

## 激光辐照下熔石英表面损伤的原子模拟\*

张学阳<sup>1)†</sup> 陈军<sup>2)‡</sup> 胡望宇<sup>3)</sup>

1) (湖南工程学院计算科学与电子学院, 湘潭 411104)

2) (北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

3) (湖南大学材料科学与工程学院, 长沙 410082)

(2023年4月15日收到; 2023年5月27日收到修改稿)

熔石英光学元件是惯性约束核聚变点火装置的核心部件, 由于该装置严苛的点火条件对高功率激光的需求, 熔石英光学元件在强激光下的损伤是制约点火装置运行的关键. 因此, 研究激光辐照下熔石英的表面损伤对惯性约束核聚变点火装置的研制至关重要. 本文采用大规模非平衡分子动力学模拟方法和适用于动态过程的微结构分析技术, 研究激光加载下熔石英表面的损伤过程, 基于理论研究的高温等离子体火球模型模拟高温熔石英等离子体球对熔石英表面的破坏, 通过跟踪局域结构、温度分布和表面形貌状态, 分析影响熔石英表面损伤的因素. 研究表明, 高温熔石英球的尺寸、距表面的距离和温度都对熔石英表面的破坏具有重要的影响. 本文可为认识激光辐照下熔石英中复杂的损伤过程提供指导.

**关键词:** 激光辐照损伤, 熔石英, 分子动力学**PACS:** 62.50.-p, 61.80.-x**DOI:** 10.7498/aps.72.20230606

## 1 引言

惯性约束核聚变 (ICF) 是目前最有希望解决能源危机的途径, 因此吸引各个国家的广泛关注. 在高强度激光聚焦于靶丸引起其温度和压力达到临界条件后, 燃料中发生核聚变反应并释放能量, 这一临界条件也被称作点火条件. 由于 ICF 装置的点火条件极为严苛, 需要达到极高的温度和压力, 因此对激光功率的需求很高, 目前强激光辐照下终端光学元件的损伤严重地制约了 ICF 装置的运行<sup>[1-5]</sup>, 而熔石英是终端光学元件的重要组成材料. 熔石英激光辐照损伤的特点是集中于表面<sup>[6-9]</sup>, 而且随着重复辐照损伤产生指数形式的增长<sup>[10]</sup>. 损伤的高速增长使得熔石英元件的性能快速降低, 因此研究激光辐照下熔石英表面的损伤机理, 可以

提高熔石英光学元件的使用寿命.

熔石英激光辐照损伤的研究大致上可以分为 3 个阶段<sup>[11-14]</sup>: 吸收模型、冲击波产生过程和冲击波导致的损伤. 关于熔石英损伤形成原因最早提出的是小球吸热模型<sup>[15]</sup>, 该模型认为熔石英表面的损伤是由材料亚表面的杂质和缺陷引起的. 后来 Feit 和 Rubenchik<sup>[16]</sup> 又提出等离子体火球爆炸模型来弥补小球吸热模型的不足, 认为杂质吸收激光能量导致周围的熔石英熔化与气化, 形成高温高压的等离子体火球, 等离子体火球继续吸收激光能量并不断扩张, 并最终发生爆炸. 本文主要关注等离子体火球形成后的损伤阶段, 即等离子体快速膨胀而产生爆炸, 使得吸收点附近产生大量的裂纹和孔洞, 同时在表面发生喷射.

冲击波损伤的阶段最开始在实验中被发现, 例如美国劳伦斯利弗莫尔 (Lawrence Livermore) 国

\* 计算物理实验室青年基金 (批准号: 6142A05QN22011) 和湖南省自然科学基金 (批准号: 2023JJ40209) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xyzhang2012@hnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: jun\_chen@iapcm.ac.cn

家实验室的 Demange 等<sup>[13]</sup>在 2011 年报道了关于熔石英在激光辐照下产生冲击波的实验研究结果. 他们的研究显示了高速冲击波的形成过程. 熔石英吸收能量后产生高温高压区域并向外膨胀, 在激光脉冲结束后产生了球形的冲击波并在坑底形成微米大小的微观裂纹. 还观察到吸收前缘半径随时间线性增长, 这与 Carr 等<sup>[11]</sup>的模拟结果一致. 不久后, Demos 等<sup>[14]</sup>又在实验上验证了高温高压等离子体的膨胀和冲击波的产生过程. 上述实验观察证实了熔石英中激光能够诱导冲击波的产生, 而高速冲击波是造成熔石英表面损伤的重要因素. 熔石英表面的损伤过程中造成的结构改变会降低熔石英的损伤阈值, 且熔石英表面的喷射物对 ICF 装置来说是一个重要的污染源, 这些都会缩短 ICF 装置中熔石英光学元件的使用寿命<sup>[17-21]</sup>. 因此, 激光诱导的冲击波导致熔石英表面损伤的微观过程受到极大的关注.

对熔石英的损伤阶段来说, 由于损伤过程的瞬时性, 实验难以通过目前的诊断方法捕捉到更多有效的信息, 计算机模拟协助实验是新的研究思路. 分子动力学模拟 (MD) 能够提供冲击波作用下微观结构的动态变化, 有助于深入理解材料的动态损伤机制. 例如 Kubota 等<sup>[22]</sup>利用 MD 方法计算了冲击波速度随活塞速度变化的雨贡纽 (Hugoniot) 曲线, 并观察到弹性波到塑性波的转换. 该工作还解释了实验<sup>[23]</sup>上损伤后的熔石英的拉曼 (Raman) 谱中 D1 和 D2 谱线增强. 关于激光辐照产生的冲击波损伤熔石英表面的模拟也陆续展开, 例如 Su 等<sup>[24]</sup>利用 MD 方法研究了平板冲击下熔石英表面喷射的微观过程, 以及相应的力学机制, 分析了熔石英表面喷射的产生条件以及孔洞的产生等结构变化. Shen 等<sup>[25]</sup>在上述工作的基础上研究了背景气体对平板冲击下熔石英的喷出物分布和输运特性的影响. 其结果表明, 表面划痕的几何形状对射流头部的速度和质量都有较大影响, 这与金属表面喷射研究的结论是一致的<sup>[26,27]</sup>. 上述模拟工作对熔石英的损伤过程进行探索, 但是由于熔石英激光损伤过程极其复杂, 涉及到多种因素的耦合, 还有很多损伤的细节亟待揭示, 例如高温等离子体火球形成后影响爆炸过程的因素, 以及影响表面损伤形貌的特点的因素等.

综合上述, 虽然已经对熔石英在激光辐照下的损伤过程进行一定的探索, 但目前对其微观细节还

缺乏足够的了解, 因此关于熔石英表面损伤的研究还有待进一步开展. 本文主要探究的是由熔石英内部的高温熔石英火球所引起的表面损伤的微观机制, 结合 MD 方法, 模拟的过程虽然和实际的损伤过程在空间和时间尺度上存在一定差异, 但是能得到损伤过程的诸多微观细节, 可以为认识激光辐照下熔石英中复杂的损伤过程提供指导.

## 2 计算方法

采用基于分子动力学方法的 Lammmps 软件<sup>[28]</sup>模拟了熔石英在激光辐照下的损伤过程. 本文采用的是 Tersoff 势函数<sup>[29]</sup>, 因为之前已有工作验证了 Tersoff 势函数的压力-温度和压力-体积曲线, 证明了 Tersoff 力场在强冲击条件下的适用性<sup>[24]</sup>. 该模拟的开展首先要构建一个符合实际结构的熔石英模型样品, 设定整个样品的尺寸在  $X$ ,  $Y$  和  $Z$  轴维度分别是  $24.7 \text{ nm} \times 24.7 \text{ nm} \times 24.7 \text{ nm}$ , 总原子数是 1000188, 初始模型中 Si 和 O 原子按 1:2 的比例随机添加, 各原子间互不重叠, 这样模型初始密度为实验上测得的熔石英的密度  $2.2 \text{ g/cm}^3$ , 然后样品在 5000 K 的正则系综 (NVT) 下充分弛豫 100 ps, 其目的是消除初始构型随机性的影响, 然后以  $5 \text{ K/ps}$  的变化率将样品从 5000 K 降温至 300 K, 最后将样品的系综条件改为等温等压系综 (NPT), 温度保持在 300 K, 压强保持在 0 GPa 附近, 充分弛豫至密度收敛, 即得到最终的样品. 经过测算其密度为  $2.3 \text{ g/cm}^3$ , 与实验值略有偏差, 使用其他力场也存在这样一个幅度的偏差, 该误差不会影响本文的结论. 上述弛豫的过程中样品都设定为三维周期性边界条件. 模拟的时间起点为高温熔石英区域已经形成, 图 1 是模型初始时刻的二维示意图, 淡蓝色表示常温下 (300 K) 的熔石英基底材料, 红色表示杂质吸热而形成的高温熔石英球形区域. 实验文献<sup>[12]</sup>表明, 激光辐照下熔石英等离子体区域的温度会达到一万多摄氏度. 因此, 高温熔石英区域的温度设定为 10000 K, 为了简化变量且考虑到损伤过程的瞬时性, 通过采用 NVT 系综使该区域原子的温度维持不变. 周围常温的熔石英采用微正则系综 (NVE),  $X$  和  $Z$  方向为周期性边界条件,  $Y$  方向为收缩边界条件. 本文计算压力采用了维里压力<sup>[30]</sup>的算法, 模拟的时间步长为 1 fs, 模拟过程的可视化通过 Ovito<sup>[31]</sup>来实现. 在样品充分弛豫后,

分别验证了其键角分布函数和对关联函数, 这两个参数分别对应着熔石英的短程序和长程序, 键长  $r_{\text{SiO}} = 1.65 \text{ \AA}$ , 键长  $r_{\text{SiSi}} = 3.15 \text{ \AA}$ , 键长  $r_{\text{OO}} = 2.69 \text{ \AA}$ , O—Si—O 的键角分布主要集中在  $109^\circ$ , 而 Si—O—Si 键角分布主要集中在  $145^\circ$ , 该计算结果与实验结果与之前的模拟结果相符合 [22,24,32,33], 说明所制备的熔石英模型与熔石英的实际结构相符合.

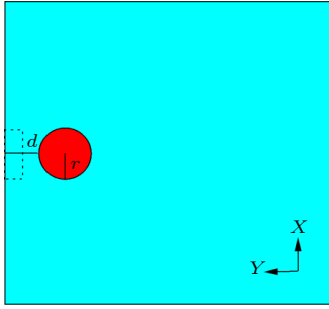


图 1 熔石英初始模型的二维示意图, 红色区域温度  $T = 10000 \text{ K}$ , 浅蓝色区域  $T = 300 \text{ K}$ ,  $r$  表示高温熔石英球的半径,  $d$  表示球面和熔石英表面之间的距离

Fig. 1. A two-dimensional schematic diagram of the initial model of fused silica, with a temperature of  $10000 \text{ K}$  in the red area and  $300 \text{ K}$  in the light blue area.  $r$  represents the radius of the high-temperature fused quartz sphere, and  $d$  represents the distance between the sphere and the surface of the fused silica.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 熔石英表面喷射的微观过程

本文主要是研究高温熔石英球的位置、大小和初始温度对熔石英表面损伤的影响, 为方便叙述, 除了讨论温度部分外, 高温熔石英的初始温度都设定为  $10000 \text{ K}$ . 由于高温熔石英球的初始温度远远高于周围熔石英的温度, 最开始是一个热传导的过程, 之前的研究已经表明, 热传导环节的耗散热能

占 47%, 热传导导致高温区域迅速膨胀从而形成压力波, 这是导致表面喷射的重要因素之一, 本文重点关注的是熔石英表面喷射过程的具体细节. 选取熔石英表面的一块区域 (图 1 中用黑色虚线框标记), 记录其压力在喷射前随时间变化的关系 (如图 2 所示). 表面发生损伤前该区域的压力随时间增长, 因为在表面发生损伤前高温熔石英产生的高压会向表面传导, 高压的传播是形成冲击波的重要原因. 当表面的压力达到熔石英的破坏强度后 (约  $5 \text{ ps}$  时), 熔石英表面发生膨胀, 此时对应着该区域的压力达到最大值, 此后压力逐渐减小, 这是因为膨胀过程会释放表面的压力. 图 3 为上述过程中不同时刻样品的微观形貌, 可以看到对应高压传播的是明显的热传导过程. 高温熔石英区域附近的温度会逐渐升高, 且高温区域会随时间逐渐扩大, 高温区域的不断扩大对应图 2 中表面压力的逐步上升, 即高温熔石英球的热量和压力会不断传导至表面, 当熔石英表面的压力达到破坏强度后, 压力的

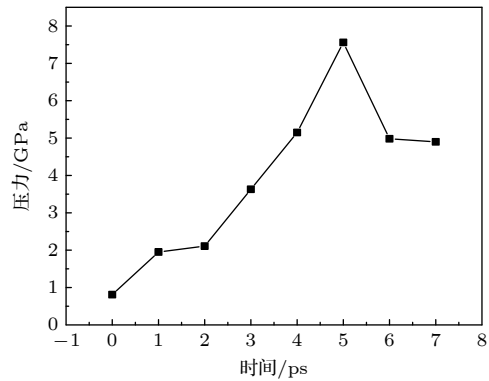


图 2 熔石英表面原子的压力随时间的变化, 原子所在的区域在图 1 中用黑色虚线框标记 (高温球  $T = 10000 \text{ K}$ ,  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 15 \text{ \AA}$ )

Fig. 2. Pressure of atoms on the surface of fused silica varies over time, and the area where the atoms are located is marked with a black dashed box in Fig. 1 (High temperature ball  $T = 10000 \text{ K}$ ,  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 15 \text{ \AA}$ ).

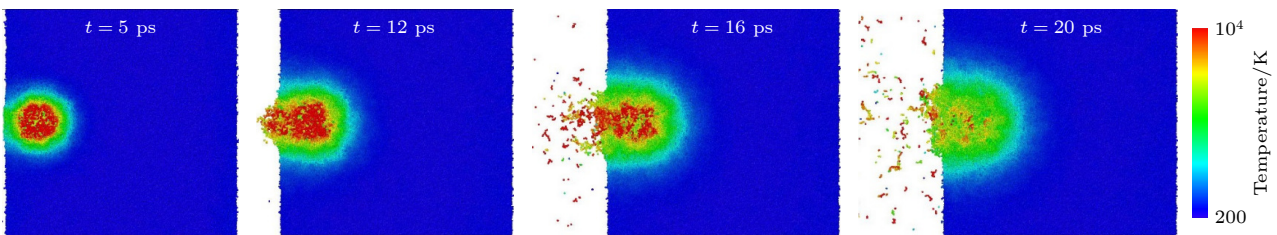


图 3 样品不同时刻微观形貌的切面图, 颜色是根据温度来上色的, 与图 2 描述的是同一过程 (高温球  $T = 10000 \text{ K}$ ,  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 15 \text{ \AA}$ )

Fig. 3. Cross-sectional view of the microstructure of the sample at different times is colored based on temperature, which is the same process as described in Fig. 2 (high temperature ball  $T = 10000 \text{ K}$ ,  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 15 \text{ \AA}$ ).

急速增大导致表面的熔石英喷射而出, 损伤形貌如图 3 所示. 结合图 2 和图 3 损伤过程可以总结为: 随着高温熔石英球的热量和压力向表面传播, 表面区域迅速增大的压力和温度使熔石英表面发生不可逆的损伤, 且伴随着损伤过程的开始, 压力会第一时间得到释放.

### 3.2 高温熔石英球距表面的距离对表面喷射的影响

为研究高温熔石英球的位置对表面损伤的影响, 将同等大小的高温熔石英球埋在更深的位置, 图 4(对应球半径  $r = 20 \text{ \AA}$ , 距表面距离  $d = 50 \text{ \AA}$ ) 为其随时间变化的二维形貌, 可以看到由于高温球离表面更远的缘故, 与前面讨论的距表面距离  $d = 15 \text{ \AA}$  的样品相比, 发生表面损伤的时刻明显大幅延后. 这是由于覆盖高温球的表面的熔石英更厚, 压力传输到表面所需要的时间更长, 在表面损伤强度一定的情况下, 熔石英表面的压强达到损伤强度的时间也随着增长, 即表面被破坏之前会有较长的一段温度与压力的传导过程, 在发生损伤时表面有较高的温度. 在图 3 中可观察到, 高温球离表面更近 ( $15 \text{ \AA}$ ) 的熔石英模型在发生表面喷射之后 ( $20 \text{ ps}$ ), 原高温熔石英球位置的温度显著降低, 由于模拟过程对应于高温熔石英持续吸收激光的能量的阶段, 高温熔石英球的温度一直设定在  $10000 \text{ K}$  左右, 那么该位置的温度为何会降低呢? 通过追踪球内原子位置的变化, 研究发现发生温度降低的原因是初始的高温熔石英球所包含的原子几乎全部被喷射出了表面. 根据之前的研究<sup>[15]</sup>可知, 形成高温熔石英等离子体火球的原因目前有多种解释, 其一是杂质吸收激光的能量导致周围的熔石英温度升高, 熔石英的温度超过某个定值时性质发生突变, 即吸收系数由趋近于 0 突变到一个较大值, 杂质附近吸收系数突变的熔石英成为吸收热量的主体, 熔石英的

温度迅速上升, 当温度足够高时呈现等离子体状态. 对应于本文中的研究, 高温熔石英球在距表面较近 ( $d = 15 \text{ \AA}$ ) 时, 由于较短的时间内表面的熔石英就会被损伤, 此时的高温区域还来不及扩张到较大的规模, 且作为吸收主体的变性高温熔石英原子在发生表面损伤时都被喷射出了表面, 由于失去吸热源、热传导和喷射做功, 熔石英内部的温度显著降低, 损伤不会进一步扩张. 而在熔石英球距表面距离较远 ( $d = 50 \text{ \AA}$ ) 时, 由于高温球离表面较远, 熔石英表面被破坏所需的时间更多, 破坏前热传导导致高温熔石英区域不断扩张, 直到  $42 \text{ ps}$  左右才看到明显的表面喷射现象, 而且由于很长时间的的热传导, 高温熔石英的区域扩张到相当大的规模, 作为吸热主体的高温熔石英无法全部被喷射出, 只有靠近表面的部分高温熔石英被喷射出去, 留在内部的高温熔石英在整个激光辐照过程中会持续吸热, 表面损伤的范围会持续扩展, 这符合实验上观察到的高温等离子体的扩张过程的特点.

综上可知, 受到强激光辐照的熔石英内部的高温等离子体区域离表面较近时, 较快发生表面损伤, 作为吸热主体的高温熔石英在损伤过程中被喷射出去, 熔石英内部的温度下降. 而高温熔石英距表面较远时, 较慢发生表面损伤, 由于球内的高温原子大部分不会被喷射出表面, 所以该区域一直处于高温状态, 其周围的温度由于热传导会迅速上升, 高温区域随着时间不断扩张. 图 5 统计了不同情况下发生表面损伤后被喷射出的熔石英质量随时间的变化, 图 5(a) 对应球半径  $r = 20 \text{ \AA}$ , 距表面距离  $d = 15 \text{ \AA}$  的模型, 根据前面的讨论, 由于高温熔石英被很快喷射出去, 内部不再吸收热量且温度降低, 所以被喷射的原子的质量在一定时间后不再增大, 这在图 5(a) 中被证实. 图 5(b) 对应球半径  $r = 20 \text{ \AA}$ , 距表面  $d = 50 \text{ \AA}$  的模型, 由于内部一直有熔石英吸收热量, 内部一直维持较高的温度和压强,

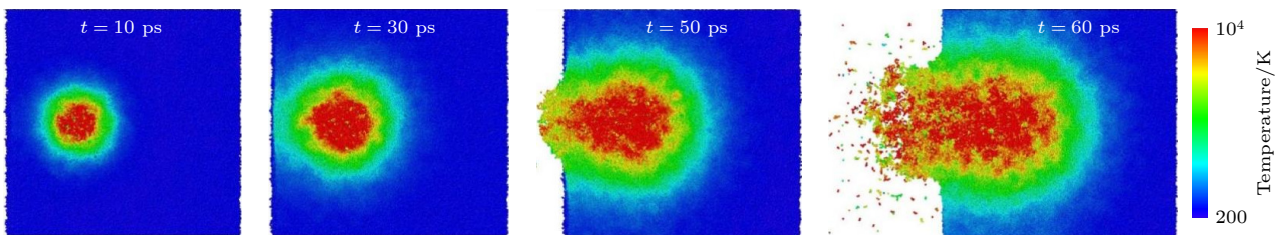


图 4 样品不同时刻微观形貌的切面图, 颜色根据温度进行上色 (高温球  $T = 10000 \text{ K}$ ,  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 50 \text{ \AA}$ )

Fig. 4. Cross-sectional view of the micro morphology of the sample at different times, with colors colored based on temperature (high-temperature ball  $T = 10000 \text{ K}$ ,  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 50 \text{ \AA}$ ).

所以被喷射的原子的质量在模拟的时间内一直增大, 而且被喷射出的原子数目显然要远远高于距表面  $d = 15 \text{ \AA}$  样品中的, 这与上文的分析完全吻合. 此外, 关注被喷射的原子的质量随时间的变化还可以得到表面损伤开始的时刻与距离  $d$  的联系,  $d = 15 \text{ \AA}$  的样品 5 ps 时发生表面喷射, 而  $d = 50 \text{ \AA}$  的样品发生在 42 ps.

### 3.3 高温熔石英球的半径对表面喷射的影响

通过关于图 3 和图 4 的对比讨论, 熔石英表面喷射的过程很明显是跟高温火球离熔石英表面的距离  $d$  有关, 接下来讨论高温熔石英球的半径  $r$  对表面损伤过程的影响. 图 6 为初始温度  $T = 10000 \text{ K}$ , 球面距表面距离  $d = 20 \text{ \AA}$ , 不同球半径  $r$  样品的表面损伤开始发生时熔石英表面的压力和温度, 以及在相同时刻统计出的被喷射出的原子的质量比. 从图 6(a) 和图 6(c) 可得, 熔石英表面损伤开始发

生时表面的压力和经过相同时间后被喷射出的质量比是关于球半径  $r$  正相关, 而表面温度和  $r$  负相关 (图 6(b)). 上述证据表明对于包含不同尺寸高温熔石英球的模型, 表面在损伤前所达到的压力并不一致, 也就是不同情况下, 表面发生损伤时所达到的压力并不直接等于表面的损伤强度. 这可能是由于冲击波所造成的损伤是瞬时的, 与静态下材料的损伤不同, 冲击损伤的瞬时性使得材料性质的变化不符合预期. 此外, 还能得到球半径  $r$  越小, 表面发生损伤越慢, 热量传导到表面的时间越长, 所以表面的温度越高. 目前已知熔石英内部高温等离子体状态的体积 (半径  $r$ ) 与杂质的吸收效率有密切关系, 杂质的吸收率越大, 高温熔石英球的  $r$  增大就越快, 就越容易发生表面损伤. 值得注意的是, 熔石英损伤时表面的压力和  $r$  的关系正相关, 这表明熔石英吸收激光能量所引起的高温等离子体区域的扩张过程对熔石英表面的损伤起重要的作用.

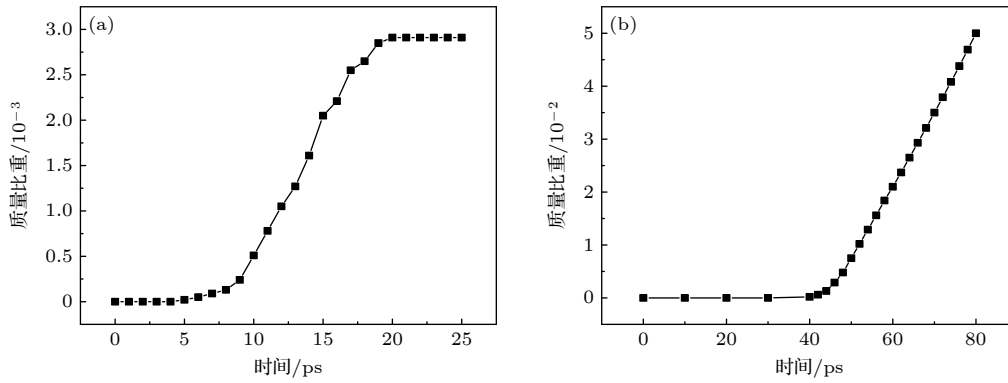


图 5 高温球  $T = 10000 \text{ K}$ , (a)  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 15 \text{ \AA}$ , (b)  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 50 \text{ \AA}$  条件下, 对应样品中减小的原子质量与样品总质量的比 (被喷射出的原子质量除以模型的总质量) 随时间的变化

Fig. 5. Ratio of the mass of reduced atoms in the sample to the total mass of the sample (the mass of ejected atoms divided by the total mass of the model) over time with high-temperature ball  $T = 10000 \text{ K}$ , (a)  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 15 \text{ \AA}$ , (b)  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 50 \text{ \AA}$ .

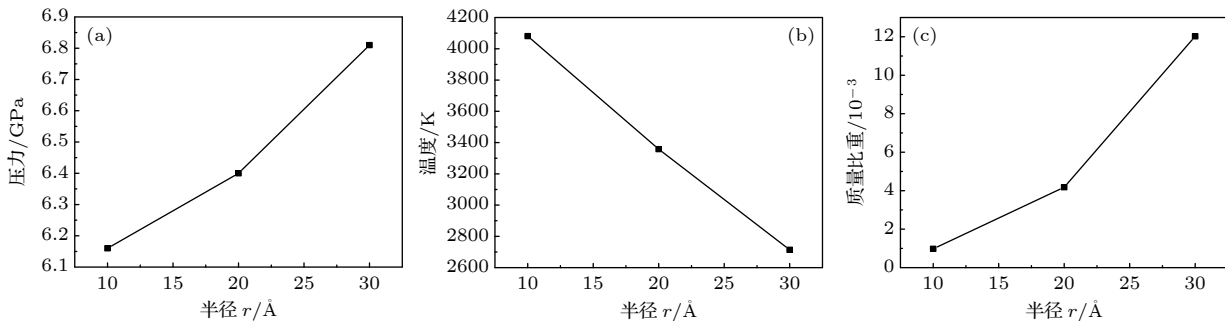


图 6 高温球初始温度  $T = 10000 \text{ K}$  和距表面距离  $d = 20 \text{ \AA}$  对应的熔石英样品发生损伤时表面的压力 (a), 温度 (b), 喷射出的原子的质量占总样品的比 (c) 随球半径  $r$  的变化

Fig. 6. Surface pressure (a), temperature (b), and the ratio of the mass of ejected atoms to the total sample (c) vary with the radius  $r$  of the ball when damage occurs to fused silica with the initial temperature of the high-temperature ball  $T = 10000 \text{ K}$  and the distance from the surface  $d = 20 \text{ \AA}$ .

### 3.4 熔石英球温度对表面损伤形成的影响

最后讨论熔石英球的初始温度对表面损伤的影响. 高温熔石英球温度为 10000 K 时, 熔石英的表面发生喷射后 (喷射出的原子质量不再变化), 会在表面形成一个 U 形的孔洞, 如图 7(a) 所示. 实验上观察到熔石英表面损伤的形貌是多种多样的, 典型的有 3 种: 麻点型、蚌壳型及火山坑型 [34–36], 麻点型的特点是损伤规模小, 蚌壳型的特点是损伤规模大, 但是没有裂纹产生, 火山坑型的特点是损伤规模大并且有大量裂纹产生. 为探究影响熔石英表面损伤后空洞形貌的因素, 将高温熔石英球的初始温度下降至 8000 K. 在较低的初始温度下, 熔石英表面发生损伤的时刻将极大地延后, 且熔石英表面的原子不是以被喷射出的方式离开 (损伤过程慢很多), 而是类似于被汽化 (如图 7(b) 所示), 这是由于较低的初始温度使得内部没有足够的压力, 吸收激光能量的高温熔石英不会被喷射出去, 但是熔石英内部会持续吸收激光的能量, 导致损伤坑周围的原子会保持高温熔融状态, 且损伤规模在激光脉冲时间内不断扩大. 上述不同初始温度对应的两种损伤形貌与之前实验研究 [34] 中观察到的两种典型的损伤形貌——麻点型与蚌壳型是符合的. 熔石英表面损伤后的形貌特点是受到多种因素共同影响的, 为了简化变量, 这里只讨论初始温度影响的情况, 可以理解为: 当熔石英内部的温度足够高时, 会发生爆炸式的表面损伤, 负责吸收热量的高温熔石英被喷射出表面, 内部吸收热量的主体不存在后, 开始降温, 熔石英不会发生进一步的大规模损伤, 对应麻点型的损伤形貌. 而熔石英内部温度较低时, 在熔石英损伤强度一定的条件下破坏其表面

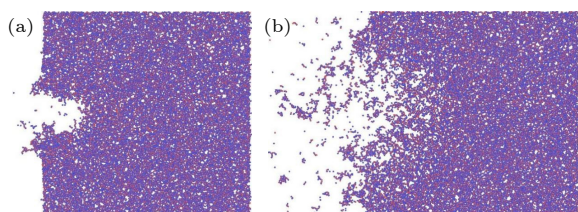


图 7 高温球半径  $r = 20 \text{ \AA}$ , 距表面的距离  $d = 20 \text{ \AA}$ , 初始温度 (a)  $T = 10000 \text{ K}$ , (b)  $T = 8000 \text{ K}$  条件下, 对应的熔石英样品发生表面喷射后的形貌图, 红色为硅原子, 蓝色为氧原子

Fig. 7. Morphologies of the fused silica sample after surface spraying shows Si atoms in red and O atoms in blue, with high temperature ball  $r = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 20 \text{ \AA}$  and (a)  $T = 10000 \text{ K}$ , (b)  $T = 8000 \text{ K}$ .

就越难, 因而很难发生爆炸式的破坏. 但是高温的熔石英球会向周围传导热量, 导致表面局部的熔石英熔化, 且损伤规模不断扩张, 即对应实验上观察到的蚌壳型熔融损伤的特点.

上述关于熔石英内部初始温度对损伤形貌的影响的讨论忽略了其他因素的影响, 但是球半径以及与表面的距离对两种损伤形貌的形成也有重要的影响, 例如当高温熔石英球距表面较近时, 熔石英表面容易被破坏, 所以容易发生爆炸式的损伤, 高温熔石英被喷射出表面, 失去吸收热量的主体后, 不再进一步损伤, 所以损伤规模小, 与实验观察到的麻点型相符, 反之则损伤规模大, 与蚌壳型的损伤特点相符. 所以熔石英表面的损伤是多种因素共同作用的结果, 在本文所讨论的 3 个影响因素中, 高温熔石英球的位置 (距表面的距离) 与杂质的位置有关, 而球的半径和初始温度的高低则与初始杂质的具体吸收特点有关. 可见杂质的性质、形状、尺寸和位置都对熔石英表面的损伤形貌具有重要的影响.

## 4 结 论

本文利用分子动力学方法模拟了熔石英在激光辐照下表面的损伤过程, 结论如下:

当熔石英内部杂质附近的高温熔石英的温度超过某定制后, 熔石英成为吸收激光能量的主体, 高温区域会迅速扩张, 形成等离子体火球. 伴随着温度与压力的传导, 熔石英表面所受的压力会持续增大, 当压力超过表面可以承受的最大压力后, 表面被破坏, 内部的高温熔石英原子被喷射出去, 且表面原子被喷射时的温度会高于熔石英的熔点.

高温熔石英球距表面的距离对表面的损伤有重要的影响. 高温熔石英球离表面较近时, 大部分高温的熔石英 (吸热源) 会被快速的喷射出去, 形成 U 形孔洞, 此后, 熔石英的损伤会几乎停止, 被喷射的原子的质量达到最大值. 高温熔石英距离表面较远时, 高温熔石英难以被全部喷射出去, 初步损伤后留在内部的高温熔石英会持续吸收热量, 孔洞周围的原子会被高温熔融, 损伤范围会持续扩大.

本文还研究了高温熔石英球的半径和初始的温度对表面喷射过程的影响, 结果表明高温熔石英球半径越大, 初始的温度越高越有利于发生表面喷

射. 结合实际的熔石英的损伤过程, 高温熔石英球距表面的距离由杂质的位置决定, 而其初始温度和半径又受到熔石英中杂质等吸收源的初始光吸收效率的影响, 即初始光吸收效率越高, 相同的时间内高温熔石英的规模越大, 距表面越近, 温度越高, 熔石英越容易发生表面损伤, 即熔石英的损伤阈值越低, 但是其损伤的区域的面积却较小.

## 参考文献

- [1] Chen Q, Wang H, Dai R, Wang Z, Tao X, Zhao W, Zhang Z 2021 *Laser Part. Beams* **2021** 6
- [2] Bude J, Guss G, Matthews M, Spaeth M L 2007 *Proc. SPIE* **6720** 672009
- [3] Chai X X, Li P, Zhao J P, Wang G Z, Zhu D Y, Jiang Y L, Chen B, Zhu Q H, Feng B, Wang L Q, Jing Y K 2020 *Optik* **226** 165549
- [4] Zhang Y, Song C, Shi F, Tian Y, Lin Z 2020 *Proc. SPIE* **11427** 1142745
- [5] Schaffer C B, Brodeur A, Mazur E 2001 *Meas. Sci. Technol.* **12** 1784
- [6] Li B, Hou C Y, Tian C X, Guo J L, Xiang X, Jiang X L, Wang H J, Liao W, Yuan X D, Jiang X D, Zu X T 2020 *Appl. Surf. Sci.* **508** 145186
- [7] Tan C, Zhao L J, Chen M J, Cheng J, Yin Z Y, Liu Q, Yang H, Liao W 2021 *J. Non-Cryst. Solids* **558** 120662
- [8] Bercegol H, Boscheron A, Di-Nicola J M, Journot E, Lamaignere L, Neauport J, Raze G 2008 *J. Phys.: Conf. Ser.* **112** 032013
- [9] Shen X, Feng G Y, Jing S, Han J H, Li Y G, Liu K 2019 *Chin. Phys. B* **28** 085202
- [10] Han W, Feng B, Zheng K X, Zhu Q H, Zheng W G, Gong M L 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 246102 (in Chinese) [韩伟, 冯斌, 郑奎兴, 朱启华, 郑万国, 巩马理 2016 *物理学报* **65** 246102]
- [11] Carr C W, Bude J D, DeMange P 2010 *Phys. Rev. B* **82** 184304
- [12] Carr C W, Radousky H B, Rubenchik A M, Feit M D, Demos S G 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 087401
- [13] Demange P, Negres R, Raman R, Colvin J, Demos S 2011 *Phys. Rev. B* **84** 054118
- [14] Demos S G, Raman R N, Negres R A 2013 *Opt. Express* **21** 4875
- [15] Dijon J, Poiroux T, Desrumaux C 1997 *Proc. SPIE* **2966** 315
- [16] Feit M D, Rubenchik A M 2003 *Mechanisms of CO<sub>2</sub> Laser Mitigation of Laser Damage Growth in Fused Silica* (Livermore, CA: Lawrence Livermore National Lab.) Report Number. UCRL-JC-148580
- [17] Jiang Y, Liu H F, Zhang F W, Zhang B J, Liao W, Zhang L J, Wang H J, Qiu R, Guo D C, Zhou Q, Yao C Z 2021 *Fusion Eng. Des.* **173** 112956
- [18] Yan C Y, Liu B A, Li X C, Liu C, Ju X 2020 *Chin. Phys. B* **29** 27901
- [19] Wang H X, Wang C, Zhang M Z, Zheng E M, Chen X H 2019 *Appl. Opt.* **58** 9839
- [20] Guo H Y, Liu Q X 2018 *Laser Infrared* **48** 958 (in Chinese) [郭洪岩, 刘全喜 2018 *激光与红外* **48** 958]
- [21] Wang Q S, Jiang L, Sun J P, Pan C J, Han W N, Wang G Y, Zhang H, Grigoropoulos C P, Lu Y F 2017 *Photonics Res.* **5** 488
- [22] Kubota A, Caturla M J, Stolken J S, Feit M 2001 *Opt. Express* **8** 611
- [23] Sugiura H, Ikeda R, Kondo K, Yamadaya T 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 1651
- [24] Su R, Xiang M Z, Chen J, Jiang S L, Wei H 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 193508
- [25] Shen R Q, Bai Q S, Li Y H, Guo Y B, Zhang F H 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 245114
- [26] Dyachkov S, Parshikov A, Zhakhovsky V 2015 *19th Biennial Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter* Tampa, USA, June 14–19, 2015 p100024
- [27] Li B, Zhao F P, Wu H A, Luo S N 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 349
- [28] Plimpton S 1995 *Comput. Mater. Sci.* **4** 361
- [29] Munetoh S, Motooka T, Moriguchi K, Shintani A 2007 *Comput. Mater. Sci.* **39** 334
- [30] Thompson A P, Plimpton S J, Mattson W 2009 *J. Chem. Phys.* **131** 154107
- [31] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [32] Barnes F, Souillard L, Mareschal M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 224108
- [33] Mozzi R, Warren B 1969 *J. Appl. Crystallogr.* **2** 164
- [34] Wong J, Ferriera J L, Lindsey E F 2006 *J. Non-Cryst. Solids* **352** 255
- [35] Miller P E, Bude J D, Suratwala T I, Shen N, Laurence T A, Steele W A, Menapace J, Feit M D, Wong L L 2010 *Opt. Lett.* **35** 2702
- [36] Neauport J, Lamaignere L, Bercegol H 2005 *Opt. Express* **13** 10163

# Atomic simulation of surface damage of fused silica under laser irradiation\*

Zhang Xue-Yang<sup>1)†</sup> Chen Jun<sup>2)‡</sup> Hu Wang-Yu<sup>3)</sup>

1) (*School of Computational Science and Electronics, Hunan Institute of Engineering, Xiangtan 411104, China*)

2) (*Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

3) (*College of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China*)

( Received 15 April 2023; revised manuscript received 27 May 2023 )

## Abstract

Fused silica optical element is the core component of the inertial confinement nuclear fusion ignition device. Due to the requirement of ignition conditions of the device for high power laser, the damage to fused silica optical element under strong laser is the key to restricting the operation of the ignition device. Therefore, the study of the surface damage of fused silica irradiated by laser is crucial to the development of the ignition device for inertial confinement nuclear fusion. In this paper, large-scale non-equilibrium molecular dynamics simulation method and micro-structure analysis technology suitable for dynamic process are proposed to study the damage process of fused silica surface under laser loading. Based on the theoretical study of high-temperature plasma fireball model, the damage of high-temperature fused silica plasma ball to surface is simulated. By tracking the local structure, temperature distribution and surface morphology, the factors affecting the surface damage of fused silica are analyzed. Our research results show that the size, distance from the surface, and temperature of high-temperature fused silica balls have important effects on the surface damage. We find that there are two different damage modes under the combined effect of the above factors. One is related to a rapid damage process, generating U-shaped voids and no further obvious damages after the surface spraying, and the other is dependent of a slow damage process: continuously expanding and resulting in a larger damage area. The surface morphologies formed by these two damage modes are consistent with the two typical damage morphologies observed in the experiments. This research can provide a guidance for understanding the complex damage process in fused silica under laser irradiation.

**Keywords:** laser irradiation damage, fused silica, molecular dynamics

**PACS:** 62.50.-p, 61.80.-x

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230606

\* Project supported by the LCP Fund for Young Scholar (Grant No. 6142A05QN22011) and the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2023JJ40209).

† Corresponding author. E-mail: [xyzhang2012@hnu.edu.cn](mailto:xyzhang2012@hnu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [jun\\_chen@iapcm.ac.cn](mailto:jun_chen@iapcm.ac.cn)

## 激光辐照下熔石英表面损伤的原子模拟

张学阳 陈军 胡望宇

### Atomic simulation of surface damage of fused silica under laser irradiation

Zhang Xue-Yang Chen Jun Hu Wang-Yu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 156201 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230606

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230606>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 激光诱导熔石英表面损伤修复中的气泡形成和控制研究

Formation and control of bubbles during the mitigation of laser-induced damage on fused silica surface

物理学报. 2018, 67(1): 016103 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171839>

#### Xe离子束辐照硼硅酸盐玻璃和石英玻璃效应对比研究

Comparative studies of irradiation effects in borosilicate glass and fused silica irradiated by energetic Xe ions

物理学报. 2018, 67(3): 038101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172117>

#### 水滴撞击结冰过程的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of freezing process of water droplets impinging on cold surface

物理学报. 2018, 67(5): 054702 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172174>

#### 锆铌合金的特殊准随机结构模型的分子动力学研究

Molecular dynamics study of special quasirandom structure of Zr-Nb alloys

物理学报. 2021, 70(3): 033103 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201407>

#### 单晶Ce冲击相变的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of shock-induced isostructural phase transition in single crystal Ce

物理学报. 2020, 69(11): 116202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200323>

#### 纳米多孔银力学性能表征分子动力学模拟

Characterization of nanoporous silver mechanical properties by molecular dynamics simulation

物理学报. 2018, 67(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172193>