# Projeto de Iniciação científica:

# Desenvolvimento de um aplicativo gráfico para a estimação de constantes óticas de filmes finos

O problema de estimar a espessura e as constantes óticas de um filme fino utilizando só dados de transmissão é muito desafiante do ponto de vista matemático, e tem importância tecnológica e econômica. Em muitos casos é um problema inverso muito mal condicionado com diversas soluções locais não-globais.

O problema consiste em achar a espessura $d$, o índice de refração $r(\lambda)$ e o coeficiente de atenuação $\kappa(\lambda)$ de um filme fino, utilizando apenas dados de transmissão. Emite-se luz com diferentes comprimentos de onda $\lambda_i$ e mede-se a luz transmitida $T_i^{meas}$ do outro lado do filme. Com um conjunto razoável de medições $(\lambda_i, T_i^{meas})$ tentamos descobrir as constantes óticas acima mencionadas. A espessura dos filmes é um importante parâmetro de desenho e caracterização. A transmissão ótica fornece informação precisa no intervalo do espectro onde o material vai da opacidade completa a algum grau de transparência [3, 6]. Algumas soluções aproximadas têm sido encontradas em casos onde a transmissão mostra um padrão de interferência numa região altamente transparente do espectro [7, 12, 13]. Porém, até agora, a solução geral do problema não tem sido satisfatória porque o sistema de equações é altamente indeterminado.

Recentemente, foi reportado um método novo, baseado num enfoque de minimização "ponto a ponto" com restrições, que permite resolver o caso geral [4, 5]. O método define um problema de programação não-linear, cujas variáveis são os coeficientes a serem estimados, com restrições que representam conhecimentos prévios da solução física. O novo método foi bem sucedido na recuperação de $d$, $r(\lambda)$ e $\kappa(\lambda)$ a partir de diferentes espectros de transmissão de filmes artificiais e reais [4, 5]. A maior dificuldade do enfoque do problema de otimização ponto a ponto com restrições é que é um problema de grande porte relativamente complexo de programação não-linear com restrições lineares cuja solução só pode ser obtida por meio de códigos sofisticados, e não sempre disponíveis, que trabalhem eficientemente com a esparsidade da matriz de restrições [9, 10].

Com o intuito de contornar o problema acima mencionado, em [1] foi introduzida uma nova formulação irrestrita do modelo de programação não linear. Nesse trabalho, o problema de estimação foi resolvido utilizando um método baseado em chamadas sucessivas a um algoritmo de minimização irrestrita recentemente introduzido [11, 2]. Experimentos numéricos em filmes gerados no computador mostraram que o novo procedimento é eficiente. Num outro trabalho ([8]) realizado com filmes verdadeiros, os alcances e limitações do método foram discutidos. Finalmente, esta em tramitação um pedido de patente deste procedimento.

A partir da publicação de [1] e [8] varias pessoas ligadas a área de filmes finos tem se mostrado interessadas em utilizar nosso *software*. Ele já existe mas não é muito fácil de usar e só foi testado em ambientes Unix. Entendemos que estes fatos estão limitando a possível utilização destas idéias pelas pessoas mais interessadas no assunto. O objetivo do presente projeto é desenvolver uma interface gráfica que facilite a entrada e saída de dados para assim viabilizar a utilização do *software*.

Inicialmente pretendemos fazer o aplicativo gráfico para o ambiente Unix. Numa segunda etapa pretendemos porta-lo para o ambiente Windows. Para quem quer desenvolver aplicações gráficas existe o Glade que usa a biblioteca GTK (usada primordiamente no desenvolvimento do GIMP e depois do Gnome) e o KDevelop (adequado para aplicações integradas ao KDE). Existem também perl, Tcl, etc. Tcl é uma linguagem interpretada para desenvolver GUIs (Graphical User Interfaces), ou seja, janelas gráficas que servem de máscara para outros programas. Pretendemos estudar as ferramentas citadas para depois escolher a mais adequada as nossas necessidades. Uma primeira idéia seria utilizar para Unix as seguintes ferramentas: GTK++, para programação gráfica usando a linguagem C++, e GDK para plotar gráficos. E para o Windows o Visual C++, compilador da Microsoft.

A primeira etapa do projeto consistirá no estudo da bibliografia básica do problema de estimação de constantes óticas. Numa segunda etapa serão analisadas as ferramentas para o desenvolvimento da interface gráfica. Finalmente o aplicativo será desenvolvido. Já um objetivo mais ambicioso seria interagir com algumas pessoas interessadas no *software* para que o *feedback* nos permita aprimorar a ferramenta e possibilitar a sua real utilização. Numa etapa posterior, fora do alcance do projeto atual, pretendemos analisar a possibilidade de explorar o fato do algoritmo ser altamente paralelizável.

## References


[1] E. G. Birgin, I. Chambouleyron and J. M. Martínez. Estimation of the optical constants and the thickness of thin films using unconstrained optimization. *Journal of Computational Physics* 151, pp. 862–880 (1999).

[2] E. G. Birgin, J. M. Martínez and M. Raydan. Nonmonotone spectral projected gradient methods on convex sets. *SIAM Journal on Optimization* 10, pp. 1196–1211 (2000).

[3] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon, London, 1980.

[4] I. Chambouleyron, J. M. Martínez, A. C. Moretti and M. Mulato, *Retrieval of optical constants and thickness of thin films from transmission spectra*, Applied Optics, 36 (1997), pp. 8238–8247.

[5] I. Chambouleyron, J. M. Martínez, A. C. Moretti and M. Mulato, *Optical constants of thin films by means of a pointwise constrained optimization approach*, Thin Solid Films, 317 (1998), pp. 133–136.

[6] O. S. Heavens, *Optical Properties of Thin Films*, Dover, New York, 1991.

[7] J. C. Manifacier, J. Gasiot, and J. P. Fillard, *A simple method for the determination of the optical constants n, k and the thickness of a weakly absorbin film*, J. Phys. E: Sci. Instrum, 9 (1976), pp. 1002.

[8] M. Mulato, I. Chambouleyron, E. G. Birgin and J. M. Martínez, *Determination of thickness and optical constants of a-Si:H films from transmittance data*, Applied Physics Letters 77 (2000), pp. 2133–2135.

[9] B. A. Murtagh and M. A. Saunders, *MINOS User's Guide*, Report SOL 77-9, Department of Operations Research, Stanford University, California, 1977.

[10] B. A. Murtagh and M. A. Saunders, *Large-scale linearly constrained optimization*, Mathematical Programming, 14 (1978), pp. 41–72.

[11] M. Raydan, *The Barzilain and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem*, SIAM Journal on Optimization, 7 (1997), pp. 26–33.

[12] R. Swanepoel, *Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon*, J. Phys. E: Sci. Instrum., 16 (1983), pp. 1214–1222.

[13] R. Swanepoel, *Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films*, J. Phys. E: Sci. Instrum., 17 (1984), pp. 896–903.