



Universidad de los Andes.

Facultad de Ciencias.

Departamento de Física.

Centro Nacional de Tecnología Óptica.

Trabajo especial de grado

“Diseño y elaboración de un programa que determine propiedades ópticas en películas delgadas en rango del visible al infrarrojo cercano.”

www.bdigital.ula.ve

Presentado ante la ilustre

Universidad de los Andes para optar al título

De Licenciado en Física

Presentado por:

Br. Juan Pablo Sevilla Lara.

Tutor: Dr. Juan Martín.

Cotutor: Msc. Keyffer Salas.

Dedicatorias y agradecimientos.

Lo primero es agradecer a dios, por la culminación de mi carrera a pesar de las adversidades.

Este trabajo va dedicado a mis padres, que siempre me apoyaron, a pesar de muchas veces haberles dado motivos para no hacerlo. Su fortaleza, inteligencia y sabiduría han sido una inspiración para mí.

Agradezco a mis tutores Keyffer Salas por haberme asignado el tema de investigación, su paciencia y apoyo, a Juan Martin por sus enseñanzas y paciencia. A mis jurados Pedro Grima, Adán López y Andrés Eloy Mora por sus correcciones y comprensión. A la universidad de los andes por haberme dado mi formación académica y deportiva. Al CNTO y su personal, por su colaboración con datos experimentales, y buena disposición, al Dr. Luis Ruiz por su ayuda en la elaboración del programa, si el todavía estaría programando “hola mundo”.

A mis compañeros de carrera, Arturo, Yonathan, Luis, Mayra, Marian. Mis amigos de la facultad de ciencias, Mayelin, Mariana. A mis amigos de Mérida y Yaracuy por su apoyo, Beatriz, Rafavi, Jesús, Mario, David, Jesús Alberto, Andrés, Luigi Godoy, Carlos Jesús. A mi familia, mis tíos y primos, en especial Cirilo y Juan José, por último y no menos importante, a mis compañeros del crossfit.

A todos los mencionados, ¡MUCHAS GRACIAS!

Resumen.

En el presente trabajo se realizó el diseño y la creación de un software para simular las propiedades ópticas de reflectancia y transmitancia en el rango de ultravioleta cercano, visible e infrarrojo cercano para recubrimientos antirreflejos de una y varias capas. Posteriormente se procedió a comparar las simulaciones del programa elaborado con los resultados reportados en artículos científicos. Para finalizar se realiza una comparación de los resultados de la simulación con los obtenidos en el Centro Nacional de Tecnología Óptica. Donde se utilizó MgF_2 , SiO_2 y ZrO_2 como materiales de recubrimientos, y vidrio óptico, vidrio común y portamuestras comerciales como sustratos. Los recubrimientos se realizaron mediante la técnica de sputtering asistido con haz de iones. La reflectancia y transmitancia fue medida empleando un espectrofotómetro.

Palabras claves: Antirreflejo, Reflectancia, Software, Película delgada.

www.bdigital.ula.ve

Contenido

Introducción.	5
Planteamiento del problema.	6
Objetivos.	7
CAPITULO I. LA LUZ EN MEDIOS MATERIALES.	8
1.1 La naturaleza de la luz.	8
1.2 La dispersión de la luz.	10
.....	12
1.3 La ecuación de Cauchy.	15
1.4 La ecuación de Sellmeier.	15
Referencias del capítulo.	18
CAPITULO II Películas delgadas.	19
2.1 Definición, aplicaciones e historia.	19
2.1.1 Definición.	19
2.1.2 Aplicaciones.	19
2.1.3 Historia.	20
2.2 Formación de las películas delgadas.	21
2.3 Óptica en películas delgadas.	24
2.3.1 Consideraciones generales.	24
2.3.2 La ley de Snell.	25
2.3.3 Modelo teórico.	26
.....	26
2.3.2.1 luz polarizada <i>P</i> entre medios materiales.	30
2.3.2.2 luz polarizada <i>S</i> entre medios materiales.	31
2.3.2.3 reflectancia y transmitancia.	31
2.3.2.4 El método matricial.	33
Referencias del capítulo.	37
Capitulo III. Antecedentes.	38
Referencias del capítulo.	40
Capítulo IV. Procedimiento experimental.	41
4.1 Cálculo del índice de refracción.	41
4.2 Cálculo de la transmitancia y reflectancia.	46

Referencias del capítulo.	55
Capítulo V. Resultados y análisis.	56
5.1 Chequeo y ajustes del programa.	56
5.2 Datos del software comparados con artículos científicos.	62
5.3 Modelo teórico versus resultados experimentales del CNTO.	65
Referencias del capítulo.	71
Conclusiones.	72
Recomendaciones.	73

www.bdigital.ula.ve

Introducción.

Las películas delgadas han despertado la curiosidad e interés del ser humano desde hace mucho tiempo, pero es desde hace aproximadamente medio siglo que las películas delgadas han sido uno de los pilares de investigación de científicos e ingenieros, esto se debe al gran número de aplicaciones donde son empleadas, abarcando diversas áreas por ejemplo chips de computadoras, herramientas mecánicas, paneles solares, lentes de cámaras, prótesis médicas recubrimientos en piezas para uso en el espacio entre otros.

Los recubrimientos ópticos se caracterizan no solo por ser los más estudiados en el área de películas delgadas, sino por ser los más fabricados. Esto se debe a que poseen el mayor número de aplicaciones tanto en el ámbito científico como en la vida cotidiana. Por lo que su diseño y fabricación son de gran importancia para laboratorios y empresas a nivel mundial.

En la actualidad en el área de recubrimientos ópticos existen gran número de técnicas para el diseño de los mismos. Sin embargo la mayoría de estas implican el desarrollo de cálculos numéricos de gran complejidad, debido a esto es necesario emplear el uso de programas de cálculo numérico. De licencia libre o privada, en la actualidad existen diversos programas capaces de simular recubrimientos ópticos multicapas de películas delgadas con gran precisión.

A pesar de la adquisición de estos softwares por parte del centro nacional de tecnologías ópticas (CNTO) es necesario el diseño y creación de un software propio y de la autoría del CNTO. Ya que esto permite lograr una mejor comprensión de los fenómenos físicos que intervienen en los recubrimientos ópticos de películas delgadas, permitiendo desarrollar nuevos conocimientos para el diseño y creación de los recubrimientos. Otro gran beneficio de la creación de este programa es dar una mayor guía al elaborar los recubrimientos ópticos en el CNTO, permitiendo una mejor comercialización y aceptación en el ámbito científico y empresarial.

Planteamiento del problema.

La elaboración de recubrimientos con películas delgadas es un proceso complejo, donde intervienen numerosas variables, cualquier variación en alguna de ellas puede modificar significativamente las propiedades ópticas del mismo, debido a esto se elaboran modelos matemáticos que permiten predecir la relación entre las variables y las propiedades ópticas del recubrimiento. El empleo de los modelos matemáticos deriva en el desarrollo de cálculos extensos y en ciertos casos complicados, razón por la cual se crean programas que facilitan el desarrollo de los modelos matemáticos.

Desde sus inicios en el año 2014 el centro nacional de tecnologías ópticas (CNTO) ha sido dotado con equipos de alta tecnología, que permiten realizar y caracterizar recubrimientos de películas delgadas con gran precisión, sin embargo carecen de un programa adecuado para simular recubrimientos ópticos en películas delgadas, esto se debe a que la mayoría de los programas son de licencia privada, y su costo resulta elevado, además de la limitación de no poder modificar el código del programa para adaptarlo a los requerimientos específicos del CNTO, lo cual permite ahorrar tiempo y costos en la elaboración de los recubrimientos.

www.bdigital.ula.ve

Objetivos.**General:**

Diseñar y elaborar un software que simule las propiedades de reflectancia y transmitancia para recubrimientos ópticos antirreflejos.

Específicos:

-Realizar simulaciones de recubrimientos ópticos antirreflejos con el software elaborado y comparar los resultados con otros softwares.

-Realizar simulaciones de recubrimientos ópticos con el software elaborado y comparar los resultados con los valores reportados en artículos científicos.

-Comparar los resultados de recubrimientos ópticos realizados y caracterizados en el centro nacional de tecnologías ópticas con los modelados mediante el software elaborado.

www.bdigital.ula.ve

CAPITULO I. LA LUZ EN MEDIOS MATERIALES.

1.1 La naturaleza de la luz.

La naturaleza y las propiedades de la luz han sido objeto de estudio de los científicos desde hace muchos siglos. Los egipcios en el 1200 a.c. usaban instrumentos ópticos (aunque no se preocupan por la comprensión de la naturaleza de la luz), la ley de la reflexión fue formulada por Euclides en el 300 a.c, y la refracción fue estudiada por Aristóteles en el 350 a.c y Ptolomeo formuló la ley en el 120 a.c. Alhazen realizó numerosos estudios en óptica alrededor del 1000 d.c [4].

En años posteriores numerosos científicos continuaron realizando trabajos en óptica, hasta que en los siglos XVI y XVII se produjo una discrepancia de opiniones de la comunidad científica sobre la naturaleza de la luz. Un grupo de científicos sostenían que la luz estaba compuesta por partículas, esta teoría estaba apoyada por Isacc Newton y se fundamentaba en la propagación rectilínea de la luz. Por otro lado el fenómeno de difracción daba base a una naturaleza ondulatoria de la luz, siendo Robert Hooke uno de sus defensores [6].

Numerosos científicos de renombre como Euler, Huygens, Bartolinus, Lamonosov entre otros hicieron sus aportes apoyando ya sea a la teórica ondulatoria o corpuscular de luz [4].

Hasta el siglo XVIII la teoría corpuscular llevaba la delantera y era la más aceptada por la comunidad científica, fue a principio del siglo XIX que los trabajos de Augustin Jean Fresnel y Thomas Young pusieron a la cabeza la naturaleza ondulatoria de la luz, ya que sus estudios daban una explicación a la propagación rectilínea de la luz mediante su naturaleza ondulatoria, otro gran aporte de Young fue proponer la luz como una onda transversal.

Por otro lado los experimentos realizados por Michael Faraday en 1845 lograron establecer una relación entre la luz y el electromagnetismo [6].

James Maxwell logra unificar todo el conocimiento empírico y teórico logrado hasta esa época en su celebres ecuaciones del electromagnetismo. En ellas se logra explicar la naturaleza de la luz como una onda electromagnética transversal con velocidad constante de $3 \cdot 10^8$ metros por segundo en el espacio. Uno de los grandes obstáculos del desarrollo de las teorías de la luz de la época era la aceptada existencia del llamado éter, el cual funcionaba como medio para la propagación de la luz. Lamentablemente Maxwell fallece 8 años antes de que Albert Michelson y

Edwar Morley con su célebre experimento lograran descartar la teoría del éter y comprobar que las ondas electromagnéticas logran propagarse en el vacío.

La luz fue descrita como una onda durante varias décadas, sin embargo a principios del siglo XX, talentosos científicos como Max Planck con su explicación del experimento del cuerpo negro, Albert Einstein que desarrolla un modelo físico del efecto fotoeléctrico, Niel Bohr que elabora un modelo del átomo de hidrogeno, entre otros. Logran establecer un conjunto de pruebas de fenómenos ópticos que, no solo no podían ser explicados con un modelo ondulatorio de la luz, sino que encajaban perfectamente con una nueva teoría corpuscular de la luz. Estos fundamentos dieron nacimiento a una nueva teoría llamada mecánica cuántica.

En la actualidad la naturaleza de la luz está bien establecida, llegando a la conclusión de que esta se puede tratar como una onda para ciertos fenómenos físicos, y como una partícula para otros.

www.bdigital.ula.ve

1.2 La dispersión de la luz.

La luz al incidir en un medio material altera el valor de su velocidad, esto se debe a que es absorbida y posteriormente emitida por los electrones del material cuando se relajan, entre el proceso de excitación y relajación de los electrones existe un tiempo finito, por lo que la luz tardara más tiempo en atravesar el medio material que el vacío. Macroscópicamente este fenómeno se representa como un nuevo valor en la velocidad de la luz, el cual siempre es menor que la velocidad en el vacío (c). La relación entre el cambio de la velocidad con respecto a su valor constante c viene dado por el valor del índice de refracción del material n , sin embargo, diversos experimentos demostraron que para un mismo material ondas electromagnéticas con diferentes frecuencias cambian su velocidad de manera diferente al incidir sobre un medio material, por lo que se concluye que n no solo varia con el tipo del material, sino también con la frecuencia de la onda electromagnética. A este último fenómeno se conoce con el nombre de dispersión. Los resultados experimentales obtenidos han permitido llegar a la conclusión de que la variación del índice de refracción con la longitud de onda es de carácter no lineal.

La dispersión actualmente es un fenómeno físico muy bien conocido y utilizado, gracias a ella podemos explicar el color azul del cielo, saber cómo son los cuerpos celestes a millones de años luz, etc. El parámetro fundamental en el fenómeno de dispersión es el índice de refracción que se define como:

$$n \equiv \frac{c}{v} \quad (1.1)$$

Y que Maxwell logró relacionar con las propiedades eléctrica y magnética del medio:

$$n = \sqrt{\frac{\epsilon\mu}{\epsilon_0\mu_0}} \quad (1.2)$$

Donde ϵ y μ son la permitividad eléctrica y permeabilidad magnética en un medio material y ϵ_0 y μ_0 son las constantes de permitividad eléctrica y permeabilidad magnética en el vacío los cuales se expresan en el sistema internacional de medidas. Una manera más práctica de expresar las propiedades eléctricas y magnéticas del medio es mediante el uso de la permitividad eléctrica relativa (o constante dieléctrica) la cual se define como el cociente de la permitividad eléctrica del material y la permitividad eléctrica del vacío, del mismo modo definimos la permeabilidad magnética relativa. Por simplicidad definiremos la permitividad eléctrica relativa como ϵ y la magnética como μ . Teniendo en cuenta que al utilizar estas letras será referencia de las definiciones relativas.

Otra caso importante es el de los materiales dieléctricos (los cuales serán los que se emplearan para el modelo matemático), para los cuales, la permeabilidad magnética $\mu \approx 1$, por lo que la ecuación 1.2 para estos materiales se reescribe como:

$$n = \sqrt{\epsilon} \quad (1.3)$$

Existen 2 tipos de dispersión las cuales se explican a continuación:

-Dispersión normal: La dispersión normal se caracteriza por un incremento de n *de manera relativamente lenta* al decrecer la longitud de onda, es decir a menor longitud de onda mayor dispersión [3], lo cual es la causa por la que el color rojo se refracta más que el azul. La causa de este fenómeno se debe a la interacción de la radiación electromagnética con el medio material, lo cual conlleva a una disminución de la velocidad de la luz en el medio material. La dispersión normal ocurre a frecuencias lejos de las bandas de absorción características del material [4].

-Dispersión anómala: al incidir luz con longitud de onda cercana a las bandas de absorción del material ocurre la llamada dispersión anómala, la cual se caracteriza por un incremento de n de manera muy rápida al aumentar la longitud de onda. Al incidir una longitud de onda igual a la banda de absorción el termino de índice de refracción definido anteriormente carece de sentido, esto se debe a que los modelos teóricos que utilizan esta definición de n predicen un valor infinito en la línea de absorción, lo cual contradice la evidencia experimental que resulta complicada de obtener debido a que prácticamente toda la luz es absorbida en la longitud de la banda de absorción.

Para dar una mejor explicación al fenómeno del índice de refracción en las valores de las líneas de absorción se debe recurrir a un modelo de índice de refracción complejo, el cual da paso a la definición del coeficiente de absorción óptica.

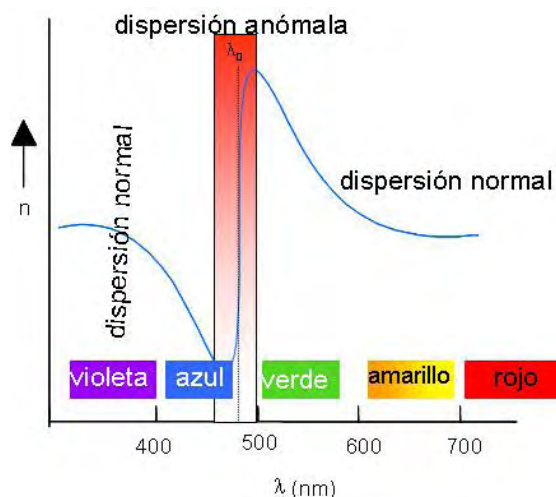


Figura 1.1 Curva de índice de refracción vs longitud de onda donde se indica la dispersión normal y anómala. [6]

A continuación se debe obtener un modelo matemático de la teoría de dispersión, para el cual se emplearán los fundamentos de la teoría clásica, ya que esta mantiene los rasgos esenciales de la teoría usados en el modelo cuántico, permitiendo obtener para nuestro tema de estudio resultados similares a los que se obtendrían usando la mecánica cuántica. [4].

Consideremos la incidencia de una onda electromagnética en un medio material. El primer efecto físico que ocurre es una redistribución de las partículas cargadas (o iones) dentro del material, dando paso a la creación de dipolos eléctricos. Un dipolo eléctrico posee un momento definido como:

$$\mathbf{p} = e\mathbf{r} \quad (1.4)$$

Donde $\mathbf{r}$ es la posición, y e la carga del dipolo. Otro concepto que será de utilidad es el la polarización del medio que viene dada por la contribución de todos los dipolos en una unidad de volumen:

$$\mathbf{P} = N e \mathbf{r} \quad (1.5)$$

La ecuación de desplazamiento eléctrico en un medio viene dada por:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} = \epsilon_0 \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} \quad (1.6)$$

Es decir:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} = \epsilon_0 \mathbf{E} + 4\pi N e \mathbf{r} \quad (1.7)$$

De la ecuación 1.7 se obtiene una expresión para el índice de refracción, sustituyendo 1.3 en 1.7 y despejando n se tiene:

$$n^2 \mathbf{E} = \epsilon_0 \mathbf{E} + 4\pi N e \mathbf{r} \quad (1.8)$$

Ahora hallaremos una expresión para obtener r .

El campo eléctrico de la onda incidente modifica la posición de los electrones en los átomos del material produciendo un desplazamiento r , sin embargo los electrones no permanecen en esta posición sino que comienzan a oscilar a una frecuencia igual a la de la onda incidente. Cabe destacar que para longitudes de onda del orden del infrarrojo estas oscilaciones se producen en los iones del material.

En la búsqueda de un modelo físico y matemático que describa al fenómeno de dispersión a nivel atómico el del oscilador armónico es uno de los más usados. En el sistema del oscilador armónico del electrón y el núcleo se manifiestan las siguientes fuerzas:

1) Fuerza restauradora. Al igual que un resorte unido a una masa que oscila, para los electrones oscilando existe una fuerza que para pequeños desplazamientos intenta restablecer los electrones a su posición de equilibrio, esta fuerza es de la forma:

$$F_r = -br \quad (1.9)$$

Evidencia experimental ha demostrado que los átomos aislados tienen la capacidad de emitir ondas monocromáticas características del tipo de átomo, además las frecuencias no varían significativamente si la sustancia que se compone por los átomos es calentada.

2) Fuerza de frenado: si para el modelo de dispersión la representación se hace mediante un oscilador armónico amortiguado, es necesario agregar un coeficiente de amortiguamiento que disminuya la amplitud de las oscilaciones. El uso de este coeficiente se hace evidente si tomamos en cuenta la interacción del átomo con sus adyacentes que puede producir pérdida de energía, además el electrón al oscilar va emitiendo energía por lo que la energía del oscilador va disminuyendo paulatinamente. La expresión matemática para esta fuerza viene dada por:

$$G = -g \frac{dr}{dt} \quad (1.10)$$

Esta fuerza es similar a la fuerza de roce, por lo que no es extraño que como ocurre en diversos problemas de física la fuerza de roce sea dependiente de la velocidad, por último el coeficiente g depende de la naturaleza del medio.

3) Fuerza impulsiva: las oscilaciones de los electrones son producidas por la incidencia de una onda electromagnética. Para casos prácticos se considera solo la componente eléctrica de la onda, ya que para la fuerza magnética ($\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$). La velocidad de los electrones es mucho menor que la velocidad de la luz, por lo que el valor de la fuerza magnética es pequeño en comparación con

la fuerza eléctrica. Considerando esto la componente eléctrica de la onda electromagnética viene dada por:

$$F_e = qE_0 \cos \omega t \quad (1.11)$$

Ahora teniendo definidas todas las fuerzas que intervienen en el movimiento armónico y utilizando la segunda ley de newton se tiene:

$$F_e + G + F_r = ma \quad (1.12)$$

Se utiliza la ecuación en forma escalar ya que suponemos que el movimiento ocurre en una dimensión. Sustituyendo las expresiones se tiene:

$$qE_0 \cos \omega t - g\dot{r} - br = m_e \ddot{r} \quad (1.13)$$

Esta es la ecuación a resolver para hallar r en el modelo de dispersión y así poder obtener n . Sin embargo podemos obtener una solución aproximada que resulta muy útil, si se omite de la ecuación la fuerza de dispersión:

$$qE_0 \cos \omega t - br = m_e \ddot{r} \quad (1.14)$$

Lo primero es dar una representación adecuada al coeficiente b . Al estudiar el problema del oscilador armónico es fácil deducir que b se puede escribir como:

$$b = m_e \omega_0^2 \quad (1.15)$$

Ahora la solución a este tipo de ecuación diferencial es ampliamente conocida en mecánica y el método para resolverla se puede consultar en cualquier libro especializado de mecánica teórica [5]. Por lo que se tiene:

$$r = r_0 \cos \omega t \quad (1.16)$$

Para obtener el valor de r_0 introducimos la solución (1.16) en la ecuación (1.13) con lo que se tiene:

$$r_0 = \frac{qE_0}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (1.17)$$

Ahora sustituyendo en la ecuación 1.8 la ecuación 1.16 y 1.17 y despejando n se obtiene la ecuación de dispersión:

$$n = \sqrt{1 + 4\pi N \frac{q^2}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2)}} \quad (1.18)$$

El valor ω_0^2 se denomina frecuencia de resonancia y es propia del tipo de átomo y material, además existen varias frecuencias de resonancia para una misma sustancia. De la ecuación (1.17) podemos ver que existen 3 posibilidades:

- 1) Desde $\omega=0$ hasta $\omega \approx \omega_0$. El índice de refracción es mayor a 1 y aumenta conforme aumenta ω , al aproximarse a las frecuencias de resonancia la razón de crecimiento de n se va incrementando
- 2) $\omega_0 = \omega$. en este caso la energía de la onda electromagnética es absorbida por completo y convertida en energía mecánica, la cual se disipa térmicamente en la sustancia.
- 3) $\omega > \omega_0$. Para este caso se obtiene un índice de refracción menor a la unidad.

Esta solución aunque muy útil no es la solución más general, ya que se debe considerar el coeficiente de amortiguamiento, el cual nos permite obtener la solución general al problema de dispersión. Sin embargo obtener el índice de refracción a través de este modelo resulta complicado, ya que calcular las frecuencias naturales de vibración de los materiales es difícil, por lo que resulta más práctico el uso de modelos matemáticos obtenidos a través de resultados experimentales.

1.3 La ecuación de Cauchy.

En 1836 Augustin Cauchy desarrolla su ecuación de dispersión, la cual es:

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} \quad (1.18)$$

Donde A , B y C son constantes a determinar. Para obtener los valores de las constantes es necesario tener el valor de n para 3 longitudes de onda diferente, de esta forma se tiene un sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas. Cabe señalar que el fundamento teórico usado por Cauchy para el desarrollo de esta ecuación fue probado como incorrecto, por lo que este es un modelo meramente empírico [3], aunque resulta apropiada para materiales en el rango de dispersión normal que no sean metales, semiconductores y que no posean absorción óptica. La ecuación de Cauchy puede ser modificada para modelar materiales con una débil absorción óptica [4].

1.4 La ecuación de Sellmeier.

El fracaso de la ecuación de Cauchy para obtener un modelo de dispersión para valores cercanos a las frecuencias de resonancias dio paso al desarrollo de un nuevo modelo de dispersión. Este

modelo se basa en la existencia de frecuencias propias de vibración para cada material. De la sección 1.2 sabemos que según la frecuencia de la luz incidente se ubique con respecto a la frecuencia propia del material la dispersión será diferente. En 1871 Willhem Sellmeier saca a la luz su trabajo obteniendo la siguiente ecuación:

$$n^2 = 1 + \sum_i \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_i^2} \quad (1.19)$$

Donde los λ_i son las longitudes de onda características del material y las constantes A_i son proporcionales al número de osciladores capaces de vibrar con esas frecuencias [3].

La ecuación 1.19 resulta muy útil para calcular la dispersión en valores lejos de las bandas de absorción del material, pero para estas el resultado es catastrófico, ya que como se deduce de la ecuación para longitudes de onda de la banda de absorción n tendería a infinito, y la evidencia experimental no solo prueba que esto es falso sino que las curvas obtenidas teóricamente no son iguales a tales experimentos.

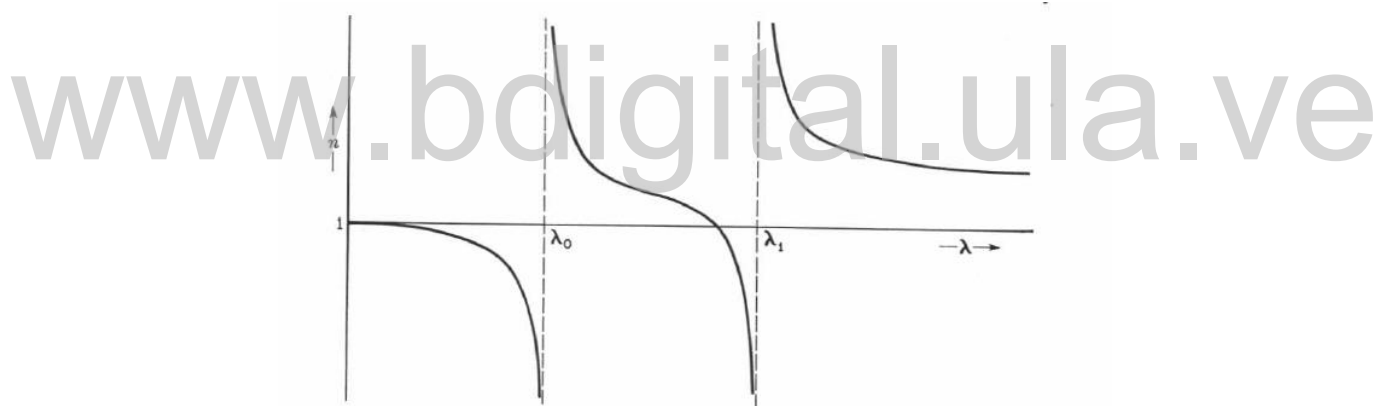


Figura 1.2. Curva de dispersión teórica determinada por el modelo de Sellmeier usando 2 frecuencias naturales [3].

Este problema fue resuelto por Hermann Von Helmholtz al percatarse que el modelo de Sellmeier no tomaba en cuenta la energía de absorción de la onda, lo cual es el análogo al coeficiente de fricción en el modelo del oscilador armónico [3]. La solución de Helmholtz fue el uso de un coeficiente dependiente de la velocidad y que tomara en cuenta la absorción del medio material:

$$k_0 = \frac{\alpha\lambda}{4\pi} \quad (1.20)$$

Donde α es el coeficiente de absorción del medio. El desarrollo de la teoría de Helmholtz da como resultado la siguiente ecuación de dispersión:

$$n^2 - k_0^2 = 1 + \sum_i \frac{A_i \lambda^2}{(\lambda^2 - \lambda_i^2) + g_i \lambda^2 / (\lambda^2 - \lambda_i^2)} \quad (1.21)$$

$$2nk_0 = \sum_i \frac{A_i \sqrt{g_i} \lambda^3}{(\lambda^2 - \lambda_i^2)^2 + g_i \lambda^2} \quad (1.22)$$

Donde g es una constante que depende del tipo de material y se determina de forma experimental. En la figura 3 se observa las curvas de dispersión usando las ecuaciones (1.21) y (1.22) las cuales concuerdan con los datos experimentales.

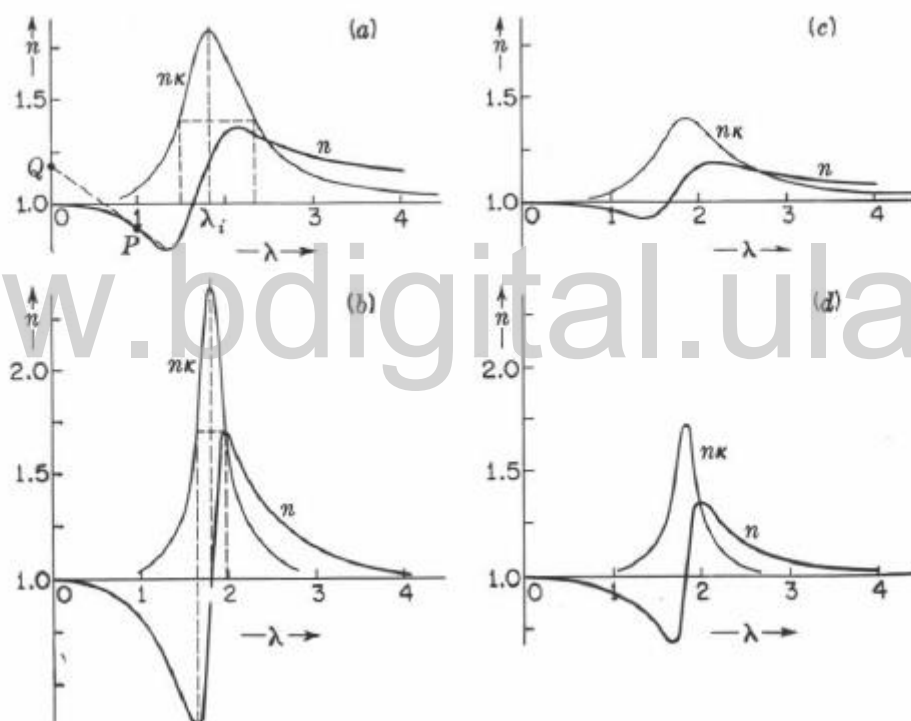


Figura 1.3. Curvas de dispersión para diferentes valores de n , donde se muestra la curva con y sin el uso del coeficiente de absorción k . utilizando el valor k los valores de la curva se asemejan a los obtenidos experimentalmente [3].

Referencias del capítulo.

- [1] Cauchy and related empirical dispersion formulae for transparent materials. Recuperado el 25/02/2017 de: www.jobinyvon.com.
- [2] Dispersion. Recuperado el 22/02/2017 de:
http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/677/mod_resource/content/1/1C_C11812_A/cristalografia/16/4.htm.
- [3] Jenkins F, White H. (1957). Fundamentals of optics. California USA: McGrawHill
- [4] Landsberg G.S. (1975). Óptica. Moscú, Rusia: Mir.
- [5] Hausser Walter. (1966). Introduction to the principles of mechanics. Massachusetts, USA: Addison-Wesley.
- [6] Hecht Eugene. (2002). Optics. Nueva York USA. Addison Wesley.

www.bdigital.ula.ve

CAPITULO II Películas delgadas.

2.1 Definición, aplicaciones e historia.

2.1.1 Definición.

Las películas delgadas se pueden definir como capas delgadas de un material con espesores que varían desde $100\mu\text{m}$ hasta 1nm . Cabe destacar que los espesores de estos recubrimientos pueden ser de solo unos cuantos radios atómicos [1].

Otra definición usada para definir una película delgada, es cuando se detectan efectos de interferencia en la luz reflejada y transmitida, esta definición no solo dependerá del espesor de la película, sino también de la longitud de onda de la luz incidente [2].

2.1.2 Aplicaciones.

En la actualidad las películas delgadas son ampliamente utilizadas con diversos propósitos, entre ellos se encuentran:

- La creación de componentes eléctricos como resistores y capacitores.
- Diseño de celdas solares.
- Recubrimientos de herramientas mecánicas para aumentar su resistencia al desgaste.
- Almacenamiento de energía en baterías de películas delgadas.
- Construcción de semiconductores.
- Desarrollo de medicamentos con mayor eficiencia de absorción en el organismo.
- Diseño de lentes antirreflejos, de alta reflectancia, divisores de haz y filtros.

2.1.3 Historia.

El estudio de la física de las películas delgadas nace con el estudio de colores que aparecen en materiales con forma de películas delgadas como burbujas de jabón, agua sobre aceite entre otros. Estos estudios fueron realizados por Joannes Macri (1648), Robert Boyle (1663), F Grimaldi (1665), Robert Hooke (1665) entre otros [2], [3].

Newton (1717) también estudio el fenómeno de películas delgadas en los llamados anillos de Newton. Y los estudios de Thomas Young y Augustin-Jean Fresnel dieron una base al estudio de los fenómenos de interferencia y difracción fundamentales en el estudio de películas delgadas. En 1883 G.B Airy utilizando el concepto de interferencia de múltiples haces logra dar explicación a los anillos de Newton y los colores en las películas delgadas [3]. Dennis Poisson en correspondencia con Fresnel obtienen un resultado de gran importancia al demostrar que películas con un espesor de media longitud de onda no modifica la reflectancia en una superficie, y que un espesor de un cuarto de longitud de onda reduce a cero la reflectancia en la superficie [2].

Las ecuaciones de Maxwell presentadas en 1873 fueron la herramienta definitiva para el desarrollo de todos los modelos teóricos de películas delgadas. Joseph Von Fraunhofer en 1817 logra construir el primer recubrimiento antirreflejo conocido. En el año 1917 es descubierto el primer artículo donde se construye el primer arreglo multicapa de películas, este fue realizado por Lord Rayleigh. En 1904 se concede la primera patente para el procedimiento de la creación de recubrimientos antirreflejos [3].

El nacimiento de la ciencia y tecnología de las películas delgadas ocurre en la década de los 30, esto debido al avance obtenido en las cámaras de vacío, permitiendo obtener técnicas de deposición de alta calidad y a costos reducidos [2]. A. Smakula y J. Strong se consideran de manera independiente como los padres de los recubrimientos antirreflejos de una capa. Entre los años 1937 y 1947 se desarrolla el modelo teórico para sistemas ópticos antirreflejos y reflectantes, el crédito de este logro se atribuye a Pierre Rouard, Antonin Vasicek A. Crook entre otros. Luego de la segunda guerra mundial la investigación, desarrollo y producción de películas delgadas crece aceleradamente, siendo estas aplicadas en prácticamente todas las ramas de la física y otras ciencias.

2.2 Formación de las películas delgadas.

El crecimiento y formación de una película delgada sobre un sustrato es un proceso complejo, esto se debe a que en el proceso de formación de la película intervienen una cantidad de variables y etapas. Cualquier modificación en una de estas conlleva a diferentes propiedades de la película delgada.

Básicamente la formación de una película delgada consiste en evaporar el material que formara la película, y en el transporte del mismo hasta el sustrato para formar el recubrimiento. Sin embargo, existe una cantidad de procesos bien definidos en la formación de películas delgadas, los cuales se explican a continuación:

1. Transporte y llegada de los átomos; en este proceso los átomos y/o iones del material del recubrimiento llegan a la superficie del sustrato. El parámetro más importante a considerar en esta etapa es la velocidad de los átomos, ya que si la velocidad de los átomos transportados es alta al incidir sobre el blanco estos podrían deformar el sustrato, lo que modificaría las propiedades del recubrimiento. Al llegar las moléculas al sustrato se produce una colisión donde existe una transferencia de energía cinética de los átomos al sustrato por lo que la superficie del sustrato comienza a vibrar y calentarse, los átomos continúan vibrando cerca de la superficie del sustrato hasta perder suficiente energía para alcanzar el equilibrio térmico [4].
2. Adsorción y Desorción de los átomos; el proceso de adsorción ocurre cuando los átomos incidente llegan a la superficie del sustrato a los llamados “sitios de adsorción”, que son lugares en la estructura del sustrato donde los átomos o moléculas del recubrimiento se adsorben fácilmente. Pero no todos los átomos son adsorbidos, existe el caso en que el átomo se encuentra en un sitio de adsorción y se mueve hacia otro proceso, en el cual existe una probabilidad de que el átomo se reevapore y escape de la superficie del sustrato [1]. “Cuanto más pequeña en la energía de adsorción mayor es la velocidad de desorción; entonces solo puede haber un crecimiento cuando el ritmo de llegada de los átomos es muy superior a los que se reevaporan” [4].

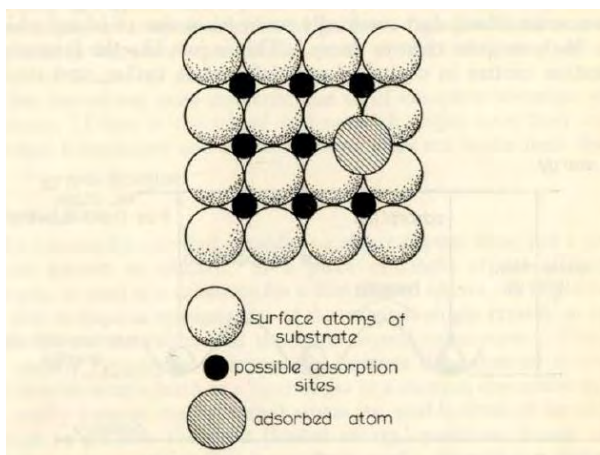


Figura 2.1 Representación de un átomo adsorbido en la formación de una película delgada [1].

3. Difusión superficial; al llegar los átomos o moléculas a un sitio de adsorción, no mantienen una posición fija, estas oscilaran debido a su energía cinética propia o a la vibración del sustrato (que depende de la temperatura del mismo). Durante este proceso los átomos adsorbidos (adatomos) se mueven de un sitio de adsorción a otro con mayor energía de enlace. Durante este proceso existe la probabilidad de una desorción de los átomos, los átomos que llegan con mayor energía a la superficie alcanzaran una posición de adsorción con mayor energía de enlace [3], [4].

Otro proceso que puede ocurrir en esta etapa es una colisión entre los átomos, formando grupos de átomos enlazados, los cuales son más estables y tienen menor probabilidad de ser reevaporados [1].

4. Nucleación y crecimiento de la película; los átomos adsorbidos en la superficie del sustrato tienden a acumularse formando un numero de átomos o moléculas, las cuales se denominan “islas”. Tanto la cantidad de islas como su tamaño aumenta conforme llegan y se adsorben más átomos al sustrato, hasta que las islas son tan grandes que se unen unas con otras recubriendo por completo el sustrato, además al continuar la llegada de átomos al sustrato se crean más islas y aumenta el espesor del recubrimiento [5]. Existen 3 modelos sobre como ocurre este proceso:

a) Modelo de Volmer-Weber. para este caso prevalece la interacción entre los átomos enlazados, por lo que sobre el sustrato se forman primero islas con varios átomos de espesor antes que el recubrimiento completo, y cuando la superficie del sustrato quede completamente cubierta la película tendrá varios átomos de espesor.

b) Modelo de Frank van der Merwe. Para este modelo los átomos quedan adsorbidos en la posición donde se localizan al llegar al sustrato, y no existe colisión entre los átomos, por lo

que el crecimiento de la película es de espesor uniforme, es decir en monocapa, y se forma una capa a la vez.

- c) Modelo de Stranki-Krastanov. Es la combinación de los casos anteriores. Primero se forma una o varias monocapa, y luego el crecimiento continúa en forma de islas.

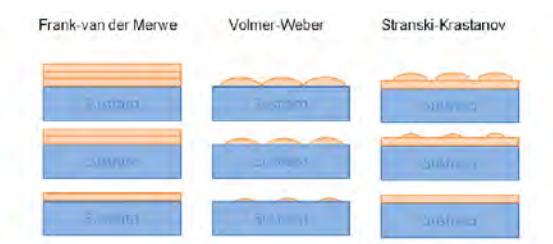


Figura 2.2 Representación de los 3 modelos de crecimientos de películas delgadas.

La formación de películas delgadas sobre un sustrato es un proceso delicado, donde existen muchos parámetros que modifican tanto la naturaleza del proceso como el resultado final, estos son; la temperatura del sustrato, la estructura del sustrato, la limpieza del sustrato, la energía de los átomos al llegar a la superficie, naturaleza del sustrato y del material de deposición, presión de la cámara de recubrimiento entre otros. En la figura 2.3 se observa un esquema de la formación de películas delgadas, sin embargo este proceso es más complicado de lo que se representa en la imagen.

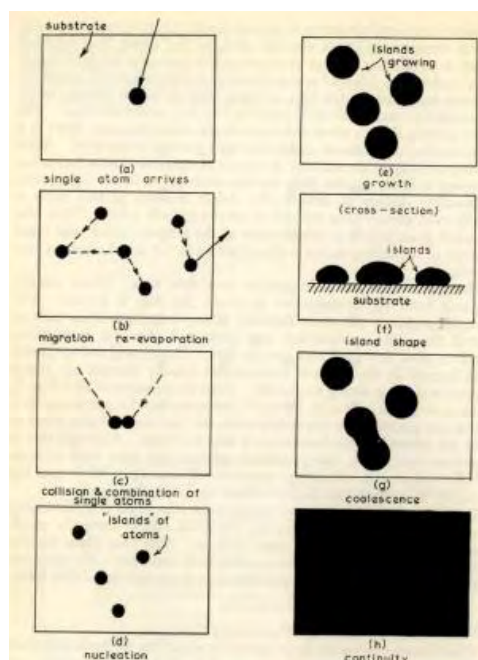


Figura 2.3. Esquema simple de las etapas en la formación de una película delgada [1].

2.3 Óptica en películas delgadas.

2.3.1 Consideraciones generales.

El desarrollo de la óptica en películas delgadas viene dado por la teoría electromagnética de maxwell. En la actualidad la teoría desarrollada ha demostrado ser muy precisa a la hora de explicar y desarrollar fenómenos experimentales, sin embargo en muchos casos el desarrollo de una teoría que se adapte totalmente a la naturaleza resulta ser muy complicado de desarrollar, además de no ser necesario resultados tan precisos para las aplicaciones y la comprensión del fenómeno, también se pueden presentar diferencias entre la teoría y el experimento debido a parámetros del experimento no tomados en cuenta en la teoría. Por lo tanto para el desarrollo del modelo de este trabajo se tomaran en cuenta las siguientes consideraciones:

- i. La masa de la película es un medio óptico isotrópico, cuyo índice de refracción es real para materiales dieléctricos, y complejo para metales.
- ii. Dos medios adyacentes se encuentran separados por un plano.
- iii. Puede existir una dependencia de la refracción con las coordenadas espaciales, sin embargo para propósitos prácticos solo se puede tomar en cuenta la dependencia del índice de refracción con la profundidad de la película, es decir inhomogenidad normal.
- iv. Las dimensiones laterales de la película se consideran infinitas.
- v. El tipo de la estructura de la película evaporada puede causar algo de dispersión o absorción que no se toma en cuenta en los modelos teóricos.
- vi. La rugosidad en el sustrato y en las películas puede causar dispersión.
- vii. A nivel experimental se puede presentar anisotropía del material debido al estrés que se forma en el arreglo.
- viii. Se puede producir una inhomogenidad del material debido a las condiciones de la evaporación al realizar el recubrimiento.
- ix. En algunos casos se puede suponer que el sustrato tiene un espesor infinito.

2.3.2 La ley de Snell.

El fenómeno de refracción consiste en la modificación de la trayectoria de la luz al pasar de un medio material a otro. La refracción se puede observar por ejemplo, al introducir un lápiz en un vaso con agua, y observar desde una posición lateral al vaso como se observa en la fig. 2.4

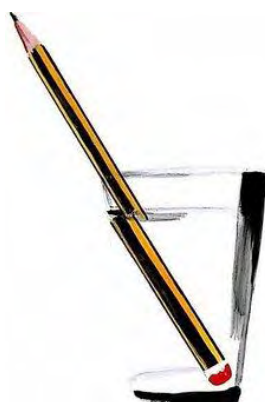


Figura 2.4. Ley de Snell

La ley de la refracción o ley de Snell, recibe su nombre en honor a Willebrord Snel van Royen, quien en 1621 presenta su formulación [5]. A través del principio de Fermat y el uso de la óptica geométrica se obtiene la formulación de la ley de Snell, las ecuaciones de maxwell permiten obtener la ecuación de la ley de Snell mediante la óptica ondulatoria. A continuación su representación matemática:

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \quad (2.1)$$

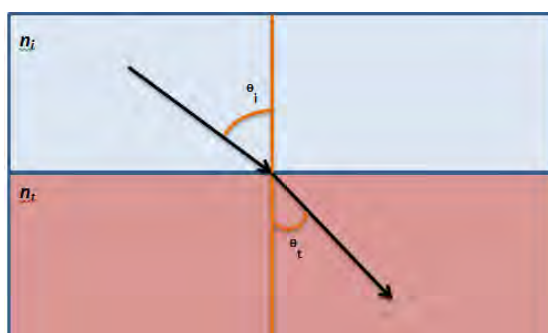


Figura 2.5. Esquema de la ecuación de la ley de Snell

2.3.3 Modelo teórico.

El desarrollo de la teoría óptica en películas delgadas tiene su base en las ecuaciones de maxwell:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.5)$$

Donde la definición de los parámetros de la ecuación se muestra a continuación:

Tabla2.1 Variables y constantes ópticas.

Nombre	Símbolo	Definición	Ecuación	Unidad	Valor
Densidad de corriente	$\mathbf{j}$	Corriente eléctrica por unidad de área	-	A/m ²	-
Desplazamiento eléctrico	$\mathbf{D}$	Campo eléctrico por permitividad del medio	$\epsilon \cdot \mathbf{E}$	C/m ²	-
Permitividad eléctrica	ϵ	Tendencia de un material a polarizarse ante la aplicación de un campo eléctrico	-	C ² / N.m ²	-
Permitividad eléctrica en el vacío	ϵ_0	Efecto del vacío sobre el campo eléctrico.	-	C ² / N.m ²	8,85.10 ⁻¹²
Permitividad eléctrica relativa	ϵ_r	-	ϵ / ϵ_0	-	-
Permeabilidad magnética	μ	Capacidad de un medio para atraer y hacer pasar a través de el, campos magnéticos.	-	N·A ⁻²	-
Permeabilidad magnética del vacío	μ_0	Efecto del vacío sobre el campo magnético.	-	N·A ⁻²	4 π .10 ⁻⁷
Permeabilidad magnética relativa	μ_r	-	μ / μ_0	-	-
Admitancia óptica del vacío	y	Constante que relaciona las magnitudes de los campos eléctrico y magnético de una onda en el vacío.	$(\epsilon_0 / \mu_0)^{1/2}$	S	2.654.10 ⁻³

Al resolver las ecuaciones para el caso de un medio material no conductor se llega a la conocida ecuación de onda:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.6 \text{ A})$$

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.6 \text{ B})$$

Cuya solución es una onda plana, imponiendo su desplazamiento en el eje z se puede escribir como:

$$\mathbf{E} = \epsilon \exp[i\omega \left(t - \frac{z}{v}\right)] \quad (2.7)$$

Es bien conocido que la solución a la ecuación de onda puede tener una amplitud compleja, por lo que se debe incluir en la solución, siendo una solución más general:

$$\mathbf{E} = \epsilon \exp(i\phi) \exp[i\omega \left(t - \frac{z}{v}\right)] \quad (2.8)$$

Al sustituir la solución en la ecuación de onda se observa que para que (2.6) sea solución de (2.5 A) se debe cumplir:

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \omega^2 \epsilon \mu - i\omega \mu \sigma \quad (2.9)$$

Para una onda en el vacío su velocidad es la de la luz, σ es cero, y los valores de permeabilidad y permitividad son los del vacío. Debido a esto la ecuación (2.8) se reescribe para este caso como:

$$c^2 = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \quad (2.10)$$

Luego se multiplica (2.6) por (2.7) y se divide por ω^2 para obtener:

$$\frac{c^2}{v^2} = \frac{\epsilon \mu}{\epsilon_0 \mu_0} - i \frac{\mu \sigma}{\omega \epsilon_0 \mu_0} \quad (2.11)$$

El cociente de las velocidades se denomina N, arreglando (2.11) y usando la tabla 2.1 se tiene:

$$N^2 = \epsilon_r \mu_r - i \frac{\mu_r \sigma}{\omega \epsilon_0} \quad (2.12)$$

La ecuación (2.12) es muy común en óptica y es escrita de la siguiente manera:

$$N = n - ik \quad (2.13)$$

Donde N es el índice de refracción complejo del material, n es la parte real del índice de refracción, comúnmente llamado índice de refracción, ya que en muchos materiales N es real. Por último k se conoce como el coeficiente de extinción [2].

Al sustituir (2.12) en la solución de la ecuación de onda y ordenando se tiene:

$$E = \epsilon \exp \left[- \left(\frac{2\pi k}{\lambda} \right) z \right] \exp \left[\left(i\omega t - \frac{2\pi n}{\lambda} \right) z \right] \quad (2.14)$$

Un resultado de gran importancia en el estudio de las ecuaciones de electromagnetismo es el hecho de que las ondas eléctricas y magnéticas son perpendiculares entre sí, y a la vez con la dirección de propagación de la onda, hecho que se puede describir como:

$$\frac{N}{c\mu} (\hat{S} \times \vec{E}) = \vec{H} \quad (2.15)$$

Donde $\hat{S}$ es la dirección de propagación. El coeficiente $\frac{N}{c\mu}$ es de suma importancia en óptica y se conoce como “admitancia óptica del medio” la cual se define como:

$$y = N\mu \quad (2.16)$$

Es importante resaltar el hecho de que las interacciones magnéticas para fenómenos ópticos son relativamente muy pequeñas, por lo que la permitividad magnética relativa es 1, hecho que permite obtener la ecuación (2.16) [2].

Ahora estudiaremos el caso de una onda electromagnética propagándose entre 2 medios con diferente índice de refracción.

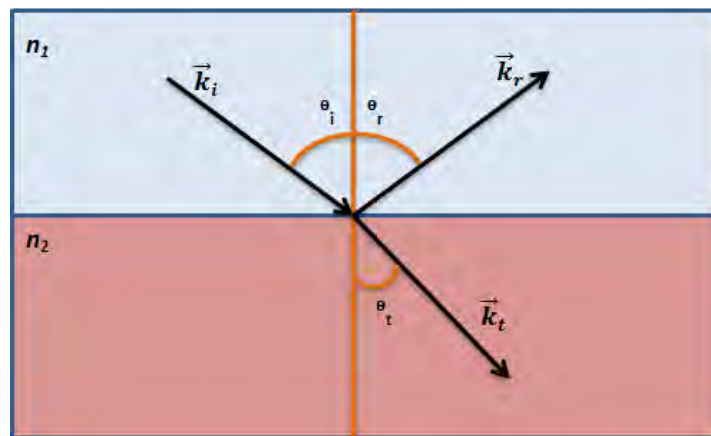


Figura 2.6. Representación de una onda electromagnética atravesando un material.

En la figura 2.6 se observa una onda plana k incidente con un ángulo de incidencia, entre 2 materiales, suponemos el caso de ausencia de absorción, por lo que se utiliza el índice de refracción real. La onda plana puede ser descompuesta en 3 ondas diferentes, una incidente, una reflejada y una transmitida.

Para que las ecuaciones de Maxwell se cumplan se deben satisfacer ciertos requerimientos denominados “condiciones de frontera”. Las condiciones de frontera exigen que tanto las componentes eléctricas y magnéticas de la onda, las cuales son tangentes a la interfaz entre los 2 medios deben ser continuas [5].

Los cálculos utilizando direcciones arbitrarias (siempre y cuando sean perpendiculares a la dirección de propagación) suelen ser complicados, sin embargo, existen 2 elecciones de la dirección de las componentes que son privilegiadas, permitiendo realizar los cálculos de una manera más sencilla. Estas direcciones de ondas particulares se definen a continuación:

-Ondas P: esta onda electromagnética se caracteriza por tener su componente eléctrica en el plano de incidencia de la onda o paralelo a este, es decir en el plano que contiene el vector de desplazamiento de la onda. En la figura 2.7 Se observa la orientación de las componentes de la onda electromagnética P para la onda incidente, reflejada y transmitida. En este caso se observa que la componente eléctrica se encuentra en el plano xy del sistema de referencia utilizado.

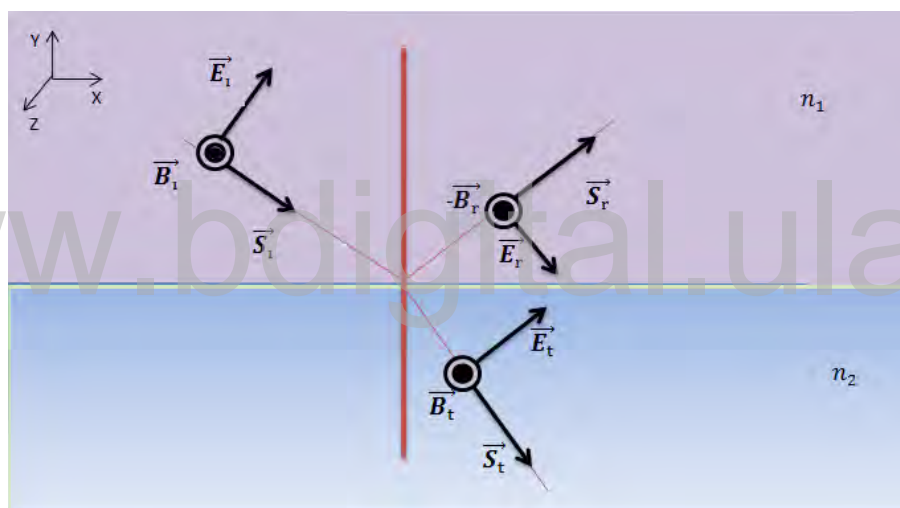


Figura 2.7. Direcciones de las ondas incidentes, reflejadas y transmitidas para una onda P.

-Ondas S: para el caso de la onda S la componente eléctrica es perpendicular a la componente eléctrica de la onda P, además de perpendicular al plano de incidencia de la onda. En la figura 2.8 se describe la orientación de las componentes de la onda S, estando localizada la componente eléctrica en el plano xz.

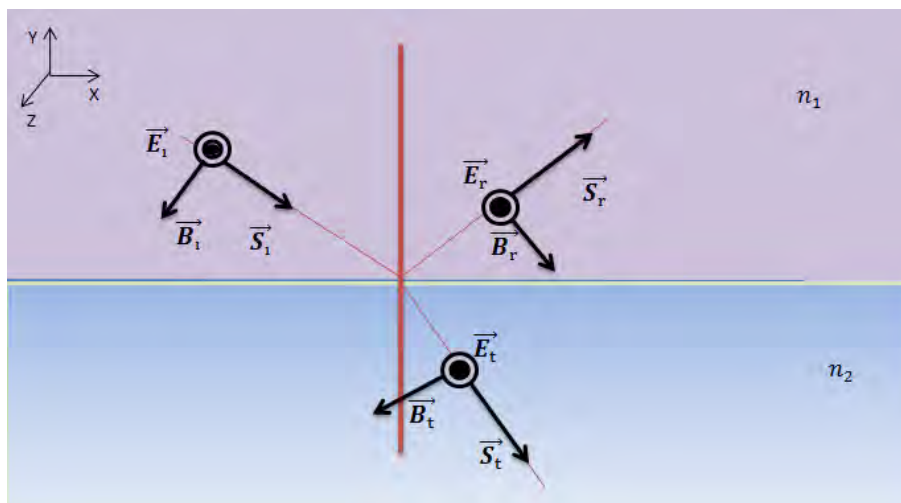


Figura 2.8. Direcciones de las ondas incidentes, reflejadas y transmitidas para una onda S.

Es fácil demostrar que cualquier onda electromagnética con polarización arbitraria, se puede representar como la suma de una onda S y una P adecuada, por lo que para simplificar los cálculos se realizan solamente para las componentes S y P.

2.3.2.1 luz polarizada P entre medios materiales.

Utilizando las condiciones de frontera para la componente eléctrica se tiene:

$$\epsilon_i \cos \theta_i + \epsilon_r \cos \theta_r = \epsilon_t \cos \theta_t \quad (2.17)$$

Donde $\theta_i = \theta_r = \theta_0$, ϵ es la intensidad del campo eléctrico (se utiliza un cambio en la notación para asemejar a la notación usada en libros de óptica). Para la componente magnética se tiene:

$$y_0 \epsilon_i - y_0 \epsilon_r = y_t \epsilon_t \quad (2.18)$$

La ecuación anterior se representa en términos de las componentes eléctricas usando la ecuación (2.15). Otro aspecto importante es el signo negativo en la ecuación, el cual se elige por conveniencia en la componente magnética de la onda reflejada, para mantener la dirección de la componente eléctrica reflejada. Esto se hace ya que la componente eléctrica es más importante, debido a que interactúa más con la materia que la componente magnética.

Utilizando reducción matemática en las ecuaciones (2.17) y (2.18) se obtiene:

$$\frac{\epsilon_r}{\epsilon_i} = \frac{y_0 \cos \theta_t - y_t \cos \theta_0}{y_0 \cos \theta_t + y_t \cos \theta_0} \quad (2.19)$$

$$\frac{\epsilon_t}{\epsilon_i} = \frac{2y_0 \cos \theta_0}{y_0 \cos \theta_t + y_t \cos \theta_0} \quad (2.20)$$

2.3.2.2 luz polarizada S entre medios materiales.

Para este caso las condiciones de frontera definen las siguientes ecuaciones:

$$\epsilon_i + \epsilon_r = \epsilon_t \quad (2.21)$$

$$y_0 \epsilon_i \cos \theta_i - y_0 \epsilon_r \cos \theta_r = y_t \epsilon_t \cos \theta_t \quad (2.22)$$

Procediendo de manera análoga al caso de la onda P se tiene:

$$\frac{\epsilon_r}{\epsilon_i} = \frac{y_0 \cos \theta_0 - y_t \cos \theta_t}{y_t \cos \theta_t + y_0 \cos \theta_t} \quad (2.23)$$

$$\frac{\epsilon_t}{\epsilon_i} = \frac{2y_0 \cos \theta_0}{y_0 \cos \theta_0 + y_t \cos \theta_t} \quad (2.24)$$

Las expresiones ϵ_r/ϵ_i y ϵ_t/ϵ_i en la literatura se les asigna las letras r y t respectivamente y se conocen como coeficientes de reflexión y transmisión.

2.3.2.3 reflectancia y transmitancia.

Las ecuaciones (2.19), (2.20), (2.23) y (2.24) se conocen como ecuaciones de fresnel, las cuales dependen de la elección de las direcciones de las componentes de la onda electromagnética incidente, reflejada y transmitida. Las ecuaciones de fresnel permiten derivar importantes resultados en óptica, a continuación se usaran para definir los conceptos de reflectancia y transmitancia.

Supongamos que un haz de luz de forma circular incida sobre una superficie, la cual es iluminada en un área A por el haz. Ahora se procede a calcular el flujo de energía, el cual se realiza a través del vector de poynting:

$$\vec{S} = c^2 \epsilon_0 \vec{E} \times \vec{H} \quad (2.25)$$

El cual permite definir la irradiancia o densidad de flujo, el cual es el valor medio del vector de poynting, remplazando la componente magnética por su análogo eléctrico y modificando la ecuación se tiene:

$$I = \frac{c\epsilon_0}{2} E^2 \quad (2.26)$$

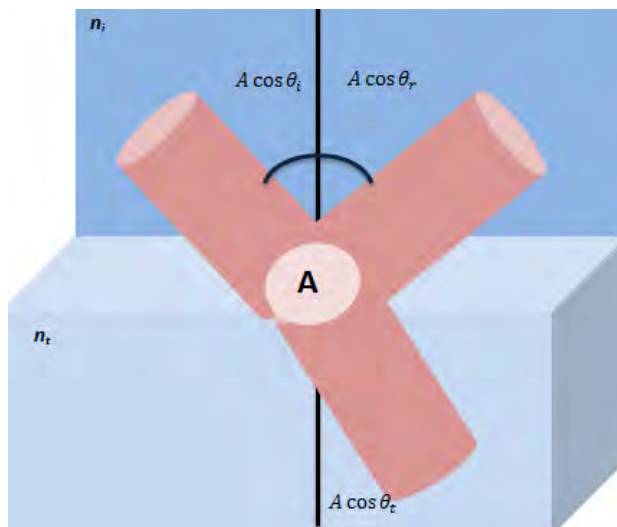


Figura 2.9 Flujo de energía incidente, reflejado y transmitido en un área A para un haz de luz.

El valor del flujo de energía en una sección transversal de área A para el haz de luz incidente, reflejado y transmitido se deduce de la figura 2.9 dando como resultado:

$$I_i A \cos \theta_i \quad (2.27a)$$

$$I_r A \cos \theta_r \quad (2.27b)$$

$$I_t A \cos \theta_t \quad (2.27c)$$

Utilizando los conceptos anteriores se define la reflectancia como la razón entre el flujo de energía reflejado y el incidente, y la transmitancia es definida como la razón entre el flujo de energía transmitido y el flujo de energía incidente. Usando las expresiones anteriores se tiene:

$$R \equiv \frac{I_r A \cos \theta_r}{I_i A \cos \theta_i} \quad (2.28)$$

$$T \equiv \frac{I_t A \cos \theta_t}{I_i A \cos \theta_i} \quad (2.29)$$

Utilizando la ecuación (2.19), la relación entre el ángulo incidente y el reflejado y la relación entre las propiedades eléctricas y magnéticas de los 2 medios se tiene:

$$R = \left(\frac{\epsilon_r}{\epsilon_i} \right)^2 = r^2 \quad (2.30)$$

$$T = \frac{y_t \cos \theta_t}{y_0 \cos \theta_i} \left(\frac{\epsilon_t}{\epsilon_i} \right)^2 = \left(\frac{y_t \cos \theta_t}{y_0 \cos \theta_i} \right) t^2 \quad (2.31)$$

La conservación de la energía permite obtener un resultado de suma importancia; $T+R=1$, este resultado es válido siempre y cuando los valores de T y R estén normalizados, y no haya absorción óptica en el material.

El caso de absorción óptica es más complicado, para este se utiliza el índice de refracción N , el cual es complejo, lo cual modifica las ecuaciones para los coeficientes de reflexión y transmisión. Por otra parte la presunción de separar el flujo de energía en incidente, reflejado y transmitido no es del todo correcto para medios absorbentes.

No obstante este caso no presenta problemas para la mayoría de los cálculos en películas delgadas antirreflejos, ya que, por lo general se utilizan intervalos de longitud de onda donde los materiales escogidos o no presentan absorción óptica, o esta es muy pequeña, por lo que su efecto se puede omitir.

2.3.2.4 El método matricial.

Una vez definidos los conceptos de transmitancia y reflectancia el siguiente paso es desarrollar un método para su cálculo en películas delgadas, el método a desarrollar a continuación es conocido como el método matricial, el cual fue desarrollado por Florin. Abelés en 1950. Este es el método más utilizado para la simulación de recubrimientos antirreflejos.

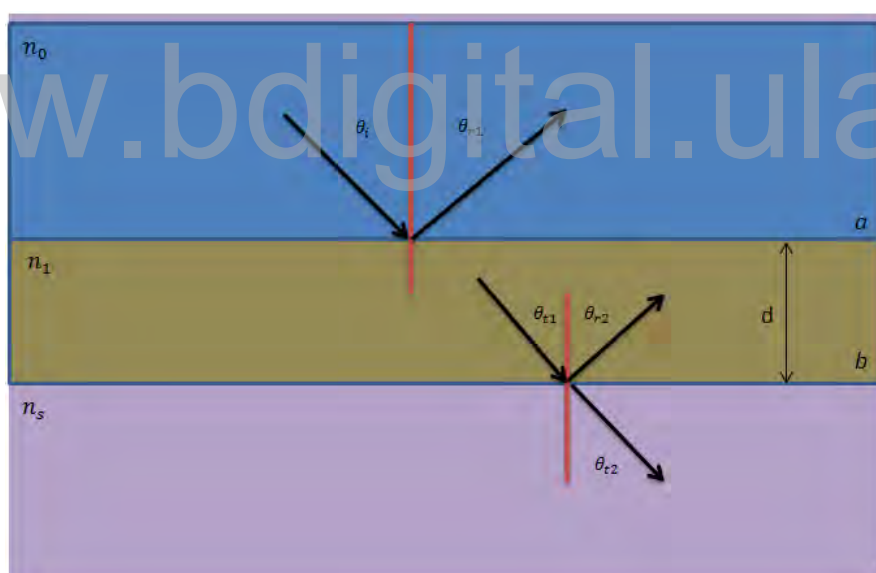


Figura 2.10. Onda electromagnética a través de 3 medios (vacío, película delgada y sustrato).

Consideremos la figura 2.10, donde se tiene una película de espesor d sobre un sustrato, para este caso existen 2 fronteras; la frontera a entre el vacío (aire) y la película, y la frontera b entre la película y el sustrato. Las componentes eléctricas y magnéticas (donde las componentes magnéticas se expresan en términos de las componentes eléctricas) en las fronteras, son las siguientes:

$$\epsilon_a = \epsilon_{ai} + \epsilon_{ar} = \epsilon_{at} \quad (2.32A)$$

$$\mathcal{H}_a = \eta_0 \epsilon_{ai} - \eta_0 \epsilon_{ar} = \eta_1 \epsilon_{at} \quad (2.32B)$$

$$\epsilon_b = \epsilon_{bi} + \epsilon_{br} = \epsilon_{bt} \quad (2.33A)$$

$$\mathcal{H}_b = \eta_1 \epsilon_{bi} - \eta_1 \epsilon_{br} = \eta_1 \epsilon_{bt} \quad (2.33B)$$

Luego sumando las ecuaciones (2.33A) y (2.33B), y restando (2.33A) y (2.33B) se tiene:

$$\epsilon_{bi} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{H}_b}{\eta_1} + \epsilon_b \right) \quad (2.34)$$

$$\epsilon_{br} = \frac{1}{2} \left(\frac{-\mathcal{H}_b}{\eta_1} + \epsilon_b \right) \quad (2.35)$$

$$\mathcal{H}_{bi} = \frac{1}{2} (\mathcal{H}_b + \eta_1 \epsilon_b) \quad (2.36)$$

$$\mathcal{H}_{br} = \frac{1}{2} (\mathcal{H}_b - \eta_1 \epsilon_b) \quad (2.37)$$

Ahora tenemos las componentes eléctricas y magnéticas incidente y reflejada en la frontera b. Para obtener estas componentes en la frontera a, se usa el hecho de que la onda en la frontera a y b tendrán componentes iguales, diferenciándose solamente por un factor de fase. El cual se expresa como:

$$\exp_{\pm}^{\pm}(i\delta)$$

Con δ igual a:

$$\frac{2\pi n_1 d \cos \theta_t}{\lambda_0}$$

Por lo tanto las componentes en la frontera a se representan como las componentes en la frontera b por el factor de fase, es decir:

$$\epsilon_{ai} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{H}_b}{\eta_1} + \epsilon_b \right) e^{(i\delta)} \quad (2.38)$$

$$\epsilon_{ar} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{H}_b}{\eta_1} - \epsilon_b \right) e^{-(i\delta)} \quad (2.39)$$

$$\mathcal{H}_{ai} = \frac{1}{2} (\mathcal{H}_b + \eta_1 \epsilon_b) e^{(i\delta)} \quad (2.40)$$

$$\mathcal{H}_{ar} = \frac{1}{2} (\mathcal{H}_b - \eta_1 \epsilon_b) e^{-(i\delta)} \quad (2.41)$$

A continuación se suman las ecuaciones (2.38) y (2.39) luego las (2.40) y (2.41) dando como resultado:

$$\epsilon_a = \epsilon_b \cos \delta + \mathcal{H}_b \frac{i \sin \delta}{\eta_1} \quad (2.42)$$

$$\mathcal{H}_a = \epsilon_b i \eta_1 \sin \delta + \mathcal{H}_b \cos \delta \quad (2.43)$$

Las ecuaciones (2.42) y (2.43) se pueden representar en forma matricial como se muestra a continuación:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_a \\ \mathcal{H}_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i \sin \delta_1}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_b \\ \mathcal{H}_b \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

Donde la matriz se define como:

$$\mathcal{M}_{ab} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i \sin \delta_1}{\eta_1} \\ i \eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

La matriz $\mathcal{M}$ se conoce como matriz característica, y relaciona los campos electromagnéticos entre 2 fronteras adyacentes, el subíndice en el coeficiente δ indica la frontera donde se calcula la fase de la onda. Para obtener una ecuación general para un número mayor de capas, se agrega otra película al recubrimiento, por lo que se tendría 3 fronteras (a,b,c), realizando un procedimiento análogo al anterior la relación entre los campos electromagnéticos en las fronteras b y c viene dado como:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_b \\ \mathcal{H}_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_2 & \frac{i \sin \delta_2}{\eta_2} \\ i \eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_c \\ \mathcal{H}_c \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

$$\mathcal{M}_{bc} = \begin{bmatrix} \cos \delta_2 & \frac{i \sin \delta_2}{\eta_2} \\ i \eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

Ahora de (2.44) se obtiene una ecuación para $\mathcal{M}_{ab}$:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_b \\ \mathcal{H}_b \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \epsilon_a \\ \mathcal{H}_a \end{bmatrix} = \mathcal{M}_{ab} \quad (2.48)$$

Luego se multiplica matricialmente (2.46) y (2.48) se tiene:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_a \\ \mathcal{H}_a \end{bmatrix} = \mathcal{M}_{ab} \mathcal{M}_{bc} \begin{bmatrix} \epsilon_c \\ \mathcal{H}_c \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

Para tener una notación más simple y consistente se sustituyen los índices de las matrices características por los índices de la variable δ , por lo que la ecuación (2.49) queda como:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \mathcal{H}_1 \end{bmatrix} = \mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2 \begin{bmatrix} \epsilon_2 \\ \mathcal{H}_2 \end{bmatrix} \quad (2.50)$$

El procedimiento anterior permite obtener una formula general para un sistema con m capas:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \mathcal{H}_1 \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^m \begin{bmatrix} \cos \delta_r & \frac{\sin \delta_r}{\eta_r} \\ i\eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} \epsilon_{m+1} \\ \mathcal{H}_{m+1} \end{bmatrix} \quad (2.51a)$$

$$\begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \mathcal{H}_1 \end{bmatrix} = \{ \prod_{r=1}^m \mathcal{M}_r \} \begin{bmatrix} \epsilon_{m+1} \\ \mathcal{H}_{m+1} \end{bmatrix} \quad (2.51b)$$

Una vez teniendo la matriz característica para el conjunto de películas se procede a obtener una ecuación para calcular los coeficientes de transmisión y reflexión. Para esto se reescribe la matriz del lado izquierdo de la ecuación (2.51) en términos de las ondas incidentes y reflejada, y la del lado derecho en términos de la onda eléctrica transmitida. Se supone el caso más sencillo (con un recubrimiento de una película) siendo el cálculo general determinado de la misma manera. De la figura 2.10 se tiene:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_i + \epsilon_r \\ (\epsilon_i - \epsilon_r)\eta_0 \end{bmatrix} = \mathcal{M} \begin{bmatrix} \epsilon_t \\ \epsilon_t \eta_s \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

Donde los índice 0 y s denotan el vacío y el sustrato respectivamente. Desarrollando la ecuación (2.52), y utilizando las definiciones de las ecuaciones (2.30) y (2.31) se tiene:

$$r = \frac{\eta_0 \mathcal{M}_{11} + \eta_0 \eta_s \mathcal{M}_{12} - \mathcal{M}_{21} - \eta_s \mathcal{M}_{22}}{\eta_0 \mathcal{M}_{11} + \eta_0 \eta_s \mathcal{M}_{12} + \mathcal{M}_{21} + \eta_s \mathcal{M}_{22}} \quad (2.53)$$

$$t = \frac{2\eta_0}{\eta_0 \mathcal{M}_{11} + \eta_0 \eta_s \mathcal{M}_{12} + \mathcal{M}_{21} + \eta_s \mathcal{M}_{22}} \quad (2.54)$$

Expresiones que permiten obtener los valores de reflectancia y transmitancia a partir de las ecuaciones (2.30) y (2.31).

Referencias del capítulo.

- [1] K.D. Leaver, B.N. Chapman. (1971). Thin Films. Londres, UK: Wykheham publications.
- [2] H. Angus Mcleod. (2010). Thin Films Optical Filters. Tucson, USA: Taylor & Francis Book.
- [3] Zdenek Knittl. (1976) Optics in Thin Films. Praga, República Checa: Wyley & Sons.
- [4] Sánchez J. (2005) Trabajo académicamente dirigido: Deposición de capas constituyentes de estructuras multicapa con funciones controlables eléctricamente. Universidad de Zaragoza (2005).
- [5] Hecht Eugene. (2002). Optics. Nueva York, USA. Addison Wesley.
- [6] Ley de Snell. Recuperado el 16/02/2018 de <https://twitter.com/laleydesnell>.
- [7] Abeles F. (1950) La theorie generale des couches minces. J. Phys. Radium, 11 (7), pp.307-309.
- [8] Larouche S. y Martinu Ludvik. (2008). OpenFilters: open-source software for the design, optimization, and synthesis of optical filters. Applied Optics, 47,219-230.

www.bdigital.ula.ve

Capítulo III. Antecedentes.

La descripción de un modelo matemático para obtener la transmitancia y reflectancia en un arreglo de películas delgadas ha sido objeto de diferentes investigaciones desde hace mucho tiempo.

Florin Abelès [1], en su artículo publicado en 1950, desarrolla un modelo matemático el cual, representa propiedades de la película (espesor, índice de refracción, ángulo de incidencia de la luz) mediante una matriz 2×2 . Permitiendo representar un arreglo multicapa de películas delgadas como un producto de matrices 2×2 y mediante la manipulación matemática de estas obtener la transmitancia y reflectancia.

En la actualidad existen varios programas que pueden ser utilizados para estos cálculos como por ejemplo: OpenFilter, TFCALC y filmetric.

La compañía LIGHT TEC [2] tiene disponible el software de diseño óptico TFCALC™, el cual es ideal para simulación y optimización de recubrimientos ópticos de cualquier tipo. Este software se puede considerar el más completo del mercado, ya que contiene una extensa lista de materiales, diversos métodos de cálculos y optimización. La principal desventaja de este programa radica en el alto costo de su licencia de uso, lo cual dificulta su adquisición por parte de empresas y centros de investigación con pocos recursos financieros, otro inconveniente es que solo se encuentra disponible en inglés, lo cual requiere dominio del idioma para su uso.

La página filmetrics.com [3] ofrece una aplicación de licencia libre que puede ser usada desde su sitio web, la cual permite simular valores de transmitancia, reflectancia y absorbancia.

Esta aplicación tiene como ventaja la consideración de la absorción en sus cálculos, lo cual permite trabajar con un rango de longitud de onda bastante amplio. El poder utilizar el programa sin necesidad de instalarlo es a la vez una ventaja y desventaja, ya que permite ahorrar recursos de memoria en el computador, pero imposibilita su uso cuando no se tiene conexión a internet. Sin embargo, además no permite agregar nuevos materiales a la lista ya existente, solo se encuentra disponible en inglés, y en algunos casos, sus cálculos presentan errores.

El modelo matricial desarrollado por Abelès ha sido utilizado para la elaboración de software que puedan calcular propiedades ópticas en películas delgadas. OpenFilters es un software de licencia libre diseñado por Stéphane Larouche [4], que permite calcular propiedades ópticas en arreglos de películas delgadas mediante el método matricial.

OpenFilters posee grandes ventajas como el poder calcular la absorción en sus simulaciones, además de otros análisis ópticos como elipsometría, diagrama de admitancia etc. Su desventaja principal es que posee una base de datos reducida, y que presenta algunos errores, además de no poder visualizar los valores numéricos de las curvas.

Estas desventajas de los programas anteriores, pueden ser resueltas mediante la elaboración de un programa propio del CNTO, ya que esto permite modificar los parámetros del programa, para adaptarlo a las necesidades de los experimentos a realizar. Este programa funcionaria como una primera aproximación al momento de realizar los recubrimientos.

www.bdigital.ula.ve

Referencias del capítulo.

- [1] Abeles, F. (1950) La theorie generale des couches minces. J. Phys. Radium, 11 (7), pp.307-309.
- [2] <http://www.lighttec.fr/optical-design-software/tfcalc/>. Consultado el 21/04/2019.
- [3] <https://www.filmetrics.com/reflectance-calculator>. Consultado el 21/04/2019.
- [4] Larouche, S. y Martinu, L. (2008). OpenFilters: open-source software for the design, optimization, and synthesis of optical filters. Applied Optics, 47,(13),219-230.

www.bdigital.ula.ve

Capítulo IV. Procedimiento experimental.

4.1 Cálculo del índice de refracción.

Para determinar las matrices características es necesario primero obtener los índices de refracción para los materiales de las películas delgadas y los sustratos. Se selecciona y crea una lista de los materiales y sustratos más usados en recubrimientos ópticos.

Una vez creada la lista se utilizan el modelo de dispersión más apropiado a cada material, siendo los más comunes los modelos de Cauchy y Sellmeier, los coeficientes para estas ecuaciones se obtienen de los manuales SUMISA [1], SCHOTT [2], del manual de constantes ópticas [3] y de diversas publicaciones científicas. El rango de longitud de onda para el diseño del programa se encuentra entre 450nm y 1300nm. En la tabla 4.1 se muestran los materiales de la base de datos creada y en el anexo 1 se dan los coeficientes de las constantes.

Tabla 4.1 Lista de materiales de la base de datos a utilizar en el programa creado.

Material	Formula química	ecuación de dispersión
Dióxido de aluminio	Al_2O_3	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Oxinitruro de aluminio	AlON	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Borato de bario	BaB_2O_4	$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - D} - C\lambda^2$
Fluoruro de bario	BaF_2	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Oxido de berilio	BeO	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Calcita	CaCO_3	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Fluoruro de calcio	CaF_2	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Molibdato de calcio	CaMoO_4	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Wolframato de calcio	CaWO_4	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Bromuro de cesio	CsBr	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Cloruro de Cesio	CsCl	$n^2 = K + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - F^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - G^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - H^2} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - I^2} + \frac{E^2}{\lambda^2 - J^2}$
Cloruro de cobre	CuCl	$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - D} + \frac{C}{\lambda^2}$

Ioduro de cesio	CsI	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - F^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - G^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - H^2} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - I^2} + \frac{E^2}{\lambda^2 - J^2}$
Oxido de hafnio (estabilizado con Itrio)	HfO ₂ : 9.8%Y ₂ O ₃	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - F^2}$
Bromuro de potasio	KBr	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Cloruro de potasio	KCl	$n^2 = K + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - F^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - G^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - H^2} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - I^2}$
Fluoruro de potasio	KF	$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - E^2}$
Yoduro de potasio	KI	$n^2 = K + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - G^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - H^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - I^2} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - J^2} + \frac{E\lambda^2}{\lambda^2 - K^2} + \frac{F\lambda^2}{\lambda^2 - L^2}$
Niobato de litio	LiNbO ₃	$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - E^2}$
Espinela	MgAl ₂ O ₄	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - C^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2}$
Fluoruro de magnesio	MgF ₂	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - F^2}$
Oxido de magnesio	MgO	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - F^2}$
Bromuro de sodio	NaBr	$n^2 = K + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - F^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - G^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - H^2} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - I^2} + \frac{E^2}{\lambda^2 - J^2}$
Fluoruro de sodio	NaF	$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - E^2}$
Yoduro de sodio	NaI	$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - E^2}$
Fluoruro de plomo	PbF ₂	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - F^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - G^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - H^2} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - I^2}$
Fluoruro de estroncio	SrF ₂	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - F^2}$
Molibdato de estroncio	SrMoO ₄	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - C^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2}$
Titanato de estroncio	SrTiO ₃	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - F^2}$
Dióxido de titanio	TiO ₂	$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C}$
Granate de aluminio y ytrio	Y ₃ Al ₅ O ₁₂	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - C^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2}$
Oxido de itrio	Y ₂ O ₃	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - C^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2}$
Fosfito de zinc germanio	ZnGeP ₂	$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - E^2}$
Óxido de zinc	ZnO	$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C^2} - D\lambda^2$
Sulfuro de zinc (alfa)	ZnS	$n^2 - 1 = K + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - C^2}$

Dióxido de zirconio	ZrO2	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{F^2 - \lambda^2}$
Fused Silica	-	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D^2} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E^2} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - F^2}$
Vidrio común (Soda-lime glass)	-	$n^2 = A - B\lambda^2 + \frac{C}{\lambda^2}$
BK7	-	$n^2 - 1 = \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - D} + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - E} + \frac{C\lambda^2}{\lambda^2 - F}$

Después de crear la base de datos con los materiales seleccionados según los intereses del CNTO, se procede a escribir el código del programa utilizando el software "MatLabTM"

En la figura 4.1 y 4.2 se muestran el pseudocódigo y un diagrama de flujo del programa implementado

```

pseudocodigotablas: Bloc de notas
Archivo  Edición  Formato  Ver  Ayuda

    ecuación de dispersión.
    coeficientes de dispersión

    Salidas.
    Archivo de texto que contiene los índices de refracción y longitudes de onda.

Programa
Inicio
    obtener (material)
    obtener (formula de dispersión)
    obtener (coeficientes de dispersión)
    F== formula de dispersión
    para k=450 hasta 1300
        inicio
            RANGO ==1
            RANGO= RANGO +1

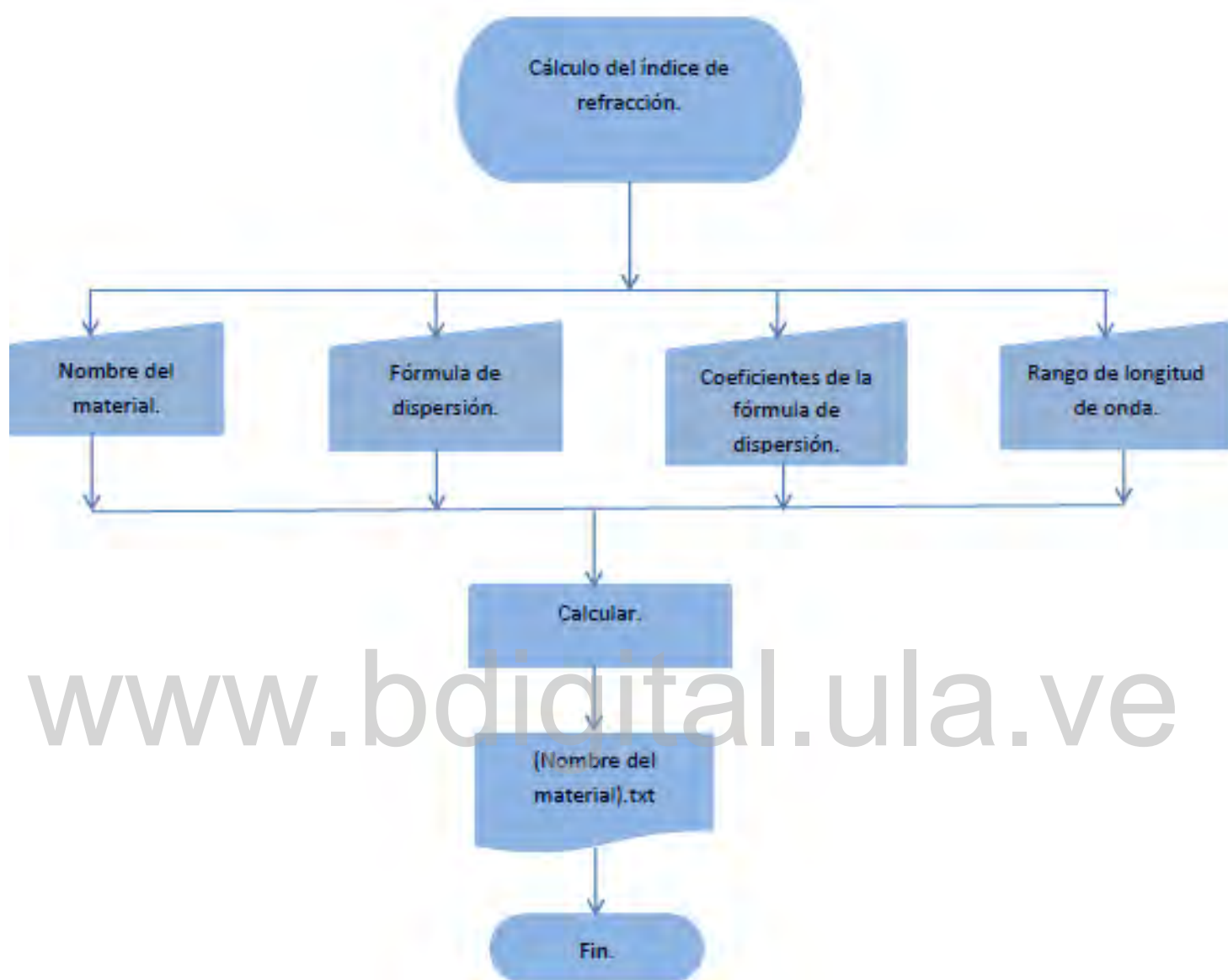
            k=k+2
        fin

        para t==1 hasta RANGO
            inicio
                n(t)= F
            fin

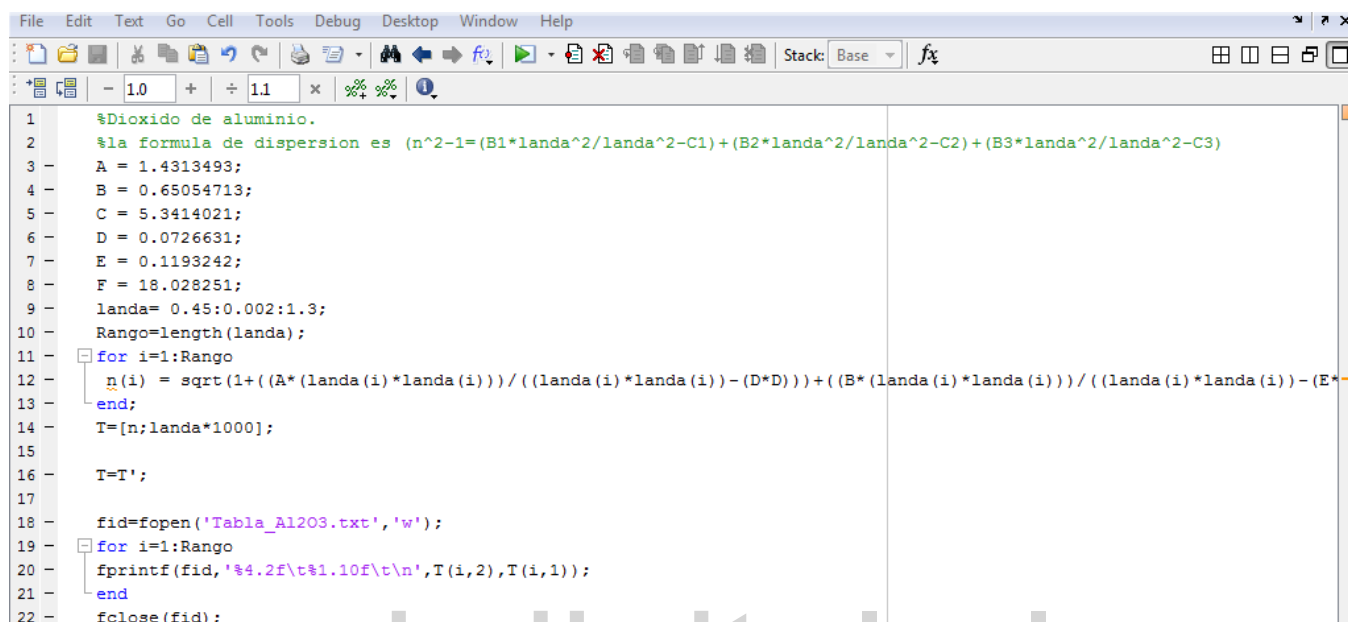
            Tabla_material.txt=n
    fin

```

Figura 4.1 Pseudocódigo de programa para calcular los índices e refracción de los materiales.



En figura 4.3 se muestra un ejemplo de un programa realizado en MATLAB™ para obtener el índice de refracción para el Dióxido de aluminio.



```

1  %Dióxido de aluminio.
2  %la formula de dispersion es (n^2-1)=(B1*landa^2/landa^2-C1)+(B2*landa^2/landa^2-C2)+(B3*landa^2/landa^2-C3)
3  A = 1.4313493;
4  B = 0.65054713;
5  C = 5.3414021;
6  D = 0.0726631;
7  E = 0.1193242;
8  F = 18.028251;
9  landa= 0.45:0.002:1.3;
10 Rango=length(landa);
11 for i=1:Rango
12     n(i) = sqrt(1+((A*(landa(i)*landa(i)))/((landa(i)*landa(i))-(D*D)))+(B*(landa(i)*landa(i)))/((landa(i)*landa(i))-(E*
13 end;
14 T=[n;landa*1000];
15
16 T=T';
17
18 fid=fopen('Tabla_Al2O3.txt','w');
19 for i=1:Rango
20     fprintf(fid,'%4.2f\t%1.10f\t\n',T(i,2),T(i,1));
21 end
22 fclose(fid);

```

Figura 4.3. Código de programa para el cálculo del índice de refracción del Al_2O_3

4.2 Cálculo de la transmitancia y reflectancia.

Para el caso del programa principal se creó un código utilizando MatLab™, para obtener los valores de transmitancia, reflectancia y sus respectivas gráficas. A continuación se presenta el código del programa, el cual puede ser dividido en 3 partes. La primera parte del código es la que presenta interacción con el usuario, en ella se introducen los valores de entrada del programa.

```

1  clc
2  close all
3  clear all
4  m = input ( ' m= ' ); %numero de capas
5  nvacio=1;
6  y=0.0027;
7  polarizacion = input ( ' polarizacion= ' );
8  %la polarizacion es 1 para polarizacion s y 2 para polarizacion p.
9  tetai = input ( ' teta= ' );
10 Steta = sin(tetai);
11 landapatron = input ('landapatron = ' );
12 S = input ( ' Enter Material sustrato= ' );
13 filename=['Tabla_' S '.txt']; % lectura txt propio del sustrato
14 SUSTRATO = ReadRefIndTabla(filename);
15 %ReadRefIndTabla COMANDO Q CREA LA TABLA
16 for i=1:m
17     ic=num2str(i);
18     disp (['Enter material file for film-' ic])
19     filemain = input ([' filemat',ic , '= ' ] );
20     filename=['Tabla_' filemain '.txt']; % lectura txt propio
21     [A,B] = ReadRefIndTabla(filename);
22     var = sprintf('Mat%02d',i);
23     eval([var ' =B;'])
24
25
26 end
27 for j=1:length(Mat01)
28     Mat00(j,1)=Mat01(j,1);
29     Mat00(j,2)=nvacio;
30 end
31 for k=1:m
32     esp = input ( ' esp= ' );
33     ES(k)=(esp*landapatron);
34 end

```

Figura 4.4. Código del programa. En la primera parte del código se introducen los valores de entrada del programa.

Luego, la siguiente parte del código realiza los cálculos de la reflectancia y transmitancia para el arreglo de películas delgadas. El siguiente paso es la obtención de los ángulos de difracción para el arreglo de películas delgadas, estos valores son obtenidos mediante la ley de Snell, y se calculan para cada una de las capas y en el rango de índice de refracción del programa.

```

35 - for j=1:length(Mat01)
36 -     for k=1:m
37 -         ang(:,1)= Mat01(:,1);
38 -         ang(:,2)= tetai;
39 -         nlast=eval(['Mat0' ,k+47, '(j,2)']);
40 -         nnext=eval(['Mat0' ,k+48, '(j,2)']);
41 -         ang(j,k+2)=asind((nlast/nnext)*sind(ang(j,k+1)));
42 -     end
43 - end
44 - for j=1:length(Mat01)
45 -     k=1;
46 -     nlast=eval(['Mat0' ,m+48, '(j,2)']);
47 -     nnext=SUSTRATO(2,j);
48 -     angS(j,k)=asind((nlast/nnext)*sind(ang(j,m+2)));
49 - end
50 - for j=1:length(Mat01)
51 -     ansalsus(j,1)= asind((SUSTRATO(2,j)/Mat00(j,2))*sind(angS(j)));
52 - end
53 - AR= [ang,angS,ansalsus];

```

Figura 4.5. Código del programa. Esta parte del código calcula los ángulos de difracción para el arreglo de películas.

El siguiente paso es calcular las diferencias de fase de la onda al atravesar cada capa del recubrimiento.

```

55 - for p=1:length(Mat01)
56 -     for k=1: m
57 -         ind(p)=eval(['Mat0' ,k+48, '(p,2)']);
58 -         d(p,k)=((2*pi)*ind(p)*ES(k)*cosd(AR(p,k+2)))/Mat01(p,1);
59 -     end
60 -     d(p,m+1)=((2*pi)*SUSTRATO(2,p)*dsust*cosd(AR(p,m+2)))/Mat01(p,1);
61 - end
62 - eta0=y*nvacio*cosd(tetai);
63 - if (polarizacion == 1)
64 -     for p=1:length(Mat01)
65 -         for k=1:m
66 -             ic=num2str(k);
67 -             ind(p)=eval(['Mat0' ,ic, '(p,2)']);
68 -             eta(p,k)=y*ind(p)*cosd(AR(p,k+2));
69 -         end
70 -         etas(p)=y*SUSTRATO(2,p)*cosd(AR(p,(m+3)));
71 -     end
72 - else
73 -     for p=1:length(Mat01)
74 -         for k=1:m
75 -             ic=num2str(k);
76 -             ind(p)=eval(['Mat0' ,ic, '(p,2)']);
77 -             eta(p,k)=y*ind(p)/cosd(AR(p,k+2));
78 -         end
79 -         etas(p)=y*SUSTRATO(2,p)/cosd(angS(p,1));
80 -     end
81 - end

```

Figura 4.6. Código del programa. Esta parte del código la diferencia de fase que se produce cuando la onda atraviesa cada capa.

Ahora se procede a calcular la matriz característica, se calculan m matrices características para cada longitud de onda, donde m es el número de capas del recubrimiento.

```

82 - M=eye(2,2);
83 - for k=1:m
84 -     ic=num2str(k);
85 -     for p=1:length(Mat01)
86 -         clear i;
87 -         M11=cos(d(p,k));
88 -         M11v(p,k)= M11;
89 -         M12=i*sin(d(p,k))/eta(p,k);
90 -         M12v(p,k)= M12;
91 -         M21=i*sin(d(p,k))*eta(p,k);
92 -         M21v(p,k)= M21;
93 -         M22=M11;
94 -         eval(['caracteristica' ,ic,'=[M11,M12;M21,M22];']);
95 -         CA=eval(['caracteristica' ,ic,]);
96 -         eval(['car',ic,'(:, :,p)= CA;']);
97 -     end
98 - end

```

Figura 4.7. Código del programa. Calculo de la matriz característica para cada capa en el rango de longitud de onda del programa.

Una vez obtenidos los valores de la matriz característica, se procede a calcular los valores de transmitancia y reflectancia. Cabe destacar que el programa calcula estos valores para todos los arreglos desde m-(m+1) capa, hasta las m capas.

```

118 - for k=1:m
119 -     for p=1:length(Mat01)
120 -         c=num2str(f);
121 -         if f==1
122 -             MM(:, :,p)= car1(:, :,p);
123 -         else
124 -             MM(:, :,p) = (eval(['car',c-1,'(:, :,p);']))*(eval(['car',c,'(:, :,p);']));
125 -         end
126 -         if AR(p,k)==90
127 -             tra(p)=0;
128 -             ref(p)=1;
129 -         else
130 -             ref(p)=(eta0*MM(1,1,p)+eta0*etas(p)*MM(1,2,p)-MM(2,1,p)-etas(p)*MM(2,2,p))/(eta0*MM(1,1,p)+eta0*etas(p)*MM(1,2,p)+MM(2,1,p)+etas(p)*MM(2,2,p));
131 -             tra(p)=2*eta0/(eta0*MM(1,1,p)+eta0*etas(p)*MM(1,2,p)+MM(2,1,p)+etas(p)*MM(2,2,p));
132 -         end
133 -         R(p,f)=ref(p)*conj(ref(p));
134 -         T(p,f)=(etas(p)/eta0)*(tra(p)*conj(tra(p)));
135 -     end
136 -
137 -
138 - end
139 -

```

Figura 4.8. Código del programa. Calculo de los valores de transmitancia y reflectancia para el arreglo de películas delgadas.

Por último el programa procede a realizar las gráficas de la transmitancia y la reflectancia.

```

144
145 -      x= Mat01(:,1);
146 -          plot(x,R', '--r');
147 -          plot(x,T', '--g');|
148 -          title('arreglo de películas delgadas')
149 -          xlabel('longitud de onda');
150 -          ylabel('transmitancia y reflectancia');

```

Figura 4.9. Código del programa. Se grafica la reflectancia y transmitancia del arreglo de películas delgadas.

En la figura 4.10 se presenta un diagrama de flujo del programa creado, donde se puede apreciar la lógica y orden del programa, así como la relación entre los cálculos, para hacer eficiente la ejecución del mismo.

El código anterior resulta eficiente. Para mejorar la interacción con los usuarios, se desarrolló una interfaz gráfica (GUI) que permite introducir los datos y su chequeo, con lo cual se disminuye la posibilidad de errores en la ejecución del programa desarrollado. En la figura 4.11 se muestra la ventana principal de la interfaz gráfica y a continuación se describe la ventana de la interfaz gráfica.

www.bdigital.ula.ve

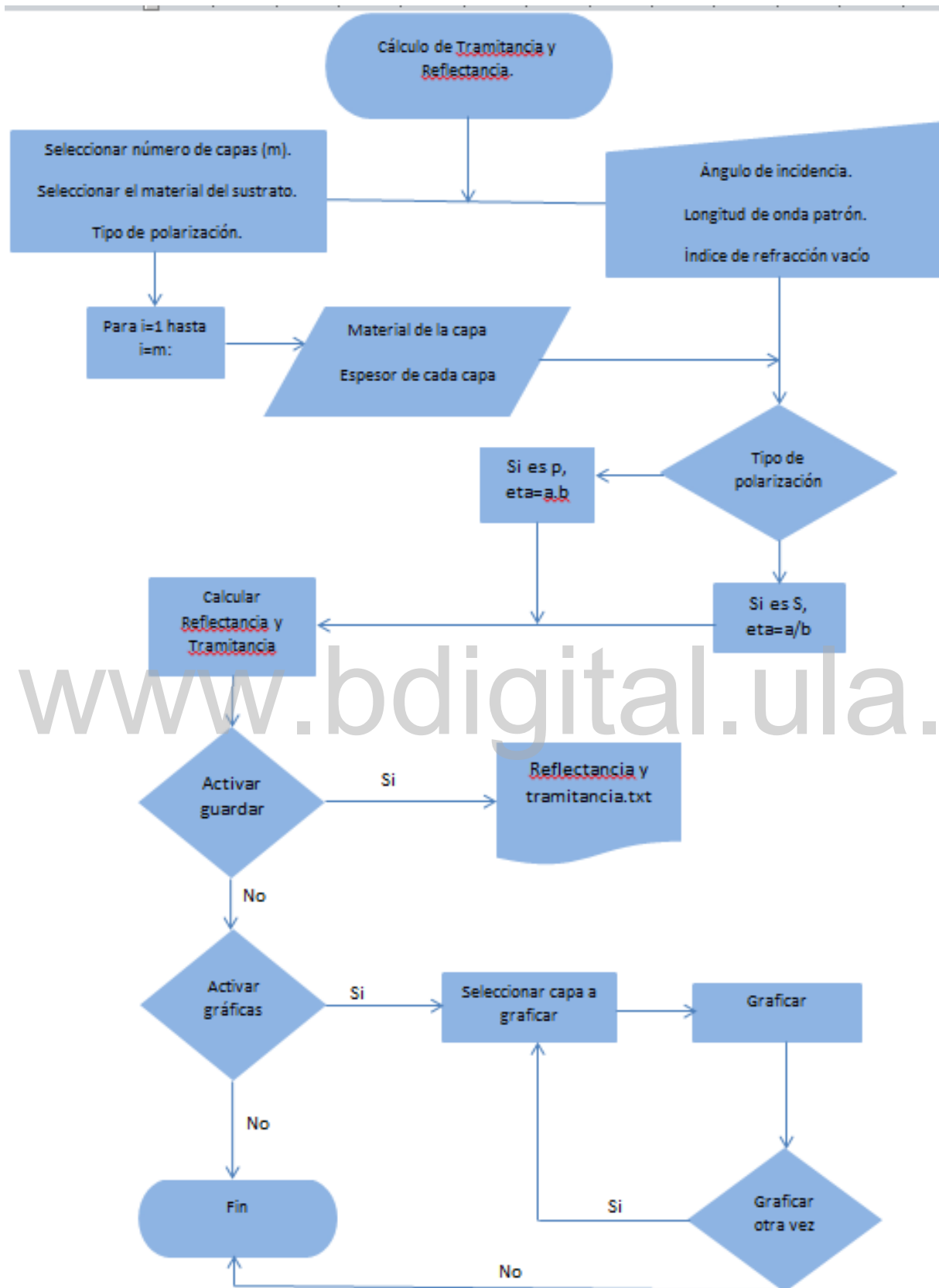


Figura 4.10. Diagrama de flujo del programa para calcular la transmitancia y reflectancia.

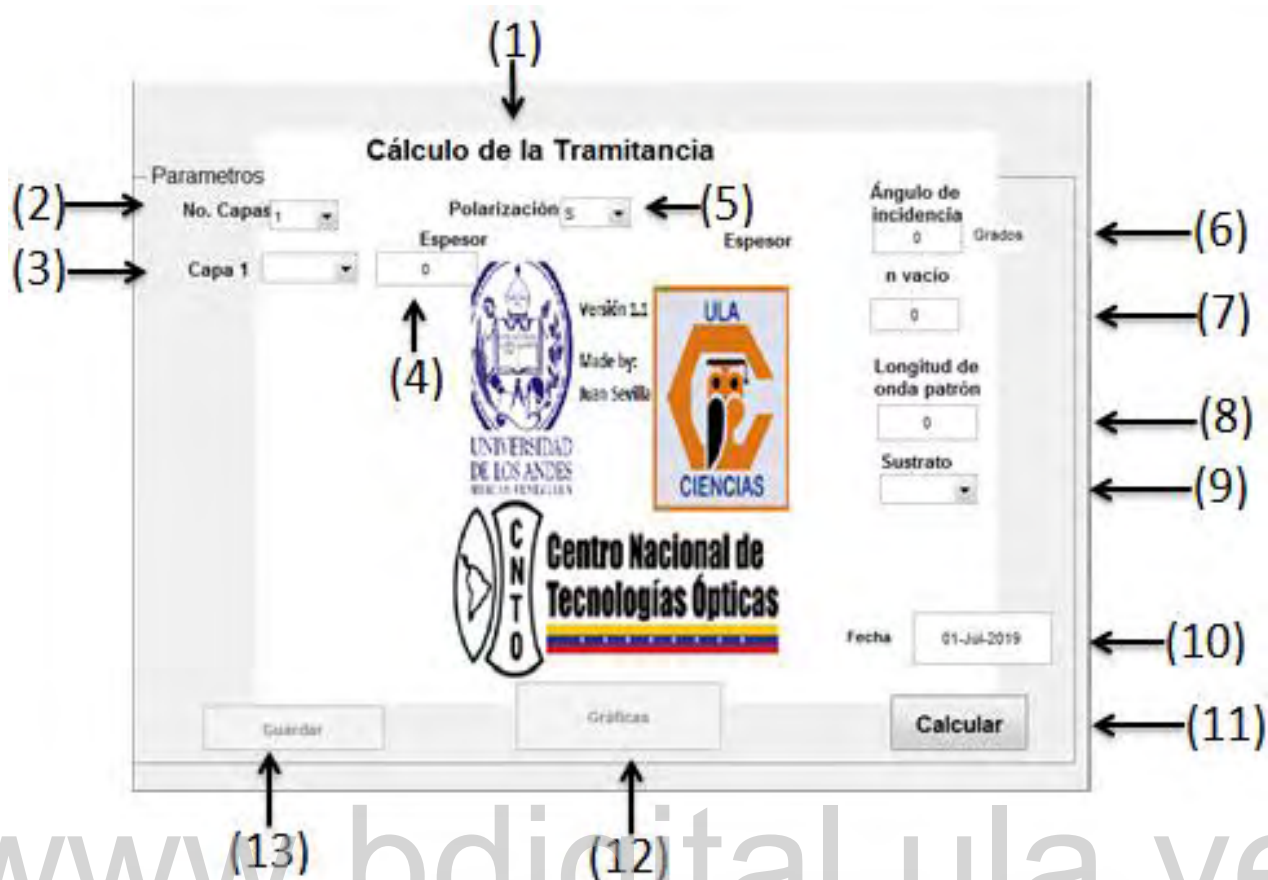


Figura 4.11. Ventana principal de la interfaz gráfica del programa.

A continuación se describen las partes de la interfaz gráfica y su función:

1. Título del programa.
2. Ventana para seleccionar el número de capas en el recubrimiento. Se pueden calcular recubrimientos de una a veinte capas, la configuración por defecto viene dada para una capa.
3. Ventana para seleccionar el material de cada capa. Al seleccionar el número de capas para el recubrimiento, se muestra en la interfaz un número de ventanas igual al número de capas. En cada ventana se selecciona el nombre (formula química) del material. Existe un total de 39 materiales a seleccionar para los recubrimientos. Al seleccionar el nombre del material el programa accede al archivo de la base de datos donde se guardan los índices de refracción.
4. Ventana para elegir el espesor del material. En esta ventana se introduce el espesor del material de cada capa. Al seleccionar el número de capas para el recubrimiento, se muestra en la interfaz un número de ventanas igual al número de capas. El espesor se introduce como un número real positivo, el cual es un múltiplo de la longitud de onda patrón (8), se elige esta forma de presentar los espesores por ser la más adecuada y utilizada en el diseño de recubrimientos antirreflejos.

5. Ventana para seleccionar el tipo de polarización. Al seleccionar esta ventana se despliega un menú con 2 opciones, S y P, las cuales se refieren al tipo de polarización a utilizar para realizar los cálculos.
6. Ventana para seleccionar el ángulo de incidencia. En esta ventana se introduce el ángulo de incidencia expresados en grados, y como un número entero, real y positivo.
7. Ventana para seleccionar el índice de refracción del vacío. Se introduce el valor del índice de refracción del primer medio, el cual se supone el vacío, por lo general este valor es 1.
8. Ventana para seleccionar la longitud de onda patrón. Se introduce el valor de la longitud de onda patrón en forma de un entero real positivo. La longitud de onda patrón es el valor del espectro electromagnético donde se desea obtener la mayor o menor reflectancia, viene expresado en nanómetros.
9. Ventana para seleccionar el material del sustrato. Esta ventana permite seleccionar a la lista de materiales que se pueden seleccionar como sustrato, en la base de datos creada existen 42 materiales para utilizar. Al seleccionar el material del sustrato el programa accede al archivo de la base de datos donde se encuentran guardado los índices de refracción.
10. Ventana indicadora de fecha. Esta ventana muestra la fecha del día donde se realizan las simulaciones, además la fecha se utiliza para dar nombre a los archivos que se desean guardar.
11. Botón calcular. Al accionar el botón “calcular” una vez seleccionado las características del recubrimiento a simular (sección 2 a 9), el programa calcula los valores de transmitancia y reflectancia para el recubrimiento simulado, cuyos valores son presentados en dos tablas de datos, una para la reflectancia y otra para la transmitancia. Al accionar el botón “calcular”, se activan para su uso los botones “gráficas” y guardar”.
12. Botón gráficas. Al accionar el botón “gráficas” se activa y visualiza una nueva interfaz gráfica para la creación de las gráficas de transmitancia y reflectancia del recubrimiento simulado. Más adelante se explica de manera más detallada esta interfaz gráfica.
13. Botón guardar. Al accionar el botón “guardar” se crean 2 archivos .txt que guardan los datos de transmitancia y reflectancia del recubrimiento simulado. Los archivos se crean con los nombres “transmitancia_tabla (nombre del sustrato y materiales de cada capa) (fecha de creación del recubrimiento)” y “reflectancia_tabla (nombre del sustrato y materiales de cada capa) (fecha de creación del recubrimiento)”. Los datos son guardados como una tabla de datos que contiene los valores de reflectancia y transmitancia para la simulación con cada capa del recubrimiento simulado. Este archivo posee la ventaja de estar guardado como un archivo de texto que puede ser revisado en cualquier editor de texto, por lo que no es necesario tener instalado el programa creado o MATLAB™.

En la figura 4.12 se muestran las nominaciones la interfaz gráfica, donde se colocan los resultados en forma de una gráfica de dispersión de transmisión o reflexión contra longitud de onda en el programa y a continuación se describe las partes de cada gráfico.

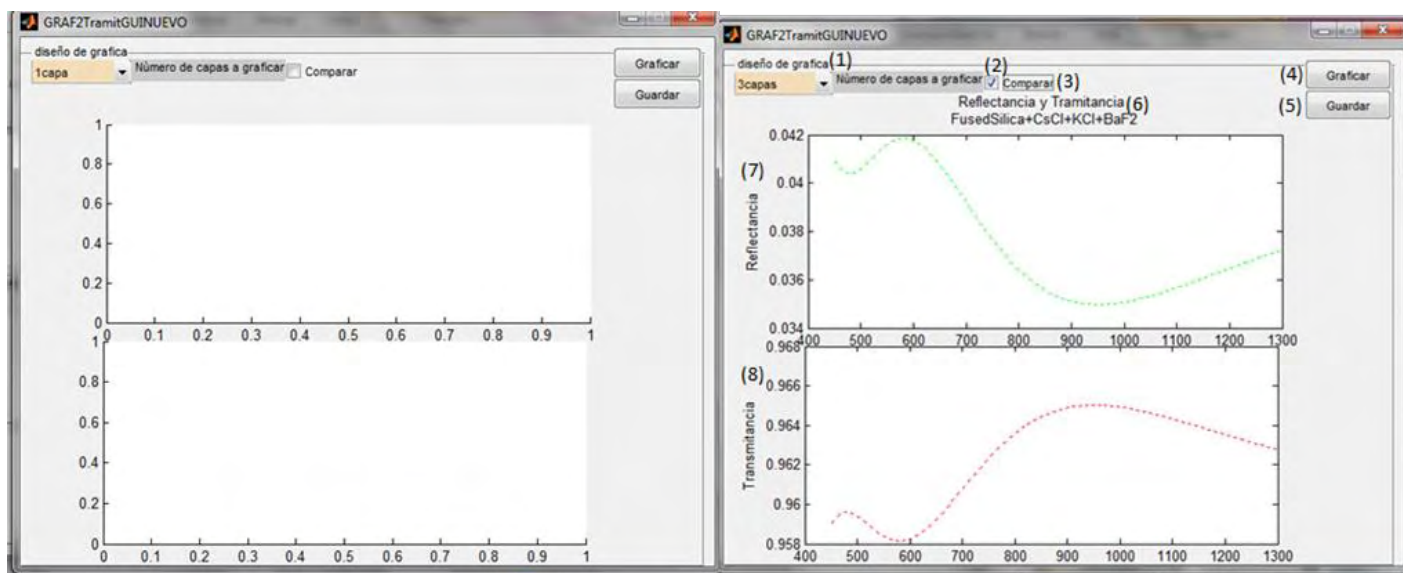


Figura 4.12. Interfaz gráfica para la elaboración de las gráficas del recubrimiento simulado. A la izquierda se observa la interfaz como se observa al activar el botón “graficas” en la interfaz principal. A la derecha se usa como ejemplo un recubrimiento de tres capas para graficar.

Los elementos de la interfaz gráfica son los siguientes:

1. Título de la interfaz gráfica.
2. Ventana para seleccionar el número de capas del recubrimiento para graficar. Esta ventana permite seleccionar un número de capas del total de películas colocadas en el diseño del recubrimiento.
3. Botón comparar. Al activar este botón permanecen en la ventana las curvas que representan la reflectancia y transmitancia para cada capa seleccionada del arreglo de películas delgadas simulado, si se desactiva el botón solo se muestra la última curva seleccionada.
4. Botón graficar. Una vez seleccionado el número de capas para realizar la gráfica, se activa el botón “Graficar”, el cual realiza y muestra en pantalla la gráfica de la transmitancia y reflectancia del recubrimiento simulado.
5. Botón guardar. Permite guardar como una imagen las ventanas graficas con las curvas representadas.
6. Título del recubrimiento. A la gráfica se le asigna el nombre de “Reflectancia y Transmitancia” seguido del nombre del sustrato utilizado, y del material o los materiales usados en cada una de las capas. En la fig 4.5 se observa un ejemplo de un recubrimiento simulado con un sustrato de óxido de hafnio y una película de cloruro de cesio.
7. Eje de Reflectancia. Al activar el botón “Graficar” sobre estos ejes se muestra la gráfica de la reflectancia en función de la longitud de onda, siendo el eje de las abscisas el asignado a la longitud de onda, y el eje de las ordenadas a la reflectancia.

8. Eje de Transmitancia. Al activar el botón “Graficar” sobre estos ejes se muestra la gráfica de la transmitancia en función de la longitud de onda, siendo el eje de las abscisas el asignado a la longitud de onda, y el eje de las ordenadas a la transmitancia.

www.bdigital.ula.ve

Referencias del capítulo.

- [1] SCHOTT Optical Glass Data Sheets. Recuperado el 24/09/2017 de: www.us.schott.com.
- [2] SUMITA Optical Glass Data Book. Recuperado el 24/09/2017 de: <http://www.sumita.eu>.
- [3] Bass Michael. (Ed). (). Handbook of Optics
- [4] Wood D., Nassau K. (1982). Refractive index of cubic zirconia stabilized with yttria. Applied Optics, 21(16), 2978-2981.
- [5] Hidrobo F., Tucci K., Uzcategui M. Programación y Diseño Algorítmico. Recuperado el 24/09/2017 de: <http://webdelprofesor.ula.ve/ciencias/maye/>.
- [6] Borja V. (2013) Herramientas computacionales para la matemática. Recuperado el 24/11/2017 de: <http://www.utm.mx/~vero0304/HCPM/1-Introduccion.pdf>.
- [7] Echevarría R. Breves Apuntes Para Comenzar con Matlab. Recuperado el 27/11/2017 de: <http://www.docentes.unal.edu.co/radelacruzg/docs/BREVES%20APUNTES%20MATLAB5.pdf>.
- [8] Franco R. (2014). GUI - Interfaz Gráfica de Usuario en MATLAB. Recuperado de <https://www.youtube.com/watch?v=jBecrEnkSV0&t=16s>.
- [9] Li H. (1980). Refractive index of alkaline earth halides and its wavelength and temperature derivatives. Journal of Physical and Chemical Reference Data 9, 161; doi: 10.1063/1.555616.
- [10] Refractive index database. Recuperado el 25/09/2017 de: <https://refractiveindex.info/>
- [11] Ramonet Jaume. (sf). Teoría y práctica en el modelado de procesos mediante Diagramas de Flujo. Recuperado el 15/02/2019 de: https://www.jramonet.com/sites/default/files/adjuntos/diagramas_flujo_jrf_v2013.pdf.
- [12] Significado de los 23 símbolos de diagrama de flujo de procesos. Recuperado el 15/02/2019 de: <https://www.heflo.com/es/blog/modelado-de-procesos/significado-simbolos-diagrama-flujo/>.

Capítulo V. Resultados y análisis.

El programa desarrollado ha sido extensamente probado, siguiendo el siguiente protocolo:

Primero se ejecutó y sus resultados se compararon los resultados de otros programas conocidos, esta se esta parte sirvió para encontrar posible errores de programación y bugs del software.

En la segunda comprobación se compararos sus resultados con los de algunos artículos científicos seleccionados, con esta sección se trata de ver los problemas de las aproximaciones utilizadas en el cálculos, así como la importancia de algunos parámetros no tomados en cuenta.

En la última y más importante de estos análisis se compara los resultados del programa desarrollado con las mediciones de reflectancia dadas por el CNTO de algunos recubrimientos realizados por ellos en sus equipos de caracterización

5.1 Chequeo y ajustes del programa.

Para que el programa creado tenga mayor aceptación y credibilidad se procede a comparar sus resultados con los obtenidos de otro software que simule propiedades ópticas en películas delgadas. Open filters es un programa creado por Stéphane Larouche y colaboradores en el politécnico de Montreal [2], se escoge este programa por ser de licencia libre además de poder ser utilizado (sus funciones básicas) de manera sencilla y sin requerir estudios avanzados sobre el uso del programa.

En la tabla 5.1 se muestran los parámetros utilizados para calcular la reflectancia y transmitancia de programa creado, con tres diferentes películas: los valores y materiales son seleccionados para poder comparar con el software OpenFilters.

Tabla 5.1 Parámetros utilizados en el programa creado para simular los recubrimientos de una capa.

Numero de capas	Material capa	Espesor capa (fracción de longitud de onda)	Polarización (tipo)	Índice refracción vacío	Longitud onda patrón (nm)	Ángulo de incidencia (grados)	Material del sustrato
1	ZrO ₂	0.25	S	1	550	0 30	Fused Sillica
1	MgF ₂	0.25	S	1	550	0 30	Fused Sillica
1	KBr	0.25	S	1	550	0 30	Fused Sillica

En la figura 5.1 y 5.2 se muestran las gráficas de los dos programas para una película de ZrO₂, se puede observar que la curvas son prácticamente idénticas cerca de la denominada longitud de onda patrón y difieren significativamente para longitud de onda largas, lo cual puede deberse a

las aproximaciones de los dos programas, términos de orden superior no tomados en cuenta en el índice de refracción

También se observa que el programa desarrollado da en forma sistemática valores un poco más pequeños que OpenFilter, aun cuando la diferencia entre los dos es menor del 1%.

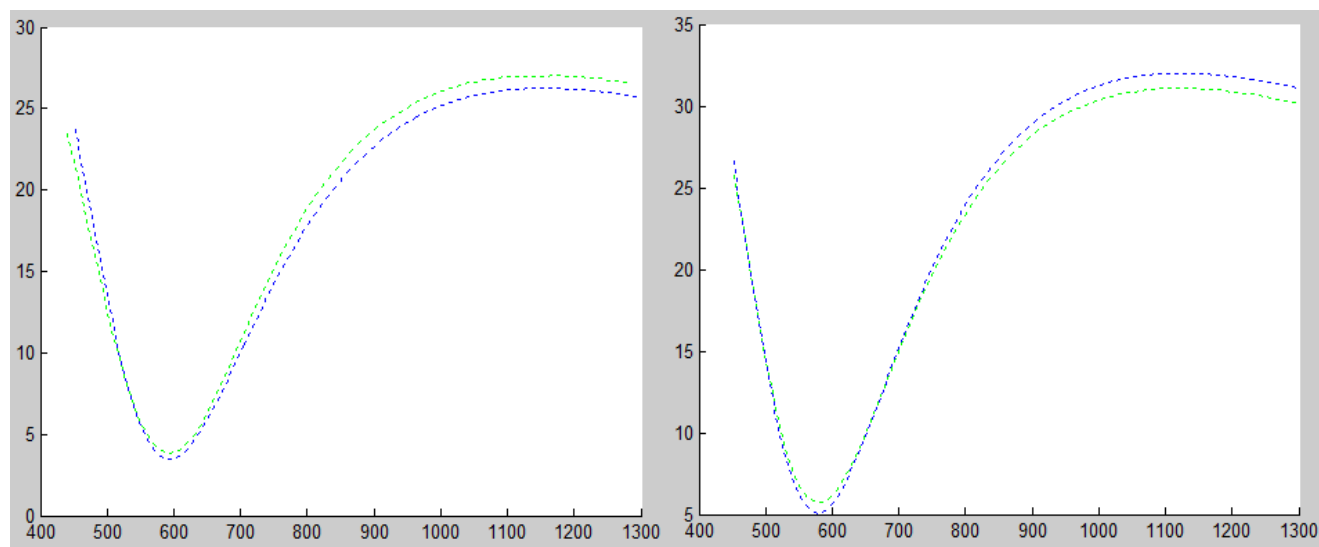


Figura 5.1. Reflectancia para una simulación de un recubrimiento de una capa de ZrO_2 . La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

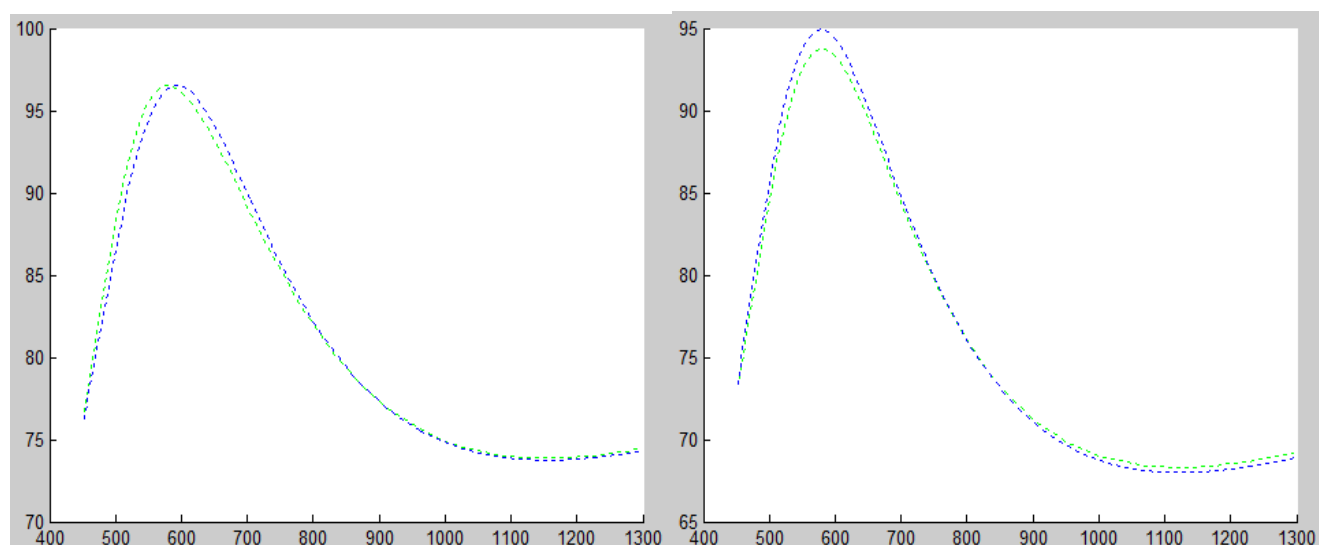


Figura 5.2. Tramitancia para una simulación de un recubrimiento de una capa de ZrO_2 . La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

Las figuras 5.3 y 5.4 muestran las curvas simuladas utilizando MgF_2 como recubrimiento. Se observa que la curva simulada con OpenFilters y la creada con el programa poseen la misma forma, la ligera diferencia en los valores se atribuye a términos de orden superior no tomados en cuenta al calcular del índice de refracción, el desplazamiento horizontal entre las curvas de la figura concuerda con una diferencia entre ambos programas para el primer coeficiente de la ecuación de dispersión empleada. La diferencia entre los valores es menor al 1%.

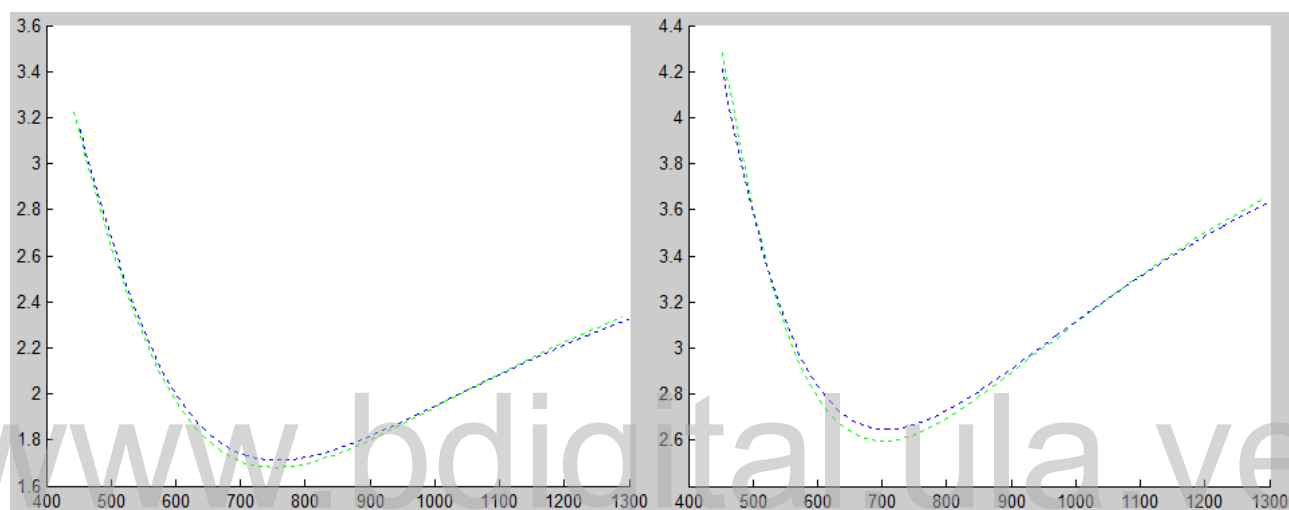


Figura 5.3. Reflectancia para una simulación de un recubrimiento de una capa de MgF_2 . La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

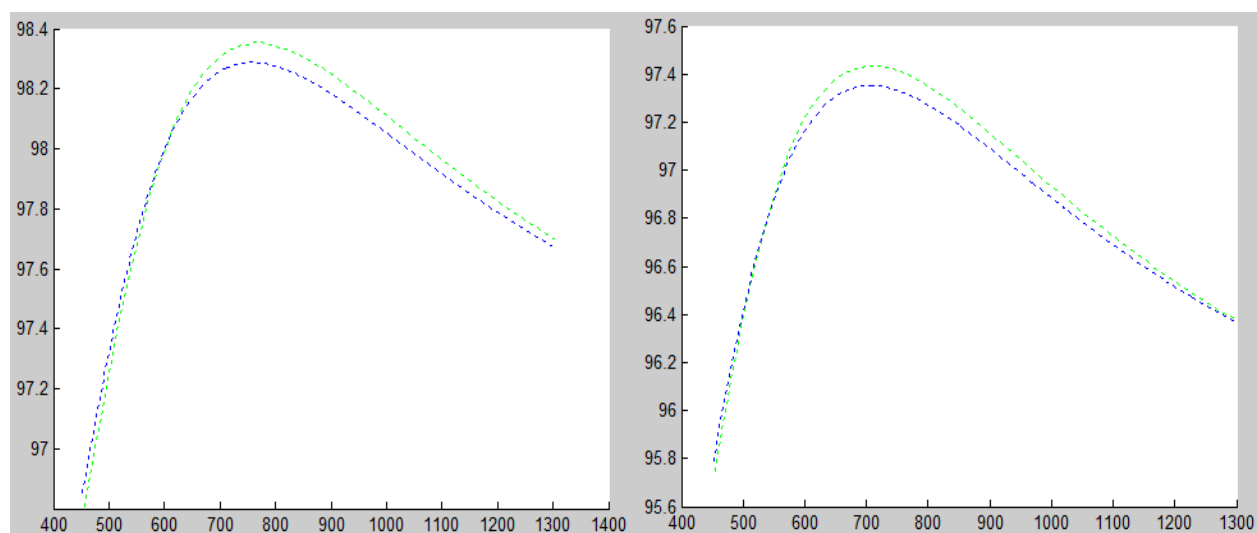


Figura 5.4. Tramitancia para una simulación de un recubrimiento de una capa de MgF_2 . La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

El último material utilizado para el chequeo del programa simulando con una capa es KBr, los resultados observados son similares para los recubrimientos anteriores.

La tabla 5.2 muestra la discrepancia porcentual máxima y para la longitud de onda patrón, entre las curvas simuladas por OpenFilters y las simuladas por el programa creado.

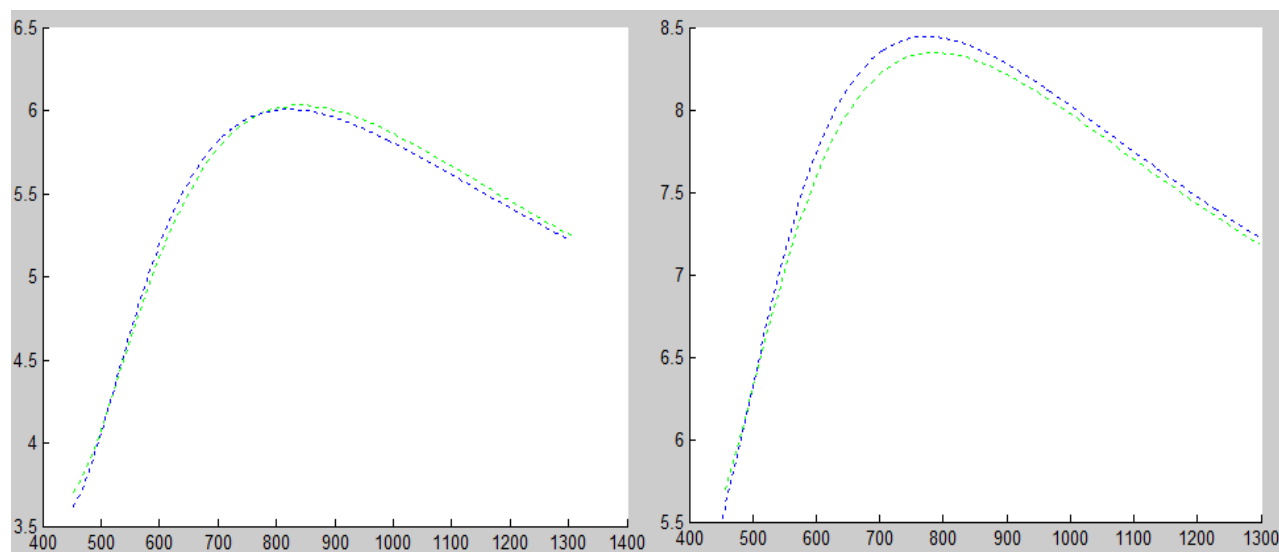


Figura 5.5. Reflectancia para una simulación de un recubrimiento de una capa de KBr. La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

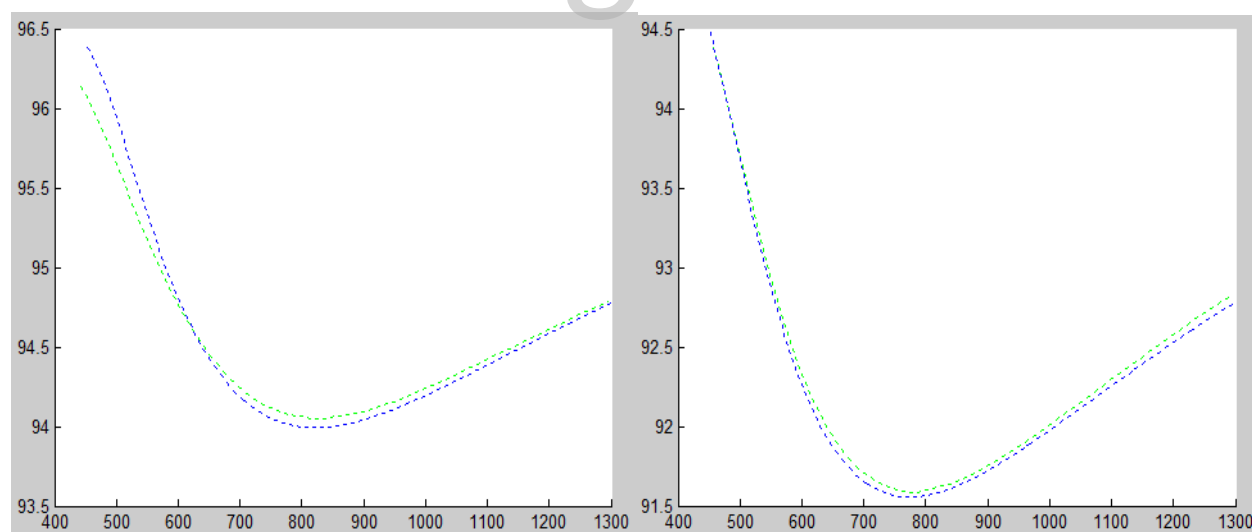


Figura 5.6. Transmittancia para una simulación de un recubrimiento de una capa de KBr. La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

Tabla 5.2 Discrepancia porcentual entre los valores de las curvas simuladas con OpenFilters y las del programa creado. Se muestran los valores de discrepancia máxima y los de la longitud de onda patrón.

Material del recubrimiento.	Discrepancia máxima 0 y 30 grados (transmitancia)	Discrepancia máxima 0 y 30 grados (reflectancia)	Discrepancia en longitud de onda patrón 0 y 30 grados (transmitancia)	Discrepancia en longitud de onda patrón 0 y 30 grados (reflectancia)
ZrO ₂	0.08/0.26	0.83/0.85	0.89/0.91	0.27/0.35
MgF ₂	0.02/0.14	0.01/0.02	0.04/0.05	0.01/0.02
KBr	0.25/0.03	0.01/0.03	0.13/0.08	0.01/0.07

Para el caso de la simulación usando dos materiales, se simula un recubrimiento utilizando KBr, ZrO₂ y MgF₂ como materiales. En la tabla 5.3 se muestran los valores y materiales utilizados para el cálculo de dos capas, siguiendo el mismo criterio de poder compararse entre los dos programas.

Tabla 5.3 Parámetros utilizados en el programa creado para simular los recubrimientos de dos capas.

Número de capas	Material capa	Espesor capa (fracción de longitud de onda)	Polarización (tipo)	Índice refracción vacío	Longitud onda patrón (nm)	Ángulo de incidencia (grados)	Material del sustrato
2	KBr ZrO ₂	0.25 0.25	S	1	550	0 30	Fused Silica
2	ZrO ₂ MgF ₂	0.25 0.25	S	1	550	0 30	Fused Silica

Las figuras 5.7 y 5.8 muestran las curvas de dos capas usando KBr y MgF₂ como materiales. Se observa que la forma de la curva simulada por OpenFilters y la del programa creado es similar, la diferencia entre los valores de las curvas se puede atribuir a diferencias entre los coeficientes de las fórmulas de dispersión usadas, la discrepancia entre los errores es menor al 1%.

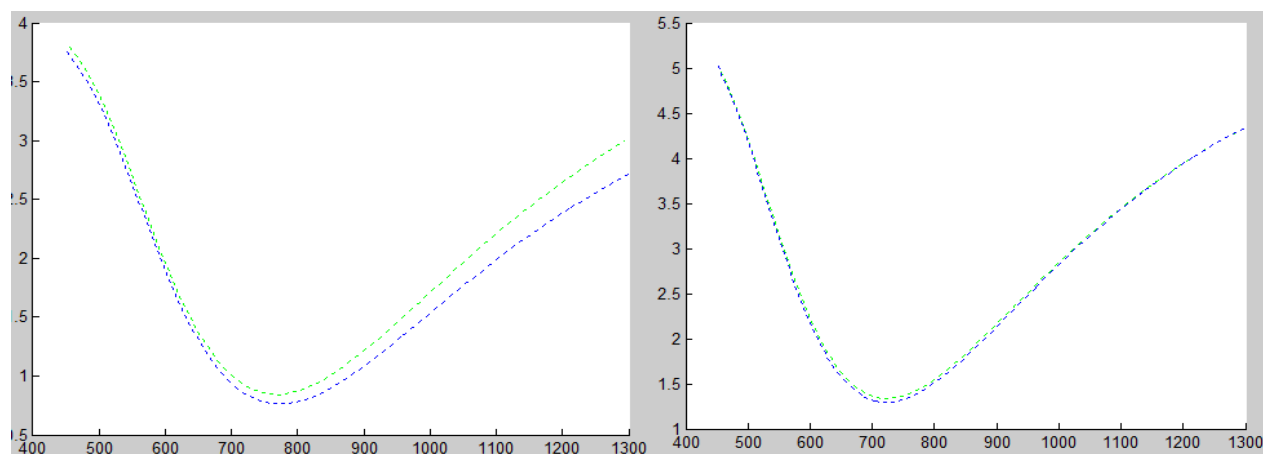


Figura 5.7. Reflectancia para una simulación de un recubrimiento de dos capas de KBr y MgF₂. La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

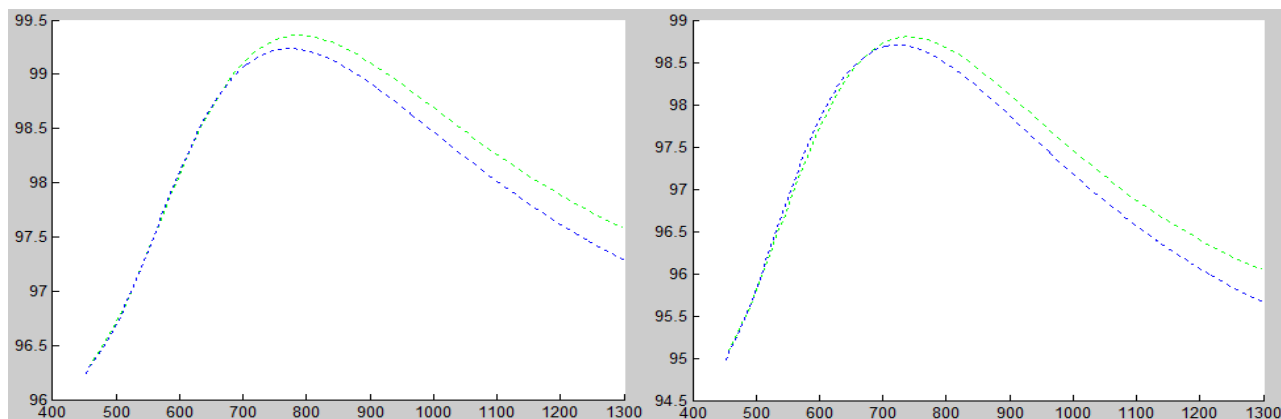


Figura 5.8. Tramitancia para una simulación de un recubrimiento de dos capas de KBr y MgF_2 . La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

Se procede a realizar otra simulación de dos capas con ZrO_2 y MgF_2 como materiales, la forma de la curva simulada con OpenFilters es similar a la del programa creado, y la discrepancia entre los valores es menor al 1%.

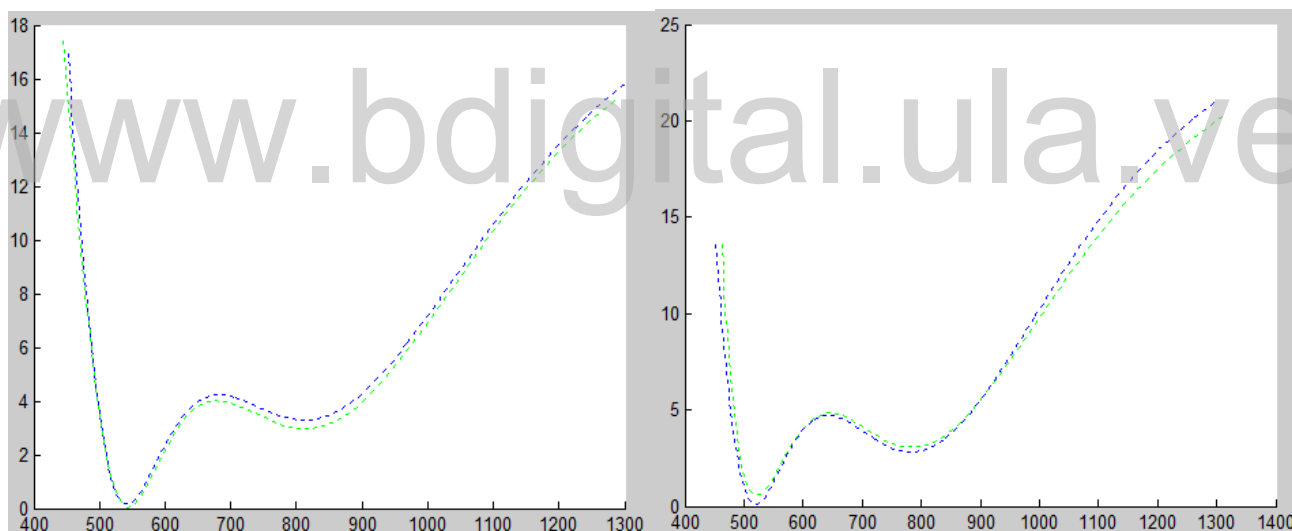


Figura 5.9. Reflectancia para una simulación de un recubrimiento de dos capas de ZrO_2 y MgF_2 . La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

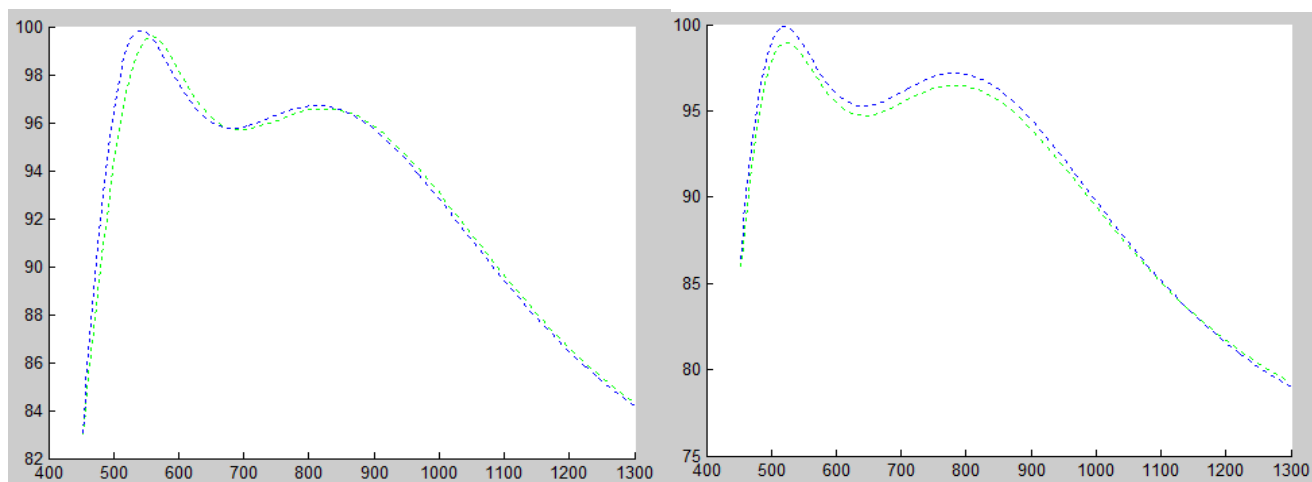


Figura 5.10. Tramitancia para una simulación de un recubrimiento de dos capas de ZrO_2 y MgF_2 . La imagen de la izquierda para un ángulo de incidencia de 0 grados, y la de la derecha para un ángulo de 30 grados. La curva verde es la simulada por Open filters y la azul por el programa creado.

En la siguiente tabla se muestran las discrepancias porcentuales entre las curvas simuladas con OpenFilters y las del programa creado, se puede observar que los valores son bajos.

Tabla 5.4. Discrepancia porcentual entre los valores de las curvas simuladas con OpenFilters y las del programa creado. Se muestran los valores de discrepancia máxima y los de la longitud de onda patrón.

Materiales del recubrimiento.	Discrepancia máxima 0 y 30 grados (tramitancia)	Discrepancia máxima 0 y 30 grados (reflectancia)	Discrepancia en longitud de onda patrón 0 y 30 grados (tramitancia)	Discrepancia en longitud de onda patrón 0 y 30 grados (reflectancia)
KBr MgF_2	0.30/0.38	0.28/0.03	0.04/0.20	0.08/0.03
ZrO_2 MgF_2	0.18/0.35	0.11/0.80	0.34/0.32	0.11/0.27

De los cálculos anteriores podemos asumir que no se tienen errores sistemáticos que están aumentando con el número de capas. Así como que no existen errores en el código del programa que están dando diferencias con otros software comerciales, las diferencias en las curvas son causadas por valores diferentes en los coeficientes de la fórmula de dispersión, lo cual da como resultados diferentes valores en los índices de refracción. Otro factor que influye es el uso del programa WebPlotDigitizer, el cual se utiliza para obtener los valores numéricos de las curvas de OpenFilters. Estos valores obtenidos pueden variar de los valores reales de las curvas.

5.2 Datos del software comparados con artículos científicos.

En esta parte se analizarán la posible importancia de los diferentes parámetros en los resultados comparados con algunos artículos científicos. Se selecciona el artículo “Ion-beam-assisted

deposition of thin films” de los autores “P. J. Martin, H. A. Macleod, R. P. Netterfield, C. G. Pacey, and W. G. Sainty [1]. Los valores de las curvas fueron calculados utilizando el software online WebPlotDigitizer. Los valores exactos de los parámetros necesarios para realizar la simulación en el programa creado se desconocen, la solución fue aproximar los parámetros para obtener una curva semejante a la experimental. En la tabla 5.5 se muestran los valores utilizados por este programa para tratar de reproducir los resultados del artículo.

Tabla 5.5. Valores de los parámetros utilizados para simular las curvas obtenidas del artículo científico.

Numero de capas	Material capa	Espesor capa (fracción de longitud de onda)	Polarización (tipo)	Índice refracción vacío	Longitud onda patrón (nm)	Ángulo de incidencia (grados)	Material del sustrato
1	ZrO ₂	0.36	S	1	550	19	BK7
1	TiO ₂	0.45	S	1	550	19	BK7
2	SiO ₂ ZrO ₂	0.29 0.40	S	1	550	19	BK7

En la figura 5.11 se muestran los resultados del programa y del artículo “Ion-beam-assisted deposition of thin films”, donde podemos apreciar que para la longitud de onda patrón los valores son muy similares, y la discrepancia aumenta significativamente al alejarnos de este valor, aun cuando la forma de la curva es similar.

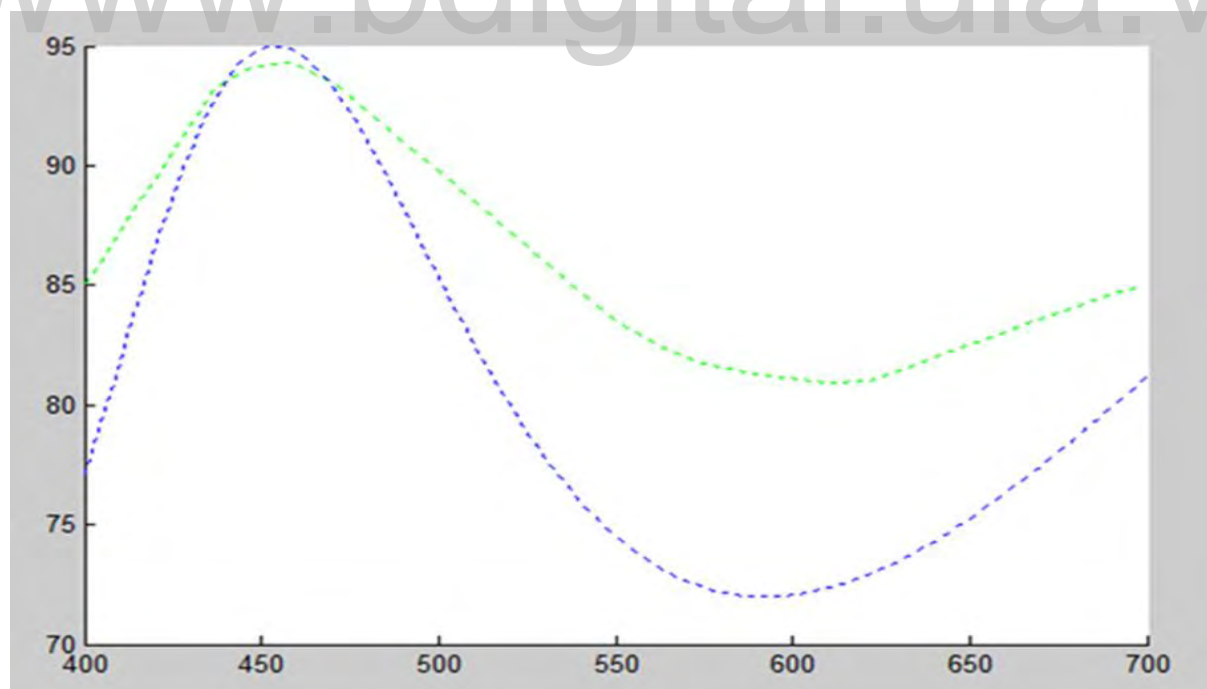


Figura 5.11. Curva simulada por el programa creado (azul), curva publicada en el artículo de H. A. Macleod en la página 3 (verde).

Las gráficas de las figuras 5.12 y 5.13 presentan el mismo comportamiento que la curva anterior. Presentan un aumento en la discrepancia al aumentar la longitud de onda, la mayor discrepancia en estas curvas se observa en la región roja del espectro visible. Es importante resaltar, que al aumentar el número de capas, las semejanzas en las similitudes se mantienen, lo cual comprueba ausencia de errores en el código del programa.

La diferencia entre las curvas teóricas y experimentales se atribuye al hecho de que en el proceso de recubrimiento se modifica la temperatura del sustrato, parámetro que modifica de manera importante las propiedades ópticas de los recubrimientos. Otro factor importante es la presencia de humedad en el ambiente donde se realiza el proceso de deposición, la humedad puede alterar la composición y estructura de las películas depositadas, lo cual cambia el índice de refracción de la misma. En la actualidad el programa creado no considera en sus cálculos la temperatura del sustrato.

c

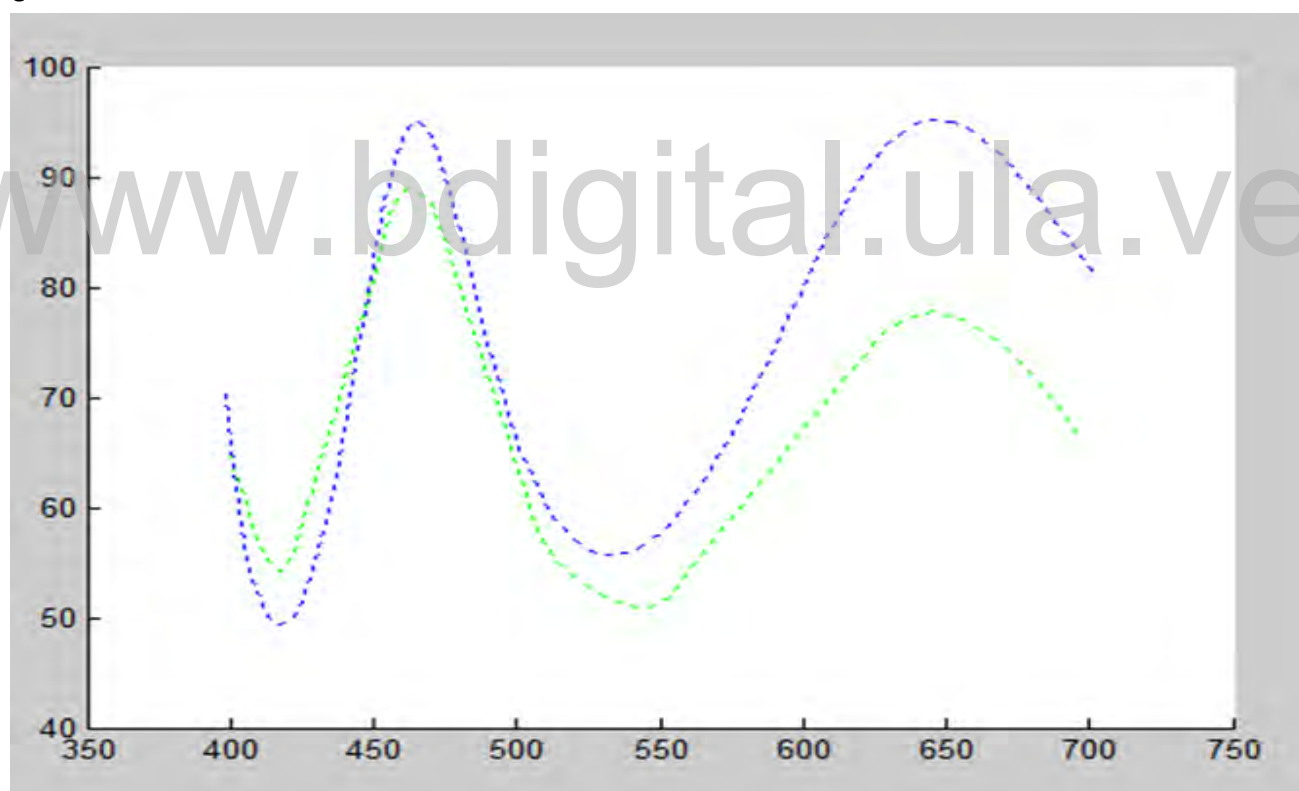


Figura 5.12. Curva simulada por el programa creado (azul), curva publicada en el artículo de H. A. Macleod en la página 5 (verde).

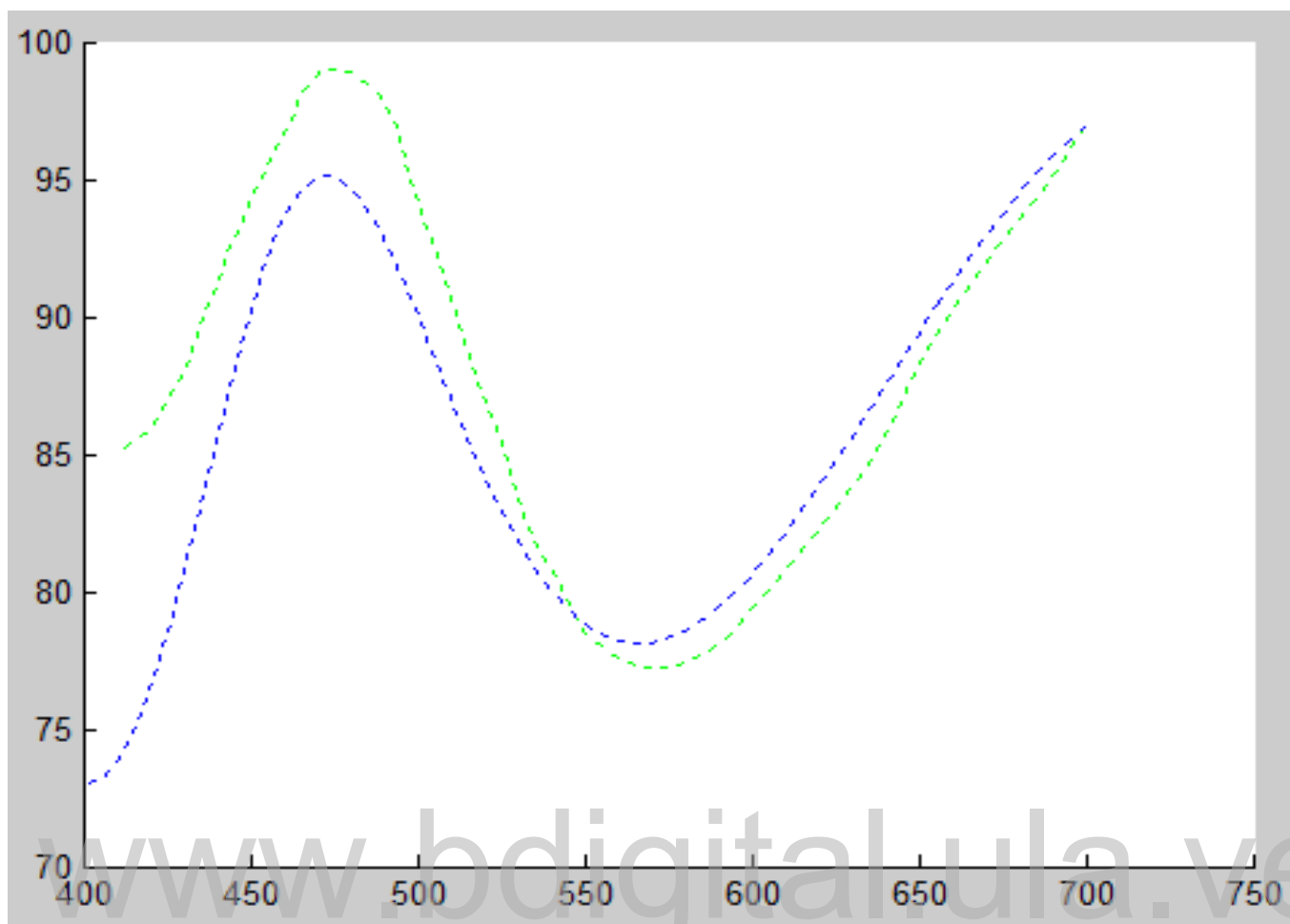


Figura 5.13. Curva simulada por el programa creado (azul), gráfica publicada en el artículo de H. A. Macleod en la página 6 (verde).

5.3 Modelo teórico versus resultados experimentales del CNTO.

La prueba más importante del éxito del programa creado es comparar los resultados de las simulaciones realizadas por el mismo, con las mediciones realizadas en recubrimientos de películas delgadas realizadas en el Centro Nacional de Tecnologías Ópticas (CNTO). Los recubrimientos fueron realizados utilizando la técnica de deposición de pulverización catódica, se comparan los resultados de 3 muestras. A continuación se muestran las curvas experimentales obtenidas en el CNTO. Las cuales fueron medidas durante el proceso de deposición. A continuación se muestran las curvas experimentales obtenidas en el CNTO.

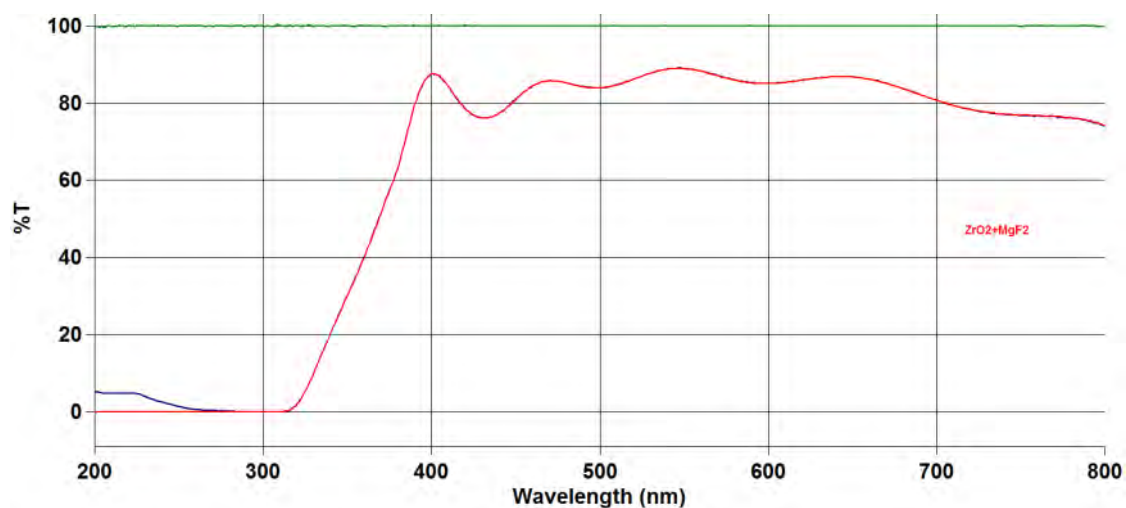


Figura 5.14. Tramitancia medida en el CNTO para un recubrimiento de 2 capas de ZrO_2 y MgF_2 .

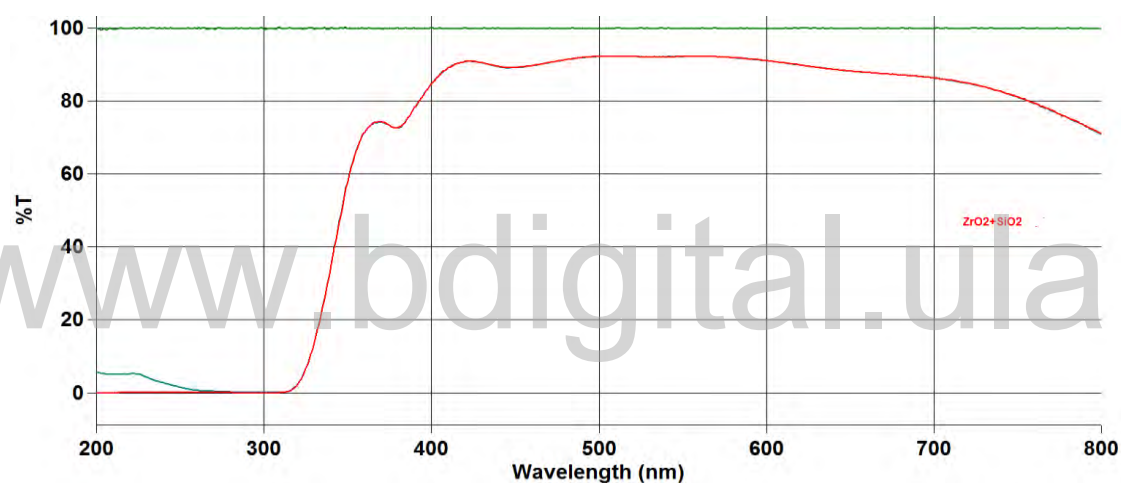


Figura 5.15. Tramitancia medida en el CNTO para un recubrimiento de 2 capas de ZrO_2 y SiO_2 .

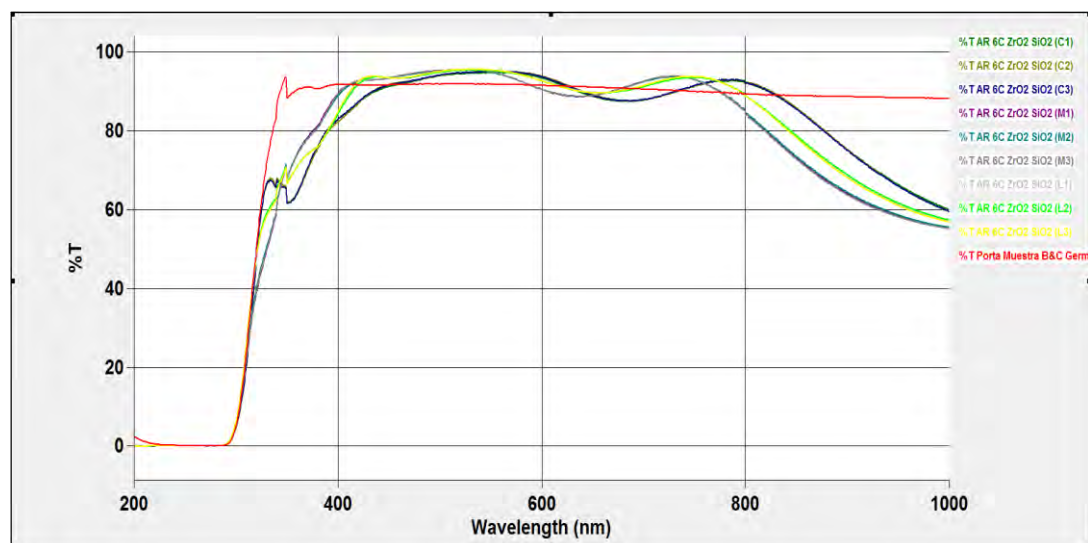


Figura 5.16. Tramitancia medida en el CNTO para un recubrimiento de 6 capas de ZrO_2 y SiO_2 .

En las gráficas se puede observar que en el rango aproximado entre 300nm y 350nm los valores de la transmitancia son muy bajos, esto se asocia a la presencia de bandas de absorción [3,4], debido a que el modelo matemático utilizado no considera las bandas de absorción, se decide comparar los resultados a partir de una longitud de onda de 400nm.

Es importante destacar el hecho de que el material del sustrato y los espesores de cada capa, se toman como una aproximación, esto es debido a que se desconoce con exactitud los valores reales, el programa creado resulta ser adecuado para este caso, ya que permite ajustar los espesores para obtener la curva teórica que más se aproxime a la curva experimental.

Para las simulaciones de dos capas, la forma de las curvas teóricas y experimentales presentan gran similitud en un rango de la curva, para el recubrimiento de ZrO_2 y MgF_2 el rango es entre 410nm y 670nm aproximadamente, y para el recubrimiento de ZrO_2 y SiO_2 el rango es entre 400nm y 710nm aproximadamente.

En el rango de similitud existen semejanzas en la cantidad de máximos y mínimos en las curvas, sin embargo las curvas teóricas (del programa creado) presentan valores superiores a los de la curva experimental, existe un leve desplazamiento horizontal entre las curvas.

La discrepancia entre las curvas se debe a variables que no son tomadas en cuenta por el programa creado, parámetros como la humedad, la presencia de impurezas y la variación de la temperatura del sustrato traen como consecuencia variaciones en las curvas experimentales en referencia a los modelos teóricos. La tabla 5.6 presenta los datos que permiten obtener las curvas que mejor se ajusten a los datos experimentales.

Tabla 5.6. Valores de los parámetros utilizados para simular las curvas medidas en el CNTO.

Número de capas	Material de cada capa	Espesor capa (fracción de longitud de onda patrón)	Polarización (tipo)	Índice refracción vacío	Longitud onda patrón (nm)	Ángulo de incidencia (grados)	Material del sustrato
2	ZrO_2 MgF_2	1.16 0.50	S	1	550	0	Vidrio común
2	ZrO_2 SiO_2	0.41 0.22	S	1	550	0	Vidrio común
6	ZrO_2 SiO_2 ZrO_2 SiO_2 ZrO_2 SiO_2	0.55 0.23 0.55 0.23 0.55 0.23	S	1	550	0	Vidrio común

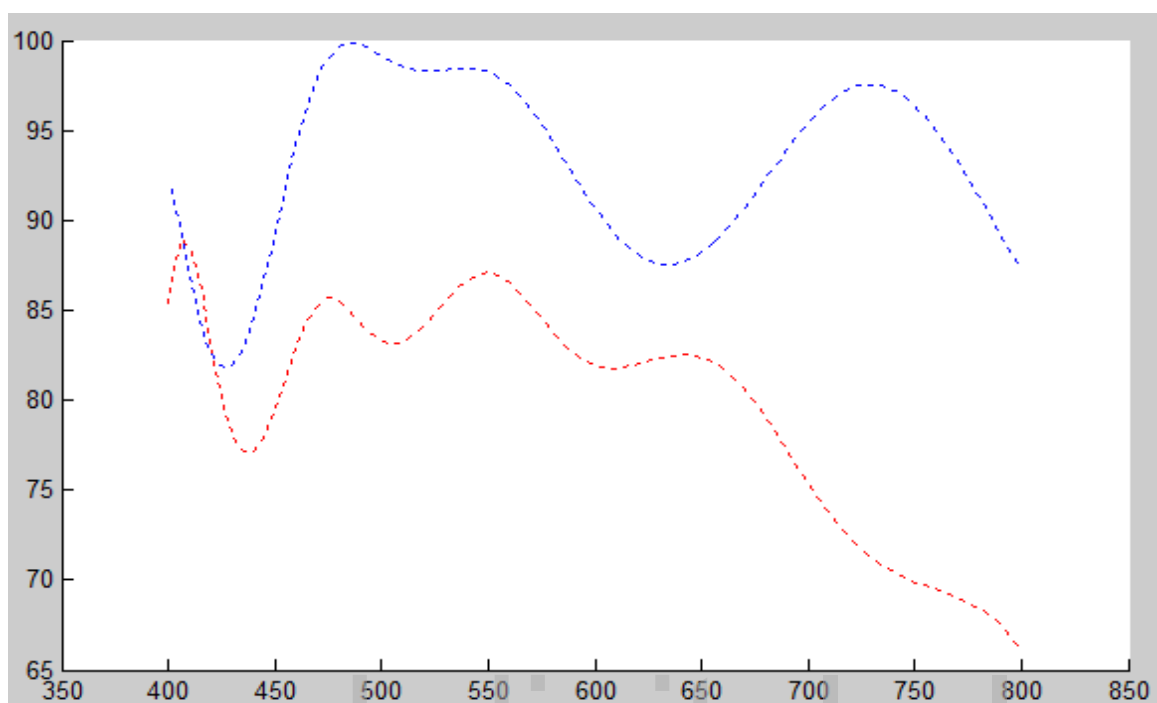


Figura 5.17. Curva simulada por el programa creado (azul), curva obtenida en el CNTO (rojo), para un recubrimiento de 2 capas de ZrO_2 y MgF_2 .

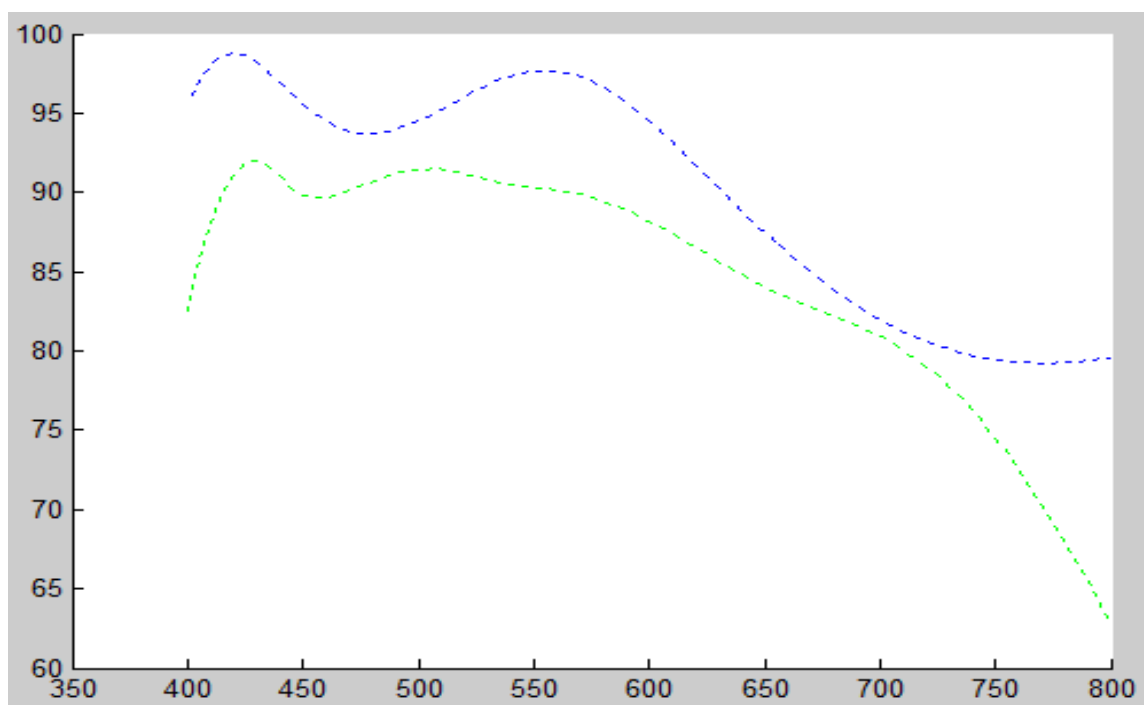


Figura 5.18. Curva simulada por el programa creado (azul), curva obtenida en el CNTO (verde), para un recubrimiento de 2 capas de ZrO_2 y MgF_2 .

La curva de la figura 5.19 es más complicada de ajustar debido al número de capas utilizadas. Para un recubrimiento de 6, tanto el proceso experimental como los cálculos teóricos resultan más complicados, esto se debe a que un error aceptable para un número pequeño de capas, puede propagarse para una mayor cantidad de capas, y producir un valor totalmente diferente al esperado.

Para el recubrimiento de seis capas se observa que la forma de las curvas son iguales a partir de la longitud de onda de 500nm, la curva simulada presenta valores superiores a la experimental a partir de los 470nm, se observa un leve desplazamiento horizontal entre las curvas.

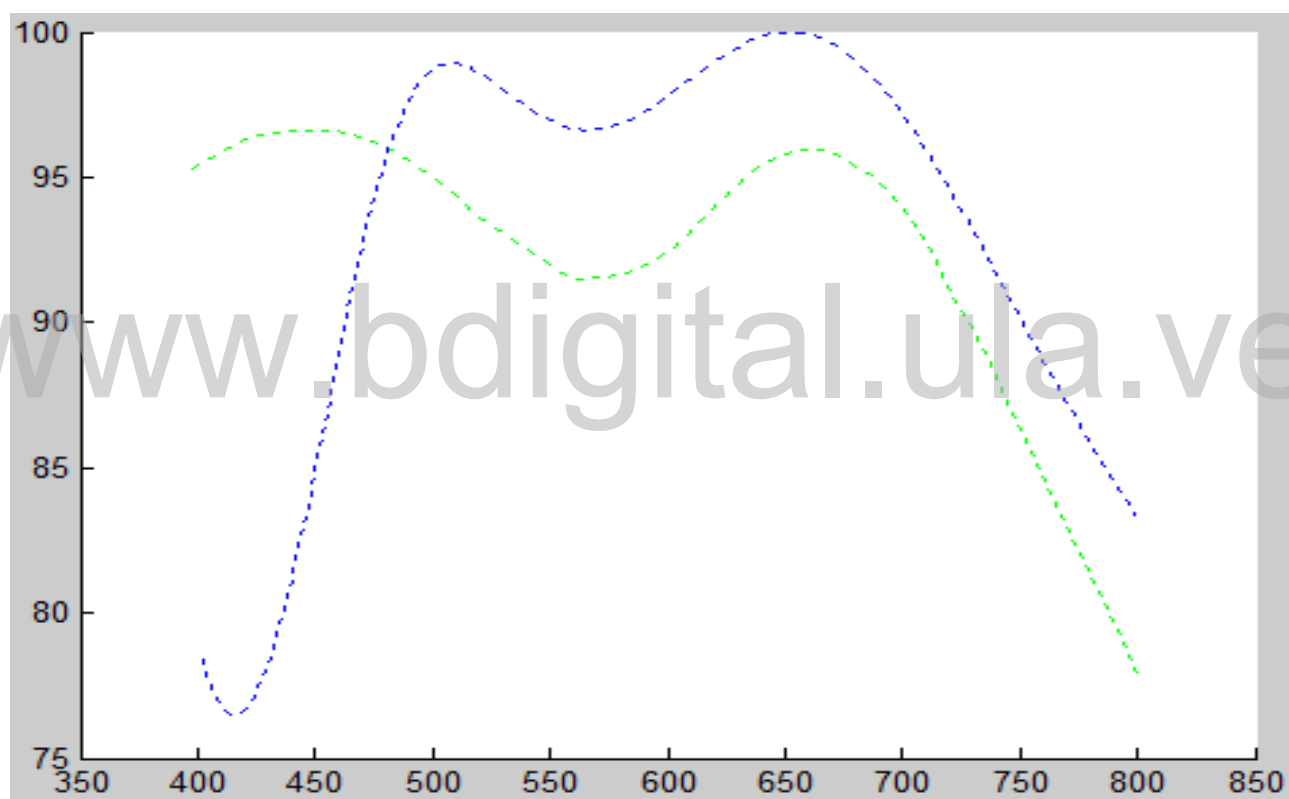


Figura 5.19. Curva simulada por el programa creado (azul), curva obtenida en el CNTO (verde), para un recubrimiento de 6 capas de ZrO_2 y SiO_2

El uso del programa creado presenta una gran ventaja, la cual ha sido notada durante su uso para comparar curvas experimentales. El programa permite obtener los espesores aproximados de las películas conociendo la curva de transmitancia o reflectancia, lo cual resulta útil, ya que en ciertos experimentos, este parámetro se desconoce.

Anteriormente se mencionan los parámetros que pueden afectar la discrepancia entre los valores teóricos y experimentales, la temperatura del sustrato y el medio al momento de realizar la

deposición se considera uno de los parámetros que más influyen, ya que se observa que la modificación de la temperatura cambia los valores de la curva de transmitancia significativamente.

Para las simulaciones se utiliza polarización S, esto se debe a que en artículos científicos se reporta utilizarla para medir reflectancia y transmitancia, se debe tomar en cuenta que al utilizar ciertos materiales o ciertos ángulos de incidencia, el tipo de polarización o la ausencia de la misma, modifica la gráfica obtenida.

www.bdigital.ula.ve

Referencias del capítulo.

- [1] Martin, P., Macleod, H., Netterfield, R., Pacey, C., y Sainty, W. (1983). Ion-beam-assisted deposition of thin films. *Applied Optics*, 22(1), 178-184.
- [2] Larouche, S., y Martinu, L. (2008). OpenFilters: open-source software for the design, optimization, and synthesis of optical filters. *Applied Optics*, 47,(13), 219-230.
- [3] Sergeev, A., y Sergeev, P. (2008). Individual induced absorption bands in MgF₂. *Quantum Electronics*, 38(3), 251-257.
- [4] Hugo, Victor. (2006). Propiedades Luminescentes de Nanocristales de ZrO₂ Dopados con Iones de Dy³⁺ Y Lu³⁺ (tesis de maestría). CENTRO DE INVESTIGACIONES EN OPTICA A.C., León, México.

www.bdigital.ula.ve

Conclusiones.

Se creó una base de datos con una lista de materiales. Los materiales fueron escogidos con la condición de ser “transparentes” en el rango de longitud de onda a utilizar en las simulaciones, permitiendo tener acceso a estos datos para su posterior uso en el programa principal.

Se realiza el diseño de un programa para simular recubrimientos con películas delgadas, para posteriormente escribir su código. Luego de comprobar su correcto funcionamiento a nivel de programación, se procede a comparar su funcionamiento con datos valores obtenidos de la medición experimental.

Las curvas experimentales y las simuladas por el programa presentan similitud, para este modelo teórico, es de esperarse que exista una discrepancia con los resultados experimentales. Se pueden observar valores de 20%, lo cual se debe a que el modelo empleado no considera variables que afectan los cálculos como la temperatura, rugosidad entre otros.

Los rangos usados en las curvas no son los más adecuados, ya que para varios materiales de la base de datos se presentan bandas de absorción a longitudes de onda menores a 400nm. Se recomienda usar el programa para intervalos entre 450 y 1300nm.

Se debe comparar un número mayor de muestras realizadas en el CNTO. Otro factor importante para mejorar la precisión de los resultados, es obtener los valores específicos de los espesores de cada capa y el material exacto de del sustrato.

Recomendaciones.

- Mejorar el modelo matemático, para que tome en consideración una mayor cantidad de variables involucradas en el proceso. Entre estas se encuentra la temperatura, la porosidad, la absorción, espesor del sustrato.
- Agregar más materiales a la base de datos e incluir materiales que presenten absorción en el intervalo de longitud de onda utilizado por el programa.
- Agregar una opción que permita “cargar” y manipular datos guardados.
- Mejorar la interfaz gráfica para que sea más eficiente y cómoda de utilizar.

www.bdigital.ula.ve