

文章编号 1004-924X(2008)09-1582-07

基于混合优化算法测定铝薄膜光学常数

金伟华^{1,2}, 金春水¹, 张立超¹, 朱宏力^{1,2}, 刘磊^{1,2}

- (1. 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;
2. 中国科学院 研究生院, 北京 100083)

摘要:提出了一种离线精确测定金属铝薄膜光学常数的方法。与传统的原位测量方法相比,这种方法简便,不需要连接到真空室的复杂测量设备上。该方法以测量椭圆偏光光谱曲线和分光光谱曲线为目标,考虑金属铝薄膜在空气中表面氧化的影响,在混合优化算法的基础上,使用基于色散关系的多波长法拟合确定金属铝薄膜从紫外到可见区(200~800 nm)的光学常数;优化算法采用多种群并行遗传算法和单纯形法相结合的方式,提高了拟合质量和速度,得到了理想的结果,光谱曲线拟合误差 $<2\%$ 。在确定了铝光学常数的基础上,镀制了单腔紫外诱导透射滤光片,测量的透过率光谱与设计结果在 265 nm 处的峰值透过率偏差 $<1\%$ 。

关键词:铝薄膜;光学常数;椭圆偏光光谱;遗传算法;单纯形法

中图分类号: O484.5 **文献标识码:** A

Determination of optical constants for aluminum thin film based on combined optimal algorithm

JIN Wei-hua^{1,2}, JIN Chun-shui¹, ZHANG Li-Chao¹, ZHU Hong-li^{1,2}, LIU Lei^{1,2}

- (1. State Key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China;
2. Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

Abstract: An ex-situ determining method was proposed for the optical constants of aluminum thin films precisely. Compared to the traditional in-situ method, the method had no need of the complex optical measurement apparatus attached to vacuum chamber and could do measurement simply and fastly. By using multi-wavelength fitting method, the ellipsometric and photometric spectra were fitted with a combination of optimal genetic algorithm and a simplex algorithm and the oxide layer formed on the aluminum in air was considered in the fitting process. With the combination of parallel genetic algorithm and least square method, the fitting speed and quality were obviously improved and the optical constants from the UV to visible range were obtained within an error no more than 2%. With these data known, an UV induced transmission filter with one cavity was designed. The tested transmission spectra are well consistent with that design in a peak transmittance error less than 1% at 265 nm.

Key words: aluminum thin film; optical constants; ellipsometry; genetic algorithm; simplex method

收稿日期:2008-02-22;修订日期:2008-03-10.

基金项目:吉林省科技厅项目(No. OT483UQ080)

1 引言

金属铝膜与玻璃基底附着性良好,且在紫外到远红外的宽广谱段均有着平坦且很高的反射率,从极紫外到真空紫外直至红外都有广泛应用^[1]。特别是在紫外区,金属铝有着比其他所有金属都高的反射率和 k/n 比,这使得金属铝成为紫外诱导透射滤光片的首选材料。

金属铝是一种非常活泼的金属,在空气中易被迅速氧化,在表面形成一层薄薄的氧化膜,这层氧化膜在可见或红外波段对光学性能的影响可以忽略,但是在紫外波段到极紫外波段却对金属层的光学性能有严重影响。

在诱导透射滤光片的设计和制备过程中,精确测定铝的光学常数意义重大。测定铝光学常数方面的文章很多^[2-5],这些测量多需高真空环境,虽然在高真空状态下测量薄膜的光学常数可以得到非常精确的结果,但是实际操作需要连接到真空中复杂的测量设备,并涉及特殊要求的人射角度等等。而离线测量却不需要真空环境,快捷方便,但是要解决表面氧化的问题以消除表面氧化层对解析金属铝光学常数的影响。

本文在色散关系的基础上建立了双层模型,编制了反演程序对测量的椭圆偏光谱曲线和分光光谱曲线进行拟合反演,得到了铝层的光学常数信息。

2 实验

在 Oxford 600 型离子束溅射镀膜机上沉积了一定厚度的金属铝薄膜。溅射靶材选用 99.99% 的进口铝靶,工作气体选用氩气,气体流量用 MKS 型流量计精确控制,基底选用厚度 1 mm、直径 2.54 cm 的双抛熔石英玻璃。本底真空度约为 4×10^{-5} Pa。为了保证镀膜的均匀性,基底以 5 r/min 自转。

在美国莱特太平洋公司的 M2000 型光谱型椭圆偏仪上测量了样品的椭圆偏光谱曲线,入射角度选用 85° ,光谱范围 200~800 nm;在美国 PE 公司的 Lambda950 分光光度计上测量了样品的正入射透过率和 8° 反射率曲线,光谱范围 200~800 nm,反射率测量选用了 VN 型反射率附件,探测

器选用 150 mm 积分球。

3 优化算法和色散模型

数据反演基于自编的拟合程序,各个程序均基于 Matlab 环境,采用了并行遗传算法^[6-7]和单纯形法相结合的混合优化算法。铝薄膜光学常数反演问题由于有十几个未知参量,参量之间相关性很大,评价函数和解析各参量之间是一个复杂的多峰函数,存在很多局部极小解,若仅仅采用单纯形法,解析结果对给定初值的依赖性非常大,易陷入局部极值。若仅采用遗传算法,虽然很容易跳出局部极值,但是算法后期收敛性不好,进化速度非常慢,所以将二者结合寻优。先通过遗传算法找出全局最优初解,再在这个初解附近局部寻优,既避免了陷入局部极值问题,又达到了较快的速度。其简单的流程如图 1。

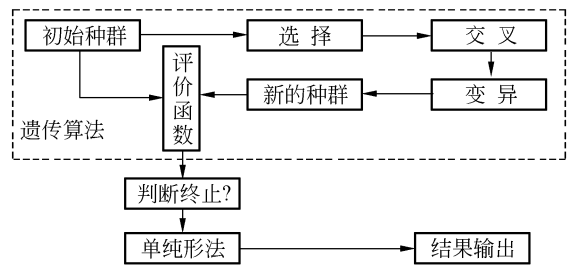


图 1 优化算法流程图

Fig. 1 Flowchart of optimal algorithm

拟合中所选用的评价函数形式如下:

$$\delta\xi = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \left(\frac{\xi_j(\lambda_i)_{\text{calc}} - \xi_j(\lambda_i)_{\text{meas}}}{\xi_j(\lambda_i)_{\text{meas}}} \right)^2, \quad (1)$$

其中, $\xi(\lambda_i)_{\text{calc}}$ 、 $\xi(\lambda_i)_{\text{meas}}$ 分别代表计算量和测量量。 N 为数据点数, M 为测量量的个数(此处为 6)。

选用 Lorentzian 和 Drude 结合的色散公式表征金属铝薄膜的色散关系,色散方程如下^[8-9]:

$$\epsilon(\lambda) = A + \frac{B\lambda^2}{1 + C^2\lambda^2} + \sum_{i=1}^J \frac{B_i\lambda^2(\lambda^2 - C_i^2)}{(\lambda^2 - C_i^2)^2 + D_i^2\lambda^2} + i \left(\frac{BC\lambda^3}{1 + C^2\lambda^2} + \sum_{i=1}^J \frac{B_i D_i \lambda^3}{(\lambda^2 - C_i^2)^2 + D_i^2\lambda^2} \right), \quad (2)$$

式中, A 为低频介电常数(接近于 1), B 、 C 正比于金属中自由电子的振子强度及等离子体频率的平方,而与电子弛豫时间成反比, B_i 、 C_i 、 D_i 分别为 J 谐振子的共振强度、共振波长和线宽,拟合中这几个参数均可以为任意值而不表征任何实际意义^[10]。

4 程序验证

多种群并行遗传算法设置如下:种群数设为 8~20,种群规模为 200~500,多种群的并行运算增加了个体的多样性,有效地防止了算法早熟,避免了算法陷于局部极值而无法得到全局最优解的局面;进化代数 100~200,迁移代数间隔为 20;选择函数采用 *stochunif* 函数;交叉概率设为 0.8;选用高斯型变异,变异概率为 0.01;选择矢量化运算以提高计算效率。

首先选用了 Palik 等报导的金属铝的光学常数对本文所采用的色散关系的有效性进行了验证,用该色散关系表征的铝光学常数曲线见图 2,二者吻合良好。色散方程中各个参数见表 1。

表 1 用色散关系表征标准铝光学常数的各个参数值

Tab.1 Dispersion parameters of standard aluminum

A	B	C	B ₁	C ₁	D ₁	B ₂	C ₂	D ₂
0.923 5	-35.407 0	1.398 9	5.769 5	-0.792 8	-0.322 0	195.366 1	2.063 6	0.463 1

为讨论优化算法的拟合精度,首先对理论值进行拟合。为了模拟实际情况(铝在空气中氧化,表面形成 2~6 nm 的氧化层^[11],氧化层对于考察波段的光学性质影响很大,另外膜间扩散和表面粗糙度影响很小,忽略不计),在理论模拟过程中建立了二层膜模型,拟合过程中表面氧化层的参数固定,只拟合铝层的光学常数。由于铝层和表面氧化层厚度很小,光谱曲线波动很小,解析过程中厚度和光学常数相关性非常大,为了消除这种相关性,选择了 3 组光谱曲线:熔石英基底上正入射透过率和反射率光谱、熔石英基底上 85°入射的椭圆偏光(角标 1)和硅基底上 85°入射的椭圆偏光(角标 2)。

首先,假设理论值为表 1 的参数值,通过它计算得到的正入射透过率、反射率曲线以及 85°入射的椭圆偏反射光谱曲线。然后,分别用遗传算法、

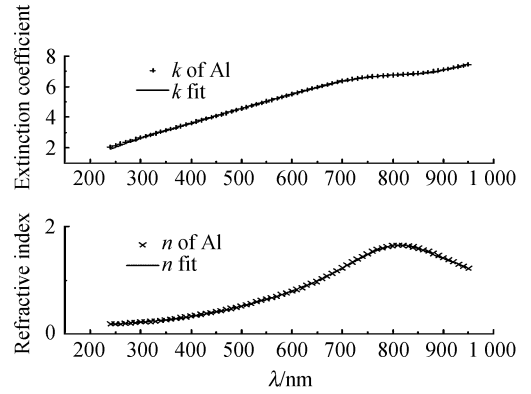


图 2 用色散关系表征标准铝光学常数

Fig. 2 Optical constants of standard aluminum characterized by dispersion relations

混合算法同时拟合这些光谱曲线,得到色散关系的拟合参数,结果如表 2 中第 3、4 行。此时,拟合的光谱曲线如图 3:混合优化算法的拟合结果和测量曲线完全吻合。从图中也可以看出,应用混合算法比只用 GA 得到的各光谱曲线更加接近理想值,与理论值可以完全吻合。

从上面讨论的不同优化算法拟合结果可以看出:用混合遗传算法可以对理论值取得很好的拟合结果。但是,实际测试数据往往存在各种各样的误差,如光谱曲线测量的随机误差和系统误差,以及基底的折射率误差,还有色散关系的模型误差。这些误差中,系统误差影响最大,误差的存在使得在拟合实际测量的光谱曲线时不能像拟合理论值一样取得几乎完全吻合的结果。这里需要讨论测试的随机误差和系统误差对拟合结果的影响。

表 2 用 GA 和混合优化算法拟合结果的比较

Tab. 2 Parameter fitting results of theory data with GA algorithm and combined optimal algorithm

	A	B	C	B ₁	C ₁	D ₁	B ₂	C ₂	D ₂	厚度	评价函数
理论值	0.923 5	-35.407 0	1.398 9	5.769 5	-0.792 8	-0.322 0	195.366 1	2.063 6	0.463 1	24	0
GA 拟合	0.879 7	-35.780 1	1.417 8	6.063 8	-0.793 0	-0.325 7	196.211 0	2.044 5	0.450 3	23.95	0.336 1
混合算法	0.923 1	-35.407 2	1.398 7	5.769 2	-0.792 8	-0.322 2	195.367 0	2.064 0	0.463 4	24.001 5	0.002 1

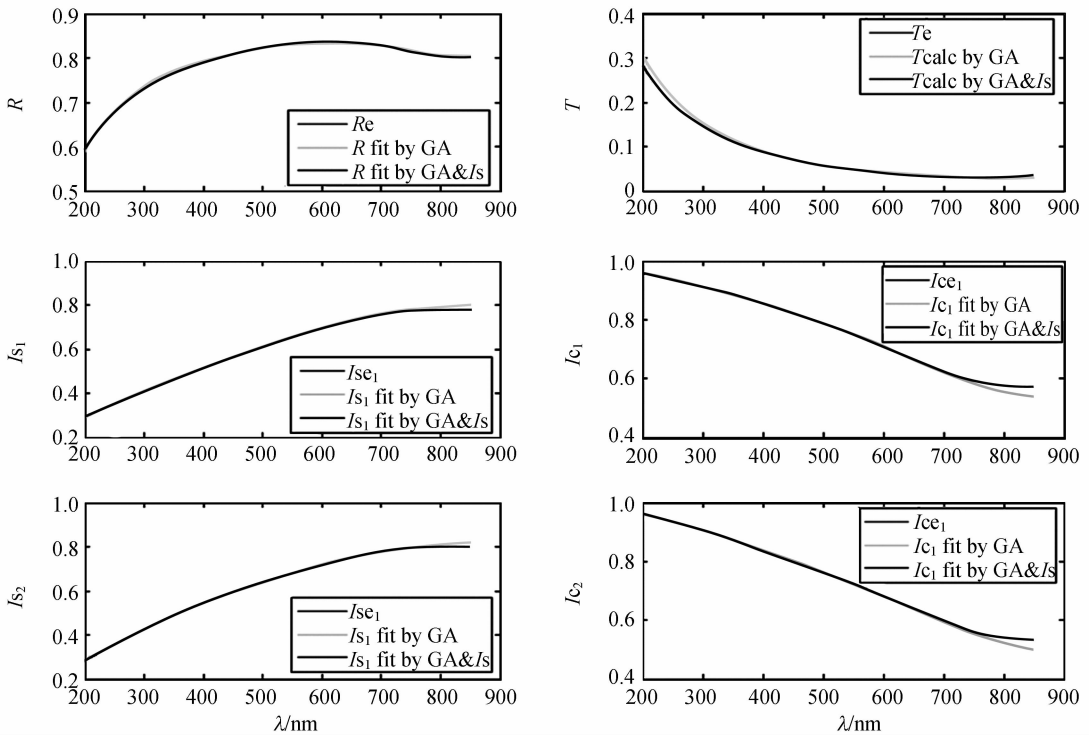


图 3 两种优化算法对理论光谱曲线拟合情况的对比

Fig. 3 Curves of theory spectra fitted by GA algorithm and combined optimal algorithm

给理论反射率、透过率、椭圆参数 I_s 、 I_c 谱线均加入标准差为 0.002 的正态分布的随机误差 (模拟实际测试中探测器的噪声水平) 作为模拟测试数据, 仅用混合优化算法拟合, 拟合结果如表 3 所示。拟合厚度为 24.033 2 nm, 和实际的厚度 24 nm 相差甚微。图 3 为拟合的谱线和理论谱线的对比: 可见随机误差对拟合结果的影响非常小,

可以忽略不计。

同样, 给理论光谱曲线加入 +0.2% 的系统误差作为模拟数据, 拟合参数如表 4 所示。拟合厚度为 23.564 3 nm, 与理论值偏差 1.8% 左右, 可见要想保证拟合的精度, 必须保证系统误差足够小。

表 3 理论光谱曲线加 0.002 标准偏差的随机误差后的拟合结果比较

Tab. 3 Parameter fitting results of theory spectra with 0.002 standard random error

	A	B	C	B_1	C_1	D_1	B_2	C_2	D_2	厚度	评价函数
理论值	0.923 5	-35.407 0	1.398 9	5.769 5	-0.792 8	-0.322 0	195.366 1	2.063 6	0.463 1	24	0
混合算法	0.909 1	-36.816 8	1.340 9	5.552 2	-0.790 9	-0.316 2	198.221 0	2.088 4	0.467 7	24.033 2	0.899 3

表 4 理论光谱曲线加 0.002 的系统误差后的拟合结果比较

Tab. 4 Parameter fitting results of theory spectra with 0.002 system error

	A	B	C	B_1	C_1	D_1	B_2	C_2	D_2	厚度	评价函数
理论值	0.923 5	-35.407 0	1.398 9	5.769 5	-0.792 8	-0.322 0	195.366 1	2.063 6	0.463 1	24	0
混合算法	0.879 3	-35.431 0	1.409 7	6.154 9	-0.797 6	-0.333 2	197.815 4	2.058 7	0.573 5	23.564 3	0.971 7

5 实验结果

利用上面的方法拟合了实际膜层的实测光谱曲线,拟合曲线比较如图 4,光谱曲线吻合良好,曲线绝对偏差小于 0.5%。

实验中采用的 lambda950 分光光度计的系统误差能够保证在 0.05% 量级,椭偏仪测试误差 Psi 和 Delta 分别 < 0.02° 和 < 0.01°, 各测量量的

系统误差均远远小于理论模拟加入的 0.2% 的误差值。通过前面的误差分析,实验数据的拟合精度能够控制在 2% 以内。拟合得到膜层厚度为 23.18 nm,折射率曲线如图 5 所示。根据反演得到的铝光学常数设计了单腔滤光片,介质层光学常数见作者其他文献[12],测试结果和设计曲线对比见(图 6、图 7),二者基本吻合,峰值透过率偏差约 1%,拟合得到各参数列于表 5。

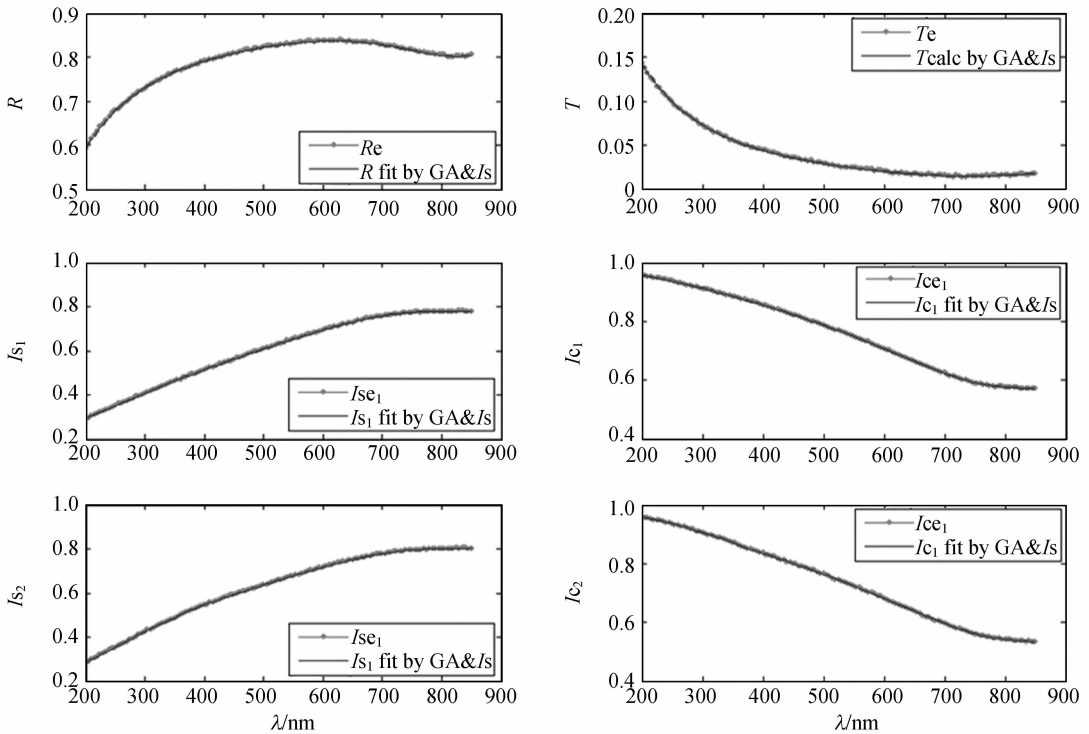


图 4 理论光谱曲线加 0.002 标准偏差的随机误差后光谱曲线拟合情况

Fig. 4 Curve fitting results of theory spectra with 0.002 standard random error by combined optimal algorithm

表 5 实际测量薄膜光谱曲线的参数拟合结果比较

Tab. 5 Parameter fitting results of tested spectra by combined optimal algorithm

A	B	C	B ₁	C ₁	D ₁	B ₂	C ₂	D ₂	Al ₂ O ₃ 厚度	铝厚度	评价函数
1.200 1	-121.544 9	0.804 3	6.943 0	-0.785 6	-0.251 8	408.329 6	3.604 3	9.716 3	5.38	23.184 3	2.171 7

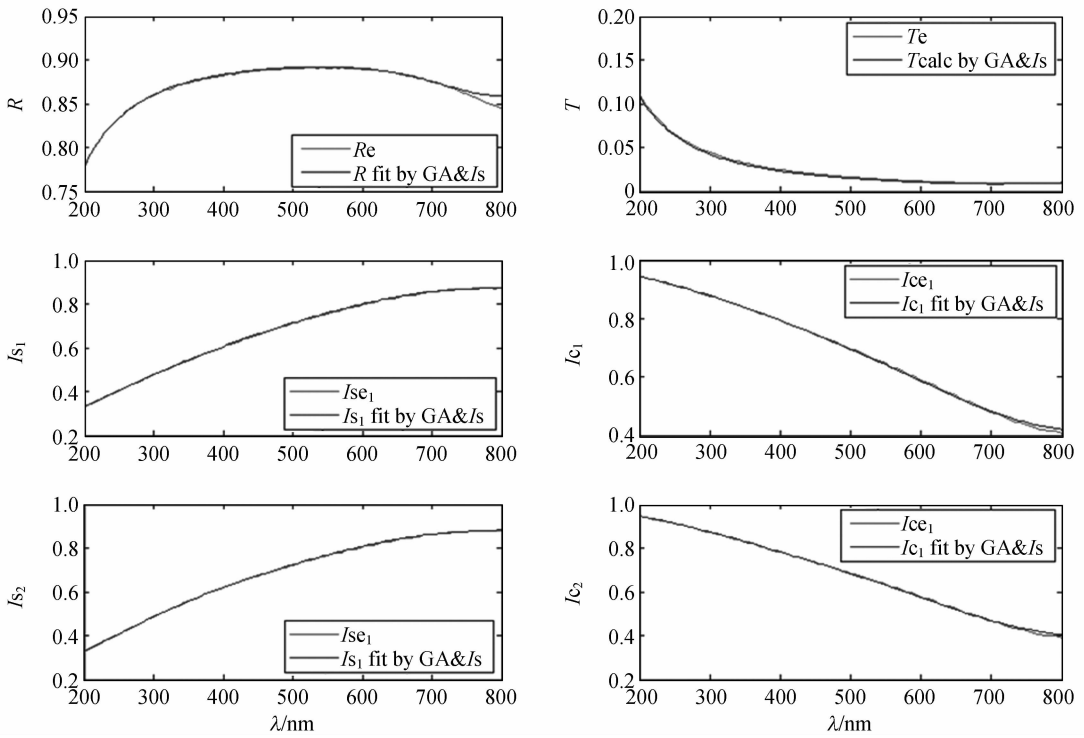


图 5 测量光谱曲线的拟合情况

Fig. 5 Curves of tested spectra fitted by combined optimal algorithm

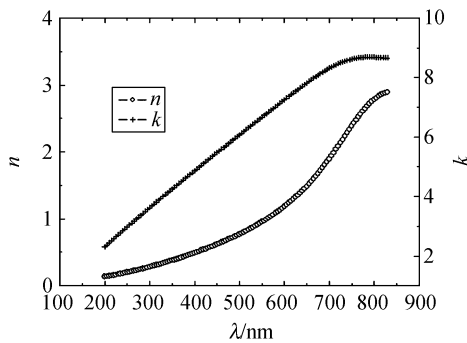


图 6 铝光学常数色散曲线

Fig. 6 Dispersion spectra of aluminum

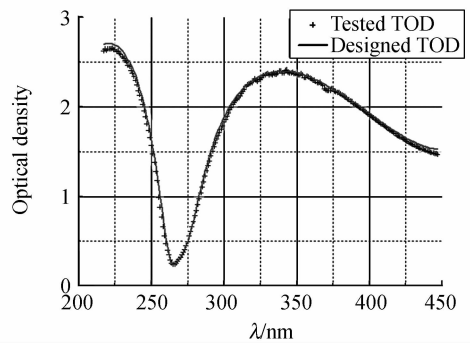


图 7 单腔滤光片设计和测试结果对比

Fig. 7 Tested optical spectra versus designed result of 1 cavity filter

6 结 论

提出了一种空气中精确测定铝的光学常数的方法,基于色散关系模型拟合确定了铝和表面

氧化层的厚度和色散关系各参数值,拟合误差 < 2%;最后根据得到的光学常数设计并沉积了单腔诱导透射滤光片,测试结果和设计曲线吻合良好,峰值透过率偏差 1%。

参考文献:

[1] 周洪军,钟鹏飞,郑津津,等.不同厚度 Al 滤片对 17~33 nm 高次谐波抑制的定量研究[J].光学精密工程,2006,14

(7):1016-1020.

ZHOU H J, ZHONG P F, ZHENG J J, *et al.*. Quantitative research on higher order harmonic suppression in 17~33 nm with different thickness Al filters [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14 (7): 1016-1020. (in Chinese)

- [2] ALEKSANDAR D R. Algorithm for the determination of intrinsic optical constants of metal films: application to aluminum [J]. *Applied Optics*, 1995, 34(22): 4755-4767.
- [3] SCHULZ L G. An interferometric method for the determination of the absorption coefficients of metals, with results for silver and aluminum [J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1951, 41(12): 1047-1050.
- [4] LARRUQUERT J I, MENDEZ J A, AZNAREZ J A. Far-ultraviolet reflectance measurements and optical constants of unoxidized aluminum films [J]. *Applied Optics*, 1995, 34(22):4892-4899.
- [5] ERIC K L, JANUSZ J, MARK N. In-situ ellipsometric measurements of thin film aluminum oxidation [J]. *SPIE*, 4099:218-227.
- [6] 陈华,叶东,陈刚,等. 遗传算法的数字图像相关搜索法[J]. 光学 精密工程,2006,14(10):1633-1638.
CHEN H, YE D, CHEN G, *et al.*. Digital image correlation search method based on genetic algorithm [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14 (10): 1633-0638. (in Chinese)
- [7] 叶东,刘长英,车仁生,等. 基于遗传算法的像机虚拟立体校准技术研究[J]. 光学 精密工程,2006,14(3):485-489.
YE D, LIU CH Y, CHE R SH, *et al.*. Dummy solid camera calibration technology using genetic algorism [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(3):485-489. (in Chinese)
- [8] DOBROWOLSKI J A, HO F C, WALDORF A. Determination of optical constants of thin film coating materials based on inverse synthesis [J]. *Applied Optics*, 1983, 22(20): 3191-3195.
- [9] VRIENS L, RIPPENS W. Optical constants of absorbing thin solid films on a substrate [J]. *Applied Optics*, 1983, 22(24):4105-4110.
- [10] NGUYEN H V, COLLINS R W. Optical functions of discontinuous aluminum films-intraband and interband contributions to particle resonance absorption [J]. *J. Opt. Soc. Am. A.*, 1993, 10(3): 515-511.
- [11] OUGHADDOU H, VIZZINI S, AUFRAY B, *et al.*. Growth and oxidation of aluminum thin films deposited on Ag (1 1 1) [J]. *Appl. Surf. Sci.*, 2006, 252:4167-4170.
- [12] JIN W H, JIN CH SH, ZHU H L, *et al.*. The determination of optical constants of zirconia and silica thin films in the UV to visible range [J]. *SPIE*, 2007, 6722:67220T- 67226T.

作者简介:金伟华(1977—),男,博士研究生,主要从事紫外光学薄膜研究。E-mail:jin. weihua@yahoo. com. cn

导师简介:金春水(1964—),男,研究员,博士生导师,主要研究方向为紫外及软 X 射线光学。E-mail:jincs@sklao. ac. cn