

Aplicações

Marina Andretta

ICMC-USP

29 de setembro de 2014

Baseado nos trabalhos presentes em

<http://www.ime.usp.br/~egbirgin/puma/> e na tese de doutorado de Marina Andretta

Problema de estimativa de parâmetros em um problema de óptica

Um filme fino é uma fina camada de material de espessura normalmente inferior a um micrón. Este é depositado sobre um substrato transparente, de espessura muito maior.

Como medir a espessura de filmes finos é um processo caro, estamos interessados em **estimar a espessura** e algumas constantes ópticas (**índice de refração e coeficiente de absorção**) de um filme.

Estimativa de espessura e constantes ópticas de filmes finos

Já que filmes finos são utilizados na produção de semicondutores, revestimentos de diversos materiais, biotecnologia e na geração e conservação de energia (painéis solares), é grande a importância da resolução deste problema.

A idéia é **utilizar alguns dados facilmente medidos** e o **comportamento físico teórico** conhecido do sistema e **modelar** o problema de estimar a espessura e as constantes ópticas como um **problema de programação não-linear**.

A **transmitância** T de um filme fino absorvente depositado sobre um substrato grosso transparente é dada por

$$T = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2},$$

onde

- $A = 16s(n^2 + \kappa^2)$,
- $B = [(n + 1)^2 + \kappa^2][(n + 1)(n + s^2) + \kappa^2]$,

- $C = [(n^2 - 1 + \kappa^2)(n^2 - s^2 + \kappa^2) - 2\kappa^2(s^2 + 1)]2 \cos \varphi - \kappa[2(n^2 - s^2 + \kappa^2) + (s^2 + 1)(n^2 - 1 + \kappa^2)]2 \sin \varphi,$
- $D = [(n - 1)^2 + \kappa^2][(n - 1)(n - s^2) + \kappa^2],$
- $\varphi = 4\pi nd/\lambda,$
- $x = \exp(-\alpha d),$
- $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda.$

Nestas expressões:

- λ é o comprimento de onda,
- $s = s(\lambda)$ é o índice de refração do substrato transparente (considerado conhecido),
- $n = n(\lambda)$ é o índice de refração do filme,
- $\kappa = \kappa(\lambda)$ é o coeficiente de atenuação do filme,
- $\alpha = \alpha(\lambda)$ é o coeficiente de absorção do filme e
- d é a espessura do filme.

Um conjunto de dados experimentais

$$(\lambda_i, T^{\text{obs}}(\lambda_i)), \quad \lambda_{\min} \leq \lambda_i < \lambda_{i+1} \leq \lambda_{\max}, \quad i = 1, \dots, N,$$

é dado e queremos estimar d , $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$.

Este problema é altamente indeterminado.

Mesmo com d conhecido, queremos que valha

$$T[\lambda_i, s(\lambda_i), d, n(\lambda_i), \kappa(\lambda_i)] = T^{\text{obs}}(\lambda_i), \quad i = 1, \dots, N.$$

Ou seja, temos uma única equação para cada duas incógnitas ($n(\lambda_i)$ e $\kappa(\lambda_i)$).

O conjunto de pontos que satisfazem esta equação, para um dado d , é infinito.

No entanto, algumas restrições físicas conhecidas reduzem o espaço de possíveis soluções.

Na vizinhança do pico de absorção fundamental, essas restrições são:

- R1. $n(\lambda) \geq 1$ e $\kappa(\lambda) \geq 0$ para todo $\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$;
- R2. $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ são funções decrescentes em λ ;
- R3. $n(\lambda)$ é convexa;
- R4. existe $\lambda_{\text{infl}} \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ tal que $\kappa(\lambda)$ é convexa se $\lambda \geq \lambda_{\text{infl}}$ e côncava se $\lambda \leq \lambda_{\text{infl}}$.

Utilizando os comprimentos de onda λ_i , $i = 1, \dots, N$, equidistantes no intervalo $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, obtemos uma discretização das funções acima.

Note que

$$\lambda_i = \lambda_{\min} + (i - 1) \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{N - 1}.$$

Denotaremos por $n_i = n(\lambda_i)$, $\kappa_i = \kappa(\lambda_i)$, $s_i = s(\lambda_i)$ e $T_i^{\text{obs}} = T^{\text{obs}}(\lambda_i)$.

A restrição R2 pode ser escrita como

$$n_{i+1} \leq n_i, \quad i = 1, \dots, N-1,$$

$$\kappa_{i+1} \leq \kappa_i, \quad i = 1, \dots, N-1.$$

A restrição R3 pode ser escrita como $n''(\lambda) \geq 0$, ou

$$n_i \leq n_{i-1} + \frac{n_{i+1} - n_{i-1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}}(\lambda_i - \lambda_{i-1}), \Rightarrow$$

$$n_i \leq \frac{1}{2}(n_{i+1} + n_{i-1}), \quad i = 2, \dots, N - 1.$$

A restrição R4 pode ser escrita como $\kappa''(\lambda) \geq 0$, para $\lambda \geq \lambda_{\text{infl}}$ e $\kappa''(\lambda) \leq 0$, para $\lambda \leq \lambda_{\text{infl}}$, ou seja,

$$\kappa_j \geq \kappa_{j-1} + \frac{\kappa_{j+1} - \kappa_{j-1}}{\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}}(\lambda_j - \lambda_{j-1}) \Rightarrow$$

$$\kappa_j \geq \frac{1}{2}(\kappa_{j+1} + \kappa_{j-1}), \lambda_{j+1} \leq \lambda_{\text{infl}},$$

$$\kappa_j \leq \kappa_{j-1} + \frac{\kappa_{j+1} - \kappa_{j-1}}{\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}}(\lambda_j - \lambda_{j-1}) \Rightarrow$$

$$\kappa_j \leq \frac{1}{2}(\kappa_{j+1} + \kappa_{j-1}), \lambda_{j-1} \geq \lambda_{\text{infl}}.$$

Modelo matemático

Para calcular os valores de d , $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$, resolvemos o seguinte problema de programação não-linear:

$$\text{Minimizar } \sum_{i=1}^N [T_i^{\text{obs}} - T(\lambda_i, s_i, d, n_i, \kappa_i)]^2$$

$$\begin{aligned} \text{sujeita a } \quad & n_{i+1} \leq n_i, & i = 1, \dots, N-1, \\ & \kappa_{i+1} \leq \kappa_i, & i = 1, \dots, N-1, \\ & n_i \leq \frac{1}{2}(n_{i+1} + n_{i-1}), & i = 2, \dots, N-1, \\ & \kappa_i \geq \frac{1}{2}(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}), & \lambda_{i+1} \leq \lambda_{\text{infl}}, \\ & \kappa_i \leq \frac{1}{2}(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}), & \lambda_{i-1} \geq \lambda_{\text{infl}}, \\ & n_i \geq 1, & i = 1, \dots, N, \\ & \kappa_i \geq 0, & i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

(1)

Algoritmo para resolução do problema

Note que, **fixado d** , temos **$2N$ variáveis** (n_i e κ_i , para $i = 1, \dots, N$) e **$4N - 6$ restrições lineares**.

Por saber que, na região de interesse, a função κ é convexa, **fixamos λ_{infl} em λ_{min}** .

Dados N , λ_{min} , λ_{max} e as observações T_i^{obs} , $i = 1, \dots, N$, fixamos o valor de d . Utilizando uma estimativa inicial para n e κ , podemos usar um método para minimização com restrições lineares para resolver a instância do problema (1).

Algoritmo para resolução do problema

Utilizamos seis **estimativas iniciais de n** .

Todas elas são funções lineares decrescentes, que vão do ponto (x_1, y_1) ao ponto (x_2, y_2) , sendo os pares $[(x_1, y_1); (x_2, y_2)]$ os seguintes:

- $[(\lambda_{\min}, 3); (\lambda_{\max}, 2)],$
- $[(\lambda_{\min}, 4); (\lambda_{\max}, 2)],$
- $[(\lambda_{\min}, 5); (\lambda_{\max}, 2)],$
- $[(\lambda_{\min}, 4); (\lambda_{\max}, 3)],$
- $[(\lambda_{\min}, 5); (\lambda_{\max}, 3)],$
- $[(\lambda_{\min}, 5); (\lambda_{\max}, 4)].$

Algoritmo para resolução do problema

Para as **estimativas iniciais de κ** , utilizamos a **função linear por partes** que vale 0.1 em λ_{\min} , 0.01 em $\lambda_{\min} + 0.2(\lambda_{\max} - \lambda_{\min})$, e 10^{-10} em λ_{\max} .

Dado um intervalo $[d_{\min}, d_{\max}]$ no qual sabe-se estar a espessura verdadeira, utilizamos como **estimativa para espessura do filme** os valores no intervalo $[d_{\min}, d_{\max}]$, espaçados de 10 em 10. Ou seja, **$d_{\min}, d_{\min} + 10, \dots, d_{\max}$** .

Algoritmo para resolução do problema

Para resolver o problema (1), utilizamos **cada combinação das estimativas de n , κ e d** citadas acima e utilizamos GENLIN para resolver as instâncias do problema.

Dentre todas as combinações usadas, ficamos com a solução \bar{n} e $\bar{\kappa}$ que **fornece menor valor da função objetivo**.

Algoritmo para resolução do problema

Chamemos \bar{d} o valor de d utilizado na obtenção desta solução.

Definimos então o intervalo $[\bar{d} - 10, \bar{d} + 10]$. Fixamos d como os pontos deste intervalo espaçados um a um, \bar{n} e $\bar{\kappa}$ como ponto inicial e resolvemos estas instâncias do problema (1) utilizando GENLIN.

Dentre as soluções obtidas para cada instância, consideramos como solução do problema (1) original a espessura d^* e a solução n^* e κ^* que fornecem o menor valor de função objetivo.

Para verificar se este método de resolução do problema (1) é confiável, utilizamos **transmitância gerada por computador** de filmes *gedanken*, para os quais **temos os resultados verdadeiros para comparar com a solução** fornecida pelo método.

Os conjuntos de filme e substrato utilizados nos experimentos são:

- **Filme A**: este filme gerado por computador simula um filme fino de Silício amorfo hidrogenado ($a\text{-Si:H}$), depositado sobre um substrato de vidro, com espessura $d^{\text{real}} = 100$ nm. O intervalo de comprimentos de onda usado vai de 550 nm a 1530 nm;

- **Filme B:** este filme, como o Filme A, simula um filme fino de Silício amorfo hidrogenado ($a\text{-Si:H}$) depositado sobre um substrato de vidro. Sua espessura é $d^{\text{real}} = 600$ nm e o intervalo de comprimentos de onda usado vai de 620 nm a 1610 nm;
- **Filme C:** simula um filme fino de Germânio amorfo hidrogenado ($a\text{-Ge:H}$), depositado sobre um substrato cristalino de Silício, com espessura $d^{\text{real}} = 100$ nm e intervalo de comprimentos de onda de 1250 nm a 2537 nm;

- **Filme D:** este filme, como o Filme C, simula um filme fino de Germânio amorfo hidrogenado ($a\text{-Ge:H}$), depositado sobre um substrato cristalino de Silício. Sua espessura é $d^{\text{real}} = 600$ nm e o intervalo de comprimentos de onda vai de 1250 nm a 2537 nm;
- **Filme E:** simula um filme de óxido de metal, com espessura $d^{\text{real}} = 80$, depositado sobre vidro. O intervalo de comprimentos de onda usado vai de 360 nm a 657 nm.

O índice de refração $s(\lambda)$ dos substratos de vidro e Silício usados nos experimentos são dados, respectivamente, por

$$s_{\text{vidro}}(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{1}{\left(0.7568 - \frac{7930}{\lambda^2}\right)}},$$

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

O índice de refração n^{real} e o coeficiente de absorção α^{real} de $a\text{-Si:H}$ são dados por

$$n^{\text{real}}(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{1}{\left(0.09195 - \frac{12600}{\lambda^2}\right)}},$$

$$\ln(\alpha^{\text{real}}(E)) = \begin{cases} 6.5944 \times 10^{-6} e^{(9.0846E)} - 16.102, & 0.60 < E < 1.40, \\ 20E - 41.9, & 1.40 < E < 1.75, \\ \sqrt{59.56E - 102.1} - 8.391, & 1.75 < E < 2.29. \end{cases}$$

O índice de refração n^{real} e o coeficiente de absorção α^{real} de $a\text{-Ge:H}$ são dados por

$$n^{\text{real}}(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{1}{\left(0.065 - \frac{15000}{\lambda^2}\right)}},$$

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

Experimentos numéricos

O índice de refração n^{real} e o coeficiente de absorção α^{real} do óxido de metal são dados por

$$n^{\text{real}}(\lambda) = \sqrt{1 + \frac{1}{\left(0.3 - \frac{10000}{\lambda^2}\right)}},$$

$$\ln(\alpha^{\text{real}}(E)) = 6.5944 \times 10^{-6} e^{(4.0846E)} - 11.02, \quad 0.5 < E < 3.5.$$

Nas expressões anteriores, o comprimento de onda λ é dado em nanômetros (nm), a energia do fóton $E = 1240/\lambda$ é dada em eV e o coeficiente de absorção α é dado em nm^{-1} .

Note que κ pode ser obtido a partir de α .

Para todos os experimentos, usamos $N = 100$. Os valores de λ_i utilizados são os 100 pontos do intervalo fechado $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ igualmente espaçados.

Para cada conjunto de filme e substrato descrito, calculamos os valores verdadeiros s^{real} , n^{real} e κ^{real} utilizando cada um desses λ_j .

A partir destes valores, calculamos a transmitância verdadeira dos filmes T^{real} .

Precisamos de um intervalo inicial para a espessura d . Utilizamos $d^{\text{min}} = 0.5d^{\text{real}}$ e $d^{\text{max}} = 1.5d^{\text{real}}$.

Instância	Esp verdadeira	Espessura	Erro quadrático	Tempo
Filme A	100	100	5.25E-07	250.68
Filme B	600	600	1.93E-07	1635.60
Filme C	100	105	1.15E-07	119.46
Filme D	600	600	1.69E-07	841.28
Filme E	80	80	1.26E-07	239.99

Tabela : Espessuras (em nanômetros) verdadeiras e recuperadas, erro quadrático e tempo (em segundos) gasto por GENLIN para resolver as instâncias Filme A a Filme E.

Os valores de espessura recuperados por GENLIN estão muito próximos dos valores reais.

Com relação às constantes ópticas recuperadas, apenas no caso do Filme C (Figura 11), o método obteve uma aproximação ruim para o coeficiente de absorção. Isso é esperado, dado o alto grau de indeterminação do modelo para este filme.

Resultados numéricos

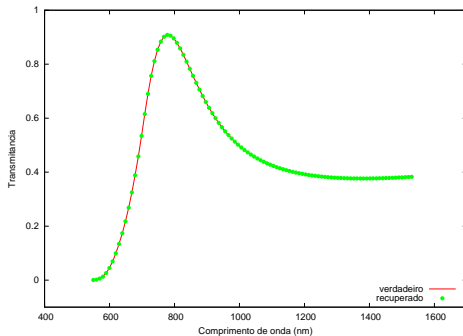


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme A.

Resultados numéricos

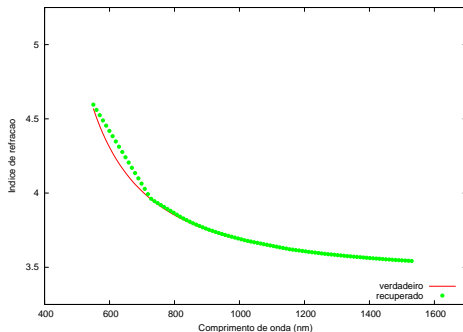


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de refração do Filme A.

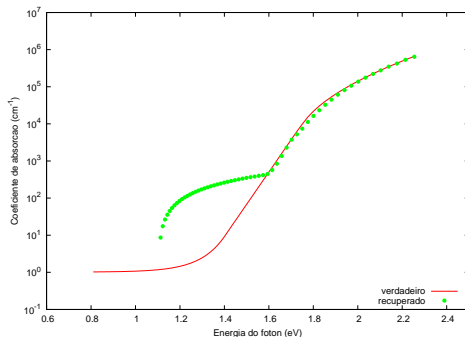


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme A.

Resultados numéricos

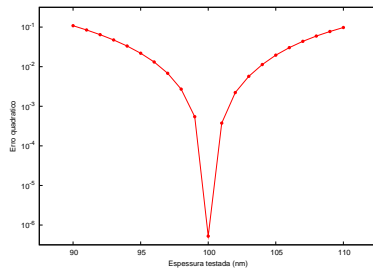
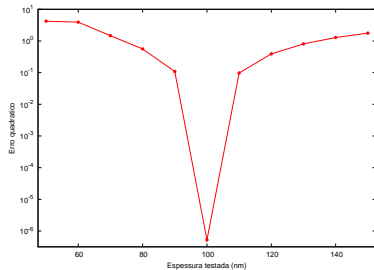


Figura : Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme A.

Resultados numéricos

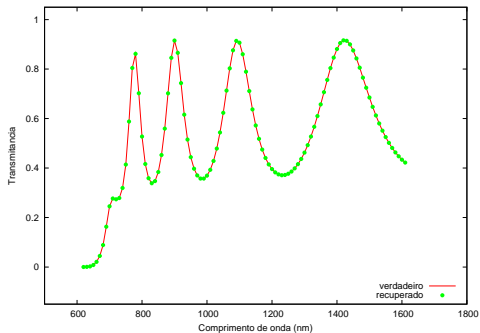


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme B.

Resultados numéricos

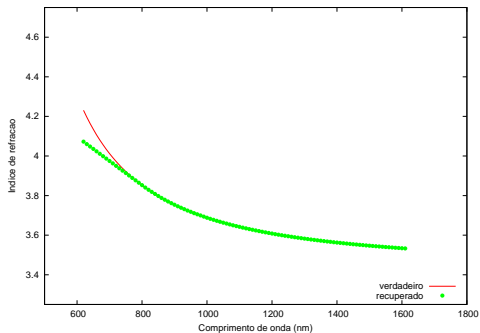


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de refração do Filme B.

Resultados numéricos

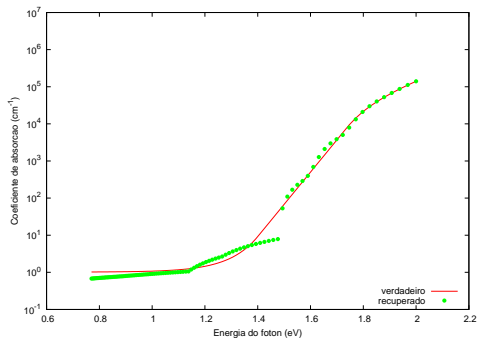


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme B.

Resultados numéricos

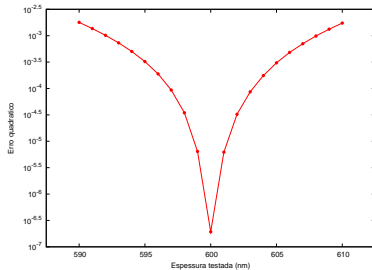
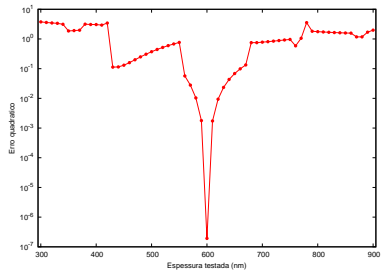


Figura : Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme B.

Resultados numéricos

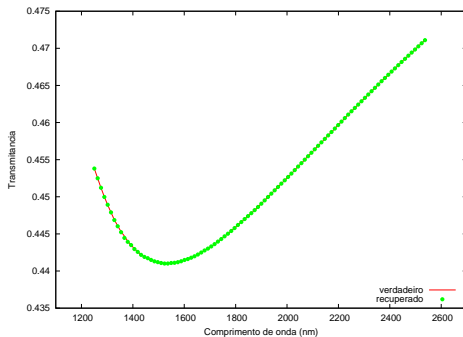


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme C.

Resultados numéricos

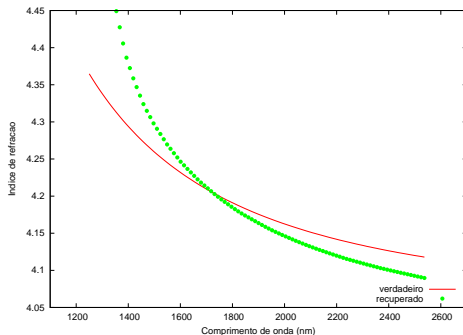


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme C.

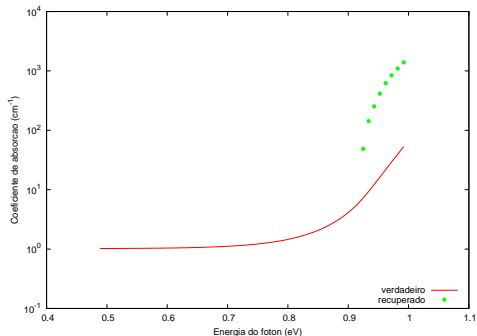


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme C.

Resultados numéricos

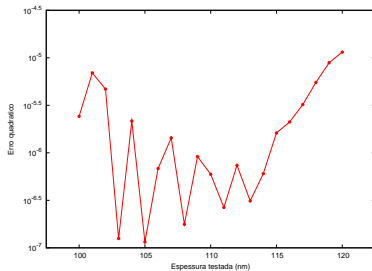
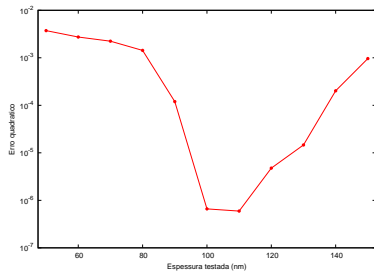


Figura : Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme C.

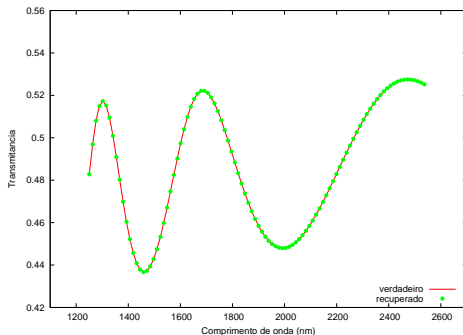


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme D.

Resultados numéricos

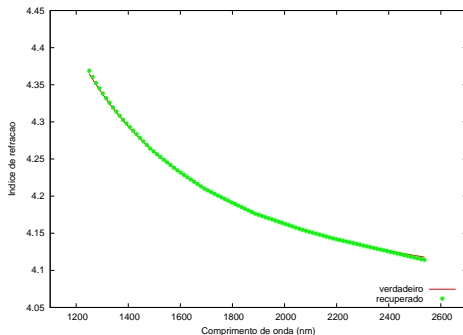


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme D.

Resultados numéricos

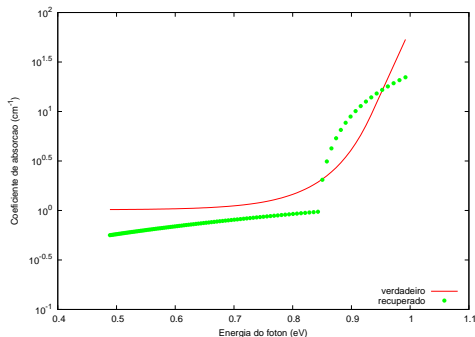


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme D.

Resultados numéricos

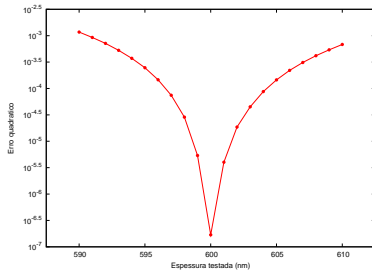
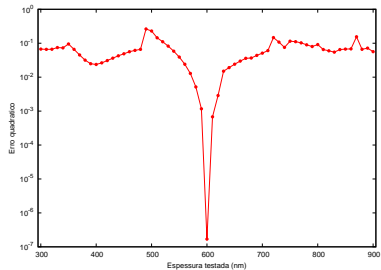


Figura : Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme D.

Resultados numéricos

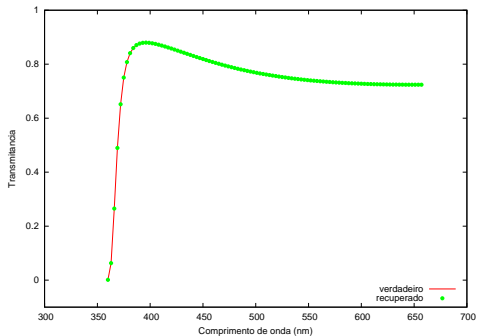


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme E.

Resultados numéricos

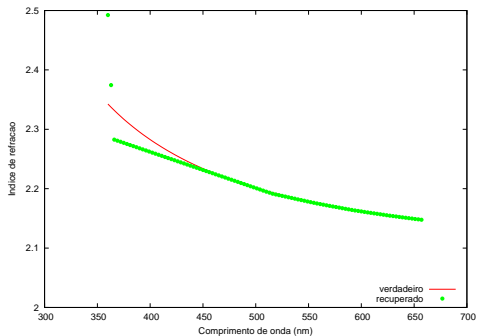


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme E.

Resultados numéricos

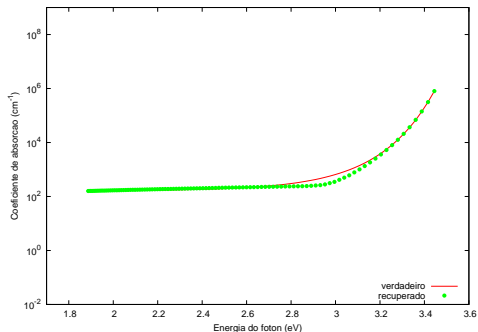


Figura : Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme E.

Resultados numéricos

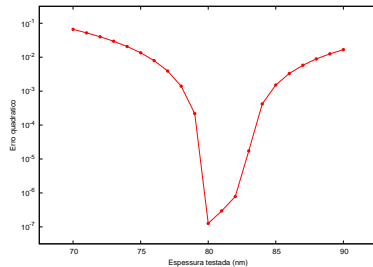
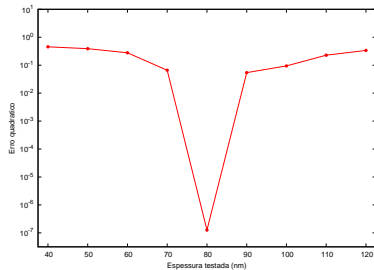


Figura : Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme E.