

泄漏波导法精确测量薄膜参数的理论和实验研究*

肖丙刚 宋军 何赛灵

(浙江大学现代光学仪器国家重点实验室,光及电磁波研究中心,光通讯交叉中心,杭州310027)

摘要 对泄漏波导法测量薄膜折射率和厚度的实验方法做了介绍,基于四层介质结构的理论模型,通过严格的电磁场理论推导出了测量方法依据的本征色散方程,并使用了Newton-Raphson方法求解复传播常数,保证了测量的精确与快捷。以等离子增强化学气相沉积法生长的SiO₂薄膜为例,对其折射率和厚度进行了测定。实验证明,本文方法与传统方法相比,不仅具有更高的测量精度,而且数据处理更加快捷,完成一片样品测试,仅花费机时60 ms。

关键词 导波光学; 泄漏波导; 色散方程; Newton-Raphson方法

中图分类号 TN256 文献标识码 A

0 引言

在硅基底上生长介质薄膜是制备平面光集成波导器件的一种常用方法^[1,2],因而准确测量单层薄膜的性能参数(折射率和厚度)就显得很重要。介质薄膜的折射率通常都小于硅的折射率,不能用一般的棱镜耦合法^[3]来测量,为此文献[4]提出了泄漏波导测量薄膜参数的技术。泄漏波导技术具有和棱镜耦合法相近的精度(小于10⁻⁴),以及测量简单快捷等优点^[3]。

文献[4]仅从射线光学推导出三层泄漏波导结构色散方程,而实际测量中,是包括了所用棱镜在内的四层结构(硅基底,待测薄膜,空气和棱镜),在不考虑其他测量误差的情况下,测量原理本身就存在着误差。另外,在泄漏波导结构中,传播常数应是复数(虚部体现了衰减),通常的测量仅以测得的传播常数的实部近似作为传播常数带入色散方程,同样存在误差。本文使用四层结构的理论模型,通过严格电磁场理论推导,得出了模型满足的本征色散方程,并给出了一种快速而又精确的求解传播常数的方法。应用推导出的本征色散方程,给出了测量单层介质薄膜光学参数的方法。并且在测量中对传播常数虚部的影响进行了修正,实验证明本文提出的方法能够精确而又快速地用于测量单层薄膜的光学参数。

1 理论分析

1.1 测量装置

实验装置如图1。在被测薄膜上面加一等腰棱镜(棱镜的折射率要大于被测薄膜的折射率),棱镜安置在测角仪平台上,光从棱镜的一侧入射,在棱镜

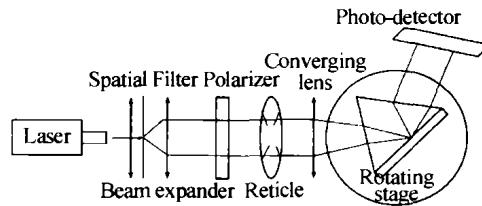


图1 实验装置

Fig. 1 Schematic diagram of the experimental setup with a prism and a leakage waveguide

的另外一侧用光电探测器来探测不同角度的出射光。如要激发泄漏波导,则入射角度必须满足下面的条件

$$k_0 n_p \sin \theta_m = \beta_m \quad (1)$$

式中 k_0 为真空中的波数, n_p 为棱镜的折射率, β_m 为泄漏波导中 m 阶模式的传播常数。泄漏波导传播常数是复数,其虚部相对于实部是很小的,因而 β_m 可以暂时近似为传播常数的实部。图2为棱镜和薄

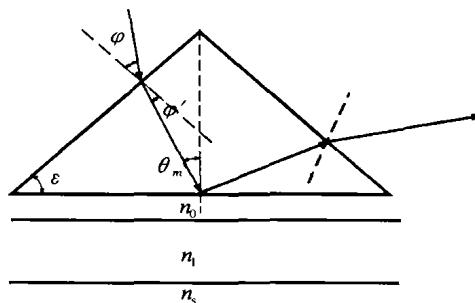


图2 棱镜与被测样品示意图

Fig. 2 A sketch of the prism and the sample to be measured膜接触部分示意图,实际测的是棱镜侧面的入射角度 φ (可正可负,图2所示情况为负),因此有

$$\frac{\theta_m}{\sin \varphi} = n_p \sin \varphi' \quad (2)$$

代入式(1)可以得到

$$\beta_m = k_0 [\sin \varphi \cos \varepsilon + (n_p^2 - \sin^2 \varphi)^{1/2} \sin \varepsilon] \quad (3)$$

当某些入射角能够激发泄漏模时,探测到的出射光强有非常明显的下降。通过测量出射光的光强随入射角度变化的曲线,可以测出能激发泄漏模式的入射角,利用式(3)可求出对应等效折射率 $N_{\text{eff}} =$

*国家自然科学基金项目(60377022)资助

Tel:0571-87951688 Email:bxiao@coer.zju.edu.cn

收稿日期:2004-02-24

β_m/k_0 , 再利用泄漏波导的本征色散方程, 就可以求出待测薄膜厚度和折射率。测量要求薄膜的厚度要能提供两个或者两个以上的模式, 薄膜和棱镜之间要保证良好的接触。

1.2 泄漏波导(单层膜)的色散方程

泄漏波导法测量单层膜光学参数简化模型如图3, 从严格电磁场理论可以推导出该四层结构的本征色散方程如下^[5,6]

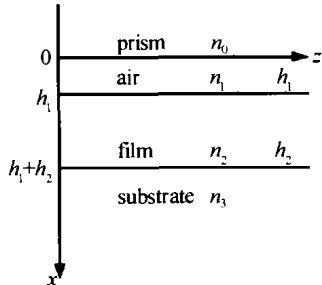


图3 泄漏波导简化模型图

Fig. 3 The leakage structure containing the film to be measured

TE模式

$$A \left[\left(1 + \frac{\alpha_0}{\alpha_3} \right) \cos(\alpha_2 h_2) + i \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3^2} + \frac{\alpha_0}{\alpha_2} \right) \cdot \sin(\alpha_2 h_2) \right] + B \left[\left(\frac{\alpha_2 \alpha_0}{\alpha_1 \alpha_3} + \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right) \sin(\alpha_2 h_2) + i \left(\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\alpha_1}{\alpha_3} \right) \cos(\alpha_2 h_2) \right] = 0 \quad (4)$$

其中

$$\alpha_s = \begin{cases} \sqrt{k_0 n_s^2 - \beta^2} & (s = 0, 2, 3) \\ \sqrt{\beta^2 - k_0 n_s^2} & (s = 1) \end{cases} \quad (5)$$

$$A = \cosh(\alpha_1 h_1), B = \sinh(\alpha_1 h_1) \quad (6)$$

这里 β 是 z 方向的传播常数, $k_0 = 2\pi/\lambda$ 是真空中的波数。式(4)是一个关于传播常数 β 的复数超越方程, 需要在复平面上求解, 比较复杂。为了方便求解出 β , 这里给出了一个比较简便的方法。

首先解出 β 的实数解, 通过解下面的实数方程(式(4)的近似)

$$A \left(1 + \frac{\alpha_0}{\alpha_3} \right) \cos(\alpha_2 h_2) + B \left(\frac{\alpha_2 \alpha_0}{\alpha_1 \alpha_3} + \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right) \cdot \sin(\alpha_2 h_2) = 0 \quad (7)$$

式(7)可利用二分法快速求解。得到实数解 β_0 之后, 式(4)的复数解可以用下面的 Newton-Raphson 迭代方法得到

$$\beta_{k+1} = \beta_k - [f(\beta_k)/f'(\beta_k)] \quad (8)$$

这里 $f(\beta_k)$ 为式(4)左边的函数, $f'(\beta_k)$ 为 $f(\beta_k)$ 的一阶导数。 β 的虚部相对于实部非常小, β_0 接近于其实部, 所以通过上面的迭代方法可以很快的解出 β 。

类似于 TE 模, 可以得到上述系统的 TM 模式的色散方程

$$A \left[\left(1 + \frac{\alpha_0 n_3^2}{n_0^2} \right) \cos(\alpha_2 h_2) + i \left(\frac{n_3^2 \alpha_2}{n_0^2 \alpha_3} + \frac{\alpha_0 n_2^2}{\alpha_2 n_0^2} \right) \cdot \sin(\alpha_2 h_2) \right] + B \left[\left(\frac{n_2^2 \alpha_1}{n_1^2 \alpha_2} - \frac{n_3^2 n_1^2 \alpha_2 \alpha_0}{n_0^2 n_2^2 \alpha_1 \alpha_3} \right) \sin(\alpha_2 h_2) + i \left(\frac{n_1^2 \alpha_0}{n_0^2 \alpha_1} - \frac{n_3^2 \alpha_1}{n_0^2} \right) \cos(\alpha_2 h_2) \right] = 0 \quad (9)$$

其中

$$A = \cosh(\alpha_1 h_1), B = \sinh(\alpha_1 h_1) \quad (10)$$

1.3 理论模型的正确性验证

以往对单层薄膜参数的测定, 大都选用了文献[4]提供的理论模型, 在测定过程中, 只考虑了空气、薄膜、硅基底的三层介质结构。而前面推导的式(4), 则是考虑了棱镜存在前提下, 利用电磁波理论严格推导得出。并且在本文的本征方程求解当中, 可以求出与实际情况相符的复数传播常数, 因此更加精确。

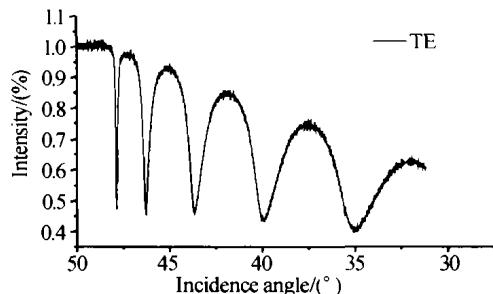


图4 测量光强变化曲线图

Fig. 4 Intensity of the detected light as the incidence angle θ_m increases

对一块折射率和厚度均已知的标准薄膜, 采用图1所示的实验装置测定出其光强随入射角度变化的关系曲线, 如图4。图中每处光强峰值下降, 均对应为薄膜中的一个泄漏模式。

实验中使用的标准薄膜是一块以等离子增强化学气相沉积法方法在硅基底上生长的 SiO_2 薄膜, 其折射率和厚度分别为 1.45 和 3.91 μm 。实验选用波长为 1547 nm 的入射光, 所用棱镜和硅基底的折射率分别为 1.9349 和 3.4, 棱镜的底角为 49.54°。近似取空气层厚度为 0.3 μm 。另外, 由于实验中使用入射光为 TE 偏振, 因此以下分析没有特别指明都以 TE 偏振为例, TM 偏振情况分析完全类似。

使用已知的薄膜参数, 基于前面推导的本征色散方程计算薄膜各模式对应下的有效折射率, 并与前面实验实测结果相比较, 如图5。从图中可以看到, 使用现在的色散方程, 其计算结果与实际非常吻合。使用式时, 由于计算出来的传播常数是复数, 这里只取其实部即可。图6则给出了分别基于本征色散方程和文献[4]给出的色散方程计算得到的有效折射率与实际测量之间的相对误差, 容易看到, 使用

通常的如文献[4]给出的色散方程会与实际值存在较大偏差。而使用本文方法得到的结果，则与实际相当接近，说明现在的理论模型及本征方程求解方法更加精确。另外，由于高阶模可能存在较大的测量误差，因此在实际测量过程中，取低阶模更为合理。

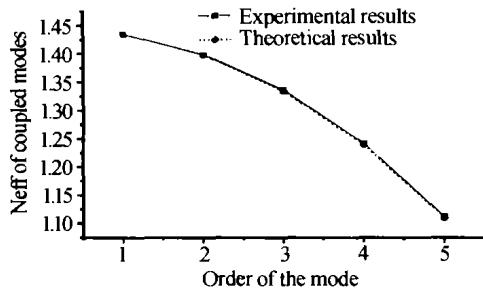


图5 理论计算与实验结果比较

Fig. 5 Comparison of the results obtained theoretically and experimentally

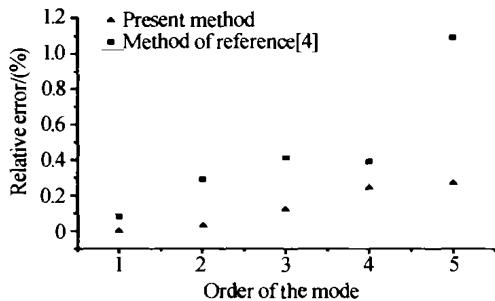


图6 不同理论计算与测量结果的相对误差比较

Fig. 6 Relative error in measuring the effective refractive index

1.4 单层薄膜折射率和厚度的测量

对一块未知参数的薄膜确定其光学参数可以按如下步骤：

步骤(1)：外推法求解折射率：在测出两个或者两个以上的耦合模式之后（如果模式很多，主要选取低阶模，以保证小的测量误差），利用外推法^[7]计算出待测薄膜的折射率。计算过程如下：将测得的泄漏波导各模式的有效折射率 N_{eff}^2 和模式的阶数 m^2 ，利用最小二乘法进行拟合，可以得到一条直线，将直线延长到零点，直线在 N_{eff}^2 轴上的截距就是待测薄膜折射率 n 的平方。

步骤(2)：求解薄膜厚度：薄膜折射率 n 求出以后，代入泄漏波导的色散式(4)，可以得到关于待测薄膜厚度 h 的方程

$$\begin{aligned} A \left[\left(1 + \frac{\alpha_0}{\alpha_3} \right) \cos (\alpha_2 h) + i \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_3} + \frac{\alpha_0}{\alpha_2} \right) \sin (\alpha_2 h) \right] + B \\ \left[\left(\frac{\alpha_2 \alpha_0}{\alpha_1 \alpha_3} + \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right) \sin (\alpha_2 h) + i \left(\frac{\alpha_0}{\alpha_1} - \frac{\alpha_1}{\alpha_3} \right) \cos (\alpha_2 h) \right] = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

式(11)是关于 h 的复数方程，同样采用 Newton-Raphson 迭代法求解 h 。

Newton-Raphson 法的初值可由下面方程（即式(13)的实部）给出

$$A \left(1 + \frac{\alpha_0}{\alpha_3} \right) \cos (\alpha_2 h) + B \left(\frac{\alpha_2 \alpha_0}{\alpha_1 \alpha_3} + \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right) \sin (\alpha_2 h) = 0 \quad (12)$$

(注：这里的 A, B, α_s ($s = 0, 1, 2, 3$) 意义同上。) 得到初值之后，式(11)的解由下面的 Newton-Raphson 迭代法给出

$$h_{k+1} = h_k - \frac{g(h_k)}{g'(h_k)}$$

$g(h_k)$ 为式(11)左边的函数， $g'(h_k)$ 为 $g(h_k)$ 的一阶导数。

步骤(3)：考虑传播常数虚部，对计算结果进行修正：将得到的薄膜厚度代入式(4)，使用 1.2 节提供的方法可以得到不同阶数泄漏模的传播常数的复数解 β' ，并以该 β' 替换测量得到的相应阶数的实数解 β ，重复步骤(2)的计算，可以得到薄膜厚度 h 更为精确的解。如此反复迭代计算，直到满足要求的精度。

2 理论模型用于未知参数薄膜的实验测量

以一块利用等离子增强化学气相沉积法在硅基底上生长的参数未知的 SiO_2 薄膜为例，采用图 1 所示实验装置进行测定，可以测得类似于图 4 所示的曲线，即可以知道各不同泄漏模对应的人射角。这时，利用前面 1.4 节提到的方法，可以求得薄膜的折射率和厚度。其中外推法求解折射率的过程如图 7 所示，最终求得折射率为 1.4467 ± 0.0001 。全部测量和计算结果如表 1。实验中对薄膜光学参数的求取过程仅花费了 60 ms（在一台 PIII 1GHz 的个人计算机上）。

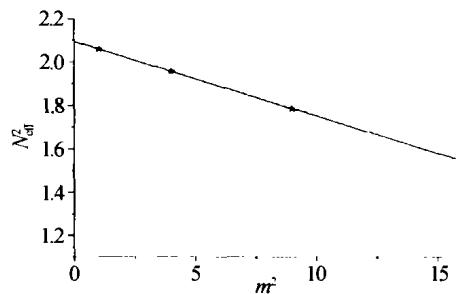


图7 外推法求解折射率

Fig. 7 The linear extrapolation of the refractive indices for different modes of the thin film

表1 二氧化硅薄膜的实验测量结果

耦合的泄漏模式阶数	1	2	3	4
测量的入射角度 φ (度)	-3.2400	-6.2850	-11.3850	-18.690
角度 θ_m (度)	47.8647	46.2946	43.6812	40.0032
测量的有效折射率	1.4348	1.3987	1.3363	1.2438
计算的薄膜厚度/ μm	3.9259	3.9487	0.9528	3.9554
标准方差/ μm			0.0116	

3 结论

对泄漏波导法测量薄膜折射率和厚度的实验原理作了介绍,基于四层介质模型,通过严格的电磁场理论,推导出了测量装置所满足的本征色散方程,并采用 Newton-Raphson 方法求解复传播常数,提高了理论计算与实测的效率。理论计算与实验结果相当吻合,同时指出高阶模相对低阶模可能存在更大的相对误差,测量应尽可能的选用低阶模。最后给出了对未知薄膜的厚度和折射率进行测定的详细方法,测量中特别考虑到了泄漏波导传播常数是复数这一特性,对结果进行了修正,进一步减小了测量误差。

参考文献

- 1 文泓桥,何赛灵,盛钟延,等.两点法设计平场型EDG波分复用器件.光子学报,2003,32(3):307~310
Wen H Q, He S L, Sheng Z Y, et al. *Acta Photonica Sinica*, 2003, 32(3): 307 ~ 310
- 2 徐静,戴道锌,何赛灵.基于PML边界的有限差分法及其在光波导泄漏损耗计算中的应用.光子学报,2003,32

(12):1426~1429

Xu J, Dai D X, He S L. *Acta Photonica Sinica*, 2003, 32

(12):1426~1429

- 3 Ulrich R, Torge R. Measurement of thin film parameters with a prism coupler. *Applied Optics*, 1973, 12(12): 2901~2908
- 4 吴启宏.利用泄漏波导测量低折射率薄膜的折射率和厚度.光学学报;1987,7(9):838~843
Wu Q H. *Acta Optica Sinica*, 1987, 7(9) : 838 ~ 843
- 5 Lu J, He S L, Romanov V G. Study of the leakage loss in a silica-on-silicon slab waveguide. *Fiber Integrated Opt*, 2003, 22(4): 249 ~ 261
- 6 陈方荣,刘书哲,何赛灵.基于插值的全矢量有限差分法求解阶跃光波导本征模式.光子学报,2003,32(7):777~781
Chen F R, Liu S Z, He S L. *Acta Photonica Sinica*, 2003, 32(7): 777 ~ 781
- 7 Lee J, Henry C H, Orlowsky K J, et al. Kometani Refractive-index dispersion of phosphosilicate glass, thermal oxide, and silicon nitride films. *Appl Opt*, 1988 , 27(19) : 4104 ~ 4107

Theoretical and Experimental Analysis for Measuring the Refractive Index and Thickness of a Film in a Leakage Waveguide

Xiao Binggang, Song Jun ,He Sailing

*State Key Laboratory for Modern Optical Instrumentation, Joint Laboratory of Optical Communications of Zhejiang University,
Center for Optical and Electromagnetic Research, Zhejiang University, Hangzhou 310027*

Received date:2004-02-24

Abstract An accurate method for measuring the refractive index and thickness of a dielectric film in a leakage waveguide is presented in details. The dispersion equation of a four-layers structure is derived. The complex propagation constant is determined with the Newton-Raphson numerical method. With the dispersion equation derived above, the method for measuring the optical parameters of the single-layer is presented. As an example, the refractive index and thickness of the single-layer silica film deposited with Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition are determined by the present method. The result shows that the present method is accurate and fast compared with the traditional method . To determine the parameters of a sample, a personal computer only spends 60ms using the present method.

Keywords Guided-wave optics;Leakage waveguide; Dispersion equation;Newton-Raphson method



Xiao Binggang was born in 1979 and graduated from Department of Optical Engineering, Zhejiang University in 2001. Currently he is a Ph. D student at Center for Optical and Electromagnetic Research, Zhejiang University. His main interests are in theoretical characterization and experimental measurements of surface roughness induced scattering losses of submicron-width optical waveguides.