Aplicações

Marina Andretta

ICMC-USP

19 de outubro de 2010

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 mícron. 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.

Comportamento físico teórico

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

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

onde

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

Comportamento físico teórico

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

Comportamento físico teórico

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.

Modelo matemático

Um conjunto de dados experimentais

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

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

Este problema é altamente indeterminado.

Modelo matemático

Mesmo com d conhecido, queremos que valha

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

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.

Modelo matemático

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 $\lambda \in [\lambda_{\text{min}}, \lambda_{\text{max}}]$;

R2. $n(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ são funções decrescentes em λ;

R3. $n(\lambda)$ é convexa;

R4. existe $\lambda_{\text{infl}} \in [\lambda_{\text{min}}, \lambda_{\text{max}}]$ tal que $\kappa(\lambda)$ é convexa se $\lambda \geq \lambda_{\text{infl}}$ e côncava se $\lambda \leq \lambda_{\text{infl}}$.

Modelo matemático

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

Note que

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

Modelo matemático

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

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

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

Modelo matemático

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

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

$$\boxed{n_i \leq \tfrac{1}{2}(n_{i+1} + n_{i-1}), \; i = 2, \ldots, N-1.}$$

Modelo matemático

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,

$$\kappa_i \geq \kappa_{i-1} + \frac{\kappa_{i+1} - \kappa_{i-1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}}(\lambda_i - \lambda_{i-1}) \Rightarrow$$

$$\boxed{\kappa_i \geq \tfrac{1}{2}(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}),\ \lambda_{i+1} \leq \lambda_{\text{infl}},}$$

$$\kappa_i \leq \kappa_{i-1} + \frac{\kappa_{i+1} - \kappa_{i-1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}}(\lambda_i - \lambda_{i-1}) \Rightarrow$$

$$\boxed{\kappa_i \leq \tfrac{1}{2}(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}),\ \lambda_{i-1} \geq \lambda_{\text{infl}}.}$$

Modelo matemático

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

$$
\begin{array}{lll}
\text{Minimizar} & \sum_{i=1}^{N} [T_i^{\text{obs}} - T(\lambda_i, s_i, d, n_i, \kappa_i)]^2 & \\
\text{sujeita a} & n_{i+1} \le n_i, & i = 1, \ldots, N-1, \\
 & \kappa_{i+1} \le \kappa_i, & i = 1, \ldots, N-1, \\
 & n_i \le \frac{1}{2}(n_{i+1} + n_{i-1}), & i = 2, \ldots, N-1, \\
 & \kappa_i \ge \frac{1}{2}(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}), & \lambda_{i+1} \le \lambda_{\text{infl}}, \\
 & \kappa_i \le \frac{1}{2}(\kappa_{i+1} + \kappa_{i-1}), & \lambda_{i-1} \ge \lambda_{\text{infl}}, \\
 & n_i \ge 1, & i = 1, \ldots, N, \\
 & \kappa_i \ge 0, & i = 1, \ldots, N.
\end{array}
\tag{1}
$$

Algoritmo para resolução do problema

Note que, fixado d, temos $2N$ variáveis (n_i e κ_i, para $i = 1, \ldots, N$) 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}, $i = 1, \ldots, N$, 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 $\lambda_{\text{min}} + 0.2(\lambda_{\text{max}} - \lambda_{\text{min}})$, e 10^{-10} em λ_{max}.

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

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.

Experimentos numéricos

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-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;

Experimentos numéricos

- Filme B: este filme, como o Filme A, simula um filme fino de Silício amorfo hidrogenado (*a-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-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;

Experimentos numéricos

- Filme D: este filme, como o Filme C, simula um filme fino de Germânio amorfo hidrogenado (*a-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

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

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

Experimentos numéricos

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

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

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

Experimentos numéricos

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

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

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

Experimentos numéricos

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

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

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

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 $[\lambda_{\text{min}}, \lambda_{\text{max}}]$ igualmente espaçados.

Experimentos numéricos

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

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

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

Resultados numéricos

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.

Resultados numéricos

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

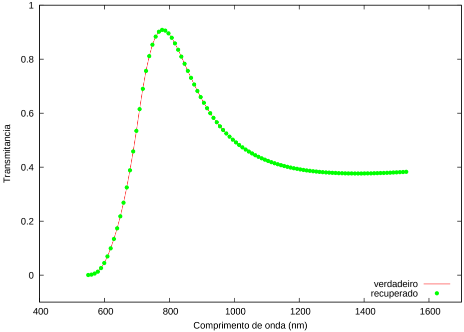


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme A.

Resultados numéricos

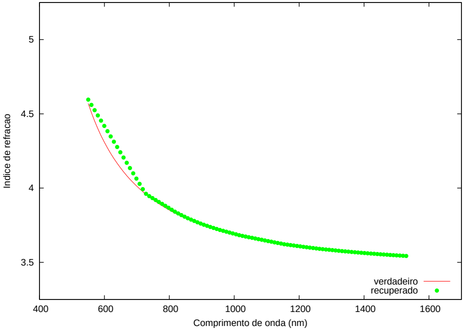


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme A.

Resultados numéricos

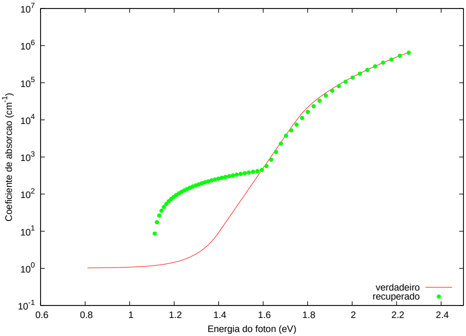


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme A.

Resultados numéricos

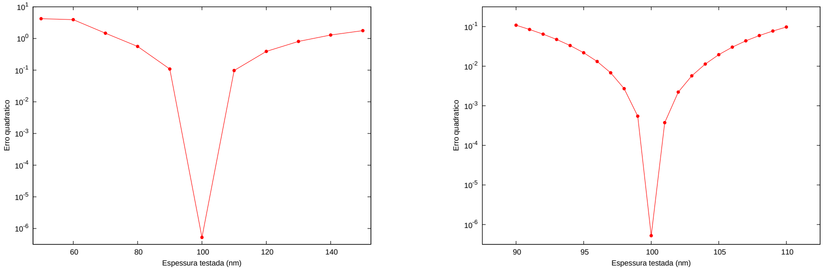


Figura: Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme A.

Resultados numéricos

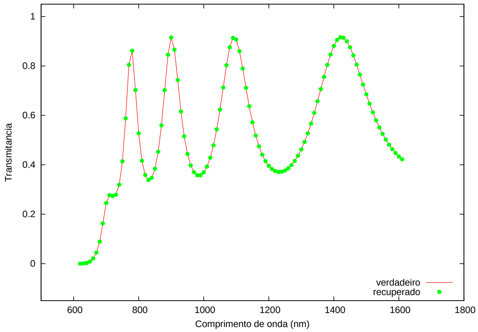


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme B.

Resultados numéricos

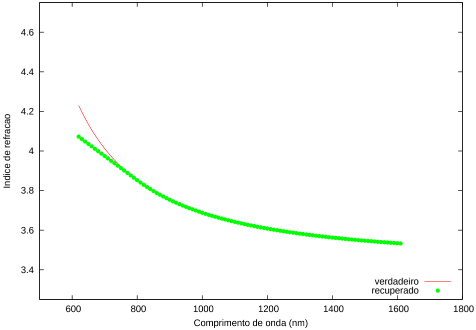


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme B.

Resultados numéricos

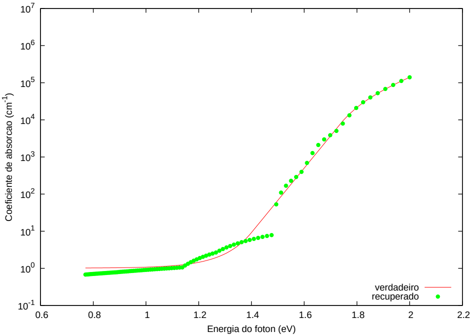
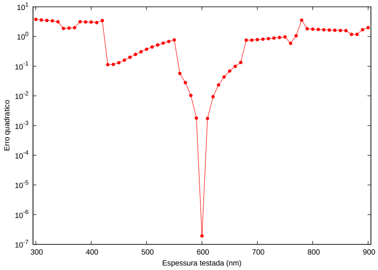


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme B.

Resultados numéricos



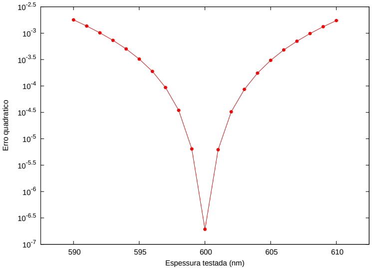


Figura: Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme B.

Resultados numéricos

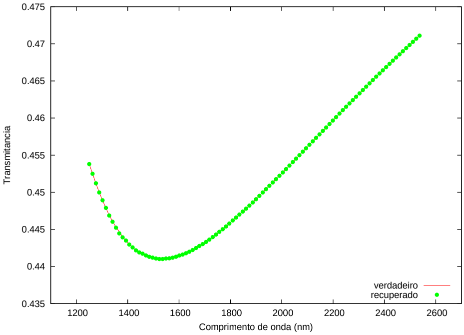


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme C.

Resultados numéricos

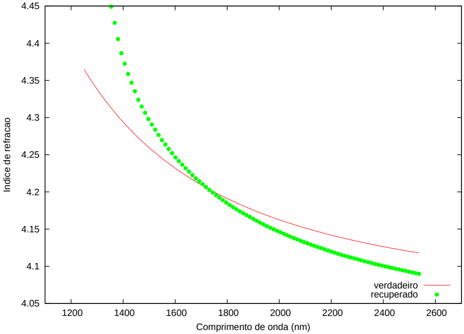


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme C.

Resultados numéricos

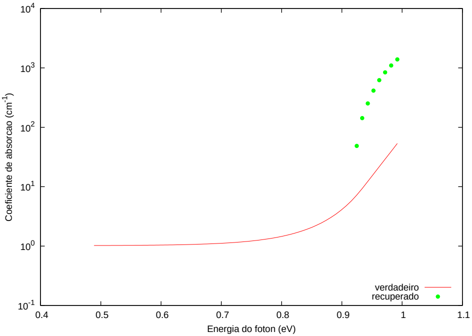


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme C.

Resultados numéricos

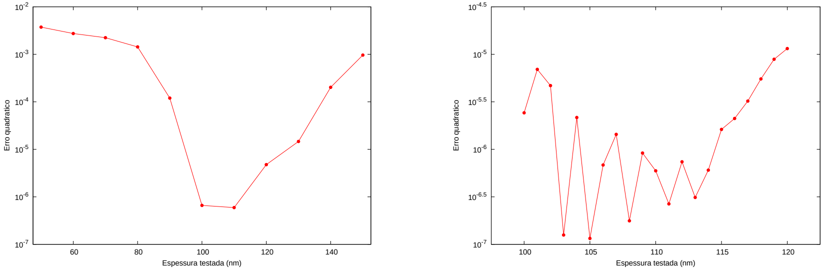


Figura: Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme C.

Resultados numéricos

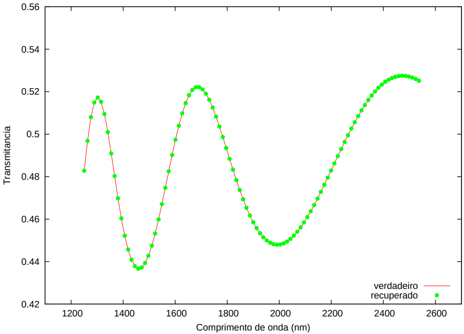


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme D.

Resultados numéricos

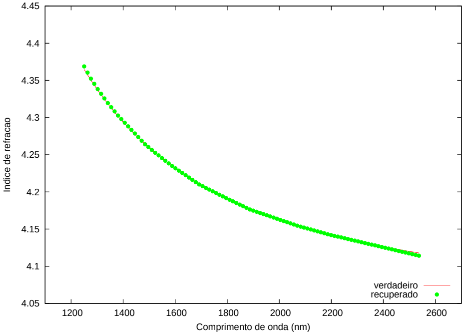


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme D.

Resultados numéricos

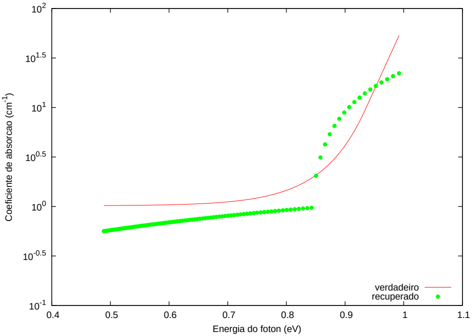
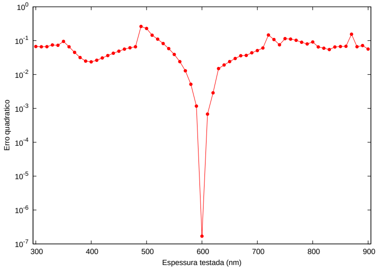


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme D.

Resultados numéricos



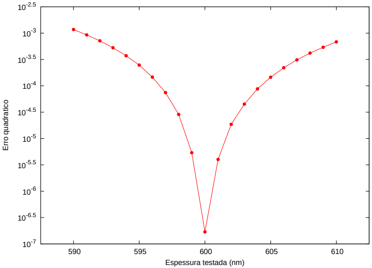


Figura: Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme D.

Resultados numéricos

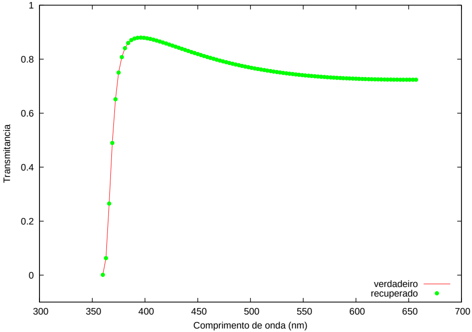


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para a transmitância do Filme E.

Resultados numéricos

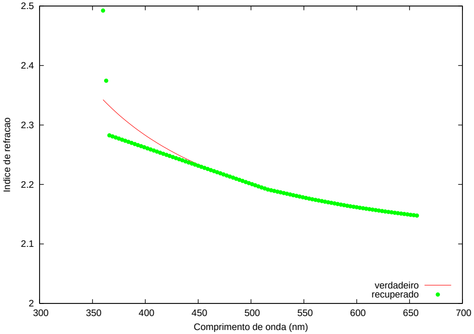


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o índice de reflexão do Filme E.

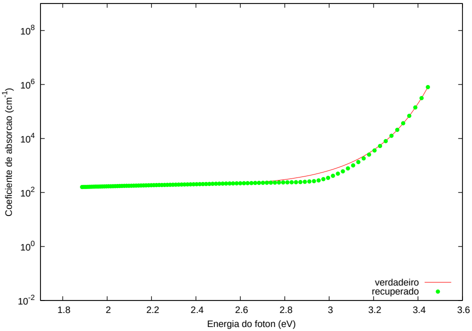
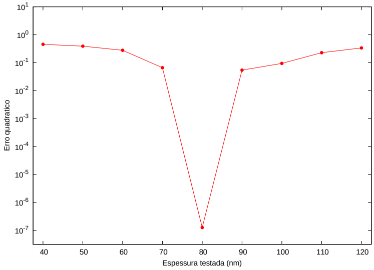


Figura: Valores reais e recuperados por GENLIN para o coeficiente de absorção do Filme E.

Resultados numéricos



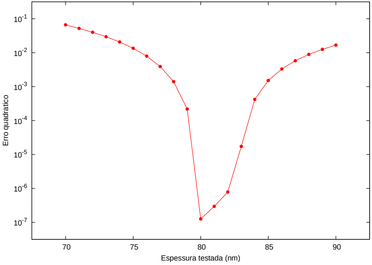


Figura: Erro quadrático obtido por GENLIN durante o processo de otimização em relação aos valores testados para espessura do Filme E.