

基于量子衍生遗传算法的光学薄膜结构分析

周祥燕¹, 张超¹, 匡尚奇¹, 龚学鹏², 杨海贵³

¹长春理工大学理学院, 吉林 长春 130022;

²中国科学院长春光学精密机械与物理研究所应用光学国家重点实验室, 吉林 长春 130033;

³中国科学院长春光学精密机械与物理研究所光学系统先进制造技术重点实验室, 吉林 长春 130033

摘要 掠入射 X 射线反射(GIXR)由于检测精度高且对检测薄膜的无损伤而被广泛用于薄膜检测和高精度表征。GIXR 是一种基于数值拟合的间接检测方法,因此在薄膜微观结构的求解,特别是复杂多层膜膜系的求解过程中对数值优化算法的要求较高。为此提出了基于量子衍生遗传算法(QIGA)的薄膜 GIXR 拟合求解方法,并基于 QIGA 对 Si 单层膜和等周期 Mo/Si 多层膜的 GIXR 分别进行拟合求解。结果表明,该方法具有求解速度快、拟合精度高的明显优势,说明 QIGA 在光学薄膜表征方面有潜在的应用价值。

关键词 薄膜; 薄膜表征; 量子衍生遗传算法; 掠入射 X 射线反射

中图分类号 O436 **文献标识码** A

doi: 10.3788/CJL201744.1203002

Analysis of Optical Thin Film Structure Based on Quantum-Inspired Genetic Algorithm

Zhou Xiangyan¹, Zhang Chao¹, Kuang Shangqi¹, Gong Xuepeng², Yang Haigui³

¹School of Science, Changchun University of Science and Technology, Changchun, Jilin 130022, China;

²State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China;

³Key Laboratory of Optical System Advanced Manufacturing Technology, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 130033, China

Abstract Grazing incident X-ray reflection (GIXR) is widely used in film detection and high accuracy characterization because of its high detection accuracy and nondestructive measurement. However, it is a kind of indirect measurement method, and therefore it requires a superior numerical optimization algorithm when solving thin film parameters, especially for complicated multilayers. A new method based on quantum-inspired genetic algorithm (QIGA) is proposed to realize GIXR fitting. The proposed algorithm is applied in fitting the GIXR of Si single layers and periodic Mo/Si multilayers. The results indicate that the algorithm based on QIGA has fast solving speed and high fitting precision, and QIGA has potential values in the field of thin film characterization.

Key words thin films; film characterization; quantum-inspired genetic algorithm; grazing incident X-ray reflection

OCIS codes 310.3840; 310.6628; 340.7480

1 引 言

光学薄膜是由分层介质构成,通过界面传播光束的一类光学介质材料。光学薄膜除了具有基本的反射、减反射和光谱调控等功能以外,在光学系统中还具有偏振调控、相位调控以及光电、光热和光声等调控功能^[1-3]。如今,光学薄膜已广泛应用于激光技术、光电子技术、光通信技术、光显示技术和光储存技术等现代

收稿日期: 2017-07-10; **收到修改稿日期:** 2017-09-24

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金(61405189)、吉林省科技发展计划(20150101019JC,20170312024ZG)

作者简介: 周祥燕(1997—),女,本科生,主要从事量子进化算法方面的研究。E-mail: 1578498290@qq.com

导师简介: 匡尚奇(1981—),男,博士,副教授,主要从事量子光子与量子算法方面的研究。

E-mail: physicskuang@sina.com(通信联系人)

光学技术中。特别是新兴的纳米薄膜,它所具备的独特的光学、电学、磁学、力学与气敏特性,使其作为功能材料和结构材料具有良好的发展前景^[4-6]。

光学薄膜的迅猛发展得益于薄膜技术的发展。薄膜技术主要包括薄膜的制备、控制、测试技术^[1]。其中,光学薄膜测试的意义在于通过测试建立起薄膜宏观和微观的联系,进而通过分析得到元件的微观参数和性能指标。光学薄膜的性能与其几何厚度、密度、粗糙度等微观参数有直接关系^[7]。因此,精确表征薄膜的结构参数,从而为设计和镀制高质量的光学薄膜建立前提和基础具有十分重要的意义。目前,应用于材料和表面测量的仪器和方法包括掠入射 X 射线反射(GIXR)、透射电子显微镜(TEM)、卢瑟福后向散射谱、俄歇电子能谱、光谱椭圆偏等^[8-12],其中 TEM^[13]和 GIXR^[14-16]是纳米级薄膜或具有超晶格结构的纳米级周期厚度多层膜普遍采用的主要检测手段。TEM 可直接对薄膜进行表征,但是由于 TEM 观测的同时会破坏薄膜结构,且检测精度不高,所以常用作薄膜表征的参考;GIXR 采用波长为 0.154 nm 的硬 X 射线作为光源,其优点在于不会破坏光学薄膜的结构,可以在膜层信息较少的情况下得到高精度的结果,其难点在于需要建立相应的理论模型,并对用于表征薄膜结构参数的求解算法有较高要求。因此,对基于 GIXR 的薄膜拟合表征方法来说,研发和应用具有较强全局搜索能力的高效算法具有重要意义。

对于工作在紫外一极紫外波段的光学薄膜来说,所需的光学膜厚均在纳米量级。例如,深紫外波段所需光学薄膜的单层膜厚仅为 20~30 nm;而极紫外(EUV)光波段普遍采用的等周期高反射率 Mo/Si 多层膜的平均周期厚度仅为 7 nm^[17]。实现这些光学薄膜的参数拟合不仅在理论模型建立方面有较高难度,而且对于求解算法的选取也有一定要求,尤其是在 EUV 多层膜的拟合中需要考虑实际情况中膜层间的扩散层,这使得求解参数的数量进一步增加,搜索空间增大。在薄膜拟合表征方面普遍采用的算法包括 Levenberg-Marquart 算法^[18]、爬山法、遗传算法(GA)^[19-20]等。其中 Levenberg-Marquart 算法收敛速度快,但是求得全局极值的概率小;爬山法随机性较强,难以将之前进行的迭代过程有效利用;GA、一般采用二进制对参数进行编码,全局搜索能力强,是薄膜研发常用的算法,但其同样存在收敛速度慢、易早熟、难以较高精度搜索到全局最优解的问题。量子衍生遗传算法(QIGA)是量子衍生算法和 GA 的有机结合,其对染色体进行量子编码,并采用量子旋转门更新染色体上的基因,该算法的提出是对 GA 全局寻优能力强等优点的继承以及对 GA 收敛速度慢、早熟和局部寻优能力差等缺点的改善^[21-22]。目前,QIGA 的应用涉及到信息技术、经济管理、交通运输、通信网络等诸多领域,并取得了较为理想的效果^[23]。

本文针对 QIGA 进行研究,进一步完善量子变异和量子交叉操作,建立了适用于薄膜 GIXR 拟合求解的 QIGA,并将其应用于纳米级单层膜和等周期 EUV 多层膜的 GIXR 拟合,取得了优于 GA 的良好效果。同时,相关研究充分说明 QIGA 有助于薄膜表征效率和精度的提高,在薄膜表征这一工程技术领域具有潜在应用价值。

2 基于 QIGA 的光学薄膜结构分析方法

以 Si 单层膜和等周期 Mo/Si 多层膜为例,在其 GIXR 拟合求解过程中应用 QIGA,具体实施步骤如下。

1) 输入基于 QIGA 的薄膜结构分析用初始参数值。其中包括量子种群规模 N 、量子染色体数 M 、量子染色体的基因位数 λ 、进化代数最大值 T_{\max} 、量子变异基因位数 s 、量子全交叉概率 p_c 、以及染色体表征的参数取值范围。

2) 薄膜结构参数的量子种群的初始化。对光学薄膜的微观结构参数进行量子编码,生成表征薄膜结构参数的量子种群 Q ,该种群表示为

$$Q = \{q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_{N-1}, q_N\}。 \quad (1)$$

对于 Si 单层膜的 GIXR 拟合,量子染色体数 $M=6$,每个量子染色体的基因位数 $\lambda=20$,则第 i 个个体为

$$q_i = [\gamma_1 \quad \gamma_2 \quad \gamma_3 \quad \gamma_4 \quad \gamma_5 \quad \gamma_6] = \begin{bmatrix} \alpha_{i1,1} & \alpha_{i1,2} & \dots & \alpha_{i1,19} & \alpha_{i1,20} & \dots & \alpha_{ij,1} & \alpha_{ij,2} & \dots & \alpha_{ij,19} & \alpha_{ij,20} & \dots & \alpha_{i6,1} & \alpha_{i6,2} & \dots & \alpha_{i6,19} & \alpha_{i6,20} \\ \beta_{i1,1} & \beta_{i1,2} & \dots & \beta_{i1,19} & \beta_{i1,20} & \dots & \beta_{ij,1} & \beta_{ij,2} & \dots & \beta_{ij,19} & \beta_{ij,20} & \dots & \beta_{i6,1} & \beta_{i6,2} & \dots & \beta_{i6,19} & \beta_{i6,20} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中 $\gamma_j = \begin{bmatrix} \alpha_{ij,1} & \alpha_{ij,2} & \dots & \alpha_{ij,19} & \alpha_{ij,20} \\ \beta_{ij,1} & \beta_{ij,2} & \dots & \beta_{ij,19} & \beta_{ij,20} \end{bmatrix}$ 为第 j 个染色体。 γ_1 表征 Si 膜层的几何厚度 d_{Si} , γ_2 表征 Si 膜层的密度

$\rho_{\text{Si}}, \gamma_3$ 表征 Si 膜层的粗糙度 $\sigma_{\text{Si}}, \gamma_4$ 表征表面 SiO_2 氧化层的几何厚度 $d_{\text{SiO}_2}, \gamma_5$ 表征 SiO_2 膜层的密度 $\rho_{\text{SiO}_2}, \gamma_6$ 表征表面氧化层 SiO_2 的粗糙度 σ_{SiO_2} 。

对于等周期 Mo/Si 多层膜的表征,采用四层模型,即不仅考虑 Mo 和 Si 膜层,但要考虑扩散层的作用,扩散层近似为 MoSi_2 膜层,其膜系结构为 $\text{Sub}[\text{Si}/\text{MoSi}_2/\text{Mo}/\text{MoSi}_2]_{60} \text{Si}/\text{SiO}_2$ 。其中,镀膜基底(Sub)为超光滑 Si 基底,膜系考虑表面 Si 膜层氧化形成的 SiO_2 膜层。在多层膜的 GIXR 拟合求解过程中, QIGA 中量子染色体数 $M=11$, 每个量子染色体的基因位数 $\lambda=20$, 则第 i 个个体为

$$\mathbf{q}_i = [\gamma_1 \quad \gamma_2 \quad \cdots \quad \gamma_j \quad \cdots \quad \gamma_{10} \quad \gamma_{11}] = \begin{bmatrix} \alpha_{i1,1} & \alpha_{i1,2} & \cdots & \alpha_{i1,19} & \alpha_{i1,20} & \cdots & \alpha_{ij,1} & \alpha_{ij,2} & \cdots & \alpha_{ij,19} & \alpha_{ij,20} & \cdots & \alpha_{i11,1} & \alpha_{i11,2} & \cdots & \alpha_{i11,19} & \alpha_{i11,20} \\ \beta_{i1,1} & \beta_{i1,2} & \cdots & \beta_{i1,19} & \beta_{i1,20} & \cdots & \beta_{ij,1} & \beta_{ij,2} & \cdots & \beta_{ij,19} & \beta_{ij,20} & \cdots & \beta_{i11,1} & \beta_{i11,2} & \cdots & \beta_{i11,19} & \beta_{i11,20} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中 $\gamma_j = \begin{bmatrix} \alpha_{ij,1} & \alpha_{ij,2} & \cdots & \alpha_{ij,19} & \alpha_{ij,20} \\ \beta_{ij,1} & \beta_{ij,2} & \cdots & \beta_{ij,19} & \beta_{ij,20} \end{bmatrix}$ 表示第 j 个染色体。 γ_1 表征 Si 膜层的几何厚度 d_{Si}, γ_2 表征 Mo 膜层的几何厚度 d_{Mo}, γ_3 表征 Mo 在 Si 上的扩散层 MoSi_2 的厚度 $d_{\text{Mo,on-Si}}, \gamma_4$ 表征 Si 在 Mo 上的扩散层 MoSi_2 的厚度 $d_{\text{Si,on-Mo}}, \gamma_5$ 表征 Si 膜层的密度 $\rho_{\text{Si}}, \gamma_6$ 表征 Mo 膜层的密度 $\rho_{\text{Mo}}, \gamma_7$ 表征 SiO_2 膜层的密度 $\rho_{\text{SiO}_2}, \gamma_8$ 表征各膜层间的粗糙度 σ, γ_9 表征多层膜表面 SiO_2 氧化层的几何厚度 $d_{\text{SiO}_2}, \gamma_{10}$ 表征 MoSi_2 扩散层的密度 $\rho_{\text{SiO}_2}, \gamma_{11}$ 表征 SiO_2 膜层的表面粗糙度 σ_{SiO_2} 。在(2)式和(3)式中, $[\alpha_{ij,k} \quad \beta_{ij,k}]^T$ 表示第 i 个个体中第 j 个染色体的第 k 个基因位, 并且满足 $\alpha_{ij,k}^2 + \beta_{ij,k}^2 = 1$, 在初始化过程中每个量子比特基因位均赋值为 $\alpha_{ij,k} = \beta_{ij,k} = \sqrt{1/2}$ 。

3) 对初始种群 Q 进行测量和解码。生成一个随机数 $r \in (0, 1)$, 如果 $r < \alpha_{ij,k}^2$, 则该基因位的确定解为 0, 否则确定解为 1, 进而得到整个种群的确定解 P_0 为

$$P_0 = \{p_1, p_2, \dots, p_i, \dots, p_{N-1}, p_N\}, \quad (4)$$

其中任意个体 p_i 的编码为

$$p_i = [a_{i1,1} \quad a_{i1,2} \quad \cdots \quad a_{i1,\lambda-1} \quad a_{i1,\lambda} \quad \cdots \quad a_{ij,1} \quad a_{ij,2} \quad \cdots \quad a_{ij,\lambda-1} \quad a_{ij,\lambda} \quad \cdots \quad a_{iM,1} \quad a_{iM,2} \quad \cdots \quad a_{iM,\lambda-1} \quad a_{iM,\lambda}], \quad (5)$$

式中 $a_{ij,k}$ 为第 i 个个体中第 j 个染色体的第 k 个基因位的确定解, 根据测量结果取 1 或 0。

4) 终止条件的判定。判断是否达到进化代数最大值 T_{max} , 若满足, 则终止程序并输出最优膜系, 若不满足, 则继续进行。

5) 量子个体适应度评估, 并保存最佳个体。应用如下评价函数对量子个体的适应度进行评估:

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^m \left(\frac{I_{k,\text{meas}} - I_{k,\text{calc}}}{I_{k,\text{meas}}} \right)^2, \quad (6)$$

式中 χ^2 为量子个体的评价系数, m 为实验数据点数, $I_{k,\text{calc}}$ 为第 k 个数据点的理论反射强度, $I_{k,\text{meas}}$ 为第 k 个数据点的实验反射强度。此过程中采用菲涅耳系数法计算薄膜的理论反射强度, 通过数据库^[24]中的原子散射因子数据计算材料的复折射率。

6) 量子旋转门更新量子种群 Q , 并对子代 Q' 进行测量和评估, 更新最优量子个体。其中, 对每个基因位进行量子旋转门更新, 量子旋转门为

$$\mathbf{U}(\theta_{ij,k}) = \begin{bmatrix} \cos \theta_{ij,k} & -\sin \theta_{ij,k} \\ \sin \theta_{ij,k} & \cos \theta_{ij,k} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

式中 $\theta_{ij,k}$ 为第 i 个量子个体第 j 个染色体中第 k 个基因位的旋转角, 其值表示为 $\theta_{ij,k} = s(\alpha_{ij,k}, \beta_{ij,k}) \cdot \Delta\theta_{ij,k}$, 其中 $s(\alpha_{ij,k}, \beta_{ij,k})$ 控制旋转的方向^[25], $\Delta\theta_{ij,k}$ 控制旋转的大小^[26],

$$\Delta\theta_{ij,k} = (\theta_{ij,k})_{\min} + f_{ij,k} [(\theta_{ij,k})_{\max} - (\theta_{ij,k})_{\min}], \quad (8)$$

式中 $(\theta_{ij,k})_{\min} = 0.001\pi$ 为搜索角度范围区间的最小值; $(\theta_{ij,k})_{\max} = 0.05\pi$ 为搜索角度范围区间的最大值; $f_{ij,k} = \text{Ham}(A, B) / l_{\text{chromelens}}$, 其中 $l_{\text{chromelens}}$ 为当前量子个体的染色体基因长度, A 为第 i 个量子个体的确定解 p_i , B 为当前最优个体的确定解 p_{best} , $\text{Ham}(A, B)$ 为 p_i 和 p_{best} 中相应位置不相同的个数。基于(7)式中的量子旋转门对量子基因位 $[\alpha_{ij,k} \quad \beta_{ij,k}]^T$ 进行更新, 更新为

$$\begin{bmatrix} \alpha'_{ij,k} \\ \beta'_{ij,k} \end{bmatrix} = \mathbf{U}(\theta_{ij,k}) \times \begin{bmatrix} \alpha_{ij,k} \\ \beta_{ij,k} \end{bmatrix}, \quad (9)$$

式中 $[\alpha'_{ij,k} \ \beta'_{ij,k}]^T$ 为量子旋转门更新后的量子基因位。

7) 对量子种群进行量子变异操作,更新子代种群。在量子种群中的每个量子个体中选取 s 个基因位进行量子非门操作,即

$$\begin{bmatrix} \alpha'_{ij,k} \\ \beta'_{ij,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \alpha_{ij,k} \\ \beta_{ij,k} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

式中 $[\alpha_{ij,k} \ \beta_{ij,k}]^T$ 为变异前基因, $[\alpha'_{ij,k} \ \beta'_{ij,k}]^T$ 为变异后基因。

8) 量子全干扰交叉操作^[27]。以概率 $p_c=0.04$ 对子代进行经典量子全干扰交叉操作。生成一个均匀分布随机数 $r \in (0,1)$,如果 $r < p_c$,则进行本操作,否则略过此步骤。

9) 用精英保留策略更新子代 Q' ,对子代 Q' 进行测量和解码,得到确定解 P ,之后转到步骤 4)。

3 实验结果分析

采用磁控溅射镀膜系统通过沉积速率的定标,基于时间控制膜厚的方法分别镀制 Si 单层膜和等周期 Mo/Si 多层膜各两个薄膜样品,并应用 PANalytical Powder X 射线衍射仪对薄膜进行 GIXR 测量。

3.1 Si 单层膜实验结果分析

Si 单层膜镀制在超光滑 Al_2O_3 基底上,在考虑 Si 单层膜表面氧化层的情况下,基于 QIGA 对薄膜 GIXR 进行参数拟合。基于 QIGA 的拟合过程所采用的参数为:量子种群规模 $N=100$,进化代数最大值 $T_{max}=100$,量子变异基因位数 $s=2$,量子全交叉概率 $p_c=0.04$ 。此外,表征薄膜微观结构的参数的搜索范围见表 1。图 1 所示为基于 GA 和 QIGA 两种搜索算法,两个 Si 单层膜 GIXR 拟合的最优评价系数与进化的关系。分析表明,在 GIXR 的拟合求解过程中,QIGA 的求解精度高于 GA,特别是对于 Si 单层膜样品 2 的求解。

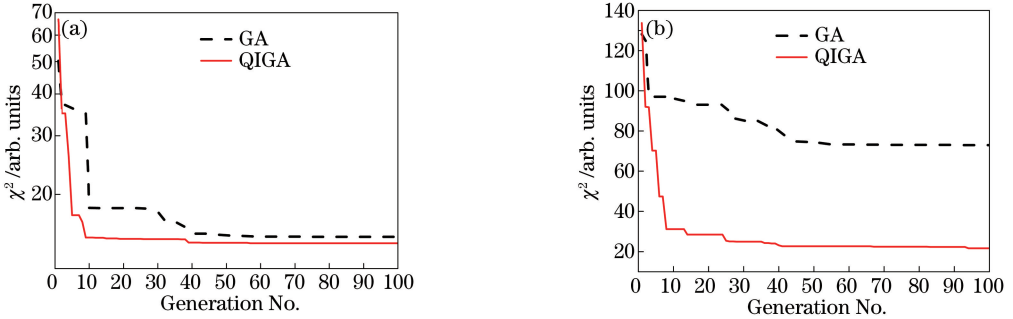


图 1 基于 GA 和 QIGA 针对 Si 单层膜样品的 GIXR 拟合评价系数 χ^2 与进化代数的关系。

(a) Si 单层膜样品 1 的拟合结果;(b) Si 单层膜样品 2 的拟合结果

Fig. 1 Relationships between the fitting values χ^2 of GIXR for single-layer Si samples and generation numbers based on GA and QIGA. (a) Results of single-layer Si sample 1; (b) results of single-layer Si sample 2

图 2 所示为基于 GA 和 QIGA 获得的 Si 单层膜最优膜层结构参数理论反演 GIXR 与实验测试结果的对比。由于 QIGA 具有更高的拟合精度,所以依据 QIGA 求解的最优膜层参数反演所得的单层膜 GIXR 与实验结果更加符合,相应膜层结果参数以及基于 GA 求解的膜层参数详见表 1。

表 1 基于 GA 和 QIGA 获得的 Si 单层膜样品的结构参数

Table 1 Structure parameters of two single-layer Si samples obtained by GA and QIGA

Parameter	Sample 1				Sample 2			
	Domain	Optimal solution		Domain	Optimal solution			
		QIGA	GA		QIGA	GA		
d_{Si}/nm	[28.0,32.0]	28.21	30.48	[28.0,32.0]	28.19	29.86		
$\rho_{Si}/(g \cdot cm^{-3})$	[1.5,2.5]	2.00	2.00	[1.5,2.5]	1.99	1.97		
σ_{Si}/nm	[0.1,1.0]	0.89	0.99	[0.1,1.0]	0.26	0.90		
d_{SiO_2}/nm	[0.1,3.0]	2.42	0.15	[0.1,3.0]	2.28	0.65		
$\rho_{SiO_2}/(g \cdot cm^{-3})$	[1.5,2.8]	1.93	1.88	[1.5,2.8]	1.90	1.55		
σ_{SiO_2}/nm	[0.1,1.0]	0.10	0.10	[0.1,1.0]	0.10	0.14		

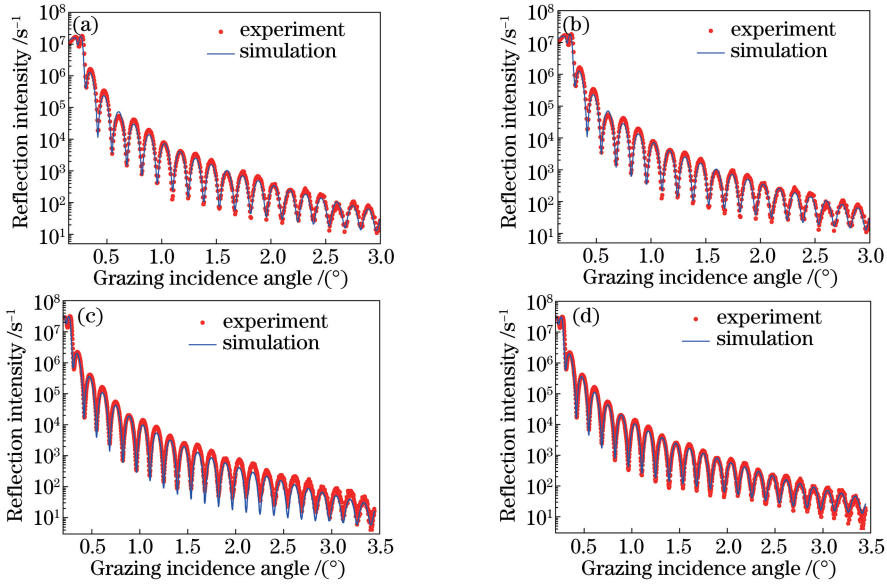


图 2 基于 GA 和 QIGA 求解得到的两个 Si 单层膜样品最优薄膜结构参数反演的 GIXR 与实验结果的对比。

(a) 基于 GA 得到的样品 1; (b) 基于 QIGA 得到的样品 1; (c) 基于 GA 得到的样品 2; (d) 基于 QIGA 得到的样品 2

Fig. 2 Calculated and experimental GIXR curves of two single-layer Si samples based on GA and QIGA.

(a) Sample 1 based on GA; (b) sample 1 based on QIGA; (c) sample 2 based on GA; (d) sample 2 based on QIGA

3.2 等周期极紫外 Mo/Si 多层膜的实验结果分析

为进一步验证 QIGA 在复杂多层膜的 GIXR 拟合过程中的适用性,以超滑 Si 基底上镀制的等周期极紫外 Mo/Si 多层膜的微观结构拟合求解为例进行对比分析。基于 QIGA 的拟合过程所采用的参数为:量子种群规模 $N=100$, 进化代数最大值 $T_{\max}=200$, 量子变异基因位数 $s=2$, 量子全交叉概率 $p_c=0.04$ 。此外,表征多层膜微观结构的参数的搜索范围见表 2。图 3 所示为基于 GA 和 QIGA 的 Mo/Si 多层膜两个样品 GIXR 拟合的评价系数 χ^2 与进化代数之间的关系。从图 3 可以看到,基于 GA 的评价系数随进化代数的增加下降得较为缓慢,而基于 QIGA 的评价系数不仅在 200 代的优化过程中一直有较剧烈的下降趋势,而且第 200 代时收敛结果明显优于 GA。因此,基于 QIGA 的多层膜 GIXR 拟合过程中收敛速度优于基于 GA 的 GIXR 拟合求解速度。

表 2 基于 GA 和 QIGA 获得的 Mo/Si 多层膜样品的结构参数

Table 2 Structure parameters of multi-layer Mo/Si samples obtained by GA and QIGA

	Sample 1			Sample 2		
	Domain	Optimal solution		Domain	Optimal solution	
		QIGA	GA		QIGA	GA
d_{Si}/nm	[2.0,4.0]	3.61	3.49	[2.0,4.0]	3.49	2.94
d_{Mo}/nm	[1.5,2.0]	1.75	1.89	[1.5,2.0]	1.50	1.91
$d_{\text{Mo}_{\text{on Si}}}/\text{nm}$	[0.5,2.0]	1.22	0.89	[0.5,2.0]	1.61	1.46
$d_{\text{Si}_{\text{on Mo}}}/\text{nm}$	[0.1,1.0]	0.26	0.52	[0.1,1.0]	0.36	0.67
$\rho_{\text{Si}}/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	[1.5,2.6]	1.93	1.65	[1.5,2.6]	2.58	1.51
$\rho_{\text{Mo}}/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	[8.5,10.5]	10.47	10.11	[8.5,10.5]	10.12	10.37
$\rho_{\text{MoSi}_2}/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	[5.0,8.0]	7.77	7.91	[5.0,8.0]	5.93	5.11
σ/nm	[0.1,1.0]	0.31	0.34	[0.1,1.0]	0.32	0.34
$d_{\text{SiO}_2}/\text{nm}$	[1.0,3.0]	1.91	1.15	[1.0,3.0]	2.98	1.07
$\rho_{\text{SiO}_2}/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	[1.0,2.7]	2.68	2.66	[1.0,2.7]	1.10	2.63
$\sigma_{\text{SiO}_2}/\text{nm}$	[0.1,1.5]	0.77	0.45	[0.1,1.5]	0.83	0.52

基于 GA 和 QIGA 在进化到第 200 代求解得到的最优多层膜结构参数反演的 GIXR 结果如图 4 所示。从图 4 可以看出,基于 QIGA 得到的参数绘制的图谱与实验结果更为符合,拟合精度更高,结合表 2 最优薄膜结构参数可知,GIXR 算法的求解结果更符合实际情况,参数的可信度更高。

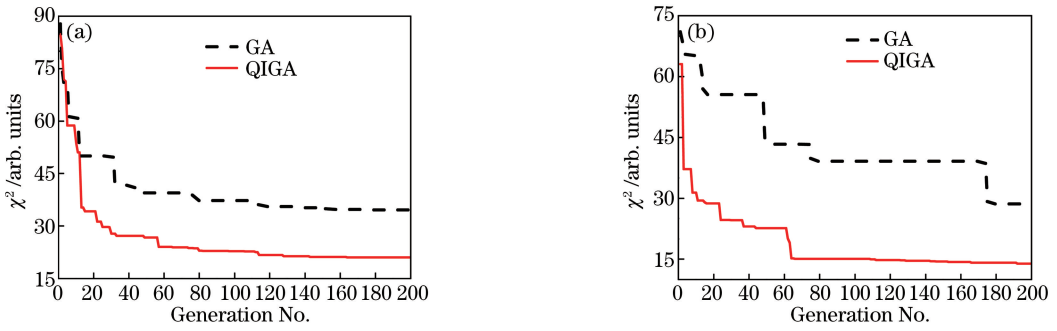


图 3 基于 GA 和 QIGA, 针对 Mo/Si 多层膜样品的 GIXR 拟合评价系数 χ^2 与进化代数的关系。

(a) 多层膜样品 1 的结果; (b) 多层膜样品 2 的结果

Fig. 3 Relationships between fitting values χ^2 of GIXR and generation numbers for multi-layer Mo/Si samples based on GA and QIGA. (a) Results of multi-layer Mo/Si sample 1; (b) results of multi-layer Mo/Si sample 2

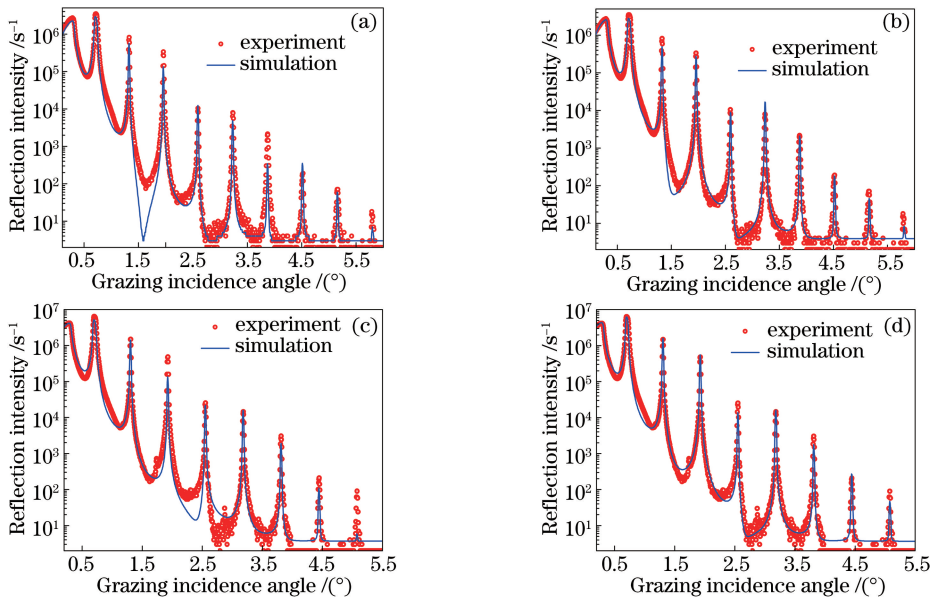


图 4 基于 GA 和 QIGA 求解得到的两个等周期 Mo/Si 多层膜样品的结构参数反演 GIXR 谱和 GIXR 实验结果。

(a) 基于 GA 得到的样品 1; (b) 基于 QIGA 得到的样品 1; (c) 基于 GA 得到的样品 2; (d) 基于 QIGA 得到的样品 2

Fig. 4 Calculated and experimental GIXR curves of two multi-layer Mo/Si samples based on GA and QIGA.

(a) Sample 1 based on GA; (b) sample 1 based on QIGA; (c) sample 2 based on GA; (d) sample 2 based on QIGA

对比可见, 在 Si 单层膜和 Mo/Si 多层膜的 GIXR 拟合求解过程中, QIGA 的求解效率和精度明显优于 GA 的求解效率和精度, 并且基于 QIGA 求解得到的薄膜微观结构参数较基于 GA 求解得到的参数更符合磁控溅射工艺的实际情况。分析得到 QIGA 在薄膜 GIXR 拟合求解中具有优势的原因如下: 1) QIGA 在种群初始化时采用量子比特编码, 量子比特编码有可同时表示多量子态叠加的特性, 所以量子种群的多样性优于传统二进制编码构成的种群; 2) QIGA 采用量子旋转门对量子种群进行更新, 并采用动态旋转角策略, 使得算法兼具较强的全局搜索能力和局部寻优能力; 3) QIGA 采用的量子变异和量子交叉操作在一定程度上抑制了种群陷入早熟。

4 结 论

针对传统 GA 在光学薄膜结构表征中存在的求解速度慢、精度低、易早熟等问题, 将 QIGA 应用于光学薄膜的结构参数分析中。Si 单层膜和 Mo/Si 多层膜的 GIXR 拟合表征结果表明, 由于 QIGA 采用量子编码、量子旋转门、量子变异、量子交叉操作, 因此该量子算法较传统 GA 具有明显的优势。相关研究工作的开展体现出 QIGA 在光学薄膜表征领域, 尤其是在复杂膜系参数分析中有潜在的实际应用价值, 可为光学薄

膜的拟合表征过程提供一种新的算法。

参 考 文 献

- [1] Fan Zhengxiu. Development and recent progress of optical thin films[J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(9): 0900131.
范正修. 光学薄膜及其进展[J]. 光学学报, 2011, 31(9): 0900131.
- [2] Zhuang Qihui, Liu Guojun, Fu Xiuhua, *et al.* Design and fabrication of a depolarizing beam splitter working in band from near-infrared[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(11): 1131001.
庄秋慧, 刘国军, 付秀华, 等. 工作波段覆盖近紫外到近红外波的消偏振分色片的设计与研制[J]. 光学学报, 2016, 36(11): 1131001.
- [3] Li Daqi, Yu Tianyan, Chen Gang, *et al.* Design and fabrication: Phase modulated antireflection coatings in 0.55-0.85 μm waveband[J]. Acta Optica Sinica, 2016, 36(7): 0731001.
李大琪, 于天燕, 陈刚, 等. 0.55-0.85 μm 波段增透膜的相位调控设计与研制[J]. 光学学报, 2016, 36(7): 0731001.
- [4] Xu Jian, Lu Min, Zhu Lina, *et al.* Progress of preparation techniques and thickness measurements of nano-scale thin films[J]. Modern Instruments, 2012, 18(3): 11-15.
徐建, 陆敏, 朱丽娜, 等. 纳米薄膜的制备技术及其膜厚表征方法进展[J]. 现代仪器, 2012, 18(3): 11-15.
- [5] Huang Jiangtao, Gu Kunming, Mao Fei, *et al.* Preparation and characterization of multilayered titanium/titanium-diamond-like carbon films[J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(8): 088102.
黄江涛, 谷坤明, 毛斐, 等. Ti-Ti 类金刚石多层膜的制备与表征[J]. 物理学报, 2012, 61(8): 088102.
- [6] Zhuang Lingping, Zhang Xiongjun, Zhang Jun, *et al.* Study of repetition-rate electro-optic switch based on transparent conductive films[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2016, 53(1): 012303.
庄令平, 张雄军, 张军, 等. 基于透明导电膜的重复频率电光开关的研究[J]. 激光与光电子学进展, 2016, 53(1): 012303.
- [7] Wu Suyong, Long Xingwu, Yang Kaiyong. Technique to minimize the characterization deviation of optical parameters of thin films caused by ellipsometric measurement systematic errors[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(6): 0631001.
吴素勇, 龙兴武, 杨开勇. 一种最小化薄膜光学参数表征偏差的椭圆测量系统误差处理技术[J]. 光学学报, 2012, 32(6): 0631001.
- [8] Cui Jianjun, Gao Sitian. Nanometer film thickness metrology and traceability based on grazing incidence X-ray reflectometry[J]. Acta Physica Sinica, 2014, 63(8): 060601.
崔建军, 高思田. 基于 X 射线掠射法的纳米薄膜厚度计量与量值溯源研究[J]. 物理学报, 2014, 63(8): 060601.
- [9] Ma Yibo, Wang Meiling, Wang Hai, *et al.* Thickness calculation of silicon dioxide nano-films based on GIXRR reflectivity curve[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(10): 3265-3268.
马一博, 王梅玲, 王海, 等. 基于 GIXRR 反射率曲线的二氧化硅纳米薄膜厚度计算[J]. 光谱学与光谱分析, 2016, 36(10): 3265-3268.
- [10] Wu Bin, Hu Ming, Hou Shunbao, *et al.* Preparation and characteristic of phase transition vanadium oxide thin films by rapid thermal process[J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(18): 188101.
武斌, 胡明, 后顺保, 等. 快速热处理制备相变氧化钒薄膜及其特性研究[J]. 物理学报, 2012, 61(18): 188101.
- [11] Li Jiang, Tang Jingyou, Pei Wang, *et al.* Accurate determination of optical constants of amorphous absorbing thin films by spectroscopic ellipsometry[J]. Acta Physica Sinica, 2015, 64(11): 110702.
李江, 唐敬友, 裴旺, 等. 光谱型椭圆仪精确表征非晶吸收薄膜的光学常数[J]. 物理学报, 2015, 64(11): 110702.
- [12] Kamini V K, Diebold A C. Overview of optical metrology of advanced semiconductor materials[C]//Aip Conference Proceedings, 2011, 1395(1): 33-40.
- [13] Yu Bo. Structural characterization of Mo/Si multilayer by grazing incidence X-ray diffraction[J]. Chinese Optics, 2010, 3(6): 623-629.
喻波. Mo/Si 多层膜小角 X 射线衍射结构表征[J]. 中国光学, 2010, 3(6): 623-629.
- [14] Nolot E, André A. Systematic combination of X-ray reflectometry and spectroscopic ellipsometry: A powerful technique for reliable in-fab metrology[J]. Thin Solid Films, 2011, 519(9): 2782-2786.
- [15] Fuertes M C, Barrera M P, Plá J. Sorption and optical properties of sol-gel thin films measured by X-ray reflectometry and ellipsometric porosimetry[J]. Thin Solid Films, 2012, 520(15): 4853-4862.
- [16] Chen Kai, Cui Mingqi, Zheng Lei, *et al.* Layer thickness measurement of super thin films[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2008, 20(2): 234-238.
陈凯, 崔明启, 郑雷, 等. nm 量级薄膜厚度测量[J]. 强激光与粒子束, 2008, 20(2): 234-238.

- [17] Zhang Chao, Zhang Jierui, Wang Yiming, *et al.* Design of broad-angle extreme ultraviolet multilayer coatings based on quantum evolutionary algorithm[J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(6): 0631001.
张超, 张杰瑞, 王一名, 等. 基于量子进化算法的宽角度极紫外多层膜设计[J]. *光学学报*, 2017, 37(6): 0631001.
- [18] Yakshin A E, Kozhevnikov I V, Zoethout E, *et al.* Properties of broadband depth-graded multilayer mirrors for EUV optical systems[J]. *Optics Express*, 2010, 18(7): 6957-6971.
- [19] Ulyanenkov A, Omote K, Harada J. The genetic algorithm: Refinement of X-ray reflectivity data from multilayers and thin films[J]. *Physica B*, 2000, 283(1): 237-241.
- [20] Dane A D, Veldhuis A, Boer D K G D, *et al.* Application of genetic algorithms for characterization of thin layered materials by glancing incidence X-ray[J]. *Physica B*, 1998, 253(3/4): 254-268.
- [21] Yang Shuyuan, Jiao Licheng, Liu Fang. The quantum evolutionary algorithm [J]. *Chinese Journal of Engineering Mathematics*, 2006, 23(2): 236-246.
杨淑媛, 焦李成, 刘芳. 量子进化算法[J]. *工程数学学报*, 2006, 23(2): 236-246.
- [22] Wang L X, Kowk S K, Ip W H. Design of an improved quantum-inspired evolutionary algorithm for a transportation problem in logistics systems[J]. *Journal of Intelligent Manufacturing*, 2012, 23(6): 2227-2236.
- [23] Zhang G X. Quantum-inspired evolutionary algorithms: A survey and empirical study[J]. *Journal of Heuristics*, 2011, 17(3): 303-351.
- [24] Henke B L, Gullikson E M, Davis J C. X-ray interactions: Photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at $E=50-30,000$ eV, $Z=1-92$ [J]. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1993, 54(2): 181-342.
- [25] Han K H, Kim J H. Genetic quantum algorithm and it's application to combinatorial optimization problem [Z/OL]. [2017-03-20]. <http://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?arnumber=870809>.
- [26] Wang Zhurong, Yang Bo, Lü Xingzhao, *et al.* An improved quantum genetic algorithm[J]. *Journal of Xi'an University of Technology*, 2012, 28(2): 145-151.
王竹荣, 杨波, 吕兴朝, 等. 一种改进的量子遗传算法[J]. *西安理工大学学报*, 2012, 28(2): 145-151.
- [27] Yang Shuyuan, Liu Fang, Jiao Licheng. The quantum evolutionary strategies[J]. *Acta Electronica Sinica*, 2001, 29(12A): 1873-1877.
杨淑媛, 刘芳, 焦李成. 量子进化策略[J]. *电子学报*, 2001, 29(12A): 1873-1877.