

自适应遗传退火算法在薄膜椭偏测量中的应用

王红翠, 井西利, 刘英杰, 马毅恒, 王全志, 邢小宁
(燕山大学理学院, 河北 秦皇岛 066004)

摘要:将自适应遗传模拟退火混合算法应用于薄膜椭偏测量的反演问题中。由于模拟退火算法的基本思想是跳出局部最优解而得到全局最优解,因此将模拟退火思想引入到遗传算法,遗传算法和模拟退火算法相结合,组建自适应遗传模拟退火算法,从而综合了全局优化和局部搜索的特点,并通过模拟计算,验证了此方法在薄膜椭偏测量问题中的可行性及有效性,为解决薄膜椭偏测量的优化问题提供了新的思路。

关键词:模拟退火算法;遗传算法;自适应遗传模拟退火;椭偏测量;薄膜
中图分类号: O484.5 **文献标识码:** A

Application of adaptive genetic simulated annealing algorithm in ellipsometric measurement of thin films

WANG Hong-cui, JING Xi-li, LIU Ying-jie, MA Yi-heng, WANG Quan-zhi, XING Xiao-ning
(College of Sciences, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China)

Abstract: The essence of simulated annealing algorithm is getting away from the local optimum and converging to the global optimum, so the method is introduced into genetic algorithms. Combining simulated annealing and genetic algorithm together, a new algorithm called adaptive genetic simulated annealing algorithm is formed and is introduced in order to solve inverse problem related to ellipsometric measurement of thin films. The hybrid algorithm combines two powers: global optimization and local search. What is more, in order to check the feasibility and efficiency of the algorithm in ellipsometric measurement of thin films, numerical simulation is done in this paper. The results obtained may be a good example to demonstrate the feasibility and efficiency of the approach to solve more complex inverse problems in ellipsometry.

Key words: simulated annealing; genetic algorithm; adaptive genetic simulated annealing; ellipsometry; thin films

1 引言

薄膜的厚度和光学参数在很大程度上决定了薄膜的电磁性能、光电性能、力学性能和光学性能等^[1],因此,准确地测量薄膜的厚度和光学常数在薄膜的制备和应用中起着关键的作用。而椭圆偏振法,因为能同时测量薄膜的厚度和光学常数,及其非破坏性^[2-4]和非扰动性等优点,成为薄膜主要的光学测量方法。但是椭偏测量过程中,测量输出量与所求薄膜的厚度及光学常数的关系是一个超越非线性方程^[5],不可能得到解析解,需要对其进行优化反演计算。

关于这一优化问题,前人已经做了大量的研究,都试图找到一个好的算法来解决这一问题。比如,

多项式反算法,多维牛顿法,修正下降单纯型法,遗传算法,模拟退火算法,神经网络等多种算法都曾被应用于薄膜椭偏测量的反演问题中^[6],但每一种算法都有其优缺点,得到的结果的收敛性和精度都不是很好。比如,遗传算法的优点是收敛速度快,具有并行性的多点搜索优点,且具有较强的全局搜索能力,能使搜索空间达到整个可行的解空间,但其较为严重的缺点是过早收敛、局部收敛的问题^[7],而模拟退火算法能够以一定的概率接受目标函数值不太

作者简介:王红翠(1984-),女,硕士研究生,主要研究方向为薄膜优化。E-mail:wanghongcuiwulixi@163.com

收稿日期:2010-10-14;**修订日期:**2010-11-12

好的状态,使得算法可以避免局部极小而得到全局极小^[8],但它对参数的依赖性较强,并且需要不断迭代取得最优解,运用效率低。

本文引用遗传模拟退火算法^[9-12],这一算法已经被应用于解决许多优化问题,例如,旅行商问题,结构优化设计,背包问题,阿尔奇公式参数估计等都取得了较好的结果。本文采用此方法用来解决椭圆方程的寻优问题,并根据要解决的问题的情况,在理论方法上做了一定的创新,形成了自适应遗传模拟退火,并通过理论试算,在 MATLAB 环境下编程验证了此算法在椭圆测量数据处理中的有效性。

2 椭圆测量的基本原理

当一束偏振光照射在样品上,并在薄膜层内进行多次反射后,其偏振态将会发生改变,即平行于入射平面的 p 分量与垂直于入射平面的 s 分量的振幅与相位均不相同,椭圆仪可以通过测量椭圆参数 (Ψ, Δ) 来获得振幅和相位的相对变化,椭圆测量的基本公式为^[13]:

$$R_p/R_s = \tan \Psi \exp(i\Delta) \quad (1)$$

式中, R_p, R_s 分别是 p 分量和 s 分量的反射系数。

考虑基底上有一单层吸收薄膜的情况,光束从环境介质中入射,折射率为 n_1 ,薄膜折射率为 n_2 ,厚度为 d ,基底折射率为 n_3 ,其光路图如图 1 所示。

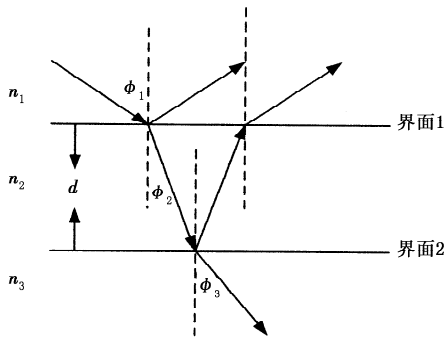


图 1 单层膜的光路图

Fig.1 beam path of single-layer film

其椭圆方程为:

$$\tan \Psi \exp(i\Delta) = R_p/R_s = \frac{r_{1p} + r_{2p} \exp(-i2\delta)}{1 + r_{1p} r_{2p} \exp(-i2\delta)} \times \frac{1 + r_{1s} r_{2s} \exp(-i2\delta)}{r_{1s} + r_{2s} \exp(-i2\delta)} \quad (2)$$

式中, r_{1p} 和 r_{1s} 为环境媒质与薄膜表面之间的菲涅耳反射系数; r_{2p} 和 r_{2s} 为薄膜与基底界面之间的菲涅耳反射系数; δ 为光在薄膜中传播所引起的相位差,有:

$$2\delta = \frac{4\pi d(n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \phi_1)^{1/2}}{\lambda} \quad (3)$$

由式(2)~式(3)知,测量值 (Ψ, Δ) 不能直接得到 n_2, d 的解析解,我们通过反演计算来得到其最优解。在椭圆方程反演计算中,评价函数一般选为^[14]:

$$x_u^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\left(\frac{\Psi_c^i - \Psi_m^i}{\epsilon^\Psi} \right)^2 + \left(\frac{\Delta_c^i - \Delta_m^i}{\epsilon^\Delta} \right)^2 \right] \quad (4)$$

式中, N 为测量的总次数; $\epsilon^\Psi, \epsilon^\Delta$ 分别为 Ψ, Δ 的测量误差; Ψ_c^i, Δ_c^i 为测量的椭圆参数值; Ψ_m^i, Δ_m^i 为计算的椭圆参数值。

如果计算收敛后的 $x_u^2 \approx 1$ 时,表示拟合结果比较好,意味着计算值与测量值之间的差与实验误差处于相同的数量级;如果 $x_u^2 \gg 1$,表示计算值偏离测量值很远;而如果 $x_u^2 \leq 1$,则说明实验误差估计过大^[9,14]。

3 遗传模拟退火算法

3.1 遗传模拟退火算法的基本思想

遗传模拟退火算法的核心思想是将模拟退火算法嵌入到遗传算法中,利用模拟退火算法来保证遗传算法中种群的稳定性和优越性。该算法从一组随机产生的初始群体开始,通过引用模拟退火机制产生选择概率,再根据选择概率进行选择,再进行交叉、变异等遗传操作,产生一组新的个体,这个过程反复迭代,直到满足条件为止。

其中,个体的选择是遗传算法中较为关键的一步,它是从母体中选择个体形成繁殖库的过程,有时直接关系到收敛速度的问题。传统的遗传算法采用轮盘赌的方式进行个体选择,这种方式容易在进化过程中丢掉最优解,而且速度较慢,因此本文在选择过程中引用模拟退火机制来代替传统的轮盘赌选择方式。另外,基因操作是遗传算法中的主要内容跟关键,交叉和变异都是遗传算法中获取新的优良个体的重要手段,传统的遗传算法把交叉概率和变异概率取为固定值,结果在进化初期容易陷入局部最优解,而在进化末期又会因为变异概率过大而使得解在最优解附近波动。所以,本文采用自适应交叉概率和自适应变异概率,即考虑了解的全局性又考虑了解的收敛性,交叉概率和变异概率的公式为^[9]:

$$p_c = \begin{cases} \frac{p_{c1}(f_{\text{mean}} - f') + p_{c2}(f' - f_{\text{min}})}{f_{\text{mean}} - f_{\text{min}}} f' < f_{\text{mean}} \\ \frac{p_{c2}(f_{\text{max}} - f') + p_{c3}(f' - f_{\text{mean}})}{f_{\text{max}} - f_{\text{mean}}} f' \geq f_{\text{mean}} \end{cases} \quad (5)$$

$$p_m = \begin{cases} \frac{p_{m1}(f_{\text{mean}} - f) + p_{m2}(f - f_{\text{min}})}{f_{\text{mean}} - f_{\text{min}}} f < f_{\text{mean}} \\ \frac{p_{m2}(f_{\text{max}} - f) + p_{m3}(f - f_{\text{mean}})}{f_{\text{max}} - f_{\text{mean}}} f \geq f_{\text{mean}} \end{cases} \quad (6)$$

式中, f_{max} 为种群中最大的适应度值; f_{mean} 为每代种群中的平均适应度值; f_{min} 为种群中最小的适应度值; f' 为要交叉的 2 个个体中较大的适应度值; f 为要变

异个体的适应度值。其中, $p_{c1} > p_{c2} > p_{c3}, p_{m1} > p_{m2} > p_{m3}, p_{c1}, p_{c2}, p_{c3}, p_{m1}, p_{m2}, p_{m3}$ 取(0,1)区间的值。

遗传模拟退火算法的具体步骤如下:

- (1) 给定初始数值, 随机产生初始种群;
- (2) 评价群体中每个个体的适应度函数值;
- (3) 用模拟退火机制产生选择概率;
- (4) 根据选择概率选择父代个体;
- (5) 对(4)中选择的优秀个体进行交叉操作, 交叉概率为自适应交叉概率;
- (6) 对(5)中交叉后的优秀个体进行变异操作, 变异概率为自适应变异概率;
- (7) 由(3)~(6)产生的新的群体, 若满足收敛条件, 结束, 否则转(2)。

3.2 遗传模拟退火算法程序设计图

遗传模拟退火算法程序设计图如图2所示。

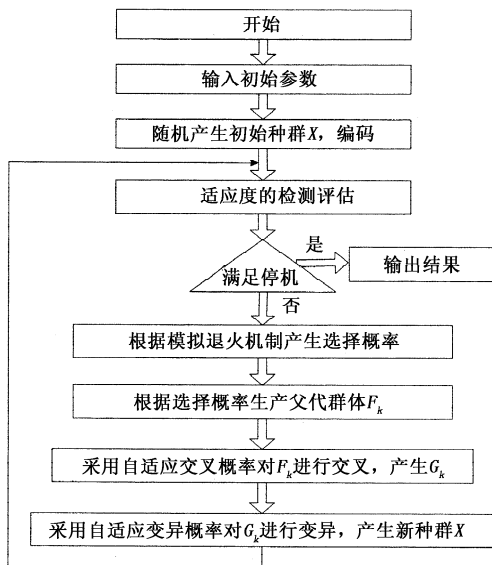


图2 自适应遗传模拟退火算法流程图

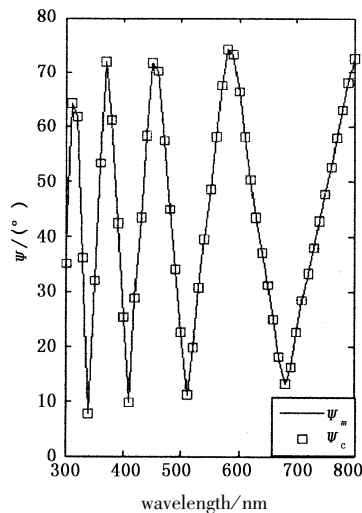


图3 单层薄膜椭偏参数随波长的变化曲线

Fig.3 ellipsometric parameters of single-layer film as a function of wavelength

Fig.2 flow chart of adaptive genetic simulated annealing algorithm

4 数值模拟计算

4.1 单层膜理论试算

下面将通过一些模拟计算来验证自适应遗传模拟退火混合算法在薄膜椭偏测量反演计算中的可行性及有效性。首先, 选用在玻璃衬底上的单层TiO₂, 其光路图如图1所示。假设该模型的参数值为: $n = 2.625, k = 0.015, d = 417 \text{ nm}, n_s = 1.523, k_s = 0$, 其中 n 为薄膜折射率的实部, k 为薄膜折射率的虚部, 入射波长为 300 ~ 800 nm, 入射角为 70°, 通过数值计算可获得椭偏参数(Ψ, Δ)的准确值, 波长范围为 300 ~ 800 nm, 步长为 10 nm, 共获得 51 个椭偏参数对, 椭偏参数(Ψ_m, Δ_m)随波长的变化如图3所示。然后通过引入一个呈正态(高斯)分布的随机误差来模拟数据的不精确度, 在这里我们假设 Ψ 和 Δ 的噪声标准偏差分别为 0.01° 和 0.02°, 加入噪声后的椭偏参数(Ψ_c, Δ_c)随波长的变化如图3所示。为了验证本文方法的可行性和有效性, 分别采用本文算法、遗传算法、模拟退火算法对加入噪声后的椭偏参数进行处理, 求得薄膜参数如表1所示, 得到的结果为运行 10 次后的平均值。为了便于比较, 三种算法的初始模型相同, 本文算法的交叉概率、变异概率均为自适应, 遗传算法的交叉概率、变异概率均为固定值, 分别为 0.6, 0.02, 模拟退火的初始温度都选为 20, 降温速度都为 0.99。另外, 表1中还列出了扩大参数的搜索范围时, 用本文算法拟合的结果, 从表1中数据可以看出, 扩大搜索范围仍能得到相似的结果。从而验证了本文算法可以高精度的反演出正确的模型参数。

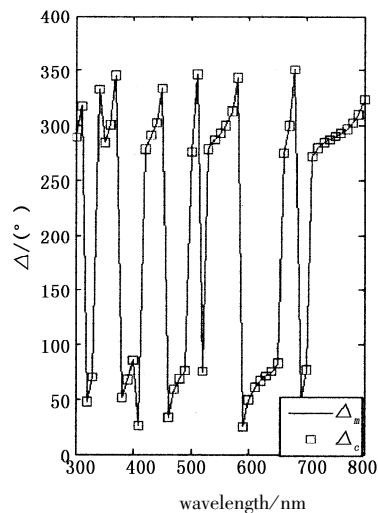


表 1 用自适应遗传模拟退火算法、遗传算法、模拟退火算法计算得到的单层薄膜参数

Tab.1 the result of computation of single-layer film parameters by adaptive genetic simulated annealing algorithm, genetic algorithm, simulated annealing algorithm

	模型参数	遗传算法	模拟退火算法	本文算法	本文算法扩大搜索范围
迭代次数		134	187	85	121
n	2.625	2.6750	2.6260	2.6260	2.6260
d/nm	417	417.2530	416.8130	416.9222	417.2110
k	0.015	0.0156	0.0153	0.0152	0.0153
x_u^2		0.9530	1.0000	1.0000	1.0000

4.2 多层膜理论试算

根据上面的模拟验证,说明了自适应遗传模拟退火混合算法可以并且高效的解决单层薄膜椭圆偏测量问题,下面再通过双层吸收膜来验证该算法的可

行性。模拟一组双层薄膜数据,假设玻璃基底上所镀材料分别为 $\text{HfO}_2, \text{Ta}_2\text{O}_5$ 材料薄膜,模型参数值为: $n_1 = 1.90, d_1 = 226 \text{ nm}, k_1 = 0.0035 (\text{HfO}_2); n_2 = 1.98, d_2 = 161 \text{ nm}, k_2 = 0.0012 (\text{Ta}_2\text{O}_5); n_s = 1.523, k_s = 0$ 。入射波长、入射角及步长同单层膜一样,得到的椭圆偏参数 (Ψ_m, Δ_m) 及分别对 Ψ_m, Δ_m 加入 $0.02^\circ, 0.025^\circ$ 噪声后椭圆偏参数 (Ψ_c, Δ_c) 随波长的变化如图 4 所示,同单层膜一样,分别采用本文算法、遗传算法、模拟退火算法对加入噪声后的椭圆偏参数进行处理,求得的薄膜参数如表 2 所示。三种算法的初始模型依然相同,经验证,遗传算法的交叉概率和变异概率分别为 0.8, 0.01, 模拟退火初始温度都为 50 比较合适,降温速度仍为 0.99。从表 2 中可以看出,在双层膜的情况下,遗传算法容易陷入局部极值,模拟退火算法能得到最优解,但是收敛较慢,而本文算法仍能快速有效的找到最优解。

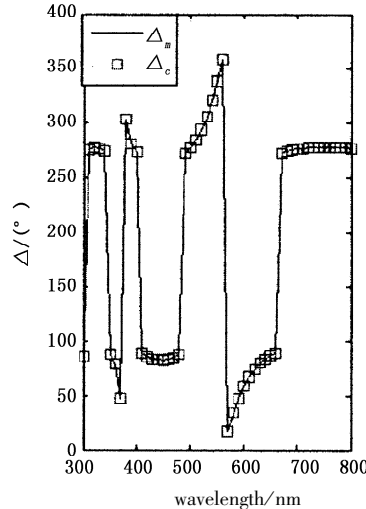
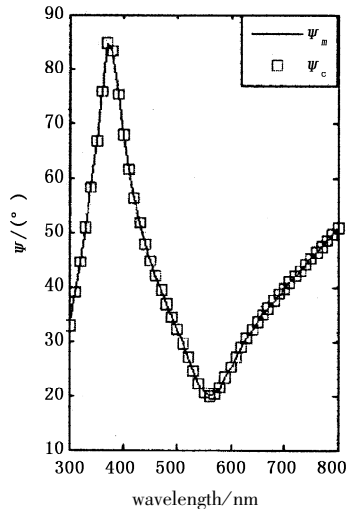


图 4 椭圆偏参数随波长的变化曲线

Fig.4 ellipsometric parameters of multi-layer film as a function of wavelength

表 2 用自适应遗传模拟退火算法、遗传算法、模拟退火算法计算得到的多层薄膜参数

Tab.2 the result of computation of multi-layer film parameters by adaptive genetic simulated annealing algorithm, genetic algorithm, simulated annealing algorithm

	模型参数	遗传算法	模拟退火	本文算法
迭代次数		353	486	249
n_1	1.90	1.8723	1.8851	1.9119
d_1/nm	226	216.3428	1.8851	1.9119
k_1	0.0035	0.0037	0.0035	0.0035
n_2	1.98	1.9303	1.9881	1.9764
d_2/nm	161	168.9951	159.9435	160.6173
k_2	0.0012	0.0011	0.0012	0.0012
x_u^2		1.1333	0.9653	1.0028

5 结论

本文提出将自适应遗传模拟退火混合算法用于解决薄膜椭圆偏测量的反演计算问题,并在 MATLAB 环境下编程,进行了模拟计算。结果表明,自适应遗传模拟退火混合算法在解决薄膜椭圆偏测量的反演问题中即高效又稳定,而且该算法的收敛不依赖于初始值的选择。所以,用该算法求解椭圆偏方程是可行的,也是非常有效的,也为解决薄膜椭圆偏测量的优化问题提供了新的思路。

参考文献:

[1] Liu Aiyun. Study on the preparation and optical properties of the LSCO thin film [J]. Laser & Infrared, 2008, 38 (6):566 - 568. (in Chinese)

- 刘爱云. LSCO 薄膜的制备及光学性能研究[J]. 激光与红外, 2008, 38(6): 566 - 568.
- [2] Zhou Quan. Ellipsometric measurement of some usual optical material(Film) [D]. Chang Sha: Journal of National University of Defense Technology, 2007. (in Chinese)
周全. 某些常用光学材料(薄膜)的椭偏测量[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2007.
- [3] Zhou Quan, Huang Yun. Application and comparison of simulated annealing algorithm and genetic algorithm in spectral ellipsometry data processing[J]. Journal of Applied Optics, 2008, 29(3): 385 - 389. (in Chinese)
周全, 黄云. 模拟退火算法与遗传算法在光谱椭偏数据处理中的应用比较[J]. 应用光学, 2008, 29(3): 385 - 389.
- [4] Chen Yanping, Yu Feihong. Test methods for film thickness and optical constants[J]. Optical Instruments, 2006, 28(6): 84 - 88. (in Chinese)
陈燕平, 余飞鸿. 薄膜厚度和光学常数的主要测试方法[J]. 光学仪器, 2006, 28(6): 84 - 88.
- [5] Wang Fangning, Wang Zhiheng, Jiang Ming. Improving the precision of optical parameters of thin films in ellipsometry by using the modified simulated-annealing data processing[J]. Journal of Southwest University for Nationalities: Natural Science Edition, 2006, 32(4): 783 - 787. (in Chinese)
王芳宁, 王植恒, 姜明. 使用修正的模拟退火数据处理以提高椭偏测量中薄膜参数的精度[J]. 西南民族大学学报: 自然科学版, 2006, 32(4): 783 - 787.
- [6] Yu Zhao xian, Mo Dang. Generalized simulated annealing algorithm applied in the ellipsometric inversion problem [J]. Thin Solid Films, 2003, 425: 108 - 112.
- [7] Li Wei, Yang Shaoqing. Image registration based on improved adaptive genetic algorithm[J]. Laser & Infrared, 2009, 39(9): 991 - 994. (in Chinese)
李伟, 杨绍清. 基于改进自适应遗传算法的图像配准方法[J]. 激光与红外, 2009, 39(9): 991 - 994.
- [8] Liu Haifei, Ruan Baiyao, Zhang Saimin, et al. Global hybrid inversion method and application based on simulated annealing algorithm[J]. Journal of Guilin University of Technology, 2008, 28(3): 312 - 318. (in Chinese)
刘海飞, 阮百尧, 张赛民, 等. 基于模拟退火的全局混合反演方法及其应用[J]. 桂林工学院学报, 2008, 28(3): 312 - 318.
- [9] Wang Wenjun. Research on frequency assignment arithmetic based on genetic and simulated annealing algorithm [J]. Equipment Environmental Engineering, 2010, 7(1): 29 - 33. (in Chinese)
王文君. 基于遗传模拟退火算法的频率指配算法研究[J]. 装备环境工程, 2010, 7(1): 29 - 33.
- [10] Duan Yuhua. Research on designing of optic film narrow bandpass filters [D]. Qinhuangdao: Yanshan University, 2008. (in Chinese)
段玉华. 光学薄膜窄带滤波器的设计方法研究[D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2008.
- [11] Cui Jianwen. An Improved global optimization method and its application to the inversion of mproved global optimization method and its application to the inversion of surface wave dispersion curves[J]. Chinese Journal of Geophysics, 2004, 47(3): 521 - 527. (in Chinese)
崔建文. 一种改进的全局优化算法及其在面波频散曲线反演中的应用[J]. 地球物理学报, 2004, 47(3): 521 - 527.
- [12] T W Leung, Chi Kin Chan, Marvin D Troutt. Application of a mixed simulated annealing-genetic algorithm heuristic for the two-dimensional orthogonal packing problem[J]. European Journal of Operational Research, 2003, 145: 530 - 542.
- [13] Jing Xili, Xu Tianfu, Chen Xiujuan, et al. An adaptive hybrid inversion algorithm for ellipsometric measurement of thin films[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2007, 24(5): 619 - 624. (in Chinese)
井西利, 徐天赋, 陈秀娟, 等. 薄膜椭偏测量的自适应混合反演算法[J]. 计算物理, 2007, 24(5): 619 - 624.
- [14] Liao Qingjun, Wang Zhiheng, Wang Lei, et al. Ellipsometric data Inversion of absorbing films by simulated annealing[J]. Acta Optica Sinica, 2002, 22(6): 683 - 687. (in Chinese)
廖清君, 王植恒, 王磊, 等. 模拟退火法在吸收薄膜的椭偏反演算法中的应用[J]. 光学学报, 2002, 22(6): 683 - 687.