

doi: 10.3788/lop47.030501

基于 FlexPDE 研究顺电相 KTN 晶体中大调制度全息光栅的形成

宋艳生¹ 季家镛¹ 窦文华² 温昌礼¹¹国防科技大学光电科学工程学院, 湖南 长沙 410073; ²国防科技大学计算机学院, 湖南 长沙 410073)

摘要 在用带运输模型研究光折变效应时, 大多数情况下都限定入射的相干光调制度远小于 1, 对方程做线性化近似以便于求解, 这在求解小调制度问题时可以达到的精度。但在很多实际情况下光调制度接近于 1, 此时线性理论不再适用。基于 FlexPDE 程序提出了一种新的求解方法, 适用于大调制度时的情况。采用有限元算法, 严格求解光折变带运输方程, 研究了外加电场时顺电相 KTN 晶体中大调制度全息光栅的形成, 给出了晶体中的空间电荷场、光激发电子、离化施主、晶体折射率等的分布情况和时间演化曲线。计算结果表明, 采用 FlexPDE 程序不仅可以大大降低带运输模型的求解难度, 而且能够实时动态显示全息光栅的形成过程, 具有直观性。

关键词 全息光栅; 光折变效应; 顺电相; FlexPDE 程序

中图分类号 O438.1 OCIS 050.1950 090.7330 文献标识码 A

Research on Forming of Holographic Grating in Paraelectric KTN Crystals at Large Modulation Depth Based on FlexPDE

Song Yansheng¹ Ji Jiarong¹ Dou Wenhua² Wen Changli¹

¹College of Opto-Electronic Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China
²College of Computer, National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China

Abstract The modulation of incident coherent beams is limited much less than 1 to linearize the equations easily in the study of the photorefractive effect with band transport model. The linearization can get good precision if the light modulation is small. However, in most cases the modulation approximates to 1 and the linear theory is not available any more. A new solution based on FlexPDE is put forward to solve the problem at large modulation depth. The photorefractive equations are rigorously solved based on the algorithm of finite element method. The forming of holographic grating in paraelectric KTN crystals at large modulation depth is researched. The distributions and time evolution curves of space charge field, light excited electrons, ionized donors, and crystal refractive index are shown. Calculation indicates that the FlexPDE can reduce the difficulty of solving the photorefractive equations, and display the forming process with visualization of holographic grating dynamically on real time.

Key words holographic grating; photorefractive effect; paraelectric phase; FlexPDE

收稿日期: 2009-11-11; 收到修改稿日期: 2009-11-18

资助课题: 国家 863 计划(2007AA01Z2a5)资助课题。

作者简介: 宋艳生(1981—), 男, 博士研究生, 主要从事集成光电子器件方面的研究。E-mail: yansheng.song@gmail.com

导师简介: 季家镛(1946—), 男, 教授, 主要从事信息光学和集成光电子器件等方面的研究。

E-mail: jijiarong@hotmail.com

1 引言

光折变效应中全息相位光栅形成的动力学过程可由 N. V. Kukhtarev 等^[1]提出的一组非线性偏微分方程组来描述。在利用这一模型来分析问题时,通常限定入射的相干光调制度 $m \ll 1$, 对方程作线性化近似^[2-4], 便于求解, 或直接运用线性近似所得的结果^[5]。这在求解小调制度问题时可以达到满意的精度。但在很多实验和实际应用中, 大部分情况下光调制度 m 约为 1, 此时线性理论^[6]不再适用。为了描述大调制度时真实的非线性响应, 对应于各种特殊情况的解析或数值的求解方法相继被提出。M. G. Moharam 等^[7]给出了任意调制深度时的空间电荷场的解析表达式, 但其模型没有考虑施主与受主粒子密度对时间的依赖。C. H. Kawk 等^[8]提出用经验公式来修正大调制度下空间电荷场与光调制度之间的关系。G. A. Brost^[9,10]与 E. Serrano 等^[11,12]分别用微扰法、有限差分法计算和模拟了光折变非线性响应的记录和擦除动力学特性。周忠祥等^[13]应用微扰法讨论了大调制度下外加电场对高阶空间电荷场的影响。以上方法均包含一定的近似和简化。李大汕等^[14]提出了一种基于偏微分方程通用求解算法(PDECOL)的数值计算方法来求解带运输方程, 该算法的基本思路是将难于直接求解的偏微分方程, 通过空间离散化, 转化为一组仅以时间为变量的半离散的且易于求解的常微分方程组, 求解此常微分方程组得到原偏微分方程的解。此方法可以取得很高的精度, 但是 PDECOL 算法基于 FORTRAN 语言且程序包的子程序较多, 其中有 4 个非通用子程序需要自己根据具体问题开发, 在编译和数据分析时具有一定的复杂性。本文采用有限元方法, 基于 FlexPDE 程序求解 Kukhtarev 方程组, 建模简单, 在满足高精度的条件下大大降低了求解难度。在计算过程中能够以图线的形式实时动态显示计算结果, 可更为直观地对光折变晶体中体全息光栅的形成过程进行精确的分析。

2 理论

2.1 Kukhtarev 方程

在光折变效应中, 光激发载流子产生、迁移和复合的过程, 可采用 Kukhtarev 等提出的带运输模型来描述。假设电荷载流子为电子, 则有

$$\frac{\partial N_d^+}{\partial t} = (sI + \beta)(N_d - N_d^+) - \gamma_R N_d^+ n_e, \quad \frac{\partial n_e}{\partial t} = \frac{\partial N_d^+}{\partial t} + \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J}_e, \quad \mathbf{J}_e = e\mu_e n_e \mathbf{E} + \mu_e kT \nabla n_e + \beta_p I,$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}) = e(N_d^+ - N_a - n_e), \quad I = I_0 [1 + m \cos(\mathbf{K}_g \cdot \mathbf{r})], \quad (1)$$

式中 N_a 表示单位体积中受主的数目, N_d , N_d^+ 分别表示施主和离化了的施主数密度, n_e 表示进入导带的电子数密度, s 为光电离截面面积, β 为电子的热产生率, γ_R 表示电子与陷阱心的复合率, \mathbf{E} 表示晶体内部的总电场, e 为电子电量, μ_e 表示电子的迁移率, k 为玻尔兹曼常数, β_p 为光生伏打张量, ϵ_0 为真空介电常数, ϵ 为相对介电系数, 光强调制度 $m = 2\sqrt{I_1 I_2} / (I_1 + I_2)$, $I_0 = I_1 + I_2$, I_1 , I_2 分别为两束写入光光强, $|\mathbf{K}_g| = \frac{2\pi}{\Lambda}$, Λ 为光栅周期, \mathbf{r} 表示空间位置矢量。

2.2 顺电相光折变晶体中的全息相位栅

铁电材料只在某一温度范围内才具有铁电性。存在一临界温度 T_c , 当温度高于 T_c 时, 铁电材料发生结构相转变, 这个临界温度 T_c 就称为铁电材料的居里温度。铁电体在居里温度以上由无极性的相组成, 不显示自发极化, 对应于这种状态的相称为顺电相, 如钛酸钡(BaTiO_3)晶体在居里温度(约为 130 °C)以上已由四方铁电相转变为顺电相, 钛酸锶(SrTiO_3)、KTN(原子数分数为 35% KNbO_3)等晶体在室温已为顺电相。

在顺电相中, 晶体存在对称中心, 空间电荷场通过二次电光效应引起折射率变化^[5,6], 即

$$\Delta n(\mathbf{r}) = (1/2)n_0^3 g_{\text{eff}} [\mathbf{E}(\mathbf{r})]^2, \quad (2)$$

式中 g_{eff} 为晶体的有效二次电光系数。 N_0 为晶体折射率。 设外电场为 \mathbf{E}_0 ， 晶体内部空间电荷所形成的空间电荷场为 $\mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r})$ ， 则晶体内总电场

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

由布拉格衍射条件， 晶体有效相位栅的折射率调制幅度为

$$\Delta n(\mathbf{r}) = n_0^3 g_{\text{eff}} \mathbf{E}_0 \mathbf{E}_{\text{sc}}(\mathbf{r}). \quad (4)$$

3 计算方法与结果

对 Kukhtarev 方程的解法一般都是限定入射相干光调制度 $m \ll 1$ ， 使方程线性化而易于求解， 但在实际应用中， 大部分情况下光调制度 m 接近于 1， 此时线性理论不再适用。 为了描述克尔电光效应中大调制度相干光入射时的非线性响应， 需要建立新的数值计算方法。

3.1 基于 FlexPDE 求解带运输模型

FlexPDE 是 PDE Solution 公司专门开发的使用有限元方法给出线性和非线性偏微分方程数值解的软件。 假设沿 KTN 晶体的 X 方向施加外电场， 写入光入射于 X - Y 平面， 光栅矢量与外加电场平行。 选对称入射的相干光波长为 532 nm， 入射角为 45° 。 由布拉格条件可得出所写入的全息光栅的周期为 0.168 μm 。 计算中所选用的参量数值如表 1 所示。 利用(1)式可以得到

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \mathbf{J}_e, \quad (5)$$

表 1 计算中用到参量的数值
Table 1 Parameters in calculation

Parameters	Value	Parameters	Value
$I_0 / (\text{W}/\text{m}^2)$	3200	β_p	0
$s / (\text{m}^2/\text{J})$	3×10^{-4} [15]	$ \mathbf{E}_0 / (\text{V}/\text{m})$	2.5×10^5
$\beta / (1/\text{s})$	0.05 [15]	Λ / m	1.67×10^{-7}
$N_a / (1/\text{m}^3)$	2×10^{22} [16]	$\mu_e / [\text{m}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})], (T=300 \text{ K})$	10^{-6} [17]
$N_d / (1/\text{m}^3)$	10^{25} [16]	ϵ	2×10^4 [18]
$\gamma_R / (\text{m}^2/\text{J})$	10^{-15} [15]	n_0	2.23
λ / nm	532	m	1
$g_{\text{eff}} / (\text{m}^2/\text{V}^2)$	2.2×10^{-14} [18]	k	1.38×10^{23}

联立(1)， (5)式在 FlexPDE 中完成建模， 程序划分的网格如图 1 所示， 共划分网格节点 117894 个， 默认允许最大误差为 0.002。

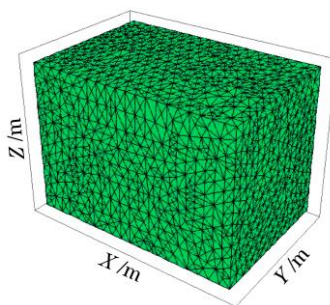


图 1 有限元网格划分
Fig.1 Finite element mesh

3.2 结果与分析

两束相干光在晶体内形成干涉条纹, 晶体吸收的光能可以将载流子从其能量陷阱里光致电离到导带(电子)或价带(空穴)。晶体中各处被激发到导带的电子浓度与该处的光强成正比, 光激发电荷或在电场作用下漂移, 或因激发电荷数密度梯度而扩散, 或由光生伏打效应(顺电相 KTN 晶体中忽略该效应)而运动, 光致电离的电子在传输到低光强区遇到合适的陷阱后重新被俘获, 结果导致正电荷处于高光强区, 负电荷处于低光强区, 形成一个与激发光照空间相关的净空间电荷场。如图 2 所示, 离化施主数密度、光激发电子数密度、空间电荷场与干涉光强的分布形态相似, 具有相同的周期。由于漂移和扩散作用, 光激发载流子的分布与干涉光强的分布有 $\pi/2$ 的相移, 而空间电荷场相对于干涉光强的分布有 $\pi/4$ 的相移。由于光栅周期与晶体尺寸的巨大差异, 图中仅显示局部晶体内的若干个光栅周期。

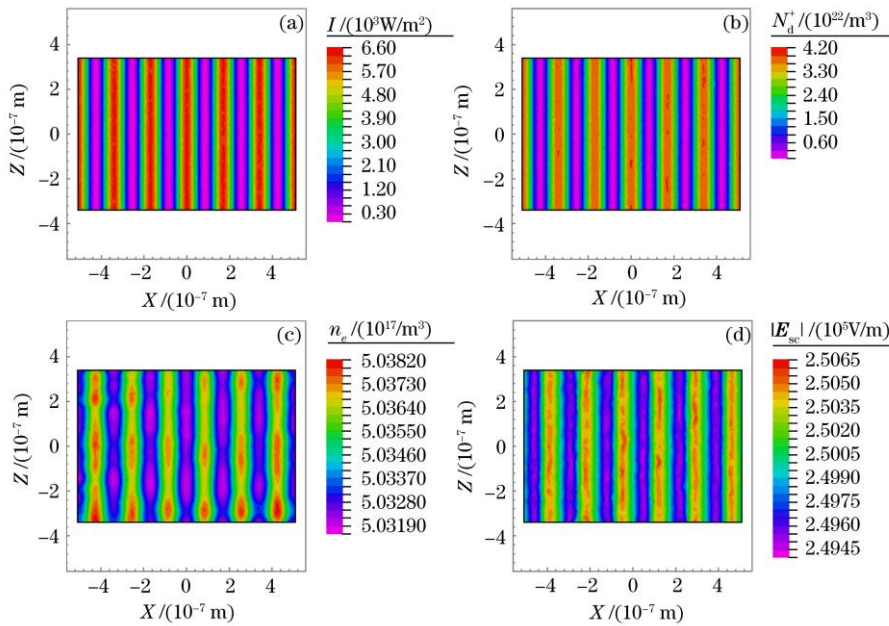


图 2 光强(a), 离化施主数密度(b), 光激发电子数密度(c)和空间电荷场(d)在 $Y=0$ 截面分布的等值线图
Fig.2 Isoplethic map on $Y=0$ section of light intensity (a), ionized donors density (b), light excited electrons (c) and space charge field (d)

由于正负电荷分离后, 正电荷处于高光强区, 负电荷处于低光强区, 形成了正负电荷集中区域相间隔的周期分布。图 3 给出了晶体内总电场分布的矢量图, 直观显示了电场周期性反向的分布规律。KTN 晶体内部 $Y=0$ 截面的总电场与折射率分布的三维视图如图 4 所示, 折射率的分布与电场的分布是反相的。总电场的值域约为 $-500\sim 500V$, 而由克尔电光效应引起的满足布拉格衍射条件的折射率调制幅度为 6×10^{-5} 。计算中的均方根误差为 9.1×10^{-4} 。

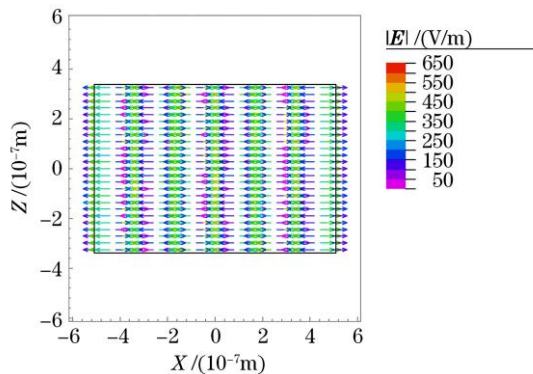


图 3 晶体内 $Y=0$ 截面的电场矢量图
Fig.3 Vectorgraph of electric field on $Y=0$ section in crystal

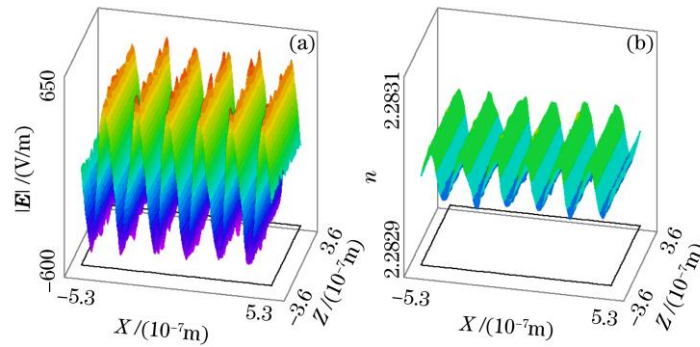


图4 晶体内 $Y=0$ 截面的总电场(a)和折射率分布的三维视图(b)
Fig.4 3D distributions on $Y=0$ section of total electric field (a) and refractive index (b)

图5为空间电荷场和折射率改变量的时间演化曲线, A, B, C 分别代表晶体内 $(0, 0, 0), (-2.9 \times 10^{-7}, -1 \times 10^{-7}, 0.3 \times 10^{-6}), (4.3 \times 10^{-7}, 2 \times 10^{-7}, 3 \times 10^{-6})$ 三个不同的坐标(单位为 m)点, 计算的均方根误差为 2.6×10^{-4} 。空间电荷场在 $1.6 \times 10^{-2} s$ 时就基本达到稳定值, 可见光折变效应的响应速度很快。而据实验测得在顺电相掺杂 KTN 晶体中的克尔电光效应响应时间为纳秒量级^[19], 因此比较图5中的两图, 由电场引起折射率调制的过程无明显延时。

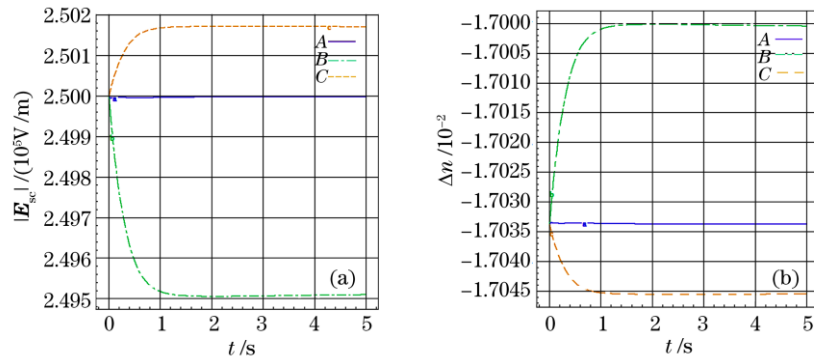


图5 空间电荷场(a)和折射率改变量(b)的时间演化曲线
Fig.5 Time evolution curves of space charge field (a) and the change of refractive index (b)

4 结 论

描述光折变相位光栅形成的带运输模型是由一组非线性偏微分方程组成, 难以严格求解。而在大调制度相干光入射条件下, 材料的非线性响应增强, 线性近似的求解方法已不再适用。基于 FlexPDE 研究大调制度下光折变光栅的形成时其调制度可以设置为任意值。程序通过有限元方法在设定的求解域内对方程进行高精度的数值求解, 并将实时动态地显示晶体中的空间电荷场、光激发电子数密度、离化施主数密度、晶体折射率等的分布图和时间演化曲线, 不仅大大降低了求解难度, 而且可以直观地显示光栅形成的动态过程。由于数值计算量较大, 这里给出的结论只是初步的。

参 考 文 献

- 1 N. V. Kukhtarev, V. B. Markov, S. G. Odulov *et al.*. Holographic storage in electro-optic crystals[J]. *Ferroelectrics*, 1979, **22**(1): 949~960
- 2 Dai Cuixia, Yu Yingjie, Liu De'an *et al.*. Optimization of nonvolatile holographic recording in $\text{LiNbO}_3:\text{Ce}:\text{Cu}$ with green light[J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(7): 1045~1049
戴翠霞, 于瀛洁, 刘德安 等. $\text{LiNbO}_3:\text{Ce}:\text{Cu}$ 晶体中绿光非挥发全息记录优化[J]. *中国激光*, 2008, **35**(7): 1045~1049
- 3 Ji Xuanmang, Wang Jinlai, Liu Jinsong. Evolution of Gauss beam in biased centrosymmetric photorefractive media[J]. *Acta*

- Optica Sinica, 2008, **28**(9): 1798~1804
吉选芒, 王金来, 刘劲松. 高斯光束在有外电场的中心对称光折变材料中的演化[J]. 光学学报, 2008, **28**(9): 1798~1804
- 4 Shen Yan, Sun Xiudong, Zhang Guoquan *et al.*. Theoretical studies on nonvolatile holographic recording with continuous-wave lights for LiNbO₃:Fe:Mn[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(8): 1450~1456
申岩, 孙秀冬, 张国权 等. 连续光条件下对LiNbO₃:Fe:Mn晶体全息存储性能的理论研究[J]. 光学学报, 2008, **28**(8): 1450~1456
- 5 Liu Hongmei, Yan Xiaona. Wavelength demultiplexing scheme implemented by single volume grating in photorefractive LiNbO₃ crystal[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(10): 1893~1897
刘红梅, 阎晓娜. 光折变LiNbO₃晶体中单光栅实现波长解复用方案[J]. 光学学报, 2008, **28**(10): 1893~1897
- 6 Amnon Yariv, Sergei S. Orlov, George A. Rakuljic. Holographic storage dynamics in lithium niobate: theory and experiment[J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1996, **13**(11): 2513~2523
- 7 M. G. Moharam, T. K. Gaylord, R. Magnusson *et al.*. Holographic grating formation in photorefractive crystals with arbitrary electron transport lengths[J]. *J. Appl. Phys.*, 1979, **50**(9): 5642~5651
- 8 C. H. Kawk, S. Y. Park, J. S. Jeong *et al.*. An analytical solution for large modulation effects in photorefractive two-wave couplings[J]. *Opt. Commun.*, 1994, **105**(5~6): 353~358
- 9 G. A. Brost. Photorefractive grating formations at large modulation with alternating electric fields[J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1992, **9**(8): 1454~1460
- 10 G. A. Brost. Numerical analysis of photorefractive grating formation dynamics at large modulation in BSO[J]. *Optics Communications*, 1993. **96**(1~3): 113~116
- 11 E. Serrano, V. López, M. Carrascosa *et al.*. Recording and erasure kinetics in photorefractive materials at large modulation depths[J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1994, **11**(4): 670~675
- 12 E. Serrano, M. Carrascosa, F. Agulló-López. Analytical and numerical study of photorefractive kinetics at high modulation depths[J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1996, **13**(11): 2587~2594
- 13 Zhou Zhongxiang, Jiang Yongyuan, Sun Xiudong *et al.*. Perturbative analysis of effect of applied electric field on high-order response of photorefractive effects[J]. *Acta Optica Sinica*, 1997, **17**(6): 710~716
周忠祥, 姜永远, 孙秀冬 等. 外加电场对光折变高阶响应影响的微扰分析[J]. 光学学报, 1997, **17**(6): 710~716
- 14 Li Dashan, Liu Liren, Liu Dean *et al.*. Photorefractive grating dynamics under large modulation and strong applied electric field[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(1): 148~154
李大汕, 刘立人, 刘德安 等. 强外加电场与大调制度下光折变动力学光栅形成研究[J]. 光学学报, 2007, **27**(1): 148~154
- 15 Liu Bo, Liu Liren, Xu Liangying. Characters of recording and thermal fixing in lithium niobate[J]. *Acta Optica Sinica*, 1999, **19**(7): 941~947
刘波, 刘立人, 徐良瑛. LiNbO₃中光折变全息的热固定特性[J]. 光学学报, 1999, **19**(7): 941~947
- 16 Ji Jiarong, Feng Ying. *Advanced Optics Tutorial-Nonlinear Optics and Waveguide Optics*[M]. Beijing: science press, 2008: 85~94,165~180
季家镛, 冯莹. 高等光学教程——非线性光学与导波光[M]. 北京: 科学出版社. 2008: 85~94,165~180
- 17 G. Montemezzani, M. Zgonik, P. Günter. Photorefractive charge compensation at elevated temperatures and application to KNbO₃[J]. *J. Opt. Soc. Am. B*, 1993, **10**(2): 171~185
- 18 Tadayuki Imai, Masahiro Sasaura, Koichiro Nakamura *et al.*. Crystal growth and electro-optic properties of KTa_{1-x}Nb_xO₃[J]. *NTT Technical Review*, 2007, **5**(9): 1~8
- 19 Aharon J. Agranat, Lavi Secundo, Noam Golshani *et al.*. Wavelength-selective photonic switching in paraelectric potassium lithium tantalate niobate[J]. *Optical Materials*, 2001, **18**(1): 195~197