

**NUEVOS MATERIALES,
ALGORITMOS DE CARACTERIZACIÓN
Y RECUBRIMIENTOS
PARA APLICACIONES ESPACIALES
EN EL ULTRAVIOLETA LEJANO Y EXTREMO**

Luis V. Rodríguez de Marcos

**TESIS DOCTORAL
SALAMANCA, 2015**

Yo, el Dr. Juan I. Larruquert Goicoechea con D.N.I. 15244276z, como investigador científico del Instituto de Óptica, sito en C/Serrano 121, 28006 Madrid, centro perteneciente al Consejo Superior de Investigaciones Científicas, y como director de tesis doctoral de Luis V. Rodríguez de Marcos,

AUTORIZO:

a que D. Luis V. Rodríguez de Marcos, con D.N.I. 47227705b, presente esta memoria, titulada "NUEVOS MATERIALES, ALGORITMOS DE CARACTERIZACIÓN Y RECUBRIMIENTOS PARA APLICACIONES ESPACIALES EN EL ULTRAVIOLETA LEJANO Y EXTREMO", para aspirar al grado de Doctor.

Y para que conste a los efectos oportunos, expido la presente autorización, a petición del interesado, en Madrid, el día 24 de Noviembre de 2014.

Fdo.: Juan I. Larruquert Goicoechea.



**VNiVERSiDAD
D SALAMANCA**

Programa de Doctorado de Física Aplicada y Tecnología

NUEVOS MATERIALES, ALGORITMOS DE CARACTERIZACIÓN Y RECUBRIMIENTOS PARA APLICACIONES ESPACIALES EN EL ULTRAVIOLETA LEJANO Y EXTREMO

*Memoria presentada en el Departamento de Física Aplicada de la Facultad de Ciencias
de la Universidad de Salamanca, por*

Luis V. Rodríguez de Marcos

para optar al Grado de Doctor en Ciencias Físicas

SALAMANCA, 2015

Director: Juan I. Larruquert Goicoechea

Codirector: José A. Méndez Morales



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

Agradecimientos

Agradecido a:

Motivo(s) del agradecimiento:

Dr. Juan I. Larruquert Goicoechea*
Dr. José A. Méndez Morales*
Dr. José A. Aznárez Candao*

Director / Formación integral
Codirector / Formación integral
Cuasi codirector / Formación integral

Dra. Manuela Vidal Da Silva
D. Sergio García Cortés
D. Antonio P. Pérez Marín
D. José M. Sánchez Orejuela
D. Juan P. Adrados

Compañera de grupo/ Ayuda recibida
Compañero de grupo/ Ayuda recibida
Compañero de grupo/ Ayuda recibida
Compañero de grupo / Ayuda recibida
Compañero de grupo/ Ayuda recibida

Dr. Luis Plaja Rustein

Tutor

Dr. Félix y Alberto Rodríguez
Dra. Ayalid Villamarín
Dr. Xavier Angulo

Compañeros de despacho
Compañero de despacho
Compañero de despacho

Dra. Mónica Fernandez Perea
Dra. Regina Soufli
Dr. Erik Gullikson

Estancia en LLNL y colaboradora en los experim. en ALS
Estancia en LLNL y colaboradora en los experim. en ALS
Colaborador en los experimentos en ALS

Dr. Marco Malvezzi
Dr. Luca Poletto
Dr. Fabio Frassetto
Dr. Ángelo Giglia
Dr. Denis Garoli
Dr. Nicola Mahne
Dr. Stefano Nannarone

Colaborador en los experimentos en ELETTRA
Colaborador en los experimentos en ELETTRA
Colaborador en los experimentos en ELETTRA
Colaborador en los experimentos en ELETTRA
Colaborador en los experimentos en ELETTRA
Colaborador en los experimentos en ELETTRA
Colaborador en los experimentos en ELETTRA

D. José Luis Bris
Dr. Joaquín Campos
D. Ignacio Carabias
Dra. Ana Soubrié

Asistencia en las medidas de espectrofotometría
Asistencia en las medidas de espectrofotometría
Asistencia en las medidas de DRX
Asistencia en las medidas de AFM

CSIC

Beca JAE/ Disfrute de instalaciones

Luis*, Tina* y Silvia*
Resto de Familia*

Padre, Madre y Señora, respectivamente
Familia

** Agradecimiento especial*

Resumen

Ciertos fenómenos físicos de la naturaleza producen fotones con longitudes de onda comprendidas en los intervalos espectrales llamados ultravioleta extremo (EUV, 10-100 nm) y lejano (FUV, 100-200 nm), regiones donde la mayoría de los materiales de la naturaleza se tornan fuertemente absorbentes. La manipulación y detección de dichos fotones es fundamental para obtener información acerca de los procesos que los generan. Esto ha creado una demanda creciente de instrumentación óptica que, a su vez, requiere de unos recubrimientos eficientes. Para el diseño de los recubrimientos en el EUV/FUV es necesario disponer de constantes ópticas precisas de los materiales que van a ser empleados. El objetivo de este trabajo ha sido proporcionar a la comunidad científica nuevos recubrimientos para el EUV/FUV así como conjuntos extensos y congruentes de constantes ópticas para su diseño.

En el campo de la obtención de las constantes ópticas hemos seguido una línea de investigación iniciada en GOLD en la década de los 90 que consiste en la búsqueda y caracterización de materiales con propiedades prometedoras en el EUV/FUV. Así, hemos caracterizado los siguientes materiales en un amplio intervalo del espectro electromagnético: Sr, Lu y SrF_2 . Con la caracterización del Lu se ha completado el análisis de las constantes ópticas de todos los lantánidos (Exceptuando el Pm, por no poseer isótopos estables). El SiC y el B_4C ya habían sido previamente caracterizados en el EUV/FUV; se han caracterizado aquí en el visible y ultravioleta cercano para diseñar ciertos recubrimientos en el EUV/FUV que requieren de restricciones adicionales en el visible y alelados.

La contribución en el campo de las constantes ópticas también incluye la evaluación de las constantes obtenidas y el desarrollo de modelos de ajuste. Obtenidos los conjuntos de constantes ópticas experimentalmente, es necesario disponer de herramientas para analizar su congruencia global. Para ello hemos desarrollado nuevos algoritmos que, en la evaluación de la congruencia de las constantes ópticas obtenidas, asignan más peso al intervalo espectral deseado. Otro objetivo ha sido el desarrollo de modelos que describen las constantes ópticas de materiales en función de unos pocos parámetros. En esa línea, hemos obtenido un nuevo algoritmo para generar modelos analíticos a partir de los modelos empíricos que se utilizan habitualmente en el ajuste de datos experimentales de constantes ópticas.

Con las constantes ópticas de los materiales anteriores y de otros caracterizados en el pasado, hemos llevado a cabo el desarrollo y caracterización de los siguientes recubrimientos para el EUV/FUV:

i) Nuevos recubrimientos eficientes de banda estrecha para la línea Lyman β del Hidrógeno (102.57 nm) de interés en física solar y astrofísica. Estos recubrimientos, que operan por reflexión, rechazan además la línea Lyman α del Hidrógeno (121.57 nm), que es más intensa en las observaciones de la corona solar y puede enmascarar la línea Lyman β .

ii) Nuevos recubrimientos de transmitancia para la línea OI del Oxígeno (135.6 nm) y la banda del N_2 Lyman-Birge-Hopfield (140-180 nm) y con restricciones adicionales en el visible y ultravioleta cercano. Se trata de un recubrimiento para el instrumento "Atmospheric Photometer" (AP) a bordo del satélite chino de observación de la tierra Feng-Yun 3D, que está previsto poner en órbita en 2016.

iii) Caracterización en el intervalo 4-90 nm de todos los testigos de vuelo de los recubrimientos de reflectancia para el EUV del instrumento "Atmospheric Imaging Assembly" (AIA) a bordo del satélite "Solar Dynamic Observatory" (SDO), en órbita desde 2010. Esta calibración permitirá un mejor análisis de los datos obtenidos por el AIA.

Abstract

Some natural processes produce photons whose wavelengths are in the spectral ranges called extreme ultraviolet (EUV, 10-100 nm) and far ultraviolet (FUV, 100-200 nm), regions where most of the materials in nature turn absorbent. The manipulation and detection of these photons are fundamental in order to obtain information about the processes which generate them. Nowadays there is an increasing demand of optical instrumentation that requires more efficient optical coatings. Accurate optical constants in the FUV/EUV are needed for the design of coatings. The main goal of the present work has been to provide new optical coatings for the EUV/FUV ranges along with accurate and extensive optical data sets.

Regarding optical constant research, in this work we have continued a research initiated by GOLD in the 1990s, aimed to find and characterize materials whose optical constants are suitable for the development of new coatings in the EUV/FUV ranges. Sr, Lu and SrF_2 have been characterized in this work. With Lu, we have already completed the characterization of all the lanthanides, except Pm, that has not stable isotope. SiC and B_4C had been previously characterized in the EUV/FUV range by GOLD; at this time we have also characterized these materials in the visible and ultraviolet ranges and obtained self-consistent optical constants in a wide spectrum, which will enable the design of new optical coatings for the EUV/FUV ranges with additional restrictions in the visible or ultraviolet.

Not only have we characterized new materials, but also we have developed new tools for the optical-constant consistency analysis, along with new mathematical models to fit them. Hence, once the optical constants were experimentally determined, it is necessary to check their consistency. In this work, we have developed a new algorithm to evaluate the consistency of the optical-constant data sets. The new algorithm is able to give more weight to one spectral range over the others in the consistency analysis. On the other hand, we have developed a new algorithm to generate new analytical models starting from empirical and non-analytical models which are frequently used to fit experimental data.

Taking advantage of the previously described tools, we have developed and/or characterized the following optical coatings for the EUV/FUV range:

i) New narrowband reflective coatings for the Hydrogen Lyman β line (102.57 nm); Observations in the latter line may unveil essential information for solar physics and astrophysics. These coatings were developed with the strong constraint to reject the Hydrogen Lyman α line (121.57 nm), which is the most intense line in solar observation and hence it could mask the weaker Lyman β line. The key parameter of these new coatings is that they have a high Lyman β -to- Lyman α reflectance ratio.

ii) New transmittance coatings tuned at either the Oxygen I line (135.6 nm) or the central part of the N_2 Lyman-Birge-Hopfield band (around 140-180 nm), with additional constraints in the near ultraviolet and visible ranges. These coatings were developed for the engineering model of the “Atmospheric Photometer” (AP) instrument, aboard the spacecraft Feng-Yun 3D (FY-3D), developed by China, and scheduled to be launched in 2016.

iii) We have characterized in the 4-90 nm range the EUV flight witnesses of “Atmospheric Imaging Assembly” (AIA) instrument, aboard “Solar Dynamic Observatory” (SDO), which is in orbit since 2010. This calibration is expected to further improve the understanding of the AIA instrument response and the corresponding interpretation of data furnished by AIA.

Índice

Capítulo 1. Introducción general	1
1.1-Introducción histórica	1
1.2-Estado del arte en el FUV/EUV	3
1.2.1 Estado del arte en los recubrimientos para el EUV	3
1.2.2 Estado del arte en los recubrimientos para el FUV	4
1.2.3 Estado del arte en la búsqueda y caracterización de nuevos materiales para el FUV/EUV	4
1.2.4 Estado del arte en el desarrollo de herramientas para facilitar la caracterización de materiales	5
1.3-Objetivo del trabajo realizado	6
1.4-Estructura del trabajo	8
Capítulo 2. Fundamentos teóricos	9
2.1-Introducción	9
2.2-Ecuaciones de Maxwell	9
2.2.1 Ecuaciones de Maxwell en el vacío	9
2.2.2 Ecuaciones de Maxwell en medios materiales	10
2.2.3 Ecuación de ondas en medios no conductores	11
2.2.4 Ecuación de ondas en medios conductores	12
2.3-Reflexión y transmisión en una multicapa	13
2.3.1 Ondas planas en la frontera entre dos medios	13
2.3.2 Ecuaciones de Fresnel	14
2.3.3 Multicapas: Reflexión y transmisión	16
2.3.4 Generalización para una multicapa de M láminas	18
2.3.5 Reflectancia y transmitancia de una multicapa	19
2.3.6 Ley de Beer-Lambert	20
2.3.7 Rugosidad en una superficie	20
2.4-El índice de refracción	21
2.4.1 Interacción de los fotones con la materia en bajas energías	21
2.4.2 Interacción de los fotones con la materia en altas energías	24
2.5-Relaciones de dispersión	25
2.5.1 La integral de Kramers-Krönig	26
2.5.2 Teorema de Superconvergencia y reglas de suma	28
Capítulo 3. Equipos y técnicas experimentales	31
3.1-Introducción	31
3.2-Equipos experimentales	31
3.2.1 Equipo experimental del Grupo de Óptica de Láminas Delgadas	31

3.2.2 Línea BEAR del sincrotrón ELETTRA	44
3.2.3 Línea 6.3.2 del sincrotrón ALS	45
3.3-Técnicas experimentales.....	46
3.3.1 Técnicas de deposición de láminas delgadas	46
3.3.2 Caracterización óptica: transmitancia, reflectancia y elipsometría	48
3.3.3 Fabricación de sustratos en lámina delgada.....	49
3.3.4 Determinación de los espesores de las láminas depositadas.....	50
Capítulo 4. Determinación de las constantes ópticas	53
4.1-Introducción: Lu, Sr y SrF ₂	53
4.1.1 Estudios previos	54
4.2-Equipos experimentales: Lu, Sr y SrF ₂	56
4.2.1 Preparación de las muestras	56
4.2.2 Equipos de medida	57
4.3- Resultados y discusión: Lu, Sr y SrF ₂	58
4.3.1 Medidas de transmitancia y determinación del coeficiente de extinción k	58
4.3.2 Cálculo del índice de refracción a partir de las relaciones de dispersión.	68
4.3.3 Evaluación de la congruencia de las constantes ópticas obtenidas	73
4.4-Conclusiones: Lu, Sr y SrF ₂	74
4.5-Introducción: SiC y B ₄ C.....	76
4.5.1 Estudios previos.....	76
4.6-Preparación de las muestras: SiC y B ₄ C.....	77
4.7-Resultados y discusión: SiC y B ₄ C	78
4.7.1 Obtención de constantes ópticas	78
4.7.2 Obtención de un conjunto de constantes ópticas congruente a partir de las relaciones de dispersión de KK.....	81
4.7.3 Evaluación de la congruencia de las constantes ópticas obtenidas	84
4.7.4 Cálculo de la energía del gap	85
4.8-Conclusiones: SiC y B ₄ C	87
Capítulo 5. Nuevos algoritmos y modelos para constantes ópticas	89
5.1-Introducción.....	89
5.2-Funciones ventana para la integral de Kramers-Krönig.....	90
5.2.1 Introducción.....	90
5.2.2 Nuevas relaciones de KK que incluyen una función ventana.....	91
5.2.3 Nuevas reglas de suma para el índice de refracción complejo multiplicado por una función ventana.....	95
5.2.4 Aplicación de las nuevas reglas de suma a datos experimentales de SrF ₂ y SiC.....	98
5.2.5 Conclusiones	102

5.3-Modificación del modelo de Tauc-Lorentz para convertirlo en un modelo analítico. ...	103
5.3.1 <i>Introducción</i>	103
5.3.2 <i>Nuevo modelo analítico de Tauc-Lorentz</i>	106
5.3.3 <i>Aplicación a datos experimentales: SiC y Si₃N₄</i>	110
5.3.4 <i>Conclusiones</i>	113
Capítulo 6. Multicapas para el FUV/EUV	115
6.1-Introducción.....	115
6.2-Recubrimientos de reflectancia de banda estrecha para la línea espectral Lyman β del Hidrógeno.....	116
6.2.1 <i>Introducción</i>	116
6.2.2 <i>Equipo experimental</i>	118
6.2.3 <i>Resultados</i>	118
6.2.4 <i>Conclusiones</i>	126
6.3-Filtros de transmitancia en el FUV para el instrumento “Ionospheric Photometer (IP)” a bordo del satélite “Feng-Yun 3D (FY-3D)”	128
6.3.1 <i>Información acerca del instrumento</i>	128
6.3.2 <i>Especificaciones técnicas</i>	129
6.3.3 <i>Diseño y fabricación de los filtros</i>	130
6.3.4 <i>Resultados experimentales</i>	131
6.3.5 <i>Evolución de la transmitancia de los filtros en el tiempo</i>	135
6.3.6 <i>Conclusiones</i>	136
6.4-Calibraciones fuera de banda de multicapas para el instrumento “Atmospheric Imaging Assembly (AIA)” a bordo del “Solar Dynamics Observatory (SDO)”	137
6.4.1 <i>Información acerca del instrumento</i>	137
6.4.2 <i>Calibraciones del instrumento</i>	138
6.4.3 <i>Constantes ópticas y modelos de reflectancia</i>	139
6.4.4 <i>Medidas experimentales en la región 48.7-90.0 nm y su comparación con los resultados de las extrapolaciones de los modelos.</i>	155
6.4.5 <i>Conclusiones</i>	157
Capítulo 7. Conclusiones	159
7.1-Conclusiones generales.....	159
Bibliografía	161

Capítulo 1. Introducción general

1.1- Introducción histórica

Un recubrimiento óptico consiste en una o varias láminas delgadas de materiales que se depositan sobre un elemento óptico con el fin de optimizar sus propiedades ópticas. Su funcionamiento se basa en la superposición coherente de los múltiples haces provenientes de las distintas intercaras. La respuesta de un recubrimiento óptico depende de la naturaleza, el número, el espesor y el orden de las láminas que lo componen.

El comienzo de la utilización de la ingeniería de superficies ópticas por el ser humano se remonta a la cultura griega, cuando las superficies de los metales eran pulidas hasta lograr la calidad de espejos, y eran usados como tales. Posteriormente en el siglo XVI, se produjeron los llamados espejos venecianos, en los que se recubría vidrio con una amalgama de mercurio y estaño, agregando posteriormente oro y bronce en proporciones adecuadas, para lograr mayor belleza en las imágenes reflejadas. Ésta puede ser considerada la primera muestra de recubrimientos ópticos. Más recientemente, en 1817, Fraunhofer [1] observó una reducción de la reflectancia cuando la superficie de ciertos vidrios se vio deslucida artificialmente mediante el tratamiento con ácidos. Esta es probablemente la primera referencia a un recubrimiento antirreflejante. Posteriormente, en 1818, Fresnel [2] dedujo sus famosos coeficientes para una onda que incide sobre una superficie frontera entre dos medios; de esas ecuaciones se deduce cuál debe ser el espesor y el índice de refracción de dicha lámina para obtener un recubrimiento antirreflejante perfecto. En 1886, Lord Rayleigh [3] observó una reducción en la reflectancia de las superficies de vidrio, y comprobó que al pulir la superficie de un vidrio su reflectancia disminuye debido a que en la superficie del mismo se forma una lámina delgada con un índice de refracción diferente, que hace de recubrimiento antirreflejante. Como un hito en la historia de las láminas delgadas en óptica, la concepción de la teoría de Fabry-Perot [4] en 1899 abrió el camino hacia la descripción teórica de estructuras multicapa. Esta teoría básica describe la interferencia de las ondas parciales reflejadas en dos superficies ópticas plano-paralelas, lo cual puede ser considerado como el elemento fundamental de todos los sistemas de recubrimientos ópticos.

Posteriormente, en el siglo XX se han producido grandes avances en la tecnología de láminas delgadas, entre los que cabe destacar los obtenidos en la década de los 30: Rouard [5] observó que un recubrimiento de lámina delgada metálica aumentaba la reflectancia del vidrio. Pfund [6] depositó por evaporación láminas de sulfuro de zinc para hacer divisores de haz (beam splitters) con bajas pérdidas para los interferómetros de Michelson. Strong [7] produjo recubrimientos antirreflejantes mediante la evaporación de fluorita (CaF_2) y consiguió reducir la reflectancia original del vidrio en el visible en un 89%. Por otra parte, Geffcken [8] construyó el primer filtro interferencial basado en láminas metal-dieléctrico.

Poco después, durante la Segunda Guerra Mundial, la necesidad de mejorar la eficacia de los instrumentos ópticos, tales como prismáticos, telescopios y periscopios, hizo que el desarrollo y producción de recubrimientos ópticos experimentase un rápido crecimiento, el cual no se detuvo tras la conclusión de dicha guerra, sino que experimentó un avance

espectacular, sobre todo impulsado por el desarrollo de aplicaciones que los demandaban, como por ejemplo, los láseres.

En este trabajo se presentan recubrimientos desarrollados para el ultravioleta lejano (FUV, far ultraviolet) y ultravioleta extremo (EUV, extreme ultraviolet), si bien alguno de ellos se extenderá hasta la región del ultravioleta, visible e infrarrojo (UV-vis-IR) por un lado y a la de los rayos X blandos (SXR, soft X-rays) por el otro. Concretamente, la región del FUV se extiende entre 100-200 nm (6.2-12.4 eV), y la región del EUV se extiende entre 10 y 100 nm (12.4-124 eV). En la figura 1.1 se muestran las distintas subdivisiones que se hacen del espectro electromagnético, en función de la longitud de onda y de la energía.

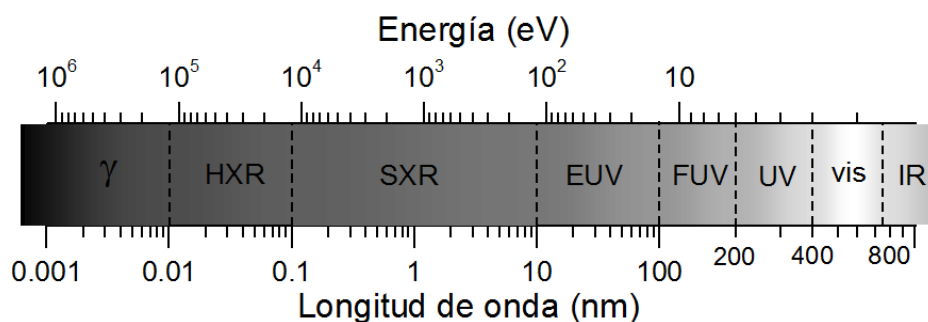


Figura. 1.1. Representación del intervalo del espectro electromagnético comprendido entre los rayos gamma y el infrarrojo, en escala logarítmica.

Continuando con el repaso histórico y particularizando en la región del FUV-EUV, tras la Segunda Guerra Mundial hubo pocos avances en comparación con los producidos en otras regiones espectrales, como el visible o el infrarrojo. La causa principal es que la radiación FUV-EUV es fuertemente absorbida por casi todos los materiales, incluido el aire (esto obliga a trabajar en condiciones de vacío), lo que complica y encarece el trabajo en esa región; esta fuerte absorción de los materiales a lo largo del FUV-EUV se debe a que contiene las energías de los fotones que producen las transiciones de los electrones de la capas externas del átomo, que forman un continuo de alta absorción en la mayoría de los materiales.

Los autores cuyos trabajos supusieron avances destacados en el desarrollo de recubrimientos para la región del FUV-EUV son: Banning [9] en 1942, que, en la búsqueda de materiales con alta reflectancia en el FUV, midió la reflectancia de Al, Be, Cu y Ag; Abelès [10], quien en 1950 desarrolló el método matricial, que sigue utilizándose, para calcular las propiedades ópticas de los recubrimientos multicapa; Hass y Tousey [11], descubrieron en 1959 que el Al protegido con MgF_2 conservaba una alta reflectancia en el FUV; Choyke *et al.* [12], descubrieron en 1972 la alta reflectancia del SiC en el EUV; también en 1972 Spiller [13] propuso la creación de multicapas en el EUV a pesar de la absorción de los materiales en esa región, basadas en la baja absorción de los materiales en energías inmediatamente inferiores a un borde de absorción del material.

Recientemente, la disponibilidad de fuentes de radiación más intensas que emiten en longitudes de onda cortas (sincrotrones, láseres de electrones libres, fuentes de plasma inducido por láser, etc), unida a los avances de la tecnología de vacío y de nuevas técnicas de deposición de recubrimientos, ha estimulado el desarrollo de recubrimientos ópticos, de gran

utilidad en muchos campos como la astronomía, la física solar, la física de la atmósfera, la litografía, etc.

A continuación, se resumen las contribuciones más recientes en el desarrollo de recubrimientos para el FUV/EUV.

1.2- Estado del arte en el FUV/EUV

1.2.1 Estado del arte en los recubrimientos para el EUV

En los últimos años, se han desarrollado numerosos recubrimientos para el EUV basados en la reducida absorción de materiales en energías inmediatamente inferiores a sus bordes de absorción. Se divide el intervalo EUV en dos partes, 12.5-60 nm y 60-100 nm:

-En el intervalo 12.5-60 nm, hay varios materiales con estas bandas específicas de baja absorción, tales como las que están por encima del borde L del Si, Al y Mg, y el borde M del Sc. A estos materiales se les denomina espaciadores. A continuación se resumen los recubrimientos que operan por reflexión o transmisión en este intervalo.

Recubrimientos que operan por reflexión: en los últimos años ha habido un importante desarrollo de multicapas con alta reflectancia basadas en los mencionados espaciadores. Entre las multicapas más eficientes tenemos Mo/Si [14], Sc/Si [15], B₄C/Si [14], Al/SiC [16], SiC/Si [14] y Mg/SiC [17]. En este tipo de multicapas, el avance ha sido espectacular en los 30 últimos años, y en la actualidad se continúa investigando en su desarrollo y optimización para muy diversas aplicaciones.

Recubrimientos que operan por transmisión: se presenta la dificultad de que los materiales en esta región son fuertemente absorbentes, lo que impide usar sustratos convencionales, y por tanto, estos recubrimientos sólo son posibles cuando están autoportados, como por ejemplo la multicapa Sn/C [18]. Los recubrimientos de transmisión más frecuentes son las láminas simples autoportadas de materiales en sus regiones de baja absorción, tales como Al, Si, C, Ti, etc, los cuales han sido muy empleados para aplicaciones como instrumentación para astronomía o física solar [19].

-En el intervalo 60-100 nm, la mayoría de materiales tienen una fuerte absorción, por lo que existen pocos recubrimientos eficientes.

Recubrimientos que operan por reflexión: se suelen utilizar recubrimientos de una sola lámina de materiales como el Ir [20] o el SiC [21]. Recientemente se han caracterizado todos los materiales lantánidos, que presentan un intervalo de absorción relativamente baja en esta región. Ello ha permitido el desarrollo de algunas multicapas de reflexión basadas en lantánidos, con una eficiencia moderadamente alta en una banda estrecha [22] [23] [24] [25]. También, se han desarrollado recientemente nuevas multicapas de Mg/SiC [26], basadas en la relativamente baja absorción del Mg; estas multicapas reflejan eficientemente en bandas estrechas individuales o múltiples, centradas en longitudes de onda comprendidas entre 25 y 80 nm.

Recubrimientos que operan por transmisión: la gran absorción de los materiales en esta región limita la eficiencia de los recubrimientos que operan por transmisión, obligando con frecuencia a prescindir del uso de sustrato. El In y el Sn son dos materiales con baja absorción, por lo que se han usado como láminas simples autosoportadas [27], o como recubrimientos autosoportados (multicapas de In/Sn [18]). El principal inconveniente de estos dos materiales como componentes de multicapas es que no son suficientemente estables.

1.2.2 Estado del arte en los recubrimientos para el FUV

Se divide el intervalo FUV en dos partes:

-En el intervalo 100-115 nm, la escasez de materiales transparentes ha impedido el desarrollo de recubrimientos eficientes.

Recubrimientos que operan por reflexión: en la actualidad no existen recubrimientos capaces de seleccionar una banda estrecha. En cambio sí se dispone de espejos eficientes de banda ancha, que están basados en la elevada reflectancia del Al y la transmitancia de una lámina protectora de LiF [28] [29] [30], el material de la naturaleza que tiene el cut-off (borde de absorción, longitud de onda por encima de la cual el material es transparente) en la longitud de onda más corta posible: ~105 nm;

Recubrimientos que operan por transmisión: se conoce un recubrimiento peculiar de banda estrecha resultado de una lámina de In, el cual aún es relativamente transparente por debajo de 105 nm, depositada sobre un sustrato de LiF [31].

-En el intervalo 115-200 nm, el MgF_2 es el material espaciador preferido para la fabricación de multicapas, dado que su cut-off (longitud de onda por encima de la cual se puede considerar un material como no absorbente) está en ~115 nm. Esto hace que se hayan desarrollado recubrimientos multicapa de transmisión o reflexión basados en MgF_2 [32], y un segundo material elegido entre Al u otros fluoruros, como por ejemplo BaF_2 , LaF_3 o NdF_3 [33] [34]. Cabe señalar que en esta región, el espejo de banda ancha más eficiente consiste en una lámina de Al protegida con MgF_2 .

Todos estos recubrimientos han sido desarrollados gracias al descubrimiento de materiales con regiones de baja absorción en el FUV-EUV, lo cual es un elemento indispensable en el desarrollo de nuevas multicapas. A continuación se describen las contribuciones más recientes sobre la búsqueda y caracterización de nuevos materiales.

1.2.3 Estado del arte en la búsqueda y caracterización de nuevos materiales para el FUV/EUV

El desarrollo de recubrimientos en el FUV/EUV requiere de materiales con baja absorción, además de un conocimiento preciso del índice de refracción ($N=n+ik$) de los materiales depositados en láminas delgadas.

Estudios recientes han sugerido que, tanto los lantánidos, como los alcalino-térreos y algunos metales de transición disponen de una región de baja absorción en el EUV. Con esta

motivación, en las tres últimas décadas ha habido grandes avances en la caracterización de estos materiales:

-Lantánidos: Se han caracterizado todos los materiales lantánidos (excepto el Prometio, cuyos isótopos son todos radiactivos): **Yb** [35], **Ce** [36], **Pr** [37], **Eu** [38], **Er** [39], **Ho** [40], **Tm** [41], **Lu** [42], Sm [43], La, Tb, Nd, Gd y Dy [44].

-Alcalino-térreos: **Mg** [45], **Ca** [46], **Sr** [47] y Be [48].

-Metales de transición: **Sc** [49], **Mo** [48] [50] [51], Y [52], Zr y Ti [50].

Se ha descubierto que algunos metaloides y compuestos metaloide-no metal tienen valores altos de reflectancia en las longitudes de onda largas del EUV. Estos materiales también presentan una menor absorción en el visible. Por ello, recientemente se han caracterizado:

-Metaloides: **B** [53] y Si [54]

-Compuestos metaloide-no metal: **SiC** [55] [56] y **B₄C** [57]

En general la región de transparencia de casi todos los materiales de la naturaleza, como óxidos o nitruros, acaba en longitudes de onda superiores a las del FUV. En cambio, la región de transparencia de los fluoruros alcalinos y alcalino-térreos se extiende hasta el FUV. Por esa razón, recientemente se han caracterizado:

-Fluoruros: **SrF₂** [58], LiF [59], AlF₃ y MgF₂ [60].

(En negrita se han resaltado los materiales que han sido caracterizados por GOLD). La búsqueda y caracterización de nuevos materiales ha sido un elemento fundamental en el desarrollo de nuevas multicapas en el FUV-EUV y requiere de unas herramientas especiales para analizar los datos experimentales obtenidos y para calcular a partir de ellos valores congruentes de constantes ópticas. A continuación se describen las contribuciones más recientes acerca de esta materia.

1.2.4 Estado del arte en el desarrollo de herramientas para facilitar la caracterización de materiales

Una de las principales herramientas para analizar y evaluar los valores obtenidos de constantes ópticas son las relaciones de dispersión de Kramers-Krönig (KK, deducidas en los años 20) [61] [62] junto con sus reglas de suma asociadas [63] [64], obtenidas posteriormente. Cualquier conjunto de datos de constantes ópticas, e incluso cualquier modelo que se use para ajustarlas, ha de respetar las relaciones de KK, ya que estas constituyen el test fundamental de congruencia.

Las relaciones de KK tienen un carácter no local y, por lo tanto, para obtener una plena caracterización de un material, se necesita conocer bien el coeficiente de extinción o bien el índice de refracción en todo el espectro electromagnético. En casos prácticos, es necesario utilizar extrapolaciones de los datos en las regiones espectrales en las que no se dispone de datos experimentales. Estas extrapolaciones inducen errores. Un buen ejemplo de la

importancia de las extrapolaciones en el análisis de KK lo tenemos en los paquetes de software comerciales de análisis de KK (Omnic, Perkin Elmer, Kluger Nielsen, etc) , los cuales, para unos mismos datos experimentales, proporcionan resultados diferentes en función de los diferentes algoritmos de extrapolación que usa cada uno [65]. Hasta ahora, no se dispone de herramientas específicas para analizar la congruencia de conjuntos de constantes ópticas que permitan seleccionar unos intervalos espectrales frente a otros, bien para dar más peso a las regiones en las que se dispone de datos experimentales, limitando la contribución de las extrapolaciones al resultado, o bien para dar más peso a las regiones donde se han empleado extrapolaciones, evaluando la bondad de éstas.

Por otro lado, a veces resulta práctico describir las constantes ópticas de un material mediante modelos matemáticos sencillos, dependientes de unos pocos parámetros. Desde hace tiempo se vienen usando modelos empíricos para describir las constantes ópticas de los materiales, tales como los de Cauchy, Sellmeier, Forouhi y Bloomer para materiales dieléctricos, o el de Drude [66], para metales. En 1996 Jellison y Modine [67] propusieron un modelo para describir materiales dieléctricos, el denominado modelo de Tauc-Lorentz, el cual se usa frecuentemente; sin embargo, se verá que no cumple ciertas propiedades básicas que han de cumplir las constantes ópticas de cualquier material que se pretenda modelizar, tal y como está actualmente formulado este modelo. Este defecto observado en el modelo de Tauc-Lorentz también se presenta en otros modelos usados habitualmente, con la excepción del modelo de Drude.

1.3- Objetivo del trabajo realizado

El objetivo global de este trabajo es el desarrollo de nuevos recubrimientos ópticos para dar solución a las necesidades de las comunidades científicas en la región del EUV-FUV. Este objetivo global ha sido llevado a la práctica a través de los siguientes objetivos concretos.

El primero de estos objetivos ha sido el diseño, preparación y caracterización de multicapas reflectantes de banda estrecha para la línea espectral Lyman β (102.6 nm) del Hidrógeno. La formación de imágenes de la corona solar en la línea Lyman β aportará mucha información acerca de la dinámica solar. Un requisito exigente para estas multicapas es que simultáneamente han de tener una reflectancia muy baja en la línea espectral Lyman α (121.6 nm) del Hidrógeno, la línea más intensa en las observaciones solares, y esa intensidad puede enmascarar la formación de imágenes en la línea Lyman β . Este trabajo continúa y amplía el trabajo pionero de Edelstein [68], y el objetivo final es el desarrollo de multicapas eficientes que permitan realizar las observaciones referidas.

El segundo objetivo ha sido el diseño, fabricación y caracterización de dos tipos diferentes de filtros de transmitancia de banda estrecha en el FUV para el modelo de ingeniería del instrumento *Ionospheric Photometer* (IP), dentro del satélite *FY-3D*, diseñado para estudiar la ionosfera terrestre. Los principales requisitos de estos filtros son una alta transmitancia bien en la longitud de onda de la línea OI en 135.6 nm o bien en la banda LBH del Nitrógeno, (~ 140 -180 nm), y al mismo tiempo, una baja transmitancia fuera de banda, especialmente en el visible. Esta investigación y desarrollo se han realizado por encargo del

CSSAR (Center for Space Science and Applied Research, China). El instrumento tiene como fecha prevista de lanzamiento el año 2015.

El tercer objetivo ha sido la caracterización de la reflectancia fuera de banda de muestras-testigo de todas las multicapas para el EUV presentes en el instrumento *Atmospheric Imaging Assembly* (AIA) a bordo del *Solar Dynamic Observatory* (SDO), diseñado para estudiar la física de la corona solar, y actualmente en órbita desde 2010. Hasta el momento la respuesta de las multicapas solamente había sido estudiada en el intervalo 4-50 nm. En cambio se desconocía la respuesta del instrumento en el intervalo espectral entre 50 nm y 90 nm. En longitudes de onda más largas no es necesario conocer esta respuesta, ya que los filtros de Al del instrumento absorben fuertemente los fotones con longitudes de onda mayores que 90 nm. Esta calibración entre 50 y 90 nm es necesaria para el análisis detallado de los datos transmitidos por el instrumento AIA e involucra no sólo la medida de la reflectancia de las multicapas sino la aplicación de modelos que describen esta reflectancia en función de los parámetros intrínsecos de cada multicapa. Esta investigación se ha realizado en el marco de una colaboración con la División de Física del laboratorio Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL)

Estos son los tres objetivos concretos del trabajo aquí presentado. Para poder alcanzar este tipo de objetivos es fundamental disponer de datos precisos de las constantes ópticas de los materiales candidatos a formar parte de las multicapas. Por ello, a los objetivos anteriores, se ha añadido otro relacionado con la caracterización óptica de materiales, bien dirigido a las multicapas para los objetivos anteriores, o bien para futuras multicapas para el FUV-EUV.

Como se ha dicho, el desarrollo de recubrimientos en el FUV-EUV requiere en particular de materiales con baja absorción y además necesita de un conocimiento preciso de las constantes ópticas de los materiales preparados en forma de lámina delgada en todo el intervalo espectral de interés. En este sentido, se ha continuado con una línea de investigación iniciada por GOLD hace casi dos décadas, que consiste en la caracterización de las constantes ópticas de materiales prometedores para el FUV-EUV. En el trabajo aquí presentado se han caracterizado los siguientes materiales: Lu, Sr, SrF_2 , SiC y B_4C . En muchos casos las caracterizaciones se han realizado en intervalos espectrales más amplios, desde el SXR hasta el IR. Finalmente, para el desarrollo y caracterización de las multicapas objetivo, mencionadas en los párrafos anteriores, se han utilizado materiales que han sido caracterizados en este trabajo y otros que lo fueron en trabajos previos de GOLD.

Dentro del objetivo de la caracterización óptica de materiales, hay una segunda vertiente que se ha abordado, que ha sido la de crear nuevas herramientas teóricas que simplifican o mejoran el análisis de los datos obtenidos experimentalmente. Estas herramientas han sido, por un lado, la inclusión de una función ventana en las relaciones de dispersión de KK. Esto da como resultado unas nuevas reglas de suma que, en el análisis de la congruencia de conjuntos de constantes ópticas, permiten dar más peso a unos intervalos frente a otros mediante la elección adecuada de la función ventana. Esto permite analizar, bien las regiones en las que se dispone de datos experimentales, para limitar la contribución de las extrapolaciones, o bien las regiones donde se han empleado extrapolaciones, para

evaluar la bondad de éstas. Por otro lado, se ha revisado la aplicación del modelo de Tauc-Lorentz, que es ampliamente usado para describir las constantes ópticas de los materiales dieléctricos. Ese modelo, como se verá, no cumple algunas de las propiedades básicas que deben cumplir los modelos de constantes ópticas de cualquier material a modelar y por lo tanto no es matemáticamente correcto, lo que introduce errores en el análisis de los datos experimentales. En este trabajo se ha modificado este modelo hasta hacerle cumplir los requisitos matemáticos necesarios.

En resumen, el objetivo último de este trabajo ha sido dar solución a problemas reales de las comunidades científicas en el campo de los recubrimientos para el ultravioleta lejano y extremos, incorporando un amplio abanico de recursos.

1.4- Estructura del trabajo

La estructura de este trabajo es la siguiente:

Tras este capítulo introductorio, en el capítulo 2 se derivan y muestran los conceptos teóricos básicos que serán aplicados a lo largo del trabajo.

En el capítulo 3 se describen las técnicas y los equipos experimentales que han sido utilizados en el desarrollo del trabajo.

En el capítulo 4 se describe paso a paso el proceso de obtención de constantes ópticas de cinco materiales diferentes, Lu, Sr, SrF_2 , SiC y B_4C , a partir de medidas de transmitancia o elipsometría.

En el capítulo 5 se muestra, por una parte, la introducción de una función ventana al análisis de KK, y la deducción de las nuevas reglas de suma asociadas a la elección de la función ventana. Por otra parte, se presenta una modificación del modelo de Tauc-Lorentz para transformarlo en una función que cumpla las condiciones de KK.

El capítulo 6 se centra en el desarrollo y caracterización de recubrimientos ópticos para tres aplicaciones prácticas. En primer lugar, se presentan nuevos recubrimientos ópticos diseñados para optimizar la reflectancia en la línea Lyman β del Hidrógeno, en 102.6 nm, con gran rechazo simultáneo en la línea Lyman α del Hidrógeno, en 121.6 nm. La segunda aplicación práctica consiste en el desarrollo de recubrimientos ópticos diseñados para optimizar la transmitancia en dos líneas clave para el estudio de la ionosfera: la línea 135.6 nm del Oxígeno y la banda 140-180 nm (LBH) del Nitrógeno molecular. La tercera aplicación práctica en este capítulo consiste en la caracterización por primera vez de la respuesta fuera de banda de testigos del instrumento AIA, en el intervalo 50-90 nm.

Finalmente, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones y se propone una serie de vías de investigación que han quedado abiertas tras la realización del trabajo aquí presentado.

Capítulo 2. Fundamentos teóricos

2.1-Introducción

En este capítulo se presenta el formalismo físico que se ha utilizado en este trabajo. Se parte de las bien conocidas ecuaciones de Maxwell para obtener la ecuación de ondas, y ésta se resuelve mediante el uso de una onda plana. Esta solución tendrá ciertas restricciones, de las cuales se deduce uno de los conceptos clave en este trabajo, que es el índice de refracción complejo, N .

Una vez obtenida la solución para la ecuación de ondas, se estudiará cómo las ondas interaccionan con la materia, primero desde el punto de vista monocromático. Los campos eléctrico y magnético experimentan cambios en su fase y en su amplitud (atenuación) al incidir sobre un medio material. Mediante el uso de un ejemplo práctico, una onda incidiendo en la frontera entre dos medios materiales distintos, se deducen las ecuaciones de Fresnel para la reflexión y la transmisión; este resultado será generalizado a una onda propagándose a través de una multicapa. Por último, se deduce la ecuación de Beer-Lambert, la cual permite relacionar la transmitancia de un material con la parte imaginaria de N .

Después se estudiará cómo las ondas interaccionan con la materia, considerando la luz como fotones de diferentes energías. Se muestra de una manera simplificada cómo se comporta la materia cuando es excitada por la luz, y se relaciona este comportamiento con el índice de refracción del material. Esta descripción es útil para predecir, comprobar e incluso extrapolar resultados experimentales.

Para acabar el capítulo, se demuestra que al introducir el principio de causalidad en la formulación anterior, aparecen unas ligaduras para N que relacionan su parte imaginaria con su parte real, y viceversa. Por último, se estudian las propiedades asintóticas de N , las cuales permiten conocer el comportamiento medio de las componentes real e imaginaria de N a lo largo del espectro electromagnético.

2.2-Ecuaciones de Maxwell

En este apartado se formulan las ecuaciones de Maxwell, las cuales sintetizan todo el electromagnetismo clásico.

2.2.1 Ecuaciones de Maxwell en el vacío

Las relaciones de Maxwell pueden ser escritas en el vacío como [69]:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\epsilon_0} \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.2)$$

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

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (2.4)$$

donde $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ representa el campo eléctrico, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ el magnético, $\rho(\mathbf{r}, t)$ la densidad de cargas y $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ la densidad de corriente, siendo estas últimas las fuentes de los campos eléctricos y magnéticos, respectivamente.

Las constantes μ_0 y ϵ_0 , (constante de permeabilidad magnética y constante de permitividad dieléctrica, respectivamente) son características del vacío, y están relacionadas de la forma $\mu_0 \epsilon_0 c^2 = 1$, siendo c la velocidad de la luz en el vacío.

2.2.2 Ecuaciones de Maxwell en medios materiales

En los medios materiales se pueden definir las ecuaciones de Maxwell como:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (2.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) \quad (2.8)$$

Los nuevos campos $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$, denominados desplazamiento eléctrico y campo magnético, vienen dados en componentes como:

$$D_i = \tilde{\epsilon} E_i + P_i + \dots \quad (2.9)$$

$$H_i = \frac{1}{\mu} B_i - M_i + \dots \quad (2.10)$$

donde P_i y M_i representan las componentes de los campos dipolar eléctrico y dipolar magnético, respectivamente; la serie continúa con los términos cuadripolares y de orden superior.

En el caso particular de un medio dieléctrico, la polarización de éste, $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$, surge como respuesta a la presencia de un campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$. Esta relación causa-efecto es también llamada relación constitutiva y se expresa como:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \chi_e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (2.11)$$

siendo χ_e la susceptibilidad eléctrica del medio. También se puede definir $\tilde{\epsilon}$, la permitividad, y ϵ , la constante dieléctrica o permitividad relativa de un material en el medio, de la siguiente manera:

$$\epsilon \epsilon_0 = \tilde{\epsilon} = (\chi_e + 1) \epsilon_0 \quad (2.12)$$

En medios materiales que no sean ferroeléctricos ni ferromagnéticos, para campos débiles comparados con los campos internos atómicos, se puede suponer que un campo eléctrico o magnético induce una polarización eléctrica o magnética linealmente proporcional al valor del campo aplicado:

$$D_i = \sum_j \tilde{\epsilon}_{ij} E_j \quad (2.13)$$

$$B_i = \sum_j \mu_{ij} H_j \quad (2.14)$$

Análogamente para la densidad de corriente:

$$J_i = \sum_j \sigma_{ij} E_j \quad (2.15)$$

donde los tensores $\tilde{\epsilon}_{ij}$, μ_{ij} y σ_{ij} se denominan tensor de permitividad dieléctrica, tensor de permeabilidad magnética y tensor de conductividad, respectivamente, y son independientes del tiempo. Para medios isótropos, estos tensores se convierten en escalares:

$$D = \tilde{\epsilon} E \quad (2.16)$$

$$B = \mu H \quad (2.17)$$

$$J = \sigma E \quad (2.18)$$

En general, en este trabajo se considerarán los medios materiales como lineales, homogéneos e isótropos.

2.2.3 Ecuación de ondas en medios no conductores

Tomando el rotacional en la ecuación 2.7 y junto con la ecuación 2.8, se obtiene:

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - \mu \tilde{\epsilon} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mu \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tilde{\epsilon}} \nabla \rho(\mathbf{r}, t) \quad (2.19)$$

Ecuación que indica la propagación del campo eléctrico con una velocidad $v = \frac{1}{\sqrt{\mu \tilde{\epsilon}}}$. En un medio libre de fuentes de cargas y corrientes, la ecuación de ondas para el campo eléctrico viene dada por:

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.20)$$

Análogamente se puede obtener una expresión similar para $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$. Una posible solución para la ecuación 2.20 es la onda plana armónica, propagándose en dirección y sentido del vector de onda $\mathbf{k}$:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (2.21)$$

La distancia de un frente de ondas al origen del sistema de coordenadas es:

$$\zeta = \frac{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}}{\kappa} \quad (2.22)$$

de manera que se puede utilizar un eje de coordenadas ζ en la dirección de propagación $\boldsymbol{\kappa}$, tal que la fase puede ser escrita como $\varphi = \omega t - \kappa \zeta$. Un frente de ondas se desplaza de modo que su fase permanece constante a lo largo del tiempo, de modo que:

$$d\varphi = \omega dt - \kappa d\zeta = 0 \quad (2.23)$$

Se define *velocidad de fase*, o velocidad de propagación del frente de ondas como:

$$v = \frac{d\zeta}{dt} = \frac{\omega}{\kappa} \Rightarrow \kappa = \omega \sqrt{\mu \varepsilon} \quad (2.24)$$

Finalmente, a partir de las ecuaciones de Maxwell, se puede comprobar que tanto el campo magnético como el eléctrico son perpendiculares a la dirección de propagación, y son a su vez perpendiculares entre sí:

$$\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.25)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu \omega} \boldsymbol{\kappa} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \mathbf{u}_{\boldsymbol{\kappa}} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (2.26)$$

2.2.4 Ecuación de ondas en medios conductores

En los medios conductores, además de la corriente de desplazamiento, existe un término correspondiente a la densidad de corriente $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, en respuesta a la presencia del campo eléctrico. Por tanto, la ecuación de ondas para el campo eléctrico resulta ser:

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \mu \sigma \frac{\partial}{\partial t} \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.27)$$

donde $v = \frac{1}{\sqrt{\mu \varepsilon}}$. Análogamente, se puede obtener una expresión similar para $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$.

Substituyendo la solución 2.21 en la ecuación de ondas, obtenemos:

$$\kappa^2 = \omega^2 \mu \varepsilon \left(1 + i \frac{\sigma}{\omega \varepsilon} \right) \Rightarrow \kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2} N^2 \rightarrow N^2 = \mu_r \varepsilon \left(1 + i \frac{\sigma}{\varepsilon \omega} \right) \quad (2.28)$$

Se observa que hay una marcada diferencia con los medios no conductores en el comportamiento de la constante de propagación κ con la frecuencia. En la relación de dispersión nueva, aparece un nuevo término, $\omega \varepsilon \sigma^{-1}$, relacionado con la capacidad de almacenamiento de energía en forma de campo eléctrico frente a la de disipar ésta en forma de calor por efecto Joule. En la ecuación 2.28, se ha definido N , el llamado índice de refracción complejo. El índice de refracción complejo especifica la diferencia en fase entre dos ondas planas con la misma frecuencia y que se propagan a lo largo de la misma distancia, una en el vacío y otra en el medio material. El origen de esta diferencia de fase está en la excitación de las cargas en el medio con el paso de la onda electromagnética. Como todo objeto complejo, puede ser descompuesto en una parte real (n , o $1 - \delta$) y otra imaginaria (k , nótese la diferencia

de notación con el módulo del vector de ondas, κ) de forma que $N = n + ik = 1 - \delta + ik$. El vector de ondas complejo puede ser reescrito como $\kappa = \frac{\omega}{c}N = \frac{\omega}{c}(1 - \delta + ik)$; teniendo en cuenta el resultado anterior, la onda plana solución a la ecuación de ondas se expresa como:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \kappa \zeta)} = \mathbf{E}_0 e^{-\frac{\omega}{c}k\zeta} e^{-i(\omega t - \frac{\omega}{c}(1-\delta)\zeta)} \\ &= \mathbf{E}_0 e^{-\frac{\omega}{c}k\zeta} e^{-i\omega(t - \frac{\zeta}{c})} e^{-i\frac{\omega}{c}\delta\zeta} \end{aligned} \quad (2.29)$$

La ecuación 2.29 puede ser separada en tres términos diferentes con una clara interpretación física: el término $e^{-i\omega(t - \frac{\zeta}{c})}$ representa una onda propagándose en el vacío (propagación), el término $e^{-i\frac{\omega}{c}\delta\zeta}$ representa el cambio de fase debido a la presencia de un medio material (dispersión), y el término $e^{-\frac{\omega}{c}k\zeta}$ representa la atenuación de la onda al propagarse en un medio material (absorción).

Por último, podemos escribir la fase como $\varphi = \omega t - \frac{\omega}{c}n\zeta$, por lo que la velocidad de fase viene dada por:

$$v = \frac{d\zeta}{dt} = \frac{c}{n} \quad (2.30)$$

2.3-Reflexión y transmisión en una multicapa

2.3.1 Ondas planas en la frontera entre dos medios

Cuando una onda plana incide sobre la frontera entre dos medios con diferentes índices de refracción, se divide en dos ondas: una onda transmitida y una onda reflejada. La existencia de estas dos ondas puede ser demostrada a partir de las condiciones de contorno para la propagación de un campo magnético y eléctrico de un medio a otro [70]. A partir de ahora, los dos medios serán considerados como homogéneos, isótropos y no magnéticos, y por lo tanto sus permeabilidades magnéticas son iguales a la unidad ($\mu_1 = \mu_2 = 1$).

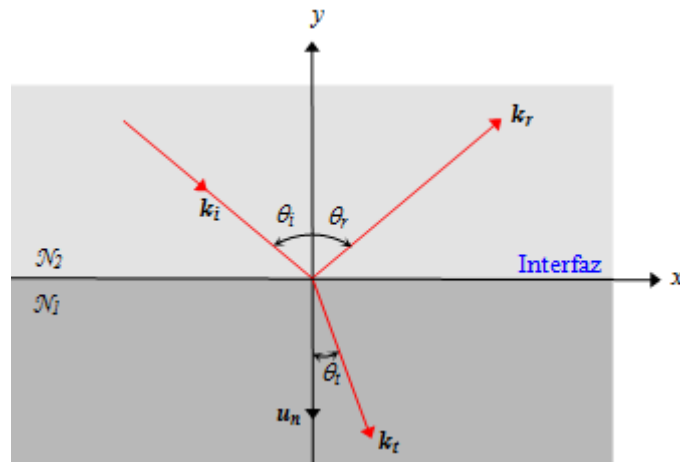


Figura. 2.1. Onda plana incidente en la frontera entre dos medios homogéneos e isótropos.

Sea una onda plana monocromática con frecuencia ω , de la forma $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$, que incide sobre la frontera entre dos medios. Esta onda se dividirá en dos ondas diferentes: la onda reflejada y la onda transmitida. Suponiendo que las ondas resultantes también son planas, las componentes de la onda incidente, reflejada y transmitida pueden ser expresadas de manera general como:

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{0i} e^{-i(\omega_i t - \mathbf{\kappa}_i \cdot \mathbf{r})} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{E}_r(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{0r} e^{-i(\omega_r t - \mathbf{\kappa}_r \cdot \mathbf{r})} \quad (2.32)$$

$$\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{0t} e^{-i(\omega_t t - \mathbf{\kappa}_t \cdot \mathbf{r})} \quad (2.33)$$

donde los subíndices i , r y t corresponden al campo incidente, reflejado y transmitido, respectivamente. Se deducirá la relación que hay entre las fases de las ondas incidente, reflejada y transmitida: en la frontera entre dos medios, la fase de los campos transmitido y reflejado debe de ser igual a la del campo incidente [70]:

$$[\mathbf{\kappa}_i \cdot \mathbf{r} - \omega_i t]_{y=0} = [\mathbf{\kappa}_r \cdot \mathbf{r} - \omega_r t]_{y=0} = [\mathbf{\kappa}_t \cdot \mathbf{r} - \omega_t t]_{y=0} \quad (2.34)$$

Los tres campos deberán tener la misma dependencia funcional en t , por lo que se deduce que tanto la onda incidente, como la reflejada y la transmitida tienen la misma frecuencia:

$$\omega_i = \omega_r = \omega_t \quad (2.35)$$

Además, dado que $\mathbf{\kappa}_i$, $\mathbf{\kappa}_r$, $\mathbf{\kappa}_t$ y $\mathbf{u}_n$ son coplanares, las componentes tangenciales de todos los vectores de onda deben de ser iguales, y por tanto:

$$\kappa_i \sin \theta_i = \kappa_r \sin \theta_r = \kappa_t \sin \theta_t \quad (2.36)$$

Como la onda incidente y reflejada están en el mismo medio, los módulos de sus vectores de onda serán iguales, $\kappa_i = \kappa_r$, y por tanto se obtiene la ley de la reflexión:

$$\theta_i = \theta_r \quad (2.37)$$

Y de la otra igualdad, $\kappa_i \sin \theta_i = \kappa_t \sin \theta_t$, junto con la ecuación 2.28, se deduce la ley de Snell:

$$N_i \sin \theta_i = N_t \sin \theta_t \quad (2.38)$$

2.3.2 Ecuaciones de Fresnel

Una vez analizada la dependencia entre las fases de las ondas $\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{E}_r(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t)$, se analiza la relación que existe entre las amplitudes $\mathbf{E}_{0i}$, $\mathbf{E}_{0r}$ y $\mathbf{E}_{0t}$. Las condiciones de contorno de los campos exigen la continuidad de las componentes tangenciales de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ en la interfaz entre los dos medios.

Al aplicar las condiciones de contorno es conveniente considerar de forma independiente las componentes de los campos $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ paralelas (denotadas con el subíndice $\parallel$) y perpendiculares (denotadas con el subíndice $\perp$) al plano de incidencia.

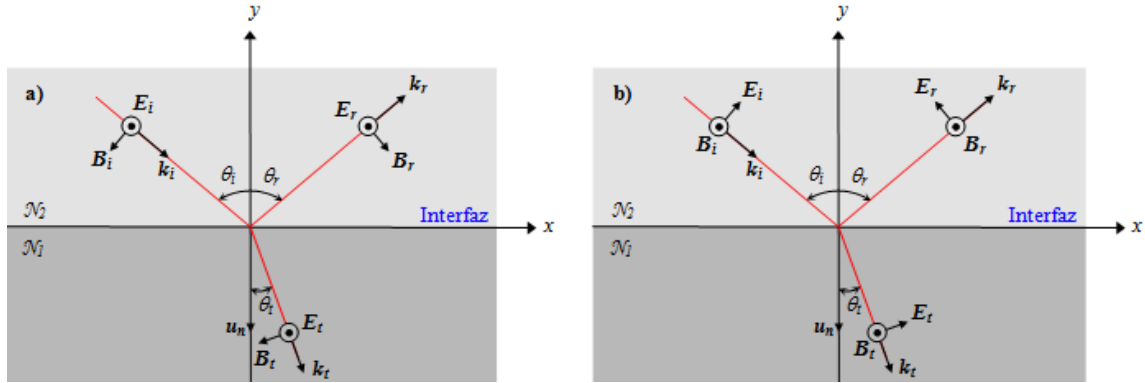


Figura. 2.2. Onda plana incidente en la frontera entre dos medios homogéneos e isótropos. A la izquierda, con el campo eléctrico normal al plano de incidencia. A la derecha, con el campo eléctrico perpendicular al plano de incidencia.

Considerando el caso a) de la figura 2.2, en el que se supone que el campo eléctrico incidente es perpendicular al plano de incidencia, se tiene que:

$$\mathbf{E}_{0i} = (0, 0, A_{\perp}) \quad (2.39)$$

Las componentes de la amplitud de $\mathbf{H}$ se deducen directamente al usar la ecuación 2.26 sobre $\mathbf{E}_{0i}$:

$$\mathbf{H}_{0i} = (-N_2 A_{\perp} \cos \theta_i, -N_2 A_{\perp} \sin \theta_i, 0) \quad (2.40)$$

Lo mismo para las amplitudes de los campos reflejados y transmitidos:

$$\mathbf{E}_{0r} = (0, 0, R_{\perp}) \quad (2.41)$$

$$\mathbf{H}_{0r} = (N_2 R_{\perp} \cos \theta_r, -N_2 R_{\perp} \sin \theta_r, 0) \quad (2.42)$$

$$\mathbf{E}_{0t} = (0, 0, T_{\perp}) \quad (2.43)$$

$$\mathbf{H}_{0t} = (-N_1 T_{\perp} \cos \theta_t, -N_1 T_{\perp} \sin \theta_t, 0) \quad (2.44)$$

Mediante un procedimiento similar, se obtienen las ecuaciones análogas para el caso b) de la figura 2.2, donde se supone que el campo eléctrico incidente está contenido en el plano de incidencia. Como se demuestra en [70], en la frontera entre los dos medios ($y=0$) es necesario introducir una condición de contorno de continuidad para las componentes tangenciales de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$. Formalmente se puede expresar como:

$$\mathbf{u}_n \times [\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_r(\mathbf{r}, t)]_{y=0} = \mathbf{u}_n \times [\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t)]_{y=0} \quad (2.45)$$

$$\mathbf{u}_n \times [\mathbf{H}_i(\mathbf{r}, t) + \mathbf{H}_r(\mathbf{r}, t)]_{y=0} = \mathbf{u}_n \times [\mathbf{H}_t(\mathbf{r}, t)]_{y=0} \quad (2.46)$$

Por lo tanto, aplicando dichas condiciones, para el caso a) obtenemos las ecuaciones 2.47-2.48, y para el caso b), las ecuaciones 2.49-2.50:

$$A_{\perp} + R_{\perp} = T_{\perp} \quad (2.47)$$

$$N_2 A_{\perp} \cos \theta_i - N_2 R_{\perp} \cos \theta_r = N_1 T_{\perp} \cos \theta_t \quad (2.48)$$

$$N_2 A_{\parallel} + N_2 R_{\perp} = N_1 T_{\parallel} \quad (2.49)$$

$$A_{\parallel} \cos \theta_i - R_{\parallel} \cos \theta_r = T_{\parallel} \cos \theta_t \quad (2.50)$$

Las ecuaciones están divididas en dos grupos, uno de los cuales contiene las componentes paralelas al plano de incidencia y el otro contiene las componentes perpendiculares a dicho plano. Por tanto, esos dos tipos de ondas son independientes entre sí, lo cual permite resolver estas ecuaciones en términos de amplitud incidente, reflejada y transmitida:

$$t^p = \frac{T_{\parallel}}{A_{\parallel}} = \frac{2N_2 \cos \theta_i}{N_1 \cos \theta_i + N_2 \cos \theta_t} \quad (2.51)$$

$$t^s = \frac{T_{\perp}}{A_{\perp}} = \frac{2N_2 \cos \theta_i}{N_2 \cos \theta_i + N_1 \cos \theta_t} \quad (2.52)$$

$$r^p = \frac{R_{\parallel}}{A_{\parallel}} = \frac{N_1 \cos \theta_i - N_2 \cos \theta_t}{N_1 \cos \theta_i + N_2 \cos \theta_t} \quad (2.53)$$

$$r^s = \frac{R_{\perp}}{A_{\perp}} = \frac{N_2 \cos \theta_i - N_1 \cos \theta_t}{N_2 \cos \theta_i + N_1 \cos \theta_t} \quad (2.54)$$

donde se han introducido r^s y r^p , los coeficientes de reflexión para la amplitud y t^s y t^p , los coeficientes de transmisión para la amplitud. Se introduce también la notación s (perpendicular al plano de incidencia) y p (paralelo al plano de incidencia). Las expresiones 2.51-54 se han obtenido con el criterio de los signos de los campos que corresponde a la figura de 2.2. Otros posibles criterios de signos dan como resultado algún cambio de signo en estas expresiones. Generalizando estas expresiones, para la frontera entre un medio i y un medio j se obtiene:

$$t_{ij}^p = \frac{2N_i \cos \theta_i}{N_j \cos \theta_i + N_i \cos \theta_j}, \quad t_{ij}^s = \frac{2N_i \cos \theta_i}{N_i \cos \theta_i + N_j \cos \theta_j} \quad (2.55)$$

$$r_{ij}^p = \frac{N_j \cos \theta_i - N_i \cos \theta_j}{N_j \cos \theta_i + N_i \cos \theta_j}, \quad r_{ij}^s = \frac{N_i \cos \theta_i - N_j \cos \theta_j}{N_i \cos \theta_i + N_j \cos \theta_j} \quad (2.56)$$

2.3.3 Multicapas: Reflexión y transmisión

Una vez obtenido el comportamiento en fase y amplitud de las ondas incidente, reflejada y transmitida por una superficie, se aplicarán estos resultados a un caso práctico [71]: la determinación de los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud de una lámina delgada homogénea e isotrópica de índice de refracción N_1 y espesor d_1 , inmersa entre dos medios de índices N_0 y N_2 . En la figura 2.3 se puede ver el esquema de las reflexiones

múltiples que se producen en el interior de la lámina delgada, cuando una onda plana incide sobre ella con un ángulo de incidencia θ_2 , siendo θ_1 y θ_0 son los ángulos que forman los rayos en el interior de la lámina y en el medio de salida, respectivamente, con la normal a las intercaras.

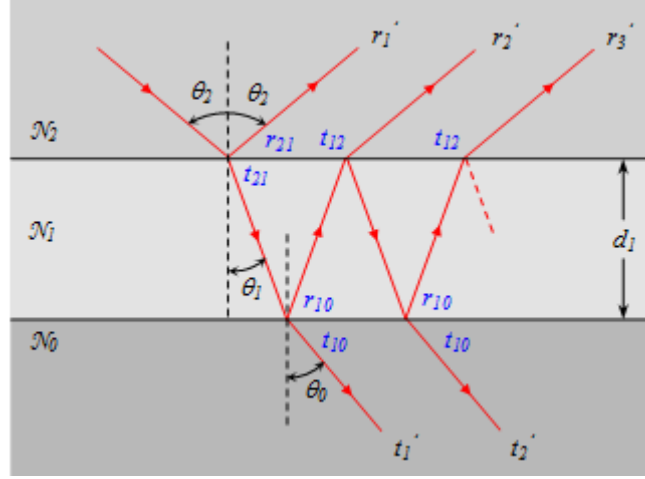


Figura. 2.3. Esquema de las reflexiones múltiples que se producen en el interior de una lámina delgada de espesor d_1 e índice de refracción N_1 que se encuentra inmersa entre dos medios de índices de refracción N_0 y N_2 .

Sean r_{ij} y t_{ij} los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud incidente en la intercara entre los medios de índices de refracción N_i y N_j . Se puede calcular el coeficiente de reflexión efectivo para la amplitud de la lámina de índice de refracción N_1 situada entre los medios de índices de refracción N_0 y N_2 como la suma de las amplitudes de los infinitos rayos reflejados en las interfaces de la lámina. De esta manera se obtiene la resultante de la amplitud reflejada:

$$r_1 = \sum_{N=1}^{\infty} r'_N = r_{21} + t_{21}r_{10}t_{12}e^{2i\beta_1} + t_{21}r_{10}t_{12}e^{2i\beta_1}(r_{12}r_{10}e^{2i\beta_1}) + \dots \quad (2.57)$$

donde $\beta_1 = \frac{2\pi}{\lambda}(N_1d_1\cos\theta_1)$. Mediante el uso de la siguiente substitución, $x = r_{12}r_{10}e^{2i\beta_1}$, y dado que $|x| < 1$, la suma de la serie anterior se puede calcular mediante:

$$\sum_{N=0}^{\infty} ax^N = \frac{a}{1-x} \quad (2.58)$$

Teniendo en cuenta que $r_{12} = -r_{21}$ y $t_{12}t_{21} = 1 - r_{12}^2$, finalmente se obtiene el coeficiente de reflexión efectivo para la amplitud de la lámina delgada:

$$r_1 = \frac{r_{21} + r_{10}e^{2i\beta_1}}{1 + r_{10}r_{21}e^{2i\beta_1}} \quad (2.59)$$

Análogamente se puede calcular el coeficiente de transmisión efectivo para la amplitud de la lámina delgada:

$$t_1 = \frac{t_{10}t_{21}e^{i\beta_1}}{1 + r_{10}r_{21}e^{2i\beta_1}} \quad (2.60)$$

2.3.4 Generalización para una multicapa de M láminas

A continuación se generaliza el cálculo de los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud de una lámina delgada al de una multicapa con M láminas [71], como la que se muestra en la figura 2.4:

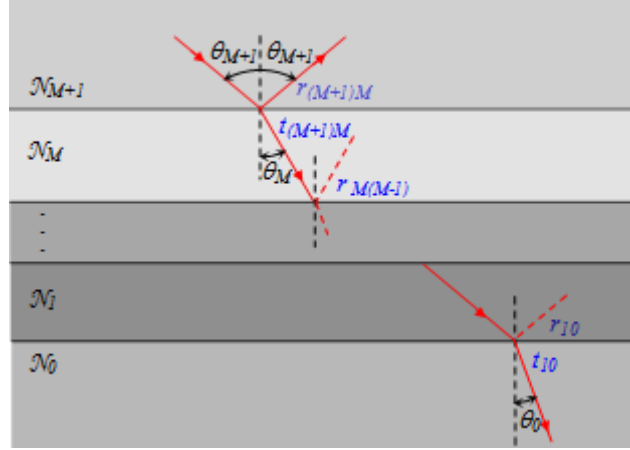


Figura. 2.4. Esquema de los coeficientes de reflexión y transmisión en amplitud en una multicapa de M láminas.

El procedimiento consiste en ir calculando los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud para cada lámina, al igual que se hizo en la sección anterior, comenzando por la lámina más profunda, hasta obtener los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud de la multicapa (r_M y t_M). Se empieza calculando los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud para la lámina de índice de refracción N_1 , inmersa en dos medios de índices de refracción N_0 y N_2 (r_1 y t_1 , obtenidos en la sección anterior). A continuación se sigue el mismo procedimiento para la lámina de índice N_2 inmersa en dos medios de índices N_0 y N_3 , donde los coeficientes r_{21} y t_{21} se substituyen por los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud de la lámina anterior (en este caso, r_1 y t_1), y se obtiene r_2 y t_2 . Repitiendo este proceso, se puede simplificar la multicapa a una lámina de índice N_M inmersa entre dos medios de índices N_0 y N_{M+1} , donde los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud en la intercara inferior son r_{M-1} y t_{M-1} . Los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud de cada lámina vendrán dados por:

$$r_j = \frac{r_{(j+1)j} + r_{j-1}e^{2i\beta_j}}{1 + r_{j-1}r_{(j+1)j}e^{2i\beta_j}} \quad (2.61)$$

$$t_j = \frac{t_{j-1}t_{(j+1)j}e^{i\beta_j}}{1 + r_{j-1}r_{(j+1)j}e^{2i\beta_j}} \quad (2.62)$$

donde $\beta_j = \frac{2\pi}{\lambda}(N_j d_j \cos\theta_j)$, con $j = 1, \dots, M$. El ángulo θ_{M+1} se calcula a partir de la ley de Snell:

$$N_0 \sin\theta_0 = N_{M+1} \sin\theta_{M+1} \quad (2.63)$$

Una vez obtenidos los coeficientes de reflexión y transmisión para la amplitud de una multicapa, se calculará su reflectancia y su transmitancia.

2.3.5 Reflectancia y transmitancia de una multicapa

A continuación estudiaremos cómo se divide la energía del campo incidente entre el campo reflejado y el campo transmitido. La potencia por unidad de área que atraviesa una superficie viene dada por $\mathbf{S}$, el vector de Poynting:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (2.64)$$

Entonces la energía por segundo J de una onda electromagnética que atraviesa una superficie viene dada por:

$$J = \oint \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} da \quad (2.65)$$

Siendo $\mathbf{n}$ el vector unitario normal a la superficie de la multicapa ($\mathbf{u}_n$), suponiendo las intercaras plano-paralelas. Usando la ecuación $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \mathbf{u}_k \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ y recordando que $\mathbf{u}_k$ es normal a $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ y a $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$, y forma un ángulo θ_i con $\mathbf{u}_n$, en un área a y para un medio con $\mu=1$ se obtiene:

$$J_i = a S_i \cos \theta_i = \frac{a}{c} N_{M+1} |E_{oi}|^2 \cos \theta_{M+1} \quad (2.66)$$

Análogamente para la onda reflejada y para la transmitida a través de la multicapa:

$$J_r = a S_r \cos \theta_r = \frac{a}{c} N_{M+1} |E_{or}|^2 \cos \theta_{M+1} \quad (2.67)$$

$$J_t = a S_t \cos \theta_t = \frac{a}{c} N_0 |E_{ot}|^2 \cos \theta_0 \quad (2.68)$$

Por tanto, se define la reflectancia como el cociente entre el flujo de energía reflejado y el flujo de energía incidente. Del mismo modo, se define la transmitancia como el cociente entre el flujo de energía transmitido y el flujo de energía incidente:

$$R = \frac{J_r}{J_i} = \frac{|E_{or}|^2}{|E_{oi}|^2} = |r_M|^2 \quad (2.69)$$

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{N_0 \cos \theta_0}{N_{M+1} \cos \theta_{M+1}} \frac{|E_{ot}|^2}{|E_{oi}|^2} = \frac{N_0 \cos \theta_0}{N_{M+1} \cos \theta_{M+1}} |t_M|^2 \quad (2.70)$$

Como la transmitancia y la reflectancia de la multicapa dependen de la polarización, es conveniente expresarlas en términos de sus componentes paralela y perpendicular al plano de incidencia:

$$R^{p,s} = |r_M^{p,s}|^2 \quad (2.71)$$

$$T^{p,s} = \frac{N_0 \cos \theta_0}{N_{M+1} \cos \theta_{M+1}} |t_M^{p,s}|^2 \quad (2.72)$$

Como se ha visto, las dos componentes s y p de la onda incidente se reflejan de distinta manera, modificando la polarización inicial. Para una onda incidente no polarizada, se obtiene una onda reflejada caracterizada por un grado de polarización definido como:

$$\wp = \frac{R^p - R^s}{R^p + R^s} \quad (2.73)$$

Si $\wp = -1$, entonces la componente del campo paralela al plano de incidencia es nula, mientras que si $\wp = +1$, la componente del campo perpendicular al plano de incidencia es nula. Por lo tanto, $-1 \leq \wp \leq 1$

2.3.6 Ley de Beer-Lambert

Sea una onda que atraviesa una lámina de espesor d , e índice de refracción N , inmersa en el vacío ($N_0 = N_2 = 1$), en el caso particular de incidencia normal, esto es, $\theta_i = 0$. La polarización en incidencia normal no influye, por tanto no se hace distinción entre onda p o s . Si se supone que las reflexiones internas son despreciables ($r_{10} = 0$), entonces:

$$r_1 = \frac{r_{21} + r_{10}e^{2i\beta_1}}{1 + r_{10}r_{21}e^{2i\beta_1}} \cong r_{21} \quad y \quad t_1 = \frac{t_{10}t_{21}e^{i\beta_1}}{1 + r_{10}r_{21}e^{2i\beta_1}} \cong t_{10}t_{21}e^{i\beta_1} \quad (2.74)$$

De la primera parte de la ecuación 2.74 se obtiene que, con la aproximación de reflexiones internas despreciables, la reflectancia de la lámina ($R = |r_1|^2$) no depende del espesor de la misma. De la segunda parte de la ecuación 2.74 se obtiene que:

$$T = |t_1|^2 \cong |t_{10}t_{21}|^2 \cdot e^{-\frac{4\pi k}{\lambda}d} \quad (2.75)$$

Si ahora se considera que el medio 0 es igual al medio 2 (ambos son el vacío), y usando $t_{10} = t_{12} \Rightarrow t_{10}t_{21} = 1 - r_{21}^2$, se obtiene:

$$T \cong (1 - 2\Re(r_{21})^2 + R^2) \cdot e^{-\frac{4\pi k}{\lambda}d} \sim (1 - 2R) \cdot e^{-\frac{4\pi k}{\lambda}d} \quad (2.76)$$

Que es la conocida como la Ley de Beer-Lambert y se utilizará en el capítulo de la determinación de constantes ópticas. Acerca de la aproximación de suponer que las reflexiones internas son despreciables, se considera válida siempre que el producto $\lambda^{-1} \cdot k \cdot d$ sea grande. En capítulos posteriores se utilizará esta ley, pero con una aproximación más: se supondrá que la reflectancia es despreciable frente a la transmitancia, y por tanto será eliminada de la ecuación. Esta aproximación adicional suele ser válida para longitudes de onda muy cortas, donde r_{21} se aproxima a cero.

2.3.7 Rugosidad en una superficie

Cuando una onda incide sobre una superficie, la presencia de rugosidad en ésta provoca la aparición de ondas dispersadas en todas las direcciones que, por tanto, reducen la reflectancia especular y la transmitancia [59].

El cálculo exacto del efecto de la rugosidad sobre la interacción de la luz es complejo. El problema se simplifica cuando la desviación en la altura de la superficie respecto a una altura media es una pequeña fracción de la longitud de onda incidente, por lo cual se pueden usar modelos perturbativos. Éste es el caso más común en las ópticas para el EUV-FUV, donde

las rugosidades suelen ser del orden de unos pocos nanómetros y las longitudes de onda, de decenas o pocos cientos de nanómetros.

El modelo más común y simple es el de Debye y Waller [72], [73], en el que se describe la rugosidad a través de un solo parámetro, σ , que se define como la desviación cuadrática media de las alturas en la superficie respecto a una altura media. En éste límite, los coeficientes de Fresnel pueden ser modificados introduciendo la influencia de la rugosidad:

$$r = r_0 \exp\left(\frac{-8\pi^2 \sigma^2 N_1^2 \cos^2 \theta_1}{\lambda^2}\right) \quad (2.77)$$

$$t = t_0 \exp\left(\frac{-2\pi^2 \sigma^2 (N_1 \cos \theta_1 - N_2 \cos \theta_2)^2}{\lambda^2}\right) \quad (2.78)$$

donde r_0 y t_0 son los coeficientes de reflexión y transmisión para una superficie totalmente lisa ($\sigma=0$). Un resultado similar se puede obtener al suponer que en la frontera entre el medio 1 y 2 hay una lámina con una variación gaussiana (de espesor σ) de índice desde N_1 hasta N_2 .

2.4-El índice de refracción

Hasta ahora se ha estudiado la interacción macroscópica entre una onda electromagnética y un medio material a través del índice de refracción complejo. En esta sección se muestra cómo se relaciona el índice de refracción con los procesos elementales de interacción de la materia con los fotones [59].

2.4.1 Interacción de los fotones con la materia en bajas energías

La respuesta de la materia a la radiación con energía desde el visible hasta ~ 1 keV se debe fundamentalmente a la interacción de los fotones con los electrones de los átomos. La respuesta de los átomos (más pesados que los electrones) a un campo eléctrico se produce en frecuencias de resonancia mucho más pequeñas que las de los electrones, por lo que las vibraciones de los átomos se ponen de manifiesto en el IR, mientras que la de los electrones lo hacen en las longitudes de onda del visible y más cortas. Se produce absorción cuando la energía del fotón incidente es igual a la diferencia entre un nivel electrónico ocupado y otro vacante; cuando la energía del fotón excede la energía de unión del electrón, este último es expulsado y el átomo o molécula se ioniza momentáneamente. Los átomos o moléculas excitados o ionizados tenderán a relajarse mediante una o más transiciones de electrones desde un nivel superior a uno inferior, con la emisión de uno o más fotones y, a veces también con la emisión de un electrón. El fotón o electrón emitidos aportan información importante sobre los niveles de energía del átomo o molécula, que es la base para varias técnicas de espectroscopía, tales como la espectroscopía de rayos X (XPS) o, si se pretende estudiar los niveles o bandas electrónicas mas externas, la espectroscopía ultravioleta (UPS).

Los fotones en el visible, NUV, FUV y EUV tienen energía suficiente como para excitar electrones poco ligados, como aquellos presentes en las bandas de un sólido cristalino. Estos electrones contienen información sobre los enlaces moleculares. Por otro lado, los fotones en las longitudes de onda cortas del EUV, rayos X blandos y duros (SXR y HXR, respectivamente) tienen energía suficiente como para excitar electrones fuertemente ligados al núcleo atómico, y estos electrones excitados contienen información sobre los niveles electrónicos de los

átomos. Para fotones con energías aún superiores, los rayos gamma, las interacciones con los átomos pueden involucrar interacciones con los núcleos de estos.

A continuación describiremos brevemente y de manera simplificada, la interacción entre los diferentes tipos de materiales y los fotones de longitudes de onda del FUV y más cortas:

- a) En los dieléctricos, la absorción es casi nula siempre que la energía de los fotones incidentes sea menor que la energía del gap de los materiales. En general, cuando un material se encuentra en su estado condensado, los niveles electrónicos mas externos forman unos continuos de energía llamados bandas. En los dieléctricos, los electrones más externos llenan la llamada banda de valencia. Esta banda está separada de la banda de conducción (vacía) por una energía llamada *energía del gap* o simplemente gap. Cuando en un dieléctrico la energía de los fotones incidentes no es suficiente como para excitar los electrones desde la banda de valencia a la de conducción, esto es, cuando la energía del fotón es inferior al gap, los electrones no absorberán la energía del fotón y por tanto en esa región se dice que el material es transparente (con alguna salvedad). La absorción aparecerá en cuanto la energía de los fotones iguale o supere a la del gap, que permitirá a los electrones pasar de la banda de valencia a la banda de conducción. Las longitudes de onda de los gap más cortas en la naturaleza (que se corresponden con la máxima energía posible del gap) están en el FUV, siendo los valores más extremos del gap los del MgF_2 (115 nm) y los del LiF (105 nm).
- b) En los metales, los electrones menos ligados son compartidos entre todos los átomos, formando un continuo de bandas, en las que la concentración de electrones en la banda de conducción es alta, por lo que no existe gap. Cuando los electrones en la banda de conducción son excitados mediante un campo eléctrico, se produce una disipación de energía debido a la resistencia eléctrica del material, lo que da lugar a un fenómeno específico de absorción. Para fotones con energías inferiores a las energías de ligadura de los electrones, un modelo sencillo que proporciona una buena aproximación para muchos metales es el modelo de electrones libres de Drude [66], el cual supone que los electrones menos ligados de los átomos son libres sin ninguna fuerza recuperadora:

$$N^2 = \varepsilon \cong 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\Gamma} \quad (2.79)$$

donde $\omega_p^2 = \frac{N_e e^2}{m \varepsilon_0}$ es la llamada frecuencia de plasma, N_e es la densidad de electrones libres, e y m son la carga y masa del electrón, ε_0 es la permitividad del vacío, y Γ es un parámetro relacionado con la disipación de energía en el material. Para valores de Γ pequeños, entonces $n^2 - k^2 \cong 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$, y por tanto podemos diferenciar dos regiones en el espectro: en la región $\omega < \omega_p$, se cumple $k > n$, por tanto es una región de gran absorción y reflectancia. En la región $\omega > \omega_p$, los electrones cuasi-libres del material no pueden acoplarse a la alta frecuencia del campo oscilante, lo que da como resultado una gran caída de la absorción de los materiales. Cuando la energía de los fotones es suficientemente alta, empiezan a excitar electrones ligados, por lo cual la

hipótesis de que los electrones no están ligados por ninguna fuerza recuperadora ya no se cumple, y el modelo de Drude deja de ser válido.

- c) Para metales y dieléctricos, cuando la energía de los fotones es superior a la de las bandas ocupadas por los electrones menos ligados de los átomos, y suficiente como para excitar los electrones más fuertemente ligados de los átomos que conforman el material (en las regiones de HXR, SXR y las regiones del EUV con $\lambda < 30$ nm), entonces las diferencias entre metales y dieléctricos desaparecen desde el punto de vista óptico. Debido al pequeño papel desempeñado por los enlaces de los átomos en longitudes de onda cortas, las propiedades ópticas de un material se pueden obtener aproximadamente mediante la suma de las respuestas de los electrones de todos los átomos a la radiación incidente, como si los átomos fueran independientes unos de los otros. Desde el punto de vista clásico, cada electrón ligado en el átomo tiene una frecuencia de resonancia específica; se obtiene la interacción de la onda electromagnética incidente con un átomo de múltiples electrones mediante la suma de la interacción sobre todas las frecuencias de resonancia de los electrones del átomo. En un segundo paso, la suma se extiende también a todos los átomos que componen el material. Como resultado, la materia se puede describir mediante el siguiente índice de refracción [74]:

$$N = \sqrt{\varepsilon} = \left[1 - \frac{N_a e^2}{\varepsilon_0 m} \sum_s \frac{g_s}{\omega^2 - \omega_s^2 + i\omega\Gamma} \right]^{1/2} \quad (2.80)$$

$$\cong 1 - \frac{N_a r_e \lambda^2}{\pi} [f_1^0(\omega) - i f_2^0(\omega)]$$

donde $r_e = e^2/4\pi\varepsilon_0 mc^2$ es el radio clásico del electrón, c es la velocidad de la luz en el vacío, Γ es un parámetro relacionado con la disipación de energía en el material, N_a es la densidad de átomos, y g_s es la fuerza del oscilador asociado a la frecuencia de resonancia del electrón s , cuya suma sobre todas las frecuencias de resonancia resulta ser igual al número total de electrones, Z :

$$\sum_s g_s = Z \quad (2.81)$$

Esta igualdad es conocida como la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn. El término entre corchetes en la ecuación 2.80 contiene los llamados factores de scattering (dispersión) atómicos para el régimen de colisión $\theta=0$ (scattering hacia adelante, en la dirección de la propagación de la onda en el material); dichos factores representan la amplitud del campo eléctrico de la onda dispersada por un átomo individual en la dirección hacia adelante con respecto a la dispersada por un electrón libre. La ecuación 2.80 conecta los factores de scattering con un parámetro colectivo del material como es el índice de refracción. Si expresamos $N = n + ik$, entonces:

$$f_1^0 = \frac{\pi}{N_a r_e \lambda^2} (1 - n^2 + k^2) \cong \frac{2\pi}{N_a r_e \lambda^2} (1 - n) \quad (2.82)$$

$$f_2^0 = \frac{\pi}{N_a r_e \lambda^2} (2nk) \cong \frac{-2\pi}{N_a r_e \lambda^2} k \quad (2.83)$$

Finalmente, para longitudes de onda pequeñas (por ejemplo, $\lambda < 6.2$ nm en el Mo), la aproximación de primer orden para obtener las ecuaciones 2.82 y 2.83 es válida en [75].

2.4.2 Interacción de los fotones con la materia en altas energías

Para longitudes de onda más largas que el diámetro del átomo, los factores de scattering atómicos son independientes de la dirección en la que el átomo dispersa la radiación y por lo tanto la interacción macroscópica de una onda electromagnética a través de un medio uniforme se describe completamente con el índice de refracción. En longitudes de onda comparables a la dimensión del átomo, la radiación percibe la distribución periódica de las nubes electrónicas en un cristal, lo que da como resultado unas direcciones de difracción características (las cuales siguen la ley de Bragg), que no pueden ser descritas con un índice de refracción macroscópico. Los factores de scattering atómico, presentados en la ecuación 2.80, están deducidos suponiendo que todos los electrones en un átomo dispersan la luz en fase [74]. Esto es válido siempre y cuando la longitud de onda de la radiación incidente sea más grande que el diámetro del átomo. Cuando la longitud de onda de la radiación incidente es más pequeña que el diámetro atómico (HXR y rayos gamma), la suposición de que todos los electrones dispersan la luz en fase sigue siendo válida para la dispersión en la dirección de propagación de la onda en el material, por eso la ecuación 2.80, en la que participan factores de scattering hacia adelante, sigue siendo válida para energías grandes. Para longitudes de onda más cortas que el diámetro atómico, la amplitud dispersada por un átomo aumenta o disminuye cuando uno se mueve angularmente lejos de la dirección de propagación de la onda incidente [76], debido a las interferencias en fase o fuera de fase entre las ondas dispersadas por los electrones que están separados dentro del átomo a distancias comparables o mayores que la longitud de onda incidente. Por lo tanto, a pesar de que el índice de refracción sigue teniendo sentido y se siguen cumpliendo las leyes de la reflexión y refracción, este fenómeno de interacción para longitudes de onda más cortas que el diámetro atómico no se puede describir completamente con un parámetro macroscópico como lo es el índice de refracción, sino como secciones eficaces de scattering. En estas altas energías, la absorción se genera por varios mecanismos de interacción, siendo los más importantes los siguientes:

- a) Efecto fotoeléctrico (τ): consiste en la absorción completa de un fotón por un electrón extraído del átomo, normalmente denominado fotoelectrón. Si la energía del fotón E supera la energía de ligadura del electrón dentro del átomo, este será emitido con una energía cinética igual a $E - E_B$, siendo E_B la energía de ligadura del electrón, dejando una vacante en el átomo. Se forma entonces un ión positivo cuya estructura de niveles electrónicos se puede llenar mediante la emisión de rayos X característicos o bien por una cascada de electrones Auger. La sección eficaz del efecto fotoeléctrico muestra abruptas variaciones, debido a las diferentes energías de ligadura de los electrones en el átomo. El valor relativo del salto de la sección eficaz es tanto más grande cuanto más profunda sea la capa, siendo el salto más notable el de los dos electrones de la capa K, seguido de los correspondientes a la L, M, etc. Este efecto es el dominante por debajo de 100 keV, para átomos ligeros, y de 0.8 MeV para átomos con número atómico Z grande.

- b) Efecto Compton (σ_C) (o dispersión incoherente): en esta interacción el fotón incidente transfiere parte de su momento al electrón sobre el que incide, el cual puede ser expulsado, y el resto a un fotón de menor energía que es dispersado; dicha energía del fotón dispersado depende de varios factores, entre ellos del ángulo al que sale dispersado con respecto al electrón, por lo que, macroscópicamente, el halo de dispersión no es monocromático; a diferencia del efecto fotoeléctrico, la radiación incidente ve los electrones de un átomo como electrones libres, sin considerar ni el estado ligado del electrón ni las diferentes contribuciones según el nivel atómico. Este efecto es dominante desde 100 keV hasta 10 MeV, y depende de Z .
- c) Producción de pares κ : se produce cuando la energía del fotón incidente es lo suficientemente grande (al menos dos veces la masa del electrón en reposo: 1.02 MeV) para generar un par electrón-positrón en presencia de un campo magnético intenso (principalmente, el nuclear); este proceso es dominante a energías por encima de 10 MeV para los átomos ligeros, pero puede serlo a partir de 4 MeV para átomos con Z grande. El positrón generado puede recombinarse con un electrón, lo que produce dos fotones gamma.

Dado que en las altas energías la interacción en cada átomo se puede considerar independiente de los demás, es útil normalizar algunos parámetros a la densidad del material. Así, se define el coeficiente de atenuación másica, $\frac{\alpha}{\rho}$, como la suma de las secciones eficaces de cada proceso de interacción divididas entre la densidad atómica:

$$\frac{\alpha}{\rho} = \frac{\tau}{\rho} + \frac{\sigma_C}{\rho} + \frac{\kappa}{\rho} \quad (2.84)$$

donde α es el coeficiente de absorción, que se relaciona con la parte imaginaria del índice de refracción, k , mediante:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (2.85)$$

Finalmente, en el caso de un compuesto, en el coeficiente de absorción másico se calcula cada contribución de acuerdo a la densidad atómica relativa de cada átomo en el compuesto.

2.5-Relaciones de dispersión

Continuando con el estudio del índice de refracción de los materiales, N , se han visto hasta ahora dos comportamientos diferentes en su componente real e imaginaria: la parte imaginaria de N rige los cambios de intensidad o la atenuación al propagarse la onda electromagnética en un medio, mientras que la parte real de N contiene información acerca de los cambios de fase que se producen al atravesar la onda dicho medio. Habitualmente, es más sencillo medir la parte imaginaria del índice de refracción de un material, por ejemplo mediante el uso de la ley de Beer-Lambert (ecuación 2.76), aunque también hay métodos experimentales de medida de la parte real. Además, hay técnicas que proporcionan

información sobre n y k al mismo tiempo, como la elipsometría. Pero muy frecuentemente sólo se dispondrá de información de una de las partes de N , por lo que la otra parte necesitará ser calculada. En este apartado, se presenta una serie de relaciones de dispersión, llamadas relaciones de *Kramers-Krönig* (KK), que relacionan la parte real y la imaginaria tanto del índice de refracción como de la constante dieléctrica.

2.5.1 La integral de *Kramers-Krönig*

Las relaciones de KK están fundadas en el principio de causalidad. Para el campo de la óptica, el concepto de causalidad puede ser interpretado como que una señal no puede propagarse más rápido que la velocidad de la luz en el vacío, o bien que una respuesta no puede producirse antes de que llegue la causa. Kramers [61] probó que el principio de causalidad relativista permitía obtener la parte real del índice de refracción a partir de su parte imaginaria. Krönig [62] demostró que la existencia de unas relaciones de dispersión era una condición necesaria y suficiente que la causalidad debía cumplir. En este apartado se deducen las ecuaciones de dispersión de KK a partir del principio de causalidad.

La ecuación general en la que una función de entrada, dependiente del tiempo, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ perturba un sistema y produce una respuesta lineal de éste, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$, también dependiente del tiempo, viene dada por [77]:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G(t - t') \mathbf{A}(\mathbf{r}, t') dt' = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G(\tau) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t - \tau) d\tau \quad (2.86)$$

donde t' es el instante al que se produce la perturbación del sistema, t es el momento en el que se produce la respuesta, y G es una función de Green que relaciona la perturbación con la respuesta. Substituyendo $\tau = t - t'$ como el tiempo en el que el sistema tarda en responder a la perturbación, y reconociendo la integral como una convolución, se puede reescribir como:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = [G * \mathbf{A}(\mathbf{r})](t) \quad (2.87)$$

Tras lo cual se calcula su transformada de Fourier, usando el teorema de convolución $\mathcal{F}[G * A] = \mathcal{F}[G] \mathcal{F}[A]$, donde $\mathcal{F}$ representa la transformada de Fourier de la función entre corchetes. Por tanto:

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, \omega) = \hat{G}(\omega) \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.88)$$

donde $\hat{\mathbf{B}}$, $\hat{G}$ y $\hat{\mathbf{A}}$ son las transformadas de Fourier de $G * \mathbf{A}$, G y $\mathbf{A}$, respectivamente.

Un ejemplo de la ecuación 2.88 es la polarización en un dieléctrico isótropo que surge como respuesta a la presencia de un campo eléctrico en éste:

$$\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}, \omega) = (\varepsilon(\omega) - 1) \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \quad (2.89)$$

Esta respuesta es proporcional al campo eléctrico, pero dependiente de la frecuencia. Debido a que la constante dieléctrica debe obedecer el principio de causalidad, la forma de estas

funciones es muy restringida. A continuación se demostrará que las partes real e imaginaria de dichas funciones estarán relacionadas entre sí.

El principio de causalidad implica que no puede haber respuesta en el medio antes de que la perturbación aparezca, o de otra forma, $G(\tau) = 0$ si $\tau < 0$. Matemáticamente este efecto es equivalente a introducir la función de Heaviside o escalón, $\theta(t)$, de tal forma que, si se verifica el principio de causalidad, entonces $G(t)$ ha de cumplir:

$$G(t) = \theta(t)G(t) \quad (2.90)$$

Al analizar la ecuación 2.90 en el dominio de las frecuencias veremos aparecer restricciones explícitas impuestas por la causalidad a la función de transferencia:

$$\begin{aligned} \hat{G}(\omega) &= \mathcal{F}[G(t)] = \mathcal{F}[G(t)\theta(t)] = \mathcal{F}[G(t)] * \mathcal{F}[\theta(t)] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{G}(\omega') \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \pi\delta(\omega - \omega') + \frac{i}{\omega - \omega'} \right\} d\omega' = \\ &= \frac{1}{2} \hat{G}(\omega) + \frac{i}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{G}(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega' \end{aligned} \quad (2.91)$$

donde se ha usado que $\mathcal{F}[\theta(t)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \pi\delta(\omega) + \frac{i}{\omega} \right\}$, y la contribución $\frac{1}{\omega}$ ha sido integrada como Valor Principal de Cauchy (P) para evitar la singularidad en $\omega = \omega'$. Agrupando términos, se observa que la condición de causalidad impuesta a la función de transferencia en el dominio de las frecuencias viene dada por:

$$\hat{G}(\omega) = \frac{i}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{G}(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega' \quad (2.92)$$

Si ahora se separan la parte real e imaginaria de la función de transferencia, se obtienen las relaciones de Kramers-Kronig:

$$\mathcal{R}[\hat{G}(\omega)] = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Im[\hat{G}(\omega')]}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (2.93)$$

$$\Im[\hat{G}(\omega)] = \frac{-1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathcal{R}[\hat{G}(\omega')]}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (2.94)$$

Las funciones de $\hat{G}(\omega)$ son una transformada de Fourier de funciones reales $G(t - t')$, lo que implica que $\hat{G}(\omega)$ es hermítica ($\hat{G}(-\omega) = \hat{G}(\omega)^*$). Si se multiplica por $\omega' + \omega$ en el numerador y denominador de 2.93 y 2.94, y se tiene en cuenta la propiedad anterior, se obtiene:

$$\mathcal{R}[\hat{G}(\omega)] = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\Im[\hat{G}(\omega')]\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (2.95)$$

$$\Im[\hat{G}(\omega)] = \frac{-2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\Re[\hat{G}(\omega')]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (2.96)$$

Estas relaciones son validas para toda función $\hat{G}(\omega)$ que sea: i) analítica en el semiplano superior complejo y ii) $\hat{G}(\omega) = O[(\omega)^{-a}]$, con $a > 1$ en $\omega \rightarrow \infty$. Por último, se puede substituir $\hat{G}(\omega)$ por $\varepsilon(\omega) - 1$ o por $N(\omega) - 1$ y obtener sus correspondientes relaciones de KK. En el caso de substituir $\hat{G}(\omega)$ por $N(\omega) - 1$, las ecuaciones 2.95 y 2.96 son válidas tanto para metales como para dieléctricos. Si se substituye $\hat{G}(\omega)$ por $\varepsilon(\omega) - 1$, las ecuaciones 2.95 y 2.96 son sólo válidas para materiales dieléctricos. En los metales, la función $\varepsilon(\omega) - 1$ presenta un polo en el origen de la forma $\sigma(0)/\omega$, que procede de la conductividad no nula presentada por los metales al ser excitados por campos estáticos. Este término induce un comportamiento asintótico que hace que esta función no cumpla la propiedad ii). Dado que $\varepsilon(\omega) = i\sigma(\omega)/\omega$, Altarelli *et al.* [63] encontraron una solución consistente en la aplicación del principio de causalidad a la función $\varepsilon(\omega) - \frac{i\sigma(0)}{\omega} - 1$, la cual cumple con los requisitos arriba mencionados.

Una vez obtenidas las ecuaciones de KK, en el apartado siguiente se derivan las reglas de suma, que proporcionan información sobre el comportamiento de estas funciones a lo largo del espectro electromagnético.

2.5.2 Teorema de Superconvergencia y reglas de suma

Para deducir las reglas de suma para el índice de refracción complejo, se utiliza el Teorema de Superconvergencia [78]. Sean dos funciones g y f relacionadas de la siguiente manera:

$$g(y) = P \int_0^{\infty} \frac{f(x)}{y^2 - x^2} dx \quad (2.97)$$

Si: a) $f(x)$ es continuamente diferenciable y b) $f(x) = O[(x \ln x)^{-1}]$ en $x \rightarrow \infty$, entonces, para valores $y \rightarrow \infty$, se cumple la siguiente igualdad asintótica:

$$g(y) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} f(x) dx + O(y^{-2}) \leftrightarrow \int_0^{\infty} f(x) dx = \lim_{y \rightarrow \infty} [y^2 g(y)] \quad (2.98)$$

Si ahora se substituye en 2.95 $y = \omega$, $x = \omega'$, $f(\omega') = -\frac{2\omega'}{\pi} k(\omega')$ y $g(\omega) = n(\omega) - 1$, y si se tiene en cuenta que el comportamiento asintótico de $n(\omega)$ y $k(\omega)$ es el siguiente [64]:

$$n(\omega) - 1 \rightarrow -\frac{\omega_p^2}{2\omega^2} + O(\omega^{-\beta}) \text{ y } k(\omega) \rightarrow O[\omega^{-2} \ln^{-\alpha}(\omega)] \quad (2.99)$$

con $\beta > 2$ y $\alpha > 1$, y donde ω_p es la frecuencia de plasma característica de cada medio. Para $\omega \rightarrow \infty$, al substituir en 2.98 se obtiene:

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \lim_{y \rightarrow \infty} [y^2 g(y)] \rightarrow \int_0^{\infty} \frac{2\omega'}{\pi} k(\omega') d\omega' = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \left[\omega^2 \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} \right] \quad (2.100)$$

Simplificando, se obtiene la primera regla de suma, también conocida como regla de suma f:

$$\int_0^{\infty} \omega' k(\omega') d\omega' = \frac{\pi \omega_p^2}{4} \quad (2.101)$$

Usando la segunda relación de dispersión (ecuación 2.96), se obtiene la siguiente regla de suma, substituyendo en 2.98 $f(\omega') = \frac{2}{\pi} [n(\omega') - 1]$ y $g(\omega) = k(\omega) \omega^{-1}$:

$$\int_0^{\infty} \frac{2}{\pi} [n(\omega') - 1] d\omega' = \lim_{\omega \rightarrow \infty} [-\omega^2 \omega^{-1} O[\omega^{-2} \ln^{-\alpha}(\omega)]] = 0 \quad (2.102)$$

$$\int_0^{\infty} [n(\omega') - 1] d\omega' = 0 \quad (2.103)$$

Esta regla de suma expresa que el promedio de la parte real de $N(\omega) - 1$ sobre todo el espectro electromagnético es cero, y son válidas tanto para metales como para dieléctricos. Se puede realizar un proceso análogo para obtener reglas de suma para $\varepsilon(\omega) - 1$, dando como resultado unas reglas de suma análogas a las presentadas en las ecuaciones 2.101 y 2.103 [63]:

$$\int_0^{\infty} \omega' \varepsilon_2(\omega') d\omega' = \frac{\pi \omega_p^2}{2} \quad (2.104)$$

$$\int_0^{\infty} [\varepsilon_1(\omega') - 1] d\omega' = -2\pi^2 \sigma(0) \quad (2.105)$$

donde estas ecuaciones son válidas tanto para dieléctricos ($\sigma(0) = 0$) como para metales ($\sigma(0) \neq 0$).

Las reglas de suma obtenidas pueden ser fácilmente generalizadas [78], aplicando el Teorema de Superconvergencia a funciones analíticas del tipo:

$$[N(\omega) - 1]^m \text{ y } \omega^m [N(\omega) - 1]^m \quad (2.106)$$

donde m es un entero positivo. Estas funciones tienen el comportamiento asintótico requerido para aplicar el teorema, y también cumplen las condiciones necesarias para aplicar las relaciones de KK. Aplicando el teorema de Superconvergencia, y para diferentes valores de m , se pueden obtener sucesivas reglas de suma en las diferentes dependencias funcionales en la frecuencia, las cuales dan como resultado la modificación de los pesos a lo largo del espectro. Esta propiedad puede ser útil para, bien aumentar el peso del intervalo espectral en el que k o n son conocidas, minimizando así el peso del resto del espectro electromagnético, o bien, en los intervalos donde se han empleado extrapolaciones, para evaluar la congruencia de éstas.

Capítulo 3. Equipos y técnicas experimentales

3.1-Introducción

Para el trabajo realizado en esta tesis doctoral se han utilizado diferentes equipos y técnicas experimentales, los cuales serán descritos a lo largo de este capítulo. En la sección 3.2 se describen todos los equipos experimentales utilizados. A continuación, en la sección 3.3 se describen las técnicas experimentales utilizadas.

En la primera parte de este capítulo se muestran las características principales de las instalaciones en las que se ha realizado el trabajo experimental: el equipo experimental del Grupo de Óptica de Láminas Delgadas (GOLD) del CSIC, la línea BEAR del sincrotrón ELETTRA (Trieste, Italia) y la línea 6.3.2 del sincrotrón ALS (Berkeley, EEUU) del Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL). En el equipo de GOLD, se puede realizar tanto la deposición como la caracterización óptica *in situ* de recubrimientos en el intervalo espectral de 12.5 a 200 nm. Esa caracterización puede ser ampliada a longitudes de onda superiores a 200 nm hasta el infrarrojo cercano (NIR) bien mediante el uso del elipsómetro SOPRA-GES-5S o bien mediante el espectrofotómetro PERKIN ELMER Lambda 9. Para disponer de radiación en longitudes de onda más cortas que 12.5 nm, se han utilizado instalaciones sincrotrón, como la línea BEAR del sincrotrón ELETTRA, en la que se pueden caracterizar *in situ* materiales en el intervalo espectral de 3 eV a 1200 eV (1.03-412 nm), o la línea 6.3.2 del sincrotrón ALS, donde se pueden caracterizar *ex situ* materiales en el intervalo de 25 eV a 800 eV (1.55-49.6 nm).

En la segunda parte de este capítulo se detallan las técnicas experimentales de deposición de láminas delgadas que han sido empleadas para fabricar las muestras: evaporación y pulverización (*sputtering*). También se describe el proceso de fabricación de sustratos en lámina delgada realizado en GOLD y los diferentes métodos utilizados para el control de los espesores.

3.2-Equipos experimentales

A continuación se resumen las características principales de los equipos experimentales que se han usado en este trabajo.

3.2.1 Equipo experimental del Grupo de Óptica de Láminas Delgadas

GOLD dispone de un sistema de deposición de láminas delgadas y reflectometría conectados entre sí, que opera en condiciones de ultra alto vacío (UHV), donde se puede realizar tanto la preparación como la caracterización óptica de recubrimientos en el intervalo espectral de 12.5 a 200 nm. La mayor parte de los materiales ven notablemente modificadas su propiedades ópticas en el FUV tras muy breves exposiciones a agentes oxidantes, como el oxígeno o el agua; por ello es valioso tener un sistema que permita depositar y caracterizar los materiales sin necesidad de exponerlos a la atmósfera. El equipo de GOLD nos permite realizar la preparación y la caracterización de las muestras *in situ*.

En la figura 3.1 se muestra un esquema del equipo experimental. Se compone de varias cámaras de UHV conectadas entre sí y separadas mediante válvulas de compuerta, lo cual permite aislar unas cámaras de las otras. Se puede dividir en dos partes: las cámaras de deposición de láminas delgadas y el reflectómetro. Las diferentes partes del equipo experimental serán descritas a continuación.

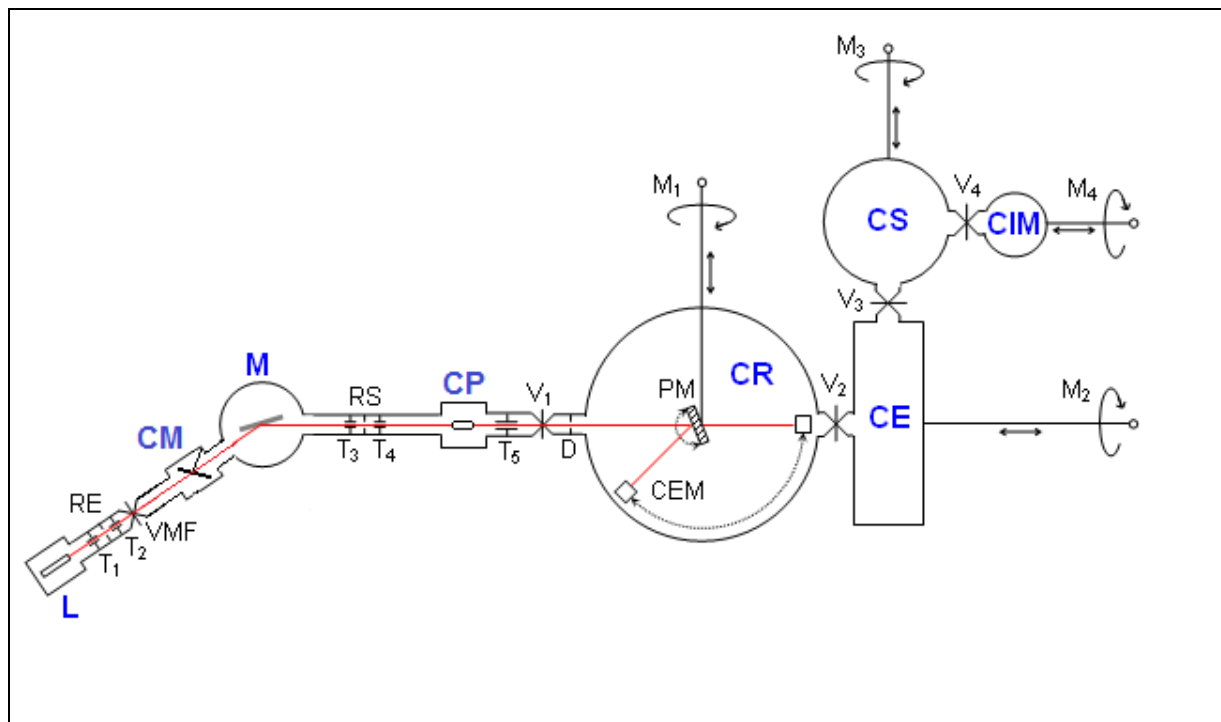


Figura. 3.1. Esquema del equipo experimental de UHV de GOLD para la deposición y caracterización in situ de recubrimientos ópticos en el FUV/EUV. L: lámpara; VMF: válvula con ventana de MgF_2 ; CM: cámara de modulación; M: monocromador; RE: rendija de entrada; RS: rendija de salida; CP: cámara de polarización; T_1, T_2, T_3, T_4, T_5 : tubos de baja conductancia; D: diafragma; CR: cámara de reflectometría; PM: portamuestras; CEM: detector multiplicador de electrones; CE: cámara de evaporación; CS: cámara de sputtering; CIM: cámara de introducción de muestras; V_1, V_2, V_3, V_4 : válvulas de compuerta; M_1 : manipulador de precisión; M_2, M_3, M_4 : manipuladores magnéticos.

3.2.1.1 Cámara de introducción de muestras

La cámara de introducción de muestras (CIM) permite meter y sacar las muestras en el equipo experimental sin necesidad de romper el vacío en el mismo. Está conectada a la cámara de *sputtering* (CS) y separada de ella mediante una válvula de compuerta (V_4). Para la transferencia de muestras, se pone el portamuestras en un manipulador magnético (M_4) mediante un sistema de anclaje y se hace vacío. El bombeo se realiza con una bomba turbomolecular de 200 l/s y una bomba rotatoria de apoyo de 16 m³/h. Cuando se alcanza una presión de $\sim 10^{-4}$ Pa, se transfiere la muestra a la CS, previa apertura de V_4 .

En la CIM también se realiza la limpieza iónica de los substratos y de las muestras. La limpieza iónica se produce por la reacción entre los iones (principalmente de oxígeno) procedentes de una descarga iónica luminiscente con los compuestos orgánicos presentes en la superficie de la muestra, lo que provoca la desorción de las moléculas adsorbidas sin dañar la superficie de la muestra. Para generar dicha descarga, se introduce aire en la CIM hasta

alcanzar una presión de ~ 10 Pa y se pone un electrodo a una tensión de ~ -2 kV. La duración típica de los lavados iónicos realizados es de 15 minutos.

Antes de introducir una muestra, la CIM se cubre con un techo de flujo laminar de clase 100, con el fin de evitar que se depositen partículas de polvo sobre la superficie de la muestra y dentro del equipo. En la figura 3.2 podemos ver una imagen de la CIM.

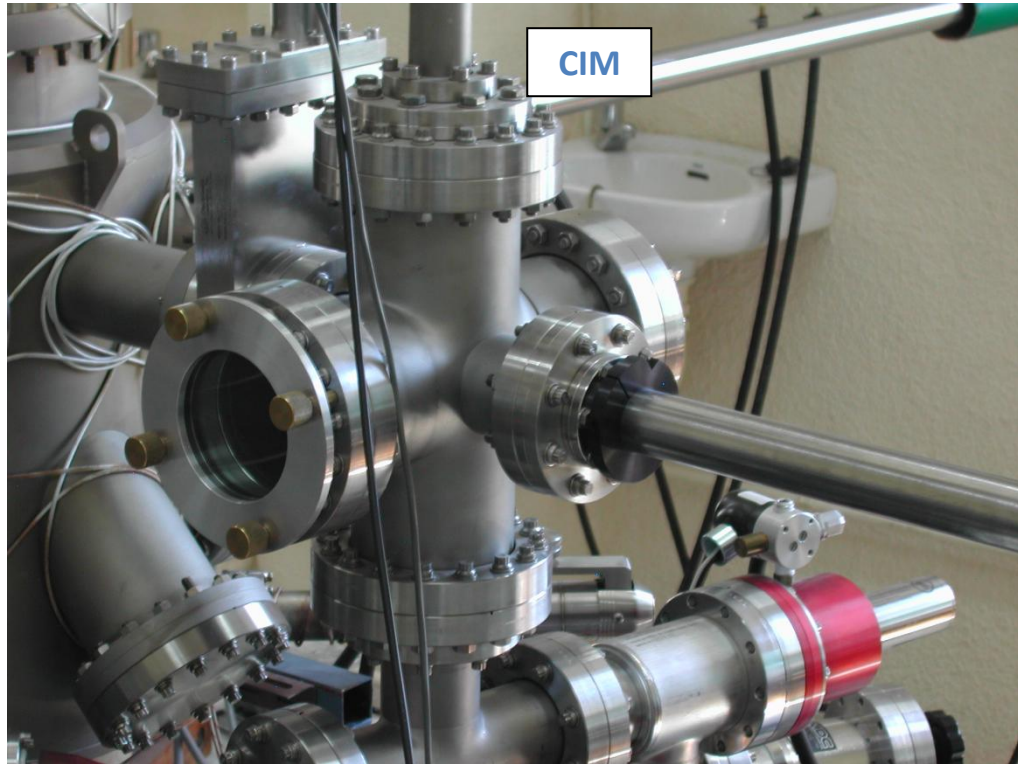


Figura. 3.2. Imagen de la cámara de introducción de muestras (CIM).

Desde la CIM se transfiere el sustrato para su recubrimiento hacia las dos cámaras de deposición existentes: una cámara de *sputtering* y otra de evaporación, las cuales se describen en los siguientes apartados.

3.2.1.2 Cámara de sputtering

La cámara de *sputtering* (CS), destinada a la deposición de recubrimientos mediante la técnica de *sputtering* por haz de iones (descrita en la sección 3.3.1.3), ha sido diseñada íntegramente en GOLD. El sistema consiste en un cañón de iones orientado a 45° con respecto al blanco, un neutralizador que incorpora electrones suficientes al haz de iones y un sustrato colocado enfrente del blanco. Los iones son generados por un cañón de iones de cátodo hueco de la casa Veeco Instruments, siendo 3 cm el diámetro del haz a la salida del cañón; el gas utilizado típicamente para producir los iones es argón. Se puede alcanzar una corriente máxima de iones de 100 mA y una energía máxima de los iones de 1.200 eV. El neutralizador genera los electrones en una descarga con argón mediante un sistema de cátodo hueco. En GOLD también fue diseñado el portablancos giratorio con capacidad para cuatro blancos y refrigeración por agua. El diámetro máximo de los blancos es de ~ 100 mm. También fue diseñado un sistema de rotación y traslación del portasustratos dentro de la campana que

permite seleccionar la distancia del sustrato con respecto al blanco, así como la velocidad de rotación de éste para alcanzar un grado mayor de homogeneidad en la deposición. La distancia típica de trabajo entre los blancos y el sustrato es de 150 mm. Un obturador manual permite controlar la deposición.

El sistema de bombeo está compuesto por una bomba criogénica con velocidades de bombeo de 4.600 l/s para el vapor de agua, 1.500 l/s para el nitrógeno y 1.200 l/s para el argón, una bomba de sublimación de titanio y una bomba rotatoria de apoyo de 16 m³/h, provista de una trampa micromaze. La presión base después de un horneado a 470 K es de $5 \cdot 10^{-8}$ Pa. La presión total se mide con un manómetro de cátodo frío o Penning. Para el control de los espesores en la deposición de láminas delgadas se utiliza una microbalanza de cuarzo. Las medidas que se hacen con esta balanza se calibran mediante interferometría de Tolansky, cuyo fundamento será descrito en la sección 3.3.4.2. En la figura 3.3 se muestra una imagen de la cámara de sputtering.

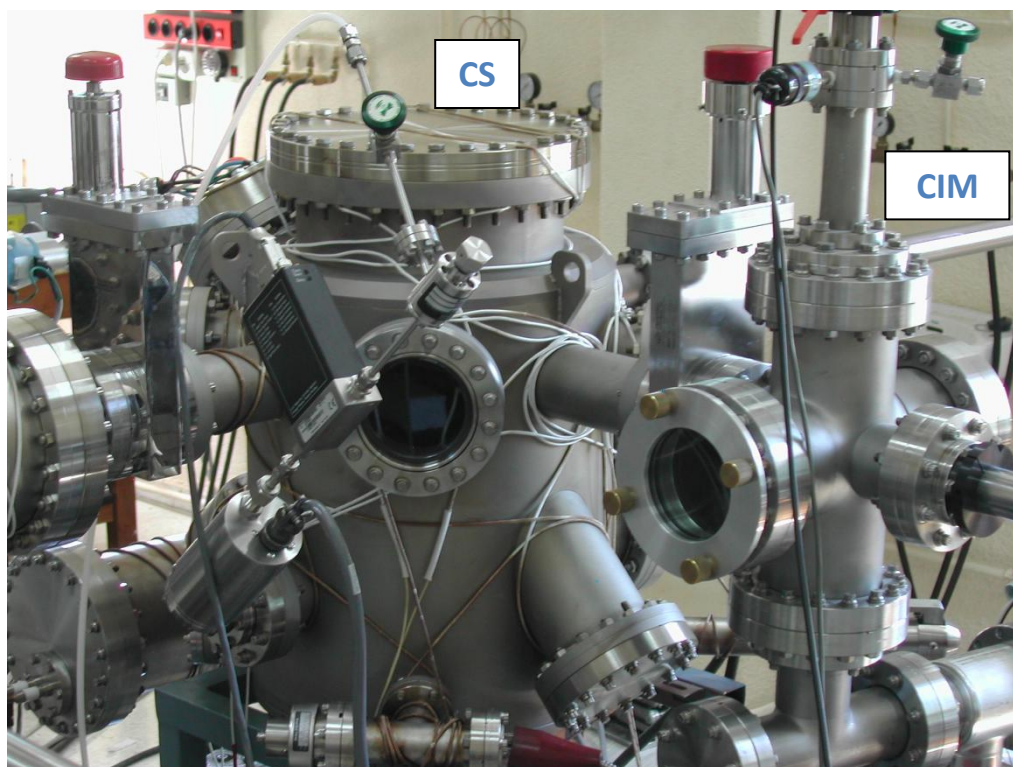


Figura. 3.3. Imagen de la cámara de sputtering (CS).

3.2.1.3 Cámara de evaporación

La cámara de evaporación (CE) está conectada a la CS a través de una válvula de compuerta (V_3). En ella pueden prepararse láminas delgadas tanto por evaporación térmica convencional (ETC) como por evaporación con cañón de electrones. La técnica usada en este trabajo fue la de ETC, que será descrita con detalle en la sección 3.3.1.1.

Una de las bridas de la CE tiene tres pasajes eléctricos en los cuales se instalan las fuentes de evaporación para la ETC. Para la evaporación de Al se utilizan unas fuentes formadas por varios hilos de wolframio unidos entre sí, y para el resto de materiales se utilizan

fuentes hechas de molibdeno, tántalo o wolframio; la geometría de la fuente de evaporación depende del material que se va a evaporar, siendo la geometría más utilizada la forma de caja. La distancia entre las fuentes y los substratos es de ~ 38 cm. Un obturador manual permite tapar y destapar el substrato para el control de la deposición.

El bombeo se realiza mediante una bomba iónica Varian StarCell y una bomba de sublimación de titanio, cuyo panel de condensación puede ser refrigerado con nitrógeno líquido. La presión base después de un horneado a 470 K es de 10^{-8} Pa. La presión se mide con un manómetro de ionización, también llamado Bayard-Alpert; la cámara dispone asimismo de un cuadrupolo de masas (de 1 a 200 amu) para la medida de las presiones parciales de los gases residuales. Al igual que en la CS, los espesores de las láminas depositadas se miden con una microbalanza de cuarzo. En la figura 3.4 se muestra una imagen de la cámara evaporación.

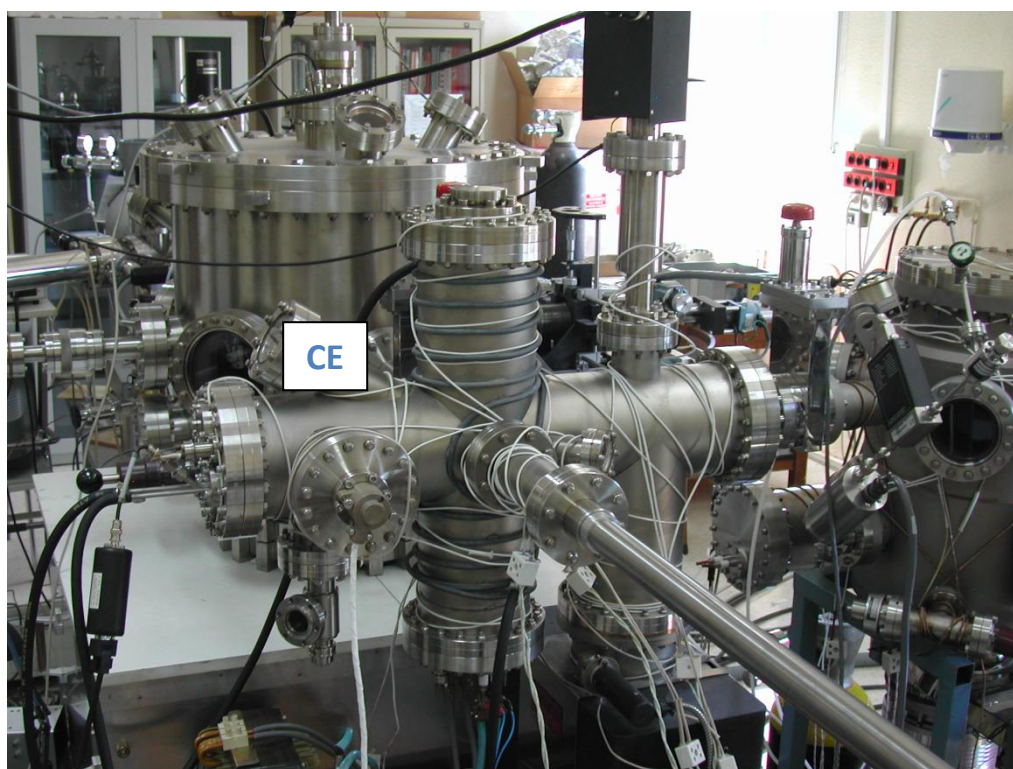


Figura. 3.4. Imagen de la cámara de evaporación (CE).

A continuación se describen las cámaras que constituyen el reflectómetro.

3.2.1.4 Cámara de reflectometría

La cámara de reflectometría (CR) es una cámara cilíndrica de 60 cm de diámetro y 60 cm de altura, donde pueden realizarse medidas de reflectancia y transmitancia de las muestras en función del ángulo de incidencia en dos planos de incidencia perpendiculares entre sí. Esta cámara está situada entre la CE y la cámara de polarización (CP), y separada de ambas mediante válvulas de compuerta (V_2 y V_1 respectivamente). Está provista de un equipo de bombeo con una bomba iónica Varian Triodo de 240 l/s y otra bomba de sublimación de titanio con panel criogénico para nitrógeno líquido. La presión base después de un horneado a 470 K es de 10^{-8} Pa, y para su medida se utiliza un manómetro de ionización de tipo Bayard-

Alpert, de la casa Varian. El portamuestras (PM) está colocado sobre un manipulador de precisión de la casa Thermionics Northwest, serie EM 200 (M_1). El manipulador permite el desplazamiento de la muestra en las direcciones X e Y (perpendiculares al brazo del manipulador) y en la dirección Z (en la dirección del brazo del manipulador). Además también son posibles las rotaciones de 360° alrededor del eje Z y de $\sim 95^\circ$ alrededor de un eje perpendicular a Z, el cual denotaremos como F. El eje F está contenido en el plano de la superficie externa del sustrato y gira con el eje Z al rotar el manipulador. Los giros alrededor de los ejes Z y F permiten reflejar la luz que incide sobre la muestra en los planos vertical y horizontal, respectivamente.

Cuando no está disponible el uso de un polarizador, la radiación que llega a la CR es parcialmente polarizada, con un grado de polarización desconocido que depende de la longitud de onda; para afrontar esta polarización parcial en medidas en ángulos fuera de la normal, el equipo permite realizar medidas de reflectancia en dos planos de incidencia perpendiculares entre sí. El promedio de las reflectancias medidas en estos dos planos para un mismo ángulo de incidencia es igual a la reflectancia que mediríamos con luz no polarizada en ese mismo ángulo. Para la realización de las medidas, la CR cuenta con dos detectores multiplicadores de electrones de canal (*Channel Electron Multiplier*, CEM) de las casas Galileo Electro-Optics Corporation y Burle Industries Inc., modelo Channeltron 4800, los cuales pueden girar en sendos ejes perpendiculares entre sí, y coincidentes con los ejes de giro Z y F del manipulador. Al desplazarse según estos ejes, los detectores describen órbitas circulares, lo que permite realizar medidas en un intervalo de ángulos de incidencia comprendido entre $\sim 3^\circ$ y 85° . Los CEM son horneables a 470 K, (el proceso de horneado será descrito en la sección 3.2.1.11). Estos detectores, en su configuración estándar, detectan radiación de longitud de onda inferior a ~ 120 nm. Para extender su sensibilidad a longitudes de onda más largas, los fotocátodos de los detectores están recubiertos de CsI, lo que permite extender la capacidad de detectar la radiación hasta una longitud de onda de ~ 200 nm. La señal del detector es amplificada por medio de un amplificador de transresistencia, con ganancia de hasta 10^{11} V/A. Se muestra una imagen de CR en la figura 3.5.



Figura. 3.5. Imagen de la cámara de reflectometría (CR).

Tras la descripción de la CR, se describe el camino que sigue la radiación que se usa para realizar medidas, partiendo desde su generación en la lámpara hasta su llegada a la CR.

3.2.1.5 Lámpara

La fuente de radiación (L) es una lámpara de descarga capilar y cátodo hueco fabricada en GOLD. Tiene una potencia máxima de 500 W, y trabaja con un flujo continuo de gas. La lámpara dispone de una bomba rotatoria de 20.5 m³/h para disminuir el flujo de gas hacia la campana. Una trampa *micromaze* situada entre la bomba rotatoria y la lámpara impide el flujo de vapor de aceite hacia la lámpara.

La emisión de luz corresponde a la excitación de las líneas espectrales del gas o mezcla de gases que fluye en el interior de la lámpara. Dado que no se pueden utilizar ventanas de separación entre la lámpara y la CR, ya que no existe ningún material transparente a la radiación de longitud de onda inferior a ~ 105 nm, parte del flujo de gas puede llegar a la CR. Por este motivo, los gases deberán ser lo suficientemente inertes como para que no reaccionen con los materiales que se quieran estudiar. Con el fin de obtener el máximo número de líneas espectrales en el intervalo de interés, en este trabajo se han utilizado dos mezclas de gases, total o casi totalmente constituidas por gases inertes. Una de ellas tiene la siguiente composición: 86% de Ar, 3% de Ne, 3% de Kr, 3% de He, 3% de Xe y 2% de H₂. La composición de la otra mezcla es: 93% de He, 3% de Ar, 3% de Ne y 1% de N₂. Para las dos mezclas, se ha utilizado una presión de trabajo de ~ 4 -6 Pa. Además de estas dos mezclas, también se han utilizado gases puros individuales como el Ar, He y el CO₂.

Los gases nobles, además de sus líneas espectrales, emiten radiación continua (o pseudo-continua) en ciertos intervalos característicos. Para la emisión de ese continuo es necesaria una elevada presión de gas en la lámpara. El He emite de forma continua entre ~ 60 y 100 nm. Durante este trabajo se ha utilizado en algunas ocasiones la emisión continua del He, con presiones de trabajo desde ~ 60 Pa a unos cientos de Pa. En la figura 3.6 se muestra la lámpara.

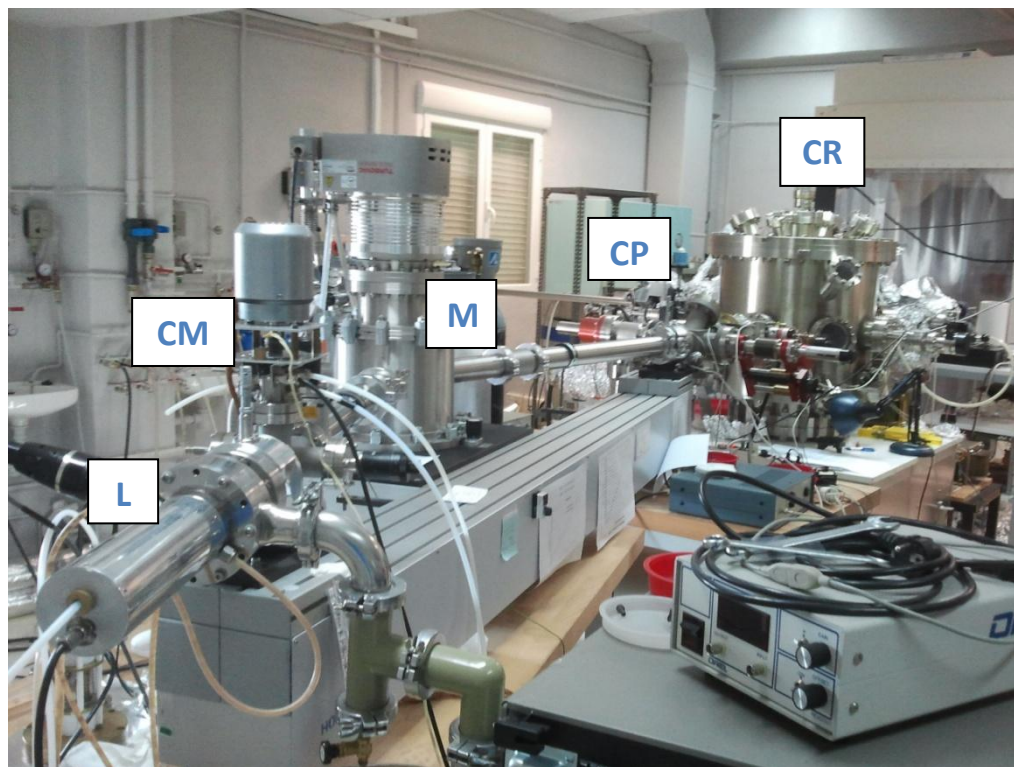


Figura. 3.6. Imagen de la lámpara (L), la cámara de modulación (CM, a continuación de la lámpara), el monocromador (M), los brazos de entrada y salida del monocromador, y la cámara de reflectometría (CR).

3.2.1.6 Cámara de modulación

La cámara de modulación (CM) está situada en el brazo de entrada del monocromador y delante de la VMF, en el sentido de propagación de la luz. Su función es modular la radiación procedente de la lámpara mediante el giro sincronizado de dos cruces coaxiales, lo que permite reducir el efecto de la luz de fondo que puede enmascarar la señal medida. Una de las cruces, situada en el exterior de la CM, interrumpe periódicamente el paso del haz de luz emitida por un LED, que será detectado por un fotodiodo. Esta señal servirá como referencia de la señal que llega a la CR, modulada por otra cruz coaxial situada en el interior de la CM. La pequeña señal de corriente generada por el detector de la CR se lleva a un preamplificador de transresistencia y la señal de tensión resultante se amplifica mediante un amplificador *lock-in*. Este amplificador permite obtener la componente de la señal que tenga la misma modulación que la señal de referencia, disminuyendo por tanto el ruido. La frecuencia habitual de trabajo suele ser entre 2 y 4 Hz. En la figura 3.6 se muestra la cámara de modulación, entre la lámpara y el monocromador (M).

3.2.1.7 Monocromador

El equipo dispone de un monocromador modelo TGM1200 de la casa HORIBA Jobin Yvon, con el que se puede trabajar en el intervalo espectral de 12.5 a 200 nm. Sus brazos forman un ángulo de 146° . Dispone de dos redes de difracción toroidales recubiertas con Pt; una de las redes tiene 950 líneas/mm y se utiliza para longitudes de onda entre 12.5 y 52.5 nm; la otra tiene 250 líneas/mm y se utiliza en el intervalo entre 50 y 200 nm. La anchura de las rendijas de entrada (RE) y salida (RS) se puede variar entre $21\text{ }\mu\text{m}$ y 1.8 mm. La resolución espectral en función de la apertura de las rendijas es de 2.1 nm/mm y 0.76 nm/mm para la red de 250 líneas/mm y de 950 líneas/mm, respectivamente.

En el brazo de entrada del monocromador se ha incorporado una válvula de compuerta que contiene una ventana de MgF_2 , denotada como VMF en la figura 3.1, que se utiliza como barrera mecánica para el flujo de gas procedente de la lámpara para longitudes de onda mayores de 120 nm, pero que debe abrirse para el paso de radiación más corta. El bombeo en el monocromador se realiza con una bomba turbomolecular de 700 l/s apoyada por una rotatoria de $16\text{ m}^3/\text{h}$. La presión se mide con un manómetro de cátodo frío o Penning. En la figura 3.7 se muestra una imagen del monocromador, junto con los brazos de entrada y salida.

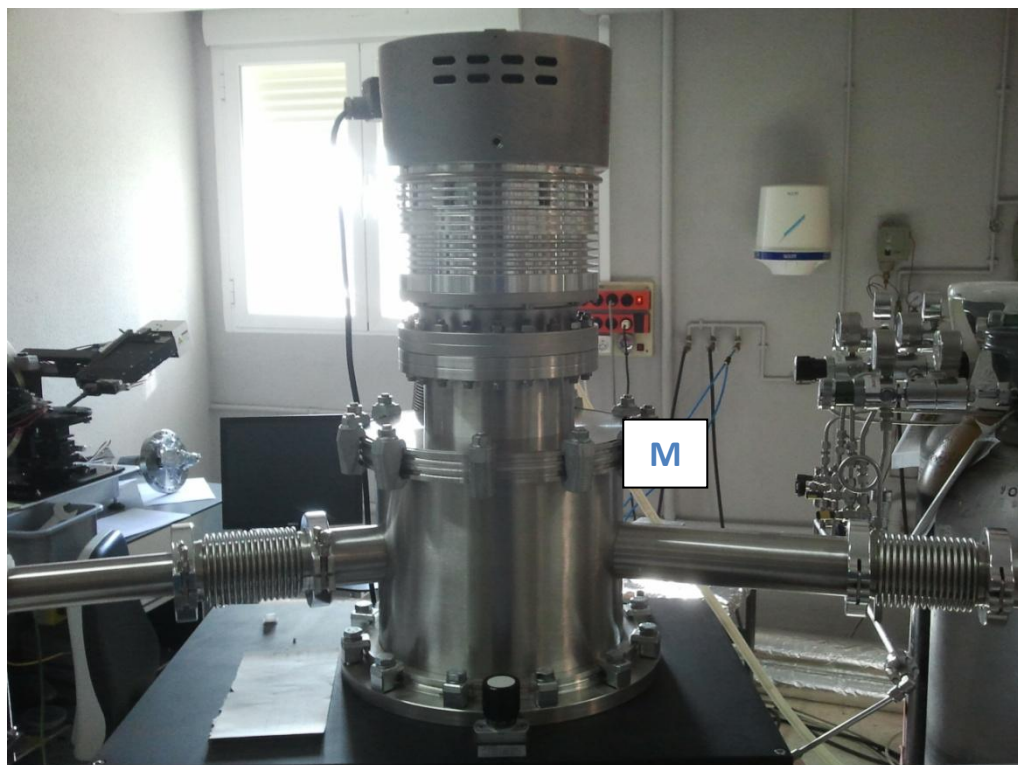


Figura. 3.7. Imagen del monocromador (M).

3.2.1.8 Cámara de polarización

La cámara de polarización (CP) está situada entre la rendija de salida del monocromador y la cámara de reflectometría. Dentro de la cámara hay dos polarizadores que se pueden situar en el camino de la luz mediante sendos manipuladores. El primero es un

polarizador comercial que opera por transmisión en longitudes de onda mayores que ~ 140 nm. El segundo, desarrollado en GOLD, opera también por transmisión en una estrecha banda en torno a 121 nm.

Para el bombeo de esta cámara se utiliza una bomba turbomolecular de 200 l/s apoyada por una bomba rotatoria de $8 \text{ m}^3/\text{h}$. El bombeo en ésta cámara contribuye a reducir el flujo de gas que entra en la CR procedente de la lámpara.

3.2.1.9 Sistema de vacíos diferenciales

Dado que no existen materiales que transmitan la radiación inferior a 105 nm, no pueden utilizarse ventanas de separación entre las diferentes partes del sistema, con el fin de evitar el paso del gas desde la lámpara a la CR. Por lo tanto, para hacer compatible el flujo de gas que permita mantener la presión adecuada en la lámpara (típicamente entre 10 Pa y 100 Pa) con la presión de trabajo en la CR (UHV) se utiliza un sistema de vacíos diferenciales en cascada. Este sistema consiste en que las diferentes cámaras, empezando por la lámpara, están conectadas entre sí mediante tubos de baja conductancia y tienen bombeos independientes. De esta forma se consigue reducir el flujo de gas entre cámaras contiguas, al tiempo que se permite el paso de la luz. El monocromador lleva incorporados cuatro tubos (T_1 , T_2 , T_3 y T_4) de baja conductancia, y existe un quinto tubo que conecta la CP con la CR (T_5), todos ellos dispuestos de la forma esquematizada mostrada en la figura 3.1.

3.2.1.10 Transporte de muestras

Los manipuladores señalados como M_2 , M_3 y M_4 en la figura 3.1 permiten el transporte de muestras entre las diversas cámaras. El portamuestras permite la utilización de sustratos de hasta 50.8×50.8 mm. Para las medidas de transmitancia, el portamuestras dispone de una ventana excéntrica que permite utilizar sustratos de hasta 12.5×12.5 mm. En la parte trasera, el portamuestras tiene un sistema de sujeción de tipo bayoneta que permite sujetarlo con dos manipuladores perpendiculares entre sí, de forma que se pueda realizar la transferencia entre las distintas cámaras mediante el enganche de un manipulador seguido del desenganche del otro manipulador perpendicular. El manipulador ubicado en la CR (M_1) tiene un sistema de sujeción para el portamuestras que permite situar la superficie superior de las muestras en la posición adecuada para su caracterización (medida de la reflectancia y transmitancia).

3.2.1.11 Horneado del equipo

Cuando un material se encuentra en vacío comienza a desorber los gases que haya adsorbido en contacto con la atmósfera. Debido a esto, el nivel de presión de ultra alto vacío (presiones menores que $\sim 10^{-7}$ Pa) no se puede alcanzar por el mero paso del tiempo durante el bombeo. Por eso es necesario el proceso de horneado, que consiste en calentar las paredes del equipo y de sus componentes con el fin de acelerar su proceso de desorción. Durante el calentamiento, el ritmo de desorción de las superficies aumenta momentáneamente, por lo que tras volver a la temperatura ambiente, el ritmo de desorción disminuye con respecto a su valor antes del calentamiento. Esta disminución dependerá de la temperatura de horneado y de su duración.

El horneado del equipo experimental de GOLD se realiza a una temperatura de aproximadamente 470 K durante un tiempo mínimo de doce horas (típicamente 24h). El proceso de horneado implica que todos los componentes que se encuentran dentro del sistema deben resistir las altas temperaturas que se alcanzan durante el calentamiento. La CIM, CE y la CS se hornean utilizando unas resistencias flexibles que rodean el exterior de las cámaras. Para aislar térmicamente el sistema durante el horneado y para homogeneizar la temperatura se cubre el equipo con papel de aluminio. En cambio, para el horneado de la CR se cubre ésta con un cajón aislante del calor provisto de unas resistencias calefactoras. Para el control de la temperatura en su interior, las cámaras disponen de medidores del tipo termopar.

A continuación se van a describir otros equipos complementarios de GOLD y que han sido utilizados en este trabajo.

3.2.1.12 Equipo de deposición en alto vacío

Además del equipo combinado de deposición y reflectometría en condiciones de UHV, GOLD dispone de otro equipo de deposición en alto vacío (HV). La cámara del equipo es de forma cúbica de 45 cm de arista y está construida de acero inoxidable. El bombeo se realiza mediante una bomba turbomolecular Leybold TW701 de 700 l/s apoyada por una bomba rotatoria de 20 m³/h. El grupo de bombeo se complementa con una bomba de sublimación de titanio con panel criogénico. Las presiones parciales de los gases residuales se miden con un cuadrupolo de masas Prisma de Pfeiffer. La presión se mide con un manómetro Pfeiffer de tipo mixto Penning/Pirani. La presión base es de 10⁻⁵ Pa. En la base de la cámara, se han colocado cuatro pares de pasajes eléctricos en los cuales se pueden instalar hasta cuatro fuentes de evaporación distintas para ETC. La distancia entre las fuentes de evaporación y los sustratos es típicamente de 30 cm. Sobre cuatro columnas de acero inoxidable está colocado el marco de soporte para los sustratos, que permite albergar sustratos de distinto tamaño. Típicamente se ha trabajado con sustratos de 50.8x50.8 mm, y también con sustratos de 25.4x25.4 mm. Un obturador manual permite tapar y destapar los sustratos.

Al igual que en la CE del otro equipo, los espesores de las láminas que se depositan se miden con una microbalanza de cuarzo calibrada por interferometría de Tolansky. Podemos ver una imagen de este equipo de deposición en la figura 3.8.

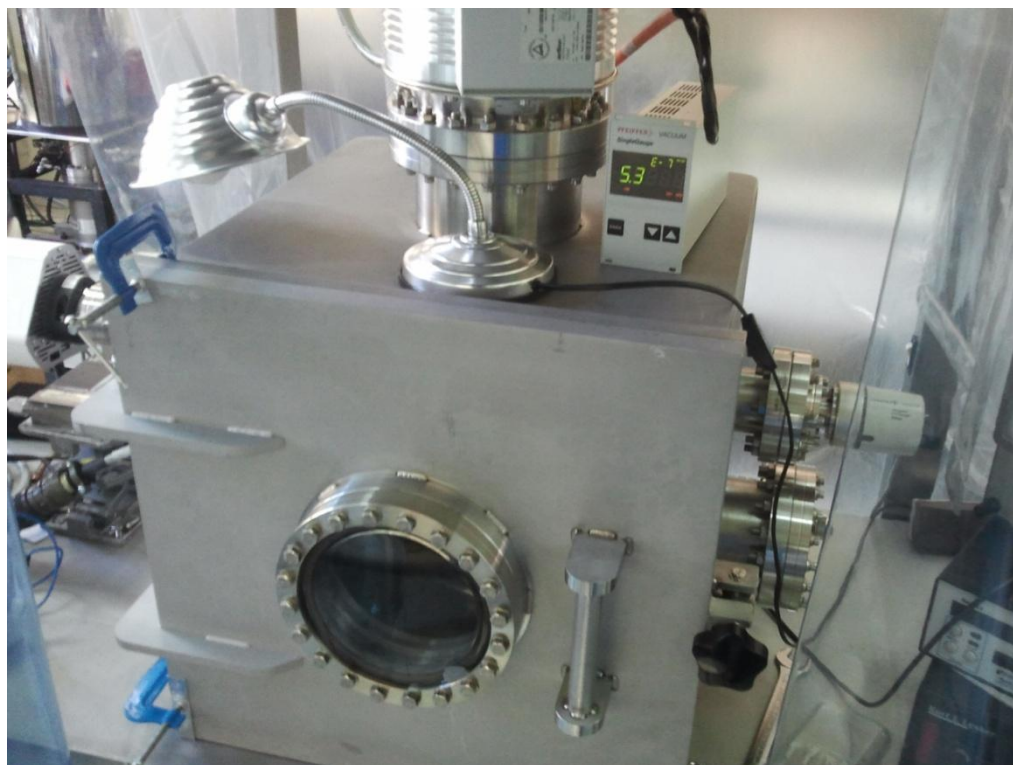


Figura. 3.8. Imagen del equipo de alto vacío.

3.2.1.13 Elipsómetro SOPRA GES 5S

El elipsómetro espectroscópico SOPRA 5S permite realizar medidas de elipsometría multi-ángulo en la región espectral desde 190 nm hasta 900 nm. La fuente de luz es una lámpara de Xenón con una potencia de 75 W colocada en el brazo del polarizador. La configuración es la siguiente: un brazo con un polarizador rotatorio (con frecuencia máxima de 10 Hz) que polariza linealmente el haz incidente, un portamuestras regulable en tres direcciones en el que se sitúan las muestras, y un segundo brazo con el analizador que recoge la luz reflejada en la muestra, y rota a la velocidad de giro del polarizador. El analizador polariza linealmente la luz reflejada en la muestra en una dirección fija y esta señal es enviada a través de una fibra óptica para ser analizada, bien por un espectrómetro de barrido de alta resolución (High Resolution Scanning Spectrometer) combinado con un tubo fotomultiplicador (PMT), cuya anchura a media altura (FWHM) es <0.5 nm en la región desde 190 hasta 900 nm, o bien por un espectrógrafo rápido (Fast Spectograph) con detección CCD, cuya FWHM es <3 nm en la región desde 250 nm hasta 990 nm.

El elipsómetro permite introducir un compensador $\lambda/4$ en el brazo del analizador. Existen además dos atenuadores en el brazo del polarizador que permiten limitar la cantidad de luz incidente y que el instrumento controla automáticamente. En un ángulo de incidencia de 75° , el haz se extiende sobre la muestra en un área de 3 mm x 12 mm, pudiendo ser reducido a $365 \mu\text{m} \times 270 \mu\text{m}$ cuando se utiliza el accesorio llamado “microspot”, que está situado a la salida del brazo que contiene el polarizador. Ambos brazos, el polarizador y el analizador, están montados sobre un goniómetro que es controlado por el software. El rango de los ángulos de incidencia está entre 7° y 90° con una repetibilidad de 0.01° . El elipsómetro permite la medida para varios ángulos, lo que aumenta la precisión del cálculo. Los programas

de obtención y análisis de datos, WINSE y WINELLI son propios de SOPRA. En la figura 3.9 se muestra una imagen del elipsómetro.



Figura. 3.9. Imagen del elipsómetro SOPRA GES 55..

3.2.1.14 Espectrofotómetro PERKIN ELMER Lambda 9

El espectrofotómetro PERKIN ELMER Lambda 9 es un equipo capaz de realizar medidas de transmitancia, absorbancia y reflectancia en la región desde 185 hasta 3200 nm. Se trata de un espectrofotómetro de doble haz que dispone de dos monocromadores, uno con 1440 líneas/mm para la región de UV/VIS (longitudes de onda 185-860.8 nm) y el otro con 360 líneas/mm para el NIR ($\lambda > 860.8$ nm). Dispone de dos lámparas, una de Deuterio (longitudes de onda 185-319.2 nm) y la otra halógena de Wolframio ($\lambda > 319.2$ nm). El espectrofotómetro dispone asimismo de dos detectores, un fotomultiplicador (longitudes de onda 185-860.8 nm) y un detector de PbS ($\lambda > 860.8$ nm), que cambian al mismo tiempo que los monocromadores. El cambio tanto de monocromador, como de lámpara y de detector es automático. La precisión en la longitud de onda es de 0.2 nm en el UV/VIS y 0.8 nm en el NIR. El instrumento proporciona directamente la transmitancia, o reflectancia a través de un software propio, al dividir las señal reflejada/transmitida entre la señal de referencia. Para medir bajas transmitancias se pueden usar filtros de densidad neutra en cascada. Esta técnica consiste en medir la transmitancia de un filtro, y luego medir la transmitancia de la muestra colocando el filtro en el haz de referencia. Por tanto, dividiendo ambas transmitancias se obtiene la de la muestra. En la figura 3.10 se muestra una imagen del este equipo.



Figura. 3.10. Imagen del espectrofotómetro PERKIN ELMER Lambda 9.

Aquí termina la descripción de los equipos utilizados dentro del laboratorio de GOLD. A continuación, se describen otros laboratorios en los que se ha realizado una parte del trabajo experimental.

3.2.2 Línea BEAR del sincrotrón ELETTRA

ELETTRA es un sincrotrón de tercera generación en cuyo anillo de almacenamiento circulan electrones que han sido previamente acelerados (primero en un acelerador lineal, y después en un acelerador sincrotrón) hasta una energía de 2 GeV, con una corriente tras la inyección de 300 mA.

La línea BEAR (*Bending Magnet for Emission Absorption and Reflectivity*) está dedicada al estudio de las propiedades ópticas, electrónicas y magnéticas de los materiales, en el intervalo de energía de ~ 3 a ~ 1700 eV. La estación experimental está compuesta por dos cámaras de UHV conectadas entre sí: la cámara experimental y la cámara de preparación de muestras. En la cámara experimental, cuya presión base es de 10^{-8} Pa, se realizan las medidas de reflectancia, transmitancia, absorción óptica, fluorescencia y fotoemisión resuelta en ángulo; en la cámara de preparación, con presión base de 2×10^{-8} Pa, se pueden depositar láminas delgadas por evaporación. Este sistema permite la caracterización óptica *in situ* de los materiales objeto de estudio.

A continuación describiremos los aspectos del diseño más relevantes de la línea BEAR [79] [80]. El monocromador dispone de dos redes de difracción; la red que corresponde al monocromador de incidencia normal (*Grating of the Normal Incidence Monochromator*, GNIM) cubre el intervalo entre 3 y 50 eV, y la red que corresponde al monocromador de incidencia

rasante (G1200) cubre el intervalo entre 40 y 1700 eV. Ambas redes tienen 1200 líneas/mm y la resolución espectral $\lambda/\Delta\lambda$ es mayor o igual a 3000.

El sincrotrón proporciona una fuente de radiación con un espectro continuo desde el infrarrojo hasta los rayos X duros. Este gran intervalo espectral tiene como inconveniente la contribución no despreciable de la radiación de órdenes superiores (introducida por la red de difracción), que conviene minimizar. Para ello, se procede de la siguiente forma: para fotones de energía menores que 100 eV se utilizan filtros de transmisión de diferentes materiales, como cuarzo, LiF, In, Sn, Al y Si, cada uno adaptado a un cierto intervalo espectral. Por encima de 100 eV, los órdenes de difracción superiores se eliminan por reflexión; para ello, se optimiza el ángulo de incidencia sobre un espejo plano de platino asociado a la red G1200 de forma que refleje los órdenes superiores en la menor proporción posible, y a la vez que refleje eficientemente el primer orden. El ángulo de incidencia puede tomar valores entre 2.5° y 12.5° respecto de la rasante.

El tamaño del haz que incide sobre la muestra es 30 μm x 300 μm , pero se puede ampliar si es necesario. Tanto la intensidad de la radiación transmitida (I_T) como la de la radiación incidente (I_D) se miden utilizando un fotodiodo de silicio modelo SXUV-100 de la casa IRD. Para poner de manifiesto las fluctuaciones y el decaimiento temporal del haz, se mide una señal de referencia (R); antes de entrar en la cámara experimental, el haz atraviesa una rejilla de oro que se encuentra a un potencial negativo de 100 V, generándose una corriente por efecto fotoeléctrico proporcional a la señal incidente, que se usa como señal de referencia. Cuando el número de fotones incidente y, por tanto, la corriente de electrones, es muy pequeño, no se puede utilizar la señal de la rejilla como señal de referencia. En este caso se utiliza como referencia la corriente de electrones dentro del anillo de almacenamiento. La señal de fondo se corrige midiendo la corriente de oscuridad del fotodiodo (I_B) y de la señal de referencia (R_B). Para ello, se cierra la válvula del equipo que da paso a la radiación y se calcula el valor promedio de intensidad en un barrido temporal. La transmitancia se calcula de la siguiente forma:

$$T = \frac{(I_T - I_B)/(R_T - R_B)}{(I_D - I_B)/(R_D - R_B)} \quad (3.1)$$

Cuando se utiliza la corriente del anillo para la normalización no tiene sentido hablar de corriente de oscuridad ($R_B = 0$).

Las láminas delgadas usadas en este trabajo se depositaron en este equipo experimental mediante la técnica del calentamiento por electrones, la cual será descrita en detalle en la sección 3.3.1.2.

3.2.3 Línea 6.3.2 del sincrotrón ALS

ALS (*Advanced Light Source*) es un sincrotrón de tercera generación, ubicado en el laboratorio (Lawrence Berkeley National Laboratory) LBNL, en cuyo anillo de almacenamiento circulan electrones que han sido previamente acelerados (primero en un acelerador lineal, y después en un acelerador sincrotrón) hasta una energía de 1.9 GeV, con una corriente de 400 mA después de la inyección.

La línea 6.3.2 está dedicada a la caracterización de elementos ópticos y recubrimientos reflectantes en el intervalo espectral de 25 a 1200 eV. Está compuesta principalmente por un monocromador y un reflectómetro [81] [82]. El monocromador consta de una red de difracción plana con espaciado interlineal variable de 80, 200, 600 y 1200 líneas/mm. La estabilidad y el reducido tamaño del haz de luz, $10\text{ }\mu\text{m} \times 300\text{ }\mu\text{m}$, hacen posible que no sea necesario utilizar una rendija en la entrada del monocromador. De esta forma se consigue un flujo de fotones elevado y una resolución espectral $\lambda/\Delta\lambda$ en torno a 7000.

Una característica de esta línea es la gran precisión en el posicionamiento de las muestras dentro del reflectómetro. La precisión en el posicionamiento lineal en cada uno de los tres ejes es de $4\text{ }\mu\text{m}$ y en el posicionamiento angular es de 0.002° . Otra característica importante de esta línea es la alta pureza espectral, que se consigue con un sistema formado por un conjunto de filtros y un supresor de órdenes superiores. El equipo dispone de una rueda con filtros de Mg, Al, Si, Be, B, C, Ti, Cr, Co y Cu, que permite seleccionar el filtro adecuado para cada intervalo espectral. El supresor de órdenes consiste en un sistema de tres espejos que funcionan en incidencia rasante, y que con los ángulos adecuados evita que el haz se desvíe. El ángulo de incidencia en el espejo central puede variar entre 6° y 45° . Los espejos están recubiertos con bandas de Ni, C y Si, siendo posible seleccionar cualquiera de los tres recubrimientos mediante una traslación lateral del supresor de órdenes.

La presión de trabajo en el reflectómetro es $\sim 10^{-4}$ Pa. El sistema está equipado con diferentes detectores, como fotodiodos de Si y GaAsP, varios CEM y una cámara CCD. El equipo no dispone de una cámara para la preparación de las muestras, por lo que la caracterización de las mismas se hace *ex situ*.

La transmitancia se calcula a través de la ecuación 3.1, utilizando la corriente del anillo para la normalización de las medidas.

3.3-Técnicas experimentales

A continuación se resumen las características principales de las técnicas experimentales que se han usado en este trabajo.

3.3.1 Técnicas de deposición de láminas delgadas

En todas las técnicas de deposición de láminas delgadas utilizadas a lo largo de este trabajo se parte del material sólido que se quiere depositar, para después convertirlo en vapor mediante calentamiento o bombardeo con partículas energéticas y finalmente condensarlo sobre el sustrato. Esto es lo que se conoce como técnicas de deposición física en fase vapor (*Physical Vapour Deposition*, PVD). El proceso de deposición ha de realizarse en vacío con el fin de por un lado evitar la oxidación del material, y por otro conseguir que las partículas en estado de vapor describan trayectorias rectilíneas hasta alcanzar el sustrato, sin colisionar con las moléculas de la atmósfera. En las siguientes secciones describiremos detalladamente las técnicas utilizadas en la deposición de láminas delgadas.

3.3.1.1 Evaporación térmica convencional

En la evaporación térmica convencional (ETC), el material que se quiere depositar se calienta a temperaturas elevadas hasta alcanzar una presión de vapor adecuada para el ritmo de deposición de trabajo. Los materiales se colocan sobre una fuente de evaporación en forma de caja o filamento por la que se hace circular una corriente eléctrica de gran intensidad, de forma que su temperatura se incrementa por efecto Joule. La alimentación eléctrica se transfiere desde fuera de la campana de vacío. Los materiales típicos utilizados para las fuentes de evaporación son metales de alto punto de fusión, como tántalo, molibdeno y wolframio (3290 K, 2896 K y 3683 K, respectivamente), y presión de vapor muy baja para las temperaturas de evaporación habituales. La elección del material de la fuente dependerá de la naturaleza del material que se quiera evaporar, para evitar en lo posible la formación de aleaciones con menor temperatura de evaporación. En la figura 3.11 se muestra un esquema de esta técnica de deposición de láminas delgadas.

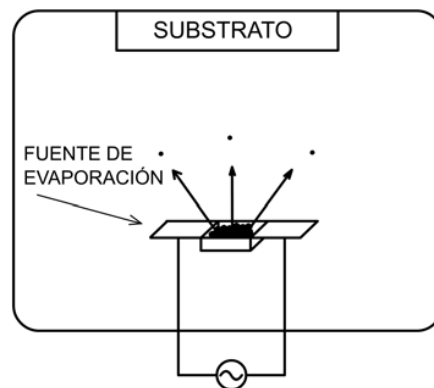


Figura. 3.11. Esquema de la técnica de evaporación térmica convencional.

3.3.1.2 Evaporación en la línea BEAR: Calentamiento por electrones

Esta técnica es la utilizada en la línea BEAR del sincrotrón ELETTRA, donde se utiliza una fuente denominada TriCon [83] diseñada por ellos mismos. En esta fuente, un filamento de tántalo rodea un crisol de tántalo, wolframio o molibdeno, dentro del cual se introduce el material que se va a evaporar. Se hace pasar una corriente a baja tensión por el filamento, del cual se extrae una corriente de electrones hacia el crisol, que se encuentra a alta tensión positiva. De esta manera el flujo de electrones calienta el crisol y como consecuencia, el material que contiene. Las ventajas de esta fuente respecto a las fuentes convencionales de ETC, descritas anteriormente, son una menor desorción durante las evaporaciones y una mayor estabilidad térmica.

3.3.1.3 Deposición mediante *Sputtering* por haz de iones

En las dos técnicas de evaporación descritas, las moléculas o átomos que se condensan sobre el sustrato lo hacen con una energía pequeña (típicamente no alcanza 0.1 eV), la que corresponde a su temperatura de evaporación. A continuación se describe la técnica del *sputtering* por haz de iones (existen otros tipos de *sputtering*), que permite depositar láminas delgadas sin necesidad de calentar el material que se quiere evaporar, conservando su estequiometría y proporcionando átomos más energéticos; la energía típica de los átomos

arrancados mediante esta técnica está entre uno y pocos eV; esto último quiere decir que se obtendrán láminas delgadas más densas y con mejor adherencia que con otras técnicas. El *sputtering* por haz de iones se basa en el bombardeo de una pieza del material que se quiere depositar, denominado blanco, con iones energéticos producidos en una descarga eléctrica en forma de plasma. Éstos iones son acelerados en la dirección del blanco por una diferencia de potencial llamada voltaje de aceleración, que en este trabajo fue del orden de 1200 V. Para evitar que el blanco se cargue positivamente, se usa un neutralizador. El neutralizador extrae electrones de un cátodo hueco y los acelera en dirección al haz de iones incidentes con un voltaje del ~ 220 V. Por tanto, el haz de iones incidente arrastra los electrones que necesita para que la carga del conjunto sea nula.

Cuando los iones interactúan con los átomos del blanco, le transfieren parte de su momento lineal, de forma que se arrancan átomos que se depositan en un sustrato colocado enfrente del blanco. Para producir los iones suelen utilizarse gases inertes de masa elevada, en este caso, argón. En la figura 3.12 se muestra un esquema de esta técnica de deposición.

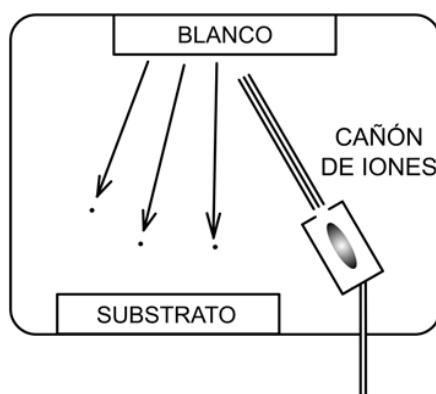


Figura. 3.12. Esquema de la técnica de sputtering por haz de iones.

3.3.2 Caracterización óptica: transmitancia, reflectancia y elipsometría

La caracterización óptica de distintos materiales se ha realizado a partir de medidas de transmitancia, reflectancia y elipsometría. La transmitancia de una muestra se define como el cociente entre la intensidad de la luz que transmite y la intensidad de la luz incidente. Por esta razón, en los reflectómetros utilizados en este trabajo se midió tanto la intensidad de la radiación transmitida como la intensidad incidente. De forma análoga, se define la reflectancia de una muestra como el cociente entre la intensidad de la luz que refleja y la intensidad de la luz incidente. El proceso de medida varía ligeramente dependiendo de cada equipo. En GOLD el método utilizado consiste en la medida sucesiva de la intensidad transmitida o reflejada y de la intensidad incidente, y el promedio de los valores obtenidos. En el espectrofotómetro y en las líneas de haz BEAR y 6.3.2 la intensidad transmitida y la intensidad incidente se normalizan a una señal de referencia, de forma que no es necesario alternar medidas de ambas intensidades.

La elipsometría es una técnica de análisis óptico que se basa en el cambio del estado de polarización de la luz que incide sobre un material (debido a las reflexiones y transmisiones

que se producen en el material y el sustrato). Dicho análisis es no destructivo y es útil para la determinación de espesores y/o constantes ópticas de láminas delgadas. La elipsometría mide la ratio compleja de reflectancia, $\rho = \frac{r_p}{r_s} = \tan(\psi)e^{i\Delta}$, la cual puede ser parametrizada mediante la componente de amplitud, ψ , y la diferencia de fase, Δ . En general, las constantes ópticas o el espesor de las láminas se pueden deducir directamente a partir de medidas de ψ y Δ , ya que estos valores se relacionan con r_s y r_p .

La obtención de las constantes ópticas a partir de medidas de transmitancia y de elipsometría se describirá en detalle en el siguiente capítulo.

3.3.3 Fabricación de sustratos en lámina delgada

Para la realización de las medidas de transmitancia de láminas delgadas es conveniente la utilización de sustratos que transmitan la mayor parte de la radiación incidente posible, de modo que se mantenga la máxima intensidad de luz para la posible absorción de la lámina que se deposita sobre el sustrato. Esta cuestión, que es elemental en muchas regiones espectrales, no lo es para longitudes de onda inferiores a ~ 105 nm, debido a que no se conoce ningún material que, con un espesor suficiente para su manipulación, del orden de 1 mm, transmita la radiación necesaria para la realización de medidas de transmitancia. Por lo tanto, para la medida de la transmitancia de láminas delgadas es necesaria la utilización de sustratos especiales, que consisten a su vez en láminas delgadas autosoportadas.

El tipo de sustratos autosoportados utilizados en GOLD se basan en una fina lámina delgada de carbono soportada sobre una rejilla de níquel electroformada. Se utiliza carbono porque este material forma láminas continuas sin apenas agujeros, para espesores tan finos como 5 nm e incluso menores. Las láminas de carbono que se han usado tienen un espesor de entre 5 y 12.5 nm.

Se han utilizado diferentes tipos de rejillas de soporte. De la casa Stork-Veco se han utilizado de pitch 750 (número de períodos barra+hueco por pulgada), con una transmitancia del 50%, 8-9 μm de espesor, 8 μm de barra y 25 μm de hueco. De la casa InterNet, Inc. se han utilizado dos tipos de rejillas: de pitch 333 que tiene un 70% de transmitancia, espesor de 10 μm , barra de 12.5 μm y hueco de 64 μm ; y de pitch 117 con un 88.6% de transmitancia, espesor de 15 μm , barra de 12.7 μm y hueco de 203 μm .

El proceso de deposición de la lámina de carbono sobre estas rejillas se describe a continuación: Se introduce una de las rejillas descritas anteriormente en un recipiente con agua destilada. Se añade una gota de colodión disuelto en acetato de amilo, lo que hará que se forme una película de colodión en la superficie del agua. A continuación se extrae la rejilla del recipiente, de forma que queda completamente cubierta por la película de colodión. Una vez seca se introduce en la cámara de deposición y se deposita la lámina de carbono sobre la película de colodión mediante la técnica de evaporación por cañón de electrones (técnica detallada en [32]). Por último, se disuelve el colodión mediante disolución con acetato de amilo, quedando sólo la lámina de carbono sobre la rejilla.

En este trabajo también se ha utilizado láminas delgadas autosoportadas que se diferencian de las anteriores en que no existe una rejilla de soporte, y en su lugar, la lámina de colodión se extiende sobre un pequeño agujero; además se substituyó el C por Al. El método de preparación utilizado es el siguiente: sobre una chapa de cobre, con cinco agujeros de aproximadamente 1.1 mm de diámetro, se deposita una capa de colodión mediante el proceso de inmersión antes mencionado. A continuación, se deposita una lámina de 25 nm de Al. Después, se disuelve el colodión y, por tanto, queda la lámina de aluminio sobre el cobre, de tal forma que en la zona sobre cada agujero en la chapa, el aluminio queda autosoportado. Por último, se evapora encima del aluminio el material de interés, enmascarando uno de los agujeros para que en él quede solamente la lámina de Al. Esto servirá para normalizar las medidas de transmitancia del conjunto lámina-substrato a la transmitancia del substrato, de donde se obtiene la transmitancia de la lámina deseada.

3.3.4 Determinación de los espesores de las láminas depositadas

A lo largo de este trabajo se han utilizado diferentes métodos para la medida de los espesores de las láminas. Para poder depositar una multicapa es necesario que la medida de espesores pueda realizarse *in situ* en tiempo real; por otra parte, la calibración de estas medidas se produce mediante una medida más precisa *ex situ*. Los métodos utilizados se describen en detalle a continuación.

3.3.4.1 Microbalanzas de cuarzo

Sirven para medir el espesor acumulado y la velocidad de deposición, en tiempo real, durante la deposición de la lámina. El cuarzo tiene propiedades piezoeléctricas, de forma que al aplicar una tensión entre ambas caras se produce una deformación del cristal. Dependiendo de su geometría, tendrá diversos modos de oscilación; uno de ellos, habitualmente el fundamental, se utilizará como referencia en el circuito de un oscilador. Al depositar una lámina sobre el cuarzo se produce una disminución de su frecuencia de resonancia, que depende de la masa depositada y de sus propiedades mecánicas, y está por tanto relacionada con el espesor depositado. Para poder obtener el espesor depositado, éste debe ser mucho menor que el espesor del cuarzo; o lo que es lo mismo, que la variación producida en la frecuencia sea una pequeña fracción de la frecuencia fundamental del cuarzo.

Para convertir la variación de la frecuencia debida a la deposición de una lámina en su espesor es necesario conocer algunas de sus propiedades, entre ellas la densidad. La densidad de la lámina no es fácil de conocer con exactitud, ya que, en muchos casos, la densidad de un material en lámina delgada depositada a temperatura ambiente es inferior a la del material masivo. Por ello es conveniente hacer alguna calibración de la medida dada por la microbalanza mediante la medida directa del espesor de alguna lámina del material de interés. Esa medida directa del espesor depositado en el substrato puede determinarse mediante diferentes métodos. En este trabajo ese espesor se ha medido utilizando la interferometría de Tolansky, que se describe a continuación.

3.3.4.2 Interferometría de Tolansky

La interferometría de Tolansky [84] permite la determinación *ex situ* de los espesores a partir del patrón interferencial que se produce al iluminar una cuña de aire entre dos superficies reflectantes. Para ello hay que producir un escalón abrupto en la lámina depositada. Para formar el escalón se coloca en un lado del sustrato una cuchilla metálica a modo de máscara. Posteriormente se deposita sobre la muestra una lámina de un metal reflectante con el fin de tener igual desfase de las ondas reflejadas a ambos lados del escalón. En este trabajo, las muestras fueron recubiertas con aluminio. Este método resulta destructivo para la muestra, lo cual es un inconveniente. En la figura 3.13 se representa un esquema de este método.

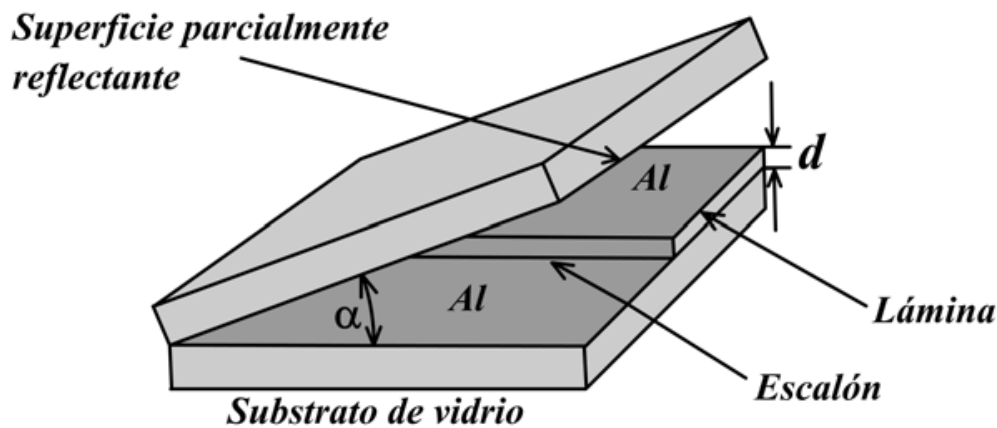


Figura. 3.13. Esquema de la cuña de aire entre dos superficies en contacto. El ángulo que forman las dos superficies, exagerado en la figura, es α , y el espesor problema es d .

Un vidrio plano y el sustrato donde se ha formado el escalón se ponen en contacto de forma que aparezca una cuña de aire. El vidrio plano tiene un recubrimiento parcialmente reflectante que permite el paso de una parte de la luz. Al iluminar desde el infinito con luz monocromática, aparece un patrón de franjas. Debido al cambio brusco de espesores, en el escalón se produce un desplazamiento en las franjas; la ratio entre dicho desplazamiento, a , y el periodo de las franjas de interferencia, b permite obtener el espesor de la lámina depositada, d , mediante:

$$d = \frac{b\lambda}{2a} \quad (3.2)$$

Como fuente de iluminación se utiliza una lámpara de sodio; se toma como su longitud de onda el valor medio del doblete del sodio ($\lambda=589.3$ nm). Para las medidas de transmitancia, debido al reducido tamaño de los sustratos utilizados, es necesario el uso de un testigo de vidrio sobre el que se deposita el mismo espesor que sobre el sustrato. Para la aplicación de este método es necesaria la exposición de las muestras a la atmósfera, por lo que no es adecuado en el caso de que los materiales sean muy reactivos.

3.3.4.3 Reflectancia en función del ángulo: franjas de Kiessig

El espesor de una lámina depositada sobre un sustrato se puede determinar a partir de medidas de reflectancia en función del ángulo para una energía fija. La interferencia entre la luz reflejada en la interfaz entre la lámina y el sustrato, y la luz reflejada en la interfaz entre la lámina y el vacío da lugar a una estructura de máximos y mínimos en función del ángulo de incidencia, de la cual se puede extraer el valor del espesor de la lámina. La posición angular de los máximos locales de la curva está relacionada con el espesor de la lámina depositada, como se muestra en la ecuación 3.3:

$$2z\sqrt{\sin^2\theta_M - \sin^2\theta_C} = m\lambda \quad (3.3)$$

donde z es el espesor de la lámina, θ_m es el ángulo en el que se da el máximo local de la curva, θ_c es el ángulo crítico, m es un número natural que ordena los máximos relativos y λ es la longitud de onda en la que se realiza la medida.

Además, la posición del ángulo crítico nos da información sobre la densidad del material, mediante la dependencia de los factores de scattering con la densidad, en longitudes de onda lejos de bordes de absorción:

$$N = \cos\theta_C \quad (3.4)$$

Finalmente, de los valores de reflectancia de los máximos y mínimos se puede obtener información sobre la rugosidad superficial. Éste método tiene la limitación de que el cálculo teórico de la reflectancia implica un buen conocimiento de las constantes ópticas del material en las energías de trabajo, lo que no siempre será posible. Además, estas medidas se suelen hacer en ángulos muy rasantes respecto a la normal, por lo que la influencia de los posibles contaminantes en la superficie es determinante. Por último, para determinados materiales, puede darse un gradiente de densidad a lo largo del espesor de la lámina depositada, lo cual complica la obtención de información a partir de este tipo de medidas.

Esta técnica se utilizó en las líneas de haz de ELETTRA y ALS, dado que disponen de radiación de energía adecuada y sistemas automatizados de giro de muestra y detector que permiten una rápida determinación de las franjas de Kiessig.

Capítulo 4. Determinación de las constantes ópticas

4.1-Introducción: Lu, Sr y SrF₂

En este capítulo se muestra la investigación realizada para la caracterización de las constantes ópticas de materiales en los intervalos espectrales desde los SXR hasta el IR, partiendo de medidas de transmitancia y elipsometría. La caracterización de estos materiales constituye un paso previo necesario para poder diseñar y preparar nuevos recubrimientos ópticos basados en ellos, en particular algunos de los recubrimientos ópticos que se presentarán en el capítulo 6. Además, el conocimiento experimental de las constantes ópticas de los materiales en amplias regiones del espectro electromagnético permite encontrar zonas de baja absorción que puedan hacer particularmente interesantes dichos materiales en el desarrollo de filtros, espejos, polarizadores, etc., con vistas a diversas aplicaciones para la litografía, láseres, instrumentación espacial, radiación sincrotrón, láseres de electrones libres, etc.

El desarrollo de recubrimientos multicapa en el EUV-FUV requiere de materiales con baja absorción, además de un conocimiento preciso de las constantes ópticas de los materiales depositados en lámina delgada en dicha zona. La información existente sobre materiales lantánidos y alcalino-térreos sugería que presentan una región de baja absorción en las longitudes de onda largas del EUV, lo cual los hace prometedores a la hora de desarrollar nuevos recubrimientos. Los lantánidos tienen los bordes teóricos de absorción O₂ y O₃ entre 16.8 (La) y 33.6 eV (Lu), y presentan una relativamente baja absorción en energías inmediatamente inferiores a estos valores, lo que les convierte en materiales singulares, dado que en esta región espectral la mayor parte de los materiales de la naturaleza presentan una gran absorción. Los materiales alcalino-térreos presentan a su vez un borde teórico de absorción entre 14.8 eV (Ba, O₃) y 111.5 eV (Be, K), que los convierte en candidatos prometedores para los recubrimientos ópticos en los intervalos de energías inmediatamente inferiores a sus bordes de absorción en el EUV; de hecho el Mg se viene empleando con éxito en multicapas para el EUV en los últimos años [26].

La investigación sobre las propiedades ópticas de estos materiales se ha enmarcado en el trabajo que viene realizando el grupo GOLD, en colaboración con varios grupos italianos (IFN, Istituto di Fotonica e Nanotecnologie, en Padua, CNISM, Dipartimento di Elettronica, en la universidad de Pavía e IOM-CNR, Istituto Officina dei Materiali, en Trieste), dentro de una línea de investigación para encontrar nuevos materiales para recubrimientos ópticos en las longitudes de onda largas del EUV. Los materiales caracterizados previamente en esa colaboración habían sido Yb [35], Ce [36], Pr [37], Eu [38], Er [39], Ho [40] y Tm [41]. En paralelo con esta colaboración, el grupo liderado por el Dr. J. Seely del Naval Research Laboratory (NRL), en Washington DC [85] ha realizado la caracterización de otros materiales lantánidos (Sm [43], La, Tb, Nd, Gd y Dy [44]).

En este capítulo se ha culminado esta línea de investigación y se ha realizado el estudio de las propiedades ópticas del Lu, con lo que quedó completada la caracterización de los lantánidos. Además se han caracterizado dos materiales alcalino-térreos, Ca y Sr, aunque sólo la caracterización del segundo ha podido completarse dentro del periodo que corresponde a

este trabajo. El Lu, el Sr y el Ca, fueron depositados y caracterizados en la línea de haz BEAR del sincrotrón ELETTRA de Trieste.

En este capítulo también se ha caracterizado el SrF_2 , debido a las dos motivaciones que se exponen a continuación: En primer lugar, los estudios realizados por Nisar y Robin [86], en los que obtienen las constantes ópticas del SrF_2 aplicando el análisis de KK a medidas de reflectancia en la región de 10-36 eV sobre cristales exfoliados, muestran una absorción prácticamente nula en la energía de 26.9 eV, que está muy cercana a la energía de operación del láser “Ne-like Ar”, que es 26.4 eV. Por tanto, se consideró el SrF_2 como un candidato interesante para realizar recubrimientos sintonizados en esta importante línea, que pudieran mejorar las propiedades de las multicapas de Sc/Si [87] que se utilizan actualmente. Lamentablemente, los resultados aquí obtenidos dieron un valor alto de k en la energía de interés, lo cual significa que este material no es interesante para esta aplicación específica. La segunda motivación para caracterizar el SrF_2 fue la escasez de datos existente en la literatura acerca de sus propiedades ópticas, en particular en energías superiores a 30 eV [88]. Este material fue depositado en las instalaciones de GOLD y caracterizado en la línea de haz 6.3.2 del sincrotrón ALS, en el laboratorio LBNL, en colaboración con la División de Física del laboratorio norteamericano Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL).

4.1.1 Estudios previos

A continuación se resume brevemente la bibliografía disponible acerca de cada uno de los materiales analizados.

4.1.1.1 Lu

Antes de este trabajo, la literatura existente sobre el Lu era muy escasa. Zimkina *et al.* [89] publicaron medidas de absorción en lámina delgada en la región de 60-480 eV. Lamentablemente, dichos datos se presentan en unidades arbitrarias, por lo que no se puede deducir el coeficiente de absorción. Schüller *et al.* [90], Homewood y Trodahl [91] y Weaver y Lynch [92] publicaron medidas de conductividad óptica y reflectancia (o funciones con las que éstas pueden ser inmediatamente derivadas) en los intervalos 0.28-5 eV, 1.5-6 eV y 1.5-4.5 eV, respectivamente. Las medidas se realizaron *in situ* sobre láminas delgadas, en el caso de Schüller *et al.* y Homewood y Trodahl, o sobre cristales, en el caso de Weaver y Lynch. Fischer y Baun [93] obtuvieron los espectros de emisión en los bordes M_α y M_β de los lantánidos y óxidos de lantánidos, incluido el Lu, aunque de este elemento solo representaron el espectro del óxido, asegurando que la diferencia entre el espectro de emisión del óxido y el del metal era inapreciable. A energías mayores de las aquí estudiadas, Padalia *et al.* [94] obtuvieron el espectro de absorción del Lu y otros lantánidos en los bordes de absorción $L_{2,3}$.

Por otra parte, se han publicado otros artículos en los que se realizan medidas no ópticas del Lu. Bonelle *et al.* [95], obtuvieron espectros de fotoelectrones del Lu_2O_3 en la región de valencia y en la región 4d. Lang *et al.* [96] publicaron los niveles de energías de enlace de los electrones más internos medidos por espectroscopía de rayos x. Colliex *et al.* [97] publicaron el espectro de pérdida de energía de electrones transmitidos a través de láminas delgadas de Lu, además de otras tierras raras y compuestos; para el Lu, los autores obtuvieron un máximo de pérdida de energía en 14.9 eV, el cual fue asignado a unas excitaciones

colectivas de la última capa electrónica, y un pico menos intenso en 41.0 eV, el cual fue asignado a la excitación de los electrones en la capa 5p. Onsgaard *et al.* [98] publicaron un espectro de pérdida de energía de electrones reflejados en una cara (001) de Lu cristalino, y además publicaron las energías de excitación del Lu. Netzer *et al.* [99] publicaron el espectro de pérdida de energía de electrones reflejados en Lu y otros lantánidos. Manoubi *et al.* [100] determinaron los ratios entre la sección eficaz de Lu en los bordes $M_{4,5}$ y la del O en el borde K. Henke *et al.* [101] obtuvieron un conjunto semiempírico de constantes ópticas en la región de 30-30000 eV. Esta compilación utilizó como información de referencia los datos de Zimkina *et al.* [89]. Debido a la gran escasez de datos experimentales sobre el Lu, Henke *et al.* tuvieron que recurrir al uso de datos de Yb en los bordes $M_{3,4,5}$, publicados anteriormente por Combley *et al.* [102].

4.1.1.2 Sr

En el caso del Sr, el precedente más interesante es el trabajo de Endriz y Spicer [103], en el que publicaron la reflectancia de láminas depositadas mediante evaporación de Ba, Sr, Yb y Eu, en la región 0.3-11.6 eV, y calcularon las constantes ópticas de dichos materiales mediante el análisis de KK. Varios grupos de autores publicaron espectros de absorción en vapores de Sr: Mansfield y Connerade [104], en 130-310 eV, Brown *et al.* [105] en 6.54-8.87 eV, Garton y Codling [106] en 5.1-7.5 eV, y Hudson y Carter [107] en 6.12-7.54 eV. Aymar y Lecomie [108] midieron la sección eficaz de fotoabsorción de vapores de Sr en la región 8.69-11.92 eV. Lamentablemente en todos estos artículos se publicó la absorción en unidades arbitrarias, por lo que no se pueden obtener los valores numéricos. Por otra parte, se han publicado otros artículos en los que se realizan medidas no ópticas acerca del Sr. Langkowski [109] midió el espectro de pérdida de energía de electrones en láminas delgadas de Lu en el intervalo 2-50 eV, y calculó la función dieléctrica compleja en dicho intervalo. Finalmente, Henke *et al.* [101] obtuvieron un conjunto semiempírico de constantes ópticas en la región de 30-30000 eV. Esta compilación utilizó como información de referencia los datos de Mansfield y Connerade [104].

4.1.1.3 SrF₂

Antes de este trabajo, la literatura sobre el SrF₂ era muy escasa. Lukirskii *et al.* [88] publicaron medidas de reflectancia en función del ángulo de incidencia sobre láminas delgadas de SrF₂ en cinco energías entre 110 y 525 eV, en las cuales calcularon δ y k . En el cálculo no tuvieron en cuenta la rugosidad de la lámina, por lo que se espera que sus valores de las constantes ópticas puedan no ser muy precisos. Robin-Kandare y Robin [110] hicieron medidas de transmitancia de láminas delgadas de SrF₂, CaF₂ y BaF₂, a partir de las cuales calcularon la absorción (despreciando la reflectancia) y k en el intervalo 9-14 eV. Además, midieron la reflectancia de monocristales exfoliados de esos materiales en el intervalo 9.5-13.8 eV. Nisar y Robin [86] midieron la reflectancia de cristales de SrF₂ y BaF₂ exfoliados *in situ* en el intervalo 8-35 eV, y calcularon n y k mediante el análisis de KK. Finalmente, entre los artículos en los que se realizaron medidas no ópticas, se destaca el de Frandom *et al.* [111], donde publicaron medidas de pérdida de energía de electrones en láminas de SrF₂ en el intervalo 5-35 eV, a partir de las cuales calcularon la constante dieléctrica compleja.

Cuando el SrF_2 se deposita en forma de lámina delgada, crece con menor densidad y mayor contenido de defectos y huecos que el material masivo, tal que un monocristal. En general, los fluoruros como el SrF_2 o el MgF_2 , depositados sobre sustratos a temperatura ambiente crecen con una considerable porosidad [112] [113], lo cual implica que su densidad en lámina delgada es inferior a la de sus respectivos cristales. Esto puede provocar que las constantes ópticas difieran significativamente, sobre todo en la zona de transparencia, donde la lámina delgada es varios órdenes de magnitud más absorbente que el cristal, como se ha mostrado para el MgF_2 [114] [115]. En el caso de láminas delgadas de SrF_2 , El-Shazly y Ebrahim [116] encontraron que láminas delgadas depositadas por evaporación, sobre sustratos cuya temperatura no superaba los 50 °C, eran no homogéneas en profundidad; describieron este comportamiento descomponiendo la lámina en dos, cada una con su índice de refracción en el intervalo espectral de 460 a 1000nm: un índice inferior, para la capa adyacente al aire y otro más grande, para la capa adyacente al sustrato de vidrio. Gisin [117] obtuvo la dependencia del índice de refracción del SrF_2 en función del espesor de la lámina delgada depositada, en la longitud de onda de 4,5 μm . El índice de refracción disminuía continuamente en el intervalo de espesores entre 0,8 y 7,4 μm . Por tanto, de acuerdo con los datos de la literatura, se espera que las propiedades ópticas de las láminas delgadas de SrF_2 no sólo difieran de las del material masivo, sino que dependan del espesor de la lámina.

4.2-Equipos experimentales: Lu, Sr y SrF_2

4.2.1 Preparación de las muestras

Las muestras de Lu y Sr fueron depositadas y analizadas en la línea BEAR del sincrotrón ELETTRA. Ambas fueron depositadas sobre láminas de carbono de 5 nm de espesor, soportadas sobre rejillas de Níquel con una transmitancia nominal del 88.6% y un periodo de 216 μm . El procedimiento de preparación de los sustratos de C ha sido descrito en la sección 3.3.3. Las láminas de Lu y Sr fueron depositadas in-situ mediante la fuente de evaporación Tri-Con, descrita previamente en el apartado 3.2.2. La pureza de los materiales utilizados fue del 99.99% para el Lu, de la casa LTS Chem. Inc. y del 99.9% para el Sr, de la casa ESPI Metals. Para este último, dada la gran reactividad del Sr, el suministro se realizó en latas selladas rellenas de argón, para evitar una posible oxidación. La distancia entre la fuente Tri-Con y los sustratos de C fue de 200mm. Las velocidades de deposición fueron de unos 2.5 nm/min para el caso del Lu y en el caso del Sr, estuvieron en torno a 4 nm/min para las muestras más finas y en torno a 9 nm/min para las muestras más gruesas. El espesor fue controlado durante la deposición mediante una microbalanza de cuarzo. Las presiones base y de evaporación fueron de $3 \cdot 10^{-7}$ y $4 \cdot 10^{-6}$ Pa, respectivamente, para el Lu, y de $5 \cdot 10^{-7}$ Pa y $2 \cdot 10^{-6}$ Pa, respectivamente para el Sr. Para estas muestras la deposición se realizó sobre los sustratos a temperatura ambiente. También se puso un testigo de vidrio, parcialmente enmascarado con una cuchilla, en el plano de los sustratos situado a una distancia menor que 10 mm de los sustratos de lámina de C, para que recibieran la misma cantidad de material evaporado; las láminas sobre sustratos de vidrio se prepararon para obtener valores adicionales de los espesores mediante las técnicas de reflectancia en función del ángulo, medidas que se hicieron en las energías 100 eV y 115 eV para el Lu y Sr, respectivamente, e interferometría de Tolanski.

Las muestras de SrF_2 fueron depositadas por evaporación sobre unos substratos de Al de 25 nm de espesor, cuya preparación fue descrita en la sección 3.3.3. Dicha deposición se realizó en la campana de alto vacío de GOLD descrita en la sección 3.2.1.12. Se evaporó SrF_2 de pureza para el FUV en unas cestillas de W, situadas a una distancia de 200 mm de los substratos. La velocidad de deposición fue de ~ 0.5 nm/s. Se utilizaron cuatro substratos para cada una de las deposiciones: i) dos chapas de cobre, cada una con cinco agujeros, cada agujero a su vez soportando una fina lámina de Al, para medidas de transmitancia, ii) un substrato de vidrio parcialmente enmascarado con una cuchilla, para realizar medidas de espesor por interferometría de Tolanski, y iii) un substrato de Si para realizar medidas de reflectancia en función del ángulo en la energía de 91.8 eV. El espesor fue controlado mediante una microbalanza de cuarzo. La presión base y la presión durante la deposición fueron de $2 \cdot 10^{-5}$ y 10^{-4} Pa, respectivamente.

4.2.2 Equipos de medida

4.2.2.1 Lu y Sr

El equipo en el que se realizaron las medidas de las muestras de Lu y Sr fue la línea BEAR del sincrotrón ELETTRA, descrito en la sección 3.2.2. Se usó una apertura vertical de 100 μm para las energías superiores a 24 eV y de 450 μm para energías por debajo de ese valor. La resolución espectral del monocromador $E/\Delta E$ varió entre 500 y 2000, dependiendo de la rendija utilizada. Para suprimir los órdenes de difracción superiores se utilizaron filtros de cuarzo, LiF, In, Sn, Al y Si. En el caso del Lu, se utilizó adicionalmente un filtro de Ag para medidas por encima de 1200 eV. El reflectómetro de la línea BEAR opera a una presión base de $1 \cdot 10^{-8}$ Pa y está conectado en vacío a la cámara de evaporación, lo que permite transferencias entre ambas cámaras en condiciones UHV. El tamaño del spot en la muestra fue aproximadamente de 0.7×1.5 mm².

Para cada uno de los materiales se prepararon tres muestras sobre sendos substratos de C. Dado que la cámara de deposición y el reflectómetro están unidos en UHV, se pudieron depositar sucesivamente varias láminas sobre un mismo substrato, de modo que cuando se terminaba de medir la transmitancia de una lámina dada, se transfería ésta a la cámara de deposición, se depositaba una nueva lámina sobre la anterior y se pasaba a medir la transmitancia de la lámina resultante. En el caso del Lu, en el primer substrato se depositaron dos láminas sucesivas, en el segundo, cuatro, y en el tercero, una única lámina. En el caso del Sr, en el primer substrato se depositaron dos láminas, una en el segundo, y tres en el tercero. Las deposiciones sucesivas en cada uno de los substratos se realizaron sin romper las condiciones de UHV y a temperatura ambiente. Las medidas de transmitancia también se hicieron a temperatura ambiente. Las medidas de uniformidad realizadas en las muestras seleccionadas de ambos materiales muestran una variación máxima de transmitancia a lo largo de la muestra del $\sim 2\%$. La normalización de las medidas de transmitancia (para neutralizar las fluctuaciones de la señal) se hizo, bien respecto de la corriente de electrones del anillo de almacenamiento, o bien respecto de la corriente fotogenerada sobre una malla de oro alimentada con un potencial de 100V situada a la entrada del reflectómetro. La elección de una u otra generalmente produjo resultados equivalentes. En energías menores que 18 eV la

corriente de malla fue muy pequeña, por lo que la normalización únicamente pudo hacerse con respecto a la corriente de anillo.

4.2.2.2 SrF₂

Una importante diferencia en la medida de SrF₂, frente al caso del Lu y Sr, es que el primero se midió *ex-situ*, de modo que las muestras de SrF₂, que se prepararon en GOLD, estuvieron aproximadamente un mes expuestas a la atmósfera antes de ser medidas en el sincrotrón.

Las muestras de SrF₂ se midieron en la línea 6.3.2 del sincrotrón ALS, descrito en la sección 3.2.3. Dicha línea está dedicada a la caracterización de elementos ópticos y recubrimientos reflectantes en el intervalo espectral de 25 a 1200 eV. Está compuesta principalmente por un monocromador y un reflectómetro. El monocromador consta de una red de difracción plana con el número de líneas por milímetro variable entre 80, 200, 600 y 1200. El tamaño de la rendija de salida es de 40 μm . La resolución espectral $\lambda/\Delta\lambda$ fue alrededor de 7000. El tamaño del haz de luz en la superficie de la muestra fue de 10 μm x 300 μm . El reflectómetro opera a una presión base de $4 \cdot 10^{-5}$ Pa. Dado que las muestras eran bastante frágiles, el bombeo en los primeros minutos se realizó a través de un tubo de baja conductancia que disminuye la velocidad de bombeo para evitar turbulencias en la cámara.

Se utilizaron tres poli-substratos de Al, y sobre cada uno de ellos se depositó una lámina de SrF₂ con el espesor deseado. Las medidas de uniformidad de transmitancia realizadas en las muestras seleccionadas de ambos materiales indican una variación de transmitancia de ~2%. Las medidas de transmitancia se hicieron a temperatura ambiente. Finalmente, la normalización de las medidas de transmitancia, para descontar las fluctuaciones del haz, se realizó respecto a la corriente de almacenamiento del anillo.

4.3- Resultados y discusión: Lu, Sr y SrF₂

4.3.1 Medidas de transmitancia y determinación del coeficiente de extinción

k.

Para cada material se midió la transmitancia de varias láminas de diferentes espesores, con el fin de calcular el coeficiente de extinción del material. Para el Lu se midieron láminas con los siguientes espesores: 24.6 y 28.0 nm en el primer substrato, 34.5, 44.2, 71.5 y 90.0 nm en el segundo y 114.0 nm en el tercero. Para el Sr, los espesores fueron los siguientes: 21.5 y 31.5 nm en el primer substrato, 85.0 nm en el segundo y 39.8 y 64.0 nm en el tercero. Para el SrF₂, usamos tres substratos diferentes con una sola lámina cada uno, de espesores 22.0, 46.0 y 89.5 nm. Los espesores fueron calculados mediante el análisis de las franjas de Kiessig, obtenidas por medidas de reflectancia en función del ángulo para las energías de 100 eV en el caso del Lu, 115 eV en el caso del Sr y 91.8 eV en el caso del SrF₂. En algunas muestras de Sr, se realizó una corrección adicional al espesor tras comparar la transmitancia experimental por encima de ~100 eV (donde la aproximación de átomos aislados es válida, y lejos de los bordes de absorción) con la transmitancia calculada mediante constantes ópticas obtenidas de la web de CXRO [27]. Por último, en el caso del SrF₂, las transmitancias calculadas con los espesores

obtenidos mediante el análisis de las franjas de Kiessig no fueron compatibles con las transmitancias teóricas obtenidas de la web del CXRO, por lo que finalmente los espesores considerados como válidos fueron los obtenidos mediante interferometría de Tolanski. Esto fue debido a la dificultad de simular el posible gradiente de índice de refracción debido a la variación de la densidad en función del espesor en las láminas de dicho material. En el caso del Lu y Sr, los espesores no fueron medidos por interferometría Tolanski debido a su alta reactividad.

El intervalo de medida de la transmitancia de las muestras y sus respectivos substratos fue de 3-1800 eV para el Lu, 6-1220 eV para el Sr y 25-780 eV para el SrF_2 . En la figura 4.1 se muestra la transmitancia de las láminas de Lu, Sr y SrF_2 normalizadas a la transmitancia del substrato. En el caso del Lu, se aprecian dos grandes bandas de transmisión, cuyos máximos se sitúan en ~ 1486 y ~ 25 eV, justo por debajo de los bordes de absorción M_5 y $O_{2,3}$, respectivamente. La banda de alta transmitancia, de interés para el desarrollo de nuevos recubrimientos para el EUV, se extiende entre ~ 20 -26 eV. En el caso del Sr, se encontraron dos bandas de transmisión centradas en ~ 130 y en ~ 18.6 eV, justo por debajo de los bordes de absorción $M_{4,5}$ y $N_{2,3}$, respectivamente. Las bandas de alta transmitancia de interés para el posible uso en nuevas multicapas para el EUV se extienden entre ~ 14 -20 eV y ~ 70 -140 eV; esta última banda ha dado lugar a multicapas de reflectancia Mo/Sr centradas en ~ 132 eV [118]. En el caso del SrF_2 , se esperaba una banda de alta transmitancia en ~ 26 eV, dado que los datos de Nisar y Robin [86] sugerían una muy baja absorción en esa energía, pero lamentablemente la transmitancia medida experimentalmente en los alrededores de dicha energía fue baja.

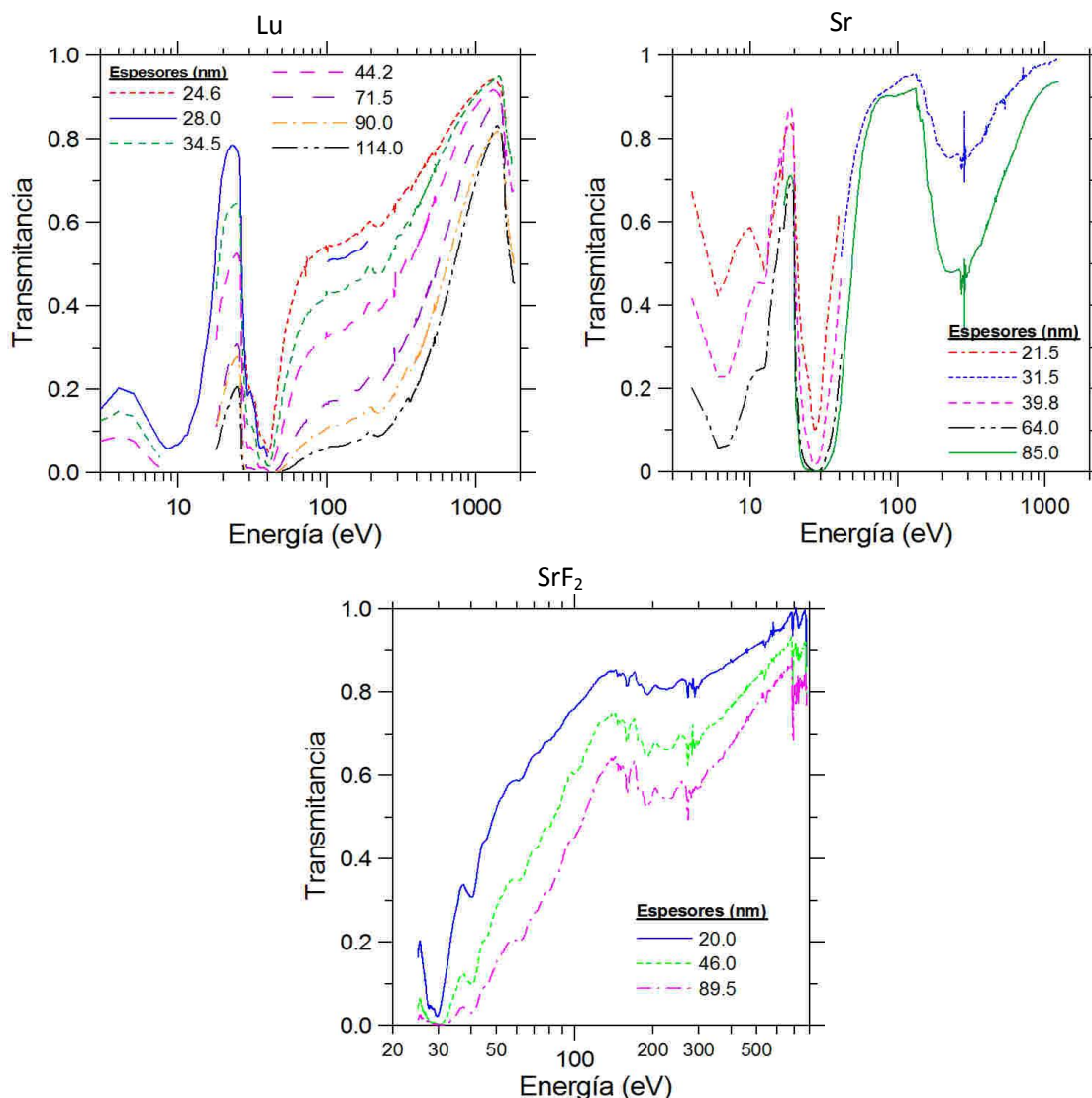


Fig. 4.1. Transmitancia de las láminas depositadas de Lu, Sr y SrF₂ normalizadas a la transmitancia de sus respectivos substratos, en función del logaritmo de la energía de los fotones incidentes.

En el caso del Lu y del Sr, las antes mencionadas bandas de alta transmitancia son parecidas a las medidas en otros lantánidos, como el La, Ce, Pr, Nd, Eu, Gd, Tb, Dy, Tm e Yb. Por tanto, la baja absorción de estos dos materiales en la zona ~12-26 eV los hacen prometedores para el desarrollo de recubrimientos centrados en esas energías, en las que la gran mayoría de los materiales presentan una gran absorción.

En todas las figuras de transmitancia se pueden observar pequeñas oscilaciones que se pueden asignar a la presencia de los bordes de absorción del material problema o de posibles materiales contaminantes. Estos últimos pueden localizarse tanto en las muestras como en las ópticas de las líneas de haz. Se observa la presencia de Si (99.8 eV), C (284-286 eV), N (410 eV), Ti (453-460 eV), O (543 eV) y Fe (697 eV). En general, la presencia de contaminantes en las medidas de transmitancia no es muy acusada, excepto en el caso particular del carbono, el cual se manifiesta en todos los materiales analizados, con una abrupta oscilación correspondiente a su borde K.

Para la determinación del coeficiente de extinción, se aplicó la ley de Beer-Lambert, presentada en el capítulo 2. Suponiendo despreciables las reflexiones internas dentro de la lámina y el sustrato, y normalizando la transmitancia del conjunto sustrato + lámina (T_{s+l}) a la transmitancia del sustrato (T_s), se obtiene:

$$\frac{T_{s+l}}{T_s} \approx A' \cdot \frac{\exp\left\{-\frac{4\pi}{\lambda}(k_s d_s + k_l d_l)\right\}}{\exp\left\{-\frac{4\pi}{\lambda}(k_s d_s)\right\}} = A' \cdot \exp\left\{-\frac{4\pi}{\lambda}(k_l d_l)\right\} \quad (4.1)$$

$$\ln\left(\frac{T_{s+l}}{T_s}\right) \approx A - \frac{4\pi}{\lambda}(k_l) \cdot d_l \quad (4.2)$$

En la ecuación 4.1, A' es un factor que apenas depende de los espesores cuando el coeficiente de extinción k de los materiales es pequeño y el índice de refracción se acerca a la unidad. El coeficiente k del Lu, Sr y SrF_2 se calculó ajustando la pendiente del logaritmo de la transmitancia frente al espesor para cada energía, de acuerdo con la ecuación 3.2. En la figura 4.2 se muestra el coeficiente k calculado para los materiales analizados; también se muestran los bordes de absorción de cada material, tomados de la referencia [119]. Se comparan con los datos de Homewood *et al.* [91] y los semiempíricos de Henke *et al.* [101] en el caso del Lu, Endriz y Spicer [103], Langkowski [109] y los semiempíricos de Henke *et al.* [101], en el caso del Sr, y para el SrF_2 , con los datos de Lukirskii *et al.* [88] y con una aproximación atómica usando los datos experimentales previamente obtenidos del Sr [47] y los semiempíricos de Henke del F. Estos valores semiempíricos usados para comparar han sido calculados para unas densidades de 9.84 g/cm^3 , 2.58 g/cm^3 y 3.98 g/cm^3 , para el Lu, Sr y SrF_2 , respectivamente. En el caso del Lu y Sr, las densidades corresponden a las del material masivo. En el caso del SrF_2 , dado que es un material que crece poroso al ser depositado por evaporación, tiene por tanto una fuerte dependencia entre la densidad y el espesor [116] [117]. Por consiguiente, una vez obtenidos los espesores mediante las medidas de interferometría de Tolanski, se calcularon las densidades ajustando las medidas de transmitancia con la aproximación atómica de Sr+F para cada uno de los tres espesores depositados. Esta aproximación se basa en que las propiedades ópticas de cada átomo no se ven afectadas significativamente por los átomos de su proximidad, y esto se cumple para energías mayores de 30 eV, y lejos de los bordes de absorción de los materiales. Si se cumplen estas condiciones, el cálculo del índice de refracción complejo se realiza directamente sumando las contribuciones de cada especie, pesadas con su densidad atómica y estequiometría correspondiente. Las densidades obtenidas mediante el ajuste se resumen en la tabla 1:

Espesor	Densidad
20.0 nm	3.98 g/cm^3
46.0 nm	3.37 g/cm^3
89.5 nm	2.58 g/cm^3

Tabla 1. Densidades calculadas para cada espesor de las tres láminas de SrF_2 depositadas mediante la técnica de evaporación.

Dado que hay tres densidades diferentes, se consideró que para la posible aplicación del SrF_2 en recubrimientos ópticos, donde los espesores de trabajo suelen ser pequeños, la densidad con la que se debería calcular el coeficiente k es la correspondiente a la de la lámina más delgada, esto es 3.98 g/cm^3 . Por esta razón, se cambiaron artificialmente las

transmitancias de las láminas más gruesas para pasarlas a la densidad de la más fina mediante la ecuación 4.3, inmediatamente deducible de la ley de Beer-Lambert:

$$(T_i)^{d_j \rho_j} = (T_j)^{d_i \rho_i} \quad (4.3)$$

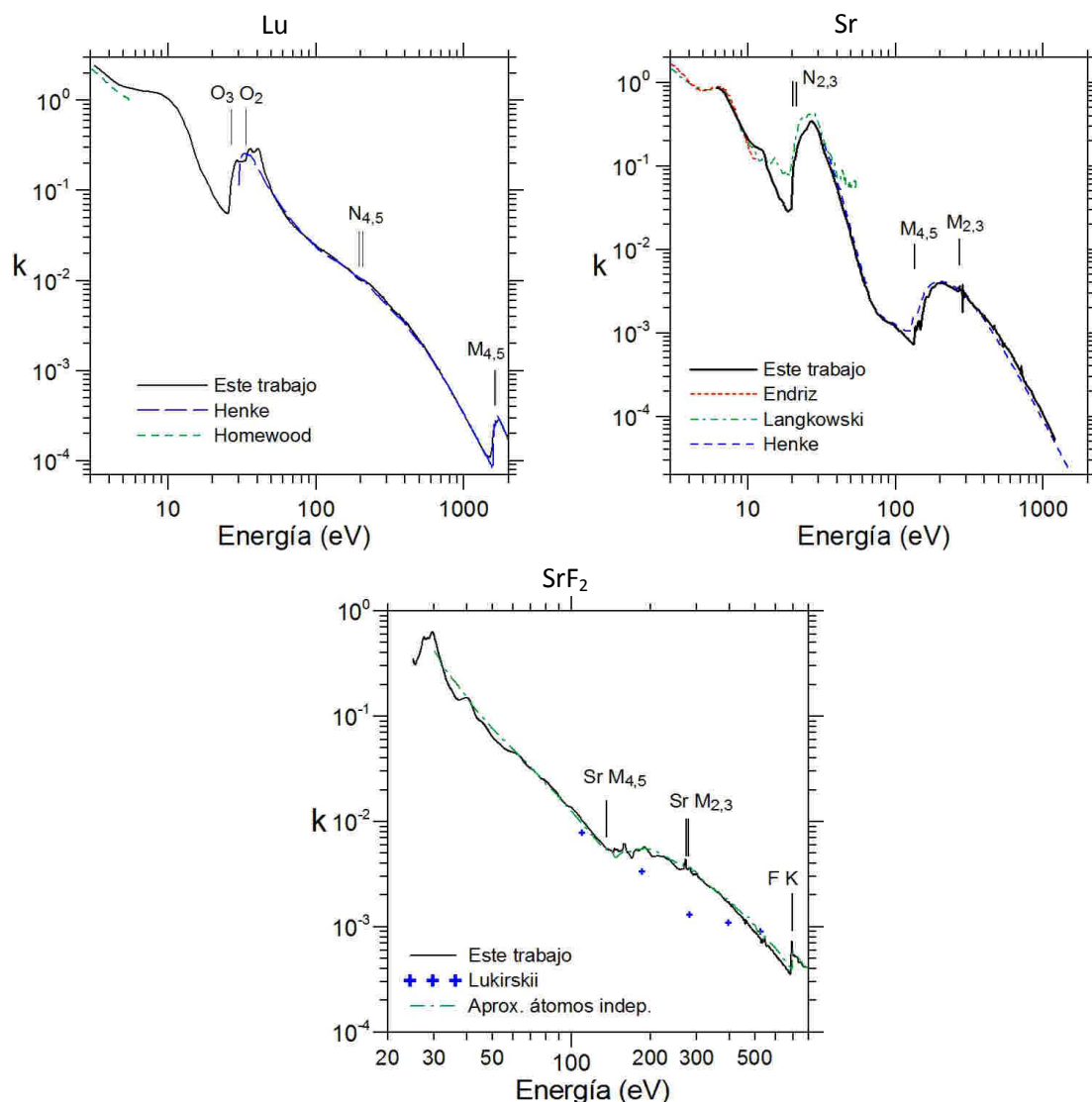


Fig. 4.2. k obtenida para el Lu, Sr y SrF_2 en función de la energía de los fotones incidentes. El cálculo ha sido realizado a partir de las medidas de transmitancia aplicando la ecuación 4.2. Se compara con los datos de Homewood et al. [91] y los semiempíricos de Henke et al. [101] en el caso del Lu, Endriz y Spicer [103], Langkowski [109] y los semiempíricos de Henke [101], en el caso del Sr y con los datos de Lukirskii et al. [88] y la aproximación de átomos independientes Sr+F, tomando el F de los datos semiempíricos de Henke et al. [101], en el caso del SrF_2 .

A continuación se expone la aportación realizada en este trabajo en comparación con los datos existentes en la literatura. Para el Lu, no existían medidas experimentales de k por encima de 7 eV, y en este trabajo se presenta k en el intervalo 3-1800 eV, con una resolución entre 0.25 y 1 eV, y también medidas experimentales de sus bordes de absorción, con una resolución de 0.125 eV. Una posible aplicación de estos resultados se revela en una

prometedora banda de baja absorción situada justo debajo de los bordes $O_{2,3}$. Para el Sr, tampoco había datos procedentes de medidas ópticas en energías superiores a 11 eV. Este trabajo proporciona medidas experimentales en el intervalo 3-1000 eV, con igual resolución que las medidas del Lu, y muestra dos bandas de baja absorción, una debajo del borde $N_{2,3}$ y una segunda banda por debajo de los bordes $M_{4,5}$, las cuales hacen a este material prometedor no sólo para recubrimientos en el intervalo ~ 10 -25 eV, sino para recubrimientos en el intervalo ~ 60 -110 eV, si se consigue limitar su gran reactividad [118]. Para el SrF_2 , se disponía de datos experimentales por debajo de 25 eV, pero los datos existentes en altas energías eran escasos y se esperaban poco precisos: la k calculada no coincide con la obtenida por Lukirskii [88], ya que en aquel trabajo no se tuvo en cuenta la rugosidad, cuya importancia es clave en el análisis de medidas de reflectancia, pero puede considerarse despreciable en medidas de transmitancia. Este trabajo muestra medidas experimentales en el intervalo 25-780 eV, con una resolución promedio entre 0.25-1 eV, y proporciona medidas experimentales del borde K del F.

Se observa que la presencia de los contaminantes influye más en los valores medidos de transmitancia que en el valor de k obtenido a partir de estas medidas. Eso es debido a que, midiendo diferentes muestras, con distintos espesores, y con similar contaminación superficial, las oscilaciones observables en las figuras de transmitancia tienden a cancelarse en el cálculo de k mediante el método de ajustar las pendientes según la ecuación 4.2 [120]. Hay una excepción, el borde K del C en las muestras de Sr: su presencia es muy llamativa en ambas gráficas, la de transmitancia y la de k . Esto puede ser debido a una contaminación en la óptica de la línea de haz que no es constante en el tiempo, por lo que no se cancela en la normalización.

Cuando la reflectancia del material no es despreciable, porque su k no es pequeña y/o su n difiere ampliamente de la unidad, la aplicación del método de las pendientes mediante la ecuación 4.2 para obtener k puede generar errores en ésta. Para evitarlo, se procede a corregir el valor de k así obtenido por medio de cálculo de la transmitancia sin las simplificaciones de la ecuación 3.1, y se sigue un proceso iterativo. Este procedimiento se aplicó en el intervalo 3-30 eV para el caso del Lu y 4-104 eV en el caso del Sr (aunque para el Sr, las correcciones por encima de 30 eV fueron despreciables). Este proceso consiste en lo siguiente: en la primera iteración, los valores de k se determinaron en ambos materiales con el método de las pendientes en los citados intervalos. Esta k obtenida, junto con los valores de k del resto del espectro, se utilizó en el cálculo del índice de refracción n mediante el análisis de KK (descrito en la sección 2.5). Una vez obtenido el primer juego de $\{n, k\}$, se calculó la transmitancia del sistema de las láminas del material de estudio sobre un sustrato, con espesores iguales a los obtenidos experimentalmente, usando las ecuaciones de Fresnel (descritas en la sección 2.3.3). Estas transmitancias se comparan con las obtenidas experimentalmente, después de normalizarlas a la del sustrato. En cada energía, el promedio de las diferencias entre la transmitancias medidas y las obtenidas a través del primer juego de constantes ópticas se usa para modificar k . Este valor de k modificado se emplea como segunda estimación de k , y a partir de él, usando otra vez el análisis de KK, se obtiene un segundo valor de n , y por tanto un segundo juego corregido de constantes ópticas, que sirve para recalcular otra vez los valores de transmitancia y compararlos con los experimentales. Este procedimiento se repite hasta que las diferencias entre la transmitancia experimental y la transmitancia calculada son despreciables.

En el caso del SrF_2 este cálculo iterativo no fue necesario, dado que las medidas parten de 25 eV, y la reflectancia calculada con las constantes ópticas obtenidas mediante la ecuación 3.1 por encima de 25 eV da un valor despreciable. Por otra parte, hasta ~ 32 eV solo se consideró válida la transmitancia de la lámina más delgada, dado que las demás eran incongruentes con la primera al transformarlas mediante la ecuación 4.3, probablemente debido a la presencia de microperforaciones en las dos láminas más gruesas; dichas microperforaciones tienen el efecto de dejar pasar la luz directamente y por tanto, la transmitancia medida se ve artificialmente incrementada. Este fenómeno solo es apreciable cuando la transmitancia es pequeña, del orden del área abierta correspondiente a las microperforaciones.

En la figura 4.3 se muestra k en las proximidades del borde $\text{O}_{2,3}$ y $\text{N}_{2,3}$ para el Lu y el Sr, respectivamente, una vez completada la corrección iterativa de k , junto con los valores de Homewood *et al.* [91] y los semiempíricos de Henke *et al.* [101] en el caso del Lu, Endriz y Spicer [103], Langkowski [109] y los datos semiempíricos de Henke *et al.* [101], en el caso del Sr. El pequeño valor de k de 0.029 obtenido para el Sr en ~ 18.5 eV es de gran interés dado que es necesario disponer de materiales con baja absorción para el desarrollo de recubrimientos para multicapas en el EUV-FUV. Éste mínimo es ligeramente inferior al del Eu por debajo de su borde $\text{O}_{2,3}$, cuyo valor es de 0.042 en ~ 16.6 eV. Por tanto, el Sr es uno de los materiales de la naturaleza con menor k en la región de 16.5-20 eV. El mínimo del Lu se presenta en torno a 25.2 eV y es de 0.059; este mínimo está en una energía algo superior a los casos del Sr y Eu, donde hay menos escasez de materiales poco absorbentes.

Por último, en la figura 4.3 se representan también los valores de k del SrF_2 , junto con los datos experimentales de Frandon *et al.* [111], Nisar y Robin [86], y la aproximación atómica de $\text{Sr}+\text{F}$. Se aprecia que el valor de k obtenido en 26.4 eV es alto, lo que descarta este material por su alta absorción para posibles recubrimientos en la región de operación del “Ne-like Ar” láser.

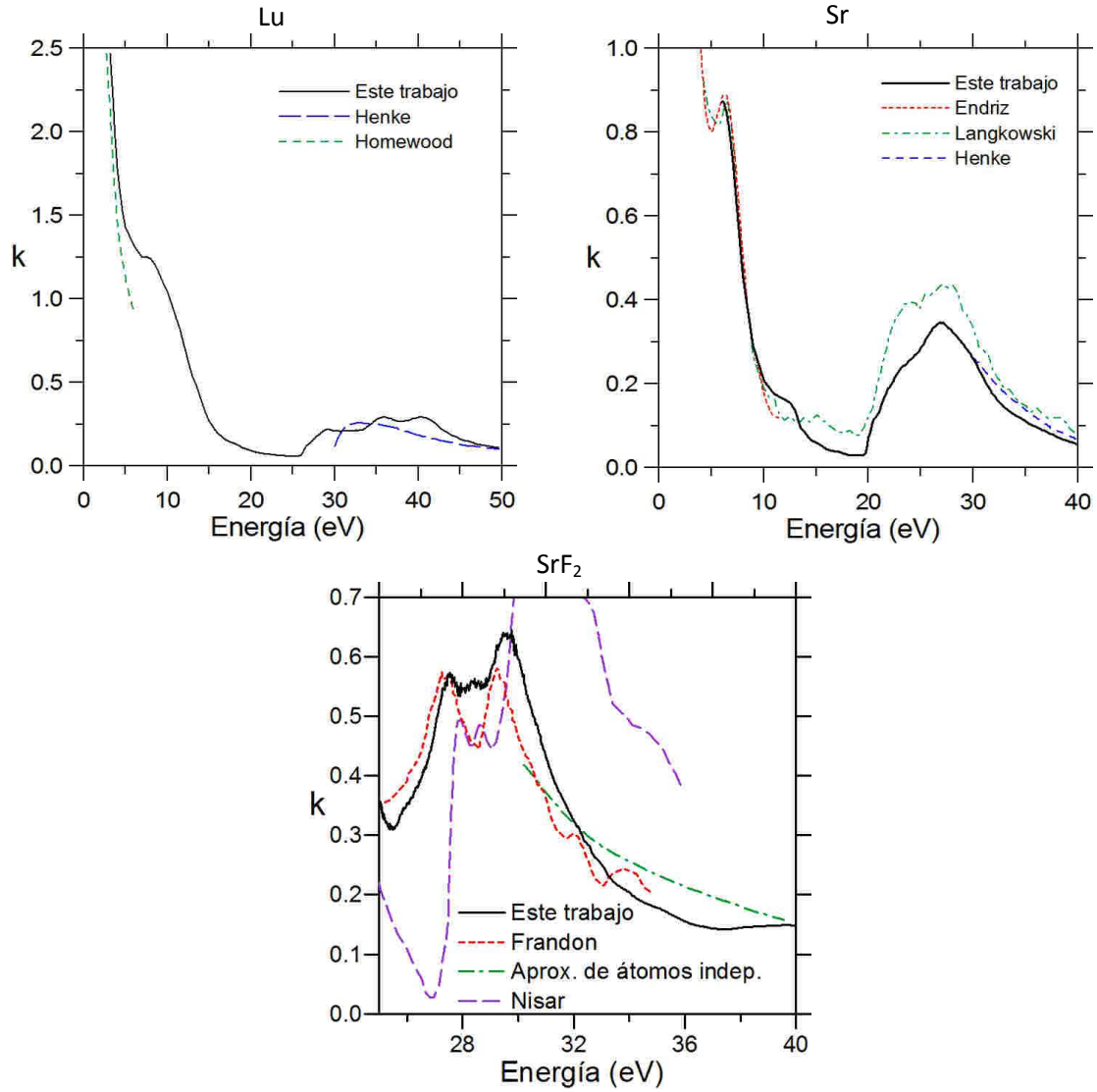


Fig. 4.3. k obtenida para el Lu, y Sr y SrF₂ en función de la energía de los fotones incidentes. Se compara con los datos de Homewood [91] y los semiempíricos de Henke [101] en el caso del Lu y con Endriz y Spicer [103], Langkowski [109] y los semiempíricos de Henke [101], en el caso del Sr. Para el SrF₂, se muestra la k obtenida en función de la energía de los fotones incidentes. Se compara con los datos experimentales de Frandon et al. [111], Nisar y Robin [86], y la aproximación de átomos independientes. Nótese las diferencias en los valores de k en la energía de operación del láser “Ne-like Ar”, 26.4 eV.

En la tabla 2 [120] se muestra, a modo de comparación, el valor mínimo del coeficiente de extinción de diferentes lantánidos en una zona por debajo de su respectivo borde de absorción O_{2,3}, así como del Sc (por debajo de su borde M_{2,3}) y del Sr (por debajo de su borde N_{2,3}). Los datos en rojo corresponden a materiales caracterizados por GOLD en colaboración con varios grupos italianos, mientras que los datos en negro corresponden a materiales caracterizados por el grupo liderado por el Dr. J. Seely del NRL.

Material	Energía (k mínima) (eV)	k mínima
Ce	16.1	0.2
La	16.5	0.138
Eu	16.7	0.04
Pr	16.9	0.278
Nd	17	0.135
Sm	18.5	0.089
Sr	18.5	0.029
Tb	19.5	0.072
Gd	19.7	0.072
Dy	20.2	0.09
Yb	21.2	0.035
Ho	22	0.093
Er	22.5	0.089
Tm	23	0.067
Lu	25.2	0.059
Sc	27	0.024

Tabla 2. Comparación de los valores mínimos del coeficiente de extinción k de diferentes lantánidos, más el Sr y el Sc, en la región del EUV. El orden creciente de las energías de mínima k en el EUV casi coincide con el orden del número atómico de los materiales.

En la figura 4.4 se presentan los bordes $M_{4,5}$ del Lu, los bordes $M_{2,3}$ y $M_{4,5}$ del Sr, y el borde K del F en el SrF_2 . Estos son los bordes de absorción medidos más prominentes. Los bordes $N_{4,5}$ del Lu y los bordes $M_{2,3}$ y $M_{4,5}$ del Sr presentes en el SrF_2 son débiles y se muestran en la figura 4.2. En la figura 4.4 además se muestra el borde K del C, próximo al borde $M_{2,3}$ del Sr. La presencia de oscilaciones por encima del borde K del F en el SrF_2 podría ser atribuido al fenómeno XAFS (X-ray Absorption Fine Structure), y las oscilaciones en el SrF_2 en ~ 540 eV son atribuidas al borde K del O. La energía de enlace de los electrones de la capa K del F es de 697 eV; sin embargo, la posición experimental del borde K del F obtenida en el SrF_2 es de ~ 686 eV. Esto es consecuencia de que los átomos de F están enlazados a los de Sr, lo que produce un desplazamiento del borde de absorción hacia energías menores. El valor del desplazamiento del borde K obtenido experimentalmente es compatible con ~ 12 eV, valor disponible en la base de datos para XPS <http://srdata.nist.gov/xps/>.

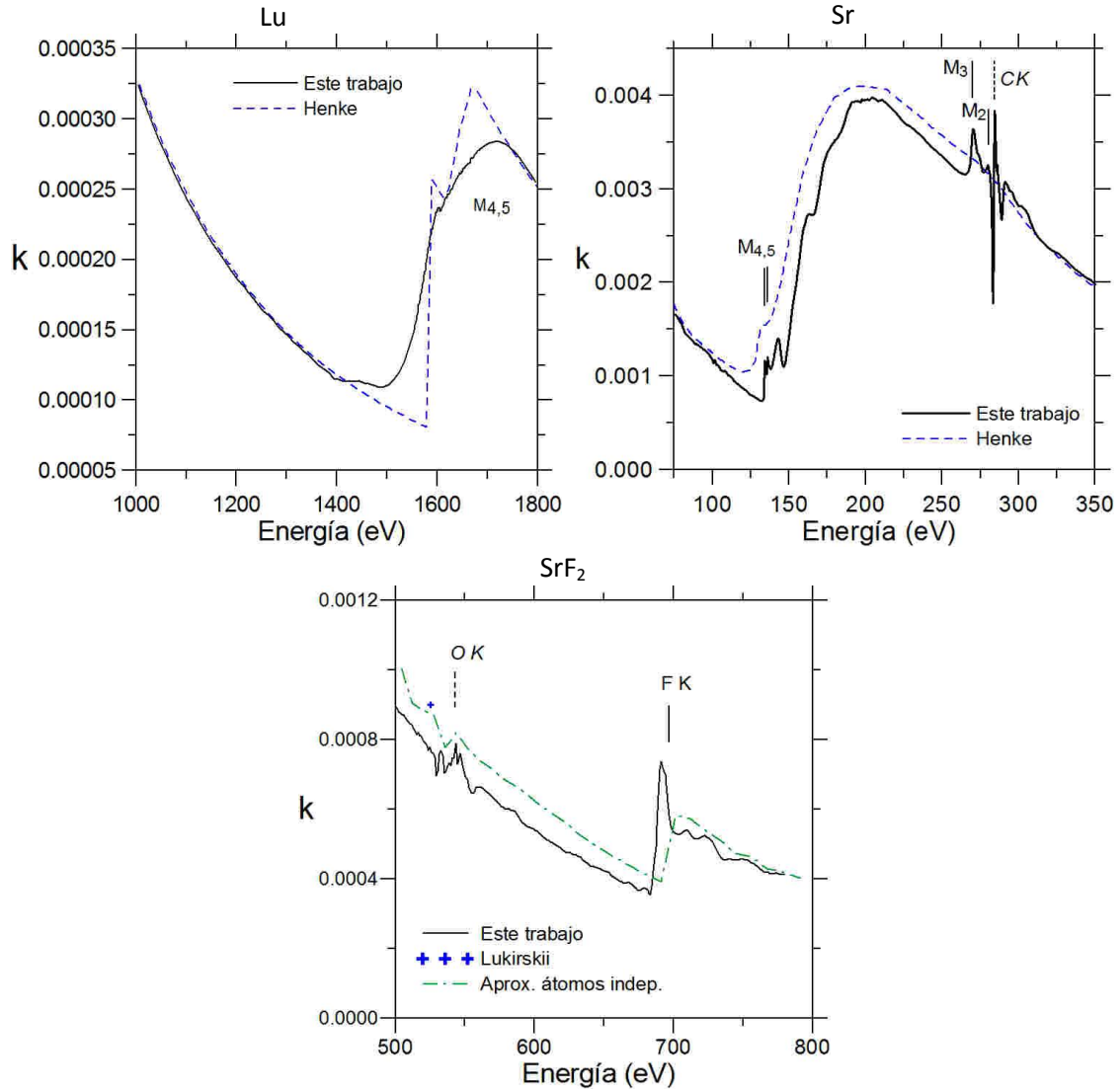


Fig. 4.4. k obtenida para el Lu en los bordes $M_{4,5}$, para el Sr en los bordes $M_{2,3}$ y $M_{4,5}$, y para el SrF₂ en el borde K del F, en función de la energía de los fotones incidentes. Se compara con los datos semiempíricos de Henke et al. [101] en el caso del Lu y el Sr, y con los datos de Lukirskii et al. [88] y la aproximación atómica para el caso del SrF₂.

Para el cálculo de la k , no siempre fue posible emplear las medidas de transmitancia para todas las muestras disponibles, dado que en ciertos intervalos las medidas para diferentes muestras eran incompatibles entre sí; esto redujo el número de medidas disponibles en el cálculo de k , hasta dejarlo alguna vez reducido a una única medida, en cuyo caso no se pudo usar el método de las pendientes.

En el caso del Lu, en la región de 7.75-17.5 eV, solo había disponible la transmitancia de la lámina de 28.0 nm de espesor; las medias en las láminas más gruesas resultaron muy ruidosas, por lo que fueron descartadas. En ese intervalo, la k se obtuvo empleando directamente la ecuación 3.2 con dicha transmitancia, despreciando la reflectancia (con $A=0$). En el caso del Sr, en la región 40-130 eV, la k se obtuvo empleando el método anterior para la transmitancia de la lámina de 85 nm de espesor. El resto de transmitancias fueron descartadas bien debido a problemas en la señal del sincrotrón durante la medida o bien por desviaciones excesivas con respecto a las predicciones teóricas de Henke, que además no eran compatibles

con las medidas de otras muestras. Por último, en el caso del SrF_2 , en el intervalo en la región entre 25-32 eV se usó la transmitancia de la muestra de 20.0 nm, dado que, para espesores mayores, las transmitancias eran mayores que lo esperado debido probablemente a las microperforaciones. El error cometido con el cálculo de k a partir de una sola lámina se corrigió con el uso del procedimiento iterativo referido arriba. Además, en la zona de 560-780 eV se usó únicamente la transmitancia de la muestra de espesor 89.5 nm, ya que las otras se desviaban excesivamente de la predicción semiteórica de Henke.

4.3.2 Cálculo del índice de refracción a partir de las relaciones de dispersión.

El índice de refracción se calculó usando las relaciones de dispersión de KK:

$$n(E) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{E' k(E')}{E'^2 - E^2} dE' \quad (4.4)$$

Para poder emplear esta ecuación es necesario el conocimiento de k a lo largo de todo el espectro electromagnético, y aunque las medidas cubren aproximadamente tres órdenes de magnitud en el caso del Lu y Sr y casi dos en el SrF_2 , es necesario extenderlas. Por encima de 1800, 1000 y 780 eV en el caso del Lu, Sr y SrF_2 , respectivamente, la extensión se hizo con los datos semiempíricos de Henke, disponibles hasta 30 keV. Por encima de 30 keV, se usaron los datos de Chantler *et al.* [121], disponibles hasta 430 keV. La extrapolación desde esa energía hasta el infinito se realizó mediante una función potencial.

La extrapolación en las bajas energías, en el caso del Lu, se realizó de la siguiente manera: se consideró inicialmente las medidas de Schüller *et al.* [90], Homewood y Trodahl [91] y Weaver y Lynch [92]. De estos tres artículos, fue descartado el de Weaver y Lynch, ya que en su trabajo usaron cristales de Lu, mientras que los dos restantes fueron realizados sobre láminas delgadas y además en condiciones de UHV. Se eligieron los datos de Homewood y Trodahl, ya que eran los que mejor se ajustaban a nuestras medidas experimentales en el intervalo de solapamiento; además, en la zona de energías más bajas, los valores de n y k de Homewood y Trodahl se parecían a los valores de los vecinos del Lu en la tabla periódica: Tm e Yb. Por tanto, se eligió la k derivada del artículo de Homewood y Trodahl desde 6 eV hasta 1.5 eV, y, como la de Schüller *et al.* se extendía hasta 0.28 eV, fue usada a continuación de la de Homewood y Trodahl. La extrapolación desde 0.28 eV hasta la energía cero se hizo ajustando un modelo de Drude a los datos de Schüller *et al.*

En el caso del Sr, se usaron los datos de Endriz y Spicer [103] que cubren el intervalo 0.3-11.6 eV. Para obtener unos empalmes suaves, por debajo de 7 eV se modificó ligeramente la k obtenida experimentalmente para que conectase suavemente con los datos de Endriz y Spicer. La extrapolación desde 0.3 eV hasta cero se hizo por medio de un ajuste con un modelo de Drude a los datos experimentales de Endriz y Spicer.

En el caso del SrF_2 , por debajo de 25 eV se usaron los datos obtenidos en láminas delgadas por Frandon *et al.* [111] que llegan hasta 8 eV; en ese trabajo se muestra experimentalmente la posición del cutoff del SrF_2 , ~9.8 eV. Por debajo de esa energía, en la región de transparencia, solo se disponía de datos de k para cristales, cuyos valores podían ser tan pequeños como $\sim 10^{-6}$ y menores aún. Estos valores no pueden asignarse a una lámina delgada depositada a temperatura ambiente, en la cual, el tamaño de los cristales, del orden

de pocos nanómetros, junto con posibles defectos en la red hacen que la k esperable sea del orden de $\sim 10^{-2}$ - 10^{-4} . Por otro lado, dado que el SrF_2 es un compuesto iónico, presenta una banda de gran absorción en el infrarrojo lejano, que se conoce por su nombre en alemán “reststrahlen”; sólo se encontraron datos experimentales sobre la banda de reststrahlen para el SrF_2 en forma cristalina en los artículos de Kaiser *et al.* [122] y Bosomworth [123]. En vista de la falta de información existente de constantes ópticas de SrF_2 en lámina delgada en la zona de transparencia, la solución tomada fue hacer un ajuste y extrapolación de los datos de la literatura. El ajuste incluyó un conjunto de siete osciladores de Lorentz a los valores de ϵ_1 y ϵ_2 medidos por Frandon *et al.* en el intervalo 9.8-30 eV y un oscilador adicional para las medidas de reststrahlen. La parte real de los osciladores se ajustó a ϵ_1 y la imaginaria, a ϵ_2 ; de ambos ajustes se obtuvo un conjunto de parámetros de cada oscilador que finalmente se promedió. Por último, se calculó n y k directamente a partir de ϵ_1 y ϵ_2 . Los osciladores de Lorentz, como se verá en el capítulo 5, son funciones que cumplen las propiedades de KK. Con estos 8 osciladores, se completaron los valores de k entre la zona cubierta por los datos de Frandon *et al.* y la zona de los reststrahlen de Kaiser *et al.* En la figura 4.5 se muestra el resultado de los ajustes realizados.

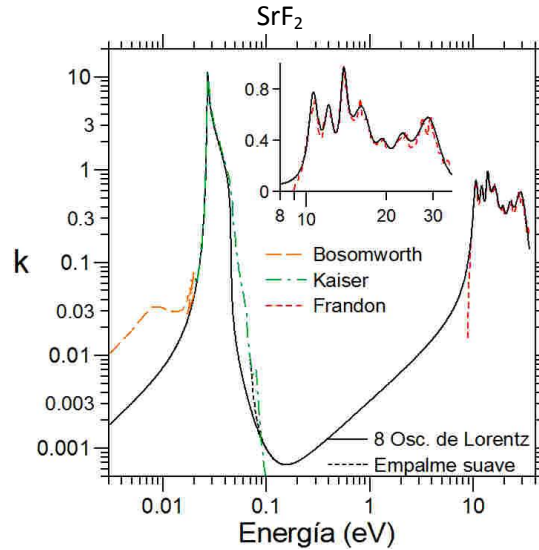


Fig. 4.5. k del SrF_2 en la zona de transparencia y zonas colindantes en función del logaritmo de la energía de los fotones incidentes, junto con el ajuste de ocho osciladores de Lorentz a los datos experimentales de Frandon *et al.* [111] y Kaiser *et al.* [122], y los datos de Bosomworth [123].

La figura 4.6 muestra la k del Lu, Sr y SrF_2 extendidas con los datos de la literatura, cálculos y extrapolaciones a todo el espectro electromagnético.

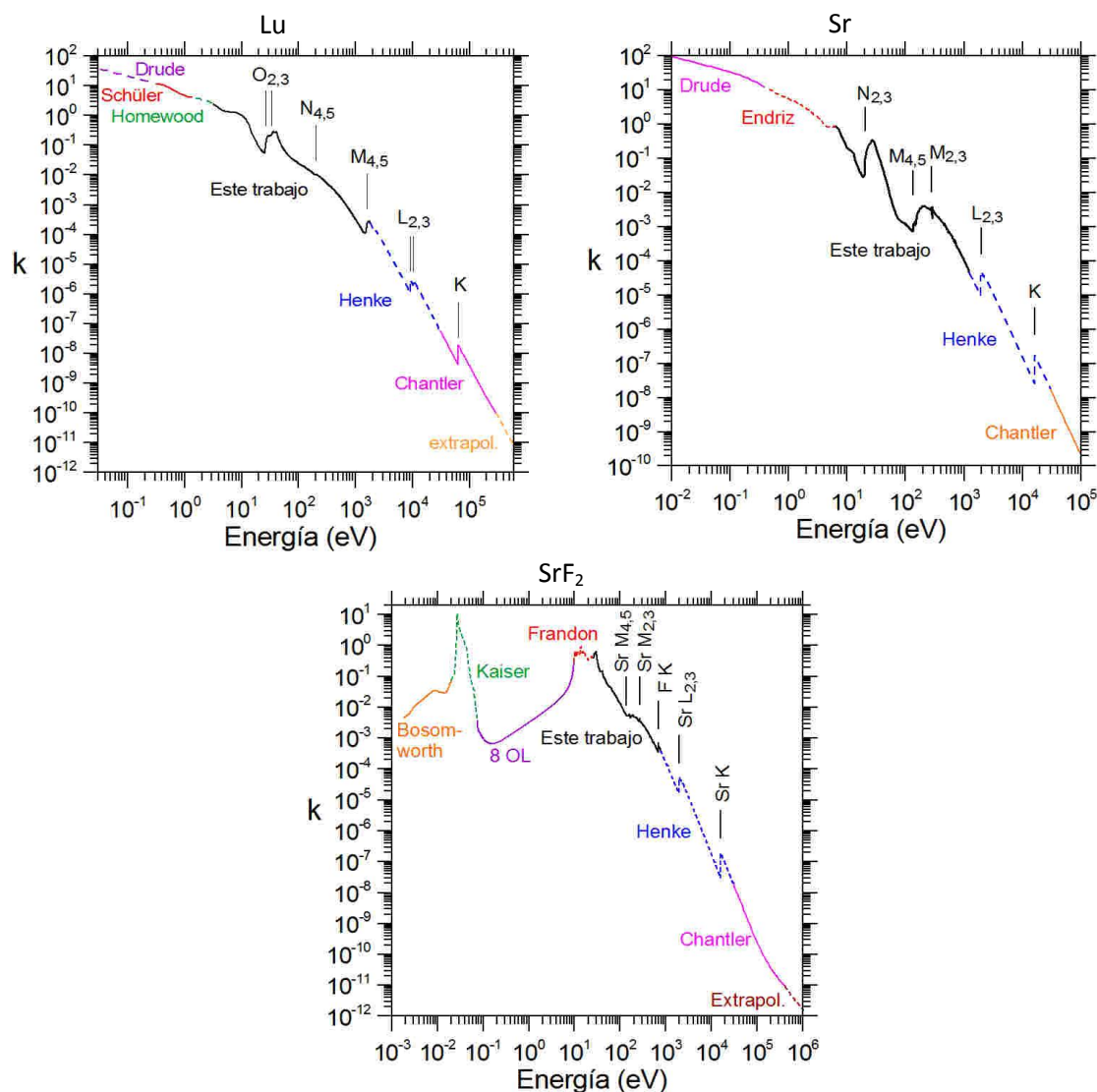


Fig. 4.6. k extendida del Lu, Sr y SrF_2 en todo el espectro electromagnético en función de la energía de los fotones incidentes, en escala doble logarítmica.

En la figura 4.7 se muestra $\delta=1-n$, calculada a partir de la ecuación 4.4 mediante el análisis de KK, usando los datos representados en la figura 4.6; además se compara, en el caso del Lu, con los datos semiempíricos de Henke *et al.* [101], en el caso del Sr, con los datos de Endriz y Spicer [103], Langkowski [109] y los semiempíricos de Henke *et al.*, y en el caso de SrF_2 , con los datos de la aproximación de átomos independientes y con los datos de Lukirskii *et al.* [88].

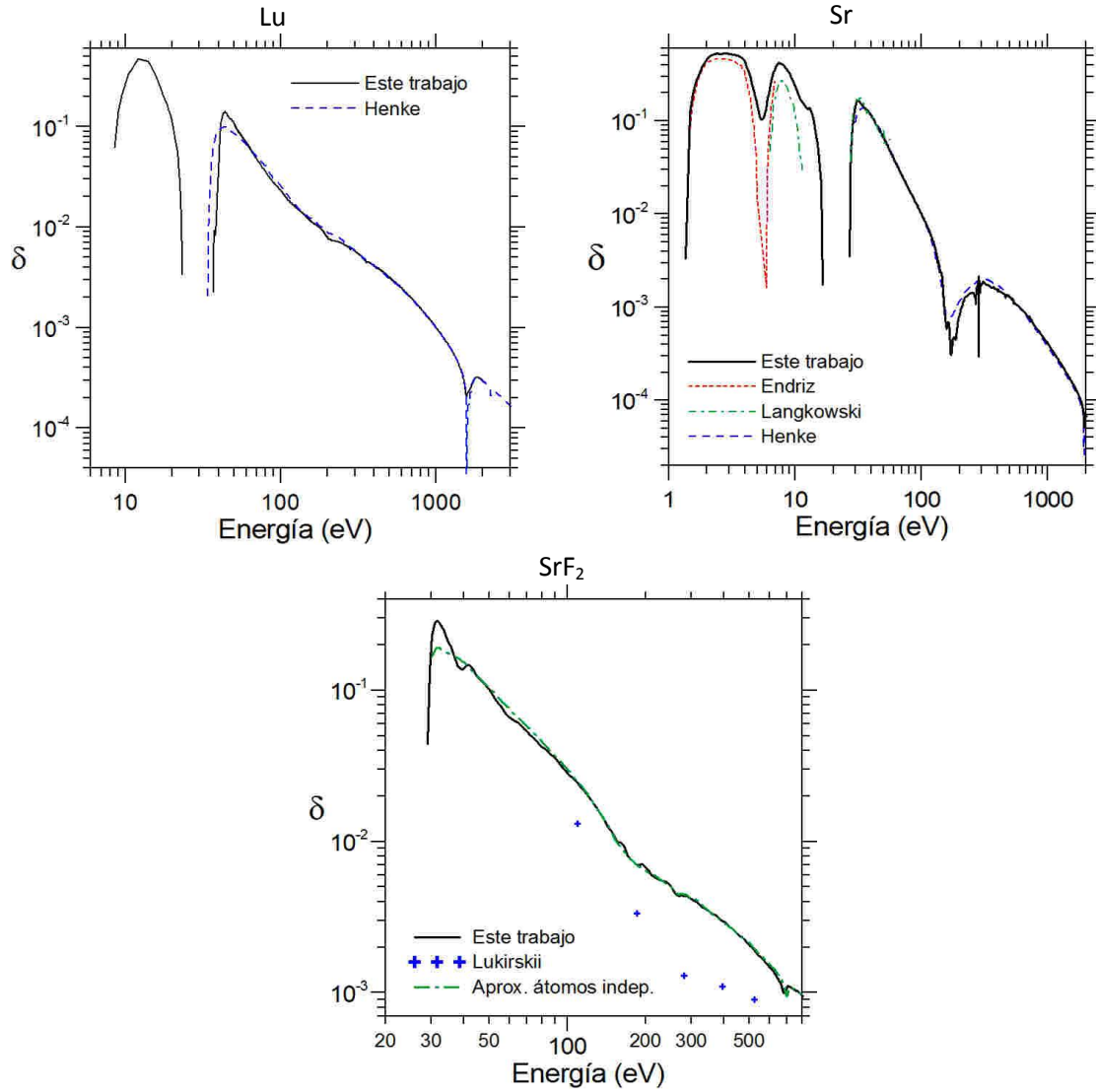


Fig. 4.7. δ del Lu, Sr y SrF_2 en función de la energía de los fotones incidentes, en escala doble logarítmica. Se compara con los datos semiempíricos de Henke et al. [101] en el caso del Lu, Endriz y Spicer [103], Langkowski [109] y los semiempíricos de Henke et al. [101], en el caso del Sr y con los datos de Lukirskii et al. [88] y la aproximación atómica $\text{Sr} + \text{F}$ para el caso del SrF_2 .

Al igual que con k , no existía ningún dato experimental acerca del valor de n del Lu para energías superiores a 7 eV. En el caso del Sr, en la literatura no existían datos para energías superiores a 50 eV, y los datos existentes de Langkowski en el intervalo 3-50 eV fueron obtenidos a partir de medidas no ópticas. Para el SrF_2 , los únicos datos existentes por encima de 35 eV eran los de Lukirskii et al., obtenidos a partir de medidas de reflectancia frente a ángulo, pero no tuvieron en cuenta la rugosidad. Por tanto, este trabajo aporta n para cada uno de los tres materiales en un amplio intervalo espectral en que prácticamente no había datos experimentales, obtenida mediante el análisis de KK de una k experimental, a partir de medidas de transmitancia sobre láminas delgadas. Más adelante se demostrará que esos pares de n y k obtenidos, que son congruentes entre sí, además cumplen las reglas de las sumas, lo que permitirá en futuras investigaciones diseñar recubrimientos multicapa usando estos materiales con constantes ópticas precisas.

En la figura 4.8, se representa n en la región de bajas energías para los tres materiales junto con los datos semiempíricos de Henke *et al.*, además de los datos experimentales de Homewood y Trodahl, en el caso del Lu, junto con los datos experimentales de Endriz y Spicer, y Langkowski, en el caso del Sr, y junto con los datos experimentales de Frandon *et al.* y la aproximación atómica, en el caso del SrF_2 .

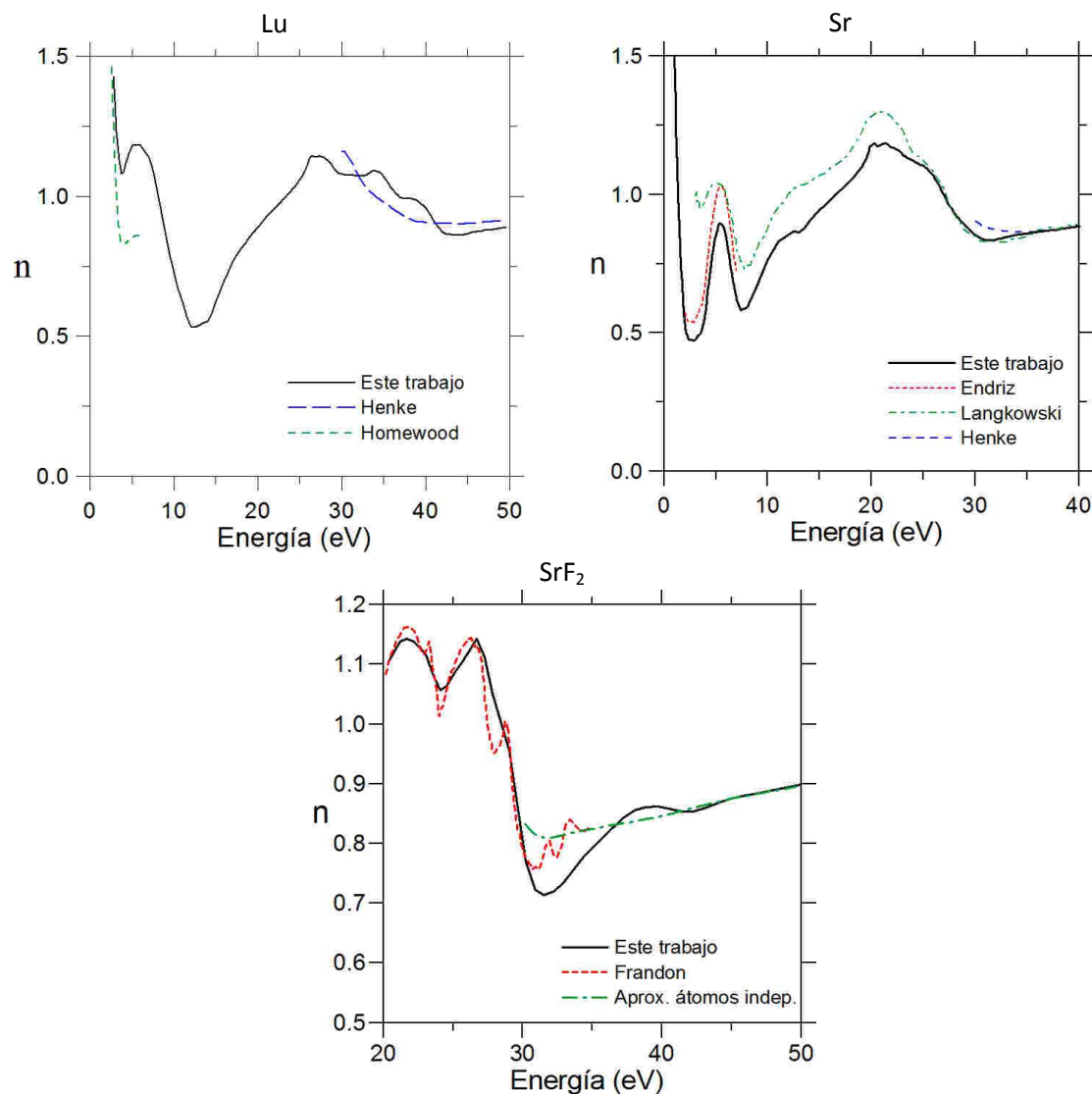


Fig. 4.8. n del Lu, Sr y SrF_2 en función de la energía de los fotones incidentes. Se compara con los datos de Homewood y Trodahl [91] y los semiempíricos de Henke *et al.* [101] en el caso del Lu, con Endriz y Spicer [103], Langkowski [109] y los semiempíricos de Henke *et al.*, en el caso del Sr y con los datos de Frandon *et al.* [111] y la aproximación atómica $\text{Sr} + \text{F}$, para el caso del SrF_2 .

En la figura 4.9 se presenta δ en las regiones con los bordes de absorción más prominentes: los bordes $M_{4,5}$ del Lu, los bordes $M_{4,5}$ y $M_{2,3}$ del Sr y el borde K del F en el SrF_2 , junto con sus respectivos valores semiempíricos de Henke *et al.* para el Lu y Sr y la aproximación de átomos independientes para el SrF_2 . Al igual que en k , δ no presenta una estructura importante en el resto de los bordes medidos: $N_{4,5}$ del Lu y el $M_{2,3}$ y $M_{4,5}$ del Sr presentes en el SrF_2 , ya que estos bordes son débiles.

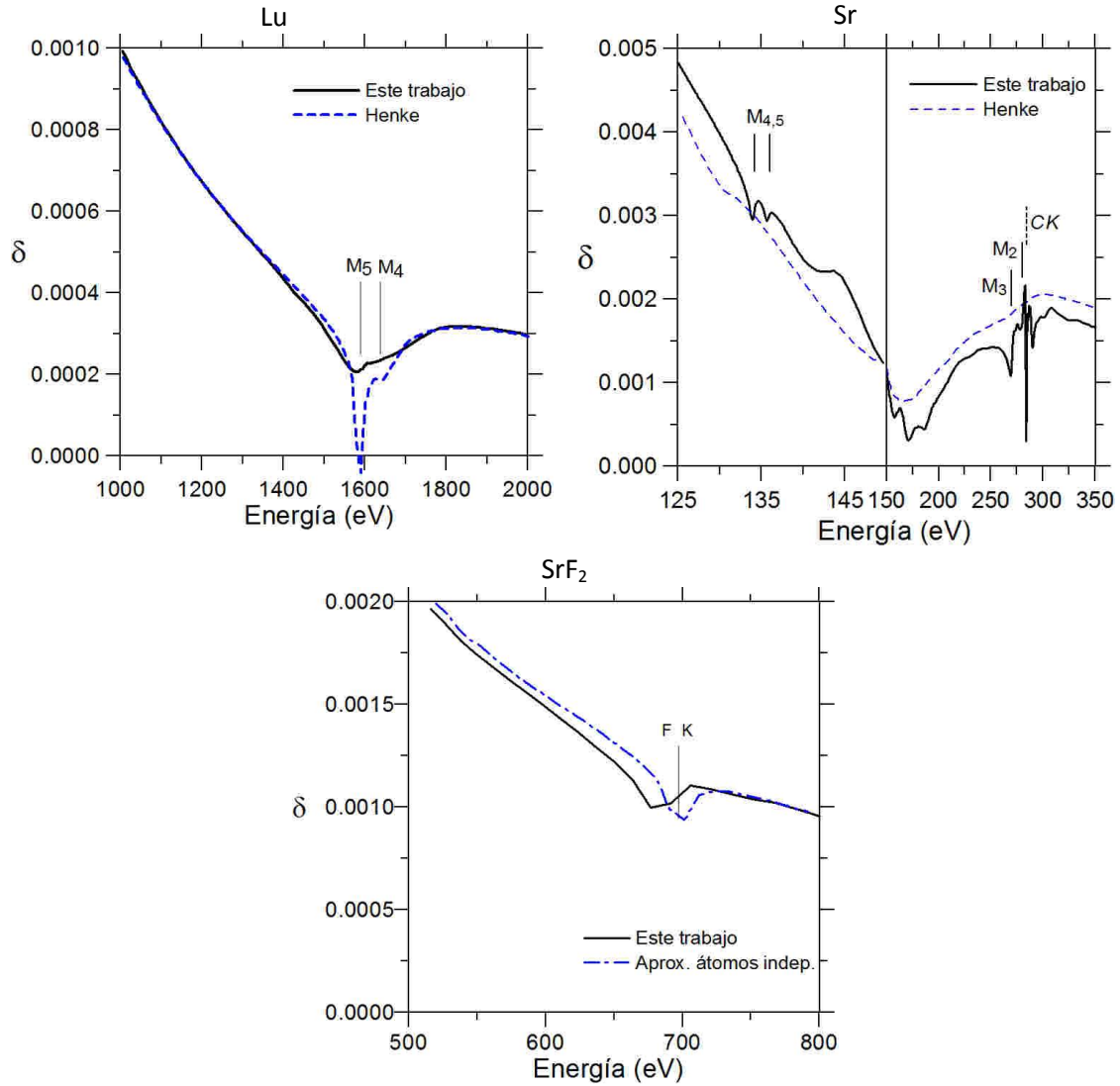


Fig. 4.9. δ del Lu, Sr y SrF_2 para los bordes $M_{4,5}$ del Lu, $M_{4,5}$ y $M_{2,3}$ del Sr y el borde K del F presente en el SrF_2 , en función de la energía de los fotones incidentes. Se compara con los datos semiempíricos de Henke et al. [101] en el caso del Lu y Sr, y con la aproximación atómica de $\text{Sr}+\text{F}$, para el caso del SrF_2 .

4.3.3 Evaluación de la congruencia de las constantes ópticas obtenidas

La regla de suma f , descrita en la sección 2.5.2, relaciona k con el número atómico efectivo de electrones que contribuyen a la absorción. Es por tanto, un análisis al que se puede someter la k obtenida y comprobar su precisión en conjunto. El número efectivo de electrones por átomo, $n_{\text{eff}}(E)$ que contribuye a k hasta la energía E , viene dado por:

$$n_{\text{eff}}(E) = \frac{4\epsilon_0 m}{\pi N_a e^2 \hbar^2} \int_0^E E' k(E') dE' \quad (4.5)$$

La regla de suma f expresa que el número efectivo de electrones en el límite de altas energías de la integral es igual al número atómico del elemento, en materiales con un solo elemento como el Lu, Sr, o igual al número de electrones de la molécula, como en el caso del SrF_2 . Estos números son 71, 38 y 56, para el Lu, Sr y SrF_2 , respectivamente. Cuando se consideran correcciones relativistas en los factores de scattering [121], el límite del número

efectivo de electrones se ve ligeramente modificado: $Z^*=69.70$, 37.73 y 55.71 [124], respectivamente.

Los resultados obtenidos aplicando la regla de suma de la ecuación 4.5 a los valores de k con sus extrapolaciones fueron de 70.77 para el Lu, un 1.5% superior, 39.13 , para el Sr, un 3.7% superior, y de 55.71 , exactamente el mismo número para el SrF_2 ; la exacta coincidencia para el SrF_2 se considera fortuita, dado que los errores experimentales para este material pueden ser del mismo orden que en los casos del Lu y Sr. Las principales contribuciones a la integral de la ecuación 4.5 se dan en los intervalos ~ 1 eV- 600 KeV en el caso del Lu, ~ 0.7 eV- 100 KeV en el caso del Sr y ~ 10 eV- 100 KeV en el caso del SrF_2 . Las principales fuentes de error a la hora de calcular Z^* son la determinación de los espesores, pequeños cambios en la densidad, e incertidumbre en las medidas de transmitancia. El intervalo en que k es importante se extiende en el Lu más que en el Sr y SrF_2 , ya que el Lu tiene más electrones y por tanto, niveles electrónicos más profundos con una alta energía de ligadura. El hecho de que el SrF_2 empiece a tener contribución para k en una energía tan alta como 10 eV se debe a la transparencia del SrF_2 desde el NIR hasta el FUV, mientras que el componente metálico de la molécula, el Sr, como metal, tiene absorción en todo el visible y en energías inferiores.

Otro test útil que se puede aplicar a las constantes ópticas para analizar su congruencia en conjunto es la regla de suma inercial [125]:

$$\int_0^{\infty} \{n(E) - 1\} dE = 0 \quad (4.6)$$

En la práctica, es útil establecer un criterio de cuánto se aproxima a cero la integral de la ecuación 4.6. Se ha utilizado el parámetro ζ [125]:

$$\zeta = \frac{\int_0^{\infty} \{n(E) - 1\} dE}{\int_0^{\infty} |n(E) - 1| dE} \quad (4.7)$$

Shiles [126] sugirió que un buen valor de ζ debería estar en el intervalo $\pm 5 \cdot 10^{-3}$. En este trabajo se obtuvieron los valores de $\zeta = -4.0 \cdot 10^{-4}$ en el caso del Lu, de $\zeta = 4.8 \cdot 10^{-4}$ en el caso del Sr y de $\zeta = -2.3 \cdot 10^{-4}$ en el caso del SrF_2 , que en todos los casos están por debajo del límite propuesto por Shiles. Por tanto, estas reglas de suma sugieren que la congruencia de los conjuntos de constantes ópticas que hemos obtenido es satisfactoria.

4.4- Conclusiones: Lu, Sr y SrF_2

La transmitancia de láminas delgadas de Lu, Sr y SrF_2 depositadas por evaporación han sido medidas *in situ* en la región de 3 - 1800 eV para el caso del Lu, 6 - 1220 eV en el caso del Sr y 25 - 780 eV en el caso del SrF_2 en condiciones de UHV, excepto para el SrF_2 en el que las láminas se expusieron a la atmósfera antes de ser medidas.

El coeficiente de extinción k de estos materiales se ha obtenido a partir de medidas de transmitancia en el mismo intervalo espectral, y se ha encontrado que en la región del EUV, tanto Lu como Sr presentan unos mínimos de absorción de 0.059 en 25.2 eV (Lu) y, aún más interesante, de 0.029 en 18.5 eV (Sr), que son bajos comparados con los de la mayoría de materiales de la naturaleza, lo que hace a estos materiales candidatos prometedores para el desarrollo de recubrimientos multicapa en dicha región, donde prácticamente no se han

desarrollado recubrimientos debido a la gran absorción de los materiales. Un inconveniente que habría que salvar en ambos materiales es el de su reactividad, por lo cual se requerirían en particular elementos de pasivación superficial para evitar el contacto con la atmósfera de estos materiales. Con el Lu, se ha completado la caracterización de todos los lantánidos, realizada entre GOLD y el grupo norteamericano liderado por el Dr. J. Seely. En el caso del SrF_2 , se han obtenido las constantes ópticas de este material desde 25 eV hasta 780 eV, y se muestra experimentalmente la posición del borde K del Flúor. Sin embargo, se encontró que su absorción en la región de operación del láser “Ne-like Ar” es demasiado alta para su utilidad en multicapas y no concuerda con el bajo valor de k que se había medido en el SrF_2 cristalino.

Posteriormente, mediante el análisis de KK, se ha calculado la parte real del índice de refracción complejo n para cada uno de los tres materiales. Estos valores de n han sido los primeros determinados a partir de medidas ópticas experimentales en energías superiores a 7, 11 y 35 eV para el Lu, Sr y SrF_2 , respectivamente.

Finalmente, la evaluación de dichas constantes utilizando las reglas de suma ha resultado ser satisfactoria y por tanto, se ha obtenido por primera vez para el Lu, Sr y SrF_2 unos conjuntos congruentes de constantes ópticas $\{n, k\}$ en una gran extensión del espectro electromagnético, mostrando además varios bordes de absorción medidos con una gran resolución.

4.5- Introducción: SiC y B₄C

Tanto el SiC como el B₄C son materiales con un gran número de aplicaciones, debido a que presentan una combinación de buenas propiedades mecánicas y ópticas: son semiconductores con un gap ancho, resistentes a la radiación, poseen una buena estabilidad y conductividad térmica, suelen crecer con poca rugosidad al ser depositados por sputtering y poseen una moderadamente alta reflectancia en el EUV. Estos materiales han sido usados en multitud de recubrimientos de reflectancia en el EUV o en la región de SXR, bien como “barreras” para evitar que dos materiales reaccionen entre sí (los materiales “barrera” más frecuentes en dicha región son SiC, B₄C y C), o bien como componentes de multicapas [127] [128] [129] [130].

En la bibliografía se han encontrado pocos artículos en los que dichos materiales fueran empleados en recubrimientos para longitudes de onda superiores a 200 nm, con algunas excepciones, como por ejemplo el trabajo de Schuhle *et al.* [131] en el caso del SiC. Una de las razones podría ser que ambos materiales no poseen unas constantes ópticas atractivas en el visible, ya que su absorción es relativamente alta, y no poseen una reflectancia notable.

Sin embargo, existen aplicaciones en el EUV-FUV que requieren de ciertas restricciones adicionales en rangos secundarios, como podría ser el visible, UV o IR; por ejemplo, un rechazo del visible es deseable para recubrimientos en el EUV cuando no se dispone de detectores de baja sensibilidad para el visible. Aunque existe una gran variedad de artículos mostrando el coeficiente de absorción de estos materiales por encima de 200 nm, hay pocos artículos que muestren tanto la absorción como el índice de refracción en dicha región. Por tanto, es necesario disponer de un conjunto de constantes ópticas congruentes en este intervalo espectral para diseñar recubrimientos. En este trabajo se ha obtenido un conjunto congruente de constantes ópticas de estos materiales en longitudes de onda mayores que 190 nm, que en el presente están siendo empleadas por la comunidad científica [132], [133].

Estos materiales fueron depositados y caracterizados en las instalaciones de GOLD.

4.5.1 Estudios previos

A continuación se resume brevemente la bibliografía disponible acerca de cada uno de los materiales analizados.

4.5.1.1 SiC

Antes de este trabajo, la literatura sobre constantes ópticas obtenidas a partir de medidas sobre láminas delgadas de SiC depositado por sputtering por encima de 190 nm era escasa. Además, la mayoría de los trabajos existentes mostraban únicamente su absorción. Fagen [134] publicó medidas de reflectancia y el coeficiente de absorción en el intervalo 0.08-4 eV (309.7-15487.5 nm). Matsunami *et al.* [135] publicaron medidas de reflectancia y el coeficiente de absorción en el intervalo 1.2-3.2 eV (387.2-1032.5 nm); estos autores depositaron las láminas sobre sustratos a ~100°C. Dutta *et al.* [136] obtuvieron la absorción de los compuestos Si_xC_xF_y, dependiendo de la concentración de F, incluyendo el SiC, en el intervalo 1.6-2.4 eV (516.2-774.4 nm). Heckens y Woollam [137] realizaron medidas de

elipsometría *in-situ* y de ahí obtuvieron las constantes ópticas en el intervalo 400-750 nm. Sundaram *et al.* [138] publicaron medidas de transmitancia y el coeficiente de absorción en el intervalo 300-800 nm, proporcionando además valores experimentales del gap. Por último, Guerra *et al.* [139] publicaron medidas de transmitancia y el coeficiente de absorción en el intervalo 190-1100 nm.

En cuanto al SiC preparado con otros métodos, Musumeci *et al.* [140] caracterizaron cristales de 6H-SiC que habían sido amorfizados mediante la implantación de iones de Kr acelerados por un potencial del 200 keV. Hicieron medidas de transmitancia y reflectancia, de las cuales obtuvieron n y k en el intervalo 300-1100 nm. Finalmente, Choyke y Palik [141] recopilan la información existente acerca de las constantes ópticas del 6H-SiC (cristalino) a lo largo de todo el espectro electromagnético; lamentablemente las constantes ópticas del SiC en estado cristalino no tienen por qué coincidir con las del SiC depositado en forma de lámina delgada [142].

4.5.1.2 B₄C

Antes de este estudio, no se encontró en la literatura ninguna publicación sobre constantes ópticas obtenidas a partir de medidas realizadas sobre láminas delgadas de B₄C depositado por sputtering por encima de 190 nm. En cuanto al B₄C preparado por otros métodos, Ronning *et al.* [143] publicaron medidas de reflectancia y el coeficiente de absorción en el intervalo 300-700 nm de láminas delgadas depositadas por implantación directa de iones de B⁺ y C⁺ en un sustrato. Ahmad *et al.* [144] hicieron medidas elipsométricas y, de ahí, obtuvieron n y k para láminas de B₅C depositadas por CVD en el rango 309-1000 nm, obteniendo también un valor experimental para el gap. Finalmente, Samara *et al.* [145] midieron en el intervalo 250-20000 nm la reflectancia y la constante dieléctrica de láminas exfoliadas de B₄C, fabricado mediante prensado uniáxico en caliente de polvo de grafito y B.

4.6- Preparación de las muestras: SiC y B₄C

Las muestras de SiC y B₄C fueron depositadas por sputtering, técnica descrita en la sección 3.3.1.3, en la cámara de sputtering del grupo GOLD, descrita en la sección 3.2.1.2. El ángulo de incidencia de los iones en el blanco fue de 25°. Los blancos tienen 96.5 mm de diámetro y la pureza es del 99.9995% en el caso del SiC y del 99.9% en el caso del B₄C. Los blancos, refrigerados por agua, están colocados en un soporte que permite seleccionar un blanco y el ángulo de incidencia del haz de iones, mediante giro del bloque de blancos.

Los iones son generados por un cañón de iones de cátodo hueco, siendo 3 cm el diámetro del haz a la salida del cañón; estos iones son acelerados por un potencial en dirección al blanco; antes de que ese haz incida sobre dicho blanco, se combina con otro haz de electrones producidos en el neutralizador de cátodo hueco, el cuál ha sido acelerado en la dirección del haz incidente de iones. Ni el cañón de iones ni el neutralizador disponen de filamento, lo que minimiza posibles efectos de la contaminación.

Las condiciones de deposición de ambos materiales fueron las siguientes: los iones fueron acelerados con un potencial de 1200 V y la corriente total de iones fue de 45 mA. El gas

seleccionado para generar iones fue el Argón. La velocidad de deposición fue de ~ 0.09 nm/s en el caso del SiC y de ~ 0.04 nm/s en el caso del B_4C . La distancia entre los blancos y el sustrato fue de 15 cm. El espesor fue controlado durante la deposición mediante una microbalanza de cuarzo. Los sustratos usados para las medidas de elipsometría en ambos materiales fueron una oblea de silicio y un testigo de vidrio al lado de la oblea, de forma que recibiera la misma cantidad de material depositado, para así poder realizar medidas de espesor usando interferometría de Tolanksi. La deposición se realizó a temperatura ambiente. La presión base de la cámara de sputtering es de $7 \cdot 10^{-8}$ Pa, y la presión durante la deposición fue de $6 \cdot 10^{-2}$ Pa. Las medidas se realizaron después de extraer las muestras del equipo de UHV, por lo que se estima que estuvieron en contacto con la atmósfera durante ~ 5 min antes de empezar a medirlas, tiempo que fue minimizado para reducir posibles oxidaciones. Las medidas de elipsometría duraron ~ 30 min y fueron realizadas con el elipsómetro espectroscópico SOPRA GES-5E, descrito en la sección 3.2.1.13.

4.7- Resultados y discusión: SiC y B_4C

4.7.1 Obtención de constantes ópticas

En este trabajo fueron depositadas tres láminas de SiC y dos de B_4C , cuyos espesores fueron 29, 32 y 41 nm en el caso del SiC y 37 y 39 nm en el caso del B_4C . Dichos espesores se determinaron a partir de medidas de interferometría de Tolanksi sobre los testigos de vidrio. Las medidas de elipsometría fueron realizadas en el intervalo 190-950 nm en ángulos de incidencia de 72° a 74° en el caso del SiC y de 72° en el caso del B_4C . Estas medidas proporcionan valores de $\tan\psi$ y $\cos\Delta$ para cada longitud de onda, relacionados con la polarización de la luz según la siguiente ecuación:

$$\frac{r_s}{r_p} = \tan(\psi)e^{i\Delta} \quad (4.8)$$

donde r_s y r_p se dedujeron en la sección 2.3.2. Si se considera una lámina con constantes ópticas desconocidas, pero con espesor conocido, depositada sobre un sustrato con constantes ópticas conocidas, y la radiación incidiendo en un ángulo conocido sobre la muestra, entonces para cada longitud de onda tenemos un sistema no lineal de dos ecuaciones con dos incógnitas de donde se pueden determinar los valores n y k del material problema. En el análisis de las medidas elipsométricas no se usó ningún modelo que suponga un comportamiento restrictivo para n o k , por lo que las constantes ópticas fueron calculadas individualmente para cada longitud de onda mediante un algoritmo de Newton-Raphson. En la figura 4.10 se muestran los parámetros elipsométricos obtenidos experimentalmente, $\tan\psi$ y $\cos\Delta$, de la muestra de 29 nm de espesor de SiC medida a 72° y de la muestra de 39 nm de espesor de B_4C medida a 72° , junto con los ajustes calculados con las constantes ópticas obtenidas.

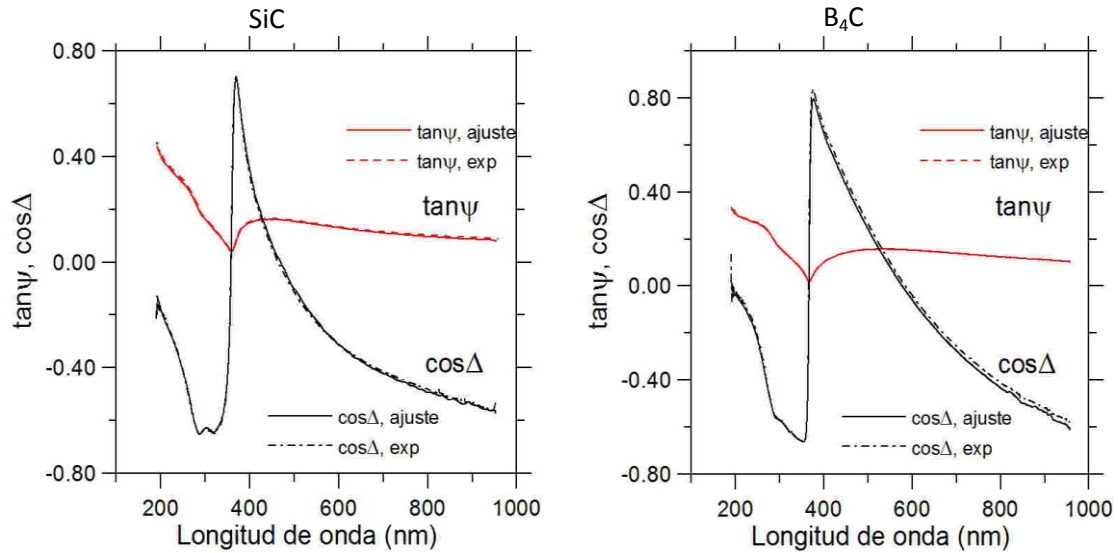


Fig. 4.10. $\tan\psi$ y $\cos\Delta$ del SiC y B_4C junto con sus respectivos ajustes, en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

En la figura 4.11 se muestra, para cada material, las constantes ópticas calculadas a partir de las medidas elipsométricas, las cuales han sido promediadas a partir de las obtenidas para las diferentes muestras. En los cálculos, la rugosidad superficial ha sido ignorada, ya que se estima que la rugosidad media es al menos dos órdenes de magnitud inferior a las longitudes de onda en las que se realizaron las medidas.

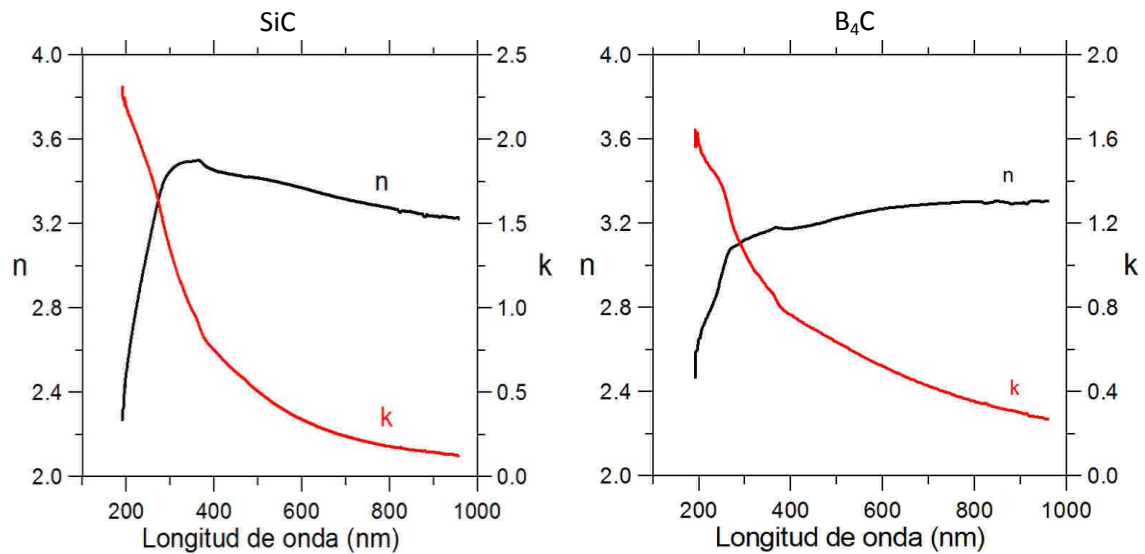


Fig. 4.11. Constantes ópticas n y k del SiC y B_4C , obtenidas a partir de las medidas de elipsometría, en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

Las desviaciones estándar de los valores de las constantes ópticas obtenidas para cada muestra respecto al promedio fueron de 0.020 en n y 0.016 en k para el SiC, y de 0.012 para n y 0.008 para k para el B_4C . Normalizando a los valores de n y k , se obtuvo una desviación normalizada de 0.006 para n y 0.05 para k en el caso del SiC y 0.004 para n y 0.015 para k , en el caso del B_4C .

Como se ha mencionado en la introducción, en la literatura existen pocos datos de constantes ópticas para estos dos materiales en el intervalo 190-950 nm, fundamentalmente

sólo de absorción, de los que se puede deducir sólo k . En la figura 4.12 se comparan las constantes ópticas que se han obtenido en este trabajo por elipsometría y las recopiladas en la literatura. Para las comparaciones se han escogido en general los datos de la literatura obtenidos a partir de medidas sobre láminas delgadas a temperatura ambiente, debido a que para muchas aplicaciones no es posible o recomendable calentar el sustrato y además la lámina o multicapa puede crecer con tensiones (stress) aumentadas debido a la diferencia de coeficientes de dilatación entre las láminas o entre éstas y el sustrato.

En el caso del SiC, este trabajo ha sido el primero en proporcionar un conjunto de n y k en el intervalo 190-300 nm. En la figura 4.12 se muestran las constantes ópticas obtenidas en este trabajo junto con los datos de Fagen [134], Matsunami *et al.* [135], Dutta *et al.* [136], Heckens y Woollam [137], Sundaram *et al.* [138] y Guerra *et al.* [139]. Todos ellos usaron la técnica de deposición por sputtering. Se incluyen también los valores obtenidos por Musumeci *et al.* [140] debido a su coincidencia con los obtenidos en este trabajo, aunque el método de deposición empleado (cristales 6H-SiC amorfizados mediante la implantación de iones pesados de Kr acelerados a 200 keV) difiere de los arriba mencionados. Los valores obtenidos por Heckens y Woollam [137] son compatibles con nuestros datos; estos valores fueron obtenidos mediante una técnica (elipsometría *in-situ*) parecida a la empleada en este trabajo (elipsometría *ex-situ*, pero minimizando el tiempo de exposición a la atmósfera de las muestras). Los valores relativamente bajos de k obtenidos por Matsunami *et al.* son explicables debido a que la deposición se realizó sobre sustratos a $\sim 100^\circ\text{C}$; habitualmente las láminas depositadas en sustratos calientes crecen más compactas y son menos absorbentes. Entre los demás autores, se aprecia una gran dispersión en k . La comparación en n sólo se puede realizar con los datos de Heckens y Woollam, con los que hay una diferencia de $\sim 6\%$, y con los de Musumeci *et al.*, con los que hay una mayor coincidencia.

En el caso del B_4C , este trabajo ha sido el primero en proporcionar un conjunto de n y k en el intervalo 190-950 nm, a partir de láminas depositadas mediante sputtering en sustratos a temperatura ambiente, y con la estequiometría B_4C . En la figura 4.12 se muestran las constantes ópticas obtenidas en este trabajo junto con los datos de Samara *et al.* [145], Ronning *et al.* [143] y Ahmad *et al.* [144]. Los valores de constantes ópticas obtenidos en este trabajo no son compatibles con ninguno de estos trabajos, debido tanto a que las técnicas de deposición son diferentes de la de sputtering (Samara *et al.* midieron láminas exfoliadas de B_4C fabricado mediante prensado uniáxico en caliente de polvo de grafito y B, Ronning *et al.* midieron muestras depositadas por implantación directa de iones de B^+ y C^+ en un sustrato y Ahmad *et al.* midieron láminas depositadas por CVD) como a diferencias en la estequiometría (en el caso del trabajo de Ahmad se trata de B_5C).

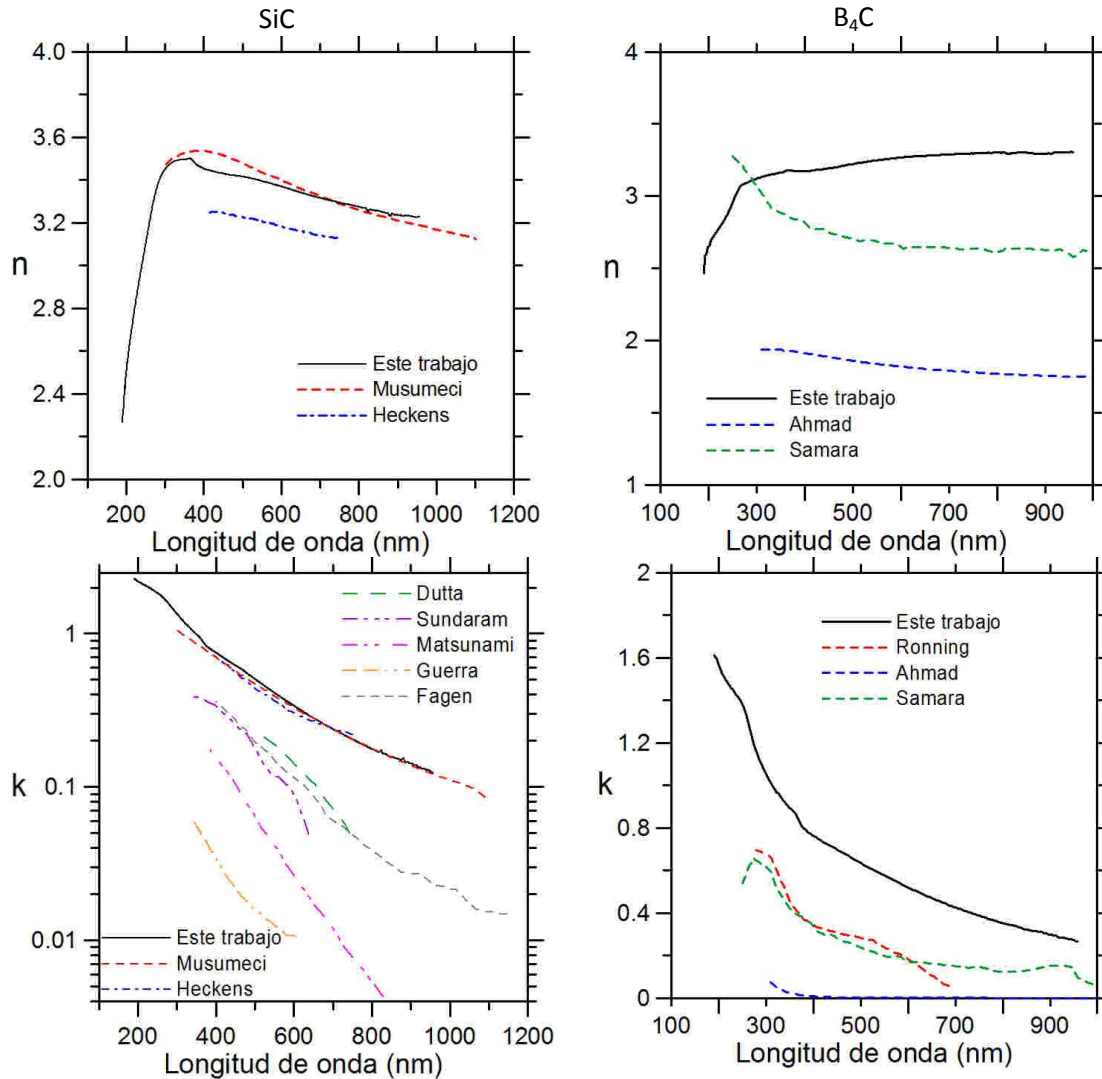


Fig. 4.12. Constantes ópticas n y k del SiC y B_4C , en función de la longitud de onda, comparadas con los datos experimentales de Fagen [134], Matsunami et al. [135], Dutta et al. [136], Heckens y Woollam [137], Sundaram et al. [138], Guerra et al. [139] y Musumeci et al. [140] en el caso del SiC y de Ronning et al. [143], Ahmad et al. [144], y Samara et al. [145] en el caso del B_4C . La k del SiC se muestra en escala logarítmica para facilitar la comparación.

4.7.2 Obtención de un conjunto de constantes ópticas congruente a partir de las relaciones de dispersión de KK.

Con la finalidad de obtener un conjunto de constantes ópticas congruentes mediante el análisis de KK, es necesario extender las constantes obtenidas con las de la bibliografía existente. Para ello, se construirá una k a lo largo de todo el espectro electromagnético y después se obtendrá un índice de refracción n mediante el análisis de KK. Finalmente, se comparará la n calculada mediante el análisis de KK con la n obtenida directamente por elipsometría.

En el caso del SiC, la extensión de los datos experimentales a longitudes de onda cortas (altas energías) se hizo mediante los datos de Fernández-Perea *et al.* [56], obtenidos a partir de muestras depositadas por IBS, en el intervalo 58.4-149.2 nm. Estas medidas fueron realizadas *in-situ*, por lo que se espera que las muestras estén menos contaminadas, y por tanto, las

constantes ópticas obtenidas sean más precisas que las obtenidas por Larruquert y Keski-Kuha [51], en cuyo trabajo las muestras, también depositadas mediante IBS, estuvieron expuestas ~2 minutos a la atmósfera. El hueco entre los datos de Fernández-Perea *et al.* y las medidas de elipsometría (que empiezan en 190 nm) fue cubierto mediante una conexión suave, tomando como guía los datos de Larruquert y Keski-Kuha. Para energías superiores, se emplearon los datos de Kortright y Windt [146], obtenidos a partir de muestras depositadas por sputtering magnetrón (pulverización magnetrón), desde 58.4 nm hasta 41.3 nm (30 eV). Por encima de 30 eV, se usaron los datos semiempíricos de Henke *et al.* [101], con la densidad de 2.98 g/cm³, tomada del artículo de Soufli *et al.* [147], en la que determinó dicha densidad a partir de muestras depositadas por sputtering magnetrón en sustratos a temperatura ambiente.

En el caso del B₄C, se usaron los datos de Blumenstock *et al.* [148], que midieron *ex-situ* láminas depositadas por IBS en el intervalo 58.1-175 nm. El hueco entre las medidas de Blumenstock *et al.* y las medidas de elipsometría (que empiezan en 190 nm) fue cubierto mediante un empalme suave. Por debajo de 40 nm hasta 1.61 nm (770 eV) se usaron los datos de Soufli *et al.* [149], obtenidos a partir de muestras depositadas por sputtering magnetrón. Como los datos de Blumenstock *et al.* llegaban hasta 40.6 nm, pero no eran compatibles en la zona de solapamiento con los de Soufli, se realizó una conexión usando los datos de Monaco *et al.* [150], obtenidos a partir de muestras depositadas por sputtering magnetrón, los cuales empalmaban bien con Soufli *et al.* en la región de 40-46 nm y con Blumenstock *et al.* en 58.1 nm. Los datos de Soufli *et al.* se extienden hasta 770 eV; por encima de esta energía se usaron los valores semiempíricos de Henke *et al.* [101] hasta 30 keV, con una densidad de 2.28 g/cm³, valor que fue sugerido en el trabajo de Soufli *et al.* [147].

La extensión de los datos experimentales a longitudes de onda largas (bajas energías) fue complicada en ambos materiales. En la literatura no se encontraron datos de *k* obtenidas a partir de láminas delgadas para ningún material desde 950 nm hasta la zona de reststrahlen, donde sí se encontraron datos experimentales: para el SiC, se tomaron los datos de Fagen [134], obtenidos a partir de muestras depositadas por magnetrón sputtering, y para el B₄C se tomaron datos de Samara *et al.* [145], obtenidos a partir de láminas exfoliadas de B₄C fabricado mediante prensado uniáxico en caliente de polvo de grafito y B.

En el caso del SiC, para evitar la discontinuidad con los datos existentes en la literatura, la conexión entre 950 nm y la zona de reststrahlen (~10-11 μm) se realizó mediante datos de láminas delgadas del Si, un semiconductor cuyas propiedades se estiman cercanas a las del SiC en esa región; los datos fueron tomados de Pierce y Spicer [151]. Dichos datos se multiplicaron por un factor 1.95 para que la conexión en 950 nm fuese suave. Para que el empalme entre los datos del Si y los valores experimentales en la zona de reststrahlen fuese suave, se ajustó un oscilador de Lorentz a los datos experimentales de reststrahlen, y con dicho ajuste se realizó una conexión suave a los datos de Pierce y Spicer; finalmente, para longitudes de onda mayores, se usaron los valores de *k* procedentes de la extensión natural del oscilador de Lorentz ajustado.

En el caso del B₄C, el procedimiento fue similar al usado con el SiC. Para conectar los datos de elipsometría con los datos de reststrahlen (~5-10 μm) se usaron las constantes ópticas de láminas delgadas de B procedentes de la compilación de Fernandez-Perea *et al.*

[53], en la cual se había tomado los valores de Morita [152] por encima de 200 nm. Los valores de la zona de reststrahlen obtenidos por Samara *et al.* se ajustaron mediante dos osciladores de Lorentz, y dichos osciladores se emplearon por un lado para hacer una conexión suave en longitudes de onda más cortas, con los datos de Morita [152], y por el otro, para extender los datos a longitudes de onda más largas. En la figura 4.13 se muestran los datos de k obtenidos en este trabajo por elipsometría para el SiC y el B₄C junto con los procedentes de la literatura.

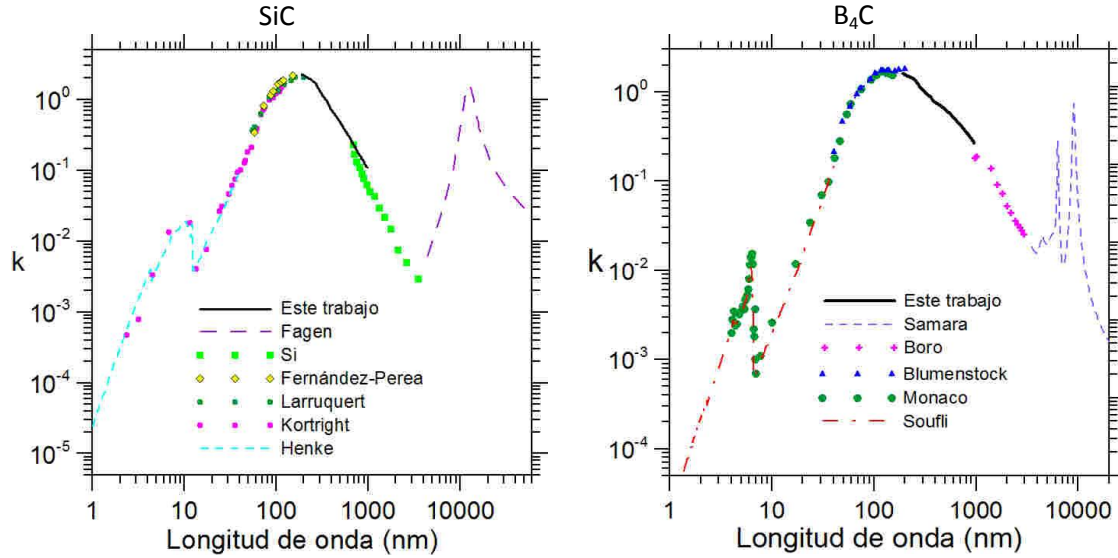


Fig. 4.13. k del SiC y B₄C en función del logaritmo de la longitud de onda, junto con los datos de la literatura usados para extender los valores de k a un extenso intervalo del espectro electromagnético.

Una vez construido un conjunto de k para cada material en un extenso intervalo del espectro electromagnético, se calculó el índice de refracción n de ambos mediante el análisis de KK (ecuación 4.9):

$$n(E) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{E' k(E')}{E'^2 - E^2} dE' \quad (4.9)$$

Para el SiC, la n obtenida mediante este procedimiento resultó ser ~3.2% más grande de media que la n obtenida por elipsometría; para el B₄C la n obtenida mediante el análisis de KK resultó ser ~1.3% menor de media que la obtenida por elipsometría. Para corregir la dispersión en la n del SiC, en el intervalo de elipsometría (190-950 nm), se hizo un promedio entre la n obtenida por elipsometría y la n obtenida mediante el análisis de KK; la n resultante del promedio se unió a la n de energías más altas mediante un empalme suave, sin modificar éstas; a energías menores, se corrigió el factor multiplicativo de la n procedente del Si hasta obtener un empalme suave con las n promediadas. Finalmente, se realizó el análisis de KK inverso (ecuación 4.10) para obtener una nueva k :

$$k(E) = -\frac{2E}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{n(E') - 1}{E'^2 - E^2} dE' \quad (4.10)$$

Esta k fue comparada con la obtenida mediante elipsometría, y se obtuvo que era ~1% menor. Esta diferencia se consideró suficientemente pequeña y por tanto, este último conjunto de n y k se tomó como resultado final. En el caso del B₄C, se consideró que la diferencia entre ambas n , tanto la calculada mediante análisis de KK como la obtenida

mediante elipsometría, eran suficientemente pequeñas, por lo que el par n y k se tomó como conjunto final de constantes ópticas. En la figura 4.14 se presenta la n obtenida para cada material y se comparan con los valores obtenidos de la bibliografía. En el caso del SiC, se compara con la n de Fernández-Perea *et al.* [56], Kortright *et al.* [146], Larruquert y Keski Kuha [51] y los datos teóricos de Henke *et al.* [101]. En el caso del B₄C, se compara la n obtenida con la de Blumenstock *et al.* [148], Monaco *et al.* [150] y Soufli *et al.* [149].

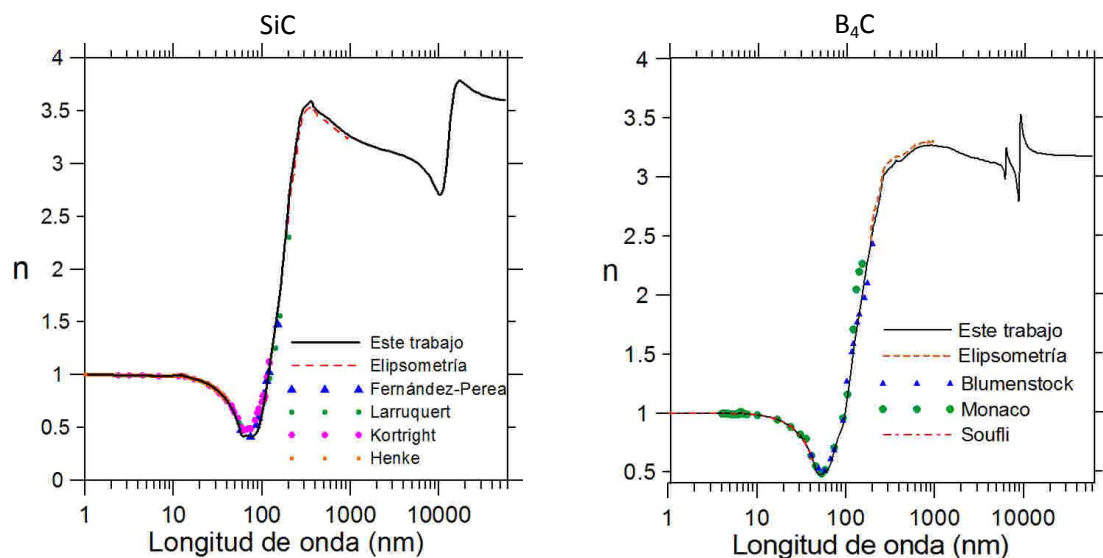


Fig. 4.14. n del SiC y B₄C en función del logaritmo de la longitud de onda, junto con los datos obtenidos de la literatura.

En este trabajo, además de haber obtenido n y k en el intervalo 190-950 nm, se ha recopilado y extendido nuestra k con valores de la literatura, y finalmente se ha obtenido, mediante el análisis de KK, un conjunto congruente de constantes ópticas para el SiC y el B₄C, que pueden ser empleados en el diseño de recubrimientos ópticos en cualquier longitud de onda de todo el espectro electromagnético [133].

4.7.3 Evaluación de la congruencia de las constantes ópticas obtenidas

La regla de suma f , descrita en la sección 2.5.2, relaciona k con el número efectivo de electrones que contribuyen a la absorción. Es por tanto, un análisis al que se puede someter la k obtenida para comprobar su precisión en conjunto. El número efectivo de electrones por átomo, que en el presente caso se extiende al número efectivo de electrones por molécula, $n_{\text{eff}}(E)$, que contribuyen a k hasta la energía E viene dado por:

$$n_{\text{eff}}(E) = \frac{4\epsilon_0 m}{\pi N_a e^2 \hbar^2} \int_0^E E' k(E') dE' \quad (4.11)$$

Esta regla expresa que el número efectivo de electrones que contribuyen a k en el límite de altas energías de la integral es el número de electrones de la molécula de SiC o de B₄C. Estos números son 20 y 26 para el SiC y B₄C, respectivamente. Cuando se tienen en cuenta las correcciones relativistas a los factores de scattering [121], el número de electrones máximo se modifica ligeramente: $Z^*=19.97$ o 25.98 [124], respectivamente.

Aplicando la regla de suma de la ecuación 4.11 a las k obtenidas en el apartado anterior se obtuvo un valor de 19.68 para el SiC, un 1.5% inferior, y 26.80 para el B₄C, un 3.2%

superior a los valores teóricos. La contribución de la parte medida por elipsometría a la ecuación 4.11 fue de ~ 0.45 para el SiC y de ~ 0.88 para el B_4C . Para aumentar la contribución de la parte obtenida por elipsometría, se utilizó otra regla de suma que reemplaza k por ϵ_2 ; el número efectivo de electrones integrado en todo el espectro pasó a incrementarse únicamente 0.004 y 0.01 para el SiC y el B_4C , respectivamente, pero la contribución al número efectivo de electrones de la región espectral medida por elipsometría pasó a ser ~ 1.45 y ~ 2.48 para el SiC y B_4C , respectivamente. Estos resultados sugieren que la desviación en Z^* , en particular relativamente alta para el B_4C , se origina en todo el espectro, y no particularmente en el rango medido por elipsometría. Esta desviación es probablemente debida tanto al gran número de fuentes bibliográficas usadas en las extrapolaciones (necesarias para completar k a lo largo del espectro electromagnético) como a que se emplearon datos de constantes ópticas de materiales diferentes, como fueron los de Si en el SiC y B en el B_4C .

Otro test útil que se puede aplicar a las constantes ópticas para analizar su congruencia en conjunto es la regla de suma inercial [125]:

$$\int_0^{\infty} \{n(E) - 1\} dE = 0 \quad (4.12)$$

En la práctica, es útil establecer un criterio de cuánto se aproxima a cero la integral de la ecuación 4.12. Se ha utilizado el parámetro ζ [125]:

$$\zeta = \frac{\int_0^{\infty} \{n(E) - 1\} dE}{\int_0^{\infty} |n(E) - 1| dE} \quad (4.13)$$

Shiles [126] sugirió que un buen valor de ζ debería estar en el intervalo ± 0.005 . En este trabajo se obtuvo, para el SiC, el valor $\zeta = 2 \cdot 10^{-4}$, y para el B_4C , el valor $\zeta = 9 \cdot 10^{-4}$. La principal contribución a la integral de la ecuación 4.12 proviene del intervalo ~ 0.02 eV-5 keV en el caso del SiC, y del intervalo ~ 0.05 eV-6 keV en el caso del B_4C , con máximos en 10.7 eV y 12.7 eV, respectivamente. Ambos intervalos incluyen el tramo en el que se han realizado las medidas elipsométricas. Al igual que se hizo con la regla de suma f (ecuación 4.12), se buscó otra regla de suma en la cual el peso de la parte obtenida por elipsometría fuese mayor, y se encontró como regla de suma adecuada la que reemplaza n por ϵ_1 en la ecuación 4.14 [125]. Análogamente se modificó el parámetro ζ de la ecuación 4.13 reemplazando n por ϵ_1 . El resultado obtenido para ζ fue de $5 \cdot 10^{-5}$ para el SiC, con máximo en 6.4 eV, y de $8 \cdot 10^{-6}$ para el B_4C , con un máximo en 8.3 eV. El desplazamiento de los máximos hasta energías más próximas a las usadas en elipsometría es notable, y simultáneamente el parámetro ζ disminuye. Por tanto, a la vista de los resultados obtenidos a través de esta regla de suma y la de la regla de suma f , se constata que se ha obtenido un conjunto congruente de constantes ópticas para cada material.

4.7.4 Cálculo de la energía del gap

Para semiconductores cristalinos, el gap es un parámetro bien definido, correspondiente a la energía de las transiciones prohibidas entre la banda de valencia y la de conducción. No lo es tanto para semiconductores amorfos, donde existe una densidad finita de estados localizados entre dichas banda. Tauc *et al.* [153] [154] interpretaron la presencia de un

gap en semiconductores amorfos como la energía de las transiciones sin conservación de momento entre estados extendidos entre las bandas de valencia y las de conducción, suponiendo un comportamiento parabólico de dichas bandas [77]. Mediante esa interpretación, se puede calcular la energía del gap considerándolo como un parámetro de ajuste de las ecuaciones 4.14 y 4.15 para α o ε_2 :

$$\sqrt{\alpha E} \propto (E - E_g) \quad (4.14)$$

$$\sqrt{\varepsilon_2 E^2} \propto (E - E_g) \quad (4.15)$$

donde $\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}$ es el coeficiente de absorción y E_g es la energía del gap. Siguiendo esa interpretación, en la figura 4.15 se muestra el ajuste realizado en los datos experimentales de SiC y B₄C obtenidos en este trabajo para encontrar el gap de Tauc de estos materiales.

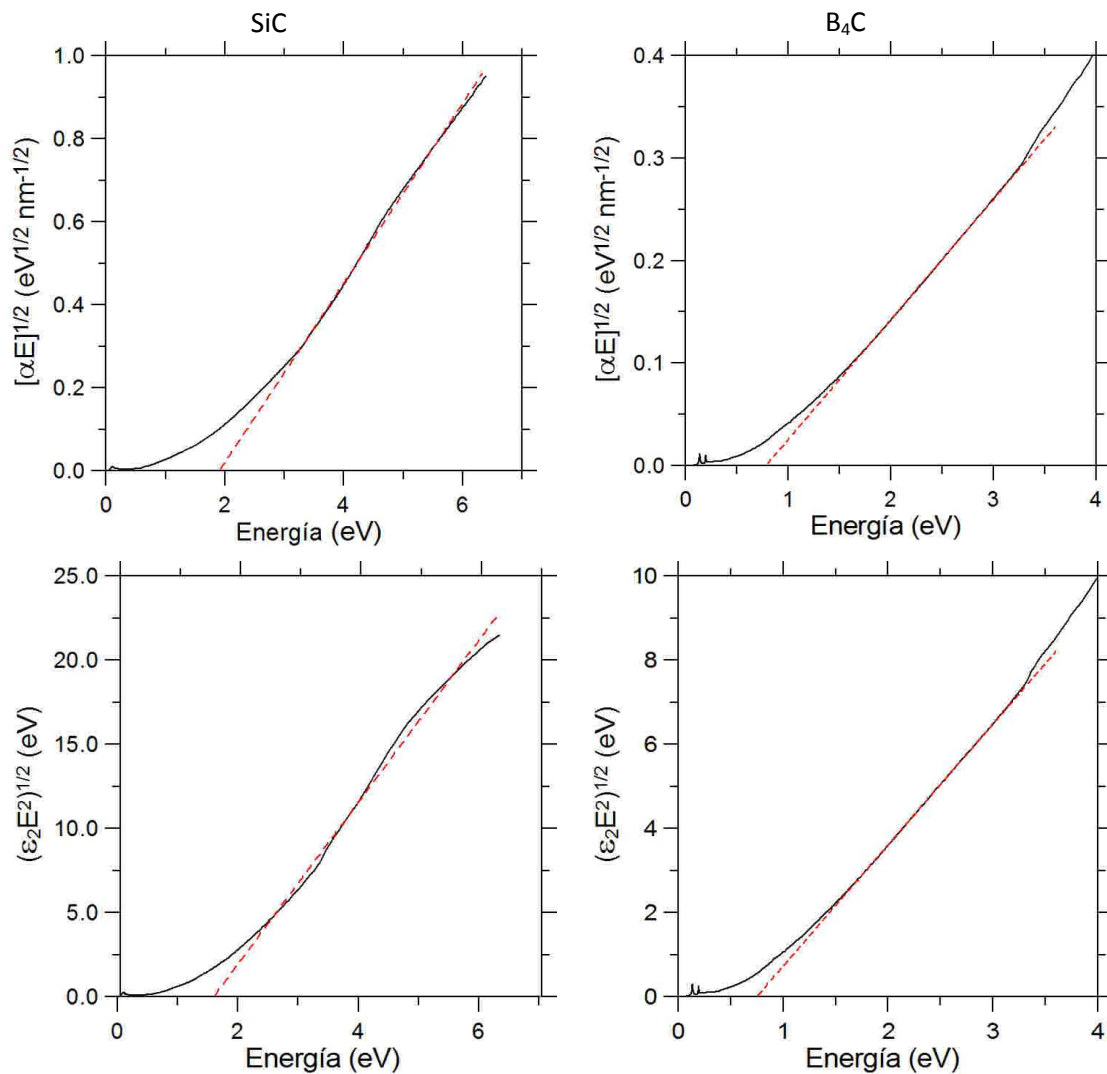


Fig. 4.15. El valor del gap del SiC y B₄C obtenido experimentalmente. Dichos valores se pueden determinar gráficamente como los puntos en los que las extrapolaciones lineales de las funciones a) $\sqrt{\alpha E}$ y b) $\sqrt{\varepsilon_2 E^2}$ cortan el eje de las energías.

Los resultados obtenidos son $E_g=1.93$ (ecuación 4.14) y 1.65 eV (ecuación 4.15) en el caso del SiC, y $E_g=0.78$ (ecuación 4.14) y 0.75 eV (ecuación 4.15) en el caso del B₄C. Para el SiC, en la literatura se tienen los valores de 2.0 eV, obtenido por Sundaram *et al.* [138] para muestras no identificadas, de 1.6 eV, obtenido por Fagen [134], para muestras más gruesas que las aquí empleadas (entre 0.6 y 16.5 μm), y de 1.35 eV, obtenido por Dutta *et al.* [136], para muestras depositadas por sputtering. En el caso del B₄C se tiene el valor de 0.6 eV obtenido por Ahmad *et al.* [144], para muestras de B₅C depositadas por sputtering magnetrón y de 0.8 eV, obtenido por Lee *et al.* [155], para muestras depositadas mediante CVD. La disparidad de valores es grande, en parte por la variedad de naturaleza de las muestras, pero también porque las extrapolaciones lineales dependen del intervalo de energía en que se acepte que la función tiene un comportamiento lineal.

4.8- Conclusiones: SiC y B₄C

Mediante medidas de elipsometría en la región espectral de 190-950 nm, se han obtenido las constantes ópticas de láminas delgadas de SiC y B₄C, depositadas por sputtering en sustratos a temperatura ambiente. Las medidas se realizaron tras una exposición mínima de las muestras a la atmósfera. En el caso del SiC, este trabajo ha sido el primero en proporcionar un conjunto de n y k en el intervalo 190-300 nm. En el caso del B₄C, este trabajo ha sido el primero en proporcionar un conjunto de n y k en el intervalo 190-950 nm, ya que los datos existentes en la literatura fueron obtenidos a partir de muestras con distinta estequiometría o distintas técnicas de deposición. Para ambos materiales, se ha construido k a lo largo de todo el espectro electromagnético con datos de la bibliografía y mediante el análisis de KK se ha obtenido n , que cubre también todo el espectro electromagnético y es compatible con los valores de n obtenidos directamente por elipsometría.

Se ha demostrado que estos conjuntos de constantes ópticas dan unos resultados excelentes con la aplicación de varias reglas de sumas; por tanto estos conjuntos podrán ser útiles en el diseño de recubrimientos a lo largo de un amplio intervalos del espectro electromagnético. En particular, las constantes ópticas obtenidas en este trabajo para el SiC ya están siendo empleadas por la comunidad científica [132] [133].

Finalmente, con estos conjuntos de constantes ópticas se han obtenido experimentalmente unas energías de gap de Tauc de 1.65-1.93 eV en el caso del SiC y de 0.75-0.78 eV en el caso del B₄C.

Capítulo 5. Nuevos algoritmos y modelos para constantes ópticas

5.1-Introducción

En este capítulo se presentan nuevos métodos y algoritmos bien para analizar valores obtenidos de constantes ópticas o bien para parametrizar éstas mediante modelos.

Las dificultades que fueron surgiendo a lo largo de este trabajo en la aplicación del análisis de KK, relacionadas sobre todo con los intervalos de medida no infinitos, han conducido a los desarrollos que se presentan en este capítulo, posteriores a la caracterización de los materiales cuyas constantes ópticas se han determinado en el capítulo anterior. Por ello sólo se han utilizado a posteriori, cuando los conjuntos de constantes ópticas ya habían sido publicados. En todo caso, dado que la determinación de constantes ópticas es una de las líneas de GOLD, los nuevos desarrollos serán de utilidad en el futuro.

En la primera parte de este capítulo se presentan unas nuevas reglas de suma basadas en una función ventana, la cual multiplica al índice de refracción complejo y permite dar más peso en dicha regla de suma a la región espectral en la que se desea comprobar la congruencia de las constantes ópticas, bien porque solo se disponga de medidas experimentales en esa región o bien porque se haya utilizado una extrapolación de la que se quiere comprobar su bondad. Para este fin, se deducirán unas nuevas relaciones de KK que incluyan una función ventana general, así como la propuesta de una función ventana particular. A partir de la elección particular de la función ventana se obtendrán las nuevas reglas de suma asociadas. Por último, las nuevas reglas de suma se aplicarán a casos reales para evaluar la congruencia de las constantes ópticas de SrF_2 y SiC , dando más peso a diversos intervalos espectrales de interés.

La segunda parte de este capítulo presenta una corrección del modelo de Tauc-Lorentz propuesto por Jellison y Modine [67] en 1996, el cual es frecuentemente utilizado como función paramétrica para describir la constante dieléctrica de materiales semiconductores amorfos. El modelo de Jellison y Modine describe la constante dieléctrica mediante una función matemática que no es analítica. En este trabajo, se ha generado un modelo revisado que elimina los problemas que se presentan en el modelo de Jellison y Modine, permite describir la parte imaginaria de la constante dieléctrica también en energías inferiores a la del gap y finalmente permite obtener la parte real de la constante dieléctrica en el intervalo en el que se ha realizado un ajuste a datos experimentales de la parte imaginaria, o viceversa, lo cual no era posible con el modelo original. Finalmente, como demostración, se muestran ajustes con este nuevo modelo, junto con el de Jellison y Modine, a datos experimentales de SiC y Si_3N_4 .

5.2-Funciones ventana para la integral de Kramers-Krönig.

5.2.1 Introducción

Cuando la parte real (imaginaria) del índice de refracción es conocida en todo el espectro electromagnético, la parte imaginaria (real) puede calcularse a partir de las relaciones de KK, como se ha visto en el capítulo 2. En particular, a la hora de obtener experimentalmente las constantes ópticas de un material, uno de los procedimientos más comunes es medir la transmitancia de dicho material, de la que se deduce directamente el coeficiente de extinción k , y a continuación se obtiene el índice de refracción n a partir del análisis de KK sobre k . Este procedimiento se ha utilizado en el capítulo 4 de este trabajo para obtener las constantes ópticas del Lu, Sr y SrF_2 .

El problema más habitual al realizar este tipo de cálculos, es que k puede obtenerse experimentalmente en un intervalo limitado de energías, $E_1 < E < E_2$, debido al tamaño limitado de las muestras, a las regiones espectrales útiles de los detectores y de las fuentes de radiación, y a limitaciones técnicas en general, por lo que para realizar la integral de KK y obtener n se hace necesario prolongar el intervalo a energías mayores que E_2 hasta infinito y a energías menores que E_1 , hasta 0.

El procedimiento habitual para superar este problema consiste en completar los intervalos espectrales carentes de datos con medidas experimentales procedentes de la literatura. En general, la bibliografía acerca de constantes ópticas para todos los elementos de la tabla periódica es relativamente extensa, pero se refiere principalmente a materiales en su forma masiva (bulk) [156]. En cambio, los estudios realizados sobre constantes ópticas de materiales depositados en forma de lámina delgada suelen ser más escasos y dispersos, por eso, usualmente no existen datos fiables en la literatura para complementar los datos experimentales de k .

En las regiones en que no hay datos, particularmente en los dos extremos del espectro electromagnético, se suele recurrir a extrapolaciones. A continuación se describen los recursos más habituales para realizar estas extrapolaciones:

En el intervalo 30-30000 eV, se suelen utilizar los datos semiteóricos de Henke *et al.* [101], que estiman k a partir de: i) datos experimentales (cuando los hay), ii) datos de materiales cercanos en la tabla periódica (cuando no hay datos experimentales), y iii) cálculos teóricos, basados en el efecto fotoeléctrico, con la aproximación de átomos independientes. Estos resultados semiteóricos de Henke *et al.* son más precisos en el subintervalo de altas energías, y lejos de los bordes de absorción de los materiales. Por encima de 30 keV, la absorción de los materiales se puede extrapolar con los datos teóricos de Chantler *et al.* [121], que cubren el intervalo 10 eV-433 keV, procedentes del cálculo que tiene en cuenta el efecto fotoeléctrico y el scattering Compton. Por encima de 433 keV, en el cálculo de constantes ópticas desarrollado en este trabajo se ha utilizado una extrapolación potencial de k , como se ha mencionado en el capítulo anterior. Dicha extrapolación en general no coincidirá plenamente con los valores reales, pero cumple los requisitos matemáticos para poder hacer el análisis de KK y en todo caso el peso de esa parte de muy altas energías en el cálculo de n en el intervalo de interés es muy bajo.

Por el lado de las bajas energías, las dos vías de extrapolación analítica que se han usado en este trabajo son los osciladores de Lorentz, para los dieléctricos, y el modelo de Drude para los metales. En la extrapolación en bajas energías también es común utilizar modelos no analíticos, como el de Cauchi, Sellmeier, Forouhi and Bloomer, Tauc-Lorentz, etc.

Ante el hecho de que los valores de n calculados dependerán del acierto de las extrapolaciones utilizadas en k , surge la necesidad de disponer de unas herramientas que permitan evaluar la congruencia de las constantes ópticas en los intervalos de interés. Estas herramientas podrán dar más peso bien a las regiones en las que se dispone de datos experimentales, para limitar la contribución de las extrapolaciones a la evaluación, o bien a las regiones donde se han incluido extrapolaciones, para evaluar la bondad de éstas. Así, en este capítulo se presenta un nuevo algoritmo para evaluar la congruencia de valores de constantes ópticas dando más peso a unas regiones de interés frente a otras. Dicho algoritmo consiste en la modificación de las reglas de suma tradicionales y se basa en multiplicar la función $N-1$ por una función ventana, sintonizada para minimizar el peso en el parámetro de evaluación de los valores de constantes ópticas en las regiones que no son de interés.

Este apartado se organiza de la siguiente manera: en la sección 5.2.2 se deriva una relación de KK generalizada para la función resultado de multiplicar el índice de refracción complejo por una función ventana, y se propone una función ventana. En la sección 5.2.3 se deducen unas nuevas reglas de suma que incluyen una función ventana, y se particulariza para la función ventana propuesta; en la sección 5.2.4 se aplican las nuevas reglas de suma a datos experimentales del SrF_2 y SiC , y finalmente, en la sección 5.2.5 se presentan las conclusiones de este apartado.

5.2.2 Nuevas relaciones de KK que incluyen una función ventana

Como ya se vió en la sección 2.4, el índice de refracción es una función compleja y analítica, cuyas partes real e imaginaria no son independientes, sino que están conectadas mediante las relaciones de dispersión no locales de KK:

$$\mathcal{R}[N(E) - 1] = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\Im[N(E') - 1]E'}{E'^2 - E^2} dE' \quad (5.1)$$

$$\Im[N(E) - 1] = \frac{-2E}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\mathcal{R}[N(E') - 1]}{E'^2 - E^2} dE' \quad (5.2)$$

donde $N(E) - 1 = n(E) - 1 + ik(E)$, y E es la energía, que se extiende al plano complejo. Es conveniente revisar brevemente las condiciones que ha de tener una función arbitraria compleja $J(E)$, para que sus partes real e imaginaria cumplan las relaciones de KK [157] : i) $J(E)$ ha de ser analítica en el semiplano complejo superior C^+ , donde $C^+ = \{E: \text{Im}(E) > 0\}$, ii) los polos en el eje real de la función $J(E)$ han de ser como mucho simples, iii) $J(E)$ debe tender asintóticamente a 0 para valores infinitos de $|E|$ con una dependencia de una potencia de $|E|^{-a}$, siendo $a > 1$, y iv) $J(E)$ es hermítica: $J(E)^* = J(-E^*)$.

A continuación, se construye una función compleja $J(E)$. Sea $F(E)$ una función analítica, llamada función ventana y que tendrá un perfil adecuado para dar más peso al intervalo espectral deseado. Si se descompone en sus partes real e imaginaria, se obtiene:

$$F(E) = F_1(E) + iF_2(E) \quad (5.3)$$

Si ahora se multiplica $N(E)-1$ por $F(E)$, se obtiene una nueva función $J(E)$ que se puede descomponer a su vez en sus partes real e imaginaria:

$$\Re[J(E)] = [n(E) - 1]F_1(E) - k(E)F_2(E) \quad (5.4)$$

$$\Im[J(E)] = [n(E) - 1]F_2(E) + k(E)F_1(E) \quad (5.5)$$

Si la nueva función producto $J(E)$ cumple las propiedades i-iv, entonces a ella se le pueden aplicar las relaciones de KK. En particular, se puede calcular la parte real de $J(E)$ a partir de su parte imaginaria, mediante la siguiente ecuación:

$$\Re[J(E)] = \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\Im[J(E')]E'}{E'^2 - E^2} dE' \quad (5.6)$$

También se puede deducir una expresión análoga para la parte imaginaria:

$$\Im[J(E)] = -\frac{2E}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\Re[J(E')]}{E'^2 - E^2} dE' \quad (5.7)$$

A continuación se va a elegir una función ventana $F(E)$ de forma que al multiplicarla por el índice de refracción complejo maximice la aportación de las constantes ópticas en las nuevas reglas de suma en una cierta región $[E_1, E_2]$. Una ventaja importante es que hay una relativa libertad en la elección de la función ventana $F(E)$ (aunque el producto $F(E) \cdot [N(E)-1]$ ha de cumplir los requisitos i-iv), para minimizar la contribución a las reglas de suma de la región espectral no deseada, llamando contribución no deseada a los valores de n y k en energías $E < E_1$ y $E > E_2$. El uso de unas ciertas funciones ventana para dar más peso a ciertas regiones espectrales del índice de refracción complejo frente a otras para fines diversos ha sido sugerido por otros autores, como Bimonte [157].

Una elección natural de la función ventana $F(E)$ es aquella en que tanto su parte real como su parte imaginaria tomen valores no nulos en $[E_1, E_2]$, y tiendan rápidamente a 0 fuera de ese intervalo. Una posible función que cumple los requisitos arriba propuestos son los osciladores de Lorentz:

$$O(E; A_L, E_0, C) = \frac{-A_L E_0}{(E^2 - E_0^2) + iCE} \quad (5.8)$$

donde el parámetro A_L es una constante, E_0 es la energía en la que está centrado el oscilador y C la anchura del oscilador; todos estos parámetros toman valores reales positivos. Estos osciladores son funciones analíticas, no aportan polos al semiplano superior, tienen la

paridad correcta y tienen un comportamiento asintótico en el infinito proporcional a $\frac{1}{E^2}$ en la parte real y $\frac{1}{E^3}$ la parte imaginaria, por lo que su producto por $N-1$ cumple las propiedades i-iv arriba exigidas. Sin embargo, esta función no presenta una caída en extremo rápida tanto en altas como en bajas energías.

Se propone a continuación una nueva función ventana $F(E)$ más exigente. Sea $f(E)$ una función real que toma el valor unitario en el intervalo $[E_1, E_2]$ y se anula fuera de él. La función ventana $F(E)$ se tomará tal que su parte imaginaria se aproxime a $f(E)$ en $[E_1, E_2]$:

$$\Im[F(E)] \sim f(E) = \begin{cases} 1 & E \in [E_1, E_2] \\ 0 & \text{resto} \end{cases} \quad (5.9)$$

Esto se consigue mediante un procedimiento similar al usado por Brendel y Bormann [158], los cuales mostraron que la convolución de osciladores de Lorentz con una función gaussiana da lugar a una suma de osciladores cuya envolvente es la propia gaussiana, que cumple con los requisitos de KK. Ese resultado puede extenderse a cualquier función envolvente $f(E)$, de forma que:

$$f(E) \approx \left[N \int_0^\infty f(E_0) \Im[O(E; A_L, E_0, C)] dE_0 \right] \quad (5.10)$$

donde $N=2/\pi A_L$ es una constante de normalización. Por tanto, la nueva función ventana $F(E)$ tendrá como parte imaginaria la resultante de la convolución de $f(E)$ con la parte imaginaria de los osciladores de Lorentz, y se parecerá más a $f(E)$ cuanto más se aproxime el parámetro C a cero.

$$\Im[F(E)] = \left[N \int_0^\infty f(E_0) \Im[O(E; A_L, E_0, C)] dE_0 \right] \quad (5.11)$$

Si ahora se calcula la parte real de $F(E)$ mediante la integral de KK, se obtiene:

$$\begin{aligned} \Re[F(E)] &= \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{E' \cdot \Im[F(E')]}{E'^2 - E^2} dE' = \\ &= \frac{2N}{\pi} P \int_0^\infty \frac{E' \cdot \left\{ \int_0^\infty f(E_0) \cdot \Im[O(E'; A_L, E_0, C)] dE_0 \right\}}{E'^2 - E^2} dE' \\ &= \frac{2N}{\pi} P \int_0^\infty \left\{ \int_0^\infty \frac{E' \cdot f(E_0) \cdot \Im[O(E'; A_L, E_0, C)]}{E'^2 - E^2} dE_0 \right\} dE' \end{aligned} \quad (5.12)$$

Como las funciones en la ecuación 5.12 son continuas, se puede aplicar el teorema de Fubini, el cual permite cambiar el orden de integración:

$$\Re[F(E)] = N \int_0^\infty \left\{ f(E_0) \cdot \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{E' \cdot \Im[O(E'; A_L, E_0, C)]}{E'^2 - E^2} dE' \right\} dE_0 \quad (5.13)$$

La integral más interna equivale a la expresión de KK para obtener la parte real de una función por integración de su parte imaginaria. Dado que el oscilador de Lorentz $O(E)$ es una función que cumple las propiedades que posibilitan el análisis de KK, se obtiene finalmente la parte real de $F(E)$:

$$\Re[F(E)] = N \int_0^{\infty} \{f(E_0) \cdot \Re[O(E; A_L, E_0, C)]\} dE_0 \quad (5.14)$$

Y por tanto, combinando con la parte imaginaria mostrada en la ecuación 5.11, se obtiene:

$$F(E) = N \int_0^{\infty} \{f(E_0) \cdot O(E; A_L, E_0, C)\} dE_0 \quad (5.15)$$

La ecuación 5.15 indica que la función ventana $F(E)$ buscada, que es una función compleja, se puede obtener a partir de una función real $f(E)$ en convolución con osciladores de Lorentz; la función $f(E)$ real se fija a priori con el perfil deseado (de modo que dé más peso a la parte del espectro seleccionada), y ese perfil se transfiere directamente a la parte imaginaria de $F(E)$, lo que a su vez, a través de los osciladores de Lorentz, fija la parte real.

Particularizando la función $f(E)$ a la propuesta en la ecuación 5.9, se puede obtener una solución algebraica para la función ventana, que llamaremos $H(E)$:

$$\begin{aligned} H(E) &= N \int_{E_1}^{E_2} \{1 \cdot O(E; A_L, E_0, C)\} dE_0 \\ &= \frac{1}{\pi} \{\ln(E_2 - b) + \ln(E_2 + b) - \ln(E_1 - b) - \ln(E_1 + b)\} \end{aligned} \quad (5.16)$$

donde $b = b(E) = +\sqrt{E^2 + iCE}$ y $C < E_1 < E_2$. El argumento del logaritmo está definido en el intervalo $[-\pi, \pi]$. Las singularidades $b_0 = b(E_0) = \pm E_1$ y $b_0 = \pm E_2$ bien son evitables o bien se encuentran en el semiplano inferior complejo. Esta función ventana $H(E)$ es un caso muy particular de todas las funciones ventana analíticas que se pueden obtener mediante el procedimiento arriba mostrado. De hecho, en la segunda parte de este capítulo se usará un procedimiento análogo al aquí seguido para transformar la parte imaginaria del modelo de Tauc-Lorentz propuesto por Jellison y Modine [67] en una función analítica. Para la elección particular de $H(E)$ dada en la ecuación 5.9 como función ventana, sus únicos grados de libertad son C , E_1 y E_2 . El parámetro A_L del oscilador desaparece de la ecuación 5.16 con la exigencia de la normalización (el valor del parámetro de normalización N es $2/\pi A_L$). Finalmente, y a modo de ejemplo, en la figura 5.1 se presentan las partes real e imaginaria de esta función ventana con $E_1=25$ eV, $E_2=125$ eV y varios valores de C .

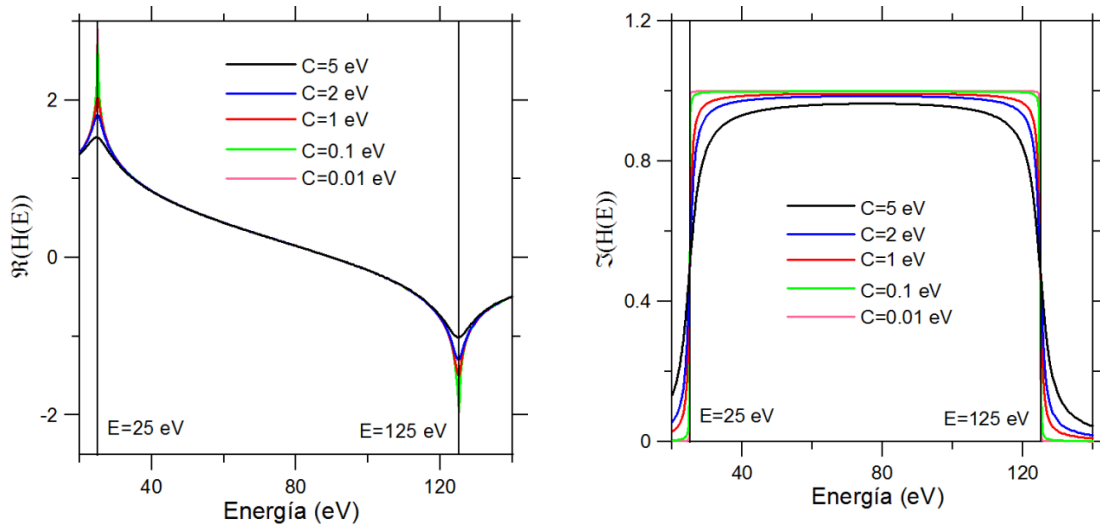


Figura. 5.1. Parte real e imaginaria de la función ventana $H(E)$ con $E_1=25$ eV, $E_2=125$ eV y varios valores de C . Izquierda, parte real, derecha, parte imaginaria.

5.2.3 Nuevas reglas de suma para el índice de refracción complejo multiplicado por una función ventana.

Unas herramientas útiles para comprobar la congruencia de las constantes ópticas son las reglas de suma. En el capítulo 2 se dedujeron reglas de suma para n y k . Hasta ahora, una manera de intentar encontrar una regla de suma con un perfil espectral más favorable a un caso particular consistía en aplicar el teorema de superconvergencia [63] a funciones del tipo:

$$[N(E) - 1]^m \quad \text{o} \quad E^m [N(E) - 1]^m \quad (5.17)$$

y buscar valores de m para los que la contribución de la región en estudio a la regla de suma fuese máxima. Esto, en caso de ser posible, no es inmediato, y los casos en los que es posible, se suelen dar con valores de m grandes, lo que provoca que pequeños errores en la determinación de n y/o k se propaguen con m , lo cual hace que este método no sea efectivo a la hora de comprobar la congruencia de las constantes ópticas en una determinada región espectral. Por el contrario, la introducción de una función ventana en el epígrafe anterior aporta una gran flexibilidad para la obtención de nuevas reglas de suma. Estas nuevas reglas de suma permitirán comprobar la congruencia de un conjunto n y k dando más peso a los valores en el intervalo espectral deseado, gracias a la elección de una función ventana $F(E)$ sintonizada en dicho intervalo. Para deducir las nuevas reglas de suma usaremos un procedimiento similar al seguido por Lucarini *et al.* [78] en su demostración para obtener las reglas de suma ordinarias. Se conoce que el comportamiento asintótico para altas energías del índice de refracción es [63]:

$$n(E) - 1 \rightarrow \frac{-\omega_p^2}{2E^2} + O(E^{-\beta}) \quad (5.18)$$

$$k(E) \rightarrow O(E^{-2} \log^{-\alpha} E) \quad (5.19)$$

Con $\beta > 2$ y $\alpha > 1$. Por otro lado, el comportamiento asintótico de la función $F(E)$ para altas energías es de la forma general:

$$\Re[F(E)] \rightarrow A + BE^{-1} + CE^{-2} + O(E^{-3}) \quad (5.20)$$

$$\Im[F(E)] \rightarrow A' + B'E^{-1} + C'E^{-2} + O(E^{-3}) \quad (5.21)$$

Si ahora se multiplica la función del índice de refracción complejo por la función ventana $F(E)$, y se tienen en cuenta las condiciones i-iv) presentadas en el apartado anterior que tiene que cumplir $F(E)$ y $F(E) \cdot [N(E) - 1]$, que implican que términos como A' , B , C' (paridad) y B' (comportamiento asintótico) han de ser nulos, se obtiene el siguiente resultado:

$$\Re[F(E) \cdot [N(E) - 1]] \rightarrow$$

$$\text{si } A = 0 \rightarrow C \frac{\omega_p^2}{2E^4} + O(E^{-6}) // \text{si } A \neq 0 \rightarrow A \frac{\omega_p^2}{2E^2} + O(E^{-4}) \quad (5.22)$$

$$\Im[F(E) \cdot [N(E) - 1]] \rightarrow$$

$$\text{si } A = 0 \rightarrow O(E^{-4} \log^{-\alpha} E) // \text{si } A \neq 0 \rightarrow O(E^{-2} \log^{-\alpha} E) \quad (5.23)$$

Por otro lado, usando el teorema de superconvergencia [78], que afirma que si una función analítica $f(x)$ es i) continuamente diferenciable, ii) tiene un comportamiento asintótico de la forma $O(x^{-1} \log^{-1} x)$, y iii) si además se cumple que:

$$g(y) = P \int_0^\infty \frac{f(x)}{y^2 - x^2} dx \quad (5.24)$$

entonces, para $y \rightarrow \infty$, se obtiene el siguiente desarrollo asintótico:

$$g(y) = \frac{1}{y^2} \int_0^\infty f(x) dx + \frac{1}{y^4} \int_0^\infty x^2 f(x) dx + \frac{1}{y^6} \int_0^\infty x^4 f(x) dx + O(y^{-8}) \quad (5.25)$$

Substituyendo los valores de la integral de KK inversa en la ecuación 5.24: $y = E$, $x = E'$, $g(E) = \frac{\pi}{2E} \Im[F(E) \cdot [N(E) - 1]]$, y $f(E') = \Re[F(E') \cdot [N(E') - 1]]$, se tiene para $E \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \Im[F(E) \cdot [N(E) - 1]] = & \\ & \frac{2}{\pi E^1} \int_0^\infty \Re[F(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + \\ & \frac{2}{\pi E^3} \int_0^\infty E'^2 \Re[F(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + \\ & \frac{2}{\pi E^5} \int_0^\infty E'^4 \Re[F(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + O(E^{-7}) \end{aligned} \quad (5.26)$$

Substituyendo los valores de la integral de KK directa, en la ecuación 5.24, y renombrando $g(E) = \Re[F(E) \cdot [N(E) - 1]]$, y $f(E') = -\frac{2}{\pi} E' \Im[F(E') \cdot [N(E') - 1]]$, se obtiene para $E \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned}
& \Re[F(E) \cdot [N(E) - 1]] = \\
& \frac{-2}{\pi E^2} \int_0^\infty E' \Im[F(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + \\
& \frac{-2}{\pi E^4} \int_0^\infty E'^3 \Im[F(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + \\
& \frac{-2}{\pi E^6} \int_0^\infty E'^5 \Im[F(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + O(E^{-8}) \quad (5.27)
\end{aligned}$$

Particularizando $F(E)$ a la función ventana $H(E)$ propuesta en la sección anterior, se tiene el comportamiento asintótico siguiente:

$$\Re[H(E)] \rightarrow \frac{E_1^2 - E_2^2}{\pi E^2} + O(E^{-4}) \quad (5.28)$$

$$\Im[H(\omega)] \rightarrow O(E^{-3}) \quad (5.29)$$

Igualando potencias de E a ambos lados de las ecuaciones 5.22 y 5.26, y 5.23 y 5.27, y truncando la serie a los órdenes más bajos de E (orden 5 en E en las ecuaciones 5.22 y 5.26, y orden 6 en las ecuaciones 5.23 y 5.27), se obtienen las reglas de suma para la función $F(E) \cdot [N(E) - 1]$:

$$\begin{aligned}
O(E^{-5}) &= \frac{2}{\pi E^1} \int_0^\infty \Re[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + \\
&\frac{2}{\pi E^3} \int_0^\infty E'^2 \Re[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + O(E^{-5}) \quad (5.30)
\end{aligned}$$

De las ecuaciones 5.22 y 5.26 y

$$\begin{aligned}
\frac{-\omega_p^2}{2E^2} \cdot \frac{E_1^2 - E_2^2}{\pi E^2} + O(E^{-6}) &= \frac{-2}{\pi E^2} \int_0^\infty E' \Im[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' \\
&+ \frac{-2}{\pi E^4} \int_0^\infty E'^3 \Im[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' + O(E^{-6}) \quad (5.31)
\end{aligned}$$

De las ecuaciones 5.23 y 5.27. De las ecuaciones 5.30 y 5.31 se extrae que:

$$\int_0^\infty E' \Im[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' = 0 \quad (5.32)$$

$$\int_0^\infty E'^3 \Im[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' = \frac{\omega_p^2}{4} \cdot (E_1^2 - E_2^2) \quad (5.33)$$

$$\int_0^\infty \Re[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' = 0 \quad (5.34)$$

$$\int_0^\infty E'^2 \Re[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' = 0 \quad (5.35)$$

Nótese que considerando la función $H(E)=1$ y siguiendo el mismo procedimiento se obtienen las reglas de suma ordinarias a partir de las ecuaciones 5.26 y 5.27.

Finalmente se puede definir un nuevo parámetro, análogo al propuesto por Altarelli y Smith [125], que permite evaluar numéricamente cuánto se aproxima a 0 la integral de, por ejemplo, la regla de suma 5.34:

$$\frac{\int_0^\infty \Re[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE'}{\int_0^\infty |\Re[H(E') \cdot [N(E') - 1]]| dE'} = \xi \quad (5.36)$$

Parámetros similares se pueden definir con las integrales 5.32 y 5.35. Al igual que Shiles *et al.* [126], se propone que el conjunto de constantes ópticas se considere congruente si $\xi \in [-0.005, +0.005]$.

Éstas son las reglas de suma particulares para la función filtro $H(E)$ propuesta en la sección anterior. Estas nuevas reglas de suma serán comprobadas y aplicadas con datos reales de SrF_2 y SiC al final de esta parte del capítulo. El resultado deducido en este apartado será una nueva herramienta muy útil a la hora de evaluar la congruencia de un conjunto de constantes ópticas, dando más peso a un intervalo electromagnético seleccionado que al resto, debido a la presencia de una función ventana sintonizada en el intervalo deseado.

5.2.4 Aplicación de las nuevas reglas de suma a datos experimentales de SrF_2 y SiC

En este apartado se presenta una aplicación práctica de las reglas de las sumas deducidas en el apartado 5.2.3 en el proceso de análisis de los datos experimentales de SrF_2 y SiC presentados previamente en el capítulo 4.

Una de las mayores dificultades que surgieron a la hora de obtener un conjunto congruente de constantes ópticas del SrF_2 en todo el espectro fue la falta de datos en el intervalo 0.1-9.8 eV. Dicho intervalo está comprendido entre el intervalo de los reststrahlen (0.01-0.1 eV), donde existían datos de Kaiser *et al.* [122] y Bosomworth [123] y el intervalo de datos de Frandon *et al.* [111], 9.8-35 eV. En el intervalo de ausencia de datos, que se corresponde con la región de transparencia del SrF_2 , no existían constantes ópticas obtenidas a partir de láminas delgadas de SrF_2 , aunque existían datos muy dispersos sobre constantes ópticas obtenidas a partir de SrF_2 cristalino. En vista de la falta de información existente de constantes ópticas del SrF_2 en lámina delgada en la zona de transparencia, la solución tomada fue ajustar a los datos de la literatura en esos intervalos un modelo discreto de osciladores de Lorentz, con intención de obtener k por interpolación en la región 0.1-9.8 eV, para luego obtener n por el análisis de KK.

El conjunto $\{n, k\}$ obtenido incluía valores experimentales de k (deducidos a partir de medidas de T) en el intervalo 25-780 eV. A estos valores de k hay que añadir los obtenidos por extrapolación en 0.1-9.8 eV mediante osciladores de Lorentz, además de los otros intervalos referidos en que había datos de la literatura. Mediante las nuevas reglas de suma “sintonizadas” en cada uno de los dos intervalos anteriormente mencionados, se puede comprobar la congruencia de las constantes ópticas en las regiones de interés. La primera regla de suma que se va a utilizar es:

$$\int_0^{\infty} \Re[H(E') \cdot [N(E') - 1]] dE' = 0 \quad (5.37)$$

Esta regla de suma se puede “sintonizar” en el intervalo deseado, eligiendo la función ventana adecuada para dicho intervalo. Por tanto, si se elige la función ventana $H(E)$ con $E_1=0.1$, $E_2=9.8$ eV y $C=0.01$ eV, se puede evaluar la congruencia del conjunto de constantes ópticas, dando más peso al intervalo de interpolación cubierto por medio de los osciladores de Lorentz y de esa manera evaluar la bondad de dicha interpolación. Los datos experimentales fueron tomados en la región 25-780 eV, por lo que también se puede calcular la regla de suma dada por 5.37 y el valor ξ análogo al de Shiles presentado en 5.36 con una función ventana $H(E)$ sintonizada en este nuevo intervalo. Las reglas de suma sintonizadas en los dos intervalos mencionados se muestran en la figura 5.2 junto con el conjunto $\{n, k\}$ del SrF_2 ; los ordinales representan la integral de las ecuaciones 5.37 (izquierda) y 5.36 (derecha) desde 0 hasta el límite superior dado por la abscisa. Si la aplicación de las ecuaciones 5.37 y 5.36 diesen un resultado exacto, las curvas tenderían a 0 en $E \rightarrow \infty$.

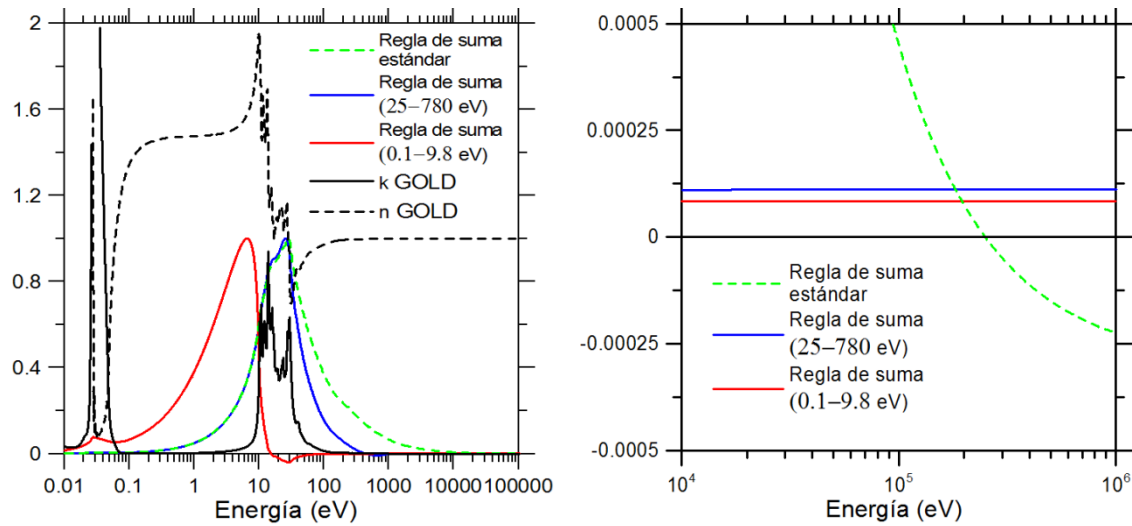


Figura. 5.2. Constantes ópticas del SrF_2 en función de la energía, junto las tres reglas de suma, una con función ventana centrada en el intervalo 0.1-9.8 eV (rojo), la segunda en el intervalo 25-780 eV (azul), y por último, la regla de suma inercial estándar (ecuación 2.103), sin función ventana (verde). Izquierda, regla de suma correspondiente a la ecuación 5.37, normalizadas a la unidad. Derecha, detalle en el intervalo de altas energías del valor ξ análogo al de Shiles correspondiente a la ecuación 5.36.

En la figura 5.2 izquierda se muestra cómo las regiones de aportación principal a las reglas de suma coinciden aproximadamente con los intervalos que han sido seleccionados mediante la función ventana. Los resultados finales del valor ξ análogo al de Shiles *et al.* [63], propuesto en la ecuación 5.36, es de $8.3 \cdot 10^{-5}$ para la regla de suma centrada en 0.1-9.8 eV, y de $1.1 \cdot 10^{-4}$ para la regla de suma centrada en 25-780 eV. El valor del parámetro ξ para las constantes ópticas del SrF_2 sin función ventana es de $-2.3 \cdot 10^{-4}$. De las reglas de suma sin función ventana y con la función ventana en el intervalo 25-780 eV se obtiene que la congruencia de los datos experimentales es excelente, y que las extrapolaciones son correctas. El valor del parámetro de Shiles obtenido mediante la regla de suma sin función ventana es más alto comparado con los valores de las reglas de suma que incluyen una función ventana. Eso es probablemente debido a que la primera asigna más peso al intervalo de energías grandes, donde las extrapolaciones utilizadas incluyen modelos teóricos del coeficiente de

extinción para los bordes de absorción; D.Y. Smith en [156] demuestra para el caso del aluminio que los errores en los modelos teóricos del coeficiente de extinción en las proximidades de los bordes de absorción afectan sensiblemente a los resultados de las reglas de suma.

Una aclaración importante es que las funciones que representan las reglas de suma se presentan en la figura 5.2 izquierda normalizadas a la unidad para favorecer la comparación gráfica; en caso contrario sería necesario mostrarlas en distintas figuras, ya que sus recorridos son diferentes.

El valor del parámetro ξ análogo al de Shiles de la regla de suma centrada en 0.1-9.8 eV es muy bajo, lo que indica que la interpolación (en la que se usaron osciladores de Lorentz) y los datos adyacentes se pueden considerar congruentes. El pico de la región de contribución principal está en 6.5 eV, y el intervalo de energías en que la curva baja a media altura del máximo es de 1.5-9.4 eV. Para este caso particular se han buscado laboriosamente potencias de $[N(E)-1]^m$ y $E^m[N(E)-1]^m$ con la finalidad de encontrar algún valor de m que diese más peso al intervalo 0.1-9.8 eV frente al resto del espectro electromagnético, y no se ha encontrado ningún valor de m adecuado. El mejor resultado se obtuvo para $m=3$ en $E^m[N(E)-1]^m$ donde el pico de la región principal de aportación a la regla de suma estaba en 13.5 eV, y el intervalo de energías en que la curva baja a media altura del máximo es de 10.1-19.5 eV, que queda fuera del intervalo deseado. El valor del parámetro de Shiles obtenido para esa regla de suma fue 0.008, mayor que el máximo permitido, 0.005.

Con la regla de suma de la ecuación 5.33 se puede comprobar la congruencia de las constantes ópticas, conocido el número de electrones del SrF_2 (con la correspondiente corrección relativista). Los resultados obtenidos se muestran en la figura 5.3:

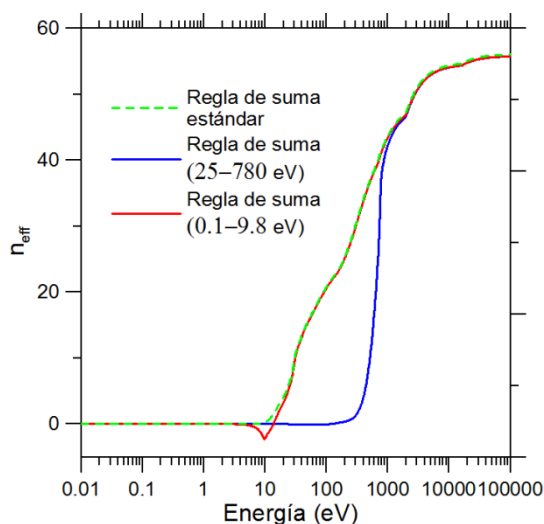


Figura. 5.3. Regla de suma f del SrF_2 en función de la energía, una con una función ventana centrada en el intervalo 0.1-9.8 eV (rojo), la segunda en el intervalo 25-780 eV (azul), y por último, la regla de suma estándar, sin función ventana (verde, ecuación 2.101).

Para el caso de la función ventana centrada en el intervalo 0.1-9.8 eV, se obtiene $Z=55.98$, y para la función ventana centrada en el intervalo 25-780 eV, se obtiene $Z=55.97$. El valor de Z esperado, igual al número de electrones de la molécula corregido con el término

relativista, es de 55.71. En este caso, la regla de suma ordinaria sin función ventana da como resultado exactamente ese mismo valor; es un resultado magnífico, si bien, con los errores previsibles en los valores de constantes ópticas utilizados, esta coincidencia puede tener un componente fortuito. Los valores obtenidos para la regla de suma con ventanas centradas en 25-780 eV y 0.9-9.8 eV son un 0.47% y un 0.48% superiores al valor teórico, respectivamente, que pueden considerarse unas desviaciones ínfimas. El número de electrones involucrados en el intervalo 0.1-9.8 eV y 25-780 eV utilizando, bien la regla de suma estándar o bien la función ventana centrada en cada uno de los intervalos, resulta ser 0.15 y 2.33 para el intervalo 0.1-9.8 eV, respectivamente, y 34.73 y 37.43 para el intervalo 25-780 eV, respectivamente. El beneficio del uso de una función ventana centrada en los intervalos seleccionados es, por tanto, hacer que esos intervalos contribuyan a la regla de suma con un número mayor de electrones que en las reglas ordinarias.

Por tanto en el caso del SrF_2 se puede concluir que tanto los datos obtenidos como el conjunto de extrapolaciones utilizadas son satisfactorios y permite considerar que el conjunto de n y k obtenido en todo el espectro electromagnético es congruente.

En el caso del SiC una de las dificultades principales que se presentaron cuando fue analizado en el capítulo anterior fue la necesidad de emplear múltiples conjuntos de extrapolaciones, ya que el intervalo en el que se disponía de valores experimentales de n y k era relativamente reducido. Para analizar la congruencia de las constantes ópticas obtenidas en el capítulo anterior se utilizó la regla de suma inercial con $n-1$, obteniendo el valor del parámetro de Shiles de $\xi=2\cdot 10^{-4}$, siendo la región principal de contribución el intervalo 0.02-5000 eV, con un pico en 10.7 eV, y la regla de suma inercial con ϵ_1 , donde se obtuvo el valor del parámetro de Shiles de $\xi=5\cdot 10^{-5}$, con la misma región principal de contribución a la suma, pero con el pico desplazado a 6.4 eV. Mediante el uso de la nueva regla de suma de la ecuación 5.37, con una función ventana centrada en el intervalo 1.3-6.5 eV (intervalo donde se obtuvieron las constantes ópticas por elipsometría) y $C=0.1$ eV, se ha obtenido un valor del parámetro de Shiles de $\xi=3.1\cdot 10^{-5}$, reduciendo la región principal de contribución a la regla de suma al intervalo 0.008-35 eV, y el pico en 3.4 eV, energía dentro del intervalo medido. También se puede usar la nueva regla de suma de la ecuación 5.32, en cuyo caso el valor del parámetro de Shiles es de $\xi=6.6\cdot 10^{-5}$ cuyo intervalo de contribución principal a la regla de suma es 1-85 eV, y el pico en 6.4 eV, energía dentro del intervalo medido. El resultado obtenido con la regla de suma de la ecuación 5.32 es muy bueno, ya que más de la mitad de la contribución a la integral corresponde a la zona medida. Se puede conseguir que la mayor parte de la contribución provenga del intervalo medido, reduciendo el valor de E_2 a la mitad, 3.25 eV; aunque se obtiene un parámetro de Shiles de $\xi=1.1\cdot 10^{-4}$ un poco más grande que con $E_2=6.5$ eV (aun así cómodamente dentro del intervalo permitido), se obtiene que el intervalo de energías en que la curva baja a media altura del máximo es ~ 2.3 -5.5 eV, con el pico en 3.2 eV. Esto sugiere que los valores de constantes ópticas obtenidos en el intervalo de elipsometría (~ 1.3 -6.5 eV) son muy precisos. En la figura 5.4 se muestran todos los resultados descritos anteriormente.

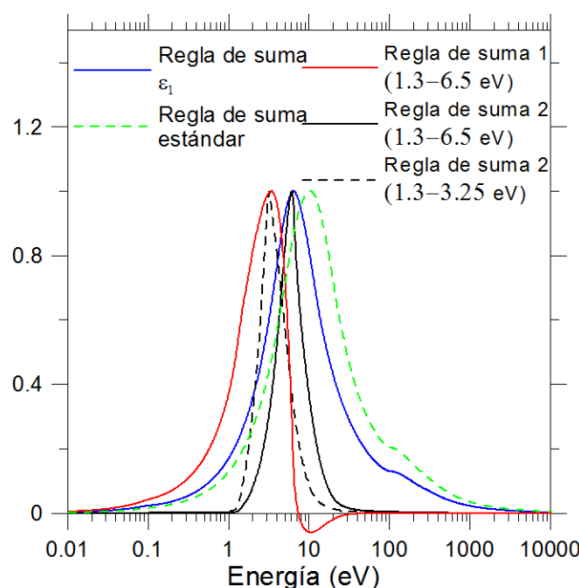


Figura. 5.4. Regla de suma inercial del SiC en función de la energía, una con una función ventana centrada en el intervalo 1.3-6.5 eV (rojo, ecuación 5.37 y negro, ecuación 5.32), regla de suma inercial para ϵ_1 (azul), y la regla de suma inercial estándar (verde, ecuación 2.103). Negro discontinuo: ecuación 5.32 con una función ventana centrada en el intervalo 1.3-3.25 eV.

Usando las nuevas reglas de suma, en ambos casos se ha conseguido dar más peso a la región en la que se dispone de datos experimentales frente a las regiones donde se han empleado extrapolaciones, acercando las regiones principales de contribución a las reglas de suma y desplazando el máximo de esa contribución hacia la región en la que se dispone de datos experimentales. Con este análisis de los datos del SiC se concluye que tanto los datos experimentales como las extrapolaciones usadas son correctos y el conjunto de n y k obtenido en todo el espectro electromagnético es congruente.

Estas nuevas reglas de suma permiten, de una manera rápida y sencilla, comprobar la congruencia de un conjunto de constantes ópticas, dando más peso en la integral a la región deseada, gracias a la aplicación de una función ventana. Como ya se mencionó en el apartado de las reglas de suma, este procedimiento sustituye a aquel en el que se buscaban potencias de $[N(E)-1]^m$ y $E^m[N(E)-1]^m$ con la finalidad de encontrar algún valor de m que diese más peso a la región deseada que al resto del espectro electromagnético.

5.2.5 Conclusiones

En ese apartado se han deducido unas nuevas relaciones de KK y reglas de suma asociadas para el índice de refracción complejo multiplicado por una función ventana, de forma que dichas reglas de suma se pueden sintonizar en cualquier intervalo de interés para comprobar, en dicho intervalo, la congruencia de las constantes ópticas obtenidas.

Finalmente se han presentado los casos del SrF_2 y SiC; en ambos materiales se ha analizado la congruencia de las constantes ópticas obtenidas en el intervalo de medida mediante las nuevas reglas de suma. Además, en el caso del SrF_2 , en el que se realizó una extrapolación con un conjunto de osciladores en una región donde no había datos previos, se han utilizado las nuevas reglas de suma para analizar la bondad de la extrapolación.

5.3-Modificación del modelo de Tauc-Lorentz para convertirlo en un modelo analítico.

5.3.1 Introducción

Algunos grupos de materiales de la naturaleza presentan propiedades ópticas afines entre sí. Esto permite el uso de modelos comunes que describen sus propiedades ópticas en ciertos intervalos espectrales, modelos que dependen de unos pocos parámetros que hay que determinar para cada material. Este es el caso de muchos materiales dieléctricos en el visible y alrededores, cuyo índice de refracción puede describirse con modelos sencillos como los de Cauchy y Sellmeier. A diferencia de lo anterior, en el capítulo 4 se ha presentado la obtención de constantes ópticas de varios materiales en amplios intervalos; estas constantes ópticas se han obtenido en cada longitud de onda sin el uso de modelos.

En el caso de materiales semiconductores su constante dieléctrica puede ser descrita mediante modelos semiempíricos basados en cálculos de la estructura electrónica, como por ejemplo el modelo de Forouhi and Bloomer, o más recientemente, el modelo de Tauc-Lorentz (TL). Este último es el modelo de constante dieléctrica más extendido para semiconductores amorfos, y se ha convertido en estándar en muchos paquetes de software de análisis de medidas experimentales, en particular de medidas elipsométricas, como por ejemplo en el programa WinElli II, incluido en el elipsómetro SOPRA GES 5 disponible en el laboratorio [159].

Si bien no se han utilizado algún tipo de modelo como los referidos para describir los materiales caracterizados en este trabajo, estos modelos han despertado nuestro interés por dos motivos. Por un lado porque varios de los materiales con los que hemos trabajado son semiconductores. Por otro, el estudio realizado sobre la congruencia de las constantes ópticas y sobre los requisitos para que se pueda aplicar el análisis de KK nos ha hecho encontrarnos con estos modelos y observar que no cumplen los requisitos matemáticos. Por ello se incorpora este estudio que modifica los modelos hasta hacerlos matemáticamente correctos.

A continuación se describe el modelo parametrizado de TL, propuesto por Jellison y Modine [67]. Este modelo está basado en un resultado previo de Tauc *et al.* [154], los cuales interpretaron la presencia de un gap en semiconductores amorfos como la energía de las transiciones sin conservación de momento entre estados extendidos de las bandas de valencia y de conducción, suponiendo un comportamiento parabólico de dichas bandas y elementos de matriz constantes en el operador momento [153] [77]. Dicha interpretación dio como resultado la siguiente expresión para la parte imaginaria de la función dieléctrica:

$$\varepsilon_2 = \Theta(E - E_g) A_T \frac{(E - E_g)^2}{E^2} \quad (5.38)$$

donde A_T y E_g son una constante de ajuste y la energía del gap, respectivamente, y Θ es la función escalón de Heaviside, lo que hace que ε_2 se anule para energías inferiores al gap. Anteriormente, Forouhi y Bloomer [160] (FyB) publicaron un modelo para describir k de materiales semiconductores y aislantes amorfos, suponiendo que tanto la banda de valencia como la de conducción pueden ser descritas con una función parabólica; después extendieron

dicha formulación para semiconductores cristalinos y metales [161]. La expresión que obtuvieron para n y k fue:

$$k_{FB} = \frac{A(E - E_g)^2}{E^2 - BE + C} \quad (5.39)$$

$$n_{FB} = n_\infty + \frac{B_0 E + C_0}{E^2 - BE + C} \quad (5.40)$$

donde los parámetros de ajuste son A , B , C , n_∞ y la energía del gap E_g . B_0 y C_0 están relacionados directamente con los parámetros anteriores. Éste método fue usado por McGrahan y Woollam [162] para describir materiales amorfos, aunque el resultado dio valores negativos de E_g para algunos materiales, lo que condujo a que McGrahan *et al.* [163] modificaran el modelo de FyB de forma que incluyera estados por debajo del gap y bandas no parabólicas.

En su trabajo, Jellison y Modine (JyM) mostraron los problemas que tienen la formulación de FyB y la formulación de FyB corregida por McGrahan. Dichos autores sostienen que: i) En la formulación de FyB, $k > 0$ para $E < E_g$, lo cual afirman que no es cierto, y citan como ejemplo que para $E < E_g$, la mayoría de los cristales son transparentes, esto es, tienen $k=0$. Este hecho es reconocido por McGrahan *et al.* [163] en su trabajo. ii) Ambos métodos, el de FyB y McGrahan *et al.* dan como resultado que k se hace constante (no nula) cuando E tiende a infinito; en cambio, JyM afirman que k tiende a cero con una dependencia E^{-3} o más rápido en energías suficientemente grandes. iii) JyM afirman que ambos métodos, FyB y McGrahan *et al.* no incorporan las condiciones de paridad requeridas para k , esto es, no se cumple $k(E) = -k(-E)$.

Tras esta discusión, JyM presentaron una nueva parametrización, basada en la combinación entre el modelo de densidad de estados de Tauc y el oscilador de Lorentz, que se deduce a partir del cálculo de ϵ_2 en el marco de la mecánica cuántica estándar [67]. Así ϵ_2 viene dado por:

$$\epsilon_2 = \frac{A_L E_0 C E}{(E^2 - E_0^2)^2 + C^2 E^2} \quad (5.41)$$

donde E_0 es la posición del oscilador, C es el ancho del oscilador y A_L es una constante. Si se multiplica por la ecuación 5.38, se obtiene el modelo de Tauc-Lorentz (TL) propuesto por JyM:

$$\epsilon_2 = \Theta(E - E_g) \frac{(E - E_g)^2 A E_0 C}{(E^2 - E_0^2)^2 + C^2 E^2} \cdot \frac{1}{E} \quad (5.42)$$

Este modelo presenta cuatro parámetros de ajuste: $A = A_L \cdot A_T$, E_0 , C y E_g , todos ellos en unidades de energía. Una vez propuesto este modelo para ϵ_2 , los autores obtienen ϵ_1 a partir de la integral de KK, añadiendo un nuevo parámetro de ajuste, $\epsilon_1(\infty)$:

$$\epsilon_1(E) = \epsilon_1(\infty) + \frac{2}{\pi} P \int_{E_g}^{\infty} \frac{\epsilon_2(E') E'}{E'^2 - E^2} dE' \quad (5.43)$$

La solución de esta ecuación se presenta en [67]; no se reproducirá aquí por su extensión. Éste es el modelo propuesto por JyM, que se suele denominar de TL, el cuál ha sido ampliamente usado para describir la constante dieléctrica de semiconductores amorfos por

encima de su gap, o para determinar la energía de éste [164]. Una vez presentado el modelo de TL, pasaremos a enunciar una serie de defectos que tiene dicho modelo. Como recordatorio, los requisitos necesarios sobre ϵ_2 para poder aplicar el análisis de KK son: i) ha de ser analítica e ii) impar, iii) no ha de tener polos en el semiplano inferior y iv) debe tener un comportamiento asintótico determinado para energías altas.

- a) La constante dieléctrica propuesta no es una función analítica al estar definida por tramos. En este caso, claramente la función no es analítica en $E = E_g$.
- b) ϵ_2 no es impar.
- c) El modelo asigna unos valores nulos de k y ϵ_2 para $E < E_g$. Sin embargo, los datos experimentales de absorción en materiales amorfos demuestran que, si bien la absorción es pequeña, dichos valores no son nulos, debido a que el desorden en la red amorfa introduce una densidad de estados accesibles a los electrones con energías inferiores a E_g [165] [77].

De a) y b) se deduce que ϵ_2 no cumple los requisitos i) e ii) necesarios para aplicar el análisis de KK, luego la componente ϵ_1 , obtenida mediante las fórmulas del análisis de KK, es incorrecta.

Estas deficiencias en el modelo causan incongruencias en los resultados, como los detectados por Ferlauto *et al.* [166], quienes emplearon el modelo de TL para ajustar los valores experimentales de la constante dieléctrica obtenidos con compuestos de Si. Estos autores obtuvieron valores de $\epsilon_1(\infty)$ próximos a cero e incluso negativos en el análisis de compuestos $\alpha\text{-Si}_{1-x}\text{Ge}_x$:H. La constante $\epsilon_1(\infty)$, debería ser estrictamente la unidad si ϵ_2 cumpliera los requisitos antedichos y ϵ_1 fuese la transformada de ϵ_2 mediante el análisis de KK; en cambio este parámetro es introducido en ϵ_1 por JyM para mejorar el ajuste y es un parámetro que se hace depender del límite superior de los datos experimentales disponibles. El parámetro $\epsilon_1(\infty)$ simplifica con una constante la contribución de las desviaciones del modelo de TL frente al comportamiento real de los materiales en energías mayores que el límite superior de los datos experimentales disponibles para el ajuste. Por la forma de la integral de KK, esa contribución no puede ser constante ya que depende de la energía.

Es importante resaltar que el modelo de TL se suele tomar como un modelo correcto matemáticamente, tanto por sus autores como por artículos que lo citan, y es un modelo que surgió para corregir los defectos matemáticos del modelo FB, tal como el de la paridad. Sin embargo aquí se ha mostrado que no es correcto matemáticamente ya que no cumple dos de los requisitos necesarios.

El modelo de TL es actualmente uno de los más usados en el ajuste de datos experimentales de materiales dieléctricos. Aunque presenta las incongruencias teóricas que se han descrito anteriormente, en la práctica resulta útil para realizar un ajuste paramétrico. Por ello, en la siguiente sección se modificará este modelo para convertirlo en un nuevo modelo analítico, el cual pueda ser usado al menos en los mismos casos que el propuesto por JyM.

Este apartado se organiza de la siguiente manera: en la sección 5.3.2 se presenta la modificación del modelo de TL que lo convierte en una función compleja analítica. En la sección 5.3.3, se comparará el modelo de TL con el obtenido en este trabajo en el ajuste de

datos experimentales del SiC y Si₃N₄. Finalmente, en la sección 5.3.4 se presentan las conclusiones.

5.3.2 Nuevo modelo analítico de Tauc-Lorentz

Análogamente al desarrollo realizado en la sección 5.2.2, basado a su vez en el trabajo de Brendel y Bormann [158], una función real $v_2(E)$ puede ser aproximada mediante la suma de un conjunto de N osciladores de Lorentz $O(E; A, E_0, C_1)$. La convolución de dicha función con osciladores de Lorentz da como resultado una función, $v_2'(E, C_1)$, que es una suma continua de osciladores que usa como envolvente a $v_2(E)$ y que cumple las propiedades necesarias para poder realizar el análisis de KK:

$$v_2'(E, C_1) = N \int_{-\infty}^{\infty} v_2(E_0) \cdot \Im[O(E; A_L, E_0, C_1)] dE_0 \cong v_2(E) \quad (5.44)$$

donde $N=2/\pi A_L$ es una constante de normalización. Esta nueva función tenderá tanto más a $v_2(E)$ cuanto más pequeño sea el valor de C_1 , como ya se mostró en la figura 5.1. Al ser $v_2'(E)$ una función analítica compuesta por la suma de funciones que cumplen las propiedades de KK, podemos calcular la parte real mediante dicha integral, siguiendo un procedimiento similar al usado en la sección 5.2.2:

$$\begin{aligned} v_1'(E, C_1) &= \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{E' \cdot v_2'(E', C_1)}{E'^2 - E^2} dE' = \\ &= \frac{2N}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{E' \cdot \int_{-\infty}^{\infty} v_2(E_1) \cdot \Im[O(E'; A_L, E_1, C_1)] dE_1}{E'^2 - E^2} dE' = \\ &= \frac{2N}{\pi} P \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{E' \cdot v_2(E_1) \cdot \Im[O(E'; A_L, E_1, C_1)]}{E'^2 - E^2} dE_1 dE' \end{aligned} \quad (5.45)$$

Las funciones en la ecuación 5.45 son continuas, requisito necesario para aplicar el teorema de Fubini, el cual permite cambiar el orden de integración:

$$v_1'(E, C_1) = N \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ v_2(E_1) \cdot \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{E' \cdot \Im[O(E'; A_L, E_1, C_1)]}{E'^2 - E^2} dE' \right\} dE_1 \quad (5.46)$$

Dado que el oscilador de Lorentz es una función que cumple las propiedades necesarias para poder realizar el análisis de KK, se obtiene finalmente el valor de v_1' :

$$v_1'(E, C_1) = N \int_{-\infty}^{\infty} \{v_2(E_1) \cdot \Re[O(E; A_L, E_1, C_1)]\} dE_1 \quad (5.47)$$

De forma que

$$v_1'(E, C_1) + i v_2'(E, C_1) = N \int_{-\infty}^{\infty} \{v_2(E_1) \cdot O(E; A_L, E_1, C_1)\} dE_1 \quad (5.48)$$

Esto es, las partes real e imaginaria de v' se obtienen como una superposición de las partes real e imaginaria de los osciladores de Lorentz con la misma función envolvente: la función real v_2 . Particularizando la envolvente $v_2(E)$ al modelo de TL, $\varepsilon_{2TL}(E; A, E_0, C, E_g)$, obtenemos una nueva función analítica para las parte imaginaria y real, la cual llamaremos ε_{2TL}^{mod} y ε_{1TL}^{mod} , respectivamente, y se presentan en las ecuaciones 5.49 y 5.50:

$$\varepsilon_{2TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g) = N \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_{2TL}(E_1, A, E_0, C, E_g) \cdot \Im[O(E; A_L, E_1, C_1)] dE_1 \quad (5.49)$$

$$\varepsilon_{1TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g) = N \int_{-\infty}^{\infty} \{ \varepsilon_{2TL}(E_1, A, E_0, C, E_g) \cdot \Re[O(E; A_L, E_1, C_1)] \} dE_1 \quad (5.50)$$

El modelo completo de TL modificado $\varepsilon_{TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g)$ se describe por tanto como:

$$\varepsilon_{TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g) = N \int_{-\infty}^{\infty} \{ \varepsilon_{2TL}(E_1, A, E_0, C, E_g) \cdot O(E; A_L, E_1, C_1) \} dE_1 \quad (5.51)$$

El modelo que se propone en este trabajo para sustituir al de JyM tiene una solución algebraica que se muestra en la ecuación 5.52. Si en la ecuación 5.51 se substituye el valor de ε_{2TL} dado en la ecuación 5.4, se obtiene:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g) = & \\ & = N \int_{E_g}^{\infty} \left\{ \frac{(E_1 - E_g)^2 A E_0 C}{(E_1^2 - E_0^2)^2 + C^2 E_1^2} \cdot \frac{1}{E_1} \cdot \frac{-A_L E_1}{(E^2 - E_1^2) + i C E} \right\} dE_1 \\ & = \frac{A E_0 C}{\pi} \left\{ -\frac{(b - E_g)^2 \ln(E_g - b)}{b(b^2 - g^2)(b^2 - d^2)} + \frac{(b + E_g)^2 \ln(E_g + b)}{b(b^2 - g^2)(b^2 - d^2)} \right. \\ & \quad + \frac{(d - E_g)^2 \ln(E_g - d)}{d(d^2 - g^2)(b^2 - d^2)} - \frac{(d + E_g)^2 \ln(E_g + d)}{d(d^2 - g^2)(b^2 - d^2)} \\ & \quad \left. - \frac{(g - E_g)^2 \ln(E_g - g)}{g(d^2 - g^2)(b^2 - g^2)} + \frac{(g + E_g)^2 \ln(E_g + g)}{g(d^2 - g^2)(b^2 - g^2)} \right\} \end{aligned} \quad (5.52)$$

donde $b = b(E) = +\sqrt{E^2 + i C_1 E}$, $C_1 > 0$, $d = \frac{1}{2}\sqrt{4E_0^2 - C^2} - i\frac{1}{2}C$, $b^*(E) = b(-E)$ y $g = d^*$. El argumento del logaritmo está definido en el intervalo $[-\pi, \pi]$. Las singularidades $b_0 = \pm E_g$, $b_0 = 0$, $b_0 = g$ y $b_0 = -d$ son singularidades evitables, y las correspondientes a $b_0 = d$ y $b_0 = -g$ están en el semiplano inferior complejo. Este nuevo modelo se denomina en lo sucesivo modelo de Tauc Lorentz-modificado (TL-mod). En TL-mod ya no es necesario el parámetro $\varepsilon_1(\infty)$, ya que el valor obtenido para ε_1 es directamente el que corresponde a las relaciones de KK y no necesita de ninguna corrección. Nótese que la distribución $\theta(E - E_g)$ presente en $\varepsilon_{2TL}(E_1, A, E_0, C, E_g)$ hace que en la integral 5.52 no exista ningún oscilador centrado en energías por debajo de E_g ; sin embargo, la función $\varepsilon_{TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g)$

tomará valores no nulos por debajo de E_g , debido a la anchura de banda, gobernada por el parámetro C_1 , de la suma de osciladores de Lorentz situados en energías superiores a E_g . Esto resuelve una de las deficiencias descritas arriba para el modelo de TL, dado que en la práctica ε_2 no puede hacerse estrictamente nulo por debajo del gap.

La nueva función obtenida cumple los requisitos de KK, y reproduce aproximadamente la forma básica del modelo de TL; en el límite cuando $C_1=0$, la nueva función reproduce exactamente el modelo de TL, pero es precisamente en ese límite matemático donde no se cumplen las condiciones para el análisis de KK.

Una ventaja de la nueva función es que, para obtener un modelo de ε es suficiente disponer de datos experimentales de una de las dos partes, bien de ε_1 o bien de ε_2 (aunque también se puede ajustar a ε_1 y ε_2 simultáneamente) ya que ambas componentes están asociadas mediante las relaciones de KK y, por lo tanto, del ajuste de una parte de ε se obtiene automáticamente la otra; en cambio, el modelo de TL necesita disponer de datos experimentales tanto de ε_1 como de ε_2 , ya que la mayoría de los parámetros se obtiene con un ajuste a ε_2 , pero el parámetro $\varepsilon_1(\infty)$, necesario para ajustar el modelo, ha de ser determinado exclusivamente en el ajuste a ε_1 .

La parte imaginaria de los osciladores de Lorentz en bajas energías tiende a cero como $Im\{O(E)\} \propto E$, lo que hace que el modelo TL-mod tenga esa misma dependencia funcional en energías por debajo de la del gap, la cual, si bien es más realista que el valor nulo del modelo de TL, puede no ser la más adecuada para algunos materiales. Así, hay muchos materiales dieléctricos para los que la caída de la absorción en un intervalo de energías inmediatamente por debajo de la energía del gap se viene ajustando empíricamente por una función exponencial:

$$\alpha(E) = \alpha_0 \exp\left(\frac{E}{E_0}\right) \quad (5.53)$$

a esta caída exponencial se le suele llamar la cola de Urbach [167]. Esta caída no la reproduce el modelo TL, que hace que k se anule súbitamente por debajo de la energía del gap. La transformación del modelo TL propuesta en esta sección puede modificarse para incorporar el modelo empírico de la cola de Urbach. El modelo corregido que se ha desarrollado arriba, si bien evita la caída súbita del modelo TL, no es particularmente adecuado para describir un comportamiento como la cola de Urbach. Foldyna *et al.* [168] hicieron una modificación del modelo TL para incorporar la cola de Urbach (lo llamaron modelo TLU). Para ello sustituyeron el tramo de energías cortas, desde una energía E_c superior a la del gap hasta cero, por un tramo con comportamiento exponencial. Su modelo es de la forma:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2TLU}(E; A_u, E_u, E_c) &= \frac{A_u}{E} \exp\left(\frac{E}{E_u}\right) \quad E < E_c \\ \varepsilon_{2TLU} &= \frac{(E - E_g)^2 A E_0 C}{(E^2 - E_0^2)^2 + C^2 E^2} \cdot \frac{1}{E} \quad E \geq E_c \end{aligned} \quad (5.54)$$

donde E_u y A_u son parámetros que en [168] están elegidos de tal forma que garantizan la continuidad de ε_2 y su primera derivada en E_c ; el valor de estos parámetros depende de E_c y de los parámetros del modelo de TL, y se muestran en las ecuaciones 5.55 y 5.56:

$$E_u = (E_c - E_g) \left[2 - 2E_c(E_c - E_g) \frac{C^2 + 2(E_c^2 - E_0^2)}{C^2 E_c^2 + (E_c^2 - E_0^2)^2} \right]^{-1} \quad (5.55)$$

$$A_u = \exp\left(-\frac{E_c}{E_u}\right) \frac{AE_0 C(E_c - E_g)^2}{C^2 E_c^2 + (E_c^2 - E_0^2)^2} \quad (5.56)$$

Este modelo se ajusta en un rango de energías particular de cada material. El modelo TLU sigue adoleciendo de los mismos problemas que el original de TL: no cumple las condiciones de paridad, no es analítico (las derivadas a partir de la segunda no son continuas en E_c); a ello se suma que en energías próximas a cero el modelo diverge. En la ecuación 5.57 se propone un modelo para convertir en analítico el modelo TLU mediante un procedimiento análogo al seguido con respecto al modelo TL. Este modelo modificado se llamará TLU-mod y viene dado por:

$$\varepsilon_{TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g, E_c) + \varepsilon_U^{mod}(E; C_1, E_{inf}, E_c) \quad (5.57)$$

en que el primer termino es similar al del modelo TL-mod, salvo que la integral se extiende desde la energía $E_c(>E_g)$ hasta infinito, y el segundo es el nuevo término que se añade para incorporar la cola de Urbach; en este término se ha añadido una energía límite inferior, E_{inf} , al intervalo donde los materiales siguen el modelo de Drude. Esto evita la divergencia del modelo en energía cero. Las funciones de los dos términos de la ecuación 5.57 son las siguientes:

$$\begin{aligned} \varepsilon_U^{mod}(E; C_1, E_{inf}, E_c) &= N \int_{E_{inf}}^{E_c} \{\varepsilon_{2U}(E_1; E_c) \cdot O(E; A_L, E_1, C_1)\} dE_1 = \\ &= \frac{A_u}{\pi b} \left\{ \exp\left(\frac{b}{E_u}\right) \left[Ei\left(\frac{E_c - b}{E_u}\right) - Ei\left(\frac{E_{inf} - b}{E_u}\right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \exp\left(\frac{-b}{E_u}\right) \left[Ei\left(\frac{E_{inf} + b}{E_u}\right) - Ei\left(\frac{E_c + b}{E_u}\right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.58)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{TL}^{mod}(E; A, E_0, C, C_1, E_g, E_c) &= \\ &= N \int_{E_c}^{\infty} \{\varepsilon_{2TL}(E_1, A, E_0, C, E_g) \cdot O(E; A_L, E_1, C_1)\} dE_1 = \\ &= \frac{AE_0 C}{\pi} \left\{ -\frac{(b - E_g)^2 \ln(E_c - b)}{b(b^2 - g^2)(b^2 - d^2)} + \frac{(b + E_g)^2 \ln(E_c + b)}{b(b^2 - g^2)(b^2 - d^2)} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{(d - E_g)^2 \ln(E_c - d)}{d(d^2 - g^2)(b^2 - d^2)} - \frac{(d + E_g)^2 \ln(E_c + d)}{d(d^2 - g^2)(b^2 - d^2)} \\
& - \frac{(g - E_g)^2 \ln(E_c - g)}{g(d^2 - g^2)(b^2 - g^2)} + \frac{(g + E_g)^2 \ln(E_c + g)}{g(d^2 - g^2)(b^2 - g^2)} \Big\} \quad (5.59)
\end{aligned}$$

donde $b = b(E) = +\sqrt{E^2 + iC_1E}$; $Ei(x) = P \int_{-\infty}^x \frac{e^t}{t} dt$ es la integral exponencial, que es analítica en el semiplano superior complejo, y $E_{\text{inf}} > 0$. Los valores de E_u y A_u no son libres y toman los valores de las ecuaciones 5.55 y 5.56.

El modelo TLU-mod presenta tres ventajas frente al modelo TLU: i) El nuevo modelo es analítico, ii) ϵ_1 está definido en $E=E_c$ (en el modelo TLU no lo está [168]) y iii), como consecuencia de lo anterior, este modelo modificado, al igual que el de TL-mod, puede ajustarse a datos experimentales que incluyan, por ejemplo, únicamente datos de ϵ_2 (y no necesariamente de ambos ϵ_1 y ϵ_2) y proporciona simultáneamente ϵ_1 y ϵ_2 . En cambio, con datos de ϵ_2 el modelo de TL y TLU sólo pueden proporcionar valores de ϵ_2 y no de ϵ_1 , ya que en la ecuación de esta última función necesitan introducir un parámetro de ajuste suplementario $\epsilon_1(\infty)$. Esta característica del modelo TLU-mod y también del modelo TL-mod puede ser particularmente útil para obtener la n conjugada de la k obtenida de medidas de transmitancia en un cierto intervalo espectral, sin necesidad de aplicar KK. Un procedimiento similar se puede aplicar para medidas de elipsometría o reflectometría.

5.3.3 Aplicación a datos experimentales: SiC y Si₃N₄

En este apartado, en primer lugar se ajustan los datos experimentales del SiC (caracterizado en este trabajo) mediante los modelos de TL y TL-mod y se comparan los ajustes obtenidos. En segundo lugar, se ajustan los datos experimentales de otro semiconductor, Si₃N₄, con el modelo TLU-mod, que incluye una cola de Urbach.

En el caso del SiC, se han usado ambos métodos para ajustar las constantes ópticas experimentales presentadas en el capítulo anterior, en el intervalo 0.4-10 eV. Los ajustes se muestran en la figura 5.5:

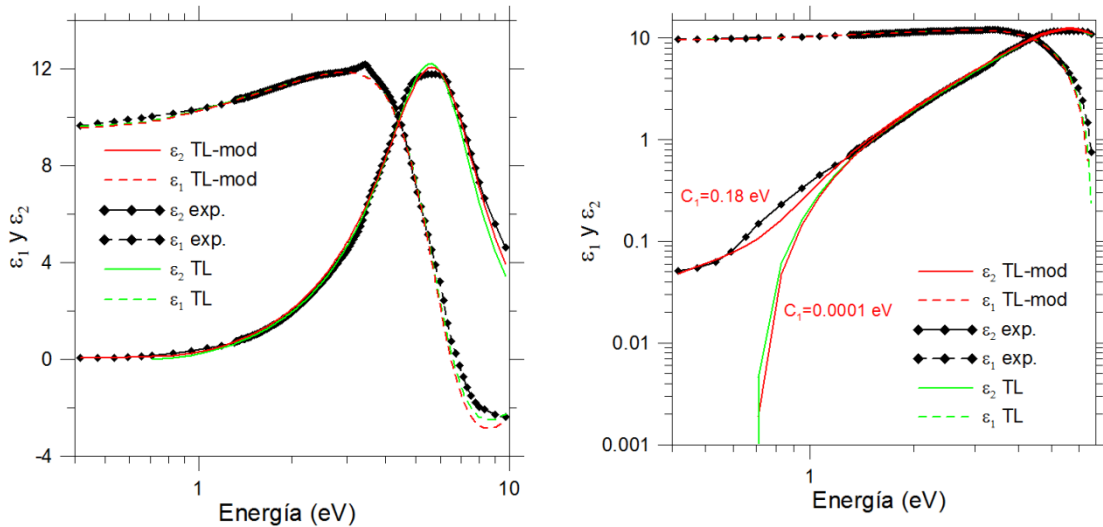


Fig. 5.5. Constantes ópticas del SiC en función de la energía, junto con los ajustes siguiendo el modelo TL y TL-mod en escala semi-logarítmica (izquierda) y doble logarítmica (derecha). Nótese que para valores pequeños de C_1 , los modelos de TL y TL-mod tienden a coincidir.

La figura 5.5 izquierda muestra una coincidencia muy buena entre los dos modelos y los datos experimentales, tanto en ϵ_1 como en ϵ_2 , aunque en la figura 5.5 derecha en el entorno de la energía del gap, el ajuste con el modelo TL-mod es mucho mejor. Respecto el gap de Tauc, el valor obtenido mediante el ajuste a la ecuación $\sqrt{\epsilon_2 E^2} \propto (E - E_g)$ con el modelo de TL-mod es de 1.58 eV, compatible con 1.65 eV, valor obtenido en la sección 4.7.4. Sin embargo el valor obtenido en el ajuste del parámetro E_g del modelo de TL-mod es de 0.72 eV, lo cual pone de manifiesto que el parámetro E_g en los modelos TL y TL-mod no es más que un mero parámetro de ajuste. En la tabla 1 se muestran los parámetros para cada uno de los modelos utilizados en el ajuste.

Modelo	A (eV)	E_0 (eV)	C (eV)	E_g (eV)	$\epsilon_1(\infty)$	C_1 (eV)
TL	81.84	6.01	5.38	0.70	1.25	-
TL-mod	87.23	6.07	5.56	0.72	-	0.18

Tabla 1. Parámetros empleados en el ajuste del SiC con los modelos TL y TL-mod.

En particular, el modelo TL asigna un valor nulo a ϵ_2 en energías por debajo del gap. Sin embargo, una de las ventajas del modelo aquí propuesto es que, aunque todos los osciladores están situados por encima del valor del gap, hay una contribución a ϵ_2 por debajo del gap, y dicha contribución puede ser ajustada mediante la anchura de los osciladores C_1 . En la figura 5.5, a la derecha, se muestra el efecto de los osciladores por debajo de la energía del gap, para dos valores distintos de C_1 : si C_1 es suficientemente pequeño, el modelo TL-mod tiende a TL; si C_1 se utiliza como un parámetro más, sirve para ajustar los valores del modelo propuesto en este trabajo a los valores experimentales en energías por debajo de la del gap; así, en el intervalo 0.4-1.2 eV se observa que el modelo TL-mod, en el que se ha optimizado el parámetro C_1 , proporciona un ajuste mejor a los datos experimentales que TL.

Ninguno de los modelos TL y TL-mod describe el intervalo de reststrahlen (que corresponde a energías inferiores a las mostradas en la Fig. 5.5), ya que ignoran las resonancias que pueda haber por debajo del gap. Para incluir la zona de reststrahlen en el modelo TL-mod, se ha ajustado un oscilador a los datos experimentales del reststrahlen de Fagen [134]. De esta manera, al sumar al modelo TL-mod el oscilador que describe la zona de reststrahlen se obtiene un buen ajuste en un intervalo aumentado con respecto al modelo TL, ajuste que incluye desde la región de alta absorción, el entorno del gap, hasta la zona de reststrahlen. Los resultados se muestran en la figura 5.6.

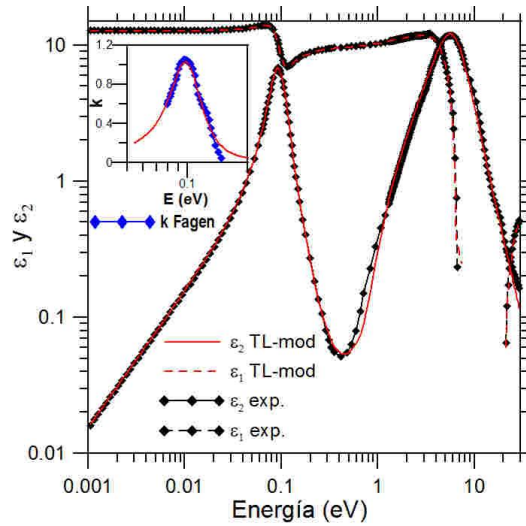


Fig. 5.6. Constante dieléctrica del SiC en función de la energía, junto con los el ajuste de TL-mod al que se le ha añadido un oscilador para incorporar también la zona de reststrahlen. En detalle, el ajuste del oscilador a los datos de k de reststrahlen de Fagen [134].

El nuevo modelo, junto con el oscilador ajustado a los datos de reststrahlen de Fagen, da un ajuste excelente en ϵ_1 y ϵ_2 , tanto en energías superiores como en energías inferiores a la del gap, así como fuera de la región de ajuste.

Un material semiconductor cuyas constantes ópticas se pueden describir con un modelo de TL y una cola de Urbach es el Si_3N_4 . En la figura 5.7 se presentan los datos experimentales de ϵ_2 en el intervalo 4.5-18 eV de Philipp [169], disponibles en la compilación de Palik [156], junto con un ajuste del modelo TLU-mod. En el ajuste sólo se han tenido en cuenta los datos de ϵ_2 , ϵ_1 ha sido directamente calculado tomando la parte real de la ecuación 5.59 del modelo TLU-mod con los parámetros obtenidos en el ajuste de ϵ_2 .

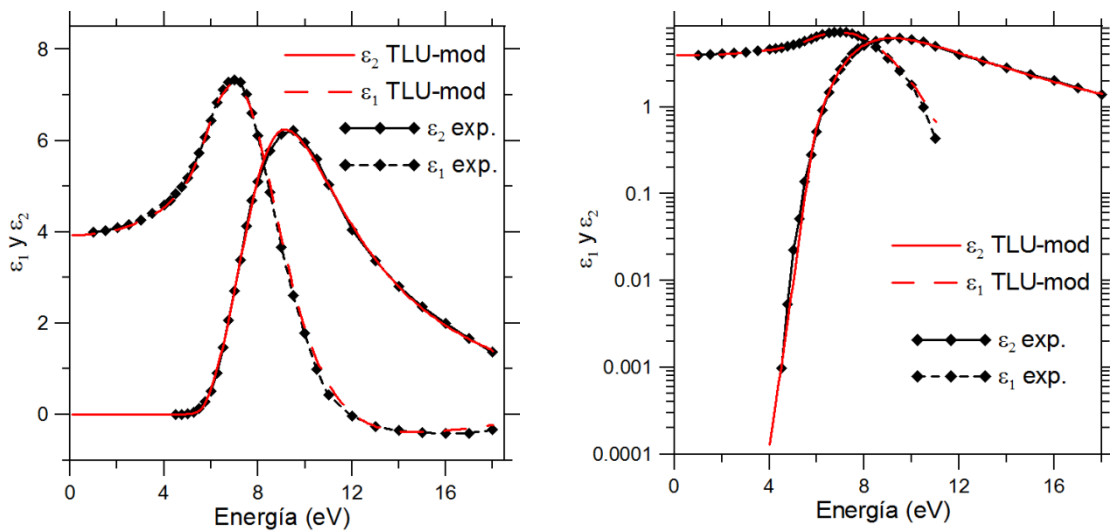


Fig. 5.7. Constante dieléctrica del Si_3N_4 en función de la energía, junto con el ajuste a ϵ_2 del modelo TLU-mod y la parte real conjugada de dicho ajuste. Izquierda, escala lineal. Derecha, en escala logarítmica. En [169] se dan valores de ϵ_1 para energías inferiores a 4.5 eV, los cuales se muestran también, junto con la extrapolación de ϵ_1 .

El ajuste en ϵ_2 es excelente, incluyendo la región de la cola de Urbach. Los valores de ϵ_1 obtenidos directamente del ajuste de ϵ_2 también ajustan muy bien a los datos experimentales. En la tabla 2 se muestran los parámetros de ajuste utilizados.

Modelo	A (eV)	E_0 (eV)	C (eV)	E_g (eV)	E_c (eV)	C_1 (eV)
TLU-mod	261.60	7.99	5.70	5.26	5.80	0.001

Tabla 2. Parámetros empleados en el ajuste del Si_3N_4 con el modelo TLU-mod.

Un ajuste similar al de TLU-mod en ϵ_2 se puede obtener con el modelo de TLU; sin embargo, ya que el parámetro $\epsilon_1(\infty)$ requiere de valores experimentales de ϵ_1 para su ajuste, con dicho modelo no se puede obtener directamente ϵ_1 de ϵ_2 .

5.3.4 Conclusiones

En esta sección se ha puesto de manifiesto que el modelo TL no cumple con los requisitos matemáticos para describir la constante dieléctrica de un material de manera correcta. Se ha desarrollado un nuevo modelo basado en la superposición de osciladores de Lorentz que utiliza la propia función del modelo TL como envolvente. Este modelo cumple con todos los requisitos matemáticos y además permite ajustes similares o mejores a los que se consiguen con el modelo TL. El modelo describe de una manera más realista el comportamiento de las constantes ópticas del material en energías inferiores a la de su gap, frente al modelo TL, en que ϵ_2 se anula. Además permite obtener simultáneamente ϵ_2 y ϵ_1 aunque sólo se disponga de datos experimentales de ϵ_2 (o ϵ_1) mientras que TL necesita información suplementaria para ajustar ϵ_1 a partir de datos de ϵ_2 . El mismo procedimiento se ha utilizado también para generar un modelo analítico que incluya la cola de Urbach. El nuevo modelo ha sido empleado con éxito en la caracterización paramétrica de las constantes ópticas de materiales como SiC (material cuyas constantes ópticas se han caracterizado en este trabajo) y Si_3N_4 (ajustando datos de la literatura), dando como resultado un mejor ajuste en la región espectral en el entorno de la energía del gap de cada material.

Capítulo 6. Multicapas para el FUV/EUV

6.1- Introducción

El principal objetivo de GOLD es proporcionar a la comunidad científica un amplio conjunto de recubrimientos ópticos eficientes para el FUV/EUV. Dentro de esta línea de investigación, en este trabajo se diseñaron, prepararon y caracterizaron unos nuevos filtros de reflexión y transmisión de banda estrecha, centrados en el FUV. Estos nuevos filtros se enmarcan en un contexto en el que se encuentran escasos trabajos en la literatura sobre este tipo de recubrimientos, a pesar del creciente número de aplicaciones para los que se demandan. El trabajo que se presenta en este capítulo involucra diseño, preparación y medida de multicapas orientadas a resolver problemas específicos para la física solar y la física de la atmósfera, de las que unas operan por reflexión y las otras por transmisión. Un tercer bloque de resultados consiste en el desarrollo de modelos y caracterización óptica de multicapas, relacionado asimismo con la física solar. Entre los objetivos de este capítulo están el desarrollo de recubrimientos eficientes y su caracterización, y tienen en común el empleo del conocimiento de las constantes ópticas de materiales tanto en el diseño y posterior preparación de multicapas, como en el análisis inverso para obtener la estructura de una multicapa a partir de sus medidas fotométricas.

El primer objetivo de este capítulo ha sido la preparación de multicapas reflectantes de banda estrecha para la línea espectral Lyman β (102.6 nm) del Hidrógeno, una línea que puede aportar mucha información acerca de la dinámica solar; una fuerte restricción para estas multicapas es que al mismo tiempo han de poseer una muy baja reflectancia en la línea espectral Lyman α (121.6 nm) del Hidrógeno, que es la línea más intensa en las observaciones solares y puede enmascarar a la Lyman β . Estas multicapas están basadas en los materiales Al, LiF y SiC, y tienen como objetivo la mejora de los resultados del único trabajo previo que existe en la literatura, que estaba basado en multicapas con Al, LiF y Al_2O_3 .

El segundo objetivo de este capítulo ha sido la preparación de dos tipos diferentes de filtros de transmitancia de banda estrecha en el FUV para el instrumento para física de la atmósfera Ionospheric Photometer (IP), dentro del satélite FY-3D. Los principales requisitos de estos filtros consisten en una alta transmitancia bien en la línea OI (135.6 nm) del Oxígeno o bien en la región $\sim 140\text{-}180$ nm de la banda Lyman-Birge-Hopfield (LBH) del Nitrógeno molecular, y al mismo tiempo, una muy baja transmitancia en las regiones NUV-vis-NIR. En esta parte, se han preparado filtros de Al y MgF_2 , materiales habitualmente utilizados en el FUV para obtener una transmitancia alta en la zona deseada y baja transmitancia en el visible. Existen en el mercado filtros relativamente parecidos a estos, si bien en el presente caso se optimizaron para cumplir los requisitos de la aplicación concreta. Por otra parte, hay poca información en la literatura científica acerca de las características de este tipo de filtros y de su evolución en el tiempo.

El tercer objetivo de este capítulo ha sido la caracterización de la reflectancia fuera de banda de todas las multicapas para el EUV presentes en el instrumento *Atmospheric Imaging Assembly* (AIA), a bordo del *Solar Dynamic Observatory* (SDO), diseñado para estudiar la física de la corona solar, y actualmente en órbita desde 2010. Hasta la fecha actual, la respuesta de

las multicapas solamente había sido estudiada en el intervalo 4-50 nm. En cambio se desconocía la respuesta del instrumento en el intervalo espectral entre 50 nm y 90 nm. En longitudes de onda más largas no es necesario conocer esta respuesta, ya que los filtros de Al del instrumento absorben fuertemente la radiación con longitud de onda mayor que 90 nm. La calibración consta de 3 fases. La primera consiste en el ajuste de un modelo a las medidas experimentales de reflectancia sobre testigos de vuelo, realizadas en el intervalo 4-50 nm. Para ese modelo fue necesario conocer las constantes ópticas de todos los materiales que conforman las multicapas. En la segunda fase, se extrapoló ese modelo hasta 90 nm; dichas extrapolaciones de los modelos indicaban que la reflectancia de todas las multicapas era significativa en ese intervalo; además los modelos presentaron problemas de ajuste en las longitudes de onda más largas, por lo que la fase tercera consistió en la medida de la reflectancia en el intervalo 50-90 nm. En esta calibración se emplearon medidas experimentales complementarias obtenidas en dos instalaciones diferentes, el laboratorio del grupo GOLD y la línea 6.3.2 del sincrotrón ALS; dicha calibración servirá para disminuir errores en el análisis de datos obtenidos por el instrumento AIA.

En cada uno de estos tres trabajos ha sido crucial disponer de constantes ópticas precisas para cada uno de los materiales usados en las multicapas; en muchos de los casos los materiales han sido anteriormente caracterizados por miembros de GOLD (SiC, Al, Mg, MgF₂, Mo y Cr).

6.2- Recubrimientos de reflectancia de banda estrecha para la línea espectral Lyman β del Hidrógeno.

6.2.1 Introducción

Las observaciones de objetos espaciales en las regiones espectrales del FUV/EUV, están llamadas a desvelar información fundamental para la física solar y astrofísica. Las líneas de emisión de los ambientes calientes, producidas por las transiciones electrónicas de los átomos presentes en lugares como la cromosfera y la corona solar, las estrellas, las galaxias o el medio interestelar, se pueden observar de manera óptima en los intervalos FUV/EUV. Estas observaciones, que deberán ser realizadas fuera de la atmósfera terrestre, ayudarán a resolver incógnitas fundamentales de la física solar y la astrofísica, tales como los mecanismos de calentamiento de la corona solar, la formación de galaxias, el origen y evolución de los planetas y estrellas, etc.

En particular, el intervalo espectral 100-105 nm es de gran importancia, ya que contiene la línea Lyman β (102.6 nm) del Hidrógeno, además de otras líneas notables de la física solar, como las O VI (103.2-103.7 nm) del Oxígeno. Estas líneas son útiles para la observación de la cromosfera, la región de transición y la corona solar, en términos de los parámetros del plasma y de sus flujos. Hoy en día, la escasa eficiencia de las ópticas en el FUV/EUV limita el rendimiento de los instrumentos espaciales de observación, por lo que el desarrollo de recubrimientos multicapa para el rango 100-105 nm es un elemento importante para la futura generación de los instrumentos espaciales de observación solar.

Como se mostró en la sección 1.2 de la introducción, donde se detallan los diferentes recubrimientos ópticos que han sido desarrollados para el FUV/EUV, en los últimos años se han generado nuevos recubrimientos en bandas espectrales adyacentes al intervalo espectral 100-105 nm basados en la existencia de materiales que son suficientemente transparentes. La reciente disponibilidad de estos recubrimientos se ha traducido en el desarrollo de instrumentos que proporcionan información valiosa para diversos campos como la física solar, astrofísica, radiación sincrotrón, física del plasma, litografía, etc.

Por el contrario, en el intervalo espectral entre 100 y 115 nm, y en particular, en la línea Lyman β , no existen en la actualidad recubrimientos eficientes de banda estrecha, aunque son bien conocidos los espejos de banda ancha basados en Al recubierto con LiF, los cuales presentan una alta reflectancia desde una longitud de onda tan corta como la línea Lyman β [28] [29] [30].

La línea Lyman β está en el extremo de la parte relativamente transparente de LiF, el material que en la naturaleza tiene el cut-off en la longitud de onda más corta posible, ~ 105 nm. En Lyman β la absorción del LiF es aún relativamente pequeña, lo que lo convierte en la mejor opción de material espaciador para recubrimientos multicapa en dicha longitud de onda [170]. Actualmente, el único ejemplo de un filtro de banda estrecha en Lyman β presentado en la literatura está basado en las bandas de transmitancia naturales del In y LiF, a ambos lados de Lyman β , pero con un rendimiento relativamente modesto [31]; por otra parte, el In, que tiene una extraordinaria banda de transmitancia centrada en ~ 80 nm, por su bajo punto de fusión, no es un material suficientemente estable para formar parte de multicapas.

Un problema adicional para los recubrimientos que se desean desarrollar en esta sección es que la intensidad de la línea Lyman β es débil en las aplicaciones prácticas, y puede ser enmascarada por líneas más intensas, como la línea Lyman α (121.6 nm) del Hidrógeno, que es la línea más intensa del espectro solar [171] [172]. Un trabajo pionero en el desarrollo de recubrimientos con alta ratio entre la reflectancia en la línea Lyman β y la reflectancia en la línea Lyman α (en adelante, ratio Lyman β /Lyman α) fue publicado por Edelstein [68]. Este autor observó que no parecía posible el desarrollo de recubrimientos de banda estrecha centrados en la línea Lyman β , por lo que desarrolló recubrimientos dedicados exclusivamente a la optimización de la ratio Lyman β /Lyman α , independientemente de la eficiencia de dichos recubrimientos en otras longitudes de onda. Un problema relativamente similar se ha tratado en la literatura, consistente en el desarrollo de recubrimientos con una ratio grande entre las líneas 83.4 y 121.6 nm, siendo 83.4 nm la línea de emisión del O II [173] [174] [175].

En este trabajo se aborda el desarrollo de recubrimientos multicapa de banda estrecha con alta reflectancia en Lyman β basados en un sistema de cuatro capas (Al/LiF/SiC/LiF) que muestran un buen comportamiento, tanto recién depositados (frescos) como a lo largo del tiempo. Además, estos recubrimientos mantienen sus buenas propiedades al ser empleados en ángulos fuera de la incidencia normal; dichas propiedades se mantienen hasta aproximadamente 30° .

Este apartado está organizado de la siguiente manera. La sección 6.2.2 ofrece una breve descripción del equipo experimental utilizado. La sección 6.2.3 presenta cinco multicapas basadas en Al/LiF/SiC/LiF con alta reflectancia en Lyman β y una baja reflectancia en Lyman α . Todos los filtros depositados en este trabajo han sido medidos periódicamente

para comprobar si su eficiencia se conserva en el tiempo. Finalmente, en la sección 6.2.4 se resumen los logros más importantes obtenidos en esta sección.

6.2.2 Equipo experimental

Los recubrimientos realizados en este trabajo se depositaron y midieron en el sistema combinado de deposición y reflectometría en UHV de GOLD, detallado previamente en la sección 3.2.1. Las láminas de Al y LiF fueron depositadas por evaporación usando parrillas de W (Al), y barquillas de Mo (LiF); el material de evaporación fue Al de una pureza de 99,999%, y LiF de pureza especial para UV. Las velocidades de deposición típicas fueron de $\sim 0.5 - 0.9$ nm/s para el Al y $\sim 0.2 - 0.5$ nm/s para el LiF. La presión durante la deposición fue de $\sim 10^{-6}$ Pa en el caso del Al y $\sim 2 \times 10^{-7}$ Pa en el caso del LiF. Las láminas de SiC fueron depositadas por pulverización con haz de iones (IBS), técnica descrita en la sección 3.3.1.3. El ángulo del haz de iones con el blanco fue de 25° . Como blanco se utilizó un disco de SiC de 96.5 mm de diámetro preparado por deposición química en fase de vapor (CVD), con una pureza de 99,9995%. Las condiciones típicas de deposición fueron: una energía de los iones de 1200 eV y una intensidad de corriente total de ~ 60 mA. El gas usado en el proceso fue Ar, y la presión de Ar en la cámara durante el proceso de sputtering se aumentó hasta $\sim 7 \times 10^{-2}$ Pa. Las láminas se depositaron a temperatura ambiente sobre sustratos de vidrio con una superficie de ~ 5 cm x 5 cm.

Las medidas de reflectometría de rayos x en incidencia rasante se realizaron en la sección de Difracción de Rayos X del Centro de Asistencia a la Investigación (CAI) en la Universidad Complutense de Madrid, con el difractómetro PANalytical modelo X'Pert PRO MRD. Como fuente de rayos X se usó un ánodo de cobre sometido a una descarga de 45 kV. La longitud de onda de emisión, seleccionada mediante un monocromador de grafito, fue la línea del Cu $K\alpha$ ($\lambda = 0.154$ nm). Se realizaron medidas de reflectancia en ángulo rasante desde 0.1° hasta 2° , con un paso de 0.005° .

6.2.3 Resultados

Para el diseño de multicapas con la mayor reflectancia posible en Lyman β y con alta ratio Lyman β /Lyman α , el primer paso fue la selección de los materiales más prometedores. En su trabajo, Edelstein [68] desarrolló recubrimientos a partir de la capa más interna de Al, una segunda capa de LiF, y tres opciones para la capa más externa: SiO_2 , Al_2O_3 , y Au. En este trabajo también se ha optado por Al y LiF, debido al gran contraste de índice de refracción entre ambos, además de la absorción relativamente baja de LiF en esta región espectral. Sin embargo, a diferencia del trabajo de Edelstein, se seleccionó el SiC como tercer material en la multicapa, debido a que su absorción es relativamente baja y tiene una reflectancia relativamente alta en esta región, además de que se trata de un material con el que el grupo GOLD tiene amplia experiencia. En un primer diseño, se prepararon multicapas con tres láminas, Al/LiF/SiC; lamentablemente estas multicapas sufrieron un aumento de reflectancia indeseado en Lyman α tras exponer las muestras a la atmósfera [170]. En una modificación del diseño, se añadió una lámina de LiF encima del SiC con el fin de evitar la oxidación de SiC.

Se empleó por tanto un sistema Al/LiF/SiC/LiF en el desarrollo de multicapas de banda estrecha eficientes en Lyman β y con alta ratio Lyman β /Lyman α . El primer diseño utilizado fue el siguiente: 45 nm Al/14.4 nm LiF/8.8 nm SiC/15.1 nm LiF. En el diseño se utilizaron los datos de constantes ópticas obtenidas en láminas delgadas disponibles en la literatura para Al

[126] [176], LiF [177], y SiC [56] [55]. Las constantes ópticas del Al y del SiC en la región de interés fueron obtenidas por el grupo GOLD, y particularmente, las constantes ópticas del SiC han sido presentadas en el capítulo 4 de este trabajo.

Siguiendo este diseño, se prepararon cuatro muestras (#1, #2, #3 y #4), cada una de ellas con ligeras correcciones en los espesores para aproximarse a los valores óptimos del diseño. En la figura 6.1 se muestra la reflectancia medida para cada uno de estos recubrimientos, antes de ser expuestos a la atmósfera:

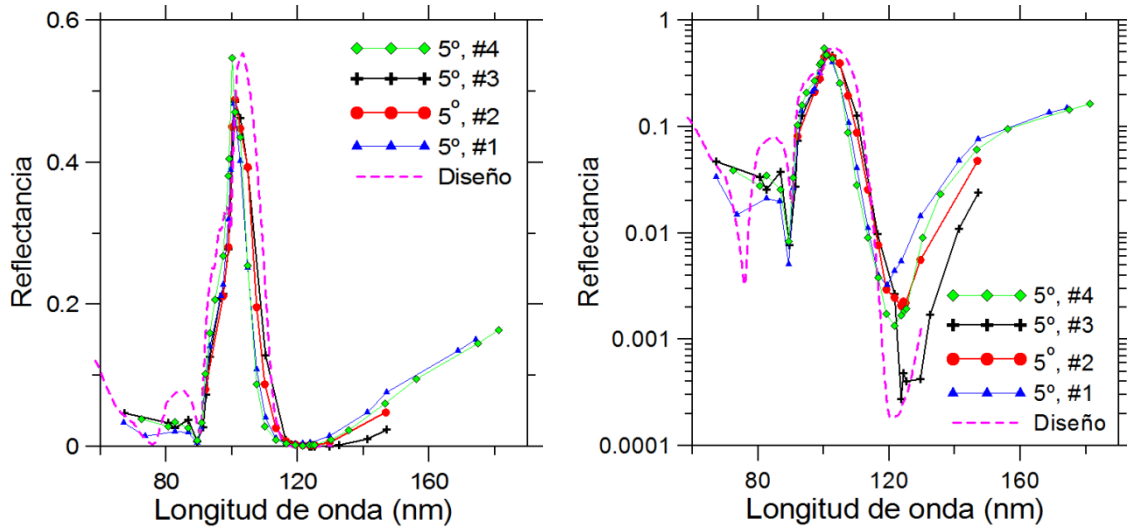


Fig. 6.1. Reflectancia experimental a 5° en función de la longitud de onda de las muestras #1, #2, #3 y #4 sin exponer a la atmósfera. También se muestra el diseño. Izquierda y derecha: reflectancia en escala lineal y logarítmica, respectivamente.

En la figura 6.2 se muestra en detalle la reflectancia de estos recubrimientos en el entorno de Lyman α :

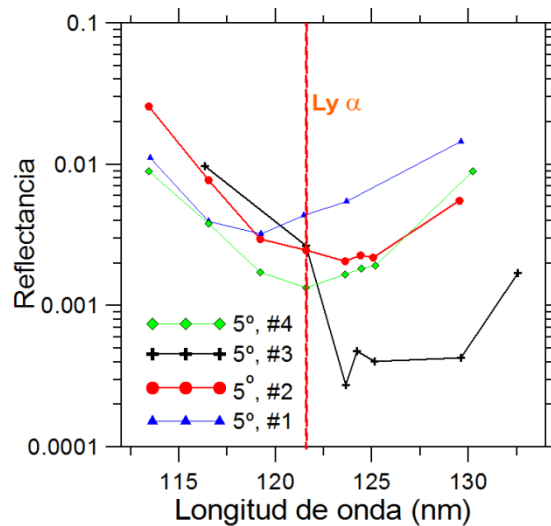


Fig. 6.2. Detalle de la reflectancia a 5° en las cercanías de Lyman α para las muestras #1, #2, #3 y #4, sin exponer a la atmósfera.

Los valores de reflectancia en Lyman α y Lyman β de las multicapas no expuestas a la atmósfera, fueron muy prometedores; las ratios Lyman β /Lyman α fueron, 93, 180, 177 y 325 para las muestras # 1, #2, #3 y #4, respectivamente. Como se muestra en la figura 2, cada multicapa tiene un valor de reflectancia en Lyman α menor que el anterior (excepto en las

muestras #2 y #3, donde la reflectancia en Lyman α es similar), por tanto las ligeras correcciones al espesor citadas anteriormente dieron como resultado mejoras de eficiencia para las multicapas, antes de ser expuestas a la atmósfera. El máximo de reflectancia de todas las multicapas se presentó en el intervalo 100.3-100.9 nm, longitudes de onda ligeramente más cortas que Lyman β .

Para la muestra #1 se realizaron medidas de reflectancia de rayos X en función de ángulo de incidencia para obtener los espesores, densidades y rugosidades del sistema Al/LiF/SiC/LiF. Las medidas se realizaron en la línea K α del Cu ($\lambda=0.154$ nm). En la figura 6.3 se muestran las medidas experimentales y el modelo ajustado.

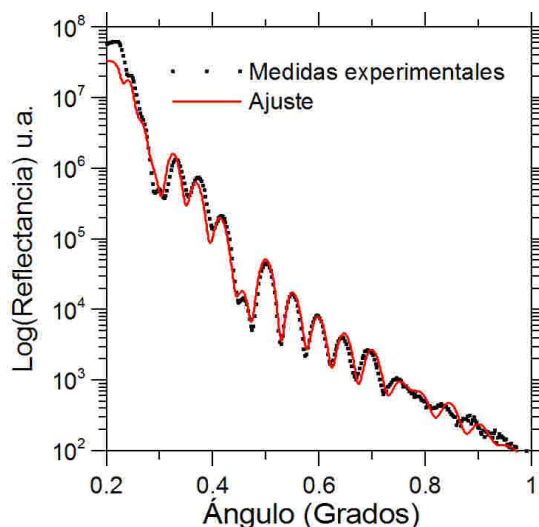


Fig. 6.3. Reflectancia experimental de la muestra #1 y su ajuste, en función del ángulo, para la longitud de onda $\lambda=0.154$ nm.

Los valores obtenidos del ajuste mostrado en la figura 3 se resumen en la tabla 1:

Lámina	Espesor (nm)	Densidad (g/cm ³)	Rugosidad rms (nm)
LiF	15.4	2.21	2.2
SiC	8.1	2.80	2.4
LiF	15.0	2.14	2.2
Al	45.0	2.65	2.6

Tabla 1. Espesores, densidades y rugosidades de la muestra #1 obtenidos mediante ajuste de la figura 3.

Como se muestra en la tabla 1, los espesores de las dos láminas de LiF y de la lámina de SiC de la muestra #1 fueron respectivamente superiores e inferior a los del diseño teórico. La densidad promedio de las láminas de LiF corresponde al ~82% de la densidad del material masivo. En el caso del SiC, el valor de densidad obtenido es compatible con 2.98 g/cm³, valor obtenido por Soufli *et al.* [147] para muestras de SiC depositadas por sputtering. En el caso del Al, el valor de densidad obtenido es parecido al del material masivo, 2.7 g/cm³.

Todas las multicapas fueron medidas de nuevo después de un período de almacenamiento en un desecador para estudiar los efectos del paso del tiempo en la reflectancia, como por ejemplo una posible oxidación o contaminación externa y reacciones químicas y/o difusión entre los diferentes materiales constituyentes de la multicapa. Las figuras 6.4, 6.5, 6.6 y 6.7 resumen la reflectancia medida para las muestras #1, # 2, #3, y #4,

donde se comparan la reflectancia de las muestras frescas con la de las muestras tras su almacenamiento en un desecador.

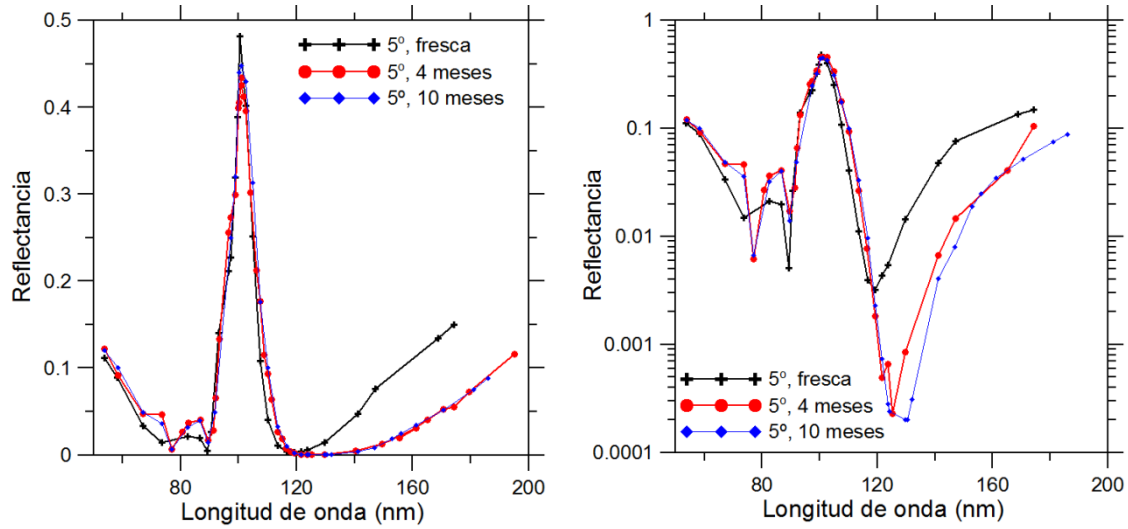


Fig. 6.4. Reflectancia a 5° en función de la longitud de onda de la muestra #1 fresca, y tras ser almacenada 4 meses y 10 meses en un desecador. Izquierda y derecha: reflectancia en escala lineal y logarítmica, respectivamente.

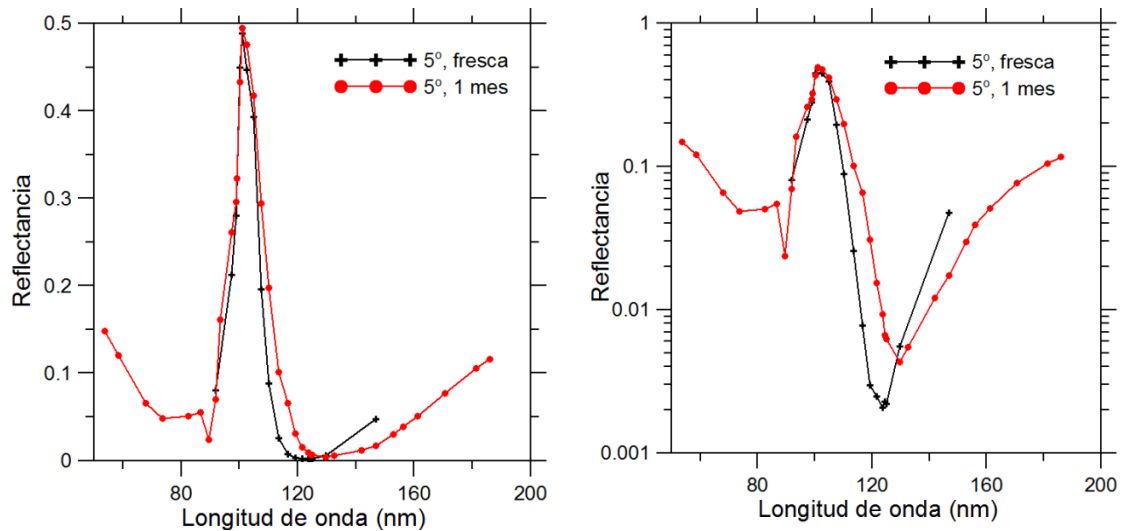


Figura. 6.5. Reflectancia a 5° en función de la longitud de onda de la muestra #2 fresca, y tras ser almacenada 1 mes en un desecador. Izquierda y derecha: reflectancia en escala lineal y logarítmica, respectivamente.

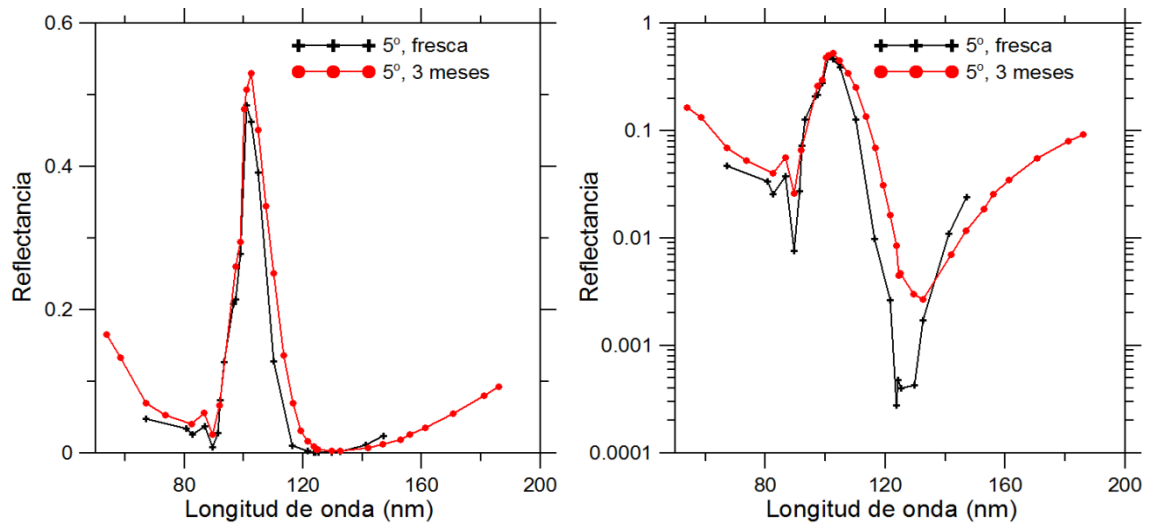


Fig. 6.6. Reflectancia a 5° en función de la longitud de onda de la muestra #3 fresca, y tras ser almacenada 3 meses en un desecador. Izquierda y derecha: reflectancia en escala lineal y logarítmica, respectivamente.

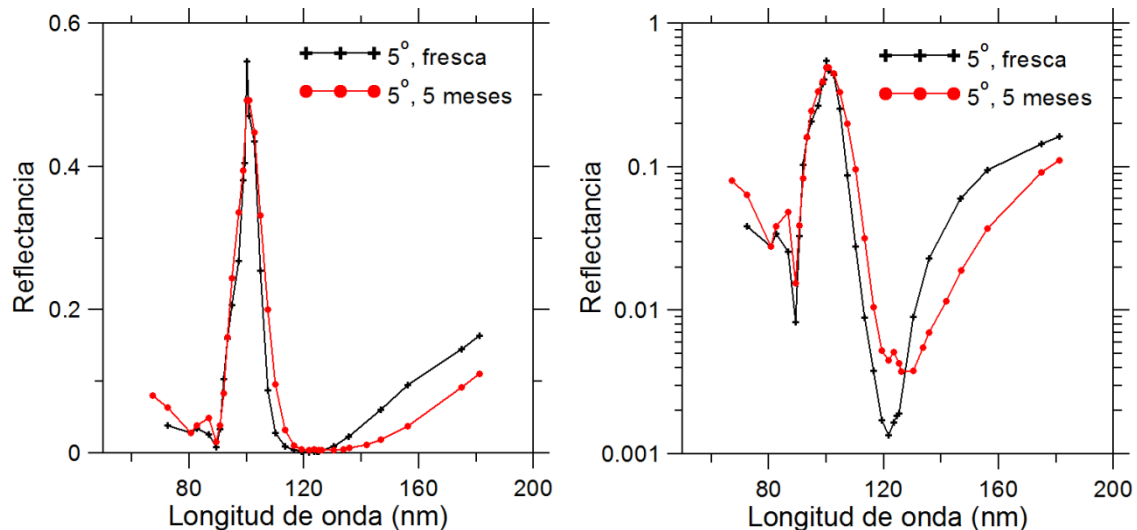


Fig. 6.7. Reflectancia a 5° en función de la longitud de onda de la muestra #4 fresca, y tras ser almacenada 5 meses en un desecador. Izquierda y derecha: reflectancia en escala lineal y logarítmica, respectivamente.

Todas estas muestras presentaron una prometedora ratio Lyman β /Lyman α cuando se midieron sin exponer a la atmósfera; sin embargo, después de almacenarlas un tiempo en un desecador, se encontró que dicha ratio disminuyó, debido al desplazamiento del mínimo interferencial de reflectancia hacia longitudes de onda mayores que Lyman α , lo que aumentó la reflectancia en dicha línea para la mayoría de las multicapas. La ratio Lyman β /Lyman α para las muestras envejecidas #1, #2, #3 y #4 fue de 614, 32, 33 y 100, respectivamente. La muestra #1 se comportó de manera diferente a las demás, ya que la reflectancia en Lyman α disminuyó con el tiempo. A diferencia de las otras muestras, la reflectancia mínima medida en la #1 antes de ser expuesta a la atmósfera estaba situada en una longitud de onda más corta que Lyman α (119 nm), y por tanto el desplazamiento del mínimo tras su exposición a la atmósfera hacia longitudes de onda más largas resultó ser un efecto favorable para esta muestra.

A pesar de este cambio con el paso del tiempo en Lyman α , la reflectancia de todas las muestras aumentó ligeramente en Lyman β , lo que se atribuye a un ensanchamiento y

desplazamiento del máximo de la banda de alta reflectancia, el cual se situaba originalmente para todas las muestras en longitudes de onda más cortas que Lyman β .

En la tabla 2 se resumen las principales características de todas las multicapas antes y después de ser expuestas a la atmósfera.

SIN EXPONER A LA ATMÓSFERA						
Muestra	R en Ly β	R en Lyman α	Ratio $L\beta/L\alpha$	FWHM (nm)	Pico (nm)	R en Pico
1	0.40	0.0043	93	7.6	100.3	0.48
2	0.45	0.0025	180	8.6	100.9	0.49
3	0.46	0.0026	177	9.5	100.9	0.49
4	0.43	0.0013	325	8.3	100.3	0.55
TRAS DISTINTOS PERIODOS DE ENVEJECIMIENTO						
Muestra	R en Ly β	R en Lyman α	Ratio $L\beta/L\alpha$	FWHM (nm)	Pico (nm)	R en Pico
1	0.43	0.0007	614	10.1	100.9	0.45
2	0.48	0.015	32	11.9	100.9	0.49
3	0.53	0.016	33	12.2	102.6	0.53
4	0.45	0.0045	100	11.3	100.8	0.49

Tabla 2. Resumen de los parámetros principales de las muestras #1, #2, #3 y #4, tanto frescas como envejecidas: reflectancia en Lyman β , en Lyman α y su ratio, ancho de banda (Full Width at Half Maximum, FWHM), longitud de onda del pico y reflectancia en el pico.

A continuación se comparan los resultados obtenidos en este trabajo con los de Edelstein [68]. Su mejor resultado fue obtenido empleando Al_2O_3 como tercer material, con lo que logró una reflectancia de 0.014 en Lyman α y de 0.30 en Lyman β , lo que da una ratio Lyman β /Lyman α de ~ 21 . Las presentes multicapas mejoran significativamente tanto la reflectancia en Lyman β como la ratio Lyman β /Lyman α .

A pesar de la eficiencia mostrada por las multicapas Al/LiF/SiC/LiF, podría no ser suficiente en aplicaciones para la física solar, debido a la intensidad mucho mayor de la línea Lyman α . Según datos del espectro solar adquiridos por el instrumento OSO-8 y analizados por Lemaire *et al.* [172], la relación media de intensidades Lyman α /Lyman β es ~ 80 [172]. Es una ratio muy elevada, que hace difícil que en la práctica se pueda revertir con el uso de un único espejo recubierto con una multicapa como las desarrolladas más arriba. Por tanto, para obtener un rechazo suficiente en Lyman α , estos espejos podrían ser usados en cascada, con reflexiones sucesivas sobre varios espejos recubiertos con las presentes multicapas. Por ejemplo, tras dos reflexiones, la reflectancia producto de ambas en Lyman β sería $\sim 20\%$, mientras que el rechazo de Lyman α sería lo suficientemente grande como para poder obtener imágenes en Lyman β a pesar de haber un fondo intenso dominado por la Lyman α , como el medido por Lemaire *et al.* en su trabajo.

Usualmente en instrumentación es necesario trabajar con multicapas cuyas propiedades ópticas se mantengan en un cierto intervalo angular alrededor de la incidencia normal, debido a la apertura angular del haz incidente y a la curvatura de los espejos. Hasta ahora, se han presentado medidas en un ángulo de 5° con respecto a la normal. A continuación se muestran las medidas de reflectancia en función del ángulo para las dos

longitudes de onda clave en este trabajo, Lyman β y Lyman α . Estas medidas se realizaron para la multicapa #4, tras ser expuesta a la atmósfera, y el resultado se muestra en la figura 6.8. El grado de polarización estimado de la radiación en esas longitudes de onda es de $\rho \sim 0.3$ (con predominancia de radiación con el campo eléctrico perpendicular al de incidencia).

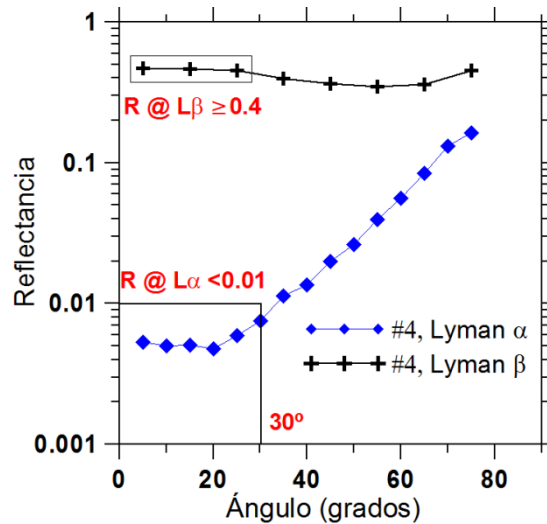


Fig. 6.8. Reflectancia en función del ángulo en las líneas Lyman β y Lyman α medida en la multicapa #4, tras ser almacenada 5 meses en un desecador.

En la figura 6.8 se observa que la reflectancia en Lyman α es inferior a 0.01 desde 5° hasta 30° con respecto a la normal. En cuanto a la reflectancia en Lyman β , permanece bastante constante por encima de 0.40 hasta 30° . La ratio Lyman β /Lyman α es superior a 50 hasta 30° , ángulo que puede considerarse suficiente en aplicaciones para la física solar.

Basado en la multicapa Al/LiF/SiC/LiF de los filtros anteriores, se diseñó otro filtro cuyo objetivo principal era obtener la mayor reflectancia posible con una anchura de banda mínima en torno a la línea Lyman β , sin exigir un rechazo específico en Lyman α . El nuevo diseño fue: 45 nm Al/12.0 nm LiF/10.2 nm SiC/14.8 LiF nm. En la figura 6.9 se muestra la reflectancia medida para la multicapa #5, tanto fresca como después de siete semanas de almacenamiento en un desecador.

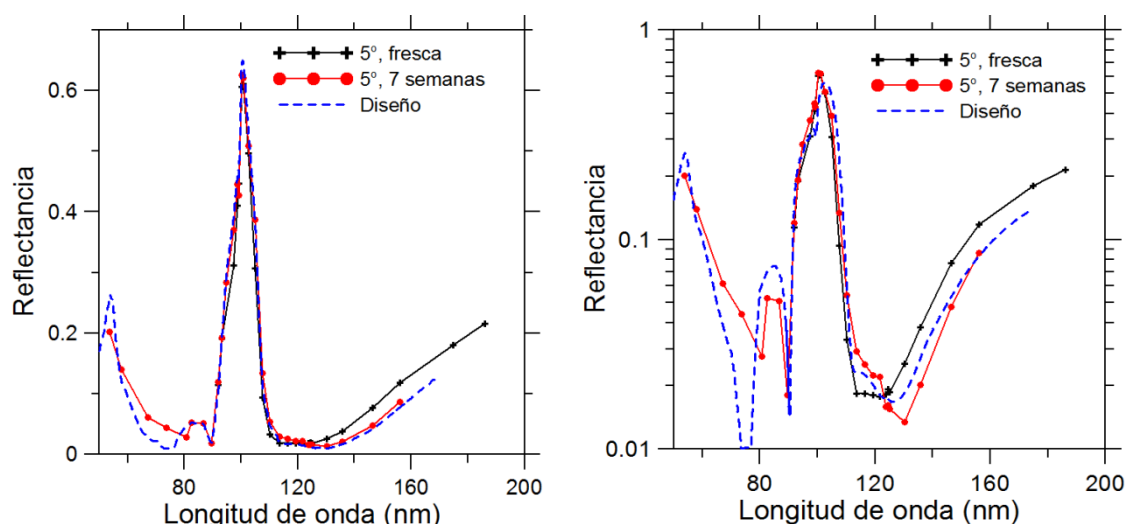


Fig. 6.9. Reflectancia experimental a 5° en función de la longitud de onda de la muestra #5 fresca y tras ser almacenada 7 semanas en un desecador. También se muestra el diseño. Izquierda y derecha: reflectancia en escala lineal y logarítmica, respectivamente.

Antes de ser expuesta a la atmósfera, esta multicapa presentó una reflectancia en Lyman β de 0.50, aunque el pico de reflectancia fue de 0.61 en 100.9 nm. Esta muestra se almacenó durante 7 semanas en un desecador para estudiar los efectos del envejecimiento en la reflectancia. Después de ese tiempo, se midió un ligero incremento en la reflectancia en Lyman β , debido a un ensanchamiento de la banda de alta reflectancia, como ocurrió con las muestras #1 a #4. En cuanto a la evolución de la anchura de banda de la multicapa con el tiempo, este valor fue de 7.7 nm antes de exponer ésta a la atmósfera, y de 9.9 nm después de estar almacenada 7 semanas en un desecador. La Tabla 3 resume los principales parámetros de la muestra #5.

SIN EXPONER A LA ATMÓSFERA				
Muestra	R en Lyman β	FWHM (nm)	Pico (nm)	R en Pico
5	0.50	7.7	100.9	0.61
TRAS 7 SEMANAS EN DESECADOR				
Muestra	R en Lyman β	FWHM (nm)	Pico (nm)	R en Pico
5	0.51	9.9	100.3	0.63

Tabla 3. Los principales parámetros de la multicapa #5 tanto fresca como envejecida: reflectancia en Lyman β , ancho de banda, longitud de onda en el pico y reflectancia en el pico.

Esta multicapa de banda estrecha tiene una eficiencia muy superior a los pocos antecedentes existentes en la literatura. Como se mencionó anteriormente, Carruthers diseñó filtros basados en In y LiF, y obtuvo una reflectancia máxima en Lyman β de sólo 0.038, si bien es muy estrecha, con una anchura de banda de ~ 6 nm [31]. El mejor resultado obtenido por Edelstein fue para la multicapa en la que usó Al_2O_3 como el tercer material, con una reflectancia de ~ 0.30 en Lyman β [68]; el ancho de banda de su multicapa no fue medido. Por último, existen multicapas de Al protegido por LiF que alcanzan un valor alto de reflectancia en la Lyman β , por ejemplo, Cox *et al.* [30] midieron una reflectancia de 0.76, pero se trata de un espejo de banda ancha, a diferencia de los presentados en este trabajo.

Para comprobar que la multicapa #5 mantiene sus buenas propiedades al ser usada en un ángulo de incidencia distinto a la normal, se realizaron medidas de reflectancia en función de la longitud de onda en 20° y en 30° . En la figura 6.10 se presentan los resultados. El grado de polarización estimado de la radiación en esas longitudes de onda es de $\rho \sim 0.3$ (con predominancia de radiación con el campo eléctrico perpendicular al de incidencia).

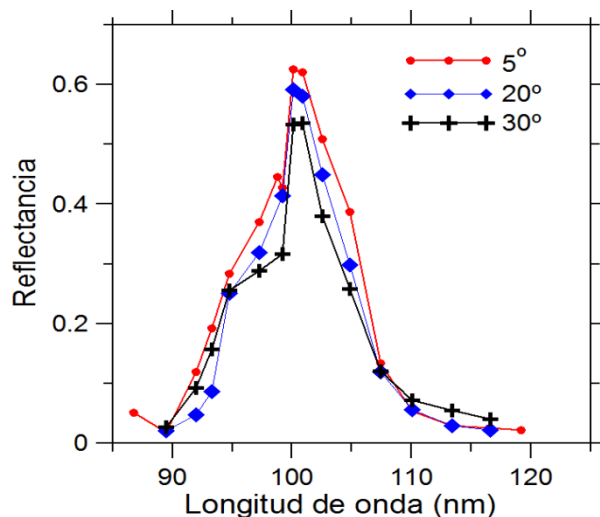


Fig. 6.10. Reflectancia en función de la longitud de onda para los ángulos de 5° , 20° y 30° , para la multicapa #5, tras ser almacenada 8 meses en un desecador.

En la figura 6.10 se observa que la reflectancia en Lyman β es ~ 0.45 y ~ 0.39 para las medidas a 20° y 30° , respectivamente. Además, el perfil estrecho se mantiene para dichos ángulos. Por tanto, este filtro de banda estrecha centrado cerca de Lyman β mantiene una buena eficiencia en un ángulo de, al menos, hasta 30° .

Finalmente, las muestras preparadas tienen unas dimensiones de ~ 5 cm x 5 cm; para posibles aplicaciones reales, habría que disponer de un sistema de deposición adaptado para depositar estos recubrimientos sobre superficies mayores, con una uniformidad aceptable.

6.2.4 Conclusiones

Se ha diseñado un sistema de cuatro capas Al/LiF/SiC/LiF optimizado para obtener una alta reflectancia en Lyman β y al mismo tiempo, una gran ratio de reflectancias Lyman β /Lyman α . Con este diseño, se han preparado cuatro multicapas con pequeñas diferencias de espesor en las láminas, y antes de exponerlas a la atmósfera, todas ellas presentaron un valor alto de reflectancia en Lyman β (superior a 0.40) y una ratio Lyman β /Lyman α superior a 90. Tras varios meses de almacenamiento en un desecador, las muestras conservaron el perfil de banda estrecha; la reflectancia presenta un mínimo en los alrededores de Lyman α , tal como estaba previsto; la posición y la altura de este mínimo resultó ser bastante crítico y en la mayoría de casos la reflectancia en Lyman α aumentó con el tiempo. Sin embargo, la reflectancia en Lyman β no decayó con el tiempo, incluso aumentó ligeramente debido a cierto ensanchamiento y desplazamiento del pico hacia longitudes de onda mayores. Tras su exposición a la atmósfera, las muestras conservaron una ratio Lyman β /Lyman α alta, cuyos dos mejores valores fueron 100 y 614, y una reflectancia en Lyman β superior a 0.40 para todas las muestras. Finalmente, se comprobó que estas multicapas mantienen una buena eficiencia en ángulos tan grandes como 30° con respecto a la normal, conservando un valor de

reflectancia superior a 0.40 en Lyman β y una ratio Lyman β /Lyman α de aproximadamente 50 en ese ángulo.

El mismo sistema Al/LiF/SiC/LiF se optimizó de nuevo para obtener el recubrimiento con la banda más estrecha y la mayor reflectancia posible en Lyman β , sin exigir un rechazo específico en Lyman α . Con este nuevo diseño se preparó una nueva muestra, la cual se midió tanto fresca como después de 7 semanas de almacenamiento en un desecador. El resultado fue un pico de reflectancia de 0.63 en 100.3 nm, una reflectancia en Lyman β superior a 0.50 y un ancho de banda de 9.9 nm después ser expuesta a la atmósfera. Esta es la máxima reflectancia experimental obtenida nunca para un recubrimiento de banda estrecha en el intervalo espectral entre 100 y 105 nm.

6.3- Filtros de transmitancia en el FUV para el instrumento “Ionospheric Photometer (IP)” a bordo del satélite “Feng-Yun 3D (FY-3D)”

6.3.1 Información acerca del instrumento

El objetivo del instrumento IP, a bordo del satélite FY-3D que será puesto en órbita en 2015, es analizar la respuesta global de la ionosfera y la termosfera a las perturbaciones solares y geomagnéticas. La ionosfera es la parte ionizada de la alta atmósfera que se sitúa a una altitud de entre 60 y 2000 Km. Se comporta aproximadamente como un plasma: se encuentra a bajas presiones, sus elementos están ionizados y contiene el mismo número de cargas positivas y negativas, siendo así un medio conductor y eléctricamente neutro. La existencia de estas partículas cargadas tiene una gran influencia en la propagación de las ondas electromagnéticas, especialmente las ondas de radio. La ionosfera se compone básicamente de gases atmosféricos como N_2 , O_2 y O (oxígeno atómico), ionizados por la radiación solar, especialmente radiación FUV, EUV y rayos X. Dichos iones y electrones tienden a recombinarse, emitiendo fotones en unas longitudes de onda características. Este instrumento realizará observaciones en el FUV, región espectral en la que existen líneas de emisión características como las líneas del oxígeno OI (130.4-135.6 nm), y la banda Lyman-Birge-Hopfield (LBH, 140-180 nm) del N_2 , que proporcionan información acerca de la ionosfera y los cambios producidos en ella por causas diversas. Por ejemplo, cuando ocurre una tormenta solar, en la ionosfera se produce una caída de la densidad de número de átomos de O , mientras que la densidad del número de moléculas de N_2 permanece estable. Por consiguiente, cambia en la ionosfera la ratio O/N_2 y, por tanto, la ratio entre las líneas de emisión $\lambda(135.6 \text{ nm})/\lambda(\text{LBH})$ [178].

El telescopio del instrumento IP es de tipo Cassegrain Burch invertido. La resolución espacial del instrumento es de 6 minutos de arco y el campo de visión es de $25^\circ \times 25^\circ$.

En 2011, investigadores del CSSAR (Center for Space Science and Applied Research, China) se pusieron en contacto con el grupo GOLD, ya que precisaban de filtros de transmitancia en el FUV de dos tipos: unos centrados en la línea 135.6 nm y otros en la banda LBH (140.0-180.0 nm), y con restricciones adicionales. Estos filtros serán incorporados al modelo de ingeniería del instrumento. En este trabajo se detalla el proceso de diseño, fabricación y caracterización de dichos filtros.

Este apartado está organizado de la siguiente manera. La sección 6.3.2 presenta las especificaciones técnicas requeridas. En la sección 6.3.3 se describen los procesos de diseño y fabricación de los filtros. En la sección 6.3.4 se presentan las medidas de transmitancia de las multicapas depositadas, las cuales fueron medidas transcurrido un tiempo para comprobar si su eficiencia se había conservado. En la sección 6.3.5 se analizan los resultados y se dan posibles hipótesis que expliquen los resultados obtenidos. Finalmente, en la sección 6.3.6 se resumen los logros más importantes obtenidos en este trabajo.

6.3.2 Especificaciones técnicas

En este apartado se muestran las especificaciones técnicas inicialmente requeridas para los filtros de transmitancia. En la tabla 4 y 5 se resumen las especificaciones para los filtros centrados en la línea 135.6 nm y en la banda LBH, respectivamente.

Especificaciones *	
Longitud de onda central	135.6 nm
Tolerancia en la longitud de onda central	± 2.5 nm
Anchura de banda (FWMH)	≤ 15 nm
Transmitancia en λ_{central} a 0°	≥ 0.10
Incidencia: de 0° a 16° La apertura del instrumento tiene un semiángulo de 16°	Se admite una reducción en la transmitancia del pico a 16° del 10% respecto a la transmitancia a 0°
Rechazo fuera de banda	
$T_{200 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	< 0.01
$T_{250 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	< 0.001
$T_{300 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	$< 4 \cdot 10^{-4}$
$T_{350 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$
$T_{\text{visible}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$
Tamaño	
Diámetro	15 mm
Diámetro del área activa	13 mm
Espesor	1-2 mm
Cantidad	
3 prototipos para el modelo de ingeniería	

Tabla 4. Resumen de los requisitos para los filtros centrados en la línea 135.6 nm.

Especificaciones *	
Longitud de onda central	160.0 nm
Tolerancia en la longitud de onda central	± 2.5 nm
Anchura de banda (FWMH)	~ 20 nm
Transmitancia en λ_{central} a 0°	≥ 0.10
Incidencia: de 0° a 16° La apertura del instrumento tiene un semiángulo de 16°	Se admite una reducción en la transmitancia del pico a 16° del 10% respecto a la transmitancia a 0°
Rechazo fuera de banda	
$T_{\lambda \leq 135.6 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	< 0.005
$T_{200 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	< 0.01
$T_{250 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	< 0.001
$T_{300 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	$< 4 \cdot 10^{-4}$
$T_{350 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$
$T_{\text{visible}}/T_{160 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$
Tamaño	
Diámetro	15 mm
Diámetro del área activa	13 mm
Espesor	1-2 mm
Cantidad	
3 prototipos para el modelo de ingeniería	

Tabla 5. Resumen de los requisitos para los filtros centrados en la banda LBH.

*Estos requisitos fueron propuestos inicialmente en función de unas primeras estimaciones. En las discusiones posteriores acerca de las especificaciones técnicas, y a la vista de resultados preliminares, se observó que probablemente algún requisito no podría ser cumplido, por lo que se establecieron unas prioridades; la principal fue maximizar el rechazo fuera de banda.

6.3.3 Diseño y fabricación de los filtros

6.3.3.1 Selección de materiales

La configuración de los filtros de transmitancia más común en la literatura y que serán utilizados en este trabajo es la de Fabry-Perot. Con esta configuración, las múltiples reflexiones en el interior del material espaciador, colocado entre dos superficies parcialmente reflejantes dan lugar a un máximo interferencial en la transmitancia en una longitud de onda que depende del espesor del espaciador [32]. A continuación se seleccionan los materiales más adecuados para una configuración Fabry-Perot:

1) Espaciadores: los mejores candidatos son los fluoruros cuyo cut-off (longitudes de onda por debajo de la cual se vuelven transparentes) está por debajo de 135.6 nm, tales como AlF_3 , LaF_3 , GdF_3 , LiF , MgF_2 y SrF_2 . En la literatura solo se han podido encontrar referencias al uso de láminas de MgF_2 en combinación con Al para multicapas para el FUV. Dado que GOLD tiene experiencia en el uso de MgF_2 , finalmente se escogió este material, frente a por ejemplo el LiF, que tiene la desventaja de que es un material algo higroscópico.

2) Materiales cuyas constantes ópticas contrasten con las constantes ópticas del espaciador seleccionado: de los posibles candidatos, Al, Be, Mg o In, todos ellos con un índice de refracción que contrasta con el del MgF_2 en el FUV, se eligió el Al, porque hay bastante bibliografía sobre multicapas de MgF_2/Al que operan por transmitancia, además de que había experiencia con ellas en GOLD [32]. Otro buen candidato podría ser el Mg, pero presenta ciertas desventajas experimentales con respecto al Al: es un material con una presión de vapor relativamente alta ($1.3 \cdot 10^{-6}$ Pa a 185 °C), por lo que al evaporarse, contamina la cámara de evaporación, en particular en equipos de UHV, en que un depósito de alta presión de vapor en sus paredes se reacomoda por toda la campana durante los ciclos de horneado. Además, el Mg es un material muy reactivo, y en caso de oxidarse con los gases residuales presentes en la cámara de evaporación, aumenta su densidad (el óxido es más denso que el metal) y la zona oxidada se contrae, permitiendo exponer las regiones más profundas de la lámina a los gases residuales de la campana de evaporación, pudiendo llegar a oxidarse toda la lámina (a diferencia del Al, al que unos pocos nanómetros de óxido lo protegen de ulterior oxidación). Finalmente no se conocen las posibles reacciones químicas y efectos de intercara que pudieran aparecer en las multicapas Mg/MgF_2 .

3) Substratos: Se usó el MgF_2 cristalino (es birrefringente, pero está cortado de modo que el eje óptico sea perpendicular a sus caras) para los filtros centrados en 135.6 nm y cuarzo (SiO_2 cristalino, también es birrefringente y se corta igual que el MgF_2) para los centrados en la banda LBH, dado que su abrupto cut-off en torno a 145 nm contribuye a que la ratio $T_{\lambda \leq 135.6 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$ sea muy baja, requisito exigido para los filtros centrados en la LBH.

En resumen, se eligieron los materiales MgF_2 y Al como los más idóneos para la elaboración de los filtros, junto con sustratos de MgF_2 cristalino para los filtros centrados en 135.6 nm, y de cuarzo para los centrados en la banda LBH.

6.3.3.2 Constantes ópticas empleadas y diseño

Para el Al, las constantes ópticas empleadas en el diseño corresponden a las obtenidas por Shiles *et al.* [126] en el intervalo 100-1000 nm. Para el MgF_2 , al no existir datos fiables en la literatura, se usó un conjunto provisional de constantes ópticas generadas por GOLD, obtenidas a partir de medidas de reflectancia, transmitancia y elipsometría. Respecto a los sustratos utilizados, MgF_2 cristalino para los filtros centrados en 135.6 nm y cuarzo para los centrados en la LBH, las constantes ópticas que se usaron pertenecen a la recopilación realizada por Palik *et al.* [156], el cual presenta constantes ópticas obtenidas para cristales. Es importante notar que para un material transparente como el MgF_2 la absorción de una lámina delgada depositada como las que se prepararon en este trabajo es varios órdenes de magnitud mayor que la del cristal del mismo material, por lo que hay que disponer de conjuntos de constantes ópticas específicas para cada presentación del material. En los sustratos de MgF_2 cristalino, donde k en longitudes de onda más largas que 114 nm es nula en la compilación de Palik, el valor de k fue ligeramente aumentado en el FUV para hacerlo compatible con las medidas de transmitancia, que muestran que la absorción del material no es despreciable.

Una vez seleccionados los materiales adecuados con sus respectivas constantes ópticas, el cálculo de los espesores óptimos fue realizado mediante un método de Monte-Carlo en el que se introdujeron los requisitos impuestos en forma de función de mérito y se obtuvieron los espesores óptimos para cada tipo de filtro. La determinación del número óptimo de bicapas de Al/ MgF_2 se realizó añadiendo nuevas bicapas a los primeros diseños obtenidos, empezando por dos bicapas, hasta que la adición de nuevas bicapas no producía una mejora significativa en la función de mérito. El número de bicapas seleccionado fue de cuatro para los filtros centrados en 135.6 nm y de tres para los filtros centrados en la banda LBH.

6.3.3.3 Fabricación de los filtros

Todos los filtros fueron depositados sobre sustratos a temperatura ambiente mediante evaporación en la cámara de alto vacío, descrita en la sección 3.2.1.12, y cuya presión base es de 10^{-5} Pa. Para la evaporación del Al se usaron unas parrillas de W en las que previamente se había fundido una cantidad prefijada de Al, de la casa Balzers, con una pureza de 99.999%. Para el MgF_2 se usaron trozos de material de grado VUV que se evaporaron desde unas cajas de W. La presión durante las evaporaciones se mantuvo en $\sim 10^{-4}$ Pa. El tiempo transcurrido entre la deposición de una lámina y la siguiente se redujo al mínimo posible (~ 1 minuto), para minimizar la posible reacción de los materiales evaporados con los gases residuales de la cámara de evaporación.

6.3.4 Resultados experimentales

En esta sección se muestran las medidas de transmitancia en función de la longitud de onda para cada filtro. Las medidas de transmitancia fueron realizadas, en el rango de 100 a 200 nm en la cámara de reflectometría de GOLD, y en el rango entre 200 a 1000 nm, mediante

el espectrofotómetro Lambda-9 (Perkin-Elmer). Ambos instrumentos han sido descritos en las secciones 3.2.1.4 y 3.2.1.13, respectivamente. Para cada filtro, se muestran las medidas de transmitancia, que se realizaron en la siguiente secuencia: i) Frescas: tras ser depositadas en el equipo de alto vacío, se trasladan inmediatamente al equipo de UHV (descrito en la sección 3.2.1) y se mantienen en vacío hasta ser medidas en la cámara de reflectometría, generalmente en ese mismo día o al día siguiente. La exposición a la atmósfera es menor que 15 minutos. Esas medidas se realizan en incidencia normal. ii) Envejecidas: las muestras frescas, tras ser medidas, son extraídas del equipo de UHV y almacenadas en desecadores durante días. Después, esas muestras se introducen de nuevo en el reflectómetro para volver a medirlas. Estas medidas se realizan en incidencia normal. iii) Transmitancia fuera de la normal: tras las medidas anteriores, las muestras no se extraen del equipo y se mide a continuación su transmitancia a 16° (el semiángulo de apertura del instrumento) con respecto a la normal. Dado que el monocromador induce una polarización parcial desconocida en la radiación generada por la lámpara, se realizaron medidas de transmitancia a 16° en dos planos perpendiculares de incidencia, por lo que la media de ambas medidas es igual a la transmitancia del filtro para radiación no polarizada. iv) Medidas en el espectrofotómetro: se mide la transmitancia de las muestras en incidencia normal con el espectrofotómetro tras periodos de almacenamiento en un desecador de ~ 15 -20 días.

Una vez acabadas todas las medidas, las muestras se almacenaron en un desecador, hasta que fueron extraídas para su empaquetamiento y posterior envío a China. En la tabla 6 se resumen los tiempos en los que las muestras estuvieron expuestas a la atmósfera hasta que fueron medidas.

	Tiempos de exposición a la atmósfera (desecador)			
	Nombre muestra	T (0° , FUV)	T (0° y 16° , FUV)	T (0° , $\lambda > 200$ nm)
Filtros para $\lambda = 135.6$ nm	AMMG0712	<15 min	10 días	~ 15 -20 días
	AMMG0812-1	<15 min	13 días	~ 15 -20 días
	AMMG0812-2	~ 24 h	13 días	~ 15 -20 días
Filtros para la banda LBH	QAMMG0612-a	<15 min	12 días	~ 15 -20 días
	QAMMG0612-b	<15 min	13 días	~ 15 -20 días
	QAMMG0612-c	<15 min	16 días	~ 15 -20 días

Tabla 6. Resumen de los tiempos de exposición a la atmósfera transcurridos desde la deposición de los filtros hasta sus medidas.

Las figuras 6.11, 6.12 y 6.13 muestran los resultados experimentales obtenidos para los tres filtros centrados en la línea 135.6 nm, y las figuras 6.14, 6.15 y 6.16 muestran los resultados experimentales obtenidos para los tres filtros centrados en la banda LBH.

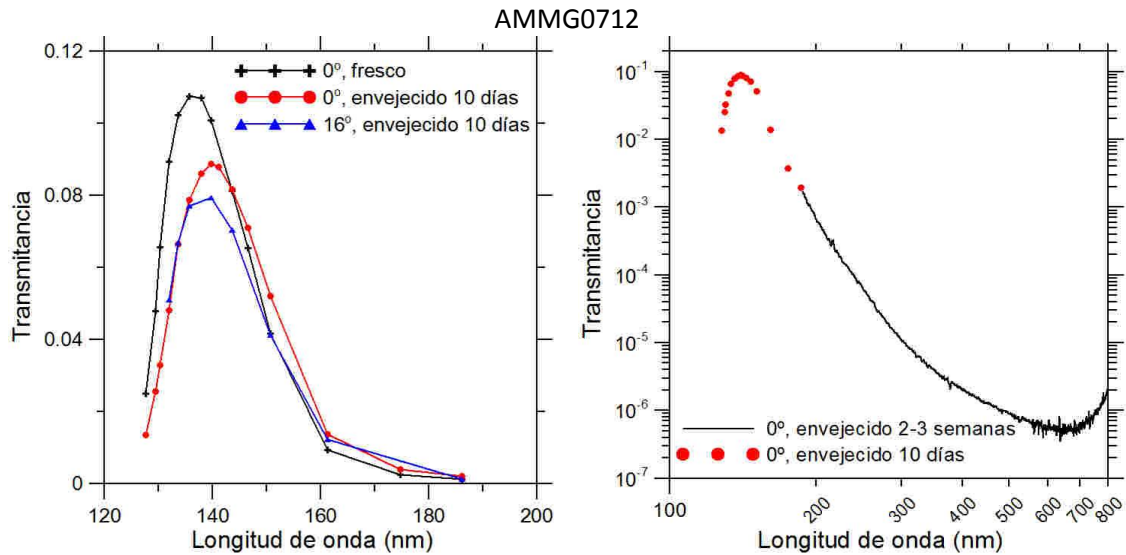


Fig. 6.11. Transmittancia del filtro AMMG0712 en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

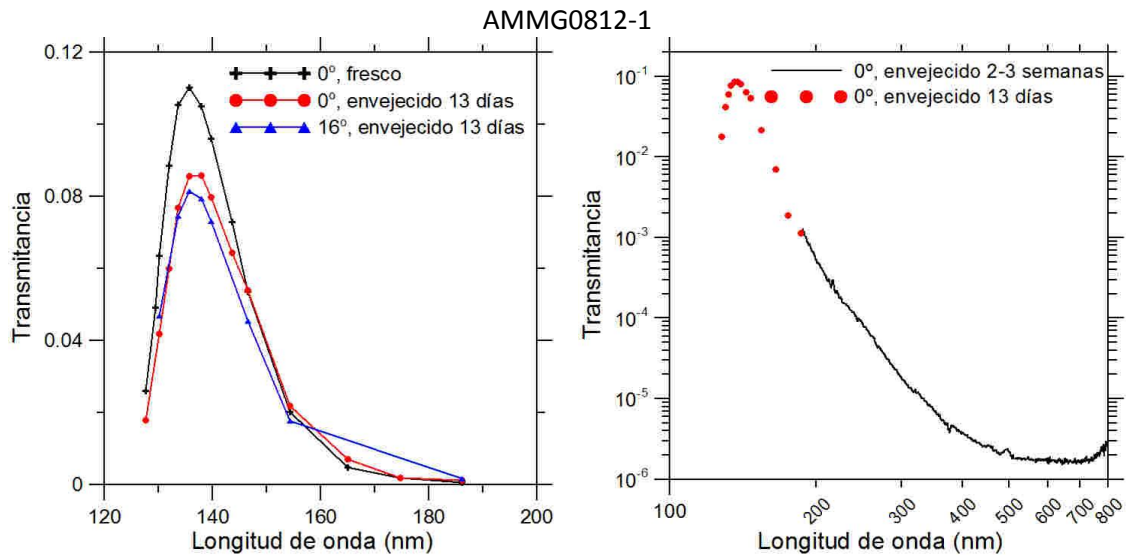


Fig. 6.12. Transmittancia del filtro AMMG0812-1 en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

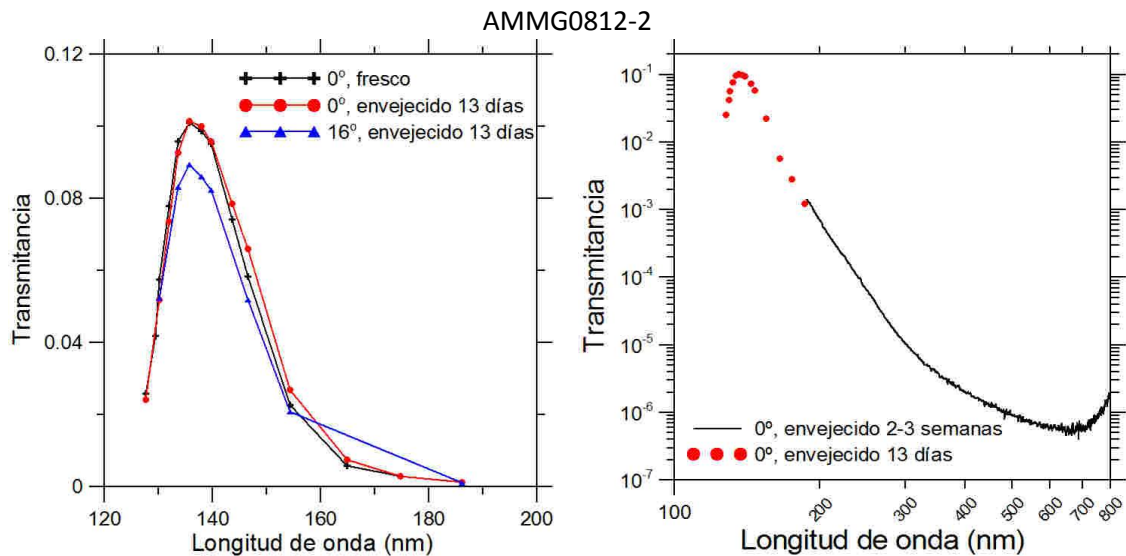


Fig. 6.13. Transmittancia del filtro AMMG0812-2 en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

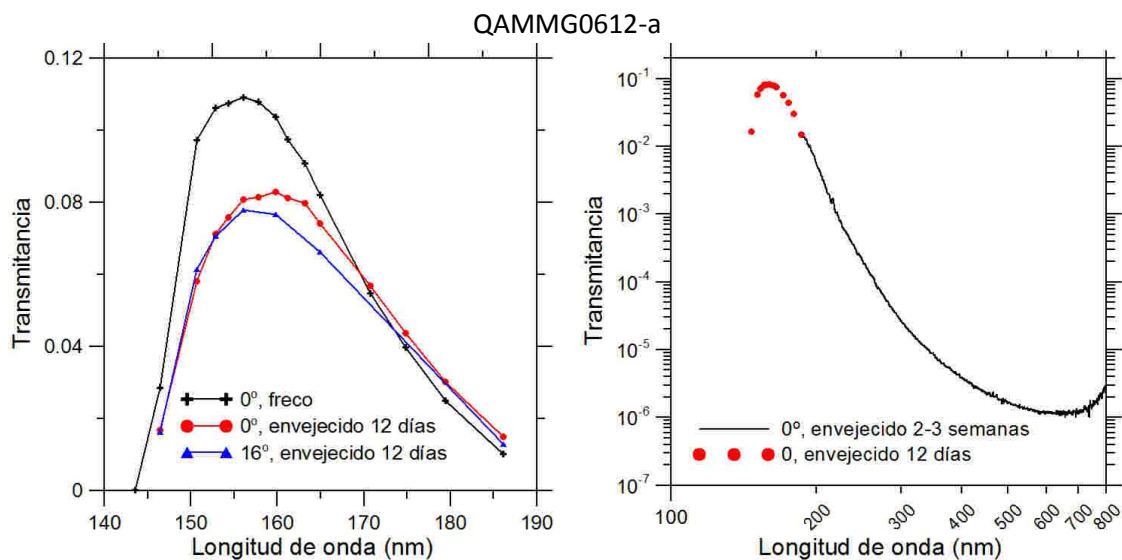


Fig. 6.14. Transmittancia del filtro QAMMG0612-a en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

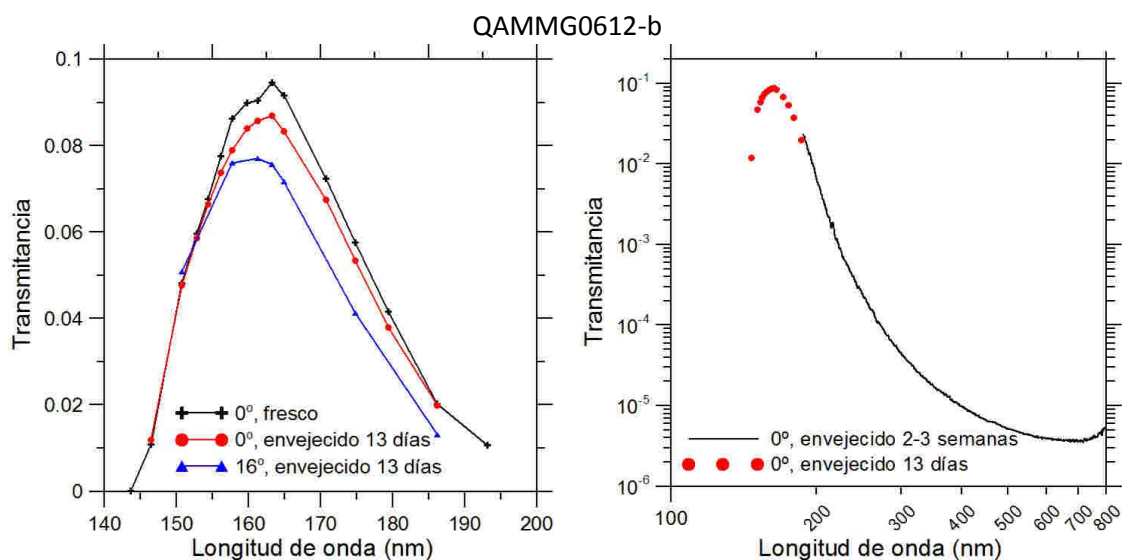


Fig. 6.15. Transmittancia del filtro QAMMG0612-b en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

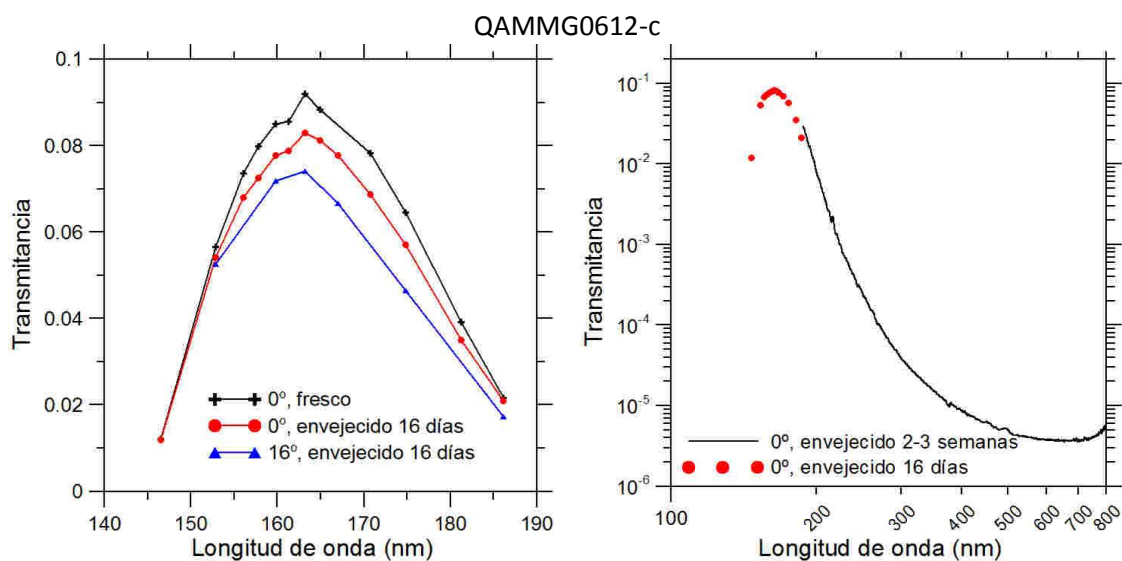


Fig. 6.16. Transmittancia del filtro QAMMG0612-c en función de la longitud de onda de los fotones incidentes.

En la tabla 7 se comparan los valores experimentales obtenidos para las muestras envejecidas con los requisitos que se habían exigido. En verde y rojo se presentan los requisitos que se han cumplido y los que no, respectivamente. Respecto a estos últimos, el desarrollo de los filtros se fue haciendo de manera interactiva con el grupo del CSSAR, para ir adaptando los requisitos ligeramente, y dar prioridad a los más importantes cuando todos no podían cumplirse simultáneamente.

Valores obtenidos para los filtros centrados en 135.6 nm				
Requisito	Requerido	AMMG0712	AMMG0812-1	AMMG0812-2
λ_{central}	135.6 nm	139.8 nm	136.7 nm	135.7 nm
$\Delta\lambda_{\text{central}}$	± 2.5 nm	+4.3 nm	+1.1 nm	+0.1 nm
FWHM	≤ 15 nm	21.7 nm	18.7 nm	18.8 nm
$T_{135.6 \text{ nm}}$	≥ 0.10	0.089	0.087	0.101
$T_{200 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	< 0.01	8.5E-03	6.3E-03	6.8E-03
$T_{250 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	< 0.001	8.0E-04	9.8E-04	6.4E-04
$T_{300 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	$< 4 \cdot 10^{-4}$	1.4E-04	2.1E-04	1.1E-04
$T_{350 \text{ nm}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$	5.0E-05	8.2E-05	3.8E-05
$T_{\text{visible}}/T_{135.6 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$	1.1E-05	2.6E-05	9.4E-06
Valores obtenidos para los filtros centrados en la banda LBH				
Requisito	Requerido	QAMMG0612-a	QAMMG0612-b	QAMMG0612-c
λ_{central}	160.0 nm	159.8 nm	163.1 nm	163.1 nm
$\Delta\lambda_{\text{central}}$	± 2.5 nm	-0.2 nm	+3.1 nm	+3.1 nm
FWHM	~ 20 nm	26.7 nm	28.5 nm	28.6 nm
$T_{160 \text{ nm}}$	≥ 0.10	0.082	0.087	0.083
$T_{\lambda \leq 135.6 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	< 0.005	~ 0	~ 0	~ 0
$T_{200 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	< 0.01	6.8E-02	8.1E-02	1.1E-01
$T_{250 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	< 0.001	2.4E-03	2.8E-03	3.1E-03
$T_{300 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	$< 4 \cdot 10^{-4}$	3.1E-04	5.3E-04	5.0E-04
$T_{350 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$	1.0E-04	2.1E-04	1.9E-04
$T_{\text{visible}}/T_{160 \text{ nm}}$	$\leq 3 \cdot 10^{-4}$	2.0E-05	6.1E-05	6.4E-05

Tabla 7. Resumen de los valores experimentales obtenidos en las muestras envejecidas.

Como ya se mencionó en el apartado 6.3.2, los requisitos ópticos fueron establecidos a partir de unas estimaciones preliminares; algunos de dichos requisitos resultaron ser demasiado exigentes, tal como la ratio $T_{200 \text{ nm}}/T_{160 \text{ nm}} < 0.01$ para los filtros centrados en la banda LBH, la cual se extiende hasta 180 nm, y está muy próxima a 200 nm.

6.3.5 Evolución de la transmitancia de los filtros en el tiempo

En general, se pueden resumir los efectos del envejecimiento en la transmitancia de los filtros en la zona del FUV en:

- La transmitancia máxima bajó de media un 13%.
- La longitud de onda del máximo se desplazó ligeramente hacia longitudes de onda más largas.
- La FWHM se vio incrementada de media un 11%.

En todos los filtros se aprecia que la transmitancia se reduce cuando éstos se exponen a la atmósfera. Como ya se ha visto en anteriores trabajos [32], las propiedades ópticas del MgF_2 depositado en lámina delgada se modifican sensiblemente al ser expuesto a la

atmósfera, ya que este material es poroso y tiende a incorporar vapor de agua e hidrocarburos presentes en el aire, por lo que aumenta su absorción. Este efecto provoca una caída de transmitancia por adsorción de vapores de la lámina más externa de MgF_2 . La bajada de la transmitancia de los filtros puede ser también atribuida, en menor medida, a la posible oxidación limitada de la capa de Al más externa, debido a que los poros de la capa protectora de MgF_2 podrían permitir al oxígeno atmosférico llegar hasta la lámina de Al más externa en algunos puntos y oxidarla parcialmente. Para explicar el desplazamiento del máximo interferencial de transmitancia de los filtros hacia longitudes de onda más largas hace falta, bien un cambio en los espesores del material espaciador (MgF_2), lo cual es improbable, o bien la formación de un compuesto en las intercaras MgF_2/Al con constantes ópticas diferentes de las del material espaciador; Weimer *et al.* [179], sugieren que en las intercaras se puede dar la formación de AlF_3 , lo que podría explicar un desplazamiento de los picos a longitudes de onda más largas.

Por último, un caso muy ilustrativo acerca de la evolución de la transmitancia en el tiempo es el del filtro AMMG0812-2, cuya transmitancia fue medida por primera vez tras 24 horas de exposición a la atmósfera (debido a que se preparó en un mismo ciclo junto a AMMG0812-1 y fue esta muestra la que se midió en primer lugar, de modo que es el único filtro que se midió con un tiempo de exposición a la atmósfera superior a 15 minutos) y fue medida de nuevo tras 13 días de almacenamiento en un desecador; se observa que ambas medidas de transmitancia coinciden, por lo que se estima que la mayor caída en la transmitancia producida en las láminas se da en las primeras horas de exposición a la atmósfera.

6.3.6 Conclusiones

En este trabajo se han diseñado, construido y caracterizado los filtros para el modelo de ingeniería del instrumento Ionospheric Photometer (IP), instrumento para el estudio de la ionosfera terrestre y que será instalado en el satélite Feng-Yun 3D (FY-3D), con fecha de lanzamiento prevista para el 2015; Los filtros se han diseñado siguiendo unas especificaciones técnicas exigentes que aunque todas no pudieron cumplirse simultáneamente, se asignaron prioridades para los requisitos más necesarios. En particular, se obtuvieron unos rechazos en el visible de un nivel que no se ha encontrado en la literatura. El comportamiento de estos filtros ha sido analizado en el plazo de 2-3 semanas y se ha comprobado que su eficiencia es aceptable al cabo de ese tiempo, donde se estima que ocurren la mayor parte de los efectos del envejecimiento.

6.4- Calibraciones fuera de banda de multicapas para el instrumento “Atmospheric Imaging Assembly (AIA)” a bordo del “Solar Dynamics Observatory (SDO)”

6.4.1 Información acerca del instrumento

El Atmospheric Imaging Assembly (AIA) es uno de los tres instrumentos a bordo del observatorio Solar Dynamics Observatory (SDO), que fue puesto en órbita por la NASA el 11 de febrero de 2010 para estudiar el Sol. Entre los objetivos del instrumento AIA está el de resolver el enigma más intrigante en la física solar moderna: el origen y los mecanismos de calentamiento de la corona, por medio del estudio del campo magnético del Sol y su plasma. El objetivo final es obtener información suficiente para modelar y predecir la actividad solar, incluidos los fenómenos extremos (como llamaradas y eyecciones de masa coronal) que, cuando se dirigen hacia la Tierra, pueden interrumpir las comunicaciones por satélite, afectar a las redes eléctricas y suponen amenazas para la aviación y para la seguridad de los astronautas.

Actualmente AIA es una de las misiones solares más avanzadas, y proporciona imágenes de la corona solar (hasta 1.3 diámetros solares) en siete canales con longitudes de onda pertenecientes al ultravioleta extremo (EUV): 9.39, 13.10, 17.11, 19.35, 21.13, 30.38 y 33.54 nm, y tres canales en el UV/visible. El AIA consta de 4 telescopios. La resolución espacial de cada uno de ellos es de 1 segundo de arco, el campo de visión es de 41 minutos de arco, el tiempo que tarda en tomar una imagen en cada canal es de 10-12 segundos y está tomando imágenes del Sol 24 horas al día sin interrupción. En la figura 6.17 se muestra un ejemplo de las imágenes tomadas del Sol por el AIA el día en que fue escrito este párrafo (6-5-2013):

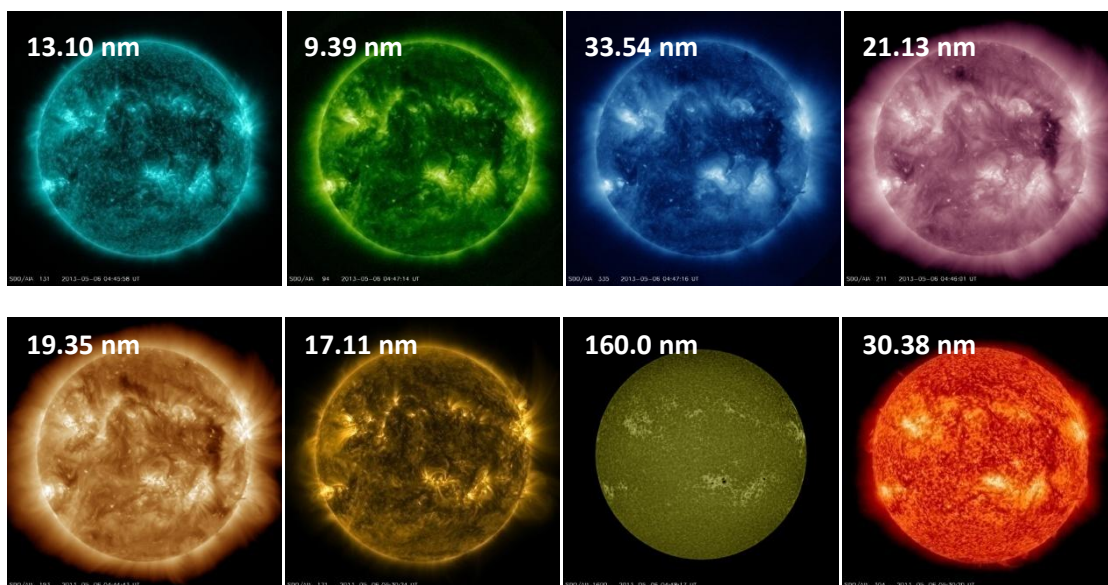


Fig. 6.17. El Sol observado por el instrumento AIA en los siete canales del EUV y un canal FUV (160.0 nm) el día 6-5-2013, disponibles en <http://sdo.gsfc.nasa.gov> [180]. De izquierda a derecha, y de arriba hacia abajo, canal 13.10, 9.39, 33.54, 21.13, 19.35, 17.11, 160.0 y 30.38 nm.

El instrumento AIA se compone de cuatro telescopios tipo Cassegrain, cada uno de los cuales incluye un espejo principal y otro secundario, que operan en ángulos de incidencia

cuasi-normales. Cada telescopio proporciona imágenes en dos longitudes de ondas, ya que cada mitad de los espejos de cada telescopio está recubierta por una multicapa diferente. Los pares de longitudes de onda asignadas a cada telescopio son: 13.10 / 33.54 nm, (telescopio 1), 21.13 / 19.35 nm (telescopio 2), FUV / 17.11 nm (telescopio 3) y 30.38 / 9.39 nm (telescopio 4). Las longitudes de onda en el EUV fueron seleccionadas con el fin de observar la corona solar en temperaturas específicas correspondientes a líneas de emisión de iones de Fe y He (30.38 nm) como se muestra en la Tabla 8.

Canal (nm)	Iones	Región solar de interés	Log(T) característico
30.38	He II	Cromosfera, reg. de transición	4.7
160	C IV+continuum	Reg. de transición, fotosfera sup.	5.0
17.11	Fe IX	Corona, reg. de transición.	5.8
19.35	Fe XII, XXIV	Corona y llamaradas de plasma	6.2, 7.3
21.13	Fe XIV	Región activa de la corona	6.3
33.54	Fe XVI	Región activa de la corona	6.4
9.39	Fe XVIII	Región de llamaradas	6.8
13.1	Fe VIII, XXI	Región de llamaradas	5.6, 7.0

Tabla 8: Líneas de emisión, niveles de ionización, regiones de emisión y temperatura característica [180].

El emparejamiento de longitudes de onda en cada telescopio es tal que, el uso del filtro de transmitancia bien de Zr o bien de Al, es suficiente para la selección de una de las longitudes de onda en el par y la supresión de la otra, con la excepción de la del telescopio 2 (19.3/21.1 nm), donde ambas longitudes de onda se sitúan en la región de transmisión del filtro de Al (por encima de su borde de absorción $L_{2,3}$, en 17 nm); en este caso, se utiliza un obturador mecánico como selector de longitud de onda [19]. El desarrollo de estos recubrimientos multicapa para cada uno de los siete canales de EUV ha sido discutido en detalle por Soufli *et al.* [133]. Las multicapas usadas finalmente para cada canal del EUV fueron: multicapas de Mo/Y para el canal de 9.39 nm, multicapas de Mo/Si para los canales 13.10, 17.11, 19.35 y 21.13 nm, y multicapas de SiC/Si para los canales de 30.38 y 33.54 nm.

Para permitir el seguimiento a largo plazo de las propiedades de los recubrimientos del instrumento AIA en vuelo, se prepararon varios testigos a la vez que se depositaban los recubrimientos que iban a ser ensamblados en el instrumento AIA. Para los testigos se utilizaron sustratos de Si (100) de $\sim 525 \mu\text{m}$ de espesor. Algunos testigos fueron almacenados en contenedores especiales con los espejos de vuelo AIA hasta que dichos espejos se instalaron en el instrumento AIA a bordo del SDO. Otros testigos, con unas dimensiones de unos $20 \times 20 \text{ mm}^2$, fueron almacenados en ambiente de laboratorio (aire).

6.4.2 Calibraciones del instrumento

El análisis detallado de los datos transmitidos por el instrumento AIA requiere un conocimiento preciso de la respuesta del instrumento en función de longitud de onda, en el intervalo 4-90 nm. El objetivo de este trabajo es calibrar la reflectancia de todas las multicapas en dicho intervalo. No es necesario conocer la reflectancia en longitudes de onda superiores a 90 nm, ya que los filtros de Al a bordo de la AIA son fuertemente absorbentes en esa región espectral.

Las imprecisiones en la calibración de los espejos pueden complicar significativamente la interpretación de las observaciones. Por ejemplo, si las mediciones de calibración

subestiman la respuesta del instrumento en una determinada línea de emisión de la atmósfera solar a temperaturas muy bajas, entonces la emisión de esta línea "fría" puede ser atribuida a material "más caliente", lo que llevaría a conclusiones erróneas acerca de los procesos físicos que rigen la corona solar. Para un canal que selecciona una longitud de onda dada, los fotones fuera de banda que se reflejan en las multicapas y no son suprimidos por los filtros de transmisión a bordo el instrumento AIA, llegan hasta los detectores y pueden introducir errores en el análisis de datos. Por lo tanto, el conocimiento de la sensibilidad del instrumento a la radiación fuera de banda para cada canal es esencial para optimizar la capacidad de diagnóstico del instrumento AIA.

En las calibraciones fotométricas iniciales del instrumento AIA en 2005, presentadas por Boerner *et al.* [19], se hicieron únicamente medidas en banda (primer pico de Bragg) de cada uno de los espejos de vuelo. Posteriormente, en 2009, la Dra. Soufli midió en banda y fuera de banda los testigos de vuelo que habían sido almacenados en el aire, en la línea 6.3.2 del sincrotrón ALS (descrita en la sección 3.2.3) en el intervalo 4-50 nm [181]; en dicha línea no se puede medir longitudes de onda por encima de 50 nm.

El objetivo de este apartado ha sido calibrar la reflectancia de todos los testigos de vuelo del instrumento AIA en el intervalo 50-90 nm, intervalo que no pudo ser medido en las calibraciones realizadas en 2009. La solución inicial para la calibración fue construir un modelo de reflectancia para cada una de las multicapas a partir de los datos experimentales en el intervalo 4-50 nm, con la intención de extrapolar dicho modelo hasta 90 nm. La construcción de dichos modelos se detalla en la sección 6.4.3. La extrapolación de dichos modelos desde 50 hasta 90 nm mostró que la reflectancia nominal en dicho intervalo de todas las multicapas para el EUV del AIA era significativa y no despreciable, por lo que se decidió finalmente medir la reflectancia de los testigos de vuelo en el intervalo de 48.7 a 90 nm en el equipo de reflectometría de GOLD (descrito en la sección 3.2.1) en 2012. Las mediciones en la línea 6.3.2 del ALS se realizaron con un ángulo de incidencia de 3°, para que coincidiese con el ángulo de los espejos de vuelo del AIA; las mediciones en las instalaciones de GOLD se realizaron a 5°. En la sección 6.4.4 se muestran las medidas realizadas y se comparan con las extrapolaciones de los modelos construidos en la sección 6.4.3. Finalmente, en la sección 6.4.5 se resumen los logros más importantes obtenidos en este trabajo.

6.4.3 Constantes ópticas y modelos de reflectancia

Para cada una de las siete multicapas de AIA para el EUV se construyó un modelo para la reflectancia medida en la región 4-50 nm, con la intención de extrapolar ese modelo y predecir la reflectancia en el intervalo 50-90 nm. Para la construcción de los modelos se usó el programa IMD [182], y una recopilación de constantes ópticas experimentales. En esta sección se van a presentar los conjuntos de constantes ópticas que se construyeron para cada componente de las multicapas, además de los modelos realizados y las extrapolaciones de dichos modelos.

6.4.3.1 Constantes ópticas

En las siguientes figuras se presentan las constantes ópticas existentes en la bibliografía para cada uno de los materiales, y se elige el conjunto final de constantes ópticas que se empleó para el modelo de reflectancia. Teniendo en cuenta que las multicapas del AIA fueron depositadas en UHV mediante la técnica de pulverización magnetrón sobre sustratos a temperatura ambiente [133], se han buscado en la bibliografía constantes ópticas en el intervalo 4-90 nm obtenidas a partir de medidas en muestras depositadas por dicha técnica o técnicas similares. Las constantes ópticas de la bibliografía van a ser clasificados atendiendo a la preparación de cada material. Por debajo de 43 nm ante la carencia de datos experimentales, en muchos casos se usó la aproximación semiteórica de átomos independientes de Henke *et al.* [101], disponibles en [183]; cuando existen datos experimentales se incorporan de manera congruente en el modelo de Henke. Los valores de constantes ópticas existentes en la bibliografía en longitudes de onda superiores a 90 nm no serán considerados en esta sección.

6.4.3.1.1 Molibdeno

La bibliografía acerca de constantes ópticas del Mo es muy extensa. Los resultados de constantes ópticas obtenidas a partir de láminas depositadas mediante la técnica de pulverización magnetrón son los siguientes: Tarrio *et al.* [184], en el intervalo 8.26-35.4 nm, a partir de medidas de reflectancia in-situ, Soufli y Gullikson [185], en el intervalo 1.33-20.65 nm, a partir de medidas de transmitancia sobre un sándwich C-Mo-C, y Windt [186], (Windt 1991 en la figura 6.18) en el intervalo 1.33-30.4 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ. Los datos experimentales de Tarrio *et al.* y Soufli y Gullikson ya habían sido incorporados al modelo de Henke *et al.* [101].

A continuación se mencionan conjuntos de datos de constantes ópticas obtenidos con láminas depositadas mediante otras técnicas. Por IBD: Larruquert y Keski-Kuha [142], en el intervalo 49-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ, aunque las muestras estuvieron expuestas a la atmósfera aproximadamente 5 minutos. Por e-beam: Windt *et al.* [50], (Windt 1988 en la figura 6.18) en el intervalo 2.4-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ.

También se dispone de constantes ópticas obtenidas para material masivo: Weaver *et al.* [187], en el intervalo 20.6-90 nm, a partir de medidas de absorción (calorimetría) y reflectancia ex-situ, y Juenker *et al.* [188], en el intervalo 53.7-90 nm, a partir de medidas de reflectancia.

Las constantes ópticas arriba mencionadas, junto con los datos semiteóricos de Henke *et al.* [101] se muestran en la figura 6.18:

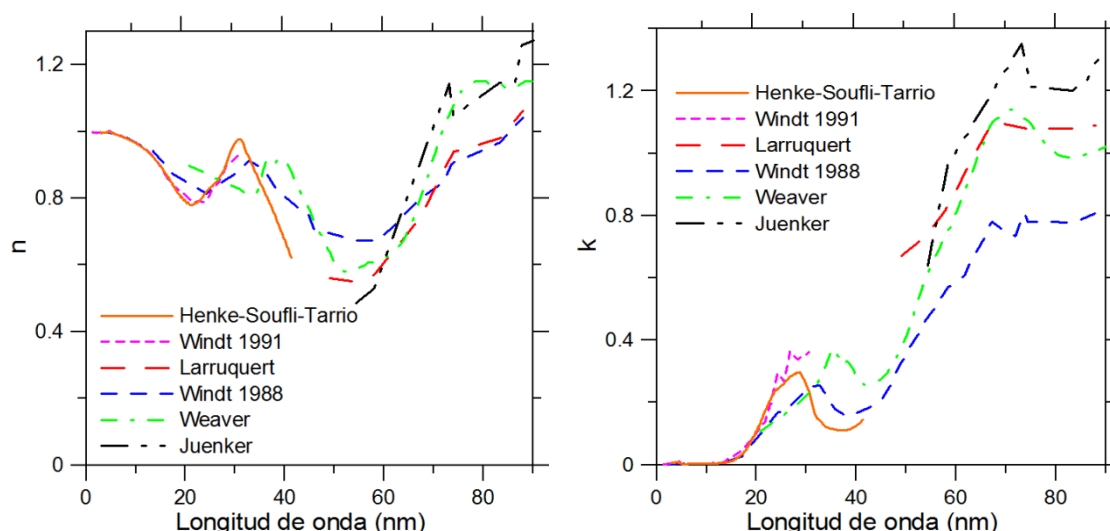


Fig. 6.18. Constantes ópticas del Mo en función de la longitud de onda de los fotones incidentes. Izquierda y derecha, n y k , respectivamente.

El conjunto final de constantes ópticas arriba presentadas contiene los datos semiteóricos de Henke (CXRO) *et al.* [101], desde 4 hasta 41.3 nm, [Actualizado con los valores obtenidos por Soufli y Gullikson [185], desde 1.3 hasta 20.6 nm, y re-actualizado con los valores de Tarrio *et al.* [184] desde 20.6 hasta 35.4 nm], y los datos de Larruquert y Keski-Kuha [142], desde 49 hasta 90 nm.

6.4.3.1.2 Silicio

Al igual que en el caso del Mo, la bibliografía acerca de constantes ópticas del Si amorfo es muy extensa. Las constantes ópticas obtenidas a partir de láminas depositadas mediante la técnica de pulverización magnetrón son las siguientes: Tarrio *et al.* [184], en el intervalo 8.26-35.4 nm, a partir de medidas de reflectancia in-situ y Windt *et al.* [186] (Windt 1991 en la figura 19), en el intervalo 1.33-30.4 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ.

A continuación se mencionan conjuntos de datos de constantes ópticas obtenidos con láminas depositadas mediante otras técnicas. Por e-beam: Windt *et al.* [189] (Windt 1988 en el gráfico), en el intervalo 2.4-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ; Pierce y Spicer [151], en el intervalo 24.8-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ y Phillipp [190], en el intervalo 47.6-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ. Por evaporación: los datos no publicados de Hunter (contenidos en la recopilación de Palik [156]), en el intervalo 12.4-65 nm, a partir de medidas de reflectancia y transmitancia.

También se dispone de constantes ópticas obtenidas para material masivo: Soufli y Gullikson [54], en el intervalo 2.4-41.3 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ en obleas de silicio, a las que se eliminó previamente el óxido mediante un ataque químico con un baño de HF:etanol, Sasaki *et al.* [191], en el intervalo 64.5-90 nm, a partir de medidas de reflectancia, y Gullikson *et al.* [192], en el intervalo 6.2-41.3 nm, a partir de medidas de reflectancia y absorción; las constantes ópticas de Soufli y Gullikson [54] y Gullikson *et al.* [192] han sido incluidas en los datos semiteóricos de Henke *et al.*

Las constantes ópticas arriba mencionadas, junto con los datos semiteóricos de Henke *et al.* [101] se muestran en la figura 6.19:

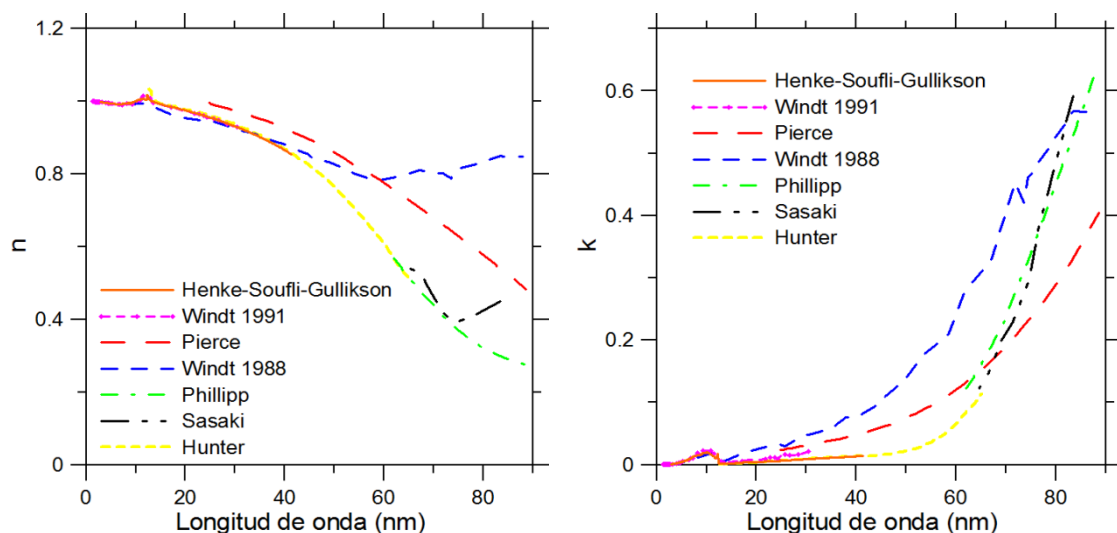


Fig. 6.19. Constantes ópticas del Si en función de la longitud de onda de los fotones incidentes. Izquierda y derecha, n y k , respectivamente.

El conjunto final de constantes ópticas arriba presentadas contiene los datos semiteóricos de Henke (CXRO) *et al.* [101], desde 4 hasta 41.3 nm, [Actualizado con los valores de Gullikson *et al.* [192], en el intervalo 6.2-41.3 nm, y re-actualizado con los valores de Soufli y Gullikson [54] desde 2.4 hasta 41.3 nm], los datos de Hunter [156], desde 41.9 hasta 64.9 nm y los datos de Phillipp [190], desde 69.8 hasta 90 nm.

6.4.3.1.3 Carburo de silicio

Al igual que en los casos del Mo y Si, la bibliografía acerca de constantes ópticas del SiC es muy extensa, aunque las únicas constantes ópticas obtenidas a partir de láminas depositadas mediante la técnica de pulverización magnetrón son las de Kortright y Windt [146], en el intervalo 2.36-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ.

A continuación se mencionan conjuntos de datos de constantes ópticas obtenidos con láminas depositadas mediante otras técnicas. Por IBS: Fernández-Perea *et al.* [56], en el intervalo 58.4-90 nm, a partir de medidas de reflectancia in-situ, y Larraquert y Keski-Kuha [142], en el intervalo 54.3-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ, aunque las muestras estuvieron expuestas a la atmósfera menos de 5 minutos. Por CVD, Windt *et al.* [189], en el intervalo 2.4-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ. Se incluye la compilación de constantes ópticas de Larraquert *et al.* [55] que cubre todo el espectro electromagnético y ha sido presentada en el capítulo 4 de este trabajo; en esta compilación, se usaron datos de Fernández-Perea *et al.* [56] y de Kortright y Windt [146] en el intervalo 4-90 nm.

También se dispone de constantes ópticas obtenidas para material masivo: Por una parte, Rehn *et al.* [193] y por otra, los datos no publicados de Leveque y Lynch, todos ellos a partir de medidas de reflectancia, y todos contenidos en la publicación de Palik [156], en el intervalo 41.3-90 nm.

Las constantes ópticas arriba mencionadas se muestran en la figura 6.20:

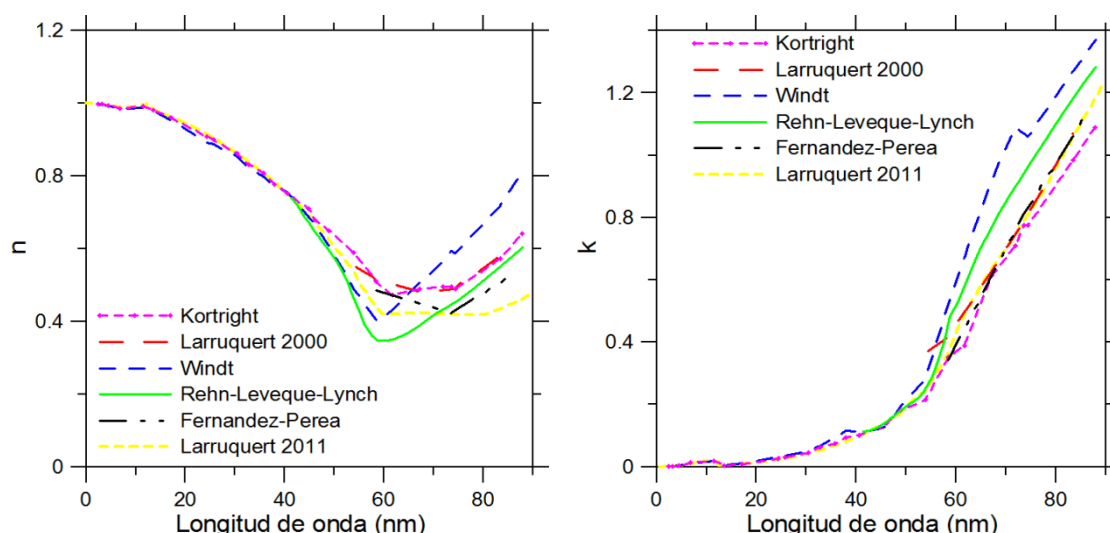


Fig. 6.20. Constantes ópticas del SiC en función de la longitud de onda de los fotones incidentes. Izquierda y derecha, n y k , respectivamente

El conjunto final de constantes ópticas arriba presentadas fue la compilación de Larruquert *et al.* [55], desde 4 hasta 90 nm.

6.4.3.1.4 Ytrio

En el caso del Y, la bibliografía acerca de sus constantes ópticas es escasa. El único conjunto de constantes ópticas obtenidas a partir de láminas depositadas mediante la técnica de pulverización magnetrón es el de Sae-Lao y Soufli [52], en el intervalo 0.9-41.3 nm, a partir de medidas de transmitancia ex-situ (las muestras se transportaron desde la campana de deposición hasta el refractómetro en un desecador). En ese trabajo se obtuvieron constantes ópticas hasta longitudes de ondas mayores, pero la extensión a dicha región se hizo con datos obtenidos para cristales por Weaver y Olson [194].

Se dispone de un conjunto de datos de constantes ópticas obtenido con láminas depositadas mediante evaporación: Chee *et al.* [195], en el intervalo 88.5-90 nm, a partir de medidas de reflectancia in-situ.

También se dispone de constantes ópticas obtenidas para material masivo: Brousseau *et al.* [196], en el intervalo 24.8-90 nm, a partir de medidas de espectroscopía de pérdida de energía de electrones ex-situ, y Weaver y Olson [194], en el intervalo 41.3-90 nm, a partir de medidas de reflectancia.

Las constantes ópticas arriba mencionadas se muestran en la figura 6.21:

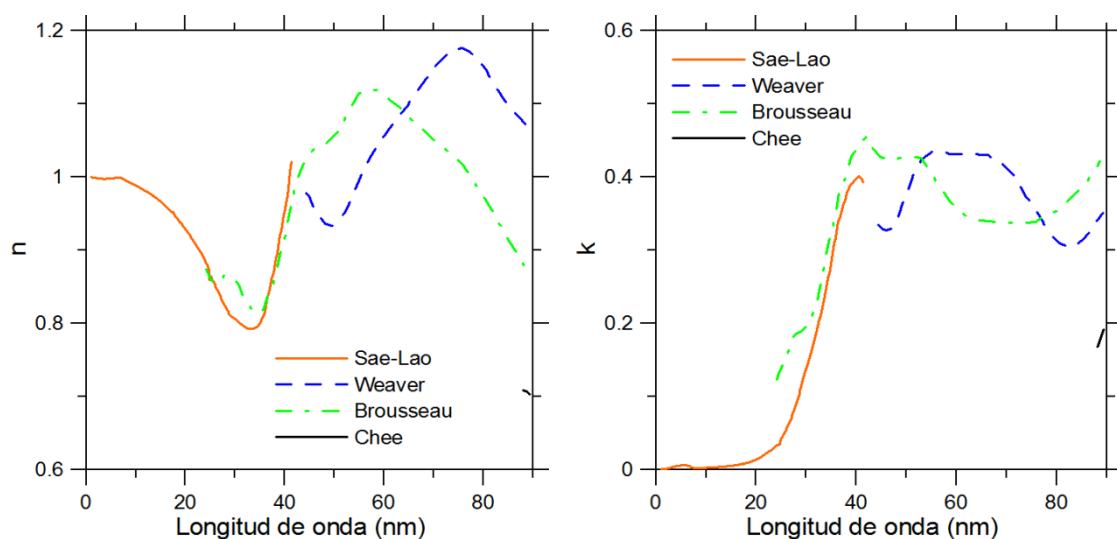


Fig. 6.21. Constantes ópticas del Y en función de la longitud de onda de los fotones incidentes. Izquierda y derecha, n y k , respectivamente

El conjunto final de constantes ópticas arriba presentadas contiene los datos de Sae-Lao y Soufli [52], desde 4 hasta 41.3 nm, y los datos de Weaver y Olson [194], desde 44.3 hasta 90 nm. El empalme en n se hizo siguiendo el criterio de [52].

6.4.3.1.5 Dióxido de silicio

Este material no está presente nominalmente en ninguna de las multicapas, aunque las de Mo/Si tienen como capa protectora una última lámina de Si, la cual, por estar en contacto directo con la atmósfera, se habrá oxidado en su parte más exterior y por lo tanto se habrá formado una lámina de SiO_x amorfo. La estequiometría que se usó en los modelos fue $x=2$, debido a la extensa bibliografía acerca de constantes ópticas de este material, aunque no se encontraron datos de constantes ópticas obtenidas sobre láminas depositadas mediante la técnica de pulverización magnetrón.

A continuación se describen los conjuntos de datos de constantes ópticas obtenidos a partir de muestras preparadas mediante diversas técnicas. Por oxidación en seco del silicio: Filatova *et al.* [197], en el intervalo 0.41-20.6 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ; por CVD, Tarrio y Schnatterly [198], en el intervalo 62.2-90.0 nm (también se incluyen datos de SiO_2 depositado mediante evaporación térmica en el mismo intervalo), obtenidas ex-situ a partir del espectro de dispersión inelástico de electrones (IES), y Tripathi *et al.* [199], en el intervalo 8-20 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ. Por e-beam: Phillipp *et al.* [190], en el intervalo 47.6-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ.

También se dispone de constantes ópticas obtenidas para material masivo: los datos no publicados de Hunter, contenidos en la publicación de Palik [156], en el intervalo 28.9-59.9 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ.

Las constantes ópticas arriba mencionadas, junto con los datos semiteóricos de Henke *et al.* [101] se muestran en la figura 6.22:

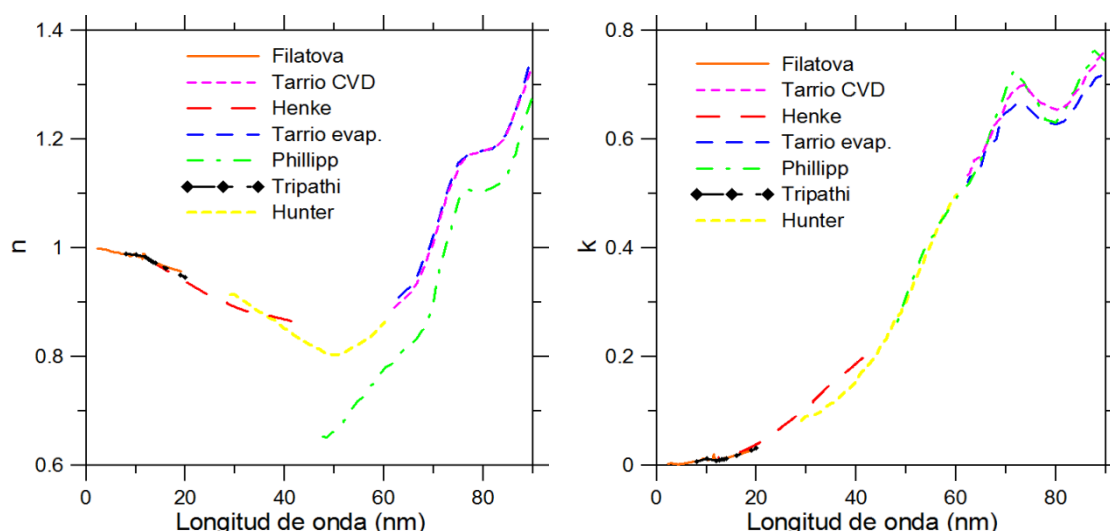


Fig. 6.22. Constantes ópticas del SiO_2 en función de la longitud de onda de los fotones incidentes. Izquierda y derecha, n y k , respectivamente

El conjunto final de constantes ópticas arriba presentadas contiene los datos de Filatova *et al.* [197], desde 4.2 hasta 19 nm, los datos de Hunter [156], desde 28.9 hasta 59.9 nm y los datos de Tarrio y Schnatterly (evaporación) [198], desde 62.2 hasta 90 nm. También se emplearon los valores de Si de Windt *et al.* [189], ya que en el artículo se reconoce una probable oxidación.

6.4.3.1.6 Óxidos de molibdeno

Al igual que el SiO_2 amorfo, estos óxidos no están presentes nominalmente en ninguna de las multicapas, pero la multicapa de Mo/Y tienen como material más externo una lámina de Mo, el cual por estar en contacto directo con la atmósfera, estará oxidada al menos en una parte de su espesor; este óxido lo podemos expresar como Mo_yO_x , donde los óxidos más comunes del Mo son el dióxido (MoO_2) y el trióxido de molibdeno (MoO_3). En este caso, no se encontraron constantes ópticas del MoO_2 y MoO_3 para el intervalo de interés, excepto los datos de Itoh *et al.* [200], para MoO_3 , en el intervalo 50-90 nm, obtenidas a partir de medidas de reflectancia en cristales de MoO_3 enfriados a 3K.

Ante la escasez de valores experimentales y dado que las medidas de Windt *et al.* [50] fueron realizadas ex-situ y el propio artículo reconoce una presencia muy probable de oxidación, se tomó la decisión de utilizar estos datos como los correspondientes al óxido de Mo.

6.4.3.1.7 Óxidos de carburo de silicio

Al igual que el óxido de silicio y el óxido de molibdeno, este material no está presente nominalmente en ninguna de las multicapas, pero las multicapas de SiC/Si tienen como material más externo una lámina de SiC, el cual por estar en contacto directo con la atmósfera, estará al menos parcialmente oxidado. En este caso, se utilizó el mismo criterio que en el caso del óxido de molibdeno: se tomaron los datos obtenidos a partir de medidas ex-situ tanto de Kortright y Windt [146] como de Windt *et al.* [189] en el intervalo 4-90 nm, ya que en ambos casos el SiC estuvo expuesto a la atmósfera antes de ser medido.

6.4.3.1.8 Cromo

En las dos multicapas de SiC/Si se depositó una capa de adherencia de Cr de 20 nm, situada entre la multicapa y el sustrato. Esta capa se depositó para evitar un posible despegue de la multicapa, ya que las multicapas de SiC/Si poseen una elevada tensión mecánica compresiva (stress, superior a -1GPa). Para este material, no se encontraron constantes ópticas obtenidas a partir de muestras depositadas mediante pulverización magnetrón.

A continuación se mencionan conjuntos de datos de constantes ópticas obtenidos a partir de láminas depositadas mediante otras técnicas: por evaporación térmica, Larruquert y Keski-Kuha [142], en el intervalo 54.3-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ, sobre muestras que estuvieron 2h almacenadas en un desecador; Girault *et al.* [201], en el intervalo 24.8-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ y Sonntag *et al.* [202], que obtuvieron k en el intervalo 4.13-31 nm, a partir de medidas de transmitancia; por espectroscopía de pérdida de electrones, Wehenkel y Gauthe [203], que obtuvieron k en el intervalo 9.5-90 nm. Los valores de Wehenkel y Gauthe [203] y de Sonntag *et al.* [202] han sido incluidas en los datos semiteóricos de Henke *et al.* [101].

También se dispone de constantes ópticas obtenidas para material masivo: los datos de Olson y Lynch en el intervalo 42-90 nm, a partir de medidas de reflectancia ex-situ, contenidos en la publicación de Palik [156].

Las constantes ópticas arriba mencionadas, junto con los datos semiteóricos de Henke *et al.* [101], se muestran en la figura 6.23:

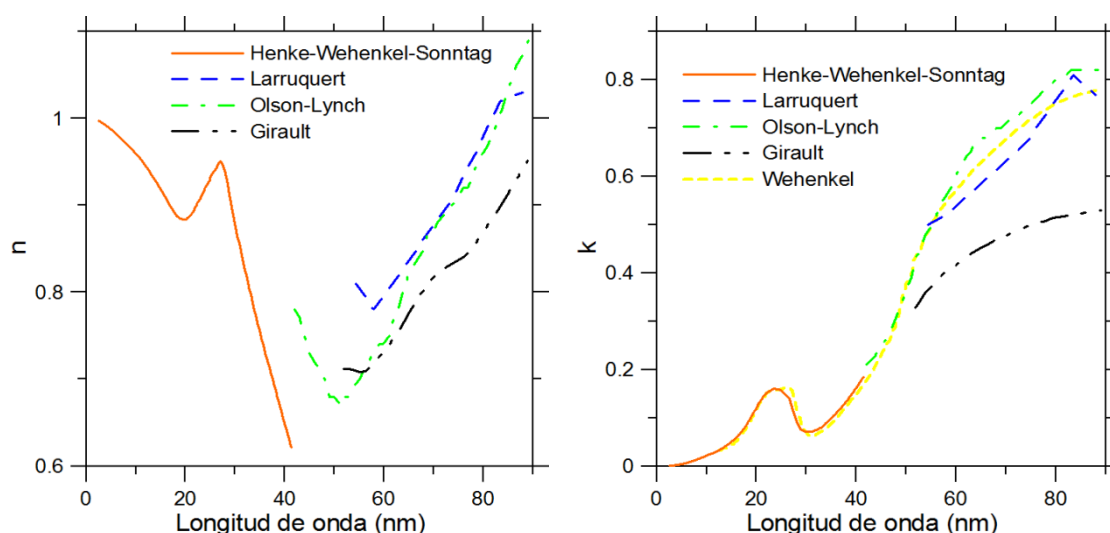


Fig. 6.23. Constantes ópticas del Cr en función de la longitud de onda de los fotones incidentes. Izquierda y derecha, n y k , respectivamente

El conjunto final de constantes ópticas arriba presentadas contiene los datos semiteóricos de Henke (CXRO) *et al.* [101], desde 4 hasta 41.3 nm, (que incluyen los valores de Wehenkel y Gauthe [203] y de Sonntag *et al.* [202]), y los datos de Larruquert y Keski-Kuha [142], desde 54.4 hasta 90 nm. El primer valor de n de Larruquert y Keski-Kuha fue eliminado para realizar un empalme suave en el intervalo 41.3-54.4 entre los dos conjuntos de datos.

6.4.3.2 Modelos de reflectancia

En este apartado se describen los modelos teóricos de las multicapas para la reflectancia medida experimentalmente en el intervalo 4-50 nm, y su extrapolación al intervalo 50-90 nm. Para cada multicapa se detalla en un cuadro las constantes ópticas usadas para cada material, sustrato y la capa de adhesión, si la hubiera. El objetivo es conseguir el modelo más realista posible que ajuste a los datos experimentales existentes para cada multicapa, para extrapolarlo y predecir la reflectancia desde 50 hasta 90 nm.

A continuación se presentan los parámetros característicos de una multicapa: N : número de bicapas; $d=d_1+d_2$: espesor de la bicapa, donde d_2 es el espesor del material espaciador y d_1 el espesor del segundo material; $\Gamma=d_1/d$: fracción del espesor del material no espaciador en la multicapa. σ : rugosidad rms.

En las cuatro multicapas de Mo/Si se depositó una lámina de protección de Si de 3.5 nm de espesor. En las multicapas sin capa de protección, se ha desacoplado la última bicapa con el fin de cambiar las constantes ópticas de la lámina en contacto con la atmósfera. Las muestras fueron medidas en la línea 6.3.2 del sincrotrón ALS en un ángulo de incidencia de 3° y con un grado de polarización $\rho=-0.82$. Para modelizar el sustrato sobre el que se depositaron las multicapas, se empleó una lámina de Si con una rugosidad de 0.1 nm, y una lámina de óxido nativo de 2 nm de espesor, con una rugosidad de 0.1 nm. En las multicapas SiC/Si se usó una lámina de adherencia de Cr de 20 nm de espesor, con una rugosidad estimada de 0.5 nm. Finalmente se dio más peso al ajuste en banda que fuera de banda, ante la dificultad de obtener un modelo compatible en todo el intervalo de medidas experimentales.

En las tablas 9-15 se muestran los parámetros usados en los ajustes de cada multicapa, junto con los materiales empleados para simular los componentes de las láminas.

- Multicapa de Mo/Y, centrada en 9.39 nm, con N=120, d=4.770 nm, $\Gamma=0.35$ y $\sigma(\text{Mo-Y})\approx\sigma(\text{Y-Mo})\approx0.55$ nm.

Mo/Y (Sintonizada en 9.39 nm)		
Parte de la multicapa	Material	Constantes óptica utilizadas
Bicapa externa	Mo	Windt (2.4-90 nm)
	Y	Sae-Lao (0.95-41.3 nm) y Weaver (44.3-90 nm)
Multicapa (x119 bicapas)	Mo	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Soufli (1.3-20.6 nm) y Tarrio (20.6-35.4 nm)], y Larruquert (49-90 nm)
	Y	Sae-Lao (0.9-41.3 nm) y Weaver (44.3-90 nm)
Substrato	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrio (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).

Tabla 9: Modelo para la multicapa Mo/Y centrada en 9.39 nm.

El resultado del modelo se muestra en la figura 6.24:

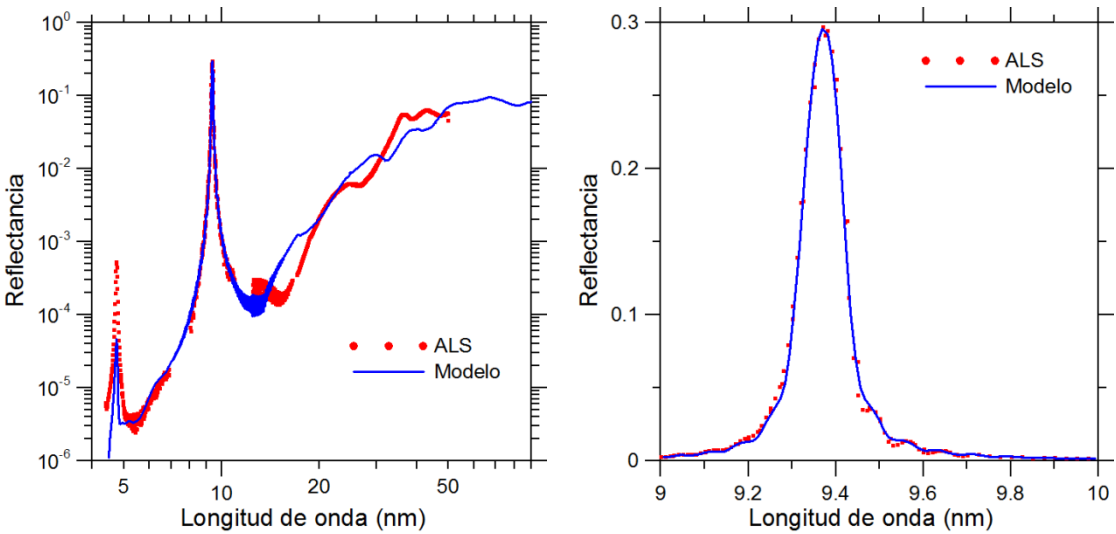


Fig. 6.24. Reflectancia a 3° experimental (rojo) y el modelo (azul) en función de la longitud de onda para la multicapa de Mo/Y centrada en 9.39 nm. A la izquierda, ajuste en banda y fuera de banda. A la derecha, ajuste en banda.

- Multicapa de Mo/Si, centrada en 13.10 nm, con $N=50$, $d=6.705$ nm, $\Gamma=0.36$, $\sigma(\text{Mo-Si}) = 0.11$ nm y $\sigma(\text{Si-Mo})=0.39$ nm.

Mo/Si (Sintonizada en 13.10 nm)		
Parte de la multicapa	Material	Constantes óptica utilizadas
Capa de protección	Si+SiO ₂	Windt (2.4-90 nm)
Multicapa (x50 bicapas)	Mo	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Soufli (1.3-20.6 nm) y Tarrio (20.6-35.4 nm)], y Larruquert (49-90 nm)
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Substrato	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrio (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).

Tabla 10: Modelo para la multicapa Mo/Si centrada en 13.10 nm.

El resultado del modelo se muestra en la figura 6.25:

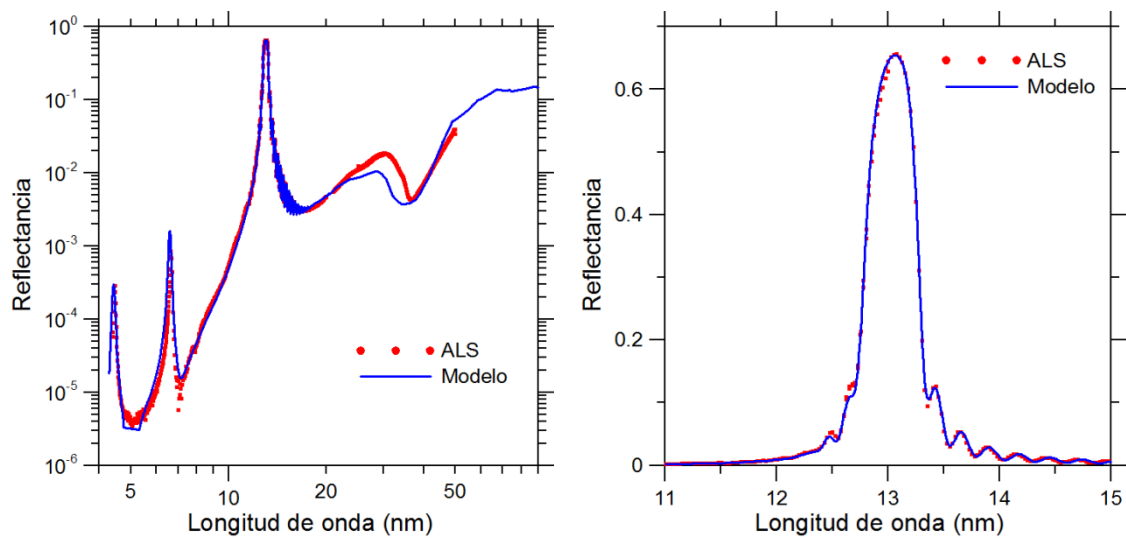


Fig. 6.25. Reflectancia a 3° experimental (rojo) y el modelo (azul) en función de la longitud de onda para la multicapa de Mo/Si centrada en 13.10 nm. A la izquierda, ajuste en banda y fuera de banda. A la derecha, ajuste en banda.

- Multicapa de Mo/Si, centrada en 17.11 nm, con $N=40$, $d=8.835$ nm, $\Gamma=0.175$, $\sigma(\text{Mo-Si})=0.36$ nm y $\sigma(\text{Si-Mo})=0.28$ nm.

Mo/Si (Sintonizada en 17.11 nm)		
Parte de la multicapa	Material	Constantes óptica utilizadas
Capa de protección	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Multicapa (x40 bicapas)	Mo	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Soufli (1.3-20.6 nm) y Tarrío (20.6-35.4 nm)], y Larruquert (49-90 nm)
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Substrato	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).

Tabla 11: Modelo para la multicapa Mo/Si centrada en 17.11 nm.

El resultado del modelo se muestra en la figura 6.26:

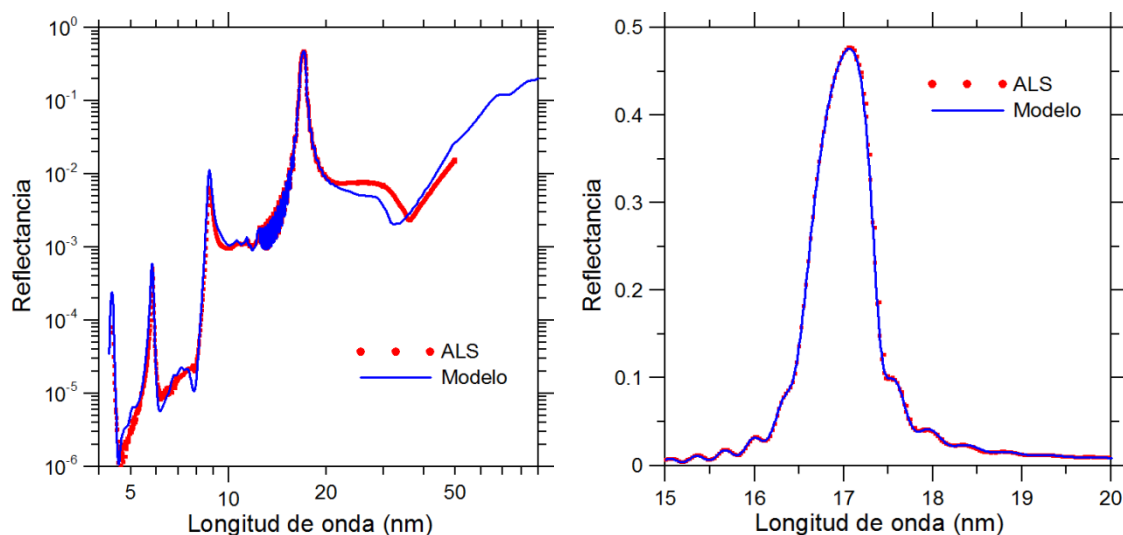


Fig. 6.26. Reflectancia a 3° experimental (rojo) y el modelo (azul) en función de la longitud de onda para la multicapa de Mo/Si centrada en 17.11 nm. A la izquierda, ajuste en banda y fuera de banda. A la derecha, ajuste en banda.

- Multicapa de Mo/Si, centrada en 19.35 nm, con $N=40$, $d=10.07$ nm, $\Gamma=0.16$, $\sigma(\text{Mo-Si})=0.23$ nm y $\sigma(\text{Si-Mo})=0.37$ nm.

Mo/Si (Sintonizada en 19.35 nm)		
Parte de la multicapa	Material	Constantes óptica utilizadas
Capa de protección	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Multicapa (x40 bicapas)	Mo	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Soufli (1.3-20.6 nm) y Tarrío (20.6-35.4 nm)], y Larruquert (49-90 nm)
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Substrato	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).

Tabla 12: Modelo para la multicapa Mo/Si centrada en 19.35 nm.

El resultado del modelo se muestra en la figura 6.27:

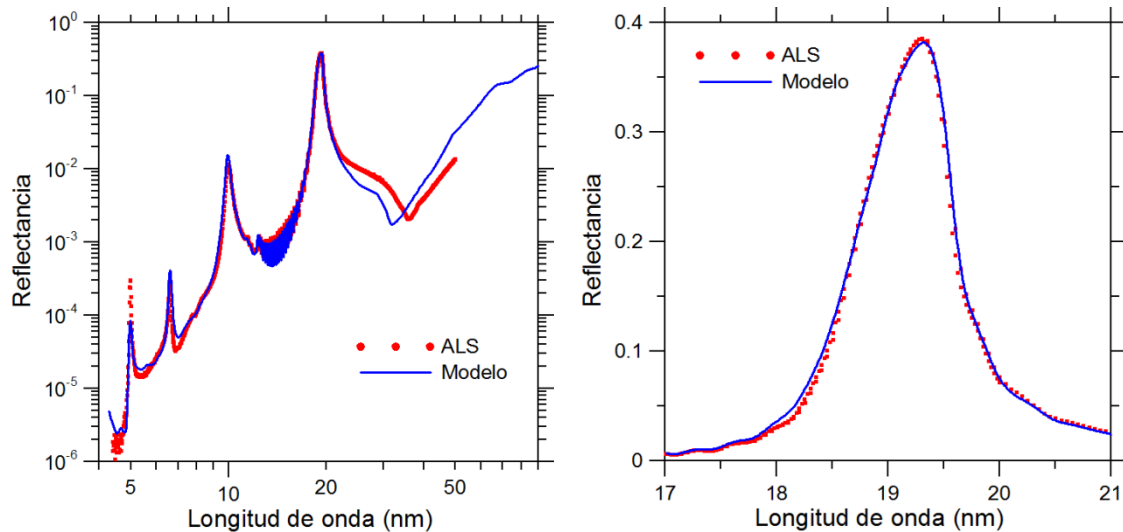


Fig. 27. Reflectancia a 3° experimental (rojo) y el modelo (azul) en función de la longitud de onda para la multicapa de Mo/Si centrada en 19.35 nm. A la izquierda, ajuste en banda y fuera de banda. A la derecha, ajuste en banda.

- Multicapa de Mo/Si, centrada en 21.13 nm, con $N=40$, $d=10.995$ nm, $\Gamma=0.12$, $\sigma(\text{Mo-Si})=0.90$ nm y $\sigma(\text{Si-Mo})=0.40$ nm.

Mo/Si (Sintonizada en 21.13 nm)		
Parte de la multicapa	Material	Constantes óptica utilizadas
Capa de protección	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Multicapa (x40 bicapas)	Mo	Henke (1-31.8 nm) [CXRO: actualizado por Soufli (1.3-20.6 nm) y Tarrío (20.6-35.4 nm)], Weaver (31.8-50 nm) y Larruquert (54.3-90 nm)
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Substrato	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).

Tabla 13: Modelo para la multicapa Mo/Si centrada en 21.13 nm.

El resultado del modelo se muestra en la figura 6.28:

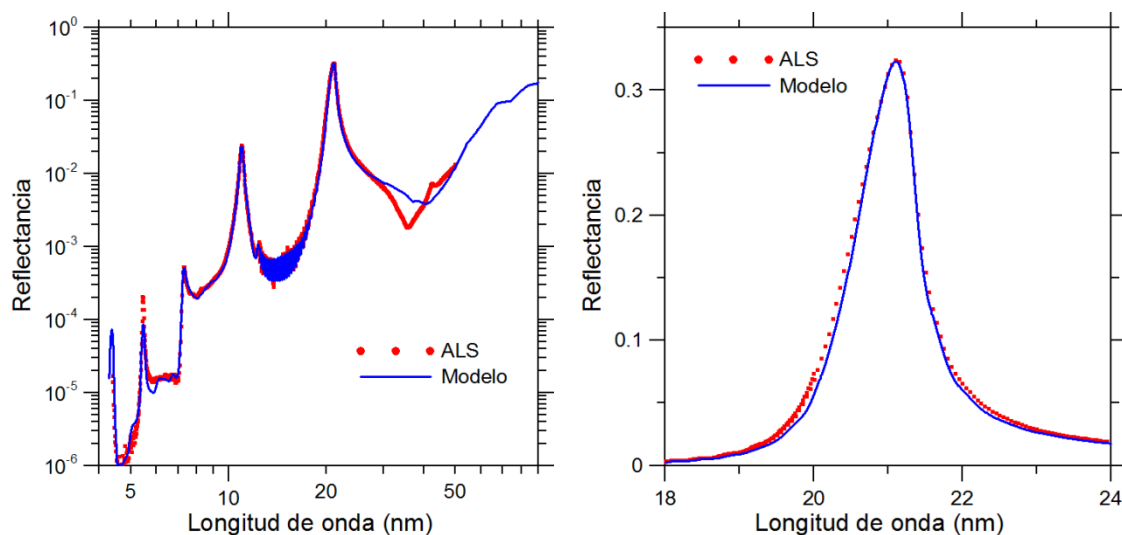


Fig. 6.28. Reflectancia a 3° experimental (rojo) y el modelo (azul) en función de la longitud de onda para la multicapa de Mo/Si centrada en 21.13 nm. A la izquierda, ajuste en banda y fuera de banda. A la derecha, ajuste en banda.

- Multicapa de SiC/Si, centrada en 30.38 nm, con $N=30$, $d=16.775$ nm, $\Gamma=0.35$, $\sigma(\text{SiC-Si})=1.04$ nm y $\sigma(\text{Si-SiC})=2.10$ nm.

SiC/Si (Sintonizada en 30.38 nm)		
Parte de la multicapa	Material	Constantes óptica utilizadas
Bicapa externa	SiC	Kortright (2.4-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Multicapa (x29 bicapas)	SiC	Larruquert (1-90 nm)
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Capa de adhesión	Cr	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: con los datos de Wehenkel y Gauthe, y Sonntag] y Larruquert (54.4-90 nm).
Substrato	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).

Tabla 14: Modelo para la multicapa SiC/Si centrada en 30.38 nm.

El resultado del modelo se muestra en la figura 6.29:

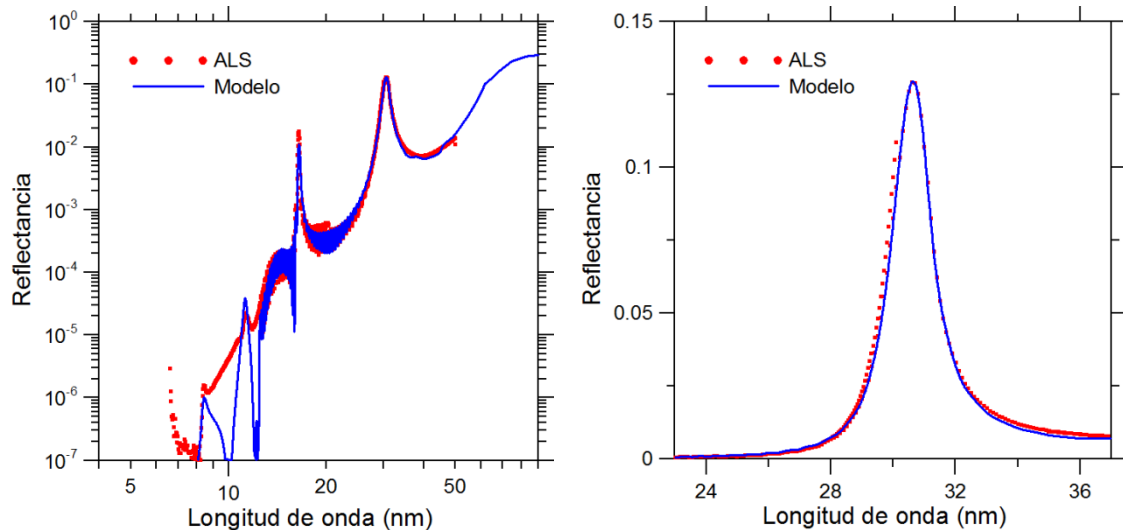


Fig. 6.29. Reflectancia a 3° experimental (rojo) y el modelo (azul) en función de la longitud de onda para la multicapa de SiC/Si centrada en 30.38 nm. A la izquierda, ajuste en banda y fuera de banda. A la derecha, ajuste en banda.

- Multicapa de SiC/Si, centrada en 33.54 nm, con $N=30$, $d=18.775$ nm, $\Gamma=0.25$, $\sigma(\text{SiC-Si})=1.90$ nm y $\sigma(\text{Si-SiC})=1.90$ nm.

SiC/Si (Sintonizada en 33.54 nm)		
Parte de la multicapa	Material	Constantes óptica utilizadas
Bicapa externa	SiC	Windt (4-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Multicapa (x29 bicapas)	SiC	Larruquert (1-90 nm)
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).
Capa de adhesión	Cr	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: con los datos de Wehenkel y Gauthe, y Sonntag] y Larruquert (54.4-90 nm).
Substrato	SiO ₂	Filatova (4.2-19 nm), Hunter (28.9-59.9 nm) y Tarrío (62.2-90 nm).
	Si	Henke (1-41.3 nm) [CXRO: actualizado por Gullikson (6.2-41.3 nm) y Soufli (2.4-41.3 nm)], Hunter (41.9-64.9 nm) y Phillipp (69.8-90 nm).

Tabla 15: Modelo para la multicapa SiC/Si centrada en 33.54 nm.

El resultado del modelo se muestra en la figura 6.30:

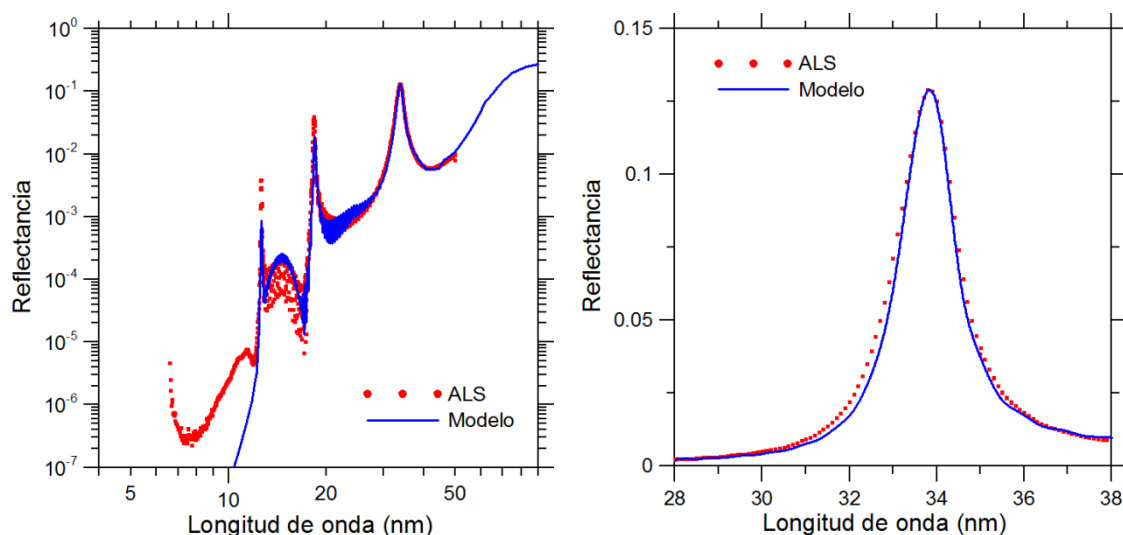


Fig. 6.30. Reflectancia a 3° experimental (rojo) y el modelo (azul) en función de la longitud de onda para la multicapa de SiC/Si centrada en 33.54 nm. A la izquierda, ajuste en banda y fuera de banda. A la derecha, ajuste en banda.

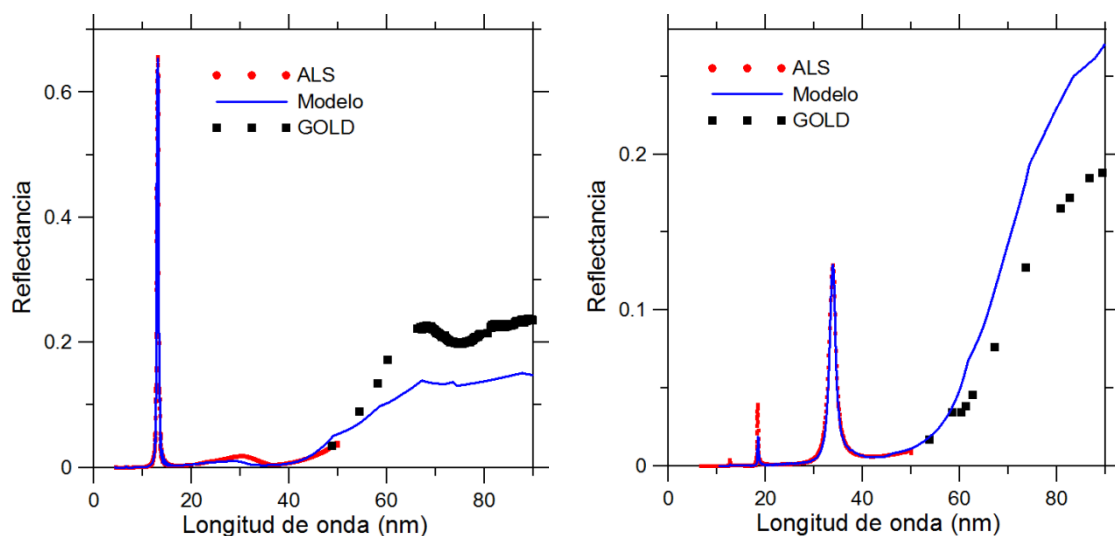
El ajuste entre el modelo teórico y la reflectancia experimental en banda y en regiones adyacentes es excelente para todas las multicapas, como se muestra en las figuras 6.24-6.30. Existen discrepancias entre los modelos y las medidas en las longitudes de onda más largas, especialmente en la multicapa Mo/Y. Esta discrepancia se atribuye a que en dicha región la penetración de los fotones es mínima, por lo que la principal contribución a la reflectancia proviene de las capas exteriores de la multicapa, que pueden contener posibles óxidos, hidrocarburos u otros contaminantes que puedan haberse formado en la superficie de la muestras envejecidas. Otra razón para la discrepancia fuera de banda, relacionada con la anterior, es la posible mayor inexactitud en las constantes ópticas de los materiales en las regiones de longitud de onda más largas.

En las longitudes de onda cortas también se aprecian discrepancias, especialmente en las multicapas de SiC/Si. Esta discrepancia se atribuye a que en dicha región los efectos de interdifusión de los materiales de la multicapa y la rugosidad adquieren mayor protagonismo.

6.4.4 Medidas experimentales en la región 48.7-90.0 nm y su comparación con los resultados de las extrapolaciones de los modelos.

La extrapolación de los modelos descritos en la sección anterior desde 50 hasta 90 nm mostraron que las reflectancias nominales de las multicapas para el EUV del AIA en dicho intervalo eran significativas: entre 0.07 y 0.1 para la multicapa de Mo/Y, entre 0.01 y 0.26 para las cuatro de Mo/Si y entre 0.01 y 0.3 para las dos multicapas de SiC/Si. Dada la relativamente alta reflectancia, que puede introducir fotones parásitos en los detectores, se decidió finalmente medir la reflectancia de los testigos de vuelo en el intervalo de 48.7-90 nm en el equipo de reflectometría de GOLD. En las figuras 6.31-6.34 se presentan estas medidas, junto con las medidas en la región 4-50 nm ya presentadas y los modelos teóricos extrapolados hasta 90 nm:

- La figura 6.31 corresponde a las multicapas del telescopio 1: Mo/Si (13.10 nm) y SiC/Si (33.54 nm):



- La figura 6.32 corresponde a las multicapas del telescopio 2: Mo/Si (21.13 nm) y Mo/Si (19.35 nm):

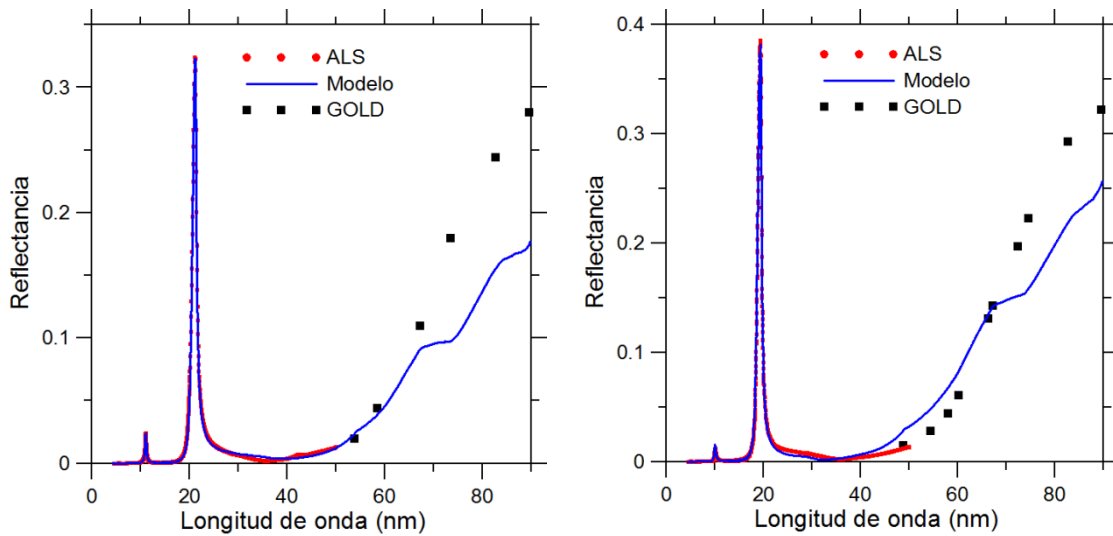


Fig. 6.32. Reflectancia de la multicapas Mo/Si centrada en 21.13 nm (izquierda) y Mo/Si centrada en 19.35 nm (derecha) en un ángulo de 3° (ALS) y 5° (GOLD) en función de la longitud de onda.

- La figura 6.33 corresponde a la multicapa del EUV del telescopio 3: Mo/Si (17.11 nm)

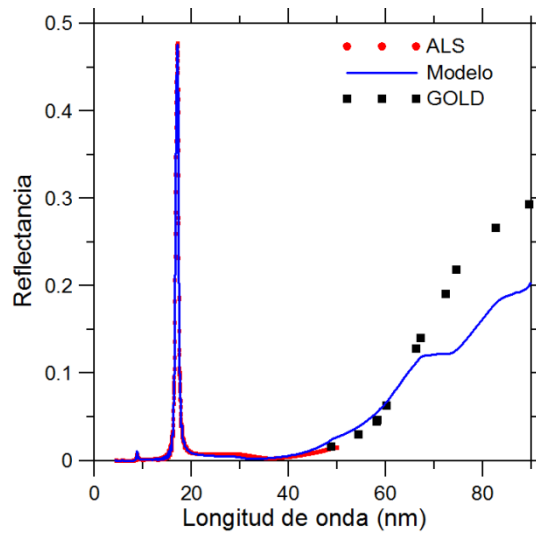


Fig. 6.33. Reflectancia de la multicapa Mo/Si centrada en 17.11 nm en un ángulo de 3° (ALS) y 5° (GOLD) en función de la longitud de onda.

La figura 6.34 corresponde a las multicapas del telescopio 4: SiC/Si (30.38 nm) y Mo/Y (9.39 nm)

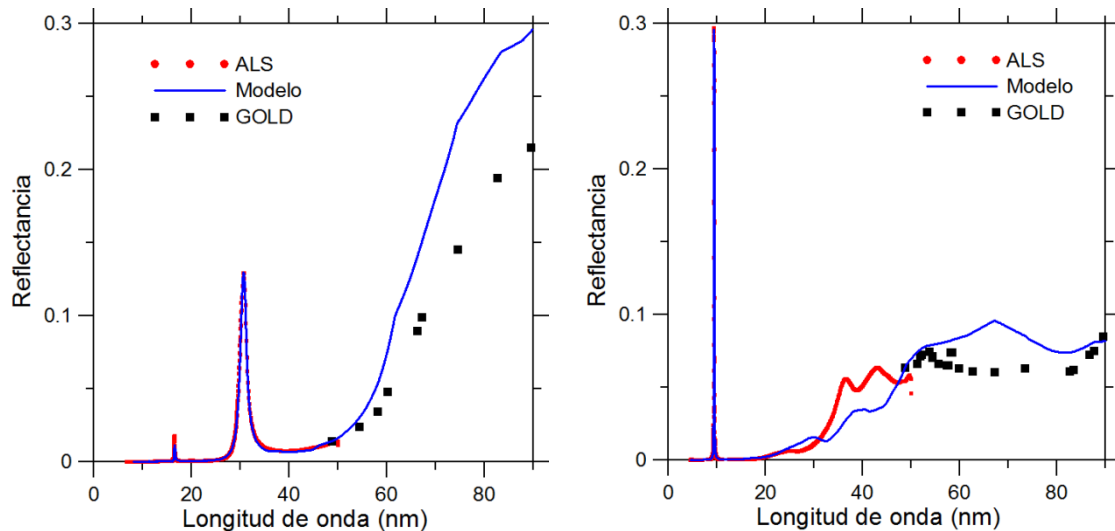


Fig. 6.34. Reflectancia de las multicapas SiC/Si centrada en 30.38 nm (izquierda) y Mo/Y centrada en 9.39 nm (derecha) en un ángulo de 3° (ALS) y 5° (GOLD) en función de la longitud de onda.

La compatibilidad entre el modelo teórico extrapolado y la reflectancia experimental es limitada en el intervalo 50-90 nm para todas las multicapas, como se muestra en las figuras 6.31-6.34. Hay que tener en cuenta que en el extremo de longitudes de onda largas (~70-90 nm), la absorción de los materiales es tan grande que prácticamente sólo contribuye a la reflectancia la lámina más externa. Esta es la más difícil de describir teóricamente, debido a que suele estar modificada por interacción con la atmósfera o por deposición de contaminantes del ambiente.

En la introducción se expuso que las medidas experimentales obtenidas en ALS fueron realizadas a 3°, mientras que en GOLD fueron hechas a 5°. El empalme entre las medidas correspondientes a las dos regiones espectrales es excelente, incluso a pesar de estar realizadas en dos laboratorios diferentes y en tiempos muy distintos. El hecho de haber medido en dos ángulos distintos pero próximos no complica la interpretación. Dado que la línea 6.3.2 de ALS es una de las más precisas del mundo, el resultado es un buen aval de la calidad de la medida en GOLD, al menos en el intervalo espectral de conexión.

Estos resultados serán incluidos en las calibraciones fotométricas finales del instrumento AIA.

6.4.5 Conclusiones

En este trabajo se presenta la calibración en banda y fuera de banda, además de modelos teóricos en el intervalo 4-90 nm de los testigos de vuelo correspondientes a las multicapas de los siete canales distintos en el EUV de AIA, instrumento en vuelo a bordo de SDO; dicha calibración combina las medidas realizadas por la Dra. Soufli en el intervalo 4-50 nm en la línea 6.3.2 de ALS junto con las realizadas en este trabajo en el intervalo 50-90 nm en el reflectómetro de GOLD. En la calibración fotométrica inicial solo se realizaron medidas de reflectancia en banda sobre los espejos de vuelo. Los resultados obtenidos en esta investigación serán incluidos en las calibraciones fotométricas finales del AIA. Se espera que estos resultados contribuyan a mejorar aún más la comprensión de la respuesta del instrumento AIA y la correspondiente interpretación de los datos procedentes de dicho instrumento.

Capítulo 7. Conclusiones

7.1.- Conclusiones generales

Este trabajo ha permitido avanzar en el objetivo principal del grupo GOLD, el cual ha sido proporcionar a la comunidad científica nuevos recubrimientos para el EUV/FUV, así como conjuntos extensos y congruentes de constantes ópticas para su diseño. A continuación se exponen los pasos que se han dado para alcanzar estos objetivos:

Se ha hecho una amplia tarea en el campo de la caracterización de constantes ópticas, tanto en la línea de medidas experimentales como en la de análisis con algoritmos exigentes, algunos de ellos desarrollados en este trabajo, así como en la obtención de nuevos modelos efectivos y rigurosos.

Así, se han caracterizado por primera vez los materiales Lu, Sr y SrF_2 en un intervalo muy amplio del espectro electromagnético. Se ha medido su transmitancia, y de ahí se ha obtenido el coeficiente de extinción k . También se han caracterizado en un intervalo amplio los materiales SiC y B_4C , mediante medidas de elipsometría, de las cuales se obtiene n y k . Para todos estos materiales se ha construido un conjunto congruente de constantes ópticas en todo el espectro electromagnético, mediante el uso de extrapolaciones y de la integral de Kramers Krönig (KK), de tal forma que dichas constantes pueden ser usadas para el diseño de nuevos recubrimientos ópticos en prácticamente cualquier región del espectro electromagnético. Tanto el Lu como el Sr tienen una muy baja absorción en el EUV, por lo que si se logra limitar su reactividad, se pueden convertir en materiales importantes para el desarrollo de nuevas multicapas. El SrF_2 es un material que se viene usando desde hace tiempo pero el cual no había sido caracterizado por encima de 25 eV hasta este trabajo. Las constantes ópticas del SiC aquí obtenidas han sido utilizadas para aplicaciones directas en este trabajo.

La contribución en el campo de las constantes ópticas también incluye la evaluación de las constantes obtenidas y el desarrollo de modelos de ajuste: Se han desarrollado unas nuevas ecuaciones de KK y reglas de suma asociadas que incorporan una función ventana, la cual puede ser elegida de tal forma que dé más peso a unos intervalos frente a otros en la evaluación de la congruencia de conjuntos de constantes ópticas, lo que permite estudiar bien los intervalos donde se dispone de datos experimentales, o bien de los intervalos donde se han utilizado extrapolaciones, para analizar la bondad de éstas. Se ha propuesto una función ventana, y con ella se han analizado varios conjuntos de constantes ópticas de materiales analizados en la primera parte de este trabajo, SiC y SrF_2 , con resultados satisfactorios. Por otro lado, se ha desarrollado una nueva función para el modelo de Tauc-Lorentz, el cual es usado para el ajuste de las constantes ópticas de los semiconductores. Esta nueva formulación es matemáticamente congruente y presenta ventajas directas frente a la formulación anterior. Este resultado ha sido usado para modelar las constantes ópticas de varios materiales: SiC y Si_3N_4 .

Con ayuda del estudio sobre constantes ópticas realizado tanto en este trabajo como en tesis anteriores de GOLD, se han desarrollado y caracterizado los siguientes recubrimientos para el EUV/FUV demandados por la comunidad científica:

Se han desarrollado nuevos recubrimientos eficientes de banda estrecha basados en el sistema Al/LiF/SiC/LiF, que presentan una reflectancia alta en Lyman β , superior a 0.4, y al mismo tiempo, una ratio de reflectancias Lyman β /Lyman α de hasta 614. El mismo sistema se ha optimizado para obtener el recubrimiento con la banda más estrecha y la mayor reflectancia posible en Lyman β , alcanzando una reflectancia de 0.51 Lyman β y en 0.63 en una longitud de onda próxima, y 9.9 nm de FWHM. Estos filtros, optimizados para operar en incidencia normal, mantienen una buena eficiencia en ángulos tan grandes como 30° con respecto a la normal. Todos estos valores fueron obtenidos tras almacenar las muestras varios meses en desecadores.

También se han desarrollado nuevos recubrimientos de transmitancia para el modelo de ingeniería del instrumento “Ionospheric Photometer (IP)”, instrumento para física de la atmósfera dentro del satélite Feng Yun-3D, con fecha de lanzamiento prevista para el 2016. Se desarrolló de acuerdo con un contrato con el CSSAR. Se han seguido unas especificaciones técnicas exigentes, siendo las principales una alta transmitancia en la línea OI (135.6 nm) y en la banda LBH (140-180 nm) y, sobre todo, una muy baja transmitancia en el visible. Estos filtros fueron depositados, y caracterizados tanto recién depositados como tras varias semanas de exposición a la atmósfera. Finalmente fueron enviados a CSSAR para su posterior ensamblaje en el instrumento.

Por otra parte, se ha realizado la calibración en el intervalo 4-90 nm los testigos de vuelo de las siete multicapas correspondientes a los canales en el EUV de instrumento *Atmospheric Imaging Assembly* (AIA), a bordo del *Solar Dynamic Observatory* (SDO), en órbita desde 2010. La calibración incluye modelos para todas las multicapas y medidas experimentales de reflectancia en todo el intervalo. Los resultados obtenidos serán incluidos en las calibraciones fotométricas finales de AIA.

Finalmente, y como resumen, los recubrimientos que han sido presentados en este trabajo constituyen una aportación importante a la experiencia de GOLD, ya que el objetivo principal del grupo es disponer de un amplio catálogo de recubrimientos, que es ofrecido a la comunidad científica interesada en instrumentación espacial, instalaciones sincrotrón, diagnóstico de plasmas, fotolitografía, etc. Para ello el grupo cuenta (y va mejorando continuamente) con un gran abanico de posibilidades de diseño, deposición y caracterización recubrimientos.

Bibliografía

- [1] J. V. Fraunhofer, «Versuche über die Ursachen des Anlaufens und Mattwerdens des Glases und die Mittel denselben zuvorzukommen,» München, Gesammelte Schriften, 1817.
- [2] Z. Knittl, «Fresnel historique et actuel,» *Opt. Acta*, nº 25, pp. 167-173, 1978.
- [3] J. W. Lord Rayleigh, «On the intensity of light reflected from certain surfaces at nearly perpendicular incidence,» *Proc. R. Soc.*, nº 41, pp. 275-294, 1886.
- [4] C. Fabry y A. Perot, «Théorie et applications d'une nouvelle méthode de spectroscopie interférentielle,» *Ann. Chim. Phys.*, nº 16, pp. 115-144, 1899.
- [5] P. Rouard, «Sur le pouvoir réflecteur des métaux en lames très minces,» *C. R. Acad. Sci.*, nº 195, pp. 869-872, 1932.
- [6] A. H. Pfund, «Highly reflecting films of zinc sulphide,» *J. Opt. Soc. Am.*, nº 24, pp. 99-102, 1934.
- [7] J. Strong, «On a method of decreasing the reflection from non-metallic substances J. Opt. Soc. Am. 26 73-4,» *J. Opt. Soc. Am.*, nº 26, pp. 73-74, 1936.
- [8] W. Geffcken, «Interferenzlichtfilter». Alemania Patente 716153, 1939.
- [9] M. Banning, «The Far Ultraviolet Reflectivities of Metallic Films,» *J. Opt. Soc. Am.*, nº 32, pp. 98-102, 1942.
- [10] F. Abelès, «Recherches sur la propagation des ondes electromagnétiques sinusoidales dans les milieus stratifiés. Applications aux couches minces,» *Ann. Phys.*, nº 5, pp. 596-640, 706-784, 1950.
- [11] G. Hass y R. Tousey, «Reflecting Coatings for the Extreme Ultraviolet,» *J. Opt. Soc. Am.*, nº 49, pp. 593-601, 1959.
- [12] W. J. Choyke, R. F. Farich y R. A. Hoffman, «SiC, a new material for mirrors. 1: High power lasers; 2: VUV applications,» *Appl. Optics*, nº 27, pp. 2006-2007, 1976.
- [13] E. Spiller, «Low-loss reflection coatings using absorbing materials,» *Appl. Phys. Lett.*, nº 20, p. 365, 1972.
- [14] D. L. Windt, S. Donguy, J. Seely y B. Kjornrattanawanich, «Experimental comparison of extreme-ultraviolet multilayers for solar physics,» *Appl. Opt.*, nº 43, pp. 1835-1848, 2004.
- [15] S. A. Yulin, F. Schaefer, T. Feigl y N. Kaiser, «Enhanced reflectivity and stability of Sc/Si multilayers,» *Proc. SPIE*, nº 5193, pp. 155-163, 2004.
- [16] D. L. Windt y J. A. Bellotti, «Performance, structure, and stability of SiC/Al multilayer films for extremeultraviolet applications,» *Appl. Opt.*, nº 48, pp. 4932-4941, 2009.
- [17] H. Takenaka, S. Ichimaru, T. Ohchi y E. Gullikson, «Soft-X-ray reflectivity and heat resistance of SiC/Mg multilayer,» *J. of Elect. Spec. and R. Phenom.*, nº 144, pp. 1047-1049, 2005.
- [18] S. Chakrabarti, S. Bowyer, F. Paresce, B. Franke y A. B. Christensen, «Long term variability of transmission of thin In-Sn and Sn-C films for EUV instrumentation,» *APPLIED OPTICS*, vol. 21, nº 19, pp. 3417-3418, 1982.
- [19] P. Boerner, C. Edwards, J. Lemen, A. Rausch, C. Schrijver, R. Shine, L. Shing, R. Stern, T. Tarbell, A. Title, C. J. Wolfson, R. Soufli, E. Spiller, E. Gullikson, D. McKenzie, D. Windt, L. Golub, W. Podgorski, P. Testa y M. Weber, «Initial Calibration of the Atmospheric Imaging Assembly (AIA) on the Solar Dynamics Observatory (SDO),» *Solar Physics*, vol. 275, nº 1, pp. 41-66, 2011.
- [20] G. Hass, J. G. F. y W. R. Hunter, «Optical properties of evaporated iridium in the vacuum ultraviolet from 500 Å to 2000 Å,» *J. Opt. Soc. Am.*, nº 57, pp. 758-762, 1967.
- [21] R. A. M. Keski-Kuha, J. F. Osantowski, H. Herzig, J. S. Gum y A. R. Toft, «Normal incidence reflectance of ion beam deposited SiC films in the EUV,» *Appl. Opt.*, nº 27, pp. 2815-2816, 1988.
- [22] M. Vidal-Dasilva, M. Fernández-Perea, J. A. Méndez, J. A. Aznárez y J. I. Larruquert, «Narrowband multilayer coatings for the extreme ultraviolet range of 50-92 nm,» *Opt. Express*, vol. 25, nº 17, pp. 22773-22784, 2009.

- [23] D. L. Windt, J. F. Seely, B. Kjornrattanawanich y Y. A. Uspenskii, «Terbium-based extreme ultraviolet multilayers,» *Opt. Lett.*, vol. 23, nº 30, pp. 3186-3188, 2005.
- [24] B. Kjornrattanawanich, D. L. Windt y J. F. Seely, «Normal-incidence silicon-gadolinium multilayers for imaging at 63 nm wavelength,» *Opt. Lett.*, vol. 9, nº 33, pp. 965-967, 2008.
- [25] J. F. Seely, Y. A. Uspenskii, B. Kjornrattanawanich y D. L. Windt, «Coated photodiode technique for the determination of the optical constants of reactive elements: La and Tb,» *Proc. SPIE*, nº 6317, pp. 63170T, 63170T-9, 2006.
- [26] M. Fernández-Perea, R. Soufli, J. C. Robinson, L. Rodríguez-De Marcos, J. A. Méndez, J. I. Larruquert y E. M. Gullikson, «Triple-wavelength, narrowband Mg/SiC multilayers with corrosión barriers and high peak reflectance in the 25-80 nm wavelength region,» *Opt. Express*, nº 21, pp. 24018-24029, 2012.
- [27] W. R. Hunter, D. W. Angel y R. Tousey, «Thin films and their use in the extreme ultraviolet,» *Appl. Opt.*, nº 4, pp. 891-898, 1965.
- [28] W. R. Hunter, J. F. Osantowski y G. Hass, «Reflectance of Aluminum Overcoated with MgF₂ and LiF in the Wavelength Region From 1600 Å to 300 Å at Various Angles of Incidence,» *Appl. Opt.*, nº 3, pp. 540-544, 1971.
- [29] M. R. Adriaens y B. Feuerbacher, «Improved LiF and MgF₂ Overcoated Aluminum Mirrors for Vacuum Ultraviolet Astronomy,» *Appl. Opt.*, nº 4, pp. 958-959, 1971.
- [30] J. T. Cox, G. Hass y J. E. Waylonis, «Further Studies on LiF-Overcoated Aluminum Mirrors with Highest Reflectance in the Vacuum Ultraviolet,» *Appl. Opt.*, nº 8, pp. 1535-1539, 1968.
- [31] G. R. Carruthers, «Narrow-Band Filters for the Lyman β Wavelength Region,» *Appl. Optics*, nº 6, pp. 1461-1463, 1971.
- [32] M. Fernández-Perea, Búsqueda y caracterización de nuevos materiales y su aplicación en recubrimientos ópticos para el ultravioleta lejano y extremo, Madrid: Tesis Doctoral, 2008.
- [33] M. Zukic y D. G. Torr, «Multiple reflectors as narrowband and broadband vacuum ultraviolet filters,» *Appl. Opt.*, nº 31, pp. 1588-1596, 1992.
- [34] A. Malherbe, «Multidielectric Components for the Far Ultraviolet,» *Appl. Opt.*, nº 6, p. 1276, 1974.
- [35] M. Fernández-Perea, J. I. Larruquert, J. A. Aznárez, J. A. Méndez, L. Poletto, D. Garoli, A. M. Malvezzi, A. Giglia y S. Nannarone, «Optical constants of Yb films in the 23-1700 eV range,» *J. Opt. Soc. Am. A*, nº 24, p. 3691, 2007.
- [36] M. Fernández-Perea, J. I. Larruquert, J. A. Aznárez, J. A. Méndez, L. Poletto, D. Garoli, A. M. Malvezzi, A. Giglia y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of Ce films in the 6-1,200-eV spectral range,» *Journal of Applied Physics*, nº 103, p. 073501, 2008.
- [37] M. Fernández-Perea, M. Vidal-Dasilva, J. A. Aznárez, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, L. Poletto, D. Garoli, A. M. Malvezzi, A. Giglia y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of Pr films in the 4-1,600-eV spectral range,» *Journal of Applied Physics*, nº 103, p. 113515, 2008.
- [38] M. Fernández-Perea, M. Vidal-Dasilva, J. A. Aznárez, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, L. Poletto, D. Garoli, A. M. Giglia y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of Eu films in the 8.3-1,400-eV spectral range,» *Journal of Applied Physics*, nº 104, p. 123527, 2008.
- [39] J. I. Larruquert, F. Frassetto, S. García-Cortés, M. Vidal-Dasilva, M. Fernández-Perea, J. A. Aznárez, J. A. Méndez, L. Poletto, A. M. Malvezzi, A. Giglia y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of erbium films in the 3.25-1580 eV spectral range,» *Applied Optics*, nº 15, p. 2211, 2011.
- [40] M. Fernandez-Perea, J. I. Larruquert, J. A. Aznarez, J. A. Mendez, L. Poletto, F. Frassetto, A. M. Malvezzi, D. Bajoni, A. Giglia, N. Mahne y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of Ho films in the 3-1340 eV spevtral range,» *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, nº 109, p. 083525, 2011.

- [41] M. Vidal-Dasilva, M. Fernández-Perea, J. A. Aznárez, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, L. Poletto, A. M. Malvezzi, A. Giglia y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of Tm films in the 2.75–1,600 eV spectral range,» *J. Appl. Phys.*, nº 105, p. 103110, 2009.
- [42] S. García-Cortés, L. Rodríguez de Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Aznárez, J. A. Méndez, L. Poletto, F. Frassetto, A. M. Malvezzi, A. Giglia, N. Mahne y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of Lu films in the 3–1800 eV spectral range,» *J. Appl. Phys.*, nº 108, p. 063514, 2010.
- [43] B. Kjornrattanawanich, D. L. Windt y J. F. Seely, «Optical constants determination of samarium, holmium, and erbium in the 1.5–850 eV spectral range using a transmittance method,» *App. Opt.*, vol. 49, nº 31, pp. 6006–6013, 2010.
- [44] B. Kjornrattanawanich, D. L. Windt, J. A. Bellotti y J. F. Seely, «Measurement of dysprosium optical constants in the 2–830 eV spectral range using a transmittance method, and compilation of the revised optical constants of lanthanum, terbium, neodymium, and gadolinium,» *Appl. Opt.*, vol. 48, nº 16, pp. 3084–3093, 2009.
- [45] M. Vidal-Dasilva, A. L. Aquila, E. M. Gullikson, F. Salmassi y J. I. Larruquert, «Optical constants of magnetron-sputtered magnesium films in the 25–1300 eV energy range,» *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, nº 108, p. 063517, 2010.
- [46] «En preparación».
- [47] L. Rodríguez-de Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Aznárez, M. Vidal-Dasilva, S. García-Cortés, J. A. Méndez, L. Poletto, F. Frassetto, A. M. Malvezzi, D. Bajoni, A. Giglia, N. Mahne y S. Nannarone, «Transmittance and optical constants of Sr films in the 6–1220 eV spectral range,» *Journal of Applied Physics*, nº 11, p. 113533, 2012.
- [48] R. Soufli, «Optical constants of Materials in the EUV/SXR Region for Multilayer Mirror Applications,» *Tesis Doctoral*, 1997.
- [49] J. I. Larruquert, J. A. Aznárez, J. A. Méndez, A. M. Malvezzi, L. Poletto y S. Covini, «Optical Properties of Scandium Films in the Far and the Extreme Ultraviolet,» *Appl. Opt.*, vol. 43, nº 16, pp. 3271–3278, 2004.
- [50] D. L. Windt, W. C. Cash, M. Scott, P. Arendt, B. Newnam, R. F. Fisher y A. B. Swartzlander, «Optical constants for thin films of Ti, Zr, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Hf, Ta, W, Re, Ir, Os, Pt, and Au from 24 Å to 1216 Å,» *APPLIED OPTICS*, vol. 27, nº 2, pp. 246–278, 1988.
- [51] J. I. Larruquert y A. M. Keski-Kuha, «Reflectance measurements and optical constants in the extreme ultraviolet for thin films of ion-beam-deposited SiC, Mo, Mg₂Si, and InSb and of evaporated Cr,» *Appl. Opt.*, nº 39, p. 2772–2781, 2000.
- [52] B. Sae-Lao y R. Soufli, «Measurements of the refractive index of yttrium in the 50–1300-eV energy region,» *APPLIED OPTICS*, vol. 41, nº 34, pp. 7309–7316, 2002.
- [53] M. Fernández-Perea, J. I. Larruquert, J. A. Aznárez, J. A. Méndez, M. Vidal-Dasilva, E. M. Gullikson, A. Aquila, R. Soufli y J. L. G. Fierro, «Optical constants of electron-beam evaporated boron films in the 6.8–900 eV photon energy range,» *J. Opt. Soc. Am. A*, nº 24, pp. 3800–3807, 2007.
- [54] R. Soufli y E. M. Gullikson, «Reflectance measurements on clean surfaces for the determination of optical constants of silicon in the extreme ultraviolet–soft-x-ray region,» *APPLIED OPTICS*, vol. 36, nº 22, pp. 5499–5507, 1997.
- [55] J. I. Larruquert, A. P. Pérez-Marín, S. García-Cortés, L. Rodríguez-de Marcos, J. A. Aznárez y J. A. Méndez, «“Self-consistent optical constants of SiC thin films,” 28, 2340–2345 (2011).,» *J. Opt. Soc. Am. A*, nº 28, pp. 2340–2345, 2011.
- [56] M. Fernández-Perea, J. A. Méndez, J. A. Aznárez y J. I. Larruquert, «In situ reflectance and optical constants of ion-beam-sputtered SiC films in the 58.4 to 149.2 nm region,» *Appl. Opt.*, nº 48, pp. 4672–4698, 2009.
- [57] J. I. Larruquert, A. P. Pérez-Marín, S. García-Cortés, L. Rodríguez-de Marcos, J. A. Aznárez y J. A. Méndez, «Self-consistent optical constants of sputter-deposited B₄C thin films,» *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 1, nº 29, pp. 117–123, 2012.
- [58] L. Rodríguez-de Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Aznárez, M. Fernández-Perea, R. Soufli, J. Méndez, S. L. Baker y E. M. Gullikson, «Optical constants of SrF₂ thin films in the 25–780-eV spectral range,» *J. Appl. Phys.*, nº 113, p. 143501, 2013.

- [59] J. I. Larroquert, Comunicación personal.
- [60] F. Bridou, M. Cuniot-Ponsard, J.-M. Desvignes, M. Richter, U. Kroth y A. Gottwald, «Experimental determination of optical constants of MgF₂ and AlF₃ thin films in the vacuum ultra-violet wavelength region (60–124 nm), and its application to optical designs,» *Optics Communications*, nº 283, p. 1351, 2010.
- [61] H. A. Kramers, «La difusion de la lumière par les atomes,» *Atti del Congresso Internazionale dei Fisici*, vol. 2, pp. 545-557, 1927.
- [62] R. d. L. Krönig, «On the theory of dispersion of x-rays,» *J. Opt. Soc. Am.*, nº 12, pp. 547-557, 1926.
- [63] M. Altarelli, D. L. Dexter y H. M. Nussenzveig, «Superconvergence and Sum Rules for the Optical Constants,» *Phys. Rev. B*, vol. 6, nº 12, pp. 4502-4509, 1972.
- [64] A. Villani y A. H. Zimerman, «Generalized f-sum rules for the optical constants,» *Physics Letters*, vol. 4, nº 44A, 1973.
- [65] P. Lichvár, M. Liska y D. Galusek, «What is the true Kramers-Kronig transform?,» *Ceramics*, vol. 1, nº 46, pp. 25-27, 2002.
- [66] P. Drude, «Zur Elektronentheorie der metalle,» *Annalen der Physik*, vol. 3, nº 306, p. 566, 1900.
- [67] G. E. Jellison y F. A. Modine, «Parameterization of the optical functions of amorphous materials in the interband region,» *Appl. Phys. Lett.*, nº 69, pp. 371-373, 1996.
- [68] J. Edelstein, «Reflection/ suppression coatings for the 900–1200 Å radiation,» *Proc. SPIE*, nº 1160, pp. 19-25, 1989.
- [69] F. S. Quesada, L. Soto, M. Ruiz y J. Sánchez-Barriga, *Fundamentos de Electromagnetismo*, Madrid: Ed. Síntesis, 2000.
- [70] M. Born y E. Wolf, *Principles of Optics*, Cambridge: Cambridge University Press, 1980.
- [71] M. V. D. Silva, *Recubrimientos ópticos de banda estrecha en el EUV basados en la caracterización de nuevos materiales*, Madrid: Tesis Doctoral, 2010.
- [72] P. Debye, «Über der Intensitätsverteilung in den mit Röntgenstrahlung erzeugten Interferenzbildern,» *Verh. d. Deutsch. Phys. Ges.*, nº 15, p. 738., 1913.
- [73] I. Waller, «Zur Frage der Einwirkung der Wärmebewegung auf die Interferenz von Röntgenstrahlen,» *Z. Phys.*, nº 17, pp. 398-408, 1923.
- [74] D. Attwood, *Soft X-rays and Extreme Ultraviolet Radiation, Principles and Applications*, Cambridge University Press, 1999.
- [75] R. Soufli, «Comunicación personal».
- [76] F. Stanglmeier, B. Lengeler, W. Weber, H. Göbel y M. Schuster, «Determination of the dispersive correction $f'(E)$ to the atomic form factor from X-ray reflection,» *Acta Cryst.*, nº A48, pp. 626-639, 1992.
- [77] O. Stenzel, *The Physics of Thin Film Optical Spectra*, Germany: Springer, 2005.
- [78] V. Lucarini, J. Saarinen, K.-E. Peiponen y E. Vartiainen, *Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research*, Germany: Springer, 2005.
- [79] L. Pasquali, A. De Luisa y S. Nannarone, «The UHV Experimental Chamber For Optical Measurements (Reflectivity and Absorption) and Angle Resolved Photoemission of the BEAR Beamline at ELETTRA,» *AIP Conference Proceedings*, nº 705, pp. 1142-1145, 2004.
- [80] S. Nannarone, F. Borgatti, A. De Luisa, B. P. Doyle, G. C. Gazzadi, A. Giglia, P. Finetti, N. Mahne, L. Pasquali, M. Pedio, G. Selvaggi, G. Naletto, M. G. Pelizzo y G. Tondello, «The Bear beamline at ELETTRA,» *AIP Conference Proceedings*, nº 705, pp. 450-453, 2004.
- [81] J. H. Underwood y E. M. Gullikson, «High-resolution, high-flux, user friendly VLS beamline at the ALS for the 50-1300 eV energy region,» *J. Electr. Spectr. Rel. Phenom.*, nº 92, pp. 265-272, 1998.
- [82] E. M. Gullikson, S. Mrowka y B. B. Kaufmann, «Recent development in EUV reflectometry at the Advanced Light Source,» *Emerging Lithographic Technologies, Proc. SPIE*, nº 4343, pp. 363-373, 2001.
- [83] R. Verucchi y S. Nannarone, «Triode electron bombardment evaporation source for ultrahigh vacuum thin film deposition,» *Rev. Sci. Instrum.*, nº 71, pp. 3444-3450, 2000.

- [84] S. Tolansky, *Multiple-Beam Interferometry of surfaces and films*, Londres: Oxford University Press, 1948.
- [85] «<http://spectroscopy.nrl.navy.mil/>,» [En línea].
- [86] M. Nisar y S. Robin, «Far ultraviolet electronic spectra of SrF₂ and BaF₂,» *Pak. J. Sci. Ind. Res.*, nº 17, pp. 49-54, 1974.
- [87] Y. Uspenskii, V. E. Levashov, A. V. Vinogradov, A. I. Fedorenko, V. V. Kondratenko, Y. P. Pershin, E. N. Zubarev y V. Y. Fedotov, «High-reflectivity multilayer mirrors for a vacuum-ultraviolet interval of 35-50nm,» *Opt. Lett.*, nº 23, p. 771, 1998.
- [88] A. P. Lukirskii, E. P. Savinov, O. A. Ershov y Y. F. Shepelev, «Reflection coefficients of radiation in the wavelength range from 23.6 to 113 Å for a number of elements and substances and the determination of the refractive index and absorption coefficient,» *Opt. Spectrosc.*, nº 16, pp. 168-172, 1964.
- [89] T. M. Zimkina, V. A. Fomichev, S. A. Gribovskii y I. I. Zhukova, *Sov. Phys. Solid State*, nº 9, p. 1128, 1967.
- [90] C. C. Schüller, *Proceedings of the International Colloquium on Optical Properties and Electronic Structure of Metals and Alloys*, 1966.
- [91] V. J. Homewood y H. J. Trodahl, «Strain-modulated reflectivity of lutetium,» *Phys. Rev. B*, nº 44, p. 2920, 1991.
- [92] J. H. Weaver y D. W. Lynch, *Phys. Rev. Lett.*, nº 34, p. 1324, 1975.
- [93] W. L. Fischer y D. W. Baun, *J. Appl. Phys.*, nº 38, p. 4830, 1967.
- [94] B. D. Padalia, S. N. Gupta, V. P. Vijayavargiya y B. C. Tripathi, *J. Phys. F: Met. Phys.*, nº 4, p. 938, 1974.
- [95] C. Bonelle, R. C. Karnatak y C. K. Jorgensen, *Chem. Phys. Lett.*, nº 14, p. 145, 1972.
- [96] W. C. Lang, B. D. Padalia, L. M. Watson y D. J. Fabian, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, nº 7, p. 357, 1975.
- [97] C. Colliex, M. Gasgnier y P. Trebbia, *J. Phys. (France)*, nº 37, p. 397, 1976.
- [98] J. Onsgaard, S. Tougaard, P. Morgen y F. Ryborg, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, nº 18, p. 29, 1980.
- [99] F. P. Netzer, G. Strasser, G. Rosina y J. A. D. Matthew, *Surf. Sci.*, nº 152/153, p. 757, 1985.
- [100] T. Manoubi, C. Colliex y P. Rez, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, nº 50, p. 1, 1990.
- [101] B. L. Henke, E. M. Gullikson y J. C. Davis, *At. Data Nucl. Data Tables*, nº 27, p. 1, 1982.
- [102] F. H. Combley, E. A. Stewardson y J. E. Wilson, *J. Phys. B*, nº 1, p. 120, 1968.
- [103] J. G. Endriz y W. E. Spicer, *Phys. Rev. B*, nº 2, p. 1466, 1970.
- [104] M. Mansfield y J. Connerade, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, nº 342, p. 421, 1975.
- [105] C. M. Brown, M. S. Longmire y M. L. Ginter, *J. Opt. Soc. Am.*, nº 73, p. 985, 1983.
- [106] W. R. Garton y K. Codling, *J. Phys. B*, nº 1, p. 106, 1967.
- [107] R. D. Hudson y V. L. Carter, *Phys. Rev.*, nº 180, p. 77, 1969.
- [108] M. Aymar y J. M. Lecomte, *J. Phys. B*, nº 31, p. 5135, 1998.
- [109] J. Langkowski, *J. Phys. D*, nº 8, p. 2058, 1975.
- [110] S. Robin-Kandare y J. Robin, «Propriétés optiques des fluorures des métaux alcalinoterreux dans l'ultraviolet lointain,» *C. R. Acad. Sc. Paris*, nº 262, pp. 1020-1023, 1966.
- [111] J. Frandon, B. Lahaye y F. Pradal, «Spectra of electronic excitations in CaF₂, SrF₂, and BaF₂ in the 8 to 150 eV range,» *Phys. Stat. Sol. (b)*, nº 53, pp. 565-575, 1972.
- [112] U. Kaiser, N. Kaiser, P. Weilbrodt, U. Mademann, E. Hacker y H. Müller, «Structure of thin fluoride films deposited on amorphous substrates,» *Thin Solid Films*, nº 217, p. 7, 1992.
- [113] N. Kaiser, «Some fundamentals of optical thin film growth,» de *Optical interference coatings*, Berlín, Springer Series in Optical Sciences, Springer-Verlag, 2003.
- [114] G. Hass y J. B. Ramsey, «Vacuum deposition of dielectric and semiconductor films by a CO₂ laser,» *Appl. Opt.*, nº 8, p. 1115, 1969.

- [115] O. R. Wood II, H. G. Craighead, J. E. Sweeney y P. J. Maloney, «Vacuum ultraviolet loss in magnesium fluoride films,» *Appl. Opt.*, nº 23, p. 3644, 1984.
- [116] A. A. El-Shazly y M. H. Ebrahim, «Determination of the spectral dependence $[n=f(\lambda)]$ of strontium fluoride thin films in the wavelength range of 460-1000 nm,» *Appl. Phys.*, nº 22, pp. 107-109, 1980.
- [117] M. A. Gisin, «Optical constants of thin strontium fluoride films,» *Opt. Spectrosc.*, nº 27, pp. 194-195, 1969.
- [118] B. Kjørnattanawanich, Reflectance, Optical Properties, and Stability of Molybdenum/Strontium and Molybdenum/Yttrium Multilayer Mirrors, Tesis Doctoral, 2002.
- [119] A. Thompson, D. Attwood, E. Gullikson, M. Howells, K. J. Kim, J. Kirz, J. Kortright, I. Lindau, Y. Liu, P. Pianetta, A. Robinson, J. Scofield, J. Underwood y G. Williams, Center for X-Ray Optics and Advanced Light Source: X-Ray data booklet, Berkeley, 2009.
- [120] M. Vidal-Dasilva, Recubrimientos ópticos de banda estrecha en el ultravioleta extremo basados en la caracterización de nuevos materiales, Madrid: Tesis Doctoral, 2010.
- [121] C. T. Chantler, K. Olsen, R. A. Dragoset, J. Chant, A. R. Kishore, S. A. Kotochigova y D. S. Zucker, «X-ray form factor, attenuation and scattering tables,» *National Institute of Standards and Technology*, 2005.
- [122] W. Kaiser, W. G. Spitzer, R. H. Kaiser y L. E. Howarth, «Infrared properties of CaF_2 , SrF_2 , and BaF_2 ,» *Phys. Rev.*, nº 127, pp. 1950-1954, 1962.
- [123] D. R. Bosomworth, «Far-infrared optical properties of CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 , and CdF_2 ,» *Phys. Rev.*, nº 157, pp. 709-715, 1967.
- [124] «NIST: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/Text/cover.html>,» [En línea].
- [125] M. Altarelli y D. Y. Smith, *Phys. Rev. B*, nº 9, p. 1290, 1974.
- [126] E. Shiles, T. Sasaki, M. Inokuti y D. Y. Smith, «Self-consistency and sum-rule tests in the Kramers-Kronig analysis of optical data: Applications to aluminum,» *Physical Review B*, nº 4, p. 1612, 1980.
- [127] S. Bajt, J. B. Alameda, T. W. Barbee, J. A. Folta, B. Kaufmann, E. A. Spiller y W. M. Clift, «Improved reflectance and stability of Mo-Si multilayers,» *Opt. Eng.*, nº 41, p. 1797, 2002.
- [128] S. Braun, H. Mai, M. Moss, R. Scholz y A. Leson, «Mo/Si Multilayers with Different Barrier Layers for Applications as Extreme Ultraviolet Mirrors,» *Jpn. J. Appl. Phys.*, nº 41, p. 4074, 2002.
- [129] C. Hecquet, M.-F. Ravet-Krill, F. Delmotte, A. Jérôme, A. Hardouin, F. Bridou, F. Varnière y M. Roullay, «Design, conception, and metrology of EUV mirrors for aggressive environments,» *Proc. SPIE 6586*, nº 6586, 65860X, 2007.
- [130] J. I. Larruquert y R. A. M. Keski-Kuha, «Multilayer coatings with high reflectance in the EUV spectral region from 50 to 121.6 nm,» *Appl. Opt.*, nº 38, p. 1231, 1999.
- [131] U. Schühle, H. Uhlig, W. Curdt, T. Feigl, A. Theissen y L. Teriaca, «Thin silicon carbide coating of the primary mirror of VUV imaging instruments of solar orbiter,» de *The Second Solar Orbiter Workshop (ESA Publications Division)*, 2007.
- [132] P. Zuppella, A. Corso, V. Polito, J. Mariscal, N. Rouanet y J. Maria, «Optical subsystems calibration and derived radiometric instrument response of the PHEBUS spectrometer on board of the BepiColombo Mission,» *Journal of Instrumentation*, nº 7, p. 10023, 2012.
- [133] R. Soufli, E. Spiller, D. L. Windt, J. C. Robinson, E. M. Gullikson, L. Rodríguez-de Marcos, M. Fernández-Perea, S. L. Baker, A. L. Aquila, F. J. Dollar, J. A. Méndez, J. I. Larruquert, L. Golub y P. Boerner, «In-band and out-of-band reflectance calibrations of the EUV multilayer mirrors of the Atmospheric Imaging Assembly instrument aboard the Solar Dynamics Observatory,» *Proc. of SPIE*, nº 8443 84433C-1, 2012.
- [134] E. A. Fagen, «Optical and electrical properties of amorphous silicon carbide films,» *Amorphous and Liquid Semiconductors*, vol. 1, 1973.
- [135] H. Matsunami, H. Masahiro y T. Tanaka, «Structures and physical properties of sputtered amorphous SiC films,» *J. Electron. Mater.*, nº 8, pp. 249-260, 1979.
- [136] R. Dutta, P. K. Banerjee y S. S. Mitra, «Amorphous silicon-carbon-fluorine alloy films,» *Phys. Rev. B*, nº 27, pp. 5032-5038, 1983.

- [137] S. Heckens y J. A. Woollam, «In-situ ellipsometry on sputtered dielectric and magneto-optic thin films,» *Thin Solid Films*, nº 270, pp. 65-68, 1995.
- [138] K. B. Sundaram, Z. Alizadeh y L. Chow, «The effects of oxidation on the optical properties of amorphous SiC films,» *Mater. Sci. Eng. B*, nº 90, pp. 47-49, 2002.
- [139] J. A. Guerra, L. Montañez, O. Erlenbach, G. Galvez, F. De Zela, A. Winnacker y R. Weingärtner, «Determination of the optical bandgap and disorder energies of thin amorphous SiC and AlN films produced by radio frequency magnetron sputtering,» *J. Phys.*, nº 274, p. 012113, 2011.
- [140] P. Musumeci, R. Reitano, L. Calcagno, F. Roccaforte, A. Makhtari y M. G. Grimaldi, «Relaxation and crystallization of amorphous silicon carbide probed by optical measurements,» *Philos. Mag. B*, nº 76, pp. 323-333, 1997.
- [141] W. J. Choyke y E. D. Palik, «Silicon carbide (SiC),» de *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, 1985, p. 587.
- [142] J. I. Larruquert y R. A. M. Keski-Kuha, «Reflectance measurements and optical constants in the extreme ultraviolet for thin films of ion-beam-deposited SiC, Mo, Mg₂Si, and InSb and of evaporated Cr,» *Appl. Opt.*, nº 39, p. 2772, 2000.
- [143] C. Ronning, D. Schwen, S. Eyhusen, U. Vetter y H. Hofsass, «Ion beam synthesis of boron carbide thin films,» *Surf. Coat. Technol.*, nº 158-159, pp. 382-387, 2002.
- [144] A. A. Ahmad, N. J. Ianno, P. G. Snyder, D. Welipitiya, D. Byun y P. A. Dowben, «Optical properties of boron carbide (B₅C) thin films fabricated by plasma-enhanced chemical-vapor deposition,» *J. Appl. Phys.*, nº 79, pp. 8643-8647, 1996.
- [145] G. Samara, H. L. Tardy, E. L. Venturini, T. L. Aselage y D. Emin, «ac hopping conductivities, dielectric constants, and reflectivities of boron carbides,» *Phys. Rev. B*, nº 48, pp. 1468-1477, 1993.
- [146] J. B. Kortright y D. L. Windt, «Amorphous silicon carbide coatings for EUV optics,» *Appl. Opt.*, nº 27, pp. 2841-2846, 1988.
- [147] R. Soufli, S. L. Baker, J. C. Robinson, T. J. McCarville, M. Pivovarov, S. P. Hau-Riege y R. Bionta, «Morphology, microstructure, stress and damage properties of thin film coatings for the LCLS x-ray mirrors,» *Proc. SPIE*, nº 7361, p. 73610U, 2009.
- [148] G. M. Blumenstock, R. A. M. Keski-Kuha y M. L. Ginter, «Extreme ultraviolet optical properties of ion-beam-deposited boron carbide thin films,» *Proc. SPIE*, nº 2515, pp. 558-564, 1995.
- [149] R. Soufli, A. L. Aquila, F. Salmassi, M. Fernández-Perea y E. M. Gullikson, «Optical constants of magnetron-sputtered boron carbide thin films from photoabsorption data in the range 30 to 770 eV,» *Appl. Opt.*, nº 47, pp. 4633-4639, 2008.
- [150] G. Monaco, D. Garoli, R. Frison, V. Mattarello, P. Nicolosi, M. G. Pelizzo, V. Rigato, L. Armelao, A. Giglia y S. Nannarone, «Optical constants in the EUV Soft x-ray (5–152 nm) spectral range of B₄C thin films deposited by different deposition techniques,» *Proc. SPIE*, nº 6317, p. 631712, 2006.
- [151] D. T. Pierce y W. E. Spicer, «Electronic structure of amorphous Si from photoemission and optical studies,» *Phys. Rev. B*, nº 5, pp. 3017-3029, 1972.
- [152] N. Morita, «Optical constants of boron in visible and near infrared,» *J. Sci. Res. Inst.*, nº 48, pp. 8-12, 1954.
- [153] J. Tauc, R. Grigorovici y A. Vancu, «“Optical properties and electronic structure of amorphous germanium,» *Phys. Status Solidi*, nº 15, pp. 627-637, 1966.
- [154] J. Tauc, «Optical properties and electronic structure of amorphous Ge and Si,» *Mat. Res. Bull.*, nº 3, pp. 37-46, 1968.
- [155] S. Lee, J. Mazurowski, G. Ramseyer y P. A. Dowben, «Characterization of boron carbide thin films fabricated by plasma enhanced chemical vapor deposition from boranes,» *J. Appl. Phys.*, nº 72, pp. 4925-4933, 1992.
- [156] E. D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids I and II*, Academic Press, 1991.

- [157] G. Bimonte, «Generalized Kramers-Kronig transform for Casimir effect computations,» *PHYS. REV. A*, nº 81, p. 062501, 1981.
- [158] R. Brendel y D. Bormann, «An infrared dielectric function model for amorphous solids,» *J. Appl. Phys.*, vol. 71, nº 1, p. 1, 1992.
- [159] N. Ambou y P. Boher, «Winelli II: User's Manual,» 2002.
- [160] A. R. Forouhi y I. Bloomer, *Phys. Rev. B*, nº 34, p. 7018, 1986.
- [161] A. R. Forouhi y I. Bloomer, *Phys. Rev. B*, nº 38, p. 1865, 1988.
- [162] W. A. McGahan y J. A. Woollam, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 453, nº 349, 1994.
- [163] W. A. McGahan, T. Makovicka, J. Hale y J. A. Woollam, *Thin Solid Films*, vol. 253, nº 57, 1994.
- [164] B. Blanckenhagen, D. Tonova y J. Ullmann, «Application of the Tauc-Lorentz formulation to the interband absorption of optical coating materials,» *APPLIED OPTICS*, vol. 41, nº 16, pp. 3137-3141, 2002.
- [165] G. D. Cody, *Semiconductors and Semimetals*, Orlando: Academic, 1984, p. 11.
- [166] A. S. Ferlauto, J. Koh, P. I. Rovira, C. R. Wronski, R. W. Collins y G. Ganguly, «Modeling the dielectric functions of silicon-based films in the amorphous, nanocrystalline and microcrystalline regimes,» *J. Non-Cryst. Solids* 266–269, 269 ~2000!, vol. 269, nº 266-269, 2000.
- [167] F. Urbach, «The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids,» *Phys. Rev.*, vol. 92, p. 1324, 1953.
- [168] M. Foldyna, K. Postava, J. Bouchala, J. Pitara y T. Yamaguchi, «Model dielectric function of amorphous materials including Urbach tail,» *Proceedings of SPIE*, vol. 5445, 2003.
- [169] H. R. Philipp, «Optical Properties of Silicon Nitride,» *J. Electrochem. Soc.*, vol. 120, p. 295, 1973.
- [170] L. Rodríguez-De Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, J. A. Aznárez, M. Vidal-Dasilva y S. García-Cortés, «Coatings with high 102.6-to-121.6 nm reflectance ratio,» *Proc. of SPIE*, nº 8443, p. 84433P, 2012.
- [171] A. Vourlidas, B. Sanchez Andrade-Nuño, E. Landi, S. Patsourakos, L. Teriaca, U. Schühle, C. Korendyke y I. Nestoras, «The Structure and Dynamics of the Upper Chromosphere and Lower Transition Region as Revealed by the Subarcsecond VAULT Observations,» *Solar Phys*, nº 261, pp. 53-75, 2010.
- [172] P. Lemaire, J. C. Vial, W. Curdt, U. Schühle y T. N. Woods, «The solar hydrogen Lyman α to Lyman β line ratio,» *Astronomy and Astrophysics*, vol. L25, nº 542, 2012.
- [173] J. F. Seely y W. R. Hunter, «Thin film interference optics for imaging the O II 834-Å airglow,» 30,,» *Appl. Opt.*, nº 30, p. 2788–2794, 1991.
- [174] S. Chakrabarti, J. Edelstein, R. A. M. Keski-Kuha y F. T. Threat, «Reflective coating of 834 Å for imaging O I ions,» *Opt. Eng.*, nº 33, pp. 409-413, 1994.
- [175] J. I. Larruquert y R. A. M. Keski-Kuha, «Multilayer coatings for narrowband imaging in the extreme ultraviolet,» *Appl. Opt.*, nº 40, pp. 1126-1131, 2001.
- [176] J. I. Larruquert, J. A. Méndez y J. A. Aznárez, «Far UV reflectance measurements and optical constants of unoxidized aluminum films,» *Appl. Opt.*, nº 34, pp. 4892-4899, 1995.
- [177] J. I. Larruquert, *No publicadas. Comunicación personal.*
- [178] J. Wang, T. Yi, T. Li-jun y N. Guo-qiang, «Retrieval of Ionospheric O/N₂ based on FUV imaging data,» de *Proc. of SPIE Vol. 7498 74982N-1*.
- [179] J. J. Weimer, J. Kim, M. Zukic y D. G. Torr, «Composition and morphology of a MgF₂/Al multilayer thin film reflective coating,» *Journal of Vacuum Science A*, nº 13, p. 1008, 1995.
- [180] «<http://sdo.gsfc.nasa.gov/data/aiahmi/>,» [En línea].
- [181] R. Soufli, «Out-of-band measurements on AIA flight witness samples,» *Comunicación personal*, 2009.
- [182] D. L. Windt, «IMD—Software for modeling the optical properties of multilayer films,» *Computers in Physics*, nº 12, p. 360, 1998.

- [183] «[http://henke.lbl.gov/optical_constants/.](http://henke.lbl.gov/optical_constants/)» [En línea].
- [184] C. Tarrio, R. N. Watts, T. B. Lucatorto, J. M. Slaughter y C. M. Falco, «Optical constants of in situ-deposited films of important extreme-ultraviolet multilayer mirror materials,» *APPLIED OPTICS*, vol. 37, nº 19, 1998.
- [185] R. Soufli y E. M. Gullikso, «Absolute photoabsorption measurements of molybdenum in the range 60–930 eV for optical constant determination,» *APPLIED OPTICS*, vol. 37, nº 10, 1998.
- [186] D. L. Windt, «XUV optical constants of single-crystal GaAs and sputtered C, Si, Cr₃C₂, Mo, and W,» *APPLIED OPTICS*, Vol. 30, No. 1, (1991), vol. 30, nº 1, 1991.
- [187] J. H. Weaver, D. W. Lynch y C. G. Olson, «Optical properties of V, Ta, and Mo from 0.1 to 35 eV,» *PHYS. REV. B.*, Vol 10, No. 2 (1974), vol. 10, nº 2, pp. 501-516, 1974.
- [188] D. W. Juenker, L. J. Leblanc y C. R. MARTIN, «Optical Properties of Some Transition Metals,» *JOSA*, vol. 58, nº 2, pp. 164-171, 1968.
- [189] D. L. Windt, W. C. Cash, M. Scott, P. Arendt, B. Newnam, R. F. Fisher, A. B. Swartzlander, P. Z. Takacs y J. M. Pinneo, «Optical constants for thin films of C, diamond, Al, Si, and CVD SiC from 24 Å to 1216 Å,» *APPLIED OPTICS*, vol. 27, nº 2, pp. 279-295, 1988.
- [190] H. R. Philipp, «Optical properties of non-crystalline Si, SiO, SiO_x and SiO₂,» *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 32, 1971.
- [191] T. Sasaki y K. Ishiguro, «Optical Constants of Silicon in the Extreme Ultraviolet Region,» *PHYSICAL REVIEW*, vol. 127, nº 4, pp. 1091-1092, 1962.
- [192] E. M. Gullikson, P. Denham, S. Mrowka y J. H. Underwood, «Absolute photoabsorption measurements of Mg, Al, and Si in the soft-x-ray region below the L_{2,3} edges,» *PHYSICAL REVIEW*, vol. 49, nº 23, pp. 283-288, 1994.
- [193] V. Rehn, J. L. Stanford y V. O. Jones, de *Proc. Int. Conf. Phys. Semicond.*, Roma, 1976.
- [194] J. H. Weaver y C. G. Olson, «Optical absorption of hcp yttrium,» *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 15, nº 2, pp. 590-594, 1977.
- [195] K. T. Chee, F. E. Girouard y V. V. Truong, «Optical behavior of yttrium films in ultrahigh vacuum,» *APPLIED OPTICS*, vol. 18, nº 11, pp. 1702-1704, 1979.
- [196] B. Brousseau, C. Colliex, J. Frandon, M. Gasgnier y P. Trebbia, «Determination of the electron excitation spectrum in scandium and yttrium by means of characteristic energy loss measurements,» *Phys. Stat. Solidi B*, vol. 69, nº 1, pp. 257-266, 1975.
- [197] E. Filatova, V. Lukyanov, R. Barchewitz, J.-M. Andre, M. Idir y P. Stemmler, «Optical constants of amorphous SiO₂ for photons in the range of 60–3000 eV,» *J. Phys.: Condens. Matter*, nº 11, pp. 3355-3370, 1999.
- [198] C. Tarrio y S. E. Schnatterly, «Optical properties of silicon and its oxides,» *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 10, nº 5, pp. 952-957, 1993.
- [199] P. Tripathi, G. Lodha, M. Modi, A. Sinha, K. Sawhney y R. Nandedkar, «Optical constants of silicon and silicon dioxide using soft X-ray reflectance measurements,» *Optics Communications*, nº 2011, pp. 215-223, 2002.
- [200] M. Itoh, K. Hayakawa y S. Oishi, «Optical properties and electronic structures of layered MoO₃ single crystals,» *J. Phys.: Condens. Matter*, nº 13, p. 6853–6864, 2001.
- [201] P. Girault, A. Seignac, M. Priol y S. Robin, «Propriétés optiques du chrome et du plomb dans l'ultra-violet lointain,» *Compt. Rend.*, nº 266, pp. 688-690, 1968.
- [202] B. Sonntag, R. Haensel y C. Kunz, «Optical Absorption Measurements Of The Transition Metals Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni In The Region Of 3p Electron Transitions,» *Solid State Communications*, vol. 7, pp. 597-599, 1969.
- [203] C. Wehenkel y B. Gauthe, «Optical Absorption Coefficient of the first series transition metals between 20 and 130 eV,» *PHYSICS LETTERS*, vol. 47A, nº 3, pp. 253-254, 1974.

