



Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA



Técnicas de Otimização para Estimação de Parâmetros de Filmes Finos

TESE DE DOUTORADO

Sergio Drumond Ventura

Doutorando em Matemática Aplicada

Orientador: **Prof. Dr. José Mario Martínez Perez**

Co-Orientador: **Prof. Dr. Ernesto Julián Goldberg Birgin**

Banca: Prof. Dr. Ana Friedlander

Prof. Dr. Carlos Humes Jr.

Prof. Dr. Ivan Emilio Chambouleyron

Prof. Dr. José Alberto Cuminato

3 de março de 2005

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

Bibliotecário: Maria Júlia Milani Rodrigues – CRB8a / 2116

Ventura, Sergio Drumond

V567t Técnicas de otimização para estimação de parâmetros de filmes
finos / Sergio Drumond Ventura -- Campinas, [S.P. :s.n.], 2005.

Orientadores : José Mario Martínez; Ernesto Julián Birgin

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto
de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Otimização. 2. Filmes finos. 3. Matemática aplicada. 4.
Estimativa de parâmetro. I. Martínez, José Mario. II. Birgin, Ernesto
Julián. III. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática,
Estatística e Computação Científica. IV. Título.

Título em inglês: Optimization techniques for the estimation of thin film parameters.

Palavras-chave em inglês (keywords): 1. Optimization. 2. Thin films. 3. Applied
mathematics. 4. Parameter estimation.

Área de concentração: Otimização

Titulação: Doutorado em Matemática Aplicada

Banca examinadora: Prof. Dr. José Mario Martínez (UNICAMP)
 Prof. Dr. Ana Friedlander (UNICAMP)
 Prof. Dr. Ivan Emilio Chambuleyron (UNICAMP)
 Prof. Dr. Carlos Humes Jr. (USP)
 Prof. Dr. José Alberto Cuminato (USP)

Data da defesa: 03/03/2005

Técnicas de Otimização para Estimação de Parâmetros de Filmes Finos

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

Campinas, 3 de março de 2005.

Prof. Dr. José Mario Martínez Perez
Orientador

Ernesto Julián Goldberg Birgin
Co-orientador

Banca Examinadora

José Mario Martínez Perez

Ana Friedlander

Carlos Humes Jr.

Ivan Emilio Chambouleyron

José Alberto Cuminato

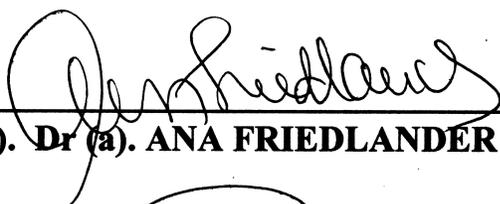
Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Unicamp, como requisito parcial para obtenção do Título de DOUTOR em Matemática Aplicada.

Tese de Doutorado defendida em 03 de março de 2005 e aprovada:

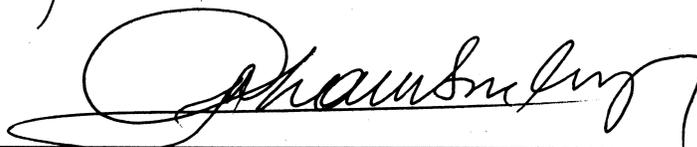
Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



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



Prof. (a). Dr (a). ANA FRIEDLANDER DE MARTÍNEZ PÉREZ



Prof. (a). Dr (a). IVAN EMÍLIO CHAMBOULEYRON



Prof. (a). Dr (a). CARLOS HUMES JÚNIOR



Prof. (a) Dr. (a) JOSÉ ALBERTO CUMINATO

Little Bill: *I don't deserve this. To die like this. I was building a house.*

Munny: *Deserve's got nothing to do with it.*

Little Bill: *I'll see you in hell, William Munny.*

Trecho de diálogo da parte final do filme *Unforgiven*.

(Os Imperdoáveis, 1992).

Aos meus pais e aos meus amigos.

Agradecimentos

Ao meu orientador Prof. José Mario Martínez pela amizade, por tudo que me ensinou, da matemática à literatura, passando pela libertação das conspirações e ocultismos, tudo regado pela infinita paciência.

Aos Profs. Ernesto Birgin e Ivan Chambouleyron, pela amizade e por tudo que me ensinaram.

Agradeço aos meus pais e grandes amigos, Vanderlei e Sonia, pelo apoio ininterrupto. E por sempre acreditarem em mim. E à Ana, por ser uma amiga e sempre dar uma força.

Aos meus grandes amigos Ricardo & Debora, por serem pessoas incríveis e por terem me ensinado muita, muita coisa.

À minha grande amiga Valéria por todas as correções de todos meus textos, incluindo aqueles não muito “rasoáveis”.

Ao meu grande amigo “o Poderoso” Cantão por ser muito humano e pela sua sempre agradável presença.

À Fátima, por ter me ajudado sempre que precisei e ao Flávio por gentilmente imprimir todas as páginas coloridas.

E àquelas fantásticas pessoas que conheci nesses 12 anos de Unicamp que, direta ou indiretamente, contribuíram para a concretização deste trabalho.

Foi, sinceramente, um privilégio.

Conteúdo

1	Introdução	1
I	Teoria	7
2	Transmitância e Refletância para Filmes Finos	9
2.1	Introdução	9
2.2	Sistemas de Camadas para Filmes Finos	14
2.2.1	Transmitância Média	17
2.2.2	Refletância Média	22
2.3	Configurações Especiais e Suas Simplificações	24
2.3.1	Substrato “embaixo” dos filmes	25
2.3.2	Substrato “acima” dos filmes	26
2.3.3	Fórmulas Fechadas para Um Filme	27
3	Modelagem	31
3.1	Introdução	31
3.2	Otimização	35
3.2.1	Restrições Físicas	36
3.2.2	Regularização	36
3.2.3	Enfoque da <i>Variação Total</i>	37
3.2.4	Formas Funcionais	37
3.2.5	Chute Inicial para o Enfoque Ponto-a-Ponto	38
3.2.6	Acrescentando a Espessura	40
II	Aplicações	43
4	Estimativas a partir de Dados de Refletância	45

4.1	Introdução	45
4.2	Estimativa Ponderada	49
4.3	Erros Aleatórios	50
4.4	Erros Sistemáticos	51
4.5	Conclusão	55
5	Estimativas com <i>TVA</i> e Regularização	57
5.1	Introdução	57
5.1.1	<i>Total Variation Approach</i>	57
5.1.2	Regularização	58
5.1.3	Método “Zero”	60
5.2	Conclusões	61
6	Estimativas para Vários Filmes	65
6.1	Introdução	65
6.2	Experimentos Numéricos	67
6.3	Sistema com Filmes Idênticos	68
6.4	Sistema com Filmes Diferentes	70
6.4.1	Intervalo do Espectro 1000–2100nm	70
6.4.2	Intervalo do Espectro 650–2000nm	71
6.5	Conclusão	72
7	Conclusão	77
	Bibliografia	79
	Índice de Figuras	81
	Índice de Tabelas	85
A	Equação das Ondas Transmitidas e Refletidas (Recursivo)	87
A.1	Uma Interface em $x = 0$	87
A.1.1	Interface em $x = L$ (generalização)	88
A.2	Agora com duas interfaces: L_1 e L_2	89
A.2.1	Onda transmitida em $x < L_1$	91
A.2.2	Onda resultante em $L_1 < x < L_2$	92
A.2.3	Onda resultante em $x > L_2$	92
A.2.4	Verificando a continuidade nas interfaces	93

B	Detalhes da Implementação para Vários Filmes	97
B.1	Derivadas Parciais de $\overline{\mathcal{T}}(\lambda)$ e $\overline{\mathcal{R}}(\lambda)$	97
B.2	Derivadas Parciais de B^R e B^I	98
B.3	Corrigindo Problemas de <i>Overflow</i>	101
C	Integrais	103
C.1	Integral do tipo $\int R(\sin x, \cos x)dx$, com R função racional	103
C.2	Integral do tipo $\int \frac{dx}{ax^2 + bx + c}$	103
D	Constantes dos Filmes <i>Gedanken</i>	105
E	<i>Pointwise Unconstrained Minimization Approach</i> – PUMA	107
	Índice Remissivo	109

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.

Para o problema direto, fórmulas compactas foram desenvolvidas para contemplar o caso de múltiplos filmes, além do caso de um filme apenas com dados de refletância. O índice de refração, o coeficiente de absorção e a espessura de filmes finos foram recuperados utilizando para isso dados de transmissão e/ou reflexão para vários comprimentos de onda. A abordagem usada foi a de formular o problema inverso como um problema de otimização, via quadrados mínimos não-lineares. Vários modelos distintos foram usados para lidar com o alto grau de indeterminação naturalmente oriundo deste tipo de problema. Testes numéricos foram realizados usando dados (de filmes) medidos e gerados numericamente, mostrando a eficácia das abordagens.

Abstract

Among the inverse problems, the estimation of optical parameters has a great importance in the study of physical properties of thin films. Up to the present time, there are no definitive techniques for the resolution of this problem.

For the direct problem, compact formulae were developed for the case of multiple films. The refractive index, the absorption coefficient and the thickness of thin films were retrieved using transmission and/or reflection data, for many different wavelengths. The approach used was to reformulate the inverse problem as an optimization problem, via nonlinear least squares. Many different models were used to deal with the high degree of underdetermination which naturally arises from this kind of problem. Numerical tests were performed using measured and numerical generated (film) data, thus proving the efficiency of the methods.

Introdução

O objetivo deste trabalho é resolver um tipo particular de problema inverso. A partir de dados medidos ou observados, tentamos “recuperar” ou “inverter” determinadas características primárias¹, as quais estão ‘ocultas’ nos dados. Por esse motivo, chamaremos esse processo de *inversão*, *engenharia reversa*, *recuperação*, ou ainda *estimação*.

A formulação básica para o problema inverso, usada neste trabalho, é através de otimização, que, neste caso, apresenta as seguintes características:

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.*

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 podem 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.*

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.*

O objeto de estudo, cujas características intrínsecas desejamos conhecer, são os chamados **filmes finos**,

¹No sentido de que são anteriores à medição, ou que as geram.

os quais são construídos, por exemplo, através do seguinte experimento físico²: sobre um substrato faz-se evaporar um material que, após algum tempo, adere sob a superfície do substrato (ver figura 1.1). Esse material aderente forma uma película, extremamente fina, formando uma cobertura³ em um dos lados do substrato. O adjetivo *fino* surge em virtude da espessura ser da ordem de nanômetros⁴ (nm).

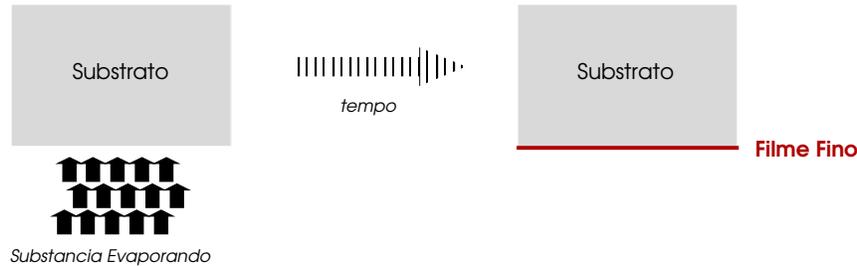


FIGURA 1.1 – Experimento físico de condensamento, através de evaporação, de um **filme fino** sob (ou sobre) um substrato.

As quantidades físicas relativas aos filmes que queremos determinar são a **espessura**, o **índice de refração** e o **coeficiente de absorção**. Embora muitas vezes possível, medi-las através de algum experimento físico pode não ser simples ou viável. Por outro lado, a **medição da energia transmitida** através do sistema formado pelo *substrato mais o filme* é um processo bem conhecido e por isso usá-la-emos para tentar extrair as constantes óticas.

A medição da energia refletida também pode ser usada de modo análogo, embora sua medição esteja mais sujeita a erros. De fato, a medição correta da energia refletida, para incidência normal, é sempre desafiante, porque um divisor de raios é necessário para desviar o raio refletido para o detector (veja figura 1.2). Com isso se reduz a intensidade óptica, o que representa uma perda de sensibilidade, especialmente quando o sinal estiver fraco. Além do mais, um espelho de referência, o qual requer freqüentes calibrações, é necessário.

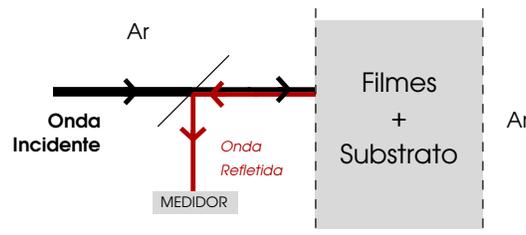


FIGURA 1.2 – Divisor de raios.

O problema de estimar propriedades óticas de filmes finos é, precisamente, um *problema inverso*, pois conhecemos a energia transmitida mas não os parâmetros que a produzem. É um problema desafiante, do

²Além do “método da evaporação” para formar filmes finos, há também ([Hea50]): *sputtering*, a deposição eletrolítica e a deposição química.

³*coating*

⁴1nm = 10^{-9} metros

ponto de vista matemático e possui importância tecnológica e econômica. Para obter soluções razoáveis, são necessários códigos computacionais eficientes e adequados.

Para desenhar o problema de estimação propriamente dito, falta ainda outra peça fundamental. Trata-se das **funções de energia transmitida e refletida teóricas**. Com essas funções, fornecidos os valores numéricos dos parâmetros de um filme, calculamos sua energia transmitida ou refletida, cujos valores devem ser equivalentes aos medidos. Se utilizarmos os valores “errados” dos parâmetros, para determinado filme, estaremos incorrendo num erro, dado por

$$\text{Erro} = \text{Energia Transmitida 'Medida'} - \text{Energia Transmitida 'Teórica'}$$

Naturalmente, se os parâmetros estiverem “corretos”, o erro é zero. Portanto, o processo de otimização se baseia na condição necessária de encontrar um erro suficiente ou satisfatoriamente pequeno. Podemos pensar, *grosso modo*, em um processo do tipo “tentativa e erro”: com a energia medida e valores iniciais para os parâmetros, calculamos o erro. Se ele for pequeno, então achamos os valores procurados. Senão, modificamos o valor dos parâmetros de modo a diminuir o erro, e seguimos modificando-os até que o erro se torne pequeno.

Multifilmes. De modo análogo, podemos considerar um sistema formado não por apenas um, mas vários filmes, inclusive em ambos os lados do substrato. O interesse de trabalhar com múltiplos filmes reside em saber até onde a inversão consegue produzir resultados razoáveis, uma vez que ao aumentarmos o número de filmes, aumentam o número de variáveis e conseqüentemente a indeterminação do problema. Obviamente, é possível pensar a estimação para vários filmes como ‘várias estimações para um filme’, *i.e.*, considerar os filmes e estimar suas constantes separadamente. Contudo, podemos supor o caso hipotético do sistema multifilmes contruído ‘*a priori*’, mas sem que se saiba, por alguma razão, quais filmes o constituem. Portanto, dispor de um instrumento de estimação efetiva nesses casos, tem um interesse prático.

Filmes Gerados por Computador. Para poder resolver numericamente o problema de minimizar o erro acima, no caso de filmes reais, é importante que tenhamos um conjunto de *problemas-teste* de modo a poder avaliar a abrangência e as limitações dos algoritmos.

Os problemas-teste, usados nesse trabalho, são filmes ‘gerados por computador’ ou *gedanken*⁵, assim chamados pois são idealizados⁶, isto é, suas constantes ópticas são ‘imaginadas’ e então o filme é construído numericamente. Dessa forma, a resposta ‘verdadeira’ é conhecida antecipadamente, de modo que o ajuste

⁵O origem dessa palavra é o verbo alemão *denken*, cuja tradução em português é ‘pensar’. Deste verbo derivam três substantivos: *der Gedanke* (o pensamento, a idéia), *die Gedanken* (os pensamentos) e *das Denken* (o ato de pensar). Veja que em português, todos os três podem ser traduzidos correta e simplesmente por ‘pensamento’. Em inglês, as três formas são diferentes, dadas por *the thought*, *the thoughts* e *the thinking*, respectivamente. Observamos ainda que esse verbo é irregular, e portanto forma o passado (*Präteritum*) com *dachte* e o particípio perfeito (*Partizip Perfekt*) com *gedacht*.

⁶Idealizado não significa simulado, pois esse último imita uma realidade já conhecida.

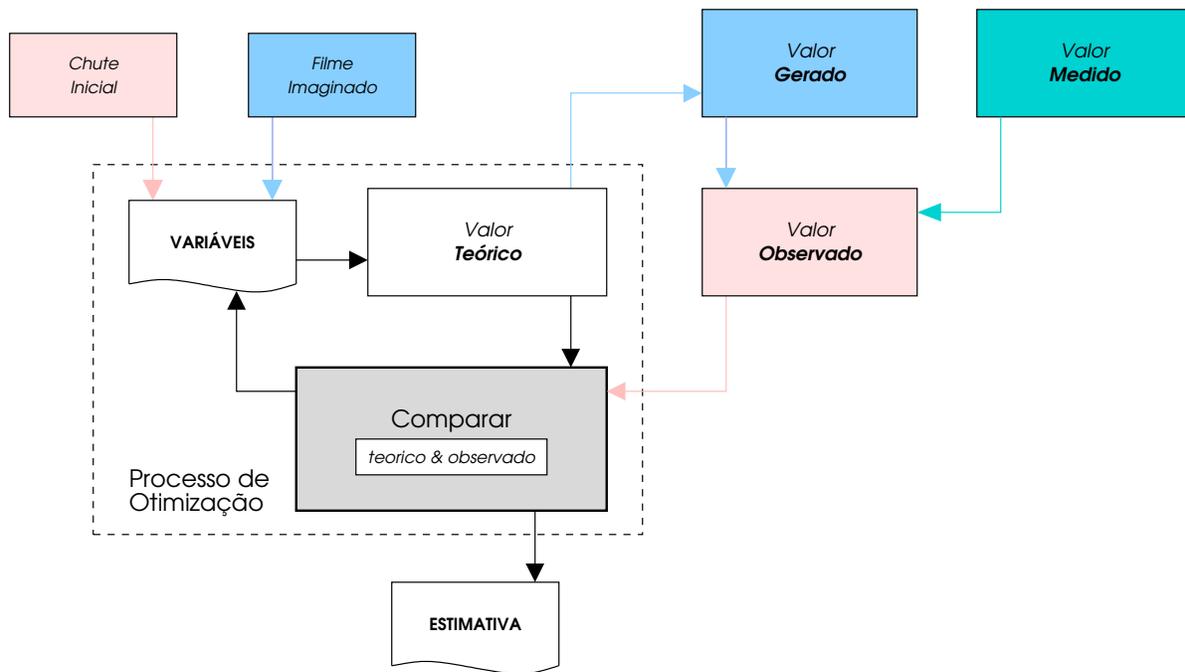


FIGURA 1.3 – Experiência física de condensamento, através de evaporação, de filme fino em um substrato.

e as limitações dos algoritmos de recuperação podem ser prontamente obtidos em filmes possuindo propriedades ópticas distintas e/ou com diferentes espessuras. Além disso, o algoritmo pode ser aplicado a filmes contendo diferentes níveis de *erros aleatórios* e *sistemáticos* nas suas transmitâncias e refletâncias. Essa possibilidade permite estabelecer as limitações do método de inversão. Finalmente, testes de consistência são facilmente aplicados a filmes *gedanken*.

Embora importantes, os experimentos com filmes *gedanken* pertencem a um mundo ideal, no sentido de que eles são homogêneos, perfeitamente planos e paralelos, livres de erros experimentais oriundos de limitações na medição (presentes em filmes reais). Apesar disso, a qualidade das recuperações obtidas para filmes gerados, tende a permanecer para filmes reais, motivo pelo qual são utilizados.

Na figura 1.3, temos um esquema geral que mostra o processo de otimização (caixas rosas). Note que o valor *de fato* utilizado para o cálculo do erro é o “valor observado”, cuja origem pode ser tanto de medição (caixa verde) quanto de construção numérica (caixas azuis).

Roteiro

Este trabalho está organizado como se segue:

Capítulo 2. Calculamos matricialmente as equações das ondas resultantes transmitida e refletida para um sistema de camadas com interfaces paralelas. Para esse sistema geral, definimos transmitância e re-

fletância. Restringimo-nos ao caso particular de sistemas para o estudo de filmes finos, isto é, formados por filmes e substrato. Descrevemos porque as fórmulas, inicialmente elaboradas, não representam bem a realidade. Corrigimo-las, chegando nas formas médias para a transmitância e refletância. Finalizamos mostrando algumas configurações especiais.

Capítulo 3. Mostramos como usar as fórmulas do capítulo anterior para construir o problema inverso de estimar as constantes ópticas de filmes finos, através de uma reformulação sob o ponto de vista da otimização e quais as dificuldades intrínsecas desse problema.

Capítulo 4. Realizamos experimentos numéricos para estimativas de filmes reais e gerados por computador, usando apenas dados de refletância. São introduzidos erros aleatórios e sistemáticos.

Capítulo 5. Realizamos experimentos numéricos para estimativas de filmes gerados por computador, usando dois modelos distintos: *Total Variation* e Regularização.

Capítulo 6. Realizamos experimentos numéricos para estimativas de um sistema com dois filmes (gerados por computador), usando somente dados de transmissão.

Capítulo 7. Conclusão geral.

Todos os experimentos numéricos foram rodados em um AMD Athlon MP, com as seguintes características: 2Gbytes de RAM, 2.8GHz. Os códigos estão em C e FORTRAN e o compilador usado foi o GNU gcc 3.3.4.

Parte I

Teoria

Transmitância e Refletância para Filmes Finos

Conteúdo do Capítulo 2

2.1	Introdução	9
2.2	Sistemas de Camadas para Filmes Finos	14
2.2.1	Transmitância Média	17
2.2.2	Refletância Média	22
2.3	Configurações Especiais e Suas Simplificações	24
2.3.1	Substrato “embaixo” dos filmes	25
2.3.2	Substrato “acima” dos filmes	26
2.3.3	Fórmulas Fechadas para Um Filme	27

2.1 Introdução

Neste capítulo, nosso objetivo é estudar e desenvolver fórmulas compactas e numericamente viáveis para a transmitância e refletância teóricas. Mostraremos porque as expressões obtidas, na sua forma pura, não modelam corretamente a realidade e quais os mecanismos que usamos para corrigi-las. Começamos com ondas com incidência normal em um sistema geral de camadas com interfaces paralelas. A seguir particularizamos para o caso de sistemas para filmes finos e calculamos as fórmulas no caso geral e em alguns casos particulares.

Seja um sistema geral de m camadas “paralelas”, numeradas $\nu = 0, 1, \dots, m - 1$ (veja figura 2.1). Nesse sistema, supomos uma onda *normalmente incidente*¹ na camada 0 inicial, a qual produzirá sucessivas ondas transmitidas e refletidas, através das diversas interfaces. Como resultado, teremos, nas camadas internas,

¹Na caso de incidência *não-normal*, as equações são mais complexas e não serão apresentadas pois não foram utilizadas neste trabalho.

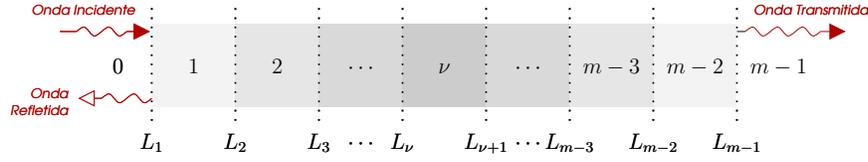


FIGURA 2.1 – Representação esquemática de um sistema de m camadas paralelas, numeradas de 0 até $m - 1$. As interfaces L_i são numeradas para $i = 1, \dots, m - 1$. Há uma onda incidente na camada 0, cujas sucessivas transmissões e reflexões através das camadas internas, produzirá uma onda transmitida resultante na ‘camada final’ $m - 1$ e uma onda resultante refletida na ‘camada inicial’ 0. As tonalidades de cinza são meramente ilustrativas e não implicam que as camadas sejam de mesmo material.

uma série de transmissões e reflexões, enquanto nas camadas externas, apenas transmissões (na última camada $m - 1$) ou apenas reflexões (na camada inicial 0).

Em [BW59, Hea50, CM01] são apresentados dois enfoques distintos para o cálculo das ondas transmitidas e refletidas do sistema da figura 2.1. O primeiro deduz, por meio de recursão, as equações das diversas ondas produzidas ao longo das camadas internas, as quais, neste caso, são inviáveis numericamente, embora forneçam uma visão mais detalhada do fenômeno.

Por outro lado o *enfoque matricial*, considera apenas, em cada camada, as ondas transmitidas e refletidas *resultantes*. Essa duas ondas são obtidas somando separadamente, em cada camada, todas as ondas transmitidas e todas as refletidas². Como queremos apenas as ondas transmitidas e refletidas “do sistema”, isto é, as ondas resultantes nas camadas inicial e final, usamos esse método. O que faremos a seguir é deduzir as equações dessas ondas resultantes em função da equação da onda incidente. De modo geral, a equação de uma onda viajando no eixo x é dada através da sua forma complexa por (veja [BW59, Hea50, CM01])

$$u(x, t) = \tilde{E} \exp \left[i(\omega t - \tilde{k}x) \right] \quad (2.1.1)$$

onde $\tilde{E}, \tilde{k} \in \mathbb{C}$ são a **amplitude** e o **vetor de onda**, respectivamente e $\omega \in \mathbb{R}$ é a **velocidade angular**. De modo habitual, definimos o **índice de refração complexo** (ou generalizado) por

$$\tilde{n} = n - i\kappa \quad (2.1.2)$$

onde $n = n(\lambda)$ é o **índice de refração** e $\kappa = \kappa(\lambda)$ é o **coeficiente de atenuação**. Também valem as seguintes relações:

$$\tilde{k} = \pm \left(\frac{\omega}{c} \right) \tilde{n} \quad \text{e} \quad \left| \text{real} \left\{ \tilde{k} \right\} \right| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.1.3)$$

Se $\text{real} \left\{ \tilde{k} \right\} > 0$, a onda viaja para a direita e se $\text{real} \left\{ \tilde{k} \right\} < 0$, a onda viaja para a esquerda. Portanto,

²Isso é possível porque todas as ondas possuem a mesma frequência.

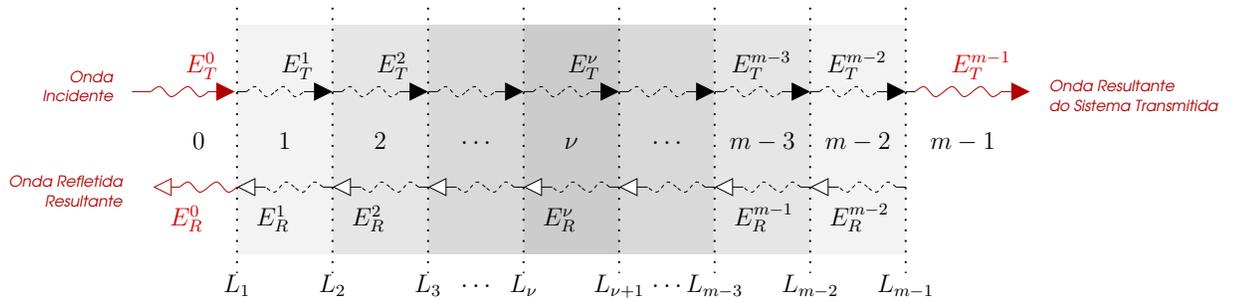


FIGURA 2.2 – Representação das ondas resultantes por camada. Como a incidência é normal, a linha das ondas transmitidas e refletidas é a mesma, e foram separadas acima por clareza. As ondas são identificadas por suas amplitudes, de modo que a onda incidente é E_T^0 , a onda transmitida na última camada é E_T^{m-1} e a onda refletida na primeira camada é E_R^0 . Como não há onda refletida na última camada, $E_R^{m-1} = 0$. As tonalidades de cinza são meramente ilustrativas e não implicam que as camadas sejam de mesmo material.

com relação às ondas resultantes e incidente, temos

$$\text{Equação da onda } \mathbf{incidente}: \quad u(x, t) = E \exp[i(\omega t - kx)]$$

$$\text{Equação da onda resultante } \mathbf{transmitida} \text{ na camada } \nu: \quad u_T^\nu(x, t) = E_T^\nu \exp[i(\omega_T^\nu t - k_T^\nu x)] \quad (2.1.4)$$

$$\text{Equação da onda resultante } \mathbf{refletida} \text{ na camada } \nu: \quad u_R^\nu(x, t) = E_R^\nu \exp[i(\omega_R^\nu t + k_R^\nu x)]$$

onde $E_T^\nu, \omega_T^\nu, k_T^\nu$ são, na camada ν , as constantes da **onda transmitida resultante** e $E_R^\nu, \omega_R^\nu, k_R^\nu$ as constantes da **onda refletida resultante**. De [BW59, Hea50, CM01], sabemos que a velocidade angular é constante³, e portanto $\omega = \omega_T^\nu = \omega_R^\nu$, para todo ν . Além disso, $k_R^\nu = -k_T^\nu$ e por isso vamos usar⁴ apenas \tilde{k}_ν e $-\tilde{k}_\nu$. Portanto, as equações das ondas resultantes são

$$u_T^\nu(x, t) = E_T^\nu \exp[i(\omega t - \tilde{k}_\nu x)] \quad (2.1.5)$$

$$u_R^\nu(x, t) = E_R^\nu \exp[i(\omega t + \tilde{k}_\nu x)]$$

Vamos identificar as ondas por suas amplitudes (veja figura 2.2), de modo que a onda incidente é E_T^0 , a onda transmitida na última camada é E_T^{m-1} e a onda refletida na primeira camada é E_R^0 . Como não há onda refletida na última camada, $E_R^{m-1} = 0$. Impondo a continuidade das ondas e de suas derivadas em x nas interfaces L_ν para $\nu = 1, \dots, m-1$, obtemos o sistema

$$\begin{cases} u_T^{\nu-1}(L_\nu, t) + u_R^{\nu-1}(L_\nu, t) = u_T^\nu(L_\nu, t) + u_R^\nu(L_\nu, t) \\ \frac{\partial}{\partial x} u_T^{\nu-1}(L_\nu, t) + \frac{\partial}{\partial x} u_R^{\nu-1}(L_\nu, t) = \frac{\partial}{\partial x} u_T^\nu(L_\nu, t) + \frac{\partial}{\partial x} u_R^\nu(L_\nu, t) \end{cases} \quad (2.1.6)$$

³Depende apenas da onda incidente

⁴Vamos usar \tilde{k} em vez de simplesmente k para enfatizar que é uma quantidade complexa

ou, substituindo pelas equações (2.1.5), temos

$$\begin{cases} E_T^{\nu-1} \exp(-i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) + E_R^{\nu-1} \exp(i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) = E_T^\nu \exp(-i\tilde{k}_\nu L_\nu) + E_R^\nu \exp(i\tilde{k}_\nu L_\nu) \\ -\tilde{k}_{\nu-1} E_T^{\nu-1} \exp(-i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) + \tilde{k}_{\nu-1} E_R^{\nu-1} \exp(i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) = -\tilde{k}_\nu E_T^\nu \exp(-i\tilde{k}_\nu L_\nu) + \tilde{k}_\nu E_R^\nu \exp(i\tilde{k}_\nu L_\nu) \end{cases} \quad (2.1.7)$$

Substituímos $\tilde{k}_\nu = k\tilde{n}_\nu/\tilde{n}_0$ e escrevemos matricialmente

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_{\nu-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \exp(-i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_T^{\nu-1} \\ E_R^{\nu-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\tilde{n}_\nu & \tilde{n}_\nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \exp(-i\tilde{k}_\nu L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(i\tilde{k}_\nu L_\nu) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_T^\nu \\ E_R^\nu \end{bmatrix} \quad (2.1.8)$$

Isolando E_T^ν e E_R^ν , temos

$$\begin{bmatrix} E_T^\nu \\ E_R^\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(-i\tilde{k}_\nu L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(i\tilde{k}_\nu L_\nu) \end{bmatrix} \frac{1}{2\tilde{n}_\nu} \begin{bmatrix} \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} \\ \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \exp(-i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(i\tilde{k}_{\nu-1}L_\nu) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_T^{\nu-1} \\ E_R^{\nu-1} \end{bmatrix} \quad (2.1.9)$$

Definimos, para $\nu = 1, \dots, m-1$,

$$A_\nu = \frac{1}{2\tilde{n}_\nu} \begin{bmatrix} \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} \\ \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \Lambda_\nu(z) = \begin{bmatrix} \exp(-izL_\nu) & 0 \\ 0 & \exp(izL_\nu) \end{bmatrix} \quad (2.1.10)$$

de modo que (2.1.9) fica

$$\begin{bmatrix} E_T^\nu \\ E_R^\nu \end{bmatrix} = \Lambda_\nu(\tilde{k}_\nu) A_\nu \Lambda_\nu(\tilde{k}_{\nu-1}) \begin{bmatrix} E_T^{\nu-1} \\ E_R^{\nu-1} \end{bmatrix} \quad (2.1.11)$$

Seja $d_\nu \equiv L_{\nu+1} - L_\nu$ a espessura da camada $\nu = 1, \dots, m-2$. Associada a essa espessura, definimos a matriz

$$D_\nu = \begin{bmatrix} \exp(-i\tilde{k}_{\nu-1}[L_{\nu+1} - L_\nu]) & 0 \\ 0 & \exp(i\tilde{k}_{\nu-1}[L_{\nu+1} - L_\nu]) \end{bmatrix} \quad (2.1.12)$$

Logo

$$\begin{bmatrix} E_T^{\nu+1} \\ E_R^{\nu+1} \end{bmatrix} = \Lambda_{\nu+1}(\tilde{k}_{\nu+1}) A_{\nu+1} D_\nu A_\nu \Lambda_\nu(\tilde{k}_{\nu-1}) \begin{bmatrix} E_T^{\nu-1} \\ E_R^{\nu-1} \end{bmatrix} \quad (2.1.13)$$

pois

$$D_\nu = \Lambda_{\nu+1}(\tilde{k}_\nu) \Lambda_\nu(\tilde{k}_\nu) \quad (2.1.14)$$

Realizamos os produtos recursivos para $\nu = 0, \dots, m-1$ e fazemos $L_1 = 0$, sem perda de generalidade, para obter

$$\begin{bmatrix} E_T^{m-1} \\ E_R^{m-1} \end{bmatrix} = \Lambda_{m-1}(\tilde{k}_{m-1}) A_{m-1} (D_{m-2} A_{m-2}) \cdots (D_2 A_2) (D_1 A_1) \begin{bmatrix} E_T^0 \\ E_R^0 \end{bmatrix} \quad (2.1.15)$$

Seja a matriz M , a qual denominaremos de *matriz do sistema de camadas*, dada por

$$M \equiv \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = A_{m-1} (D_{m-2} A_{m-2}) \cdots (D_2 A_2) (D_1 A_1) \quad (2.1.16)$$

e

$$M' \equiv \begin{bmatrix} M'_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = \Lambda_{m-1}(\tilde{k}_{m-1}) M \quad (2.1.17)$$

Logo,

$$\begin{bmatrix} E_T^{m-1} \\ E_R^{m-1} \end{bmatrix} = M' \begin{bmatrix} E_T^0 \\ E_R^0 \end{bmatrix} = \Lambda_{m-1}(\tilde{k}_{m-1}) M \begin{bmatrix} E_T^0 \\ E_R^0 \end{bmatrix} \quad (2.1.18)$$

Como na última camada não há reflexão, $E_R^{m-1} = 0$. No sistema acima, as variáveis que queremos determinar são E_T^{m-1} (onda transmitida) e E_R^0 (onda refletida), ambas em função de E_T^0 (onda incidente dada). Desse modo

$$E_R^0 = -\frac{M'_{21}}{M'_{22}} E_T^0 = -\frac{M_{21}}{M_{22}} E_T^0 \quad (2.1.19)$$

e

$$\begin{aligned} E_T^{m-1} &= \left(M'_{11} - \frac{M'_{12} M'_{21}}{M'_{22}} \right) E_T^0 \\ &= \exp(i\tilde{k}_{m-1} L_{m-1}) \left(M_{11} - \frac{M_{12} M_{21}}{M_{22}} \right) E_T^0 \\ &= \exp(i\tilde{k}_{m-1} L_{m-1}) \left(\frac{\det M}{M_{22}} \right) E_T^0 \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

Podemos simplificar $\det(M)$, visto que, para todo ν , $\det(D_\nu) \equiv 1$, e

$$\det(A_\nu) = \det \left(\frac{1}{2\tilde{n}_\nu} \begin{bmatrix} \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} \\ \tilde{n}_\nu - \tilde{n}_{\nu-1} & \tilde{n}_\nu + \tilde{n}_{\nu-1} \end{bmatrix} \right) = \frac{\tilde{n}_{\nu-1}}{\tilde{n}_\nu} \quad (2.1.21)$$

Dessa forma,

$$\begin{aligned} \det(M) &= \det(A_{m-1}) \times \cdots \times \det(A_2) \det(A_1) \\ &= \frac{\tilde{n}_{m-2}}{\tilde{n}_{m-1}} \times \cdots \times \frac{\tilde{n}_1 \tilde{n}_0}{\tilde{n}_2 \tilde{n}_1} \\ &= \frac{\tilde{n}_0}{\tilde{n}_{m-1}} \end{aligned} \quad (2.1.22)$$

Logo

$$E_T^{m-1} = \exp(i\tilde{k}_{m-1} L_{m-1}) \left(\frac{\tilde{n}_0}{\tilde{n}_{m-1}} \right) \frac{1}{M_{22}} \quad (2.1.23)$$

De [CM01], sabemos que a energia de uma onda com amplitude E inserida num meio cujo índice de refração n seja real, é dada por $n|E|^2$. Supondo a primeira e última camadas transparentes, logo $n_0, n_{m-1} \in \mathbb{R}$ e portanto, para um sistema com m camadas, as energias são dadas por

$$\begin{aligned} \text{Energia INCIDENTE} &= \tilde{n}_0 |E|^2 \\ \text{Energia TRANSMITIDA} &= \tilde{n}_{m-1} |E_{m-1}^T|^2 \\ \text{Energia REFLETIDA} &= \tilde{n}_0 |E_{m-1}^R|^2 \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

Para haver conservação de energia, a soma das energias dissipadas ou absorvidas para uma onda incidente num sistema de camadas, deve satisfazer

$$\text{Energia INCIDENTE} = \text{Energia TRANSMITIDA} + \text{Energia REFLETIDA} + \text{Energia ABSORVIDA}$$

de modo que as energias *transmitidas* e *refletidas* são uma fração da onda incidente. Logo, definimos em termos relativos

$$\begin{aligned} \text{Transmitância} &\equiv \mathcal{T}(\lambda) \equiv \frac{\text{Energia TRANSMITIDA}}{\text{Energia INCIDENTE}} \\ \text{Refletância} &\equiv \mathcal{R}(\lambda) \equiv \frac{\text{Energia REFLETIDA}}{\text{Energia INCIDENTE}} \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

Naturalmente, $\mathcal{T}(\lambda) + \mathcal{R}(\lambda) \leq 1$, ocorrendo a igualdade somente quando todos as camadas forem transparentes, isto é, não absorventes. Portanto, concluímos que

$$\mathcal{T}(\lambda) = \left(\frac{n_0}{n_{m-1}} \right) \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad \text{e} \quad \mathcal{R}(\lambda) = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 \quad (2.1.26)$$

2.2 Sistemas de Camadas para Filmes Finos

Vamos aplicar o cálculo da transmitância e refletância teóricas para o caso particular onde as camadas do sistema são formadas apenas por *ar*, *filme fino* e *substrato*. De modo geral, os sistemas de camadas para filmes finos possuem as seguintes características:

1. As camadas são numeradas de 0 até $m - 1$.
2. A onda incidente está localizada na camada 0 (inicial) que é composta de ar. Logo, temos $n_0 \equiv 1$ e $\kappa_0 \equiv 0$.
3. Um único substrato encontra-se na camada S , é transparente ($\kappa_{\text{substrato}} = 0$), e chamamos seu índice de refração de $s(\lambda)$. Pode ser de vidro, silício cristalino ou outro material, em geral, bem conhecido.
4. Para cada camada correspondente a um filme fino, há três variáveis pertinentes: a espessura, o índice de refração e o coeficiente de atenuação.



FIGURA 2.3 – Esquerda: sistema com substrato finito, sendo a ‘última camada’ composta de ar. Direita: sistema onde o substrato é a ‘última camada’ e portanto semi-infinito.

Na literatura, existem dois enfoques para tratar a espessura do substrato: considerá-la *finita* ou *semi-infinita* (veja figuras 2.3). O caso semi-infinito surge naturalmente do fato de a espessura do substrato, chamado de grosso, ser ordens de grandeza maior que as espessuras dos filmes finos. Nesse caso, as reflexões no fundo do substrato são negligenciadas e a transmitância é definida dentro do substrato.

Para entender as diferenças entre os enfoques, vejamos o exemplo abaixo, apresentado em [CM01]:

Suponha que o meio incidente seja ar ($n_0 = 1$) e se tenha uma radiação incidente com comprimento de onda de $\lambda = 995\text{nm}$. Para um único filme com espessura de 127nm , temos que seu índice de refração $n = 2.1$ e coeficiente de atenuação $\kappa = 0.1$. O índice de refração do substrato é $n_{\text{subs}} = 1.57$. Nesse caso,

$$\mathcal{T}_{\text{semi-inf}} = 0.673819$$

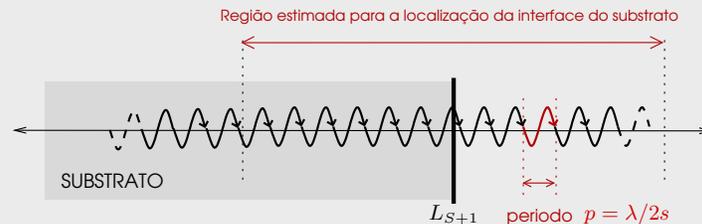
Por outro lado, supondo-o finito com espessura de $10^6\text{nm} = 1\text{mm}$, com a última camada de ar (semi-infinita), temos

$$\mathcal{T}_{\text{espessura}=10^6\text{nm}} = 0.590441$$

cuja diferença com o caso semi-infinito é significativa. Além disso, fazendo as mesmas contas mas para um substrato de $10^6 + 150\text{nm}$, obtém-se

$$\mathcal{T}_{\text{espessura}=10^6+150\text{nm}} = 0.664837$$

De novo, uma diferença não-desprezível, embora na prática os substratos finitos desse exemplo sejam indistinguíveis. Contudo, a transmitância $\mathcal{T}(\lambda)$ como função da espessura do substrato $d_S = L_{S+1} - L_S$ é periódica com período $\lambda/2s$, e que esse período é, em geral, muito menor que a espessura do substrato. Em muitos casos, o período é ainda menor que o erro associado à medição da espessura do substrato (veja figura abaixo).



Porém, na realidade os substratos são finitos e as reflexões no fundo ocorrerão, e portanto, devemos considerar a transmitância do sistema com *espessura finita para o substrato*. Mais precisamente, uma

*transmitância*⁵ *média* com relação à espessura do substrato, devido à limitações na precisão de sua medição. Portanto, segundo o exemplo, para obter uma melhor representação das quantidades medidas, devemos considerar

$$\mathcal{T}_{m\acute{e}dia}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1}+\lambda/2s} \mathcal{T}(\lambda) dL_{S+1} \quad (2.2.1)$$

Analogamente, para a refletância

$$\mathcal{R}_{m\acute{e}dia}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1}+\lambda/2s} \mathcal{R}(\lambda) dL_{S+1} \quad (2.2.2)$$

Na figura 2.4, plotamos \mathcal{T} , \mathcal{R} , $\mathcal{T}_{m\acute{e}dia}$ e $\mathcal{R}_{m\acute{e}dia}$ para um determinado filme. Podemos ver claramente como a transmitância e refletância apresentam uma grande oscilação para comprimentos de onda adjacentes, enquanto o valor médio tem um comportamento suave. Nesse exemplo, usamos um substrato de vidro com espessura $d_S = 10^6 \text{nm}$. Para outro valor, por exemplo $d_S = 10^6 + 100 \text{nm}$, obtemos outra nuvem de pontos. Ao fixar um comprimento de onda λ^* e fazer a média de $\mathcal{T}(\lambda^*)$ para todas as nuvens de pontos, obtemos $\mathcal{T}_{m\acute{e}dio}(\lambda^*)$.

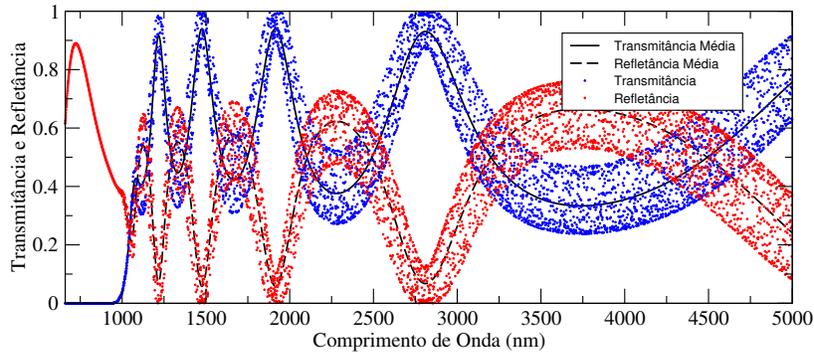


FIGURA 2.4 – Gráficos da transmitância, refletância, transmitância média e refletância média para o filme A de [BCM99]. Observe que a transmitância e refletância formam uma nuvem de pontos em torno da média.

Naturalmente, essas integrais não dependem de L_{S+1} e podem ser calculadas analiticamente. Calculamos nas seções seguintes. Consideramos o caso mais geral possível (veja figura 2.5), isto é, um sistema composto, nessa ordem, de: ar, N_1 filmes, substrato, N_2 filmes e ar. O total de camadas é, portanto, $m = N_1 + N_2 + 3$ (veja tabela 2.1). Na figura 2.8, no final deste capítulo, apresentamos o esquema geral para calcular a transmitância e refletância médias, deduzidas a seguir.

⁵E de modo analogo, uma *refletância média*.

Camada	Ar	N_1 Filmes Anteriores			Substrato	N_2 Filmes Posteriores			Ar
	0	1	\dots	$S-1$	S	$S+1$	\dots	$m-2$	$m-1$
Índice de Refração	1	n_1	\dots	n_{S-1}	s	n_{S+1}	\dots	n_{m-2}	1
Coefficiente de Atenuação	0	κ_1	\dots	κ_{S-1}	0	κ_{S+1}	\dots	κ_{m-2}	0
Espessura	$+\infty$	d_1	\dots	d_{S-1}	d_S	d_{S+1}	\dots	d_{m-2}	$+\infty$

TABELA 2.1 – Índice de refração, coeficiente de atenuação e espessura para N_1 filmes na porção anterior e N_2 filmes na porção posterior do sistema de camadas, além do substrato e das camadas (de ar) inicial e final (veja representação esquemática na figura 2.5).

2.2.1 Transmitância Média

Daqui em diante, usaremos os símbolos $\bar{\mathcal{T}}$ e $\bar{\mathcal{R}}$ respectivamente para $\mathcal{T}_{m\u00e9dia}$ e $\mathcal{R}_{m\u00e9dia}$. De (2.1.26), (2.2.1) fica

$$\bar{\mathcal{T}} = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1}+\lambda/2s} \frac{1}{|M_{22}|^2} dL_{S+1} \quad (2.2.3)$$

Em vez de calcular M realizando o produto matricial completo, consideremos o produto por partes da seguinte forma

$$M = C D_S B \quad (2.2.4)$$

onde definimos as matrizes $B, C \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ por

$$B \equiv \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} = A_S(D_{S-1}A_{S-1}) \cdots (D_1A_1) \quad (2.2.5)$$

$$C \equiv \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} = A_{m-1}(D_{m-2}A_{m-2}) \cdots (D_{S+1}A_{S+1}) \quad (2.2.6)$$

Seja $d = \sum_{\nu=1}^{S-1} d_\nu$. Ent\u00e3o $d_S = L_{S+1} - L_S = L_{S+1} - d$. Logo,

$$D_S = \begin{bmatrix} e^{-ik_S(L_{S+1}-L_S)} & 0 \\ 0 & e^{ik_S(L_{S+1}-L_S)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{-ik_S(L_{S+1}-d)} & 0 \\ 0 & e^{ik_S(L_{S+1}-d)} \end{bmatrix} \quad (2.2.7)$$

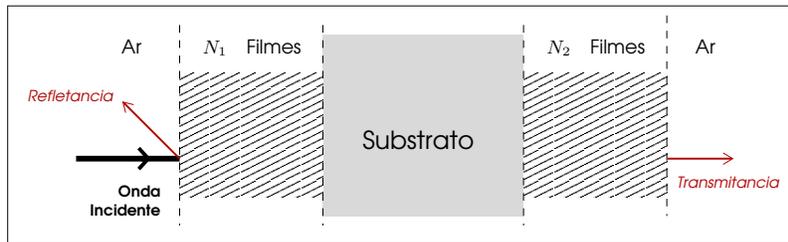


FIGURA 2.5 – Representa\u00e7\u00e3o esquem\u00e1tica para a transmit\u00e2ncia e a reflet\u00e2ncia no caso geral de N_1 filmes ‘anteriores’ e N_2 filmes ‘posteriores’, separados por um substrato transparente grosso conhecido.

Portanto,

$$M = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-iks(L_{S+1}-d)} & 0 \\ 0 & e^{iks(L_{S+1}-d)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} \quad (2.2.8)$$

donde podemos concluir que

$$M_{22} = C_{21} B_{12} e^{-iks(L_{S+1}-d)} + C_{22} B_{22} e^{iks(L_{S+1}-d)} \quad (2.2.9)$$

Para separar os fatores com e sem L_{S+1} , definimos

$$z_1 = C_{21} B_{12} e^{iks d} \quad (2.2.10)$$

e

$$z_2 = C_{22} B_{22} e^{-iks d} \quad (2.2.11)$$

de modo que

$$M_{22} = \exp\left(-i\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) z_1 + \exp\left(i\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) z_2 \quad (2.2.12)$$

onde substituímos $k_S = 2\pi s/\lambda$. Ao expandir M_{22} em suas partes real e imaginária, obtemos

$$\text{real}\{M_{22}\} = \cos\left(\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) (z_1^R + z_2^R) + \sin\left(\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) (z_1^I - z_2^I) \quad (2.2.13)$$

$$\text{imag}\{M_{22}\} = \cos\left(\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) (z_1^I + z_2^I) + \sin\left(\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) (z_2^R - z_1^R) \quad (2.2.14)$$

onde $z_1^R = \text{real}\{z_1\}$, $z_1^I = \text{imag}\{z_1\}$, $z_2^R = \text{real}\{z_2\}$ e $z_2^I = \text{imag}\{z_2\}$. Como, após realizar a conta $\text{real}\{M_{22}\}^2 + \text{imag}\{M_{22}\}^2$, os termos cruzados (com seno e cosseno) se anulam, temos

$$|M_{22}|^2 = \text{real}\{M_{22}\}^2 + \text{imag}\{M_{22}\}^2 = I + C \cos\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) + S \sin\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) \quad (2.2.15)$$

onde

$$I = |z_1|^2 + |z_2|^2 \quad C = 2 [z_1^I z_2^I + z_1^R z_2^R] \quad S = 2 [-z_1^R z_2^I + z_1^I z_2^R] \quad (2.2.16)$$

Portanto, (2.2.3) se torna

$$\begin{aligned}
\bar{T}(\lambda) &= \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1}+\lambda/2s} \frac{1}{|M_{22}|^2} dL_{S+1} \\
&= \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1}+\lambda/2s} \frac{1}{I + S \sin\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) + C \cos\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right)} dL_{S+1} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{(4\pi s L_{S+1})/\lambda}^{(4\pi s L_{S+1})/\lambda+2\pi} \frac{1}{I + S \sin(\tau) + C \cos(\tau)} d\tau \\
&= \frac{1}{\pi} \int_{\tan[(2\pi s L_{S+1})/\lambda]}^{\tan[(2\pi s L_{S+1})/\lambda+\pi]} \frac{1}{I + S \left(\frac{2\tau}{1+\tau^2}\right) + C \left(\frac{1-\tau}{1+\tau^2}\right)} \left(\frac{d\tau}{1+\tau^2}\right) \\
&= \frac{1}{\pi} \int_{\tan[(2\pi s L_{S+1})/\lambda]}^{\tan[(2\pi s L_{S+1})/\lambda+\pi]} \frac{1}{(I+C) + 2S\tau + (I-C)\tau^2} d\tau \\
&= \frac{1}{\pi (I-C) \sigma} \int_{\tan[(2\pi s L_3)/\lambda]}^{\tan[(2\pi s L_3)/\lambda+\pi]} \frac{1}{\tau^2 + \sigma^2} d\tau
\end{aligned} \tag{2.2.17}$$

onde

$$\sigma \equiv +\sqrt{\frac{I^2 - S^2 - C^2}{(I-C)}} \tag{2.2.18}$$

Como

$$\int_{\tan[(2\pi s L_3)/\lambda]}^{\tan[(2\pi s L_3)/\lambda+\pi]} \frac{1}{\tau^2 + \sigma^2} d\tau = \arctan\left(\frac{\tan\left[\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda} + \pi\right] + \frac{2S}{I-C}}{\sigma}\right) - \arctan\left(\frac{\tan\left[\frac{2\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right] + \frac{2S}{I-C}}{\sigma}\right) \tag{2.2.19}$$

e a função tangente tem período π , podemos concluir que

$$\int_{\tan[(2\pi s L_3)/\lambda]}^{\tan[(2\pi s L_3)/\lambda+\pi]} \frac{1}{\tau^2 + \sigma^2} d\tau = z\pi \tag{2.2.20}$$

onde $z \in \mathbb{Z}$. Portanto, (2.2.17) fornece

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{T}}(\lambda) &= \frac{1}{\pi (I - C) \sigma} z\pi \\
&= \frac{z}{(I - C) \sqrt{\frac{I^2 - S^2 - C^2}{(I - C)^2}}} \\
&= \frac{z}{\pm \text{sign}(I - C) \sqrt{I^2 - S^2 - C^2}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{I^2 - S^2 - C^2}} |z| \left[\pm \text{sign} \left(\frac{z}{I - C} \right) \right]
\end{aligned} \tag{2.2.21}$$

Como o integrando inicial (função módulo) é estritamente positivo, logo $z \neq 0$ e o sinal é sempre positivo. Numericamente, constatamos que $z = 1$ (óbvio no caso em que $S = 0$). Portanto temos que

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{I^2 - S^2 - C^2}} \tag{2.2.22}$$

Usando (2.2.16), obtemos

$$I^2 - S^2 - C^2 = [|z_1|^2 - |z_2|^2]^2 \tag{2.2.23}$$

Após extrair a raiz, constatamos numericamente que o sinal positivo fornece uma transmitância negativa. Além disso, usamos (2.2.10) e (2.2.11) para concluir que

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{1}{|C_{22}B_{22}|^2 - |C_{21}B_{12}|^2} \tag{2.2.24}$$

A fórmula acima permite a seguinte interpretação em termos da transmitância do substrato. Sabemos de (2.1.26) que considerando o substrato como última camada (veja figura 2.6), a transmitância é dada por

$$\mathcal{T}_{0,S} = \frac{1}{s |B_{22}|^2} \tag{2.2.25}$$

Logo, (2.2.24) se torna

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{T}}(\lambda) &= \frac{s \mathcal{T}_{0,S}}{|C_{22}|^2 - |C_{21}|^2 \left| \frac{B_{12}}{B_{22}} \right|^2} \\
&= \frac{s \mathcal{T}_{0,S}}{1 - \left| \frac{C_{21}}{C_{22}} \right|^2 \left| \frac{B_{12}}{B_{22}} \right|^2}
\end{aligned} \tag{2.2.26}$$

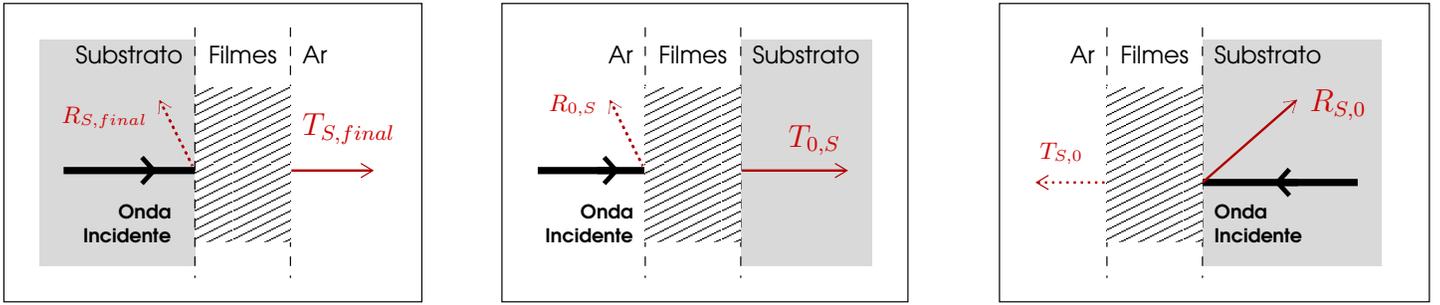


FIGURA 2.6 – Esquerda: representação de uma onda incidente no substrato (camada S) em direção a última camada ($m-1$), bem como de suas ondas transmitida e refletida. Centro: representação de uma onda incidente na primeira camada, considerando o substrato (camada S) como última camada. Direita: representação de uma onda incidente na penúltima camada (substrato) em direção a primeira camada (ar), bem como de suas ondas transmitida e refletida.

Por outro lado, para uma onda “incidente” no substrato em direção aos filmes posteriores, sua transmitância e refletância na última camada ($m-1$) (veja figura 2.6) são dadas por

$$\mathcal{T}_{S,final} = \frac{s}{|C_{22}|^2} \quad \text{e} \quad \mathcal{R}_{S,final} = \left| \frac{C_{21}}{C_{22}} \right|^2 \quad (2.2.27)$$

Portanto, temos

$$\bar{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{\mathcal{T}_{S,final} \mathcal{T}_{0,S}}{1 - \mathcal{R}_{S,final} \left| \frac{B_{12}}{B_{22}} \right|^2} \quad (2.2.28)$$

Consideremos agora uma onda incidente no substrato, mas na *direção oposta* da onda incidente original (veja figura 2.6), i.e., da camada S para a camada 0. De (2.1.26), sabemos que sua refletância é dada por

$$\mathcal{R}_{S,0} = \left| \frac{\tilde{M}_{21}}{\tilde{M}_{22}} \right|^2 \quad (2.2.29)$$

onde \tilde{M} é a matriz- M associada, onde $\tilde{M} = \tilde{A}_{m-2} \tilde{D}_{m-3} \cdots \tilde{D}_1 \tilde{A}_1$. As matrizes D_i, \tilde{D}_i se referem as mesmas camadas, mas em ordem inversa. Dessa forma, não é difícil ver que $\tilde{D}_i = D_{m-(i+2)}$, para $i = 1, \dots, m-3$. Faremos uso da seguinte aplicação:

Seja $h : \mathbb{R}^{2 \times 2} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$ tal que, se $X \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ então

$$h(X) \equiv h \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11} & -X_{12} \\ -X_{21} & X_{22} \end{pmatrix} \quad (2.2.30)$$

Se $X, Y \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, é fácil ver que h é linear e satisfaz 4 propriedades básicas:

1. $h(h(X)) = X$
2. Se X for diagonal, então $h(X) = X$.
3. $h(X^T) = h(X)^T$
4. $h(XY) = h(X)h(Y)$

Como as matrizes A_i, \tilde{A}_i relacionam as mesmas duas camadas que são separadas pela interface L_i , mas considerando a onda incidente em direções opostas, logo $\tilde{A}_i = (\tilde{n}_{m-(i+2)}/\tilde{n}_{m-(i+1)}) h(A_{m-(i+1)})$, para $i = 1, \dots, m-2$. Lembrando que A_i, D_i são simétricas e D_i é diagonal, temos

$$\begin{aligned}
\frac{1}{s} \tilde{M} &= h(A_1) \cdot D_1 \cdot h(A_2) \cdot D_2 \cdots D_{m-3} \cdot h(A_{m-2}) \\
&= h(A_1) \cdot h(D_1) \cdot h(A_2) \cdot h(D_2) \cdots h(D_{m-3}) \cdot h(A_{m-2}) \\
&= h(A_1^T) \cdot h(D_1^T) \cdot h(A_2^T) \cdot h(D_2^T) \cdots h(D_{m-3}^T) \cdot h(A_{m-2}^T) \\
&= h(A_1)^T \cdot h(D_1)^T \cdot h(A_2)^T \cdot h(D_2)^T \cdots h(D_{m-3})^T \cdot h(A_{m-2})^T \\
&= [h(A_{m-2}) \cdot h(D_{m-3}) \cdots h(D_1) \cdot h(A_1)]^T \\
&= [h(A_{m-2} \cdot D_{m-3} \cdots D_1 \cdot A_1)]^T \\
&= [h(B)]^T
\end{aligned} \tag{2.2.31}$$

Logo, $\tilde{M}_{22} = sB_{22}$ e $\tilde{M}_{21} = -sB_{12}$. Portanto

$$\mathcal{R}_{S,0} = \left| \frac{\tilde{M}_{21}}{\tilde{M}_{22}} \right|^2 \equiv \left| \frac{B_{12}}{B_{22}} \right|^2 \tag{2.2.32}$$

de forma que (veja [Lid81] e [CM01])

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{\mathcal{I}_{S,final} \mathcal{T}_{0,S}}{1 - \mathcal{R}_{S,final} \mathcal{R}_{S,0}} \tag{2.2.33}$$

2.2.2 Refletância Média

De (2.2.8), sabemos que

$$\mathcal{R}_{média}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1} + \lambda/2s} \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 dL_{S+1} \tag{2.2.34}$$

donde resta calcular M_{21} , pois M_{22} já foi desenvolvido para a transmitância. Logo

$$M_{21} = B_{11} C_{21} e^{-iks(L_{S+1}-d)} + B_{21} C_{22} e^{iks(L_{S+1}-d)} \tag{2.2.35}$$

De modo análogo ao feito para a transmitância, definimos

$$z_3 = B_{11} B_{21} e^{iks d} \tag{2.2.36}$$

e

$$z_4 = B_{21} C_{22} e^{-iks d} \tag{2.2.37}$$

Como antes, sejam $z_3^R = \text{real} \{z_3\}$, $z_3^I = \text{imag} \{z_3\}$, $z_4^R = \text{real} \{z_4\}$, $z_4^I = \text{imag} \{z_4\}$. Logo

$$|M_{21}|^2 = \text{real} \{M_{21}\}^2 + \text{imag} \{M_{21}\}^2 = I_u + C_u \cos\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) + S_u \sin\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) \tag{2.2.38}$$

onde

$$I_u = |z_3|^2 + |z_4|^2 \quad C_u = 2 [z_3^I z_4^I + z_3^R z_4^R] \quad S_u = 2 [-z_3^R z_4^I + z_3^I z_4^R] \quad (2.2.39)$$

Portanto (2.2.34) se torna

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{R}}(\lambda) &= \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1}+\lambda/2s} \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 dL_{S+1} \\ &= \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{S+1}}^{L_{S+1}+\lambda/2s} \frac{I_u + C_u \cos\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) + S_u \sin\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right)}{I_d + C_d \cos\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right) + S_d \sin\left(\frac{4\pi s L_{S+1}}{\lambda}\right)} dL_{S+1} \end{aligned} \quad (2.2.40)$$

onde I_d, C_d, S_d já foram calculados em (2.2.16). Esta integral também pode ser resolvida analiticamente. Usando o programa MATHEMATICA (veja [mat]), obtemos

$$\mathcal{R}_{\text{médio}}(\lambda) = \frac{1}{\rho} \left[\frac{I_u(\rho + I_d) - (S_u S_d + C_u C_d)}{\rho + I_d} \right] \quad (2.2.41)$$

onde definimos $\rho = \sqrt{I^2 - C^2 - S^2} = |z_2|^2 - |z_1|^2$. Olhando para a fórmula acima e para as definições de z_1, z_2, z_3, z_4 , vemos que os fatores $\exp(ik_s d)$ e $\exp(-ik_s d)$ se cancelam⁶. Dessa forma, podemos redefinir os z_i , para $i = 1, 2, 3, 4$, da seguinte forma:

$$z_1 = B_{12} C_{21} \quad (2.2.42)$$

$$z_2 = B_{22} C_{22} \quad (2.2.43)$$

$$z_3 = B_{11} C_{21} \quad (2.2.44)$$

e

$$z_4 = B_{21} C_{22} \quad (2.2.45)$$

Portanto, é fácil ver que

$$S_u S_d + C_u C_d = 4 \operatorname{real} \{z_2 z_3 \overline{z_1 z_4}\} = 4 |C_{21} C_{22}|^2 \operatorname{real} \{B_{11} B_{22} \overline{B_{12} B_{21}}\} \quad (2.2.46)$$

Por outro lado, sabemos de (2.2.1) que⁷

$$B_{11} B_{22} - B_{12} B_{21} = \frac{1}{s} \quad (2.2.47)$$

Logo

$$B_{11} B_{22} \overline{B_{12} B_{21}} = \frac{\overline{B_{12} B_{21}}}{s} + |B_{12} B_{21}|^2 \quad (2.2.48)$$

⁶Ou somem dentro do módulo, uma vez que $|e^{ia}| = 1$, para $a \in \mathbb{R}$.

⁷Neste caso, $M = B$, i.e., estamos considerando o substrato com última camada, ou seja, $S = m - 1$. Logo $\tilde{n}_{m-1} = s$.



FIGURA 2.7 – Esquerda: representação esquemática para a transmitância e a refletância no caso de N filmes ‘em cima’ do substrato. Direita: representação esquemática para a transmitância e a refletância no caso de N filmes ‘embaixo’ do substrato.

Portanto

$$S_u S_d + C_u C_d = 4 |C_{21} C_{22}|^2 \left[\frac{\text{real} \{B_{12} B_{21}\}}{s} + |B_{12} B_{21}|^2 \right] \quad (2.2.49)$$

Seja $B_{11} B_{22} = a + ib$. Logo, de (2.2.47) temos

$$B_{12} B_{21} = \left(a - \frac{1}{s} \right) + ib \quad (2.2.50)$$

Dessa forma,

$$\frac{\text{real} \{B_{12} B_{21}\}}{s} + |B_{12} B_{21}|^2 = \left[a - \frac{1}{s} \right]^2 + b^2 + \frac{1}{s} \left[a - \frac{1}{s} \right] = a^2 + b^2 - \frac{a}{s} \quad (2.2.51)$$

Visto que $a^2 + b^2 = |B_{11} B_{22}|^2$, temos

$$S_u S_d + C_u C_d = 4 |C_{21} C_{22}|^2 \left[|B_{11} B_{22}|^2 - \frac{1}{s} \text{real} \{B_{11} B_{22}\} \right] \quad (2.2.52)$$

Portanto, lembrando que $\rho + I_d = 2 |B_{22}|^2$ e que $I_u = |C_{22} B_{21}|^2 + |C_{21} B_{11}|^2$, a equação (2.2.41) fornece

$$\overline{\mathcal{R}}(\lambda) = \frac{|C_{22} B_{21}|^2 - |C_{21}|^2 G}{|C_{22} B_{22}|^2 - |C_{21} B_{12}|^2} \quad (2.2.53)$$

onde

$$G = |B_{11}|^2 - \frac{2 \text{real} \{B_{11} B_{22}\}}{s |B_{22}|^2} \quad (2.2.54)$$

2.3 Configurações Especiais e Suas Simplificações

Supomos o sistema de camadas simplificado de forma a haver filmes em apenas um dos lados do substrato. Neste caso, há duas alternativas para a onda incidente: incidir *no lado dos filmes*, de modo que o substrato está “embaixo ou depois” destes, ou incidir *no lado do substrato*, de modo que este está “acima ou antes” dos filmes (veja figuras 2.7).

2.3.1 Substrato “embaixo” dos filmes

Supomos que a penúltima e última camadas sejam, respectivamente, o substrato e ar, com a onda inicial incidente no lado dos filmes. Nesse caso, $S = m - 2$ (veja tabela 2.2) e a interface onde realizamos a integração é $L_{S+1} = L_{m-1}$, de modo que (2.2.3) se torna

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{m-1}}^{L_{m-1}+\lambda/2s} \frac{1}{|M_{22}|^2} dL_{m-1} \quad (2.3.1)$$

e

$$\overline{\mathcal{R}}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_{m-1}}^{L_{m-1}+\lambda/2s} \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 dL_{m-1} \quad (2.3.2)$$

Camada	Ar	N Filmes			Substrato	Ar
	0	1	...	$S - 1$	$S = m - 2$	$m - 1$
Índice de Refração	1	n_1	...	n_{S-1}	s	1
Coefficiente de Absorção	0	κ_1	...	κ_{S-1}	0	0
Espessura	$+\infty$	d_1	...	d_{S-1}	d_S	$+\infty$

TABELA 2.2 – Índice de refração, coeficiente de atenuação e espessura para N filmes (na parte ‘frontal’ do sistema de camadas) além do substrato e das camadas (de ar) inicial e final.

Além disso, as matrizes B, C simplificam para

$$B = A_{m-2}(D_{m-3}A_{m-3}) \cdots (D_1A_1) \quad (2.3.3)$$

$$C = A_{m-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+s & 1-s \\ 1-s & 1+s \end{bmatrix} \quad (2.3.4)$$

Portanto, (2.2.24) se torna

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{4}{(1+s)^2 |B_{22}|^2 - (1-s)^2 |B_{12}|^2} \quad (2.3.5)$$

enquanto (2.2.53) fornece

$$\overline{\mathcal{R}}(\lambda) = \frac{(1+s)^2 |B_{21}|^2 + (1-s)^2 G}{(1+s)^2 |B_{22}|^2 - (1-s)^2 |B_{12}|^2} \quad (2.3.6)$$

onde

$$G = \frac{2\text{real}\{B_{11}B_{22}\} - s |B_{11}B_{22}|^2}{s |B_{22}|^2} \quad (2.3.7)$$

A interpretação em termos das transmitâncias e refletâncias do substrato simplificam as equações (2.2.27) para

$$\mathcal{T}_{S,final} = \frac{4s}{(1+s)^2} \quad \text{e} \quad \mathcal{R}_{S,final} = \left(\frac{1-s}{1+s} \right)^2 \quad (2.3.8)$$

2.3.2 Substrato “acima” dos filmes

Supomos que a primeira e segunda camadas sejam, respectivamente, ar e o substrato, com a onda inicial incida no lado do substrato. Neste caso, $S = 1$ (veja tabela 2.3) e a interface onde realizamos a integração é $L_{S+1} = L_2$, de modo que (2.2.3) se torna

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_2}^{L_2+\lambda/2s} \frac{1}{|M_{22}|^2} dL_2 \quad (2.3.9)$$

e

$$\overline{\mathcal{R}}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_2}^{L_2+\lambda/2s} \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 dL_2 \quad (2.3.10)$$

Camada	Ar	Substrato	N Filmes			Ar
	0	$S = 1$	2	...	$m - 2$	$m - 1$
Índice de Refração	1	s	n_2	...	n_{m-2}	1
Coefficiente de Absorção	0	0	κ_2	...	κ_{m-2}	0
Espessura	$+\infty$	d_S	d_2	...	d_{m-2}	$+\infty$

TABELA 2.3 – Constantes para N filmes na parte posterior, além das camadas inicial e do substrato

Além disso, as matrizes B, C são simplificadas para

$$B = A_1 = \frac{1}{2s} \begin{bmatrix} s+1 & s-1 \\ s-1 & s+1 \end{bmatrix} \quad (2.3.11)$$

$$C = A_{m-1}(D_{m-3}A_{m-3}) \cdots (D_2A_2) \quad (2.3.12)$$

Portanto, (2.2.24) se torna

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{4}{(s+1)^2 |C_{22}|^2 - (s-1)^2 |C_{21}|^2} \quad (2.3.13)$$

enquanto (2.2.53) fornece

$$\overline{\mathcal{R}}(\lambda) = \frac{(s-1)^2 |C_{22}|^2 + |C_{21}|^2 G}{(s+1)^2 |C_{22}|^2 - (s-1)^2 |C_{21}|^2} \quad (2.3.14)$$

onde

$$G = \frac{8}{s} - (s+1)^2 \quad (2.3.15)$$

A interpretação em termos das transmitâncias e refletâncias do substrato, neste caso, reduz as equações (2.2.27) para

$$\mathcal{T}_{0,s} = \frac{4}{s(s+1)^2} \quad \text{e} \quad \mathcal{R}_{s,0} = \left(\frac{s-1}{s+1} \right)^2 \quad (2.3.16)$$

2.3.3 Fórmulas Fechadas para Um Filme

Para o caso de um filme, é possível deduzir fórmulas compactas, simplificando o cálculo numérico. Neste caso, o sistema possui $m = 4$ camadas (veja tabela 2.3). Logo, $S = m - 2 = 2$ e a interface onde realizamos a integração é $L_{S+1} = L_{m-1} = L_3$, de modo que

$$\overline{T}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_3}^{L_3+\lambda/2s} \frac{1}{|M_{22}|^2} dL_3 \quad (2.3.17)$$

e

$$\overline{R}(\lambda) = \frac{2s}{\lambda} \int_{L_3}^{L_3+\lambda/2s} \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 dL_3 \quad (2.3.18)$$

	Ar	Filme	Substrato	Ar
Camada	0	1	$S = m - 2 = 2$	$m - 1 = 3$
Índice de Refração	1	n	s	1
Coefficiente de Absorção	0	κ	0	0
Espessura	$+\infty$	d	$d_S = L_3 - d$	$+\infty$

TABELA 2.4 – Constantes para um filme na parte frontal, i.e., a incidência é pelo lado do filme.

Sejam as matrizes A_1, A_2, D_1 dadas por

$$A_1 = \frac{1}{2\tilde{n}_1} \begin{bmatrix} \tilde{n}_1 + \tilde{n}_0 & \tilde{n}_1 - \tilde{n}_0 \\ \tilde{n}_1 - \tilde{n}_0 & \tilde{n}_1 + \tilde{n}_0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2\tilde{n}} \begin{bmatrix} \tilde{n} + 1 & \tilde{n} - 1 \\ \tilde{n} - 1 & \tilde{n} + 1 \end{bmatrix} \quad (2.3.19)$$

$$A_2 = \frac{1}{2\tilde{n}_2} \begin{bmatrix} \tilde{n}_2 + \tilde{n}_1 & \tilde{n}_2 - \tilde{n}_1 \\ \tilde{n}_2 - \tilde{n}_1 & \tilde{n}_2 + \tilde{n}_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2s} \begin{bmatrix} s + \tilde{n} & s - \tilde{n} \\ s - \tilde{n} & s + \tilde{n} \end{bmatrix}$$

e

$$D_1 = \begin{bmatrix} \exp[-ik_1d] & 0 \\ 0 & \exp[ik_1d] \end{bmatrix} \quad (2.3.20)$$

Sejam as variáveis auxiliares

$$\beta = \frac{4\pi d}{\lambda} \quad \varphi = \beta n \quad x = \exp(-\beta\kappa) \quad (2.3.21)$$

Dessa forma, lembrando que $k_1 = 2\pi\tilde{n}/\lambda$ e que $\tilde{n} = n - i\kappa$, temos

$$ik_1d = i \frac{2\pi(n - i\kappa)}{\lambda} d = \frac{2\pi d}{\lambda} (\kappa + in) = \beta\kappa + i\varphi \quad (2.3.22)$$

Logo

$$\exp[ik_1d] = x^{-1} [\cos \varphi + i \sin \varphi] \quad (2.3.23)$$

e

$$\exp[-ik_1d] = x [\cos \varphi - i \sin \varphi] \quad (2.3.24)$$

Como $B = A_2 D_1 A_1$, temos

$$\begin{aligned} B_{11} &= \frac{(\tilde{n} + 1)(s + \tilde{n})x (\cos [\varphi] - i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}s} + \frac{(\tilde{n} - 1)(s - \tilde{n}) (\cos [\varphi] + i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}sx} \\ B_{12} &= \frac{(\tilde{n} - 1)(s + \tilde{n})x (\cos [\varphi] - i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}s} + \frac{(\tilde{n} + 1)(s - \tilde{n}) (\cos [\varphi] + i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}sx} \\ B_{21} &= \frac{(\tilde{n} + 1)(s - \tilde{n})x (\cos [\varphi] - i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}s} + \frac{(\tilde{n} - 1)(s + \tilde{n}) (\cos [\varphi] + i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}sx} \\ B_{22} &= \frac{(\tilde{n} - 1)(s - \tilde{n})x (\cos [\varphi] - i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}s} + \frac{(\tilde{n} + 1)(s + \tilde{n}) (\cos [\varphi] + i \sin [\varphi])}{4\tilde{n}sx} \end{aligned} \quad (2.3.25)$$

Após alguma manipulação algébrica, obtemos a fórmula para transmitância média para um filme (veja [Swa83]):

$$\bar{T} = \frac{T x}{t_0 - t_1 x + t_2 x^2} \quad (2.3.26)$$

onde

$$\begin{aligned} T &= 16 s (n^2 + \kappa^2) \\ t_0 &= [(n + 1)^2 + \kappa^2] [(n + 1)(n + s^2) + \kappa^2] \\ t_1 &= [(n^2 - 1 + \kappa^2)(n^2 - s^2 + \kappa^2) - 2\kappa^2(s^2 + 1)] 2 \cos(\varphi) \\ &\quad - \kappa [2(n^2 - s^2 + \kappa^2) + (s^2 + 1)(n^2 - 1 + \kappa^2)] 2 \sin(\varphi) \\ t_2 &= [(n - 1)^2 + \kappa^2] [(n - 1)(n - s^2) + \kappa^2] \end{aligned} \quad (2.3.27)$$

A fórmula para a refletância é desenvolvida de modo totalmente análogo ao da transmitância. Desse modo obtemos

$$\bar{\mathcal{R}} = \frac{r_0 - r_1 x + r_2 x^2}{t_0 - t_1 x + t_2 x^2} \quad (2.3.28)$$

onde t_0 , t_1 e t_2 são os mesmos coeficiente obtidos para a transmitância (dados acima) e r_0 , r_1 e r_2 são dados por

$$r_1 = R - 8 (s - 1)^2 \left(\frac{p_0 - p_1 x + p_2 x^2}{q_0 - q_1 x + q_2 x^2} \right) \quad (2.3.29)$$

$$\begin{aligned} r_0 &= [\kappa^2 + (n - 1)^2] [\kappa^2 + (1 + n)(n + s^2)] \\ R &= - [(n^2 - 1)(n^2 - s^2) + \kappa^2(1 + 2n^2 + \kappa^2 + s^2)] 2 \cos(\varphi) \\ &\quad + \kappa (1 + \kappa^2 + n^2) (s^2 - 1) 2 \sin(\varphi) \\ r_2 &= [\kappa^2 + (1 + n)^2] [\kappa^2 + (n - 1)(n - s^2)] \end{aligned} \quad (2.3.30)$$

onde p_0 , p_1 , p_2 , q_0 , q_1 e q_2 são

$$\begin{aligned} p_0 &= [(1 + \kappa^2 - n^2)(\kappa^2 + n^2)^2 + (n^2(n^2 - 1) + \kappa^2(1 + \kappa^2 + 2n^2)) s^2] \cos(\varphi) \\ &\quad - \kappa n ((\kappa^2 + n^2)^2 - s^2) 2 \sin(\varphi) \\ p_1 &= [8s + 2(1 - \kappa^2 + n^2)] (\kappa^2 + n^2)^2 + 2 (n^2(n^2 + 1) + \kappa^2(-1 + \kappa^2 + 2n^2)) s^2 \\ p_2 &= [(1 + \kappa^2 - n^2)(\kappa^2 + n^2)^2 + (n^2(n^2 - 1) + \kappa^2(1 + \kappa^2 + 2n^2)) s^2] \cos(\varphi) \\ &\quad + \kappa n ((\kappa^2 + n^2)^2 - s^2) 2 \sin(\varphi) \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

$$\begin{aligned} q_0 &= [\kappa^2 + (1 + n)^2] [\kappa^2 + (n + s)^2] \\ q_1 &= - [(n^2 - 1)(n^2 - s^2) + \kappa^2 (-1 + 2n^2 + \kappa^2 - s(4 + s))] 2 \cos(\varphi) \\ &\quad + \kappa (\kappa^2 + n^2 - s) (1 + s) 4 \sin(\varphi) \\ q_2 &= [\kappa^2 + (n - 1)^2] [\kappa^2 + (n - s)^2] \end{aligned} \quad (2.3.32)$$

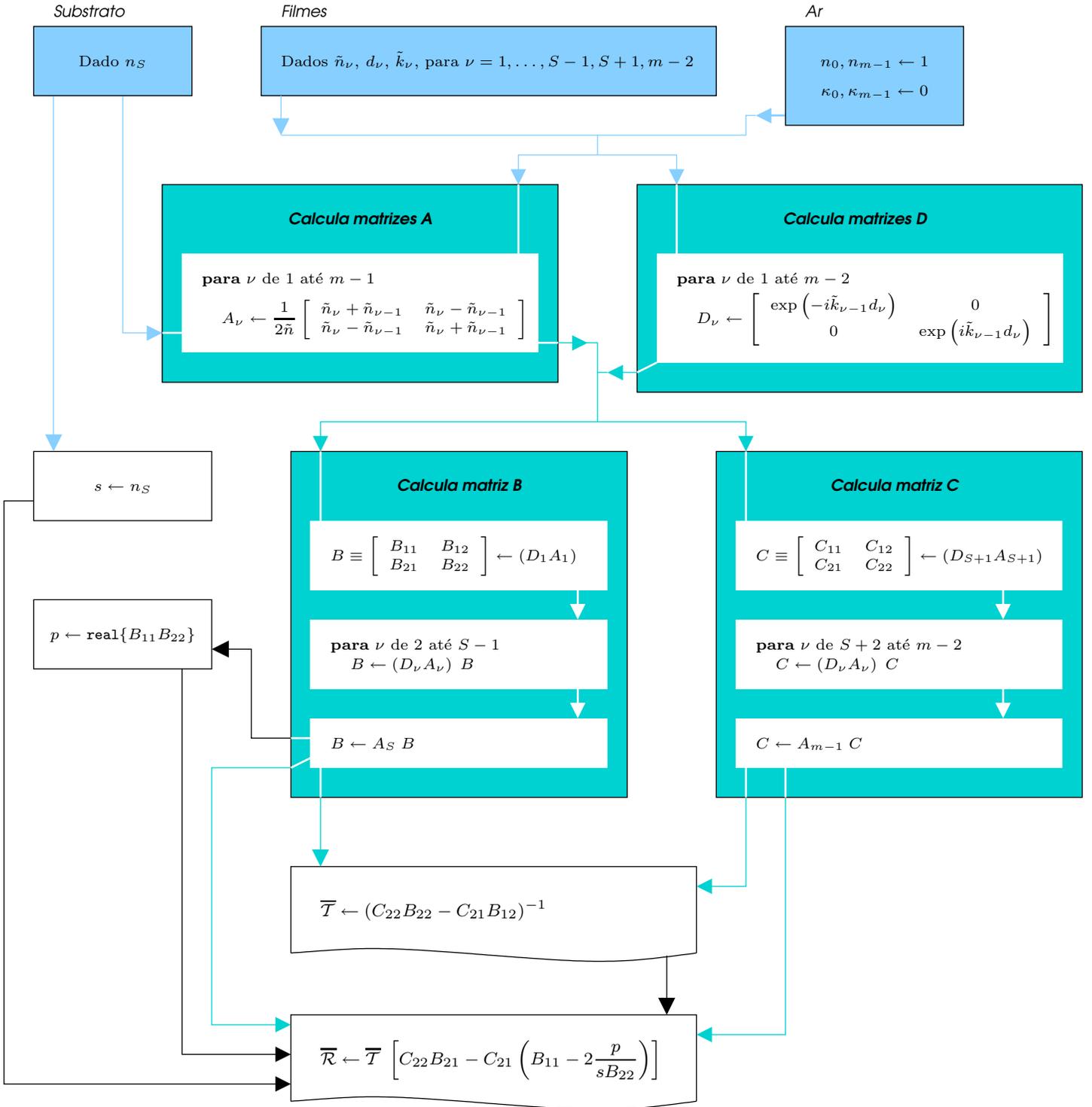


FIGURA 2.8 – Representação esquemática para o cálculo da transmitância e refletância média teórica para um sistema geral com $m-1$ camadas e $m-2$ filmes, com um substrato localizado na camada S . Logo, os filmes acima do substrato estão localizados nas camadas 1 até $S-1$ (matriz B), enquanto os localizados embaixo do substrato, estão nas camadas $S+1$ até $m-2$ (matriz C).

Modelagem

Conteúdo do Capítulo 3

3.1	Introdução	31
3.2	Otimização	35
3.2.1	Restrições Físicas	36
3.2.2	Regularização	36
3.2.3	Enfoque da <i>Variação Total</i>	37
3.2.4	Formas Funcionais	37
3.2.5	Chute Inicial para o Enfoque Ponto-a-Ponto	38
3.2.6	Acrescentando a Espessura	40

3.1 Introdução

Nosso objetivo neste capítulo é mostrar como podemos utilizar as funções de transmitância e refletância médias teóricas para construir o problema inverso de estimar as constantes ópticas de filmes finos. Veremos as dificuldades e particularidades deste problema, e como podemos utilizar esse conhecimento a nosso favor. Mostraremos então os enfoques e modelos usados para as estimativas.

Por simplicidade, vamos supor um sistema constituído de apenas um filme (o caso geral é completamente análogo; veja capítulo 6), depositado sobre um substrato transparente¹. O sistema terá quatro camadas, constituídas de ar (duas camadas), filme e substrato. Para calcular numericamente a transmitância e a

¹isso implica que a incidência é pelo lado do filme, embora, nesse caso, seja irrelevante, pois a transmitância é simétrica para um filme.

refletância teórica média desse sistema, para um comprimento de onda λ fixo, são necessários os valores: da *espessura* d do filme, do *índice de refração* $n(\lambda)$ do filme, do *coeficiente de atenuação* $\kappa(\lambda)$ do filme e do índice de refração $s(\lambda)$ do substrato, de modo que

$$\begin{aligned} \text{Transmitância Média Teórica} &\equiv \overline{\mathcal{T}}(\lambda, n, \kappa, s, d) \\ \text{Refletância Média Teórica} &\equiv \overline{\mathcal{R}}(\lambda, n, \kappa, s, d) \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

Porém, a situação que nos interessa investigar é, inversamente, dados temos o valor numérico da transmitância e da refletância, através de medição, queremos determinar os parâmetros que as geraram, que são *desconhecidos*. Para simplificar o problema, como o substrato é, em geral, feito de um material bem estudado, como vidro, supomos conhecido o valor analítico de $s(\lambda)$, de modo que a transmitância do sistema depende de apenas três parâmetros: d, n, κ . Uma vez que o valor teórico simula a quantidade medida, parece natural pedir que

$$\begin{aligned} \text{Transmitância Média TEÓRICA} &= \text{Transmitância OBSERVADA} \\ \text{Refletância Média TEÓRICA} &= \text{Refletância OBSERVADA} \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

Chamemos de \mathcal{T}^{obs} e \mathcal{R}^{obs} a transmitância e refletância observada, respectivamente. Por hora, vamos supor a espessura conhecida (essa hipótese será relaxada mais tarde; veja seção 3.2.6). Logo (3.1.2) se torna o seguinte sistema não-linear:

$$\begin{cases} \overline{\mathcal{T}}(n, \kappa) = \mathcal{T}^{obs} \\ \overline{\mathcal{R}}(n, \kappa) = \mathcal{R}^{obs} \end{cases} \quad (3.1.3)$$

No capítulo 6 de [Lid81], são apresentados três métodos para a resolução de (3.1.3). Resumi-los-emos abaixo.

Curvas de Hadley–Dannison. Para um certo κ fixo, resolve-se (3.1.3) separadamente para n , primeiro usando somente a equação da transmitância e depois somente a da refletância. A seguir grafica-se $n(\mathcal{T})$ e $n(\mathcal{R})$ contra κ e o valor procurado encontra-se na intersecção dessas curvas (veja [HD47]).

Método de Bennett e Booty. Utiliza-se minimização unidimensional. Primeiro minimiza-se $|\overline{\mathcal{R}}(n, \kappa) - \mathcal{R}^{obs}|$ com respeito a n e depois minimiza-se $|\overline{\mathcal{T}}(n, \kappa) - \mathcal{T}^{obs}|$ com respeito a κ (veja [BB66] e [BB69]).

Método de Abelès e Thèye. Resolve-se (3.1.3) usando o método de Newton para a resolução de sistemas não-lineares (veja [AT66]).

Embora o sistema (3.1.3) tenha duas equações para duas incógnitas, vamos nos fixar apenas na equação da transmitância por dois motivos: (1) as duas equações possuem comportamento similar, e a compreensão de uma leva a outra, e por fim ao sistema; (2) a medição da refletância é mais complicada e sujeita a erros e portanto seria desejável evitá-la sempre que possível. Portanto, vamos considerar apenas a equação

$$\overline{\mathcal{T}}(n, \kappa) = \mathcal{T}^{obs} \quad (3.1.4)$$

Chamaremos a curva no plano (n, κ) formada pelos pontos que satisfazem (3.1.4), de *curva-zero da transmitância*. Por outro lado, para certas regiões do espectro a transmitância pode ser nula, e nesses casos, somente a refletância estará disponível. Nesse caso, consideramos apenas

$$\overline{\mathcal{R}}(n, \kappa) = \mathcal{R}^{obs} \quad (3.1.5)$$

Analogamente, chamaremos a curva no plano (n, κ) formada pelos pontos que satisfazem (3.1.5) de *curva-zero da refletância*. Pertencer à curva-zero é condição necessária, mas não suficiente, para ser solução física.

Fisicamente, a equação (3.1.4) admite como solução apenas um par (n^*, κ^*) . Algebricamente porém, a equação (3.1.4) possui infinitos pares de solução, distintos da solução física. Por exemplo, para um determinado filme, todos os pares dados por

n	κ
5.24241774	0.0001060
2.60268785	0.0000092
3.73134401	0.0002500
4.97939633	0.1184916
3.97408253	0.0804487

forneem a mesma transmitância $\mathcal{T}^{obs} = 0.5930$, embora apenas o par da terceira linha seja a solução física. Na figura 3.1 à esquerda, plotamos esse mesmo exemplo para outros pares da curva-zero. Em (2.3.21), as variáveis auxiliares φ, β e x foram definidas para ficarem com o mesmo padrão para vários filmes (dado em (B.2.2)). Entretanto, em [BCM99] elas são escritas como

$$\varphi = \frac{4\pi nd}{\lambda} \quad \alpha = \frac{4\pi\kappa}{\lambda} \quad x = \exp(-\alpha d) \quad (3.1.6)$$

onde $\alpha = \alpha(\lambda)$ tem significado físico e é chamado de **coeficiente de absorção**. Como κ (e também α) apresenta uma variação muito grande, com ordens de diferença dentro de um mesmo espectro, definimos também

$$\tilde{\alpha} = \log(\alpha) + 7 \quad (3.1.7)$$

o qual é melhor para visualização. Portanto, embora para calcular a transmitância e a refletância usemos κ , todos os gráficos daqui em diante serão no plano $n \times \alpha$, uma vez que $\kappa, \alpha, \tilde{\alpha}$ são quantidades relacionadas.

Retornando à figura 3.1, observamos que todos os pares nas curvas contínuas das porções destras e sinistras, produzem $\mathcal{T}^{obs} = 0.5930$. Além disso, podemos observar que mesmo usando simultaneamente dados de refletância, podemos encontrar $n \sim 2.5$ (dependendo de onde começamos a busca) além de continuar

com a indeterminação para κ (ou α). Nesse exemplo, aplicando o método de Newton² [BSS79] no sistema (3.1.3), isto é, para encontrar $h = 0$, onde

$$h \equiv h(n, \kappa) = \begin{pmatrix} \bar{\mathcal{T}}(n, \kappa) - \mathcal{T}^{obs} \\ \bar{\mathcal{R}}(n, \kappa) - \mathcal{R}^{obs} \end{pmatrix} \quad (3.1.8)$$

com ponto inicial em $x_0 = (n, \kappa) = (2, 0.0074)$ obtemos como solução, após 7 iterações, o ponto $x_7 = (n, \kappa) = (2.59930, 0.0000285)$ (veja tabela 3.1), muito distante da solução física desejada (veja gráfico 3.1, à esquerda).

Iteração	$\ h\ _2$	n	κ	α
0	$2.56787476682590 \cdot 10^{-1}$	2	$7.40070485377313 \cdot 10^{-3}$	3
1	$2.56787476682590 \cdot 10^{-1}$	2.52195842198225	$1.60942295789621 \cdot 10^{-3}$	2.33739710757313
2	$2.53143837416161 \cdot 10^{-2}$	2.59519066469915	$7.79558120973143 \cdot 10^{-5}$	1.02257541559204
3	$1.28101908489840 \cdot 10^{-3}$	2.59929445469224	$2.85913402753493 \cdot 10^{-5}$	$5.86961429711959 \cdot 10^{-1}$
4	$4.20024028771087 \cdot 10^{-6}$	2.59930794570814	$2.85105581727369 \cdot 10^{-5}$	$5.85732635372031 \cdot 10^{-1}$
5	$4.58965195151178 \cdot 10^{-11}$	2.59930794585529	$2.85105576961461 \cdot 10^{-5}$	$5.85732628112239 \cdot 10^{-1}$
6	$1.57009245868378 \cdot 10^{-16}$	2.59930794585529	$2.85105576963859 \cdot 10^{-5}$	$5.85732628115892 \cdot 10^{-1}$
7	0	2.59930794585529	$2.85105576963859 \cdot 10^{-5}$	$5.85732628115892 \cdot 10^{-1}$

TABELA 3.1 – Valores de n , κ , α e $\|h\|_2$ para 7 iterações do método de Newton para resolver $h = 0$ (dado em (3.1.8)). Os pontos x_i , correspondentes a essas iterações, estão plotados no gráfico 3.1, à esquerda.

Portanto, tentar extrair n e κ através da resolução de (3.1.4), ou mesmo de (3.1.3) como no método de Abelès e Thèye [AT66], é **ineficaz** para recuperar a solução física. A dificuldade não é resolver a equação (3.1.4), mas o fato de ela ter *muitas soluções* além da única com sentido físico. Essa é uma das características que tornam os problemas inversos difíceis de resolver. Para diminuir a indeterminação, eliminando soluções indesejadas, é necessário agregar algum tipo de informação extra na formulação, a partir de conhecimento *a priori* das características do problema.

No nosso caso, essa informação surge naturalmente do fato de n e κ serem funções de λ (embora não haja um modo único de lidar com ela). Isso significa que (3.1.4) se transforma no problema contínuo

$$\bar{\mathcal{T}}(n(\lambda), \kappa(\lambda)) = \mathcal{T}^{obs}(\lambda) \quad (3.1.9)$$

de modo que queremos encontrar $n(\lambda), \kappa(\lambda)$, para $\lambda \in \Omega \equiv [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$. Numericamente, em vez de $\mathcal{T}^{obs}(\lambda)$, conhecemos o valor das transmitâncias observadas para *um conjunto finito* de comprimentos de onda. Especificamente, sejam os comprimentos de onda $\lambda_i \in \Omega$, para $i = 1, \dots, N_{obs}$. Para esse conjunto, medimos as

²Cada iteração do método resolve

$$\begin{pmatrix} n_{i+1} \\ \kappa_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_i \\ \kappa_i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{\mathcal{T}}}{\partial n} & \frac{\partial \bar{\mathcal{T}}}{\partial \kappa} \\ \frac{\partial \bar{\mathcal{R}}}{\partial n} & \frac{\partial \bar{\mathcal{R}}}{\partial \kappa} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \bar{\mathcal{T}}(n_i, \kappa_i) - \mathcal{T}^{obs} \\ \bar{\mathcal{R}}(n_i, \kappa_i) - \mathcal{R}^{obs} \end{pmatrix}$$

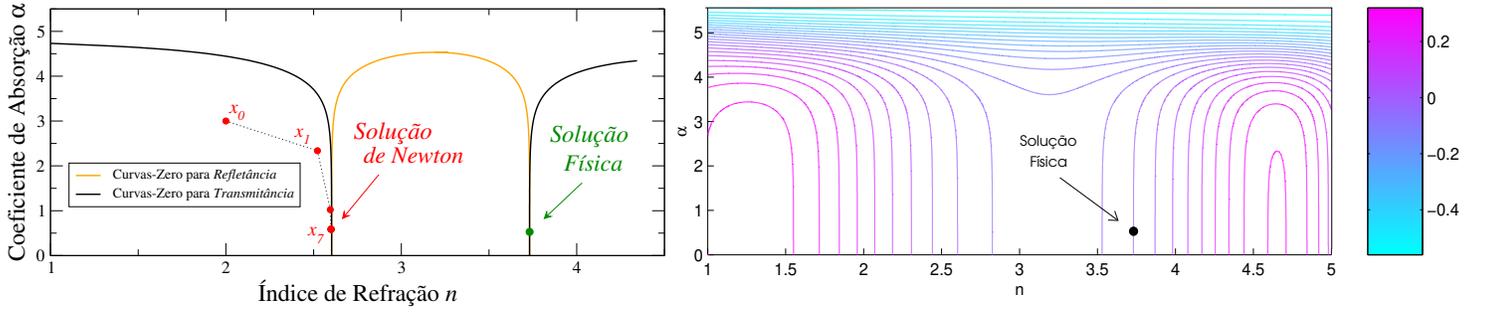


FIGURA 3.1 – Esquerda: curvas-zero para o filme A de [BCM99] no plano $n \times \alpha$. O comprimento de onda está fixo em $\lambda = 930\text{nm}$. Note que todos os pares (n, α) ao longo das curvas contínuas satisfazem a equação $\bar{T}(n, \alpha) = \mathcal{T}^{obs}$, onde $\mathcal{T}^{obs} = 0.5930$, enquanto ao longo das curvas pontilhadas satisfazem $\bar{\mathcal{R}}(n, \alpha) = \mathcal{R}^{obs}$, onde $\mathcal{R}^{obs} = 0.4069$. Em ambos os casos, a única solução fisicamente aceitável é dada pelo par $(n, \alpha) = (3.73134401, 0.528553187)$ (ou, alternativamente, $\kappa = 0.000250055$). Também estão graficados os pontos (da tabela 3.1) para resolver $h = 0$, dado em (3.1.8). Direita: curvas de nível para a equação $\bar{T}(n, \alpha) = \mathcal{T}^{obs}$, do mesmo exemplo ao lado, para vários valores distintos de \mathcal{T}^{obs} .

transmitâncias, chamando-nas de $\mathcal{T}_i^{obs} \equiv \mathcal{T}^{obs}(\lambda_i)$, para $i = 1, \dots, N_{obs}$. Então, reescrevemos (3.1.9) como um conjunto de problemas dados por

$$\bar{\mathcal{T}}(n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)) = \mathcal{T}_i^{obs}, \quad \text{para } i = 1, \dots, N_{obs} \quad (3.1.10)$$

o que é mais conveniente do ponto de vista numérico. Entretanto, o problema discretizado (3.1.10) **não considera** o fato de que n e κ dependem de λ , uma vez que as equações (3.1.10) estão “desacopladas” e portanto *não formam um sistema*³. O que obtemos, na verdade, são N_{obs} problemas disjuntos, do tipo dado em (3.1.4).

Apesar disto, esse é, em essência, o tipo de problema que queremos resolver.

3.2 Otimização

Uma vez que desejamos resolver (3.1.10) para todos os comprimentos de onda simultaneamente, reformulamos o problema de resolver N_{obs} sistemas não-lineares pela **minimização da soma dos quadrados dos erros**. Nesse caso, nosso objetivo é

$$\min_{n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)} \sum_{i=1}^{N_{obs}} [\bar{\mathcal{T}}(n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)) - \mathcal{T}_i^{obs}]^2 \quad (3.2.1)$$

Podemos pensar em (3.2.1) como a discretização da problema de estimação contínuo

$$\min_{n, \kappa} \int_{\Omega} [\bar{\mathcal{T}}(n(\lambda), \kappa(\lambda)) - \mathcal{T}^{obs}(\lambda)]^2 d\lambda \quad (3.2.2)$$

³Um sistema, quer seja ele linear ou não, consiste em impor ‘diferentes equações’ às *mesmas variáveis*. Aqui temos o contrário, ou seja, a *mesma equação* com ‘variáveis diferentes’.

cujas soluções resolvem o problema (3.1.9). Para resolver (3.2.1), a primeira alternativa é considerar o enfoque **ponto-a-ponto** ou *pointwise*⁴. Neste caso, as variáveis são os valores pontuais de $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ sobre os comprimentos de onda considerados, isto é, dados por $n_i = n(\lambda_i)$ e $k_i = n(\lambda_i)$, para $i = 1, \dots, N_{obs}$. Desta forma, o total de variáveis é $2N_{obs}$. A desvantagem deste enfoque é o mesmo do existente em (3.1.10), isto é, são problemas disjuntos. Dessa forma, podemos obter valores muito distantes de n (e também de κ) para comprimentos de onda adjacentes.

3.2.1 Restrições Físicas

Uma alternativa para diminuir a indeterminação, neste caso, é acrescentar *restrições de origem física* sobre n e κ , como por exemplo $n \geq 1$ e $\kappa \geq 0$. Assim, o problema (3.2.1) se torna

$$\begin{aligned} \min_{n_i, \kappa_i} \quad & \sum_{i=1}^{N_{obs}} \left[\bar{\mathcal{T}}(\lambda_i, n_i, \kappa_i) - \mathcal{T}_i^{obs} \right]^2 \\ \text{s.a.} \quad & \text{RESTRIÇÕES FÍSICAS} \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Esse é o enfoque utilizado por PUMA⁵ (veja [BCM99]), cujas restrições são mostradas a seguir.

Restrição 1 de PUMA: $n(\lambda) \geq 1$ e $\kappa(\lambda) \geq 0$ para todo $\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$;

Restrição 2 de PUMA: $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ são funções decrescente de λ ;

Restrição 3 de PUMA: $n(\lambda)$ é convexo;

Restrição 4 de PUMA: existe $\lambda_{infl} \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ tal que $\kappa(\lambda)$ é convexo se $\lambda \geq \lambda_{infl}$ e concavo se $\lambda < \lambda_{infl}$.

3.2.2 Regularização

Muito embora as restrições físicas acabem funcionando como restrições funcionais, há uma maneira direta de considerá-las, de modo a diminuir a indeterminação. Esta maneira é através de uma *regularização* (veja [Bjö96, Gol96]), de modo que (3.2.1) fica

$$\min_{n_i, \kappa_i} \quad \sum_{i=1}^{N_{obs}} \left[\bar{\mathcal{T}}(\lambda_i, n_i, \kappa_i) - \mathcal{T}_i^{obs} \right]^2 + V(\mathbf{n}) + V(\boldsymbol{\kappa}) \quad (3.2.4)$$

onde $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_{N_{obs}})$, $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_1, \dots, \kappa_{N_{obs}})$ e, em geral, a função V é uma discretização da derivada (de n e κ com relação a λ) de alguma ordem. Ao pedir algum nível de suavidade, conseguimos a relação de dependência. Por exemplo, para n (e de modo análogo para κ), usamos as variantes

$$V_{1,1}(\mathbf{n}) = \sum_{i=1}^{N_{obs}-1} |n_{i+1} - n_i| \quad \left(\text{Derivada 1ª; discretização de } \tilde{V}_{1,1}(n) = \|n'\|_1 = \int_{\Omega} |n'(\lambda)| \, d\lambda \right) \quad (3.2.5)$$

⁴Essa palavra vem da combinação das palavras *point* (ponto) e *wise* (modo, maneira). Constam também as formas *point wise* (separado) e *point-wise* (com travessão).

⁵No apêndice E apresentamos um breve resumo do método.

e

$$V_{1,2}(\mathbf{n}) = \sum_{i=2}^{N_{obs}-1} \left| \frac{1}{2} (n_{i+1} + n_{i-1}) - n_i \right| \quad \left(\text{Derivada } 2^{\text{a}}; \text{ discretização de } \tilde{V}_{1,2}(n) = \|n''\|_1 = \int_{\Omega} |n''(\lambda)| \, d\lambda \right) \quad (3.2.6)$$

Para obter a regularização na sua forma tradicional, sejam as matrizes $W_1 \in \mathbb{R}^{(N_{obs}-1) \times N_{obs}}$ e $W_2 \in \mathbb{R}^{(N_{obs}-2) \times N_{obs}}$ dadas por

$$W_1 = \begin{pmatrix} -1 & 1 & & & \\ & -1 & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad W_2 = \begin{pmatrix} 1/2 & -1 & 1/2 & & & \\ & 1/2 & -1 & 1/2 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1/2 & -1 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (3.2.7)$$

Portanto,

$$V_{1,i}(\mathbf{n}) = \|W_i \mathbf{n}\|_1, \quad \text{para } i = 1, 2 \quad (3.2.8)$$

De maneira análoga,

$$V_{2,i}(\mathbf{n}) = \|W_i \mathbf{n}\|_2, \quad \text{para } i = 1, 2 \quad (3.2.9)$$

3.2.3 Enfoque da *Variação Total*

Outra formulação alternativa que considera diretamente o fato de n e κ serem funções é o *Total Variation Approach*. Sob sua forma original, nosso problema de inversão para filmes finos se torna:

$$\begin{aligned} \min_{n_i, \kappa_i} \quad & \sum_{i=1}^{N_{obs}-1} |n_{i+1} - n_i| + |\kappa_{i+1} - \kappa_i| \\ \text{s.a.} \quad & \bar{\mathcal{T}}(\lambda_i, n_i, \kappa_i) = \mathcal{T}_i^{obs}, \quad \text{para } i = 1, \dots, N_{obs} \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

Também podemos pensar neste problema como a discretização do problema contínuo

$$\begin{aligned} \min_{n, \kappa} \quad & \int_{\Omega} |n'(\lambda)| + |\kappa'(\lambda)| \, d\lambda \\ \text{s.a.} \quad & \bar{\mathcal{T}}(n(\lambda), \kappa(\lambda)) = \mathcal{T}(\lambda)^{obs} \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

cujos conjunto viável são as soluções de (3.1.9) e cujas soluções são formas suaves de n e κ .

3.2.4 Formas Funcionais

O outro enfoque para resolver (3.2.1), são as *formas funcionais pré-definidas*. Nesse caso, supomos as variáveis físicas dadas por funções η e ξ , escolhidas *a priori*, isto é, $n(\lambda) = \eta(\lambda, p_1, \dots, p_P)$ e $\kappa(\lambda) = \xi(\lambda, q_1, \dots, q_Q)$. Logo, as variáveis numéricas são os parâmetros p_1, \dots, p_P e q_1, \dots, q_Q e (3.2.1) se torna

$$\min_{p_i, q_i} \sum_{i=1}^{N_{obs}} \left[\bar{\mathcal{T}}(\eta(\lambda_i, p_1, \dots, p_P), \xi(\lambda_i, q_1, \dots, q_Q)) - \mathcal{T}_i^{obs} \right]^2 \quad (3.2.12)$$

Note que no caso de formas funcionais, estamos considerando o fato de que n e κ formam funções, o que pode ser interessante para diminuir a indeterminação, embora não existam fórmulas gerais para n e κ para todas as regiões do espectro. Nesse é o enfoque usado por FFM (veja [BCMV03]), cujas funções são dadas a seguir.

Índice de refração de FFM: a função $n(\lambda) = n(\lambda, \beta, M)$ dada por

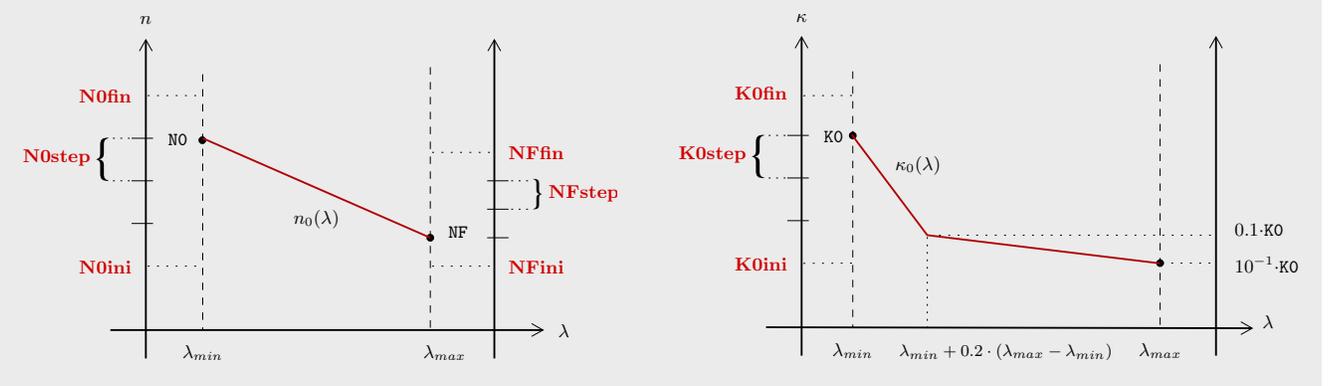
$$n(\lambda) = \sqrt{1 + \left(\beta - \frac{M}{\lambda^2}\right)^{-1}} \quad \left(\text{ou, implicitamente, por } \frac{1}{n^2 - 1} = \beta - \frac{M}{\lambda^2}\right) \quad (3.2.13)$$

Coefficiente de Absorção de FFM: por conveniência, usamos α em vez de κ , de modo que a função é dada por $\alpha = \alpha(\lambda, a, b, c, k)$, onde $\ln(\alpha_{a,b,c,k}(E)) = \sum_{j=1}^4 a_j \theta_j [b_j(E - c)] + k$, com $c, k \in \mathbb{R}$ e $a = (a_1, a_2, a_3, a_4) \in \mathbb{R}^4$ e $b = (b_1, b_2, b_3, b_4) \in \mathbb{R}^4$ e $E = 1240/\lambda$. As funções θ_j são escolhidas convenientemente.

3.2.5 Chute Inicial para o Enfoque Ponto-a-Ponto

Em problemas de aplicações práticas, cuja resolução é através de algoritmos de otimização local, tão importante quanto o modelo adotado é a escolha do ponto inicial. Mesmo quando o modelo teórico está bem construído, começar com um ponto inicial distante da solução, implica, invariavelmente, em fracasso. Por esse motivo, é crucial fazer a escolha do ponto inicial com cuidado. Por exemplo, abaixo temos a descrição do ponto inicial usado por PUMA (veja [BCM99]) e TVA (veja capítulo 5).

As estimativas iniciais para o índice de refração são funções lineares estritamente decrescentes, variando entre $N0ini$ e $N0fin$, com passo $N0step$, em λ_{min} , e entre $NFin$ e $NFfin$ com passo $NFstep$, em λ_{max} . Para o coeficiente de atenuação, as estimativas iniciais são funções lineares-por-parte, com o valor de $K0$ em λ_{min} , $0.1 \cdot K0$ em $\lambda_{min} + 0.2(\lambda_{max} - \lambda_{min})$ e $10^{-10} \cdot K0$ em λ_{max} , onde $K0$ assume os valores $K0 = K0ini + z \cdot K0step$, para $z = 0, 1, 2, \dots$, dentro do intervalo $[K0ini, K0fin]$.



Embora eficientes como ponto inicial, as estimativas acima estão limitadas às regiões do espectro onde são válidas. Por exemplo, para regiões de alta energia, ou seja, baixos comprimentos de onda, o índice de refração deixa de ser decrescente (veja figura 3.2).

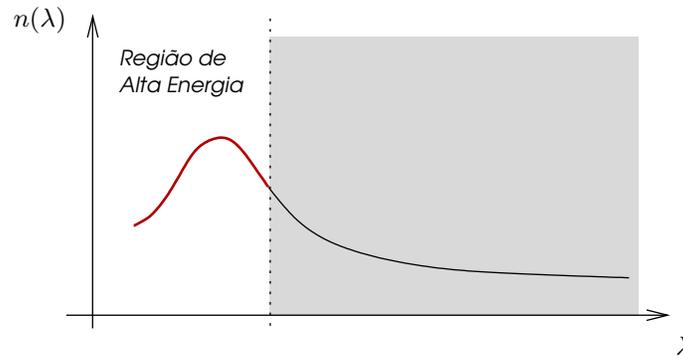


FIGURA 3.2 – Representação do índice de refração como função de λ . Na porção destra (sombreada), ele é decrescente, e portanto o chute inicial deve ser decrescente. Abaixo de um certo comprimento de onda, na região de alta energia, para λ decrescendo, n apresenta um valor máximo e depois decresce, em vez de crescer indefinidamente.

Como alternativa, exploramos as particularidades do problema inverso para sugerir pontos iniciais que dependam o menos possível de informações *a priori*. Se olharmos para a figura (3.1), à esquerda, vemos que a solução física se encontra na base das curvas-zero, onde elas são quase verticais. Desta observação, podemos extrair duas propostas para ponto inicial:

1. Se projetarmos a solução física sobre o eixo n , vemos que ela compartilha do mesmo valor de n da parte mais inferior da curva, isto é, para $\tilde{\alpha} \equiv 0$. A estratégia, é portanto, resolver separadamente cada equação de (3.1.10), tomando $\tilde{\alpha} = 0$.
2. Alternativamente, podemos considerar os valores de n que estão em retas verticais.

Por exemplo, na metade superior do gráfico 3.3, as soluções encontradas por PUMA e FFM para um filme real estão localizadas ao longo de curvas nível (próximas da curva-zero) da transmitância quase verticais. Porém, ambos os enfoques falharão quando a solução *não estiver* na base de uma curva quase vertical. Por exemplo, na metade inferior da figura 3.3, a solução que PUMA achou para outro filme real está localizada no alto, onde as curvas de nível (e provavelmente a curva-zero) são quase horizontais.

As linhas verticais ocorrem porque para valores pequenos de α , a transmitância é “dominada” por n . De (3.1.6), temos que

$$\frac{\partial x}{\partial \alpha} = -\alpha \exp(-\alpha d) = -\alpha x \quad (3.2.14)$$

e para $\alpha \sim 0$, x como função de α é praticamente constante, bem como \mathcal{T} e \mathcal{R} . Análoga e inversamente, para valores altos de α , variações de n são negligenciáveis, pois o valor de x é muito maior que o de todos os outros coeficientes. Por isso, nesse caso, as curvas são horizontais.

Nos testes numéricos, consideramos apenas o caso da dominância de n .

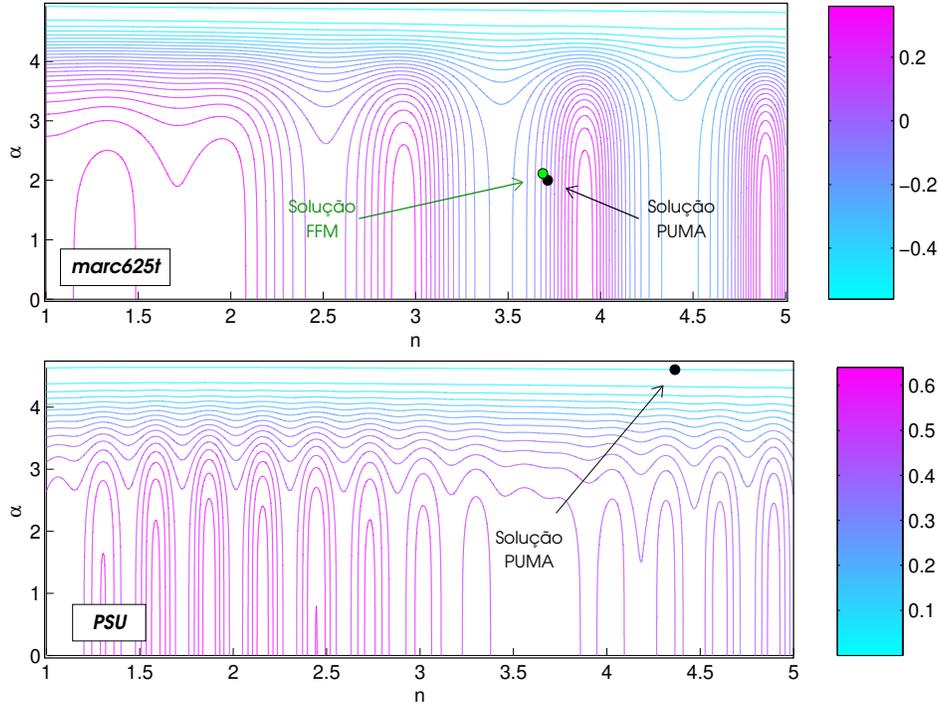


FIGURA 3.3 – As soluções de ambos os gráficos são mostradas na tabela 3.2. Acima: curvas de nível de (3.1.9) para o filme real *marc0625t* (veja [CVBM02]) em $\lambda = 1222.42\text{nm}$ com $T = 0.5749$. Abaixo: curvas de nível de (3.1.9) para o filme real *PSU* (veja [VBMC04]) em $\lambda = 582.32\text{nm}$ com $T = 0.00753$.

Filme	método	n^{recup}	κ^{recup}	α^{recup}	T^{recup}
marc0625t	PUMA	3.7136300	0.0009715	1.9994	0.57189674
	FFM	3.6887405	0.0012635	2.1136	0.57197272
PSU	PUMA	4.3650853	0.1854353	4.6022	0.00796877

TABELA 3.2 – Valores recuperados, para os métodos PUMA e FFM, de n , κ , α e T para os filmes reais *marc0625t* e *PSU*. Veja gráfico 3.3.

3.2.6 Acrescentando a Espessura

Embora haja maneiras de estimar a espessura através de experimentos físicos, é interessante tentar incluí-la no processo de otimização. Se acrescentarmos a espessura em, por exemplo, (3.2.1), obtemos

$$\min_{d, n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)} \sum_{i=1}^{N_{obs}} [\bar{T}(\lambda_i, d, n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)) - \mathcal{T}_i^{obs}]^2 \quad (3.2.15)$$

Mas, das três incógnitas, isto é d , $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$, somente d é a mesma para todos os valores de λ . Por esse motivo, consideramos os problemas separadamente. Numericamente, selecionamos N_d espessuras-teste $d_j \in [d_{\min}, d_{\max}]$, de modo que (3.2.15) se torna

$$\min_{d_j} \left(\min_{n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)} \sum_{i=1}^{N_{obs}} [\bar{T}(\lambda_i, d_j, n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)) - \mathcal{T}_i^{obs}]^2 \right) \quad (3.2.16)$$

ou

$$\min_{d_j} \delta(d_j) \quad (3.2.17)$$

onde

$$\delta(d) = \min_{n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)} \sum_{i=1}^{N_{obs}} [\bar{\mathcal{T}}(\lambda_i, d, n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)) - \mathcal{T}_i^{obs}]^2 \quad (3.2.18)$$

De maneira análoga, definimos a função δ para regularização, *Total Variation* e formas funcionais.

Parte II

Aplicações

Estimativas a partir de Dados de Refletância

Conteúdo do Capítulo 4

4.1	Introdução	45
4.2	Estimativa Ponderada	49
4.3	Erros Aleatórios	50
4.4	Erros Sistemáticos	51
4.5	Conclusão	55

4.1 Introdução

Neste capítulo, mostramos os resultados dos experimentos numéricos para recuperar a espessura e as constantes ópticas (índice de refração e coeficiente de absorção) de um filme fino a partir de um espectro de refletância somente, com incidência normal. A estimativa é feita num intervalo do espectro onde o filme não é opaco. A idéia por trás desta escolha, é comparar as características do filme recuperadas com transmitância e refletância. Foram feitos testes com filmes *gedanken* e filmes reais. Os resultados para filmes *gedanken* indicam uma boa concordância entres os valores esperados e recuperados.

Por simplicidade e clareza, consideramos quatro protótipos de filmes *gedanken*. Eles ilustram as capacidades e incapacidades do algoritmo de recuperação.

Filme A: idealização de um filme fino de silício amorfo hidrogenado (a-Si:H) com espessura de 600nm, depositado sobre um substrato de vidro (veja figura 4.1, à esquerda). Esse é um filme bem comportado, que possui um padrão de interferência bem definido numa região de absorção quase nula. Pode

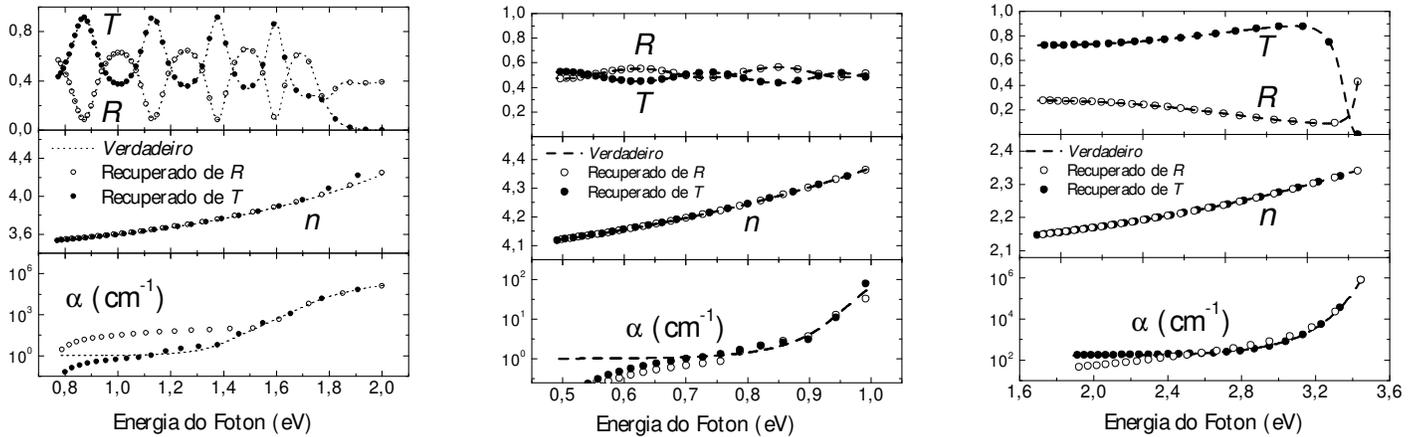


FIGURA 4.1 – Esquerda: transmitâncias verdadeiras (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de T e \mathcal{R} (filme A, PUMA). Note que a recuperação de \mathcal{R} fornece um índice de refração ligeiramente melhor, enquanto que o coeficiente de absorção é melhor recuperado a partir do espectro de transmitância. Centro: Transmitâncias verdadeiras (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de T e \mathcal{R} (filme B, PUMA). Note que o índice de refração do filme e do substrato possuem valores próximos. Como conseqüência, a amplitude da oscilação de interferência é menor. Nesse caso, as constantes ópticas são recuperadas com um grau similar de precisão. Direita: transmitâncias verdadeiras (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de T e \mathcal{R} (filme muito fino C, FFM). As constantes ópticas desse filme muito fino são recuperadas de ambos os espectros de T e \mathcal{R} . Porém, o coeficiente de absorção é melhor recuperado através dos dados de transmitância.

ser recuperado parcialmente usando métodos do tipo envelope (veja [Swa83]). PUMA foi usado para processar esse filme.

Filme B: idealização de um filme fino de germânio amorfo hidrogenado (a-Ge:H) com espessura de 600nm, depositado sobre um substrato de silício cristalino (veja figura 4.1, ao centro). A transmitância e a refletância deste filme ocorre entre o índice de refração do filme e do substrato, a amplitude da oscilação de interferência permanece muito baixa. Os dados do filme foram recuperados usando PUMA.

Filme C: idealização um filme fino de óxido metálico com 80nm, depositado sobre vidro. Como mostra a figura 4.1 à direita, os espectros de transmitância e refletância do filme não apresentam padrões de interferência. Claramente, os dados não podem ser invertidos usando métodos do tipo envelope. A finura deste filme requer FFM.

Filme D: O mesmo que o filme C, mas ainda mais fino com 40nm (veja figura 4.2 à esquerda). O filme foi invertido usando FFM, o qual se aproxima do seu limite de aplicabilidade.

As espessuras e as propriedades ópticas recuperadas dos filmes *gedanken* são mostrados nas figuras 4.1 e 4.2. As tabelas 4.1 e 4.2 indicam o erro quadrático do processo de minimização dos filmes acima. Elas também mostram as espessuras obtidas pelo processo de minimização e as espessuras “verdadeiras” usadas para gerar a refletância.

Filme	d^{verd}	d^{recup}	Erro Quadrático
A	600	600	6.28×10^{-4}
B	600	600	7.65×10^{-8}

TABELA 4.1 – Espessuras e erros quadráticos recuperados pelo PUMA (usando dados de refletância) para os filmes A e B, gerados por computador.

Além das transmitâncias e refletâncias calculadas e recuperadas dos filmes A–D, as figuras 4.1 e 4.2 também mostram os índices de refração e coeficiente de absorção recuperados como função da energia do fóton, obtidos independentemente dos espectros de \mathcal{T} e \mathcal{R} . Ambos os conjuntos de valores recuperados são comparados com os valores “verdadeiros” das constantes ópticas, usadas para gerar numericamente \mathcal{T} e \mathcal{R} . Note que os valores calculados de $\mathcal{T}(\lambda)$ e $\mathcal{R}(\lambda)$ são truncados em quatro casas decimais.

Filme	d^{verd}	d^{recup}	Erro Quadrático
C	80	80	4.50×10^{-5}
D	40	40	1.13×10^{-4}

TABELA 4.2 – Espessuras e erros quadráticos recuperados pelo FFM (usando dados de refletância) para os filmes C e D, gerados por computador.

A figura 4.2 ao centro mostra a transmitância e a refletância medidas para um filme fino a-Si:H real, depositados sobre um substrato de vidro¹, bem como as constantes ópticas obtidas após a inversão.

A figura 4.1 à esquerda indica que a recuperação da espessura e das constantes ópticas do filme A tiveram sucesso. Na maior parte do espectro considerado, n foi recuperado corretamente. Entretanto, para alta energia do fóton n desvia ligeiramente do valor “verdadeiro” quando calculado para dados de transmitância. A recuperação do α “verdadeiro” ocorre para ambos os tipos de dados para energias do fóton maiores que 1.5 eV . Porém, baixos coeficiente de absorção até 1 cm^{-1} são recuperados apenas com dados de transmitância. Já os dados de refletância falham em reproduzir o coeficiente de absorção quando $\alpha < 100 \text{ cm}^{-1}$ (os dados de refletância são mais insensíveis que os de transmitância à variações da absorção).

Num certo sentido, os resultados obtidos ao inverter os dados do filme B são similares aos resultados do filme anterior, exceto que a recuperação de ambos, n e α , da inversão de \mathcal{T} e \mathcal{R} é muito boa. Há uma perfeita recuperação do índice de refração em todo o intervalo e uma recuperação muito boa para α no intervalo $1 < \alpha < 100 \text{ cm}^{-1}$. Os resultados obtidos com PUMA nestes dois casos distintos indicam a validade do método de inversão dos dados de refletância.

A figura 4.1 à direita indica a utilidade do enfoque FFM para inverter os dados de \mathcal{T} e \mathcal{R} para filmes muito finos. A recuperação de n no filme C é perfeita para ambos os conjuntos de dados de entrada. O coeficiente de absorção correto é recuperado para além de quatro casas decimais, *i.e.*, 10^6 até 10^2 cm^{-1} . O

¹As medidas de \mathcal{T} e \mathcal{R} contém 4 dígitos. Elas foram cuidadosamente medidas pelos Profs. R. Collins e G. Ferreira, University Park, PA.

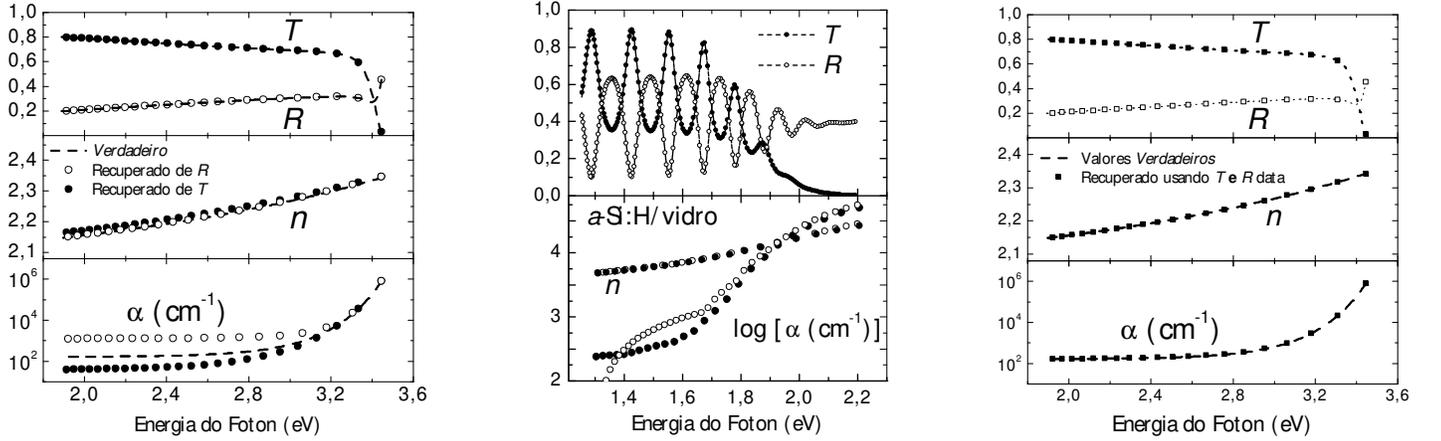


FIGURA 4.2 – Esquerda: transmitâncias verdadeiras (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de \mathcal{T} e \mathcal{R} (filme muito fino D , FFM). Note que a espessura de $d = 40\text{nm}$ foi igualmente recuperadas, a partir de \mathcal{T} e \mathcal{R} . O índice de refração é muito bem recuperados, enquanto que o coeficiente de absorção é encontrado para valores em excesso de 10^4 cm^{-1} . Centro, em cima: transmitâncias e refletâncias medidas de um filme a-Si:H, depositado sobre vidro. Centro, embaixo: constantes ópticas recuperadas a partir de \mathcal{T} (círculos cheios) e \mathcal{R} (círculos abertos). A concordância entre elas é muito boa, bem como entre suas espessuras. Como no caso de filmes gedanken, a recuperação de $\alpha(\lambda)$ é melhor a partir de espectro de \mathcal{T} . Direita: recuperação das constantes ópticas do filme muito fino D , com 40nm , minimizando ambos e simultaneamente \mathcal{T} e \mathcal{R} (4.1.1). Note a perfeita concordância entre os valores verdadeiros e recuperados, mesmo para α muito pequeno.

filme D simula o mesmo material que o filme C , mas sua espessura é ainda menor, $d = 40\text{nm}$. Os espectros de \mathcal{T} e \mathcal{R} são quase achatados ao longo do intervalo do espectro considerado (veja a figura 4.2 à esquerda). Apesar disso, o algoritmo FFM não teve dificuldade em encontrar a espessura “verdadeira” e o índice de refração, embora a recuperação tenha sido ligeiramente melhor ao usar dados de refletância, como esperado. Entretanto, o algoritmo de inversão falha ao recuperar o coeficiente de absorção para $\alpha < 10^3 \text{ cm}^{-1}$ para dados de \mathcal{T} , e para $\alpha < 5 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$ para dados de \mathcal{R} .

Os resultados acima demonstram que ambos os métodos, PUMA e FFM, são ferramentas úteis para lidar com dados de refletância. Eles mostram que, em geral, dados de refletância fornecem uma recuperação melhor do índice de refração, enquanto que dados de transmitância fornecem uma recuperação ligeiramente melhor do coeficiente de absorção.

Como consideração final, observamos que podemos usar ambos os dados, \mathcal{T} e \mathcal{R} , no processo de minimização, em vez de apenas um ou outro (veja [Pau86]), *i.e.*

$$\min \sum_i \left[\mathcal{T}_i^{obs} - \overline{\mathcal{T}}(\lambda_i, s, d, n_i, \kappa_i) \right]^2 + \left[\mathcal{R}_i^{obs} - \overline{\mathcal{R}}(\lambda_i, s, d, n_i, \kappa_i) \right]^2 \quad (4.1.1)$$

É bem sabido que usando (4.1.1), a estimativa das constantes ópticas e da espessura fica mais precisa (veja [Hea50]), e o motivo é óbvio: o problema de estimação é, em essência, altamente subdeterminado. Quando usamos, por exemplo, somente dados de transmitância, reduzimos os graus de liberdade impondo restrições

físicas. Porém, ainda resta liberdade suficiente para que a variação dos parâmetros ajuste corretamente os dados medidos. Quando dados de refletância e transmitância são usados juntos, há mais informação para ser ajustada e, conseqüentemente, a liberdade para n e α é bem reduzida.

A figura 4.2 à direita ilustra o ponto para o filme *gedanken* muito fino D ($d = 40\text{nm}$). As constantes ópticas para os dados de \mathcal{T} e \mathcal{R} do filme D são mostrados na figura 4.2 à esquerda. Usando 4.1.1, o n e α recuperados correspondem exatamente aos valores “verdadeiros”, como mostrado na figura 4.2 à direita. Esse excelente resultado está além das expectativas para um filme com tal espessura, embora, isso provavelmente aconteça devido ao fato de esse ser um experimento numérico ideal.

4.2 Estimativa Ponderada

No processo de minimização/recuperação, normalmente usamos como dados, pontos interpolados linearmente e igualmente espaçados. Porém, os experimentos de recuperação feitos com \mathcal{R} gerados sob diferentes condições, indicam a conveniência da elisão de pontos do espectro próximos aos extremos das franjas. A razão é que esses pontos extremos são mais sensíveis aos erros de medição, particularmente nos casos de sinal fraco ou quando o filme é um pouco mais grosso. Um conjunto conveniente de pontos é obtido dando pesos para um grupo seletivo de valores de \mathcal{R} . O fator é zero para pontos localizados nos extremos das franjas e em suas vizinhanças, e um nos demais pontos². O problema de estimação ponderado é

$$\min \sum_i w_i [R_i^{obs} - \overline{\mathcal{R}}(\lambda_i, s, d, n_i, \kappa_i)]^2 \quad (4.2.1)$$

sujeito às “restrições”. Isto é, a função objetivo (4.2.1) é uma soma de quadrados ponderada, cujos pesos são $w_i = 0, 1; i = 1 \dots n$.

A espessura do filme a-Si:H, recuperado através da inversão de 100 pontos de dados de transmitância no intervalo do espectro 550–950nm foi 1010nm, o erro quadrático sendo 7.763065×10^{-5} .

Para inverter o espectro de \mathcal{R} , 120 pontos igualmente espaçados foram considerados. Destes, o processo de ponderação eliminou 42. A espessura recuperada do espectro de \mathcal{R} usando os 78 pontos restantes (no mesmo intervalo) foi de 1006nm. A concordância entre as duas espessuras recuperadas é muito boa, como também a concordância das constantes ópticas obtidas separadamente de ambos os conjuntos de testes (veja a figura 4.2, ao centro).

Para o filme real a-Si:H sob análise, os resultados obtidos com a inversão simultânea dados de \mathcal{T} e \mathcal{R} (4.1.1) não foram tão bons quanto para os filmes gerados numericamente. Nesse caso, o erro quadrático ficou em 1.41×10^{-2} para uma espessura recuperada de 1018nm. As constantes ópticas n e α obtidas não diferem daquelas encontradas independentemente de \mathcal{R} e \mathcal{T} , respectivamente.

²Simulações numéricas mostram que esse método de ponderação não afeta a precisão do processo.

i	d^{recup}			Erro Quadrático		
	1	2	3	1	2	3
$j = 1$	100	100	100	1.4×10^{-2}	2.6×10^{-4}	1.0×10^{-4}
$j = 2$	101	100	100	5.8×10^{-2}	5.9×10^{-4}	1.1×10^{-4}
$j = 3$	101	100	100	1.3×10^{-1}	1.1×10^{-3}	1.1×10^{-4}
$j = 4$	98	100	100	2.3×10^{-1}	2.0×10^{-3}	1.1×10^{-4}
$j = 5$	101	100	100	3.7×10^{-1}	3.9×10^{-3}	1.2×10^{-4}
$j = 6$	100	100	100	4.8×10^{-1}	4.9×10^{-3}	1.2×10^{-4}
$j = 7$	102	100	100	7.6×10^{-1}	7.7×10^{-3}	1.4×10^{-4}
$j = 8$	95	100	100	7.3×10^{-1}	7.6×10^{-3}	2.0×10^{-4}
$j = 9$	101	100	100	1.4×10^{-1}	1.1×10^{-2}	1.7×10^{-4}

TABELA 4.3 – Espessura e erro quadrático obtidos com PUMA a partir do espectro de transmitância com ruído, de um filme *a-Si:H* *gedanken*.

4.3 Erros Aleatórios

A abrangência dos algoritmos de recuperação foram testados, considerando os filmes gerados numericamente, cujos erros nas transmitâncias foram deliberadamente introduzidos. Os testes foram feitos em filmes possuindo diferentes espessuras e propriedades. Para ilustrar esse ponto, consideramos o caso de um filme *gedanken* *a-Si:H* com espessura de 100nm, depositados sobre um substrato de vidro. Como antes, os valores de \mathcal{T} e \mathcal{R} do filme calculados, foram truncados em quatro casas decimais.

Primeiramente, o teste considera a influência de erro aleatório, tendo uma taxa de crescimento linear, que vai de zero no começo do espectro considerado, até um valor máximo no fim do intervalo, dado por $N_{max} = j \cdot 10^{-i}$, com $i = 1, 2, 3$ e $j = 1, \dots, 9$, para diferentes tentativas. Em outras palavras, o erro máximo varia entre 10^{-3} e 0.9.

As tabelas 4.3 e resumem os resultados obtidos para transmitâncias e refletâncias com ruído, respectivamente. Elas indicam que

- O erro quadrático, *i.e.*, a diferença entre o espectro calculado e recuperado, aumenta quando N_{max} aumenta, como esperado. Além do mais, a recuperação das constantes ópticas piora quando i aumenta.
- A recuperação da espessura do filme (100nm) é muito boa em todos os casos, como indicado. O erro na espessura nunca excede 6% do valor verdadeiro, mesmo com N_{max} a 90%.
- Em geral, a espessura do filme e o coeficiente de absorção são melhor recuperados a partir de espectros \mathcal{T} com ruído do que de espectro \mathcal{R} com ruído. Em contraste, a inversão de dados de \mathcal{R} fornece um melhor índice de refração.

Resumindo, podemos concluir que a existência de algum ruído aleatório nos espectros de \mathcal{T} e \mathcal{R} não afeta

i	d^{recup}			Erro Quadrático		
	1	2	3	1	2	3
$j = 1$	99	100	100	1.2×10^{-2}	1.4×10^{-4}	1.2×10^{-5}
$j = 2$	99	100	100	5.7×10^{-2}	4.7×10^{-4}	1.6×10^{-5}
$j = 3$	98	100	100	1.2×10^{-1}	1.2×10^{-3}	2.4×10^{-5}
$j = 4$	100	100	100	2.1×10^{-1}	1.8×10^{-3}	2.7×10^{-5}
$j = 5$	103	100	100	3.7×10^{-1}	3.5×10^{-3}	6.1×10^{-5}
$j = 6$	100	100	100	5.7×10^{-1}	4.3×10^{-3}	5.6×10^{-5}
$j = 7$	105	100	100	6.6×10^{-1}	5.9×10^{-3}	7.3×10^{-5}
$j = 8$	102	100	100	9.7×10^{-1}	7.9×10^{-3}	9.6×10^{-5}
$j = 9$	94	99	100	1.0×10^{-1}	1.1×10^{-2}	1.1×10^{-4}

TABELA 4.4 – Espessura e erro quadrático obtidos com PUMAA partir do espectro de refletância com ruído, de um filme *a-Si:H* gedanken.

significativamente a recuperação das propriedades dos filmes. Porém, um erro aleatório crescente, degrada a qualidade de n e α recuperados.

4.4 Erros Sistemáticos

A dificuldade importante com medições de refletância reais raramente é dada por erros aleatórios. A precisão pode ser ruim, seja por falha na calibragem do detector, porque a resposta do sistema é não-linear em todo o espectro, ou simplesmente porque o espelho de referência não está propriamente calibrado. A seguir, mostramos que, sob condições experimentais normais, PUMA e FFM podem lidar com sucesso com esses tipos de problemas.

Inicialmente, vamos considerar a precisão fotométrica. Embora muitos instrumentos comerciais forneçam dados de \mathcal{R} com quatro dígitos, é praticamente impossível medir a refletância usando um instrumento espectrométrico de medida melhor que 0.1% absoluto. De fato, muitos instrumentos comerciais, na verdade, atingem uma precisão inferior a essa. Como no caso de filmes gerados por computador, sabemos a resposta verdadeira *a priori*, é possível estimar os efeitos da falta de precisão fotométrica na qualidade das propriedades recuperadas. No que segue, consideraremos o tópico para ambos os algoritmos: PUMA e FFM.

A figura 4.3 à esquerda mostra as constantes ópticas recuperadas com PUMA num filme A (espessura de 600nm, *a-Si:H*/vidro, veja a figura 4.1 à esquerda). Os valores ‘verdadeiros’ são indicados na figura, bem como aqueles recuperados usando dados de \mathcal{R} , arredondados para três e dois casas decimais, respectivamente. Aparentemente, vemos da figura 4.3 à esquerda que o índice de refração é perfeitamente recuperado usando somente dois dígitos significativos. O coeficiente de absorção verdadeiro é recuperado em três intervalos, *i.e.*, $10^5 - 10^2 \text{ cm}^{-1}$ usando 3 e 2 dígitos significativos de \mathcal{R} . A espessura recuperada do filme é 600nm em ambos os casos. De fato, uma comparação cuidadosa entre as figuras 4.1 e 4.3 à esquerda indica

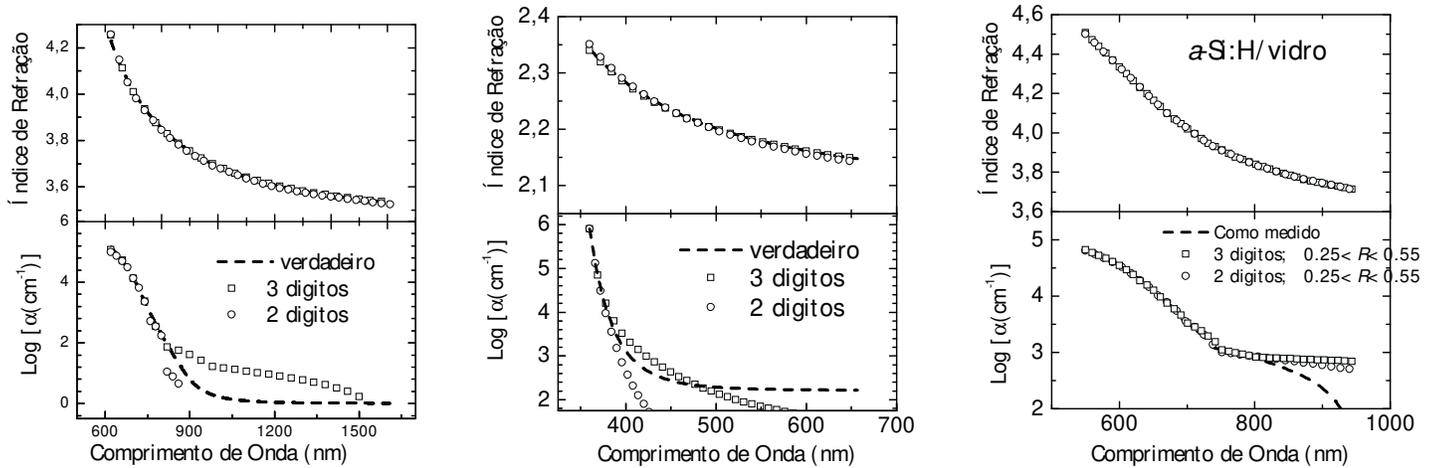


FIGURA 4.3 – Esquerda: constantes ópticas para o filme A (PUMA) verdadeiras (linha tracejada) e recuperadas. Quadrados abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para três dígitos; círculos abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para dois dígitos. Centro: constantes ópticas para o filme C (FFM) verdadeiras (linha tracejada) e recuperadas. Quadrados abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para três dígitos; círculos abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para dois dígitos. Direita: constantes recuperadas para a refletância medida de um filme fino de α -Si:H (linha tracejada, como na figura 4.2, ao centro) e constantes obtidas usando dados arredondados. Quadrados abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para três dígitos; círculos abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para dois dígitos. Os dados arredondados foram tirados de um intervalo de amplitude selecionado, i.e., $25\% < R < 55\%$.

que a recuperação das propriedades do filme não é pior usando apenas 3, ou ainda 2 dígitos dos dados, em vez de 4. Esse resultado surpreendente resulta do modo que o algoritmo inverte os dados de \mathcal{R} . Resultados similares foram obtidos com FFM, lidando com dados de refletância do filme C *gedanken* (espessura 80nm, óxido metálico/vidro, veja a figura 4.2 ao centro). A figura 4.3 ao centro mostra as constantes ópticas recuperadas a medida que a precisão fotométrica piora, sendo a espessura recuperada do filme 80nm em todos os casos. Novamente, a inversão do espectro de \mathcal{R} não é muito pior usando 2 dígitos significativos, em vez de 4 (compare as figuras 4.2 à esquerda e 4.3 ao centro). O FFM, portanto, é capaz de lidar com esse tipo de imprecisão fotométrica na medida de filmes muito finos.

A figura 4.3 à direita mostra o resultado da inversão dos dados medidos de \mathcal{R} , no intervalo da refletância 20–55%, arredondados para três e dois dígitos significativos. A estratégia do cálculo é simular uma situação na qual: a) o sistema de medição é sabido ser linear na região de 25–55%, i.e., a região de dados de saída confiáveis e, b) a precisão do sistema de detecção não é suficientemente bom. Um vez mais, a recuperação de n é perfeita e não depende do fato de usar 3 ou 2 casas decimais. Em ambos os casos, o n recuperado é similar àqueles encontrados usando o espectro completo. De modo similar, o coeficiente de absorção é recuperado em dois intervalos, i.e., $\approx 10^5 - 10^3 \text{ cm}^{-1}$, como no caso do espectro completo. Observe que a recuperação de α é melhor usando \mathcal{T} do que usando \mathcal{R} . Dos dados de \mathcal{R} arredondados, a recuperação da espessura é 1000nm, em boa concordância com $d = 1006\text{nm}$, obtida dos dados medidos. Os resultados acima indicam que PUMA e FFM tem sucesso em recuperar as propriedades de filmes finos a partir de dados

Filme	Espessura	$\Delta\mathcal{R}$	espessura recup.	Erro Quadr.
A	600nm	0.1%	600	1.06×10^4
		0.2%	597	1.24×10^4
		0.3%	595	1.57×10^4
		0.4%	596	2.49×10^4
		0.5%	592	2.69×10^4
		0.6%	591	3.63×10^4
		0.7%	598	4.52×10^4
		0.8%	590	6.54×10^4
		1%	586	9.59×10^4
C	80nm	0.1%	79	7.10×10^4
		0.2%	79	1.09×10^3
		0.5%	77	7.77×10^4

TABELA 4.5 – Espessuras e erros quadráticos recuperados obtidos com PUMA e FFM, respectivamente, através da inversão dos espectros de \mathcal{R} dos filmes A e C com erro sistemático.

de refletância, usando dados não muito precisos, os quais pertencem a um intervalo do espectro específico.

Para estabelecer a abrangência dos métodos usados para lidar com dados com erros sistemáticos, inverteremos os espectros dos filmes A (figura 4.1 à esquerda) e C (figura 4.1 à direita) acrescidos de erros sistemáticos, usando os algoritmos PUMA e FFM, respectivamente. Nos experimentos numéricos a seguir, consideramos o caso de um espelho de linha de base de refletância, fornecendo dados de \mathcal{R} ao longo de todo o intervalo do comprimento de onda. Em outras palavras, antes da inversão, o espectro da refletância verdadeiro será todo acrescido de $\Delta\mathcal{R}$, com os valores de 0.1%, 0.2%, 0.5% e 1.0%. O erro e o espectro com erro são construídos da seguinte forma:

- a) A refletância (2.3.28) é calculada como na seção anterior usando a espessura e as constantes ópticas dos filmes.
- b) Os dados de \mathcal{R} gerados por computadores são arredondados para três casas decimais.
- c) Os dados de refletância são aumentados de $\Delta\mathcal{R}$ em todo espectro.
- d) Os dados com erro $\mathcal{R} + \Delta\mathcal{R}$ são invertidos usando PUMA (filme A) ou FFM (filme C). Finalmente, a espessura recuperada e as constantes ópticas são comparadas com os valores “verdadeiros” usados para gerar o espectro sem erros. Antes de mostrar os resultados, vamos adiantar que PUMA e FFM conseguem lidar satisfatoriamente com dados de refletância com erros sistemáticos.

Consideramos primeiramente a qualidade da espessura do filme recuperada do espectro de $\mathcal{R} + \Delta\mathcal{R}$ como função de um $\Delta\mathcal{R}$ crescente. A tabela 4.5 mostra, para ambos os filmes, a espessura recuperada e o erro quadrático do processo de minimização, a espessura verdadeira sendo 600nm para o filme A e 80nm para o filme C (veja tabela 4.5). A medida que $\Delta\mathcal{R}$ aumenta, a espessura recuperada diminui. Note que para

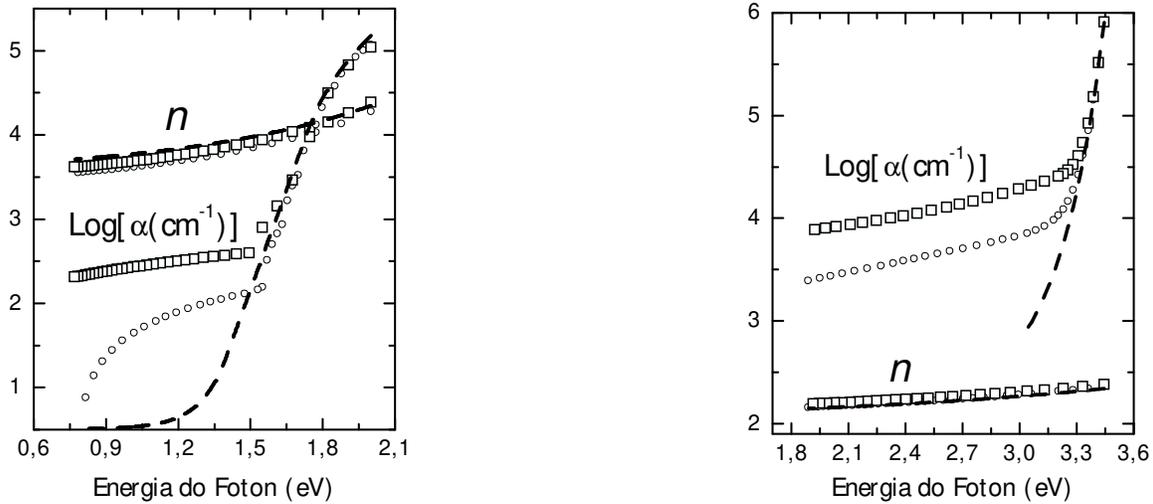


FIGURA 4.4 – Esquerda: linha treçada – valores verdadeiros das constantes do filme A. Símbolos abertos: constantes ópticas recuperadas do espectro de $R + \Delta R$. Círculos: $\Delta R = 0.2\%$; quadrados $\Delta R = 1\%$. Direita: linha treçada – valores verdadeiros das constantes ópticas do filme C. Símbolos abertos: constantes ópticas recuperadas do espectro de $R + \Delta R$. Círculos: $\Delta R = 0.1\%$; quadrados $\Delta R = 0.5\%$.

$\Delta \mathcal{R} \leq 0.1\%$, a espessura verdadeira é recuperada no filme A e, em vez de 80nm , é encontrado $d = 79\text{nm}$ para o filme C. A tabela 4.5 mostra que $\Delta \mathcal{R}$ é aumentado, a espessura recuperada diminui, embora não de modo catastrófico. Para um erro sistemático de 1.0% $\Delta \mathcal{R}$, e espessura de $d = 585\text{nm}$ é encontrada para o filme C, isto é, um erro relativo de 2% . Para o filme muito fino C, com um $\Delta \mathcal{R}$ de 0.5% , resulta em $\Delta d/d^{true}$ de 3.75% . Experimentos numéricos mostram que a situação inversa, *i.e.*, a deconvolução do espectro $\mathcal{R} - \Delta \mathcal{R}$, produz espessuras crescentes, a medida que $\Delta \mathcal{R}$ aumenta.

As figuras 4.4 à esquerda e à direita comparam, respectivamente, as constantes ópticas dos filmes A e C recuperados dos espectros com $\mathcal{R} + \Delta \mathcal{R}$ e seus valores verdadeiros. Podemos ver nas figuras que:

- O índice de refração é bem recuperado em todos os casos, mesmo quando a refletância é de 1%
- O coeficiente de absorção é também bem recuperado para altas energias do fóton. Na região quase transparente do espectro, o algoritmo de reparação interpreta a refletância aumentada como uma absorção aumentada. Quanto maior $\Delta \mathcal{R}$, maior a absorção recuperada na região quase transparente do espectro, como mostram as figura 4.4.

Valores sistemáticos, mas pequenos de $\Delta \mathcal{R}$ não afetam a recuperação do índice de refração, essencialmente dados pelo máximo do padrão de interferência na região semi-transparente do espectro. Quando a absorção for pequena, digamos $\alpha d < 0.01$, a espessura óptica nd do filme está relacionada com a diferença da energia entre os extremos de \mathcal{R} que não mudam com variações pequenas. Essa é a razão porque $d^{recup.} \approx d^{verd.}$ (veja tabela 4.5).

Os resultados da figura 4.4 e a tabela 4.5 indicam que os algoritmos de inversão PUMA e FFM não são

facilmente enganados por um espelho de referência mal calibrado. Por que isso acontece? Acreditamos que o poder dos métodos reside na filosofia da minimização. PUMA e FFM sempre buscam por propriedades ópticas e espessuras que minimizem a diferença entre a medição e o valor teórico ao longo de *todo* o espectro. Claramente, ao aumentar o erro, seja ele aleatório ou sistemático, o resultado é um erro quadrático maior, como mostram as tabelas 4.3 4.4 4.5. Contudo, os resultados indicam que mesmo para um erro “grande”, os algoritmos sempre encontram uma solução perto da verdadeira, ou seja, uma solução razoável.

4.5 Conclusão

Aplicamos dois métodos: PUMA, para filmes com espessura superior a 100nm e FFM, para filmes muito finos (com espessura inferior a 100 nm). Obtivemos sucesso para a recuperação da espessura, do n e de α , a partir de dados de refletância. Esses dados foram comparados com valores obtidos a partir de dados de transmitância, no mesmo intervalo do espectro. Os bons resultados validam o modelo com os algoritmos. A utilidade do métodos de inversão foi testada em filmes finos gerados numericamente e em um filme real de silício amorfo, depositado sobre vidro (substrato).

Os filmes *gedanken* indicam que, em geral, dados de refletância fornecem uma recuperação melhor do índice de refração enquanto que o coeficiente de absorção é melhor recuperado com transmitância. A inversão de filmes *gedanken* contendo diferentes quantidades de erro aleatório e sistemático nos permitiram determinar as limitações do algoritmo de recuperação. O método FFM obteve êxito na inversão de \mathcal{R} de um filme *gedanken* com 40nm. E a minimização simultânea de \mathcal{T} e \mathcal{R} recuperaram as constantes ‘verdadeiras’ deste filme muito fino.

Os experimentos numéricos indicam a conveniência de evitar o uso de dados de refletância perto de pontos extremos das franjas de interferência. Implementamos um método para eliminar tais pontos indesejados, e aplicamo-lo com êxito na recuperação de um filme real. A concordância das recuperações usando, separadamente, \mathcal{T} e \mathcal{R} confirmam a validade do enfoque.

Uma série de testes com dados de \mathcal{R} arredondados em duas e três casas decimais, indicam que ambos, PUMA e FFM, conseguem lidar satisfatoriamente com o problema da falta de precisão na medição.

Finalmente, a capacidade dos métodos foi testada nos casos em que o espelho de referência produz erros sistemáticos. Os resultados para filmes *gedanken* demonstram a validade dos métodos para erros de até 1%.

Estimativas com TVA e Regularização

Conteúdo do Capítulo 5

5.1	Introdução	57
5.1.1	<i>Total Variation Approach</i>	57
5.1.2	Regularização	58
5.1.3	Método “Zero”	60
5.2	Conclusões	61

5.1 Introdução

Neste capítulo, realizamos experimentos numéricos para estimar o índice de refração, o coeficiente de absorção e as espessuras de filmes *gedanken* e reais, sobre um substrato de vidro, usando dados de transmitância. Usamos dois métodos diferentes: *Varição Total* e Regularização. Em ambos os casos, usamos o *solver* Box-Quacan (veja [Mar00]).

5.1.1 Total Variation Approach

Nos experimentos numéricos, em vez de (3.2.10), usamos a forma alternativa

$$\begin{aligned}
 & \min_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}} f(\mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}) \\
 & \text{s.a. } h_i^T(\lambda_i, n_i, \kappa_i) = 0, \text{ para } i = 1, \dots, N_{obs} \\
 & \quad h_i^R(\lambda_i, n_i, \kappa_i) = 0, \text{ para } i = 1, \dots, N_{obs}
 \end{aligned} \tag{5.1.1}$$

onde

$$f(\mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}) = \sum_{i=1}^{N_{obs}-1} 100 (n_{i+1} - n_i)^2 + 0.001 \log [1 + (\kappa_{i+1} - \kappa_i)^2] \quad (5.1.2)$$

$$h_i^T = \bar{T}(\lambda_i, n_i, \kappa_i) - \mathcal{T}_i^{obs}, \text{ para } i = 1, \dots, N_{obs} \quad (5.1.3)$$

$$h_i^R = \bar{\mathcal{R}}(\lambda_i, n_i, \kappa_i) - \mathcal{R}_i^{obs}, \text{ para } i = 1, \dots, N_{obs} \quad (5.1.4)$$

Os coeficientes de n e κ em (5.1.2) são para equilibrar os pesos, pois as variáveis possuem ordens diferentes. O logaritmo deve-se ao fato de κ apresentar amplitude de valor muito grande dentro do espectro. O coeficiente de atenuação vai, por exemplo, de 3 até 10^{-5} e as regiões com menor valor ficam prejudicadas.

Em (3.2.10) apresentamos o método apenas com a transmitância nas restrições, enquanto que nos testes numéricos (5.1.1) usamos transmitância e refletância nas restrições, pois assim apresentam melhores resultados. O chute inicial utilizado foi o mesmo de PUMA. Na tabela 5.1 mostramos o valor de f da norma das restrições obtidas para os 5 filmes *gedanken* de [BCM99] e nos gráficos 5.3 e 5.4 mostramos as recuperações do índice de refração e do coeficiente de absorção.

Filme	f	$\sum_i (h_i^T)^2 + (h_i^R)^2$	Espessura Recup.
A	5.106392301	0.2926256489 10^{-18}	100
B	3.693254164	0.2453929769 10^{-15}	600
C	2.587571046	0.2634730497 10^{-13}	90
D	3.131152127	0.1078797967 10^{-20}	600
E	5.100487063	0.1602368632 10^{-13}	80

TABELA 5.1 – Valores de f , da norma das restrições e das espessuras recuperadas para os filmes testados.

5.1.2 Regularização

Na regularização, resolvemos

$$\min_{\mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}} f(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{obs}}, \mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}) \quad (5.1.5)$$

onde

$$f(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{obs}}, \mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}) = h(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{obs}}, \mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}) + V_{2,2}(\mathbf{n}) + V_{2,2}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (5.1.6)$$

$$h(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_{obs}}, \mathbf{n}, \boldsymbol{\kappa}) = \sum_{i=1}^{N_{obs}} [\bar{T}(\lambda_i, n_i, \kappa_i) - \mathcal{T}_i^{obs}]^2 \quad (5.1.7)$$

onde $V_{2,2}$ é uma discretização da derivada segunda, dada em (3.2.9). Se, ao resolver (5.1.5), encontrássemos $h = 0$, então também $V_{2,2}(\mathbf{n}) = V_{2,2}(\boldsymbol{\kappa}) = 0$, ou seja, n e κ seriam retas. Nos testes numéricos sempre obtemos $h > 0$, embora localmente $n^{recup}(\lambda)$ e $\kappa^{recup}(\lambda)$ possam ser aproximados por uma reta. Por esse motivo, nas legendas, aparece como *linear*.

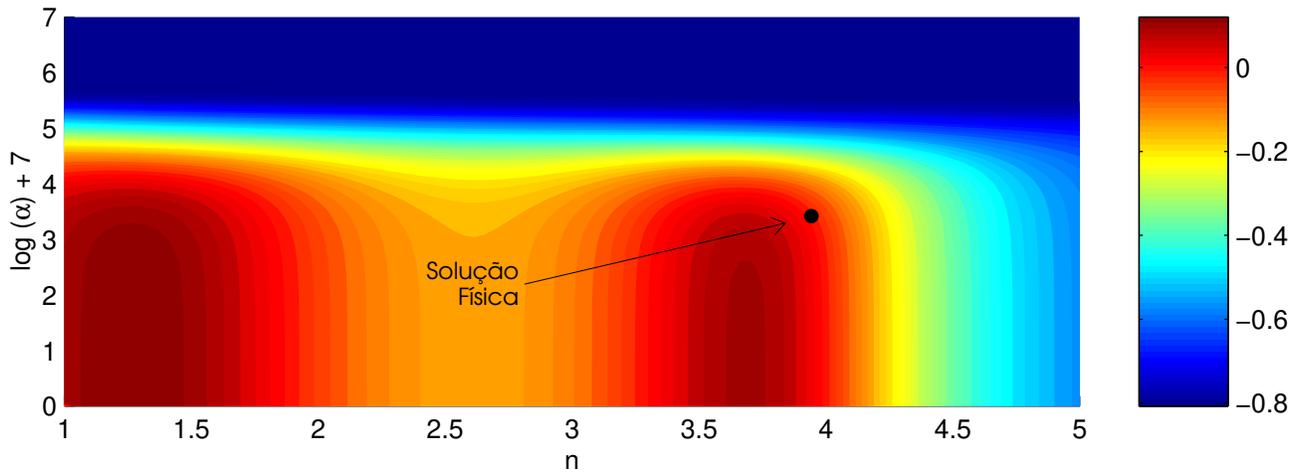


FIGURA 5.1 – Tonalidades-de-nível para o filme A de [BCM99] no plano $n \times \tilde{\alpha}$. O comprimento de onda está fixo em $\lambda = 737\text{nm}$, com $T^{obs} = 0.7493450$. A única solução fisicamente aceitável é dada pelo par $(n, \tilde{\alpha}) = (3.94269, 3.4170)$ (ou, alternativamente, $\kappa = 0.024009$). As faixas (em vermelho) em torno das curvas-zero são as que tem maior probabilidade de conter a solução de (5.1.8).

Embora também possamos estimar a espessura do modo usual, nas recuperações numéricas com regularização, foram usadas as espessuras verdadeiras. Para obter um ponto inicial, usamos a seguinte estratégia: para cada λ fixo, construímos uma malha $[n^{(j)}, \kappa^{(k)}]$ no plano (n, κ) , e consideramos

$$(\hat{n}_\lambda, \hat{\kappa}_\lambda) \leftarrow \arg \min_{n^{(j)}, \kappa^{(k)}} |T^{obs} - T(\lambda, n^{(j)}, \kappa^{(k)})| \quad (5.1.8)$$

Similarmente ao visto na seção 3.2.5, como podemos ver na figura 5.1, as faixas (em vermelho) em torno das curvas-zero são as que tem maior probabilidade de conter a solução de (5.1.8). Dentro dessas faixas, as partes verticais tem maior probabilidade de conter a solução de (5.1.8), pois são mais longas e largas.

Na figura 5.4, graficar $\lambda \times \hat{n}$ obtidos repetindo o processo acima para todos os comprimentos de onda. Nessa figura, podemos ver que para $\lambda = 737\text{nm}$, isto é, o comprimento de onda usado para gerar a figura 5.1, o procedimento (5.1.8) encontra um valor “errado” para \hat{n}_{737} . Porém, para aquelas soluções físicas, cujo n encontra-se ao longo das parte verticais, \hat{n} tem maiores chances de ser escolhido perto do valor “verdadeiro”,

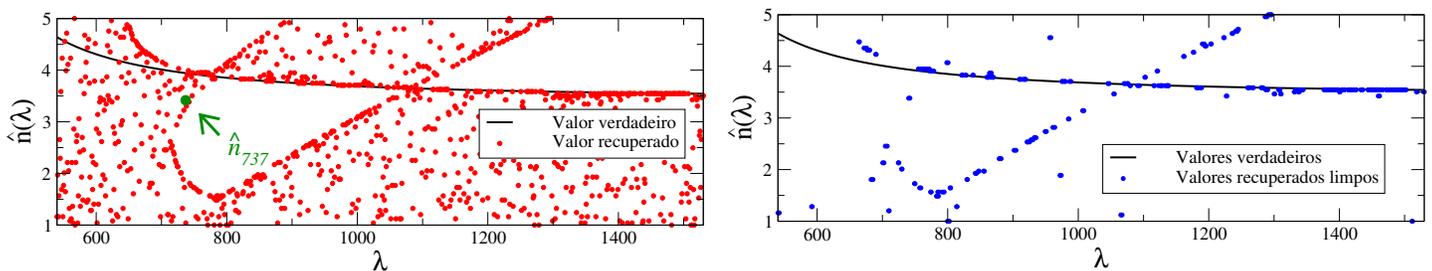
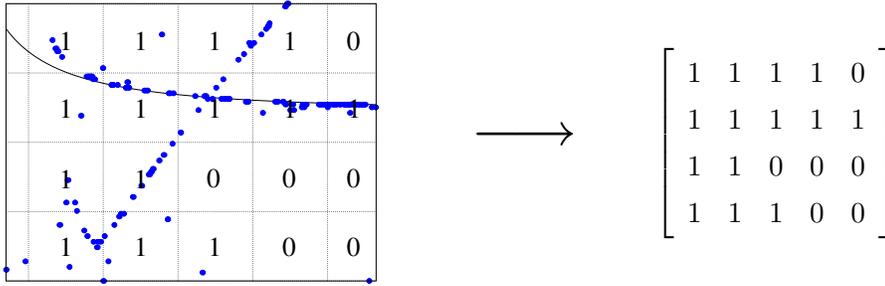


FIGURA 5.2 – Esquerda: gráficos de $\lambda \times \hat{n}$ obtido, através de (5.1.8), para o filme A de [BCM99]. Note que para $\lambda = 737\text{nm}$, isto é, o comprimento de onda usado para gerar a figura 5.1 encontra um valor “errado”.

ao varreremos vários comprimentos de onda. Podemos ver isso claramente através do padrão formado na figura 5.4, à esquerda.

Para transformar \hat{n} em um ponto inicial, primeiro limpamos os dados, jogando fora os pontos 'isolados' (figura 5.4, à direita). Então transformamos a figura em um matriz da seguinte forma



Então, a estimativa inicial é: para cada sequência de 1 começando na esquerda e terminando na direita, aproximamos os pontos de \hat{n} da sequência por um polinômio. Para o coeficiente de atenuação, usamos a reta que melhor aproxima os pontos $\hat{\kappa}$.

Na tabela 5.2 mostramos os valores de (5.1.6) e (5.1.7) para os 5 filmes *gedanken* de [BCM99] e dois filmes reais de [CVBM02]. Nos gráficos 5.3 e 5.4 mostramos as recuperações do índice de refração e do coeficiente de absorção.

Filme	f	h	$V_{2,2}(\mathbf{n})$	$V_{2,2}(\boldsymbol{\kappa})$
A	0.258803673	0.252404039	0.00634201293	5.76205371 10^{-5}
B	0.089467434	0.083866426	0.00559412387	6.88387663 10^{-6}
C	3.12140559 10^{-7}	1.28837712 10^{-7}	1.82544391 10^{-7}	7.58455077 10^{-10}
D	2.02564332 10^{-6}	1.52040179 10^{-6}	5.05206394 10^{-7}	3.51370044 10^{-11}
E	0.217625652	0.208604115	0.0090204729	1.06405308 10^{-6}
marc0098	0.003039740	0.001424115	0.0007228748	0.000892750395
marc0625	0.205305313	0.183596353	0.0213290003	0.000379960279

TABELA 5.2 – Valores de f , h , $V_{2,2}(\mathbf{n})$ e $V_{2,2}(\boldsymbol{\kappa})$ para os filmes testados.

5.1.3 Método “Zero”

Nos gráficos a seguir, também plotamos, somente para n (bolas vermelhas) os valores obtidos resolvendo

$$\overline{\mathcal{T}}(n, \alpha) = \mathcal{T}^{obs} \quad (5.1.9)$$

onde tomamos $\tilde{\alpha} = 0$. Chamamos esse método de “Zero”. Nesse caso, podemos ter mais de um valor para um mesmo λ . Esses valores correspondem aos n das curva-zero, projetados em $\tilde{\alpha} = 0$. Observamos que quando a solução física se encontra na parte vertical da curva-zero (dominância de n) pelo menos um dos valores está exatamente em cima da curva “verdadeira”.

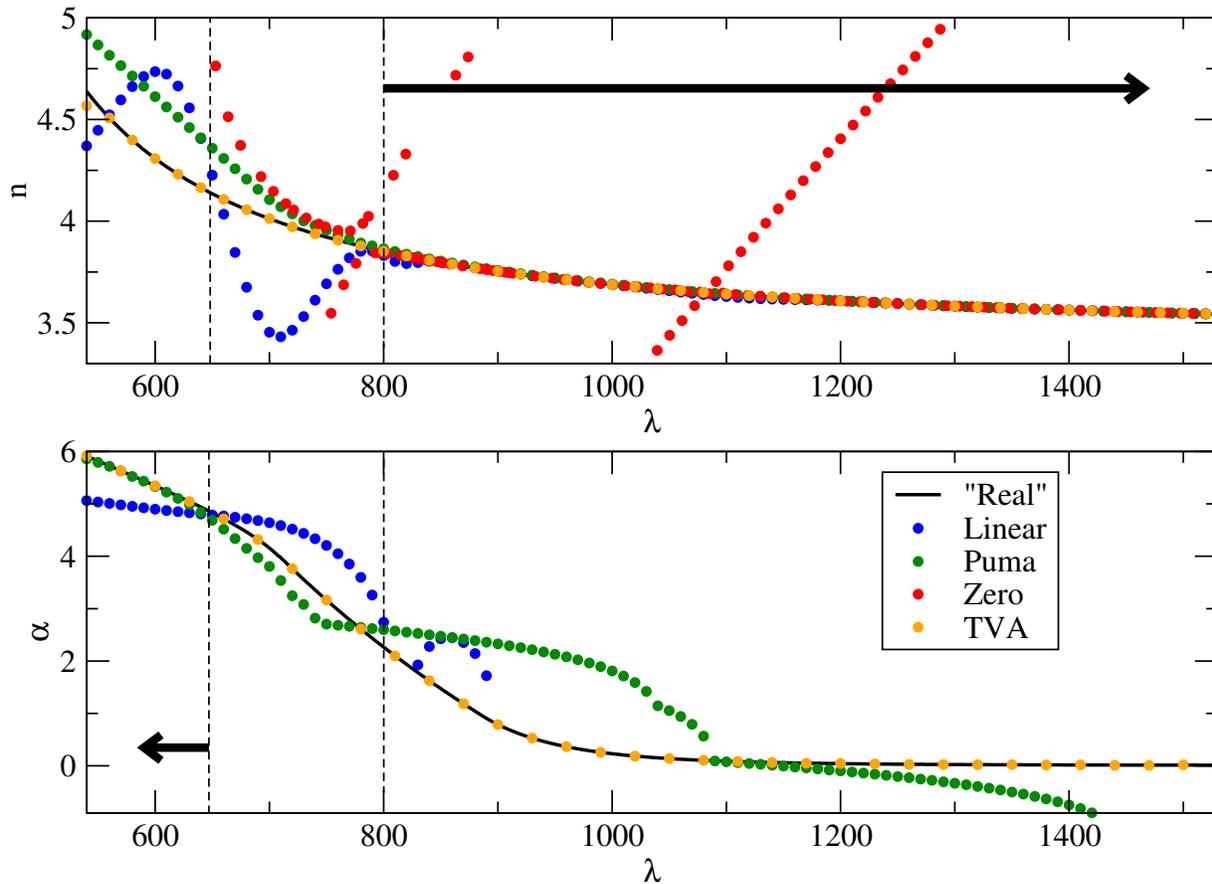


FIGURA 5.3 – Recuperações do índice de refração e do coeficiente de absorção para o filme *gedanken A* de [BCM99], obtidas por TVA e regularização. As recuperações via PUMA também estão plotadas para comparação. Para a legenda “zero” veja 5.1.3.

5.2 Conclusões

Aplicamos os métodos TVA, regularização, e Zero em cinco filmes *gedanken* e dois reais, além do PUMA para efeito de comparação.

As recuperações com TVA foram *excelentes*, inclusive para a espessura. Porém esse sucesso é esperado¹ quando lembramos que para obtê-lo, foram necessários dados de *transmitância e refletância*. As estimativas usando apenas dados de transmitância não foram suficientes para recuperar nenhuma das constantes.

A regularização produziu boas recuperações para o índice de refração, com exceção dos filmes E e *marc00625*. Embora consideravelmente pior que TVA no geral, a formulação com regularização possui a virtude de não utilizar nenhuma informação *a priori*. Embora o TVA não tenha restrições no problema de otimização, o ponto inicial é escolhido com conhecimento prévio das características da solução. Já na regularização, toda a informação vem do próprio problema². Embora nos experimentos utilizamos a

¹A indeterminação é, certamente, menor, pois há o mesmo número de equações que incógnitas.

²Além de usar somente dados de transmitância.

espessura verdadeira, há indicações de que a espessura correta também possa ser recuperada.

Tanto o TVA quanto a regularização, mais que métodos fechados, são demonstrativos de potencialidade. Por outro lado, o Zero não é um método para realizar as recuperações, como os anteriores, mas para compreensão do problema de inversão. Olhando para ele, podemos entender como e porque são as recuperações dos outros métodos.

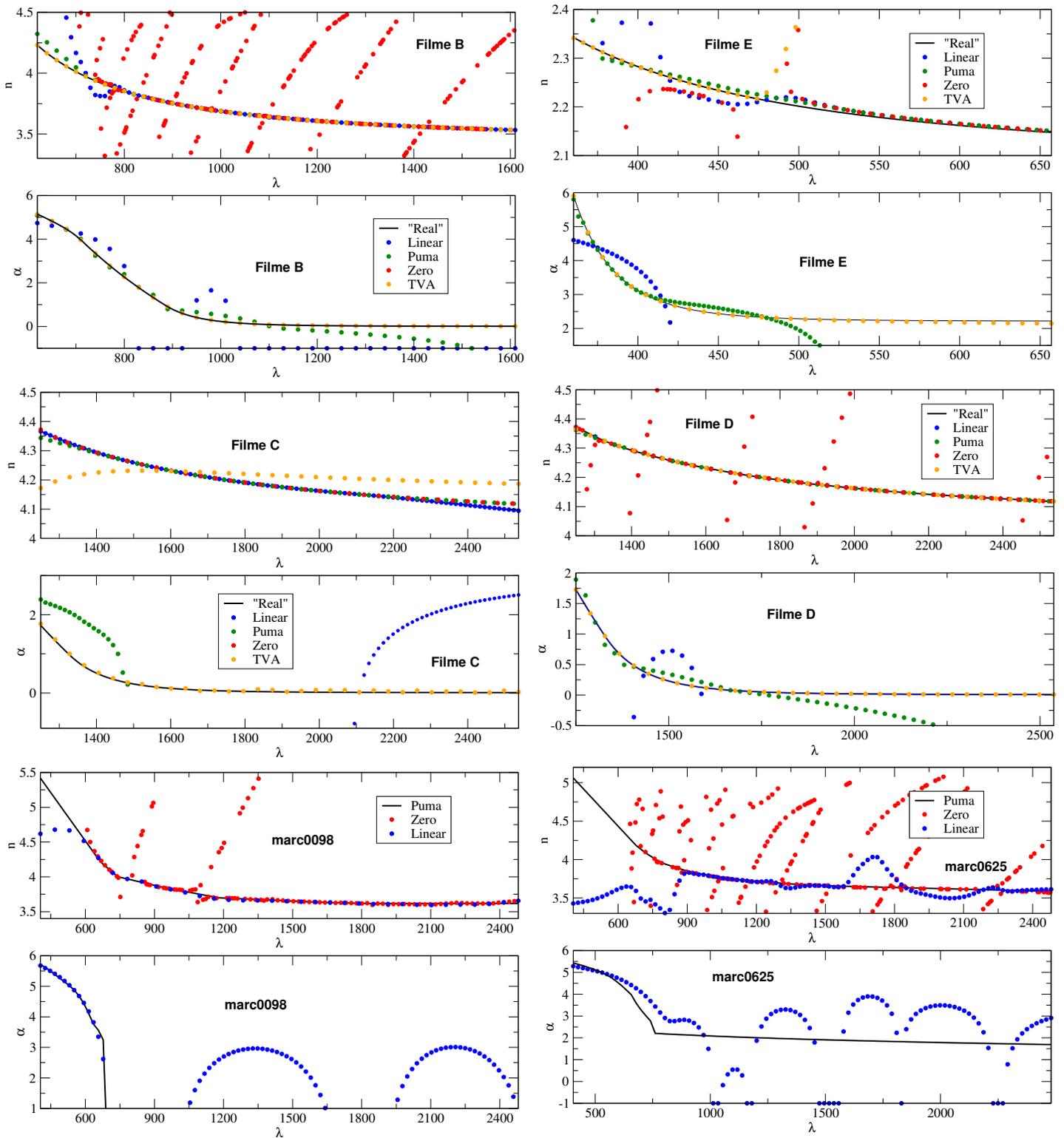


FIGURA 5.4 – Recuperações do índice de refração e do coeficiente de absorção para os filmes gedanken B (esquerda, em cima), C (esquerda, no meio), D (direita, no meio) e E (direita, em cima) de [BCM99], e os filmes reais marc0098 e marc0625 de [CVBM02], obtidas por TVA e regularização. As recuperações via PUMA também estão plotadas para comparação. Para a legenda “zero” veja 5.1.3.

Estimativas para Vários Filmes

Conteúdo do Capítulo 6

6.1	Introdução	65
6.2	Experimentos Numéricos	67
6.3	Sistema com Filmes Idênticos	68
6.4	Sistema com Filmes Diferentes	70
6.4.1	Intervalo do Espectro 1000–2100nm	70
6.4.2	Intervalo do Espectro 650–2000nm	71
6.5	Conclusão	72

6.1 Introdução

Neste capítulo, realizamos experimentos numéricos para estimar o índice de refração, o coeficiente de absorção e as espessuras de uma pilha de filmes superpostos, sobre um substrato de vidro, usando dados de transmitância. Para cada filme depositado, temos como incógnitas, a espessura, o índice de refração e o coeficiente de atenuação. Suponhamos que $m_t \geq 0$ filmes estão depositados no topo de um substrato e $m_b \geq 0$ filmes estão depositados embaixo. Para todo $i = 1, \dots, m_t$, $\lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}]$, denotamos:

$$\begin{aligned}
 d_i^t &= \text{espessura do } i\text{-ésimo filme no topo} \\
 n_i^t(\lambda) &= \text{índice de refração do } i\text{-ésimo filme no topo} \\
 \kappa_i^t(\lambda) &= \text{coeficiente de atenuação do } i\text{-ésimo filme no topo}
 \end{aligned}
 \tag{6.1.1}$$

De modo análogo, para todo $i = 1, \dots, m_b$, denotamos

$$\begin{aligned} d_i^b &= \text{espessura do } i\text{-ésimo filme embaixo} \\ n_i^b(\lambda) &= \text{índice de refração do } i\text{-ésimo filme embaixo} \\ \kappa_i^b(\lambda) &= \text{coeficiente de atenuação do } i\text{-ésimo filme embaixo} \end{aligned} \quad (6.1.2)$$

Para simplificar a notação, fazemos

$$d^{todos} = \{ \{d_i^t\}_{i=1}^{m_t}, \{d_i^b\}_{i=1}^{m_b} \}, \quad n^{todos} = \{ \{n_i^t(\lambda)\}_{i=1}^{m_t}, \{n_i^b(\lambda)\}_{i=1}^{m_b} \}, \quad \kappa^{todos} = \{ \{ \kappa_i^t(\lambda) \}_{i=1}^{m_t}, \{ \kappa_i^b(\lambda) \}_{i=1}^{m_b} \} \quad (6.1.3)$$

Vamos supor, como no caso de um filme, que N_{obs} medições da transmitância foram feitas. Podemos então generalizar (3.1.10) para o caso de muitos filmes

$$\overline{\mathcal{T}}(d^{todos}, n^{todos}(\lambda_i), \kappa^{todos}(\lambda_i)) = \mathcal{T}_i^{obs}, \quad \text{para } i = 1, \dots, N_{obs} \quad (6.1.4)$$

Nos testes realizados, usamos PUMA, cujo modelo de otimização usado para substituir as equações não-lineares é o de minimizar o *erro quadrático*, com um enfoque *pointwise*, de modo que a generalização de (3.2.3) é dada por

$$\begin{aligned} \min_{d^{todos}, n^{todos}, \kappa^{todos}} \sum_{i=1}^{N_{obs}} [\overline{\mathcal{T}}(d^{todos}, n^{todos}(\lambda_i), \kappa^{todos}(\lambda_i)) - \mathcal{T}_i^{obs}]^2 \\ \text{s.a. RESTRIÇÕES FÍSICAS} \end{aligned} \quad (6.1.5)$$

onde as restrições físicas foram generalizadas para todos os filmes. Porém, a indeterminação aumenta consideravelmente, já que esse é um sistema com $(m_t + m_b)(2N_{obs} + 1)$ variáveis e apenas N_{obs} equações. Podemos pensar num *coeficiente de indeterminação* Γ através de

$$\Gamma = \frac{\text{n}^\circ \text{ de variáveis}}{\text{n}^\circ \text{ de equações}} \quad (6.1.6)$$

visto que o numerador aumenta enquanto o denominador diminui a indeterminação. Logo

$$\Gamma = (m_t + m_b) \frac{(2N_{obs} + 1)}{N_{obs}} \quad (6.1.7)$$

Como o número de variáveis por filme e as observações são interdependentes, chamamos

$$\mu = \frac{2N_{obs} + 1}{N_{obs}} \quad (6.1.8)$$

Naturalmente, $\mu > 2$ e $\mu \rightarrow 2^+$, quando $N_{obs} \rightarrow \infty$. Desta forma, para um número de observações suficientemente grande, podemos escrever

$$\Gamma = 2(m_t + m_b) + \tau \quad (6.1.9)$$

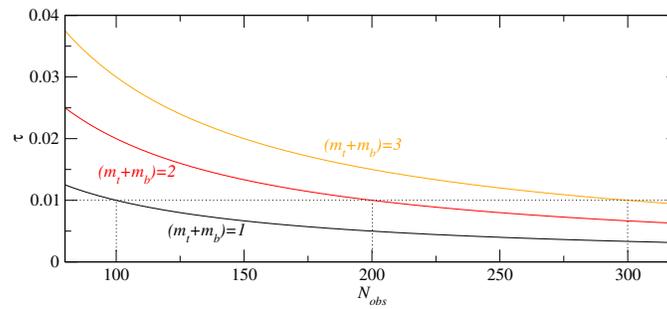


FIGURA 6.1 – Valores de τ para 1, 2 e 3 filmes. Se, por exemplo, tomamos 100 pontos para 1 filmes, devemos tomar 200 e 300 pontos para 2 e 3 filmes, respectivamente.

onde $0 < \tau < 1$. Juntando (6.1.7), (6.1.8) e (6.1.9) e, resolvendo em função de τ , obtemos

$$\tau = \frac{(m_t + m_b)}{N_{obs}} \quad (6.1.10)$$

Portanto, τ é a parte de Γ que mede a interdependência entre o número de filmes e o número de observações e, portanto, é um melhor indicativo da indeterminação, como podemos ver nos resultados a seguir. Ele representa a relação entre a incerteza (variáveis, que dependem do número de filmes) e informação (observações).

Por exemplo, no caso de apenas um filme sobre um substrato, quando $m_t = 1$ e $m_b = 0$, temos que $\tau = 1/N_{obs}$. Se aumentamos para $(m_t + m_b) = 2$ filmes, devemos multiplicar o número de observações por 2 (veja figura 6.1), de modo a manter a mesma razão.

6.2 Experimentos Numéricos

Foram realizados dois conjuntos de testes: com filmes idênticos, isto é, do mesmo material e com a mesma espessura, e com filmes diferentes. Os resultados são mostrados a seguir.

Devido à busca para a espessura, houve uma limitação da dimensão do problema. No caso de apenas um filme, a espessura é obtida através da repetida resolução do problema (3.2.12) para várias, digamos θ , espessuras-teste fixas. Isso significa que para $\gamma \geq 1$ dimensões, a malha para buscar as espessuras terá θ^γ pontos. Portanto, devido ao crescimento exponencial da malha para busca da espessura, nos testes numéricos realizados consideramos somente sistemas com dois filmes.

Como obtivemos bons resultados usando o valor *default* de $N_{obs} = 100$ no caso de apenas um filme, nos testes a seguir (com dois filmes) utilizamos $N_{obs} = 200$.

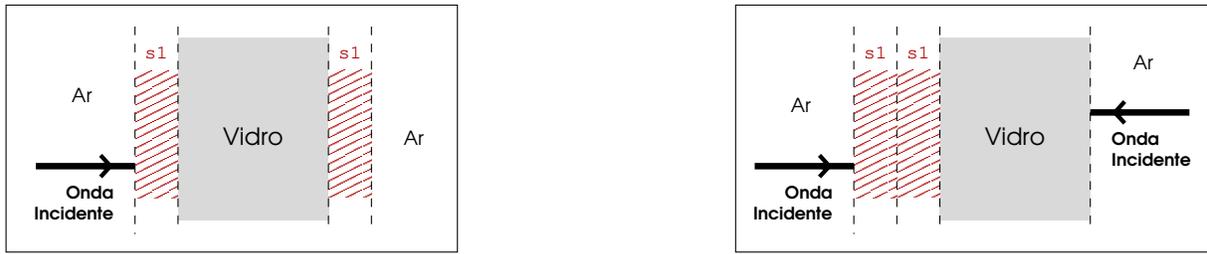


FIGURA 6.2 – Sistemas com **filmes idênticos**. Esquerda: representação esquemática para a transmitância do sistema $s1Vs1$. Direita: representação esquemática para a transmitância dos sistemas $s1s1V$ e $Vs1s1$. Observe que nesse caso, a transmitância é a mesma, isto é, quer seja a incidência pelo lado dos filmes quer seja pelo lado do substrato.

6.3 Sistema com Filmes Idênticos

No primeiro conjunto de experimentos, consideramos sistemas com dois filmes *gedanken* idênticos. A motivação aqui é meramente investigativa, já que as constantes são as mesmas nos dois filmes e podem ser recuperadas a partir de um sistema com apenas um filme. Porém, sistemas com filmes idênticos possuem um tipo diferente de indeterminação, à qual gostaríamos de submeter os modelos usados. Vejamos esse exemplo: com um filme *gedanken* de silício com espessura de 100nm, construímos os sistemas $s1s1V$, $s1Vs1$, $Vs1s1$, onde s significa silício, 1 significa espessura de 100nm, e V significa substrato vidro (veja figuras 6.2 e 6.3). Contudo, o sistema $s1s1V$ também pode ser gerado com quaisquer combinações de dois filmes de silício cujas espessuras somem 200nm (estando ambos os filmes antes do substrato), pois sendo os filmes de mesmo material, é como se não existisse interface.

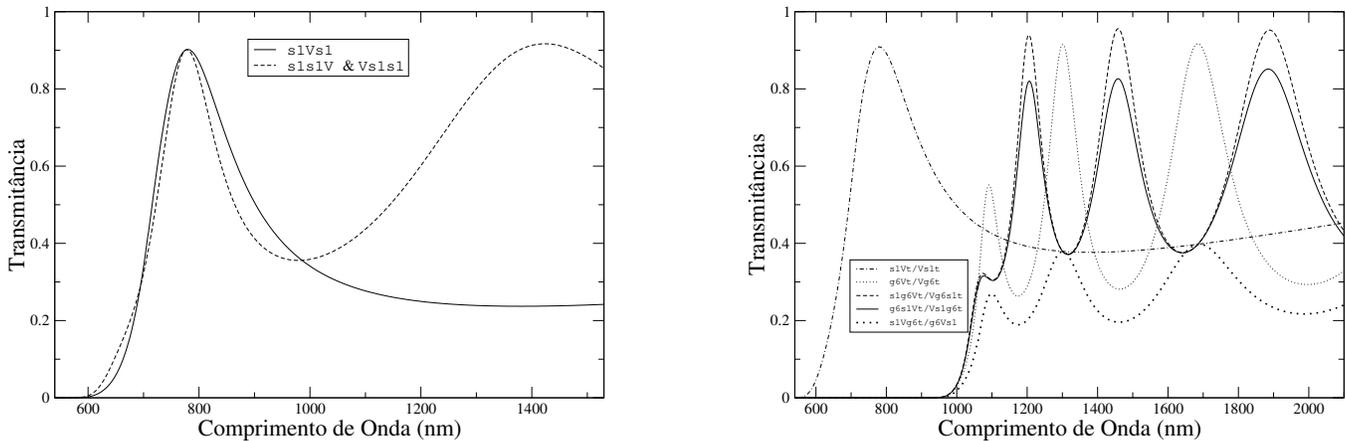


FIGURA 6.3 – Esquerda: espectros de transmitância no intervalo 540–1530nm, para os sistemas $s1Vs1$, $s1s1V$ e $Vs1s1$. Observe que, devido à simetria da transmitância, há apenas dois sistemas distintos possíveis: com o substrato ‘no meio dos filmes’ e ‘na extremidade’. Direita: espectros para transmitância, no intervalo 540–2100nm, para os sistemas com dois filmes diferentes. Observe que, devido à simetria da transmitância, há apenas três conjuntos distintos: $s1g6Vt/Vg6s1t$, $g6s1Vt/Vs1g6t$ e $s1Vg6t/g6Vs1t$. Os espectros de sistemas com apenas um filme também aparecem para comparação.

Para efeito de comparação com [BCM99], escolhemos o intervalo 540–1530nm e consideramos também

sistemas compostos por um único filme: **s1V** (filme de silício com 100nm, depositado no topo de um substrato de vidro), **Vs1** (o mesmo que o anterior mas depositados embaixo), **s2V** and **Vs2** (o mesmo que os dois filmes anteriores, mas com 200nm).

Sistema	1 ^o filme				2 ^o filme				Erro quadrático
	d^{verd}	d^{recup}	λ_{infl}^{verd}	λ_{infl}^{recup}	d^{verd}	d^{recup}	λ_{infl}^{verd}	λ_{infl}^{recup}	
s1V	100	100	540	540					1.014219e-04
Vs1	100	100	540	540					1.014214e-04
s2V	200	200	540	540					1.032218e-04
Vs2	200	200	540	540					1.825453e-04
s1s1V	100	100	540	640	100	98	540	540	7.545143e-05
Vs1s1	100	132	540	540	100	80	540	540	9.952118e-05
s1Vs1	100	87	540	540	100	120	540	540	6.284517e-05

TABELA 6.1 – Recuperações para sistemas com um e dois filme, no intervalo do espectro 540–1530nm.

Outro aspecto interessante é a simetria da transmitância, *i.e.*, o lado da onda incidente é irrelevante. Isto significa que os sistemas **Vs1s1** e **s1s1V** fornecem a mesma transmitância, bem como **Vs1** e **s1V**, no caso de um filme (veja figura 6.2, à direita). Mas, embora sejam os mesmos dados, os modelo usado para recuperação é diferente.

A tabela 6.1 resume os resultados obtidos para os sete sistemas mencionados anteriormente. Na tabela, mostramos a recuperação da espessura, o ponto de inflexão recuperado e o erro quadrático correspondente. A figura 6.4 mostra o índice de refração e coeficiente de absorção recuperados. Como esperado, as recuperações obtidas para o sistema com apenas um filme são equivalentes aos obtidos em [BCM99]. Para os sistemas com dois filmes idênticos, note que a soma das duas espessuras recuperadas é, como esperado, aproximadamente igual a soma das duas espessuras ‘verdadeiras’ (200nm). Num teste adicional, no qual incluímos a restrição de que ambas as espessuras fossem iguais, conseguimos recuperar perfeitamente a espessura de 100nm.

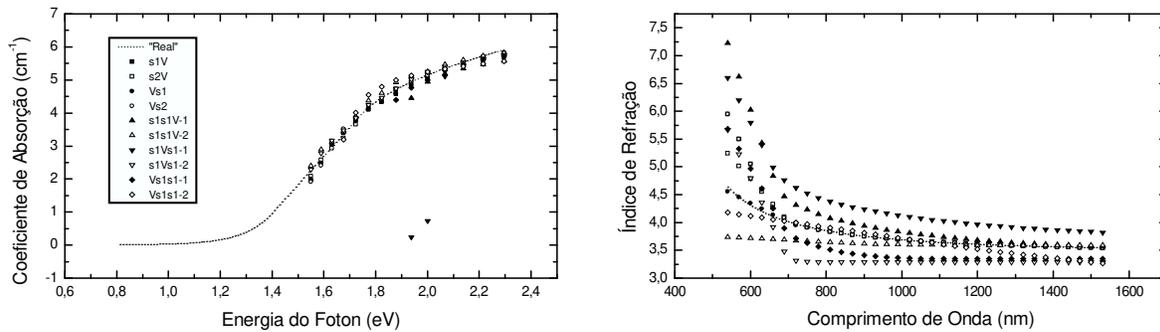


FIGURA 6.4 – Recuperação para filmes Gedanken superpostos (do mesmo material). Para comparação, testamos também sistemas com apenas um filme: **s1Vt** e **Vs1t** com 100nm e **s2Vt** e **Vs2t** com 200nm.

6.4 Sistema com Filmes Diferentes

Neste outro conjunto de testes, consideramos vários sistemas com dois filmes combinando filmes de germânio e silício com diferentes espessuras e depositados sobre ambos os lados de um substrato de vidro. Os sistemas podem ser assim descritos:

- a) **Sistemas combinando um filme de silício com 100nm junto com um filme de germânio com 600nm.** As configurações dos sistemas considerados são: $s1g6Vt$, $g6s1Vt$, $s1Vg6t$, $g6Vs1t$, $Vs1g6t$, $Vg6s1t$, onde s e g significam filmes de silício e germânio, respectivamente, 1 e 6 significam espessuras de 100nm e 600nm, respectivamente, e V significa substrato de vidro. Além dos sistemas com dois filmes, também mostramos sistemas com apenas um filme: $s1Vt$, $Vs1t$, $g6Vt$, $Vg6t$.
- b) **Sistemas combinando um filme de silício com 500nm junto com um filme de germânio com 600nm.** Quase igual aos filmes do item acima, mas com a espessura do filme de silício aumentada para 500nm. Em particular, os sistemas são: $s5g6Vt$, $g6s5Vt$, $s5Vg6t$, $g6Vs5t$, $Vs5g6t$, $Vg6s5t$.

A motivação para os teste do grupo (b), foram as recuperações pobres do grupo (a), cujas responsabilidade recaiu sobre a baixa espessura (100nm) do filme de silício.

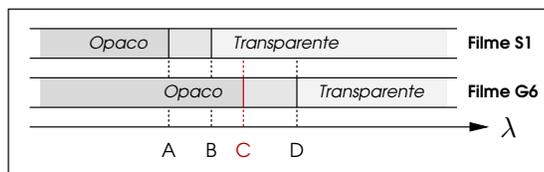


FIGURA 6.5 – Representação esquemática para as regiões de opacidade e transparência para os filmes de silício e germânio. O filme de silício é opaco à esquerda do ponto A e transparente à direita de B. O filme de germânio é opaco à esquerda de C e transparente à direita de D. Note que, para um sistema com esses dois filmes, somente a partir do ponto C haverá transmitância não-nula. Porém, nessa região, o filme de silício é transparente e a absorção é praticamente nula.

Outro item importante que surge no caso de múltiplos filmes é a escolha do intervalo para inversão, devido à ‘dessincronia’ das regiões de transparência e opacidade dos filmes constituintes. Por exemplo, na figura 6.5, vemos que para um sistema com esses dois filmes, *somente a partir do ponto C* haverá transmitância não-nula (veja figura 6.3, à direita). Porém, nessa região, o filme de silício é transparente e a absorção é praticamente nula. Por esse motivo, consideramos as recuperações em dois intervalos distintos do espectro: 1000–2100nm e 650–2000nm.

6.4.1 Intervalo do Espectro 1000–2100nm

O limite inferior do intervalo usado para as recuperações neste conjunto de testes, foi escolhido porque apenas a partir deste ponto a transmitância para dois filmes se torna não-nula. Esse valor equivale ao ponto C

na representação esquemática da figura 6.5. O filme de germânio, portanto, age como um **filtro de fato**, anulando transmitâncias para comprimentos de onda abaixo de 1000nm (veja figura 6.3, à direita).

Porém, como podemos ver na figura 6.6 (1ª e 3ª linhas, à direita), dentro deste intervalo, a absorção do filme mais fino é quase nula, o que torna sua recuperação muito difícil. Como consequência, obtemos uma recuperação pobre para o índice de refração (mesmo quando com apenas 1 filme). Para o filme mais grosso, como podemos ver na figura 6.6 (2ª e 4ª linhas), a recuperação foi melhor, embora a má recuperação do filmes mais fino afete a recuperação como um todo.

Na tabela 6.2, vemos as espessuras e o ponto de inflexão recuperados e o erro quadrático. Claramente observamos que a pior recuperação ocorre para o substrato entre os filmes.

Sistema	Filme de Si		Filme de Ge		E.Q.
	Espessura	Ponto Infl.	Espessura	Ponto Infl.	
s1Vt	100	1000	-	-	4.810396e-08
Vs1t	100	1000	-	-	4.815141e-08
g6Vt	-	-	600	1000	2.807604e-04
Vg6t	-	-	600	1000	2.813938e-04
s1g6Vt	106	1600	595	1000	3.885367e-05
g6s1Vt	98	1000	605	1200	6.097002e-05
Vs1g6t	97	1000	607	1200	9.500517e-05
Vg6s1t	105	1000	590	1000	1.305189e-04
s1Vg6t	130	1300	620	1000	1.416426e+01
g6Vs1t	130	1000	620	1100	3.834548e-05
s5g6Vt	499	1000	602	1000	1.817374e-04
g6s5Vt	497	1000	601	1000	1.777266e-04
Vs5g6t	497	1000	602	1000	2.503143e-04
Vg6s5t	497	1000	602	1000	1.829831e-04
s5Vg6t	502	1000	601	1100	3.469328e-05
g6Vs5t	496	1000	598	1100	8.612013e-06

TABELA 6.2 – Espessura, ponto de inflexão e erro quadrático recuperados para sistemas com dois filmes, onde o filme de silício tem espessura de 100nm (s1) e 500nm (s5). O intervalo utilizado é 1000–2100nm.

6.4.2 Intervalo do Espectro 650–2000nm

Neste segundo conjunto de testes, como podemos ver na figura 6.7, diminuimos o limite inferior do intervalo até um ponto onde a absorção do filme mais fino não fosse totalmente nula, como no caso anterior. Esse valor equivale ao ponto A na representação esquemática da figura 6.5. Além disso, para comprimentos de onda abaixo de 650nm, o filme de germânio *não possui transmitância*¹. Por outro lado, isso significa ter que considerar uma faixa do espectro onde a transmitância é nula (na figura 6.5, a região entre os pontos

¹Como os filmes *gedanken* são gerados por computador, não haver transmitância para certo comprimento de onda significa que obtemos NaN.

A e C). Felizmente, esse fato parece não afetar a recuperação como um todo². Pelo contrário, nesse caso os resultados são razoáveis para o filme mais fino (figura 6.7, 1^a e 3^a linhas) e muito bons para o filme mais grosso (figura 6.7, 2^a e 4^a linhas). Na tabela 6.3 podemos ver as espessuras e pontos de inflexão recuperados, além do erro quadrático.

Sistema	Filme de Si		Filme de Ge		E.Q.
	Espessura	Ponto Infl.	Espessura	Ponto Infl.	
s1Vt	100	650	-	-	1.626862e-04
Vs1t	100	650	-	-	1.626884e-04
g6Vt	-	-	600	650	2.377452e-04
Vg6t	-	-	600	650	2.370714e-04
s1g6Vt	86	1250	612	650	1.389166e-04
g6s1Vt	101	650	599	650	1.282020e-04
Vs1g6t	104	1250	595	650	1.400108e-04
Vg6s1t	87	1050	611	650	1.463124e-04
s1Vg6t	116	650	611	650	4.323037e-05
g6Vs1t	111	650	608	650	3.846334e-05
s5g6Vt	493	650	603	650	3.431265e-04
g6s5Vt	499	650	601	650	3.325285e-04
Vs5g6t	498	650	601	650	3.249405e-04
Vg6s5t	495	650	602	650	3.393605e-04
s5Vg6t	495	650	602	650	4.806390e-05
g6Vs5t	493	650	602	650	5.002737e-05

TABELA 6.3 – Espessura, ponto de inflexão e erro quadrático recuperados para sistemas com dois filmes, onde o filme de silício tem espessura de 100nm (s1) e 500nm (s5). O intervalo utilizado é 650–2000nm.

6.5 Conclusão

Aplicamos PUMA em dois conjuntos diferentes de sistemas com dois filmes *gedanken*. Para os sistemas com filmes idênticos de silício, as espessuras recuperadas ficaram em torno de 100nm, com a propriedade de que a soma das espessuras é bem próxima à soma dos valores verdadeiros. Isso acontece pois a transmitância de dois (ou mais) filmes do mesmo material depende somente da soma de todas as espessuras dos filmes, sendo independente de sua quantidade ou de suas espessuras individuais.

Para o sistema com filmes de materiais diferentes, a recuperação do filme mais fino (100nm) foi mais fraca do que a do filme mais grosso (600nm). Infelizmente, esse fato afetou a recuperação como um todo. Podemos ver isso claramente, quando comparamos as recuperações nos intervalos [1000, 2100] e [650, 2000]. No segundo caso, a absorção do filme mais fino não é totalmente nula e as estimativas deste filme melhoraram. Conseqüentemente, as estimativas do outro filme, também. Portanto, podemos dizer que

²O que acontecia quando a absorção era quase nula.

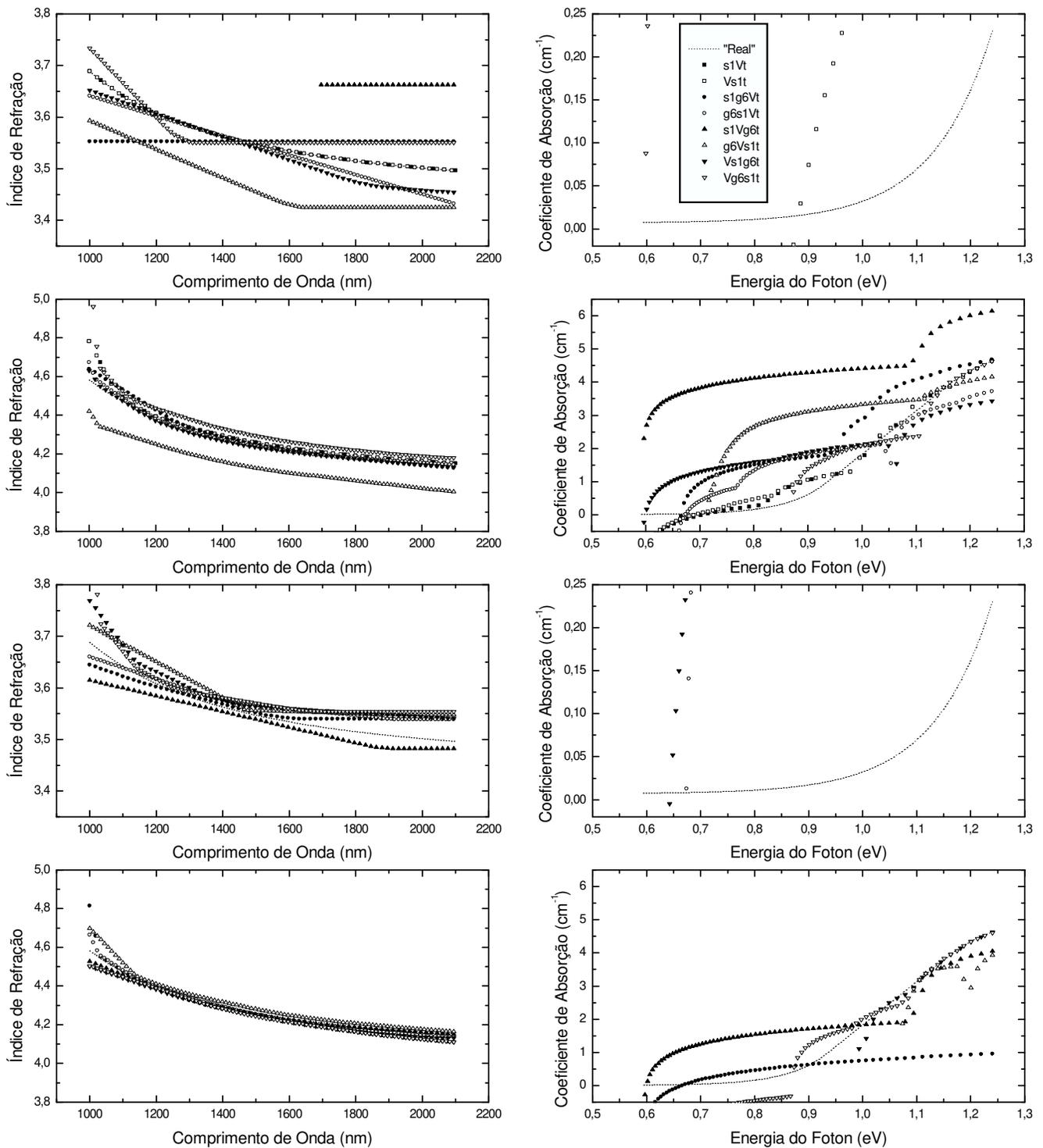


FIGURA 6.6 – Índices de refração (coluna da esquerda) e coeficientes de absorção (coluna da direita) recuperados no intervalo do espectro 1000–2100nm. Metade superior: recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s1 (de silício com 100nm; primeira linha) e g6 (de germânio com 600nm; segunda linha). Metade inferior: recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s5 (de silício com 500nm; terceira linha) e g6 (quarta linha). Obs: a segunda e quarta linha se referem à recuperação do mesmo filme, mas em situações (sistemas) distintas.

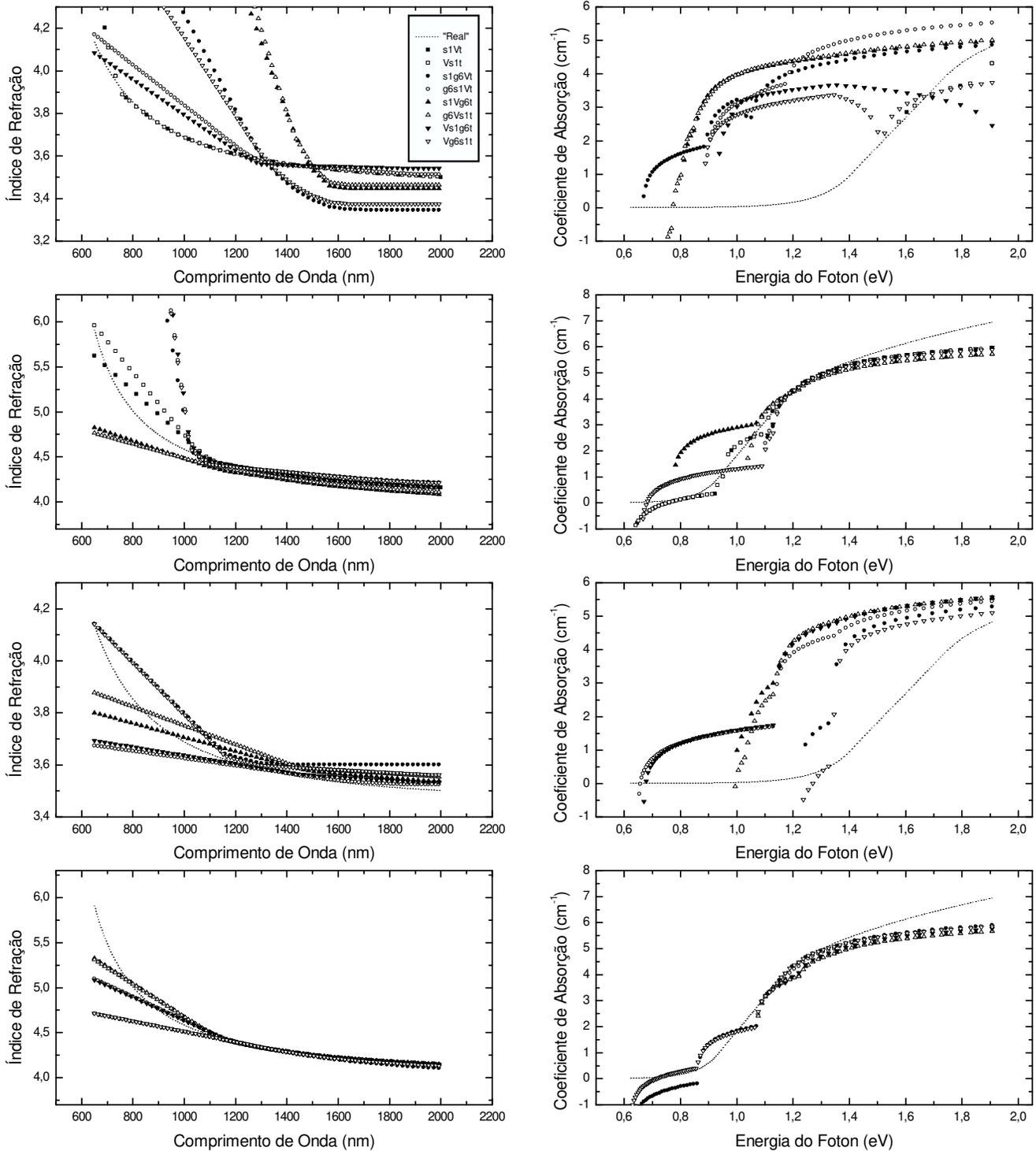


FIGURA 6.7 – Índices de refração (coluna da esquerda) e coeficientes de absorção (coluna da direita) recuperados no intervalo do espectro 650–2000nm. Metade superior: recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s1 (de silício com 100nm; primeira linha) e g6 (de germânio com 600nm; segunda linha). Metade inferior: recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s5 (de silício com 500nm; terceira linha) e g6 (quarta linha). Obs: a segunda e quarta linha se referem à recuperação do mesmo filme, mas em situações (sistemas) distintas.

a recuperação do sistema silício-germânio depende do intervalo de recuperação. Suspeitando que a razão para o fraco desempenho na recuperação pudesse ser a espessura de 100nm, aumentamo-la para 500nm, o que forneceu melhores recuperações.

De modo geral, obtivemos êxito na recuperação de pelo menos uma das constantes (índice de refração do filme mais grosso), apesar do aumento da indeterminação. O coeficiente de absorção do filme mais grosso, embora com falhas em algumas regiões do espectro, também pode ser considerado recuperado com sucesso. Ambas as recuperações do filme mais grosso são equivalentes ao obtido com apenas um filme.

Os resultados mostram a recuperação de uma determinada constante é boa quando ela joga um papel relevante na constituição da transmitância. Para os filmes iguais, há apenas um filme dominante, similarmente à recuperação com apenas um filme, o que explica os bons resultados. Com os dois filmes diferentes, essa “dominância” é do filme mais grosso, razão pela qual obteve bons resultados.

Nas figuras 6.6 e 6.7, na porção superior à esquerda, vemos a excelente recuperação do índice de refração do filme de silício para um sistema com apenas esse filme. Com a retirada do filme mais grosso, a transmitância passa a ser dominada pelo seu índice de refração.

Conclusão

Estudamos o problema inverso de estimar constantes ópticas (índice de refração, coeficiente de absorção e espessura) para filmes finos. Esse problema é altamente desafiante, pois encontra-se na junção de três áreas do conhecimento: **matemática**, **física** e **computação**. É necessário aliar *métodos de otimização*, *elaboração de fórmulas teóricas*¹, *investigação das características particulares* do problema físico-matemático e *implementação de algoritmos*. Como consequência, dividimos este trabalho em duas partes: uma teórica, enquanto reservamos a outra para experimentos numéricos.

Na primeira parte desenvolvemos uma fórmula compacta para a refletância média de um sistema com um filme depositado sobre um substrato transparente. Desenvolvemos também uma fórmula genérica para a transmitância e refletância média de sistemas com vários filmes e um substrato transparente. Todas as médias integrais foram calculadas analiticamente, bem como suas derivadas, tornando-as numericamente acessíveis. Com essas fórmulas, construímos e investigamos o problema de inverter dados de transmitância e refletância para estimar as constantes ópticas, onde pudemos aprender as dificuldades e particularidades deste tipo de problema inverso. Esse conhecimento foi então usado para sugerir enfoques novos e mais eficientes, tirando vantagem de algum tipo adicional de informação, de modo geral, crucial em problemas inversos.

Na segunda parte, realizamos vários experimentos computacionais. Utilizamos filmes *gedanken*, o que proporcionou uma avaliação imediata das estratégias, bem como filmes reais. O êxito das recuperações em ambos os casos, corroborou a validade de nossos *approaches*.

Nos testes usando **apenas dados de refletância** como dado de entrada, conseguimos obter resultados satisfatórios, tanto no caso de filmes gerados como no caso de filmes reais. No caso de filmes reais, as recuperações foram comparadas com êxito com recuperações a partir de transmitância somente. Erros aleatórios e sistemáticos foram introduzidos mostrando que os algoritmos empregados são robustos o suficiente para

¹Problema direto.

lidar com a natural imprecisão de medição de refletância.

Nos testes usando **TVA** e **regularização**, conseguimos estimar as constantes ópticas com um mínimo de informação *a priori*. Embora necessitem de aperfeiçoamento, mostram a potencialidade dos métodos que, juntamente com outros experimentos, forneceram uma compreensão razoável do problema de estimação para filmes finos.

No caso de **multifilmes**, os resultados para sistemas com dois filmes *gedanken* foram muito bons, apesar do aumento da dificuldade por causa da indeterminação maior. Testes com filmes de mesmo material, embora com interesse meramente teórico, sugerem que, mesmo com uma dificuldade a mais nesse caso, nosso enfoque apresenta resultados incentivadores. Já para filmes distintos, o interesse é prático e os resultados mostram que a inversão fornece resultados esperados, visto que o enfoque para vários filmes é uma generalização do caso de um filme somente.

Como resultado, foram publicados três artigos. A seguir as conclusões deste trabalho.

Trabalhos Futuros. O terreno da estimação de parâmetros para filmes fino é muito fértil e acreditamos poder continuar a pesquisar nessa área. Podemos listar algumas idéias, baseadas nos resultados atuais:

- a) Aprofundamento do conhecimento da estrutura do problema, através do estudo das curvas de nível. Inclusive para o caso de múltiplos filmes. Então usar esse conhecimento para desenhar estratégias melhores, tanto com relação ao ponto inicial quanto com relação à modelagem através do problema de otimização.
- b) Elaboração de estratégias mais eficientes para a busca da espessura no caso de múltiplos filmes.

Referências Bibliográficas

- [AT66] Abèle and Thèye. *Surface Sci.*, 5:325, 1966.
- [BB66] Bennett and Booty. *Appl. Opt.*, 5:41, 1966.
- [BB69] Bennett and Booty. *Appl. Opt.*, 8:2366, 1969.
- [BCM99] Birgin, Chambouleyron, and Martínez. Estimation of the optical constants and the thickness of thin films using unconstrained optimization. *Journal of Computational Physics*, 151:862–880, 1999.
- [BCM03] Birgin, Chambouleyron, Martínez, and Ventura. Estimation of optical parameters of very thin films. *Applied Numerical Mathematics*, 47:109–119, 2003.
- [Bir98] Birgin. Computational differentiation and applications. *Ph.D. Thesis – Department of Applied Mathematics, IMECC-UNICAMP*, 1998.
- [Bjö96] Björck. *Numerical Methods for Least Squares Problems*. SIAM, 1996.
- [BSS79] Bazaraa, Sherali, and Shetty. *Nonlinear Programming*. John Wiley & Sons, 1979.
- [BW59] Born and Wolf. *Principles of Optics*. Pergamon Press UK, 1959.
- [CM01] Chambouleyron and Martínez. Optical properties of dielectric and semiconductor thin films. *Handbook of Thin Films Materials*, 3:593–622, 2001.
- [CVBM02] Chambouleyron, Ventura, Birgin, and Martínez. Optical constants and thickness determination of very thin amorphous semiconductor films. *Journal of Applied Physics*, 92:3093–3102, 2002.
- [Gol96] Golub. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, 1996.
- [HD47] Hadley and Dennison. *Opt. Soc. Am.*, 37:451, 1947.
- [Hea50] Heavens. *Optical Properties of Thin Solid Films*. Butterworths Scientific Publications - London, 1950.
- [Lid81] Liddell. *Computer-aided Techniques for the Design of Multilayer Filters*. Adam Hilger Ltd, 1981.
- [Mar00] Martínez. Box-quacan and the implementations of augmented lagrangian algorithms for minimization with equality constraints. *Computational and Applied Mathematics*, 19:31–56, 2000.
- [mat] <http://www.wolfram.com>.
- [Pau86] Paulick. Inversion of normal-incidence (r,t) measurements to obtain n+ik for thin films. *Applied Optics*, 25:562–564, 1986.

- [Ray97] Raydan. The barzilai and borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem. *SIAM Journal on Optimization*, 7:26–33, 1997.
- [Swa83] Swanepoel. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. *Journal of Physics E: Sci. Instr.*, 16, 1983.
- [VBMC04] Ventura, Birgin, Martínez, and Chambouleyron. Optimization techniques for the estimation of the thickness and the optical parameters of thin films using reflectance data. *Journal of Applied Physics*, Aceito, 2004.

Índice de Figuras

1.1	Experimento físico de condensamento, através de evaporação, de um filme fino sob (ou sobre) um substrato.	2
1.2	Divisor de raios.	2
1.3	Experiência física de condensamento, através de evaporação, de filme fino em um substrato.	4
2.1	Representação esquemática de um sistema de m camadas paralelas, numeradas de 0 até $m - 1$. As interfaces L_i são numeradas para $i = 1, \dots, m - 1$. Há uma onda incidente na camada 0, cujas sucessivas transmissões e reflexões através das camadas internas, produzirá uma onda transmitida resultante na ‘camada final’ $m - 1$ e uma onda resultante refletida na ‘camada inicial’ 0. As tonalidades de cinza são meramente ilustrativas e não implicam que as camadas sejam de mesmo material.	10
2.2	Representação das <i>ondas resultantes</i> por camada. Como a incidência é normal, a linha das ondas transmitidas e refletidas é a mesma, e foram separadas acima por clareza. As ondas são identificadas por suas amplitudes, de modo que a onda incidente é E_T^0 , a onda transmitida na última camada é E_T^{m-1} e a onda refletida na primeira camada é E_R^0 . Como não há onda refletida na última camada, $E_R^{m-1} = 0$. As tonalidades de cinza são meramente ilustrativas e não implicam que as camadas sejam de mesmo material.	11
2.3	<i>Esquerda:</i> sistema com substrato finito, sendo a ‘última camada’ composta de ar. <i>Direita:</i> sistema onde o substrato é a ‘última camada’ e portanto semi-infinito.	15
2.4	Gráficos da transmitância, refletância, transmitância média e refletância média para o filme A de [BCM99]. Observe que a transmitância e refletância formam uma nuvem de pontos em torno da média.	16
2.5	Representação esquemática para a transmitância e a refletância no caso geral de N_1 filmes ‘anteriores’ e N_2 filmes ‘posteriores’, separados por um substrato transparente grosso conhecido.	17
2.6	<i>Esquerda:</i> representação de uma onda incidente no substrato (camada S) em direção a última camada ($m - 1$), bem como de suas ondas transmitida e refletida. <i>Centro:</i> representação de uma onda incidente na primeira camada, considerando o substrato (camada S) como última camada. <i>Direita:</i> representação de uma onda incidente na penúltima camada (substrato) em direção a primeira camada (ar), bem como de suas ondas transmitida e refletida.	21
2.7	<i>Esquerda:</i> representação esquemática para a transmitância e a refletância no caso de N filmes ‘em cima’ do substrato. <i>Direita:</i> representação esquemática para a transmitância e a refletância no caso de N filmes ‘embaixo’ do substrato.	24

- 2.8 Representação esquemática para o cálculo da transmitância e refletância média teórica para um sistema geral com $m - 1$ camadas e $m - 2$ filmes, com um substrato localizado na camada S . Logo, os filmes acima do substrato estão localizados nas camadas 1 até $S - 1$ (matriz B), enquanto os localizados embaixo do substrato, estão nas camadas $S + 1$ até $m - 2$ (matriz C). 30
- 3.1 *Esquerda:* curvas-zero para o filme A de [BCM99] no plano $n \times \alpha$. O comprimento de onda está fixo em $\lambda = 930\text{nm}$. Note que todos os pares (n, α) ao longo das curvas contínuas satisfazem a equação $\overline{\mathcal{T}}(n, \alpha) = \mathcal{T}^{obs}$, onde $\mathcal{T}^{obs} = 0.5930$, enquanto ao longo das curvas pontilhadas satisfazem $\overline{\mathcal{R}}(n, \alpha) = \mathcal{R}^{obs}$, onde $\mathcal{R}^{obs} = 0.4069$. Em ambos os casos, a única solução fisicamente aceitável é dada pelo par $(n, \alpha) = (3.73134401, 0.528553187)$ (ou, alternativamente, $\kappa = 0.000250055$). Também estão graficados os pontos (da tabela 3.1) para resolver $h = 0$, dado em (3.1.8). *Direita:* curvas de nível para a equação $\overline{\mathcal{T}}(n, \alpha) = \mathcal{T}^{obs}$, do mesmo exemplo ao lado, para vários valores distintos de \mathcal{T}^{obs} 35
- 3.2 Representação do índice de refração como função de λ . Na porção direita (sombreada), ele é decrescente, e portanto o chute inicial deve ser decrescente. Abaixo de um certo comprimento de onda, na região de alta energia, para λ decrescendo, n apresenta um valor máximo e depois decresce, em vez de crescer indefinidamente. 39
- 3.3 As soluções de ambos os gráficos são mostradas na tabela 3.2. *Acima:* curvas de nível de (3.1.9) para o filme real marc0625t (veja [CVBM02]) em $\lambda = 1222.42\text{nm}$ com $\mathcal{T} = 0.5749$. *Abaixo:* curvas de nível de (3.1.9) para o filme real PSU (veja [VBMC04]) em $\lambda = 582.32\text{nm}$ com $\mathcal{T} = 0.00753$ 40
- 4.1 *Esquerda:* transmitâncias *verdadeiras* (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de \mathcal{T} e \mathcal{R} (filme A, PUMA). Note que a recuperação de \mathcal{R} fornece um índice de refração ligeiramente melhor, enquanto que o coeficiente de absorção é melhor recuperado a partir do espectro de transmitância. *Centro:* Transmitâncias *verdadeiras* (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de \mathcal{T} e \mathcal{R} (filme B, PUMA). Note que o índice de refração do filme e do substrato possuem valores próximos. Como consequência, a amplitude da oscilação de interferência é menor. Nesse caso, as constantes ópticas são recuperadas com um grau similar de precisão. *Direita:* transmitâncias *verdadeiras* (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de \mathcal{T} e \mathcal{R} (filme muito fino C, FFM). As constantes ópticas desse filme muito fino são recuperadas de ambos os espectros de \mathcal{T} e \mathcal{R} . Porém, o coeficiente de absorção é melhor recuperado através dos dados de transmitância. 46
- 4.2 *Esquerda:* transmitâncias *verdadeiras* (traços) e recuperadas (círculos cheios), refletância (círculos abertos) e constantes ópticas de \mathcal{T} e \mathcal{R} (filme muito fino D, FFM). Note que a espessura de $d = 40\text{nm}$ foi igualmente recuperadas, a partir de \mathcal{T} e \mathcal{R} . O índice de refração é muito bem recuperados, enquanto que o coeficiente de absorção é encontrado para valores em excesso de 10^4 cm^{-1} . *Centro, em cima:* transmitâncias e refletâncias medidas de um filme $\alpha\text{-Si:H}$, depositado sobre vidro. *Centro, embaixo:* constantes ópticas recuperadas a partir de \mathcal{T} (círculos cheios) e \mathcal{R} (círculos abertos). A concordância entre elas é muito boa, bem como entre suas espessuras. Como no caso de filmes *gedanken*, a recuperação de $\alpha(\lambda)$ é melhor a partir de espectro de \mathcal{T} . *Direita:* recuperação das constantes ópticas do filme muito fino D, com 40nm , minimizando ambos e simultaneamente \mathcal{T} e \mathcal{R} (4.1.1). Note a perfeita concordância entre os valores *verdadeiros* e recuperados, mesmo para α muito pequeno. 48

4.3	<i>Esquerda:</i> constantes ópticas para o filme A (PUMA) <i>verdadeiras</i> (linha tracejada) e recuperados. Quadrados abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para três dígitos; círculos abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para dois dígitos. <i>Centro:</i> constantes ópticas para o filme C (FFM) <i>verdadeiras</i> (linha trecejada) e recuperadas. Quadrados abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para três dígitos; círculos abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para dois dígitos. <i>Direita:</i> constantes recuperadas para a refletância medida de um filme fino de <i>a</i> -Si:H (linha trecejada, como na figura 4.2, ao centro) e constantes obtidas usando dados arredondados. Quadrados abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para três dígitos; círculos abertos: dados de \mathcal{R} arredondados para dois dígitos. Os dados arredondados foram tirados de uma intervalo de amplitude selecionado, <i>i.e.</i> , $25\% < R < 55\%$	52
4.4	<i>Esquerda:</i> linha trecejada – valores <i>verdadeiros</i> das constantes do filme A. Símbolos abertos: constantes ópticas recuperadas do espectro de $R + \Delta R$. Círculos: $\Delta R = 0.2\%$; quadrados $\Delta R = 1\%$. <i>Direita:</i> linha trecejada – valores <i>verdadeiros</i> das constantes ópticas do filme C. Símbolos abertos: constantes ópticas recuperadas do espectro de $R + \Delta R$. Círculos: $\Delta R = 0.1\%$; quadrados $\Delta R = 0.5\%$	54
5.1	Tonalidades-de-nível para o filme A de [BCM99] no plano $n \times \tilde{\alpha}$. O comprimento de onda está fixo em $\lambda = 737\text{nm}$, com $\mathcal{T}^{obs} = 0.7493450$. A única solução fisicamente aceitável é dada pelo par $(n, \tilde{\alpha}) = (3.94269, 3.4170)$ (ou, alternativamente, $\kappa = 0.024009$). As faixas (em vermelho) em torno das curvas-zero são as que tem maior probabilidade de conter a solução de (5.1.8).	59
5.2	<i>Esquerda:</i> gráficos de $\lambda \times \hat{n}$ obtido, através de (5.1.8), para o filme A de [BCM99]. Note que para $\lambda = 737\text{nm}$, isto é, o comprimento de onda usado para gerar a figura 5.1 encontra um valor “errado”.	59
5.3	Recuperações do índice de refração e do coeficiente de absorção para o filme <i>gedanken</i> A de [BCM99], obtidas por TVA e regularização. As recuperações via PUMA também estão plotadas para comparação. Para a legenda “zero” veja 5.1.3.	61
5.4	Recuperações do índice de refração e do coeficiente de absorção para os filmes <i>gedanken</i> B (esquerda, em cima), C (esquerda, no meio), D (direita, no meio) e E (direita, em cima) de [BCM99], e os filmes reais marc0098 e marc0625 de [CVBM02], obtidas por TVA e regularização. As recuperações via PUMA também estão plotadas para comparação. Para a legenda “zero” veja 5.1.3.	63
6.1	Valores de τ para 1, 2 e 3 filmes. Se, por exemplo, tomamos 100 pontos para 1 filmes, devemos tomar 200 e 300 pontos para 2 e 3 filmes, respectivamente.	67
6.2	Sistemas com filmes idênticos . <i>Esquerda:</i> representação esquemática para a transmitância do sistema s1Vs1 . <i>Direita:</i> representação esquemática para a transmitância dos sistemas s1s1V e Vs1s1 . Observe que nesse caso, a transmitância é a mesma, isto é, quer seja a incidência pelo lado dos filmes quer seja pelo lado do substrato.	68
6.3	<i>Esquerda:</i> espectros de transmitância no intervalo 540–1530nm, para os sistemas s1Vs1 , s1s1V e Vs1s1 . Observe que, devido à simetria da transmitância, há apenas dois sistema distintos possíveis: com o substrato ‘no meio dos filmes’ e ‘na extremidade’. <i>Direita:</i> espectros para transmitância, no intervalo 540–2100nm, para os sistemas com dois filmes diferentes. Observe que, devido à simetria da transmitância, há apenas três conjuntos distintos: s1g6Vt/Vg6s1t , g6s1Vt/Vs1g6t e s1Vg6t/g6Vs1t . Os espectros de sistemas com apenas um filme também aparecem para comparação.	68
6.4	Recuperação para filmes <i>gedanken</i> superpostos (do mesmo material)). Para comparação, testamos também sistemas com apenas um filme: s1Vt e Vs1t com 100nm e s2Vt e Vs2t com 200nm.	69

6.5	Representação esquemática para as regiões de opacidade e transparência para os filmes de silício e germânio. O filme de silício é opaco à esquerda do ponto A e transparente à direita de B. O filme de germânio é opaco à esquerda de C e transparente à direita de D. Note que, para um sistema com esses dois filmes, <i>somente a partir do ponto C</i> haverá transmitância não-nula. Porém, nessa região, o filme de silício é transparente e a absorção é praticamente nula.	70
6.6	Índices de refração (coluna da esquerda) e coeficientes de absorção (coluna da direita) recuperados no intervalo do espectro 1000–2100nm. <i>Metade superior</i> : recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s1 (de silício com 100nm; primeira linha) e g6 (de germânio com 600nm; segunda linha). <i>Metade inferior</i> : recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s5 (de silício com 500nm; terceira linha) e g6 (quarta linha). <i>Obs</i> : a segunda e quarta linha se referem à recuperação do mesmo filme, mas em situações (sistemas) distintas.	73
6.7	Índices de refração (coluna da esquerda) e coeficientes de absorção (coluna da direita) recuperados no intervalo do espectro 650–2000nm. <i>Metade superior</i> : recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s1 (de silício com 100nm; primeira linha) e g6 (de germânio com 600nm; segunda linha). <i>Metade inferior</i> : recuperações para os sistemas compostos pelos filmes s5 (de silício com 500nm; terceira linha) e g6 (quarta linha). <i>Obs</i> : a segunda e quarta linha se referem à recuperação do mesmo filme, mas em situações (sistemas) distintas.	74
A.1	Reflexões e transmissões com duas interfaces. Por simplicidade e clareza, as legendas das ondas são suas amplitudes.	90
A.2	Transmissões à esquerda, como função das reflexões internas.	91
D.1	Índices de refração (à esquerda; expressões analíticas na tabela D.1) e coeficientes de absorção (à direita; expressões analíticas na tabela D.2) usados para gerar os filmes <i>gedanken</i> de silício (Si), germânio (Ge) e óxido metálico (Ox).	106

Índice de Tabelas

2.1	Índice de refração, coeficiente de atenuação e espessura para N_1 filmes na porção anterior e N_2 filmes na porção posterior do sistema de camadas, além do substrato e das camadas (de ar) inicial e final (veja representação esquemática na figura 2.5).	17
2.2	Índice de refração, coeficiente de atenuação e espessura para N filmes (na parte ‘frontal’ do sistema de camadas) além do substrato e das camadas (de ar) inicial e final.	25
2.3	Constantes para N filmes na parte posterior, além das camadas inicial e do substrato.	26
2.4	Constantes para um filme na parte frontal, <i>i.e.</i> , a incidência é pelo lado do filme.	27
3.1	Valores de n , κ , α e $\ h\ _2$ para 7 iterações do método de Newton para resolver $h = 0$ (dado em (3.1.8)). Os pontos x_i , correspondentes a essas iterações, estão plotados no gráfico 3.1, à esquerda.	34
3.2	Valores recuperados, para os métodos PUMA e FFM, de n , κ , α e \mathcal{T} para os filmes reais <code>marc0625t</code> e <code>PSU</code> . Veja gráfico 3.3.	40
4.1	Espessuras e erros quadráticos recuperados pelo PUMA (usando dados de <i>refletância</i>) para os filmes A e B, gerados por computador.	47
4.2	Espessuras e erros quadráticos recuperados pelo FFM (usando dados de <i>refletância</i>) para os filmes C e D, gerados por computador.	47
4.3	Espessura e erro quadrático obtidos com PUMA a partir do espectro de <i>transmitância</i> com ruído, de um filme a-Si:H <i>gedanken</i>	50
4.4	Espessura e erro quadrático obtidos com PUMAA partir do espectro de <i>refletância</i> com ruído, de um filme a-Si:H <i>gedanken</i>	51
4.5	Espessuras e erros quadráticos recuperados obtidos com PUMA e FFM, respectivamente, através da inversão dos espectros de \mathcal{R} dos filmes A e C com erro sistemático.	53
5.1	Valores de f , da norma das restrições e das espessuras recuperadas para os filmes testados.	58
5.2	Valores de f , h , $V_{2,2}(\mathbf{n})$ e $V_{2,2}(\boldsymbol{\kappa})$ para os filmes testados.	60
6.1	Recuperações para sistemas com um e dois filme, no intervalo do espectro 540–1530nm.	69
6.2	Espessura, ponto de inflexão e erro quadrático recuperados para sistemas com dois filmes, onde o filme de silício tem espessura de 100nm (<code>s1</code>) e 500nm (<code>s5</code>). O intervalo utilizado é 1000–2100nm.	71
6.3	Espessura, ponto de inflexão e erro quadrático recuperados para sistemas com dois filmes, onde o filme de silício tem espessura de 100nm (<code>s1</code>) e 500nm (<code>s5</code>). O intervalo utilizado é 650–2000nm.	72

A.1	Conveção de nomes para as variáveis das ondas parciais.	90
B.1	Matrizes $L_\nu, X_\nu, R_\nu \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$	99
D.1	Fórmulas para os índices de refração dos filmes <i>gedanken</i> , gerados de acordo com a equação (3.2.13), variando apenas β e M . O índice de refração do substrato também é gerado dessa forma.	105
D.2	Fórmulas para gerar o coeficiente de absorção dos filmes <i>gedanken</i> . Note que a fórmula fornece $\ln[\alpha(E)]$ e não $\alpha(E)$ ou $\alpha(\lambda)$	105

Equação das Ondas Transmitidas e Refletidas (Recursivo)

A.1 Uma Interface em $x = 0$

Suponhamos dois meios distintos e separados, porém não disjuntos, representados no plano e com interface em $x = 0$. Suponhamos uma onda inicial em $x < 0$ tal que $k > 0$ (isto é, a onda “vai” para a direita). A equação da onda é dada por

$$u(x, t) = E \exp[i(w_R t - k_R x)] \quad (\text{A.1.1})$$

Quando a onda incidente bate em $x = 0$, ela gera uma onda refletida e uma onda transmitida, cujas equações são

$$\begin{aligned} \text{onda refletida } (x < 0) : u_R(x, t) &= E_R \exp[i(w_R t - k_R x)] \\ \text{onda transmitida } (x > 0) : u_T(x, t) &= E_T \exp[i(w_T t - k_T x)] \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

Para determinar as constantes E_R, w_R, k_R (da reflexão) e E_T, w_T, k_T (da transmissão) em função de E, w, k (da onda incidente), vamos impor duas condições fisicamente razoáveis. A primeira condição (continuidade em x) diz que

$$\text{Onda resultante em } x < 0 \text{ avaliada em } x = 0 = \text{Onda resultante em } x > 0 \text{ avaliada em } x = 0 \quad (\text{A.1.3})$$

ou seja,

$$u(0, t) + u_R(0, t) = u_T(0, t) \quad (\text{A.1.4})$$

para todo $t \geq 0$. Substituindo as fórmulas dadas em (A.1.2) na equação acima para $x = 0$, obtemos

$$E e^{iwt} + E_R e^{iw_R t} = E_T e^{iw_T t} \quad (\text{A.1.5})$$

Para $t = 0$, $E + E_R = E_T$. Além disso, ao dividir (A.1.5) por $e^{iw_T t}$, o lado direito independe de t . Dessa forma, ao derivar com relação a t obtemos

$$i(w - w_T) E e^{i(w-w_T)t} + i(w_R - w_T) E_R e^{i(w_R-w_T)t} = 0 \quad (\text{A.1.6})$$

Rearrangando a equação acima, temos

$$\frac{E}{E_R} (w - w_T) = -(w_R - w_T) e^{i(w_R-w_T-w+w_T)t} \quad (\text{A.1.7})$$

Novamente, o lado esquerdo é constante com relação a t . Derivando mais uma vez, temos

$$0 = -(w_R - w_T)(w_R - w) e^{i(w_R-w)t} \quad (\text{A.1.8})$$

donde podemos concluir que $w = w_R = w_T$, a equação acima é válida para todo t .

A segunda condição (continuidade na derivada de x) diz que

$$\begin{aligned} \text{Derivada da onda resultante} &= \text{Derivada da onda resultante} \\ \text{em } x < 0, \text{ avaliada em } x = 0 &\quad \text{em } x > 0, \text{ avaliada em } x = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.1.9})$$

ou seja,

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} + \frac{\partial u_R(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial u_T(0, t)}{\partial x} \quad (\text{A.1.10})$$

para todo $t \geq 0$. Substituindo a derivada das fórmulas dadas em (A.1.2) na equação acima para $x = 0$, obtemos

$$-ik E e^{i\omega t} - ik_R E_R e^{i\omega_R t} = -ik_T E_T e^{i\omega_T t} \quad (\text{A.1.11})$$

ou

$$k E + k_R E_R = k_T E_T \quad (\text{A.1.12})$$

Sabemos de [CM01] que a constante k depende do meio através de

$$k = \pm \frac{2\pi \tilde{n}}{\lambda} \quad (\text{A.1.13})$$

onde $\tilde{n} \in \mathbb{C}$ é índice de refração complexo $\tilde{n} = n - i\kappa$. O sinal depende se a onda tem a mesma direção da onda incidente.

Logo,

$$k_R = -\frac{2\pi\tilde{n}_0}{\lambda} = -k \quad \text{e} \quad k_T = \frac{2\pi\tilde{n}_1}{\lambda} = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} \frac{2\pi\tilde{n}_0}{\lambda} = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k \quad (\text{A.1.14})$$

onde o sinal de k_R é negativo, porque a onda anda no sentido contrário ao da onda incidente. Dessa forma, (A.1.12) se torna

$$\tilde{n}_0 E - \tilde{n}_0 E_R = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} E_T \quad (\text{A.1.15})$$

Essa equação, junto com $E + E_R = E_T$ formam o sistema

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \tilde{n}_0 & \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_R \\ E_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E \\ \tilde{n}_0 E \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.16})$$

cuja solução, em termos de E , é

$$E_R = E \left(\frac{\tilde{n}_0 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \quad \text{e} \quad E_T = E \left(\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \quad (\text{A.1.17})$$

Portanto, podemos resumir as equação das ondas da seguinte forma

$$\begin{aligned} \text{onda refletida: } u_R(x, t) &= E \left(\frac{\tilde{n}_0 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp[i(\omega t + kx)] \\ &\quad (\text{para } x \leq 0) \\ \text{onda transmitida: } u_T(x, t) &= E \left(\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp \left[i \left(\omega t - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} kx \right) \right] \\ &\quad (\text{para } x \geq 0) \end{aligned} \quad (\text{A.1.18})$$

A.1.1 Interface em $x = L$ (generalização)

Analogamente, para interface em $x = L$ as condições são

$$u(L, t) + u_R(L, t) = u_T(L, t), \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{A.1.19})$$

$$\frac{\partial u(L, t)}{\partial x} + \frac{\partial u_R(L, t)}{\partial x} = \frac{\partial u_T(L, t)}{\partial x}, \quad \forall t \geq 0 \quad (\text{A.1.20})$$

Seja a equação da onda com interface em $x = 0$ dada por $u_0(x, t)$. Então a equação da onda com interface em $x = L$ é $u(x, t) = u_0(x - L, t)$. Mas isso nos leva a

$$u(x, t) = u_0(x - L, t) = E \exp[i(\omega t - k(x - L))] = E e^{ikL} \exp[i(\omega t - kx)] \quad (\text{A.1.21})$$

Chamando $\tilde{E} = E e^{ikL}$, temos que

$$u(x, t) = \tilde{E} \exp[i(\omega t - kx)] \quad (\text{A.1.22})$$

o qual tem a forma desejada. Por outro lado, sejam $u_{R0}(x, t)$ e $u_R(x, t)$ a equação da onda refletida com interface em $x = 0$ e $x = L$, respectivamente. Logo temos

$$\begin{aligned} u_R(x, t) = u_{R0}(x - L, t) &= E \left(\frac{\tilde{n}_0 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp[i(\omega t + k(x - L))] \\ &= \tilde{E} e^{-ikL} \left(\frac{\tilde{n}_0 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp[i(\omega t + k(x - L))] \\ &= \tilde{E} e^{-2ikL} \left(\frac{\tilde{n}_0 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp[i(\omega t + kx)] \end{aligned} \quad (\text{A.1.23})$$

Analogamente para a transmissão

$$\begin{aligned} u_T(x, t) = u_{T0}(x - L, t) &= E \left(\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp \left[i \left(\omega t - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k(x - L) \right) \right] \\ &= \tilde{E} e^{-ikL} \left(\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp \left[i \left(\omega t - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k(x - L) \right) \right] \\ &= \tilde{E} \left(\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp \left[ikL \left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - 1 \right) \right] \exp \left[i \left(\omega t - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} kx \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.1.24})$$

Portanto, podemos resumir da seguinte forma:

onda refletida:	$u_R(x, t) = E \left(\frac{\tilde{n}_0 - \tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp(-2ikL) \exp[i(\omega t + kx)]$	(A.1.25)
(para $x \leq L$)		
onda transmitida:	$u_T(x, t) = E \left(\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp \left[ikL \left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - 1 \right) \right] \exp \left[i \left(\omega t - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} kx \right) \right]$	
(para $x \geq L$)		

A.2 Agora com duas interfaces: L_1 e L_2

Para duas interfaces, há três meios onde as ondas podem estar. Como podemos ver na figura A.2, no meio interno há infinitas reflexões as quais geram infinitas transmissões em ambos os meios externos, através das respectivas interfaces. Para cada uma das ondas *parciais* envolvidas queremos determinar suas amplitude, como função da onda incidente e dos meios. Na tabela A.1 apresentamos a convenção que usamos para o nome das variáveis das ondas parciais.

Das seções anteriores, sabemos que

$$w_j^E = w_j^D = w_j = w \quad (\text{A.2.1})$$

nome da onda	local	amplitude	k	w	símbolo
onda incidente	$x < L_1$	E	k	w	$u(x, t)$
onda inicial refletida	$x < L_1$	R	k_R	w_R	$u_R(x, t)$
onda inicial transmitida	$L_1 < x < L_2$	T	k_T	w_T	$u_T(x, t)$
ondas transmitidas a esquerda	$x < L_1$	T_j^E	k_j^E	w_j^E	$u_j^E(x, t)$
ondas transmitidas a direita	$x > L_2$	T_j^D	k_j^D	w_j^D	$u_j^D(x, t)$
ondas refletidas no meio	$L_1 < x < L_2$	R_j	k_j	w_j	$u_j(x, t)$

TABELA A.1 – Conveção de nomes para as variáveis das ondas parciais.

para todo j . Além disso, sabendo que $k_T = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}k$, concluímos que $k_1 = -\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}k$, pois a reflexão apenas inverte o sinal da velocidade de propagação. Como no meio \tilde{n}_1 há apenas reflexões, temos que

$$k_j = (-1)^j \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}k \quad (\text{A.2.2})$$

Dessa forma, podemos perceber que

$$\begin{aligned} j \text{ par} &\Rightarrow k_j = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}k &\Rightarrow w_j t - k_j x &= wt - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kx \\ j \text{ ímpar} &\Rightarrow k_j = -\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}k &\Rightarrow w_j t - k_j x &= wt + \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kx \end{aligned} \quad (\text{A.2.3})$$

Portanto, as reflexões devem ser separadas em pares e ímpares. Como em (??) a ordem do somatório não importa, podemos considerar a soma par e a ímpar. Para calcular o k_j^E , basta observar que

$$k_j^E = \frac{\tilde{n}_0}{\tilde{n}_1} k_{2j-1} = \frac{\tilde{n}_0}{\tilde{n}_1} (-1)^j \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k = -k \quad (\text{A.2.4})$$

pois toda transmissão à esquerda precede uma reflexão (com índice) ímpar e agora estamos indo do meio \tilde{n}_1 para o \tilde{n}_0 . Olhando para a figura A.2, podemos ver que

$$k_j^D = \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} k_{2j-2} \quad (\text{A.2.5})$$

Como $2j - 2 = 2(j - 1)$ é par, temos que

$$k_{2j-2} = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k \quad (\text{A.2.6})$$

donde podemos concluir que

$$k_j^D = \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0} k \quad (\text{A.2.7})$$

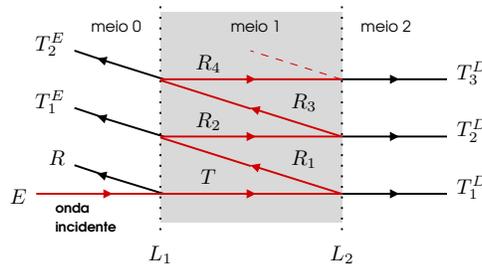


FIGURA A.1 – Reflexões e transmissões com duas interfaces. Por simplicidade e clareza, as legendas das ondas são suas amplitudes.

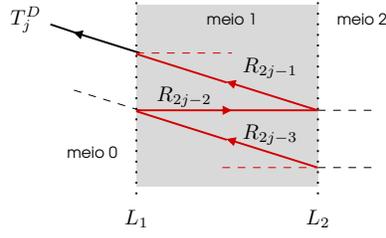


FIGURA A.2 – Transmissões à esquerda, como função das reflexões internas.

A.2.1 Onda transmitida em $x < L_1$

Para encontrar a onda transmitida em $x < L_1$, devemos calcular

$$T^E = \sum_{j=1}^{\infty} T_j^E \exp[i(w_j^E t - k_j^E x)] \quad (\text{A.2.8})$$

Mas

$$\sum_{j=1}^{\infty} T_j^E e^{i[w_j^E t - k_j^E x]} = e^{i[wt + kx]} \sum_{j=1}^{\infty} T_j^E \quad (\text{A.2.9})$$

e dessa forma nos interessa avaliar a soma infinita. Olhando para a figura A.2, vemos que usando (A.1.25) podemos expressar T_j^E em função de R_{2j-1} para $j = 1, 2, 3, \dots$, da seguinte forma

$$T_j^E = t_{10} R_{2j-1} \quad \text{onde} \quad t_{10} = \left(\frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \exp \left\{ ikL_1 \left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - 1 \right) \right\} \quad (\text{A.2.10})$$

De maneira semelhante, usando (A.1.25) podemos expressar R_{2j-1} em função de R_{2j-3} , para $j = 2, 3, \dots$, da seguinte forma

$$R_{2j-1} = r R_{2j-3} \quad \text{onde} \quad r = \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \exp \left\{ -2ik \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} [L_1 - l_2] \right\} \quad (\text{A.2.11})$$

donde concluímos que

$$R_{2j-1} = r R_{2j-3} = r^2 R_{2j-5} = \dots = r^{j-1} R_1 \quad (\text{A.2.12})$$

para $2j - 1 \geq 1$, isto é, para $j \geq 1$. Combinando (A.2.10) e (A.2.12) obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} T_j^E &= t_{10} \sum_{j=1}^{\infty} R_{2j-1} \\ &= t_{10} \sum_{j=1}^{\infty} r^{j-1} R_1 \\ &= t_{10} R_1 \sum_{j=1}^{\infty} r^{j-1} \\ &= t_{10} R_1 \frac{1}{1-r} \end{aligned} \quad (\text{A.2.13})$$

pois como $|r| < 1$, a série infinita converge¹. Substituindo t_{10} , r e R_1 acima, onde

$$\begin{aligned} R_1 &= T \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \exp \left\{ -2i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2 \right\} \\ &= E \left(\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \right) \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \exp \left\{ ik \left[-2 \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} (L_2 - L_1) - L_1 \left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} + 1 \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.2.14})$$

¹basta ver que se $a, b > 0$ então $a - b < a + b$

podemos, finalmente, chamando $d = L_2 - L_1$, escrever

$$\sum_{j=1}^{\infty} T_j^E = E \left[\frac{4n\tilde{n}_1}{(n + \tilde{n}_1)^2} \right] \left[\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right] \exp \left\{ -2ik \left[\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} d + L_1 \right] \right\} \frac{1}{1 - \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \right) \exp \left\{ -2ik \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} d \right\}} \quad (\text{A.2.15})$$

A.2.2 *Onda resultante em $L_1 < x < L_2$*

Nesse meio, devemos calcular

$$\sum_{j=1}^{\infty} R_{2j} \quad \text{e} \quad \sum_{j=1}^{\infty} R_{2j-1} \quad (\text{A.2.16})$$

Já sabemos de (A.2.12) que

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} R_{2j-1} &= R_1 \left(\frac{1}{1-r} \right) \\ &= E \left(\frac{2\tilde{n}_0}{n + \tilde{n}_1} \right) \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \exp \left\{ ik \left[-2 \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} L_2 + L_1 \left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - 1 \right) \right] \right\} \frac{1}{1 - \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \right) \exp \left\{ -2ik \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} d \right\}} \end{aligned} \quad (\text{A.2.17})$$

Para a soma par, basta perceber que as contas feitas em (A.2.12), para $\sum_j R_{2j-1}$, são simétricas. Tanto faz refletir primeiro em L_1 e depois em L_2 quanto o inverso. Portanto, também vale a iteração $R_{2j} = r R_{2j-2}$, o que fornece $R_{2j} = r^{j-1} R_2$. Dessa forma, após um certo convencimento, temos que

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{\infty} R_{2j} &= R_2 \sum_{j=1}^{\infty} r^{j-1} = R_2 \frac{1}{1-r} \\ &= R_1 \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \exp \left(2i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} L_1 \right) \frac{1}{1-r} \\ &= E \frac{2\tilde{n}_0(\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2)(\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0)}{(\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1)^2(\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2)} \exp \left[-2i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} kd + ikL_1 \left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - 1 \right) \right] \frac{1}{1 - \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \right) \exp \left\{ -2ik \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} d \right\}} \end{aligned} \quad (\text{A.2.18})$$

A.2.3 *Onda resultante em $x > L_2$*

Nos resta então calcular $T^D = \sum_j T_j^D$. De (A.1.25), sabemos que

$$T_1^D = t_{12} T \quad \text{onde} \quad t_{12} = \frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \exp \left[i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} kL_2 \left(\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} - 1 \right) \right] \quad (\text{A.2.19})$$

e de modo geral, $T_j^D = t_{12} R_{2j} = \dots = t_{12} r^{j-1} T$, para todo j . Logo

$$\sum_{j=1}^{\infty} T_j^D = \sum_{j=1}^{\infty} t_{12} r^{j-1} T = t_{12} T \sum_{j=1}^{\infty} r^{j-1} = t_{12} T \frac{1}{1-r} \quad (\text{A.2.20})$$

Escrevendo por extenso, temos

$$\sum_{j=1}^{\infty} T_j^D = E \frac{4\tilde{n}_0\tilde{n}_1}{(\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2)(\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1)} \exp \left[i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} kL_2 \left(\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} - 1 \right) \right] \exp \left[ikL_1 \left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - 1 \right) \right] \frac{1}{1 - \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right) \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \right) \exp \left[-2ik \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} d \right]} \quad (\text{A.2.21})$$

A.2.4 Verificando a continuidade nas interfaces

a) **Verificando o contorno em $x = L_1$**

Devemos ter que as ondas resultantes, a esquerda e a direita da interface em $x = L_1$, sejam iguais avaliadas nesse ponto. Isto é, vamos verificar se

$$u(L_1, t) + u_R(L_1, t) + \sum_{j=1}^{\infty} u_j^E(L_1, t) = u_T(L_1, t) + \sum_{j=1}^{\infty} u_j(L_1, t) \quad (\text{A.2.22})$$

Como vimos na seção A.1.1, as ondas u, u_R, u_T foram escolhidas de tal forma que

$$u(L_1, t) + u_R(L_1, t) = u_T(L_1, t) \quad (\text{A.2.23})$$

o que transforma (A.2.31) em

$$\sum_{j=1}^{\infty} u_j^E(L_1, t) = \sum_{j=1}^{\infty} u_j(L_1, t) \quad (\text{A.2.24})$$

Abrindo a equação acima temos

$$\sum_j T_j^E e^{i[wt+kL_1]} = \sum_j R_{2j-1} e^{i[wt+\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1]} + \sum_j R_{2j} e^{i[wt-\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1]} \quad (\text{A.2.25})$$

Pondo em evidência a parte constante e eliminando e^{iwt} , comum a todos os fatores, obtemos

$$e^{ikL_1} \sum_j T_j^E = e^{ik\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1} \sum_j R_{2j-1} + e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1} \sum_j R_{2j} \quad (\text{A.2.26})$$

Substituindo os somatórios, temos

$$e^{ikL_1} t_{10} R_1 \frac{1}{1-r} = e^{ik\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1} R_1 \frac{1}{1-r} + e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1} R_1 \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \exp\left(2i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1\right) \frac{1}{1-r} \quad (\text{A.2.27})$$

Simplificando e expandindo t_{10} , obtemos

$$e^{ikL_1} \frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \exp\left[ikL_1\left(\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - 1\right)\right] = e^{ik\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1} + e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1} \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \exp\left(2i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1\right) \quad (\text{A.2.28})$$

Agrupando as exponenciais, temos

$$\frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} \exp\left(ik\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1\right) = \exp\left(ik\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1\right) + \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \exp\left(ik\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}L_1\right) \quad (\text{A.2.29})$$

Simplificando,

$$\frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} = 1 + \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \quad (\text{A.2.30})$$

que é verdadeiro. Portanto, a condição de contorno se verifica para $x = L_1$. Agora vamos verificar a derivada, isto é, devemos verificar se

$$\frac{\partial u}{\partial x}(L_1, t) + \frac{\partial u_R}{\partial x}(L_1, t) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\partial u_j^E}{\partial x}(L_1, t) = \frac{\partial u_T}{\partial x}(L_1, t) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\partial u_j}{\partial x}(L_1, t) \quad (\text{A.2.31})$$

Felizmente, as contas anteriores podem e serão aproveitadas. Como no caso quando tínhamos uma interface, mostramos que vale a equação

$$\frac{\partial u}{\partial x}(L_1, t) + \frac{\partial u_R}{\partial x}(L_1, t) = \frac{\partial u_T}{\partial x}(L_1, t) \quad (\text{A.2.32})$$

Logo, em (A.2.39) trocando L_1 por x , derivando e avaliando em $x = L_1$, temos

$$ik \sum_j T_j^E e^{i[wt+kL_1]} = i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k \sum_j R_{2j-1} e^{i[wt+\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1]} - i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k \sum_j R_{2j} e^{i[wt-\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1]} \quad (\text{A.2.33})$$

ou

$$\sum_j T_j^E e^{i[wt+kL_1]} = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} \sum_j R_{2j-1} e^{i[wt+\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1]} - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} \sum_j R_{2j} e^{i[wt-\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_1]} \quad (\text{A.2.34})$$

Repetindo os mesmo passos de antes, temos que

$$\frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} - \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \quad (\text{A.2.35})$$

ou

$$\frac{2\tilde{n}_0}{\tilde{n}_0 + \tilde{n}_1} = 1 - \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_0} \quad (\text{A.2.36})$$

o que, de novo, é verdadeiro.

b) **Verificando o contorno em $x = L_2$**

Devemos ter que as ondas resultantes, a esquerda e a direita da interface em $x = L_2$, sejam iguais avaliadas nesse ponto. Isto é, vamos verificar se

$$u_T(L_2, t) + \sum_{j=1}^{\infty} u_j(L_2, t) = \sum_{j=1}^{\infty} u_j^D(L_2, t) \quad (\text{A.2.37})$$

Abrindo a equação acima, temos

$$T e^{i[wt+\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2]} + \sum_j R_{2j-1} e^{i[wt+\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2]} + \sum_j R_{2j} e^{i[wt-\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2]} = \sum_j T_j^D e^{i[wt-\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0}kL_2]} \quad (\text{A.2.38})$$

Pondo em evidência a parte constante e eliminando e^{iwt} , comum a todos os fatores, obtemos

$$e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} T + e^{i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \sum_j R_{2j-1} + e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \sum_j R_{2j} = e^{-i\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0}kL_2} \sum_j T_j^D \quad (\text{A.2.39})$$

Agrupando os termos com mesma exponencial, temos

$$e^{i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \sum_j R_{2j-1} + e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \left(T + \sum_j R_{2j} \right) = e^{-i\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0}kL_2} \sum_j T_j^D \quad (\text{A.2.40})$$

e substituindo os somatórios

$$e^{i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} T \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} e^{-2i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \frac{1}{1-r} + e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \left(T + R_2 \frac{1}{1-r} \right) = e^{-i\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0}kL_2} t_{12} T \frac{1}{1-r} \quad (\text{A.2.41})$$

Como $R_2 = rT$, após eliminar os fatores comuns, temos

$$e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} + e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} = e^{-i\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0}kL_2} t_{12} \quad (\text{A.2.42})$$

Agrupando os termos com mesma exponencial,

$$e^{-i\frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0}kL_2} \left(\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} + 1 \right) = e^{-i\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0}kL_2} t_{12} \quad (\text{A.2.43})$$

ou

$$\exp \left[i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2 \left(\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} - 1 \right) \right] \frac{2\tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} = t_{12} \quad (\text{A.2.44})$$

o que é a definição de t_{12} e portanto é verdade. Agora vamos verificar a condição de contorno em $x = L_2$. Isto é, queremos verificar se

$$\frac{\partial u_T}{\partial x}(L_2, t) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\partial u_j}{\partial x}(L_2, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\partial u_j^D}{\partial x}(L_2, t) \quad (\text{A.2.45})$$

Mais uma vez, vamos aproveitar as contas. Após algum convencimento, as condição na derivada pode ser obtida acrescentando alguns termos na equação (A.2.42), de modos que obtemos

$$i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k e^{-i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2} \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} - i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k e^{-i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2} = -i \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0} k e^{-i \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0} k L_2} t_{12} \quad (\text{A.2.46})$$

Simplificando, temos

$$-\tilde{n}_1 e^{-i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2} \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} + \tilde{n}_1 e^{-i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2} = \tilde{n}_2 e^{-i \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0} k L_2} t_{12} \quad (\text{A.2.47})$$

ou

$$e^{-i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2} \tilde{n}_1 \left(-\frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} + 1 \right) = \tilde{n}_2 e^{-i \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_0} k L_2} t_{12} \quad (\text{A.2.48})$$

Finalmente, temos que

$$\exp \left[i \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} k L_2 \left(\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} - 1 \right) \right] \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_2} \frac{2\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} = t_{12} \quad (\text{A.2.49})$$

o que, novamente, é a definição de t_{12} e portanto é verdade.

Detalhes da Implementação para Vários Filmes

Embora possamos fazer as contas na sua forma complexa, preferimos realizá-las usando variáveis reais, já que variáveis complexas com precisão dupla não são padrão em Fortran ou C. Dessa forma, dado que $B \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$, vamos particioná-la em $B = B^R + iB^I$, onde

$$B^R \equiv \begin{bmatrix} B_{11}^R & B_{12}^R \\ B_{21}^R & B_{22}^R \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad B^I \equiv \begin{bmatrix} B_{11}^I & B_{12}^I \\ B_{21}^I & B_{22}^I \end{bmatrix} \quad (\text{B.0.1})$$

e $B^R, B^I \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$.

B.1 Derivadas Parciais de $\overline{\mathcal{T}}(\lambda)$ e $\overline{\mathcal{R}}(\lambda)$.

De maneira análoga à separação da matriz B em parte real e imaginária, definimos as matrizes das derivadas parciais de B por

$$\frac{\partial B^R}{\partial n_\nu} = \begin{bmatrix} \frac{\partial B_{11}^R}{\partial n_\nu} & \frac{\partial B_{12}^R}{\partial n_\nu} \\ \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} & \frac{\partial B_{22}^R}{\partial n_\nu} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \frac{\partial B^I}{\partial n_\nu} = \begin{bmatrix} \frac{\partial B_{11}^I}{\partial n_\nu} & \frac{\partial B_{12}^I}{\partial n_\nu} \\ \frac{\partial B_{21}^I}{\partial n_\nu} & \frac{\partial B_{22}^I}{\partial n_\nu} \end{bmatrix} \quad (\text{B.1.1})$$

e

$$\frac{\partial B^R}{\partial \kappa_\nu} = \begin{bmatrix} \frac{\partial B_{11}^R}{\partial \kappa_\nu} & \frac{\partial B_{12}^R}{\partial \kappa_\nu} \\ \frac{\partial B_{21}^R}{\partial \kappa_\nu} & \frac{\partial B_{22}^R}{\partial \kappa_\nu} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \frac{\partial B^I}{\partial \kappa_\nu} = \begin{bmatrix} \frac{\partial B_{11}^I}{\partial \kappa_\nu} & \frac{\partial B_{12}^I}{\partial \kappa_\nu} \\ \frac{\partial B_{21}^I}{\partial \kappa_\nu} & \frac{\partial B_{22}^I}{\partial \kappa_\nu} \end{bmatrix} \quad (\text{B.1.2})$$

com $\frac{\partial B^R}{\partial n_\nu}, \frac{\partial B^I}{\partial n_\nu}, \frac{\partial B^R}{\partial \kappa_\nu}, \frac{\partial B^I}{\partial \kappa_\nu} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. Sabemos de (2.3.5) que a transmitância média pode ser escrita da seguinte forma

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda) = \frac{4}{(1+s)^2 \left[(B_{22}^R)^2 + (B_{22}^I)^2 \right] - (1-s)^2 \left[(B_{12}^R)^2 + (B_{12}^I)^2 \right]} \quad (\text{B.1.3})$$

Portanto, suas derivas parciais são

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{T}}}{\partial n_\nu} = - \frac{8 \left((1+s)^2 \left[B_{22}^R \frac{\partial B_{22}^R}{\partial n_\nu} + B_{22}^I \frac{\partial B_{22}^I}{\partial n_\nu} \right] - (1-s)^2 \left[B_{12}^R \frac{\partial B_{12}^R}{\partial n_\nu} + B_{12}^I \frac{\partial B_{12}^I}{\partial n_\nu} \right] \right)}{\left((1+s)^2 \left[(B_{22}^R)^2 + (B_{22}^I)^2 \right] - (1-s)^2 \left[(B_{12}^R)^2 + (B_{12}^I)^2 \right] \right)^2} \quad (\text{B.1.4})$$

$$\frac{\partial \overline{\mathcal{T}}}{\partial \kappa_\nu} = - \frac{8 \left((1+s)^2 \left[B_{22}^R \frac{\partial B_{22}^R}{\partial \kappa_\nu} + B_{22}^I \frac{\partial B_{22}^I}{\partial \kappa_\nu} \right] - (1-s)^2 \left[B_{12}^R \frac{\partial B_{12}^R}{\partial \kappa_\nu} + B_{12}^I \frac{\partial B_{12}^I}{\partial \kappa_\nu} \right] \right)}{\left((1+s)^2 \left[(B_{22}^R)^2 + (B_{22}^I)^2 \right] - (1-s)^2 \left[(B_{12}^R)^2 + (B_{12}^I)^2 \right] \right)^2} \quad (\text{B.1.5})$$

As derivadas da refletância média são feitas da seguinte forma

$$\frac{\partial \bar{\mathcal{R}}}{\partial n_\nu} = \frac{\partial}{\partial n_\nu} \left(\frac{I_u}{\rho} \right) - \frac{\left[\rho (\rho + I_d) \frac{\partial}{\partial n_\nu} [S_u S_d + C_u C_d] - (S_u S_d + C_u C_d) \frac{\partial}{\partial n_\nu} [\rho (\rho + I_d)] \right]}{[\rho (\rho + I_d)]^2} \quad (\text{B.1.6})$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial n_\nu} \left(\frac{I_u}{\rho} \right) &= \frac{\frac{\partial I_u}{\partial n_\nu} \rho - I_u \frac{\partial \rho}{\partial n_\nu}}{\rho^2} \\ \frac{\partial}{\partial n_\nu} [S_u S_d + C_u C_d] &= \frac{\partial S_u}{\partial n_\nu} S_d + S_u \frac{\partial S_d}{\partial n_\nu} + \frac{\partial C_u}{\partial n_\nu} C_d + C_u \frac{\partial C_d}{\partial n_\nu} \\ \frac{\partial}{\partial n_\nu} [\rho (\rho + I_d)] &= (\rho + I_d) \frac{\partial \rho}{\partial n_\nu} + \rho \frac{\partial (\rho + I_d)}{\partial n_\nu} \end{aligned} \quad (\text{B.1.7})$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_d}{\partial n_\nu} &= 2 \left[(1-s)^2 \left(B_{12}^R \frac{\partial B_{12}^R}{\partial n_\nu} B_{12}^I \frac{\partial B_{12}^I}{\partial n_\nu} \right) + (1+s)^2 \left(B_{22}^R \frac{\partial B_{22}^R}{\partial n_\nu} B_{22}^I \frac{\partial B_{22}^I}{\partial n_\nu} \right) \right] \\ \frac{\partial C_d}{\partial n_\nu} &= 2 (1-s^2)^2 \left[B_{12}^R \frac{\partial B_{22}^R}{\partial n_\nu} + B_{22}^R \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} + B_{12}^I \frac{\partial B_{22}^I}{\partial n_\nu} + B_{22}^I \frac{\partial B_{21}^I}{\partial n_\nu} \right] \\ \frac{\partial S_d}{\partial n_\nu} &= 2 (1-s^2)^2 \left[- \left(B_{12}^R \frac{\partial B_{22}^I}{\partial n_\nu} + B_{22}^I \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} \right) + \left(B_{12}^I \frac{\partial B_{22}^R}{\partial n_\nu} + B_{22}^R \frac{\partial B_{12}^I}{\partial n_\nu} \right) \right] \\ \frac{\partial I_u}{\partial n_\nu} &= 2 \left[(1-s)^2 \left(B_{11}^R \frac{\partial B_{11}^R}{\partial n_\nu} B_{11}^I \frac{\partial B_{11}^I}{\partial n_\nu} \right) + (1+s)^2 \left(B_{21}^R \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} B_{21}^I \frac{\partial B_{21}^I}{\partial n_\nu} \right) \right] \\ \frac{\partial C_u}{\partial n_\nu} &= 2 (1-s^2)^2 \left[B_{11}^R \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} + B_{21}^R \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} + B_{11}^I \frac{\partial B_{21}^I}{\partial n_\nu} + B_{21}^I \frac{\partial B_{21}^I}{\partial n_\nu} \right] \\ \frac{\partial S_u}{\partial n_\nu} &= 2 (1-s^2)^2 \left[- \left(B_{11}^R \frac{\partial B_{21}^I}{\partial n_\nu} + B_{21}^I \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} \right) + \left(B_{11}^I \frac{\partial B_{21}^R}{\partial n_\nu} + B_{21}^R \frac{\partial B_{11}^I}{\partial n_\nu} \right) \right] \\ \frac{\partial \rho}{\partial n_\nu} &= 2 \left[(1+s)^2 \left(B_{22}^R \frac{\partial B_{22}^R}{\partial n_\nu} B_{22}^I \frac{\partial B_{22}^I}{\partial n_\nu} \right) - (1-s)^2 \left(B_{12}^R \frac{\partial B_{12}^R}{\partial n_\nu} B_{12}^I \frac{\partial B_{12}^I}{\partial n_\nu} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.1.8})$$

Analogamente, temos $\frac{\partial \bar{\mathcal{R}}}{\partial \kappa_\nu}$. Portanto, para calcular as derivadas parciais, tanto da transmitância quanto da refletância, devemos encontrar as derivadas parciais de B^R e B^I .

B.2 Derivadas Parciais de B^R e B^I .

Ao derivar na camada ν , somente nos interessam as variáveis n_ν e κ_ν , as quais se encontram, dentre as matrizes que formam B_m , somente em A_ν, D_ν e $A_{\nu+1}$. Logo, dadas as matrizes $L_\nu, X_\nu, R_\nu \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ pela tabela tabela B.1, é natural considerar a partição $B_m = L_\nu X_\nu R_\nu$ (note que L_ν e R_ν são constantes). Para simplificar a notação, escreveremos apenas X para X_ν e,

Filme	L_ν	X_ν	R_ν
1	$A_{m-2}D_{m-3}A_{m-3}D_{m-4}\cdots A_3D_2$	$A_2D_1A_1$	I_2
2	$A_{m-2}D_{m-3}A_{m-3}D_{m-4}\cdots A_4D_3$	$A_3D_2A_2$	D_1A_1
3	$A_{m-2}D_{m-3}A_{m-3}D_{m-4}\cdots A_5D_4$	$A_4D_3A_3$	$D_2A_2D_1A_1$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
ν	$A_{m-2}D_{m-3}A_{m-3}D_{m-4}\cdots A_{\nu+2}D_{\nu+1}$	$A_{\nu+1}D_\nu A_\nu$	$D_{\nu-1}A_{\nu-1}\cdots D_2A_2D_1A_1$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$m-5$	$A_{m-2}D_{m-3}A_{m-3}D_{m-4}$	$A_{m-4}D_{m-5}A_{m-5}$	$D_{m-6}A_{m-6}\cdots D_2A_2D_1A_1$
$m-4$	$A_{m-2}D_{m-3}$	$A_{m-3}D_{m-4}A_{m-4}$	$D_{m-5}A_{m-5}\cdots D_2A_2D_1A_1$
$m-3$	I_2	$A_{m-2}D_{m-3}A_{m-3}$	$D_{m-4}A_{m-4}\cdots D_2A_2D_1A_1$

TABELA B.1 – Matrizes $L_\nu, X_\nu, R_\nu \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$

como antes, a fim de evitar números complexos, vamos considerar a partição $X = X^R + iX^I$ onde

$$\frac{\partial X^R}{\partial n_\nu} = \begin{bmatrix} \frac{\partial X_{11}^R}{\partial n_\nu} & \frac{\partial X_{12}^R}{\partial n_\nu} \\ \frac{\partial X_{21}^R}{\partial n_\nu} & \frac{\partial X_{22}^R}{\partial n_\nu} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \frac{\partial X^I}{\partial n_\nu} = \begin{bmatrix} \frac{\partial X_{11}^I}{\partial n_\nu} & \frac{\partial X_{12}^I}{\partial n_\nu} \\ \frac{\partial X_{21}^I}{\partial n_\nu} & \frac{\partial X_{22}^I}{\partial n_\nu} \end{bmatrix} \quad (\text{B.2.1})$$

As contas a seguir serão feitas para X^R sendo a parte de X^I análoga. Sejam as seguinte variáveis

a) Escalares β_ν, x_ν e ϕ_ν :

$$\beta_\nu = \frac{2\pi d_\nu}{\lambda} \quad x_\nu = \exp[-\beta_\nu \kappa_\nu] \quad \phi_\nu = \beta_\nu n_\nu \quad (\text{B.2.2})$$

b) Matrizes $S^{PR}, C^{PR}, S^{QR}, C^{QR}$, as quais dependem somente de $n_\nu, \kappa_\nu, n_{\nu+1}, \kappa_{\nu+1}, n_{\nu-1}, \kappa_{\nu-1}$

$$\begin{aligned} S_{11}^{PR} &= -\kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} - \kappa_{\nu+1} n_\nu (n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_\nu (-n_\nu^2 + n_{\nu-1} n_{\nu+1}) - \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu (\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu (n_\nu + n_{\nu+1})) \\ S_{12}^{PR} &= -\kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1} (n_{\nu-1} - n_\nu) n_\nu - \kappa_\nu (n_\nu^2 + n_{\nu-1} n_{\nu+1}) + \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu (\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu (n_\nu + n_{\nu+1})) \\ S_{21}^{PR} &= \kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} - \kappa_{\nu+1} n_\nu (n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu \kappa_{\nu+1} + n_\nu (n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu (n_\nu^2 + n_{\nu-1} n_{\nu+1}) \\ S_{22}^{PR} &= \kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1} (n_{\nu-1} - n_\nu) n_\nu - \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu \kappa_{\nu+1} + n_\nu (n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu (n_\nu^2 - n_{\nu-1} n_{\nu+1}) \end{aligned} \quad (\text{B.2.3})$$

$$\begin{aligned} S_{11}^{QR} &= -\kappa_\nu^3 + \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1} n_\nu (-n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu \kappa_{\nu+1} + n_\nu (n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu (-n_\nu^2 + n_{\nu-1} n_{\nu+1}) \\ S_{12}^{QR} &= -\kappa_\nu^3 + \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1} n_\nu (n_{\nu-1} + n_\nu) - \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu \kappa_{\nu+1} + n_\nu (n_\nu - n_{\nu+1})) - \kappa_\nu (n_\nu^2 + n_{\nu-1} n_{\nu+1}) \\ S_{21}^{QR} &= \kappa_\nu^3 + \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1} n_\nu (-n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_\nu (n_\nu^2 + n_{\nu-1} n_{\nu+1}) - \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu (\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu (n_\nu + n_{\nu+1})) \\ S_{22}^{QR} &= \kappa_\nu^3 + \kappa_\nu^2 \kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1} n_\nu (n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_\nu (n_\nu^2 - n_{\nu-1} n_{\nu+1}) + \kappa_{\nu-1} (\kappa_\nu (\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu (n_\nu + n_{\nu+1})) \end{aligned} \quad (\text{B.2.4})$$

$$\begin{aligned} S_{11}^{PR} &= \kappa_\nu^2 (n_{\nu-1} + n_\nu + n_{\nu+1}) + \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) + n_\nu (-(\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1}) + (n_{\nu-1} + n_\nu) (n_\nu + n_{\nu+1})) \\ S_{12}^{PR} &= \kappa_\nu^2 (-n_{\nu-1} + n_\nu + n_{\nu+1}) - \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) + n_\nu (\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1} - (n_{\nu-1} - n_\nu) (n_\nu + n_{\nu+1})) \\ S_{21}^{PR} &= -(n_\nu (\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1} + (n_{\nu-1} + n_\nu) (n_\nu - n_{\nu+1}))) - \kappa_\nu^2 (n_{\nu-1} + n_\nu - n_{\nu+1}) + \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) \\ S_{22}^{PR} &= n_\nu (\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1} + (n_{\nu-1} - n_\nu) (n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu^2 (n_{\nu-1} - n_\nu + n_{\nu+1}) - \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) \end{aligned} \quad (\text{B.2.5})$$

$$\begin{aligned} C_{11}^{QR} &= n_\nu (\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1} + (n_{\nu-1} - n_\nu) (n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu^2 (n_{\nu-1} - n_\nu + n_{\nu+1}) - \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) \\ C_{12}^{QR} &= -(n_\nu (\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1} + (n_{\nu-1} + n_\nu) (n_\nu - n_{\nu+1}))) - \kappa_\nu^2 (n_{\nu-1} + n_\nu - n_{\nu+1}) + \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) \\ C_{21}^{QR} &= \kappa_\nu^2 (-n_{\nu-1} + n_\nu + n_{\nu+1}) - \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) + n_\nu (\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1} - (n_{\nu-1} - n_\nu) (n_\nu + n_{\nu+1})) \\ C_{22}^{QR} &= \kappa_\nu^2 (n_{\nu-1} + n_\nu + n_{\nu+1}) + \kappa_\nu (\kappa_{\nu+1} n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1} n_{\nu+1}) + n_\nu (-(\kappa_{\nu-1} x \kappa_{\nu+1}) + (n_{\nu-1} + n_\nu) (n_\nu + n_{\nu+1})) \end{aligned} \quad (\text{B.2.6})$$

$$\begin{aligned}
S_{11}^{PI} &= -(\kappa_\nu^2(n_{\nu-1} + n_\nu + n_{\nu+1})) - \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1}) - n_\nu(-(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1}) + (n_{\nu-1} + n_\nu)(n_\nu + n_{\nu+1})) \\
S_{12}^{PI} &= \kappa_\nu^2(n_{\nu-1} - n_\nu - n_{\nu+1}) + \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1}) - n_\nu(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1} - (n_{\nu-1} - n_\nu)(n_\nu + n_{\nu+1})) \\
S_{21}^{PI} &= n_\nu(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1} + (n_{\nu-1} + n_\nu)(n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu^2(n_{\nu-1} + n_\nu - n_{\nu+1}) - \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1}) \\
S_{22}^{PI} &= n_\nu(-(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1}) - (n_{\nu-1} - n_\nu)(n_\nu - n_{\nu+1})) - \kappa_\nu^2(n_{\nu-1} - n_\nu + n_{\nu+1}) + \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1})
\end{aligned} \tag{B.2.7}$$

$$\begin{aligned}
S_{11}^{QI} &= n_\nu(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1} + (n_{\nu-1} - n_\nu)(n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu^2(n_{\nu-1} - n_\nu + n_{\nu+1}) - \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1}) \\
S_{12}^{QI} &= -(n_\nu(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1} + (n_{\nu-1} + n_\nu)(n_\nu - n_{\nu+1}))) - \kappa_\nu^2(n_{\nu-1} + n_\nu - n_{\nu+1}) + \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1}) \\
S_{21}^{QI} &= \kappa_\nu^2(-n_{\nu-1} + n_\nu + n_{\nu+1}) - \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1}) + n_\nu(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1} - (n_{\nu-1} - n_\nu)(n_\nu + n_{\nu+1})) \\
S_{22}^{QI} &= \kappa_\nu^2(n_{\nu-1} + n_\nu + n_{\nu+1}) + \kappa_\nu(\kappa_{\nu+1}n_{\nu-1} + \kappa_{\nu-1}n_{\nu+1}) + n_\nu(-(\kappa_{\nu-1}x\kappa_{\nu+1}) + (n_{\nu-1} + n_\nu)(n_\nu + n_{\nu+1}))
\end{aligned} \tag{B.2.8}$$

$$\begin{aligned}
C_{11}^{PI} &= -\kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} - \kappa_{\nu+1}n_\nu(n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_\nu(-n_\nu^2 + n_{\nu-1}n_{\nu+1}) - \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu(\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu(n_\nu + n_{\nu+1})) \\
C_{12}^{PI} &= -\kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1}(n_{\nu-1} - n_\nu)n_\nu - \kappa_\nu(n_\nu^2 + n_{\nu-1}n_{\nu+1}) + \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu(\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu(n_\nu + n_{\nu+1})) \\
C_{21}^{PI} &= \kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} - \kappa_{\nu+1}n_\nu(n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu\kappa_{\nu+1} + n_\nu(n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu(n_\nu^2 + n_{\nu-1}n_{\nu+1}) \\
C_{22}^{PI} &= \kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1}(n_{\nu-1} - n_\nu)n_\nu - \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu\kappa_{\nu+1} + n_\nu(n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu(n_\nu^2 - n_{\nu-1}n_{\nu+1})
\end{aligned} \tag{B.2.9}$$

$$\begin{aligned}
C_{11}^{QI} &= \kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1}(n_{\nu-1} - n_\nu)n_\nu - \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu\kappa_{\nu+1} + n_\nu(n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu(n_\nu^2 - n_{\nu-1}n_{\nu+1}) \\
C_{12}^{QI} &= \kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} - \kappa_{\nu+1}n_\nu(n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu^2 - \kappa_\nu\kappa_{\nu+1} + n_\nu(n_\nu - n_{\nu+1})) + \kappa_\nu(n_\nu^2 + n_{\nu-1}n_{\nu+1}) \\
C_{21}^{QI} &= -\kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} + \kappa_{\nu+1}(n_{\nu-1} - n_\nu)n_\nu - \kappa_\nu(n_\nu^2 + n_{\nu-1}n_{\nu+1}) + \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu(\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu(n_\nu + n_{\nu+1})) \\
C_{22}^{QI} &= -\kappa_\nu^3 - \kappa_\nu^2\kappa_{\nu+1} - \kappa_{\nu+1}n_\nu(n_{\nu-1} + n_\nu) + \kappa_\nu(-n_\nu^2 + n_{\nu-1}n_{\nu+1}) - \kappa_{\nu-1}(\kappa_\nu(\kappa_\nu + \kappa_{\nu+1}) + n_\nu(n_\nu + n_{\nu+1}))
\end{aligned} \tag{B.2.10}$$

Com essas variáveis, podemos montar as seguintes matrizes

a) Matrizes S^R, C^R :

$$S^R = x_\nu^{-1}S^{PR} + x_\nu S^{QR} \tag{B.2.11}$$

$$C^R = x_\nu^{-1}C^{PR} + x_\nu C^{QR} \tag{B.2.12}$$

b) Matrizes P^R, Q^R :

$$P^R = S^{PR} \sin(\phi_\nu) + C^{PR} \cos(\phi_\nu) \tag{B.2.13}$$

$$Q^R = S^{QR} \sin(\phi_\nu) + C^{QR} \cos(\phi_\nu) \tag{B.2.14}$$

e com essas matrizes é possível escrever X^R de duas maneiras. A primeira coloca $\sin(\varphi_\nu)$ e $\cos(\varphi_\nu)$ em evidência e é, dessa forma, melhor para calcular a derivada parcial com relação a n_ν , pois $\varphi_\nu = \varphi_\nu(n_\nu)$. Logo temos

$$X^R = \sin(\phi_\nu) S^R + \cos(\phi_\nu) C^R \tag{B.2.15}$$

e portanto

$$\frac{\partial X^R}{\partial n_\nu} = \beta_\nu \cos(\phi_\nu) S^R + \sin(\phi_\nu) \frac{\partial S^R}{\partial n_\nu} - \beta_\nu \sin(\phi_\nu) C^R + \cos(\phi_\nu) \frac{\partial C^R}{\partial n_\nu} + \tag{B.2.16}$$

ou seja

$$\frac{\partial X^R}{\partial n_\nu} = \sin(\phi_\nu) \left[\frac{\partial S^R}{\partial n_\nu} - \beta_\nu C^R \right] + \cos(\phi_\nu) \left[\frac{\partial C^R}{\partial n_\nu} + \beta_\nu S^R \right] \tag{B.2.17}$$

A segunda forma de escrever X^R coloca x_ν em evidência e é, dessa forma, melhor para calcular a derivada parcial com relação a κ_ν , pois $x_\nu = x_\nu(\kappa_\nu)$. Logo temos

$$X^R = x_\nu^{-1} P^R + x_\nu Q^R \tag{B.2.18}$$

e portanto

$$\frac{\partial X^R}{\partial \kappa_\nu} = -\beta_\nu x_\nu^{-1} P^R + x_\nu^{-1} \frac{\partial P^R}{\partial \kappa_\nu} + \beta_\nu x_\nu Q^R + x_\nu \frac{\partial Q^R}{\partial \kappa_\nu} \tag{B.2.19}$$

ou seja

$$\frac{\partial X^R}{\partial \kappa_\nu} = x_\nu^{-1} \left[-\beta_\nu P^R + \frac{\partial P^R}{\partial \kappa_\nu} \right] + x_\nu \left[\beta_\nu Q^R + \frac{\partial Q^R}{\partial \kappa_\nu} \right] \tag{B.2.20}$$

B.3 Corrigindo Problemas de Overflow

Inseridas no meio do produto matricial que fornece a matriz B_m estão as matrizes diagonais D_ν . Ao separar sua parte real e imaginária, temos

$$D_\nu = \begin{pmatrix} x_\nu [\cos(\varphi_\nu) - i \sin(\varphi_\nu)] & 0 \\ 0 & x_\nu^{-1} [\cos(\varphi_\nu) + i \sin(\varphi_\nu)] \end{pmatrix} \quad (\text{B.3.1})$$

onde $\beta_\nu, x_\nu, \varphi_\nu$ são dados em (B.2.2). Para $\lambda \rightarrow 0$, temos que $\beta_\nu \rightarrow +\infty$, de modo que $x_\nu \rightarrow 0$ e $x_\nu^{-1} \rightarrow +\infty$. Numericamente, isso significa que x_ν^{-1} pode crescer demais, gerando indesejáveis NaN. Para evitá-los, calculamos $\tilde{D}_\nu = x_\nu D_\nu$, em vez de D_ν . Contudo, ao fazer isso, o que obtemos é $\tilde{B}_m = f B_m$, onde

$$f = x_1 x_2 \cdots x_{m-3} = \exp \left[- \frac{2\pi \left(\sum_{\nu=1}^{m-3} \kappa_\nu d_\nu \right)}{\lambda} \right] \quad (\text{B.3.2})$$

Substituindo $B_m = \tilde{B}_m / f$ em (2.3.5), temos

$$\overline{\mathcal{T}}(\lambda)(B_m) = \frac{4 f^2}{(1+s)^2 |\tilde{B}_{22}|^2 - (1-s)^2 |\tilde{B}_{12}|^2} = f^2 \overline{\mathcal{T}}(\lambda)(\tilde{B}_m) \quad (\text{B.3.3})$$

Por outro lado, em (2.3.6) vemos que a refletância não se altera quando multiplicamos B_m por um valor f qualquer, isto é, $R_{\text{média}}(\lambda)(B_m) = R_{\text{média}}(\lambda)(f B_m) = R_{\text{média}}(\lambda)(\tilde{B}_m)$. De maneira análoga, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\mathcal{T}}}{\partial n_\nu}(\tilde{B}_m) &= f^2 \frac{\partial \overline{\mathcal{T}}}{\partial n_\nu}(B_m) \\ \frac{\partial \overline{\mathcal{T}}}{\partial \kappa_\nu}(\tilde{B}_m) &= f^2 \frac{\partial \overline{\mathcal{T}}}{\partial \kappa_\nu}(B_m) \\ \frac{\partial \overline{\mathcal{R}}}{\partial n_\nu}(\tilde{B}_m) &= \frac{\partial \overline{\mathcal{R}}}{\partial n_\nu}(B_m) \\ \frac{\partial \overline{\mathcal{R}}}{\partial \kappa_\nu}(\tilde{B}_m) &= \frac{\partial \overline{\mathcal{R}}}{\partial \kappa_\nu}(B_m) \end{aligned} \quad (\text{B.3.4})$$

Para calcular X_ν, L_ν, R_ν usamos o mesmo artifício para evitar *overflow* oriundo do cálculo da exponencial x_ν^{-1} . Para tal, fazemos

$$\begin{aligned} \tilde{X}_\nu &= x_\nu X_\nu \\ \tilde{L}_\nu &= x_{m-3} \cdots x_{\nu+1} L_\nu \\ \tilde{R}_\nu &= x_1 \cdots x_{\nu-1} R_\nu \end{aligned} \quad (\text{B.3.5})$$

o qual novamente fornece

$$\left(\tilde{L}_\nu \tilde{X}_\nu \tilde{R}_\nu \right) = (x_{m-3} \cdots x_{\nu+1} L_\nu) (x_\nu X_\nu) (x_1 \cdots x_{\nu-1} R_\nu) = f (L_\nu X_\nu R_\nu) = f B_m = \tilde{B}_m \quad (\text{B.3.6})$$

Integrais

C.1 Integral do tipo $\int R(\sin x, \cos x)dx$, com R função racional

Com a ajuda da transformação $\tan \frac{x}{2} = t$, reduzimos a integral acima a uma integral de uma função racional. Da transformação acima segue que

$$\sin x = \frac{2 \sin(x/2) \cos(x/2)}{1} = \frac{2 \sin(x/2) \cos(x/2)}{\sin^2(x/2) + \cos^2(x/2)} = \frac{2 \tan(x/2)}{1 + \tan^2(x/2)} = \frac{2t}{1 + t^2}$$

$$\cos x = \frac{\cos^2(x/2) - \sin^2(x/2)}{1} = \frac{\cos^2(x/2) - \sin^2(x/2)}{\sin^2(x/2) + \cos^2(x/2)} = \frac{1 - \tan^2(x/2)}{1 + \tan^2(x/2)} = \frac{1 - t^2}{1 + t^2}$$

Logo

$$x = 2 \arctan t \quad \text{e} \quad dx = \frac{2dt}{1 + t^2}$$

Portanto,

$$\int R(\sin x, \cos x)dx = \int R\left(\frac{2t}{1 + t^2}, \frac{1 - t^2}{1 + t^2}\right) \frac{2dt}{1 + t^2}$$

C.2 Integral do tipo $\int \frac{dx}{ax^2 + bx + c}$

Façamos a seguinte transformação no denominador

$$\begin{aligned} ax^2 + bx + c &= a \left[x^2 + \frac{b}{a}x + \frac{c}{a} \right] \\ &= a \left[x^2 + 2 \frac{b}{2a}x + \left(\frac{b}{2a} \right)^2 + \frac{c}{a} - \left(\frac{b}{2a} \right)^2 \right] \\ &= a \left[\left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 + \left(\frac{c}{a} - \frac{b^2}{4a^2} \right) \right] \\ &= a \left[\left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 \pm k^2 \right] \end{aligned}$$

onde

$$\pm k^2 = \frac{c}{a} - \frac{b^2}{4a^2}$$

Portanto

$$\int \frac{dx}{ax^2 + bx + c} = \frac{1}{a} \int \frac{dx}{a \left[\left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 \pm k^2 \right]}$$

Agora temos duas possibilidades que dependem do sinal de $\pm k^2$. Em qualquer livro de cálculo encontramos as integrais:

Caso $\pm k^2 > 0$: usa-se a integral

$$\int \frac{dx}{a^2 + x^2} = \frac{1}{a} \arctan \frac{x}{a} + C$$

Caso $\pm k^2 < 0$: usa-se a integral

$$\int \frac{dx}{a^2 - x^2} = \frac{1}{2a} \ln \left| \frac{a+x}{a-x} \right| + C$$

Constantes dos Filmes Gedanken

Foram considerados três filmes distintos: *silício* amorfo hidrogenado (*a*-Si:H), *germânio* amorfo hidrogenado (*a*-Ge:H) e *óxido metálico* (veja figura D.1). Para o índice de refração, usamos (3.2.13) variando M e β , conforme mostra a tabela (D.1).

Material	β	M	Fórmula	Intervalo
Vidro	0.7568	7930	$s_{vidro}(\lambda) = \sqrt{1 + (0.7568 - 7930/\lambda^2)^{-1}}$	$\lambda > 102.36$
Silício	0.09195	12600	$n_{Si}(\lambda) = \sqrt{1 + (0.09195 - 12600/\lambda^2)^{-1}}$	$\lambda > 370.18$
Germânio	0.065	15000	$n_{Ge}(\lambda) = \sqrt{1 + (0.065 - 15000/\lambda^2)^{-1}}$	$\lambda > 480.38$
Óxido Metálico	0.3	10000	$n_{Ox}(\lambda) = \sqrt{1 + (0.3 - 10000/\lambda^2)^{-1}}$	$\lambda > 182.57$

TABELA D.1 – Fórmulas para os índices de refração dos filmes *gedanken*, gerados de acordo com a equação (3.2.13), variando apenas β e M . O índice de refração do substrato também é gerado dessa forma.

Também na tabela (D.1), apresentamos o índice de refração do vidro, usado como substrato. Além deste, também consideramos o substrato de silício cristalino, cuja fórmula é o seguinte polinômio:

$$s_{Si}(\lambda) = 3.71382 - 8.69123 \cdot 10^{-5} \lambda - 2.47125 \cdot 10^{-8} \lambda^2 + 1.04677 \cdot 10^{-11} \lambda^3 \quad (D.0.1)$$

Observe que os substratos são transparentes e portanto suas absorções são nulas. Para o coeficiente de absorção, as expressões analíticas para os três filmes são dados na tabela (D.2).

Material	Fórmula	Intervalo
Silício	$\ln [\alpha_{Si}(E)] = \begin{cases} 6.5944 \cdot 10^{-6} \exp(9.0846E) - 16.102 \\ 20E - 41.9 \\ \sqrt{59.56E - 102.1} - 8.391 \end{cases}$	$0.60 < E < 1.40$ $1.40 < E < 1.75$ $1.75 < E < 2.29$
Germânio	$\ln [\alpha_{Ge}(E)] = \begin{cases} 6.5944 \cdot 10^{-6} \exp(13.629E) - 16.102 \\ 30E - 41.9 \\ \sqrt{89.34E - 102.1} - 8.391 \end{cases}$	$0.48 < E < 0.93$ $0.93 < E < 1.17$ $1.17 < E < 1.50$
Óxido Metálico	$\ln [\alpha_{Ox}(E)] = 6.5944 \cdot 10^{-6} \exp(4.0846E) - 11.02$	$0.5 < E < 3.5$

TABELA D.2 – Fórmulas para gerar o coeficiente de absorção dos filmes *gedanken*. Note que a fórmula fornece $\ln [\alpha(E)]$ e não $\alpha(E)$ ou $\alpha(\lambda)$.

Portanto, o procedimento para gerar tranmitâncias (e refletâncias) *gedanken* é, uma vez escolhidos o filme e λ , calcular

n e α segundo as fórmulas acima. De posse deles, escolhe-se uma espessura e se calcula a transmitância. Além disso, para podermos simular a limitação da precisão da medição, presente em filmes reais, de modo geral, os dados finais são truncados em três casas decimais. Por exemplo, para $\lambda = 1000\text{nm}$, o filme de silício tem transmitância (calculada com substrato de vidro) de $4.97157654141517690860 \cdot 10^{-1}$, enquanto o valor truncado, *de fato* usado, foi $4.972 \cdot 10^{-1}$ (veja a seção 5).

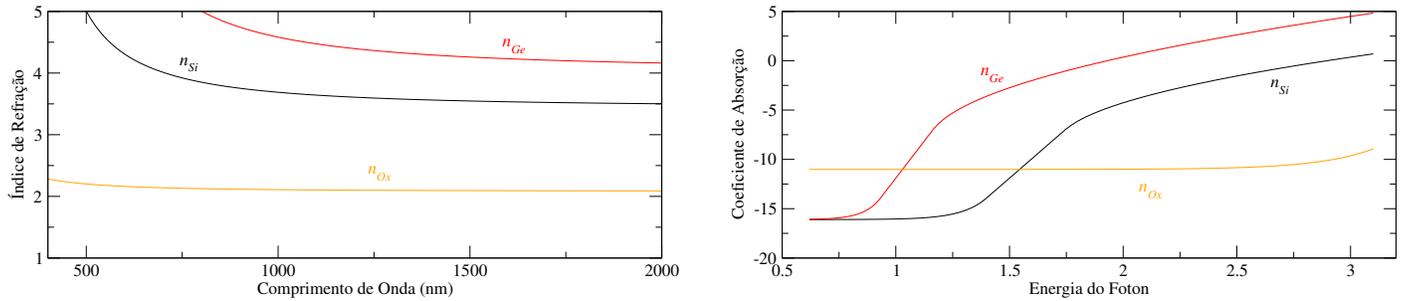


FIGURA D.1 – Índices de refração (à esquerda; expressões analíticas na tabela D.1) e coeficientes de absorção (à direita; expressões analíticas na tabela D.2) usados para gerar os filmes gedanken de silício (Si), germânio (Ge) e óxido metálico (Ox).

Pointwise Unconstrained Minimization Approach – PUMA

O pacote PUMA resolve o seguinte problema de minimizar a soma de quadrados sujeita a restrições:

$$\begin{aligned} \min_{n_i, \kappa_i} \quad & \sum_{i=1}^{N_{obs}} [\bar{T}(\lambda_i, n_i, \kappa_i) - T_i^{obs}]^2 \\ \text{s.a.} \quad & \text{RESTRIÇÕES FÍSICAS} \end{aligned} \tag{E.0.1}$$

onde as restrições físicas são dadas por

PC1: $n(\lambda) \geq 1$ e $\kappa(\lambda) \geq 0$ para todo $\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$;

PC2: $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ são funções decrescentes de λ ;

PC3: $n(\lambda)$ é convexa;

PC4: existe $\lambda_{infl} \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ tal que $\kappa(\lambda)$ é convexa se $\lambda \geq \lambda_{infl}$ e concava se $\lambda < \lambda_{infl}$.

as quais reduzem drasticamente a varibilidade das incógnitas $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$. Observe que, assumindo **PC2**, **PC1** é satisfeita sob a hipótese $n(\lambda_{\max}) \geq 1$ e $\kappa(\lambda_{\max}) \geq 0$. As restrições **PC2**, **PC3** e **PC4** podem ser reescritas, respectivamente, como

$$n'(\lambda) \leq 0 \text{ e } \kappa'(\lambda) \leq 0 \text{ para todo } \lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}], \tag{E.0.2}$$

$$n''(\lambda) \geq 0 \text{ para todo } \lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}], \tag{E.0.3}$$

$$\kappa''(\lambda) \leq 0 \text{ para todo } \lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{infl}], \text{ and} \tag{E.0.4}$$

$$\kappa''(\lambda) \geq 0 \text{ para todo } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{\max}]. \tag{E.0.5}$$

A seguir, as restrições são manipuladas de forma a eliminá-las, após o que se obtém

$$n(\lambda_{\max}) = 1 + u^2, \quad \kappa(\lambda_{\max}) = v^2, \tag{E.0.6}$$

$$n'(\lambda_{\max}) = -u_1^2, \quad \kappa'(\lambda_{\max}) = -v_1^2, \tag{E.0.7}$$

$$n''(\lambda) = w(\lambda)^2 \text{ para todo } \lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}], \tag{E.0.8}$$

$$\kappa''(\lambda) = z(\lambda)^2 \text{ para todo } \lambda \in [\lambda_{infl}, \lambda_{\max}], \text{ e} \tag{E.0.9}$$

$$\kappa''(\lambda) = -z(\lambda)^2 \text{ para todo } \lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{infl}]. \tag{E.0.10}$$

Numericamente, se considera

$$h = (\lambda_{\max} - \lambda_{\min}) / (N - 1)$$

de modo que os comprimentos de onda discretizados são dados por

$$\lambda_i = \lambda_{\min} + (i - 1)h \text{ for } i = 1, \dots, N_{obs}$$

e usa-se a notação n_i , κ_i , w_i , e z_i para as estimativas de $n(\lambda_i)$, $\kappa(\lambda_i)$, $w(\lambda_i)$, e $z(\lambda_i)$, para todo $i = 1, \dots, N_{obs}$. A discretização das relações diferenciais (E.0.6–E.0.10) fornece:

$$n_N = 1 + u^2, \quad v_N = v^2, \tag{E.0.11}$$

$$n_{N-1} = n_N + u_1^2 h, \quad \kappa_{N-1} = \kappa_N + v_1^2 h, \tag{E.0.12}$$

$$n_i = w_i^2 h^2 + 2n_{i+1} - n_{i+2} \text{ para } i = 1, \dots, N - 2, \tag{E.0.13}$$

$$\kappa_i = z_i^2 h^2 + 2\kappa_{i+1} - \kappa_{i+2}, \quad \text{se } \lambda_{i+1} \geq \lambda_{infl}, \text{ e} \tag{E.0.14}$$

$$\kappa_i = -z_i^2 h^2 + 2\kappa_{i+1} - \kappa_{i+2}, \quad \text{se } \lambda_{i+1} < \lambda_{infl}. \tag{E.0.15}$$

Como n_i e κ_i dependem de u , u_1 , v , v_1 , w , z , e λ_{infl} para (E.0.11–E.0.15), o problema (E.0.1) assume a forma

$$\min f(d, \lambda_{infl}, u, u_1, v, v_1, w, z) \tag{E.0.16}$$

onde $w = (w_1, \dots, w_{N-2})$ e $z = (z_1, \dots, z_{N-2})$ e

$$f(d, \lambda_{infl}, u, u_1, v, v_1, w, z) \equiv \sum_{i=1}^{N_{obs}} \left[\bar{\mathcal{T}}(\lambda_i, d, \lambda_{infl}, u, u_1, v, v_1, w, z) - \mathcal{T}_i^{obs} \right]^2 \tag{E.0.17}$$

O problema acima é resolvido usando um algoritmo simples introduzido em [Ray97]. Esse método trata eficientemente minimizações irrestritas de problemas potencialmente de grande escala. Ele consiste em usar somente direções de gradiente com passos que assegurem uma rápida convergência. Além disso, após a reformulação para um problema irrestrito, são necessários os cálculos de complicadas derivadas, as quais não seriam possíveis sem o uso de técnicas de diferenciação automática (no caso do PUMA, as descritas em [Bir98]).

Índice Remissivo

coeficiente

- de absorção, 33
- de atenuação, 10
- de indeterminação, 66

energia

- refletida, 14
- transmitida, 14

espelho de referência, 2

filmes finos

- definição, 2
- evaporação, 2
- gedanken, 4
- sputtering, 2

formas

- funcionais, 37

gedanken, 4

implementação

- derivadas parciais de $\overline{T}(\lambda)$ e $\overline{\mathcal{R}}(\lambda)$, 97
- vários filmes, 97

interface

- duas, 89
- duas (continuidade), 93
- uma (generalização), 88

método

- de Abelès e Thèye, 32
- de Bennett e Booty, 32
- de Hadley e Dannison, 32

overflow, 101

pointwise, 36

problemas

- inversos, 34

refletância

- definição, 14
- média
 - algoritmo, 29
 - definição, 16
 - fórmula geral, 23

regularização, 36

sistema de camadas

- energia do, 14
- enfoque matricial, 11
- filmes diferentes, 70
- filmes idênticos, 68
- matriz do, 13

substrato

- “em cima” dos filmes, 26
- “embaixo” dos filmes, 25
- de silício cristalino, 105
- de vidro, 105
- finito, 15
- semi-infinito, 15

total variation approach, 37

transmitância

- definição, 14
- média
 - algoritmo, 29
 - definição, 16
 - fórmula geral, 20
 - geral, 16
 - observada, 32

simetria, 68
um filme, 27