



论文

大量程折射仪的分步求解算法

陈艳^①, 王贤平^{①*}, 孙晶晶^①, 桑明煌^{①②}^① 江西师范大学物理与通信电子学院, 南昌 330022;^② 江西省光电子与通信重点实验室, 南昌 330022

*联系人, E-mail: xpwangphysics@gmail.com

收稿日期: 2012-08-14; 接受日期: 2012-10-17; 网络出版日期: 2013-02-20

国家自然科学基金资助项目(批准号: 61265001)

摘要 针对折射率 m 线法失效于对称金属包覆波导的大量程折射仪, 本文根据模式色散方程和衰减全反射谱, 提出了一种分步求解算法. 首先将波导层为空气时的共振角度, 由二分法及共振角处反射率之和应为最小, 计算得到波导层的最优厚度. 然后利用波导层最优厚度和波导层为样品时的共振角度, 计算出样品的最优折射率. 这种算法简单、迅速、误差小. 以纯水为例, 利用该算法所得结果与真实值一致.

关键词 大量程折射率仪, 对称金属包覆波导, 共振角度, 折射率, 算法

PACS: 02.60.Pn, 42.82.Et, 42.79.-e

doi: 10.1360/132012-498

折射率是物质的重要光学常数之一, 折射率的精确测量可用于探知物质的光学性能^[1-3]、纯度^[4]及浓度^[5]等参数, 且在化工、医药^[6]、环境、食品安全^[7]等领域中具有重要意义. 目前, 测定固体、液体、气体折射率的方法很多, 常用的有: (1) 最小偏向角法^[8], 其测量精度较高, 但需将样品加工成棱镜状, 增加了测量难度; (2) 阿贝折射仪法^[9], 具有操作方便、迅速、环境条件要求低等优点, 但其全反射原理要求样品的折射率不得大于 1.7, 因而对某些样品不适用; (3) 椭圆偏振法^[10,11], 可同时测定样品的折射率和厚度, 但若厚度超出一定值时, 其测量结果并不唯一; (4) 准波导的 m 线法^[12,13], 根据衰减全反射谱中的多个共振角度可同时给出样品折射率和厚度, 但其要求波导的厚度应足以容纳多个模式.

以上几种折射率测量方法虽被广泛应用, 但它们还具有一个共同不足, 即折射率的测量范围较小. 而在近期由曹庄琪教授课题组提出的基于对称金属包覆波导 (Symmetrical Metal-Cladding Waveguide, SMCW)^[14-18]的大量程折射率仪^[19]中, 其金属包覆的设计使折射率的测量范围不受限制^[14], 既可测量气体和液体、也可测量固体的折射率; 同时放置待测样品的波导层为亚毫米尺度, 可激发高灵敏的超高阶导模^[15], 因此测量精度高, 优于 0.0001^[17]. 由于超高阶导模的模序数通常大于 1000, 则由 m 线法^[20]所得到的样品折射率和厚度的误差都较大. 对此, 本文提出一种分步求解算法, 先根据当空气为波导层时的共振角度计算得出波导层的厚度, 再由样品为波导层时的共振角度最终计算得到样品的折射率, 为大

引用格式: 陈艳, 王贤平, 孙晶晶, 等. 大量程折射仪的分步求解算法. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2013, 43: 257-262

Chen Y, Wang X P, Sun J J, et al. Study on the multi-step algorithm for large-range refractometer (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2013, 43: 257-262, doi: 10.1360/132012-498

量程折射仪的实用化提供相应的算法支持.

1 大量程折射率仪

1.1 器件结构和测量装置

亚毫米尺度的 SMCW 如图 1(a)所示. 该器件的结构从上至下依次为薄金属膜, 玻璃薄片, 两块相对放置的 C 型玻璃片, 厚金属膜, 玻璃衬底. 两 C 型玻璃片相离一定距离, 组成两通道口, 分别为待测样品的入口和出口, 而在中心则形成一个样品室. 金属膜可通过磁控溅射等技术制备, 之后各部件再通过光胶技术组装起来.

图 1(b)则为基于 SMCW 大量程折射仪的测量装置. 半导体激光器出射的激光由偏振片产生单偏振光(TE 偏振或 TM 偏振)后, 依次经平面镜调节激光方向, 空间滤波器滤波、透镜聚焦, 最后以聚焦光束入射到 SMCW 的薄金属膜上, 其反射光通过 CCD 接收, 并光电转换后显示在计算机上. 因在入射光束的角度范围内有多个可以满足波矢匹配条件的共振角, 经 SMCW 反射后的光束中会出现相应的几条暗条纹(见图 1(b)中的反射光图样), 也即产生所谓的 m 线. 另外此测量装置无需角度扫描设备, 可有效避免角度扫描转盘振动带来的误差.

1.2 模式色散方程和衰减全反射谱

因为 SMCW 上下两金属膜内的光场为迅衰场形式, 且其衰减系数通常较大, 所以由上下两金属膜厚度所带来的影响可忽略不计, 即可认为两金属层为半无限厚^[14]. 忽略金属介电常数的虚部(在光频范围内, 贵金属介电系数的虚部远小于实部), 可得四层 SMCW 模式色散方程为

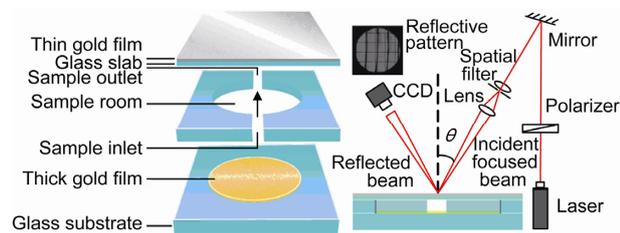


图 1 (网络版彩图) (a) 大量程折射率仪结构图, (b) 测量装置图

Figure 1 (Color online) Configurations of the large-range refractometer (a) and the measurement apparatus (b).

$$\kappa_2 h_2 + \kappa_3 h_3 = m\pi + \arctan\left(\rho_{21} \frac{\alpha_1}{\kappa_2}\right) + \arctan\left(\rho_{34} \frac{\alpha_4}{\kappa_3}\right) - \Phi(s), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

式中

$$\begin{cases} N = \sqrt{\varepsilon_0} \sin \theta, \\ \kappa_i = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{\varepsilon_i - N^2}, \quad i = 2, 3, \\ \alpha_i = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{N^2 - \varepsilon_i}, \quad i = 1, 4, \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} \Phi(s) = \arctan\left(\frac{\alpha_3}{\kappa_3}\right) - \arctan\left(\rho_{23} \frac{\alpha_3}{\kappa_2}\right), \\ \alpha_3 = \kappa_3 \tan\left[\arctan\left(\rho_{34} \frac{\alpha_4}{\kappa_3}\right) - \kappa_3 h_3\right]. \end{cases} \quad (3)$$

λ 为真空中的激光波长, θ 为入射角, m 为模序数, $\varepsilon_i(n_i)$ 和 h_i 分为 SMCW 各层的介电常数(折射率)和厚度, 0 标记空气, 1-4 依次标记 SMCW 的薄金属膜、上层玻璃薄片、样品、厚金属膜. 而

$$\rho_{ij} = \begin{cases} 1, \\ \varepsilon_i / \varepsilon_j, \end{cases} \quad i, j = 1, 2, 3, 4. \quad (4)$$

其中 $\rho_{ij}=1$ 对应 TE 偏振, $r_{ij}=\varepsilon_i/\varepsilon_j$ 对应 TM 偏振. 当波导层的厚度为亚毫米尺度时, 此时 SMCW 可容纳数千个导模($m>1000$), (1)式右边中与偏振相关的第二、三、四项可略去不计, 即对偏振不灵敏; 同时当入射角 $\theta \rightarrow 0$, 有效折射率 $N \rightarrow 0$, 这种超高阶导模对波导层折射率的改变特别灵敏^[15], 适合于生化传感器的研究^[16-18].

SMCW 大量程折射仪反射系数可由递推公式^[21]

$$\begin{cases} r_{234} = \frac{r_{23} + r_{34} \exp(i2\kappa_3 h_3)}{1 + r_{23} r_{34} \exp(i2\kappa_3 h_3)}, \\ r_{1234} = \frac{r_{12} + r_{234} \exp(i2\kappa_2 h_2)}{1 + r_{12} r_{234} \exp(i2\kappa_2 h_2)}, \\ r = \frac{r_{01} + r_{1234} \exp(i2\kappa_1 h_1)}{1 + r_{01} r_{1234} \exp(i2\kappa_1 h_1)} \end{cases} \quad (5)$$

求得. 各层间菲涅耳反射系数为

$$r_{ij} = \begin{cases} \frac{\kappa_i / \varepsilon_i - \kappa_j / \varepsilon_j}{\kappa_i / \varepsilon_i + \kappa_j / \varepsilon_j}, & \text{TM mode,} \\ \frac{\kappa_i - \kappa_j}{\kappa_i + \kappa_j}, & \text{TE mode.} \end{cases} \quad (6)$$

反射率可由 $R = |r|^2$ 得出. 当入射角满足波矢匹配条件时, 入射光被有效地耦合进 SMCW, 相应的反射光强度会明显下降, 表现为在衰减全反射谱中形成一个共振吸收峰. 图 2 给出了相邻的三个共振吸收峰 (实线), 在共振角度处, 反射率为最小, 经比较发现, 模序数越大, 其共振入射角度则越小. 选择的计算参数如下: 上下两金属膜厚度分为 $h_1=31$ nm, $h_4=300$ nm, 上层玻璃薄片厚为 $h_2=0.3$ mm, 样品室厚为 $h_3=0.7$ mm, 空气介电系数为 $\epsilon_0=1.0$, 金属膜介电常数为 $\epsilon_1=\epsilon_4=-11.4+1.5i$ ^[22], 玻璃折射率为 $n_2=1.5$, 纯水折射率为 $n_3=1.33300$, 激光波长为 $l=632.8$ nm. 当波导层的厚度或折射率增大时 ($\Delta n_3(h_3)>0$), 衰减全反射谱线会整体右移, 即共振角度相应地增加 (见图 2 虚线), 而当波导层的厚度或折射率减小时 ($\Delta n_3(h_3)<0$), 谱线会左移 (见图 2 点划线).

2 算法

2.1 m 线法

通过测量同步角便可得到 SMCW 的有效折射率 N . 文献[20]将 m 线法^[12]引入到 SMCW 中, 认为若知道了 SMCW 三个相邻模式的 N_{m-1} , N_m , N_{m+1} , 便可联立模序数分别为 $m-1, m, m+1$ 的模式色散方程, 即(1)式, 可同时求出模序数 m , SMCW 样品室厚度 h_3 和样品折射率 n_3 三个量. 但是 SMCW 的波导层厚度为亚毫米尺度, 可容纳上千个模式 ($m>1000$), 相邻模式之间的共振角度相差很小, 代入(1)式中计算会带来很大的误差. 鉴于此, 文献[19]提出将模序数间隔扩大,

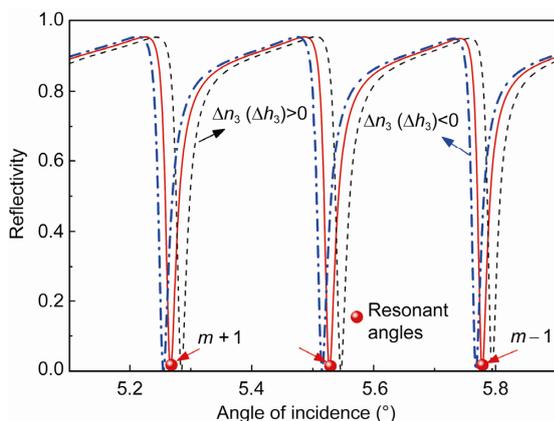


图 2 (网络版彩图) 衰减全反射谱

Figure 2 (Color online) Attenuated total reflection spectrum.

即由 $m-3, m, m+3$ 三个模式的模式色散方程来求解. 但(1)式为一个较复杂的超越方程, 在无法知道模序数 m 大致取值范围的情况下, 编程由计算机来计算, 一般难以找到合理的结果, 且其得出的模序数 m 也往往不是一个整数.

2.2 分步求解算法

将两个相邻模式的模式色散方程相减, 由(1)式可得

$$\kappa_2^m h_2 + \kappa_3^m h_3 - \kappa_2^{m-1} h_2 - \kappa_3^{m-1} h_3 = \pi + \Delta\Phi, \quad (7)$$

式中 $\Delta\Phi$ 为 SMCW 两模式在各层边界处产生的反射相移一半之差, 这样未知量减少到两个, 即样品室厚度 h_3 和样品折射率 n_3 . 在(7)式左边, 保持样品折射率 n_3 不变, 如果增加样品室厚度 h_3 , (7)式左边的值会大于右边的值, 当减小时, 左边的值则会小于右边. 在保持样品室厚度 h_3 时, 改变样品折射率 n_3 也有类似的情形. 所以在已知样品室厚度 h_3 或样品折射率 n_3 中的一个量时, 可以由(7)式通过二分法在一个合理范围内计算出另外一个量的值.

(7)式 $\Delta\Phi$ 虽为一个小量, 但其表达式相当复杂, 且与入射激光的偏振相关, 所以直接由(7)式通过二分法计算会带来误差. $\Delta\Phi$ 非常小, 可用 0.1π 来替换, 由(7)式可以定义两个评价函数

$$\begin{cases} f(h_{3\max} \text{ or } n_{3\max}) = \kappa_2^m h_2 + \kappa_3^m h_3 \\ \quad - \kappa_2^{m-1} h_2 - \kappa_3^{m-1} h_3 - 1.1\pi, \\ f(h_{3\min} \text{ or } n_{3\min}) = \kappa_2^m h_2 + \kappa_3^m h_3 \\ \quad - \kappa_2^{m-1} h_2 - \kappa_3^{m-1} h_3 - 0.9\pi. \end{cases} \quad (8)$$

若已知样品折射率 n_3 , 在一个合理厚度范围内, 可以通过二分法由(8)式中的两个评价函数等于 0, 得到样品室厚度的一个极大值 $h_{3\max}$ 和一个极小值 $h_{3\min}$. 同理在已知样品室厚度 h_3 时, 也可以求得 $n_{3\max}$ 和 $n_{3\min}$.

在计算出的样品室厚度范围 ($h_{3\min}, h_{3\max}$) 内, 存在一个最优厚度 h_{opt} , 在所有的共振角度处, 其反射率为最小, 所以反射率之和也应为最小. 如果厚度偏离最优厚度 h_{opt} , 其衰减全反射谱会移动, 那么在共振角度处, 反射率将不再为最小 (见图 2). 所以可以将厚度范围 ($h_{3\min}, h_{3\max}$) 分成 10^6 份, 计算每个厚度在所有共振角度处的反射率, 并求和, 找出让反射率之和最小的那个厚度, 这个厚度即可以认为是最优厚度 h_{opt} . 若需要得到更高的计算精度, 可以增加厚度范围的分解份数. 同理可以由样品折射率范围 ($n_{3\min},$

n_{3max}), 通过计算折射率让所有共振角度处的反射率之和取最小值, 得出最优折射率 n_{opt} .

分步求解算法的流程图如图 3 所示. 在通入待测样品之前, 由大量程折射仪测得空气为波导层时的多个共振角度. 令空气的折射率 $n_{air}=1$, 由二分法及评价函数(8)式在厚度范围 0–2 cm 内找出样品室厚度的范围(h_{3min} , h_{3max}), 再通过让共振角度处反射率之和为最小计算得出最优厚度 h_{opt} . 此时再通入待测样品, 由大量程折射仪测得样品为波导层时的多个共振角度, 代入之前得到的最优厚度 h_{opt} , 由二分法及评价函数(8)式在折射率范围 0–6 内找出样品折射率范围(n_{3min} , n_{3max}), 再通过让共振角度处反射率之和为最小计算得出最优折射率 n_{opt} . 这样通过上述的分步求解算法可算出样品室厚度 h_3 和样品折射率 n_3 .

3 讨论与结论

图 4 是利用 Matlab GUI 程序基于分步求解算法编写的大量程折射仪程序运算界面. 左上部分第一个数据区为共振角度导入区, 第二个数据区显示出计算所得到的样品厚度(或折射率)的范围和最优值.

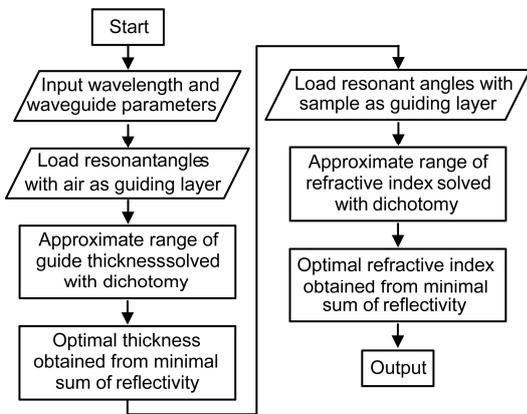


图 3 分步求解算法流程图
Figure 3 Flow chart of multi-step algorithm.

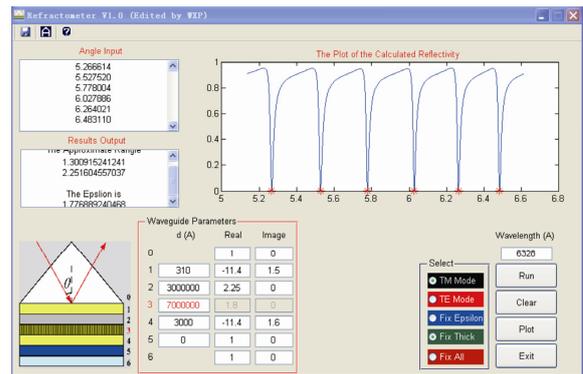


图 4 (网络版彩图) 分步求解算法流程图
Figure 4 (Color online) Flow chart of multi-step algorithm.

左下部分为 SMCW 参数输入区, 包括各层的厚度 h_i 和介电常数 ϵ_i . 右上部分为衰减全反射谱绘制区, 并用红色星号标记出所有的共振角度. 右下部分为计算和绘图控制区.

表 1 列出了由反射率公式(5)计算出的当空气或纯水为样品时的 6 个共振角度, 计算参数与前文一致, 其中样品室厚度设为 $h_3=0.7$ mm, 空气和纯水的折射率分别取为 1 和 1.33300. 将这些共振角度和 SMCW 结构参数代入大量程折射仪分步求解算法程序, 分别计算出最优厚度 h_{opt} 和最优折射率 n_{opt} , 所得结果与实际值一致. 考虑到实际中, 共振角度的测量难免会有误差, 所以将所有共振角度偏移 2‰ 度和 3‰ 度, 并计算了此时的最优厚度 h_{opt} 和最优折射率 n_{opt} , 其计算值与实际值有一定的偏差. 这种偏差其实并不是由分步求解算法带来的, 而是由 SMCW 中其超高阶导模对波导层各参数非常灵敏这一特性^[15]造成的. 所以在大量程折射仪的实用化进程中, 如何严格控制 SMCW 各层中的结构参数和精确测量共振角度将是一大亟待解决的课题. 而本文提出的分步求解算法, 解决了 m 线法应用于 SMCW 大量程折射仪中的不足, 为大量程折射仪的实用化提供了算法支持, 也为物质折射率的精确测量提供了可能.

表 1 实际值与计算值的比较^{a)}

Table 1 Comparison between actual values and calculated values

样品	共振角 (°)						实际值	计算值 a	计算值 b	计算值 c
空气	5.2555	5.4628	5.6543	5.8595	6.0681	6.2595	0.700000	0.700000	0.699983	0.699885
纯水	5.2666	5.2752	5.778	6.0279	6.2640	6.4831	1.33300	1.33300	1.33295	1.33289

a) 厚度单位为 mm; a 为准确的共振角, b 为 2‰ 度的角度偏移, c 为 3‰ 度的角度偏移

参考文献

- 1 Owens J C. Optical refractive index of air: Dependence of pressure, temperature and composition. *Appl Optics*, 1967, 6: 51–59
- 2 Tearney G J, Brezinski M E, Southern J F, et al. Determination of the refractive index of highly scattering human tissue by optical coherence tomography. *Opt Lett*, 1995, 20: 2258–2260
- 3 Sevigny B, Busque F, Godbout N, et al. High-resolution refractive index anisotropy measurement in optical fibers through phase retardation modulation. *Appl Optics*, 2008, 47: 1215–1222
- 4 Sun Y, Shopova S I, Mason G F, et al. Rapid chemical-vapor sensing using optofluidic ring resonators. *Opt Lett*, 2008, 33: 788–790
- 5 Lam W W, Chu L H, Wong C L, et al. A surface plasmon resonance system for the measurement of glucose in aqueous solution. *Sens Actuator B-Chem*, 2005, 105: 138–143
- 6 Cao X, Hancock B C, Leyva N, et al. Estimating the refractive index of pharmaceutical solids using predictive methods. *Int J Pharm*, 2008, 368: 16–23
- 7 Piliarik M, Parova L, Homola J. High-throughput SPR for food safety. *Biosens Bioelectron*, 2009, 24: 1399–1404
- 8 Zhou T, Zhang D F, Yang H G, et al. Measurement of refractive index of the crystal with angle of minimum deviation method (in Chinese). *J Synth Cryst*, 1997, 26: 377–382 [周棠, 张道范, 杨华光, 等. 用棱镜最小偏向角法测量晶体折射率. *人工晶体学报*, 1997, 26: 377–382]
- 9 Herrmann P P. Determination of thickness, refractive index, and dispersion of waveguiding thin films with an Abbe refractometer. *Appl Optics*, 1980, 19: 3261–3262
- 10 Pristiniski D, Kozlovskaya V, Sukhishvili S A. Determination of film thickness and refractive index in one measurement of phase-modulated ellipsometry. *J Opt Soc Am A-Opt Image Sci Vis*, 2006, 23: 2639–2644
- 11 Schildkraut J S. Limitations to the determination of the optical properties of a thin film by combined ellipsometric and surface plasmon resonance measurements. *Appl Optics*, 1988, 27: 3329–3333
- 12 Ulrich R, Torge R. Measurement of thin film parameters with a prism coupler. *Appl Optics*, 1973, 12: 2901–2908
- 13 Ding T, Garmire E. Measuring refractive index and thickness of thin films: A new technique. *Appl Optics*, 1983, 22: 3177–3181
- 14 Li H G, Cao Z Q, Lu H F, et al. Free-space coupling of a light beam into a symmetrical metal-cladding optical waveguide. *Appl Phys Lett*, 2003, 83: 2757–2759
- 15 Lu H F, Cao Z Q, Li H G, et al. Study of ultrahigh-order modes in a symmetrical metal-cladding waveguide. *Appl Phys Lett*, 2004, 85: 4579–4581
- 16 Chen G, Cao Z Q, Gu J H, et al. Oscillating wave sensors based on ultrahigh-order modes in symmetric metal-clad optical waveguides. *Appl Phys Lett*, 2006, 89: 081120
- 17 Gu J H, Chen G, Cao Z Q, et al. An intensity measurement refractometer based on a symmetric metal-clad waveguide structure. *J Phys D-Appl Phys*, 2008, 41: 185105
- 18 Sang M H, Yu Z X, Li C C, et al. Theoretical analysis of phase modulation based on the oscillating biochemical sensor (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2012, 42(2): 122–126 [桑明煌, 余子星, 李翠翠, 等. 相位调制型振荡场生化传感器的理论分析. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2012, 42(2): 122–126]
- 19 Ran M W, Chen X F, Cao Z Q. Research on a large-range refractometer (in Chinese). *Chin J Quantum Electron*, 2011, 28: 206–209 [冉茂武, 陈险峰, 曹庄琪. 大量程折射率仪的研究. *量子电子学报*, 2011, 28: 206–209]
- 20 曹庄琪. 导波光学. 北京: 科学出版社, 2007. 101–103
- 21 Su P Y, Cao Z Q, Chen K S, et al. Explicit expression of light reflection from inhomogeneous planar structures. *J Opt Soc Am B-Opt Phys*, 2007, 24: 3077–3080
- 22 Johnson P B, Christy R W. Optical constants of noble metals. *Phys Rev B*, 1972, 6: 4370–4379

Study on the multi-step algorithm for large-range refractometer

CHEN Yan¹, WANG XianPing^{1*}, SUN JingJing¹ & SANG MingHuang^{1,2}

¹Department of Physics, Jiangxi Normal University, Nanchang 330022, China;

²Key Laboratory of Photo-electronic & Telecommunication of Jiangxi Province, Nanchang 330022, China

Based on the modal dispersion equation and attenuated total reflection spectrum, a multi-step algorithm for calculating the refractive index of analyte in symmetrical metal-cladding waveguide (SMCW) is proposed, and thus the large error generated by the utilization of m -line method to the SMCW-based large-range refractometer is avoided. Our algorithm is simple, quick and accurate. The calculation processes are as follow: the thickness of the guiding layer is obtained from the resonant angles when air is acted as guiding layer, then the refractive index of analyte is calculated from the obtained optimal thickness and the resonant angles when analyte is employed as guiding layer. The calculation mechanism of these two processes is that the approximate range can be given by dichotomy and the sum of reflectivity at all resonant angles should be minimal. Taking pure water as an example, the calculated refractive index agrees well with the actual one.

large-range refractometer, symmetrical metal-cladding waveguide, resonant angle, refractive index, algorithm

PACS: 02.60.Pn, 42.82.Et, 42.79.-e

doi: 10.1360/132012-498