



Revista  
**Educar Mais**

## Novo método para a caracterização óptica de filmes finos

*New method for the optical characterization of thin films*

*Nuevo método para la caracterización óptica de películas delgadas*

Rafael Cardim Pazim<sup>1</sup>



• Rogério Junqueira Prado<sup>2</sup>



### RESUMO

A caracterização óptica de materiais é fundamental tanto para a pesquisa básica quanto aplicada. Novas metodologias de análise, mais práticas ou com maior precisão e/ou amplitude de utilização, são de grande importância para a área. Este artigo apresenta um novo método que permite obter a espessura e propriedades ópticas em toda a faixa UV-Vis de filmes finos. Diferente dos métodos atuais baseados no envelope de Manifacier, este se baseia na equação exata para a transmitância de filmes sobre substrato finito. Foram analisados espectros de transmitância gerados teoricamente e obtidos experimentalmente para filmes de AlN e TiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub> depositados por sputtering. Os resultados foram comparados aos do método do envelope e/ou elipsometria. Nos casos aplicáveis, os resultados foram similares, mas os avanços desta nova abordagem são claros, permitindo: (i) análise óptica de filmes sem limite mínimo de espessura, (ii) caracterização óptica na região de alta absorção do espectro, e (iii) modelos para filmes não homogêneos com nanopartículas dispersas. O método proposto é mais versátil e aplicável que o do envelope.

**Palavras-chave:** Filmes finos; Índice de refração; Transmissão óptica; Coeficiente de extinção; Método do envelope.

### ABSTRACT

*The optical characterization of materials is fundamental for both basic and applied research. New analysis methodologies, more practical or with greater precision and/or scope of use, are of significant importance to the field. This article presents a new method that allows obtaining the thickness and optical properties across the entire UV-Vis range of thin films. Unlike the current methods based on the envelope method of Manifacier, this one is based on the exact equation for the transmittance of films on a finite substrate. Optical transmittance spectra generated theoretically and obtained experimentally for AlN and TiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub> films deposited by sputtering were analyzed. The results were compared with those of the envelope method and/or ellipsometry. In applicable cases, the results were similar, but the advances of this new approach are clear, allowing: (i) optical analysis of films without a minimum thickness limit, (ii) optical characterization even in the high absorption region of the spectrum, and (iii) models for non-homogeneous films with dispersed nanoparticles. The proposed method is more versatile and applicable than the envelope method.*

**Keywords:** Thin films; Refractive index; Optical transmission; Extinction coefficient; Envelope method.

<sup>1</sup> Licenciado em Física, Mestre em Física, Doutorando em Ensino de Ciências e Matemática pela Universidade de Passo Fundo (UPF) e Professor do Instituto Federal Catarinense (IFC), Concórdia/SC – Brasil. E-mail: rafael.pazim@ifc.edu.br

<sup>2</sup> Bacharel, Mestre e Doutor em Física e Professor do Instituto de Física da Universidade Federal de Mato Grosso (UFMT), Cuiabá/MT – Brasil. E-mail: rjprado@fisica.ufmt.br

## RESUMEN

*La caracterización óptica de materiales es fundamental tanto para la investigación básica como aplicada. Nuevas metodologías de análisis, más prácticas o con mayor precisión y/o amplitud de utilización, son de gran importancia para el área. Este artículo presenta un nuevo método que permite obtener el espesor y propiedades ópticas en toda la gama UV-Vis de películas delgadas. A diferencia de los métodos actuales basados en el método del envelope de Manifacier, este se basa en la ecuación exacta para la transmitancia de películas sobre sustrato finito. Se analizaron espectros de transmitancia generados teóricamente y obtenidos experimentalmente para películas de AlN y TiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub> depositadas por sputtering. Los resultados se compararon con los del método del envelope y/o elipsometría. En los casos aplicables, los resultados fueron similares, pero los avances de este nuevo enfoque son claros, permitiendo: (i) análisis óptico de películas sin límite mínimo de espesor, (ii) caracterización óptica en la región de alta absorción del espectro, y (iii) modelos para películas no homogéneas con nanopartículas dispersas. El método propuesto es más versátil y aplicable que el método del envelope.*

**Palabras clave:** Películas delgadas; Índice de refracción; Transmisión óptica; Coeficiente de extinción; Método del envelope.

## 1. INTRODUÇÃO

Os filmes finos possuem inúmeras aplicações, dentre elas estão sistemas anti ou altamente refletivos, filtros interferométricos, dispositivos de polarização e sistemas absorvedores de calor (Heavens, 1960). Filmes finos também são largamente utilizados na microeletrônica e estão sendo estudados como barreiras de alta constante dielétrica (Kadoshima, 2003), transistores de filmes finos (Cheng et al., 2003), além de dispositivos optoeletrônicos (Silva et al., 1998) e micro-eletromecânicos, dentre outros (Tan & Miao, 2009). Várias aplicações específicas de filmes finos podem ser observadas nas referências (Winter et al., 2009; Driessen, Lambeck & Worhoff, 1999; Andreani et al., 2006; Moazzami et al., 2005; Machorro, Siqueiros & Regalado, 1988; Ortiz et al., 2006; Tripathi, Sharma & Barman, 2007; Yousef et al., 2007; Barman, Sharma & Tripathi, 2008; El-Sayad, 2008; Moustafa, El-Sayad & Marzouk, 2009).

Particularmente, a caracterização óptica de materiais é fundamental tanto para a pesquisa básica quanto aplicada, e compreende a obtenção do índice de refração  $n(\lambda)$ , coeficiente de extinção  $k(\lambda)$ , espessura do filme ( $d$ ) e gap óptico ( $E_g$ ). Todos esses parâmetros podem ser obtidos de um filme fino de faces paralelas através da análise do espectro de transmitância  $T(\lambda)$  obtido por espectrofotometria no visível e ultravioleta (UV-Vis), utilizando-se incidência normal à superfície do filme.

Todavia, há muitos caminhos que podem ser percorridos na busca pela caracterização óptica de filmes finos. As várias técnicas disponíveis diferem entre si, principalmente, pela precisão relativa, conveniência experimental e se a caracterização das propriedades ópticas deve ser realizada em determinada frequência ou numa faixa de frequências (Verleur, 1968).

Vários métodos foram propostos para a caracterização óptica na região espectral que vai do ultravioleta ao infravermelho próximo. Alguns fornecem também a espessura do filme. Essas informações são obtidas através da análise dos espectros de transmitância, refletância ou ambos para um filme fino sobre substrato absorvedor espesso, finito ou inexistente. Alguns dos primeiros pesquisadores a propor métodos numéricos com esta finalidade foram, conforme citado por

Swanepoel (1983): Hall et al., 1955; Lyashenko et al., 1964; além de Wales et al., 1967 e Szczyrbowski et al., 1977.

Os métodos consistiam basicamente em aproximações e interpolações sucessivas que permitiam encontrar as propriedades ópticas e espessura a partir dos dados da transmitância e refletância do filme, ou seja, era um procedimento que continha inúmeras iterações, por vezes somente possíveis com a ajuda de elaborados cálculos computacionais (Gasiot et al., 1976; Swanepoel, 1983). Esse tipo de busca fornecia bons resultados, mas apresentava um grave problema de múltiplas soluções para valores singulares de refletância, transmitância e espessura. Essas múltiplas soluções eram intrínsecas às equações utilizadas para descrever a transmitância e refletância dos filmes, que possuíam natureza oscilatória.

Alcançando grande salto em simplicidade com manutenção da precisão dos resultados, em 1976, Gasiot, Manificier & Fillard (1976) derivaram equações explícitas para as constantes ópticas e espessura dos filmes finos, sendo que seu método foi denominado de "método do envelope" e apenas necessitava do espectro de transmitância, eliminando-se os cálculos iterativos e as múltiplas soluções.

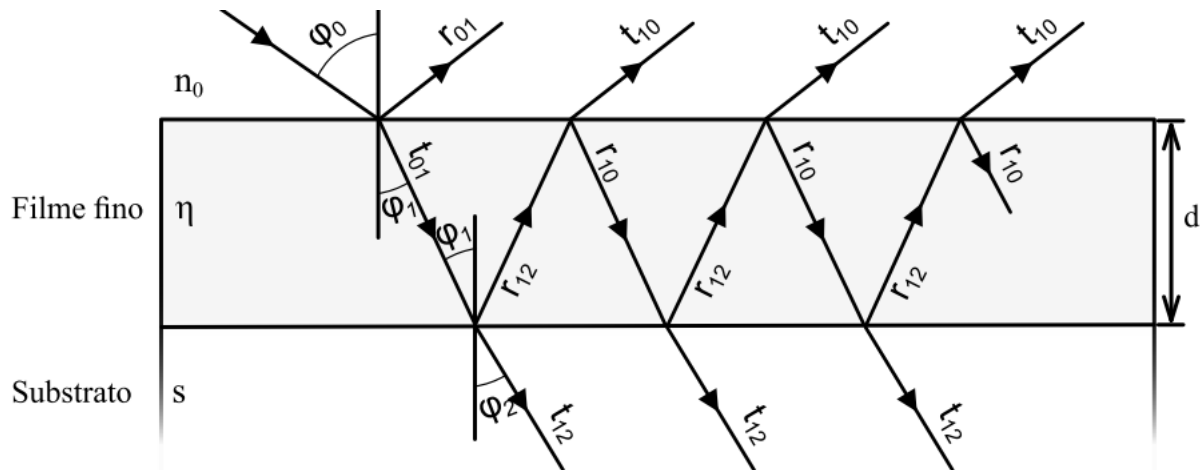
Mais tarde, em 1983, Swanepoel (1983) conseguiu melhorar ainda mais algumas das equações obtidas por Manificier, sendo que ainda hoje o método do envelope permanece altamente confiável nos casos em que ele é aplicável, o que basicamente requer filmes espessos ou que possuam índice de refração suficientemente alto para gerar um número mínimo de franjas de interferência no espectro de transmitância que possibilite o seu uso. Por exemplo, no caso de filmes com espessura igual ou inferior a 150 nm e índice de refração de aproximadamente 2, seria impossível utilizar o método do envelope, pois não surgem franjas de interferência suficientes no espectro para a utilização do mesmo. Assim, para se depositar um filme com espessura suficiente para que seja caracterizado pelo método do envelope (utilizando-se, por exemplo, a técnica de *sputtering*) pode levar mais de dez horas.

Desta forma, novos métodos de análise que, por exemplo, possibilitem a análise de filmes mais finos auxiliaria a reduzir enormemente o tempo de utilização dos equipamentos de deposição, quando depositando filmes para análise óptica por UV-Vis, e permitiria a caracterização de filmes finos com características mais próximas às de sua utilização em dispositivos, além de auxiliar na prevenção do craquelamento dos filmes depositados (o que em geral ocorre devido ao stress causado pela grande espessura dos filmes, um fenômeno bem comum). Novos métodos que permitam a análise óptica de filmes finos em sua região de alta absorção também seriam interessantes.

## 2. TEORIA

O sistema ar-filme-substrato-ar está esquematizado na Figura 1, na qual o feixe está inclinado apenas para melhor visualização.

Figura 1: Modelo óptico do sistema ar-filme-substrato.  $r$  e  $t$  representam as frações da amplitude da onda incidente que são refletidas e transmitidas, respectivamente



Fonte: Autores.

O feixe que adentra o filme sofre múltiplas reflexões que o farão retornar ou atravessar o filme. Cada feixe tem sua intensidade definida pelos coeficientes de Fresnel  $r_{ij}$  e  $t_{ij}$  (Heavens, 1991). A equação que descreve a transmitância total de um filme transparente sobre substrato finito é dada por (Cisneros, 1998),

$$T = \frac{(1-\rho)T}{1-\rho R'} \tag{1}$$

na qual  $T$  é a amplitude total da onda transmitida, dada por

$$T = \frac{t_{01}t_{12}e^{-i\delta_1}}{1+r_{01}r_{12}e^{-2i\delta_1}} \tag{2}$$

e

$$\rho = \frac{(1-s)^2}{(1+s)^2}$$

$$R' = \left[ \frac{r_{21} + r_{10}e^{-2i\delta_1}}{1 + r_{21}r_{10}e^{-2i\delta_1}} \right] \left[ \frac{r_{21} + r_{10}e^{+2i\delta_1}}{1 + r_{21}r_{10}e^{+2i\delta_1}} \right]$$

$$\delta_1 = \frac{2\pi nd}{\lambda}$$

Diferentemente do método do envelope (Gasiot et al., 1976; Swanepoel, 1983) que utiliza equações explícitas aproximadas para a obtenção das constantes ópticas, este método numérico está baseado na equação (1) e, portanto, não se utiliza de aproximações.

### 3. O MÉTODO DE ANÁLISE PROPOSTO – FILMES HOMOGÊNEOS

O programa para a implementação do método de análise foi elaborado em linguagem FORTRAN, e funciona de maneira automática após a leitura de um arquivo de entrada com as informações necessárias. Os dados experimentais de entrada são as curvas de transmitância óptica do substrato com e sem o filme depositado.

Para a análise de um filme que não tenha uma boa proposta inicial para a curva de seu coeficiente de extinção  $k(\lambda)$ , são necessárias três etapas de refinamento, descritas a seguir. Se já existe uma boa proposta para a curva de  $k(\lambda)$ , como, por exemplo, no caso de um filme similar já analisado previamente pelo programa, o número de etapas pode ser reduzido a uma, já iniciando a análise na terceira e última etapa do procedimento aqui descrito.

Na primeira etapa, realiza-se o ajuste do espectro de transmitância na região de baixa absorção do espectro, apenas, sendo que o nome do arquivo *ascii* que contém o espectro de transmitância  $T(\lambda)$  e sua respectiva região de baixa absorção devem ser definidos no arquivo de entrada, assim como devem ser informados bons valores iniciais para a espessura ( $d$ ) e para a curva de dispersão do índice de refração  $n(\lambda)$ , que é gerada com auxílio do modelo de Wemple e DiDomenico (1971). Nele, a dispersão do índice de refração está relacionada à energia do fóton, de acordo com a seguinte equação:

$$n^2 - 1 = \frac{E_0 E_d}{E_0^2 - E^2}$$

Nesta equação,  $E_0$  é a energia do oscilador,  $E_d$  é a energia de dispersão, e  $E$  a energia do fóton, todos em elétrons-volt. Este modelo foi escolhido por seu vasto uso na literatura e sua simplicidade, pois gera  $n(\lambda)$  a partir de, apenas, dois parâmetros ( $E_0$  e  $E_d$ ). Além disso, este modelo descreve bem o índice de refração de um grande número de materiais (Wemple; DiDomenico, 1971).

Nesta primeira etapa supõe-se que o filme seja perfeitamente transparente, ou seja,  $k(\lambda)$  é suposto igual a zero para todo comprimento de onda e, como parâmetros de saída, obtém-se  $d$ ,  $E_0$  e  $E_d$ , que são otimizados pelo método do  $\chi^2$  para a região de baixa absorção do espectro, definida pelo usuário no arquivo de entrada.

Na segunda etapa, utiliza-se como parâmetros fixos o trio  $d$ ,  $E_0$  e  $E_d$  obtido na primeira etapa, e obtém-se  $k(\lambda)$  otimizado ponto a ponto para todo o espectro, buscando o melhor ajuste da teoria com os dados experimentais de  $T(\lambda)$ . Nesta etapa, a função  $k(\lambda)$  obtida ainda está longe da solução correta, apresentando comportamento oscilatório.

Na terceira etapa, utilizando  $k(\lambda)$  obtido na etapa anterior, otimiza-se a espessura ( $d$ ) do filme para diferentes pares de  $E_0$  e  $E_d$ , que são variados dentro do intervalo definido pelo usuário no arquivo de entrada, obtendo-se curvas do coeficiente de extinção  $k(\lambda)$  para todo o espectro analisado (ponto a ponto). As diferentes curvas obtidas nesta etapa para o coeficiente de extinção  $k(\lambda)$ , uma para cada par de  $E_0$  e  $E_d$ , se sobrepostas num gráfico, produzem desenhos similares ao mostrado na Figura 2(b). Como pode ser notado, os "nós" (ou pontos de menor dispersão do coeficiente de extinção) da

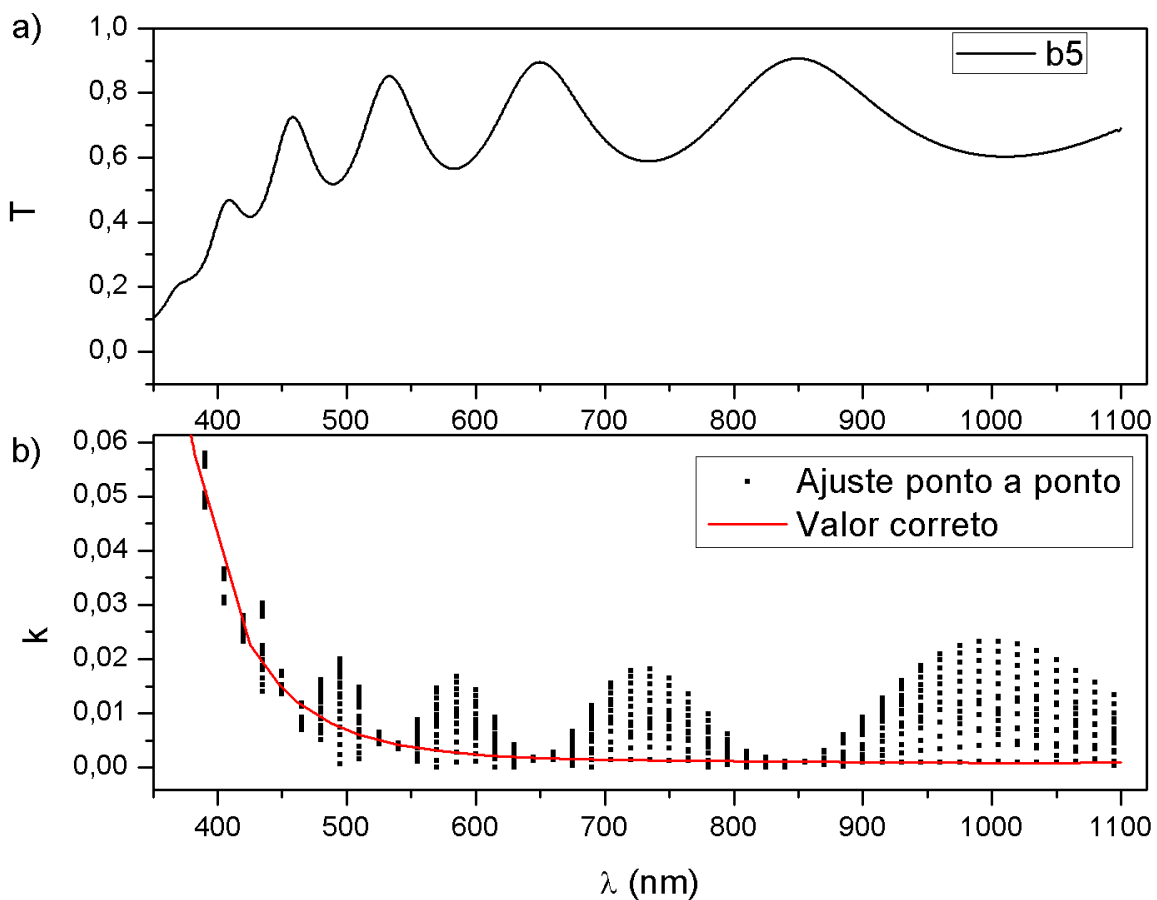
Figura estão posicionados sobre os máximos do espectro de transmitância, o que está totalmente de acordo com o fato de que, para um substrato não absorvedor e na condição de interferência construtiva, a transmitância máxima não depende do índice de refração do filme, mas somente do índice de refração do substrato ( $s$ ), conforme equação (3) (Swanepoel, 1983):

$$T_{max} = \frac{2s}{s^2+1} \quad (3)$$

O mesmo não acontece com a intensidade dos mínimos das franjas de interferência, que também dependem do índice de refração do filme, e por isso apresentam as regiões de maior dispersão do coeficiente de extinção  $k(\lambda)$  para um mesmo comprimento de onda, conforme pode ser visto na Figura 2(b) e equação (4):

$$T_{min} = \frac{4n^2s}{n^4+n^2(s^2+1)+s^2} \quad (4)$$

Figura 2: (a) Transmitância  $T(\lambda)$  do filme b5 (vide tabela 1) e (b) coeficiente de extinção  $k(\lambda)$  correto (linha vermelha) e ajustado ponto a ponto (pontos) para diferentes valores de  $E_o$  e  $E_d$



Fonte: Autores.

A comparação entre a solução para o coeficiente de extinção e as curvas obtidas correspondentes aos ajustes pontuais para diferentes valores de  $E_0$  e  $E_d$  apontam que a solução deve passar pelos "nós" existentes na Figura 2(b), e sugere que uma solução não oscilante (já que as oscilações dependem basicamente da espessura e índice de refração do filme) para o coeficiente de extinção seja uma boa escolha para a solução fisicamente correta entre as várias possíveis soluções obtidas.

A escolha de uma faixa adequada para a variação de  $E_0$  e  $E_d$  por parte do usuário é feita quando os "nós" das oscilações do coeficiente de absorção, mostradas na Figura 2(b), são bem visíveis e o gráfico com os ajustes de  $k(\lambda)$  no intervalo de  $E_0$  e  $E_d$  escolhido pelo usuário apresenta uma dispersão simétrica de curvas acima e abaixo do que seria a solução correta não oscilante que cruzaria pelos nós.

Para se aproximar dessa solução correta, é então realizada uma média simples das várias funções  $k(\lambda)$  obtidas, que é então ajustada pela função exp-linear indicada a seguir (equação 5), proposta pelos autores de forma empírica, e que tem funcionado de maneira satisfatória para os diferentes materiais depositados na forma de filmes finos ( $\alpha$ -SiC<sub>x</sub>H, AlN e TiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub>) que já foram analisados pelo programa (Queiroz, 2010; Pazim, 2011; Bonelli, 2013).

$$k(\lambda) = a \cdot \exp\left(-\frac{\lambda}{b}\right) + c + d\lambda \quad (5)$$

Na sequência, em função da minimização por  $\chi^2$  do espectro de transmitância, são definidos os melhores valores de  $d$ ,  $E_0$  e  $E_d$  utilizando-se a curva de  $k(\lambda)$  ajustada pela função exp-linear indicada e, portanto, não oscilante. Os dados de saída obtidos nesta etapa são, conseqüentemente,  $d$ ,  $E_0$ ,  $E_d$  e  $k(\lambda)$ . Esta terceira etapa do método é então realizada duas ou três vezes, utilizando-se os dados de saída como parâmetros de entrada da próxima otimização, até que se obtenha a estabilidade da solução. Os dados finais obtidos são então as curvas de  $n(\lambda)$  e  $k(\lambda)$ , e a espessura ( $d$ ) do filme.

A utilização da função exp-linear indicada não é fundamental para se determinar uma solução não oscilatória para a função  $k(\lambda)$ , mas a definição de um modelo para  $k(\lambda)$  facilita a automatização do programa, reduzindo enormemente a necessidade de intervenção do usuário durante o procedimento de análise sem modificar a precisão do método.

A combinação de uma função exponencial com uma linear, como aqui proposto, foi escolhida pela falta de modelos físicos para  $k(\lambda)$ , e levando-se em conta que, em vários dos casos analisados pelos autores (e mesmo antes da utilização da função exp-linear) havia o aumento de  $k(\lambda)$  na região de baixa absorção, para maiores comprimentos de onda, de maneira que o modelo utilizado também deveria satisfazer a essa possibilidade. Além disso, uma solução não oscilante para  $k(\lambda)$  é fisicamente desejável, com o intuito de se evitar que o programa de análise tente melhorar a qualidade do ajuste dos espectros teórico e experimental forçando oscilações em  $k(\lambda)$ , um erro grosseiro, mas comum.

#### 4. O MÉTODO DE ANÁLISE PROPOSTO – FILMES NÃO HOMOGÊNEOS (PARTÍCULAS DISPERSAS)

O modelo simplificado aqui proposto para a análise de partículas dispersas num filme consiste em se modificar o termo de fase  $\delta_1$  na equação (2), somando uma nova mudança de fase sofrida pelo feixe (causada pelas partículas supostamente homogêneas) à mudança de fase causada no feixe pela matriz também homogênea. Ao se inserir partículas no modelo, mantém-se a espessura do filme inalterada, o que equivale a retirar uma porção da matriz do filme e substituí-la por uma partícula com índice de refração diferente. O termo modificado torna-se:

$$\delta = \frac{2\pi n_m d_m}{\lambda} + \frac{2\pi n_p d_p}{\lambda}$$

$$d = d_m + d_p$$

Nas equações anteriores, os subíndices  $m$  e  $p$  correspondem às fases matriz e partícula, respectivamente, e  $d$  é a espessura total do filme. Note que  $d_p$  é o tamanho da partícula na direção do feixe e, como o experimento é feito com o feixe perpendicular à superfície do filme, espera-se obter o tamanho médio das partículas nessa direção. O valor de  $n_p$  pode, muitas vezes, ser obtido da literatura (Optical Society of America, 1994). A transmitância final deve ser obtida da equação (1).

Para que o modelo apresentado seja válido, o filme deve obedecer às seguintes condições:

- i) Que os índices de refração da matriz e partícula sejam próximos, de maneira que reflexões e refrações nas interfaces matriz-partícula possam ser desconsideradas (isso é particularmente uma boa aproximação no caso de matriz amorfa e partícula cristalina de um mesmo material);
- ii) As interfaces matriz-partícula devem ser abruptas ( $d_{interface} \ll d_p \ll d$ );
- iii) Baixa densidade de partículas dispersas na matriz, de maneira que o feixe, em cada ponto do filme em que haja partícula, atravesse apenas uma partícula.

Este modelo simples de partículas dispersas em matriz homogênea e as condições citadas podem ser implementadas no processo de minimização numérica para filmes homogêneos, possibilitando que a espessura do filme seja otimizada em conjunto com os demais parâmetros, como a porcentagem do feixe incidente que atravessa partículas dispersas na matriz e o tamanho médio dessas partículas na direção do feixe. Este é um modelo simples, utilizado aqui apenas para se avaliar algumas das possibilidades do método, mas que pode ser aperfeiçoado. Também, com algumas alterações, deve ser possível simular mais de um tipo de partícula presente no filme, não se limitando a um sistema de, apenas, duas fases.

Para a análise utilizando-se o modelo de partículas dispersas em matriz homogênea, a simulação foi realizada supondo-se 10.000 feixes que incidem perpendicularmente sobre o filme. A quantidade relativa de partículas nos filmes pode ser avaliada por um parâmetro do ajuste que quantifica quantos dos feixes incidentes atravessam uma única partícula dispersa no filme (supostamente com baixa densidade de partículas).

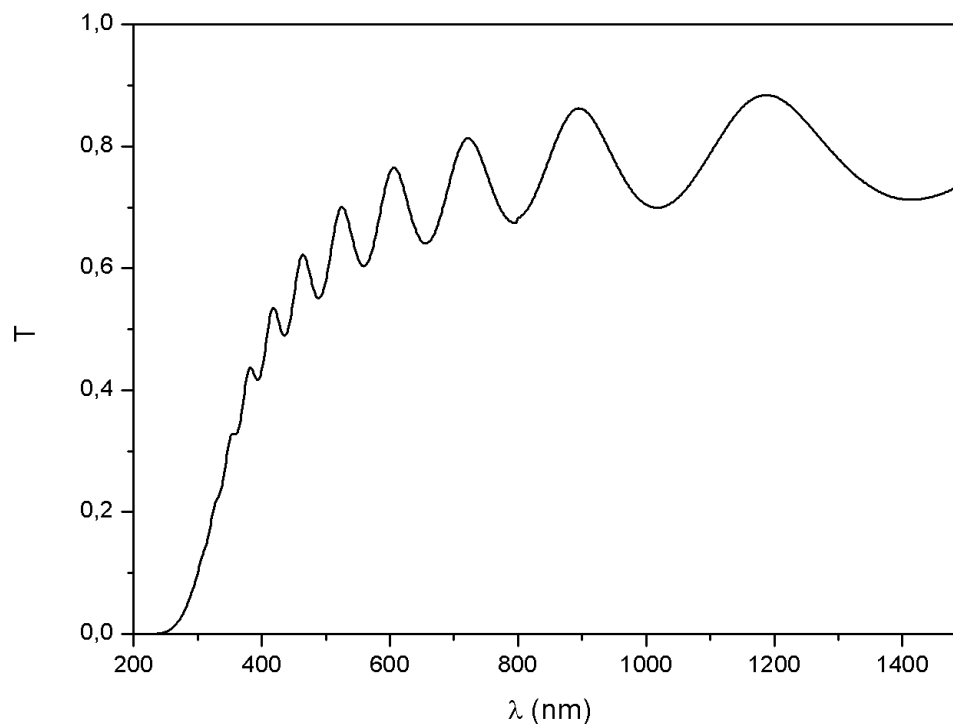


## 5. RESULTADOS – FILMES HOMOGÊNEOS

Para testar o programa desenvolvido e o procedimento aqui sugerido foram utilizados vários espectros de transmitância obtidos de filmes homogêneos de  $\alpha$ -SiC<sub>x</sub>H, AlN e TiO<sub>x</sub>N<sub>y</sub> depositados por PECVD (Queiroz, 2010) e *sputtering* (Pazim, 2011; Bonelli, 2013). Todos os espectros experimentais foram obtidos pela técnica de UV-Vis. Também foram utilizados espectros de transmitância gerados numericamente, a partir das mesmas equações utilizadas neste trabalho.

A Figura 3 apresenta o espectro de transmitância obtido por UV-Vis de um filme de AlN, cujos parâmetros ópticos e espessura foram também determinados utilizando-se o método do envelope (Gasiot et al., 1976) e o método numérico aqui proposto (Pazim, 2011).

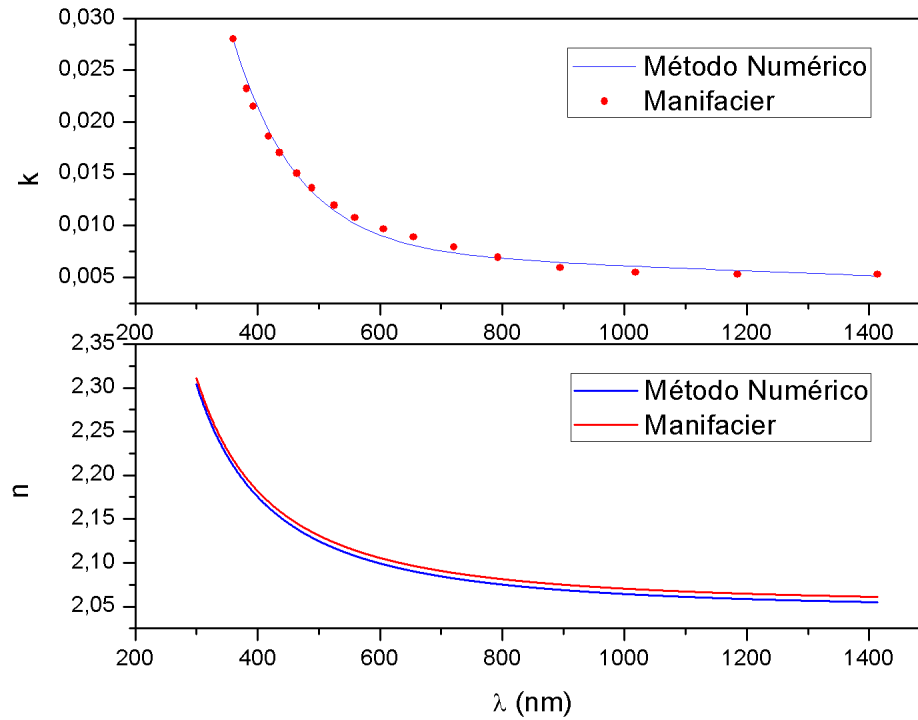
Figura 3: Espectro de transmitância  $T(\lambda)$  do filme de AlN



Fonte: Autores.

Na Figura 4 são exibidas as curvas de  $n(\lambda)$  e  $k(\lambda)$  obtidas para o referido filme, utilizando-se ambos os métodos de análise óptica. Note que tanto o coeficiente de extinção  $k(\lambda)$  quanto o índice de refração  $n(\lambda)$  determinados pelos dois métodos são muito próximos. Por exemplo, a diferença entre os índices de refração determinados por ambos os métodos é inferior a 1% em qualquer região do espectro. As espessuras determinadas também são equivalentes, 861 nm pelo método do envelope e 864 nm pelo método numérico, mostrando que o método aqui proposto para a obtenção das propriedades ópticas e espessura de filmes finos é, na pior das hipóteses, tão adequado quanto o método do envelope para a análise de filmes homogêneos.

Figura 4: Coeficiente de extinção  $k(\lambda)$  e índice de refração  $n(\lambda)$  obtidos pelo método numérico aqui proposto comparados com os mesmos dados obtidos pelo método do envelope de Manifacier



Fonte: Autores.

Para uma melhor ilustração das possibilidades do método desenvolvido neste trabalho, bem como para uma primeira estimativa da precisão e eficiência do método e programa de análise desenvolvido, foram gerados teoricamente nove espectros de filmes finos com diferentes índices de refração e espessura, conforme ilustrado na Tabela 1. Todos os espectros foram gerados utilizando-se uma mesma curva do coeficiente de extinção, obtida de um filme de  $a\text{-SiC}_x\text{:H}$  (Queiroz, 2010), que possui  $k(\lambda) < 10^{-2}$ . Todavia, testes realizados (Pazim, 2011) mostram que o resultado correto pode ser obtido independentemente da função  $k(\lambda)$  utilizada como parâmetro de entrada na primeira etapa do método. Por isso, inclusive, os autores sugerem que a análise seja iniciada supondo-se  $k(\lambda) = 0$  na primeira etapa de utilização do programa.

Tabela 1: Parâmetros utilizados para gerar espectros teóricos  $T(\lambda)$  de filmes finos e os resultados obtidos com a análise desses espectros pelo método numérico (MN) aqui proposto

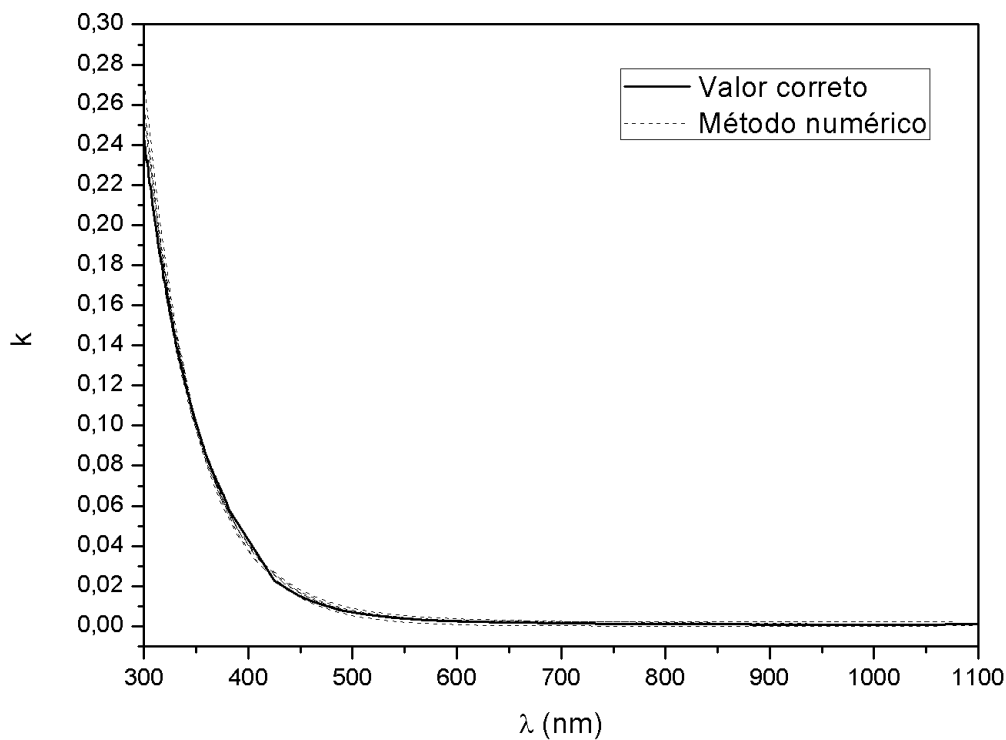
Filme	$n(E_0, E_d)$	$(E_0, E_d)_{MN}$	$d(\text{nm})$	$d_{MN}(\text{nm})$
a1	1,91(6,16)	(6,16)	100	101
a5	--	(6,16)	500	500
a10	--	(6,16)	1000	1000
b1	2,48(6,31)	(6,31)	100	100
b5	--	(6,31)	500	500
b10	--	(6,31)	1000	1000
c1	3,00(6,48)	(6,47)	100	101
c5	--	(6,49)	500	495
c10	--	(6,47)	1000	1010

Fonte: Autores.

Os resultados obtidos são também mostrados na Tabela 1. Note que o erro na determinação das espessuras é da ordem de 1%, no máximo, enquanto que  $E_o$  e  $E_d$  são também determinados com grande precisão (erro de até 2% para  $E_d$ ).

As curvas de  $k(\lambda)$  obtidas pelo método são mostradas na Figura 5 e comparadas à curva utilizada como parâmetro de entrada para se gerar os espectros de transmitância teóricos. Observe que todas as curvas  $k(\lambda)$  obtidas são praticamente equivalentes à curva utilizada como parâmetro de entrada, e que a dispersão das soluções encontradas para  $k(\lambda)$  a partir dos diferentes espectros gerados é muito pequena.

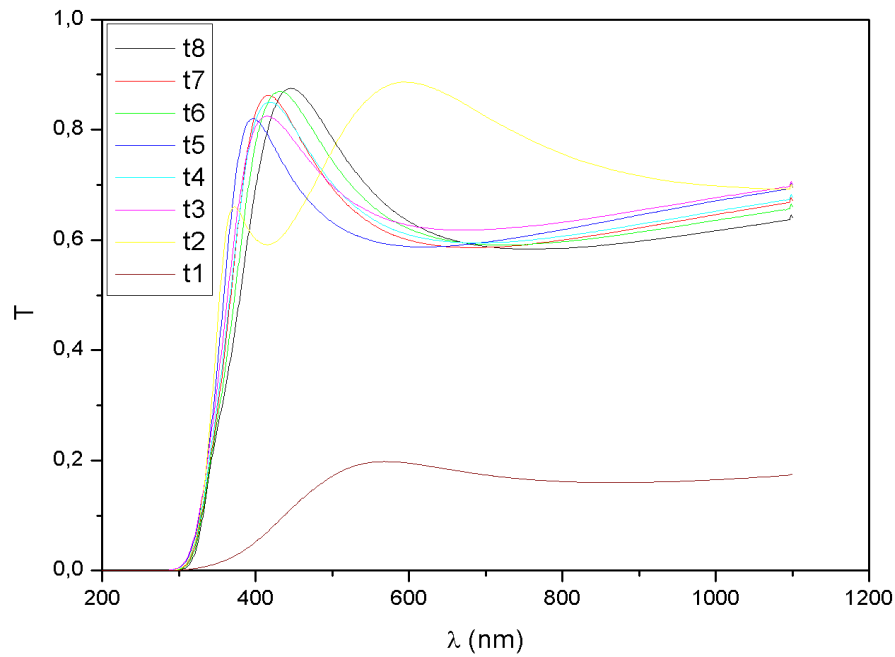
Figura 5: Coeficientes de extinção  $k(\lambda)$  obtidos pelo método (traços), a partir dos espectros de transmitância  $T(\lambda)$  gerados com os parâmetros indicados na Tabela 1, comparados ao coeficiente de extinção  $k(\lambda)$  utilizado para se gerar os espectros (linha)



Fonte: Autores.

Após os testes do método e do programa de análise, utilizando-se espectros gerados teoricamente, o procedimento de análise foi aplicado a filmes reais de  $TiO_xN_y$  depositados por *sputtering* (Bonelli, 2013), cujos espectros de transmitância obtidos por UV-Vis são mostrados na Figura 6. Note que estes espectros não poderiam ser analisados utilizando-se o método do envelope uma vez que, por serem muito finos, não há nos espectros experimentais o número mínimo de oscilações exigido para a utilização do mesmo.

Figura 6: Espectros de transmitância dos filmes de  $TiO_xN_y$



Fonte: Autores.

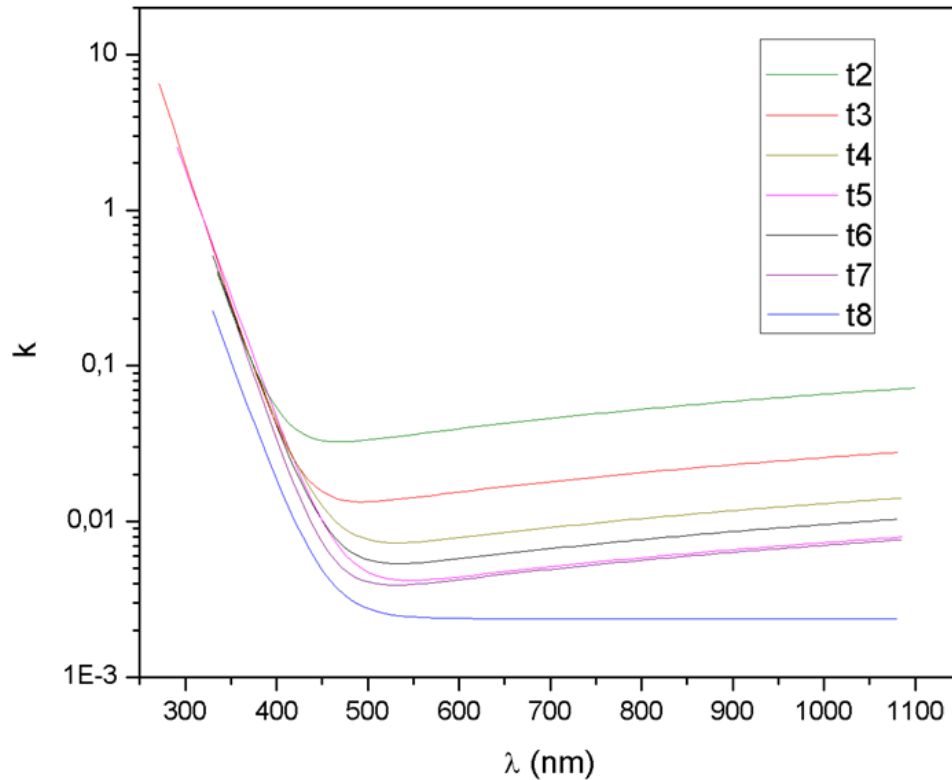
Neste caso, os resultados obtidos para o índice de refração e espessura utilizando-se o método numérico aqui descrito foram comparados com dados experimentais obtidos por elipsometria para os mesmos filmes (Tabela 2). Na Figura 7 são exibidas as curvas de  $k(\lambda)$  obtidas para os filmes analisados pelo método aqui proposto.

Tabela 2: Nome do filme e condições de deposição (porcentagem de Ar,  $N_2$  e  $O_2$  utilizadas na mistura gasosa) dos filmes de  $TiO_xN_y$  e resultados obtidos pelo método aqui proposto e elipsometria

Filme(Ar, $N_2$ , $O_2$ )	$E_o$ (MN)	$E_d$ (MN)	$d_{MN}$ (nm)	$d_{elipsometria}$ (nm)	$n_{MN}$ ( $\lambda=618nm$ )	$n_{elipsometria}$ ( $\lambda=618nm$ )
t2(60,30,10)	4,8	17,4	124	76,8	2,322	2,301
t3(60,25,15)	5,1	22,3	71	82,8	2,485	2,499
t4(60,20,20)	5,1	25,1	69	78,6	2,612	2,613
t5(60,15,25)	5,3	26,2	64	83,4	2,602	2,602
t6(60,10,30)	4,9	24,8	68	82,2	2,661	2,652
t7(60,5,35)	4,9	24,7	72	75,7	2,614	2,657
t8(60,0,40)	4,9	22,0	80	105,8	2,529	2,661

Fonte: Autores.

Figura 7: Coeficientes de extinção obtidos para os filmes de  $TiO_xN_y$  utilizando o método numérico aqui proposto.



Fonte: Autores.

De forma a se facilitar a comparação dos dados, realizou-se uma análise das razões entre os índices de refração medidos pelo método numérico e por elipsometria para os filmes especificados na Tabela 2. A partir dos valores calculados, mostrados na Tabela 3, observa-se que a maioria dos filmes apresenta uma razão muito próxima de 1, indicando uma excelente concordância entre as medições realizadas pelos dois métodos. A maior diferença ocorre com o filme t8, para o qual a discrepância entre os resultados de ambas as técnicas é de 5% (razão de 0,950), todos os outros filmes mostram discrepâncias entre os resultados menores que 1,5%. Contudo, o filme t8 é amorfo e o valor de  $n$  obtido pelo método numérico ( $n = 2,529$ ) está de acordo com o esperado pela literatura, uma vez que o valor de  $n$  para o dióxido de titânio cristalino é  $n(\lambda = 618nm) = 2,593$  (Devore, 1951), e se espera obter um valor menor para o índice de refração de um filme amorfo. Assim, a causa desta maior discrepância pode estar na própria precisão da técnica de elipsometria, e não no método aqui proposto.

Uma análise similar foi aplicada para avaliar a consistência entre a espessura dos filmes obtida pelo método numérico e por elipsometria. Para cada filme da Tabela 2, calculou-se a razão entre a espessura determinada pelo método numérico ( $d_{MN}$ ) e aquela determinada por elipsometria ( $d_{elipsometria}$ ). Os valores obtidos também são mostrados na Tabela 3. Observa-se, para o filme t2, um valor muito discrepante dos demais para a razão entre a espessura determinada pelos dois métodos (razão igual a 1,61), indicando uma clara inconsistência entre os resultados obtidos por ambas as técnicas para este filme.

Tabela 3: Razões entre as espessuras e os índices de refração determinados pelo método numérico (MN) e por elipsometria

Filme(Ar,N <sub>2</sub> ,O <sub>2</sub> )	$\frac{n_{MN}}{n_{elipsometria}}$	$\frac{d_{MN}}{d_{elipsometria}}$
t2(60,30,10)	1,009	1,6146
t3(60,25,15)	0,994	0,8575
t4(60,20,20)	0,999	0,8776
t5(60,15,25)	1,000	0,7674
t6(60,10,30)	1,003	0,8270
t7(60,5,35)	0,984	0,9511
t8(60,0,40)	0,950	0,7563

Fonte: Autores.

Todavia, sabe-se que os resultados obtidos por elipsometria são altamente sensíveis às condições de contorno iniciais (parâmetros de entrada) e, especificamente, do caminho óptico percorrido pelo feixe de luz no filme, o valor de entrada da espessura é de vital importância para a técnica. Assim, esta discrepância pode ser consequência de que o filme analisado apresente, na realidade, algo em torno do dobro da espessura determinada por elipsometria, o que forneceria um resultado similar e poderia explicar a maior razão entre a espessura determinada pelas duas técnicas para o filme t2. Decidiu-se, então, por se desconsiderar os dados obtidos por elipsometria para a amostra t2.

O desvio padrão original para a razão entre os índices de refração, calculado antes da exclusão dos dados para o filme t2, era de 0,020, indicando uma variação moderada das razões de espessura em relação à média. Desconsiderando os dados obtidos para o filme t2, a nova média das razões entre os índices de refração passa a ser 0,988 e o desvio padrão recalculado diminui para 0,012. Já para a razão entre as espessuras, o desvio padrão original, que era de 0,278 antes da exclusão dos dados obtidos para o filme t2, indicando uma variação moderada das razões de espessura em relação à média, passa a ser de 0,063, enquanto que a média obtida entre as razões passa a ser de 0,835.

## 6. RESULTADOS – FILMES NÃO HOMOGÊNEOS (PARTÍCULAS DISPERSAS)

Na tentativa de avaliar a viabilidade de implementação de um modelo para a análise de partículas dispersas num filme, utilizando o método aqui apresentado, foram analisados filmes de nitreto de alumínio depositados pela técnica de *Sputtering* (Pelegri, 2010). A proporção relativa dos gases argônio e nitrogênio, a temperatura do substrato, a pressão na câmara e a densidade de potência de rf utilizadas em cada deposição são mostradas na Tabela 4.

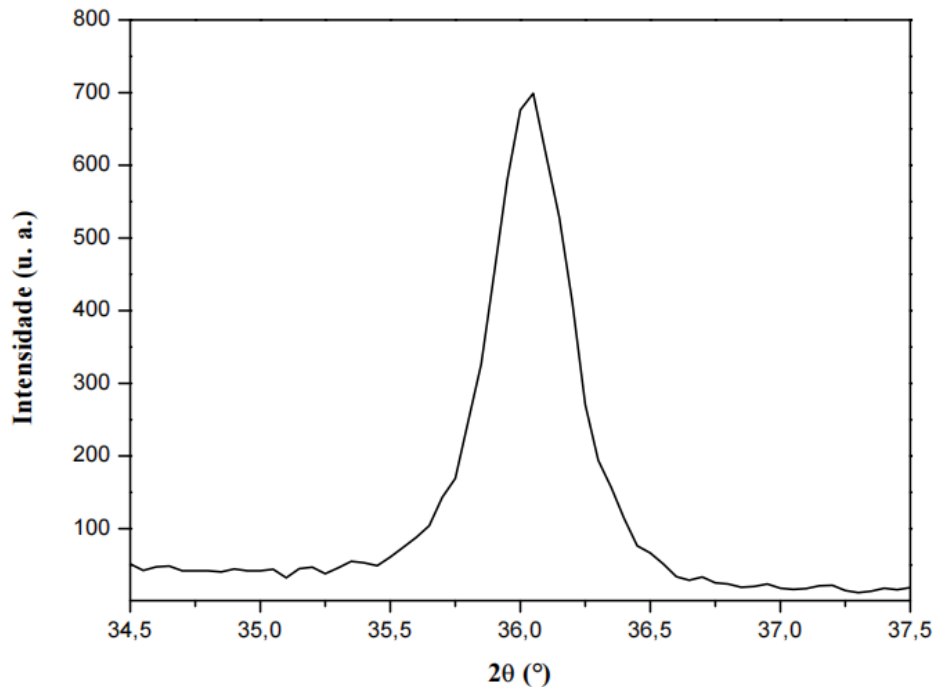
Tabela 4: Condições de deposição dos filmes de nitreto de alumínio

Filme	Ar (%)	N <sub>2</sub> (%)	Temperatura (°C)	Pressão	Potência de rf
A-1	70	30	25	2	1,23
A-2	80	20	250	2	1,23
A-3	30	70	25	2	1,23
A-4	70	30	350	2	1,23
A-5	70	30	150	2	1,23

Fonte: Autores.

A partir dessas condições de deposição foram obtidos filmes amorfos e homogêneos (A-1 e A-2), filmes amorfos e não homogêneos (A-3 e A-4), e o filme A-5 que apresenta nanocristais dispersos em volume, como atesta o pico referente ao plano (002) da fase wurtzita hexagonal do nitreto de alumínio (Swaminathan et al., 2011), obtido para o filme A-5 (Figura 8). O tamanho médio do cristalito calculado pela fórmula de Scherrer (Cullity, 1967) para este filme é de 30 nm.

Figura 8: Difratograma do filme A-5 e seu único pico, em torno de 36° em 2θ



Fonte: Autores.

Antes de aplicar o modelo de partículas dispersas, realizou-se a caracterização dos filmes considerando-os homogêneos. O índice de refração estático ( $n_e$ ) e os coeficientes  $E_0$  e  $E_d$  encontrados para cada filme são mostrados na Tabela 5. Interessante notar que o índice de refração estático ( $n_e$ ), obtido no limite de energia nula do fóton, é mais alto para os filmes A-1 e A-2, mais homogêneos, e decresce ligeiramente para os filmes A-3, A-4 e A-5, que devem possuir grau decrescente de homogeneidade, nesta ordem. Isso porque, na literatura (Joo et al., 2000), filmes epitaxiais de AlN possuem índice de refração de 2,1, e o nitreto de alumínio policristalino apresenta índice de refração maior ( $1,9 \leq n \leq 2,1$ ) que o nitreto de alumínio amorfo ( $1,8 \leq n \leq 1,9$ ).

Tabela 5: Sumário dos valores do índice de refração estático  $n_e$  e os parâmetros  $E_0$  e  $E_d$  obtidos para os filmes de nitreto de alumínio, aqui supostamente homogêneos

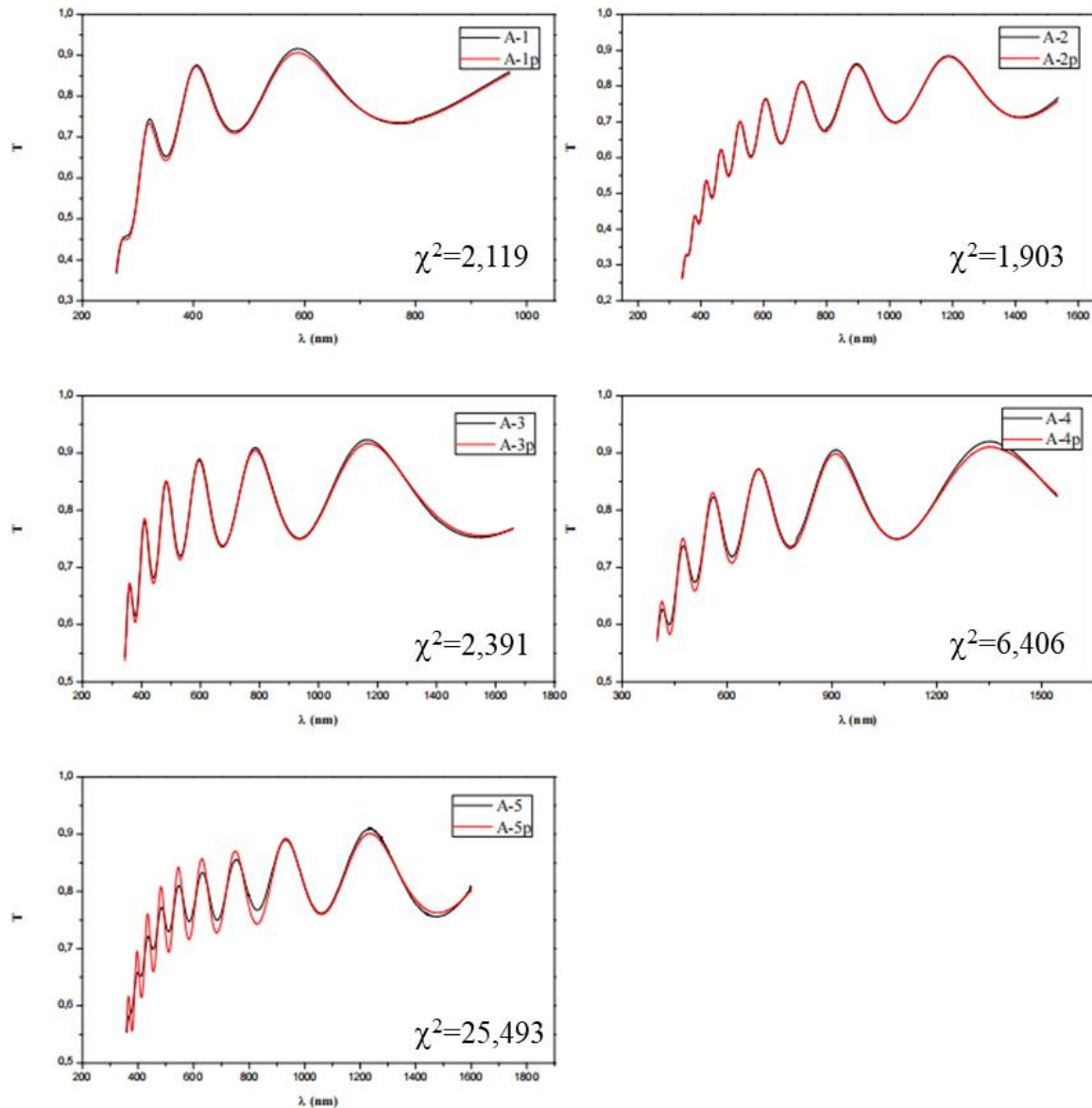
Filme	$n_e$	$E_0$	$E_d$
A-1	2,01	8,26	25,17
A-2	2,05	8,13	26,02
A-3	1,97	8,20	23,57
A-4	1,95	7,55	21,27
A-5	1,91	7,47	19,79

Fonte: Autores.

Uma maneira evidente de mostrar a possível eficácia (ou certa ineficácia) do programa e modelo de análise e, por consequência, a validade ou não dos resultados obtidos é simplesmente reconstruir o espectro de transmitância de cada filme, utilizando os parâmetros ópticos obtidos com o método

apresentado neste artigo, e compará-lo com o espectro experimental obtido pela técnica de UV-Vis. Caso as curvas obtidas para o índice de refração  $n(\lambda)$  e/ou coeficiente de extinção  $k(\lambda)$  e/ou o valor da espessura ( $d$ ) estiverem claramente incorretos, o ajuste não será o ideal. Esta comparação é feita na Figura 9.

Figura 9: Espectros de transmitância  $T(\lambda)$  experimentais (linha preta) e calculados (linha vermelha) a partir das constantes ópticas obtidas pelo método desenvolvido neste trabalho supondo-se que os filmes sejam homogêneos



Fonte: Autores.

Conforme análise visual da Figura 9 e do parâmetro  $\chi^2$  obtido para cada ajuste, conclui-se que as características ópticas de filmes homogêneos obtidas para os filmes A-1 e A-2 estão, provavelmente, corretas, e que os filmes sejam realmente homogêneos. Já os filmes A-3 e A-4 apresentam pequenas diferenças entre os espectros experimental e o calculado supondo-se que o filme seja homogêneo, o que indica a presença de algum tipo de inhomogeneidade. Por outro lado, há grandes diferenças entre o espectro experimental e o calculado pelo programa de análise óptica para o filme A-5, supondo-se que este filme seja homogêneo, o que também pode ser confirmado pelo valor obtido para  $\chi^2$ . Esses dados sugerem que a presença de inhomogeneidades neste último filme é ainda mais importante que nas amostras A-3 e A-4.



Tabela 6: Parâmetro de qualidade  $\chi^2$  dos espectros teóricos apresentados na Figura 9. Estes valores estão normalizados pela quantidade de pontos da faixa espectral na qual os espectros foram comparados

Filme	$\chi^2$ ( $\times 10^{-5}$ )
A-1	2,119
A-2	1,903
A-3	2,391
A-4	6,406
A-5	25,493

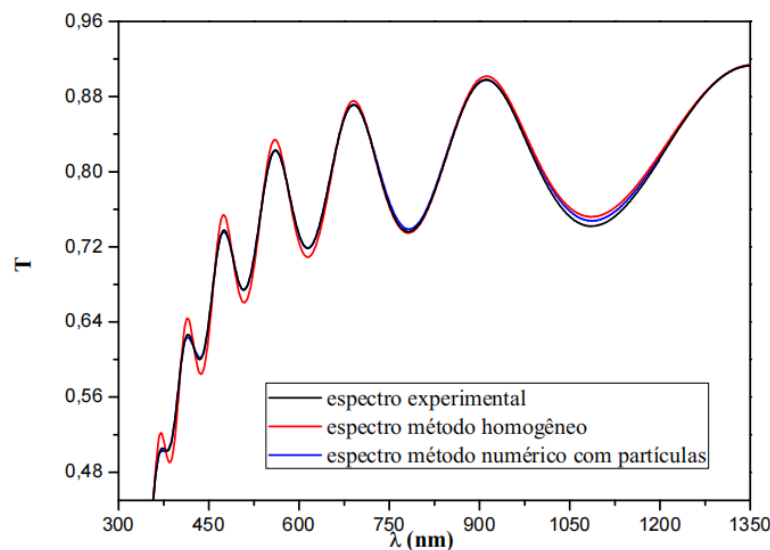
Fonte: Autores.

Apesar do tipo de inhomogeneidades presentes nas amostras A-3, A-4 não serem conhecidos, conhece-se as inhomogeneidades presentes na amostra A-5, que claramente consistem em nanocristais dispersos numa matriz amorfa, e também se sabe que a amostra A-5 é a que apresenta maior quantidade de inhomogeneidades (Pelegriani, 2010).

Logicamente, deve-se supor que, quanto maior a densidade de inhomogeneidades no filme, mais o espectro calculado supondo-se que o filme seja homogêneo se distanciará do espectro obtido experimentalmente. O fato de o modelo não conseguir ajustar um filme inhomogêneo utilizando o modelo para filmes homogêneos aqui utilizado é importante, pois mostra que o modelo é consistente, e não se utiliza de parâmetros desnecessários que possam facilitar o ajuste do espectro, de tal forma que os efeitos ópticos das inhomogeneidades não podem ser descritos pelo modelo. Esse fato também sugere que, com a utilização de um modelo adequado para as inhomogeneidades, talvez seja possível estimar a quantidade (ou densidade) relativa das inhomogeneidades presente nos filmes, e até mesmo algumas de suas características físicas, como seu tamanho médio.

Na Figura 10 são comparados o espectro experimental do filme A-4, a solução do método obtida para o modelo de filme homogêneo, e a solução do método obtida para o modelo simplificado de partículas dispersas em uma matriz homogênea. Com a utilização do modelo de partículas dispersas, nota-se clara melhora no ajuste entre as curvas experimental e teórica.

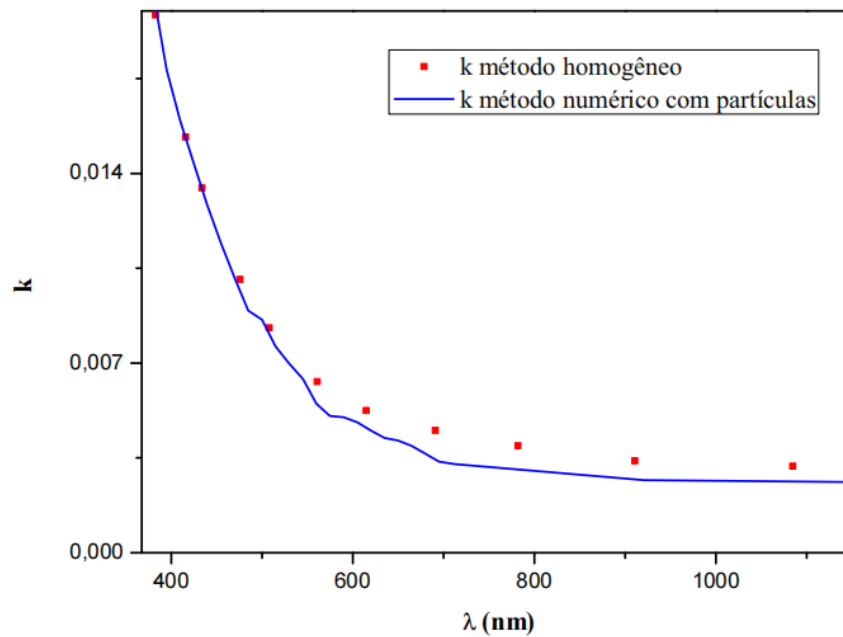
Figura 10: Transmitância do filme A-4 otimizada pelo modelo de partículas dispersas, experimental e obtida pelo modelo de filme homogêneo



Fonte: Autores.

Além disso, como mostrado na Figura 11, há uma clara redução nos valores obtidos para o coeficiente de extinção na região de transparência quando se utiliza o método de partículas dispersas em matriz homogênea, com relação aos valores obtidos pelo método do envelope, de maneira que fica evidente que os efeitos ópticos das partículas dispersas são mais visíveis na região de alta absorção, mas se estendem, inclusive, à região de transparência.

Figura 8: Coeficiente de extinção otimizado do filme A-4 comparado com o resultado obtido pelo método de filme homogêneo. Nota-se a superestimação do coeficiente de extinção obtido pelo método de filme homogêneo

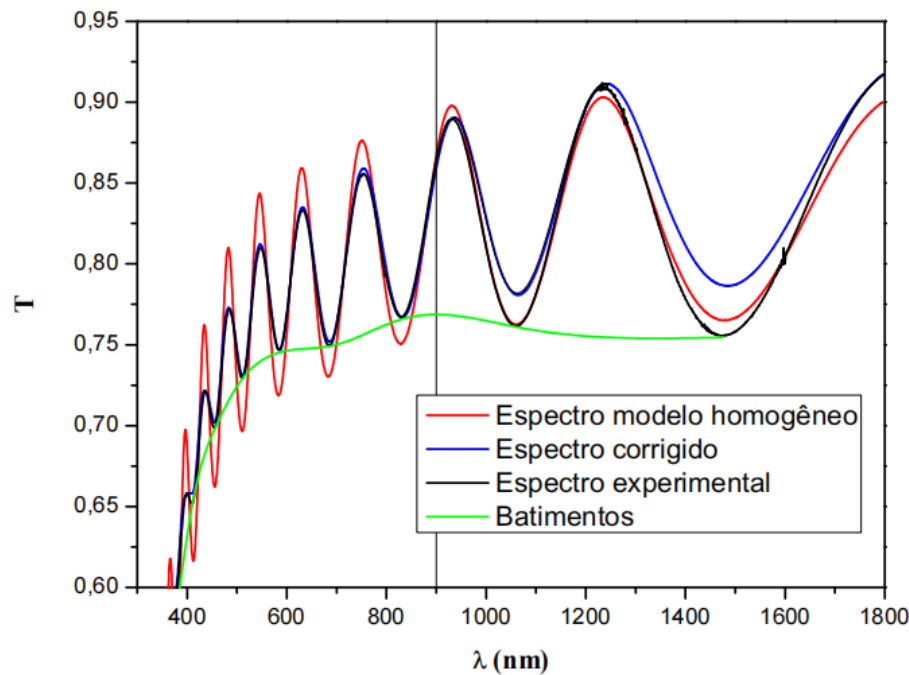


Fonte: Autores.

O espectro do filme A-5 é um pouco mais complexo que os demais pois, além dos efeitos gerados pelos cristalitos (nanopartículas dispersas), se observa uma sutil modulação das franjas de interferência (batimentos), como mostrado na Figura 12. Este tipo de efeito é observado, por exemplo, em sistemas nos quais os filmes se descolam parcialmente do substrato ou no caso de multicamadas (Bilyj et al., 2011). Como no caso do espectro obtido aqui para o filme A-5, esses efeitos parecem ser mais importantes acima de 900 nm (dentro da região de transparência), de maneira que o ajuste da influência dos cristalitos (nanopartículas) para este filme foi feito até 900 nm, apenas, na tentativa de evitar que esses efeitos (de causa provável conhecida, mas ainda em estudo) pudessem interferir de maneira significativa nos resultados obtidos. Aparentemente, a análise não ficou prejudicada com esta escolha, e o tamanho médio dos cristalitos (nanopartículas) e sua quantidade relativa puderam ser obtidos com acurácia nessa região.

Para se verificar o êxito do modelo aqui proposto aplicado ao filme A-5, na Figura 12 o espectro experimental é comparado com os espectros teórico gerados utilizando-se os parâmetros obtidos com ambos os modelos (modelo supondo filme homogêneo e modelo simplificado de partículas dispersas em meio homogêneo).

Figura 9: Transmitância do filme A-5 corrigida pelo modelo de partículas dispersas, experimental e obtida pelo modelo de filme homogêneo. A linha vertical separa a região na qual os batimentos (modulação) do espectro pouco influenciam a análise (à esquerda) da região na qual não é possível desprezar os batimentos (à direita)



Fonte: Autores.

A Tabela apresenta a porcentagem de feixes que atravessam inhomogeneidades (ou partículas) para as amostras A-3, A-4 e A-5, número que variou de 11% a 36% para as amostras em questão, bem como a porcentagem de volume das inhomogeneidades (ou partículas) com relação ao volume do filme. Note que, apesar da alta porcentagem de feixes que atravessam inhomogeneidades (ou partículas), o volume relativo dessas inhomogeneidades em comparação com o volume do filme é pequeno, da ordem de 1% ou menor, o que está de acordo com a hipótese de baixa densidade de inhomogeneidades (ou partículas) dispersas no filme.

Tabela 6: Resultados obtidos com o uso do modelo simplificado de partículas dispersas para os filmes A-3, A-4 e A-5

Filme	$d$ (nm)	$t_p$ (nm)	Feixes que atravessam partículas (%)	Volume de partículas (%)
A-3	586	15	11,25	0,29
A-4	664	24	28,75	1,04
A-5	948	30	36,25	1,15

Fonte: Autores.

Portanto, as condições necessárias para que o modelo simplificado de partículas dispersas seja válido, sugeridas neste trabalho, são perfeitamente cumpridas para os filmes analisados: i) que os índices de refração da matriz e partícula sejam próximos; ii) que as interfaces matriz-partícula sejam abruptas ( $d_{interface} \ll d_p \ll d$ ); e iii) que haja uma baixa densidade de partículas dispersas na matriz.

Deve-se esclarecer que os valores percentuais dos feixes que atravessam partículas e do volume de partículas, obtidos para as amostras A-3 e A-4, são apenas estimativas, supondo-se que o índice de refração das inhomogeneidades ali presentes seja igual ao índice de refração de um material policristalino. Todavia, os filmes A-3 e A-4 não apresentam pico de difração, de maneira que o índice

de refração de suas inhomogeneidades pode ser ligeiramente menor que o valor usado na análise ou mesmo muito próximo ao índice de refração da matriz. Este último caso poderia alterar significativamente o tamanho médio das inhomogeneidades estimado pelo método. Por outro lado, a aproximação utilizada é ótima para o filme A-5, que apresenta pico de difração da fase nanocristalina do nitreto de alumínio.

## 7. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos pelo método numérico aqui proposto para os espectros gerados teoricamente (Tabela 1) mostram que a precisão do método para a análise de filmes homogêneos é muito boa, sendo possível a obtenção de  $n(\lambda)$  e  $k(\lambda)$  para toda a faixa espectral, ponto a ponto, inclusive para a região de alta absorção do espectro, o que não é permitido pelo método do envelope, devido à falta de máximos e mínimos bem definidos na região.

A caracterização dos filmes de AlN e  $\text{TiO}_x\text{N}_y$  depositados por *sputtering* pelo método aqui proposto, utilizando-se o modelo de filme homogêneo, forneceu resultados consistentes com os obtidos por elipsometria (Tabela 2 e Figura 9). Filmes de  $\alpha\text{-SiC}_x\text{:H}$  depositados por PECVD também foram analisados pelo método em outros trabalhos (Queiroz, 2010), produzindo bons resultados.

De uma maneira geral, os resultados obtidos pelo novo método aqui proposto são similares aos determinados pelo método do envelope para os mesmos filmes. Todavia, como demonstrado, o novo método aqui proposto permite a análise de filmes ainda mais finos, independentemente da existência ou não de um número mínimo de oscilações no espectro de transmissão óptica, o que é obrigatório para a utilização do método do envelope e limita grandemente sua aplicação. Particularmente, neste trabalho, foram analisados filmes finos de  $\text{TiO}_x\text{N}_y$  com espessuras entre 60 e 80 nm, tendo sido possível obter suas espessuras e curvas de dispersão de  $n(\lambda)$  e  $k(\lambda)$ .

O novo método proposto pelos autores, ao utilizar a equação exata para a transmitância de um filme transparente sobre substrato finito, também facilita a implementação de modelos para a análise da morfologia (inhomogeneidades) interna dos filmes, o que também não pode ser realizado com o método do envelope, devido à exigência de se trabalhar com filmes homogêneos em volume e utilizando-se, apenas, as regiões transparente e de baixa absorção do espectro de transmitância. Particularmente, o novo método permitiu estimar, através da análise do espectro de transmitância, a concentração relativa e o tamanho médio de nanocristais de AlN dispersos em um filme amorfo (Pazim, 2011). O tamanho médio dos nanocristais obtido pelo método com a utilização de um modelo simplificado de partículas dispersas é idêntico ao tamanho médio dos cristalitos determinado por difração de raios X (XRD) utilizando a já bem estabelecida fórmula de Scherrer (Cullity, 1967).

Os autores avaliam que a principal fragilidade do método (também presente em outros métodos) está na utilização de uma equação para descrever  $k(\lambda)$  que não possui base teórica, uma vez que não foram encontrados modelos físicos para  $k(\lambda)$  na literatura. Todavia, a função exp-linear aqui utilizada tem descrito de maneira eficiente o coeficiente de extinção dos diferentes materiais analisados pelos autores até aqui, sendo que os resultados obtidos são (desde que possível a análise) similares aos obtidos pelo método do envelope para os mesmos filmes. Apesar dos bons resultados obtidos, devem ser realizados testes com filmes finos de diferentes materiais para uma melhor avaliação do novo método proposto. Além disso, devem ser realizadas pesquisas no sentido de

desenvolver um modelo físico para  $k(\lambda)$ , já que qualquer modelo poderia ser facilmente implementado no novo método, em substituição à função exp-linear, que tem apresentado bons resultados até aqui.

Considerando o novo método aqui proposto, e comparando-o com os métodos tradicionalmente utilizados para a determinação das propriedades ópticas e espessura de filmes finos, baseados no método do envelope de Manifacier (Gasiot et al., 1976; Swanepoel, 1983), este novo método numérico está baseado na equação (1), que é exata e, portanto, não se utiliza de aproximações. Esta nova abordagem permite a obtenção de avanços analíticos muito claros, como a possibilidade de análise de filmes bem mais finos, a obtenção das curvas de  $n(\lambda)$  e  $k(\lambda)$  ponto a ponto, para toda a faixa experimental do espectro de transmitância dos filmes finos, não apenas para os pontos de máximo e mínimo das franjas de interferência no espectro de transmissão e inclusive para a região de alta absorção do espectro. Além disso, o novo método permite a implementação de modelos que visem a análise de filmes não homogêneos em volume (como a presença de nanopartículas dispersas no volume do filme).

## AGRADECIMENTOS

À FAPEMAT, pela aprovação dos projetos de pesquisa #735604/2008 e #850109/2009, respectivamente nos editais Universal/FAPEMAT 2008 e PRONEX/FAPEMAT/CNPq 2009, que financiaram e motivaram o desenvolvimento deste trabalho. Aos pesquisadores do Grupo de Novos Materiais e Dispositivos (GNMD) da Escola Politécnica da USP.

## 8. REFERÊNCIAS

ANDREANI, Lucio Claudio; LISCIDINI, Marco; GERACE, Dario; FRANCO, Davide; BRAMBILLA, Giovanni; CUMMING, David R. S. Direct evidence of light confinement and emission enhancement in active silicon-on-insulator slot waveguides. **Applied Physics Letters**, v. 89, 2006.

BARMAN, Prasanta B.; SHARMA, Ishu; TRIPATHI, Shailendra K. Effect of Bi addition on the optical behavior of a-Ge-Se-In-Bi thin films. **Applied Surface Science**, v. 255, p. 2791-2795, 2008.

BILYJ, Jurij M.; KOSOBUTSKYY, Petro S.; KUSHNIR, Oleg P. Demonstration of optical beating in the reflectance and transmittance spectra of multilayer structures. **Ukrainian Journal of Physical Optics**, v. 12, p. 89-100, 2011.

BONELLI, Thiago Scremin. **Produção e Caracterização Estrutural de Filmes Finos Nanoestruturados de  $TiO_xN_y$  e Células Solares (DSSCs) de Nanotubos de  $TiO_2$** . Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Mato Grosso, 2013.

CHENG, I-Chun; GLESKOVA, Helena; WAGNER, Sigurd; WU, Meng. Silicon for thin-film transistors. **Thin Solid Films**, v. 430, p. 15-19, 2003.

CISNEROS, Jorge I. Optical characterization of dielectric and semiconductor thin films by use of transmission data. **Applied Optics**, v. 37, n. 22, p. 5262-5270, 1998.

CULLITY, BERNARD DENNIS. **Elements of X-Ray Diffraction**. Reading, MA: Addison-Wesley Publishing Company, 1967.

DEVORE, JOHN R. Refractive Index of Rutile and Sphalerite. **Journal of the Optical Society of America**, v. 41, n. 6, p. 416-419, 1951.

DRIESSEN, ALBERTUS; LAMBECK, PAUL VINCENT; WORHOFF, KORNELIS. Design, tolerance analysis, and fabrication of silicon oxynitride based planar optical waveguides for communication devices. **Journal of Lightwave Technology**, v. 17, p. 1401-1407, 1999.

EL-SAYAD, ESSAM A. Compositional dependence of the optical properties of amorphous  $Sb_2Se_{3-x}S_x$  thin films. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 354, p. 3806-3811, 2008.

GASIOT, Jean; MANIFACIER, Jean Claude; FILLARD, Jean Pierre. A simple method for the determination of the optical constants  $n$ ,  $k$  and the thickness of a weakly absorbing thin film. **Journal of Physics E: Scientific Instruments**, v. 9, p. 1002-1004, 1976.

HEAVENS, Oskar Sigmund. Optical properties of thin films. **Reports on Progress in Physics**, v. 23, n. 1, p. 1-65, 1960.

JOO, Heejung; CHO, Ming Young; KIM, Jin Hee; KIM, Sung Wook. The optical and structural properties of AlN thin films characterized by spectroscopic ellipsometry. **Thin Solid Films**, v. 368, n. 1, p. 67-73, 2000.

KADOSHIMA, Masaru; HIRATANI, Masahiko; SHIMAMOTO, Yasuhiro; TORII, Kazuyoshi; MIKI, Hiroshi; KIMURA, Shinichiro; NABATAME, Toshihide. Rutile-type  $TiO_2$  thin film for high- $k$  gate insulator. **Thin Solid Films**, v. 424, p. 224-228, 2003.

MACHORRO, Raúl; SIQUEIROS, Jesús Manuel; REGALADO, Luis Enrique. Determination of the optical constants of  $MgF_2$  and  $ZnS$  from spectrophotometric measurements and the classical oscillator method. **Applied Optics**, v. 27, n. 12, p. 2549-2553, 1988.

MOAZZAMI, Kamran; PHILLIPS, Jamie; LEE, David; KRISHNAMURTHY, Shankar; BENOIT, Georges; FINK, Yoel; TIWALD, Thomas. Detailed study of above bandgap optical absorption in  $HgCdTe$ . **Journal of Electronic Materials**, v. 34, n. 6, p. 773-778, 2005

MOUSTAFA, Abdelrahman M.; EL-SAYAD, Essam A.; MARZOUK, Samir Y. Effect of heat treatment on the structural and optical properties of amorphous  $Sb_2Se_3$  and  $Sb_2Se_2S$  thin films. **Physica B**, v. 404, p. 1119-1127, 2009.

OPTICAL SOCIETY OF AMERICA. **Handbook of Optics**. McGraw-Hill, 2 ed., 1994.

SÁNCHEZ-GONZÁLEZ, J.; DÍAZ-PARRALEJO, A.; ORTIZ, A. L.; GUIBERTEAU, F. Determination of optical properties in nanostructured thin films using the Swanepoel method. **Applied Surface Science**, v. 252, p. 6013-6017, 2006.

PAZIM, Rafael Cardim. **Caracterização óptica de filmes finos Homogêneos e Inomogêneos**. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Mato Grosso, 2011.

PELEGRINI, Marcus Vinícius. **Estudo de materiais piezoelétricos da família III-IV obtidos por sputtering reativo visando sua aplicação em sensores e mems**. 2010. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Sistemas Eletrônicos) – Escola Politécnica, Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010.

QUEIROZ, Jones Willian Soares de. **Propriedades Químicas e Estruturais de Filmes Finos de  $\alpha$ -SiC:H Depositados por PECVD**. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Mato Grosso, 2010.

SILVA, S.R.P., KHAN, R.U.A., BURDEN, A.P., ANGUITA, J.V., SHANNON, J.M., SEALY, B.J., PAPWORTH, A.J., KIELY, C.J., AMARATUNGA, G.A.J. The microstructural dependence of the opto-electronic properties of nitrogenated hydrogenated amorphous carbon thin films. **Thin Solid Films**, v. 332, p. 118-123, 1998.

SWANEPOEL, Robert. Determination of thickness and optical constants of amorphous silicon. **Journal of Physics E: Scientific Instruments**, v. 16, p. 1214-1222, 1983.

SWAMINATHAN, Venkatesh; SUBRAMANIAN, Balaji; JAYACHANDRAN, Marimuthu. Micro-structural and optical properties of reactive magnetron sputtered aluminum nitride (AlN) nanostructured films. **Current Applied Physics**, v. 11, p. 43-49, 2011.

TAN, Chin Wen; MIAO, Jianmin. Optimization of sputtered Cr/Au thin film for diaphragm-based MEMS applications. **Thin Solid Films**, v. 517, p. 4921-4925, 2009.

TRIPATHI, Surya Kant; SHARMA, Indu; BARMAN, Partha Bir. An optical study of a-Ge<sub>20</sub>Se<sub>80-x</sub>In<sub>x</sub> thin films in sub-band gap region. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 40, p. 4460-4465, 2007.

VERLEUR, Hans W. Determination of optical constants from reflectance or transmittance measurements on bulk crystals or thin films. **Journal of the Optical Society of America**, v. 58, n. 10, p. 1353-1364, 1968.

WEMPLE, Stephen H.; DIDOMENICO, Michael. Behaviour of the electronic dielectric constant in covalent and ionic materials. **Physical Review B**, v. 3, n. 4, p. 1338-1351, 1971.

WINTER, Charles H.; KUMAR, Pradeep; WIEDMANN, Monika K.; AVRUTSKY, Ivan. Optical properties of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> thin films grown by atomic layer deposition. **Applied Optics**, v. 48, n. 28, p. 5407-5412, 2009.

YOUSEF, El Sayed; SHAABAN, E. R.; ABDEL-RAHMAN, M. Compositional dependence of the optical properties of amorphous antimony selenide thin films using transmission measurements. **Thin Solid Films**, v. 515, p. 3810-3815, 2007.

**Submissão: 10/06/2024**

**Aceito: 24/06/2024**