

DETERMINACION DE PARAMETROS OPTICOS Y GEOMETRICOS DE PELICULAS DELGADAS A PARTIR DE ESPECTROS DE TRANSMISION.

F. Valcarce, M. Rodríguez-Vidal, J.A. Vallés* y J.J. Jiménez.
Dpto. Electricidad y Magnetismo. Fac. C.C. Físicas. Univ. Complutense. Madrid.

Se presenta un método numérico para la obtención del espesor (d), rugosidad (σ), índices de refracción (n) y de extinción (k) analizando las curvas de absorbancia en incidencia normal obtenidas utilizando un espectrofotómetro comercial. Se basa en un ajuste puntual por barrido de los parámetros n , k y σ sobre los puntos de absorbancias máxima y mínima contiguas, respectivamente, para la región de longitudes de onda alejadas del límite de absorción interbanda dada la mayor sensibilidad en el máximo para el índice n , en el mínimo de mayor longitud de onda para el índice k y en el de menor para la rugosidad, procediéndose finalmente a un proceso iterativo. Las limitaciones más destacadas son en el aspecto experimental la comprobación previa de la influencia del tamaño del haz por posibles efectos de inhomogeneidad de espesor y en el tratamiento numérico la suposición de k constante en el intervalo. Tras este análisis numérico, ya conocidos los factores geométricos d y σ se procede al cálculo para todo el espectro de los índices. Se presentan resultados para láminas de CdTe y CdS producidas por pulverización.

Algunas propiedades interesantes de los materiales en película delgada tales como, reflectividad, homogeneidad, espesor, estequiometría, absorptividad, rugosidad superficial y otros, se pueden conocer con razonable aproximación a partir de un simple espectro de absorción realizado en condiciones experimentales adecuadas cuando los factores que afectan al espectro son entendidos correctamente, y se dispone de un método de cálculo para analizar los datos experimentales.

Presentamos un método para calcular el espesor d , índice de refracción complejo ($n-jk$) y la rugosidad superficial σ de una película delgada crecida sobre un substrato transparente y liso a partir del espectro de absorbancia especular y comprobamos como el error experimental que corrientemente no es menor de .1% limita fuertemente esta técnica para la determinación de valores pequeños del índice de absorción k , es decir menores de 10^{-3} .

Algunos de los métodos existentes (1,2) simplifican demasiado el sistema omitiendo factores tales como la rugosidad superficial o las pérdidas por reflexión en la interfase substrato-aire, cuyos efectos son importantes en las observaciones experimentales, y otros métodos (3) tratan de tener en cuenta tantos factores tales como inhomogeneidades del espesor, rugosidad del substrato o radiación dispersada recogida en el detector que el método pierde su simplicidad y aplicabilidad.

Intentamos exponer aquí qué factores deben necesariamente tenerse en cuenta, y cuales pueden ser ignorados trabajando en unas condiciones experimentales adecuadas.

* Dirección actual: Dpto. Electricidad y Magnetismo. Fac. C.C. Físicas. Univ. de Santander.

La experiencia demuestra que no aparecen efectos de interferencia debidos al substrato cuando el espesor de fase de éste es mayor que la longitud de coherencia del haz - que viene dada por: $l_c = \lambda^2/\Delta\lambda$ donde $\Delta\lambda$ es la anchura de banda espectral de la radiación a la salida del sistema monocromador-rendija de salida. Inhomogeneidades del espesor del substrato pueden tener también influencia en la desaparición de los efectos de interferencia del substrato. Integrando la expresión de la transmitancia T sobre la anchura espectral $\Delta\lambda$, se llega a la desaparición de los efectos de interferencia - debidos al substrato y resulta un valor medio entre el de máximos y mínimos como era de esperar. Usualmente la anchura de banda espectral se puede mantener suficientemente baja como para no afectar seriamente los efectos de interferencia debidos a la película. Los espectros en el rango del visible e infrarrojo próximo tampoco resultan - afectados por la rugosidad de los substratos comunmente utilizados para este rango de longitudes de onda, ya que ésta es muy pequeña ($\sim 10\text{\AA}$).

Las inhomogeneidades del espesor de la película en la sección de incidencia del haz - influyen fuertemente el espectro cuando son suficientemente grandes. Los efectos - de interferencia son completamente destruidos cuando la diferencia de espesor Δd a lo largo de la sección del haz verifica; $\Delta d = \lambda/4n$, y la distribución de espesores entre el máximo y el mínimo es homogénea. En tal caso, es necesario hacer alguna hipótesis sobre el perfil de la inhomogeneidad a la hora de incluirla en un tratamiento matemático, como en (3), pero si podemos mantener $\Delta d \ll \lambda/4n$, podemos ignorar la inhomogeneidad y seguir considerando la película plano-paralela. Esta condición puede en ocasiones obligarnos a utilizar secciones del haz demasiado pequeñas por lo que pueden - presentarse problemas en la detección.

La rugosidad superficial de la película juega también un papel muy importante (4) y - valores tan pequeños, del r.m.s. de la amplitud de la rugosidad, como $\lambda/100$ tienen - efectos importantes en el espectro.

En la bibliografía hay descritos modelos para tener en cuenta la rugosidad superficial (3,5,6,7). Usamos en este trabajo un modelo que considera la superficie rugosa - como una capa inhomogénea y tiene en cuenta la radiación dispersada fuera del detector mediante una aproximación estadística, pero otro cualquiera se podría usar ya que la dependencia de la intensidad dispersada con la longitud de onda es la misma para - cualquiera de los modelos conocidos.

Utilizando uno cualquiera de estos modelos, estamos en condiciones de calcular la absorbancia que es función de la longitud de onda, de otros parámetros experimentales y del sistema.

$$A_T = f(n, k, d, \lambda, \Delta\lambda, \sigma)$$

Las condiciones experimentales que se han mantenido son las siguientes:

1) Incidencia normal y ángulo de aceptación del detector $\alpha \approx 0$. 2) La sección de incidencia del haz se ha reducido hasta comprobar que una reducción mayor no modifica el espectro, lo que nos garantiza el poder despreocupar la inhomogeneidad de espesor. 3) Anchura espectral tan pequeña como sea posible. (20-30 \AA). 4) Ausencia de polvo o grasa tanto en la película como en el substrato. 5) El espesor del substrato aproximadamente igual a l_c del haz para evitar desviaciones del haz por un substrato demasiado grueso.

PROCEDIMIENTO DE CALCULO. En la parte del espectro donde la dispersión de n y k es pequeña, podemos obtener el orden de interferencia m de un máximo y un mínimo a partir de las longitudes de onda a las que se producen

$$\text{MAX: } (2m+1)\lambda_1 = 4n(\lambda_1)d$$

$$\text{MIN: } m\lambda_2 = 2n(\lambda_2)d$$

$$\lambda_2 > \lambda_1$$

y de aquí:

$$m = \frac{\lambda_1}{2 \left| \frac{n(\lambda_1)}{n(\lambda_2)} \lambda_2 - \lambda_1 \right|}$$

y si $n(\lambda_1) \approx n(\lambda_2)$ $m \leq \frac{\lambda_1}{2 |\lambda_2 - \lambda_1|}$, m entero.

Una vez que conocemos m para este máximo y mínimo, lo podemos conocer para cualquier otro del espectro, y por lo tanto podemos conocer el espesor de fase $n(\lambda)d$ para esas longitudes de onda, por lo que si determinamos n ó d para cualquier longitud de onda, conoceremos también la dependencia de n con λ .

Tomamos tres valores experimentales de absorbancia $A(\lambda_1)$, $A(\lambda_2)$, $A(\lambda_3)$ correspondientes a estos y al mínimo de orden $m+1$ para los cuales el espesor de fase es conocido, y necesitamos hacer la suposición de que el índice de absorción k permanece constante en el intervalo $\lambda_2 \rightarrow \lambda_3$.

Comenzamos por calcular un primer valor aproximado para n y d, resolviendo numéricamente la ecuación:

$$\left| A_C(\lambda_1) - A_E(\lambda_1) \right|_{k=\sigma=0} = 0$$

donde $A_C(\lambda_1)$ y $A_E(\lambda_1)$ son los valores de la absorbancia, calculado y experimental, en el máximo manteniendo constante el espesor de fase $n(\lambda_1)d$. Entonces, a partir del valor $A_E(\lambda_3)$ calculamos un primer valor para k por medio de un proceso iterativo. Como sabemos que;

$$A(\lambda_3) = A_G(\lambda_3, k) + \frac{4\pi kd}{\lambda_3} \lg e$$

donde A_G representa las pérdidas por reflexión y el segundo término describe la absorción interna, podemos aproximarnos al valor de k por la expresión

$$k_i = \frac{|A_E(\lambda_3) - A_G(\lambda_3, k_{i-1})| \lambda_3}{4\pi d \lg e}$$

y se consigue una convergencia rápida.

Los valores calculados de d y k se usan ahora junto con el de n, determinado a partir del espesor de fase, para calcular la absorbancia $A_C(\lambda_2)$, y resolviendo numéricamente la ecuación:

$$A_C(\lambda_2, \sigma) - A_E(\lambda_2) = 0$$

obtenemos un primer valor del r.m.s. de la amplitud de la rugosidad σ . Repitiendo iterativamente los dos últimos pasos, llegamos a una convergencia de k y σ y entonces volvemos a calcular un valor mejor aproximado de n y d, repitiendo el proceso hasta que n converge también. En la figura 1 se muestra el esquema del cálculo.

El error del método es siempre menor que 1% para n y d para una imprecisión de .1% en el valor de A_E y de $\pm 5\text{nm}$ en λ , mientras que para k y σ depende fuertemente de los valores absolutos de estos parámetros y de la relación d/λ .

En la figura 2 se muestran las gráficas de n y k en función de λ determinadas para una película policristalina de CdTe de .94 μm de espesor, crecida por pulverización -

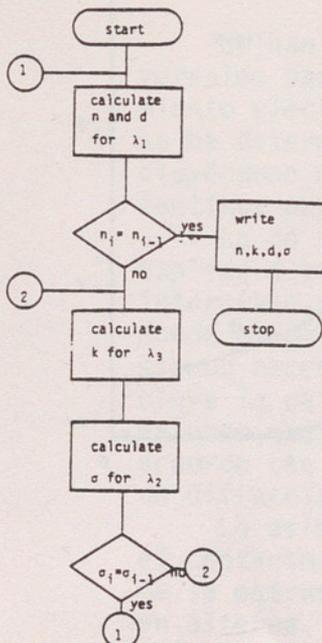
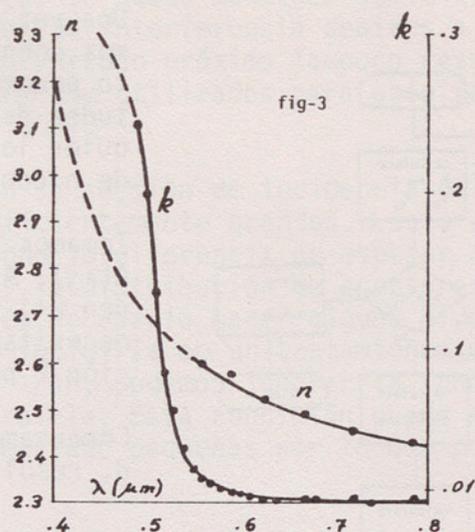
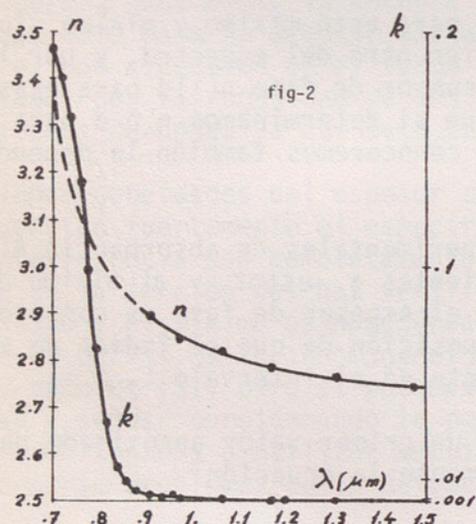


fig-1

r.f. cuya rugosidad determinada es $\sigma \cong 200 \text{ \AA}$ y cuyo tamaño de grano determinado por r-x es $\sim 500 \text{ \AA}$. (8).

La figura -3 muestra los mismos datos obtenidos para una película de CdS producida - igualmente por pulverización r.f., de $.80 \mu\text{m}$ de espesor, cuya rugosidad determinada - es $\sigma \cong 100 \text{ \AA}$.



BIBLIOGRAFIA

- 1.- WOHLGEMUTH, J.H., Can. J. Phys., 53, 1737 (1975).
- 2.- MANIFACIER, J.C., J. Phys. E, 9, 1002 (1976).
- 3.- SZCZYRBOWSKI, J., J. Phys. D, 11, 583 (1978).
- 4.- BENNETT, H.E., J. Opt. Soc. Am., 51, n° 2 (1961).
- 5.- DAVIES, H., Proc. IEE, 101, 209 (1954).
- 6.- OHLIDAL, I., J. Opt. Soc. Am., 61, n° 12 (1971).
- 7.- SKORNYAKOV, L.G., Opt. Spectrosc., 42, n° 2 (1977).
- 8.- ALVAREZ, E., Comunicació personal.

AGRADECIMIENTOS

Deseamos hacer constar nuestro agradecimiento al Dpto. de Física del Sólido de la J.E.N. y en especial al Dr. Rascón Caballero sin cuya colaboración no hubiesen sido posible las medidas experimentales.