用于光子电路仿真的条形波导工艺偏差感知紧凑模型

Aneek James、Anthony Rizzo、Yuyang Wang、Asher Novick、Songli Wang、Robert Parsons、Kaylx Jang、Maarten Hattink 和 Keren Bergman

arXiv:2301.01689v1 [physics.optics] 4 Jan 2023

摘要—我们提出了一种新型条形波导工艺偏差感知紧凑模型，适用于基于波导的工艺设计套件（PDK）元件的电路级仿真。结果表明，该模型能够描述条形波导的损耗，并且借助针对高折射率对比度材料中热光效应的新型表达式，还能描述其热光特性。一种新型分组提取方法能够对有效折射率（n_{eff}）进行建模，刻画其对局部工艺偏差的敏感性，而无需预先假设偏差来源。利用在一批 300毫米晶圆批次上制造的欧拉弯曲马赫-曾德尔干涉仪（MZI），可在高达 2.5 μm 的宽度（高度多模）下提取模型参数，同时强力抑制高阶模式激发。实验结果证明，所提出的模型能够以自洽的方式描述所有测量器件的波导相位、损耗和热光特性，覆盖前所未有的光学带宽、波导宽度和温度范围。

索引词—**硅光子学、紧凑建模、工艺偏差**。

I. 引言

硅ILICON 光子学（SiPh）作为一种技术平台，因应用于数据中心（DC）、高性能计算（HPC） [1]–[3],量子计算 [4]–[8]，以及射频通信系统 [9]–[11]而迎来爆发式需求增长。硅光子学的迅速崛起与成熟，得益于其能够借助互补金属氧化物半导体（CMOS）产业数十年来的研究成果，大幅降低新兴半导体技术相关的典型研究与开发（R&D）成本 [12]–[14]。然而，硅光子学尚无法像CMOS那样，利用产率预测工具评估光子集成电路（PIC）。产率是半导体制造领域普遍采用的一项指标，产率提升与光子集成电路设计周期所需时间和成本的降低密切相关 [15]–[17]。预测性产率模型的需求在一定程度上可以通过以下方式缓解：设计抗变化器件 [18] 或光子集成电路，使其能够容忍性能变化，或在制造后对其进行校正 [19], [20]。然而，在这两种情况下，制造前都无法确定定量产率数据；随着预测显示，未来十年内硅光子集成电路中的组件数量将增至数百万，这一障碍将愈发突出 [21]。电路设计人员还需要借助器件级设计选择来优化系统级性能 [22]。为应对日益复杂的电路设计，商业代工厂必须开发工艺设计套件（PDK），其中包含紧凑模型；这些模型既要针对广泛的相关设计和环境变量进行参数化，也要描述所有重要的器件品质因数 [23], [24]。尤其需要准确建模条形波导——它是大多数硅光子电路的关键组件——以反映其预期制造性能。

表 I 条形波导性能建模特性。本文中的模型描述了在广泛的波长和波导几何结构范围内的相位、损耗和热行为影响。

模型特性	[25]	[26]	**本文**
波长 [nm]	1550	1520–1570	**1450–1650**
标称宽度范围 [nm]	480	480–500	**400–2500**
考虑的变化来源	w,t	w,t	**任意**
统计参数变化	✓	✓	✓
波导散射损耗	✗	✗	✓
热光效应	✗	✗	✓

w - 波导宽度变化t - 波导厚度变化

大致而言，构建紧凑模型有三种方法：(i) 基于查找表的模型，直接由测量或器件仿真得出；(ii) 基于经验拟合函数的模型；以及 (iii) 基于物理的模型 [23]。此前报道的大多数工作都属于基于查找表的这一类 [25]–[29]。这些模型可通过查找表（LUTs）进行参数化，并利用插值来预测表中未明确定义的设计性能。然而，要确保查找表模型在广泛的输入参数范围内保持准确，就需要测量每种输入参数组合下波导的所有品质因数；而随着所建模的自变量数量增加，这项任务的规模将呈指数级增长。以往的演示方法还要求将测得的有效折射率和群折射率变化明确关联到预先定义数量的工艺变化来源；如果仿真配置与制造工艺的实际情况之间存在系统性偏差，就可能引入误差。

本研究部分由美国先进研究计划局能源部通过 ENLITENED资助项目 DE-AR000843 资助，部分由美国国防高级研究计划局通过 PIPES资助项目 HR00111920014 资助。A. James、Y. Wang、A. Novick、S. Wang、R. Parsons、K. Jang、M. Hattink 和 K. Bergman 均供职于美国纽约州纽约市 10027 的哥伦比亚大学电气工程系。（通讯作者：Aneek James，电子邮箱：aej2149@columbia.edu）。A. Rizzo 供职于美国纽约州罗马市 13441 的空军研究实验室信息局。© 2023年 IEEE。允许个人使用本材料。对于任何其他用途，无论是在当前还是未来媒体中，包括为广告或促销目的重印/重新发布本材料、创作新的合集作品、转售或重新分发至服务器或列表，或在其他作品中重复使用本作品的任何受版权保护部分，均须获得 IEEE 的许可。

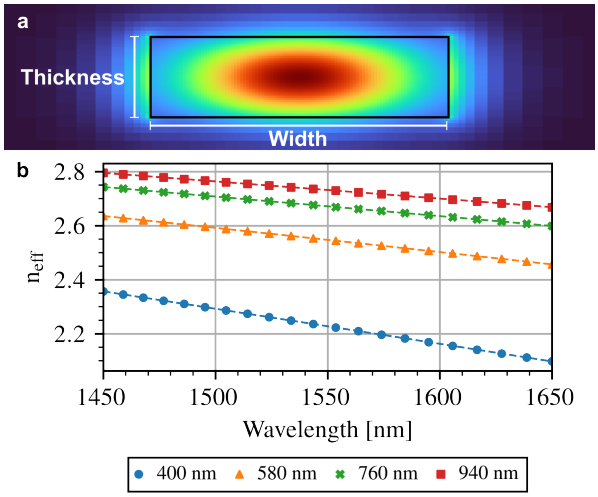


图 1. **a,** 取自 Lumerical MODE 的电场分布示例。**b,** 多个波导宽度下有效折射率随波长变化的仿真结果（散点）和模型结果（虚线）。每个波导的仿真厚度均为 220 nm。

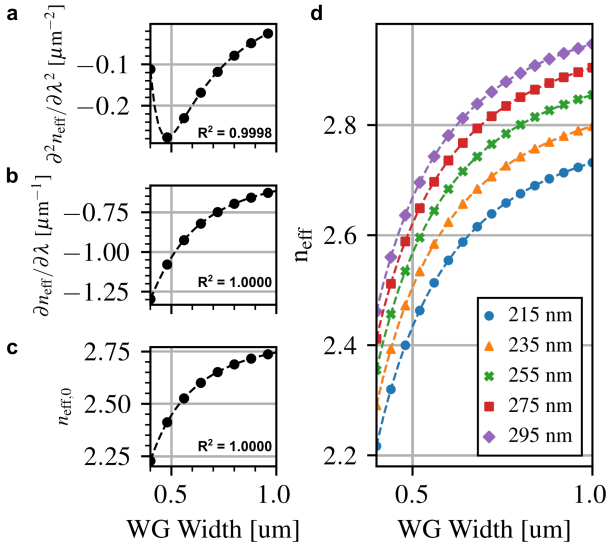


图 2。**a-c,** 模拟值（散点）和模型值（虚线） n_{eff} 参数 $[\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^2, \partial n_{\text{eff}}/\partial\lambda, n_{\text{eff},0}]$ 与波导宽度的关系图（分别对应）。这些数值针对厚度为 220 nm、波长为 1550 nm 的波导。**d,** 不同厚度下，模型值（虚线）与模拟值（散点）的n_{eff} 与波导宽度的对比。模拟波长为 1550 nm。

二者之间存在系统性偏差。

本文据我们所知，首次提出了一种条形波导几何参数化紧凑模型，可捕捉宽波长范围和多种波导几何结构下的器件性能（见表 I）。通过采用一种适用于高折射率对比度波导的新型热光效应推导方法，我们展示了该模型能够描述散射损耗和热光效应随设计参数和统计参数的变化。新颖的基于群组提取的方法无需假定来源或其相关灵敏度，即可表征工艺变化。我们利用这一提取方法，根据在 300 毫米商业代工厂制造的数十种几何变化的马赫-曾德尔干涉仪（MZIs）构建模型。这些 MZIs 中采用的欧拉弯曲段，使我们能够在尽量减少高阶模式激发的情况下表征宽波导的性能。实验结果验证了该模型准确描述整个晶圆上相位、损耗和热光性能的能力。我们还使用 Verilog-A 实现了该模型，以展示其与电子-光子协同仿真环境的兼容性 [30]–[32]。这项工作是实现基于波导的 PDK 组件建模的重要一步，可在超高集成密度下实现与测量结果高度吻合的电路仿真。

II. 物理感知模型开发

由于光波导的模式条件由超越方程描述，因此不可能推导出完全通用的有效折射率（n_{eff}）解析解 [33]。因此，正如 [34], 中所述，我们提出一种行为模型，能够在相关的关注范围内准确捕捉其对所有设计参数的依赖关系。本节将为可用的设计参数建立依赖关系模型。

随后，我们利用该模型的半物理特性来描述散射损耗和热光系数。无论工艺变化是否涉及设计参数，都将在第 IV 节中讨论。

A. 波长依赖性

首先考察波导 n_{eff} 的波长依赖性。在 Lumerical MODE 中对若干绝缘体上硅（SOI）波导几何结构的 n_{eff} 进行了模拟（图 1a）。结果表明，对于所有几何结构，在远高于截止条件的较宽波导宽度范围内，S、C 和 L 波段的波长依赖性均可通过二阶泰勒展开进行良好近似（图 1b）：

$$n_{\text{eff, model}}(\lambda) = \sum_{i=0}^{2} \frac{1}{i!} \frac{\partial^i n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^i}\bigg|_{\lambda=\lambda_0} (\lambda - \lambda_0)^i. \qquad (1)$$

B. 几何依赖性

由于泰勒展开仅捕捉波长依赖性，因此显然，拟合参数 $\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^2$、$\partial n_{\text{eff}}/\partial\lambda$和 $\partial^0 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^0$ （以下简称为 $n_{\text{eff},0}$）负责捕捉波导几何结构的依赖性。就宽度而言，此前在 [35] 中发现，三个拟合参数均可由以下行为模型很好地描述：

$$\frac{\partial^i n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^i}(w) = p_{i0} \cdot \frac{w^2 + p_{i1} w + p_{i2}}{w^2 + p_{i3} w + p_{i4}}, \qquad (2)$$

总计十五个模型参数。为验证模型的正确性，使用普通最小二乘法（OLS）将全部三个参数根据式（1）–（2）拟合到仿真数据上

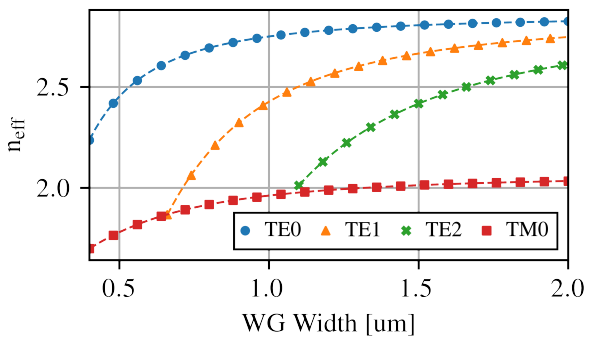


图 3. 建模结果（虚线）与仿真结果（散点） n_{eff} 在高阶模式和基模 TM 模式下的对比。所有波导均采用 220 nm 的厚度进行仿真。

回归结果。该模型能够在整个宽度扫描范围内匹配全部三个参数（图 2a–c）。模型参数与提取出的泰勒参数之间的高度吻合表明，我们对式（2）的修改仍然保留了其描述有效折射率随波长变化行为的能力。进一步而言，这三个泰勒参数能够稳健地描述 n_{eff} 随波导宽度变化的关系（图 2d）。数据还表明，这种一致性并不局限于某一特定的波导厚度，不同厚度会产生不同的子参数拟合结果。最后需要指出的是，式（2）的分子和分母均为阶数相同的多项式。因此，对于给定波长，我们的模型预测，当 w 趋于无穷大时，有效折射率将渐近趋于一个常数值。当 w 趋于无穷大时，模型所趋近的数值可解释为相同厚度无限平板的等效 n_{eff} ：

$$\lim_{w\to\infty} n_{\mathrm{eff}}(\lambda, w) = n_{\mathrm{slab}}(\lambda). \tag{3}$$

通过这种方式，我们的行为模型能够优雅地捕捉感兴趣的设计参数下有效折射率的所有显著特征。只要高阶模式与各自的波导截止条件相距足够远，该模型同样能够保持较高的准确性（图 3）。

C. 散射损耗

由侧壁粗糙度（SWR）引起的散射损耗可能是大多数已报道波导设计中的重要损耗来源，因此设计人员必须对其进行准确建模 [36]。在本节中，我们展示了模型捕捉作为波导几何结构函数的 SWR损耗的能力。 [37] 中首次指出，传统的 Payne 和 Lacey 模型所描述的 SWR 引起的损耗 [38], [39]在行为上与有效折射率相对于波导宽度的导数相同：

$$\alpha_{\mathrm{SWR}}(\lambda, w) = R\frac{\partial}{\partial w}\left[n_{\mathrm{eff}}(\lambda, w)\right], \tag{4}$$

其中 R 是比例常数。由于我们的模型可以将 n_{eff} 表示为宽度的函数，因此可以精确推导出 $\partial n_{\mathrm{eff}}/\partial w$ 的闭式表达式。该方程

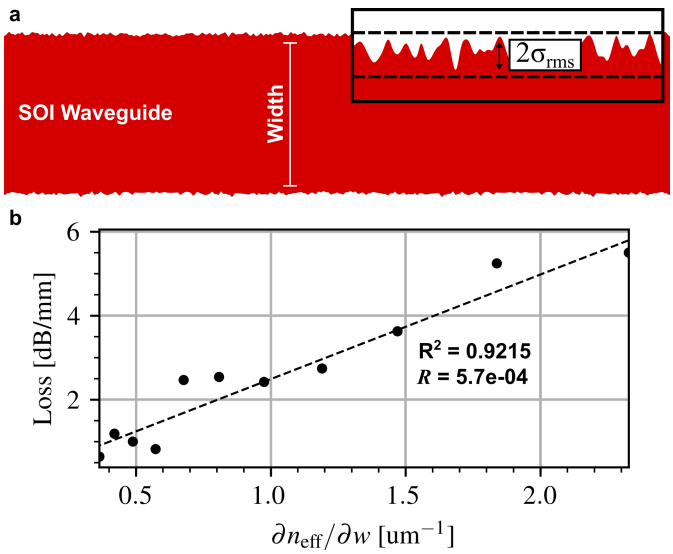


图 4. **a,** 带有一定侧壁粗糙度的波导模拟示意图。插图为波导的放大视图，用于说明 σ_{rms} 的定义。**b,** 基于 Lumerical MODE 数据，比较 FDTD 估算的散射损耗与使用我们模型拟合得到的结果。

随后可利用该方程拟合测得的波导损耗数据，从而提取比例常数。我们通过将式 (4) 拟合到 Lumerical 3D-FDTD 中具有一定侧壁粗糙度的长为 7 μm 的 SOI 波导的散射损耗数据来验证这一点（图 4a）。粗糙度均方根（RMS）和相关长度分别任意设定为 $\sigma_{\mathrm{rms}} = 5$ nm 和 $L_{\mathrm{corr}} = 1\,\mu$m。随后使用这些参数在波导侧壁上生成随机的各向异性侧壁粗糙度 [40]。对宽度范围为 450 nm 至 850 nm 的波导进行了传播损耗仿真。拟合结果如图 4b 所示，我们的模型与 FDTD 仿真提取的散射损耗变化趋势高度吻合。

D. 热光效应

我们的模型还可以在无需任何热测量的情况下，完整描述任意波导几何结构的热光系数。波导模式的热光系数最重要的是需要了解限制因子，即模式功率限制在各组成波导材料中的比例。Kawakami 在 [41] 中指出，对于由 N 种材料构成的波导，每种材料分别具有折射率 n_k 和限制因子 Γ_k:

$$\sum_k^N \Gamma_k n_k^2 = n_{\mathrm{g}} n_{\mathrm{eff}} \tag{5a}$$

$$\sum_k \Gamma_k = 1, \tag{5b}$$

其中，式（5b）可由以下事实推导得出：由于功率守恒，所有限制因子的总和必须等于 1。

由此可推导出双材料波导（例如 SOI 线波导）的限制因子的闭式表达式：

$$\Gamma_{\text{core}} = \frac{n_g n_{\text{eff}} - n_{\text{clad}}^2}{n_{\text{core}}^2 - n_{\text{clad}}^2} \tag{6a}$$

$$\Gamma_{\text{clad}} = \frac{n_{\text{core}}^2 - n_g n_{\text{eff}}}{n_{\text{core}}^2 - n_{\text{clad}}^2}, \tag{6b}$$

其中 Γ_{core} 是波导芯层中的功率，Γ_{clad} 是包层中的功率。

接下来，我们必须得到一个表达式，用限制因子来描述热光效应对 n_{eff} 的影响。n_{eff} 的热光系数通常近似为

$$\frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial T} \approx \Gamma_1 \frac{\partial n_1}{\partial T} + \Gamma_2 \frac{\partial n_2}{\partial T} + \ldots, \tag{7}$$

其中 δ 表示数值的微小扰动，Γ_n 是模式在材料 n 中的限制因子，$\partial n_n/\partial T$是材料 n [42]的热光系数。尽管该方程被广泛使用 [43]–[45]，并且在某些情况下可能准确，但据作者所知，它从未被证明是普遍准确的近似。因此，我们从第一性原理出发，考虑波动方程 [46]的一般扰动：

$$\delta\left[\beta_{\text{eff}}^2\right] = \Gamma_{\text{core}} \frac{\omega^2}{c^2} \delta\left[n_{\text{core}}^2\right] + \Gamma_{\text{clad}} \frac{\omega^2}{c^2} \delta\left[n_{\text{clad}}^2\right], \tag{8}$$

其中 β_{eff} 是有效波数，Γ_{core} 是波导芯层中的限制因子，Γ_{clad} 是波导包层中的限制因子，n_{core} 和 n_{clad} 分别是芯层和包层的折射率。完成这一运算并与式 (1) 结合（详见附录 A），得到：

$$n_{\text{eff}}(\lambda, w, T) \approx n_{\text{eff},T_0}(\lambda, w) + \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial T}(T - T_0) \tag{9a}$$

$$\frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial T} = \Gamma_{\text{core}} \frac{n_{\text{core}}}{n_{\text{eff, T}_0}} \frac{\partial n_{\text{core}}}{\partial T} + \Gamma_{\text{clad}} \frac{n_{\text{clad}}}{n_{\text{eff, T}_0}} \frac{\partial n_{\text{clad}}}{\partial T}, \tag{9b}$$

其中，$n_{\text{eff},\ T_0}$ 是在某一参考温度下的 n_{eff} T_0。与以往文献相比，式（9）的关键改进在于，每个热光项都乘以材料折射率与有效折射率之比。随着芯层与包层之间的折射率对比度降低，我们的模型将趋近于式（7）。因此显然，在描述高折射率对比度材料时，例如硅光子学中普遍采用的 SOI 波导结构，我们的模型比式（7）更准确。

通过这些表达式，我们可以验证限制因子和热光系数模型。图 5a 将仿真的限制因子与模型在 1550 nm 下的预测结果进行了比较。模型中使用的硅和二氧化硅的光学特性直接取自[47]。模型与仿真的限制因子几乎完全吻合，表明我们的模型捕捉到了限制因子的一般行为（图 5a）。通过使用 Lumerical MODE 仿真 SOI 波导的 n_{eff} 随温度的变化，验证了热光系数模型（图 5b）。假设硅的热光系数为 $1.9 \times 10^{-4}\,\text{K}^{-1}$[48]，$SiO_2$ 的热光系数为 $1 \times 10^{-5}\,\text{K}^{-1}$ [49]。模型与仿真结果显示

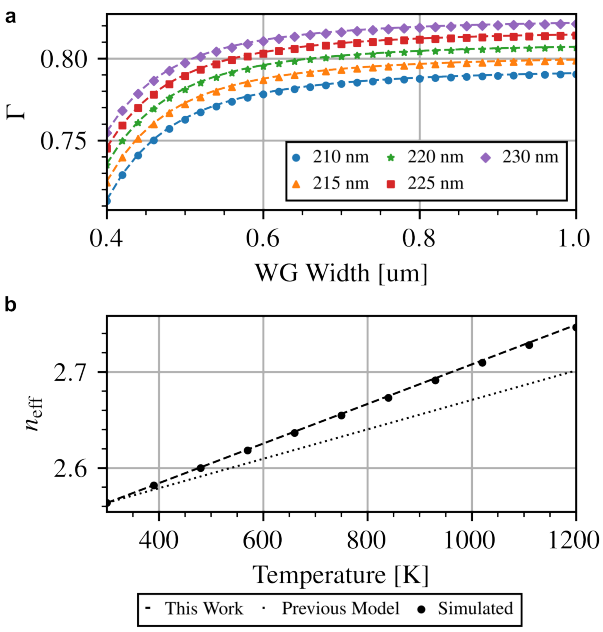


图 5. **a** 不同厚度下，建模（虚线）和仿真（散点）得到的限制因子随波导宽度的变化。**b,** 比较仿真结果（散点）、先前报道的模型（点线，式（7））和我们的工作（虚线，式（9））对 480 × 220 nm 波导的 n_{eff} 随温度变化的描述。

在 300–1200 K 范围内，两者高度吻合，尽管我们的模型不需要任何热仿真或测量数据。正如预测的那样，此前发表的热光效应模型（7）显著低估了 n_{eff}的预期变化。需要指出的是，在实际器件中，波导几何结构本身会因热膨胀而随 T 变化。可以通过将 w 建模为 T的函数来考虑这一点。然而，第五节-C 中的实验结果表明，假设几何结构的宽度恒定即可达到足够的精度。

拥有一个像这样的、在广泛条件下都准确描述热光效应的模型，将有助于开展更稳健的设计探索，例如评估光子波导加热器设计 [50],[51], 、表征微谐振器中的自热 [52], ，或研究系统中的环境温度波动所产生的影响。

E. 参数提取

紧凑模型的实际效用在很大程度上取决于相关的参数提取流程，该流程用于将模型与给定的晶圆代工工艺关联起来。在开发统计模型时，这一点尤为重要，因为准确的参数提取是确保工艺变化在模型中得到准确反映的唯一途径。一种常见的解决方案是利用干涉式光学滤波器的相位灵敏度——例如马赫-曾德尔干涉仪（MZIs）、微谐振器或阵列波导光栅（AWGs）——来监测晶圆上的工艺变化。无论选择哪种器件，一个共同的难点在于准确判断特定的干涉条纹位置对应于哪个特定的条纹级次 [25], [26], [53]。我们的方法基于

文献 [25] 和 [54], 中介绍的曲线拟合法，并增加了一些步骤，以将波导色散作为提取参数纳入其中。

参数提取的第一步是根据器件的波长扫描，对已制成的干涉仪的群折射率（n_g）进行表征。为此，将（1）重新整理为更合适的形式：

$$n_{\text{eff}}(\lambda) = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^2}\lambda^2 + B\lambda + C \tag{10a}$$

$$B = \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial \lambda} - \frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^2}\lambda_0 \tag{10b}$$

$$C = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^2}\lambda_0^2 - \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial \lambda}\lambda_0 + n_{\text{eff},0}, \tag{10c}$$

其中， B 和 C 是拟合参数，分别汇总了（1）中的 1st 阶和0th 阶项。按照 [54], 中所述的步骤，首先注意到，干涉器件的条纹条件可表示为

$$\phi = \frac{2\pi}{\lambda} n_{\text{eff}}(\lambda) L = 2\pi m, \tag{11}$$

其中， ϕ 是干涉臂之间的相位差， L 是干涉仪的光程长度， λ 是某个特定的条纹波长， m 是对应于该特定条纹级次的整数。为提取模型参数，需要对干涉器件进行波长扫描。完成扫描后，可使用峰值查找算法检测所有已检测到的干涉条纹的波长。接下来，需要建立一个函数，将条纹的相对位置与波导的 n_g 联系起来。为此，可以定义一个连续函数，使其在每个检测到的条纹位置处取整数值。令 m_0 表示位于 λ_0处、任意选定的参考条纹所对应的条纹级次。其他任一条纹的条纹级次 m 可相对于该参考条纹定义为

$$m = m_0 + \int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{dm}{d\lambda} \mathrm{d}\lambda = m_0 + n_{\mathrm{g}} L \cdot \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0}\right). \tag{12}$$

这个连续函数使我们现在能够将测量到的干涉条纹重新定义为适用于参数提取的形式。通过令$m = (m_0 + n)$，现在定义参考条纹变量 n 。将其代入式 (12) 得到：

$$n = n_g L \cdot \left(\frac{1}{\lambda_n} - \frac{1}{\lambda_0}\right), \tag{13}$$

其中，每个相对干涉条纹 n 都位于相应的波长 λ_n处。利用式 (13)，测量器件的 n_g 现在与测得的条纹位置直接相关。现在必须将此拟合方程扩展到我们特定的模型参数。波导的 n_g 定义为

$$n_g = n_{\text{eff}} - \lambda \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial \lambda}. \tag{14}$$

结合式 (10a)，可得到用我们的紧凑模型表示的 n_g 的表达式：

$$n_{\mathrm{g}} = C - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^2}\lambda^2. \tag{15}$$

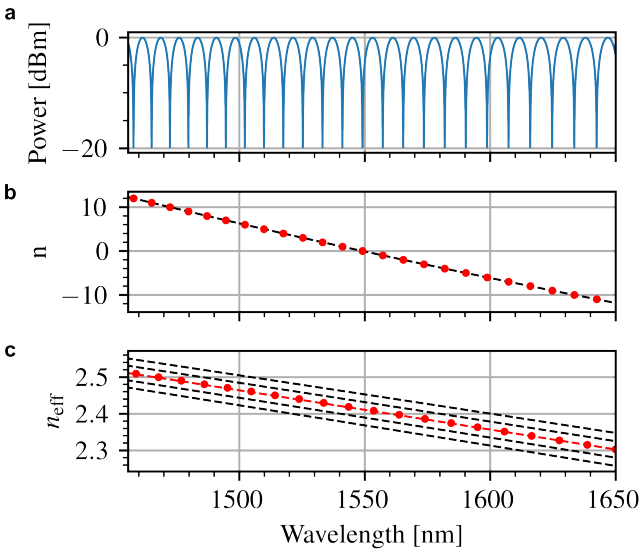


图 6. **a,** 用于参数提取的模拟马赫-曾德尔干涉仪所捕获的光谱。波导模式在 Lumerical MODE 中进行仿真，随后导出至 Lumerical INTERCONNECT 中的马赫-曾德尔干涉仪波导仿真模块。**b,** 对**a**中检测到的干涉条纹进行线性回归，以提取 n_g 。**c,** 可能的 n_{eff} 解（黑色虚线），以及由**b**中提取的 n_g 确定的实际解（红色）。

将式 (15) 代回式 (13)，可推导出一个与普通最小二乘回归兼容的表达式：

$$n = C\Lambda_C - \frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^2}\Lambda_S \tag{16a}$$

$$\Lambda_C = L \cdot \left(\frac{1}{\lambda_n} - \frac{1}{\lambda_0}\right) \tag{16b}$$

$$\Lambda_S = \frac{L}{2} \cdot \left(\lambda_n - \frac{\lambda_n^2}{\lambda_0}\right), \tag{16c}$$

其中， $[\Lambda_C, \Lambda_S]$ 为解释变量。对 n 和 $[\Lambda_C, \Lambda_S]$ 进行普通最小二乘回归，可得式（10）中的三个拟合参数中的两个。最后，结合式（11）和式（10a）即可计算出 B ：

$$B = \frac{m}{L} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial \lambda^2}\lambda_m - \frac{C}{\lambda_m}, \tag{17}$$

其中，唯一的不确定性在于，每个测得的干涉条纹 λ_m对应的条纹级次 m。根据式（17）确定 B 后，可利用式（10b）和（10c）确定式（1）中的原始拟合参数。需要注意的是，由于 λ_m 精确值存在分辨率导致的不确定性，每个检测到的干涉条纹（m、 λ_m）位置都会使 B 值产生极小的变化。为获得最佳估计，应将从每个测得的干涉条纹 λ_m 取得的所有 B_m 值求平均。

为在理想条件下验证此方法，我们在 Lumerical INTERCONNECT 中仿真了一个由 480 nm × 220 nm 波导构成的马赫-曾德尔干涉仪。为确保准确性，首先在 MODE 中仿真波导的 n_{eff} ，然后将其导出到 INTERCONNECT 中的 MODE 波导元件。由于马赫-曾德尔干涉仪的半高全宽（FWHM）不会影响提取出的 n_{eff}，因此任意假设波导的损耗为 2.5 分贝/厘米，并选择耦合系数以确保达到临界耦合。仿真的马赫-曾德尔干涉仪光谱

如图6a所示。使用峰值查找算法提取条纹位置。任意选取最接近扫描中心的条纹作为 $n = 0$。使用式（16），普通最小二乘回归得出 $\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^2 = -0.136\ \mu\text{m}^{-2}$ 和 $C = 3.9215$ （图6b）。据此，图6c绘出了n_{eff} 的解族。每个特定解对应于对检测到的条纹级次的不同猜测，例如 $m_0 = 52$与 $m_0 = 53$。图6c中绘制的每个 n_{eff} 解之间的间隔由干涉仪的自由光谱范围（FSR）决定；自由光谱范围越大，解之间的间隔越宽。

为确定参考条纹的正确级次，我们利用这样一个事实：根据第二节中进行的仿真，我们知道在参考条纹位置，波导几何结构的 n_{eff} 为 2.411。第三节将说明如何提高这一估算的精度，以避免这项仿真引入的误差。由此可得，参考条纹级次为 $m_0 \approx 114.03$。由于条纹级次必须为整数，因此将结果四舍五入为最接近的整数 114。结合式 (10a)–(10c)，可得原始拟合系数为 $\partial n_{\text{eff}}/\partial\lambda = -1.078\ \mu\text{m}^{-1}$ 和 $n_{\text{eff},\ 0} = 2.411$。为评估提取的精度，我们将提取结果与仿真所得 n_{eff}的 σ_{error} 之间的相对误差定义为：

$$\sigma_{\text{error}} = \sqrt{\frac{\int \left(n_{\text{eff, model}} - n_{\text{eff, sim}}\right)^2 \mathrm{d}\lambda}{\int n_{\text{eff, sim}}^2 \mathrm{d}\lambda}}, \tag{18}$$

其中，$n_{\text{eff,\ sim}}$ 是 MODE 仿真得到的有效折射率，用作量化我们方法精度的参考；$n_{\text{eff,\ model}}$ 则是将提取方法应用于仿真的马赫-曾德尔干涉仪后得到的结果。评估后发现，总相对误差为 0.017%。由于参考条纹级次正确，剩余的模型误差可归因于使用式 (16a)–(16c) 进行初始回归拟合时产生的精度不足。

III. 工艺变异下更稳健的 n_{eff} 提取

提取的可靠性对参考条纹级次的猜测值非常敏感。对于第二节-E中的示例，我们利用关于参考条纹处 n_{eff} 的先验知识来估计其级次。因此，假设的波导尺寸与实际尺寸之间的任何偏差都可能引入误差。注意到初始级次估计值取整到了最接近的整数，我们可以利用式（11）定义一个边界，超过该边界后，我们猜测的条纹级次将不正确 [25]:

$$|\Delta m| = |n_{\text{eff, actual}} - n_{\text{eff, guess}}| \leq \frac{\lambda_{m_0}}{2L}. \tag{19}$$

我们可以看出，要提高对猜测条纹级次的可信度，必须提高 n_{eff} 猜测的准确性，或缩短干涉光程。正如第二节-E所述，我们的提取方法首先通过光学扫描直接提取给定干涉仪的 n_g。因此，工艺变化会表现为提取出的 $\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^2$ 和 C值发生变化。通过在所有测得的裸片、晶圆和批次中，对相同版图宽度的多个器件进行测量，可以通过对提取出的拟合

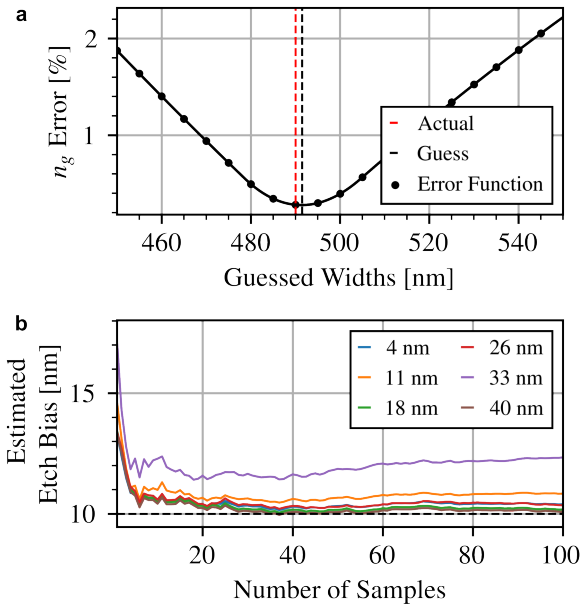


图 7. **a,** 一个样本的 n_g 误差函数图。误差函数在约 491.5 nm 处呈现最小值，与实际波导宽度 490 nm 非常接近。**b,** 对不同数量的样本取平均时，刻蚀偏差估计的收敛情况。

参数取平均值，消除随机宽度和厚度变化的影响。当样本量足够大时——所需样本量取决于工艺变化的严重程度——标称参数与平均参数之间任何剩余的偏差，都将源于波导宽度上的系统性刻蚀偏差。因此，我们提出通过基于光子模式求解器（例如 Lumerical MODE）的结果建立一个初步 n_{eff}模型，来估算这种刻蚀偏差。使用该模型，可以通过最小化误差函数求得等效波导宽度

$$\min_{w} \sqrt{\frac{\int \left[n_{\text{g, model}}(w,\lambda) - n_{\text{g, meas}}(\lambda)\right]^2 \mathrm{d}\lambda}{\int n_{\text{g, meas}}^2(\lambda)\mathrm{d}\lambda}}, \tag{20}$$

其中，$n_{\text{g,\ meas}}$ 是利用平均提取参数得到的 n_g 提取模型，而$n_{\text{g,\ model}}$ 是基于仿真的、与宽度相关的 n_{eff}先验模型。随后，可将等效波导宽度的 n_{eff} 代入先验模型，以提供更准确的条纹级次估计。通过这种方式，无论建模的波导组成是否与虚拟器件组成一致，我们都能提高有效折射率猜测值的准确性。

现在，我们将讨论在存在其他系统性非理想因素时，该优化流程的稳健性及其进行刻蚀偏差校正的能力。为此，我们需要获得 n_{eff} 的“真实值”，这可通过在 Lumerical MODE 中模拟所有非理想因素来得到。随后，我们使用 Lumerical INTERCONNECT 进行参数提取。将提取出的 n_{eff} 与 n_{eff} 的已知模拟值进行比较，即可直接评估我们方法的稳健性。

A. 统计几何变化

为测试提取流程在工艺偏差下的准确性，我们对

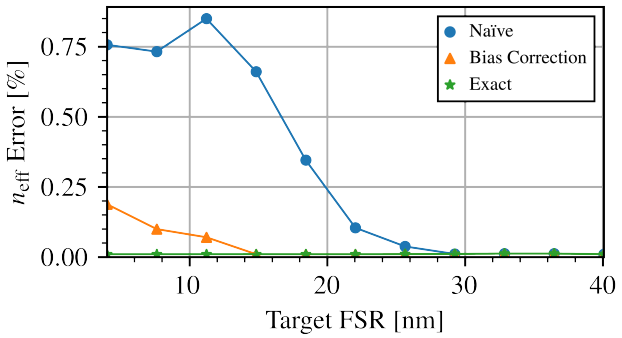


图 8. 每个仿真器件在仿真带宽内的 n_{eff} 平均误差。每个自由光谱范围均采用 100 组相对于目标波导几何结构的随机偏差进行仿真。假设宽度和厚度均为 $3\sigma = 5$ nm。

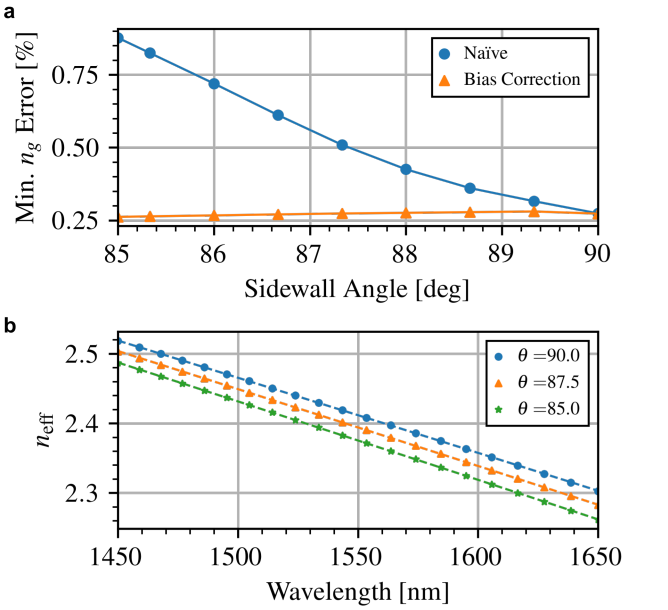


图 9. **a,** n_g 相对误差与仿真的侧壁角的关系。**b,** 不同侧壁角下仿真结果（散点）与估算结果（虚线）的对比 n_{eff} 。

波导几何结构进行了 100 次随机变化仿真。假定波导的标称尺寸为 480 x 220 nm。为模拟系统性变化，假定每个波导的刻蚀偏差均为 +10 nm。通过使每个器件的波导宽度和厚度分别产生 $3\sigma = 5$nm 的正态分布变化来模拟随机波动，因为该数值与已报道的几何变化最坏情况值一致 [25]–[27]。随后将每个模式分布导出至 INTERCONNECT，并针对自由光谱范围为 4-40nm 的干涉仪进行仿真，以研究其对提取误差的影响。图 7a 展示了其中一个样本的误差函数，其真实宽度为 490nm。图 7b 展示了对于若干种自由光谱范围设计，随着器件样本量增加，刻蚀偏差估计的收敛行为如何变化。可以看出，所有自由光谱范围设计都能使刻蚀偏差估计值与实际值的误差控制在 2 nm 以内，这表明我们的刻蚀偏差校正具有实用价值。

图 8 展示了每个样本的平均误差与干涉仪自由光谱范围之间的关系。误差在三种情形下测量：i.)“na¨ıve”情形，即假设不存在刻蚀偏差来估计条纹级次；ii.) 基于 30 个测量样本，采用我们的刻蚀偏差预测方法估计条纹级次；以及 iii.) 使用仿真得到的精确 n_{eff} 来确定实际条纹级次。最后一种情形的每样本平均误差约为 0.017%，代表前两种情形的误差下限。该误差下限完全由初始 n_g 回归中的误差以及所选行为模型的任何固有限制决定。随着自由光谱范围增大，两种情形下的每样本平均误差都稳步降低，直至达到上述误差下限。这与（19）一致，表明较大的自由光谱范围对应着更大的条纹级次估计容错范围。对于朴素方法和偏差补偿方法，自由光谱范围都存在一个临界值，超过该值后，所有样本的条纹级次都能得到正确估计。然而，很明显，估计是否存在刻蚀偏差可大幅提高条纹级次精度；与朴素方法相比，只需小得多的自由光谱范围便能达到误差下限。

B. 侧壁角

现在我们来考察参数提取用于具有一定侧壁角的波导时的表现。此前，我们的仿真假设波导没有侧壁角。然而，实际波导通常会偏离这一理想 [55]。为研究偏差校正方法在这些条件下的表现，我们对一条与之前设计相同、标称尺寸为（480 × 220 nm）的 SOI 波导进行了仿真，设置的侧壁角从 85 度到 90 度不等，因为这是代工厂中常见的范围 [25], [56]。由于这里只研究整体行为，因此未纳入宽度和厚度变化。如图 9a 所示，在刻蚀偏差估计步骤中优化得到的误差函数最小值，对于所有考察的侧壁角都大致保持不变。即使基本几何形状不同，我们的模型仍能非常准确地预测有效折射率。我们认为，这是因为优化流程选取了一个与提取出的 n_g 轮廓相匹配的“等效”波导宽度。正如图 9b 所示，该等效宽度似乎总能产生限制因子和有效折射率相近的波导设计，因此其行为也相似。

C. 材料变化

这种提高猜测的 n_{eff}准确性的方法，依赖于这样一个假设：所制造波导的材料特性通常与用于构建模型的仿真数据中所采用的材料特性相符。然而在实际中，波导材料假设的光学特性与实际光学特性之间可能存在很大偏差。作为一种变通方法，作者建议提取并构建一个以波导 $\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^2$的色散为基础的模型，因为这一波导参数

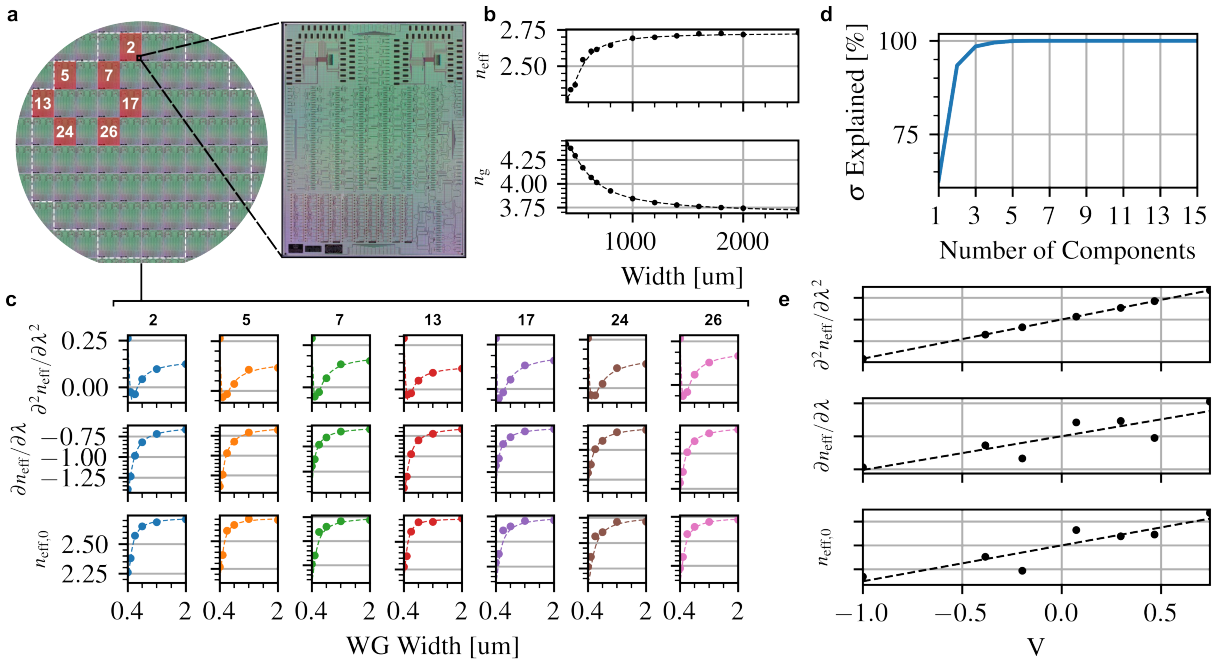


图 10。**a**，定制 300 毫米晶圆上已测量光刻掩模版的示意图，以及一张放大的显微图像，显示包含 135 个马赫-曾德尔干涉仪的芯片。**b**，根据器件测量提取的标称 n_{eff} 和 n_g 模型。**c**，对每个受测芯片进行基于宽度的模型提取。**d**，纳入的主成分数量与总模型参数 μm 方差 σ 解释量之间的关系图。**e**，n_{eff}的与宽度无关的子参数图. $_0$、$\partial n_{\text{eff}}/\partial\lambda_0$和 $\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda_0^2$ 随 V变化的关系。

可以从测量中精确提取。随后，可以用 $\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^2$ 的标称模型替换（20）中的 n_g，以估算测量器件的宽度。然后，可以将此宽度与仿真数据结合，为其指定一个 n_{eff}猜测。尽管作者尚不清楚此类技术的局限性，但第五节中的实验结果表明，该方法足以描述所有测量器件的 n_{eff}、损耗和热光效应。

IV. 提取局部参数变化

工艺变化（例如厚度变化、包层和芯层折射率变化）会体现为式（1）中构成模型的十五个模型参数发生变化。要捕捉这些变化，必须能够在局部提取其数值；仅观察任何单个器件的性能是无法做到这一点的。以往文献通常假设，大多数工艺参数在整个晶圆上缓慢变化 [25]。这意味着构成模型的参数值也会沿晶圆缓慢变化。因此，作者提出分析彼此相邻的多种波导宽度设计的性能，以局部提取全部十五个模型参数。每次局部提取都作为相应模型参数的观测值，并在整个晶圆上对这些参数进行跟踪。

创建统计模型最简单的方法，是将 15 个子参数分别视为相互独立的统计变量。然而，这并不理想，因为每增加一个变量，为了获得准确的蒙特卡洛仿真结果，所需的迭代次数都会大幅增加。为了尽可能降低模型复杂度，我们希望将每个子参数表示为一组变量的线性函数：

$$p_{ni} = p_{ni,\text{avg.}} + \vec{s}\cdot\vec{V}. \tag{21}$$

$\vec{V}$ 是表示工艺变化的变量向量。降低模型复杂度相当于缩小 V的规模。 $\vec{s}$ 描述给定参数对 V中各个元素的相应灵敏度。为了缩小 V的规模，我们利用了这样一个事实：提取出的各个模型参数之间存在很强的相关性。这是因为各模型参数的变化有着共同的来源，例如晶圆厚度、退火时间等。因此，我们提出使用主成分分析（PCA）来降低模型复杂度。这是一种将多个可能相关的变量转换为数量更少的不相关变量（即主成分）的技术。所选主成分就是构成 V的$\vec{}$变量。所选主成分就是构成 V的变量。 V 中的$\vec{}$主成分数量可灵活调整（详情见附录B）。由于我们的波导几何结构主要取决于两个工艺变量——波导宽度和厚度，因此我们仅使用第一主成分，以保留其物理解释。由此得到的模型将有效折射率表示为宽度和工艺变化的函数：Δw 表示宽度变化，另一个变量我们称为 V，表示包括厚度变化在内的其他工艺变化的综合影响：

$$n_{\text{eff,model}}(w+\Delta w, V). \tag{22}$$

随后，在每个测量器件的局部优化和重新提取中使用该完整的 n_{eff} 模型。代价函数

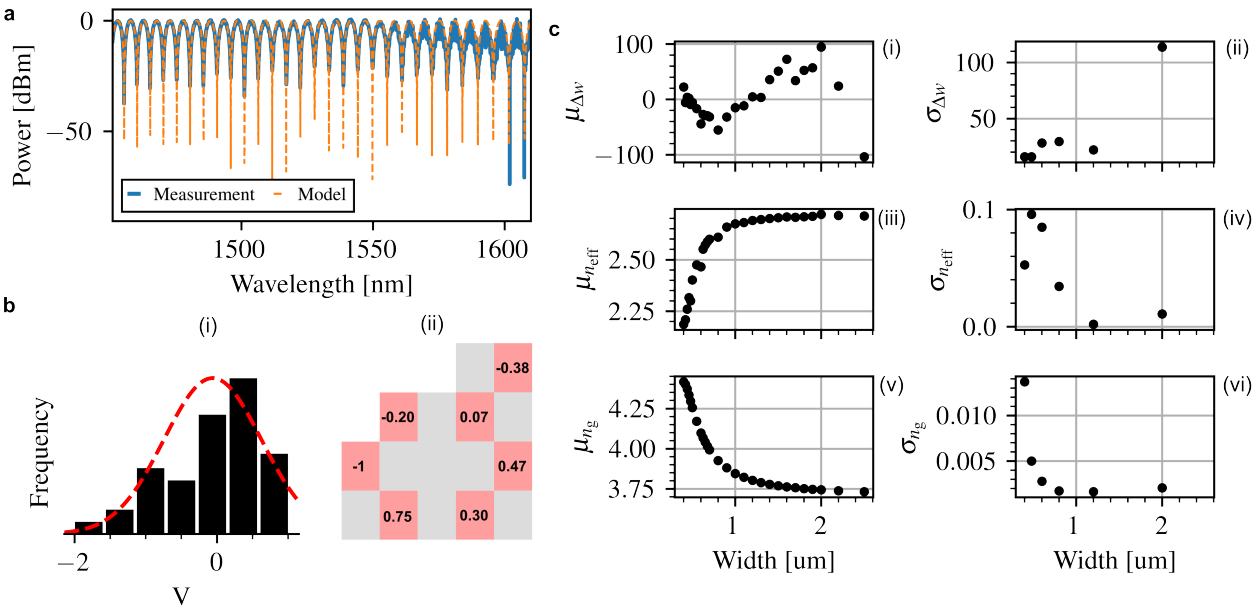


图 11。**a**，带有 $\Delta L = 100\ \mu$m 的 480 nm 波导马赫-曾德尔干涉仪的实测光谱与建模光谱。**b**，（i）提取的 V 数据直方图，并叠加其对应的高斯分布（红色虚线）。（ii）晶圆上每个实测芯片的 V 平均值空间分布图。**c**，Δw、n_{eff} 和 n_g 的均值和标准差。

定义为相对 n_{eff} 和 n_g 误差之和，分别用于匹配测得的干涉条纹位置和自由光谱范围。

因此，我们可以采用两阶段直接统计紧凑模型提取流程 [24]。第一阶段，我们使用组提取，获得均匀器件的完整十五个参数。第二步，我们针对大量器件测量集合中的每个器件，重新提取一部分模型参数。这种方法能够最准确地表示器件性能在晶圆上的变化情况，而无需对变化来源、统计分布、相关性以及变化导致的模型灵敏度作出任何假设。与其他方法相比，这种方法的一个固有优势是，它还有望用于建模其他波导几何结构。这一潜力源于模型设计人员可以根据对关键工艺变量的物理假设来选择主成分的数量，或优化参数方差的解释比例（参见附录B）。尽管还需要进一步研究来证实这一点，但该方法的灵活性十分可观，前景广阔。

V. 实验演示

我们测量了 7 个光刻掩模版，每个掩模版包含 135 个马赫-曾德尔干涉仪，采用 27 种不同的波导宽度（w），范围为 400 nm 至 2500 nm，以及 5 种不同的臂长延迟（ΔL），范围为 100 nm 至 500 nm。这些器件通过 AIM Photonics 在定制的 300 毫米整片晶圆上制造（图 10a）。在掩模版 2 上测量了全部 135 个马赫-曾德尔干涉仪，而在其余每个掩模版上测量了较小的子集，即 30 个马赫-曾德尔干涉仪，总计测量了 315 个器件。相同波导宽度的器件相邻放置，以尽量减小局部工艺偏差对器件性能的影响。所有马赫-曾德尔干涉仪的波导标称高度均为 220 nm，并配有为准TE偏振设计的光栅耦合器，用于光学 I/O。每个马赫-曾德尔干涉仪的两条臂均由对称的波导弯曲段构成，以减轻弯曲对 n_g 的影响。对于波导宽度超过单模截止宽度的器件，采用欧拉弯曲段以维持单模工作并实现高模式隔离 [18]。通过可调谐激光器以 10 pm 的分辨率在 1450–1610 nm 范围内进行扫描，从而表征每个马赫-曾德尔干涉仪的透射光谱。

A. 标称提取

如图 10b 所示，通过对所有测量器件的提取参数取平均，创建标称模型 n_{eff}。我们将第二节-E 中描述的提取方法应用于每个采集的透射光谱。利用第二节中所述的仿真数据构建初步模型，以估计每种波导宽度变化对应的预期器件自由光谱范围。随后将该估计的自由光谱范围输入峰值查找算法，以提取 n_g 参数，进而估计每个测量器件的干涉条纹级次，从而得到其 n_{eff}。由于测量的 n_g 与仿真值存在很大偏差，因此采用第三节-C 中描述的技术：基于 $\partial^2 n_{\text{eff}}/\partial\lambda^2$ 创建初步模型，并利用该模型估计波导几何结构，从而估计干涉条纹级次。随后使用式 (10a)–(10c) 推导出全部三个泰勒展开参数，并针对整个晶圆上每种宽度变化分别取平均，以创建标称实验模型。随后，对于彼此距离较近的器件，再次进行局部提取，以获得模型子参数的局部值（图 10c）。

图 10d 显示，根据（31），第一个主成分可以解释晶圆上子参数值总方差的 62.7%。作者认为，由于 V 与决定器件行为的三个模型参数之间存在明确联系

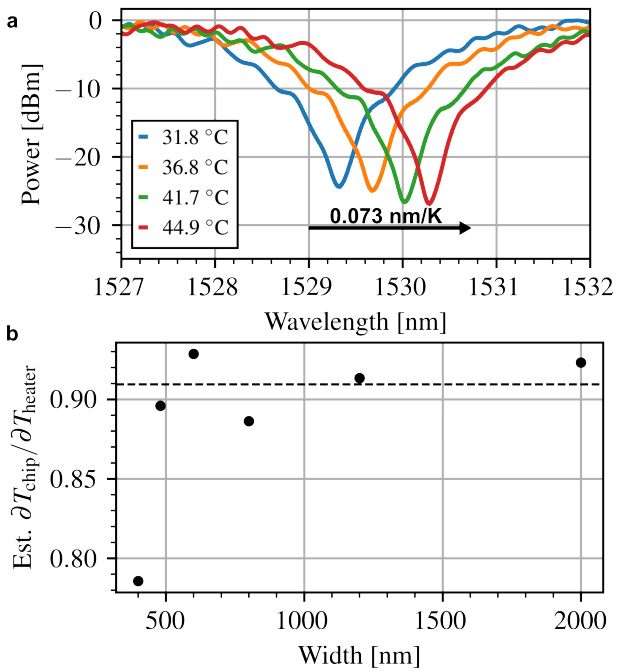


图 12. **a**，测得的 MZI器件的热光响应。**b**，使用 (9) 得出的 $\partial T_{\text{chip}}/\partial T_{\text{heater}}$ 随波导宽度的变化。

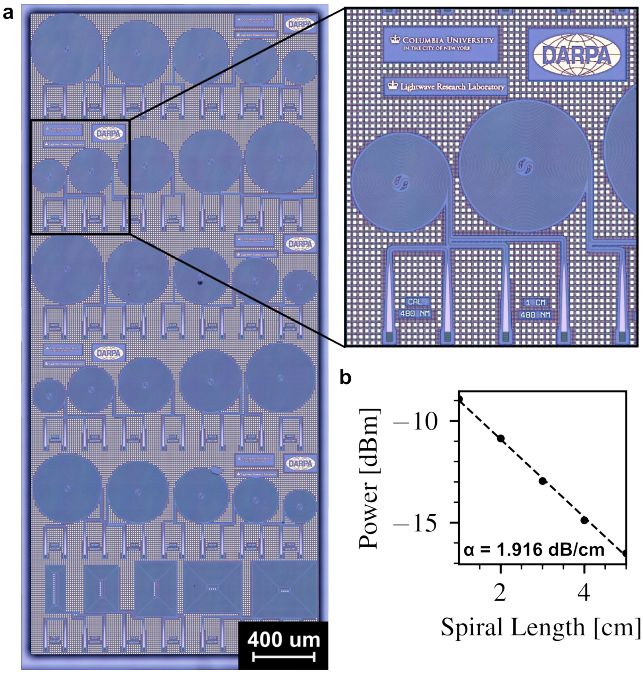


图 13. **a**，用于测量宽度相关损耗的波导螺旋测试结构芯片显微图。插图：其中三个测试结构的放大图。**b**，440 nm 波导的传播损耗测量值及拟合数据。

这些参数为 $w \to \infty$，因此该主成分可能捕捉了与宽度无关的方差来源，例如厚度变化（图 10e）。作者接下来将展示，这种方法能够构建一个足够稳健的模型，既能捕捉统计行为，又能实现清晰物理解释这一目标。

B. 统计提取

使用 Nelder-Mead算法 [58]对相对 n_{eff} 误差与 n_g 误差之和进行优化。将图 10c 中局部提取得到的波导绘制宽度和 V 用作 w 和 V的初始猜测值。尽管收集到的数据样本量有限，但基于我们的模型，已经可以观察到 Δw 中若干显著的初步统计趋势。研究发现，对每次局部优化提取得到的 n_{eff} 进行建模后，测量所得与模型预测的 MZI性能十分吻合。提取的 V值呈现出预期的物理行为，即工艺参数在晶圆上缓慢变化（图 11b）。局部优化得出的总器件标准差、平均芯片内器件标准差和平均局部器件标准差 σ_V 分别为 0.603、0.386 和 0.167，表明器件间的距离与其提取的 V 值存在相关性。如图 11b 插图所示，对于彼此距离较近以及距晶圆中心等距的芯片，其 V 均值往往相近。

将 V 的工艺变化与宽度变化 Δw 解耦后，便可提取宽度相关的系统性效应，如图 11c(i) 所示。我们的方法估计，平均误差较小的波导宽度，其 $\sigma_{\Delta w}$ 通常也较小（图 11c(ii)）。这也解释了为什么对于 $w = 2\mu$ m， n_{eff} 的变化比对于 $w = 1.2\mu$ m 更大，从而让我们得以了解哪种波导几何结构最能同时降低 $\sigma_{n_{\text{eff}}}$ 和$\sigma_{n_{\text{g}}}$。只有通过对局部区域内所有器件性能进行群组基准测试，电路设计人员才能获得这类工艺方面的洞见。

C. 热光效应模型验证

为验证第二节第 II-D 节中建立的热光效应模型，我们重新表征了图 10a 所示芯片中单个芯片的 MZI 透射光谱。热学表征通过将 Thorlabs TLK-H 聚酰亚胺加热器粘贴在芯片载台侧面进行。使用 Thorlabs TC200 温度控制器设定加热器温度。芯片与芯片载台之间涂有导热膏，以尽可能减小芯片与加热器之间的热阻。一个受测马赫-曾德尔干涉仪的热响应如图 12 所示。在每个温度步进下跟踪最接近 1550 nm 的干涉条纹，并将其随温度绘制，以提取 $\partial\lambda/\partial T$。然后，将该值与通过对式 (11) 中的 λ 关于温度求导而得到的 $\partial\lambda/\partial T$ 预测值进行比较

$$\frac{\partial\lambda}{\partial T_{\text{chip}}} = \frac{\dfrac{\Delta L}{m}\dfrac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial T_{\text{chip}}}\dfrac{\partial T_{\text{chip}}}{T_{\text{heater}}}}{1 - \dfrac{\Delta L}{m}\dfrac{\partial n_{\text{eff,model}}}{\partial\lambda}}, \tag{23}$$

其中， m 是追踪的条纹的阶数， ΔL 是两条臂之间的光程差， $\partial T_{\text{chip}}/\partial T_{\text{heater}}$表示从加热器到芯片本身的传热效率。作者只知道

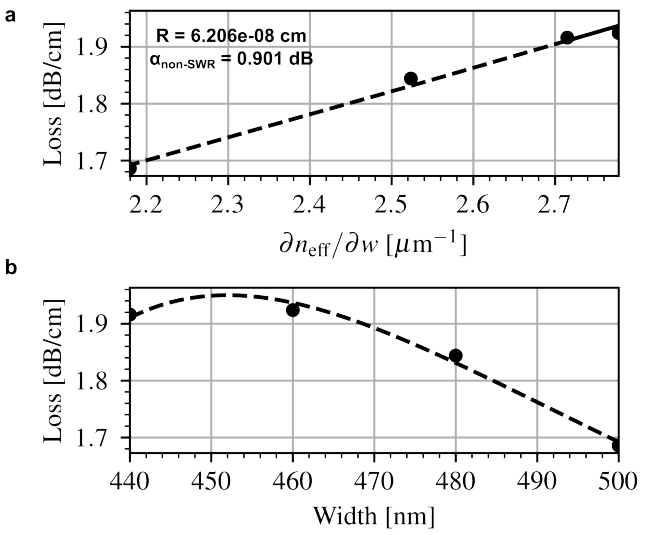


图 14。**a**，测量值（散点）和模型值（曲线）的传播损耗与 $\partial n_{\text{eff}}/\partial w$ 的关系图。拟合斜率表示公式 (4) 中的 R，而截距表示非 SWR 损耗。**b**，测量值（散点）和模型值（曲线）的传播损耗与波导宽度的关系图。

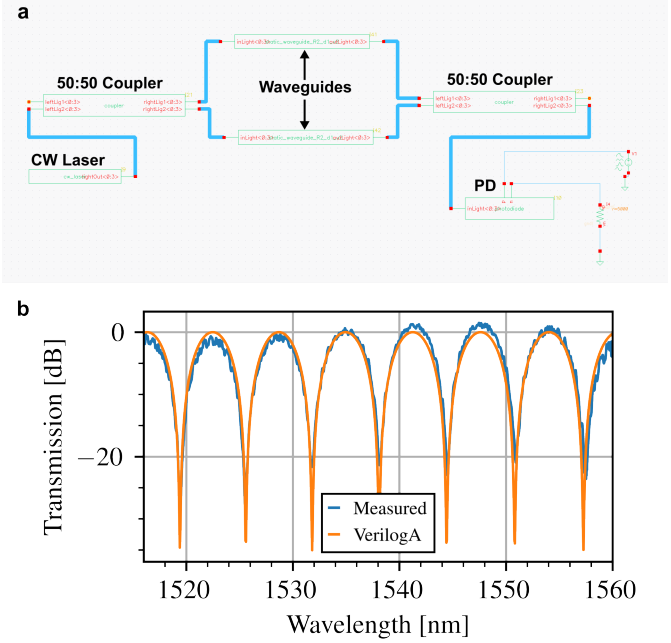


图 15. **a**，MZI测试电路的 Cadence Virtuoso 原理图。所有电路模型均使用 Verilog-A 编写。光学激励由连续波（CW）激光器提供，并通过光电探测器（PD）进行检测。**b**，对于具有 $w = 2$ μm 和 $\Delta L = 100$ μm 的 MZI，实测性能与仿真性能的比较。

电阻加热器的温度，而不知道芯片本身的温度，因此引入了最后这一项。我们知道，加热器无法将芯片温度升高到高于其自身温度的值。提取出的 Δw 和 V 参数用于计算式（23）。

平均而言，测得的热光效应为我们模型 (9) 预测值的 0.91× 。除 400 nm 外，该数值与波导几何结构无关（图 12b）。据推测，400 nm 下的这一误差是因为该宽度足够接近截止条件，导致我们的模型失去准确性。相比之下，测得的热光效应为先前报道模型预测值的 1.21× 。这意味着芯片的温度变化大于加热器的温度变化，或者先前报道的模型不正确。光子集成电路的温度变化不可能大于加热器的温度变化，因此旧模型的预测显然不符合物理规律。

D. 散射损耗模型验证

为了验证散射损耗模型，我们测量了一个芯片上的25个螺旋损耗结构。这些结构包含5种不同的波导宽度（w），范围为400 nm至500 nm，以及5种不同的螺旋长度（ΔL），范围为1 cm至5 cm；它们由AIM Photonics在定制的300 毫米整片晶圆上制造（图13）。同样，所有螺旋结构的标称波导高度均为220 nm，并采用针对准TE偏振设计的光栅耦合器实现光学输入/输出。我们记录了每种螺旋长度对应的损耗，并对数据进行线性方程拟合。拟合直线的斜率即为相应波导宽度下的传播损耗。模型拟合结果如图14所示。我们采用第五节B部分构建的模型来建立 $\partial n_{\text{eff}}/\partial w$的模型。将模型预测的 $\partial n_{\text{eff}}/\partial w$与测得的传播损耗拟合，得到比例常数 $R = 6.206 \times 10^{-8}$ cm（图14a）。损耗的截距拟合值可解释为非SWR损耗的总和，其数值为0.901 分贝。图14b显示，我们的模型与数据高度吻合，预测440 nm和460 nm波导具有相近的传播损耗。如第五节B部分所述，400 nm和420 nm波导宽度可能都接近截止条件。由于公式（4）仅在远离该条件时才有效，因此图中未包含这些数据点。

E. Verilog-A 实现

为展示其与电子-光子协同仿真的兼容性，我们在 Cadence Virtuoso 中使用 Verilog-A 实现了该电路模型（图15a）。由于 Verilog-A 本身不支持光学信号，因此我们基于先前报道的演示 [32], [59],[60]编写了一些兼容性代码，并构建了一个小型光子器件模型库。

VI. 结论

总之，我们展示了一种新颖的紧凑模型，可大幅提升硅光子集成电路的电路级仿真能力的准确性。与以往侧重于提供可供制造工程师使用的计量信息的工作不同，[26], [61], [62], 我们提出了这一工艺设计套件模型，将其作为适用于真实测量电路仿真和优化的工具。通过利用其底层物理行为并进行组提取，以局部提取工艺变化，我们展示了一个完全由测量数据驱动的 n_{eff} 模型构建框架。结果表明，该模型能够准确描述所测集成波导的相位、

损耗和热光行为，覆盖 4× 光学带宽以及以往工作中报告的 80×波导宽度范围。我们认为，本工作相较于此前成果所取得的进展，有望支持基于波导的工艺设计套件组件的开发，并推动下一代光子集成电路的稳健优化。

VII. 致谢

本研究部分得到了美国先进研究计划局能源部通过 ENLITENED资助项目 DE-AR000843 提供的支持，另有部分经费来自美国国防部高级研究计划局的 PIPES资助项目 HR00111920014。作者感谢 AIM Photonics 提供芯片制造服务。

附录

A. 热光模型的推导

从式 (8) 出发， [46], 研究热扰动对有效折射率的影响。进行这一扰动分析并应用链式法则，可得：

$$2\beta\frac{\partial\beta}{\partial T}=2\Gamma_{\text{core}}\frac{\omega^2}{c^2}n_{\text{core}}\frac{\partial n_{\text{core}}}{\partial T}+2\Gamma_{\text{clad}}\frac{\omega^2}{c^2}n_{\text{clad}}\frac{\partial n_{\text{clad}}}{\partial T}. \quad (24)$$

注意到 $\beta=\omega n_{\text{eff}}/c$ 并代入上式后，关系式可简化为式 (25)。结合式 (1) 可得：

$$n_{\text{eff}}=n_{\text{eff, T}_0}+\frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial T}(T-T_0) \quad (25a)$$

$$\frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial T}=\Gamma_{\text{core}}\frac{n_{\text{core}}}{n_{\text{eff}}}\frac{\partial n_{\text{core}}}{\partial T}+\Gamma_{\text{clad}}\frac{n_{\text{clad}}}{n_{\text{eff}}}\frac{\partial n_{\text{clad}}}{\partial T}. \quad (25b)$$

注意到 n_{eff} 出现在等式两边。两边乘以有效折射率后，可得到一个二次方程，其解为：

$$n_{\text{eff}}=\frac{n_{\text{eff, T}_0}}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{n^2_{\text{eff, T}_0}+4n'(T-T_0)} \quad (26a)$$

$$n'=\Gamma_{\text{core}}n_{\text{core}}\frac{\partial n_{\text{core}}}{\partial T}+\Gamma_{\text{clad}}n_{\text{clad}}\frac{\partial n_{\text{clad}}}{\partial T}. \quad (26b)$$

注意到对于热光系数的典型取值，$n^2_{\text{eff, T}_0}\gg 4n'$，即可简化该表达式。由此可知，平方根项的变化近似呈线性。平方根项的一阶泰勒展开为：

$$n_{\text{eff, T}_0}+\frac{1}{2}\frac{4n'}{\sqrt{n^2_{\text{eff, T}_0}+4n'(T-T_0)}}(T-T_0). \quad (27)$$

再次注意到 $n^2_{\text{eff, T}_0}\gg 4n'$，式 (27) 可简化为：

$$n_{\text{eff, T}_0}+\frac{2n'}{n_{\text{eff, T}_0}}(T-T_0). \quad (28)$$

将（26）中的平方根项替换为该表达式并化简，即可得到（9）。

B. 主成分分析

首先，我们根据局部子参数提取列表构造一个矩阵**X**，其中每一列代表一个模型参数，每一行则是对该参数的一次观测：

$$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\frac{\partial^0 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^0}_{0,1} & \frac{\partial^0 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^0}_{1,1} & \cdots & \frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^2}_{4,1}\\ \frac{\partial^0 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^0}_{0,2} & \frac{\partial^0 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^0}_{1,2} & \cdots & \frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^2}_{4,2}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \frac{\partial^0 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^0}_{0,n} & \frac{\partial^0 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^0}_{1,n} & \cdots & \frac{\partial^2 n_{\text{eff}}}{\partial\lambda^2}_{4,n}\end{bmatrix}. \quad (29)$$

随后根据 **X** 构造协方差矩阵 **S**，并求出其特征向量：

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}\vec{v}_0\\ \vec{v}_1\\ \vdots\\ \vec{v}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\vec{v}_0\\ \vec{v}_1\\ \vdots\\ \vec{v}_n\end{bmatrix}^{-1}, \quad (30)$$

其中，$[v_0,v_1,\cdots,v_n]$ 列出了特征向量，$[\lambda_0,\lambda_1,\cdots,\lambda_n]$ 是它们对应的特征值。相关矩阵的特征向量表示方差最大的轴的方向（即信息量最大的方向）。每个特征值 λ_i 都与其对应主成分v_i所捕获的方差量成正比。选择特征值最大的特征向量，可以在牺牲一定精度的情况下降低数据维度。主成分所解释的变异性百分比计算如下：

$$\frac{\sum_{i=0}^{M}\lambda_i}{\sum_{i=0}^{N}\lambda_i}, \quad (31)$$

其中，λ_i 是每个特征向量对应的特征值，M 是设计者选择纳入的主成分数量，N 是主成分的最大数量。

参考文献

[1] A. Rizzo, S. Daudlin, A. Novick, A. James, V. Gopal, V. Murthy, Q. Cheng, B. Y. Kim, X. Ji, Y. Okawachi, M. van Niekerk, V. Deenadayalan, G. Leake, M. Fanto, S. Preble, M. Lipson, A. Gaeta, and K. Bergman, 《拍比特级硅光子互连与集成克尔频率梳》, *IEEE*量子电子学精选主题期刊, 第29卷, 第1期: 非线性集成光子学, 第1–20页, 2023年。[2] Q. Cheng、M. Bahadori、M. Glick、S. Rumley和K. Bergman, 《数据中心光学技术的最新进展：综述》, *Optica*, 第5卷, 第11期, 第1354–1370页, 2018年11月。[3] M. Wade、E. Anderson、S. Ardalan、P. Bhargava、S. Buchbinder、M. L. Davenport、J. Fini、H. Lu、C. Li、R. Meade 等, 《Teraphy：一种用于低功耗、高带宽封装内光学输入/输出的芯粒技术》, *IEEE Micro*, 第40卷, 第2期, 第63–71页, 2020年。[4] G. Moody、V. J. Sorger、D. J. Blumenthal、P. W. Juodawlkis、W. Loh、C. Sorace-Agaskar、A. E. Jones、K. C. Balram、J. C. Matthews、A. Laing 等, 《2022年集成量子光子学路线图》, 《物理学杂志：光子学》, 第4卷, 第1期, 文章编号012501, 2022年。[5] G. R. Steinbrecher、J. P. Olson、D. Englund和J. Carolan, 《量子光学神经网络》, *npj*量子信息, 第5卷, 第1期, 第1–9页, 2019年。[6] S. Takeda和A. Furusawa, 《迈向大规模容错通用光子量子计算》, *APL Photonics*, 第4卷, 文章编号060902, 2019年6月, 第1期, 第1页。

[7] N. C. Harris、D. Bunandar、M. Pant、G. R. Steinbrecher、J. Mower、M. Prabhu、T. Baehr-Jones、M. Hochberg和D. Englund，《硅基大规模量子光子电路》，《纳米光子学》，第5卷，第3期，第456–468页，2016年。[8] J. E. Bourassa、R. N. Alexander、M. Vasmer、A. Patil、I. Tzitrin、T. Matsuura、D. Su、B. Q. Baragiola、S. Guha、G. Dauphinais等，《可扩展光子容错量子计算机蓝图》，《Quantum》，第5卷，文章编号392，2021年。[9] D. Marpaung、J. Yao和J. Capmany，《集成微波光子学》，《自然·光子学》，第13卷，第2期，第80–90页，2019年。[10] Y. Yang、Y. Yamagami、X. Yu、P. Pitchappa、J. Webber、B. Zhang、M. Fujita、T. Nagatsuma和R. Singh，《用于片上通信的太赫兹拓扑光子学》，《自然·光子学》，第14卷，第7期，第446–451页，2020年。[11] B. Zong、C. Fan、X. Wang、X. Duan、B. Wang和J. Wang，《6G技术：关键驱动因素、核心需求、系统架构与使能技术》，《IEEE车辆技术杂志》，第14卷，第3期，第18–27页，2019年。[12] W. Shi、Y. Tian和A. Gervais，《利用硅光子学提升光纤传输系统容量》，《纳米光子学》，第9卷，第16期，第4629–4663页，2020年。[13] Z. Zhou、R. Chen、X. Li和T. Li，《数据中心硅光子学的发展趋势》，《光纤技术》，第44卷，第13–23页，2018年。[14] R. Sabella，《面向5G及未来网络的硅光子学》，IEEE量子电子学精选主题期刊，第26卷，第11期，2019年，第2卷，第1期，页码–。[15] R. Gardner、J. Bieker和S. Elwell，《利用数据挖掘解决棘手的半导体制造问题》，载于2000年IEEE/SEMI先进半导体制造会议与研讨会。ASMC 2000（目录号00CH37072）。IEEE，2000年，第46–55页。[16] N. Kumar、K. Kennedy、K. Gildersleeve、R. Abelson、C. Mastrangelo和D. Montgomery，《半导体制造良率建模技术综述》，《国际生产研究杂志》，第44卷，第23期，第5019–5036页，2006年。[17] W. Bogaerts和L. Chrostowski，《硅光子电路设计：方法、工具与挑战》，《激光与光子学评论》，第12卷，第4期，文章编号1700237，2018年。[18] A. Rizzo、U. Dave、A. Novick、A. Freitas、S. P. Roberts、A. James、M. Lipson和K. Bergman，《标准亚微米绝缘体上硅工艺中的制造稳健型硅光子器件》，《光学快报》，第48卷，第2期，第215–218页，2023年1月。 [在线]。可访问：https://opg.optica.org/ol/abstract.cfm?URI = 48 2 215 ol- - - Y. Wang、[19] P. Sun、J. Hulme、M. A. Seyedi、M. Fiorentino、R. G. Beausoleil和K.-T. Cheng，《通过收发器分组实现光互连的能效与良率优化》，《光波技术杂志》，第39卷，第6期，第1567–1578页，2021年3月。 [在线]。可访问：http://opg.optica.org/jlt/abstract.cfm?URI = 39 6 1567 jlt- - - A. V. [20] Krishnamoorthy、X. Zheng、G. Li、J. Yao、T. Pinguet、A. Mekis、H. Thacker、I. Shubin、Y. Luo、K. Raj等，《利用互补金属氧化物半导体制造工艺降低谐振光学器件的调谐要求》，《IEEE光子学期刊》，第3卷，第3期，第567–579页，2011年。[21] N. Margalit、C. Xiang、S. M. Bowers、A. Bjorlin、R. Blum和J. E. Bowers，《关于硅光子学与电子学未来的展望》，《应用物理快报》，第118卷，第22期，文章编号220501，2021年。[22] Y. Wang、S. Wang、A. Novick、A. James、R. Parsons、A. Rizzo和K. Bergman，《面向超宽带密集波分复用的色散工程与制造稳健型绝缘体上硅波导》，载于2023年光纤通信会议暨展览会（OFC） /即将发表/, 2023, ，第1–3页。[23] R. Woltjer、L. Tiemeijer和D. Klaassen，《工业界对紧凑建模的看法》，载于2006年欧洲固态器件研究会议。IEEE，2006年，第41–48页。[24] N. Moezi，《纳米互补金属氧化物半导体晶体管的统计紧凑模型策略及原子尺度变异性研究》，博士论文，格拉斯哥大学，2012年。[25] Y. Xing、J. Dong、S. Dwivedi、U. Khan和W. Bogaerts，《利用光学测量精确提取制造几何尺寸》，《光子学研究》，第6卷，第11期，第1008–1020页，2018年。[26] Z. Lu、J. Jhoja、J. Klein、X. Wang、A. Liu、J. Flueckiger、J. Pond和L. Chrostowski，《考虑布局相关的相关制造变异的硅光子集成电路性能预测》，《光学快报》，第25卷，第9期，第9712–9733页，2017年。[27] W. A. Zortman、D. C. Trotter和M. R. Watts，《硅光子制造》，《光学快报》，第18卷，第23期，第23 598–23 607页，2010年。[28] Z. Zhang、S. I. El-Henawy、C. R´ıos和D. S. Boning，《基于表征测量推断硅光子学中的工艺偏差——ments”，载于 CLEO：科学与创新。Optica出版集团，2022年，第 SF3O–5 页。[29] T. H. Stievater、N. F. Tyndall、M. W. Pruessner、D. A. Kozak 和 W. S. Rabinovich，《光子集成电路的光学与几何参数提取》，《光学快报》，第 30 卷，14 460，2022年 9，14 453，第 – 页。[30] M. J. Shawon 和 V. Saxena，《使用 Verilog-A 紧凑模型快速仿真光子集成电路》，IEEE《电路与系统汇刊 I：正规论文》，第 67 卷，第 10 期，第 3331–3341 页，2020年。[31] Z. Zhang、R. Wu、Y. Wang、C. Zhang、E. J. Stanton、C. L. Schow、K.-T. Cheng 和 J. E. Bowers，《硅光子异质集成电路的紧凑建模》，《光波技术期刊》，第 35 卷，第 14 期，第 2973–2980 页，2017年。[32] C. Sorace-Agaskar、J. Leu、M. R. Watts 和 V. Stojanovic，《采用 Verilog-A 的集成CMOS光子电路电光协同仿真》，《光学快报》，第 23 卷，第 21 期，第 27 180–27 203 页，2015年。[33] B. E. Saleh 和 M. C. Teich，《光子学基础》。约翰·威利父子出版公司，2019年。[34] A. James、Y. Wang、A. Rizzo 和 K. Bergman，《面向商业代工厂的硅波导有效折射率灵活工艺感知紧凑模型》，载于 2022年数值光电器件仿真国际会议（NUSOD）。IEEE，2022年，第 173–174 页。[35] A. E. James、A. Wang、S. Wang 和 K. Bergman，《评估用于建模硅光子波导制造偏差的基于回归技术》，载于《机器学习应用 2021》，第 11843 卷。国际光学与光子学学会，2021年，第 1184305 页。[36] M. J. Heck、J. F. Bauters、M. L. Davenport、D. T. Spencer 和 J. E. Bowers，《超低损耗波导平台及其与硅光子学的集成》，《激光与光子学评论》，第 8 卷，第 5 期，第 667–686 页，2014年。[37] D. Melati、A. Melloni 和 F. Morichetti，《实际光子波导：引导光穿过缺陷》，《光学与光子学进展》，第 6 卷，第 2 期，第 156–224 页，2014年。[38] J. Lacey 和 F. Payne，《具有随机壁面缺陷的平面波导中的辐射损耗》，《IEE 光电子学会刊》，第 137 卷，第 4 期，第 282–288 页，1990年。[39] F. Payne 和 J. Lacey，《平面光波导散射损耗的理论分析》，《光学与量子电子学》，第 26 卷，第 10 期，第 977–986 页，1994年。[40] E. Jaberansary、T. M. B. Masaud、M. Milosevic、M. Nedeljkovic、G. Z. Mashanovich 和 H. M. Chong，《利用二维傅里叶分析估算散射损耗并对光波导侧壁粗糙度建模》，《IEEE光子学期刊》，第 5 卷，第 3 期，第 6 601 010–6 601 010 页，2013年。[41] S. Kawakami，《介质波导中的色散与功率流分布之间的关系》，JOSA，第 65 卷，第 1 期，第 41–45 页，1975年。[42] N. Y. Winnie、J. Michel、L. C. Kimerling 和 L. Eldada，《聚合物包层无热高折射率对比度波导》，载于《第十届光电集成电路会议》，第 6897 卷。国际光学与光子学学会，2008年，第 68970S 页。[43] P. Jean、A. Douaud、T. Thibault、S. LaRochelle、Y. Messaddeq 和 W. Shi，《用于无热高Q值硅微环谐振器的富硫硫系化合物包层》，《光学材料快报》，第 11 卷，第 3 期，第 913–925 页，2021年。[44] H. Zhang、J. Chen、J. Jin、J. Lin、L. Zhao、Z. Bi、A. Huang 和 Z. Xiao，《基于环形谐振器与马赫-曾德尔干涉仪耦合的陀螺仪旋转传感片上调制》，《科学报告》，第 6 卷，第 1 期，第 1–9 页，2016年。[45] Z. Zhou、B. Yin、Q. Deng、X. Li 和 J. Cui，《降低硅光子器件与系统的能耗》，《光子学研究》，第 3 卷，第 5 期，第 B28–B46 页，2015年。[46] A. Yariv 和 P. Yeh，《光子学：现代通信中的光电子学》。牛津大学出版社，2007年。[47] E. D. Palik，《固体光学常数手册》。Academic Press，1998年，第 3 卷。[48] B. J. Frey、D. B. Leviton 和 T. J. Madison，《硅和锗的温度相关折射率》，载于 SPIE 会议录，E. Atad-Ettedgui、J. Antebi 和 D. Lemke 编。SPIE，2006年 6 月。[ ] 10 1117 2 12 672850 在线。可访[49] 问：https://doi.org/ 。% F. A. W. Elshaari、I. E. Zadeh、K. D. Jons 和 V. Zwiller，《用于低温光子电路的氮化硅谐振器热光特性表征》，《IEEE光子学期刊》，第 8 卷，第 3 期，第 1–9 页，2016年。[50] D. Coenen、H. Oprins、Y. Ban、F. Ferraro、M. Pantouvaki、J. Van Campenhout 和 I. De Wolf，《具有衬底欠刻的硅光子环形调制器热建模》，《光波技术期刊》，2022年。

[51] M. Jacques、A. Samani、E. El-Fiky、D. Patel、Z. Xing 和 D. V. Plant，《绝缘体上硅平台上热光相移器设计的优化与热串扰缓解》，《光学快报》，第 27 卷，第 8 期，第 10 456–10471 页，2019年。[52] M. de Cea、A. H. Atabaki 和 R. J. Ram，《硅微环调制器的功率处理能力》，《光学快报》，第 27 卷，第 17 期，第 24 274–24285 页，2019年 8 月。 [在线]。可访问：https://opg.optica.org/ oe/abstract.cfm?URI=oe-27-17-24274[53] C. Oton、C. Manganelli、F. Bontempi、M. Fournier、D. Fowler 和 C. Kopp，《使用马赫-曾德尔干涉仪进行硅光波导测量》，《光学快报》，第 24 卷，第 6 期，第 6265–6270 页，2016年。[54] Q. Deng、L. Liu、X. Li、J. Michel 和 Z. Zhou，《利用基于线性回归的方法从环形谐振器中提取损耗》，《光学快报》，第 41 卷，第 20 期，第 4747–4750 页，2016年 10 月。 [在线]。可访问：http://opg.optica.org/ol/abstract.cfm?URI = 41 20 4747 ol- - - W. Bogaerts、[55] P. De Heyn、T. Van Vaerenbergh、K. De Vos、S. Kumar Selvaraja、T. Claes、P. Dumon、P. Bienstman、D. Van Thourhout 和 R. Baets，《硅微环谐振器》，《激光与光子学评论》，第 6 卷，第 1 期，第 47–73 页，2012年。[56] W. N. Ye、D.-X. Xu、S. Janz、P. Cheben、M.-J. Picard、B. Lamontagne 和 N. G. Tarr，《在绝缘体上硅（SOI）波导中利用应力工程控制双折射》，《光波技术期刊》，第 23 卷，第 3 期，第 1308–1318 页，2005年。[57] H. Abdi 和 L. J. Williams，《主成分分析》，《*Wiley*计算统计跨学科评论》，第 2 卷，第 4 期，第 433–459 页，2010年。[58] S. Singer 和 J. Nelder，《Nelder-Mead算法》，《*Scholarpedia*》，第 4 卷，第 7 期，第 2928 页，2009年。[59] E. Kononov，《Verilog-A 中的光子链路建模》，博士论文，麻省理工学院，2013年。[60] J. C. Leu，《集成硅光子电路仿真》，博士论文，麻省理工学院，2018年。[61] Y. Xing、M. Wang、A. Ruocco、J. Geessels、U. Khan 和 W. Bogaerts，《用于工艺控制监测、提取多个参数的紧凑型硅光子电路》，《*OSA Continuum*》，第 3 卷，第 2 期，第 379–390 页，2020年 2 月。 [在线]。可访问：https://opg.optica.org/osac/ abstract.cfm?URI=osac-3-2-379[62] D. S. Boning、S. I. El-Henawy 和 Z. Zhang，《面向硅光子可制造性设计的考虑变化的方法与模型》，《光波技术期刊》，第 40 卷，第 6 期，第 1776–1783 页，2022年。

Aneek James 于2017年获得佐治亚大学（佐治亚州雅典）的电气与电子工程理学学士学位，并于2019年和2021年分别获得哥伦比亚大学（纽约州纽约市）的电气工程理学硕士和哲学硕士学位。他目前在Keren Bergman教授指导下，于光波研究实验室攻读电气工程博士学位。他的研究兴趣包括硅光子器件制造偏差建模，以及面向高吞吐量光互连的硅光子系统测试与自动控制。

Anthony Rizzo 于2017年获得宾夕法尼亚州哈弗福德哈弗福德学院物理学理学学士学位，并于2019年、2021年和2022年分别获得纽约州纽约市哥伦比亚大学电气工程理学硕士、哲学硕士和博士学位。他在哥伦比亚大学光波研究实验室师从Keren Bergman教授完成博士研究，并率先展示了采用集成式克尔频率梳光源和硅光子发射机进行数据传输。目前，他是纽约州罗马空军研究实验室（AFRL）信息局的研究科学家，专注于面向量子信息处理和人工智能的大规模硅光子系统。

Yuyang Wang 于2015年获得中国北京清华大学电子工程工学学士学位，并于2018年和2021年分别获得美国加利福尼亚大学圣塔芭芭拉分校（UCSB）计算机工程理学硕士和博士学位。他目前在Keren Bergman教授指导下，于光波研究实验室从事博士后研究。2018年，他曾在铿腾电子设计系统担任设计工程实习生；2019年，他曾在香港科技大学担任访问实习生。他的研究兴趣包括硅光子互连和系统的工艺变化感知建模、设计与优化。

Asher Novick 于2016年和2015年分别获得康奈尔大学（美国纽约州伊萨卡）的电气与计算机工程工程硕士和理学学士学位。2016年至2019年间，他在Panduit光纤研究实验室从事研究与开发工作，为数据中心和企业应用领域的基于光纤的通信开发新的可申请专利的技术。他目前在纽约市哥伦比亚大学光波研究实验室攻读电气工程博士学位。他目前的研究兴趣包括面向可扩展高效链路架构的硅光子系统与器件的建模、设计和测试。

Songli Wang 于2019年获得中国哈尔滨哈尔滨工业大学光电信息科学与工程专业工学学士学位，并于2020年获得纽约州纽约市哥伦比亚大学电气工程专业理学硕士学位。目前，他正在哥伦比亚大学光波研究实验室攻读电气工程博士学位。他目前的研究兴趣包括硅光子器件与系统的建模、设计和测试。

Robert Parsons 分别于2020年和2022年获得美国华盛顿哥伦比亚特区乔治·华盛顿大学生物医学工程专业理学学士学位，以及美国纽约州纽约市哥伦比亚大学电气工程专业理学硕士学位。目前，他在Keren Bergman教授指导下，于哥伦比亚大学光波研究实验室攻读电气工程博士学位。他的研究兴趣包括高带宽、节能光互连的链路架构及其构成硅光子器件的建模、测试和协同优化。

Kaylx Jang 于2020年获得加利福尼亚大学欧文分校（加利福尼亚州欧文市）电气工程理学学士学位，并于2022年获得哥伦比亚大学电气工程理学硕士学位。2019年和2020年，他曾在 Ayar Labs 测试部门实习，并于2021年在诺基亚（前身为 Elenion）硅光子设计团队参加合作实习项目。他目前是光波研究实验室的电气工程博士生，在 Keren Bergman教授的指导下开展研究。他的研究兴趣包括面向高能效、可扩展链路架构的高性能硅光子器件建模、设计和测试。

Maarten Hattink 是哥伦比亚大学（美国纽约州纽约市）的一名研究生。他于2015年和2017年分别获得荷兰埃因霍温理工大学的理学学士学位和理学硕士学位。在攻读这些学位期间，他曾在 Prodrive Technologies B.V. 担任软件与FPGA工程师。目前，他正在攻读博士学位，研究兴趣包括光子器件集成和热控制。

Keren Bergman（S’87–M’93–SM’07–F’09）于1988年获得巴克内尔大学（宾夕法尼亚州刘易斯堡）的电气工程理学学士学位，并于1991年和1994年分别获得麻省理工学院（剑桥）的电气工程理学硕士学位和博士学位。Bergman博士现任哥伦比亚大学（纽约州纽约市）查尔斯·巴彻勒教授，并兼任光波研究实验室主任。她领导多个研究项目，研究先进计算系统、数据中心、光分组交换路由器以及芯片多处理器纳米光子片上网络中的光互连网络。Bergman博士是 IEEE 和 Optica 会士。