

横向划痕对光场调制的近场模拟*

章春来¹⁾ 王治国^{1)†} 刘春明¹⁾²⁾ 向霞¹⁾ 袁晓东²⁾ 贺少勃²⁾ 李莉¹⁾ 祖小涛¹⁾

1) (电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

2) (中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2011年6月16日收到; 2011年12月31日收到修改稿)

熔石英亚表面划痕对入射激光的近场调制是导致光学元件低阈值损伤的主要因素之一. 用三维时域有限差分方法研究了连续横向划痕的近场分布, 对比了尖锐截面与光滑截面场调制的差异, 着重探讨了光场调制与划痕宽深比 R 的关系. 研究表明: 酸蚀后的光滑截面有助于减弱近场调制, 这类划痕的 $R > 10.0$ 时调制较弱且相互接近, $R < 5.0$ 时调制显著增强. 当 R 取 1—3 时, 亚表面的调制达最大值, 最大电场幅值为入射波幅值的 4.3 倍. 当 R 取 1.0—3.5 时, 缺陷附近有 80% 以上取样点的最大电场幅值超过入射波幅值的 2 倍. 随着深度的增大, 强场区具有明显的“趋肤效应”: 位于划痕正下方的强场区首先往左右两侧移动, 然后移向抛物口界面以及水平界面, 同时衍生出的多条增强线诱导整个亚表面层的光场增强.

关键词: 横向划痕, 酸刻蚀, 时域有限差分, 激光辐照

PACS: 42.60.Jf, 42.62.-b, 42.70.Ce, 52.57.-z

1 引言

在大型高功率激光系统中, 石英材料被广泛应用于透镜、窗口和屏蔽片等, 其表面或亚表面的划痕、杂质及材料结构缺陷造成的热破坏和场破坏是诱导强激光辐照损伤的主要因素^[1,2]. 石英元件在研磨、抛光等加工过程中, 抛光粉(通常采用 ZrO_2 或 CeO_2) 与表面接触形成的压应力近似呈球对称分布, 如果亚表面沿着球半径方向开裂, 形成的划痕称径向划痕, 如果垂直半径诱导缺陷, 则形成横向划痕^[3,4]. 划痕通过对入射激光的调制引起场增强导致光学材料的损伤, 损伤一旦发生就会降低元件的透过率和光束质量, 产生波前畸变, 影响焦斑质量. 损伤点还会对光场进一步产生调制, 使下游元件产生新的更严重的损伤, 这是一个恶性循环^[5]. 为了延缓损伤的发生, 熔石英元件在使用前通常采用 HF 酸和 NH_4F 缓冲溶液(质量分数分别为 1% 和 15%, $pH \approx 5$) 浸泡刻蚀, 利用 HF 酸与 SiO_2 反应腐蚀掉熔石英表面的抛光层和部分亚

表面缺陷^[6], 并对抛光层下面的划痕起到钝化作用. 研究表明, 刻蚀 10 min 具有较好的提高激光损伤阈值的效果^[7,8].

对于亚表面划痕的酸刻蚀, Wong 等^[4] 用有限差分法研究了划痕形貌随酸蚀时间的变化, Suratwala 等^[9] 则用二维质量转移模型模拟了该形貌变化. 划痕对光场的调制可采用时域有限差分(FDTD)方法进行模拟^[10], 王毅等^[11] 用 FDTD 研究了二维的半圆形和三角形划痕, 指出宽度为 2λ 的尺寸对电磁场调制作用最明显. 花金荣等^[1] 将横向划痕简化为截面为三角形、长为有限长的三维划痕, 指出宽深比在 0.5—1、长度超过 $1 \mu m$ 的划痕对光场的调制最明显. 文献[1,11] 采用 FDTD 方法模拟的主要问题是模型过于简单, 没有考虑宽深比的实际覆盖面, 也没有考察酸刻蚀过程对划痕形貌造成的影响. 本文从实验结果出发, 建立了横向划痕的三维模型, 利用三维 FDTD 方法, 对比了刻蚀前后亚表面的光场分布, 探讨了一般性横向划痕对光场调制的宽深比效应, 希望能为熔石英亚表

* 国家自然科学基金(批准号: 10904008)、国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合科研基金(批准号: 11076008)和中央高等学校基本科研基金(批准号: ZYGX2009X007, ZYGX2010J045, ZYGX2011J043)资助的课题.

† E-mail: zgwang@uestc.edu.cn

面横向划痕诱导场致损伤的问题提供一定的量化依据.

2 建模与计算方法

选取 Corning 7980 型熔石英样品, 经超声清洗、酒精/甲苯反复浸泡并冲淋后, 放入 $\text{pH} \approx 5$ 的 HF 酸缓冲溶液中进行酸蚀. 刻蚀完成后立即

取出, 迅速用去离子水冲洗, 然后用无水乙醇进行脱水. 对酸蚀前后熔石英亚表面同一划痕的同一区域用 XEI-100 型原子力显微镜进行观测, 所得结果如图 1 所示. 从图 1 可以看出: 酸蚀前切向截面呈很尖锐的三角形, 经 10 min 酸蚀后截面趋于光滑. 酸蚀前其切向宽度约为 $4 \mu\text{m}$, 深度约为 125 nm ; 酸蚀后宽度约为 $4.2 \mu\text{m}$, 深度约为 350 nm , 深度与宽度的绝对变化量相近.

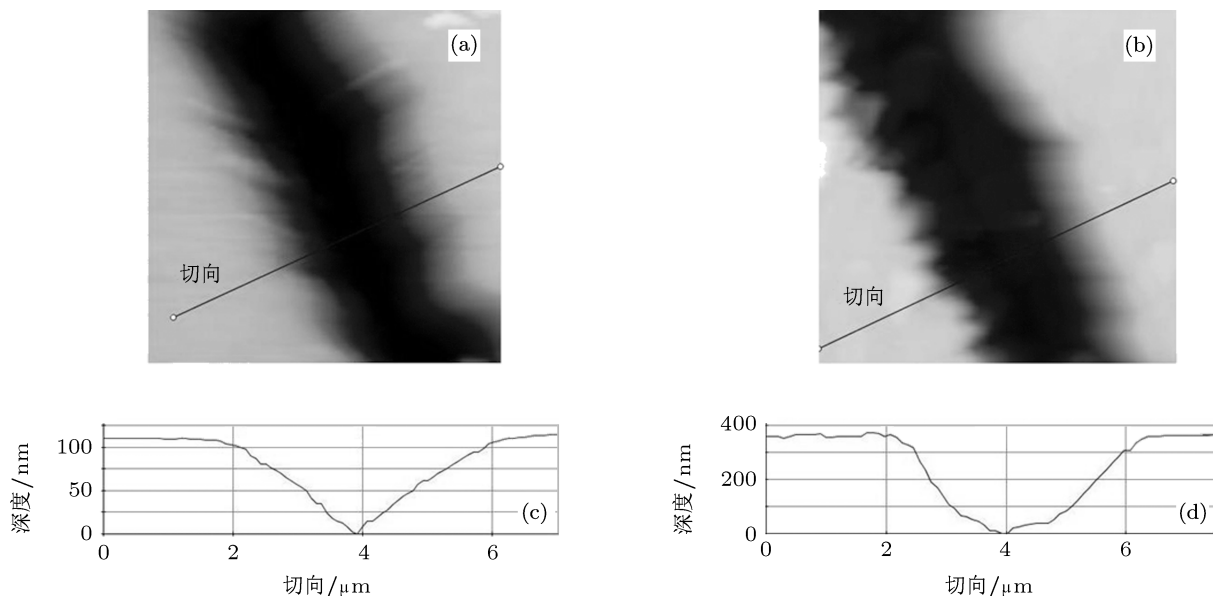


图 1 同一划痕同一测试段刻蚀前后的原子力显微镜照片及切向轮廓 (a) 刻蚀前的原子力显微镜照片; (b) 刻蚀 10 min 后的原子力显微镜照片; (c) 刻蚀前的切向轮廓; (d) 刻蚀 10 min 后的切向轮廓

对样片上其他划痕也进行了检测, 检测表明这类截面很光滑的横向划痕非常普遍; 且如果截面较钝, 经过酸蚀以后均有趋于光滑的迹象. 因此, 将连续横向划痕简单等效于截面为三角形或圆形的二维或三维有限长模型都是偏离实际情况的^[1,11]. 基于此, 建立如下计算模型: 刻蚀前 (图 2(a)) 划痕很锐利, 截面呈等腰三角形, 且长度 l 贯通计算区域, 即认为在模拟域内“无限长”. 刻蚀后截面呈光滑的抛物线形 (图 2(b)), 即划痕为抛物柱面. 本研究分两步进行, 首先研究同宽等深的三角划痕和抛物划痕的光场调制差别, 以确定酸刻蚀对划痕近场分布带来的影响. 然后探究抛物划痕的近场调制与其宽深比 $R(R = a/b)$ 的关系.

设抛物划痕在石英表面的中心坐标为 (x_0, y_0, z_0) , 则与图 2(a) 中同宽等深的抛物柱面方程可以表示为

$$z(x, y) = \frac{4b}{a^2}(y - y_0)^2 - b + z_0. \quad (1)$$

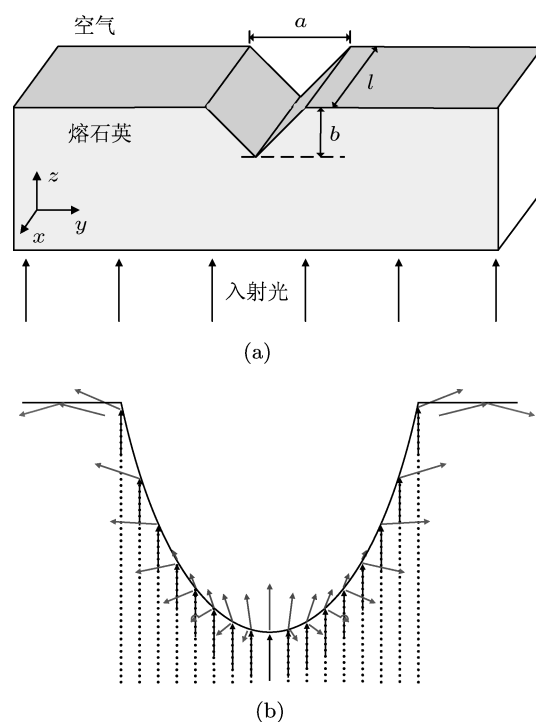


图 2 横向划痕模型 (a) 三角划痕; (b) 光在抛物划痕界面的传播

由图 2(b) 可知, 在抛物线底部入射角较小, 光线容易透射, 而左右两侧较高的位置入射角较大光线容易被反射. 因此, 抛物线的切线斜率 k 与光在界面处的反射率密切相关, 其取值为

$$|k| \in \left[0, \frac{4b}{a} \right]. \quad (2)$$

根据熔石英的折射率为 1.475(参考波长为 355 nm)^[12], 由此可得发生全反射的入射角为 42.685°. 要使激光在抛物界面发生全反射, 则切线斜率 $|k| \geq 0.9223$, 如果使得反射光线在水平界面上发生二次全反射, 则 $|k| \in (1, 2.5593]$.

计算时, 假设激光从熔石英的后表面垂直入射(图 2(a)), 激光波长 $\lambda = 355 \text{ nm}$. 入射波为沿 x 轴线极化的均匀平面波, 电场幅值 $|E|$ 为 1.0 V/m. 熔石英的相对介电常数 $\epsilon_r = 2.25$ ^[1-3,11], 差分网格尺寸 δ 在三维方向上均为 $\lambda/12$, 时间步长 $\Delta t = \delta/2c$ (c 为光速), 采用 Berenger 的完全匹配层 (PML) 吸收性边界条件^[10], PML 层厚度为 9δ . 模拟时忽略其他杂质或缺陷的存在, 并认为缺陷区域被空气填充.

3 计算结果与分析

3.1 两类划痕的调制对比

设三角划痕和抛物划痕同宽等深, $a = 80\delta$, $b = 40\delta$, 三维总场是 $80\delta \times 380\delta \times 165\delta$, 时间步 $n = 1500$, 水平分界面 $z = 150\delta$. y - z 截面电场幅值 $|E|$ 分布如图 3 所示, 可见对于后表面入射, 缺陷对电场的调制区域集中在缺陷左右两侧. 据 $x = 49\delta$ 平面的统计表明, 三角划痕的 $|E| > 2.5 \text{ V/m}$ 的数据点为 741 个, $|E| > 3.0 \text{ V/m}$ 的数据点为 228 个. 而对于抛物划痕, 这两个数据分别为 383 个和 60 个, 均小于前者. 比较 z 方向截面的最大电场, 三角划痕最大电场幅值 $|E|_{\max}$ 位于 $z = 138\delta$ 面, 其值为 4.65924 V/m, 抛物划痕的最大电场幅值 $|E|_{\max}$ 也位于 $z = 138\delta$ 面, 其值为 3.92943 V/m. 因此, 酸刻蚀对划痕的钝化可具体体现在对其形貌的改造上, 而光滑的截面有助于削弱近场强区. 从强场点分布看, 对比图 3(a) 和 (b) 可知, 抛物划痕的强区更加靠近表面. 这是因为三角划痕的切线斜率 $|k| \equiv 1$, 抛物划痕的切线斜率 $|k| \in [0, 2]$ (2 式), 对于后者, 近表面层的反射光线可以在水平界面产生二次全反射, 而前者不行.

由一次、二次全反射波与入射波的叠加形成了抛物划痕近表面层的强区. 从图 3(a) 可以看出, 在三角划痕的内部透射率极低, 这是由于光线在界面发生了全反射. 而对于抛物划痕, 出现了图 2(b) 所示的情况, 即在抛物线的底部入射波容易透射, 越往上透射率衰减越严重.

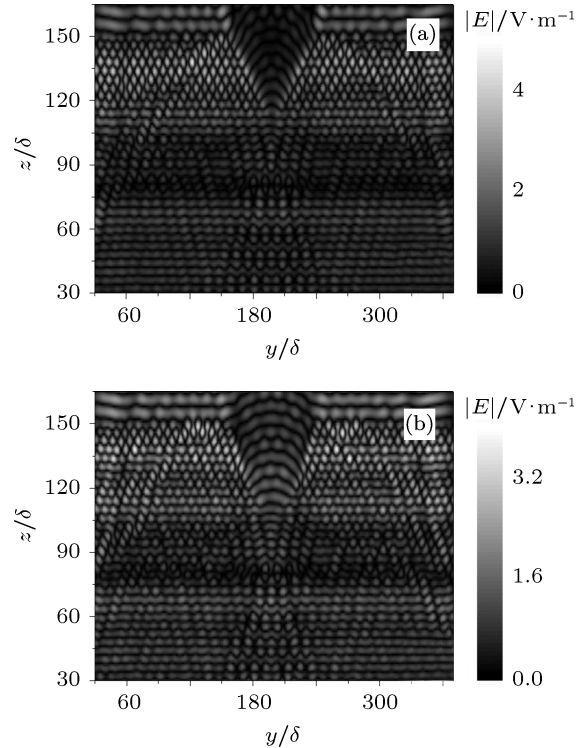


图 3 y - z 截面 ($x = 49\delta$) 的电场幅值分布 (a) 三角划痕; (b) 抛物划痕

3.2 近场调制的宽深比效应

本文研究了 $a = 136\delta$, R 从 45.3 逐渐缩小到 0.25 的抛物划痕的光场调制, 三维总场是 $80\delta \times 420\delta \times 115\delta$, 时间步 $n = 1200$, 水平分界面是 $z = 100\delta$. 研究表明, 深度从 $\lambda/4$ 开始增加, 起初强场区位于划痕正下方, 然后强区逐渐往左右两侧移动(图 4(a)), 期间出现了文献 [13] 报道的 V 型线, 其最强区位于 V 型线上方的转折处. 当 $b = 27\delta$ 时, 两侧与中间的强场点一样多(图 4(b)). 当 $b = 34\delta$ 时, 增强区完全移动到正下方左右两侧(图 4(c)). b 继续增大, 强区沿倾斜的增强线逐渐向抛物口界面移动(图 4(d)), 当强区全部移到抛物口时, 增强线旋转并逼近水平界面(图 4(e), (f)), 同时衍生出的多条增强线所表示的 $|E|$ 也逐渐增强(图 4(f), (g)). 当 $b = 55\delta$ 时, 最强点基本分布在最表面层. 因此, 随划痕深度的增加, 强激光作用下损伤起始点的转

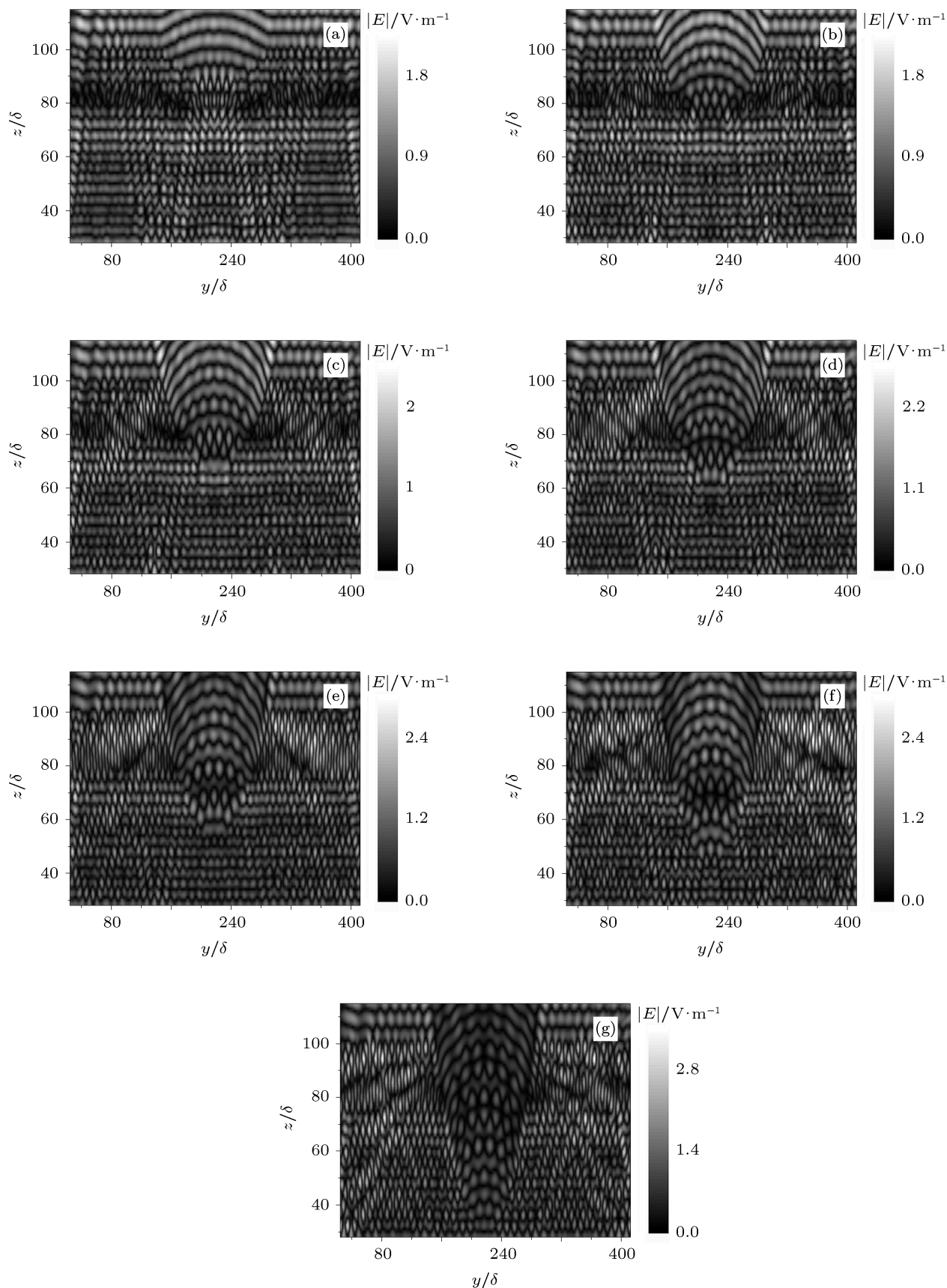


图4 当划痕深度 b 取不同值时 $y-z$ 截面 ($x = 49\delta$) 的电场幅值分布 (a) $b = 12\delta$; (b) $b = 27\delta$; (c) $b = 34\delta$; (d) $b = 39\delta$; (e) $b = 46\delta$; (f) $b = 55\delta$; (g) $b = 68\delta$

移过程是正下方 → 正下方左右两侧 → 划痕界面 → 近表面层, 抛物划痕诱导的起始损伤具有很明显的“趋肤效应”. 趋肤过程完成之后缺陷附近强场点的飞速增加, 将极大地弱化材料的力学、热学等性能, 使元件容易损伤. 对于图 1 中长约 $4 \mu\text{m}$ (即 136δ) 的抛物划痕, 最大深度应尽量控制在 $1.362 \mu\text{m}$ (46δ) 以内, 这样才能避免亚表面强场点的大幅度增加, 此时划痕的宽深比 $R \approx 3.0$.

图 5 为 $z = 95\delta$ 截面 (离水平界面 148 nm) 的电场幅值分布, 当 $b=39\delta$ 时, 最大场强很靠近抛物界面, 当 b 增至 55δ 时, 在电场明显增强的同时强场点的分布区域显著增大. 经统计, 当 $b = 39\delta$ 时, $|E| > 2.5 \text{ V/m}$ 的数据点是 32 个, 不存在 $|E| > 3.0 \text{ V/m}$ 的数据点; 而 $b = 55\delta$ 时, $|E| > 2.5 \text{ V/m}$ 的数据点是 517 个, $|E| > 3.0 \text{ V/m}$ 的数据点是 93 个, 这是强场区整体向水平表面移动的结果. 从缺陷内部的透射程度看, $b = 55\delta$ 时抛物底部的透射率要明显低于 $b = 39\delta$ 的情况, 这是由于深度不同使得抛物柱面透射程度不同所致.

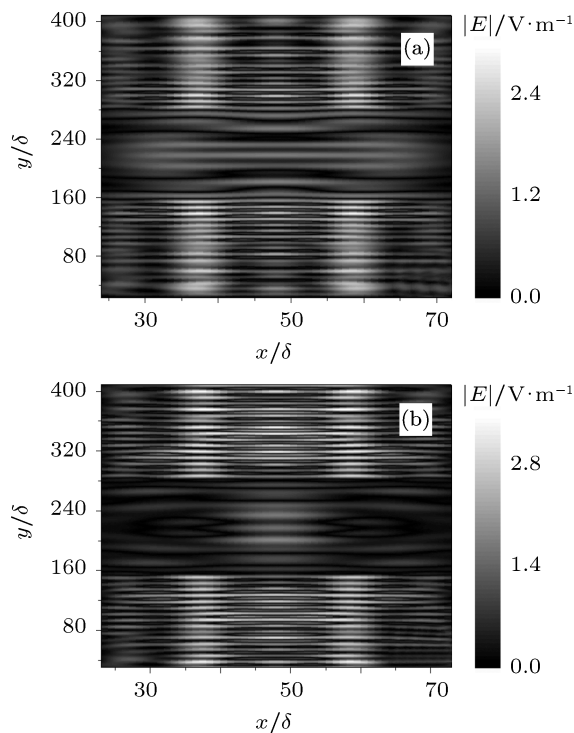


图 5 当划痕深度 $b = 39\delta, 55\delta$ 时, $z = 95\delta$ 截面的电场幅值分布 (a) $b = 39\delta$; (b) $b = 55\delta$

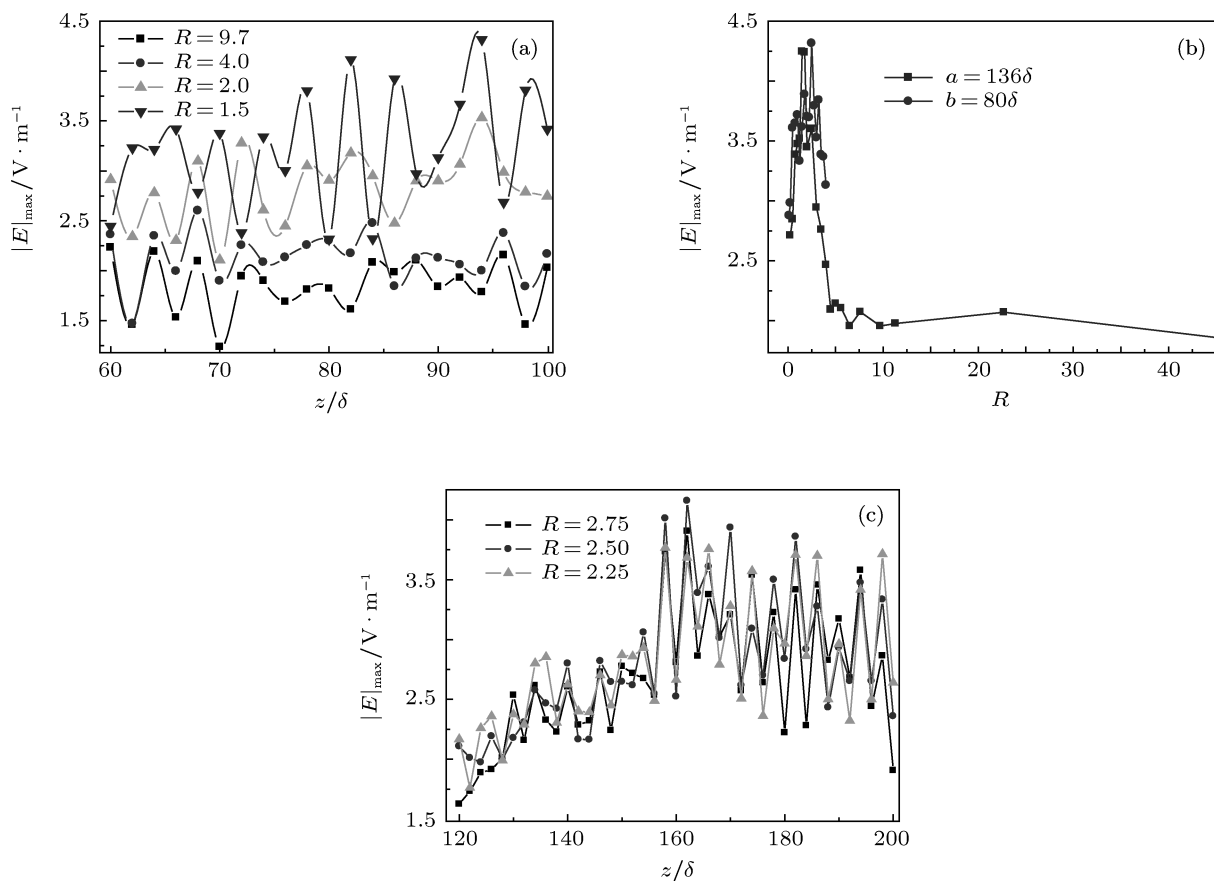


图 6 最大电场幅值 $|E|_{\text{max}}$ 分布 (a) $a = 136\delta$ 的 z 方向截面; (b) $x = 49\delta$ 平面; (c) $b = 80\delta$ 的 z 方向截面

图 6(a) 所示为划痕附近的 z 方向截面的 $|E|_{\max}$ 分布, 每隔 2δ 取一个样; 图 6(b) 所示为 $|E|_{\max}$ 与 R 的关系. 由图 6(b) 可见, 当宽深比 $R > 10$ 时, 划痕对电场的调制较弱, 而且不同宽深比 R 的调制基本相近, $|E|_{\max}$ 在 2.0 左右摆动. 当 $R < 5$ 时, 划痕附近的电场迅猛增加, 同时电场走势由水平逐渐转为倾斜 (图 6(a)), 电场幅值的振荡更加剧烈, 突显了“趋肤效应”, 说明缺陷对电场的调制正在增强. 由图 6(b) 还可以看出: 当 $R = 1.5$ 时, 亚表面电场出现最大调制, z 方向截面中电场的最大幅值 $|E|_{\max} = 4.31556 \text{ V/m}$, 位于 $z = 94\delta$ 面. 当 $R < 1.5$ 时, 调制逐渐减弱. 据统计, 当 $0.75 < R < 3.5$ 时, z 方向截面中 80% 以上样本点的 $|E|_{\max}$ 大于入射波幅值的 2 倍.

为了考察宽度对场调制的影响, 设定 $b = 80\delta$, R 从 4.25 逐渐缩小到 0.125. 三维总场是 $80\delta \times 420\delta \times 215\delta$, 时间步 $n = 1600$, 水平分界面是 $z = 200\delta$. y - z 截面的 $|E|_{\max}$ 与 R 的关系如图 6(b) 所示, z 方向截面的 $|E|_{\max}$ 分布如图 6(c) 所示. 由图 6(b) 可以看出, 随着 R 的减小, 调制同样是先增大后减小. 当 $R \approx 2.5$ 时电场幅值达到最大值, 其峰值为 4.15858 V/m . 由图 6(c) 可以看出, 当 $1.75 < R < 2.75$ 时, 亚表面缺陷层调制最佳且较为接近. 据统计, 当 $1.0 < R < 4.0$ 时, z 方向截面中 80% 以上考察点的 $|E|_{\max} > 2.0 \text{ V/m}$. 综合 $a = 136\delta$ 和 $b = 80\delta$ 两类情况, 当 R 为 1—3.5 时, z 方向截面中必有 80% 以上考察点的 $|E|_{\max} > 2.0 \text{ V/m}$. 另外从图 6(c) 总体上看, 三条曲线的总趋势是亚表面电场先增大后减小, 最强峰值约出现在 $z = 162\delta$ 面. 图 7 是 $R = 2.5$ 时 $x = 49\delta$ 面的电场幅值分布. 从图 7 可以看出, 当 b 较大时, 划痕底部反射率较低、调制较弱, 中部全反射调制最强, 上部虽然仍能完成全反射 ($|k| \in [0, 1.6]$), 但是划痕纵深较长导致反射面积

较大, 较小密度的反射光与入射波叠加很难获得一个更大的调制, 因此调制相对较弱, 这就形成了亚表面先增强后减弱的态势. 但是, 最表层的电场幅值依然被明显地调制增强.

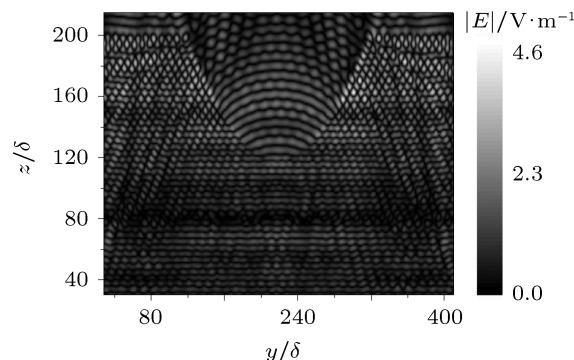


图 7 y - z 截面 ($x = 49\delta$) 的电场幅值分布

4 结论

经过酸刻蚀, 大多数截面尖锐的连续横向划痕趋于光滑, 本文用三维 FDTD 方法对比研究了这类划痕酸蚀之后对电场幅值分布的影响, 结果表明酸蚀引起的划痕形貌的改变是延缓场致损伤的重要原因. 在此基础上, 深入探讨了光滑划痕的近场调制与其宽深比 R 的关系. 结果表明, $R > 10.0$ 的划痕对光场的调制较弱且相互接近, $R < 5.0$ 时将显著增强. 当 R 取值为 1—3 时, 可获得最大调制, 最大电场幅值为入射波幅值的 4.3 倍. 研究表明, R 取值为 1.0—3.5 时, 缺陷附近有 80% 以上取样点的最大电场幅值超过入射波幅值 2 倍. 随着深度 b 的增大, 强场区具有明显的“趋肤效应”, 即位于划痕正下方的强场区首先往左右两侧移动, 然后移向抛物口界面以及水平界面, 同时衍生出的多条增强线诱导整个亚表面层的光场增强. 如果深度 b 较大, 含划痕的亚表面层将会出现先增大后减小的光场调制.

- [1] Hua J R, Jiang X D, Zu X T 2010 *High Power Laser and Particle Beams* **22** 1441 (in Chinese) [花金荣, 蒋晓东, 祖小涛 2010 强激光与粒子束 **22** 1441]
- [2] Wang F R, Huang J, Liu H J, Zhou X D, Jiang X D, Wu W D, Zheng W G 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5122 (in Chinese) [王凤蕊, 黄进, 刘红婕, 周信达, 蒋晓东, 吴卫东, 郑万国 2010 物理学报 **59** 5122]
- [3] Hua J R, Zu X T, Li L, Xiang X, Chen M, Jiang X D, Yuan X D,

Zheng W G 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2519 (in Chinese) [花金荣, 祖小涛, 李莉, 向霞, 陈猛, 蒋晓东, 袁晓东, 郑万国 2010 物理学报 **59** 2519]

- [4] Wong L, Suratwala T, Feit M D, Miller P E, Steele R 2009 *J. Non-Cryst. Solids* **355** 797
- [5] Bercegol H, Bouchut P R, Lamaignere L, Le Garrec B, Raze G 2004 *Proc. SPIE* **5273** 312
- [6] Camp D W, Kozlowski M R, Sheehan L M, Nichols M A, Dovik

- M, Raether R G, Thomas I M 1998 *Proc. SPIE* **3244** 356
- [7] Jiang Y, Yuan X D, Xiang X 2010 *J. Optoelectron. Laser* **21** 1519 (in Chinese) [蒋勇, 袁晓东, 向霞 2010 光电子·激光 **21** 1519]
- [8] Chen M, Xiang X, Jiang Y 2010 *High Power Laser and Particle Beams* **22** 1383 (in Chinese) [陈猛, 向霞, 蒋勇 2010 强激光与粒子束 **22** 1383]
- [9] Suratwala T, Miller P E, Bude J, Steele W, Shen N, Monticelli M, Feit M D, Laurence T, Norton M, Carr C, Wong L 2011 *J. Am. Ceram. Soc.* **94** 416
- [10] Ge D B, Yan Y B 2005 *FDTD Method for Electromagnetic Waves* (Xi'an: Xidian University Press) pp67, 133 (in Chinese) [葛德彪, 闫玉波 2005 电磁波时域有限差分方法 (西安: 西安电子科技大学出版社) 第 67, 133 页]
- [11] Wang Y, Xu Q, Chai L Q 2005 *High Power Laser and Particle Beams* **17** 67 (in Chinese) [王毅, 许乔, 柴立群 2005 强激光与粒子束 **17** 67]
- [12] Duan L H 2004 *J. Func. Mater.* **35**(Suppl.) 383 (in Chinese) [段利华 2004 功能材料 **35**(增刊) 383]
- [13] Qiu S G, Wolfe J E, Monterrosa A M, Feit M D, Pistor T V, Stolz C J 2009 *Proc. SPIE* **7504** 75040M

Near-field modulation of lateral cracks*

Zhang Chun-Lai¹⁾ Wang Zhi-Guo^{1)†} Liu Chun-Ming¹⁾²⁾ Xiang Xia¹⁾
Yuan Xiao-Dong²⁾ He Shao-Bo²⁾ Li Li¹⁾ Zu Xiao-Tao¹⁾

1) (School of Physical Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

2) (Research Center of Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 16 June 2011; revised manuscript received 31 December 2011)

Abstract

Light intensification caused by cracks in fused silica subsurface is one of main factors of laser-induced damage to optical materials. Three-dimensional finite-difference time-domain method is used to simulate parabola-section-model lateral cracks. Moreover, the relationship between light intensification and breadth-to-depth ratio R is discussed. The results show that the morphology change after acid etching is an important cause of damage mitigation. Modulation is very weak and close to each other when R is greater than 10.0 and it increases rapidly when R less than 5.0. The electric field intensity reaches a maximal value when R ranges from 1.0 to 3.0, and the maximal electric field is 4.3 V/m. The electric field intensity of more than 80% samples exceed 2 times than the incident light when R ranges from 1.0 to 3.5. Intensified area has the skin effect with depth increasing. It is demonstrated that enhanced area lying directly below the crack firstly shifts to left and right sides, then it moves to parabola-section interface and the horizontal interface. Finally, the whole subsurface will be enhanced. In addition, electric field modulation firstly increases and then decreases in the z direction when depth is large enough.

Keywords: lateral crack, acid etching, finite-difference time-domain, laser irradiation

PACS: 42.60.Jf, 42.62.-b, 42.70.Ce, 52.57.-z

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10904008), the National Natural Science Foundation of China and the Scientific Research Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 11076008), and the Fundamental Scientific Research Foundation for the Central Universities of China (Grant Nos. ZYGX2009X007, ZYGX2010J045, ZYGX2011J043).

† E-mail: zgwang@uestc.edu.cn