

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E
COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Dissertação de Mestrado

UNICAMP
BIBLIOTECA C
SEÇÃO CIRCUL

**Recuperação de Constantes
Ópticas de um Filme Fino
Usando Otimização Irrestrita**

Autor: Sergio Drumond Ventura

Orientador: Prof. Dr. José Mario Martínez Perez

Banca: José Mario Martínez Perez

Ernesto Julián Goldberg Birgin

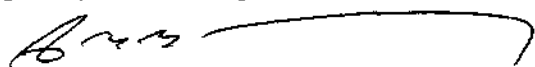
Véra Lucia da Rocha Lopes

8 de Março de 2001

Recuperação de Constantes Ópticas de um Filme Fino Usando Otimização Irrestrita

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação devidamente corrigida e defendida por Sergio Drumond Ventura e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 08 de março de 2001.



Prof. Dr. José Mario Martínez Perez
Orientador

Banca Examinadora

José Mario Martínez Perez
Ernesto Julián Goldberg Birgin
Véra Lucia da Rocha Lopes

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Unicamp, como requisito parcial para obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada.

UNIDADE	B.0		
N.º CHAMADA:	UNICAMP		
	V567r		
V.	Ex		
TOMBO BC/	45084		
PROC.	16-29210-1		
C	<input type="checkbox"/>	D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREC.	R\$ 11,00		
DATA	03/07/01		
N.º CPD			

CM00158467-5

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP**

Ventura, Sergio Drumond

V567r Recuperação de constantes ópticas de um filme fino usando otimização irrestrita / Sergio Drumond Ventura – Campinas, [S.P. s.n.], 2001.

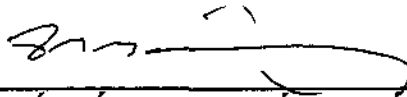
Orientador : José Mario Martinez Perez

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

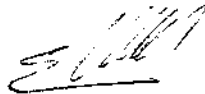
1. Otimização. 2. Filmes finos. 3. Problemas inversos (Equações diferenciais). 4. Ótica. I. Martinez Perez, José Mario. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida em 08 de março de 2001 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof (a). Dr (a). JOSÉ MÁRIO MARTÍNEZ PÉREZ



Prof (a). Dr (a). ERNESTO JULIÁN GOLDBERG BIRGIN



Prof (a). Dr (a). VERA LÚCIA DA ROCHA LOPES

“O silêncio eterno
dos espaços infinitos
me apavora”.
Blaise Pascal

Aos meus pais, Vanderlei e Sonia,
à minha irmã, Renata,
e aos meus amigos Ricardo e Valéria.

Agradecimentos

Agradeço à Deus e aos meus pais, Vanderlei e Sonia, pelo apoio ininterrupto.

Ao Martínez pela orientação serena, paciente e incansável.

Ao meu avô Drumond, onde quer que esteja, por me mostrar as portas do conhecimento.

A todos os meus amigos pelo privilégio do convívio. Em especial ao Ricardo e à Valéria.

À Fátima e à Cidinha por me salvarem da fúria dos formulários em branco.

E a todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a concretização deste trabalho.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Formulação Irrestrita para o Problema de Estimativa	4
2.1	Definições	4
2.2	Modelamento	5
2.3	Índice de Refração	6
2.4	Coefficiente de Absorção	7
3	Descrição da Implementação Computacional	12
3.1	O software Easy!	12
3.2	Estratégia Usada	14
3.3	Resultados Computacionais	15
4	Conclusões	35
A	Constantes Gedanken	38

Índice das figuras

1	Experiência física	3
2	Funções ϕ_i	8
3	Funções θ_i	10
4	Constantes dos filmes <i>Gedanken</i>	16
5	Comparação dos coeficientes de absorção do filme A .	20
6	Comparação dos índices de refração do filme A	21
7	Comparação das transmissões do filme A	21
8	Espessuras teste na malha grossa (filme A)	22
9	Espessuras teste na malha fina (filme A)	22
10	Comparação dos coeficientes de absorção do filme B .	23
11	Comparação dos índices de refração do filme B	24
12	Comparação das transmissões do filme B	24
13	Espessuras teste na malha grossa (filme B)	25
14	Espessuras teste na malha fina (filme B)	25
15	Comparação dos coeficientes de absorção do filme C .	26
16	Comparação dos índices de refração do filme C	27
17	Comparação das transmissões do filme C	27
18	Espessuras teste na malha grossa (filme C)	28
19	Espessuras teste na malha fina (filme C)	28
20	Comparação dos coeficientes de absorção do filme D .	29
21	Comparação dos índices de refração do filme D	30
22	Comparação das transmissões do filme D	30
23	Espessuras teste na malha grossa (filme D)	31
24	Espessuras teste na malha fina (filme D)	31
25	Comparação dos coeficientes de absorção do filme E .	32
26	Comparação dos índices de refração do filme E	33
27	Comparação das transmissões do filme E	33
28	Espessuras teste na malha grossa (filme E)	34
29	Espessuras teste na malha fina (filme E)	34

Resumo

Dentre os problemas inversos, a estimativa de parâmetros ópticos tem significativa importância no estudo das propriedades físicas de películas finas. Embora conhecido e estudado, não existem na atualidade técnicas definitivas para a resolução deste problema. Neste trabalho, nosso objetivo foi recuperar o índice de refração, o coeficiente de absorção e a espessura de um filme fino utilizando para isso dados de transmissão para vários comprimentos de onda. Ao invés de ponto-a-ponto, nossa abordagem foi funcional, usando conhecimento prévio acerca do comportamento físico das constantes ópticas (o que foi necessário a fim de reduzir os efeitos da alta indeterminação deste tipo de problema). Matematicamente, o problema era encontrar o mínimo global de uma soma de quadrados, isto é, resolver um problema de quadrados mínimos não-linear. Dado o alto custo computacional envolvido, a estratégia foi usar algoritmos locais, com vários pontos iniciais. Uma vez modelado, o problema foi implementado e testes numéricos foram realizados. Os filmes-testes usados foram gerados computacionalmente e os resultados foram promissores. Sabendo que para os filmes muito finos (espessura menor que 100nm) as constantes ópticas são difíceis de ter boa recuperação, os resultados obtidos para o filme com espessura de 80nm foram significativos.

Abstract

The estimation of optical parameters has among the inverse problems a meaningful importance in the study of physical properties of thin films. Although being known and studied, there are not definitive technics to solve this problem. In this work our aim was to retrieve the index of refraction, the coefficient of absorption and the thickness of a thin film using only transmission data for several wavelengths. Instead of pointwise, our approach was functional, using a priori knowledge about the physical behaviour of the optical constants (necessary to reduce the effects of high underdetermination of this kind of problem). Mathematically, the problem was to reach the global minimum of a sum of squares, *i.e.* to solve a non-linear least-squares problem. In view of the expensive computational evaluations, we used local optimization algorithms, starting from several points. Once modeled, we implemented the problem and we performed numerical tests. The test films we used were generated in a computer and the results were hopeful. We were able to retrieve thin film constants, which thickness was under 100nm, considered hard to reach.

Introdução

O problema de recuperação de parâmetros ópticos é, matematicamente, um problema inverso no sentido de que a resposta do sistema (ou uma parte dela) tal como a energia transmitida ou refletida (para um conjunto de comprimentos de onda dado) é conhecida enquanto que os parâmetros que produzem esta resposta não, sendo necessário determiná-los. Para obter soluções razoáveis são necessários códigos eficientes e adequados que possam resolver o problema de recuperação óptica. Todos os enfoques computacionais para resolver estes problemas obedecem ao seguinte esquema: i) propor um conjunto de parâmetros; ii) resolver o problema óptico usando esses parâmetros; iii) aceitar (os parâmetros) se a resposta for satisfatória ou mudá-los convenientemente, em caso negativo.

Em problemas inversos há algumas características que podem dificultar a otimização:

1. *Minimizadores Locais.* Em alguns problemas, a solução está bem definida. Ao longo do domínio porém, a função objetivo apresenta um comportamento oscilatório forte, com valores próximos. Isto significa que a função tem muitos minimizadores locais (não globais) que são inúteis para propósitos de estimativa. Muitos algoritmos eficientes de otimização têm convergência garantida para minimizadores locais (ou talvez apenas para pontos críticos, isto é, pontos com gradiente nulo ou quase nulo) mas não para minimizadores globais e portanto eles tendem a parar perto de um desses mínimos locais indesejados.
2. *Problemas Mal Postos.* Alguns problemas matemáticos podem ser altamente indeterminados, sem solução única. Além disso, pequenas imprecisões oriundas do modelo podem contribuir para uma situação onde tenhamos infinitas soluções matemáticas, sem contudo uma delas ser a solução física. Esta característica é típica dos *problemas inversos* e seus efeitos po-

dem ser amenizados com a introdução, no modelo, de informações sobre o comportamento dos parâmetros a serem estimados. Por fim, modelos simplificados, às vezes, são suficientes para fornecer estimativas razoáveis.

3. *Modelos Caros.* Os itens anteriores se tornam mais graves à medida que o custo computacional para encontrar a solução é alto. Os algoritmos de otimização utilizam essencialmente ao longo do processo os valores da resposta óptica e por isso precisam avaliar constantemente o valor da transmissão. Se a avaliação é custosa, o preço pago é o aumento do tempo computacional, diminuindo as chances de uma boa aproximação.

Neste trabalho, o problema inverso de recuperar as constantes ópticas que compõem o índice de refração complexo $\bar{n}(\lambda) = n(\lambda) + i \kappa(\lambda)$ e a espessura de filmes finos possui as três características citadas anteriormente e é por isso desafiante do ponto de vista matemático. Os dados usados para a recuperação são de transmissão e são obtidos da seguinte forma: sobre uma superfície transparente conhecida é depositado um filme fino (espessura em nanômetros), cujos parâmetros ópticos se deseja determinar; uma onda, com comprimento de onda λ , incide sobre o filme e a correspondente transmissão de energia é observada (Figura (1)). Além da transmissão observada, dispomos ainda da transmissão teórica, cuja fórmula, bem conhecida (ver [2, 6]), depende, além do comprimento de onda λ , da espessura d , do índice de refração $n(\lambda)$, do coeficiente de atenuação $\kappa(\lambda)$ e do índice de refração do substrato $s(\lambda)$. Portanto, para cada um dos vários comprimentos de onda, a equação

$$\text{transmissão teórica} = \text{transmissão observada} \quad (1)$$

tem três incógnitas, isto é d , $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ sendo que somente d é a mesma para todos os valores de λ . Isto sugere uma alta indeterminação e temos pois um problema *mal posto* (item (b)). No enfoque *pointwise* apresentado em [2, 4], a estratégia para reduzir os graus de liberdade foi incorporar conhecimento prévio sobre $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ de forma que somente as constantes fisicamente aceitáveis fossem consideradas. Neste trabalho, por outro lado, assumimos fórmulas fechadas para $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$, satisfazendo propriedades oriundas de conhecimento prévio sobre eles e dessa forma reduzindo os graus de liberdade. Essa redução contudo não foi exagerada, o que comprometeria a adequação do modelo. Ao reduzir de forma drástica as infinitas possibilidades, poderíamos não descrever corretamente a realidade.

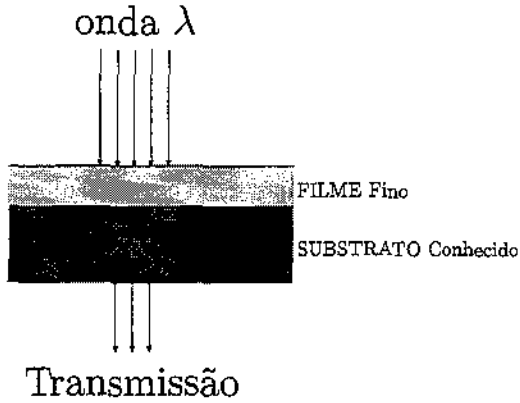


Figura 1: Experiência física

Com a transmissão observada para diversos comprimentos de onda, podemos formular convenientemente o problema de otimização como

$$\text{minimizar } \sum_{\lambda} [\text{transmissão teórica}(\lambda) - \text{transmissão observada}(\lambda)]^2 \quad (2)$$

O enfoque de propor formas funcionais já foi explorado em [8, 9, 6], embora, em alguns casos, a equação (1) é mal satisfeita ou as curvas $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ são fisicamente inaceitáveis. Neste trabalho, todavia, as fórmulas propostas são novas e os resultados numéricos foram promissores (em alguns casos) sugerindo assim novas possibilidades.

Este trabalho está organizado como se segue: no Capítulo 2 apresentamos a formulação irrestrita do problema de estimativa e no Capítulo 3 os resultados computacionais. O capítulo 4 mostra algumas conclusões.

Formulação Irrestrita para o Problema de Estimativa

2.1 Definições

A função de transmissão T de um filme fino depositado em um substrato transparente é dada por (ver [8] e [9])

$$T = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (3)$$

onde

$$A = 16s(n^2 + \kappa^2) \quad (4)$$

$$B = [(n+1)^2 + \kappa^2][(n+1)(n+s^2) + \kappa^2] \quad (5)$$

$$C = [(n^2 - 1 + \kappa^2)(n^2 - s^2 + \kappa^2) - 2\kappa^2(s^2 + 1)]2 \cos \phi - \kappa[2(n^2 - s^2 + \kappa^2) + (s^2 + 1)(n^2 - 1 + \kappa^2)]2 \sin \phi \quad (6)$$

$$D = [(n-1)^2 + \kappa^2][(n-1)(n-s^2) + \kappa^2] \quad (7)$$

$$\phi = 4\pi nd/\lambda \quad x = \exp(-\alpha d) \quad \alpha = 4\pi\kappa/\lambda \quad (8)$$

Nas equações de (3)-(8), a seguinte notação foi utilizada:

1. λ é o comprimento de onda;
2. $s = s(\lambda)$ é o *índice de refração* do substrato transparente (conhecido);
3. $n = n(\lambda)$ é o *índice de refração* do filme;
4. α é o *coeficiente de absorção* ($\kappa = \kappa(\lambda)$ é o *coeficiente de atenuação* do filme);
5. d é a espessura do filme.

2.2 Modelamento

O problema matemático pode ser posto da seguinte forma: queremos encontrar funções $\alpha(\lambda)$ e $n(\lambda)$ que resolvam o problema de quadrados mínimos não-lineares a seguir:

$$\min_{\alpha, n} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} [T(\alpha(\lambda), n(\lambda), s(\lambda), \lambda, d) - T^{med}(\lambda)]^2 d\lambda \quad (9)$$

Computacionalmente porém, necessitamos de uma formulação discreta. Dado um conjunto de valores experimentais (λ_i, T_i^{med}) tais que $\lambda_{min} \leq \lambda_i < \lambda_{i+1} \leq \lambda_{max}$ e $T_i^{med} = T^{med}(\lambda_i)$, para $i = 1, \dots, N$, podemos aproximar (9) através da soma de quadrados

$$\min_{\alpha, n} \sum_{i=1}^N [T(\alpha(\lambda_i), n(\lambda_i), s(\lambda_i), \lambda_i, d) - T_i^{med}]^2 \quad (10)$$

No enfoque “pointwise”, a otimização é feita ponto a ponto, isto é em $n(\lambda_i)$ e $\alpha(\lambda_i)$, $i = 1, \dots, N$ (ver [2]). Além disso, restrições físicas reduzem drasticamente o conjunto de possibilidades para as incógnitas $n(\lambda)$ e $\alpha(\lambda)$. Essas restrições são fundamentais do ponto de vista matemático, visto que o problema é altamente indeterminado, com demasiados pontos críticos.

Neste trabalho, a estratégia para burlar o problemas da alta indeterminação foi outra. Aqui propusemos formas funcionais (dependentes de parâmetros) para o índice de refração n e o coeficiente de absorção α . Essas formas funcionais não foram escolhidas a esmo, mas de acordo com as restrições físicas, que com isso

foram satisfeitas *a priori*. A otimização passou assim a ser sobre os parâmetros das formas funcionais propostas.

Para o índice de refração $n(\lambda)$ utilizamos uma fórmula bem conhecida [2] que utiliza dois parâmetros escalares, m e β . Para o coeficiente de absorção $\alpha(\lambda)$ propusemos uma forma funcional que depende de dez parâmetros, isto é $\alpha = \alpha(\lambda, a, b, c, k)$, com $a, b \in \mathbb{R}^4$. Acertados n e α , a formulação final ficou

$$\min \sum_{i=1}^N [T(\alpha_{a,b,c,k}(\lambda_i), n_{m,\beta}(\lambda_i), s_i, \lambda_i, d) - T_i^{med}]^2 \quad (11)$$

onde $s_i = s(\lambda_i)$ com $a, b \in \mathbb{R}^4$ e $c, k, m, \beta \in \mathbb{R}$ sendo a minimização sobre a, b, c, k, m e β .

2.3 Índice de Refração

O índice de refração n de um meio é uma constante física que é função do comprimento de onda λ e está relacionada com a velocidade v da onda no meio através da fórmula $n(\lambda) = c/v(\lambda)$, onde c é a velocidade da luz no vácuo. Fisicamente, $n(\lambda)$ deve satisfazer, para $\lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}]$:

PR1: $n(\lambda) \geq 1$;

PR2: $n(\lambda)$ é uma função decrescente de λ ;

PR3: $n(\lambda)$ é convexa.

Para o índice de refração usamos uma fórmula conhecida (ver [2, 8, 9]). Ela depende de dois parâmetros, m e β , e é dada implicitamente por

$$\frac{1}{n^2 - 1} = \frac{m}{\lambda^2} + \beta \quad (12)$$

A fim de adequar a fórmula aos experimentos numéricos, foi realizada uma mudança de variável. Em [2], os parâmetros m e β têm ordens de magnitude diferentes. Enquanto m tem valores próximos de 10^4 , β os tem próximos de 10^{-1} . Dessa forma, escolhemos inicialmente como variáveis $n(1)$ e $n(N)$, cujos valores têm a mesma ordem. Escolhidos esses valores, m e β ficam univocamente definidas.

Contudo, isto implicaria no surgimento da restrição $n(1) > n(N)$, pois $n(\lambda)$ é decrescente. Para evitar esta restrição, chamamos $p = n(N)$ e $q = n(1) - n(N)$

simplificando a restrição para $q \geq 0$. A variável p , por ser o valor do índice de refração, deve satisfazer $p \geq 1$.

A relação entre m, β e p, q pode ser extraída através da equação (12), com a seguinte notação:

$$k_1 = \frac{1}{(p+q)^2 - 1}, \quad k_N = \frac{1}{p^2 - 1}, \quad \mu = \frac{1}{\lambda_{min}^2} - \frac{1}{\lambda_{max}^2}$$

de onde podemos concluir que

$$m = \frac{k_1 - k_N}{\mu} \quad e \quad \beta = k_1 - \left[\frac{k_1 - k_N}{\mu} \right] \frac{1}{\lambda_{min}^2}$$

e, finalmente, substituir $n_{p,q}(\lambda)$ em (11).

2.4 Coeficiente de Absorção

Na fórmula da transmissão teórica, o parâmetro usado é o coeficiente de atenuação κ , que junto com o índice de refração formam o índice de refração complexo $\tilde{n} = n + i\kappa$. Usamos, em vez disso, o coeficiente de absorção que mede a intensidade de perda da onda (ver [3]) e cuja relação com κ é dada pela conhecida fórmula $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda$. Entretanto, tanto κ quanto α têm um comportamento de rápido decaimento, o que é inconveniente para nós, uma vez que queremos modelar a forma funcional. Trabalhamos pois com $\ln(\alpha)$, cujo apelo geométrico é melhor. Além disso, em [2] foi utilizado para α o argumento $E = 1240/\lambda$ (E é a energia do fóton em elétron-volt) em vez de λ , o que repetimos aqui.

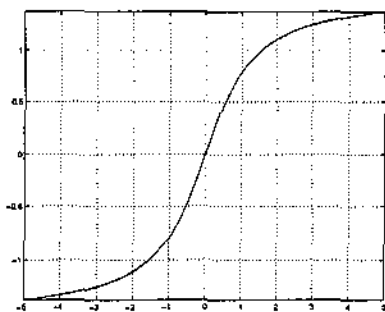
Trabalhando então com o coeficiente de absorção α , fizemos a seguinte proposta: a função de transmissão T tem demasiados mínimos locais com relação a este parâmetro; a fim de tentar evitar que o método de resolução se perca nesses pontos, foi necessário impor uma forma funcional para a função. Esta forma funcional não é arbitrária, mas segue as exigências físicas para a forma do coeficiente de absorção. Sabemos pois que α deve satisfazer as propriedades:

PA1: *Ser crescente:*

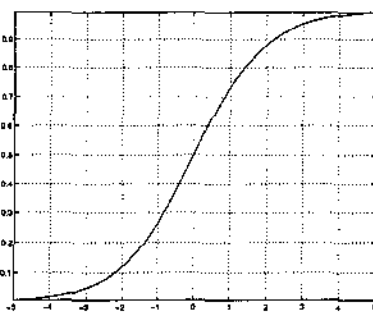
$$\alpha'(E) > 0, \text{ para todo } E \in [E_{min}, E_{max}];$$

PA2: *Ter um ponto de inflexão:*

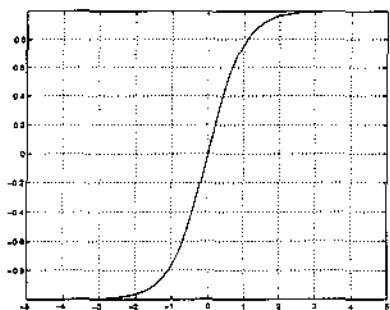
Existe um $E_{infl} \in [E_{min}, E_{max}]$ tal que $\alpha(E)$ é convexa se $E \leq E_{infl}$ e côncava se $E \geq E_{infl}$.



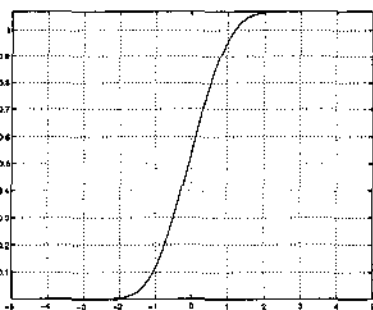
(a) $\phi_1 = \arctan(z)$



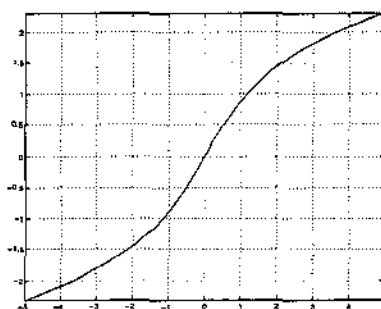
(b) $\phi_2 = \frac{1}{1 + e^{-z}}$



(c) $\phi_3 = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$



(d) $\phi_4 = \int_{-\infty}^z \left(1 - \frac{1}{1 + e^{-t^2}}\right) dt$



(e) $\phi_5 = \ln(z + \sqrt{z^2 + 1})$

Figura 2: Funções ϕ_i

Escolhemos inicialmente 5 funções ϕ_i , $i = 1, \dots, 5$ (Figuras 2 (a-e)) que satisfizessem as propriedades acima. São elas:

$$\phi_j(z) = \begin{cases} \arctg(z) & \text{se } j = 1 \\ \frac{1}{1 + e^{-z}} - \frac{1}{2} & \text{se } j = 2 \\ \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} & \text{se } j = 3 \\ \frac{1}{\sigma} \int_{-\infty}^z \left(1 - \frac{1}{1 + e^{-t^2}}\right) dt - \frac{1}{2} & \text{se } j = 4 \\ \operatorname{arcsinh}(z) = \ln(z + \sqrt{z^2 + 1}) & \text{se } j = 5 \end{cases}$$

$$\text{com } \sigma = \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{1 + e^{-t^2}}\right) dt.$$

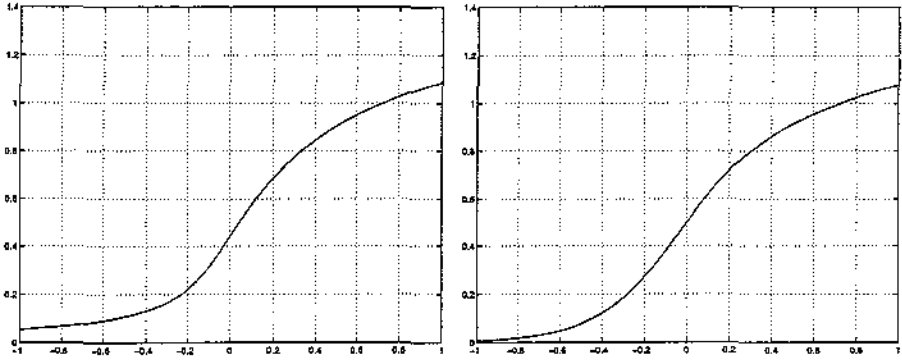
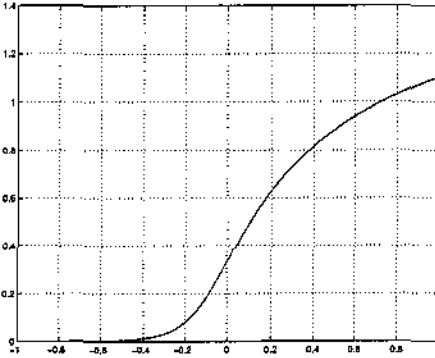
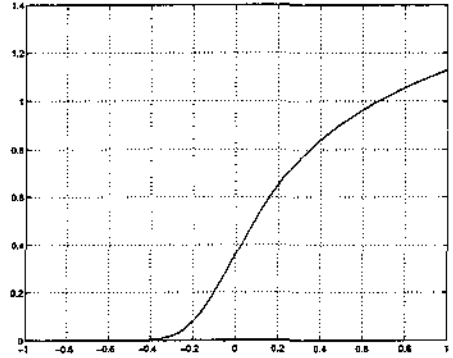
Com essas funções, faríamos então uma combinação linear, com os coeficientes como variáveis. Elas porém são simétricas com relação ao ponto do meio (ponto de inflexão), restringindo demasiadamente a aplicabilidade do modelo. A solução foi colar a parte de trás de uma com a parte posterior da outra. Dentre as várias combinações possíveis, foram escolhidas 4, cada uma começando com ϕ_i , $i = 1, \dots, 4$ e todas terminando com ϕ_5 . Matematicamente, a função colada $\hat{\theta}_j$ é, para $j = 1, \dots, 4$, dada por

$$\hat{\theta}_j(E) = \begin{cases} \frac{1}{\xi_j + \xi_5} \left(\frac{\phi_j(E)}{\phi_j'(0)} + \xi_j \right) & \text{se } E < c \\ \frac{1}{\xi_j + \xi_5} \left(\frac{\phi_5(E)}{\phi_5'(0)} + \xi_5 \right) & \text{se } E > c \end{cases}$$

onde ξ_i é dado pela coordenada i do vetor $\xi = (\pi/2 \ 2 \ 1 \ 1 \ 2)^T$. Ao dividirmos ϕ_j pela derivada no ponto zero $\phi_j'(0)$, estávamos ajustando a "colagem" das duas funções de maneira tal que pertencesse a C^2 . Além disso, através dos ξ_j normalizamos a função de modo que $\hat{\theta}_i([-5, 5]) \subset [0, 1]$, $i = 1, \dots, 4$.

Para concluir, fizemos uma translação do intervalo $[-5, 5]$ para o intervalo $[E_{min}, E_{max}]$, através da fórmula

$$\theta_j(y) = \hat{\theta}_j \left[10 \left(\frac{y - a}{b - a} - 5 \right) \right]$$

(a) θ_1 (b) θ_2 (c) θ_3 (d) θ_4 Figura 3: Funções θ_j

Temos portanto 4 funções θ_j definidas no intervalo $[E_{min}, E_{max}]$ que satisfazem as propriedades **PA1** e **PA2**. Desta forma, manipulações simples, como multiplicar o argumento por um escalar e somar as funções, ainda mantêm a forma, contanto que o ponto de inflexão continue a ser o mesmo. Assim a função proposta para o *coeficiente de absorção* foi

$$\ln(\alpha_{a,b,c,k}(E)) = \sum_{j=1}^4 a_j \theta_j [b_j(E - c)] + k$$

com $\alpha = \alpha(\lambda, a, b, c, k)$, dependente de 10 parâmetros, onde aqui $a, b \in \mathbb{R}^4$ e $E = 1240/\lambda$.

Definido o coeficiente de absorção, podemos identificar nos seus parâmetros propriedades gráficas. O parâmetro k controla o deslocamento vertical, enquanto c , que é o ponto de colagem comum, controla o deslocamento horizontal. É no ponto c que ocorre o ponto de inflexão comum, garantindo assim que a somatória das funções tenha a forma funcional desejada. Os parâmetros a_i controlam o esticamento vertical, enquanto os parâmetros b_i controlam o esticamento lateral. Se $b_j > 1$, a função encolhe e se $0 < b_j < 1$ a função estica lateralmente. Se $a_j > 1$, a função encolhe e se $0 < a_j < 1$ a função estica verticalmente. Com base nessas observações, restringimos a região factível a $a, b \in [0, 10]^4$ e $c, k \in [-10, 10]$ de forma a não considerar desnecessariamente pontos inviáveis, sem contudo estrangular a representatividade do modelo.

Descrição da Implementação Computacional

Nossa estratégia inicial foi a de trabalhar com todas as incógnitas. Infelizmente, a espessura se mostrou pouco sensível às estratégias de otimização empregadas. Quando não ficava parada no ponto inicial, retornava freqüentemente valores incorretos (mínimos locais). A saída foi realizar uma busca linear usando uma malha num intervalo $\Omega \subset \mathbb{R}$ (sugerido fisicamente), e, após resolver o problema para cada espessura-teste, guardar a espessura com menor valor da função objetivo (erro quadrático). Com um intervalo reduzido e centrado nesta espessura, repetimos o processo, refinando a busca e considerando recuperada a espessura que obtivesse o menor valor da função objetivo. Isso, significou resolver, para um malha de x pontos, $2x$ vezes (com refinamento), o que mesmo para os filmes com melhor desempenho, ficou caro.

Fixada a espessura, tínhamos em (11) um problema cujo objetivo era encontrar o mínimo (global) em n e α , isto é, nos seus parâmetros a, b, c, k, p, q . Para essas doze variáveis decidimos realizar uma busca, construindo uma malha em \mathbb{R}^{12} (com cada uma das coordenadas com o mesmo número de pontos igualmente espaçados) e a partir de cada ponto da mesma rodar um algoritmo de otimização local, considerando recuperado o ponto com menor erro quadrático.

3.1 O software Easy!

O algoritmo de otimização local utilizado foi o software para minimização em caixas BOX-QUACAN baseado em regiões de confiança (descrito em [7]). Sua versão atual está disponível publicamente com a alcunha de EASY! em [10]. A idéia dos algoritmos do tipo região de confiança é muito simples. Seja Δ o raio

da bola em torno de x_c na qual se acredita que o modelo quadrático

$$m_c(x) = f(x_c) + \nabla f(x_c)^T(x - x_c) + (x - x_c)^T H_c(x - x_c)/2$$

represente bem a função. Δ é chamado o *raio da região de confiança* e a bola

$$\Gamma(\Delta) = \{x \mid \|x - x_c\| \leq \Delta\}$$

é chamada *região de confiança*. Para computar o próximo ponto x_+ , minimiza-se (aproximadamente) m_c em $\Gamma(\Delta)$, isto é, resolve-se o subproblema

$$\min_{\|s\| \leq \Delta} m_c(x_c + s) \quad (13)$$

e obtém-se o ponto $x_t = x_c + s_t$ candidato a x_+ . Deve-se então decidir entre aceitar a atualização de x_c ou mudar o raio da região de confiança. O protótipo dos algoritmos do tipo região de confiança é descrito por

1. *Inicializar o raio da região de confiança.*
2. *Repetir até que o critério de parada seja satisfeito*
 - (a) *Resolver aproximadamente o subproblema da região de confiança para obter x_c .*
 - (b) *Testar ambos o ponto candidato e o raio da região de confiança e decidir aceitar um ou o outro ou ambos. Pelo menos um deles deve mudar.*

No EASY!, a subrotina que minimiza o modelo quadrático $m_c(x)$ é chamado de QUACAN (passo 2(a)) enquanto que o algoritmo principal, que lida com as modificações do raio da região de confiança, é chamado de BOX (passo 2(b)).

Originalmente, o EASY! está preparado para lidar com restrições não lineares (ausentes neste trabalho). Para incorporá-las ao problemas, ele substitui a função objetivo pelo Lagrangeano Aumentado. Este por sua vez, é resolvido iterativamente, atualizando o parâmetro de penalização e os multiplicadores de Lagrange, até que o critério de convergência seja atingido. Internamente, o EASY! chama de *Outer* as iterações do Lagrangeano Aumentado, enquanto designa de *Inner* as iterações realizadas pelo BOX. No que se segue, definimos como “passo” cada iteração *Inner*.

3.2 Estratégia Usada

Testes computacionais indicaram que a função objetivo era mais sensível aos parâmetros p, q, c, k . Logo, foi feita uma malha em \mathbb{R}^4 para esses parâmetros. A malha tinha em cada coordenada L pontos igualmente espaçados, o que forneceu um total de L^4 pontos. Sabendo que a função de transmissão mede a porcentagem de energia transmitida, o que sugere que os valores se mantenham no intervalo $[0, 1]$, descartamos vários pontos da malha que tinham valores grandes demais. Foram considerados, mais exatamente, somente os μ pontos com valor de função objetivo inferior a 10. Eles foram então submetidos ao algoritmo de otimização local EASY!, com a limitação de passo igual a 1, selecionando os M melhores, onde

$$M = \max\{10, \mu - \text{mod}\{\mu, 10\}\}$$

Finalmente, esses M melhores pontos iniciais foram testados pelo EASY!, sem limitação de passo (na realidade foram limitados a 100 passos, o que foi suficiente). Foi considerado como recuperado o ponto com menor erro quadrático. Abaixo descrevemos o algoritmo.

Algoritmo 1 (Principal) : *Seja m_i um ponto da malha e y_i o valor da função objetivo avaliado em m_i . Além disso, seja $\text{Easy}(m_i, P)$ o algoritmo de otimização local EASY! rodado a partir de m_i com o número de passos limitado a P . O resultado, i.e., o valor ótimo e o ponto ótimo são, respectivamente, guardados em (y_i, m_i) .*

```
malha  $\leftarrow m_i, i = 1, \dots, L^4$ 
 $\mu \leftarrow 0$ 
para  $i = 1$  até  $L^4$ 
    se  $y_i < 10$ 
         $(y_i, m_i) \leftarrow \text{Easy}(m_i, 1)$ 
         $\mu \leftarrow \mu + 1$ 
    fim
fim

 $M \leftarrow \max\{10, \mu - \text{mod}\{\mu, 10\}\}$ 
ordenar  $(y_i, m_i)$  (decrecente)
```



```

 $y \leftarrow y_1$ 
para  $i = 1$  até  $M$ 
     $(y_i, m_i) \leftarrow \text{Easy}(m_i, 100)$ 
    se  $y_i < y$ ,  $y \leftarrow y_i$ 
fim

```

3.3 Resultados Computacionais

Os resultados de aplicar as formas funcionais descritas na seção anterior aos problemas de estimativa de parâmetros em filmes foram extremamente promissores. Essas estimativas foram obtidas a partir de cinco filmes gerados por computador (também chamados de filmes *Gedanken*). No apêndice encontram-se as fórmulas usadas para construir o índice de refração bem como o coeficiente de absorção dos filmes *Gedanken* (Figura (4)). Para todos os filmes usamos 100 pontos de transmissão (na equação 11, $N = 100$). Na tabela a seguir, resumimos as características de cada filme:

Filme	Material	Espectro	d	Substrato
A	Si	540–1530	100	vidro
B	Si	620–1610	600	vidro
C	Ge	1250–2537	100	silício
D	Ge	1250–2537	600	silício
E	Ox	360–657	80	vidro

Para a recuperação da espessura usamos uma malha de $L = 3$, o que gerou a priori um total de $L^4 = 81$ pontos na malha. Nas malhas grossas e finas usadas para gerar as espessuras teste, usamos um passo de 10nm e 1nm respectivamente. A recuperação da espessura foi razoável exceto para o filme C. Embora a recuperação não tenha sido tão ruim (de 109 para 100nm), a recuperação das outras constantes ópticas foi precária, de modo que os resultados que aparecem para o filme C foram obtidos usando a espessura real $d = 100\text{nm}$. Na tabela a seguir, exibimos os valores obtidos para as espessuras dos filmes.

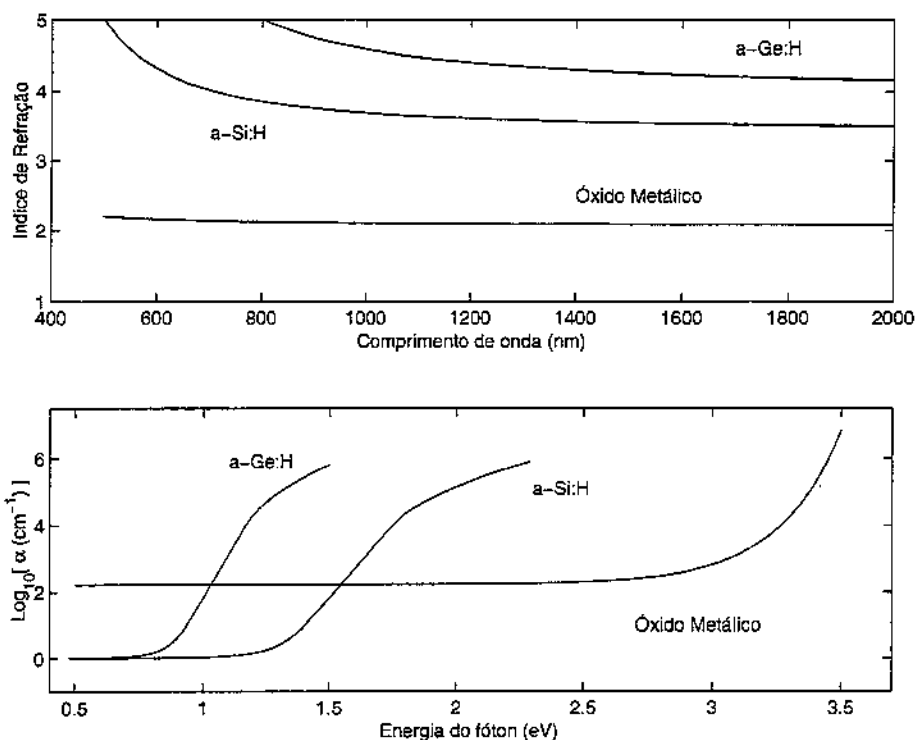


Figura 4: Constantes dos filmes *Gedanken*

Filme	d^{real}	d^{obtido}	Tempo Médio (min)
A	100	100	2.99
B	600	601	3.71
C	100	109	0.82
D	600	600	0.92
E	80	80	1.83

Com a espessura obtida e fixa, resolvemos o problema para encontrar n e α . Para melhorar a recuperação, refinamos a malha dos quatros parâmetros sensíveis, aumentando a quantidade de pontos em cada coordenada para $L = 5$, o que forneceu um total de $L^4 = 625$ pontos inicial. Na tabela abaixo, resumimos os valores obtidos nos testes numéricos para cada filme.

Filme	μ	M	Ótimo	Gradiente	Tempo (min)
A	173	17	$5.48809468 \cdot 10^{-6}$	$1.37983555 \cdot 10^{-5}$	6.56
B	45	10	$9.15001318 \cdot 10^{-5}$	$3.71549358 \cdot 10^{-5}$	4.05
C	418	41	$3.3965753 \cdot 10^{-8}$	$2.64625065 \cdot 10^{-6}$	2.83
D	375	37	$1.27869149 \cdot 10^{-7}$	$5.52386338 \cdot 10^{-6}$	2.59
E	225	22	$6.47056495 \cdot 10^{-7}$	$1.78118796 \cdot 10^{-5}$	5.04

As derivadas analíticas foram calculadas e substituíram as derivadas por diferenças finitas, gerando um ganho considerável de tempo e precisão. Na rotina que avalia o valor da função, as contas foram realizadas de forma a serem reaproveitadas no cálculo do gradiente, já que a função de transmissão não tem uma fórmula única, mas ao invés disso é desmembrada em várias parcelas.

Todos os experimentos foram realizados em um Pentium II, *clock* de 333 MHz com 128 Mb de memória RAM. Nós usamos a linguagem FORTRAN 77 com o compilador g77 (GNU project) com a opção de compilação -O. Em continuação, comparamos graficamente as estimativas obtidas neste trabalho com as obtidas em [2] e por isso elas são apresentadas. Lá foram usados os mesmo filmes testes usados neste trabalho.

Filme A. Nas Figuras 5, 6 e 7 apresentamos os valores “Verdadeiros” (linha), “Recuperados neste trabalho” (círculos abertos) e “Recuperados em [2]” (asterísco) do coeficiente de absorção, do índice de refração e da transmissão óptica, respectivamente, de um filme fino (simulando uma camada de a-Si:H) gerado numericamente, com espessura $d = 100\text{nm}$, e depositado no vidro. Na Figura 5 vê-se claramente uma melhora da *absorção* recuperada com respeito aos resultados obtidos em [2], principalmente na região $E > 1.5$. À região onde a recuperação não foi boa correspondem as áreas de alta transmissão, isto é, as áreas onde o filme é pouco absorvente para ondas com estes comprimentos de onda. Isto significa que a recuperação do coeficiente de absorção é difícil em intervalos do espectro onde há alta transmissão, uma vez que quase não existe absorção. Na Figura 6 temos o *índice de refração*, cuja recuperação foi excelente, inclusive para as regiões de baixo comprimento de onda. Na figura 7 vemos que os gráficos das transmissões são excelentes nos dois casos. Nas Figuras 8 e 9 apresentamos o erro quadrático do processo de minimização como função das espessuras testes. Na primeira o passo é 10nm enquanto que no segundo o passo é 1nm. Aqui a recuperação foi excelente.

Filme B. Nas Figuras 10, 11 e 12 apresentamos os valores “Verdadeiros” (linha), “Recuperados neste trabalho” (círculos abertos) e “Recuperados em [2]” (asterísco) do coeficiente de absorção, do índice de refração e da transmissão óptica, respectivamente, de um filme fino (simulando uma camada de a-Si:H) gerado numericamente, com espessura $d = 600\text{nm}$, e depositado no vidro. Este filme é idêntico ao filme A exceto que a espessura é $d = 600$. Sendo assim, apresenta a mesma característica que ele, isto é, para regiões de alta transmissão há dificuldade de recuperar o *coeficiente de absorção*. Na Figura 11 podemos observar que para o *índice de refração* não houve melhora significativa, já que a recuperação anterior é boa. Na figura 12 vemos que os gráficos das transmissões são excelentes nos dois casos. Nas Figuras 13 e 14 apresentamos o erro quadrático do processo de minimização como função das espessuras testes. Na primeira o passo é 10nm enquanto que no segundo o passo é 1nm . Aqui a recuperação foi muito boa, errando por 1nm .

Filme C. Nas Figuras 15, 16 e 17 apresentamos os valores “Verdadeiros” (linha), “Recuperados neste trabalho” (círculos abertos) e “Recuperados em [2]” (asterísco) do coeficiente de absorção, do índice de refração e da transmissão óptica, respectivamente, de um filme fino (simulando uma camada de a-Ge:H) gerado numericamente, com espessura $d = 100\text{nm}$, e depositado em silício cristalino. O *coeficiente de absorção* do filme C é consideravelmente mais difícil de recuperar que os dos filmes A e B, pois a amplitude da transmissão é muito pequena. Isto significa que o modelo está trabalhando com números muito pequenos. É uma espécie de mal-condicionamento. Na Figura 15 porém vemos que, comparativamente, a recuperação do *coeficiente de absorção* foi mais razoável, ainda que somente para comprimentos de onda bem baixos. Na Figura 16, o *índice de refração* foi ligeiramente melhor para baixos comprimentos de onda. Na figura 17 vemos que os gráficos das transmissões são excelentes nos dois casos. Nas Figuras 18 e 19 apresentamos o erro quadrático do processo de minimização como função das espessuras testes. Na primeira o passo é 10nm enquanto que no segundo o passo é 1nm . Aqui a recuperação não foi possível. Fazemos aqui a ressalva de que os gráficos mostrados a seguir para o filme C foram feitos com a espessura real ($d = 100\text{nm}$), já que usando a espessura recuperada ($d = 109\text{nm}$) a recuperação das constantes ópticas ficou muito a desejar.

Filme D. Nas Figuras 20, 21 e 22 apresentamos os valores “Verdadeiros” (linha), “Recuperados neste trabalho” (círculos abertos) e “Recuperados em [2]” (asterísco) do coeficiente de absorção, do índice de refração e da trans-

missão óptica, respectivamente, de um filme fino (simulando uma camada de a-Ge:H) gerado numericamente, com espessura $d = 600\text{nm}$, e depositado em silício cristalino. Este filme é essencialmente o mesmo que o filme C, diferindo apenas pela espessura. Dessa forma, a recuperação do *coeficiente de absorção* apresenta o mesmo problema. Aqui, contudo, a recuperação do *coeficiente de absorção* de [2] é razoável porque quanto maior a espessura, mais fácil é a recuperação de suas constantes e o filme C tem espessura de 100nm , menor que a do filme D. Portanto, a recuperação obtida neste trabalho é um refinamento da obtida em [2]. Nas figuras 21 e 22 vemos que os gráficos das transmissões e dos *índices de refração* são, respectivamente, excelentes nos dois casos. Nas Figuras 23 e 24 apresentamos o erro quadrático do processo de minimização como função das espessuras testes. Na primeira o passo é 10nm enquanto que no segundo o passo é 1nm . Aqui a recuperação foi excelente.

Filme E. Nas Figuras 25, 26 e 27 apresentamos os valores “Verdadeiros” (linha), “Recuperados neste trabalho” (círculos abertos) e “Recuperados em [2]” (asterísco) do coeficiente de absorção, do índice de refração e da transmissão óptica, respectivamente, de um filme fino (simulando uma camada de óxido metálico) gerado numericamente, com espessura $d = 80\text{nm}$, e depositado em vidro. Este foi o filme que apresentou, tanto para o *coeficiente de absorção* quanto para o *índice de refração*, a melhora mais significativa com relação à [2]. Neste trabalho, a recuperação foi excelente. Para este filme conseguimos atingir o ótimo global. Sabendo que filmes com espessuras muito finas têm recuperação difícil de suas constantes ópticas, o sucesso da resolução deste filme com nosso modelo sugere um caminho promissor. Na figura 27 vemos que os gráficos das transmissões são excelentes nos dois casos. Nas Figuras 28 e 29 apresentamos o erro quadrático do processo de minimização como função das espessuras testes. Na primeira o passo é 10nm enquanto que no segundo o passo é 1nm . Aqui a recuperação foi excelente.

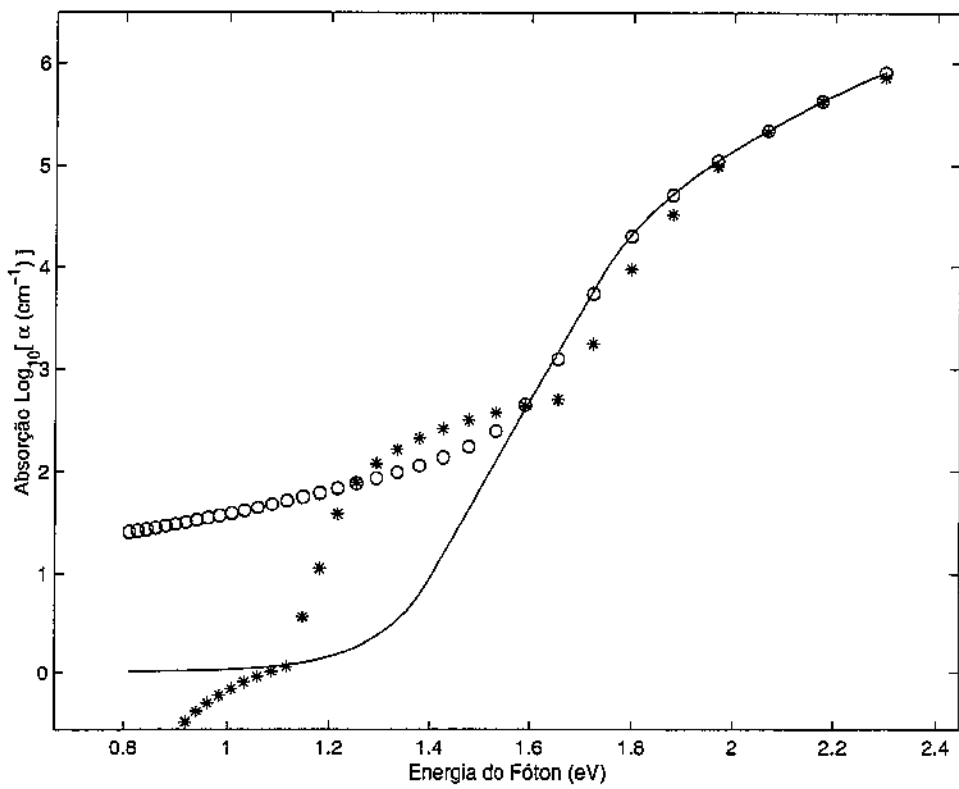


Figura 5: Comparação dos coeficientes de absorção do filme A

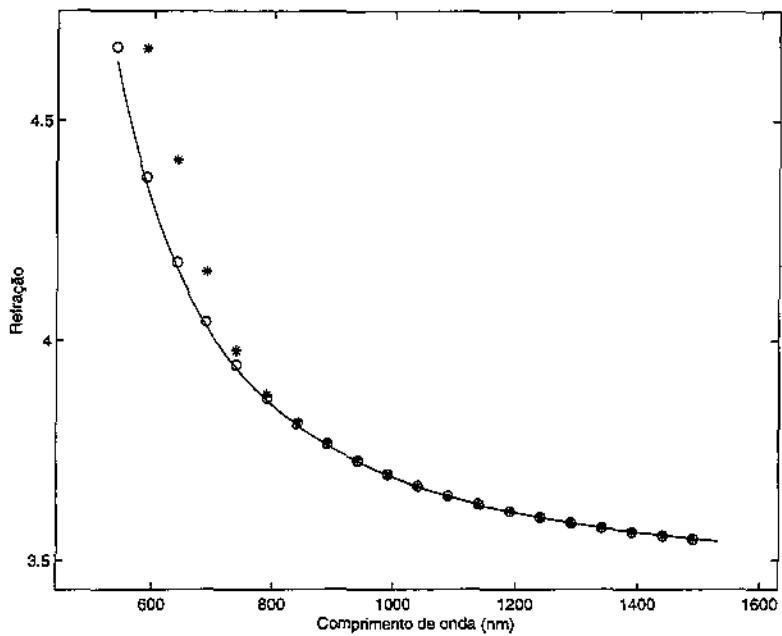


Figura 6: Comparação dos índices de refração do filme A

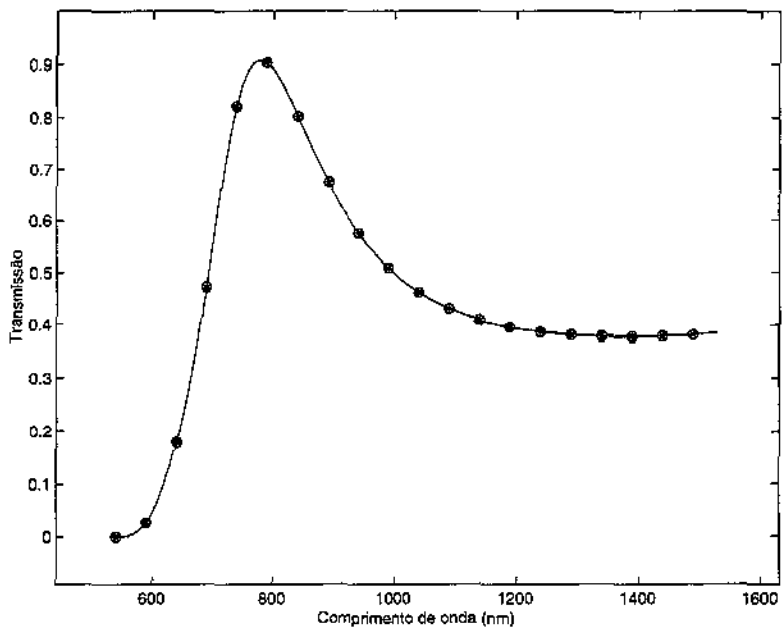


Figura 7: Comparação das transmissões do filme A

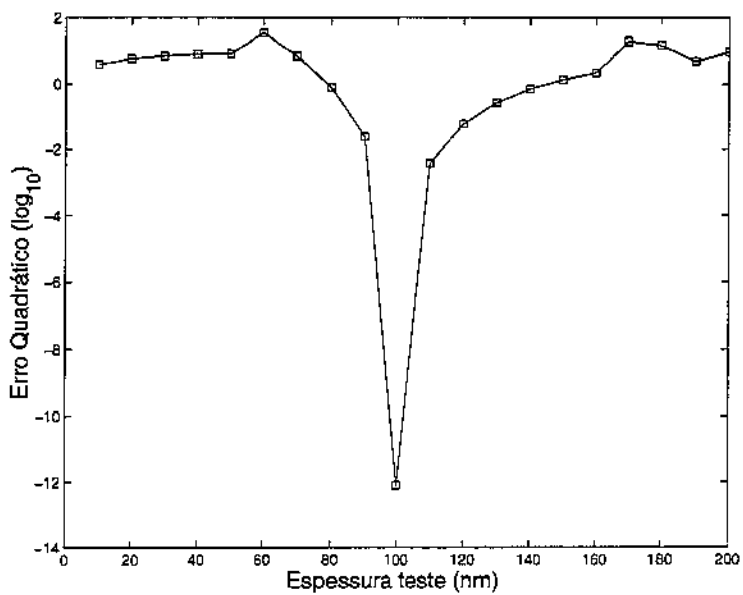


Figura 8: Espessuras teste na malha grossa (filme A)

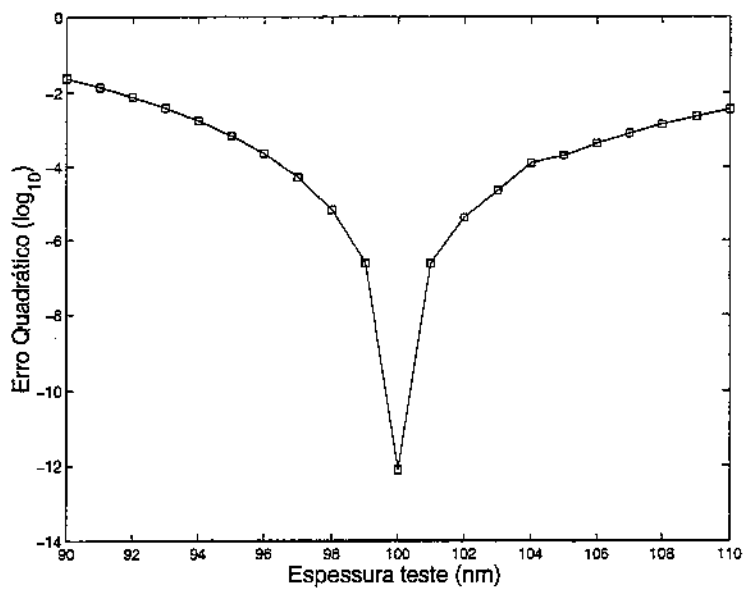


Figura 9: Espessuras teste na malha fina (filme A)

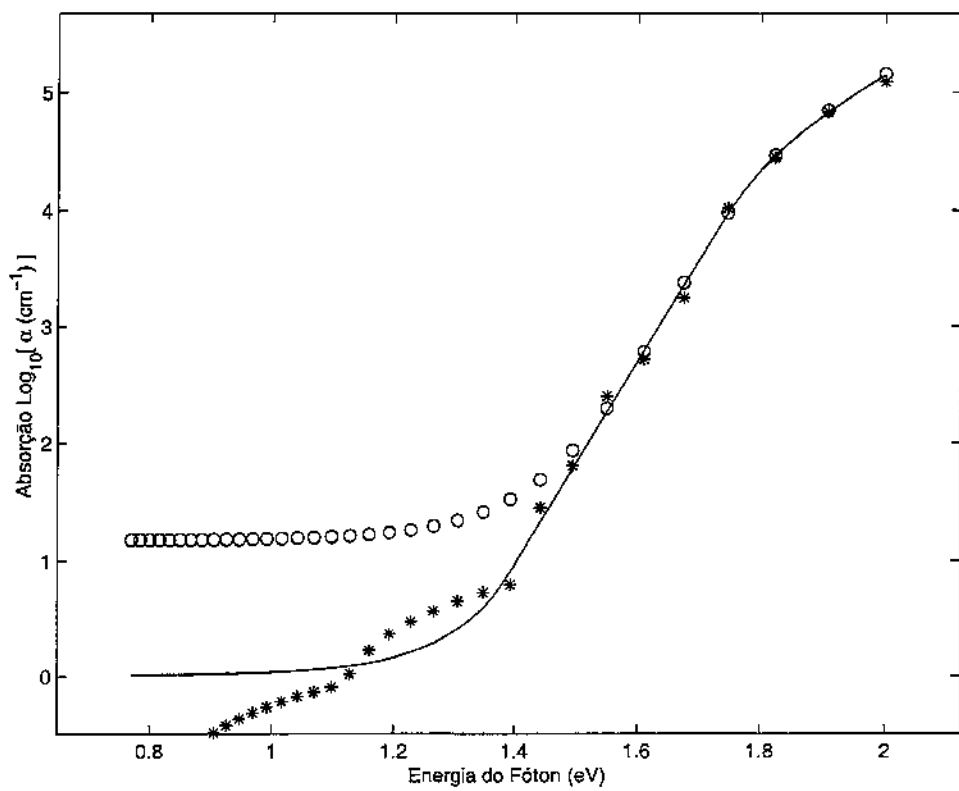


Figura 10: Comparação dos coeficientes de absorção do filme B

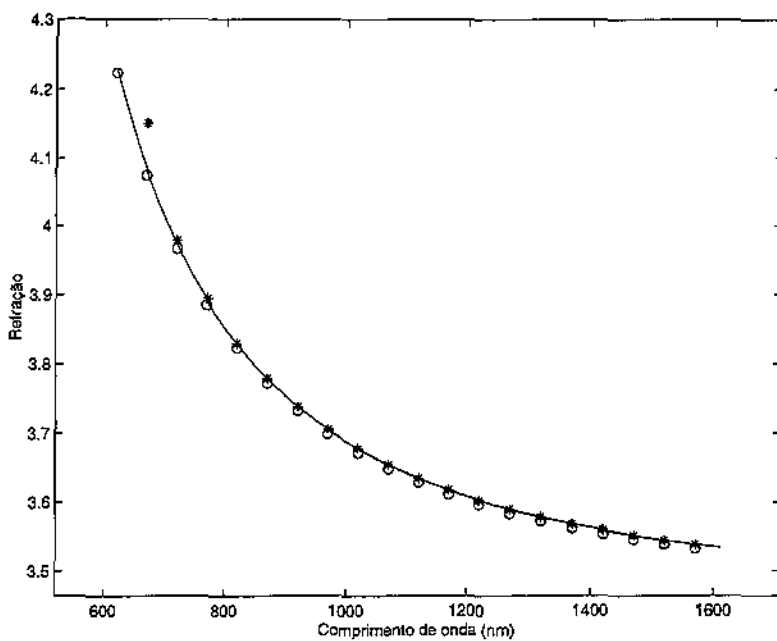


Figura 11: Comparação dos índices de refração do filme B

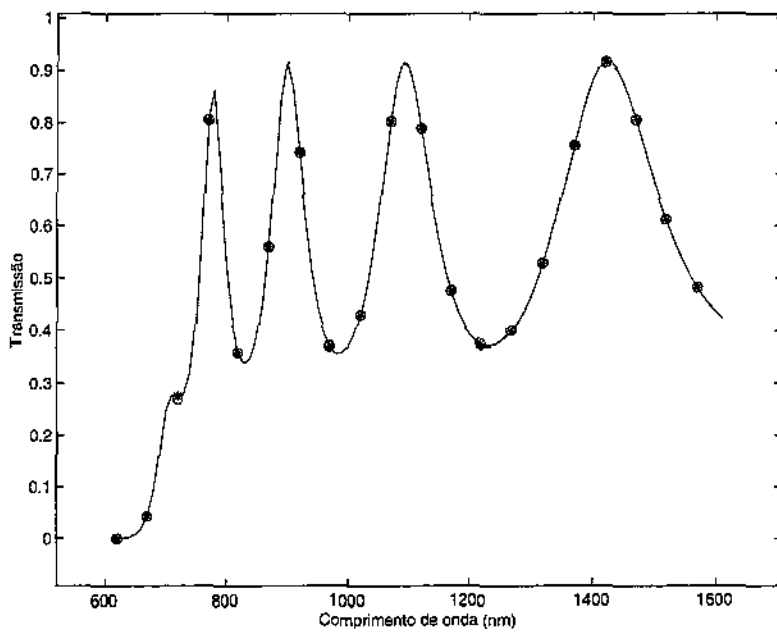


Figura 12: Comparação das transmissões do filme B

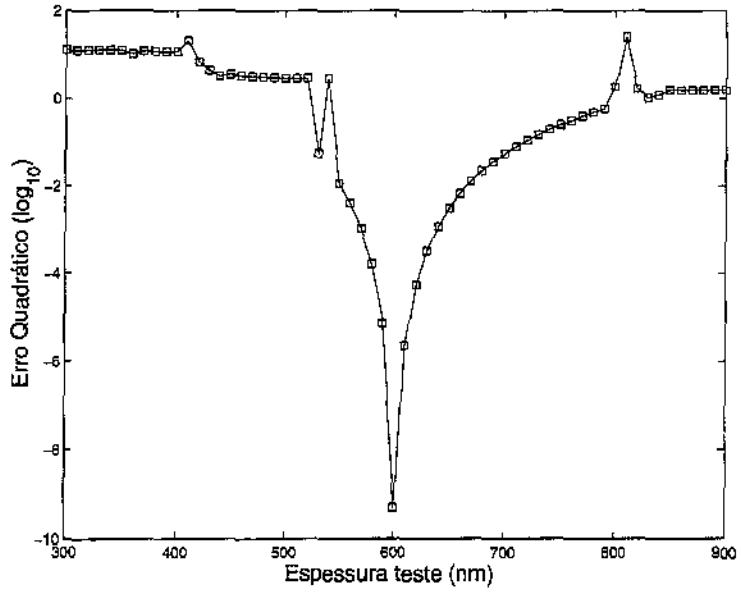


Figura 13: Espessuras teste na malha grossa (filme B)

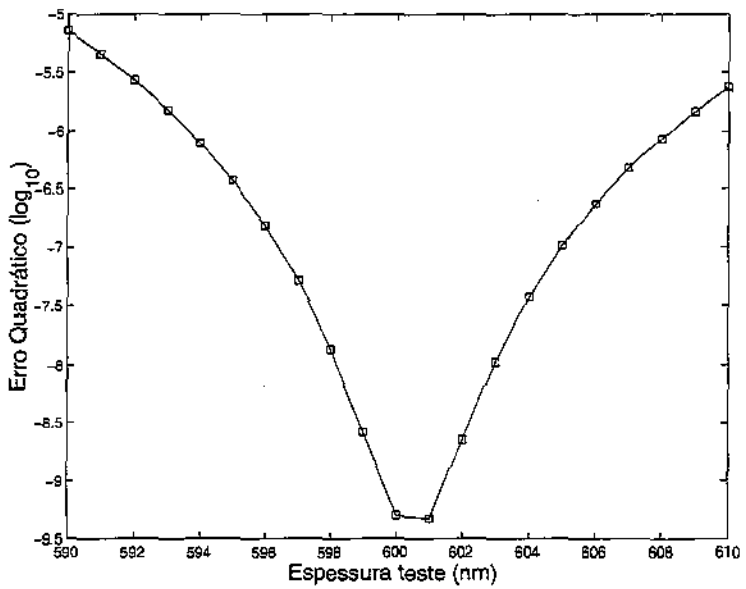


Figura 14: Espessuras teste na malha fina (filme B)

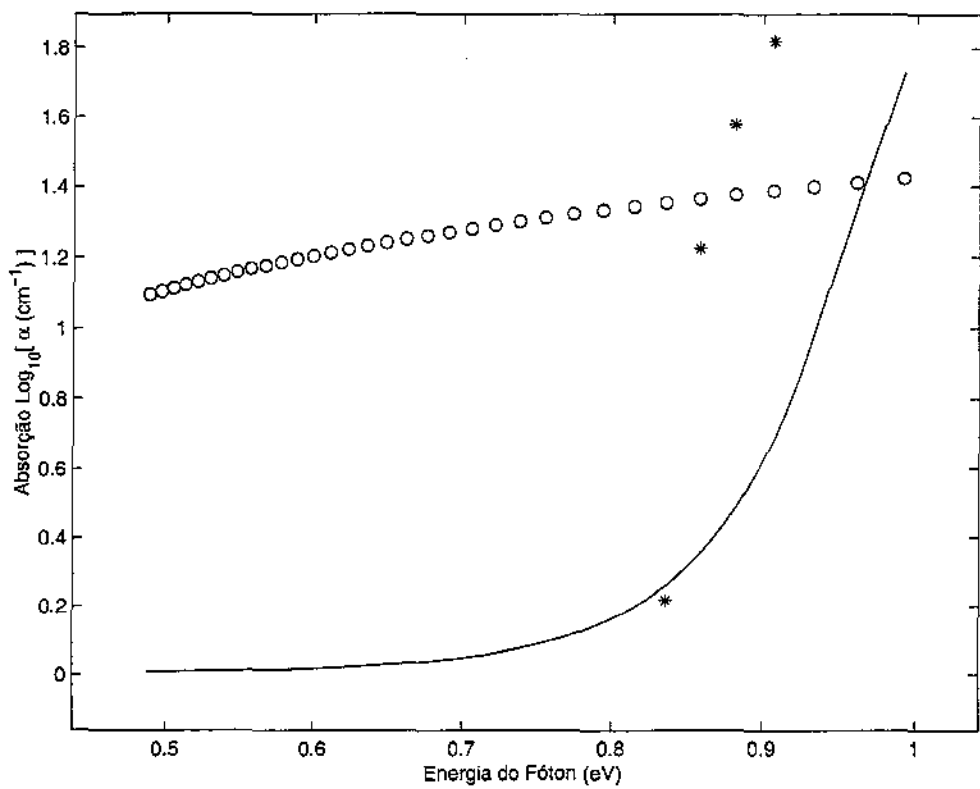


Figura 15: Comparação dos coeficientes de absorção do filme C

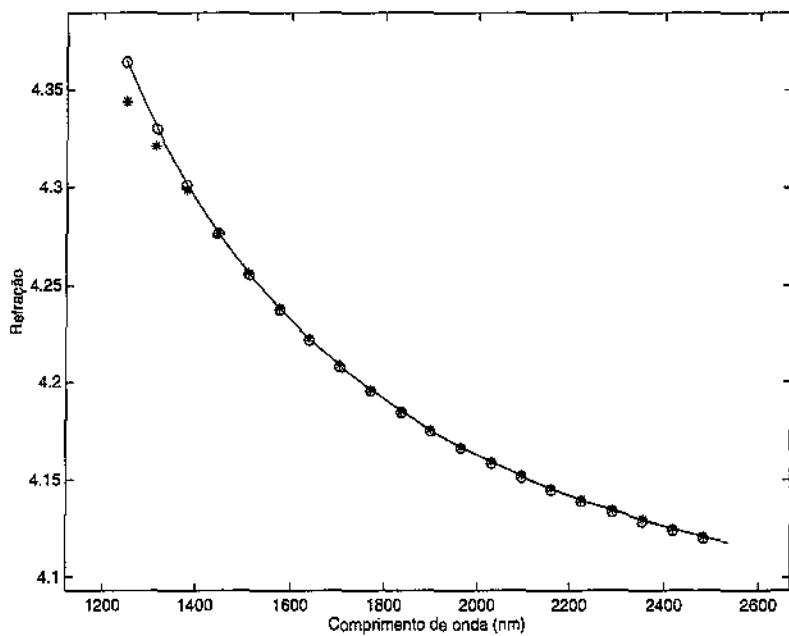


Figura 16: Comparação dos índices de refração do filme C

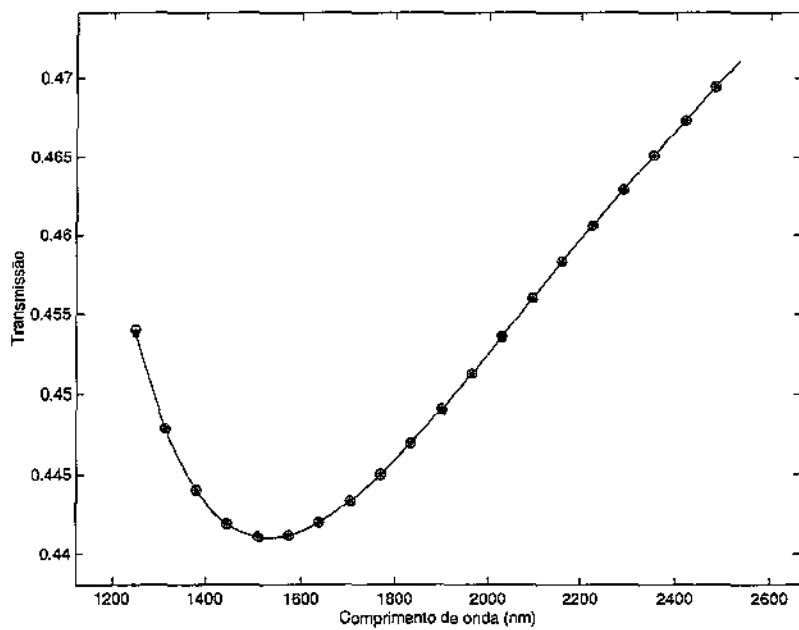


Figura 17: Comparação das transmissões do filme C

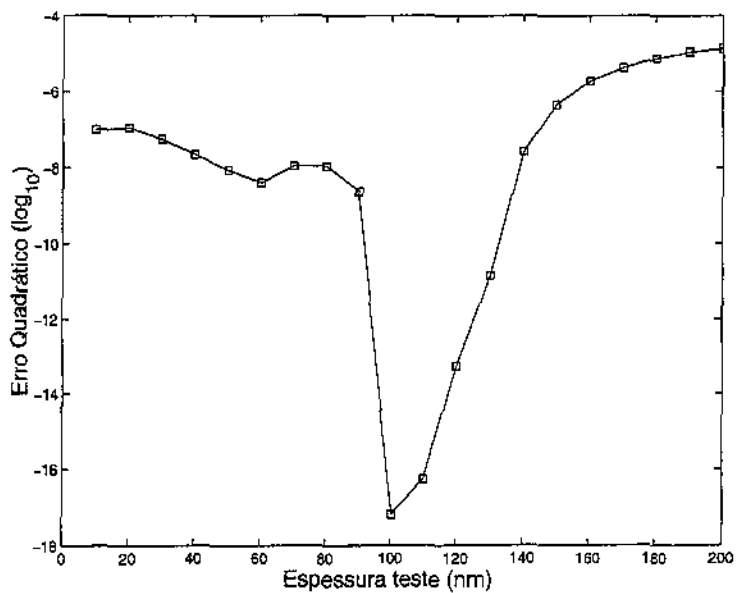


Figura 18: Espessuras teste na malha grossa (filme C)

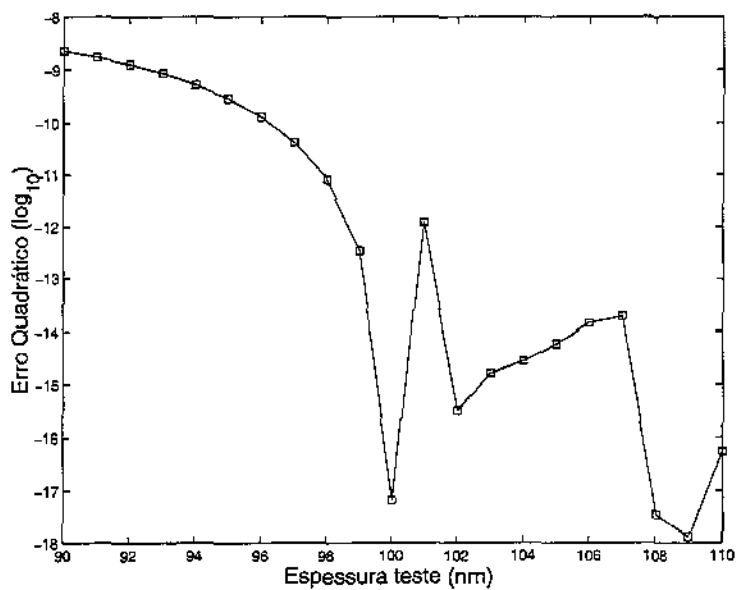


Figura 19: Espessuras teste na malha fina (filme C)

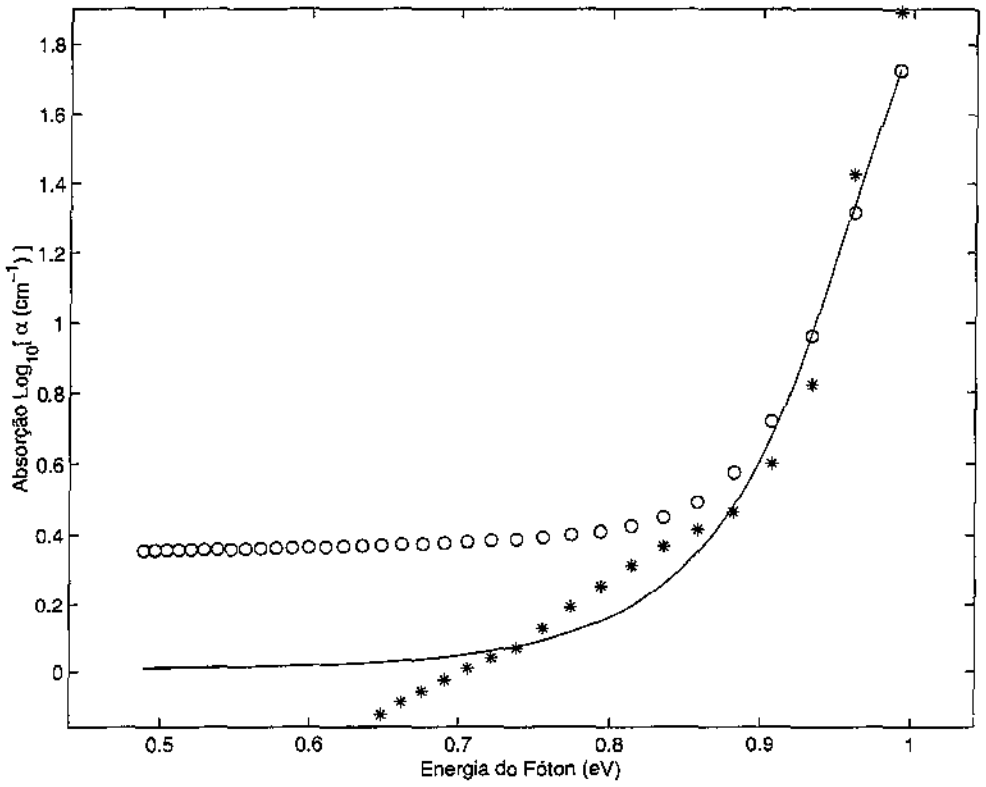


Figura 20: Comparação dos coeficientes de absorção do filme D

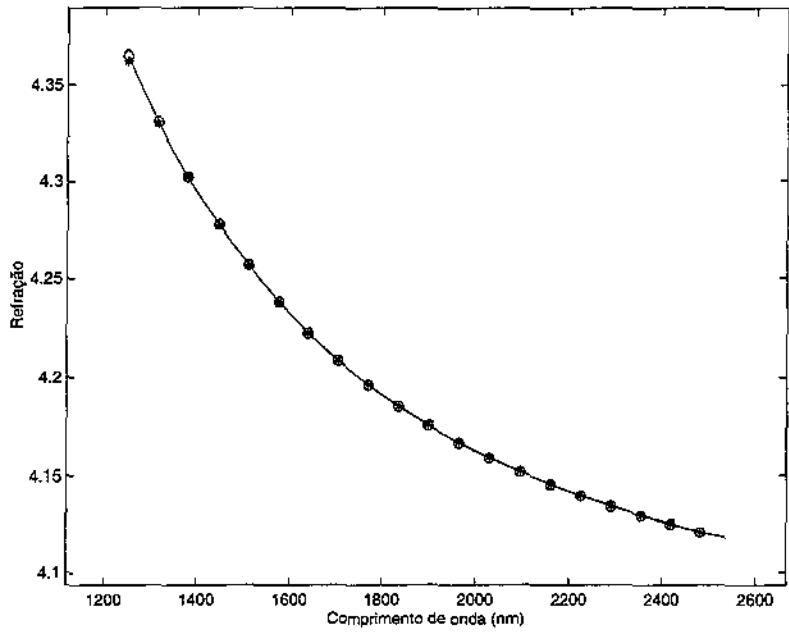


Figura 21: Comparação dos índices de refração do filme D

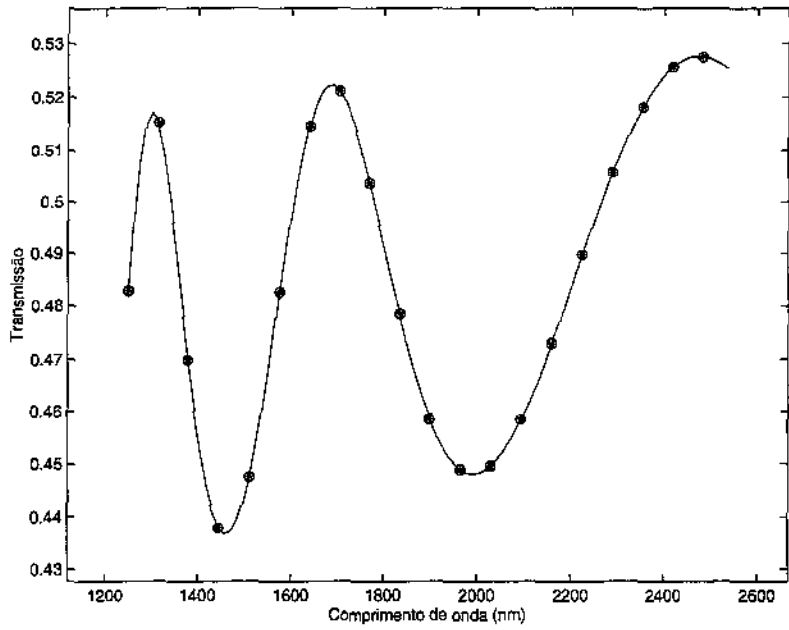


Figura 22: Comparação das transmissões do filme D

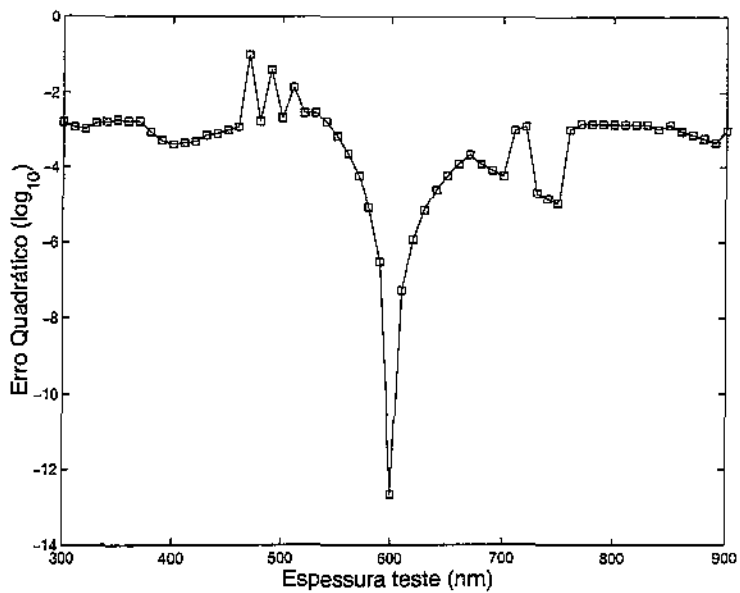


Figura 23: Espessuras teste na malha grossa (filme D)

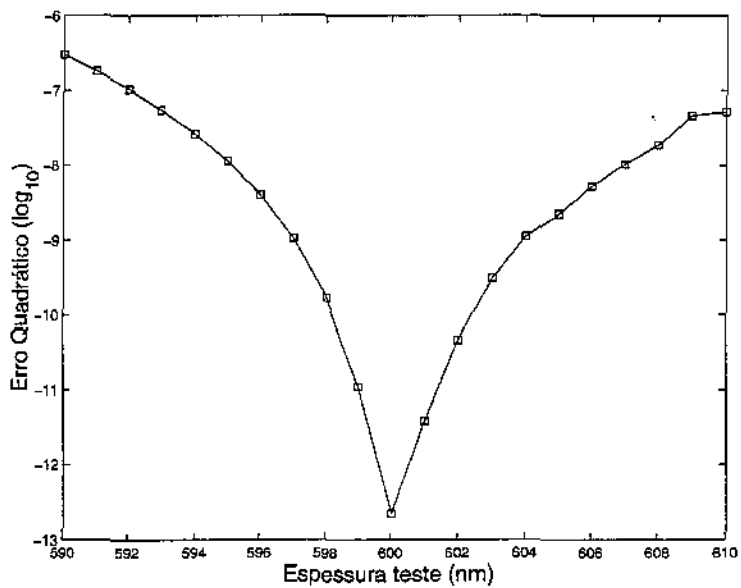


Figura 24: Espessuras teste na malha fina (filme D)

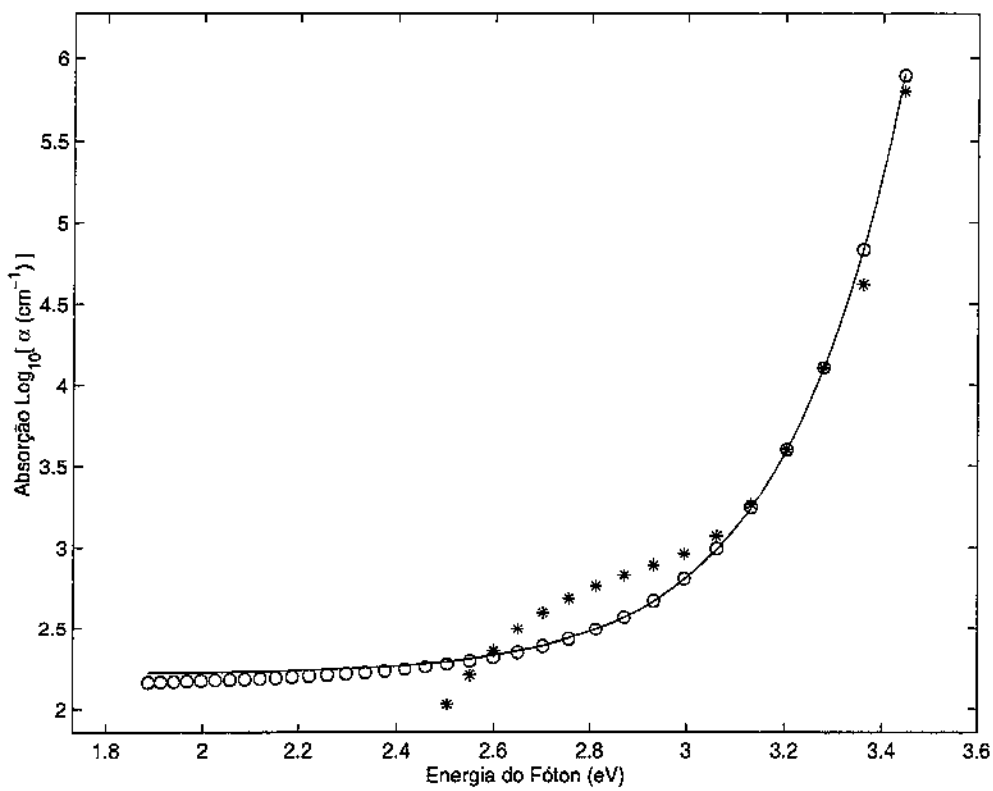


Figura 25: Comparação dos coeficientes de absorção do filme E

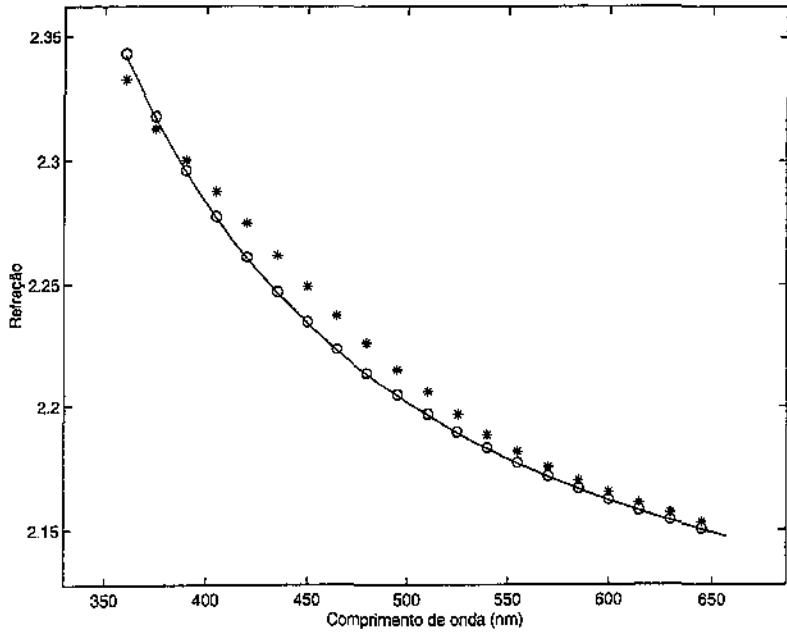


Figura 26: Comparação dos índices de refração do filme E

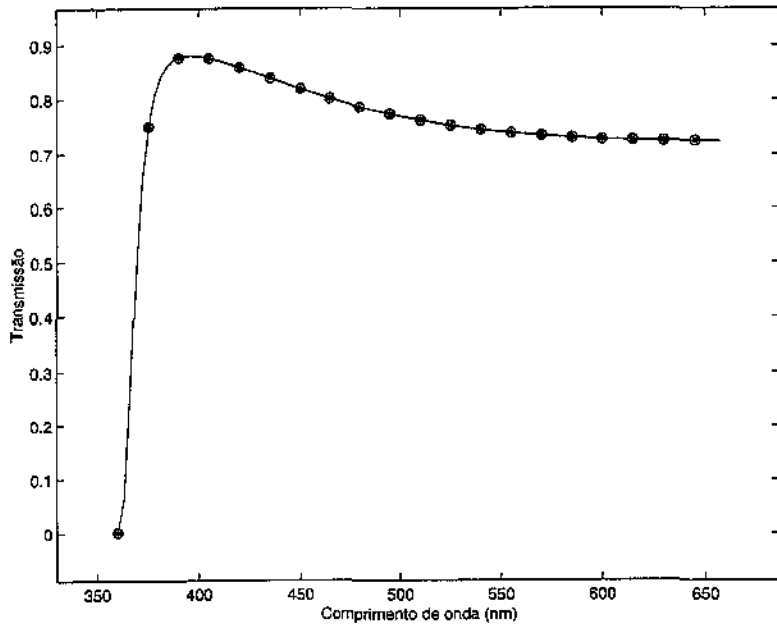


Figura 27: Comparação das transmissões do filme E

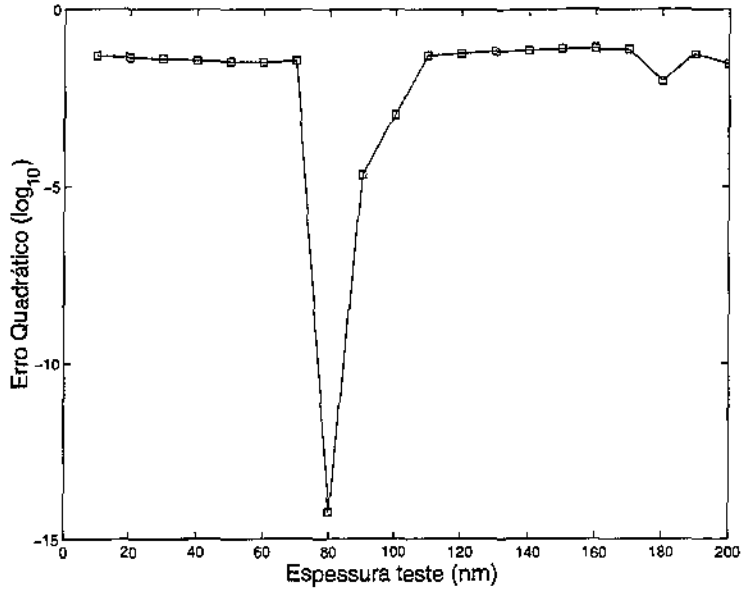


Figura 28: Espessuras teste na malha grossa (filme E)

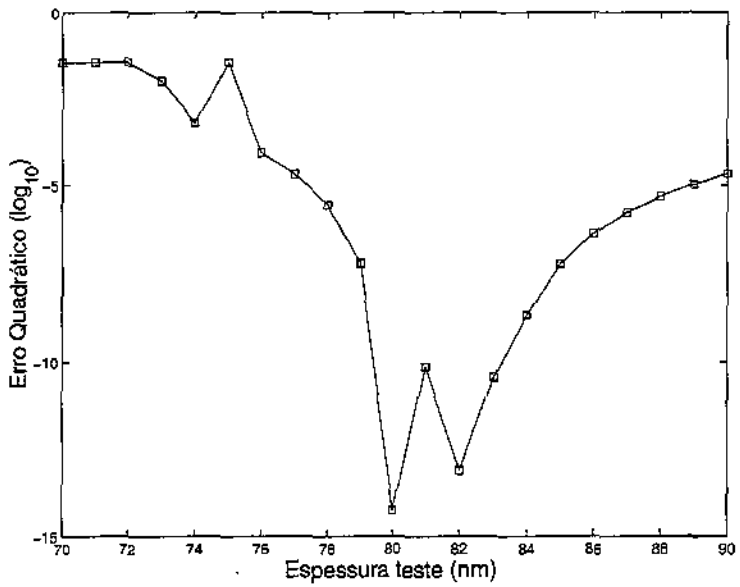


Figura 29: Espessuras teste na malha fina (filme E)

Conclusões

Podemos reunir as conclusões nos itens abaixo:

1. *Custos ainda altos.* Os tempos gastos nas otimizações foram ainda demasiado altos. Com uma média de 2.13 min, a estratégia de resolver o problema para cada uma das espessuras-teste, usada para encontrar a espessura, ficou muito cara, ainda que usando uma malha *menos refinada* com 3 pontos em cada coordenada. Portanto as esperanças de obter um resultado melhor com uma malha *mais refinada* (por exemplo com 5 pontos) ficam severamente diminuídas. Embora os físicos disponham de outras maneiras de recuperar previamente a espessura (e por isso poderíamos utilizar a real), nosso objetivo foi o de conseguir o máximo de resultados possíveis a partir dos dados de transmissão.
2. *Filme C.* A abordagem se mostrou eficiente na recuperação dos coeficientes de absorção, exceto para o filme C. Para os outros quatro filmes, a recuperação foi excelente. A amplitude da transmissão nesse caso era muito pequena e o modelo não foi suficiente para recuperar algo fisicamente aceitável. A espessura recuperada foi razoável, no entanto a recuperação das outras constantes foi pobre. Em determinado momento quando verificávamos a adequação do modelo, resolvemos o problema para encontrar n e α usando a espessura verdadeira, isto é, $d = 100\text{nm}$. Para a malha do \mathbb{R}^4 , usamos em cada coordenada $L = 10$ pontos, gerando 10000 pontos para busca. Depois de aproximadamente 6h, obtivemos, para o coeficiente de absorção, um gráfico muito similar ao do filme D apresentado neste trabalho, o que indica que refinando a malha conseguimos melhorar a recuperação. O tempo elevado, entretanto, tornou impossível a recuperação da espessura.
3. *Filme E.* Os resultados com o coeficiente de absorção do filme E foram muito promissores, uma vez que filmes com pequena espessura (menos de

100nm) são difíceis de recuperar. Serão, por isso, alvo de futuras investigações.

4. *Formas funcionais.* Os resultados deste trabalho sugerem que podemos esperar bons resultados de fórmulas fechadas para $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$. As funções ϕ_i aqui escolhidas e utilizadas na fórmula de $\alpha(\lambda)$ foram, de certo modo arbitrárias, mas o objetivo *a priori* foi o de selecionar opções razoáveis e testar o modelo. Com o filão aberto, temos pois centenas de possibilidades, sendo que, em trabalhos futuros, buscaremos escolhas mais convenientes. Por exemplo, podemos tomar as $\hat{\theta}_j$ como

$$\hat{\theta}_j = \phi_2^j \text{ para } j = 1, \dots, J$$

sendo ϕ_2 definida como anteriormente. Essas funções mantêm a forma desejada e seus raios de curvaturas se alteram gradualmente. Assim temos a vantagem de poder escolher “quantas” θ_j queremos ou precisamos para obter a precisão desejada. Além disso, evitando funções distintas e o processo de “colagem” esperamos reduzir o tempo de resolução.

5. *Índice de Refração.* No geral, os resultados obtidos para o índice de refração foram excelentes. Isso se deve ao fato de termos utilizado a mesma fórmula para gerar e recuperar a constante. No entanto, nosso objetivo nesse trabalho foi melhorar a recuperação do coeficiente de absorção, já que os resultados existentes na literatura para a espessura e o índice de refração são razoáveis.
6. *Algoritmos globais.* De um modo geral, os algoritmos globais são desenvolvidos para executar otimização global. O preço pago para tal investida são custosas avaliações de função, uma vez que são essencialmente busca de tentativa-e-erro. A alternativa para isso é encontrar métodos globais que se ajustem ao problema (a ser feito em trabalhos futuros) de forma a aproveitar as características particulares de cada problema. Neste trabalho fizemos a opção de usar o algoritmo de otimização local EASY! com vários pontos iniciais. O EASY! não foi a escolha ideal, já que foi desenvolvido para problemas de grande porte. Entretanto foi o que apresentou melhores resultados dentre os algoritmos empregados, como por exemplo busca coordenada, método de Newton em cada coordenada e “Dos Chinês”.

Referências Bibliográficas

- [1] BAZARAA, SHERALLI & SHETTY, *Nonlinear Programming*, John Wiley & Sons, 2^a. Ed. (1979)
- [2] BIRGIN, CHAMBOULEYRON & MARTÍNEZ, *Estimation of the Optical Constants and the Thickness of Thin Films Using Unconstrained Optimization*, Journal of Computational Physics, Vol. 151, 862-880 (1999)
- [3] BORN & WOLF, *Principles of Optics*, Pergamon Press UK, 6^a. Ed. (1993)
- [4] CHAMBOULEYRON, MARTÍNEZ, MORETTI & MULATO, *Retrieval of Optical Constants and Thickness of Thin Films from Transmission Spectra*, Applied Optics, Vol. 36, No. 31 8238 (1997)
- [5] KELLEY, *Iterative Methods for Optimization*, SIAM Frontiers in Applied Mathematics (1999)
- [6] MANIFACIER, GASLOT & FILLARD, *A Simple Method for the Determination of the Optical Constants n, k and the Thickness of a Weakly Absorbing Thin Film*, Journal of Physics E: Sci. Instr., Vol. 9, 1002 (1976)
- [7] MARTÍNEZ, *BOX-QUACAN and the Implementations of Augmented Lagrangian Algorithms for Minimization with Equality Constraints*, (1998)
- [8] SWANEPOEL, *Determination of the Thickness and Optical Constants of Amorphous Silicon*, Journal of Physics E: Sci. Instr., Vol. 16, 1214 (1983)
- [9] SWANEPOEL, *Determination of Surface Roughness and Optical Constants of Inhomogeneous Amorphous Silicon Films*, Journal of Physics E: Sci. Instr., Vol. 17, 896 (1984)
- [10] www.ime.unicamp.br/~martinez

Constantes Gedanken

As expressões analíticas usadas para computar os substratos e as constantes ópticas simuladas dos filmes finos são

Substratos

$$s_{vidro} = \sqrt{1 + (0.7568 - 7930 \lambda^{-2})^{-1}} \quad (14)$$

$$s_{Si} = 1.04677 \cdot 10^{-11} \lambda^3 - 2.47125 \cdot 10^{-8} \lambda^2 - 8.69123 \cdot 10^{-5} \lambda + 3.71382 \quad (15)$$

a-Si:H

Índice de Refração,

$$n^{real}(\lambda) = \sqrt{1 + (0.09195 - 12600 \lambda^{-2})^{-1}} \quad (16)$$

Coefficiente de absorção,

$$\ln(\alpha^{real}(E)) = \begin{cases} 6.5944 \cdot 10^{-6} \exp(9.0846E) - 16.102, & 0.06 < E < 1.40 \\ 20E - 41.9, & 1.40 < E < 1.75 \\ \sqrt{59.56E - 102.1} - 8.391 & 1.75 < E < 2.29 \end{cases} \quad (17)$$

a-Ge:H

Índice de Refração,

$$n^{real}(\lambda) = \sqrt{1 + (0.065 - 15000 \lambda^{-2})^{-1}} \quad (18)$$

Coefficiente de absorção,

$$\ln(\alpha^{real}(E)) = \begin{cases} 6.5944 \cdot 10^{-6} \exp(13.629E) - 16.102, & 0.48 < E < 0.93 \\ 30E - 41.9, & 0.93 < E < 1.17 \\ \sqrt{89.34E - 102.1} - 8.391 & 1.17 < E < 1.50 \end{cases} \quad (19)$$

Oxido Metálico

Índice de Refração,

$$n^{real}(\lambda) = \sqrt{1 + (0.3 - 10000 \lambda^{-2})^{-1}} \quad (20)$$

Coefficiente de absorção,

$$\ln(\alpha^{real}(E)) = 6.5944 \cdot 10^{-6} \exp(4.0846E) - 11.02, \quad 0.5 < E < 3.5 \quad (21)$$