

类金刚石薄膜光学参数反演的改进遗传算法

李建超 苏俊宏 徐均琪

(西安工业大学光电工程学院, 陕西 西安 710032)

摘要 椭圆法测试薄膜不能直接得到薄膜的光学参数,需进行数值反演算法近似求解。采用遗传算法,借鉴竞争选择、小生境和适应值调节思想,对选择算子、变异算子、交叉算子三个重要算子进行了适当改进,改进后算法有效防止了“早熟”现象,并搜索到了全局最优,降低了操作者对拟合模型设定初值的要求。在实践上,通过3种拟合方式的结果对比,得到了可靠的某条件下制备的类金刚石薄膜的光学常数,验证了改进遗传算法在拟合薄膜光学常数中的有效性。

关键词 薄膜;类金刚石(DLC)薄膜;光学常数;改进遗传算法;椭圆数据反演

中图分类号 0484.5 TN29

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP48.031201

Improved Genetic Algorithm Inverted with Optical Constants of Diamond-Like Carbon Film

Li Jianchao Su Junhong Xu Junqi

(School of Optoelectronic Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an, Shaanxi 710032, China)

Abstract Ellipsometry can not be directly tested by thin film optical parameters, which needs approximate solution method for numerical inversion. Using genetic algorithms, the selection operator, mutation operator and crossover operator are improved by drawing from competition, selection and fitness niche adjustment idea. The improved algorithm is effective in preventing the "premature" phenomenon. It searches the global optimal and reduces the requirements on the operator to set the initial value on the fitted model. In practice, by comparing the results of the three fitting methods, we gain reliable optical constants of diamond-like carbon (DLC) films prepared under certain conditions. The improved genetic algorithm is effective to fit thin film optical constants through a large number of fitting.

Key words films; diamond-like carbon; optical constants; improved genetic algorithm; ellipsometric data inversion

OCIS codes 120.4530; 310.6860; 120.2130; 240.0310

1 引言

光学常数不仅是表征薄膜宏观光学性质的物理量,也是描述光与物质相互作用的重要物理量。能否得到精确的折射率数值,对膜系设计和实际应用有着重要的影响。测量薄膜光学常数的方法很多,由于椭圆偏振法测量精度高和无损测量的优点,在光学薄膜和薄膜材料研究中受到关注^[1~3]。但椭圆偏振法测量的数据为 ψ 和 Δ ,不是直接的薄膜光学参数,需求解一个椭圆方程得到,这一椭圆方程为超越方程,不能得到解析解,需反演求解。在求解中,有研究者采用直接搜索法,多维牛顿算法,粒子群优化算法,模拟退火法,遗传算法等^[4~6]。其中,遗传算法对初始值的选择的依赖性不强,在复杂组合优化问题方面的应用与研究得以很好地推广和发展^[7~9],但是在较大范围内搜索时,收敛速度慢且容易早熟收敛。本文通过对遗传算法的变异算子、交叉算子进行适当改进,得到了可靠的某条件下制备的类金刚石薄膜的光学常数。

2 薄膜参数反演的基本理论

当一束偏振光照射到样品上,并在薄膜层内进行多次反射后,其偏振状态将会发生改变,平行于入射平面的p分量与垂直于入射平面的s分量的振幅和相位改变均不相同。椭圆仪可以通过测量两个椭圆角(ψ ,

收稿日期: 2010-10-26; 收到修改稿日期: 2010-11-22

作者简介: 李建超(1973—),男,硕士,讲师,主要从事薄膜测试方面的研究。E-mail: ljch9999@163.com

Δ) 来分别获得振幅和相位的相对变化, (ψ, Δ) 是由 p 分量和 s 分量的反射系数 R_p, R_s

$$\tan \psi \exp(i\Delta) = \frac{R_p}{R_s} = f(n, k, d, \phi_0, \lambda), \quad (1)$$

式中 n 为薄膜复折射率的实部, k 为薄膜复折射率的虚部, d 薄膜厚度, 这 3 个量为需求解的薄膜参数, ϕ_0 为入射光的入射角, λ 为入射光波长。

(1) 式可以等效为 (2) 式方程组:

$$\begin{cases} \psi = \psi(n, k, d, \phi_0, \lambda), \\ \Delta = \Delta(n, k, d, \phi_0, \lambda). \end{cases} \quad (2)$$

这一方程组为不定方程组, 不能解析求解得到薄膜 n, k, d 值, 采用数值迭代进行不断逼近实验数据的方法近似求解, 其数学过程可以描述为: 1) 根据测量数据 (ψ, Δ) 估计 n, k, d 值的范围; 2) 通过寻找评价函数的最小值来求解参数。用均方差 (MSE) 作为评价函数 f_{MSE} , 表示了 (ψ, Δ) 的测量值与给定 n, k, d 得到的计算值间的差值。当 f_{MSE} 达到最小值时, 可以认为所求模型的参数值已被找到。评价函数可写为

$$f_{\text{MSE}} = \frac{1}{2N} \sum_{L=1}^N \sqrt{\left(\frac{\psi_{\text{mL}} - \psi_{\text{cL}}}{\epsilon_\psi}\right)^2 + \left(\frac{\Delta_{\text{mL}} - \Delta_{\text{cL}}}{\epsilon_\Delta}\right)^2}, \quad (3)$$

式中 L 为第 L 个测试波长, $L = (1, 2, 3, \dots, 490)$, N 为测试波长个数, ψ_{mL} 为第 L 个波长 ψ 的测量值, ψ_{cL} 为第 L 个波长 ψ 的计算值, Δ_{mL} 为第 L 个波长 Δ 的测量值, Δ_{cL} 为第 L 个波长 Δ 的计算值, ϵ_ψ 为 ψ 的测量误差, ϵ_Δ 为 Δ 测量误差。当 f_{MSE} 最小时, 则认为 n, k, d 值达到了全局最优, 即为迭代求解值。

3 遗传算法描述

对于一个求函数最大值或最小值的优化问题, 一般可描述为下述数学规划问题:

$$\begin{cases} \max f(\mathbf{X}), \\ \text{s. t. } \mathbf{X} \in S, \\ S \subseteq R, \end{cases} \quad (4)$$

式中 $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ 为决策变量, $f(x)$ 为目标函数, R 为基本空间, S 是 R 的一个子集, 它表示由所有满足约束条件的解所组成的集合可行解集。

3.1 简单遗传算法

遗传算法 (GA)^[10] 的基本思想来自 Darwin 的进化论和 Mendel 的遗传学。它将问题表示成“染色体”的适者生存过程, 通过“染色体”群的一代代不断进化, 经过复制、交叉和变异等操作, 最终收敛到“最适应环境”的个体, 求得问题的最优解。GA 算法主要步骤如下:

- 1) 初始化, 随机产生一组初始个体构成初始种群 $P(t)$, 并评价每一个个体的适应度值。
- 2) 判断算法是否满足终止条件, 若满足终止条件则输出结果, 终止运算; 否则执行以下步骤。
- 3) 选择运算, 将选择算子作用于群体 $P(t)$ 。
- 4) 交叉运算, 将交叉算子作用于群体 $P(t)$ 。
- 5) 变异运算, 将变异算子作用于群体 $P(t)$, 群体 $P(t)$ 经过选择、交叉、变异运算后得到下一代群体 $P(t+1)$ 。
- 6) 返回步骤 2)。

基本遗传算法在实际应用中主要有两个问题: 早熟现象 (很快收敛到局部最优解而不是全局最优解) 和收敛缓慢现象。由于这些缺陷, 解决实际问题算法需要相应的改进。

3.2 改进遗传算法

3.2.1 选择算子的改进

选择算子是通过适应度函数来选择种群中的个体的, 依据个体适应度大小将优良个体选择到下一代种群中, 适应度值越高, 被选择的可能性越大。一般可以分为以下几类^[11]: 排序选择、适应度比例选择、竞争选择。轮盘赌选择方式是传统遗传算法中最常使用的选择手段^[11], 但这种方法在遗传进化的开始阶段, 存在适应度较高生物个体的可能, 这样的个体被选中的机会较大, 因而会复制出较多子代, 在进化末期, 种群个

体间的差异不大,多样性的丧失,因而难以搜索到全局最优,轮盘赌选择失效。

因此,对选择算子提出了改进措施:借鉴竞争选择和小生境思想,仍采用比例选择算子,首先对种群中的全部个体根据适应度值降序排列,将适应度最低的 $1/4$ 个体直接淘汰掉;中间的 $2/4$ 个体选择进入下一代;适应度最高的 $1/4$ 拷贝一份,并都选择到下一代,并只进行 5 代遗传竞争选择。这一改进保证种群大小不变,适应度较低的个体直接淘汰出种群,提升算法的收敛速度,在后续的多代遗传中不再直接淘汰,保证种群的多样性。在选择父染色体时,考虑染色体的适应度的同时,还依据子代个体的情况去动态调整选择概率 P_i 。当从某一代进化 K 代后,若当前子代群体可能陷入局部极小,便将在前 K 代再生中曾被选作父本的染色体以及与其的海明距离相近的染色体选择概率降低,避免 GA 陷入局部极小。

3.2.2 交叉算子

交叉算子是遗传进化操作中重要的操作算子。简单遗传算法中,使用恒定不变的交叉概率进行交叉互换,带有一定的盲目性。有研究者提出了改进的交叉算子^[12],利用两个父代个体间相似度的高低决定是否实施交叉互换操作,同时,依据进化代数不同交叉临界值不同。两个父代个体的相似度为

$$s = c/n, \quad (5)$$

式中 c 为个体 X 与个体 Y 的最长的共同子串的长度, n 为种群中个体染色体编码的长度。

利用相似程度可以有效防止“近亲繁殖”,防止产生不良子代,这一原则应贯穿整个遗传过程。由此,针对交叉算子提出的改进措施:利用两个父代个体间相似度的高低决定是否实施交叉互换操作,并在全部遗传过程中保持定值。

3.2.3 变异算子

变异算子是摆脱遗传算法局部收敛的最有效方法,有利于防止“早熟”。有研究者使用自适应变异算子。针对变异算子同样采用自适应变异算子,将个体编码串中的每个基因位视为变异点,只是在选择变异概率和具体基因位变异上采取了不同的概率选择方法,对于基因位变异采用等概率变异;子代基因变异采用自适应变异,变异概率 P 不固定,与同代中群体平均适应度值的那个子代的相似度成反比,并在 $0.0001 \sim 0.5$ 间变动。

改进后的遗传算法程序流程图见图 1。

4 数值拟合计算结果及分析

用 Matlab 编制了拟合程序,并进行了模拟计算。拟合对象为:Si 基底上非平衡磁控溅射沉积类金刚石薄膜的光学参数。测量仪器是美国 J. A. WOOLLAM 公司制造生产的 M-2000UI 型宽光谱变角度椭偏仪。该设备测量误差为 $\Delta, \psi \leq \pm 0.2^\circ$;重复性为 $\Delta, \psi \leq \pm 0.05^\circ/3h$;光谱范围为 $250 \sim 1700$ nm,每隔 2.965 nm 一个测试点,测试光入射角为 75° 。

对于弱吸收的薄膜来说,用柯西(Cauchy)^[13]模型来表达折射率与波长的函数关系,以简化模型。这样折射率 n 和消光系数 k 可表示,

$$\begin{cases} n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \\ k(\lambda) = A_1 \times \exp\left[A_2 \times 1240 \times \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{400}\right)\right], \end{cases} \quad (6)$$

式中 λ 单位为 μm ,常数 A, B, C, A_1, A_2 是待求参量。确定了这些常数,薄膜在 $250 \sim 1700$ nm 范围内所有波长下的 n, k 就确定了。

图 2 为改进遗传算法拟合曲线。图 2(a)为拟合值与实验值,(b)为拟合数据与实验数据差。分别采用椭偏仪自带拟合程序、简单遗传算法、改进遗传算法结果对比,取 $\lambda = 632.8$ nm 处 n, k, d 比较,如表 1 所示。

从表 1 可以看出改进前的遗传算法结果并不理想,3 次拟合的 n, k, d 分别是 $1.965, 0.190, 288.205$; $2.021, 0.087, 267.546$; $2.154, 0.022, 216.251$,3 次拟合得到数据很不稳定,而且偏差较大,折射率从 1.965 变化到 2.154 ,主要原因是简单遗传算法很容易发生“早熟”现象,在局部极值附近就停止拟合,而每次的局部极值不一定相同,故得出的拟合结果较分散,且在许可范围内不可接受的。改进后的 3 次拟合虽然也有变

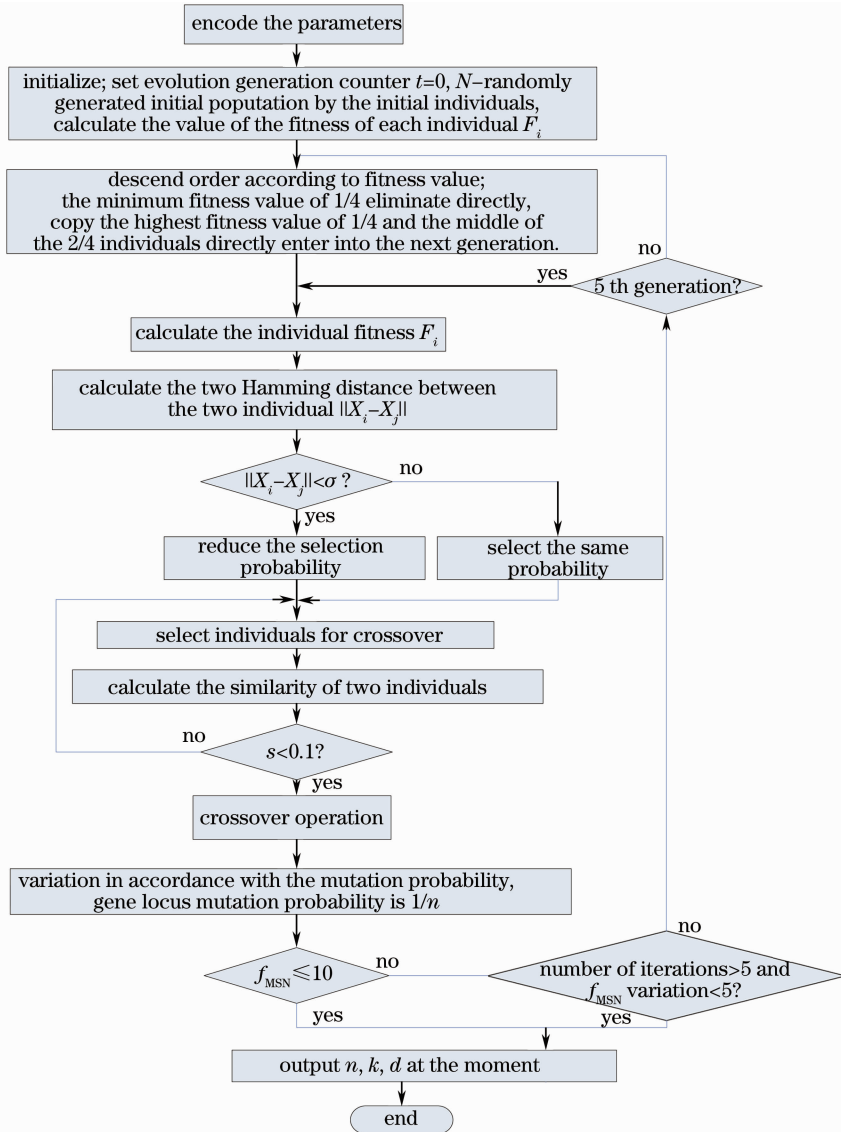


图 1 改进的遗传算法流程图

Fig. 1 Flow diagram of improved genetic algorithm

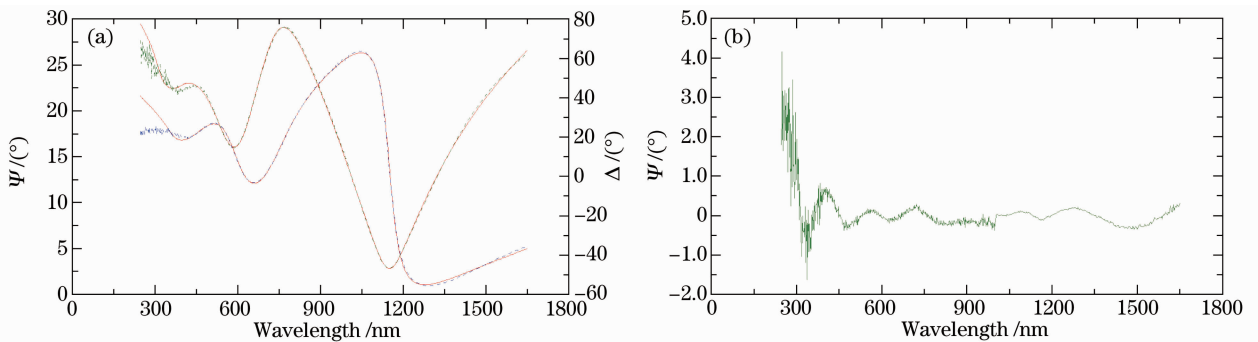


图 2 改进的遗传算法拟合曲线

Fig. 2 Improved genetic algorithm fitting curve

动,但变动很小,基本稳定在 1.971, 285.065 附近,折射率值相对变动在 1/1000 左右的水平,由于采用的结束方式有两种: $f_{MSE} \leq 10$ 和 f_{MSE} 变化量 ≤ 5 连续拟合次数 ≥ 5 次,即可结束拟合,故拟合结果会在允许范围内有所变动,且与椭偏仪自带拟合程序拟合结果对比,符合程度较高,可以认为改进后的遗传算法拟合结果准确、可靠。

表1 三种拟合方式结果比较
Table 1 Comparison of three fitting methods

Fitting parameters	n	k	d
1st fitting with simple genetic algorithm	1.965	0.190	288.205
2nd fitting with simple genetic algorithm	2.021	0.087	267.546
3rd fitting with simple genetic algorithm	2.154	0.022	216.251
1st fitting with improved genetic algorithm	1.971	0.055	285.065
2nd fitting with improved genetic algorithm	1.975	0.049	283.152
3rd fitting with improved genetic algorithm	1.969	0.058	287.118
Fitted with ellipsometry fitting procedure	1.973	0.050	284.50

4 结 论

借鉴竞争选择、小生境和适应值调节思想,对简单遗传算法中的选择算子、变异算子、交叉算子进行了改进,拟合实践,验证了改进后的遗传算法在一定程度上避免了算法的非成熟收敛,加快了收敛速度。利用遗传算法拟合出了弱吸收类金刚石薄膜光学常数参数。

参 考 文 献

- Liao Naiman, Li wei. Thickness and optical constant determination of hydrogenated amorphous silicon thin film from transmittance spectra of ellipsometer[J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, **57**(3): 1542~1547
廖乃慢, 李 伟. 椭圆透射法测量氢化非晶硅薄膜厚度和光学参数[J]. *物理学报*, 2008, **57**(3): 1542~1547
- Zhou Yi, Wu Guosong. Accurate determination of optical constants and thickness of absorbing thin films by a combined ellipsometry and spectro-photometry approach[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, **59**(4): 2356~2363
周 毅, 吴国松. 椭圆与光度法联用精确测定吸收薄膜的光学常数与厚度[J]. *物理学报*, 2010, **59**(4): 2356~2363
- Wang Xiaodong, Shen Jun. Optical constants of sol-gel derived TiO₂ films characterized by spectroscopic ellipsometry[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, **58**(11): 8027~8032
王晓栋, 沈 军. 椭圆光谱法研究溶胶-凝胶 TiO₂ 薄膜的光学常数[J]. *物理学报*, 2009, **58**(11): 8027~8032
- Wang Dangshe. Inversion and Measurement of Optical Parameter of DLC Film[D]. Xi'an: Xidian University, 2006
王党社. 类金刚石薄膜光学特性测量与参数反演[D]. 西安: 西安电子科技大学, 2006
- Liao Qingjun, Wang Zhiheng, Wanglei. Ellipsometric data inversion of absorbing films by simulated annealing[J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, **22**(6): 683~687
廖清君, 王植恒, 王 磊. 模拟退火法在吸收薄膜的椭圆反演算法中的应用[J]. *光学学报*, 2002, **22**(6): 683~687
- Yang Shenghong, Yu Zhaoxian, Li Huiqiu. Simulated annealing optimization algorithm for inverting ellipsometric spectra[J]. *Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 2000, **19**(5): 338~342
阳生红, 余招贤, 李辉道. 模拟退火法在椭圆光谱数值反演中的应用[J]. *红外与毫米波学报*, 2000, **19**(5): 338~342
- Chemishkian S., Arabyan A.. Intelligent algorithms for optimal placement of actuators and sensors in structural control [C]. American Control Conference. IEEE Piscataway, 1999, **3**: 1812~1816
- S. Martin, J. Rivory, M. Schoenauer. Synthesis of optical multilayer systems using genetic algorithms[J]. *Appl. Opt.*, 1995, **34**(13): 2247~2254
- Wang Qiang, Shen Guotu, Yang Baocheng *et al.*. Application of genetic algorithm in the design optimization of grating profile[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2005, **34**(4): 410~414
王 强, 沈国土, 杨宝成 等. 遗传算法在光栅面形优化设计中的应用[J]. *红外与激光工程*, 2005, **34**(4): 410~414
- Goldberg D. E.. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning[M]. Massachusetts: Addison-Wesley Professional, 1989. 1~83
- LI Ming. The Study on Improved Genetic Algorithm and Its Application in Optimization Questions[D]. Jilin: Jilin University, 2004
李 明. 遗传算法的改进及其在优化问题中的应用研究 [D]. 吉林: 吉林大学, 2004
- Cao Daoyou, Cheng Jiaying. A genetic algorithm based on modified selection operator and crossover operator[J]. *Computer Technology and Development*, 2010, **20**(2): 44~51
曹道友, 程家兴. 基于改进的选择算子和交叉算子的遗传算法[J]. *计算机技术与发展*, 2010, **20**(2): 44~51
- Born M., Wolf E.. Principles of Optics[M]. New York: Oxford, 1989