

## 光位移法测定蓝宝石高温折射率及理论研究

程峥<sup>1</sup>, 朱敏<sup>1</sup>, 刘禹男<sup>1</sup>, 黄泽亚<sup>1\*</sup>, 王伟<sup>2</sup>, 邵志强<sup>2</sup><sup>1</sup>南京航空航天大学材料科学与技术学院, 江苏 南京 210016;<sup>2</sup>中国电子科技集团有限公司第四十九研究所, 黑龙江 哈尔滨 150000

**摘要** 根据惠更斯原理搭建了一台可分别测量晶体折射率各向异性的实验装置,并在室温至 1200 °C 的温度范围内采用光位移法间接测定了蓝宝石在 445 nm 波长下的寻常光折射率  $n_o$  和非寻常光折射率  $n_e$ , 计算得到相应的热光系数为  $1.5793 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  和  $1.5517 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ 。此外,基于第一性原理计算了蓝宝石的折射率等光学参数,相应的折射率变化规律与实验相近。实验与计算的结合验证了蓝宝石高温折射率数据的可靠性,为蓝宝石材料的开发应用和相关器件的性能优化设计提供了有效参考。

**关键词** 材料; 光学设计与制造; 蓝宝石; 高温光学; 光位移法; 第一性原理

**中图分类号** O734 **文献标志码** A

**DOI:** 10.3788/AOS221911

## 1 引言

随着新一代航空发动机的快速发展,高温极端环境下压力参数的原位监测需求持续攀升。基于蓝宝石材料的光纤法布里-珀罗压力传感器<sup>[1-6]</sup>凭借体积小、精度高、耐高温高压和抗电磁干扰等优势,成为了当前高温压力传感器领域中的重要研究方向。然而,目前国内对蓝宝石超高温环境下物理性能参数的研究仍不完备,这限制了高温精密压力传感器的发展。

蓝宝石折射率的测试方法有多种,椭圆偏振法<sup>[7-8]</sup>、干涉法<sup>[9-10]</sup>等都较为常见。袁春宇等<sup>[11]</sup>以激光回馈干涉技术提高了蓝宝石晶体折射率测量的精度,但技术的限制使上述测试方法的适用温度区间较小。刘宣君等<sup>[12]</sup>基于多角度激发漫反射光信号测量折射率,相对误差约为 0.9%。针对高温高压极端环境下蓝宝石光学性能的变化,Cao 等<sup>[13-15]</sup>在研究蓝宝石折射率对压力的依赖性时,考虑到温度对折射率的影响,对蓝宝石及其内部绝热剪切带的折射率进行了理论计算,发现高温因素是导致蓝宝石高压相区折射率明显增加的关键因素,但后续并没有继续深入探讨高温对蓝宝石折射率的具体影响。研究人员针对折射率与温度的相关问题进行了研究。Yang 等<sup>[16]</sup>通过棱镜和最小偏差法测量了蓝宝石在 4000、2500、1666、1000 nm 波长处的折射率,虽然该方法的测量精度高,但是只适用于室温至 720 K 的温度区间。Lee 等<sup>[17]</sup>研究了紫外(UV)级蓝宝石的透过率、发射率和反射率与温度和

厚度的依赖性,丰富了蓝宝石光学特性的数据库,但该研究的温度范围也仅限于室温至 500 °C。此外,Thomas 等<sup>[18]</sup>在理论分析的基础上通过实验发现蓝宝石在红外范围内的折射率随着温度的升高而增加,该项工作的模拟温度极限为 1000 K,有效实测数据在室温至 500 K 范围内。Krishnan 等<sup>[19]</sup>用激光反射椭圆法测量了液态氧化铝的折射率,虽然该方法的温度范围较大,但是误差也很大。由此可见,关于高温因素对蓝宝石晶体折射率的影响问题仍缺少深入研究,且已有晶体折射率的测试方法无法适应类似于航空发动机这类高温极端工作环境。因此,迫切需要提出一种新的适用于(超)高温环境的晶体光学参数测试装置和方法,以补充更多的理论数据,从而进一步完善关于蓝宝石在高温环境下光学性能变化的研究。

提出了一种基于激光位移的方法(简称光位移法)来测定蓝宝石在高温下的折射率数据。利用位置敏感探测器 CMOS 相机捕捉激光光斑经过蓝宝石折射后的位置变化,可分别测量蓝宝石不同方向的折射率。采用第一性原理计算了蓝宝石从室温至 1200 °C 范围内的折射率,对实验测量结果进行了验证。同时,通过分析第一性原理计算的蓝宝石能带结构和光学性质,解释了蓝宝石折射率在高温下的变化规律。从实验和理论计算两方面验证了蓝宝石高温折射率数据的可靠性,为高温压力传感器的设计提供了重要的参考数据。

收稿日期: 2022-11-01; 修回日期: 2022-12-07; 录用日期: 2022-12-16; 网络首发日期: 2023-01-06

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项(NS2021043)

通信作者: \*huangzey@nuaa.edu.cn

## 2 基本原理

### 2.1 实验原理

晶体光学折射率的测定基于平行平板介质折射规律。光线以一定角度射入介质,在介质的两个平行表面发生两次折射,最后出射光线和入射光线平行,且偏移一个距离( $\Delta S$ ),如图 1 所示。假设蓝宝石单晶折射率为  $n$ ,激光入射蓝宝石晶体的入射角为  $\theta$ ,两个端面之间的距离为  $d$ 。

根据惠更斯原理,折射光线与入射光线互相平行且不重合,同时产生侧向位移  $\Delta S$ ,其表达式为

$$\Delta S = d \left[ 1 - \frac{\cos \theta}{\sqrt{n^2 - (\sin \theta)^2}} \right] \sin \theta, \quad (1)$$

式(1)表明,入射光的侧向位移与样品厚度  $d$ 、折射率  $n$  和入射角  $\theta$  有关。

图 2 为实验光路原理图。一束垂直于光轴的光以

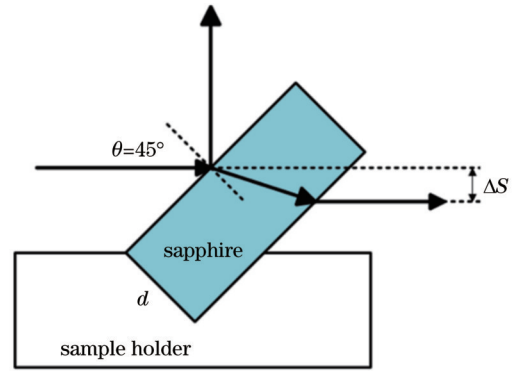


图 1 平行平板成像原理

Fig. 1 Parallel plate imaging principle

45°角斜入射蓝宝石晶体产生竖直向上的反射光和平行于入射光(同时产生侧向位移  $\Delta S$ )的折射光。通过 CMOS 感光元件记录光斑位置,结合传感器的像元尺寸,经过图像分析得到  $\Delta S$ ,便可按照式(1)求得折射率  $n$ 。

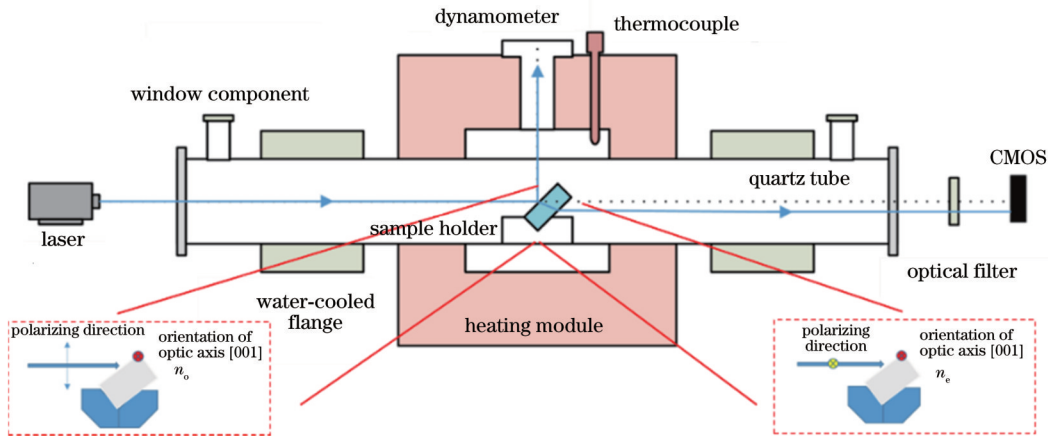


图 2 光路原理图

Fig. 2 Schematic diagram of optical path

本装置在激光发射器与加热模块之间安装了起偏器,可以调整入射线偏振光的偏振方向:当偏振方向与样品的光轴方向正交时,测得的折射率为寻常光折射率  $n_o$ ;当偏振方向与样品的光轴同向时,测得的折射率为非寻常光折射率  $n_e$ 。

实验测试装置主要由蓝光激光器(波长为

445 nm、输出功率为 20 mW)、加热模块、水冷模块、样品支架、起偏器、CMOS 感光元件(面积为  $12.8 \text{ mm} \times 9.6 \text{ mm}$ ,像元尺寸为  $2.40 \mu\text{m} \times 2.40 \mu\text{m}$ )和视窗组件等辅助部件构成。其中,加热模块的最高加热温度为  $1200 \text{ }^\circ\text{C}$ ,控温精度为  $\pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$ 。本实验所用样品参数如表 1 所示。

表 1 蓝宝石实验样品参数

Table 1 Parameters of sapphire experimental sample

Parameter	Size / (mm × mm × mm)	Crystal orientation	Roughness / ( $10^{-10} \text{ m}$ )	Smoothness / $\mu\text{m}$
Value	10 × 10 × 20	[100], [001]	≤ 5	≤ 5

基于折射率的测试原理,提出了一种光位移法来测量蓝宝石晶体在不同偏振光照射下折射率随温度变化的关系,光位移法原理如图 3 所示,其中  $\Delta S_1 \sim \Delta S_3$  分别为一系列温度下的入射光侧向偏移量,  $T_1 \sim T_3$  为不同温度点,  $y_0$  为入射光在 CMOS 传感器上的初始纵坐

标。在一定温度下,激光经准直后水平扫描经过蓝宝石样品,记录激光打在 CMOS 芯片上的  $(x, y)$  坐标位置。输出一组带有光斑灰度值信息的图片,降噪后统计光斑区域平均坐标,再根据像素的实际尺寸进行换算,即可得到光斑实际的精确位置。得到的光斑轨迹

由两段平台组成,平台高度分别表示光线在空气中和经过样品后的垂直位置。

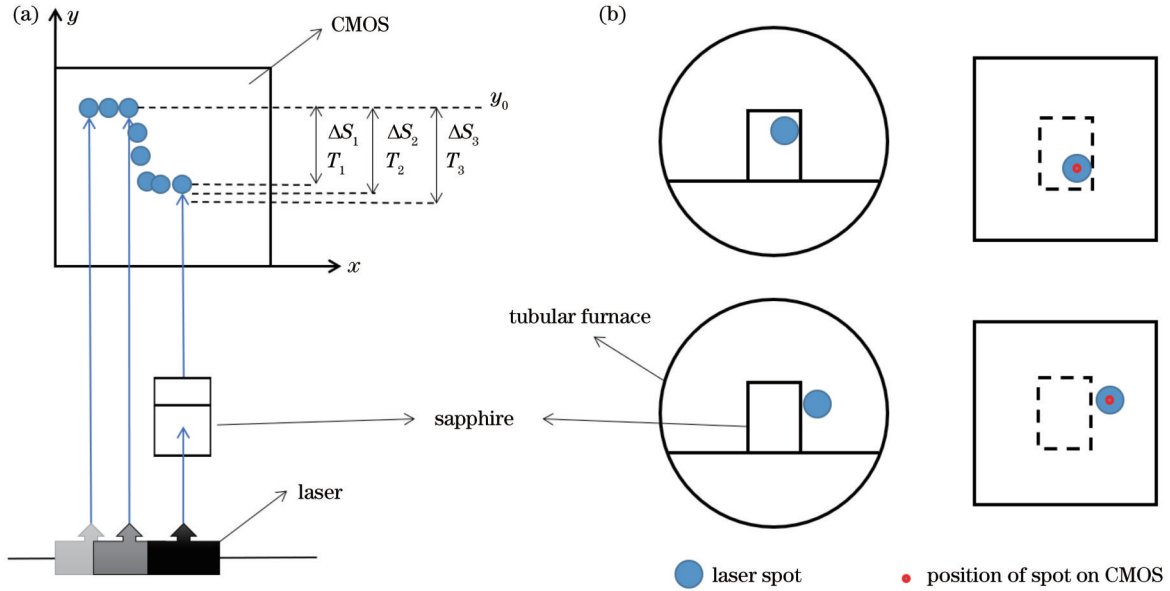


图 3 光位移法测试原理。(a)激光位移路径;(b)激光光斑、蓝宝石和 CMOS 相机的位置关系

Fig. 3 Test principle of laser displacement method. (a) Path of laser displacement; (b) position relation among laser spot, sapphire and CMOS camera

经过分析验证,此算法对光斑的位移分辨能力在  $5\ \mu\text{m}$  以上。根据折射率计算公式,折射率理论误差在  $\pm 0.002$  以内,相对精度为  $\pm 0.1\%$ ,满足精度要求。若增大样品和传感器的尺寸,则该方法的理论精度可以进一步提高。根据测试装备和样品的加工精度,要求样品定位角度的精度为  $\pm 0.1^\circ$ ,由此带来的仪器误差为  $\pm 0.006$ ,相对误差为  $\pm 0.3\%$ 。

图 3(b)为激光打在样品上和 CMOS 芯片上的示意图。在激光由靠近样品边缘到完全入射进样品的过程中,CMOS 上光斑位置有先急剧向  $y$  轴负方向移动后趋于稳定的变化趋势。同时,展现了两个平台的运动轨迹,该平台的纵向差即为侧向位移  $\Delta S_1$ 。结合折射率与侧向位移之间的关系,可计算出室温下蓝宝石

单晶的折射率。在不同温度下,重复上述操作,便可得到折射率随温度的变化曲线。

### 2.2 理论模型与计算方法

蓝宝石 ( $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ) 是一种重要的双折射晶体,属于三方晶系,空间群为  $R\text{-}3C(\text{No. } 167)$ ,本文根据变温 X 射线衍射测试结果,采用 Rietveld 结构精修获取的蓝宝石的晶胞参数和原子占位,结果如图 4 所示。测试样品为退火态的  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  粉末,仪器参数扫描范围为  $23.0^\circ \sim 137.2^\circ$ ,选用  $2/3$  狭缝,X 光管管压为  $40\ \text{kV}$ ,管流为  $150\ \text{mA}$ 。经线性拟合后外推得到室温下蓝宝石的晶胞参数为  $a=b=4.7568 \times 10^{-10}\ \text{m}$ 、 $c=1.2985 \times 10^{-9}\ \text{m}$ 、 $\alpha=\beta=90^\circ$  和  $\gamma=120^\circ$ ,与相关文献<sup>[20]</sup>报道的数据相符。

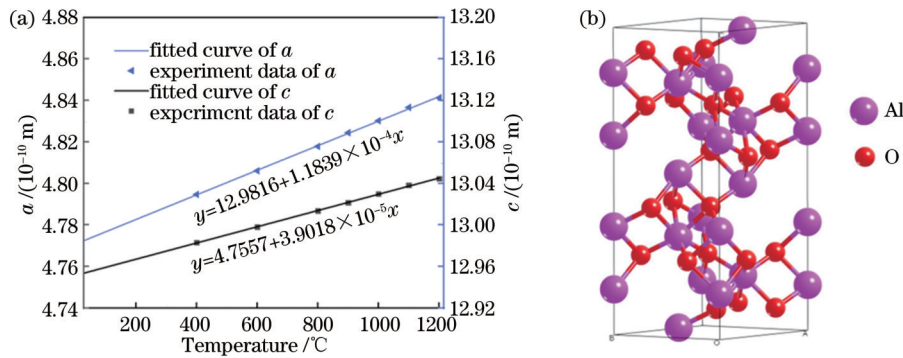


图 4 晶胞参数和模型。(a)  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  晶胞参数随温度变化的示意图;(b)  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  理论计算采用的晶胞模型示意图

Fig. 4 Lattice parameters and model. (a) Schematic diagram of cell parameters of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  varying with temperature; (b) schematic diagram of crystal model of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  for theoretical calculation

计算基于平面波超软赝势结合密度泛函理论 (DFT) 框架下的第一性原理完成, 计算软件选用 Device Studio。采用广义梯度近似 (GGA) 的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 计算方案来描述电子间的交换关联能, 原子核与价电子之间的相互作用由超软赝势来描述。 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  晶体体系中 Al 原子和 O 原子的电子组态为  $3\text{S}^23\text{P}^1$  和  $2\text{S}^22\text{P}^4$ 。经过收敛性测试确定截断能为 630 eV, 自洽收敛精度选取为  $5.0 \times 10^{-7}$  eV/atom, 采用 Monkhorst-Pack 方法划分  $K$  点网格密度为  $9 \times 9 \times 3$ , 此时计算收敛精度可满足本研究的需求。

### 3 实验与模拟结果

#### 3.1 光位移法测试结果分析

图 5 为不同温度下激光光斑随激光平移的坐标变化曲线, 此时波长为 445 nm。光斑在不同温度下经过蓝宝石折射后的位置如图 5 中的插图所示。

分析发现, 室温至 1200 °C 温度范围内的光斑移动曲线波动较小, 计算标准差和平均值发现误差在 0.1% 之内, 满足精度要求。结合折射率与侧向像素数量之间的关系, 对不同温度和不同偏振光下的光斑坐标数据进行计算, 最终可得到原始折射率数据。

由于蓝宝石样品受热膨胀后会使得式 (1) 中的  $d$  偏大, 实验中样品的  $d$  值对应于蓝宝石  $a$  轴方向的长度, 因此需要计算蓝宝石  $a$  轴方向的线性热膨胀系数来进行修正。工程中常用平均线膨胀系数来表征材料某一温度

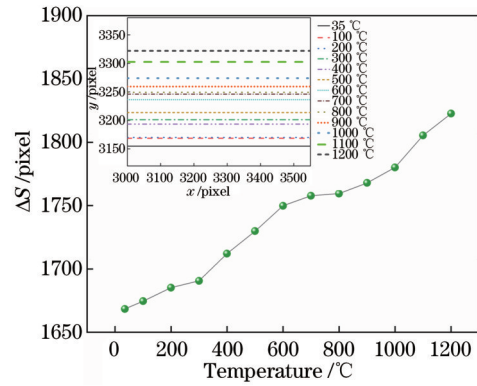


图 5  $\Delta S$  随温度的变化关系

Fig. 5  $\Delta S$  varying with temperature

区间的膨胀或收缩程度。结合原位 X 射线衍射 (XRD) 精修结果, 蓝宝石  $a$  轴方向上的平均热膨胀系数为

$$\alpha_T^{(a)} = \frac{a - a_0}{a_0(T - T_0)} = \frac{\Delta a}{a_0 \Delta T}, \quad (2)$$

式中:  $T$  为温度;  $T_0$  为室温;  $a$  为蓝宝石在温度  $T$  下的晶格常数;  $a_0$  为蓝宝石在室温  $T_0$  下的晶格常数;  $\Delta a$  为  $T_0$  变化至  $T$  时晶格常数的增量;  $\Delta T$  为  $T_0$  变化至  $T$  时的温度差。计算可得, 在室温至 1200 °C 温度范围内, 蓝宝石单晶  $a$  轴方向的平均热膨胀系数为  $8.2025 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , 与 Tohei 等<sup>[21]</sup> 得到的结果相符。用此数据对原始折射率进行修正, 得到的折射率与温度的变化曲线如图 6 所示。

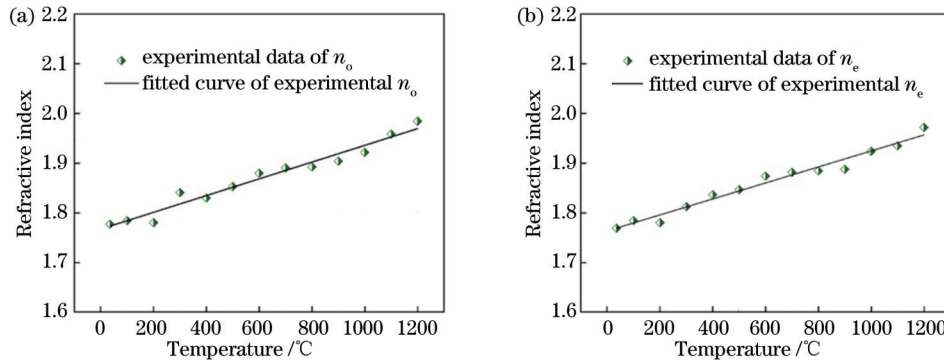


图 6 实测折射率与温度的关系。(a) 蓝宝石实测  $n_o$  随温度的变化关系; (b) 蓝宝石实测  $n_e$  随温度的变化关系

Fig. 6 Relationship between measured refractive index and temperature. (a) Relationship between measured  $n_o$  of sapphire and temperature; (b) relationship between measured  $n_e$  of sapphire and temperature

对不同温度的折射率数据进行线性拟合, 可得到蓝宝石在 445 nm 波长处折射率 ( $n_o$  和  $n_e$ ) 随温度变化的关系式, 即

$$n_o(T) = 1.7715 + 1.5793 \times 10^{-4} T, \quad (3)$$

$$n_e(T) = 1.7636 + 1.5517 \times 10^{-4} T, \quad (4)$$

式 (3) 和式 (4) 反映了蓝宝石单晶在室温至 1200 °C 温度范围内的折射率变化关系, 可得蓝宝石的热光系数分别为  $1.5793 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (寻常光) 和  $1.5517 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (非寻常光)。

蓝宝石的折射率有着明显的温度依赖性, 从图 6

可以看出, 蓝宝石的折射率随着温度的升高而线性增大, 且  $n_o > n_e$ , 两者的差值为双折射率, 统计不同温度下的双折射率如表 2 所示。

由表 2 可知, 蓝宝石的双折射率随着温度的升高而增大, 在室温下双折射率的大小为 0.0080, 与相关报道<sup>[22]</sup> 相符。

#### 3.2 模拟结果分析

##### 3.2.1 复折射率的理论计算

通过第一性原理计算的  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  晶体的折射率可由复折射率的形式给出, 即

表 2  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  在不同温度下 445 nm 波长对应的双折射率

Table 2 Birefringence of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  at wavelength of 445 nm under different temperatures

Temperature / $^\circ\text{C}$	27	200	400	600	800	1000	1200
$n_o - n_e$	0.0080	0.0085	0.0091	0.0097	0.0103	0.0109	0.0115

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega), \quad (5)$$

式中： $n(\omega)$  为材料的折射率，表示光在真空中的传播速度与光在蓝宝石中的传播速度之比； $k(\omega)$  为材料的消光系数，表示蓝宝石对光的吸收。

蓝宝石是典型的双折射晶体，一束光照射到蓝宝

石晶体上时会产生振动方向互相垂直的两束折射光（o 光和 e 光）。通过量子力学中极化方向的设置可得到  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  晶体在 [100] 和 [001] 晶向（对应于 o 光和 e 光）不同温度下的复折射率，如图 7 所示。其中，插图图为 [100]、[001] 晶向折射率的局部放大图。

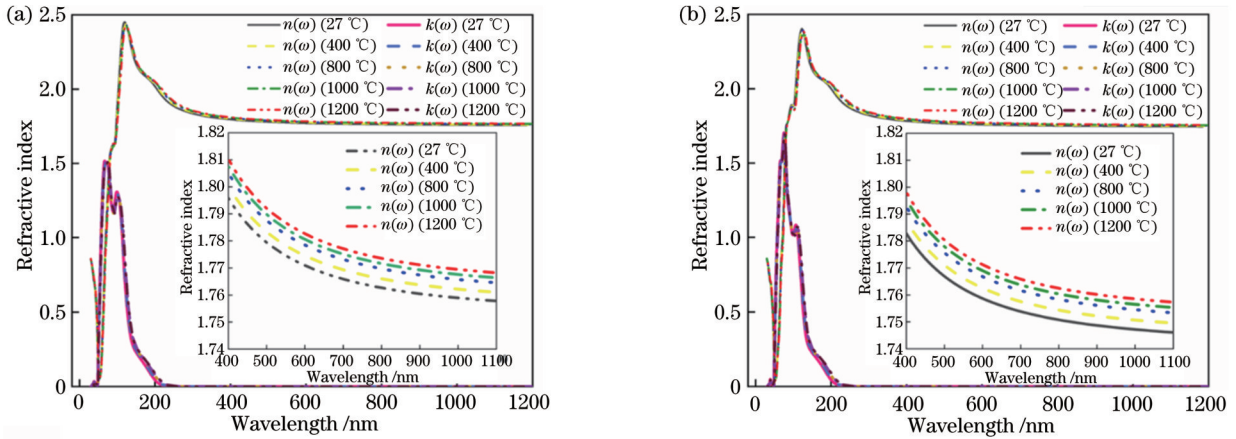


图 7  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的复折射率随温度变化的示意图。(a) [100] 晶向；(b) [001] 晶向

Fig. 7 Complex refractive index of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  varying with temperature. (a) [100] crystal orientation; (b) [001] crystal orientation

在图 7 中，在 10~400 nm 的紫外波段范围内，折射率  $n(\omega)$  随着波长的增加先减小后迅速增大，在到达峰值后又逐渐减小，消光系数  $k(\omega)$  的主要作用波长范围为 10~200 nm。插图详细地给出了晶体折射率  $n(\omega)$  随温度变化的关系。可以发现，在可见光至红外波段范围内，蓝宝石晶体折射率  $n(\omega)$  具有明显的波长依赖性和温度依赖性： $n(\omega)$  随着温度的升高而增大，且  $n_o > n_e$ ； $n(\omega)$  随着波长的增加而减小，且消光系数  $k(\omega)$  近乎为零。因此，实际应用时该波段的能量损耗可以忽略不计，晶体折射率可参考实部  $n(\omega)$ 。图 8 给出了蓝宝石晶体在 445 nm 波长处折射率随温度变化的曲线。

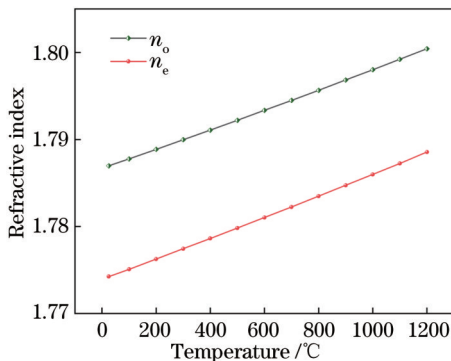


图 8 蓝宝石模拟折射率随温度变化关系

Fig. 8 Relationship between simulated refractive index of sapphire and temperature

由图 8 可知，在室温至 1200  $^\circ\text{C}$  温度范围内，模拟计算的蓝宝石折射率  $n_o$  和  $n_e$  随着温度的升高而线性增大，与光位移法测得的趋势一致，验证了折射率的温度依赖性。然而，理论计算的折射率温度系数相对偏小，1200  $^\circ\text{C}$  下模拟的折射率与实测值相差 9.3%，这是因为使用的第一性原理计算方法采用绝热近似，从而忽略了声子散射对电子的影响。在实际晶体中，晶格振动中的热振动会引起电子受到附加势场的作用，即电子-声子相互作用，进而影响介质极化过程。朱诗尧等<sup>[23]</sup> 计算发现，折射率温度系数与此电子声子作用成正相关，故忽略声子散射会引起计算的折射率温度系数偏小。

### 3.2.2 能带结构与介电函数

为探究蓝宝石折射率发生变化的原因，在布里渊区内沿选定  $K$  点取值路径  $G\text{-}A\text{-}H\text{-}K\text{-}G\text{-}M\text{-}L\text{-}H$  对  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的能带结构进行模拟计算，如图 9 所示。

由图 10(a) 可以看出， $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  晶体能带的价带顶和导带底均位于  $G$  点， $G$  点为布里渊区的中心位置，说明  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  具有直接带隙特征。计算室温下蓝宝石的禁带宽度为 6.252 eV，与高丽红等<sup>[24]</sup> 的第一性原理计算结果相同，但与相关实验报道<sup>[25]</sup> 的数据 (8.76 eV) 相比偏小。分析认为，这是因为计算使用的 GGA 方案通常会低估晶体的禁带宽度。因此，使用剪刀差算符对结果进行修正，最终的禁带宽度随温度变化的曲线如图 10(b) 所示。从图 10(b) 可以看出，随着温度的升

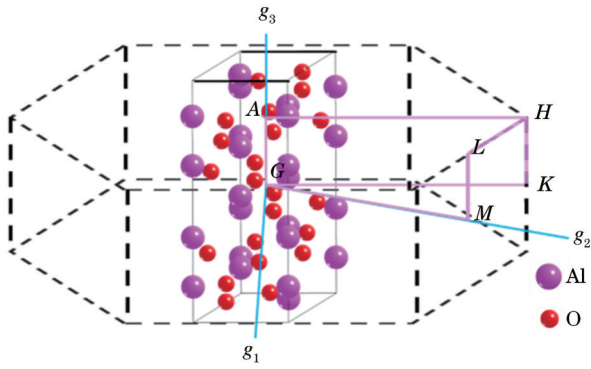


图 9 布里渊区内 K 点取值路径图

Fig. 9 Point K path graph in Brillouin zone

高,晶体的直接带隙能量在不断下降,这是因为温度升高后晶格发生膨胀,原子的波函数之间耦合减弱,从而最终的禁带宽度减小,该变化规律与相关报道<sup>[25]</sup>相符。进一步计算蓝宝石的介电函数实部  $\epsilon_1(445 \text{ nm})$  在不同

温度下的大小,如表 3 所示。由此可以推测,折射率升高的原因为温度升高引起晶格发生膨胀使得电子云在空间中分布得更广,此时极化偶极矩变大,进而蓝宝石的介电函数实部变大。

### 4 结 论

设计了基于 CMOS 的可视化高温光学测试装置,采用光位移法成功测定了蓝宝石在室温至 1200 °C 温度范围内的  $n_o$  和  $n_e$ 。结果发现,  $n_o$  和  $n_e$  都随着温度的升高而增大,热光系数分别为  $1.5793 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (o 光) 和  $1.5517 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (e 光),室温下蓝宝石的双折射率为 0.008,且双折射率随着温度的升高而增大。此外,通过第一性原理计算方法模拟计算了蓝宝石单晶材料在室温至 1200 °C 范围内的能带结构和光学性能参数。对比实验和模拟结果验证了此光学测试装置和光位移法的可靠性。本工作可为今后蓝宝石材料的开发应用、结构设计和性能优化等工作提供重要参考。

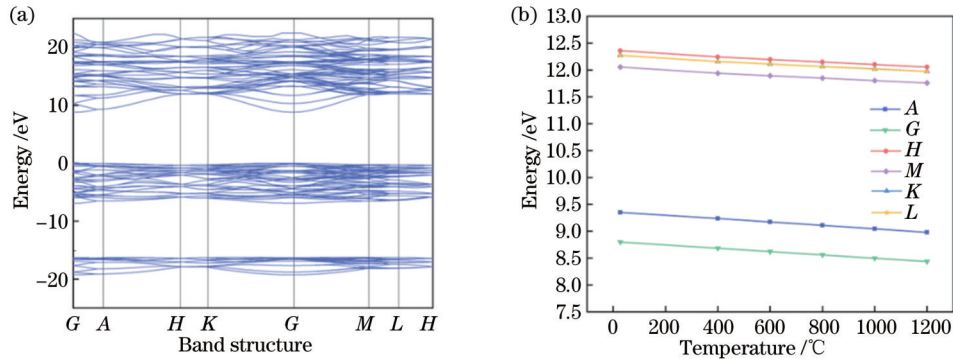


图 10  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的能带结构仿真结果。(a)  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  晶体的能带结构图; (b) 带隙能量与温度的关系图

Fig. 10 Simulation results of band structure of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ . (a) Band structure of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  crystal; (b) relationship between band gap and temperature

表 3  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  在不同温度下 445 nm 波长对应的介电函数实部

Table 3 Real part of dielectric function of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  at wavelength of 445 nm under different temperatures

Temperature / °C	27	400	800	1000	1200
$\epsilon_1$ at [100] crystal orientation / keV	3.193	3.206	3.222	3.229	3.237
$\epsilon_1$ at [001] crystal orientation / keV	3.148	3.162	3.178	3.186	3.195

### 参 考 文 献

[1] 沈永行. 从室温到 1800 °C 全程测温的蓝宝石单晶光纤温度传感器[J]. 光学学报, 2000, 20(1): 83-87.  
Shen Y H. Sapphire fiber thermometer ranging from the room temperature to 1800 °C [J]. Acta Optica Sinica, 2000, 20(1): 83-87.

[2] 代鑫, 李维来, 刘捷, 等. 蓝宝石光纤宽谱温度监测系统研究及应用[J]. 光学学报, 2013, 33(s1): s106006.  
Dai X, Li W L, Liu J, et al. Research and application on sapphire fiber temperature monitoring system with wide spectrum [J]. Acta Optica Sinica, 2013, 33(s1): s106006.

[3] Yang S, Hu D, Wang A B. Point-by-point fabrication and characterization of sapphire fiber Bragg gratings[J]. Optics Letters, 2017, 42(20): 4219-4222.

[4] Yang S, Homa D, Heyl H, et al. Application of sapphire-fiber-

Bragg-grating-based multi-point temperature sensor in boilers at a commercial power plant[J]. Sensors, 2019, 19(14): 3211.

[5] Mills D A, Alexander D, Subhash G, et al. Development of a sapphire optical pressure sensor for high-temperature applications [J]. Proceedings of SPIE, 2014, 9113: 91130H.

[6] 聂梦笛, 郑刚, 张雄星, 等. 调频连续波干涉光纤压力传感器的温度漂移补偿[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(7): 0728002.  
Nie M D, Zheng G, Zhang X X, et al. Compensation for temperature drift in frequency-modulated continuous-wave interference fiber optic pressure sensor[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(7): 0728002.

[7] 李浩杰, 张燕. 蓝宝石衬底多层 AlGaIn 薄膜透射谱研究[J]. 光学学报, 2020, 40(19): 1931002.  
Li H J, Zhang Y. Transmission spectrum of multilayer AlGaIn thin film on sapphire substrate[J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(19): 1931002.

- [8] 廖延彪, 潘安培, 吕玫, 等. 单模光纤双折射率测试的解析方法[J]. 光学学报, 1984, 4(12): 1062-1066.  
Liao Y B, Pan A P, Lü M, et al. An analytical method for measuring birefringence properties of single mode fiber[J]. Acta Optica Sinica, 1984, 4(12): 1062-1066.
- [9] 郝殿中, 吴福全, 孔伟金. 干涉法测量晶体的折射率[J]. 激光技术, 2003, 27(5): 407-408.  
Hao D Z, Wu F Q, Kong W J. Measurement of refractive index of crystals with interferometry[J]. Laser Technology, 2003, 27(5): 407-408.
- [10] 严利平, 蒋剑波, 楼盈天, 等. 基于激光单频干涉和 PTF 传感融合的空气折射率测量方法[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 60(5): 0512001.  
Yan L P, Jiang J B, Lou Y T, et al. Air refractive index measurement method based on laser single frequency interference and PTF sensor fusion[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 60(5): 0512001.
- [11] 袁春宇, 曹阳, 邓勇, 等. 以激光回馈干涉技术提高砷化镓和蓝宝石晶体的折射率测量精度[J]. 红外与激光工程, 2022, 51(3): 20210400.  
Yuan C Y, Cao Y, Deng Y, et al. Improving the measurement accuracy of refractive index of GaAs and sapphire crystal by laser feedback interferometry[J]. Infrared and Laser Engineering, 2022, 51(3): 304-310.
- [12] 刘宣君, 刘丽丽, 范可舟, 等. 基于多角度激发漫反射光信号的浑浊介质光学特性参数识别研究[J]. 中国激光, 2022, 49(15): 1507205.  
Liu X J, Liu L L, Fan K Z, et al. Optical property parameter identification of turbid media based on multi-angle excited diffuse reflection light signal[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(15): 1507205.
- [13] Cao X X, Li J B, Li J, et al. Refractive index of r-cut sapphire under shock pressure range 5 to 65 GPa[J]. Journal of Applied Physics, 2014, 116(9): 093516.
- [14] 唐士惠, 操秀霞, 何林, 等. 空位缺陷和相变对冲击压缩下蓝宝石光学性质的影响[J]. 物理学报, 2016, 65(14): 146201.  
Tang S H, Cao X X, He L, et al. Effects of vacancy point defects and phase transitions on optical properties of shocked  $\text{Al}_2\text{O}_3$ [J]. Acta Physica Sinica, 2016, 65(14): 146201.
- [15] 操秀霞, 卢铁城, 周显明. 冲击压缩下蓝宝石单晶散射消光的理论计算[J]. 原子与分子物理学报, 2011, 28(3): 485-493.  
Cao X X, Lu T C, Zhou X M. Optical scattering extinction in shocked sapphire by theoretical calculation[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2011, 28(3): 485-493.
- [16] Yang D, Thomas M E, Tropic W J. Infrared refractive index of sapphire as a function of temperature[J]. Proceedings of SPIE, 1999, 3705: 60-69.
- [17] Lee G W, Jeon S, Park S N, et al. Temperature and thickness dependence of IR optical properties of sapphire at moderate temperature[J]. International Journal of Thermophysics, 2011, 32(7): 1448-1456.
- [18] Thomas M E, Andersson S K, Sova R M, et al. Frequency and temperature dependence of the refractive index of sapphire[J]. Infrared Physics & Technology, 1998, 39(4): 235-249.
- [19] Krishnan S, Weber J K R, Schiffman R A, et al. Refractive index of liquid aluminum oxide at 0.6328  $\mu\text{m}$ [J]. Journal of the American Ceramic Society, 1991, 74(4): 881-883.
- [20] 燕云程. 第一性原理研究  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  的电子结构、力学性质和德拜温度[J]. 材料导报, 2018, 32(S1): 512-516.  
Yan Y C. First principle study of electronic structures, mechanical properties and Debye temperature of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ [J]. Materials Review, 2018, 32(S1): 512-516.
- [21] Tohei T, Watanabe Y, Lee H S, et al. First principles calculation of thermal expansion coefficients of pure and Cr doped  $\alpha$ -alumina crystals[J]. Journal of Applied Physics, 2016, 120(14): 1528.
- [22] Tear G R, Chapman D J, Eakins D E, et al. Birefringence measurements in single crystal sapphire and calcite shocked along the  $a$  axis[C]. AIP Conference Proceedings, 2017, 1793(1): 060005.
- [23] 朱诗尧, 方俊鑫. 折射率与电声子相互作用的关系[J]. 光学学报, 1987, 7(6): 534-543.  
Zhu S Y, Fang J X. Thermal effect of refractive index and the electron-phonon interaction[J]. Acta Optica Sinica, 1987, 7(6): 534-543.
- [24] 高丽红, 王富耻, 马壮, 等.  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的能带结构和光学函数的关系[J]. 稀有金属材料与工程, 2009, 38(S2): 773-776.  
Gao L H, Wang F C, Ma Z, et al. Relationship of band structure and optical functions of  $\text{Al}_2\text{O}_3$ [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2009, 38(S2): 773-776.
- [25] French R H. Electronic band structure of  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , with comparison to Alon and AlN[J]. Journal of the American Ceramic Society, 1990, 73(3): 477-489.

## Determination of High-Temperature Refractive Index of Sapphire by Laser Displacement Measurement and Theoretical Research

Cheng Zheng<sup>1</sup>, Zhu Min<sup>1</sup>, Liu Yunan<sup>1</sup>, Huang Zeya<sup>1\*</sup>, Wang Wei<sup>2</sup>, Shao Zhiqiang<sup>2</sup>

<sup>1</sup>College of Materials Science and Technology, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, Jiangsu, China;

<sup>2</sup>The 49th Research Institute of China Electronics Technology Group Corporation, Harbin 150000, Heilongjiang, China

### Abstract

**Objective** With the rapid development of aerospace technology, high-effective turbine engines are increasingly required. How to accurately measure the pressure in the turbine under a harsh environment becomes the key issue. The traditional piezoresistive sensor is greatly affected by electromagnetic interference, while the application temperature of the quartz optical fiber sensor is relatively low, which makes it no longer applicable. The sapphire optical fiber pressure sensor has

high-temperature resistance, anti-electromagnetic interference, and other excellent characteristics, which make it an ideal device for monitoring pressures at temperature above 1000 °C. There are few studies on the high-temperature refractive index of sapphire, and the highest temperature of refractive index measurement is only 700 °C. In this study, an experimental device for measuring the refractive index anisotropy of crystals is designed based on the Huygens principle. As temperature ranges from room temperature to 1200 °C, the ordinary refractive index  $n_o$  and the extraordinary refractive index  $n_e$  of sapphire at wavelength of 445 nm are measured by the laser displacement method. In addition, optical parameters such as the refractive index of sapphire in this temperature range are calculated by the first-principles method. Finally, the experimental and calculated results are compared to verify the reliability of the measured data.

**Methods** In this study, the high-temperature refractive index of sapphire is studied by experimental tests and computational verification. Firstly, we build an experimental device that can indirectly measure the high-temperature refractive index of sapphire. This device can adjust the temperature from room temperature to 1200 °C and guide the laser to pass through the sapphire crystal at a certain angle, and then make it received by the position-sensitive sensor. Besides, we install a polarizer on the optical path to measure the anisotropic refractive index of the crystal. Based on this device, we propose the laser displacement method to measure the refractive index of a single sapphire crystal under different temperatures. When the polarization direction of the laser is perpendicular to the optical axis of the crystal, the measured refractive index is  $n_o$ . When the polarization direction is parallel to the optical axis of the crystal, the measured refractive index is  $n_e$ . Subsequently, we perform error analysis and thermal expansion correction on the experimental results. In addition, we measure unit cell parameters of sapphire at high temperatures by variable temperature X-ray diffraction (XRD). According to the first-principles thinking, we calculate the band structure and optical properties of sapphire under different temperatures. The reliability of the laser displacement method is verified by experimental results, and the increase in the refractive index is explained in terms of lattice expansion.

**Results and Discussions** The practicability and credibility of the experimental device (Fig. 2) and laser displacement method (Fig. 3) are verified in this study. The ordinary refractive index  $n_o$  and the extraordinary refractive index  $n_e$  (Fig. 6) measured by the laser displacement method increase linearly with the increase in temperature. To improve the accuracy and reliability of the data, we analyze the horizontal error of laser translation and the pixel size of the complementary metal oxide semiconductor (CMOS) camera. Besides, we have corrected the error caused by the thermal expansion. The final thermo-optical coefficients of the sapphire are  $1.5793 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (o-ray) and  $1.5517 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (e-ray), respectively. The lattice parameters  $a$  and  $c$  [Fig. 4(a)] of sapphire measured by XRD increase linearly with the increase in temperature. To further verify the reliability of experimental data, we use the first-principles calculation to obtain the relationship between the refractive index of sapphire and temperature (Fig. 8 and Fig. 9). The results show that the changing trend of the calculated data is the same as that of the experimental data, and the reason why calculation results are smaller is analyzed. In addition, we calculate the relationship between the band gap and temperature (Fig. 10), and explain why the refractive index of sapphire becomes larger under high temperatures.

**Conclusions** Sapphire is an ideal structural material for high-temperature pressure sensors at a temperature above 1000 °C. The dearth of refractive index under high temperatures restricts the development of these sensors. In this paper, an experimental device for measuring the refractive index anisotropy of crystals is designed based on the Huygens principle. As temperature ranges from room temperature to 1200 °C, the ordinary refractive index  $n_o$  and the extraordinary refractive index  $n_e$  of sapphire at wavelength of 445 nm are measured by the laser displacement method. The final calculated thermo-optical coefficients are  $1.5793 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (o-ray) and  $1.5517 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  (e-ray), respectively. In addition, optical parameters such as the refractive index of sapphire in this temperature range are calculated by the first-principles method. The results show a similar variation of refractive index with temperature. The experiment and simulation results are in good agreement and verify the reliability of high-temperature refractive index data. Besides, we find that lattice expansion is the cause of a smaller band gap and a larger refractive index. The data provides an effective reference for the development and application of sapphire materials and the performance optimization design of related devices.

**Key words** materials; optical design and fabrication; sapphire; high-temperature optics; laser displacement method; first-principles thinking