

doi:10.3788/gzxb20164506.0605002

# 用严格耦合波分析法测试周期极化 LiNbO<sub>3</sub> 晶体畴结构

芦兴, 陈树强, 梁万国, 陈怀熹

(中国科学院海西研究院, 福州 350108)

**摘 要:**为了无损表征周期性极化晶体的畴结构,用严格耦合波分析法分析了周期性极化铌酸锂晶体的周期和占空比.以波长为 532 nm,功率为 20 mW 的连续激光器为光源,TE 偏振光垂直入射周期性极化的铌酸锂晶体表面,同时对晶体施加电压以改变其正负畴间的折射率差,通过光电探测器检测各衍射级的衍射效率.使用最小二乘法将光电探测器记录的实验数据与严格耦合波分析模拟的结果进行优化拟合,反演出晶体的周期和占空比.测试结果表明,该方法能准确地测试周期性极化铌酸锂晶体的周期和占空比,其周期的测试准确度为 0.05  $\mu\text{m}$ ,占空比的测试准确度为 0.05.比布喇格衍射公式计算的晶体周期准确度提高一个数量级.

**关键词:**光栅;严格耦合波分析法;衍射;周期性极化的铌酸锂晶体;优化;化学腐蚀

中图分类号:O436

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2016)06-0605002-4

## Use the Rigorous Coupled-wave Analysis to Test the Domain Structure of Periodically Polarized LiNbO<sub>3</sub> Crystal

LU Xing, CHEN Shu-qiang, LIANG Wan-guo, CHEN Huai-xi  
(West Coast Institute, Chinese Academy of Sciences, Fuzhou 350108, China)

**Abstract:** In order to nondestructively measure the domain structure of periodically polarized crystal, the rigorous coupled-wave analysis was used to analysis the period and duty cycle of the microstructure. A laser with a wavelength of 532 nm and power of 20 mW was used as the light source. The beam with TE polarization is vertically incident on the periodically poled lithium niobate crystal surface, at the same time the voltage is applied to the crystal to increase the refractive index difference between the positive and negative domains. The power of each diffraction orders is detected by a photo detector. The period and duty cycle of the periodically poled lithium niobate crystal can be got by using the least squares method to fit the simulation results of the rigorous coupled-wave analysis and the experimental data. The experimental accuracy of the period and the duty cycle is 0.05  $\mu\text{m}$  and 0.05 respectively. Compared with the period calculated by the Prague diffraction formula, the precision is improved by an order of magnitude.

**Key words:** Grating; Rigorous coupled-wave analysis; Diffraction; Periodically poled lithium niobate; Optimization; Chemical etching

**OCIS Codes:** 050.1755; 150.1960; 050.2770; 260.1180; 120.5280

## 0 引言

周期性极化的铌酸锂晶体(Periodically Poled Lithium Niobate, PPLN)拥有独特的电光、声光、弹光、

压电、热电和非线性光学特性,是声光、电光和非线性光学器件等应用中最具吸引力的材料之一<sup>[1-3]</sup>,现已被广泛应用于倍频<sup>[4]</sup>、光参量振荡<sup>[5]</sup>、差频<sup>[6]</sup>以及在光通信领域的波长变换<sup>[7]</sup>等技术中.在工程应用中,PPLN

**基金项目:**中国科学院科研装备研制项目和国家高技术研究发展计划(No. 2013AA030501)资助

**第一作者:**芦兴(1990-),男,硕士研究生,主要研究方向为微电子结构光学测试技术. Email:673177505@qq.com

**导师(通讯作者):**陈树强(1961-),男,研究员,博士,主要研究方向为微电子结构光学测试技术及光纤通信技术. Email:chensq@fjirsm.ac.cn

**收稿日期:**2015-12-17; **录用日期:**2016-03-01

<http://www.photon.ac.cn>

的结构参量准确度对各类器件性能影响很大,因此准确测试其晶体结构参量非常重要.目前,一般采用化学腐蚀法对周期性极化钽酸锂微结构进行检测<sup>[8-9]</sup>,该方法会严重破坏晶体的表面结构和光学性能,而且精确度较低.因此,如何避免这些不利因素并精确地探测晶体微结构已成为一项重要研究课题.

严格耦合波分析法(Rigorous Coupled-wave Analysis, RCWA)<sup>[10-11]</sup>是全矢量分析方法,计算精准;在光栅结构参量、材料以及衬底已知的前提下,能精确计算各衍射级的衍射效率.通过将模拟计算得到的数据与衍射效率的实验数据进行优化拟合,可实现对晶体微结构的测试.该测试方法只需要检测各衍射级次的衍射效率,简单易行,而且只有仪器误差和环境误差,减少了人为因素对测试结果的影响.

对于PPLM而言,正畴和负畴之间的折射率差很小,衍射现象不明显,其能量主要集中在零级<sup>[12]</sup>.通常情况下,零级的透射率可达到60%左右,而一级却只有1%左右,二级之后,透射率则不到0.1%.因此,除零级以外,其余衍射级次的衍射效率难以用于测试的优化拟合.本文根据钽酸锂的电光效应<sup>[13]</sup>,通过对PPLN施加电压增大正负畴之间的折射率差<sup>[14]</sup>,增强PPLN晶体的衍射效应.利用衍射电场的模拟计算结合优化分析可测试PPLN晶体的畴结构.

## 1 测试原理

周期性极化的钽酸锂晶体,其折射率呈周期性变化.为了无损地测试晶体的结构参量,本文基于严格耦合波理论,通过观察和测量微结构晶体的衍射光斑,获得晶体结构的周期和占空比等重要结构参量.

折射率呈周期性分布的PPLN晶体,其相对介电常量按傅里叶级数展开为

$$\epsilon(x) = \sum_h \epsilon_h \exp\left(j \frac{2\pi hx}{\Lambda}\right) \quad (1)$$

式中, $\epsilon_h$ 是第 $h$ 级傅里叶系数, $\Lambda$ 是晶体的周期.光以TE波偏振入射到晶体上时,电磁场的切向分量的傅里叶展开形式为

$$E_{gy} = \sum_i S_{yi}(z) \exp(-jk_{xi}x) \quad (2)$$

$$H_{gx} = -j \left(\frac{\epsilon_0}{\mu_0}\right)^{1/2} \sum_i U_{xi}(z) \exp(-jk_{xi}x) \quad (3)$$

$k_{xi}$ 满足Floquet条件 $k_{xi} = k_0 [n_i \sin \theta - i(\lambda_0/\Lambda)]$ .  $E_{gy}$ ,  $H_{gx}$ 满足Maxwell方程组

$$\begin{cases} H = (j/\omega\mu) \nabla \times E \\ E = -(j/\omega\epsilon) \nabla \times H \end{cases} \quad (4)$$

钽酸锂晶体是各向异性材料,其介电常量是一个张量,但假如入射光沿光轴入射(垂直入射),晶体的各向异性不会表现,介电常量在计算时仍可以按一个常量处理.按Maxwell方程组得到的耦合波方程的矩阵

形式为

$$[\partial^2 S_y / \partial (z')^2] = [A][S_y] \quad (5)$$

式中, $A = K_x^2 - E$ ,  $K_x$ 是对角矩阵, $K_{xii} = k_{xi}/k_0$ 是对角元素. $E$ 是介电常量矩阵, $E_{ip} = \epsilon_{i-p}$ .由耦合波方程可以得到 $S_y$ 和 $U_{xi}$ 的具体形式,根据边界条件,在 $z=0$ 和 $z=d$ ( $d$ 为晶体厚度)处有

$$\begin{bmatrix} \delta_{i0} \\ jn_i \delta_{i0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I \\ -jY_I \end{bmatrix} [R] = \begin{bmatrix} W & WX \\ V & -VX \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^+ \\ c^- \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$\begin{bmatrix} WX & W \\ VX & -V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c^+ \\ c^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I \\ jY_{II} \end{bmatrix} [T] \quad (7)$$

式中 $I$ 是单位矩阵, $R$ 、 $T$ 分别为反射、透射系数矩阵, $W$ 是矩阵 $A$ 的特征向量矩阵, $V = WQ$ , $Q$ 是矩阵 $A$ 的特征值的正的平方根 $q_m$ 组成的对角矩阵, $X$ 、 $Y_I$ 、 $Y_{II}$ 是对角矩阵,对角元素分为 $\exp(-k_0 q_m d)$ 、 $(k_{l,xi}/k_0)$ 、 $(k_{ll,xi}/k_0)$ ,其中

$$k_{l,xi} = \begin{cases} +k_0 [n_i^2 - (k_{xi}/k_0)^2]^{1/2}, & k_0 n_i > k_{xi} \\ -jk_0 [(k_{xi}/k_0)^2 - n_i^2]^{1/2}, & k_{xi} > k_0 n_i \end{cases} \quad (8)$$

$$I = I, II$$

对PPLN施加电压 $V$ 后,折射率发生变化

$$\Delta n = -\frac{1}{2} n_e^3 \gamma_{33} \frac{V}{d} \quad (9)$$

式中, $\gamma_{33}$ 为钽酸锂晶体沿晶轴方向的 $Z$ 方向的光电系数

$$n_g = n_{g0} + \Delta n, n_r = n_{r0} - \Delta n \quad (10)$$

式中, $n_{g0}$ 、 $n_{r0}$ 分别为极化后钽酸锂正负畴方向的折射率, $n_g$ 、 $n_r$ 分别为加电压后周期性极化钽酸锂晶体正负畴方向的折射率.若所加电压和光栅结构参量已知,入射光波长已知,则可得到式中 $W$ 、 $X$ 、 $V$ 、 $Y_I$ 、 $Y_{II}$ 矩阵的具体值,继而可以求出各衍射级的透射系数 $T_i$ 和反射系数 $R_i$ .因为本文主要是测试PPLN的结构参量,PPLN的透射较强,反射较弱,采用透射式更容易实现.由各衍射级透射系数可知各衍射级的透射率为

$$DE_{ti} = T_i T_i^* \operatorname{Re}[k_{ll,zi}/(k_0 n_i)] \quad (11)$$

由于光栅两侧有液体电极和夹具,对光栅每个衍射级的衍射效率产生影响.液体电极(一定浓度的氯化锂水溶液)的折射率为 $n_e$ ,夹具(厚度为1mm的玻璃)的折射率为 $n_t$ ,各衍射级的衍射角度 $\theta_i = \arctan(k_{xi}/k_z)$ .由折射定律 $n_e \sin \theta_i = n_t \sin \theta'_i = n \sin \theta''_i$ 可以知道各衍射级在夹具和空气中的衍射角 $\theta'_i$ 和 $\theta''_i$ .由菲涅尔公式求出各衍射级在液体电极与夹具界面的透射系数为

$$t'_i = \frac{2n_e \cos \theta_i}{n_e \cos \theta'_i + n_t \cos \theta'_i} \quad (12)$$

透射率为

$$T'_i = \frac{n_t \cos \theta'_i}{n_e \cos \theta'_i} (t'_i)^2 \quad (13)$$

在夹具与空气间的透射系数为

$$t''_i = \frac{2n_t \cos \theta'_i}{n_t \cos \theta'_i + n \cos \theta'_i} \quad (14)$$

透射率为

$$T_i^r = \frac{n \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i'} (t_i^r)^2 \quad (15)$$

经过界面反射后再次透射的光相对于初次透射的光强度很小,可以忽略.

激光入射到光栅经历空气-夹具界面和夹具-液体界面. 由于是垂直入射,透射率为

$$T = \frac{n_c}{n} \left( \frac{2n}{n+n_i} \right)^2 \cdot \left( \frac{2n_i}{n_i+n_c} \right)^2 \quad (16)$$

所以各衍射级透射效率为

$$T_i = DE_n T T_i' T_i^r \quad (17)$$

根据测试原理设计的测试系统如图 1.

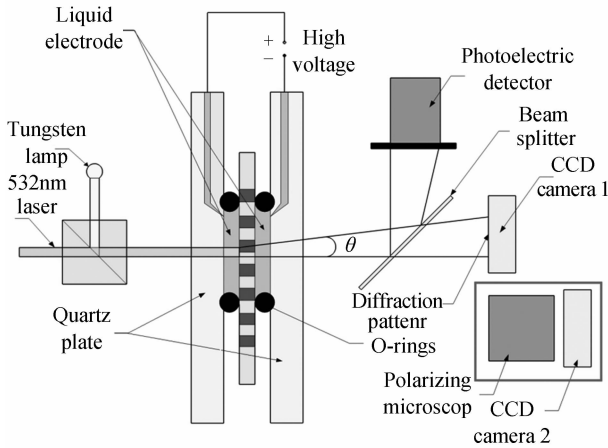


图 1 PPLN 的测试分析系统  
Fig. 1 Measurement system of PPLN

激光通过施加电压的 PPLN 晶体后产生衍射图样,通过光电探测器可检测到各衍射级的衍射效率  $MT_i$ . 偏光显微镜和 CCD 用来观测同一片晶体在化学腐蚀后的结构,用以检测测试结果.

作为对比,采用衍射光学的布喇格衍射公式计算晶体的结构参量<sup>[15]</sup>. 根据衍射光学的布喇格衍射公式可知  $D = \lambda L / \Delta x$ ,  $D$  为光栅周期,  $\lambda$  为入射波长,  $L$  为光栅与衍射屏之间的距离,  $\Delta x$  为屏上相邻两衍射级之间的距离,由此可以计算光栅的周期  $D$ . 但是布喇格衍射公式属于标量衍射理论下的近似公式,其计算准确度较低.

## 2 实验结果

实验所用的样品是厚度为 0.5 mm 的 PPLN,光电探测器与晶体之间的距离  $L$  为 655 mm. 采用 532 nm 的连续激光器作为光源,TE 偏振垂直入射到晶体上,可以清晰地观察到晶体加电压之前和加电压之后的衍射图案的变化,如图 2、3.

可以看到,加电压之前和之后的衍射图案有明显的变化,较高衍射级的光斑增强.

为了测量更多的衍射级,将光电探测器的测量范围调到最大. 光不经过晶体直接入射到记录仪上时,在

记录数据不饱和的前提下尽可能大地调节激光功率. 得到各衍射级的衍射效率,通过最小二乘法将实验数据和式(17)的结果进行优化分析,得到 PPLN 的周期  $T$  和占空比  $f$ . 表 1 和表 2 分别为两个周期差别较大的 PPLN 晶体多点测试的优化分析结果.  $D$  是用标量衍射理论计算的 PPLN 的周期.

测试结果表明 PPLN 晶体的周期变化很小,所制备的片子均匀性较好.

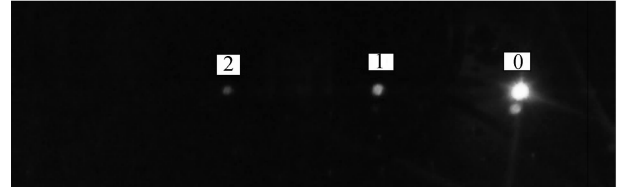


图 2 未加电压的 PPLN 衍射图样  
Fig. 2 Diffraction pattern of PPLN without voltage

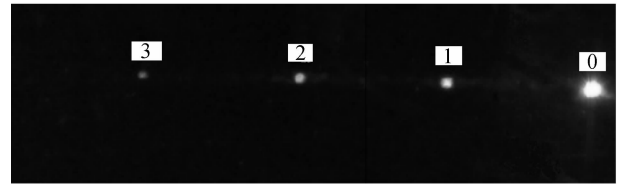


图 3 加电压后的 PPLN 衍射图样  
Fig. 3 Diffraction pattern of PPLN applied voltage

表 1 PPLN 晶体 1 的测试分析结果

Table 1 Analysis result of PPLN 1

$MT_0$	$MT_1$	$MT_2$	$MT_3$	$D$	$T$	$f$
0.6173	0.0352	0.0185	0.0020	18.91	18.92	0.37
0.6160	0.0337	0.0203	0.0021	18.79	18.94	0.38
0.6180	0.0336	0.0188	0.0024	19.21	18.93	0.37
0.6168	0.0323	0.0183	0.0015	19.02	18.95	0.38
0.6177	0.0330	0.0201	0.0019	19.15	18.91	0.37
0.6203	0.0238	0.0117	0.0023	18.84	18.92	0.35
0.6161	0.0337	0.0166	0.0024	18.93	18.93	0.38
0.6174	0.0342	0.0122	0.0022	19.17	18.91	0.37
0.6188	0.0294	0.0158	0.0019	18.83	18.93	0.36
0.6162	0.0309	0.0167	0.0025	19.14	18.91	0.36

表 2 PPLN 晶体 2 的测试分析结果

Table 2 Analysis result of PPLN 2

$MT_0$	$MT_1$	$MT_2$	$MT_3$	$D$	$T$	$f$
0.5891	0.0451	0.0028	0.0011	29.95	29.83	0.41
0.5894	0.0413	0.0028	0.0011	29.67	29.81	0.40
0.5902	0.0479	0.0031	0.0012	29.73	29.80	0.41
0.5896	0.0442	0.0023	0.0016	30.04	29.79	0.41
0.5909	0.0518	0.0029	0.0019	29.83	29.84	0.42
0.5912	0.0526	0.0030	0.0019	29.91	29.82	0.41
0.5891	0.0463	0.0028	0.0011	29.61	29.84	0.39
0.5879	0.0365	0.0025	0.0013	29.97	29.81	0.40
0.5901	0.0477	0.0029	0.0010	29.71	29.83	0.41
0.5905	0.0452	0.0028	0.0015	29.63	29.81	0.42

通过表 1、2,可以得到优化算法所得的周期  $T$  和衍射光学计算的周期  $D$  差别在  $0.2 \mu\text{m}$  左右,且通过 RCWA 算法优化分析的周期  $T$  相对于衍射光学得到的周期  $D$  的误差范围更小。

为了与优化算法作比较,对样品进行化学腐蚀,采用偏光显微镜进行观测,用 CCD 显示样品的结构,图 4、图 5 为两种样品腐蚀后的微结构显微图。从图中可以看出,晶体的周期和占空比与测试分析的结果差别很小,且相对于布喇格衍射公式计算的结果,本文的测试结果更接近晶体的周期,能精确到  $0.1 \mu\text{m}$ 。说明本文的优化分析算法是可行的。

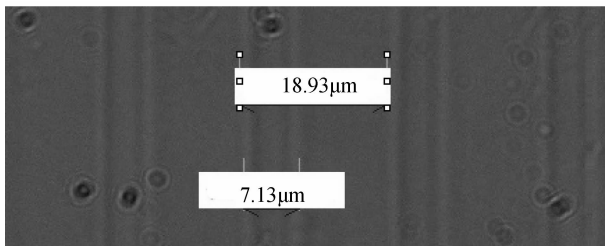


图 4 PPLN 晶体 1 腐蚀后的显微图  
Fig. 4 Microstructure of PPLN 1 after corrosion

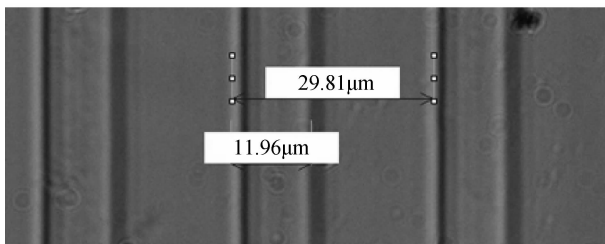


图 5 PPLN 晶体 2 腐蚀后的显微图  
Fig. 5 Microstructure of PPLN 2 after corrosion

### 3 结论

运用严格耦合波分析法,在已知折射率的前提下,理论分析了周期性极化铌酸锂晶体的衍射效率与周期和占空比之间的关系。并对施加电压后的 PPLN 微结构进行了光衍射实验研究,测试了微结构的周期和占空比。该方法无需与晶体接触,不会破坏晶体的表面结构,且精确度较高。但该方法对激光器功率稳定性和光电探测器灵敏度的要求很高,且只能测量矩形光栅结构。如何测量比较复杂的光栅结构有待进一步研究。

#### 参考文献

- [1] JOHNSON L F, BALLMAN A A. Coherent emission from rare earth ions in electro-optic crystals [J]. *Journal of Applied Physics*, 1969, **40**: 297-302.
- [2] ZHAO Li-juan, YANG Jian, XU Jing-jun, *et al.* Enhancement of  $\text{Er}^{3+}$  luminescence in  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$  crystals [J]. *Chinese Physics Letters*, 2001, **18**(9): 1205-1207
- [3] LI Wan-jie, ZHU Chang-hua, ZHAO Nan, *et al.* All-optical single-photon wavelength conversion based on cascaded sum-

frequency generation and difference-frequency generation[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, **42**(7): 763-767.

李万杰,朱畅华,赵楠,等.基于和频与差频级联的全光单光子波长变换[J].光子学报,2013,**42**(7):763-767.

- [4] CAPMANY J, PEREDA J A. Laser frequency converter for continuous-wave tunable Ti: sapphire lasers based on aperiodically poled  $\text{LiNbO}_3:\text{Nd}^{3+}$  [J]. *Applied Physics Letters*, 2001, **79**: 1751-1753.
- [5] MYERS L E, ECKARDT R C, FEJER M M, *et al.* Quasi-phase-matched optical parametric oscillators in bulk periodically poled  $\text{LiNbO}_3$  [J]. *Journal of the Optical Society of America B*, 1995, **12**(11): 2102-2116.
- [6] CHOU M H, HAUDEN J, AARBORE M A. 1.5- $\mu\text{m}$ -band wavelength conversion based on difference-frequency generation in  $\text{LiNbO}_3$  waveguides with integrated coupling structures[J]. *Optics Letters*, 1998, **23**(13): 1004-1006.
- [7] GAO Shi-ming. Wavelength management method of telecommunication-band polarization-entangled twin photons in periodically poled lithium niobate crystals[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2007, **36**(5): 820-824.  
高士明.周期极化铌酸锂中通信波段纠缠双光子的波长管理方法[J].光子学报,2007,**36**(5):820-824.
- [8] BROOKS R, TOWNSEND P D, HOLE D E, *et al.* Domain wall width of lithium niobate poled during growth[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2003, **36**: 969-971.
- [9] TIAN Ai-ling, WANG Hui-ting, DANG Juan-juan, *et al.* A novel method for subsurface damage measurement of optical components [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, **42**(2): 214-218.  
田爱玲,王会婷,党娟娟,等.抛光表面的亚表层损伤检测方法研究[J].光子学报,2013,**42**(2):214-218.
- [10] MOHARAM M G, GRANN E B, POMMET D A. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings[J]. *Journal of the Optical Society of America A-Optics Image Science and Vision*, 1995, **12**(5): 1069-1076.
- [11] LI Li-feng. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures[J]. *Journal of the Optical Society of America A-Optics Image Science and Vision*, 1996, **13**(9): 1870-1876.
- [12] WAN Ling-yu, LU Zhi-yong, LIAO Yang, *et al.* Study on electro-optical diffraction characteristics of periodically poled lithium niobate based on the rigorous coupled wave theory [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2014, **43**(1): 0105001.  
万玲玉,卢智勇,廖洋,等.基于严格耦合波理论的周期性极化铌酸锂晶体的点光衍射性质分析[J].光子学报,2014,**43**(1):0105001.
- [13] CHEN Yun-lin, HE Zhan, BO Zhou. Refractive index modulation in periodically poled MgO-doped congruent  $\text{LiNbO}_3$  crystal [J]. *Applied Physics Letters*, 2008, **93**: 222902.
- [14] GOPALAN V, MITCHELL T E, FURUKAWA Y, *et al.* The role of nonstoichiometry in  $180^\circ$  domain switching of  $\text{LiNbO}_3$  crystals [J]. *Applied Physics Letters*, 1998, **72**: 1981-1983.
- [15] WANG Dong-dong, CHEN Yun-lin, LI Bing, *et al.* Investigation of periodically poled microstructure crystal by grating diffraction[J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, **56**(12): 7153-7156.  
王栋栋,陈云琳,李兵,等.利用光衍射效应探测周期极化微结构晶体[J].物理学报,2007,**56**(12):7153-7156.