.90	0.118	4.183
535	7.395	2.317	478.189	98670.37	0.121	4.146
536	7.360	2.313	475.266	97650.10	0.124	4.111
537	7.325	2.309	469.497	95471.30	0.130	4.027
538	7.291	2.305	466.821	94561.96	0.132	3.996
539	7.256	2.300	461.502	92591.02	0.138	3.920
540	7.222	2.296	459.036	91774.17	0.140	3.892
541	7.189	2.292	454.102	89978.34	0.146	3.823
542	7.155	2.288	451.817	89239.61	0.148	3.799
543	7.122	2.283	447.217	87593.11	0.153	3.736
544	7.089	2.279	442.815	86035.43	0.159	3.676
545	7.056	2.275	440.780	85403.28	0.161	3.656
546	7.024	2.271	434.543	83155.46	0.169	3.566
547	6.991	2.267	432.674	82592.72	0.171	3.548
548	6.959	2.262	428.850	81287.60	0.175	3.499

549	6.928	2.258	425.164	80042.17	0.180	3.451
550	6.896	2.254	421.607	78851.85	0.185	3.406
551	6.865	2.250	418.170	77712.55	0.189	3.363
552	6.834	2.246	412.130	75620.59	0.194	3.278
553	6.803	2.242	411.626	75572.65	0.198	3.282
554	6.772	2.238	408.506	74565.75	0.203	3.244
555	6.742	2.234	403.896	73024.17	0.209	3.183
556	6.712	2.230	400.998	72109.67	0.214	3.149
557	6.682	2.226	398.181	71227.71	0.218	3.116
558	6.652	2.222	393.994	69863.00	0.224	3.062
559	6.622	2.218	391.359	69055.22	0.228	3.032
560	6.593	2.214	388.791	68273.75	0.232	3.003
561	6.564	2.210	384.955	67052.73	0.238	2.954
562	6.535	2.206	381.252	65886.07	0.244	2.908
563	6.506	2.202	377.672	64769.64	0.250	2.864
564	6.478	2.198	375.418	64112.37	0.253	2.840
565	6.450	2.194	372.026	63070.81	0.259	2.799
566	6.422	2.191	368.738	62070.50	0.265	2.759
567	6.394	2.187	365.547	61108.63	0.270	2.721
568	6.366	2.183	361.366	59824.26	0.278	2.669
569	6.339	2.179	359.434	59290.31	0.281	2.650
570	6.312	2.175	355.475	58093.37	0.288	2.601
571	6.285	2.171	352.645	57272.29	0.293	2.568
572	6.258	2.168	350.864	56794.67	0.296	2.551
573	6.231	2.164	348.151	56017.37	0.301	2.521
574	6.205	2.160	344.568	54966.28	0.308	2.478
575	6.178	2.156	342.917	54535.49	0.311	2.463
576	6.152	2.153	339.496	53545.70	0.318	2.422
577	6.126	2.149	337.044	52866.72	0.322	2.396
578	6.101	2.145	334.645	52207.17	0.327	2.370
579	6.075	2.141	331.460	51306.88	0.333	2.333
580	6.050	2.138	329.176	50689.54	0.338	2.309
581	6.025	2.134	326.937	50088.58	0.342	2.286
582	6.000	2.130	324.742	49503.20	0.347	2.263
583	5.975	2.127	322.588	48932.68	0.351	2.241
584	5.951	2.123	320.474	48376.33	0.355	2.219
585	5.926	2.119	318.399	47833.51	0.359	2.198
586	5.902	2.116	316.360	47303.61	0.363	2.177
587	5.878	2.112	314.357	46786.08	0.367	2.157
588	5.854	2.109	313.100	46491.99	0.370	2.147
589	5.830	2.105	310.450	45785.98	0.375	2.118
590	5.807	2.101	308.545	45302.44	0.379	2.099
591	5.783	2.098	307.350	45028.63	0.381	2.090
592	5.760	2.094	305.494	44561.68	0.385	2.072
593	5.737	2.091	303.667	44104.46	0.389	2.054
594	5.714	2.087	302.521	43846.21	0.391	2.046
595	5.692	2.084	300.738	43403.85	0.395	2.028
596	5.669	2.080	299.621	43154.33	0.397	2.020
597	5.647	2.077	298.514	42907.93	0.399	2.012
598	5.624	2.073	297.417	42664.56	0.401	2.004
599	5.602	2.070	295.708	42246.05	0.405	1.987
600	5.581	2.066	294.636	42010.40	0.407	1.980
601	5.559	2.063	293.574	41777.50	0.409	1.972

602	5.537	2.060	292.520	41547.26	0.411	1.964
603	5.516	2.056	291.476	41319.63	0.413	1.957
604	5.495	2.053	289.846	40926.64	0.416	1.941
605	5.473	2.049	288.824	40705.70	0.418	1.934
606	5.452	2.046	288.394	40651.66	0.419	1.935
607	5.432	2.043	286.803	40270.85	0.422	1.920
608	5.411	2.039	285.805	40056.83	0.424	1.913
609	5.390	2.036	285.385	40004.76	0.425	1.913
610	5.370	2.033	284.397	39793.53	0.427	1.906
611	5.350	2.029	283.416	39584.41	0.428	1.900
612	5.330	2.026	282.443	39377.35	0.430	1.893
613	5.310	2.023	281.477	39172.30	0.432	1.886
614	5.290	2.019	280.517	38969.21	0.434	1.879
615	5.270	2.016	279.565	38768.03	0.436	1.873
616	5.251	2.013	278.619	38568.72	0.438	1.866
617	5.231	2.009	277.679	38371.22	0.440	1.859
618	5.212	2.006	276.746	38175.50	0.442	1.853
619	5.193	2.003	275.819	37981.51	0.443	1.847
620	5.174	2.000	274.898	37789.22	0.445	1.840
621	5.155	1.997	273.983	37598.57	0.447	1.834
622	5.137	1.993	273.073	37409.55	0.449	1.828
623	5.118	1.990	271.654	37081.22	0.452	1.814
624	5.099	1.987	270.759	36896.48	0.454	1.808
625	5.081	1.984	269.870	36713.22	0.456	1.802
626	5.063	1.981	267.980	36258.62	0.460	1.783
689	3.993	1.799	151.986	12836.80	0.7581	0.695
765	3.463	1.621	123.811	9458.31	0.8115	0.568
893	2.919	1.388	110.018	8717.96	0.8187	0.611
1050	2.758	1.181	88.828	6682.30	0.8806	0.551



Los datos de la película a-Si:H 132 obtenidos con el elipsómetro se encuentran en la tabla T3.3

Tabla T3.3 a-Si:H 132

Espesor nm	Delta °	Psi °
222.0	330.00	3.96
227.9	293.68	4.44
218.9	154.32	7.00
218.9	155.16	7.12
218.9	156.08	7.04
218.9	157.08	7.08
218.9	156.00	7.08
218.9	156.92	7.08
218.9	156.76	7.00
218.9	157.08	7.08
218.9	157.00	7.08
218.9	156.16	7.08
218.9	155.92	7.16
218.9	155.84	7.12
218.9	156.16	7.12

El espesor, Delta y Psi promedios, junto con el ciclo del espesor de la película son :

- ◆ $\langle d \rangle = 219.6 \text{ nm} \pm s = 2.18 \text{ nm} \pm s_s = 0.41$
- ◆ $\langle \Delta \rangle = 156.19^\circ \pm s = 0.81^\circ \pm s_s = 0.16^\circ$
- ◆ $\langle \Psi \rangle = 7.08^\circ \pm s = 4.61 \times 10^{-2} \pm s_s = 9.4 \times 10^{-3}$
- ◆ Ciclo = 108.0 nm

La comparación entre el espesor obtenido por el método espectrofotométrico y el elipsométrico, así como las tendencias de los parámetros Delta y Psi se muestran en las siguientes gráficas.

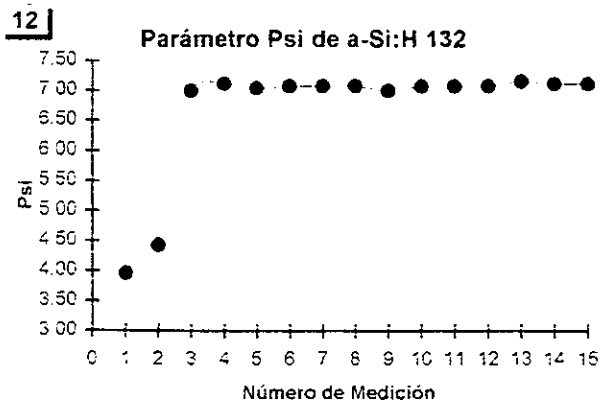
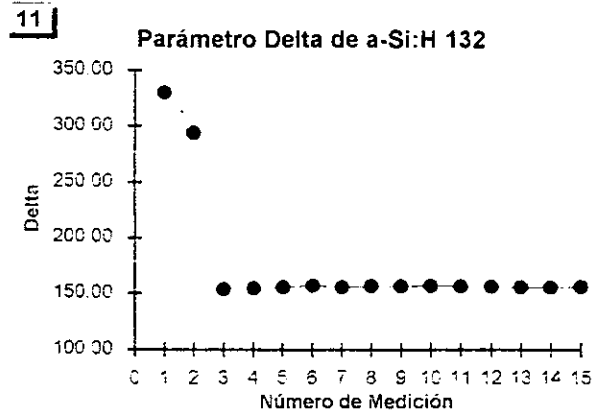
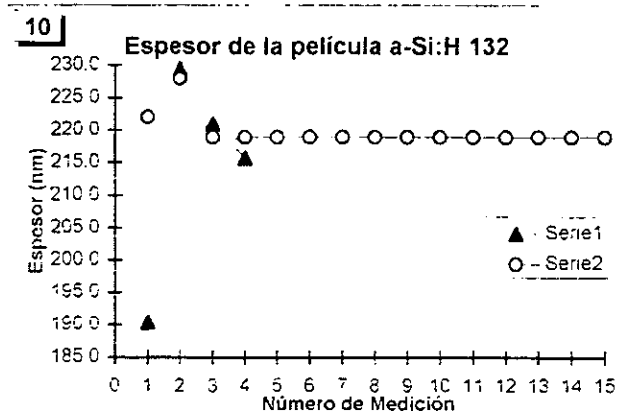


Tabla T4.1 a-Si:H 211

Longitud de onda ± 1 nm	TM %T	Tm %T	Δd nm	Índice de refracción n	Absorción x	θ rad	T _{Mo} %T	T _{mo} %T	m	Espesor d nm	Absortividad α
924	0.910	0.446	10.53	2.978	0.8917	0.328	0.988	0.454	2.0	310.3	3693.6
796	0.879	0.355		3.413	0.8551	0.343	0.953	0.353	2.5	291.5	5368.1
683	0.615	0.260		3.423	0.5843	0.799	0.882	0.218	3.0	299.3	17954.6
630	0.337	0.200		3.448	0.4174	1.128	0.882	0.218	3.5	319.8	27319.0

El espesor promedio de la película es:

- ♦ $\langle d \rangle = 305 \text{ nm} \pm s = 12 \text{ nm} \pm s_s = 4.4 \text{ nm} \quad \text{ó} \quad \langle d \rangle = 305 \text{ nm} \pm \delta_r\% = 4.06\%$
- ♦ $\langle d \rangle = 305 \text{ nm} \pm s_m = 7.2 \text{ nm}$

y el mismo espesor junto con el intervalo de confianza para la desviación estándar a la luz de la teoría de pequeñas muestras o teoría exacta del muestreo:

- ♦ $\langle d \rangle_{PM 68\%} = (305 \pm 9.4) \text{ nm} \quad \text{CONF}_{PM 68\%} = \{9.44 \leq s \leq 22.71\}$
- ♦ $\langle d \rangle_{PM 95\%} = (305 \pm 22.8) \text{ nm} \quad \text{CONF}_{PM 95\%} = \{7.03 \leq s \leq 45.81\}$

Las funciones de Cauchy que aproximan el valor del índice de refracción real en las regiones del cercano ultravioleta, visible y cercano infrarrojo para la película a-Si:H 211 son:

- ♦ $n = 2.756137779 + 301754.81869 (1/\lambda^2)$
- ♦ $n = -8.447811246 + 17500.664795 (1/\lambda) - 6415451.25 (1/\lambda^2)$

Con la última expresión se calcularon los valores del índice de refracción, absortividad, coeficiente de extinción etc., para la región ultravioleta, donde se localiza la zona de fuerte absorción, (ver Cap. 3), ya que los máximos y mínimos de interferencia de los espectros de transmisión no aparecen en dicha región.

En base en los datos de las tablas T4.1 y T4.2 se hicieron varias gráficas, calculándose el valor de la brecha prohibida para la película a-Si:H 211, a partir de la recta obtenida con los datos de $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ vs $\hbar\omega$. El valor calculado fue:

- ♦ $E_{go} = (1.665 \pm s = 0.022) \text{ eV}$.
- ♦ El valor de la constante $K = 5.12 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$.
- ♦ El coeficiente de correlación de la recta es $r = 0.995$.

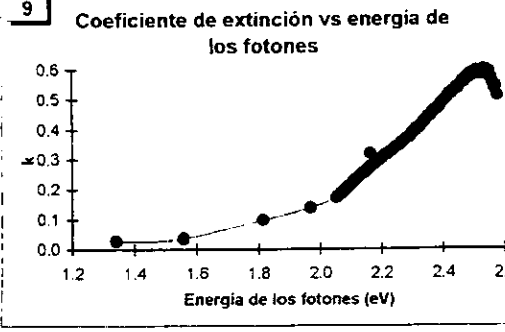
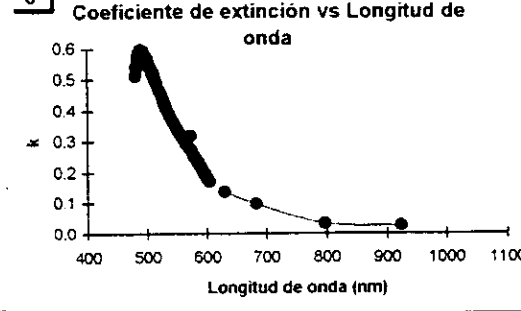
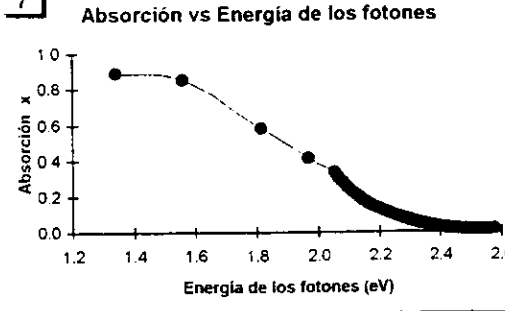
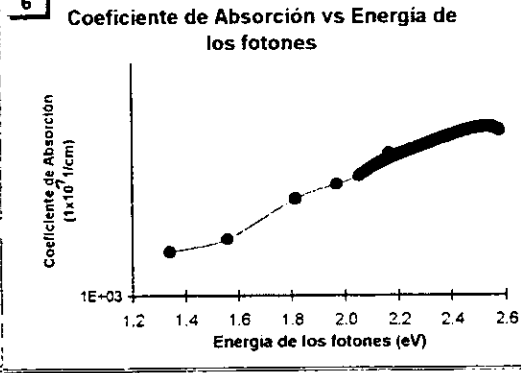
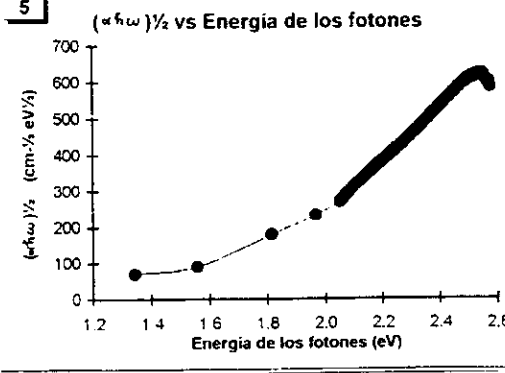
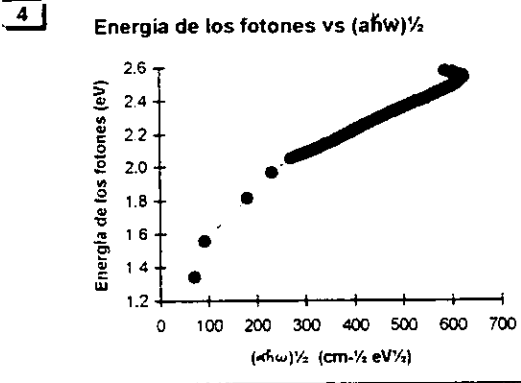
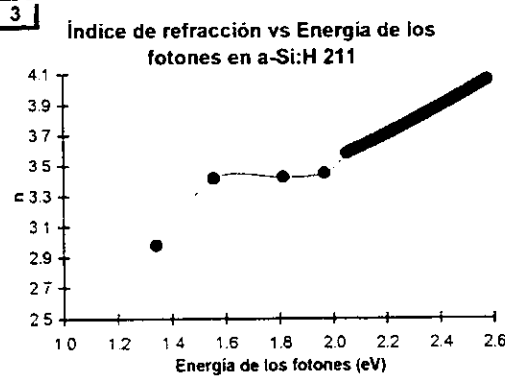
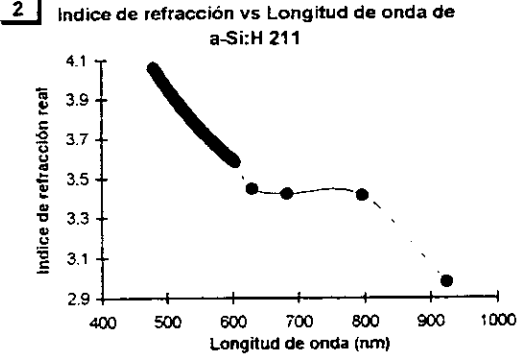
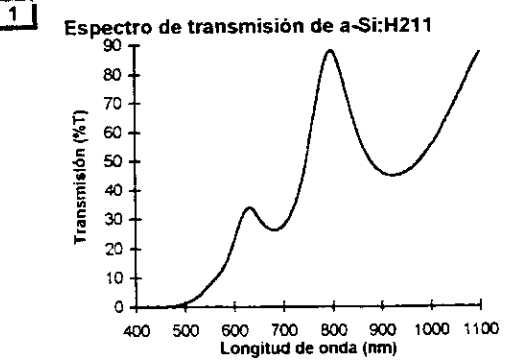
Tabla T4.2 a-Si:H 211

Longitud de Onda nm	Índice de refracción (n)	$\hbar\omega$ eV	$(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ $\text{cm}^{-1/2} \text{ eV}^{1/2}$	Coefficiente de Absorción (α) $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$	Absorción x	Coefficiente de Extinción (k)
481	4.060	2.578	586.323	133368.05	0.017	0.510
482	4.055	2.572	602.203	140982.69	0.014	0.541
483	4.050	2.567	598.983	139768.55	0.014	0.537
484	4.044	2.562	608.679	144628.92	0.012	0.557
485	4.039	2.556	616.402	148629.13	0.011	0.574
486	4.034	2.551	622.636	151963.17	0.010	0.588
487	4.028	2.546	615.532	148821.07	0.011	0.577
488	4.023	2.541	619.792	151197.50	0.010	0.587
489	4.018	2.535	623.299	153226.99	0.009	0.596
490	4.013	2.530	615.930	149931.48	0.010	0.585
491	4.008	2.525	618.370	151429.93	0.010	0.592
492	4.003	2.520	611.445	148358.80	0.011	0.581
493	3.998	2.515	613.126	149478.89	0.010	0.586
494	3.993	2.510	614.492	150450.44	0.010	0.591
495	3.988	2.505	607.697	147439.23	0.011	0.581

496	3.983	2.500	608.587	148169.96	0.011	0.585
497	3.978	2.495	602.170	145354.42	0.012	0.575
498	3.973	2.490	602.697	145901.89	0.012	0.578
499	3.968	2.485	596.604	143254.10	0.013	0.569
500	3.963	2.480	596.850	143659.46	0.012	0.572
501	3.958	2.475	591.042	141158.83	0.013	0.563
502	3.954	2.470	585.596	138846.05	0.014	0.555
503	3.949	2.465	585.227	138947.28	0.014	0.556
504	3.944	2.460	580.070	136780.94	0.015	0.549
505	3.939	2.455	575.223	134771.19	0.016	0.542
506	3.935	2.450	570.411	132788.38	0.017	0.535
507	3.930	2.445	570.081	132896.63	0.017	0.536
508	3.925	2.441	565.419	130990.17	0.018	0.530
509	3.921	2.436	560.932	129172.83	0.019	0.523
510	3.916	2.431	556.600	127435.44	0.020	0.517
511	3.912	2.426	556.088	127450.54	0.020	0.518
512	3.907	2.422	551.863	125766.69	0.022	0.512
513	3.903	2.417	547.768	124149.12	0.023	0.507
514	3.898	2.412	543.791	122591.59	0.024	0.501
515	3.894	2.407	539.923	121088.92	0.025	0.496
516	3.889	2.403	536.155	119636.69	0.026	0.491
517	3.885	2.398	532.480	118230.93	0.027	0.486
518	3.881	2.394	526.085	115631.27	0.029	0.477
519	3.876	2.389	522.667	114353.70	0.030	0.472
520	3.872	2.384	519.317	113110.40	0.032	0.468
521	3.868	2.380	516.034	111899.27	0.033	0.464
522	3.864	2.375	512.812	110781.50	0.034	0.460
523	3.859	2.371	509.649	109566.41	0.035	0.456
524	3.855	2.366	506.542	108441.50	0.037	0.452
525	3.851	2.362	501.257	106392.99	0.039	0.444
526	3.847	2.357	498.308	105345.35	0.040	0.441
527	3.843	2.353	495.406	104319.67	0.041	0.437
528	3.839	2.348	490.516	102464.70	0.044	0.431
529	3.834	2.344	487.745	101501.90	0.045	0.427
530	3.830	2.339	483.107	99768.93	0.048	0.421
531	3.826	2.335	480.450	98860.81	0.049	0.418
532	3.822	2.331	476.032	97233.92	0.051	0.412
533	3.818	2.326	471.747	95670.85	0.054	0.406
534	3.814	2.322	469.255	94840.30	0.055	0.403
535	3.810	2.317	466.792	94023.16	0.057	0.400
536	3.806	2.313	462.745	92572.32	0.059	0.395
537	3.803	2.309	460.365	91793.69	0.061	0.392
538	3.799	2.305	456.475	90416.93	0.063	0.387
539	3.795	2.300	452.681	89085.44	0.066	0.382
540	3.791	2.296	448.977	87796.20	0.069	0.377
541	3.787	2.292	446.765	87094.23	0.070	0.375
542	3.783	2.288	443.188	85863.60	0.073	0.370
543	3.780	2.283	439.689	84669.03	0.075	0.366
544	3.776	2.279	437.579	84012.89	0.077	0.364
545	3.772	2.275	434.191	82868.91	0.080	0.359
546	3.768	2.271	430.871	81756.15	0.082	0.355
547	3.765	2.267	428.852	81140.30	0.084	0.353
548	3.761	2.262	425.630	80071.77	0.087	0.349
549	3.757	2.258	422.469	79030.61	0.090	0.345
550	3.754	2.254	419.365	78015.46	0.092	0.341

551	3.750	2.250	417.459	77448.55	0.094	0.340
552	3.746	2.246	414.440	76470.72	0.097	0.336
553	3.743	2.242	411.472	75516.01	0.100	0.332
554	3.739	2.238	408.554	74583.40	0.103	0.329
555	3.736	2.234	405.684	73671.94	0.106	0.325
556	3.732	2.230	402.860	72780.73	0.108	0.322
557	3.729	2.226	400.080	71908.97	0.111	0.319
558	3.725	2.222	397.344	71055.87	0.114	0.316
559	3.722	2.218	395.635	70572.46	0.116	0.314
560	3.718	2.214	392.963	69746.73	0.119	0.311
561	3.715	2.210	390.329	68937.95	0.122	0.308
562	3.712	2.206	387.734	68145.51	0.125	0.305
563	3.708	2.202	385.175	67368.83	0.128	0.302
564	3.705	2.198	382.653	66607.35	0.131	0.299
565	3.701	2.194	380.165	65860.57	0.134	0.296
566	3.698	2.191	377.710	65127.97	0.137	0.293
567	3.695	2.187	374.422	64412.12	0.141	0.289
568	3.691	2.183	372.045	63412.31	0.144	0.287
569	3.688	2.179	369.699	62725.17	0.147	0.284
570	3.685	2.175	366.559	61772.49	0.152	0.280
571	3.682	2.171	364.282	61114.66	0.155	0.278
572	3.678	2.168	362.034	60468.25	0.158	0.275
573	3.675	2.164	359.027	69572.07	0.162	0.317
574	3.672	2.160	356.843	58952.05	0.165	0.269
575	3.669	2.156	353.923	58092.50	0.170	0.266
576	3.666	2.153	351.053	57253.37	0.174	0.262
577	3.663	2.149	348.962	56671.62	0.177	0.260
578	3.659	2.145	343.170	55865.19	0.182	0.257
579	3.656	2.141	342.715	54850.24	0.187	0.253
580	3.653	2.138	340.022	54084.80	0.192	0.250
581	3.650	2.134	337.369	53336.03	0.196	0.247
582	3.647	2.130	334.756	52603.31	0.201	0.244
583	3.644	2.127	331.521	51680.16	0.207	0.240
584	3.641	2.123	328.993	50982.18	0.211	0.237
585	3.638	2.119	326.500	50298.43	0.215	0.234
586	3.635	2.116	324.041	49628.44	0.220	0.231
587	3.632	2.112	320.997	48783.50	0.226	0.228
588	3.629	2.109	318.005	47959.98	0.231	0.224
589	3.626	2.105	314.470	46979.28	0.238	0.220
590	3.623	2.101	311.587	46200.26	0.244	0.217
591	3.620	2.098	309.325	45608.96	0.249	0.215
592	3.617	2.094	305.959	44697.34	0.256	0.211
593	3.614	2.091	302.657	43811.66	0.263	0.207
594	3.611	2.087	299.959	43106.47	0.268	0.204
595	3.608	2.084	296.233	42113.14	0.277	0.199
596	3.606	2.080	293.629	41445.50	0.282	0.197
597	3.603	2.077	291.061	40792.22	0.288	0.194
598	3.600	2.073	288.530	40152.80	0.294	0.191
599	3.597	2.070	284.534	39113.81	0.303	0.186
600	3.594	2.066	282.091	38509.09	0.309	0.184
601	3.592	2.063	279.196	37785.69	0.316	0.181
602	3.589	2.060	275.872	36952.68	0.324	0.177
603	3.586	2.056	273.073	36266.66	0.331	0.174
604	3.583	2.053	269.856	35476.00	0.339	0.171
630	3.448	1.968	231.870	27319.00	0.417	0.137

683	3.423	1.815	180.535	17954.60	0.584	0.098
796	3.413	1.558	91.440	5368.10	0.855	0.034
924	2.978	1.342	70.400	3693.60	0.892	0.027



Los datos de la película a-Si:H 211 obtenidos con el elipsómetro se encuentran en la tabla T4.3

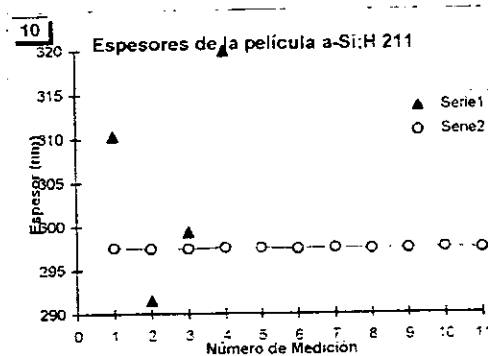
Tabla T4.3 a-Si:H 211

Espesor nm	Delta °	Psi °
297.5	68.88	24.36
297.4	69.20	24.40
297.4	69.24	24.40
297.5	68.80	24.40
297.5	69.00	24.40
297.4	69.28	24.36
297.5	68.88	24.36
297.4	69.08	24.36
297.4	69.24	24.36
297.5	68.68	24.32
297.4	69.24	24.32

El espesor, Delta y Psi promedios, junto con el ciclo del espesor de la película son :

- ♦ $\langle d \rangle = 297.5 \text{ nm} \pm s = 5.22 \text{ nm} \pm s_s = 1.17 \times 10^{-2} \text{ nm}$
- ♦ $\langle \Delta \rangle = 69.04^\circ \pm s = 0.21^\circ \pm s_s = 4.71 \times 10^{-2} \text{ }^\circ$
- ♦ $\langle \Psi \rangle = 24.37^\circ \pm s = 3.00^\circ \pm s_s = 6.71 \times 10^{-3} \text{ }^\circ$
- ♦ Ciclo = 102.3 nm

La comparación entre el espesor obtenido por el método espectrofotométrico y el elipsométrico, así como las tendencias de los parámetros Delta y Psi se muestran en las siguientes gráficas.



Serie 1: Datos espectroscópicos
Serie 2: Datos elipsométricos

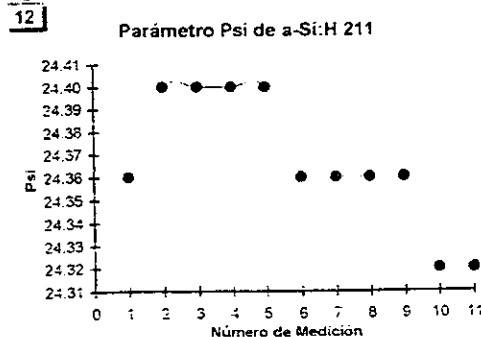
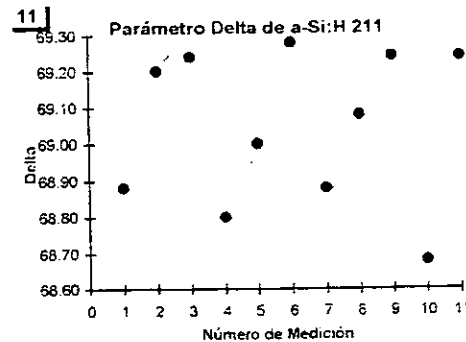


Tabla T5.1 a-Si:H 314

Longitud de onda ± 1 nm	TM %T	Tm %T	Δd nm	Índice de refracción n	Absorción x	θ rad	T _{MO} %T	T _{mo} %T	m	Espesor d nm	Absortividad α
876	1.003	0.555	9.29	2.712	0.9842	0.180	1.026	0.535	2.0	323.0	492.0
726	0.915	0.554		2.735	0.9748	0.395	0.870	0.505	2.5	331.8	768.3
640	0.780	0.510		2.913	0.9579	0.813	0.910	0.455	3.0	329.6	1303.9
558	0.521	0.420		3.105	0.8128	1.362	0.947	0.248	3.5	314.5	6588.9
545	0.434	0.380		3.114	0.7198	1.362	0.634	0.267	4.0	350.0	9392.4

El espesor promedio de la película a la luz de la teoría de grandes muestras es:

- ♦ $\langle d \rangle = 330 \text{ nm} \pm s = 13 \text{ nm} \pm s_s = 4.6 \text{ nm}$ ó $\langle d \rangle = 330 \text{ nm} \pm \delta_{r\%} = 4.0\%$
- ♦ $\langle d \rangle = 330 \text{ nm} \pm s_m = 5.9 \text{ nm}$.

y el mismo espesor junto con el intervalo de confianza para la desviación estándar a la luz de la teoría de pequeñas muestras o teoría exacta del muestreo:

- ♦ $\langle d \rangle_{PM68\%} = (330 \pm 8.1) \text{ nm}$ CONF_{PM68%} = {10.25 ≤ s ≤ 21.55}
- ♦ $\langle d \rangle_{PM95\%} = (330 \pm 18.3) \text{ nm}$ CONF_{PM95%} = {7.88 ≤ s ≤ 37.98}

Las funciones de Cauchy que aproximan el valor del índice de refracción real en las regiones del cercano ultravioleta, visibles y cercano infrarrojo para la película a-Si:H 314 son:

- ♦ $n = 2.385999605 + 216791.6277 (1/\lambda^2)$
- ♦ $n = 3.811962306 - 1990.557312 (1/\lambda) + 893322.20312 (1/\lambda^2)$.

Con la última expresión se calcularon los valores del índice de refracción, absortividad, coeficiente de extinción etc., para la región ultravioleta, donde se localiza la zona de fuerte absorción, (ver Cap. 3), ya que los máximos y mínimos de interferencia de los espectros de transmisión no aparecen en dicha región.

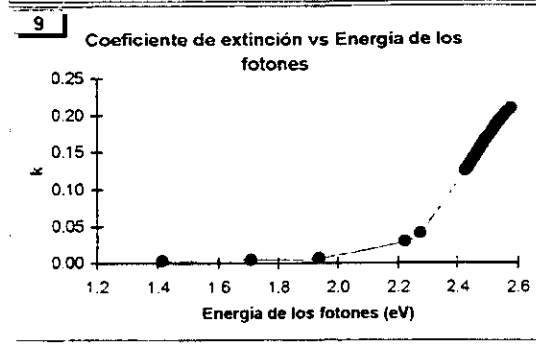
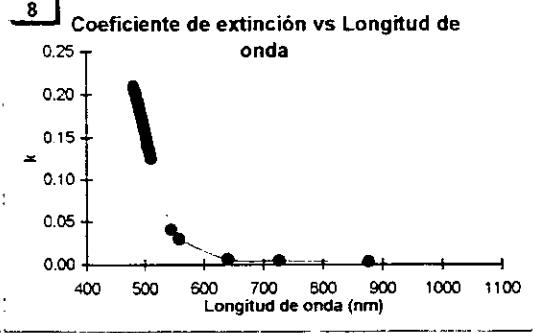
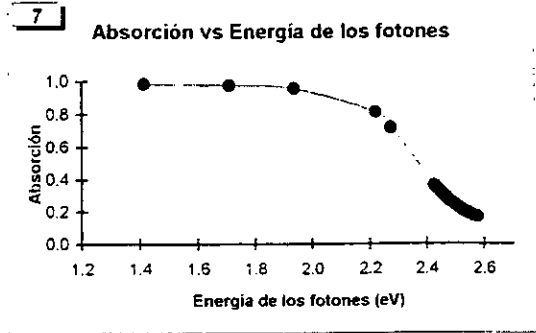
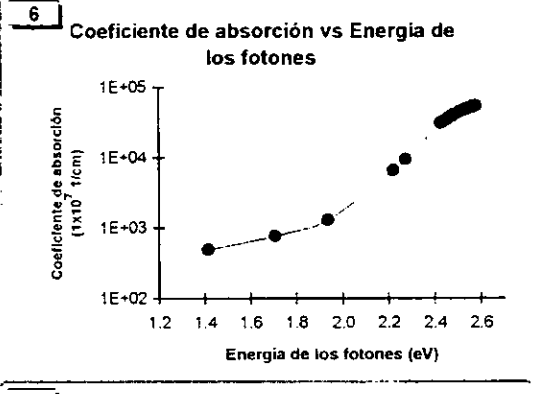
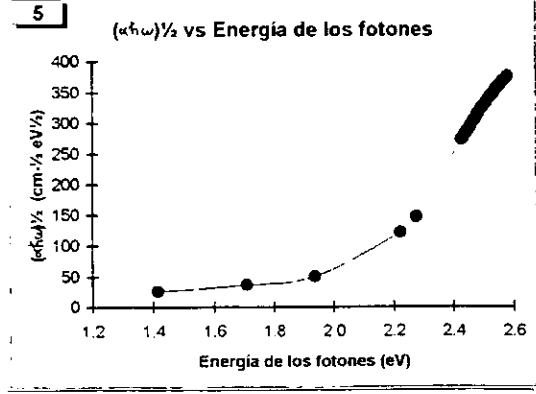
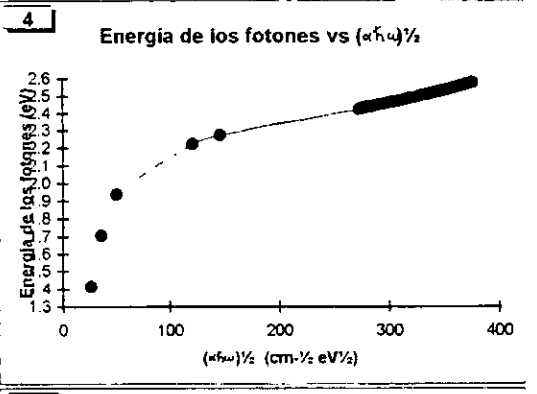
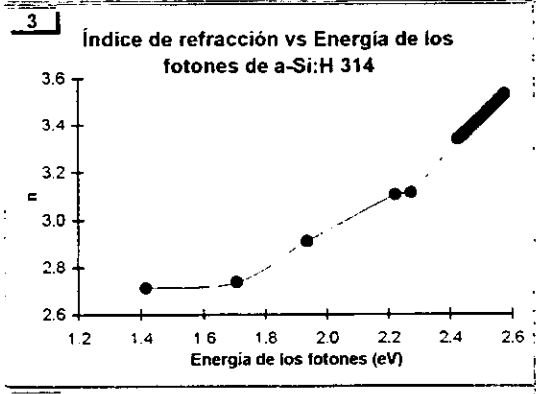
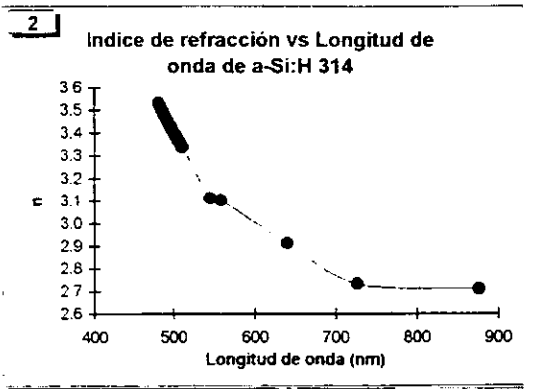
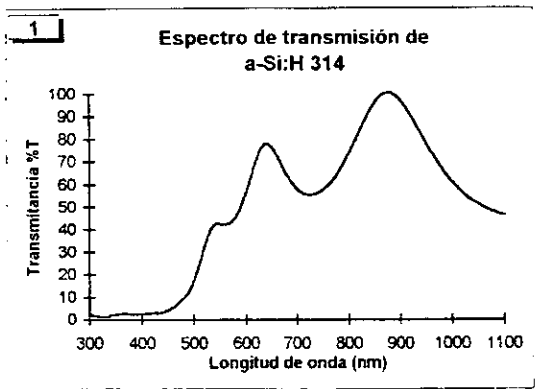
En base a los datos de las tablas T5.1 y T5.2 se hicieron varias gráficas; calculándose en una de ellas el valor de la brecha prohibida para la película a-Si:H 314, a partir de la recta obtenida con los datos de $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ vs $\hbar\omega$. El valor calculado fue:

- ♦ $E_{go} = (2.031 \pm s = 0.038) \text{ eV}$.
- ♦ El valor de la constante $K = 4.83 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$.
- ♦ El coeficiente de correlación de la recta es $r = 0.998$.

Tabla T5.2 a-Si:H 314

Longitud de Onda nm	Índice de Refracción (n)	$\alpha\hbar\omega$ eV	$(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ $\text{cm}^{-1/2} \text{ eV}^{1/2}$	Coefficiente de Absorción (α) $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$	Absorción x	Coefficiente de Extinción (k)
481	3.535	2.578	375.434	54682.04	0.165	0.209
482	3.527	2.572	372.304	53885.91	0.169	0.207
483	3.520	2.567	369.248	53114.87	0.173	0.204
484	3.513	2.562	367.177	52629.52	0.176	0.203
485	3.505	2.556	364.236	51896.91	0.181	0.200
486	3.498	2.551	361.360	51185.77	0.185	0.198
487	3.491	2.546	357.689	50254.22	0.191	0.195
488	3.484	2.541	354.949	49589.00	0.195	0.193
489	3.477	2.535	351.449	48715.44	0.201	0.190
490	3.470	2.530	348.038	47872.12	0.206	0.187
491	3.463	2.525	345.485	47268.76	0.210	0.185
492	3.457	2.520	341.464	46268.73	0.217	0.181
493	3.450	2.515	337.558	45308.14	0.224	0.178

494	3.443	2.510	334.473	44574.07	0.230	0.175
495	3.436	2.505	330.757	43677.40	0.237	0.172
496	3.430	2.500	327.817	42991.02	0.242	0.170
497	3.423	2.495	324.936	42323.93	0.248	0.167
498	3.417	2.490	321.460	41506.45	0.254	0.164
499	3.410	2.485	317.431	40553.90	0.263	0.161
500	3.404	2.480	314.129	39794.08	0.269	0.158
501	3.398	2.475	309.694	38755.93	0.279	0.155
502	3.392	2.470	305.390	37761.21	0.288	0.151
503	3.385	2.465	302.342	37085.01	0.294	0.148
504	3.379	2.460	298.239	36157.12	0.304	0.145
505	3.373	2.455	293.703	35135.25	0.314	0.141
506	3.367	2.450	289.821	34280.21	0.323	0.138
507	3.361	2.445	286.031	33455.56	0.332	0.135
508	3.355	2.441	282.831	32775.68	0.339	0.132
509	3.349	2.436	279.200	32002.32	0.348	0.130
510	3.343	2.431	275.647	31254.22	0.357	0.127
511	3.338	2.426	272.639	30635.93	0.364	0.125
545	3.114	2.275	146.175	9392.40	0.720	0.041
558	3.105	2.222	120.996	6588.90	0.813	0.029
640	2.913	1.937	50.259	1303.90	0.958	0.007
726	2.735	1.708	36.224	768.30	0.975	0.004
876	2.712	1.415	26.388	492.00	0.984	0.003



Los datos de la película a-Si:H 314 obtenidos con el elipsómetro se encuentran en la tabla T5.3

Tabla T5.3 a-Si:H 314

Espesor	Ind. Ref.	Delta	Psi
nm	Ref.	o	o
331.2	2.670	146.00	12.08
330.3	2.677	146.00	12.20
328.1	2.683	149.92	12.24
329.4	2.681	147.24	12.24
326.1	2.689	153.00	12.32
332.0	2.667	145.16	12.04
329.3	2.675	149.40	12.12
328.5	2.680	149.76	12.20
328.9	2.683	147.68	12.28
327.3	2.690	149.76	12.36
328.7	2.688	146.60	12.36
327.6	2.689	149.00	12.36
330.6	2.669	147.92	12.04
328.5	2.680	149.92	12.20
328.0	2.683	150.32	12.24
328.0	2.689	148.16	12.36
327.1	2.690	150.08	12.36
328.9	2.689	145.60	12.40
331.2	2.667	147.52	12.00
331.2	2.667	147.52	12.00
329.6	2.673	149.40	12.08
329.1	2.674	150.52	12.08
327.2	2.688	150.52	12.32
327.5	2.687	150.00	12.32
328.3	2.686	148.24	12.32
327.4	2.688	150.24	12.32
327.2	2.684	152.08	12.24
328.5	2.688	147.08	12.36
328.2	2.692	146.32	12.44
331.6	2.664	147.16	11.96
327.5	2.689	149.32	12.36
327.5	2.689	149.32	12.36

El espesor, Delta y Psi promedios, junto con el ciclo del espesor de la película son :

- ♦ $\langle d \rangle = 328.7 \text{ nm} \pm s = 1.51 \text{ nm} \pm s_s = 0.19 \text{ nm}$
- ♦ $\langle n \rangle = 2.682 \pm s = 8.51 \times 10^{-3} \pm s_s = 1.08 \times 10^{-3}$
- ♦ $\langle \Delta \rangle = 148.6^\circ \pm s = 1.89^\circ \pm s_s = 0.24^\circ$
- ♦ $\langle \Psi \rangle = 12.24^\circ \pm s = 0.13^\circ \pm s_s = 0.017^\circ$
- ♦ Ciclo = 126.9 nm

La comparación entre el espesor obtenido por el método espectrofotométrico y el elipsométrico, así como las tendencias de los parámetros Delta y Psi se muestran en las siguientes gráficas.

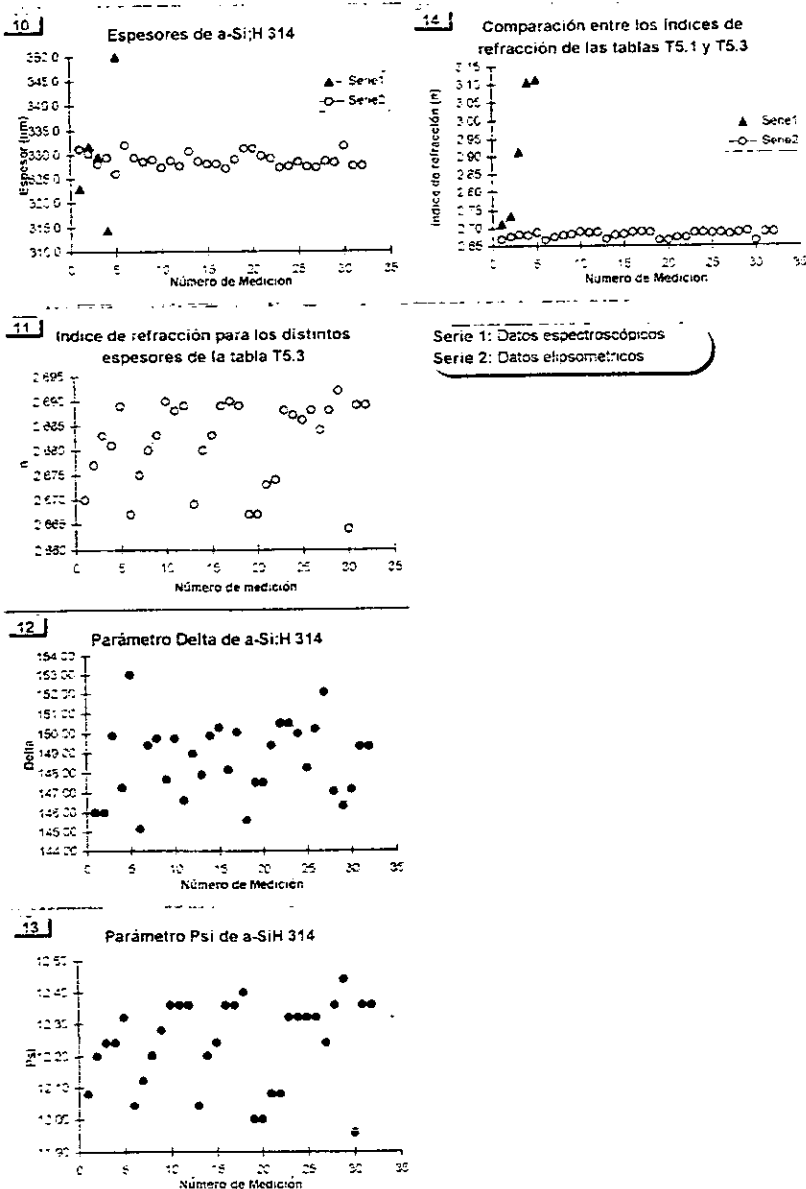


Tabla T6.1 a-Si:H 343

Longitud de onda $\pm 1 \text{ nm}$	TM %T	Tm %T	Δd nm	Indice de refracción n	Absorción x	θ rad	T _{Mo} %T	T _{mo} %T	m	Espesor d nm	Absortividad α
913	1.018	0.550	10.26	2.696	0.9660	0.161	1.092	0.626	2.0	339	1020
750	0.910	0.547		2.733	0.9606	0.391	0.870	0.499	2.5	343	1172
655	0.798	0.530		2.790	0.9399	0.780	0.915	0.483	3.0	352	1760
579	0.610	0.490		2.833	0.8582	1.267	0.904	0.349	3.5	358	4274
556	0.512	0.400		2.966	0.7244	1.286	0.840	0.263	4.0	375	8601

El espesor promedio de la película a la luz de la teoría de grandes muestras es:

- ♦ $\langle d \rangle = 353 \text{ nm} \pm s = 14 \text{ nm} \pm s_s = 4.6 \text{ nm}$ ó $\langle d \rangle = 353 \text{ nm} \pm \delta_{p\%} = 4.0\%$
- ♦ $\langle d \rangle = 353 \text{ nm} \pm s_m = 6.3 \text{ nm}$.

y el mismo espesor junto con el intervalo de confianza para la desviación estándar a la luz de la teoría de pequeñas muestras o teoría exacta del muestreo:

- ♦ $\langle d \rangle_{PM 68\%} = (353 \pm 8.7) \text{ nm}$ CONF_{PM 68%} = {11.06 ≤ s ≤ 23.25}
- ♦ $\langle d \rangle_{PM 95\%} = (353 \pm 19.7) \text{ nm}$ CONF_{PM 95%} = {8.50 ≤ s ≤ 40.96}

Las funciones de Cauchy que aproximan el valor del índice de refracción real en el intervalo ultravioleta para la película a-Si:H 343 son:

- ♦ $n = 2.537105259 + 115545.54196 (1/\lambda^2)$
- ♦ $n = 2.613291979 - 20.051361084 (1/\lambda) + 85879.117188 (1/\lambda^2)$.

Con la última expresión se calcularon los valores del índice de refracción, absortividad, coeficiente de extinción etc., para la región ultravioleta, donde se localiza la zona de fuerte absorción, (ver Cap. 3), ya que los máximos y mínimos de interferencia de los espectros de transmisión no aparecen en dicha región.

En base en los datos de las tablas T6.1 y T6.2 se hicieron varias gráficas, calculándose el valor de la brecha prohibida para la película a-Si:H 343, a partir de la recta obtenida con los datos de $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ vs $\hbar\omega$. El valor calculado fue:

- ♦ $E_{g0} = (2.010 \pm s = 0.053) \text{ eV}$
- ♦ $K = 5.12 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$
- ♦ El coeficiente de correlación de la recta es $r = 0.997$

Tabla T6.2 a-Si:H 343

Longitud de Onda nm	Índice Refracción (n)	$\alpha\hbar\omega$ eV	$(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ $\text{cm}^{-1/2} \text{ eV}^{1/2}$	Coefficiente de Absorción (α) $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$	Absorción x	Coefficiente de Extinción (k)
481	2.943	2.578	398.40	61576.08	0.114	0.236
482	2.941	2.572	395.58	60833.86	0.116	0.233
483	2.940	2.567	392.04	59874.26	0.121	0.230
484	2.938	2.562	389.51	59225.43	0.123	0.228
485	2.937	2.556	387.02	58592.49	0.126	0.226
486	2.936	2.551	383.56	57666.74	0.130	0.223
487	2.934	2.546	380.18	56772.95	0.135	0.220
488	2.933	2.541	377.86	56196.81	0.137	0.218
489	2.931	2.535	373.68	55073.21	0.143	0.214
490	2.930	2.530	370.54	54263.69	0.147	0.212
491	2.929	2.525	367.48	53478.95	0.151	0.209
492	2.927	2.520	364.48	52717.57	0.155	0.206
493	2.926	2.515	360.70	51733.71	0.161	0.203

494	2.925	2.510	357.85	51021.99	0.165	0.201
495	2.923	2.505	354.24	50100.33	0.170	0.197
496	2.922	2.500	351.52	49432.41	0.174	0.195
497	2.921	2.495	348.85	48781.71	0.178	0.193
498	2.919	2.490	346.22	48147.39	0.182	0.191
499	2.918	2.485	342.90	47323.19	0.188	0.188
500	2.917	2.480	339.66	46525.13	0.193	0.185
501	2.915	2.475	336.49	45751.69	0.199	0.182
502	2.914	2.470	332.69	44815.48	0.205	0.179
503	2.913	2.465	329.67	44092.46	0.211	0.176
504	2.912	2.460	326.05	43215.47	0.217	0.173
505	2.910	2.455	322.52	42368.42	0.224	0.170
506	2.909	2.450	319.07	41549.41	0.230	0.167
507	2.908	2.445	315.70	40756.73	0.237	0.164
508	2.907	2.441	311.81	39836.73	0.245	0.161
509	2.905	2.436	308.60	39096.72	0.251	0.158
510	2.904	2.431	305.45	38378.49	0.258	0.156
511	2.903	2.426	301.81	37542.43	0.265	0.153
512	2.902	2.422	297.17	36468.6	0.276	0.149
513	2.901	2.417	293.72	35694.98	0.283	0.146
514	2.899	2.412	289.82	34821.8	0.292	0.142
515	2.898	2.407	285.51	33860.51	0.302	0.139
516	2.897	2.403	281.81	33050.77	0.311	0.136
517	2.896	2.398	277.70	32157.16	0.321	0.132
518	2.895	2.394	272.77	31084.29	0.333	0.128
556	2.966	2.230	138.49	8601	0.724	0.038
579	2.833	2.141	95.67	4274	0.858	0.020
655	2.790	1.893	57.72	1760	0.940	0.009
750	2.733	1.653	44.02	1172	0.961	0.007
913	2.696	1.358	37.22	1020	0.966	0.007

Los datos de la película a-Si:H 343 obtenidos con el elipsómetro se encuentran en la tabla T5.3

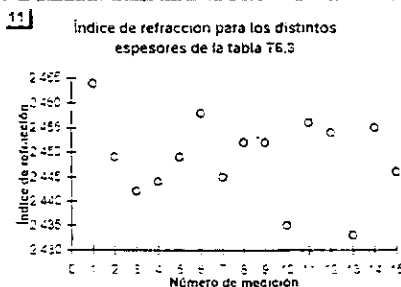
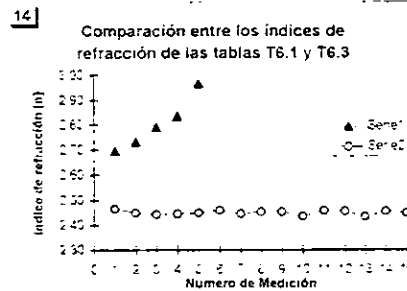
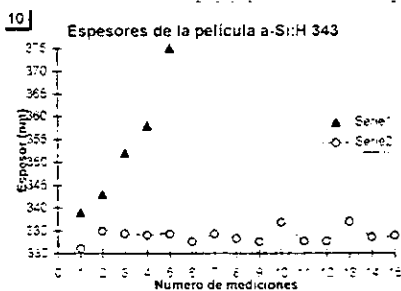
Tabla T6.3 a-Si:H 343

Espesor	Ind. Ref.	Delta	Psi
nm		°	°
331.1	2.464	239.60	9.60
335.0	2.449	236.68	9.16
334.4	2.442	242.32	9.36
334.1	2.444	241.52	9.36
334.3	2.449	238.76	9.28
332.6	2.458	238.76	9.44
334.3	2.445	240.76	9.32
333.3	2.452	239.84	9.40
332.6	2.452	241.92	9.52
336.8	2.435	239.16	9.04
332.7	2.456	239.32	9.44
332.8	2.454	239.76	9.44
337.0	2.433	239.68	9.04
333.6	2.455	237.52	9.32
334.0	2.446	241.00	9.36

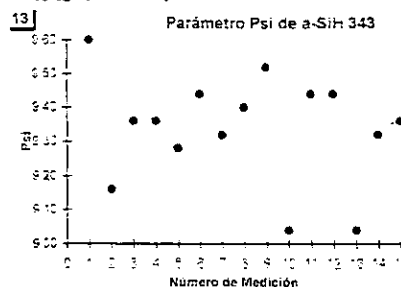
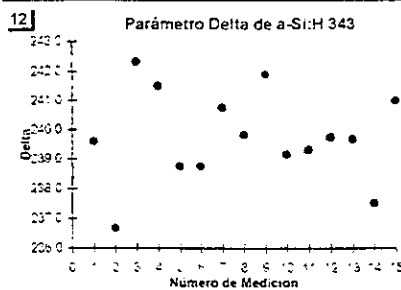
El espesor, Delta y Psi promedios, junto con el ciclo del espesor de la película son :

- ◆ $\langle d \rangle = 333.9 \text{ nm} \pm s = 1.56 \text{ nm} \pm s_s = 0.29 \text{ nm}$
- ◆ $\langle n \rangle = 2.449 \pm s = 8.35 \times 10^{-3} \pm s_s = 1.57 \times 10^{-3}$
- ◆ $\langle \Delta \rangle = 239.8^\circ \pm s = 1.56^\circ \pm s_s = 0.29^\circ$
- ◆ $\langle \Psi \rangle = 9.34^\circ \pm s = 0.15^\circ \pm s_s = 2.99 \times 10^{-2}^\circ$
- ◆ Ciclo = 139.7 nm

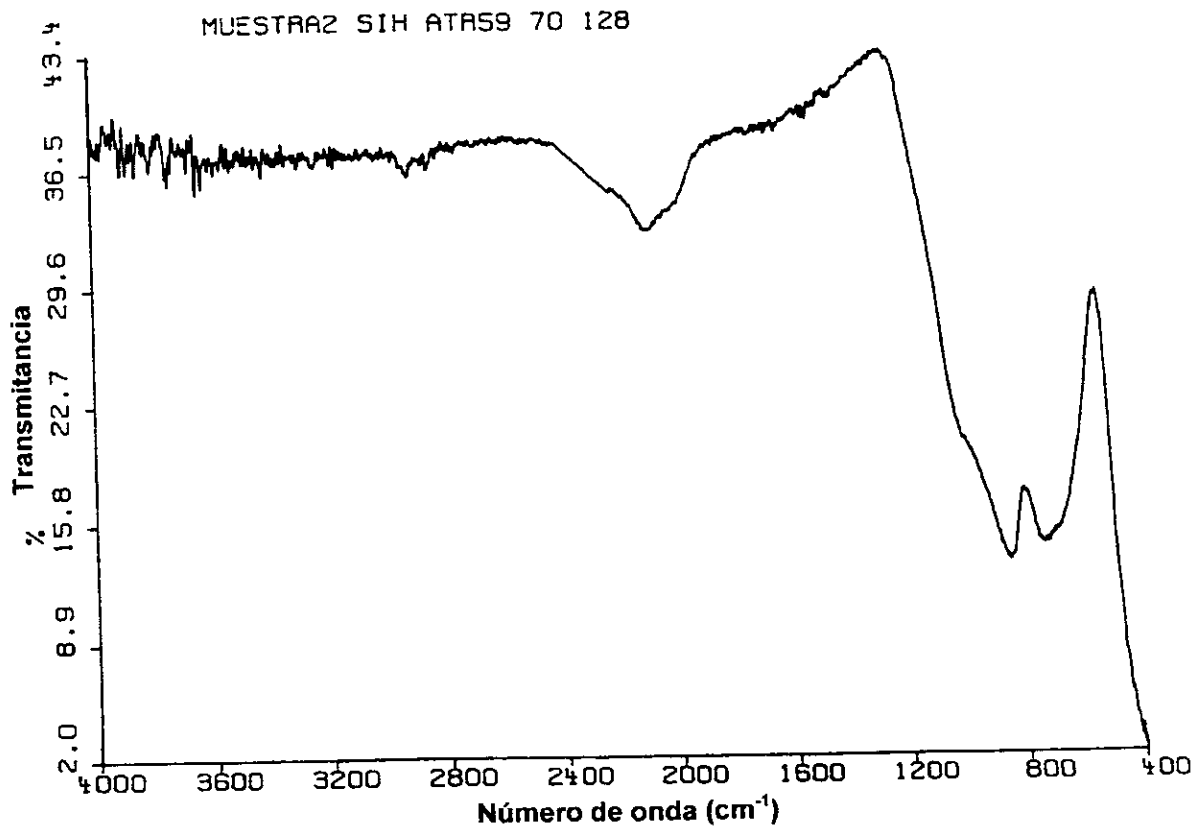
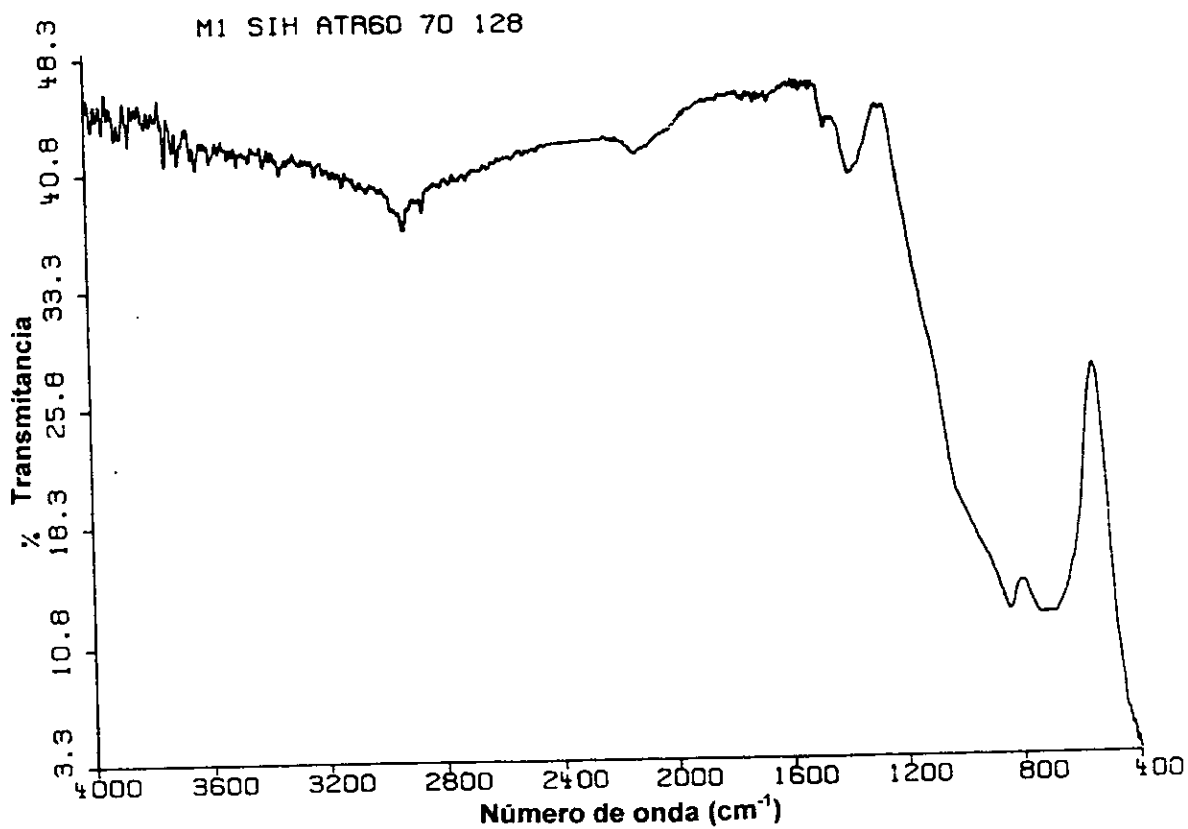
La comparación entre el espesor obtenido por el método espectrofotométrico y el elipsométrico, así como las tendencias de los parámetros Delta y Psi se muestran en las siguientes gráficas.

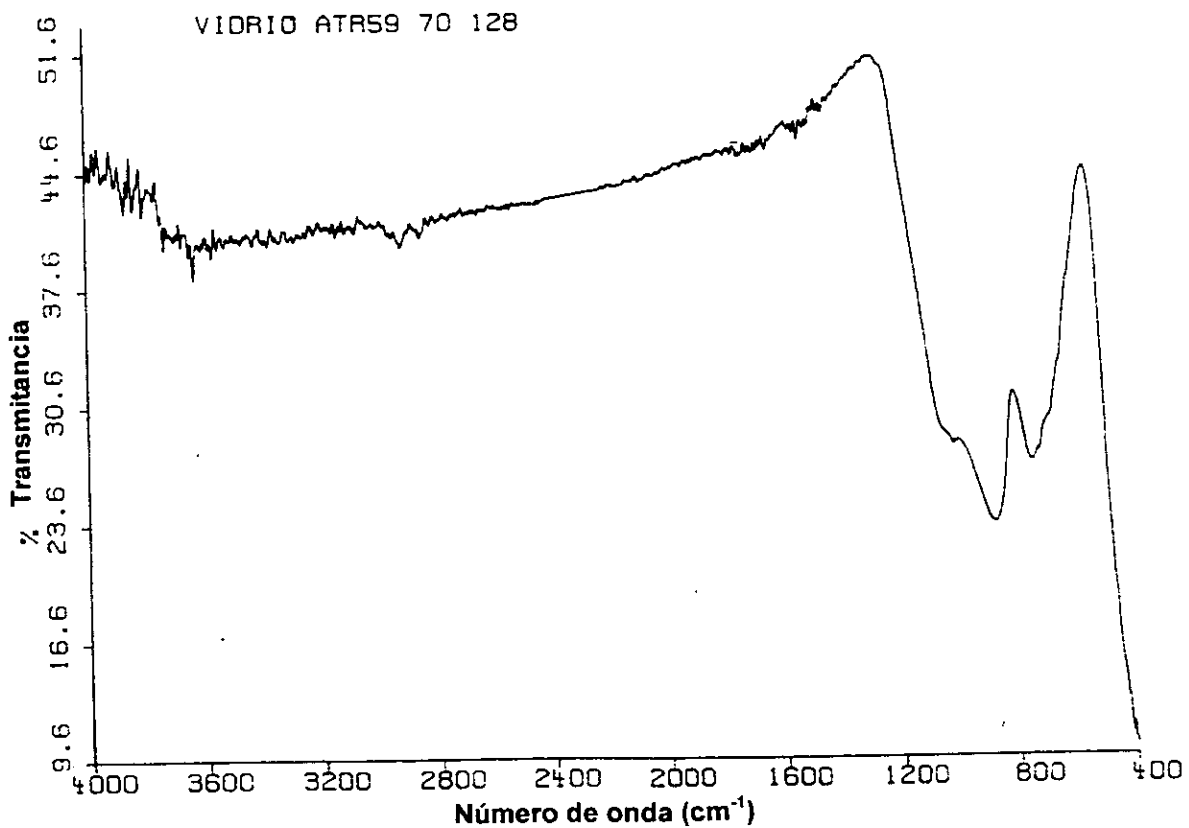
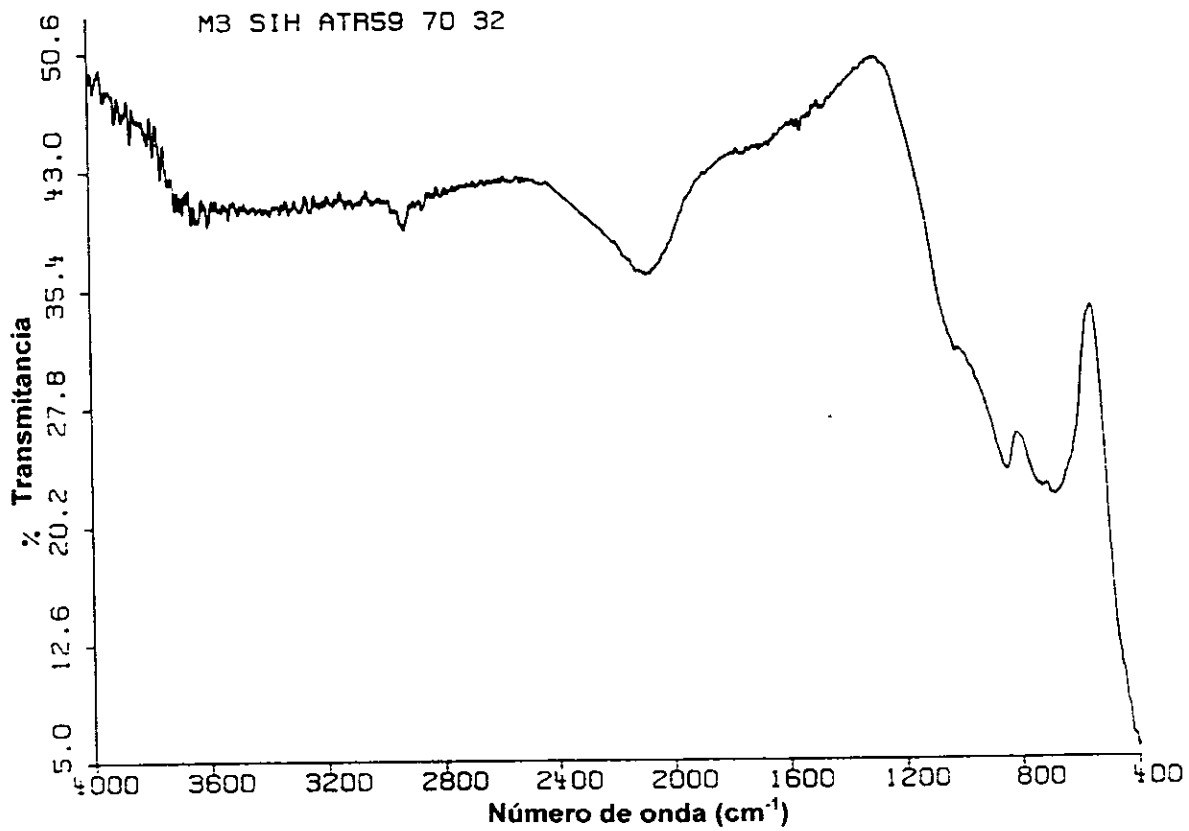


Serie 1: Datos espectroscópicos
Serie 2: Datos elipsométricos



Los espectros de transmisión en el infrarrojo, obtenidos con el espectrómetro infrarrojo de transformada de Fourier, correspondientes a las películas a-Si:H 121 (que en el espectro se identifica como M1), a-Si:H 211 (que en el espectro se identifica como Muestra2), a-Si:H 314 (que en el espectro se identifica como M3) y al vidrio que se usó de sustrato, se muestran a continuación. La interpretación de los picos se da en la sección de Discusión y Conclusiones.

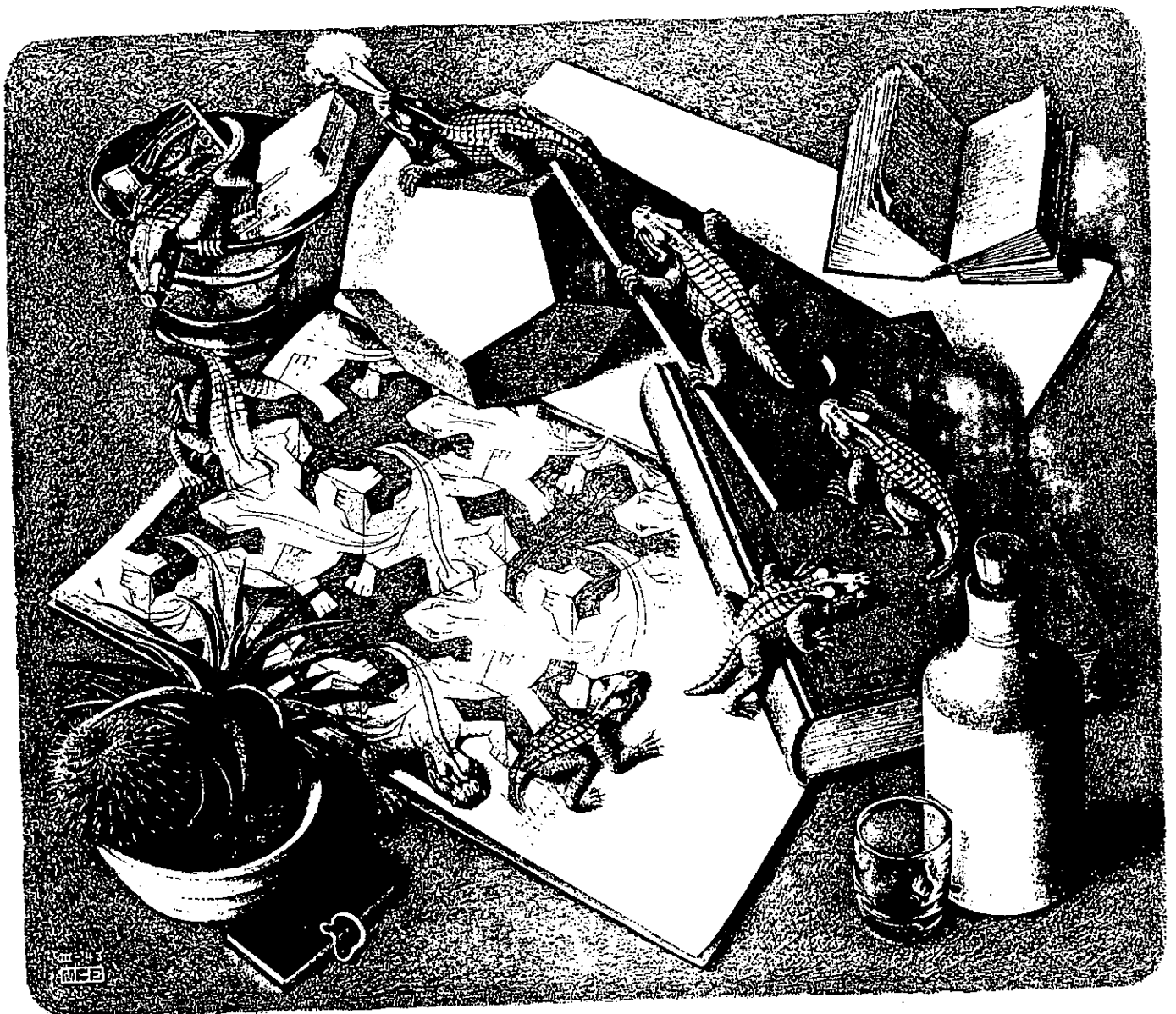




Discusión y Conclusiones

Quando un científico de barba entrecana dice que algo es posible, créanle; cuando dice que es imposible, casi seguramente está equivocado.

Arthur C. Clarke



A continuación se discutirán con detalle los valores de las propiedades ópticas de las películas semiconductoras de silicio amorfo hidrogenado obtenidas al utilizar la técnica de espectroscopía UV/VIS/NIR en conjunto con el método interferométrico desarrollado por Swanepoel, ambas técnicas provienen de una amalgama de las teorías de propagación de la radiación electromagnética en distintos medios, de la espectroscopía de absorción ultravioleta, visible y de infrarrojo cercano y de la instrumentación necesaria para su detección;

estos valores se compararán con sus contrapartes obtenidas al aplicar la elipsometría (teoría basada en la polarización de la luz).

Efectos de superficie

Sobre la superficie de las películas se patentizan ciertos fenómenos, el primero de ellos es su no uniformidad. Esto se nota en varias formas:

Los máximos de transmisión T_{MO} de las películas se aproximan al espectro de transmisión del sustrato T_S sólo en las longitudes de onda grandes, mientras que sufren una disminución consistente al disminuir la longitud de onda, incluso cuando $\alpha = 0$, esta disminución en los máximos del espectro experimental puede atribuirse erróneamente a un incremento en la absortividad (α) o a

la existencia de una cola en la banda de absorción, pero lo correcto es que dicho efecto se debe a las inhomogeneidades en la película, es por esto que el inicio de la absorción no puede deducirse del comportamiento de los máximos del espectro.

Otra evidencia de la presencia de inhomogeneidades en las superficies de las películas es el incremento en los mínimos al disminuir las longitudes de onda, como puede apreciarse en la Fig. C1, para las gráficas #4 y #5; esto no podría suceder con películas uniformes, ya que la ecuación (3.34) en el Cap. 3 muestra que T_{MO} debe permanecer constante o disminuir al decrecer λ . Cuando $\alpha > 0$ se ocasiona que T_{mo} disminuya aún más, puede decirse que el comportamiento anómalo de los mínimos del espectro es una clara indicación de la presencia de inhomogeneidades en la superficie de las películas. Estos comportamientos también se observan al variar la anchura de rendija en los espectrofotómetros, cosa que no sucedió en este trabajo, pues el espectrofotómetro que se usó, el GÉNESIS 5 de Milton Roy, tiene la anchura de rendija fija. (Ver Apéndice 1, Sección A1.1.3.1).

Unas imágenes de la superficie de las películas tomadas con el microscopio de fuerza atómica del centro de instrumentos de la U.N.A.M., se muestran en las Figs. C2 y C3.

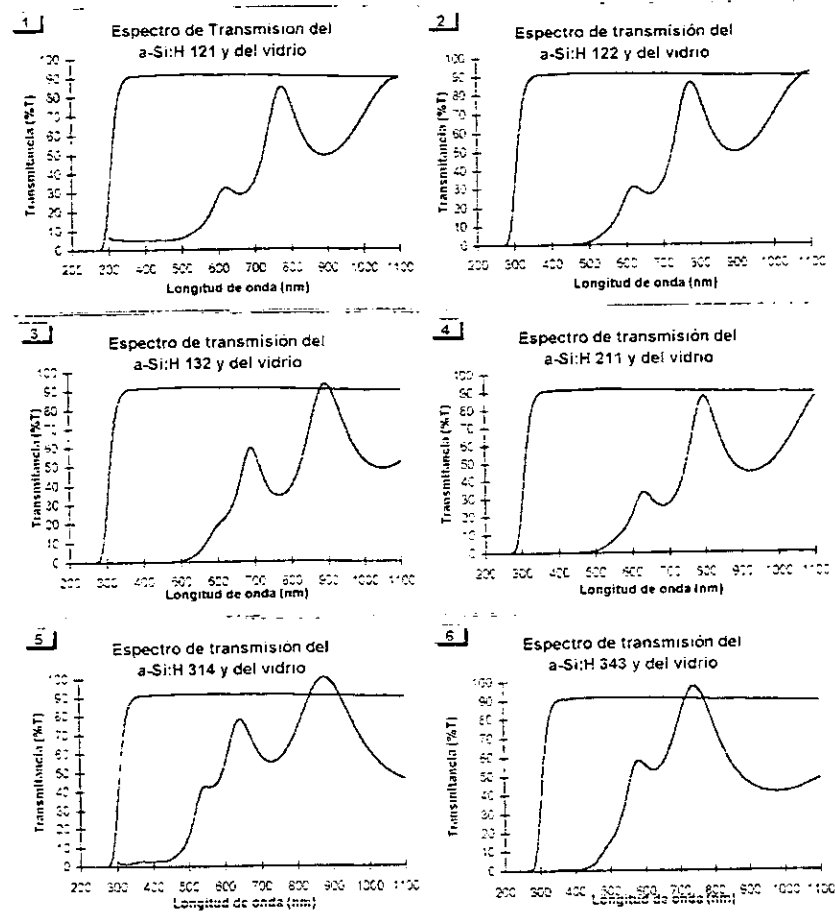
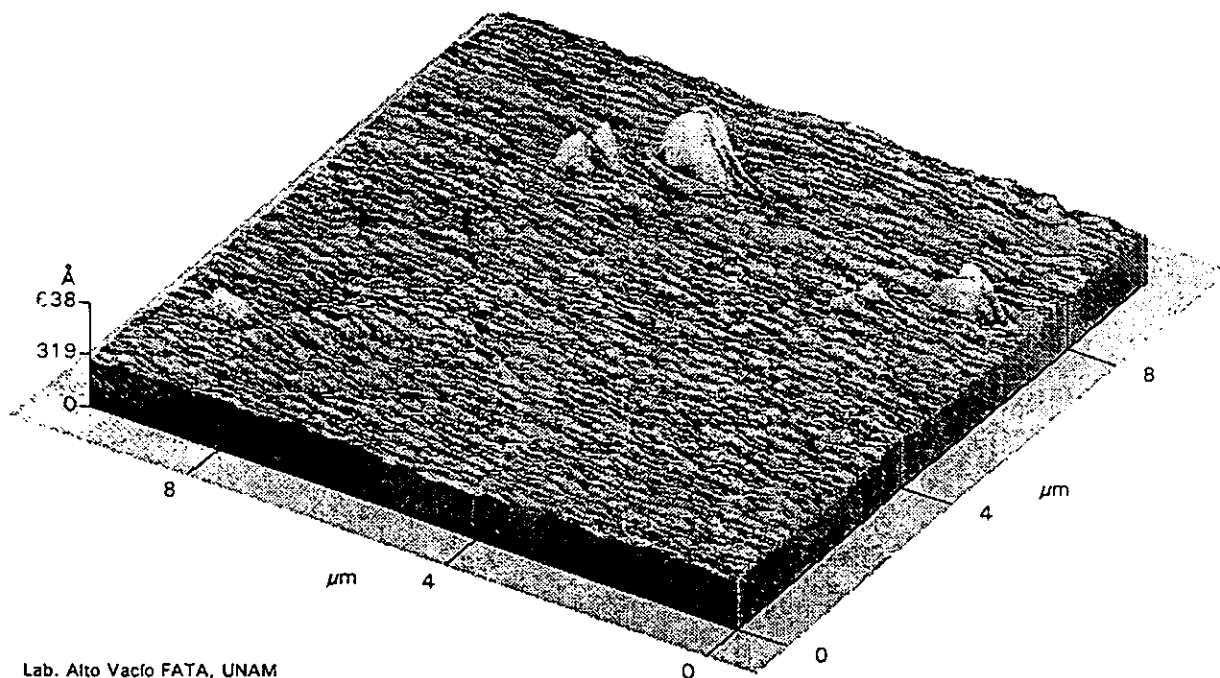


Fig. C1

Película ASi:H

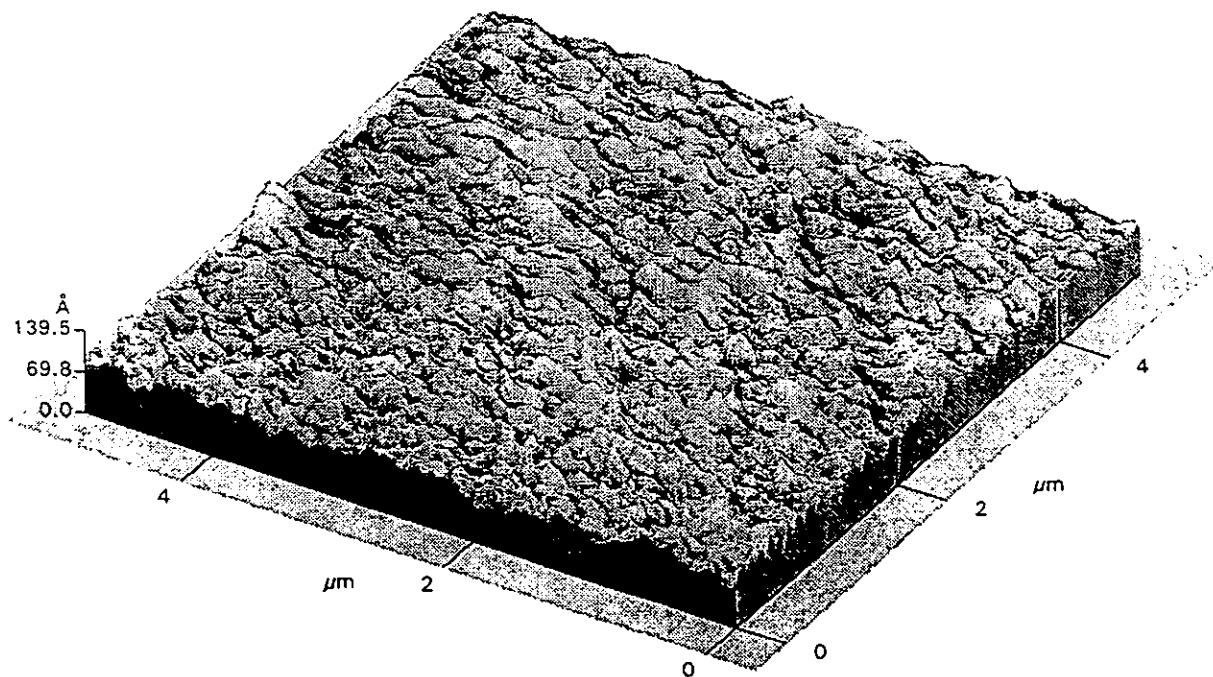


Lab. Alto Vacío FATA, UNAM

Lab. Quím. Mat. CIUNAM

Fig. C2

Película ASi:H



Lab. Alto Vacío FATA, IFUNAM

Lab. Quím. Mat. CIUNAM

Fig. C3

Espesor de las películas

El espesor de las películas se calculó según el procedimiento expuesto en el capítulo 3 secciones 3.2.4, 3.3.5 y 3.3.6, el cual se encuentra explicado también en el diagrama de bloques de la Fig. 3.12. Dichos espesores se reportan para cada longitud de onda en las tablas T1.1, T2.1, T3.1, T4.1, T5.1 y T6.1, y con ellos se obtienen el espesor promedio y su respectiva desviación estándar, suponiendo que los espesores forman una muestra que sigue una distribución gaussiana; pero por desgracia, esta suposición sólo es válida para muestras con un número de miembros mayor a treinta; como esto obviamente no sucede para el caso de los espesores, se decidió utilizar la teoría exacta del muestreo e interpretar de una manera más precisa el promedio en el espesor y su correspondiente desviación estándar, usando las distribuciones *t* de Student y Ji-cuadrada respectivamente.

Los valores del espesor e índice de refracción de las películas de a-Si:H se compararon con los obtenidos con el método elipsométrico, encontrándose en cada caso que los espesores calculados por el método interferométrico y espectroscópico abarcan a los computados por elipsometría; esto se observa en cada una de las gráficas #10 correspondientes a cada conjunto de datos, donde la *serie 1* representa a los datos espectroscópicos y la 2 a los elipsométricos.

Índice de refracción

En esta tesis se calcularon los valores para el índice de refracción de las películas de tres formas; la primera resolviendo por métodos numéricos las ecuaciones simultáneas (3.36) y (3.37) reportándolas en las tablas T1.1 a T6.1. La segunda, apoyándose en los resultados del índice de refracción de las tablas T1.1 a T6.1, ajustaba dos funciones de Cauchy para el índice de refracción del tipo $n(\lambda) = a + b/\lambda^2$ y $n(\lambda) = a + b/\lambda + c/\lambda^2$ para las regiones del cercano ultravioleta, visible y cercano infrarrojo, los cuales se reportaron en las tablas T1.2 a T6.2. Con la combinación de estos datos se hicieron las gráficas #3 y #4 en cada conjunto de datos del capítulo de Resultados y la tercera con elipsometría, reportadas en las tablas T1.3, T2.3, T5.3 y T6.3.

El conjunto de datos de las tablas Tx.1 y Tx.2 (donde $x = 1, 2, \dots, 6$) y sus respectivas gráficas, están acuerdo con los valores reportados en la literatura [35] para el intervalo del espectro electromagnético donde se estudiaron las constantes ópticas, como se muestra en las siguientes gráficas, tanto para el índice de refracción, como para el coeficiente de extinción y el coeficiente de absorción. (Fig. C4, Fig. C5, Fig. C6).

Coefficiente de Absorción

Un escrutinio más cercano al espectro de absorción $\alpha(h\nu)$ cerca del borde de absorción, muestra una fuerte dependencia de los parámetros del método de preparación, como puede verse en la Fig. C3.

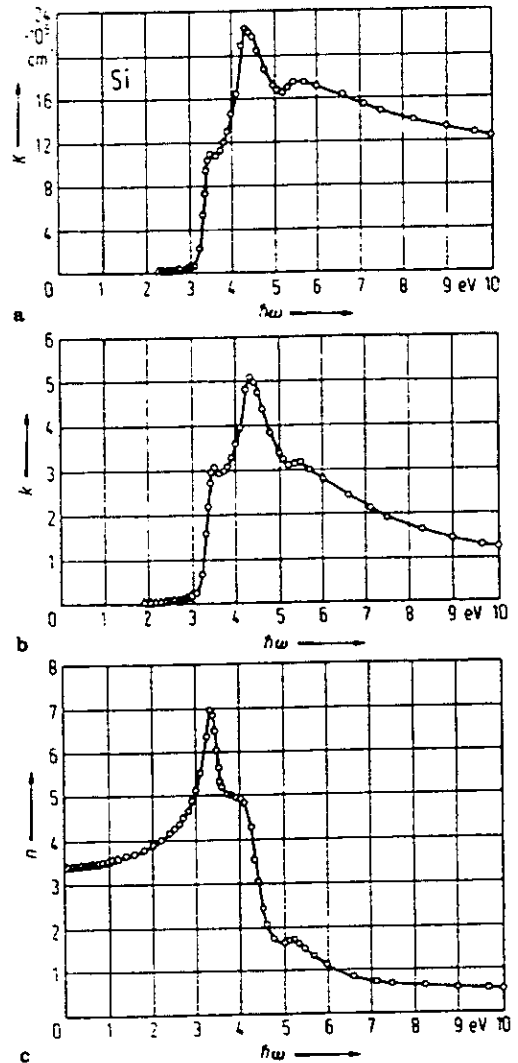


Fig. C4 Constantes ópticas del Silicio por debajo de los 10 eV para la energía de los fotones. (a) Coeficiente de absorción, (b) Coeficiente de extinción, (c) Índice de refracción real.

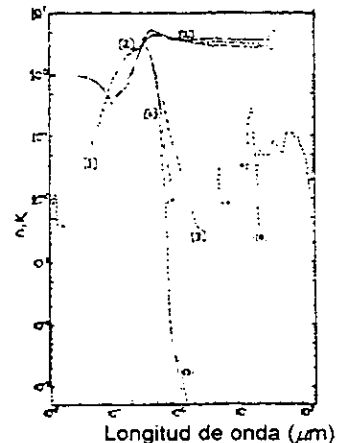


Fig. C5 Gráfica Log - Log de n (—) y k (---) vs longitud de onda para el silicio amorfo. Varias referencias se indican entre brackets, las cuales pueden encontrarse en [35].

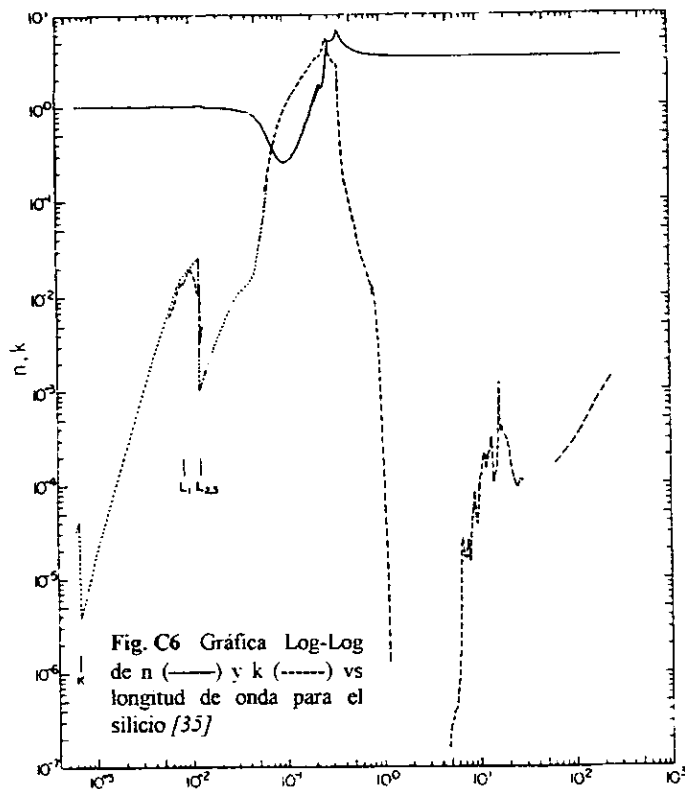


Fig. C6 Gráfica Log-Log de n (—) y k (---) vs longitud de onda para el silicio [35]

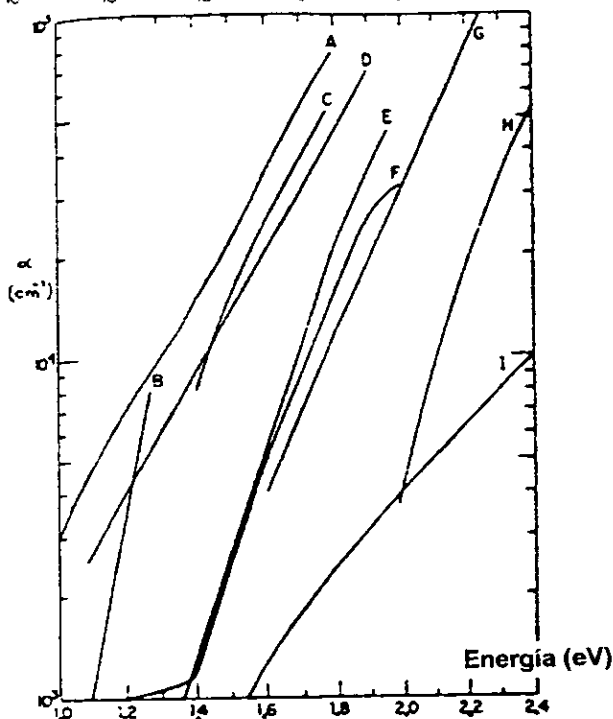


Fig. C7 Espectro del borde de absorción de las películas de silicio amorfo preparadas por diferentes métodos: [104]

- A. Sputtering. $T_s = 25^\circ\text{C}$ ($T_s =$ temperatura del sustrato)
- B. Bombardeo de iones de c-Si
- C. Sputtering sin hidrógeno. $T_s = 200^\circ\text{C}$
- D. Evaporación. $T_s = 20^\circ\text{C}$
- E. Sputtering con $\rho_H = 0.16_\mu$, $T_s = 200^\circ\text{C}$ ($\rho_H =$ presión parcial de hidrógeno)
- F. Depósito por CVD de SiH_4 . $T_s = 650^\circ\text{C}$
- G. Descomposición de silano SiH_4 , $T_s = 195^\circ\text{C}$
- H. Sputtering $\rho_H = 0.44_\mu$, $T_s = 200^\circ\text{C}$
- I. c-Si

Brecha óptica

En cuanto a la brecha óptica puede decirse que casi todas caen entre los intervalos reportados en la literatura para películas con hidrógeno presente [104], así como la constante K en [104, Tabla I] y [34, pag. 291 Tabla 6.3].

El que los enlaces de Si-H estén presentes en las películas, puede corroborarse con los espectros de absorción en el infrarrojo obtenidos mediante el espectrofotómetro de transformada de Fourier.

Espectroscopía Infrarroja

De acuerdo con los espectros mostrados en la sección de resultados para las películas, se deduce a partir de las figuras 1.78 y 1.79 que:

1. Se observa para distintos ángulos de incidencia 32° , 64° y 128° un pico de absorción en la frecuencia de los 2100 cm^{-1} , atribuible a la presencia de polisilanos $(\text{SiH}_2)_n$ (ver [33, Pag. 131]).
2. Se detecta también para los distintos ángulos de incidencia, un pequeño pico de absorción en la frecuencia de los 1000 cm^{-1} , atribuible usualmente al stretch Si-O.
3. Por lo demás todos los picos de los espectros se atribuyen al sustrato de vidrio.
4. Ninguno de los picos correspondientes a los hidruros de silicio (I) e hidruros de silicio (III) están presentes.

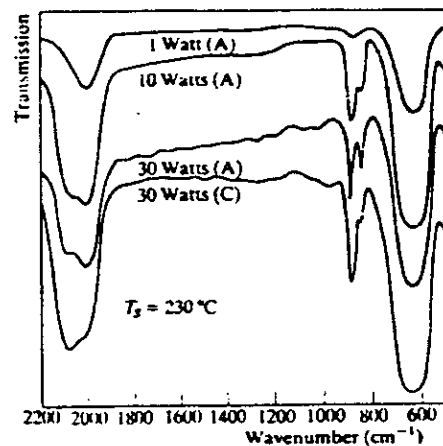


Fig. C8 Espectro de transmisión infrarroja de películas de a-Si:H depositadas a 230°C como función de la potencia de radiofrecuencia en la descarga (A se refiere al material depositado en el ánodo, C al material depositado en el cátodo).

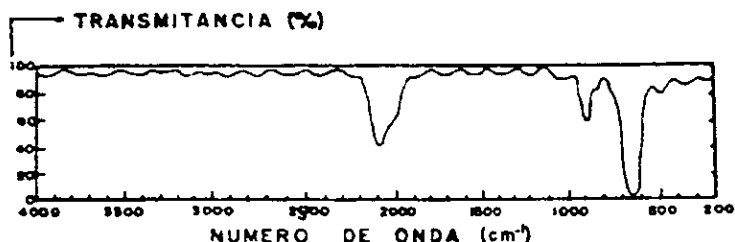


Fig. 9C Espectro de transmisión típico para los modos vibracionales Si-H [98]

En base a todos los resultados obtenidos puede señalarse que esto es apenas una primera aproximación a la caracterización óptica de las películas de a-Si:H para el proyecto de investigación "Producción de Películas Fotovoltaicas y de Diamante".

El trabajo hecho a lo largo de esta tesis ha servido para tener contacto con diversas teorías y técnicas experimentales que servirán para dar el siguiente paso en el proyecto, y obtener películas de mejor calidad para producir fotoceldas solares.

Sugerencias para investigaciones posteriores

Los estudios a futuro en este tipo de películas son:

1. Hornear las películas para influir sobre el perfil del coeficiente de absorción o absortividad, (ver Fig. C7).
2. Dopar las películas con P (Fósforo) y B (Boro) a través de la incorporación al ambiente de la cámara de vacío de PH_3 (Fosfina o Hidruro de Fósforo) y Si_2H_6 (Disilano).
3. Medir el contenido de hidrógeno C_H y la presión parcial de hidrógeno p_H en la cámara de vacío, (ver Fig. 1.80).
4. Utilizar todavía más exhaustivamente el Microscopio de Fuerza Atómica para analizar la superficie de las películas [105].
5. Aplicar el programa computacional, desarrollado en esta tesis para calcular los parámetros ópticos del a-Si:H, a otras películas semiconductoras no cristalinas, (ver Tabla 1.3).

A1

Funcionamiento del Espectrofotómetro Milton Roy SPECTRONIC® GÉNESIS 5

La naturaleza y sus leyes yacian ocultas en la noche,
Dios dijo: "Que Newton sea; y todo se hizo luz"

Alexander Pope



A1.1 Descripción Óptica del Espectrofotómetro GÉNESIS 5

El espectrofotómetro GÉNESIS 5 es un instrumento de doble haz equipado con dos detectores, como se muestra en la Fig. A1.1.

El sistema completo del instrumento ofrece varias ventajas:

- ❑ Los dos detectores son dos diodos de silicio UV. El primero se usa para medir las características de la muestra y el segundo se utiliza para fines de referencia. El detector de referencia monitorea cualquier pequeña fluctuación en la fuente de luz y reduce la polarización, con el fin de obtener mejores datos.

- ❑ El instrumento utiliza un monocromador cruzado Czerny-Turner, con una rejilla holográfica (1200 ranuras / mm) que mejora el desempeño en el rango del UV y en el cercano infrarrojo.
- ❑ La lámpara apropiada es seleccionada automáticamente. Después de encender el aparato la posición de la lámpara es optimizada automáticamente y alineada para dar una mejor precisión y exactitud.
- ❑ El haz de luz tiene 9 mm de altura por 2mm de ancho. La altura del haz esta diseñada para minimizar la sensibilidad a las pequeñas variaciones en la posición vertical.

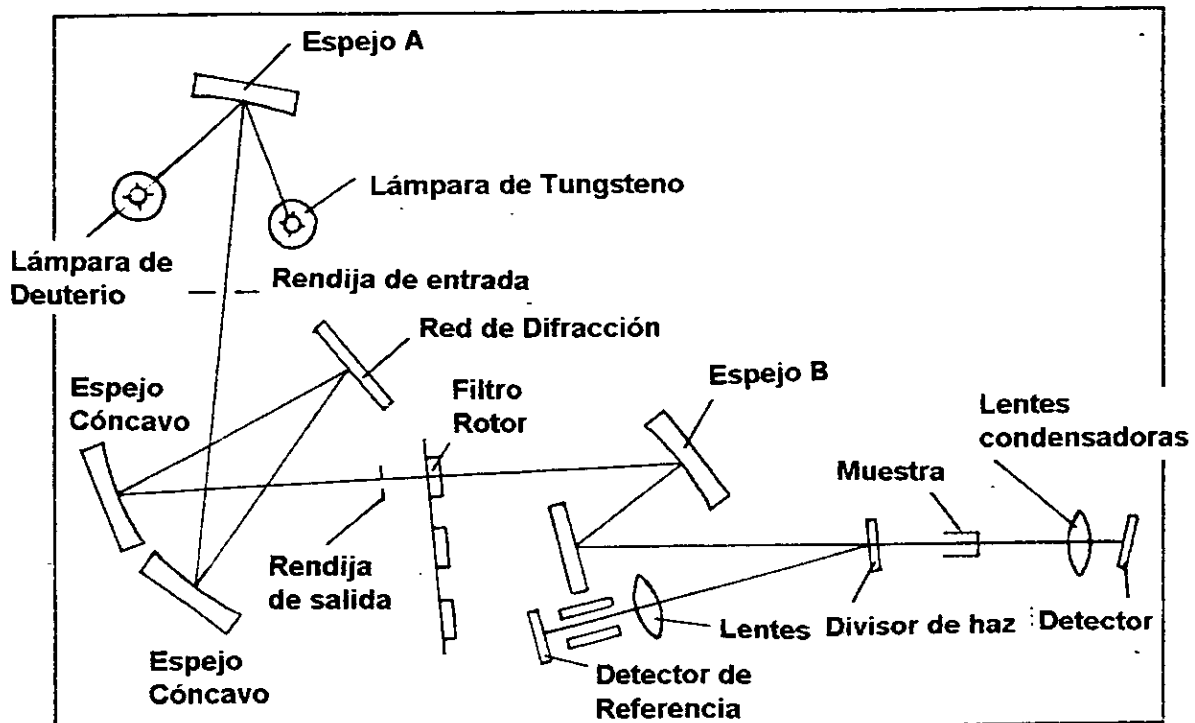


Fig. A1.1 Diagrama Óptico del Espectrofotómetro Sectronic GENESIS 5

A continuación se da una explicación del funcionamiento de cada uno de los componentes del espectrofotómetro

A1.1.1 Definición de un espectrofotómetro

Los monocromadores con una rendija fija en el plano focal (como el de la Fig. A1.2, se denominan *espectrómetros*. Un espectrómetro provisto de un detector fotoeléctrico se denomina un espectrofotómetro.

Al contrario que los espectrógrafos, los espectrómetros o espectrofotómetros son dispositivos de un solo canal en los que cada elemento del espectro se ve consecutivamente y no en forma simultánea. Los espectrofotómetros se utilizan para medidas de absorbancia de las regiones ultravioleta, visible e infrarroja y para medidas de fluorescencia en las dos primeras.

A1.1.2 Componentes de los monocromadores

La figura A1.2 muestra los elementos ópticos de todos los monocromadores, los cuales son:

1. Una rendija de entrada que proporciona una imagen óptica rectangular.
2. Una lente o espejo colimador que produce un haz paralelo de radiación.
3. Un prisma o red que dispersa la radiación en sus longitudes de onda individuales.
4. Un elemento focalizador que forma de nuevo la imagen de la rendija y la enfoca en una superficie plana denominada *plano focal*.
5. Una rendija de salida en el plano focal, que aísla la banda espectral deseada.

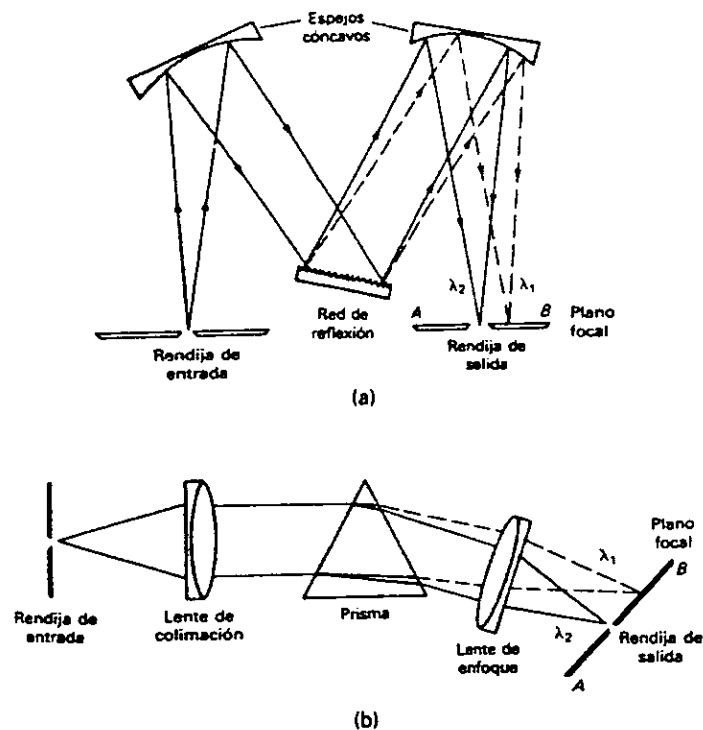


Fig. A1.2 Dos Tipos de monocromadores: (a) monocromadores de red de Czerny - Turner (En este caso $\lambda_1 > \lambda_2$).

Además, la mayoría de los monocromadores tienen ventanas de entrada y salida, cuyo diseño protege a los componentes del polvo y de los humos corrosivos del laboratorio.

Como se muestra en la Fig. A1.2, en los monocromadores hay dos clases de elementos dispersantes: redes de reflexión y prismas. Como ilustración se muestra un haz constituido por sólo dos longitudes de ondas, λ_1 y λ_2 ($\lambda_1 > \lambda_2$). La radiación que entra en los monocromadores a través de una estrecha abertura rectangular o rendija, se colima y, entonces, incide en la superficie del elemento dispersante con un ángulo dado. Para un monocromador de red, la dispersión

angular de las longitudes de onda origina la difracción, que se produce en la superficie de reflexión; para un prisma, la refracción en las dos caras da lugar a una dispersión angular de la radiación, tal como se muestra. En ambos casos, la radiación dispersada se enfoca en el plano focal AB en el que aparece en forma de dos imágenes en la rendija de entrada (una para λ_1 y la otra para λ_2). Por rotación del elemento dispersante, se puede enfocar una u otra banda en la rendija de salida.

Antiguamente, la mayoría de los monocromadores eran instrumentos de prisma. Sin embargo, hoy en día, casi todos los monocromadores comerciales se basan en redes de reflexión porque son más baratas a la hora de fabricarlas, proporcionan mejor separación de longitudes de onda para un mismo tamaño de elemento dispersante y dispersan linealmente la radiación. Como se muestra en la Fig. A1.3a, la dispersión lineal significa que la posición de una banda a lo largo del plano focal de una red, varía linealmente con su longitud de onda. Por el contrario, en los instrumentos de prisma, las longitudes de onda cortas se dispersan en mayor grado que las largas, lo que complica el diseño del instrumento. La dispersión no lineal de los dos tipos de monocromadores de prisma se ilustra en la Fig. A1.3b.

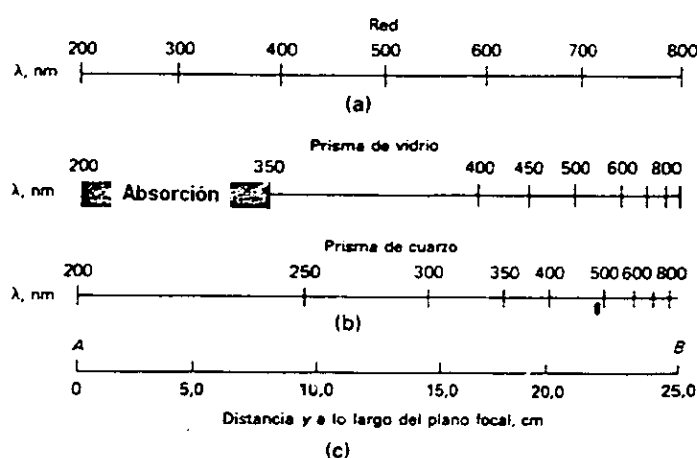


Fig. A1.3 Dispersión para tres tipos de monocromadores. Los puntos A y B en la escala (c) corresponden a los puntos mostrados en la Fig. A1.1.

A1.1.2.1 Monocromadores de red

Las radiaciones ultravioleta, visible e infrarroja pueden dispersarse dirigiendo un haz policromático a través de una *red de transmisión* o hacia la superficie de una *red de reflexión*; esto último es lo más usual. Las réplicas de redes que se usan en la mayoría de los monocromadores, se manufacturan a partir de una red patrón (master grating). Esta última consiste en una superficie dura, pulida y ópticamente plana, en la que se han grabado, con un instrumento de diamante, un

gran número de surcos paralelos y muy próximos entre sí. En la Fig. A1.4 se muestra una vista aumentada de la sección transversal de algunos de estos surcos característicos. Una red para las regiones ultravioleta y visible contiene normalmente, de 300 a 2000 surcos/mm, siendo las más comunes las de 1200 a 1400. Para la región infrarroja, se encuentran desde 10 hasta 200 surcos/mm; una red de unos 100 surcos/mm es adecuada para los espectrofotómetros que se diseñan para el intervalo más usado del infrarrojo desde 5 a 15 μm . La fabricación de una buena red es patosa, larga y cara, ya que los surcos deben ser idénticos en tamaño, exactamente paralelos, y con espaciado igual a lo largo de la longitud de la red (3 a 10 cm).

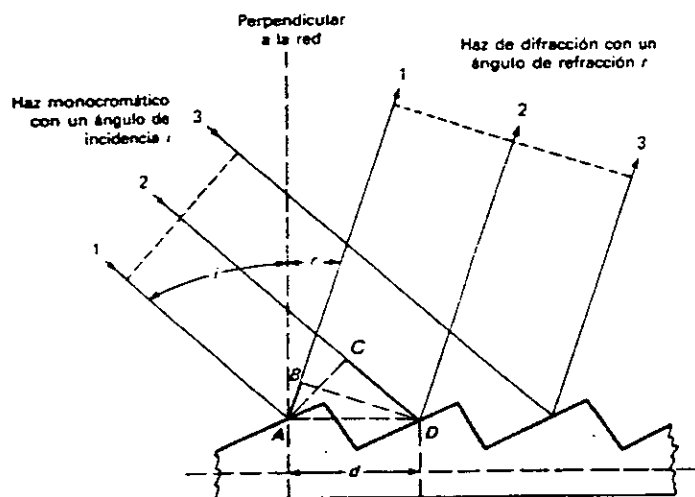


Fig. A1.4 Esquema del mecanismo de difracción de una red tipo escalerilla.

A1.1.2.2 Redes Holográficas

Uno de los productos que provienen del desarrollo de la tecnología láser es una técnica óptica (mas que mecánica) para formar redes sobre superficies vidriadas planas o cóncavas. Las redes holográficas debido a su mayor perfección en la forma y dimensiones de las líneas dan espectros con menos radiación parásita y fantasmas (dobles imágenes).

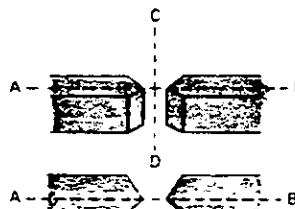
Para la preparación de las redes holográficas, se obliga a los rayos procedentes de un par de láseres idénticos a incidir con ángulos apropiados, sobre una superficie vidriada recubierta con un material fotorresistor. Las franjas de interferencia resultantes de los dos rayos sensibilizan al fotorresistor de manera que éste pueda disolverse, dejando una estructura de surcos que puede recubrirse con aluminio u otra sustancia reflectora para dar lugar a una red de reflexión. El es-

paciado de los surcos puede variarse modificando el ángulo que forman entre si los dos rayos. De esta forma pueden fabricarse redes grandes (~ 50 cm), casi perfectas, con incluso 6000 líneas / mm.

A1.1.2.3 Rendijas del Monocromador

Las rendijas de un monocromador juegan un importante papel para determinar sus características de funcionamiento y calidad. Las mordazas de la rendija son unos bordes agudos, como se muestra en la Fig. A1.5, que se forman mediante un cuidadoso proceso mecánico a partir de dos piezas de metal. Hay que asegurarse con esmero que los bordes de la rendija sean exactamente paralelos uno respecto a otro y que estén en el mismo plano. En algunos monocromadores, las aberturas de las dos rendijas son fijas (como en el espectrofotómetro GÉNESIS 5), aunque suele ser más común que el espaciado pueda ajustarse con un mecanismo micrométrico.

La rendija de entrada de un monocromador (ver Fig. A1.2) sirve como fuente de radiación; su imagen se enfoca, al final, en el plano focal que contiene la rendija de salida. Si la fuente de radiación consiste en unas pocas longitudes de onda discretas, una serie de imágenes rectangulares aparecen en esta superficie como líneas brillantes, cada una de ellas correspondiendo a una longitud de onda diferente. Si se rota el elemento dispersante, una línea particular puede enfocarse en la rendija de salida.



A1.5 Construcción de las rendijas.

Si las rendijas de entrada y salida son del mismo tamaño (como suele ser el caso), la imagen de la rendija de entrada, en teoría, ocupará exactamente la abertura de la rendija de salida cuando el ajuste del monocromador corresponda a la longitud de onda de la radiación. Un movimiento del montaje del monocromador en una u otra dirección produce una disminución continua de la intensidad emitida, que llega a ser cero cuando la imagen de la rendija de entrada se ha desplazado una distancia igual a su anchura.

A1.1.2.4 Características del funcionamiento de los monocromadores

La calidad de un monocromador depende de la pureza de su radiación de salida, de su capacidad para resolver longitudes de onda adyacentes, de su poder de captación de luz y de su anchura espectral.

Pureza espectral. El haz de salida de un monocromador suele estar contaminado con pequeñas cantidades de radiación dispersada o parásita cuyas longitudes de onda son muy diferentes de las del componente instrumental. Esta radiación no deseada puede proceder de distintas fuentes. Entre ellas están las reflexiones del haz procedentes de diversos componentes ópticos y del monocromador; las primeras surgen de imperfecciones mecánicas, en particular en las redes, originadas durante la fabricación. La dispersión por partículas de polvo de la atmósfera o en las superficies de los componentes ópticos hacen que la radiación parásita alcance también la rendija de salida. En general, los efectos de la radiación espúrea se minimizan introduciendo pantallas en lugares apropiados del monocromador y recubriendo las superficies interiores con pintura negra mate. Además el monocromador se sella con ventanas por encima de las rendijas para prevenir la entrada de polvo y humos. Sin embargo, a pesar de estas precauciones, algo de radiación espúrea se emite todavía; su presencia puede dar lugar, en ciertas condiciones, a efectos graves en las medidas de absorción.

Dispersión de los monocromadores de red. La capacidad de un monocromador para separar diferentes longitudes de onda depende de su *dispersión*. La *dispersión angular* viene dada por $dr/d\lambda$, en donde dr representa la variación del ángulo de reflexión o de refracción cuando varía la longitud de onda $d\lambda$. El ángulo r se define en las figuras A1.4.

La *dispersión lineal D* se refiere a la variación de la longitud de onda en función de y , distancia AB de los planos focales como se muestra en la Fig. A1.2. Si F es la longitud focal del monocromador, la dispersión lineal puede relacionarse con la dispersión angular por medio de la relación

$$D = dy/d\lambda = F dr/d\lambda \quad (A1.1)$$

Una medida más útil de la dispersión es la *dispersión lineal recíproca D⁻¹* en la que

$$D^{-1} = \frac{d\lambda}{dy} = \frac{1}{F} \frac{d\lambda}{dr} \quad (A1.2)$$

Las dimensiones de D^{-1} son a menudo nm/mm o Å/mm.

La dispersión angular de una red puede obtenerse diferenciando la Ec. $n\lambda = d(\sin i + \sin r)$ manteniendo i constante. Así pues, para cualquier ángulo de incidencia dado,

$$\frac{dr}{d\lambda} = \frac{n}{d \cos r} \quad (A1.3)$$

donde n se denomina el orden de difracción

La sustitución de esta relación en la Ec. 6-8 permite obtener la *dispersión lineal recíproca* de un monocromador de red:

$$D^{-1} = \frac{d\lambda}{dy} = \frac{d \cos r}{nF} \quad (A1.4)$$

Obsérvese que la dispersión angular aumenta cuando la distancia d entre las rayas disminuye o cuando el número de líneas por milímetro aumenta. Para ángulos de difracción pequeños (< 20 grados), $\cos r \sim 1$ y la Ec. 6-10 es aproximadamente

$$D^{-1} = \frac{d}{nF} \quad (A1.5)$$

Obsérvese que a efectos prácticos, *la dispersión lineal de un monocromador de red* es constante si el ángulo r es pequeño, una propiedad que simplifica, en gran medida, el diseño del monocromador.

A1.1.2.5 Poder de resolución de los monocromadores

El poder de resolución R de un monocromador indica el límite de su capacidad para separar imágenes adyacentes que tienen longitudes de onda algo diferentes. Por tanto por definición

$$R = \lambda/\Delta\lambda \quad (A1.6)$$

en donde λ representa el promedio de las longitudes de onda de las dos imágenes y $\Delta\lambda$ su diferencia. El poder de resolución de los monocromadores característicos de ultravioleta / visible está comprendido entre 10^3 y 10^4 .

Puede demostrarse que el poder de resolución de una red viene dado por la expresión

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = nN \quad (A1.7)$$

en la que n es el orden de difracción y N el número de estrías de la red iluminadas por la radiación procedente de la rendija de entrada. Así, una de las características de las redes largas y de los órdenes de difracción elevados es una mejor resolución.

A1.1.2.6 Poder de captación de luz de los monocromadores

Para aumentar la relación señal / ruido es preciso que la energía radiante que llegue al detector sea lo más grande posible. El f / número o velocidad propor-

ciona una medida de la captación de un monocromador para recoger la radiación que sale de la rendija de entrada. El $f / \text{número}$ se define mediante la ecuación

$$f = \frac{F}{d} \quad (\text{A1.8})$$

en la que F es la distancia focal del espejo colimador (o lente) y d es su diámetro. El poder de captación de luz de un dispositivo óptico aumenta con el cuadrado del inverso de $f / \text{número}$. Por tanto, una lente, $f / 2$ recoge cuatro veces más luz que una $f / 4$. Para muchos monocromadores los $f / \text{números}$ están entre 1 y 10.

A1.1.3 Efecto de la anchura de rendija en la resolución

La Fig. A1.6 ilustra la situación en que una radiación monocromática de longitud de onda λ_2 choca con la rendija de salida. En este caso, el monocromador se ajusta para λ_2 y las dos rendijas son iguales en anchura. La imagen de la rendija de entrada ocupa exactamente la rendija de salida. Un movimiento del monocromador para un ajuste de λ_1 o λ_3 hace que la imagen caiga completamente fuera de la rendija. La mitad inferior de la figura muestra una gráfica de la potencia radiante emitida en función del ajuste del monocromador. Obsérvese que la anchura de banda se define como el tramo de ajuste del monocromador (en unidades de longitud de onda) necesario para mover la imagen de la rendija de entrada a través de la rendija de salida. Si se empleara una radiación policromática también aquella representaría, para un ajuste dado del monocromador, el tramo de longitudes de onda procedentes de la rendija de salida.

La anchura de banda efectiva, que es la mitad de la anchura de banda cuando las dos anchuras de rendija son iguales, se ve que es el intervalo de longitudes de onda que salen del monocromador para un ajuste dado de longitud de onda. La anchura de banda efectiva puede relacionarse con la dispersión lineal recíproca si se escribe la Ec. 6-8 en la forma:

$$D^{-1} = \frac{\Delta\lambda}{\Delta y}$$

donde $\Delta\lambda$ y Δy representan en esta caso, los intervalos finitos de longitud de onda y de distancia lineal a lo largo del plano focal, respectivamente. Tal como se muestra en la Fig. A1.6, cuando $\Delta\lambda$ es igual a la anchura de la rendija w , $\Delta\lambda$ es la anchura de banda efectiva. Esto es,

$$\Delta\lambda_{\text{ref}} = wD^{-1}$$

La Fig. A1.7 ilustra la relación entre la anchura de banda efectiva de un instrumento y su capacidad para resolver los picos espectrales. En este caso, la rendija de salida de un monocromador de red se ilumina con

un haz constituido por sólo tres longitudes de onda, λ_1 , λ_2 y λ_3 , igualmente espaciadas; se supone que cada una de las longitudes de onda es de igual intensidad. En la figura superior, la anchura de banda efectiva del instrumento es exactamente igual a la diferencia de longitudes de onda entre λ_1 y λ_2 o λ_2 y λ_3 . Cuando el monocromador se ajusta λ_2 , la radiación de esta longitud de onda ocupa justo toda la rendija. Un movimiento del monocromador en cualquier dirección disminuye la intensidad transmitida de λ_2 , pero aumenta en una cantidad equivalente la intensidad de una de las restantes líneas. No se logra la resolución espectral de las tres longitudes de onda, tal como se indica con la línea continua de la gráfica de la derecha.

En el dibujo central de la Fig. A1.7, la anchura de banda efectiva del instrumento se ha reducido estrechando las aberturas de las rendijas de entrada y salida a tres cuartas partes de sus dimensiones originales. La línea continua de la gráfica de la derecha muestra que se obtiene una resolución parcial de las tres líneas. Una resolución completa, como la del dibujo inferior se obtiene cuando la anchura de banda efectiva se reduce a la mitad de la diferencia de longitud de onda de los tres haces. Por tanto, la resolución completa de dos líneas sólo se logra si la anchura de rendija se ajusta de forma que la anchura de banda efectiva del monocromador sea igual a la mitad de la diferencia de sus longitudes de onda.

La Fig. A1.8 muestra el efecto de la anchura de banda en el espectro experimental del benceno vapor. Obsérvese que se obtiene un detalle espectral mucho mayor con el ajuste de rendija más estrecho y, por tanto, con la menor anchura de banda.

A1.1.3.1 Selección de anchuras de rendijas

La anchura de banda efectiva de un monocromador depende de la dispersión de la red o del prisma así como de la anchura de las rendijas de entrada y de salida. La mayoría de los monocromadores están equipados con rendijas variables de forma que la anchura de banda efectiva se puede cambiar. Cuando se necesita resolver estrechas bandas de absorción o de emisión es preferible usar anchuras de rendija muy pequeñas. Por otra parte, un estrechamiento de las rendijas origina una disminución pronunciada de la potencia radiante disponible, siendo más difícil realizar mediciones exactas de dicha potencia. Por tanto, las anchuras de rendija amplias pueden usarse más para análisis cuantitativos que para los trabajos cualitativos, en los que el detalle espectral es importante.

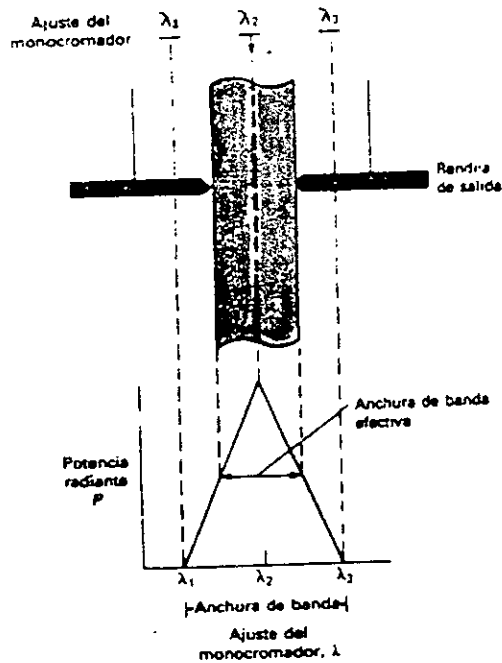


Fig. A1.6 Iluminación de la rendija de salida por una radiación monocromática λ_2 para distintos ajustes del monocromador. Las rendijas de entrada y salida son idénticas.

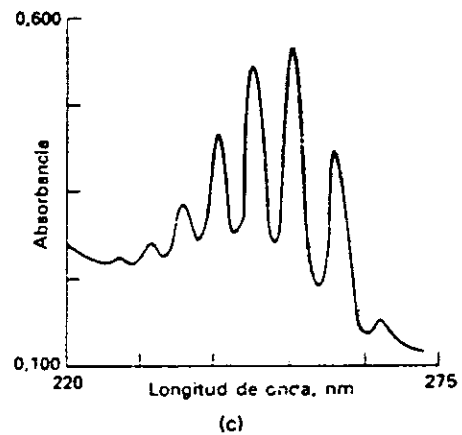
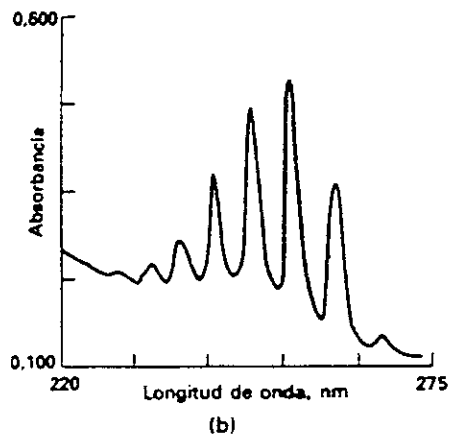
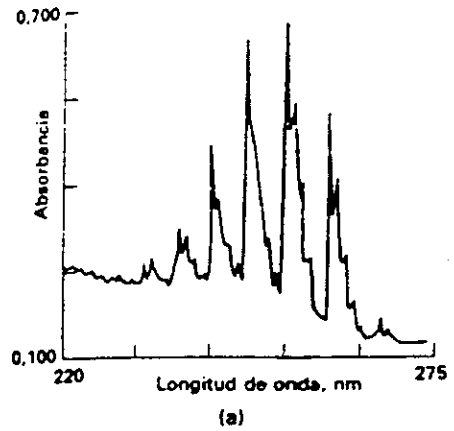


Fig. A1.8 Efecto de la anchura de banda en los detalles espectrales. (a) 0.5 nm; (b) 1.0 nm; (c) 2.0 nm

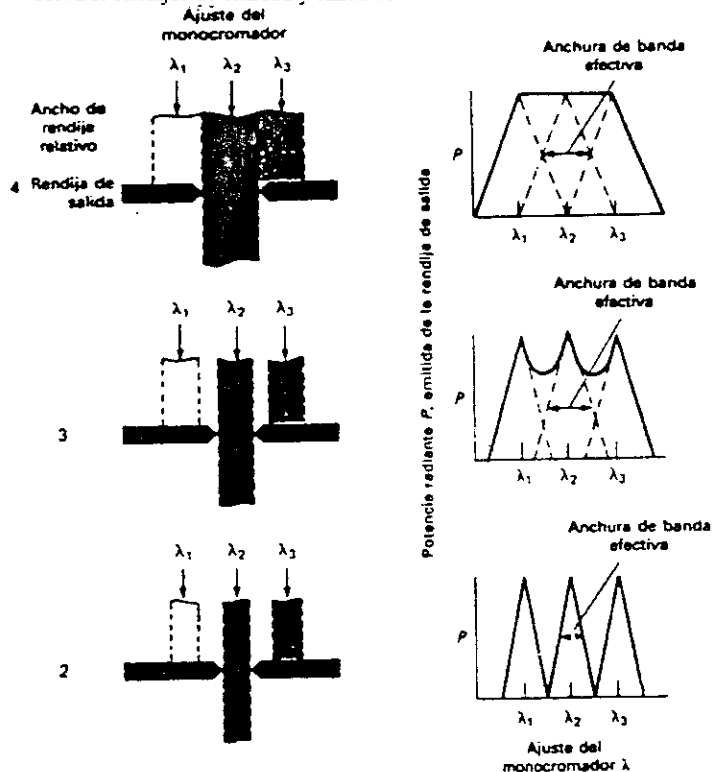


Fig. A1.7 Efecto de la anchura de rendija en los espectros. La rendija de entrada se ilumina sólo con λ_1 , λ_2 y λ_3 . Las rendijas de entrada y salida son idénticas. Las gráficas muestran los cambios de la potencia emitida cuando se varía el ajuste del monocromador.

A1.1.3.2 Detectores de diodo de Silicio

Un detector de diodo de Silicio consiste en una unión pn polarizada inversamente que se monta en un chip de Silicio. Como se muestra en la Fig. A1.9, la polarización inversa crea una capa de depleción que reduce casi a cero la conductancia de la unión. Sin

embargo, si se permite que la radiación incida sobre el circuito integrado, se forman en la capa de depleción agujeros y electrones que dan lugar a una corriente que es proporcional a la potencia radiante.

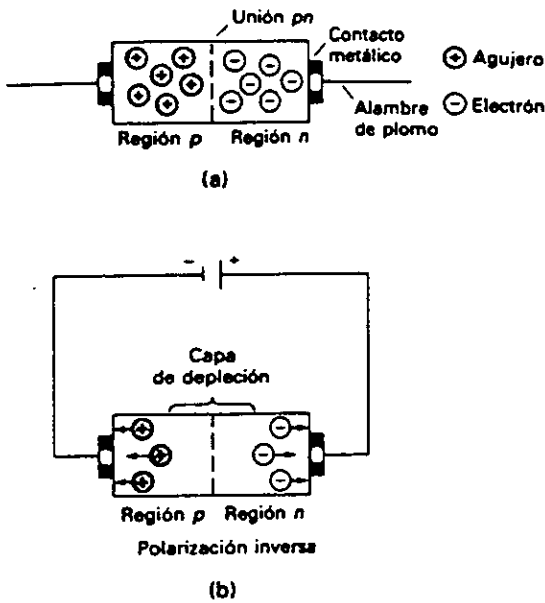


Fig. A1.9 (a) esquema de un diodo de Silicio. (b) Formación de la capa de depleción que impide el flujo de electricidad bajo una polarización inversa.

Un detector de diodo de Silicio es más sensible que un simple fototubo de vacío pero menos que un tubo fotomultiplicador (véase Fig. A1.10F). Los fotodiodos presentan intervalos espectrales de unos 190 nm a 1100 nm como es el caso del espectrofotómetro GÉNESIS 5.

A1.1.4 Datos Técnicos del Espectrofotómetro GÉNESIS 5

Los datos técnicos del espectrofotómetro GENESIS 5 se dan en la tabla A1.1

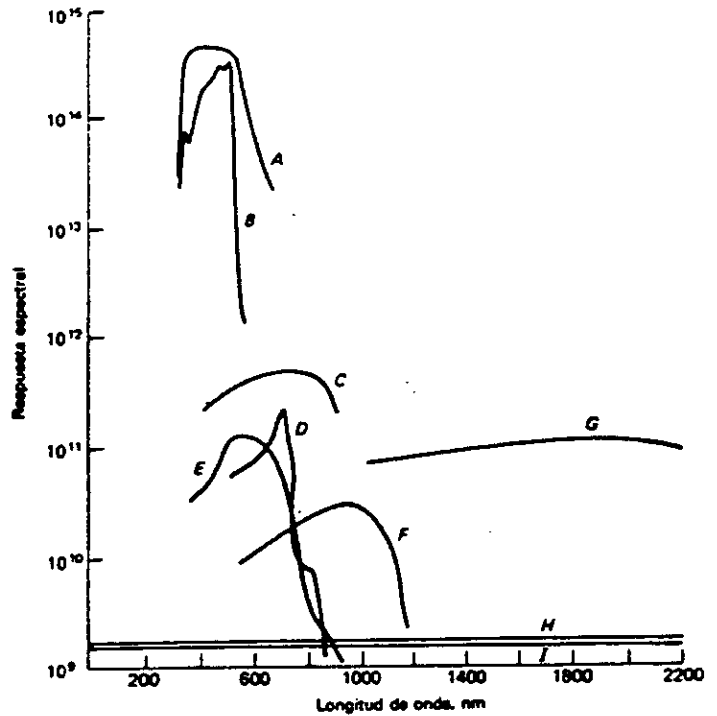


Fig. A1.10 Respuesta relativa de diversos tipos de transductores fotoeléctricos (A-G) y transductores caloríficos (H-I).

- A. Tubo fotomultiplicador
- B. Célula de fotoconductividad de CdS
- C. Célula fotovoltaica de GaAs
- D. Célula de fotoconductividad de CdSe
- E. Célula fotovoltaica de Se/SeO
- F. Fotodiodo de Silicio
- G. Célula de fotoconductividad de PbS
- H. Termopar
- I. Célula de Golay

Tabla A1.1

Specifications for SPECTRONIC® GENESYS® series of spectrophotometers^{1,2}

	SPECTRONIC® GENESYS® 5	SPECTRONIC® GENESYS® 2
Spectral slitwidth	5nm ³	2nm
Optical system	Split-beam, dual detectors	
Wavelength: Range Accuracy Precision	200 to 1100nm ± 1nm ±0.5nm (ASTM method #E275-83)	
Display	Graphic, backlit monochrome LCD	Graphic, backlit color LCD
Display range	-0.1 to 4.0A	
Photometric: Readout Range Accuracy ³	Absorbance, % Transmittance and Concentration -3.100A to 4.000A; 0 to 200%T ±0.003A from 0 to 0.3A ±1% of reading from 0.3 to 2A ±2% of reading from 2A to 3A	
Noise (peak-to-peak)	±0.001A at 220 and 340nm at 0A	
Drift	0.002A/hour at 340nm	
Stray Radiant Energy ⁴	0.05%T at 220nm, 340nm and 400nm	
Scan Speeds	300nm/min (1 pt/1nm), or 900nm/min (1 pt/3nm)	SLOW: up to 200nm/min (1 pt/0.3nm) MEDIUM: up to 600nm/min (1 pt/1nm) FAST: up to 1800nm/min (1 pt/3nm) TURBO: up to 2400nm/min (1 pt/6nm)
Slew Speed	27.000nm/min (across full wavelength range)	
Standard Cell Holder	8-position, instrument controlled	
Standard Interfaces	RS-232C serial and parallel printer ports	
Dimensions	47.9cm (18.9") width x 55.5cm (22.3") depth x 21.0cm (8.3") height	
Weight	12.3kg (27lbs)	

100 = 50.11 % T
50.11 % = 1 %
1 % = 0.1 %

¹ These specifications are valid only after a 30 minute warm up period and when the required environmental conditions are met.

² When working in the range of 800nm to 1100 nm, allow the instrument to warm up for at least one hour.

³ Measured using NIST 930D filters.

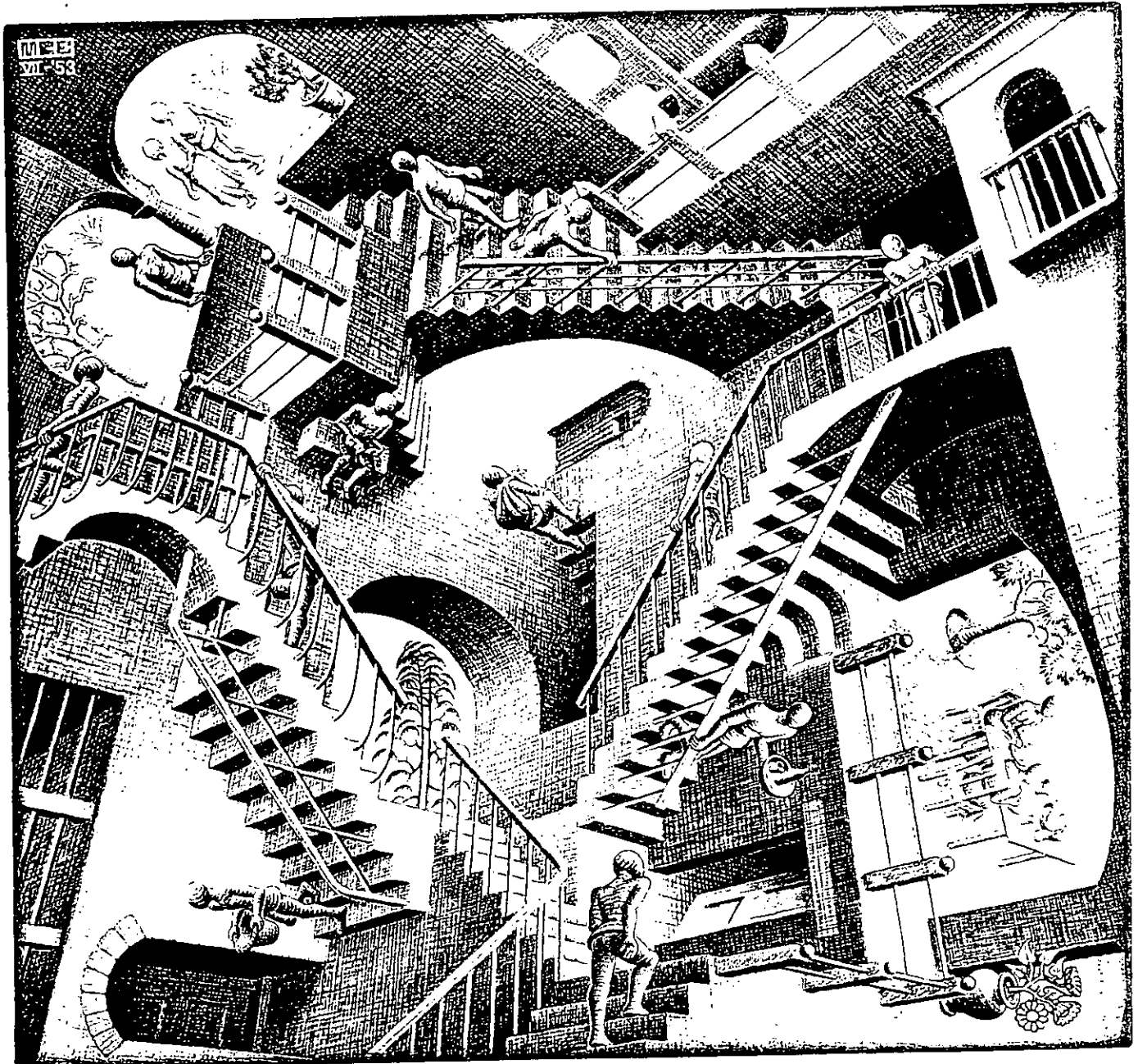
⁴ 220nm, 340nm and 400nm measurements with Milton Roy SPECTRONIC standards (#333150); 220nm measurement with deuterium lamp; 340nm and 400nm measurements with tungsten-halogen lamp.

A2

Funcionamiento del Elipsómetro Rudolph AutoEL II

Dubito ergo cogito: cogito ergo sum

René Descartes



A2.1 Elipsómetros manuales de anulación de intensidad

Antes de describir el elipsómetro automático que se utilizó en esta tesis, se describirá el funcionamiento de los elipsómetros manuales para entender la función de cada elemento.

A2.2 Conceptos

Lo primero que debe tener un elipsómetro es una fuente monocromática de luz polarizada. En la figura A2.1 se puede ver que se utiliza un láser cuya luz pasa a través de un polarizador. Si después dicha luz se refleja sobre una superficie, la luz en principio podría convertirse a elípticamente polarizada, como se muestra en la figura (del capítulo 6). Posteriormente es necesario cambiar dicha luz elíptica a linealmente polarizada y para ello se utiliza una placa de cuarto de onda (PCO). Esto se hace porque la luz linealmente polarizada es más fácil de analizar ya que podemos utilizar posteriormente otro polarizador (el analizador) para determinar la anulación de la intensidad de la luz y el ángulo de polarización.

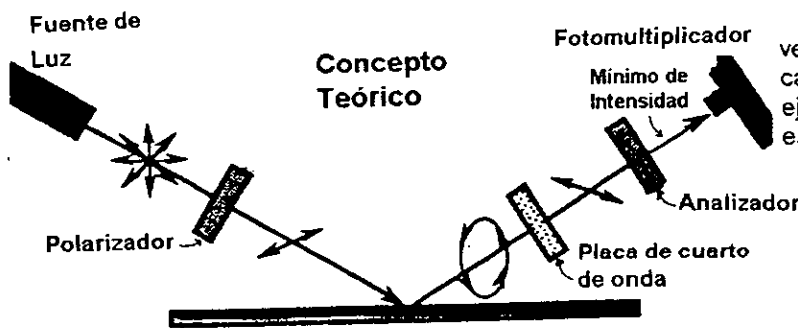


Fig. A2.1 Si la luz linealmente polarizada hace una reflexión lo que se obtiene es luz elípticamente polarizada. Conceptualmente la placa de cuarto de onda puede convertirla nuevamente en lineal y el analizador encontrar el punto nulo.

Apartémonos por un momento del tema para considerar la luz elípticamente polarizada mostrada en la figura A2.2. En ella se tienen dos componentes perpendiculares (con los ejes coordenados alineados en las direcciones horizontal y vertical), las cuales son iguales en amplitud y $\frac{1}{8}$ de longitud de onda fuera de fase. En la figura A2.2b se tiene la misma elipticidad de la luz polarizada; pero en este caso las componentes del sistema coordenado están rotadas 45° respecto a los de la figura A2.2a; pero esta vez las componentes de la luz elípticamente polarizada están $\frac{1}{4}$ de onda fuera de fase. De esto se deduce que la diferencia de fase entre las componentes del campo eléctrico de cualquier luz

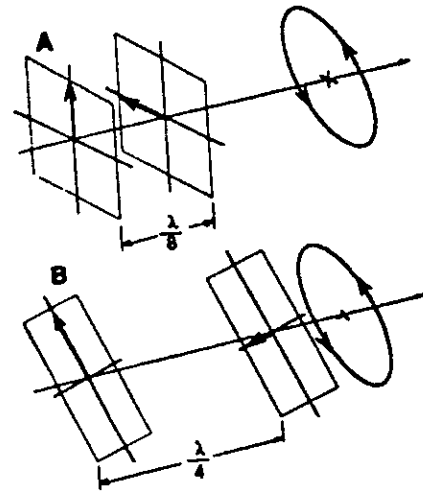


Fig. A2.2 Para la luz elípticamente polarizada la diferencia de fase entre sus componentes depende del sistema de referencia que se use.

elípticamente polarizada depende del sistema coordenado usado para describirlos.

Cualquier luz elípticamente polarizada puede convertirse en linealmente polarizada colocando en su camino una placa de cuarto de onda y alineando sus ejes rápido y lento con los ejes de la elipse. Esto se ve en la figura A2.3.

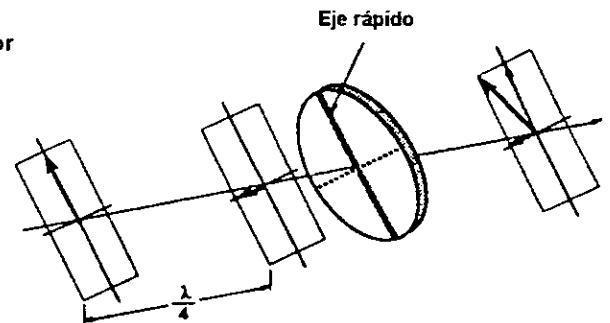


Fig. A2.3 La luz polarizada elípticamente puede convertirse en elípticamente polarizada alineando los ejes de la placa de cuarto de onda con los ejes apropiados de la elipse.

Regresando a la figura A2.1, se usó una PCO para transformar la luz elípticamente polarizada en linealmente polarizada. Cuando la PCO está colocada con el ángulo correcto, el analizador es capaz de encontrar un estado nula intensidad. Si la PCO no está colocada en el ángulo correcto, el analizador no será capaz de anular la intensidad de la luz. Los ángulos de la PCO y del analizador proporcionan información sobre la diferencia de fase y la atenuación causada por la reflexión y por tanto nos permiten calcular Δ y Ψ .

La figura A2.1 sirve para explicar conceptualmente como la PCO y el analizador pueden determinar la diferencia de fase y la orientación. Pero en la práctica la PCO se coloca antes de que la luz se refleje sobre la superficie, como se muestra en la figura A3.4.

En lugar de colocar el polarizador fijo y rotar la PCO y el analizador juntos, se prefiere fijar la PCO a 45° y el polarizador y analizador rotarlos hasta que un mínimo de intensidad sea encontrado. Una de las razones por las que se usa esta configuración es que las relaciones entre las posiciones del polarizador, el analizador y los valores de Δ y Ψ son mas simples.

El binomio polarizador — PCO funciona como un polarizador elíptico —. La elipticidad es ajustada para que sea cancelada por la reflexión. La convención que se usa para medir los ángulos del polarizador, analizador y PCO es que todos ellos se miden en el sentido contrario a las manecillas del reloj como positivos. Utilizando el polarizador y analizador de la manera anterior, se pueden obtener varias combinaciones que den un mínimo de intensidad.

$$\Psi_2 = A_2, \quad \Psi_4 = -A_2.$$

Si la compensación de la PCO es exacta, uno puede usar cualquier zona para determinar Δ y Ψ . Utilizando el promedio se pueden eliminar los errores debidos a una inexacta compensación.

La figura A2.5 muestra una gráfica de la intensidad de la luz cerca de un mínimo. Se puede notar que cerca del mínimo, el cambio de intensidad como función del ángulo es muy pequeña. Adicionalmente cerca del mínimo, el nivel de luz es muy bajo y el ruido puede ser algunas veces significativo. Ya que la curva es simétrica alrededor del mínimo, otra manera de encontrar el mínimo es leer un ángulo a ambos lados del mínimo de intensidad y tomar su promedio. Esto dará mayor precisión en determinar la posición angular del mínimo de intensidad.

A2.4 Elipsómetros con elementos rotativos automáticos

Los elipsómetros descritos anteriormente son todos operados manualmente. Pero muchos de los utilizados en la actualidad son controlados automáticamente.



Fig. A2.4 En las técnicas actuales de elipsometría por anulación, la placa de cuarto de onda se coloca antes de la reflexión de la luz sobre la superficie, colocándose en una posición fija, mientras que el polarizador y analizador se rotan para encontrar el punto nulo

Quitando las redundancias (ángulos de 180° para cada uno) y restringiendo el ángulo de PCO a un sólo ángulo (e.g. 45°), y restringiendo los rangos del polarizador (P) y analizador (A), todas las combinaciones pueden reducirse a dos zonas, definidas como:

- Zona 2: $-45^\circ < P_2 < 135^\circ, 0^\circ < A_2 < 90^\circ, PCO = 45^\circ$
- Zona 4: $-135^\circ < P_4 < 45^\circ, -90^\circ < A_4 < 0^\circ, PCO = 45^\circ$

Las relaciones de Δ y Ψ con P y A para estas dos zonas son:

$$\Delta_2 = 270^\circ - P_2, \quad \Delta_4 = 90^\circ - 2P_4$$

Fig. A2.5 El punto nulo puede localizarse si se hacen medidas a ambos lados del punto nulo con la misma intensidad. El punto nulo sería el promedio del valor angular.

Hay básicamente dos tipos de elipsómetros con sus partes internas controladas por microprocesador. Uno de ellos es el elipsómetro de mínima intensidad (utilizado en esta tesis) se puede ver en la figura A2.6 y A2.7. Cuando el analizador se rota alrededor del rayo de luz, el fotomultiplicador detectará una variación de intensidad sinusoidal. En general, los mínimos de intensidad no corresponden a la extinción total de la luz y la intensidad no tiende a cero.

A2.5 Instrucciones de operación del elipsómetro AUTOEL-II

Para comenzar a trabajar con el elipsómetro deben seguirse los siguientes pasos, (ver Fig. A2.8):

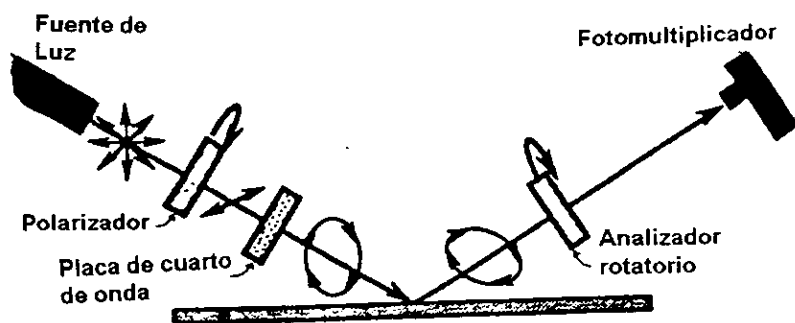


Fig. A2.6 Un tipo de elipsómetro rotatorio. Este esquema muestra un elipsómetro de anulación. El polarizador y analizador se rotan alternadamente hasta que se encuentra el punto nulo.

Cuando el polarizador está colocado correctamente, la elipticidad se cancela por reflexión y por tanto la luz detectada será linealmente polarizada. El máximo de intensidad será más grande y el mínimo será igual a cero. La orientación correcta se encontrará ajustando alternativamente el polarizador y analizador a puntos más cercanos al mínimo hasta que se encuentre el verdadero mínimo de intensidad.

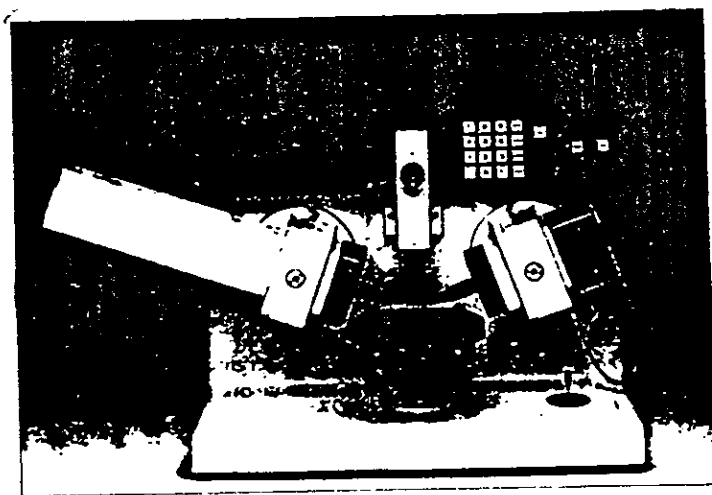


Fig. A2.7 Fotografía del elipsómetro utilizado en esta tesis. Este elipsómetro busca el punto de anulación. (Rudolph Research AUTOEL).

Encendido

1. Girar la llave del switch a la posición de encendido. Una luz verde se encenderá y durante treinta segundos aparecerá en el Display el mensaje "UP COMP - INSERT SAMPLE - PRESS CONT". Se espera durante 15 minutos para proceder con las mediciones, para permitir que el sistema se caliente.

Procedimiento de inicio.

1. Colocar en caso de ser necesario un nuevo ángulo de incidencia del laser.
2. Instalar la muestra de inicio (o muestra calibradora) sobre la plataforma para muestras (sample stage), aproximadamente centrada y con su lado reflector hacia arriba. Las muestras calibradoras están hechas de películas de SiO_2 con espesores nominales de 400 Å, 1100Å, y 2300Å sobre sustratos de Si.
3. Ajustar la altura de la plataforma de muestras para permitir que el rayo del laser reflejado incida sobre la abertura de entrada del analizador, para después fijarla cuidadosamente con los tornillos de ajuste horizontal y vertical.
4. Ajustar en el centro el punto blanco con el ocular del autocolimador. Todos los tornillos de ajuste horizontal y vertical deben apretarse al terminar el proceso.
5. Deslizar hacia arriba la abertura del compensador.
6. Oprimir el boton CONT.
7. Cuando el display muestra "DOWN COMP - PRESS CONT OR PROG", se desliza hacia abajo la abertura del compensador.

Medidas sobre las muestras calibradoras

1. Colocar las muestras en el portamuestras.
2. Reajustar la altura del portamuestras mediante los tornillos estabilizadores horizontales y verticales.
3. Seleccionar el programa adecuado para medir las muestras calibradoras. Si el elipsómetro no cuenta con un programa de reducción de datos, se oprime la tecla CONT la cual selecciona automáticamente el programa 01.
4. Anotar los resultados. Si se obtienen valores significativamente diferentes de los esperados para las muestras calibradoras debe repetirse el proceso y oprimir la tecla RESET.

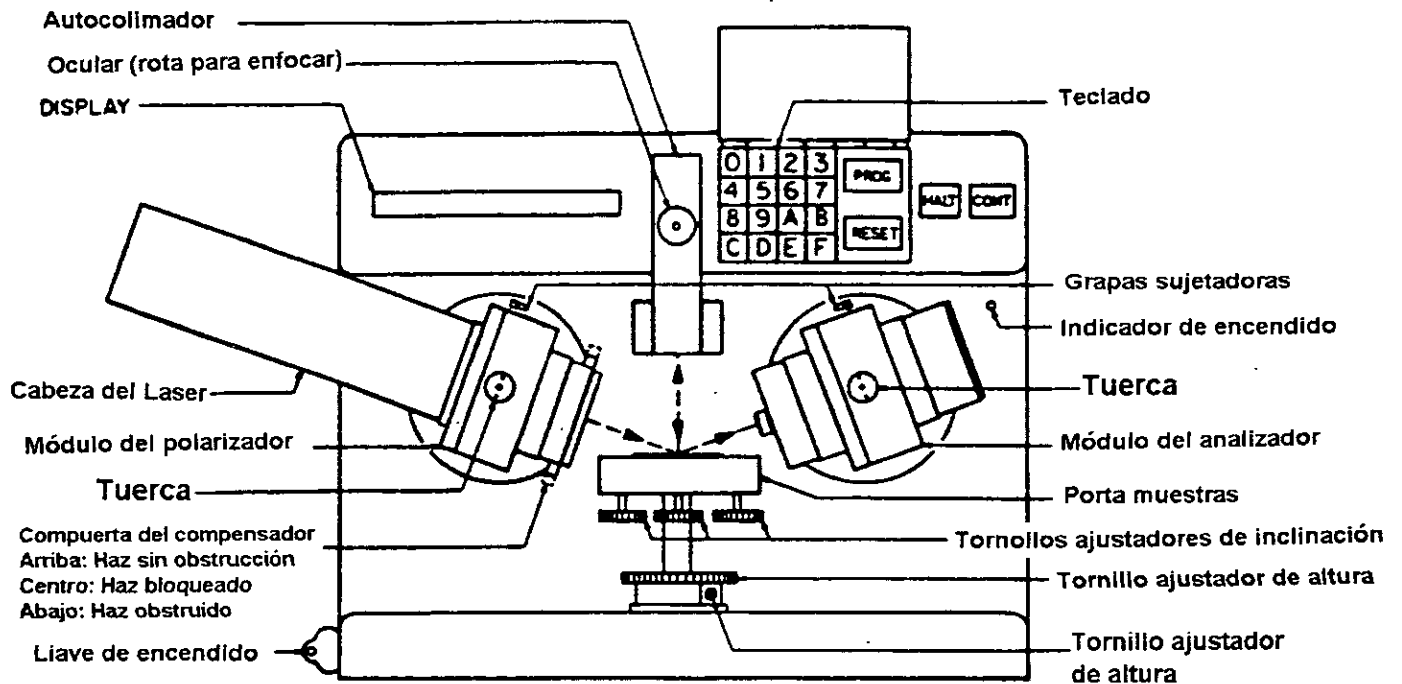


Fig. A2.8

Siguientes mediciones

1. Remover las muestras calibradoras y colocar sobre el portamuestras la muestra por analizar.
2. Si se requiere, reajustar la altura e inclinación del portamuestras.
3. Para repetir el programa anterior se oprime la tecla CONT.

Mensajes de error

Uno de los siguientes tres mensajes de error pueden desplegarse en el display durante la corrida de los programas.:

1. "NULL NOT FOUND - RETRY, PRESS CONT"
2. "BAD A2,A4 ± #####.##, ± #####.##,"
3. "THK = CALC (PSI) N2 = ERRORCYC = 0"

Estos errores pueden deberse al operador, a una deficiente alineación, a las propiedades insatisfactorias de la muestra o a un mal funcionamiento del instrumento. [65]

Las características de los programas que se utilizaron son:

Programa	Angulo de incidencia	Cantidades finales desplegadas	Numero de zonas	Precisión relativa	Velocidad relativa	Películas transparentes en cualquier sustrato	Óxido sobre silicio	Nitratos sobre silicio
01	cualquiera	Δ, Ψ	2	alta	lenta	X	X	X
02	cualquiera	Δ, Ψ	1	baja	rápida	X	X	X
03	cualquiera	Δ, Ψ	2/1	media	media	X	X	X
04	cualquiera	Δ, Ψ	1	baja	rápida	X	X	X

A2.6 Datos Técnicos del Elipsómetro Milton Roy AUTOEL II

Las especificaciones técnicas del AUTOEL II se dan a continuación, en la Tabla A2.1.

Table A2.1

SPECIFICATIONS

AutoEL[®]-II Automatic Ellipsometer

OPERATING PRINCIPLE	Null-seeking
OPERATING WAVELENGTH	632.8 nm
RESOLUTION AND ACCURACY (Note a)	
Polarizer or Analyzer	0.05°
DELTA	0.1°
PSI	0.05°
ANGLE OF INCIDENCE	
Pin Located (Note b)	70° ± 0.02° and 90° ± 0.02°
Adjustable (Note c)	60° to 90°
MEASURING TIME (Note d)	
Typical	10 seconds
Maximum	60 seconds
DISPLAY (Note e)	32-position alphanumeric
DIGITAL OUTPUT	Serial ASCII, RS-232
MAXIMUM SAMPLE SIZE	6"x6" (15.2cm x 15.2cm)
SAMPLE PLANE	Horizontal
SAMPLE MOUNTING (Note f)	
Standard	Back-surface vacuum holder
Custom	Front-surface-mounting vacuum frame
STANDARD EQUIPMENT	
Option 1 Sample Stage (Note g)	
Adjustments	Vertical and tilt
Autocollimating Telescope (Note h)	
Resolution	30 arc-seconds
OPTIONAL EQUIPMENT	
Option 2 Sample Stage (Note g)	
Adjustments	Vertical, tilt, and translation
Option 4: Microspot Optics (Note i)	
Spot Size	0.002" (0.05 mm)
Option 5A: Data Reduction (Note j)	
Option 5B: Impact Printer (Note k)	
Option 5C: Thermal Printer	
Option 6: Alignment Prisms (Note l)	
Angle of Incidence	Any fixed angle, 60° to 90°
Accuracy, all prism angles	10 arc-seconds
DIMENSIONS	
Without laser head	17-3/8"H, 21-1/4"D, 21-1/2"W
With laser head	17-3/8"H, 21-1/4"D, 27-1/2"W
WEIGHT	87 lbs. (32 kg)

NOTES:

a. Resolution and accuracy of measured film thickness and film or substrate refractive index depends on the film-substrate system and the film thickness. 1 to 10 angstroms and 0.01 refractive index units are typical for silicon oxide films on silicon.

b. Provision for other pin-located angles of incidence can be specified with order at extra charge.

c. Angles of incidence between 60° and 90° may be set within .02° by means of autocollimating telescope and optional alignment prisms cut for the desired angles.

d. Measurement time can range from 10 to 60 seconds depending on selected program.

e. Used to present results, microcomputer messages to operator, and keyboard entries.

f. Vacuum source not supplied for either standard or optional holder.

g. Option 1 and Option 2 sample stages are interchangeable. Option 1 sample stage has vertical adjustment plus tilt adjustments about vertex of angle of incidence and about axis formed by intersection of plane of incidence with plane of sample. Option 2 sample stage has vertical adjustments plus two-axis tilt adjustments, plus two calibrated orthogonal translations in the plane of the sample. Translation range 1" (2.54cm), resolution 0.001" in both directions.

h. The autocollimating telescope permits the following: precision alignment of the instrument; setting (by means of an optional alignment prism precision cut to the specified angle) any angle of incidence between 60° and 90° (in addition to the two pin-locatable angles of 70° and 90°); and viewing the sample by means of a screw-on microscope objective which is supplied with the autocollimating telescope, and which permits resolution of surface features approaching 0.002" (0.05 mm) at 70° angle of incidence.

i. The optional microspot optics are designed to be attached by the user to the polarizer module. Note that, although the beam cross-section is circular, the obliquely-illuminated sample area is elliptical; e.g., at 70° angle of incidence, the minor and major axes of the spot are 0.002" and 0.004" respectively.

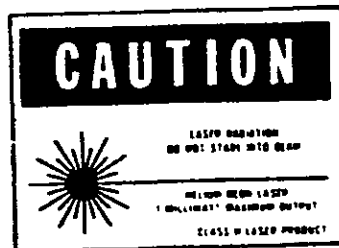
j. When Option 5A is installed, an additional series of alternate programs are added to the internal program library. The user then selects the AutoEL-II operating program via the front panel keyboard.

k. No longer available.

l. Cut for specified angle of incidence.

LASER SAFETY

The AutoEL-II is a Class II laser product as defined by Federal Regulations 21 CFR 1040, and meets all applicable performance and labeling requirements of those regulations. The helium-neon laser light source in the AutoEL-II is a low-power laser which emits only the 632.8nm red line at a level of 1 milliwatt maximum. As with any high-luminance source such as the sun or an arc lamp, the operator should not stare directly into the laser beam or into its reflection from highly reflecting surfaces. The caution label is reproduced below.

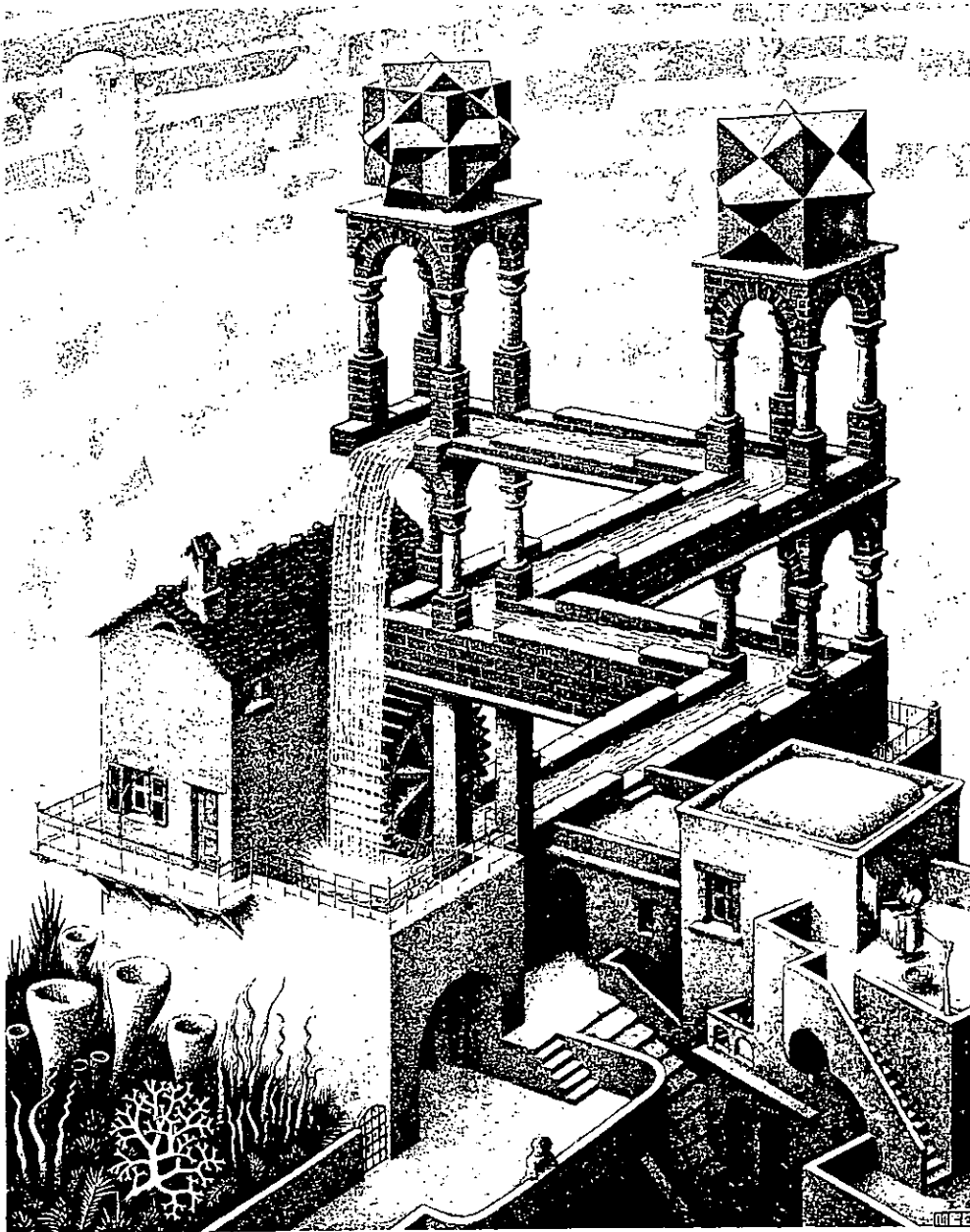


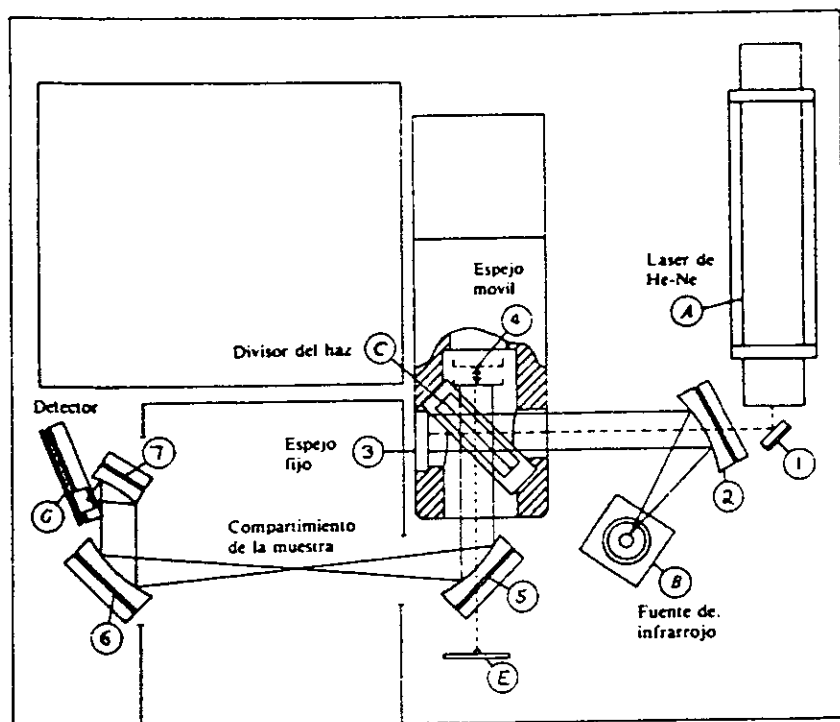
A3

Funcionamiento del Espectrómetro de Infrarrojo de Transformada de Fourier

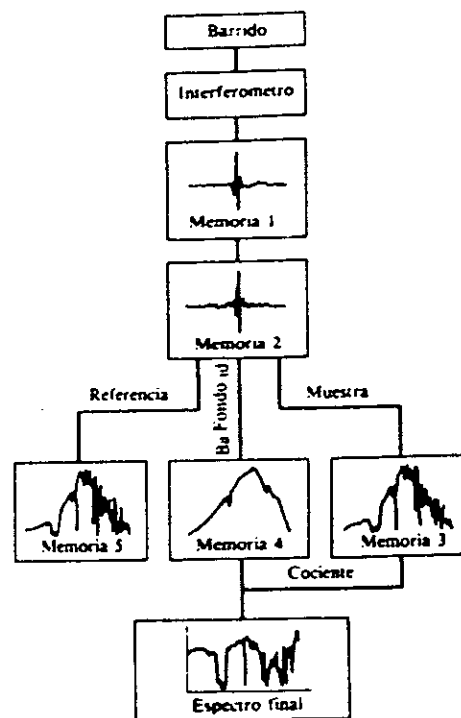
When you cannot measure it, when you cannot express it in numbers, your knowledge of it is of a meagre and unsatisfactory kind.

Lord Kelvin





(a)



(b)

Fig. A3.1 Espectrómetro Interferométrico de infrarrojo de transformada de Fourier: (a) diagrama de trayectoria óptica y (b) diagrama de bloques de las funciones del instrumento. (Nicolet Instrument Corp)

A3.1 Espectrómetro de infrarrojo de transformada de Fourier

La radiación de infrarrojo puede analizarse por medio de un interferómetro de Michelson de barrido Fig. A3.1 [23]. Consta de un espejo móvil (4), un espejo fijo (3) y un divisor del haz (C). La radiación de la fuente de infrarrojo (B) es colimada por un espejo (2) y el rayo resultante se divide en el divisor del haz; la mitad del rayo pasa al espejo fijo (3) y la otra mitad se refleja sobre el espejo móvil. Después de reflejarse, los dos rayos se recombinan en el divisor del haz y, para una onda de longitud dada, interfieren constructiva o destructivamente, dependiendo de la diferencia de las trayectorias ópticas entre los dos brazos del interferómetro. Para una velocidad de espejo constante la intensidad de la radiación emergente, a una longitud de onda particular, se modula sinusoidalmente de manera regular. En el caso de una fuente de banda ancha el rayo emergente es una mezcla compleja de modulación de frecuencias que, después de pasar a través del compartimiento de la muestra, se enfoca sobre el detector (G). La señal de este detector es muestreada a intervalos precisos durante el barrido del espejo. Tanto la rapidez de muestreo como la velocidad del espejo se controlan mediante una señal de referencia incidente a un detector (E), que se produce por la modulación de un rayo laser de helio - neón. (A).

La señal resultante en el detector (G) se conoce como interferograma (que se almacena en la memoria 1) y contiene la información requerida para reconstruir el espectro por medio de un procedimiento matemático conocido como transformación de Fourier. Para su uso en espectroscopia, la transformada de Fourier, Ec. A3.1

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i2\pi\nu t} dt \quad A3.1$$

debe ser reescrita como:

$$P_{(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} P_{0(\omega)} \cos(2\pi x \bar{\omega}) d\bar{\omega} \quad A3.2$$

donde $P_{(x)}$ es la intensidad del haz en el detector, $P_{0(\omega)}$ es la intensidad de la fuente a la frecuencia ν (en cm^{-1}), x es el desplazamiento del espejo (en cm) y la suma (integral) es sobre todas las frecuencias, o tantas como haya en la radiación que llega al detector. Sólo se necesita ondas coseno, ya que x se mide a partir de la posición en que ambos brazos del interferómetro se igualan, punto en el cual todas las ondas interfieren constructivamente; esto es, todas las intensidades de las ondas tienen un máximo en $x = 0$. La transformada de Fourier o espectro como una función de la frecuencia está dado entonces por la equivalente de la Ec. A3.3

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu) e^{i(2\pi\nu)t} 2\pi d\nu \quad \text{A3.3}$$

el cual es:

$$P_{(\bar{\nu})} = \int_{-\infty}^{\infty} P_{(\nu)} \cos(2\pi x \bar{\nu}) dx \quad \text{A3.4}$$

La transformada se hace por medio de una computadora — que es parte esencial del espectrómetro — con un algoritmo apropiado, como el algoritmo para la transformada de Cooley - Toorkey.

Esta técnica tiene varias ventajas sobre las técnicas dispersivas usuales. Sólo hay una parte móvil, el espejo (4), que está montado sobre un cojinete sin fricción. No se necesita de dispersión o filtración, por lo que tampoco se requieren rendijas que derrochan energía; ésta es una ventaja mayor, particularmente cuando hay gran demanda de energía como en el infrarrojo lejano (ver Cap. 2 Sec. 2.3.1) El uso de un laser de helio - neón como una referencia trae como consecuencia una mayor aproximación a la exactitud de frecuencias absolutas, que es mejor de 0.01 cm^{-1} en el intervalo de $4800 - 400 \text{ cm}^{-1}$. Ya que todas las longitudes de onda se detectan simultáneamente durante el barrido y el interferómetro de barrido alcanza la misma relación espectral señal - ruido que un espectrómetro dispersivo en una fracción del tiempo (ventaja de Felgett).

El proceso automático entre la iniciación del barrido y la gráfica final se muestra en la Fig. 11.9b. El interferograma registrado con cada barrido se almacena en la memoria 1; este interferograma es entonces automáticamente alineado y sumado a los interferogramas promediados en la memoria 2. Al mismo tiempo comienza la anotación de la gráfica como preparación para el espectro final. Después de un cierto número de barridos, a menudo 32 (lo que dura 60 s más o menos), se obtiene la transformada de Fourier del interferograma promediado para producir un espectro de un sólo haz que, en el modo de muestreo estándar, se almacena en la memoria 3. Tal espectro de un solo haz es entonces relacionado contra el fondo almacenado en la memoria 4 (que se corre una vez al día) y el espectro resultante "de doble haz" se grafica en un graficador digital de alta velocidad. La memoria 5 es espacio adicional para almacenar un espectro de referencia que se usaría en la técnica de sustracción espectral. Esta memoria también se usa para almacenar un nuevo espectro medido mientras se mantienen los espectros del fondo y de la muestra para su manipulación posterior. El tiempo que pasa desde la inserción de la muestra hasta que se obtiene la gráfica completa es aproximadamente de 2 min.

En las ecuaciones A3.2 y A3.4 la suma debe extenderse desde $-\infty$ hasta ∞ pero, por supuesto, esto es imposible. Si la serie de Fourier es truncada repentinamente (es decir por un truncamiento tajante), la transformada tendrá algunas ondulaciones o "campaneo", especialmente a los lados de un pico intenso. Para minimizar estos efectos la serie debe ser terminada

gradualmente, multiplicando los datos por alguna función triangular, trapezoidal o la de Norton - Beer; sin embargo, la resolución disminuye al usar este tipo de funciones.

La resolución de un espectrómetro de transformada de Fourier esta dada por:

$$R = \frac{1}{\Delta_{\max}} \text{ cm}^{-1} \quad \text{A3.5}$$

en donde R es la máxima resolución alcanzable, en números de onda, y Δ_{\max} es la retardación máxima — esto es, el doble de la distancia del movimiento del espejo, en centímetros. Junto al decremento en la resolución debido a la aplicación de una función multiplicativa, la resolución es adversamente afectada por la divergencia del haz y la inestabilidad del movimiento del espejo, tanto en velocidad como en alineación, lo que hace que la resolución sea peor de lo que predice la Ec. A3.5.

Como la computadora usa datos digitales, la señal del fotodetector debe ser convertida a la forma digital por medio de un convertidor analógico - digital. Los datos deben ser muestreados en puntos precisos y los datos resultantes almacenarse; los datos deben muestrearse al menos dos veces para cada longitud de onda, así el intervalo muestreado será la mitad de la mínima longitud de onda observada, esto es, $\nu_{\max} = 1/2\Delta x = 1/\lambda_{\max}$. Si los intervalos de muestreo son mayores que este valor, las ondas de alta frecuencia serán dobladas o pegadas al espectro.

La ventaja de Felgett, mencionada anteriormente, se presenta porque un interferómetro mide todas las longitudes de onda simultáneamente. Entonces un espectrómetro - interferómetro (cuando se compara con un espectrómetro dispersivo secuencial) realiza N mediciones, donde N es el número de elementos de resolución del espectrómetro dispersivo, en el mismo tiempo que un espectrómetro dispersivo secuencial completa un solo barrido; la señal entonces es N veces más fuerte y el ruido es \sqrt{N} veces más grande, de manera que la relación señal - ruido es \sqrt{N} (ventaja de Felgett). Otra conveniencia de los instrumentos interferométricos se conoce como ventaja de Jaquinot; ésta se debe al total de la energía aumentada. El interferómetro tiene una apertura de entrada circular grande en lugar de las pequeñas rendijas de entrada de un instrumento dispersivo, aunque el interferómetro pierde la mitad de la radiación en el divisor del haz.

Bibliografía

- [1] Hall H.E., *Física del Estado Sólido*, Editorial LIMUSA - Noriega Editores, México 1978, 398 pp.
- [2] Snigh Jasprit, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, McGraw-Hill Internationals Editions (Electrical Engineering Series 1993), 851 pp.
- [3] Rodriguez Lara Jaime, *Fundamentos de Cristalografía Física*, monografía No. 15, Secretaría General de la Organización de los Estados Americanos Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico, 1986, 82 pp.
- [4] Snigh Jasprit, *Semiconductor Devices (an introduction)*, McGraw-Hill Internationals Editions (Electrical Engineering Series 1994), 669 pp.
- [5] Peyghambarain Nasser, et. al., *Introduction to Semiconductor Optics*, Prentice Hall Inc. 1993, 485 pp.
- [6] Beiser Arthur, *Conceptos de Física Moderna*, Segunda Edición McGraw-Hill 1988, 469 pp. Se complementa con [76].
- [7] Acosta Virgilio, et al, *Curso de Física Moderna*, Harla México, 1975, 512 pp.
- [8] Eisberg Robert, Resnick Robert, *Física Cuántica*, Editorial LIMUSA - Noriega Editores, México 1988, 833 pp.
- [9] De la Peña Luis, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, Segunda Edición, Fondo de Cultura Económica & Universidad Nacional Autónoma de México, México 1991, 830 pp.
- [10] Mckelvey J.P., *Física del Estado Sólido y de Semiconductores*, Editorial LIMUSA - Noriega Editores, México 1996, 548 pp.
- [11] Alonso Marcelo, Finn Edward J., *Física Vol. 3 Fundamentos Cuánticos y Estadísticos, (edición revisada y aumentada)*, Editorial Addison Wesley - Iberoamericana, México 1986, 625 pp.
- [12] Pankove Jacques Y., *Optical Processes in Semiconductors*, Dover Publications Inc., New York 1971, 422 pp.
- [13] Kraus John D., *Electromagnetismo*, Tercera edición (Primera edición en español), McGraw - Hill, México 1986
- [14] Cabrera José Manuel, et.al., *Óptica Electromagnética*, Editorial Addison Wesley Iberoamericana S. A., 256 pp.
- [15] Hecht Eugene, Zajac Alfred, *Optica*, Editorial Addison Wesley Iberoamericana S. A., Wilmington Delaware 1986.
- [16] Fowler, *Optics*, Dover Publications Inc.
- [17] Guenther Robert, *Modern Optics*, John Wiley & Sons, Inc. 1990, 696 pp.
- [18] Heavens O.S., *Optical Properties of Thin Solid Films*, Dover Publications Inc., New York, 1955, 261 pp.
- [19] Lipson S.G., *Optical Physics*, Tercera Edición Cambridge University Press 1995, 491 pp.
- [20] Elliot R.J., Gibson A.F., *Introduction to Solid State Physics and its Applications*, The Macmillan Press Ltd. 1974. Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC176 E45 Fc - 20830, 489 pp.
- [21] Kittel Charles, *Introduction to Solid State Physics*, Séptima Edición John Wiley & Sons Inc. 1996, 671 pp.
- [22] Skoog Douglas A., Leary James J., *Análisis Instrumental*, Cuarta Edición, McGraw - Hill / Interamericana de España, S.A. 1992, 935 pp.
- [23] Willard Hobart H., et.al. *Métodos Instrumentales de Análisis*, Grupo Editorial Iberoamericana S.A. de C.V., México 1991, 879 pp.
- [24] Meyer-Arendt Jurgen R., *Introduction to Classical and Modern Optics*, Cuarta Edición, Prentice Hall a Simon & Schuster Company Englewood Cliffs, New Jersey 1995, 434 pp.
- [25] Tompkins Harland G., *A User's Guide to Ellipsometry*, Editado por Academic Press, Inc. 261 pp. Caps. I, II, III, IV, 1993. Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC443.T65
- [26] Collett Edward, *Polarized Light (Fundamentals and Applications)*, Editado por Marcel Dekker, Inc. New York 1993, 581pp 515 - 555.. Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC441 C65 Fc - 67693.
- [27] Azzam R.M.A. & Bashara N.M., *Ellipsometry and Polarized Light*, Editado por North-Holland Phtsics Publishing a division of Elsevier Science Publisher B.V. Holanda 1988, 539 pp. Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC 443. A98.
- [28] Le Combert P.G. & Mort J., *Electronic and Structural Properties of Amorphous Semiconductors*, (Proceedings of the Thirteenth Session of the Scottish Universities Summer School in Physics, Editado por Academic Press, Inc. New York 1973, 630 pp. Cap. 13, 425 -474.
- [29] Street R.A., *Hydrogenated Amorphous Silicon*, Editado por Cambridge University Press, Great Britain 1991, 417 pp., Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC 611.8A5 S77.
- [30] Brodsky M.H., *Amorphous Semiconductors*, Editado por Springer-Verlag, 1979, 337pp., Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC 611.8. A5 A45.
- [31] Pankove Jaques I. *Semiconductors and Semimetals Vol. 21 Hydrogenated Amorphous Silicon, Part B Optical Properties*, Editado por Academic Press, Inc., 439 pp., Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC 612.S4 W55 V.21 Part B
- [32] Joannopoulos J. D. & Lucovsky, *The Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon II, Electronic and Vibrational Properties*, Editado por Springer-Verlag, Alemania 1984, 360 pp., Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC 611.8S5 P59

- [33] Elliott S.R., *Physics of Amorphous Materials*, Segunda Edición, Editado por Longman Scientific & Technical Copublished in the United States with John Wiley & Sons, Inc. New York, 1990, Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC 176.8A44 E55
- [34] Mott Nevill Francis & Davis E.A., *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, Segunda Edición Editado por Clarendon Press, Oxford 1979, 590 pp.
- [35] Bunshah Rointan F., *Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings*, Editado por Noyes Publications, Park Ridge, New Jersey, U.S.A., 861 pp. Se complementa con [89].
- [36] Joannopoulos J. D. & Lucovsky, *The Physics of Hydrogenated Amorphous Silicon I, Structure, Preparation and Devices*, Editado por Springer-Verlag, Alemania 1984, 287 pp., Clave Biblioteca.Central U.N.A.M. QC 611.8. S5P49
- [37] Artículo: Márquez E. et.al., *Optical Constants of vacuum-Evaporated Amorphous As-S Thin Films derived from Transmission Measurements*, tomado del libro: *The Physics of Non-Cristaline Solids*, Edited by David Pye et.al., Publicado por Taylor & Francis Ltd. 1992, The Society of Glass Technology.
- [38] Artículo: Márquez E. et.al., *Calculation of the Thickness and Optical Constants of Amorphous Arsenic Sulphide films from their Transmission Spectra*, Journal of Physics D. Appl. Phys. 25(1992) 535-541, Printed in the UK.
- [39] Artículo: Swanepoel R., *Determination of the Thickness and Optical Constants of Amorphous Silicon*, Journal of Physics E. Sci. Instrum., Vol 16, 1983, Printed in Great Britain, 1214-1222.
- [40] Artículo: Swanepoel R., *Determination of Surface Roughness and Optical Constants of Inhomogeneous Amorphous Silicon Films*, Journal of Physics E Sci. Instrum., Vol. 15, 1984 Printed in Great Britain, 896-903.
- [41] Jenkins F. A. & White, *Fundamentals of Optics*.
- [42] Nieves Antonio & Dominguez Federico C., *Métodos Numéricos Aplicados a la Ingeniería*, Editado por Compañía Editorial Continental, S.A. de C.V., México 1995, 600 pp.
- [43] Chapra Steven C. & Canale Raymond, *Numerical Methods for Engineers*, McGraw-Hill International Editions Applied Mathematics Series, Segunda Edición 1990, 812 pp.
- [44] Buchanan James L. & Turner Peter R., *Numerical Methods and Analysis*, McGraw-Hill International Editions Applied Mathematics Series, 1992, 751 pp.
- [45] Burden Richard & Faires Douglas J., *Análisis Numérico*, Sexta Edición de International Thompson Editores an International Thompson Publishing Company ITP, México 1998, 802 pp.
- [46] Atkinson L.V. & Harley P.J., *Introducción a los Métodos Numéricos con Pascal*, Editado por SITESA (Sistemas Técnicos de Edición S.A. de C.V.) & Addison Wesley Iberoamericana S.A., México D.F. 1987, 305 pp.
- [47] Joyanes Aguilar Luis, *Programación en Turbo Pascal versiones 5.5, 6.0 y 7.0*, McGraw-Hill Segunda Edición, España 1993, 914 pp.
- [48] Joyanes Aguilar Luis, *Pascal y Turbo Pascal (Un Enfoque Práctico)*, McGraw-Hill España 1994, 619 pp.
- [49] Joyanes Aguilar Luis, *Fundamentos de Programación (Algoritmos y Estructura de Datos)*, McGraw-Hill México 1988, 702 pp.
- [50] Goldstein Larry Joel, *Turbo Pascal (Introducción a la Programación Orientada a Objetos)*, Editorial Prentice - Hall Hispanoamericana S.A., México D.F. 1993, 502 pp.
- [51] O'Brien Stephen & Nameroff Steve, *Turbo Pascal 7 (Manual de Referencia)*, editado por Osborne - McGraw-Hill, México 1993, 800 pp.
- [52] Berger Marc, *Graficación por Computador con Pascal*, Editado por Addison Wesley Iberoamericana, S.A. EE.UU. 1991, 396 pp.
- [53] Crandall Richard E., *Aplicaciones de Pascal en Ciencias*, Editorial LIMUSA - Noriega Editores, México 1988, 261 pp.
- [54] Schildt Herbert, *Turbo Pascal Avanzado (Programación y Técnicas)*, Editado por McGraw-Hill, Madrid 1986
- [55] Joyanes Aguilar Luia, *Problemas de Metodología de la Programación*, Editado por McGraw-Hill España 1990, 500 pp.
- [56] Farina, Mario V., *Diagramas de Flujo*, Editorial Diana, México 1986, 141 pp.
- [57] Serie: Mundo Electrónico, Bajo la Coordinación de José Mompin Poblet, *Energía Solar Fotovoltáica*, Editado por Marcombo Boixareu Editores, segunda edición, Barcelona, España 1985, 249 pp.
- [58] Artículo: Ogier J., Comptes-Rendus de l'Academie des Sciences, 89, (1879) p. 1068, citado en [57].
- [59] Artículo: Chittick R.C., et.al., J. Electrochem. Soc. 116, (1969) p. 77, citado en [57].
- [60] Artículo: Spear W.E. & Le Comber P.G., Solid-State Comm. 17, (1975) p. 1193 y Phil. Mag. 33, (1976) p. 935, citado en [57].
- [61] Artículo: Hauser J.J., Solid-state Comm. 19, (1976), p. 1049, citado en [57].
- [62] Artículo: Carlson D.E., et.al., 12th. Photovoltaic Specialist Conf. Baton Rouge Nov. 1976, citado en [57].
- [63] Artículo: Shimizu I. et.al., J. Non-cryst. Solids 35-36, (1980) p 773 y H. Hayama & Mmatsumara. Appl. Phys. Lett. 36, (1980) p. 754, citado en [57].
- [64] Artículo: Tawada Y. et.al., Appl. Phys. Lett. 39 (1981) 9. 237, citado en [57].
- [65] Bøer Karl W., *Advances in Solar Energy (An annual Review of Research and Development)*, Editado por:

- American Solar Energy Society, Inc. & Plenum Press, 1983, Volumen 6.
- [66] Manual de Funcionamiento del Elipsómetro Rudolf AUTOEL II.
- [67] Manual de Funcionamiento del Espectrofotómetro Spectronic GENESIS 5.
- [68] Baird D.C., *Experimentación (Una Introducción a la Teoría de Mediciones y al Diseño de Experimentos)*, Editado por: Prentice Hall Hispanoamericana, S.A., Segunda Edición México 1991, 207 pp.
- [69] Riveros Héctor & Rosas Lucía, *El Método Científico Aplicado a las Ciencias Experimentales*, Editorial Trillas quinta reimpresión, noviembre 1988, 164 pp.
- [70] Bevington Philip R. & Robinson Keith D., *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*, McGraw-Hill Inc. Segunda Edición, 1992, 328 pp.
- [71] Oda Berta, *Introducción al Análisis Gráfico de Datos Experimentales*, Facultad de Ciencias U.N.A.M.
- [72] Talavera García Guillermo, *Generalidades Sobre las Medidas*, Editado por: Editorial LIMUSA - Noriega Editores & El Instituto Politécnico Nacional (I.P.N.), Serie Metrología Técnica, México 1996, 85 pp.
- [73] Bemski George, *Semiconductores*, Serie de Física, Secretaría General de la Organización de los Estados Americanos, Monografía No. 6, Washington D.C., Segunda Edición 1980, 63 pp..
- [74] Falicov Leopoldo M., *La Estructura Electrónica de los Sólidos*, Serie de Física, Secretaría General de la Organización de los Estados Americanos, Monografía No. 3, Washington D.C., Tercera Edición 1980, 73 pp.
- [75] Ashcroft Neil W. & Mermin David N., *Solid State Physics*, Editado por: Saunders College Publishing, U.S.A. 1976, 826 pp.
- [76] Beiser Arthur, *Concepts of Modern Physics*, Editado por McGraw-Hill Inc. Quinta Edición 1995, 534 pp. Se complementa con [6].
- [77] Ibach Harald & Lüth Hans, *Solid State Physics, (An Introduction to Theory and Experiment)*, Editado por Springer Verlag 1991. Clave Biblioteca U.N.A.M. QC 176. I 33 Fc-53654
- [78] Blakemore J.S., *Semiconductor Statistics*, Editado por: Dover Publications, Inc. New York, 1987, 379 pp.
- [79] Omar M. Ali, *Elementary Solid State Physics, (Principles and applications)*, Editado por Addison-Wesley Publishing Company, 1975, 669 pp., Clave Biblioteca U.N.A.M. QC 176 O53.
- [80] Christman J. Richard, *Fundamentals of Solid State Physics*, De. John Wiley & Sons, Inc. 1988, Clave Biblioteca U.N.A.M. QC 176.C47
- [81] McGervey John D., *Introducción a la Física Moderna*, Editado por Trillas, primera reimpresión, México 1991.
- [82] Blatt Frank J., *Modern Physics*, McGraw-Hill, Inc. 1992.
- [83] Feynman & Leighton & Sands, *Mecánica Cuántica, Vol 3*, Editado por: SITESA (Sistemas Técnicos de Edición) & Addison Wesley Iberoamericana, S.A. 1987.
- [84] Sapoval B. & Herman C., *Physics of Semiconductors*, Editado por: Springer Verlag 1995, 319 pp. Clave Biblioteca Central U.N.A.M. QC 611 S35
- [85] Overhof H. & Thomas P., *Electronic Transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors*, Editado por: Springer Verlag 1989, 174 pp. . Clave Biblioteca Central U.N.A.M. QC 611.8A5 O84 OPCIT.
- [86] Pankove Jaques I., *Hydrogen in Semiconductors (Semiconductors and Semimetals)*, Editado por: Academic Press, Inc., 1991, 629 pp., Clave Biblioteca U.N.A.M. QC 610.9S45.
- [87] Pankove Jaques I., *Hydrogenated Amorphous Silicon (Semiconductors and Semimetals) Part A, Preparation and Structure*, Volumen 21, 326 pp. Clave Biblioteca U.N.A.M. QC 612.34W55
- [88] Arum Madan A., *The Physics and Applications of Amorphous Semiconductors*, Editado por: Academic Press, Inc. 1988, 545 pp., Clave Biblioteca U.N.A.M. QC 611.8A5 M33
- [89] Stuart R.V., *Vacuum Technology, Thin Films and Sputtering*, Editado por: Academic Press, Inc. 151 pp.
- [90] Talavera Laura & Fariás Mario, *El Vacío y sus Aplicaciones*, Colección La Ciencia desde México, S.E.P. / F.C.E. / CONACYT, México, D.F., 1995, 89 pp.
- [91] Kreyszig Erwin, *Introducción a la Estadística Matemática (Principios y Métodos)*, Editado por: LIMUSA S.A. de C.V., novena reimpresión 1987, 505 pp.
- [92] Spiegel Murray R., *Probabilidad y Estadística*, Serie Schaum, McGraw-Hill 1975, 372 pp.
- [93] Spiegel Murray R., *Estadística*, Editado por: McGraw-Hill, Segunda Edición 1988, 556 pp.
- [94] Walpole Ronald E. et.al., *Probabilidad y Estadística para Ingenieros*, Editado por: Prentice-Hall Hispanoamericana, S.A., Sexta Edición 1998, 739 pp.
- [95] Mendenhall William & Sincich Terry, *Probabilidad y Estadística para Ingeniería y Ciencias*, Editado por: Prentice-Hall (A Simon and Shuster Company), Cuarta Edición 1997, 1182 pp.
- [96] Tesis de Licenciatura en Física: Hector Ruiz Soria, *Depósito y Caracterización de Películas Delgadas Semiconductoras para Películas Delgadas Semiconductoras para Aplicaciones en Energía Solar*, México D.F. 1990, Clave Biblioteca U.N.A.M. Ficha 133626 clave: 001-00323-R5-1990, 61 pp.
- [97] Tesis de Licenciatura en Física: Juan Manuel Mendez Acevedo, *Propiedades Ópticas de Películas Delgadas de Silicio Amorfo Hidrogenado*, México, D.F., 1981, 101 pp., Clave Biblioteca U.N.A.M. Ficha 002355, clave: 001-00233-M2-1985
- [98] Tesis de Licenciatura en Física: Cortina Urrutia Beatriz del Carmen, *Análisis y Evaluación de Celdas Solares en Silicio Amorfo*, México D.F., Clave Biblioteca U.N.A.M. Ficha 002134, clave: 001-00323-C7-1980

- en Silicio Amorfo*, México D.F., Clave Biblioteca U.N.A.M. Ficha 002134, clave: 001-00323-C7-1980
- [99] Tesis de Licenciatura en Física: José Humberto Mondragón Suarez, ***Elaboración y Caracterización de Germanio Amorfo***, México D.F., Clave Biblioteca U.N.A.M. Ficha 002357, clave: 001-00323-M4-1985, 87 pp.
- [100] Thèse pour obtenir le grade Docteur de 3^{ème} cycle : Mini Adnan, ***Contribution a l'étude de la variation avec la température du front d'absorption fondamentale dans les alliages Ge_xTe_{1-x}*** , L'Universite Scientifique et Medicale et L'Institut National Polytechnique de Grenoble, Numéro C.N.R.S. 205142-1975-138
- [101] Thèse pour obtenir le grade Docteur es Sciences Physiques: Mini Adnan, ***Contribution a L'Etude du Silicium Amorphe Hydrogene. Proprietes Optiques et Physicochimiques***, L'Universite Scientifique et Medicale et L'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1982. 209 pp.
- [102] Tesis de Licenciatura en Física: Cordero Borboa Adolfo Ernesto, ***Estudio de Propiedades Ópticas de Sólidos por Elipsometría***, México D.F., Clave Biblioteca U.N.A.M. Ficha 002075, clave: 001-00323-C4-1979
- [103] Artículo: Manificier J.C., ***A Simple Method for the determination of the optical constants n,k and the thikness of a weakly absorbing thin film***; Journal of physics E: Sientific Instruments 1976 Volume 9, Printed in Great Britain.
- [104] Artículo: Freeman Eva C. & William Paul, ***Optical Constants of RF Sputtered Hydrogenated Amorphous Silicon***, Physical Review B, Vol. 20, Número 2, 1979.
- [105] Palik Edward D., ***Handbook of Optical Constants of Solids***, Academic Press, 1985.
- [106] Artículo: Benner Jhon P. & Kazmerski Lawrence, ***Photovoltaics, Gaining Greater Visibility***, IEEE SPECTRUM, Published by The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc., September 1999.
- [107] Braun Eliezer, ***Arquitectura de Sólidos y Líquidos***, Colección: La Ciencia desde México # 26, Editorial Fondo de Cultura Económica, México D.F.
- [108] Ruiz Mejía Carlos, ***Trampas de Luz***, Colección: La Ciencia desde México # 27, Editorial Fondo de Cultura Económica, México D.F.
- [109] Morales Acevedo Arturo, ***La Electricidad que viene del Sol (una fuente de energía limpia)***, Grupo Editorial Iberoamericana, México D.F., 1996.



1974
GNT 15