

文章编号: 1001-3806(2005)02-0165-04

## 透射光谱法测光栅参数的可行性

张丽娟,傅克祥\*,麻健勇,谢金,李建龙  
(四川大学 物理系,成都 610064)

**摘要:** 利用透射光谱,结合正单纯形法来反演折射率调制光栅参数,首先利用光栅衍射傅里叶模式理论及 RTCM 算法得出在 200nm~900nm 波长范围内的透射光谱曲线,从上取 5 个点,作为理论计算值;其次,在上述曲线上加入偏差不同的高斯噪声,以模拟透射光谱的测量曲线,再从每条曲线上各取 5 个对应点,获取模拟测量值;然后,假定光栅参数的初始值,代入评价函数,用正单纯形法不断进行迭代反演,得到光栅参数的计算模拟结果。此方法简单、快速、精确。

**关键词:** 透射光谱;正单纯形法;折射率型光栅;高斯噪声

**中图分类号:** TN253 **文献标识码:** A

### The feasibility of measuring grating parameters with the transmission spectrum method

ZHANG Li-juan, FU Ke-xiang, MA Jian-yong, XIE Jin, LI Jian-long  
(Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

**Abstract:** A new method, transmission spectrum method combined the normal simplex algorithm, is proposed to measure the grating parameters. Firstly, the transmission spectrum of the range from 200nm~900nm is obtained according to a certain grating model with the Fourier model method and reflection and transmission coefficient matrix method (RTCM), based on which the Gaussian noises with different standard deviations are added to it to get the simulated measuring value of transmission spectrum, then five points are gotten respectively from the transmission spectrum with or without Gaussian noises. Secondly, the original supposed value of grating parameters is brought to the estimating function. Through repeatedly computing with the normal simplex algorithm, the grating parameters are obtained.

**Key words:** transmission spectrum method; normal simplex algorithm; grating model with the modulation of refractive index; Gaussian noise

## 引 言

目前有很多方法可以测光栅参数,大体可以分为直接测量法与间接测量法。直接测量法所用的仪器有分光计<sup>[1]</sup>、原子力显微镜 (AFM)<sup>[2]</sup>等等。间接法就是先测一些与光栅参数有关的量,然后通过数值计算进行反演,得到所需的光栅参数。间接测量法具有成本低、无损伤性、无扰动性等优点。现在已经提出了椭偏法<sup>[3]</sup>等间接测量法。由于椭偏测量法主要应用在薄膜测量中,在测光栅参数时,有其局限性。作者采用透射光谱法来反演光栅参数,因透射系数的测量值稳定,测量数据精确。现在已有很多优化算法可用来反演光栅参数,例如全局优化算法,局部优化算法等。相对来讲,全局优化算法适用范围比较广,但速度比较慢。在这里,由于透射系数随光栅参数的变化稳定,且

是单极值,本文中采用局部优化算法中的正单纯形算法<sup>[4]</sup>来反演,其优点是简单快速。

## 1 理论分析

以折射率型光栅 (见图 1)为例进行讨论。图 1 中  $n_1$ ,  $n$ ,  $n_2$  分别为空气层,光栅层,基底层折射率,光栅层厚度为  $h$ ,空气层与基底层厚度均为无穷大。光栅层的折射率  $n = n_0 + n' \sin(2\pi x/T)$ ,沿  $x$  方向呈正弦形分布,如图 1b 所示。

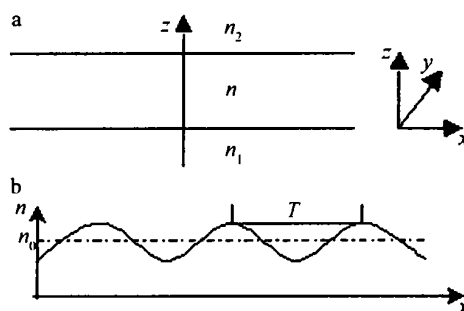


Fig 1 The sketch map for a grating model with the modulation of refractive index

作者简介:张丽娟(1978-),女,硕士研究生,主要从事光电信号处理方面的研究。

\* 通讯联系人。E-mail: fukexiang168@sina.com

收稿日期:2004-02-16;收到修改稿日期:2004-04-15

### 1.1 透射系数的求解(以s波为例)

设  $x$ 轴垂直于光栅槽沟方向,  $y$ 轴平行于槽沟方向,  $z$ 轴垂直于光栅平面。波长为  $\lambda$  的单位平面波从空气中沿  $z$ 轴正方向垂直入射, 设空气中的反射波(为下行波)、光栅层中的上行波与下行波, 以及基底层中的透射波(为上行波)均为基本模式场的线性叠加, 振幅系数为  $d^1, u^2, d^2, u^3$ , 它们均为列阵(上标代表层号, 以下相同), 各层中的基本模式场用傅里叶模表示, 其系数构成矩阵  $e_y^1, e_y^2, e_y^3$ 。则各层中的电场如下:

$$\begin{cases} \vec{E}_{in} = \hat{y} \exp(ik_0 z) \\ \vec{E}_r = \hat{y} e_y^1 \exp[ik_0(\alpha x - \gamma^1 z)] d^1 \\ \vec{E}_{up} = \hat{y} e_y^2 \exp\{ik_0[\alpha x + \gamma^2(z-h)]\} u^2 \\ \vec{E}_d = \hat{y} e_y^2 \exp\{ik_0[\alpha x - \gamma^2(z-h)]\} d^2 \\ \vec{E}_t = \hat{y} e_y^3 \exp\{ik_0[\alpha x + \gamma^3(z-h)]\} u^3 \end{cases} \quad (1)$$

同理, 可以用与(1)式相似的形式表示磁场, 不同的是磁场只具有  $x$ 分量。 $\alpha, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$  是对角阵, 本征矩阵  $e_y^1, e_y^2, e_y^3$  为方阵。 $\alpha_m = (\lambda/T)m, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$   $M \dots$  ( $m$ 代表傅里叶模编号),  $\gamma^l (l = 1, 2, 3)$  为待求参量。则:

$$\vec{E}^1 = \vec{E}_{in} + \vec{E}_r, \vec{E}^2 = \vec{E}_{up} + \vec{E}_d, \vec{E}^3 = \vec{E}_t \quad (2)$$

把(2)式代入麦克斯维方程, 并用逆规则<sup>[5]</sup>傅里叶展开法展开得本征矩阵方程:

$$(\epsilon^l - \alpha\alpha) e_y^l = e_y^l (\gamma^l)^2, h_x^l = e_y^l \gamma^l \quad (3)$$

在空气层与基底层,  $\epsilon^l (l = 1, 3)$  为对角阵, 对角线上的值即为相应层的介电常数, 而光栅层中的  $\epsilon^2$  的求解可见(4)式。由于各层都是无磁性介质, 有  $\mu = 1$ , 介电常数为对应层的折射率的平方。

在光栅层中:

$$(\epsilon^2)_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T f(x) \exp\left[-i \frac{2\pi}{T} (m-n)x\right] dx$$

$$m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm M \dots \quad (4)$$

式中,  $T$  为光栅周期,  $\epsilon(x) = n^2 = [n_0 + n' \sin(2\pi x/T)]^2$ 。数值解本征值方程(3)式, 得本征值  $\gamma^2$  和本征矢  $e_y^2, h_x^2$ 。

在空气层和基底层中, 可直接得解析解:

$$\begin{cases} e_y^1 = I, \gamma_m^1 = \pm \sqrt{1 - \alpha_m^2}, h_x^1 = \gamma^1 I \\ e_y^3 = I, \gamma_m^3 = \pm \sqrt{(n_2)^2 - \alpha_m^2}, h_x^3 = \gamma^3 I \end{cases} \quad (5)$$

式中,  $I$  为单位矩阵, 这样就确定了各层基本模式场的本征值和本征矢。把(2)式代入电磁场的切向分量在水平界面上的连续条件  $E_y^l = E_y^{l+1} (l = 1, 2), H_x^l = H_x^{l+1} (l = 1, 2)$ , 得矩阵方程:

$$\begin{aligned} e_y^1 (u^1 + d^1) &= e_y^2 [\exp(-ik_0 \gamma^2 h) u^2 + \exp(ik_0 \gamma^2 h) d^2] \\ h_x^1 (u^2 - d^2) &= h_x^2 [\exp(-ik_0 \gamma^2 h) u^2 - \exp(ik_0 \gamma^2 h) d^2] \end{aligned}$$

$$e_y^2 (u^2 + d^2) = e_y^3 u^3, h_x^2 (u^2 - d^2) = h_x^3 u^3 \quad (6)$$

实际上, 因入射波为单位波, 有  $e_y^1 = I, u^1 = [1, 0, 0, \dots]$ 。采用 RTCM 递推算法<sup>[6]</sup>解方程组(6)式, 可得基本模式场的振幅系数  $d^1, u^2, d^2, u^3$ 。定义第  $m$  级次的透射系数为  $\eta_m$ , 表示透射波能流  $z$  分量的平均值  $\bar{S}_{zm}^3$  与入射波能流  $z$  分量的平均值  $\bar{S}_{z0}^1$  之比, 即:

$$\eta_m = \bar{S}_{zm}^3 / \bar{S}_{z0}^1 = |u^3|_m|^2 \text{Re}(\gamma_m^3) \quad (7)$$

当  $m = 1$  时, 对应第 1 级透射系数。如果波长在一定范围内连续变化, 可以得到第 1 级透射光谱曲线, 本文中利用第 1 级透射光谱进行反演。

### 1.2 正单纯形法

经常碰到最优化问题, 具体可以用这样的数学模型来描述: “在给定的约束条件下, 找出一个决策变量的值, 使得被称为目标函数的表达愿望尺度的函数达到最小或最大值”, 而目标函数为一次函数, 约束条件为一次等式或不等式时所反映的问题称为线性最优化问题。可用标准形来表示:

$$\begin{aligned} \text{目标函数: } & c^T x \rightarrow \text{最小} \\ \text{约束条件: } & Ax = b, x \geq b \end{aligned} \quad (8)$$

变量  $x$  为  $n$  维实列向量,  $A$  为  $m \times n$  常数矩阵,  $b$  和  $c$  分别为  $m$  维及  $n$  维常数向量,  $T$  为转置记号。并且假定变量的个数  $n$  比约束条件个数  $m$  大。把向量  $x$  的  $n$  个分量  $x_j (j = 1, 2, \dots, n)$  分成  $m$  个和  $(n - m)$  个两组, 并以适当顺序排列后分别记为  $x_B, x_N$ 。对应向量  $x$  的分组, 矩阵  $A$  也可分为  $m \times m$  和  $m \times (n - m)$  矩阵, 分别记为  $B$  和  $N$ 。则  $x = [x_B, x_N], A = [B, N]$ , 则标准形中的约束条件可进一步写为:

$$B x_B + N x_N = b \quad (9)$$

如果  $B$  为非奇异矩阵, 通过令  $x_N = 0, x_B$  的值可由(9)式唯一确定,  $x_B = B^{-1} b$ 。这样得到:

$$x = \begin{bmatrix} x_B \\ x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B^{-1} b \\ 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

此为标准形中的约束条件的一个特殊解, 又称为(8)式的基解。特别是(10)式中, 当  $x_B = B^{-1} b \geq 0$  恒成立时, 该基解满足(8)式的约束条件, 因此, 又将其称为基可行解。线性规划问题若有最优解, 则基可行解中一定存在有最优解。据此, 为了找出线性规划问题的最优解, 没有必要考虑可行解的全体, 可限定以具有(10)式形式的基可行解为对象进行搜索。

基于这个思想有效进行最优解搜索的是 1947 年 DANTZIG 所提出的单纯形法 (simplex method)。以反演 3 个参数为例, 具体思路是: 先由参数的初始值构成初始点  $x_0$ , 然后以此点为基础构成四面体 (多面体的面数为参数的个数加 1)。这里采用的是正单纯形法, 也即正四面体, 由此形成初始单纯形  $S_0$ , 各个顶点的

表达式如下:

$$x_0 = (x_{10}, x_{20}, x_{30}), x_1 = x_0 + (p, q, q), x_2 = x_0 + (q, p, q), x_3 = x_0 + (q, q, p) \quad (11)$$

式中,  $p = 2\sqrt{2}t/3, q = t/3\sqrt{2}, t$  为正四面体的边长。

再把  $s_0$  各个顶点所对应的坐标分别代入评价函数 (见 1.3 节), 通过比较, 确定最好点  $X_h$ , 最差点  $X_l$ , 以及次好点  $X_g$  (评价函数值越小, 所对应的点越好; 反之, 越差)。接下来经过反射、扩张、压缩、收缩一系列动作, 产生一系列的点, 如图 2 所示。图中  $X_x$  为除去最坏点之后的形心,  $X_x = \frac{1}{n} \sum_{j \neq k} X_j$  ( $k$  表示最差点,  $n$  代表反演参数的个数),  $X_r = X_x + (X_x - X_h)$ ,  $X_e = X_x + 2(X_r - X_x)$ ,  $X_{c1} = X_x + 0.5(X_r - X_x)$ ,  $X_{c2} = X_x - 0.5(X_r - X_x)$ 。

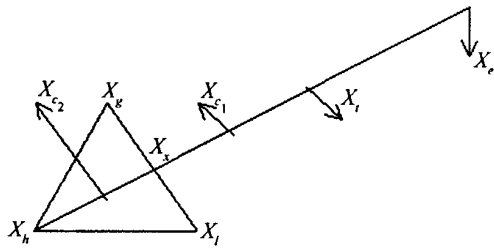


Fig 2 The chart for the normal simplex algorithm

把这些点代入评价函数, 然后进行比较, 选取合适的点, 确定新的单纯形。重复以上步骤, 得到一系列的单纯形, 直到满足某个条件时, 停止搜索, 此时单纯形的最好点的各个坐标与光栅的各个参数对应。

### 1.3 评价函数

从 1.1 节的推导过程可以看出, 透射系数是关于光栅参数的函数, 而由透射系数并不能直接得光栅参数, 即不可以得出解析解, 须采用逐步迭代法。可以先由透射光谱曲线上的  $N$  个点所对应的透射系数来估计  $n, h$  的初值, 然后采用最小二乘法, 构造评价函数 (省略表示透射系数第 1 级的下标):

$$P_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\eta_{c_i} - \eta_{g_i})^2 / \Delta\eta^2 \quad (12)$$

式中,  $P_n$  为评价函数值,  $N$  为所选点的个数,  $\eta_c$  为测量值 (代表  $\eta_{c_i}, i = 1, 2, \dots, N$ ),  $\eta_g$  为根据估计的光栅参数的尝试解得到的透射系数 (代表  $\eta_{g_i}, i = 1, 2, \dots, N$ ),  $\Delta\eta$  为标准误差。在逐步迭代过程中,  $\eta_c$  保持不变,  $\eta_g$  是不断变化的。

## 2 模拟测量与数值计算

通过以上理论分析可知, 正单纯形法可以用在透射系数对光栅参数的反演中。下面进行相关计算来验证其可行性及有效性。

在图 1 所示的光栅模型中, 假设各参数值如下:  $n_1 = 1.0, n_2 = 1.45, T = 2\mu\text{m}$  (在模拟计算中, 这些量均

为已知);  $n_0 = 1.5, n' = 0.1, h = 1\mu\text{m}$  (为待求量)。这样, 可以得到第 1 级透射光谱曲线 (见图 3)。图中实线、点划线、双划线分别代表不加噪声和噪声标准偏差为 0.007 与 0.01 时的透射光谱曲线, a, b, c, d, e 代表所选的 5 个点。

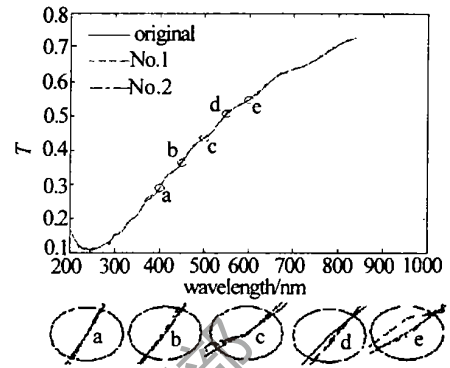


Fig 3 The graph for transmission coefficient with or without Gaussian noise and amplified graph for the five point of a b c d e etc

这里的标准偏差与实际中的测量误差相对应, 标准偏差的增大等效于测量误差的增大。从理论上讲, 在没有任何误差的情况下, 评价函数  $P_n = 0$ 。而在实际运算中, 由于正单纯形的边长不可能无限小, 以及计算机计算精度的限制, 使得反演结果 (见表 1) 只能逼近真实值。可以从表中看出, 经过反演, 折射率参量  $n_0, n$  和厚度  $h$  也都几乎接近真实值。

Table 1 The result of the conversely computation for a grating of refractive index model without Gaussian noise

	$n_0$	$n'$	$h/\mu\text{m}$
initial value	1.4	0.09	0.7
the computed result	1.50000	0.10000	0.99999
$P_n$	$2.86731 \times 10^{-21}$		

在用正单纯形法进行搜索时, 选离真实值比较远的点作为初始点 ( $x_0 = (1.4, 0.09, 0.7)$ )。当  $\Delta\eta_1 = 0.007$  时, 见表 2, 可得  $P_n = 1.00283 \times 10^{-7}$ , 收敛的最佳拟合值为  $n_0 = 1.50919, n' = 0.10054, h = 0.99360\mu\text{m}$ ; 当  $\Delta\eta_1 = 0.01$  时, 见表 2 (意味着测量误差的增大), 对应的光栅参数为:  $n_0 = 1.50903, n' = 0.10091, h = 0.99106\mu\text{m}$ , 此时,  $P_n = 20.16069 \times 10^{-7}$ 。由此可以

Table 2 The result of the conversely computation for a grating of refractive index model when Gaussian standard deviation is 0.007 or 0.01

$\Delta\eta_1 = 0.007$		$\Delta\eta_1 = 0.01$	
initial value	$n_0 = 1.4, n' = 0.09, h = 0.7\mu\text{m}$	initial value	$n_0 = 1.4, n' = 0.09, h = 0.7\mu\text{m}$
$n_0$	1.50919	$n_0$	1.50903
$n'$	0.10054	$n'$	0.10091
$h/\mu\text{m}$	0.99360	$h/\mu\text{m}$	0.99106
$P_n (10^{-7})$	1.00283	$P_n (10^{-7})$	20.16069

看出,它们与真实值均非常接近。

### 3 结论

在实际测量中,测量曲线与模拟曲线会出现较大差别,原因是与实际光栅相比,模拟光栅的入射层与基底层都是均匀的,光栅层折射率严格按照正弦型变化。

透射系数的测量比较容易,且具有测量精度高,测量值稳定,不损伤样品等特点;而正单纯形法又具备简单快速等特性,将正单纯形法和透射光谱结合起来反演光栅参数,不但速度快,而且计算精度颇高,本文中以折射率型光栅为例进行计算与讨论,结果表明具备上述优点。另外,此方法还可以用于其它类型的光栅参数的反演中。

这里只是进行了数值模拟,如果能在实验上得到

突破的话,用透射光谱法测光栅参数的优越性必将进一步得到体现,这也是现在正努力做的工作。

#### 参考文献

- [1] 罗玉西,田晓晖.测量光栅常数和波长的一种新办法[J].延安大学学报,1999,18(4):41~46
- [2] 高思田,王春艳,叶孝佑.纳米技术与纳米计量[J].现代计量测试,2000(1):3~12
- [3] 卢向东,傅克祥,王植恒.椭圆法测光栅参数的可行性理论研究[J].激光杂志,2003,24(1):29~31
- [4] 茨本俊秀,福岛雅夫.最优化方法[M].北京:世界图书出版公司,1997.4~35
- [5] LIL F Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures[J].J O SA,1996,A13(9):1870~1876
- [6] FU K X,WANG Zh H,ZHANG D Y. A modal theory and recursion RTCM algorithm for gratings of deep grooves and arbitrary profile[J]. Science in China,1999,42(6):636~645

(上接第131页)

量中滤除离散性比较大的数据的方法,这样做还可进一步提高测距精度。

(4)用整形后的高质量触发信号来控制高速场效应管纳秒开关,改善了发射激光脉冲前沿的质量。该系统是利用激光脉冲前沿来作为计时信号的,提高光脉冲前沿的上升斜率有利于改善测量精度。为此,设计中先将触发信号整形,使其前沿变陡,再用来控制高速MOSFET纳秒开关导通放电回路,使半导体激光器发光。试验结果表明,光脉冲前沿可达到5ns。

### 3 结论

该系统的性能参数是:波长 $\lambda=905\text{nm}$ ,测距范围2m~150m,测距精度1m,工作温度范围 $-20\text{C}\sim70\text{C}$ 。对系统进行的实际测试表明,系统的精度和量程能满

足汽车防撞的要求,具有较高的温度适应性,加上它具有体积小、重量轻、结构简单、成本低廉的特点,附以适当的外围控制电路可以应用于各种类型智能车辆,能够有效提高驾乘车的安全性。

#### 参考文献

- [1] 钟勇,姚剑锋.现代汽车的四种测距方法[J].汽车工业研究,2001(2):38~40
- [2] 刘峰.脉冲激光测距机的研制与应用[J].红外与激光工程,2003,132(2):118~122
- [3] 张在宣,余向东,郭宁.小型低价LD激光测距仪[J].激光与红外,1999,29(1):21~23
- [4] 谭显裕.脉冲激光测距仪雪崩光电探测器最佳工作状态和接收灵敏度研究[J].光电子技术,2001,21(2):129~137
- [5] 张在宣,郭宁,余向东.小型低值激光测距仪的优化设计[J].光电子·激光,1999,10(2):132~134
- [6] 高雅允,高岳,张开华.军用光电系统[M].北京:北京理工大学出版社,1996.205~215