بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

یک روش دقیق برای تعیین ثابت‌های اپتیکی فیلم نازک اکسید هافنیوم در ناحیه مادون قرمزنزدیک

سمانه فلاحت پور[۱]، عباس بهجت[۱] و مهدی مردیها[۲]

[۱] گروه اتمی ملکولی، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

[۲] بخش فوتونیک، شرکت صنایع الکترواپتیک صاایران، اصفهان

چکیده – روش‌های متعددی برای تعیین پارامترهای اپتیکی لایه‌های نازک وجود دارد که از جمله می‌توان به روش‌های بهینه‌سازی اشاره کرد. ابتدا یک لایه‌نشانی عملی متشکل از لایه نازک اکسید هافنیوم(HfO_2) روی بستره ژرمانیوم بروش تبخیر حرارتی در خلأ انجام شد. سپس طیف تراگسیل نمونه در ناحیه مادون قرمز اندازه‌گیری شد. پس از مطالعات دقیق و مفصل، یک برنامه کامپیوتری در *MATLAB* برای روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک(*GA*) نوشتیم و نتایج آن‌را توسط داده‌های دقیق حاصل از نرم‌افزار *Essential Macleod* امتحان کردیم. با استفاده از این روش، ضرایب سلمایرلایه بهینه شدند و بدنبال آن توانستیم ضرایب شکست و خاموشی نمونه را با دقت خوبی در ناحیه مادون قرمز استخراج کنیم. با مقایسه این نتایج و مقادیرحاصل از کار محققان قبلی دریافتیم که الگوریتم ژنتیک یک روش نسبتاً دقیق برای تعیین پارامترهای لایه نازک می‌باشد.

کلید واژه- الگوریتم ژنتیک، ضریب خاموشی، ضریب شکست، لایه نازک

An exact method for determination of optical constants of HfO_2 thin film in the near-infrared region

Samaneh Falahatpour [1], Abbas Behjat[1] and Mehdi Mardiha [2]

[1]Department of Physics, yazd University
[2]SAIRAN electro-optics Industry, Isfahan

Abstract- There are various methods for determination of optical parameters of thin films. One of these methods is optimization method. First we practically deposited a HfO_2 thin film onto Ge Substrate by vacuum evaporation technique; and transmittance spectra was measured in the infrared region. After the exact studies, a computer program written in MATLAB for Genetic Algorithm(GA) optimization method and its results test with exact values from Essential Macleod software . By using this method, the thin film sellmeier coefficient were optimized and subsequently we could extract optical constants(refractive index and extinction coefficient) of sample with good accuracy in the NIR region. Comparision data of this method with past researchs gave rise this result: the GA is an almost exact method for determination of thin films optical parameters.

Keywords: genetic algorithm, extinction coefficient, refractive index, thin film

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-07]

۱-مقدمه

به منظور طراحی و تولید ابزار و سامانه‌های اپتیکی نظیر فیلترهای تداخلی، سلول‌های خورشیدی و... در دست داشتن پارامترهای اپتیکی لایه‌های نازک بالاخص ضریب شکست و ضریب خاموشی با دقت بالا بسیار حائز اهمیت است[۱]. تاکنون روش‌های متعددی برای تعیین ضرایب فوق از سوی محققان گزارش شده است که می‌توان آنها را به سه گروه: ۱-روش(R,T)، ۲-استفاده از اندازه‌گیری‌های مجازی، ۳-استفاده از روش‌های بهینه‌سازی است[۲]. بهینه‌سازی علمی است برای یافتن بهترین پاسخ مسئله‌ای که بصورت ریاضی تعریف شده است. در این علم تابع معیار بهینگی و قیدهای موجود در مسئله مطالعه میگردد. مسائل بهینه‌سازی به دو دسته مقید و نامقید تقسیم می‌شوند[۳و۴].

الگوریتم ژنتیک (GA) یک روش بهینه‌سازی مقید است[۵و۶]که در سال ۱۹۷۰ توسط جان هلند ارائه شد. اساس این الگوریتم، نظریه تکاملی داروین(۱۸۵۹) است که بر طبق آن گونه‌های دارای خصوصیات نامطلوب به تدریج از بین می‌روند[۷و۸].

امروزه در کشورمان، استفاده از این روش در بسیاری از علوم گسترش یافته اما تاکنون در علم فیزیک چندان مورد استفاده قرار نگرفته است.

۲- الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک(Genetic Algorithm:GA)

یک تکنیک برنامه‌نویسی است که از تکامل ژنتیکی و فرایندهای زیست‌شناسی مانند وراثت و جهش به عنوان یک الگوی حل مسئله استفاده می‌کند.

قبل از تشریح این روش، اصطلاحات الگوریتم ژنتیک را معرفی می‌کنیم. عدد باینری زیر را درنظر بگیرید:

۱۰۱۰۰۰۱۱۰

به هر بیت از عدد بالا یک ژن و به زنجیره ژن‌ها، کروموزوم گفته می‌شود. از مجموعه چند کروموزوم یک نسل خواهیم داشت است.

می‌توان الگوریتم ژنتیک را در گام‌های زیر خلاصه کرد:

الف) معرفی جوابهای مسئله بعنوان کروموزوم

ب) معرفی تابع هدف

ج) جمع‌آوری اولین نسل

د) اعمال عملگرهای انتخاب و تولیدمثل

ه) تولید جمعیت جدید

و) انتخاب برترین کروموزوم (مقادیر بهینه)

۳-کار تجربی

۳-۱-آماده‌سازی نمونه

ماده اولیه اکسید هافنیوم(HfO_2) با درصد خلوص بالا تهیه شد. زیرلایه از جنس ژرمانیوم(Ge) را با استون و الکل در اتاق تمیز(clean room) شستشو داده و در کوره خشک گردید و جهت لایه‌نشانی در محفظه خلأ قرار داده شد. عملیات لایه‌نشانی به روش تبخیر حرارتی، بدلیل پایداری بیشتر، قابلیت تکرارپذیری و کنترل ضخامت و آهنگ لایه‌نشانی انجام شد. نمونه در فشار ۱*۱۰-۵mbar و در دمای ۲۸۰ $\overset{o}{c}$ با آهنگ لایه‌نشانی ۱ nm/s و در ضخامت۳۳۲/۰۳nm تهیه شد. ضخامت توسط ضخامت‌سنج کریستالی، در حین لایه‌نشانی ثبت شد. نمونه از لحاظ ظاهری بسیار شفاف و یکنواخت بوده و از چسبندگی خوبی به زیرلایه برخوردار است.

۳-۲-مشخصه‌یابی فیلم نازک و نتایج

پس از آماده شدن نمونه، طیف عبور آن توسط دستگاه طیف سنج گرفته شد که در شکل(۱) مشاهده می‌شود. همچنین طیف عبور محاسباتی را با استفاده از فرمول(۱) که برای یک لایه نازک دارای جذب نشانده شده روی بستره بدون جذب با ضریب شکست s صدق می‌کند استخراج کردیم. عبور اپتیکی برای فرود عمودی نور عبارت است از[۹]:

$$T_{calc} = \frac{Ax}{D + Cx + Bx^2} \qquad (۱)$$

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-07]

$$A = 16s(n^2 + k^2)$$

$$B = [(n-1)^2 + k^2][(n-s)^2 + k^2]$$

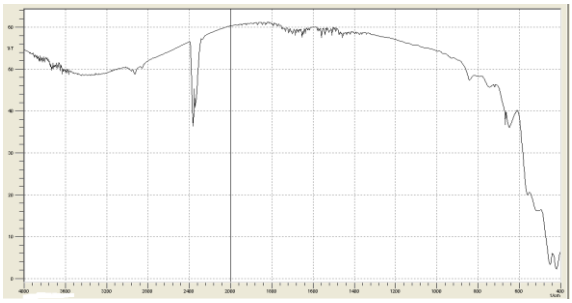
$$C = 2c_1 \cos\varphi + 2c_2 \sin\varphi$$

$$c_1 = -[(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2)] + 4k^2 s$$

$$c_2 = [2ks(n^2 - 1 + k^2)] + [2k(n^2 - s^2 + k^2)]$$

$$D = [(n+1)^2 + k^2][(n+s)^2 + k^2]$$

$$\varphi = 4\pi nd/\lambda \quad \alpha = 4\pi k/\lambda \quad x = \exp(-\alpha d)$$



شکل۱- طیف عبور لایه نازک HfO_2 روی بستره Ge

در مرحله بعد، پس از یک پروسه مطالعاتی دقیق و گسترده، طبق گام‌هایی که اشاره کردیم یک نرم‌افزار کامپیوتری برای روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک در MATLAB نوشتیم و خروجی آن را برای چندین لایه-نشانی شبیه‌سازی شده امتحان نمودیم. برای این کار طیف عبور تجربی توسط نرم‌افزار طراحی و شبیه‌سازی لایه‌های نازک Essential Macleod تولید شد. مشاهده کردیم که کد نوشته شده، ثابت‌های اپتیکی را با یک دقت قابل قبول محاسبه می‌کند. پس با اعتماد به الگوی طراحی شده، آن را برای تعیین ثابت‌های اپتیکی لایه HfO2 بکار بردیم. بدین منظور حدود مینیمم و ماکزیمم ضرایب سلمایر این لایه نازک موجود در رابطه پاشندگی سلمایر برای ضرایب شکست و خاموشی که در فرمول(۲) آمده است، تعیین شدند[۱۰]. علت استفاده از این رابطه از میان تعدد روابط پاشندگی، اعتبار آن در ناحیه مادون قرمز می‌باشد.

$$n(\lambda) = \left(A_n + \frac{B_n \lambda^2}{\lambda^2 - C_n^{\,2}}\right)^{1/2} \qquad (۲)$$

$$k(\lambda) = [n(\lambda)(B_1 + \frac{B_2}{\lambda} + \frac{B_3}{\lambda^3})]^{-1}$$

که A_n، B_n، C_n، B_1، B_2 و B_3 ضرایب سلمایر هستند.

با وارد کردن این مقادیر و پارامترهای ژنتیکی مانند تعداد نسلها، تعداد کروموزوم‌های هر نسل، احتمال پیوند و جهش و نیز درصد عبور تجربی در هر طول‌موج، مرتبه دقت و...، مقادیر بهینه ضرایب سلمایر لایه نازک فوق، توسط الگوریتم ژنتیک در هر طول‌موج استخراج می‌شود و با قرار دادن در فرمول‌های(۲) جفت بهینه ثابتهای اپتیکی(n و k) در طول‌موج متناظر تعیین می‌شود. این روند آنقدر تکرار می‌شود که پارامترهای فوق برای سیستم(HfO2/Ge) در یک گستره طول‌موجی در ناحیه مادون قرمز بدست می‌آیند. برای این مقادیر بهینه، تابع خطای مربعی فرمول(۳) کمینه می‌گردد.

$$\text{quadratic error} = \sum_{\lambda} (T_{meas}(\lambda) - T_{calc}(\lambda))^2 \qquad (۳)$$

این تابع بعنوان تابع ارزیابی استفاده می‌شود و هدف، کاهش اختلاف دو طیف عبور تجربی و تئوری است که منجر به بهبود(n و k) می‌گردد.

در جدول(۱) بخشی از نتایج خروجی برنامه و نیز تغییرات ضرایب شکست و خاموشی نمونه را در شکل(۲) مشاهده می‌نماییم.

جدول۱- ثابتهای اپتیکی فیلم نازکHfO2 با ضخامت۳۳۲/۰۳ nm بروش الگوریتم ژنتیک

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-07]

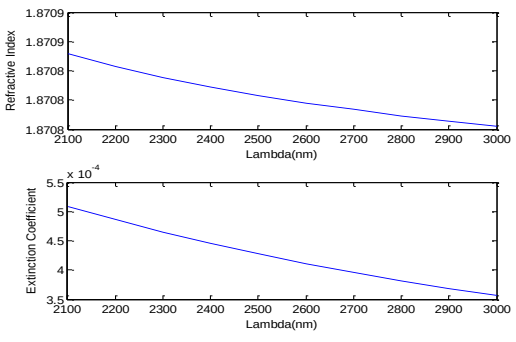
λ(nm)	n_{ga}	k_{ga}
۲۱۰۰	۱/۸۷۰۸۵۳	۰/۰۰۰۵۰۹
۲۲۰۰	۱/۸۷۰۸۵۱	۰/۰۰۰۴۸۶
۲۳۰۰	۱/۸۷۰۸۴۹	۰/۰۰۰۴۶۵
۲۴۰۰	۱/۸۷۰۸۴۷	۰/۰۰۰۴۴۵
۲۵۰۰	۱/۸۷۰۸۴۶	۰/۰۰۰۴۲۸
۲۶۰۰	۱/۸۷۰۸۴۵	۰/۰۰۰۴۱۱
۲۷۰۰	۱/۸۷۰۸۴۳	۰/۰۰۰۳۹۶
۲۸۰۰	۱/۸۷۰۸۴۲	۰/۰۰۰۳۸۲
۲۹۰۰	۱/۸۷۰۸۴۱	۰/۰۰۰۳۶۹
۳۰۰۰	۱/۸۷۰۸۴۱	۰/۰۰۰۳۵۶
quadratic error		۰/۰۲۶۱۶۶

۳-۳-بررسی میزان صحت و دقت نتایج

پس از استخراج ضرایب شکست و خاموشی نمونه، نتایج را با داده‌هایی که از کارهای محققان پیشین برروی همین نمونه بدست آمده مقایسه کردیم که جهت ملاحظه تنها به دو مورد در جدول۲ اشاره می‌کنیم.

جدول۲-نتایج تحقیقات پیشین برروی نمونه مشابه

λ(nm)	n	k
۲۱۰۰	۱/۸۸۴۴۷	۰/۰۰۶۶۸
۲۵۰۰	۱/۸۸۲۳۴	۰/۰۲۵۴۰



شکل۲- نمودار تغییرات ضرایب شکست و خاموشی نمونه

۴- نتیجه‌گیری

مقایسه نتایج دو جدول نشان می‌دهد که: اولاً با استفاده از روش بهینه‌سازی می‌توان پارامترهای اپتیکی لایه نازک را محاسبه نمود. ثانیاً مقادیر بدست آمده از روش بهینه سازی معادلات مقید و الگوریتم ژنتیک، به مقادیر دقیق بسیار نزدیک و قابل مقایسه هستند و خطای نسبی این روش از مرتبه $۱۰^{-۳}$ می‌باشد. از محاسن روش این است که مرتبه دقت پاسخهای نهایی از ابتدا توسط کاربر تعیین می‌گردد. همچنین با قرار دادن حلقه تکرار، امکان بررسی تعداد بیشتری از نقاط بهینه در فضای جواب فراهم می‌شود.

مراجع

[1]Milen R. Nenkov, Tamara G. Pencheva, Central European Journal of physics, *Determination of thin film refractive index and thickness by means of film phase thickness*, Vol. 6, No. 2, pp. 332-343, 2008.

[2] D. poelman, P. F. Smet, J. Phy, D: Appl. Phys, *Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements*, Vol36, pp 1850-1857, 2003.

[3] S. N. Sivanandam, S. N. Deepa, *Introduction to Genetic Algorithms*, Springer Berlin Heidelberg New York, 2008.

[4] D. E. Goldberg, *Optimization and Machine Learning*, Kluwer Academic Publishers, Boston, MA, 1989.

[5] Milen R. Nenkov, Tamara G. Pencheva, Central European Journal of physics, *Determination of thin film refractive index and thickness by means of film phase thickness*, Vol. 6, No. 2, pp. 332-343, 2008.

[6] L. Haupt, E. Haupt, *Practical Genetic Algorithms*, second edition, 2004.

[7] D. E. Goldberg, *The Design of Innovation: Lessons from and for Competent Genetic Algorithms*, Addison-Wesley, Reading, MA, 2002.

[8] F. Rothlauf, *Representations for Genetic and Evolutionary Algorithms*, second edition, university of Mannheim, 2006.

[9]J. C. Manifacier, J. Gasiot, J. P. Fillard, J. Phy, E: Scientific Instruments, *A simple method for the determination of the optical constants n,k and the thickness of a weakly absorbing thin film*, Vol9, pp 1002-1004, 1976.

[10]D. Palik, *Handbook of Optical constants of Solids*, Academic Press, 1998.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-07]