

熔石英亚表面杂质颗粒附近光场调制的三维模拟*

花金荣¹⁾ 李莉¹⁾ 向霞¹⁾ 祖小涛^{1)2)†}

1) (电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

2) (中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110015)

(2010年5月5日收到; 2010年5月31日收到修改稿)

熔石英亚表面缺陷是光学材料低损伤阈值的主要因素之一. 本文建立了熔石英亚表面三维球形杂质颗粒模型, 采用三维时域有限差分方法对杂质附近的光场进行了数值模拟, 分析了杂质的介电常数与尺寸对光强增强因子的影响, 结果显示: 介电常数小于熔石英的杂质, 其光强增强因子不随尺寸、介电常数的改变而改变, 均保持为4左右; 当介电常数为6.0时, 半径为 1.5λ , 2λ 及 2.5λ 的杂质, 相应的光强增强因子分别为50.1588, 73.3904及102.9953, 即增强因子随杂质尺寸的增大而增大; 恰为球体的杂质比椭球体的杂质对入射光强的增强更大. 因此, 介电常数大于熔石英, 且尺寸较大的球形杂质, 其场增强非常明显.

关键词: 杂质颗粒, 三维时域有限差分, 数值计算, 光强增强因子

PACS: 42.60.JF, 42.62.-b, 42.70.Ce, 46.15.-x

1. 引言

在强激光作用下, 光学元件材料包括表面损伤和体损伤两个方面^[1-3]. 实际应用中, 作为一种透明光学材料, 熔石英块体材料纯度很高, 激光损伤很少发生在熔石英内部, 而亚表面的各种复杂结构的缺陷, 却导致熔石英亚表面有更低的损伤阈值, Bloembergen曾指出, 块体光学材料的体损伤阈值大约为其表面损伤阈值的2—100倍^[4]. 因此, 亚表面缺陷是诱导激光损伤的重要原因之一^[5-9]. 针对熔石英亚表面缺陷诱导损伤问题, 大量实验和理论研究逐渐展开. 对于脉宽为3 ns的355 nm激光, Merkle等人^[10]得到熔石英表面平均激光损伤阈值低于 18 J/cm^2 . Hamza等对机械加工造成的划痕测试, 给出弹性压痕和脆性裂缝的损伤阈值分别是 25 J/cm^2 和 5 J/cm^2 ^[11]. Génin和Feit等人采用二维时域有限差分方法, 对各种尺寸的亚表面各尺寸的缺陷进行了二维数值模拟, 结果表明, 后表面横向划痕对光强增强最大可达10.2倍, 而赫兹锥形划痕最大可达27倍, 并且确定划痕的宽度、深度以及划痕

与表面夹角等是划痕诱导光强增强的重要因素^[12-14]. Bloembergen的系统研究表明, 355 nm激光入射时, 亚表面的微气泡、微划痕以及微裂纹分别能使光强增强因子(LIEF)达到1.5, 4.7和1.9^[4]. 然而, 以上对亚表面各类划痕、缺陷的计算模拟都是将三维缺陷简化成二维模型来处理的, 这必然与实际情况有一定误差^[15-17], 在文献[18]中对相同尺寸缺陷分别进行了二维和三维模拟, 结果显示, 三维缺陷对光场调制比二维情况要强得多, 可见三维缺陷的空间结构不容忽视. 本文建立三维球形杂质颗粒模型, 利用三维时域有限差分方法, 模拟计算缺陷附近的光场分布, 讨论不同尺寸和参数的杂质颗粒的调制作用, 为实验上提高熔石英亚表面损伤阈值提供一定的理论指导.

2. 物理模型

在对熔石英光学材料的研磨、抛光等加工过程中, 不可避免地会在亚表面产生抛光重沉积层, 气泡, 金属和氧化物颗粒等, 如图1所示, 其中图1(a)为三维结构示意图, 图1(b)为 yo z平面示意图, 其

* 国家高技术研究发展计划(批准号:2007AA804233, 2008AA8040508), 电子科技大学青年基金重点项目(批准号:L08010401JX0806), 国家自然科学基金和中国工程物理研究院联合基金(批准号:11070008)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xtzu@uestc.edu.cn

中基体材料为熔石英,相对介电常数为 2.25,杂质颗粒的半径为 r ,在亚表面内,忽略其他缺陷. 设入射激光为平面波,波长为 355 nm,垂直表面入射,电场强度幅值为 1.0 V/m. 本文采用三维时域有限差分方法(FDTD)^[19-21],差分网格尺寸 δ 取为 $\lambda/12$,吸收性边界条件采用完全匹配层(PML)^[19],计算时间步数为 400,模拟各类杂质颗粒对入射光场的调制作用.

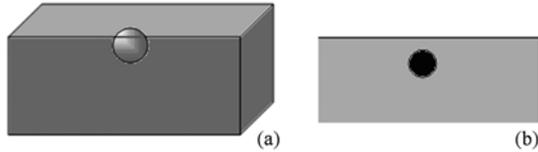


图1 亚表面三维杂质颗粒 (a) 三维示意图;(b) 平面示意图

3. 计算结果与讨论

3.1. 气泡类

图2所示为熔石英亚表面气泡对入射光场调制

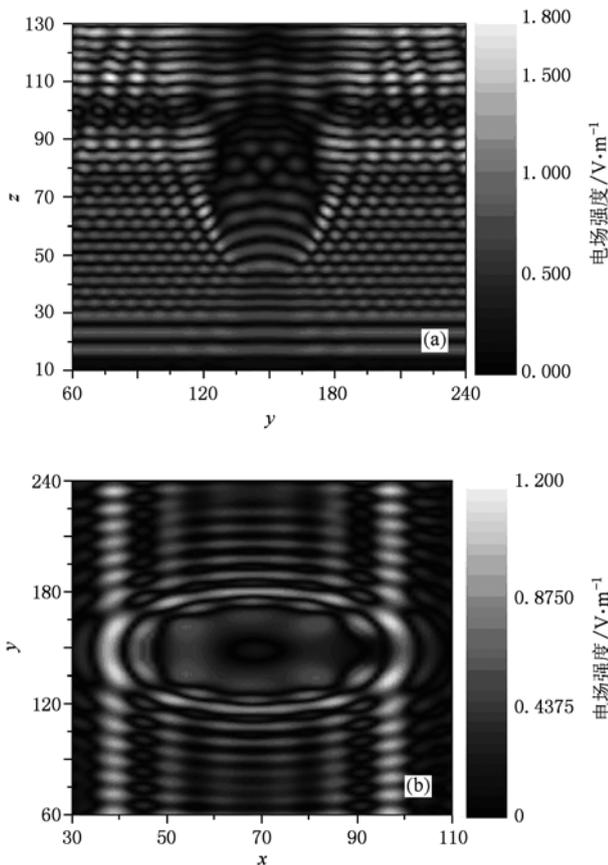


图2 气泡附近电场强度分布 (a) yoz 平面;(b) xoy 平面

后的场强分布图,从图2(a)中可以看到,入射光在气泡附近受到一定的调制作用. 这是由于气泡的相对介电常数为 1.0,小于熔石英,所以就相当于在此处设置了一个凹透镜,入射激光受气泡散射,使得气泡后区域留下一片阴影区,而散射光与周围的入射光再次叠加,使得场增强最高达到 2.01682 倍,相应的 LIEF 约为 4 位置为 $x = 90\delta$, $y = 186\delta$, $z = 131\delta$. 图2(b)显示了 xoy 平面电场强度分布,可以看到,受气泡调制作用,气泡后区域的 xoy 平面上,中间场强弱,周围是一圈场增强点,呈圆形对称分布,这个现象是与实际散射情况符合的.

3.2. 杂质颗粒类

对于金属、氧化物等杂质颗粒,通常它们的介电常数比熔石英的大,在亚表面形成一个个天然的凸透镜,加剧了自聚焦效应,它们的危害性远比划痕大得多. 如图3所示是相对介电常数为 3.0 的杂质颗粒对入射场调制作用的模拟,从图3(a)图中可以看到,大部分区域很暗,只有一小部分区域非常亮,这个异常亮的区域就是在杂质颗粒后面所形

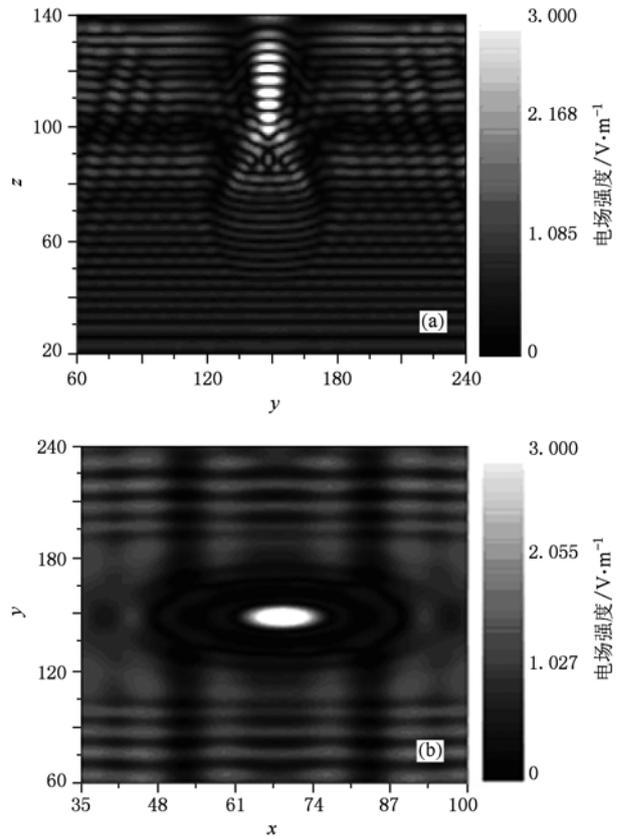


图3 ϵ_r 为 3.0 的杂质颗粒周围电场强度分布 (a) yoz 平面;(b) xoy 平面

成的场增强区,相当集中. 经过杂质颗粒的入射光全都汇聚到了这里,根据计算数据,这里最大电场强度为 5.06743 V/m,相应的 LIEF 约为 25,也就是说,这里的最大光强为入射光强的 25 倍. 图 3(b) 同样给出了 xoy 平面电场分布,中间是极强的增强点,周围是一定范围的阴影区,该区是杂质颗粒的后区域,由于光都汇聚到了中间的增强点,所以留下了阴影. 更外围区域是未受杂质颗粒作用的区域,场强约为 1 V/m,且较均匀.

3.3. 介电常数与 LIEF

为了能给实验提供一个比较全面的参考,有必要研究杂质介电常数与 LIEF 的关系,数据整理结果如图 4 所示. 从图中可以看到,随着杂质颗粒介电常

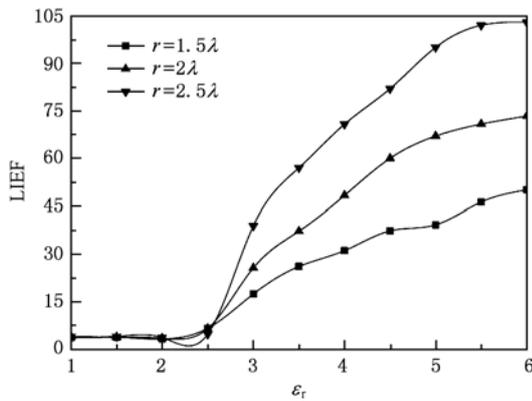


图 4 不同尺寸杂质颗粒的介电常数与 LIEF 的关系

数从 1.0 到 6.0 逐渐增大过程中, LIEF 先基本保持不变,然后迅速增大. 熔石英的介电常数约为 2.25, 则当杂质颗粒的介电常数小于 2.25 时,就相当于是一个凹透镜的作用,入射激光束受其作用而发散,与其他入射光再相互作用,有一定的光强增强. 当杂质的介电常数约为 2.25 时,与熔石英处理相同,则相当于杂质消失了,理论上 LIEF 就为 1,这就是图中介电常数在 2—2.5 之间 LIEF 有很明显的降低趋势的原因. 当介电常数大于 2.25 时,杂质颗粒在其中起到了凸透镜的作用,经过它的入射光汇聚起来,光强增强显著,半径为 2.5λ 的杂质在 ϵ_r 为 6.0 时, LIEF 达到了 102.9953,与 Feit 等人报道的 10^2 数量级一致^[5]. 从图 4 中, ϵ_r 为 1—2 之间, LIEF 较小且基本保持不变,说明熔石英亚表面气泡等 ϵ_r 小于 2.25 的杂质对入射光场的调制作用不是很明显,且和 ϵ_r 的关系不突出. 而当 ϵ_r 从 2.5 开始, LIEF 迅速增大,说明高 ϵ_r 的杂质颗粒对入射激光的汇聚作

用特别明显,容易引起激光损伤. 比较图 4 中的三条曲线,可以看到,半径为 2.5λ 的杂质比半径为 2λ 及 1.5λ 的杂质对光场调制作用要强. 这是容易理解的,半径大的球形杂质,所接收到的入射光束也多,汇聚到一起后的总能量也就越大. 在文献 [12] 和 [15] 中分别指出,熔石英亚表面平面划痕和赫兹锥形划痕引起的最大 LIEF 可达到为 10 和 100,而高 ϵ_r 的以及大尺寸的杂质则可以使 LIEF 轻易突破 100,因此它们的危害甚至超越了亚表面各种划痕.

3.4. 杂质形状与 LIEF

实际情况中的杂质颗粒不会恰为球体,多数为一定程度的椭球体,其结构和参数如图 5 所示. 设椭球体 x 方向和 z 方向的半径均为 a ,且始终保持两者

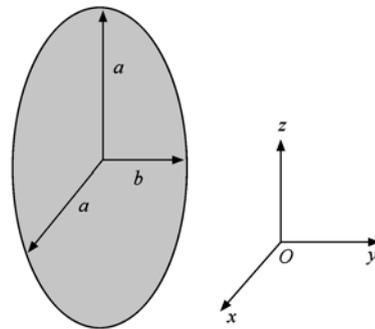


图 5 椭球形颗粒模型示意图

相等, y 方向的半径为 b , 设半径比 $\gamma = b/a$. 模拟得到如图 6 所示的电场分布图,图中的杂质为 $\gamma \approx 2.15$, $\epsilon_r = 4.0$, $a = \sqrt{\frac{27}{22}}\lambda$, $b = \frac{11}{4}\lambda$. 从图 6 中可以看到,入射激光经过杂质后已经不能很好地汇聚到局部小区域,所以场增强不是很大. 保持椭球形杂质颗粒的体积为恒定值,模拟计算不同形状 (γ 不

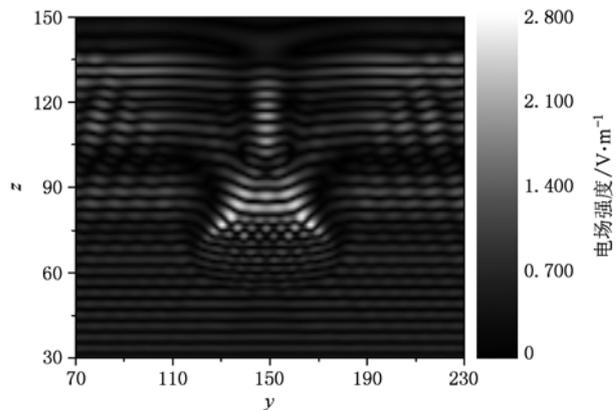


图 6 γ 为 2.15 的杂质附近的电场分布

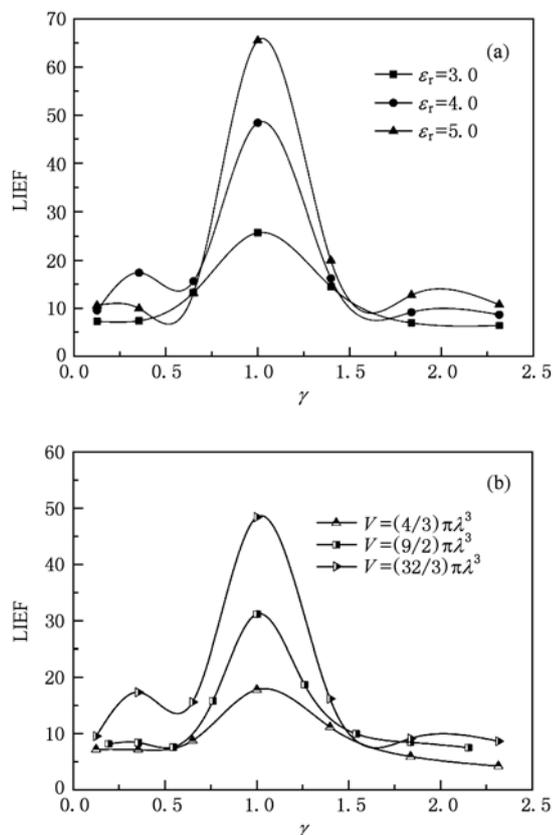


图7 杂质颗粒半径比 γ 与 LIEF 的关系 (a) 介电常数不同; (b) 尺寸不同

同)的椭球体对入射光场的调制作用. 由于杂质颗粒的体积大小、介电常数可能会对结果有影响, 因此考虑了多种情况下 γ 与 LIEF 的关系, 结果如图 7 所示, 图 7 (a) 中三条曲线分别代表介电常数为 3.0, 4.0 以及 5.0 的相同大小的杂质颗粒的 γ 与 LIEF 的关系, 而图 7 (b) 中三条曲线分别代表体积不同 (对应为球体时的半径分别为 $\lambda, 1.5\lambda$ 以及

2 λ)、介电常数相同的杂质颗粒的 γ 与 LIEF 的关系. 从图 7 两图中可以看到, 随着杂质颗粒的半径比 γ 逐渐增大, LIEF 先是有微小的起伏, 在 γ 为 1 的附近, LIEF 迅速增大, 并在 $\gamma = 1$ 处达到峰值. γ 继续增大, LIEF 先是迅速下降, 在 1.5 之后 LIEF 的变化基本上比较平缓了. γ 的增大过程, 就是杂质颗粒是从竖直的椭球体变为球体, 然后再变为横放的椭球体的过程, 综合两图说明, 恰为球体的杂质颗粒对入射激光的场增强最显著, 而当颗粒为椭球体时, 相应的增强作用要弱很多. 同时, 从图 6 中也可以清楚地看到, 杂质颗粒的介电常数越大, 或者颗粒体积越大, 都会导致场增强也越大, 与前面的结论一致.

4. 结 论

本文针对熔石英亚表面杂质缺陷建立三维球形模型, 分别对不同参数的气泡及杂质颗粒进行了深入的模拟和探讨, 结果显示: 介电常数小于基体熔石英的杂质对入射光场调制作用较弱, 且 LIEF 与介电常数的变化没有明显联系; 介电常数大于基体熔石英的杂质对入射光场调制作用非常强, 且随着介电常数的增大, LIEF 也逐渐增大; 介电常数相同时, 半径大的杂质, 其 LIEF 也越大; 恰为球体时的杂质对入射光场调制作用最强; 总之, 杂质对入射光场的调制作用明显强于亚表面的各类划痕. 这对于实验上熔石英亚表面的处理具有一定的指导意义, 尺寸较大且介电常数也较大的杂质颗粒是极其危险的, 必须首先清除, 从而大幅度提高熔石英抗激光损伤能力.

[1] Sun C W, Lu Q S, Fan Z X 2002 *Laser Irradiation Effect* (Beijing: National Defense Industry Press) p265 (in Chinese)
 [孙承伟、陆启生、范正修 2002 激光辐照效应 (北京: 国防工业出版社) 第 265 页]

[2] Chen F, Meng S X 1998 *Physics Progress* **18** 187 (in Chinese)
 [陈 飞、孟绍贤 1998 物理学进展 **18** 187]

[3] Liu F M, Zhang L D, Li G H 2005 *Chin. Phys.* **14** 2145

[4] Bloembergen N 1973 *Appl. Opt* **12** 661

[5] Feit M D, Rubenchik A M 2004 *Proc. SPIE* **5273** 264

[6] Liu C M, Zu X T, Wei Q M, Wang L M 2007 *Chin. Phys.* **16** 95

[7] Xue S W, Zu X T 2007 *Chin. Phys.* **16** 1119

[8] Liao L S, Bao X M, Zheng X Q, Li N S, Min N B 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 850

[9] Trupke T, Green M A, Wittfel P, Altermatt P P, Wang A, Zhao J, Corkish R 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 4930

[10] Merkle L D, Kitriotis D 1988 *Phys. Rev. B* **38** 1473

[11] Hamza A V, Siekhaus W, Rubenchik A M 2002 *Proc. SPIE* **4679** 96

[12] Génin F Y, Salleo A, Pistor T V 2001 *J. Opt. Soc. Am. A* **18** 2607

[13] Rubenchik A M, Feit M D 2002 *Proc. SPIE* **4679** 79

- [14] Han P G, Ma Z Y, Xia Z Y, Chen D Y, Xu J, Qian B, Chen S, Li W, Huang X F, Chen K J, Feng D 2007 *Chin. Phys.* **16** 1410
- [15] Hua J R, Zu X T, Li L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2519 (in Chinese) [花金荣、祖小涛、李莉 2010 物理学报 **59** 2519]
- [16] Chen X Q, Zu X T, Zheng W G, Jiang X D, Liu C M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1201 (in Chinese) [陈习权、祖小涛、郑万国、蒋晓东、刘春明 2006 物理学报 **55** 1201]
- [17] Xiang X, Chen M, Chen M Y, Zu X T, Zhu S, Wang L M 2010 *Chin. Phys. B* **19** 018107
- [18] Li L, Lei Y, Xiao S Q 2009 *High Power Laser and Particle Beams* **21** 936 (in Chinese) [李莉、雷雨、肖邵球 2009 强激光与粒子束 **20** 936]
- [19] Ge D B, Yan Y B 2002 *Electro Magnetic Wave and FDTD* (Xi'an: Xidian University Press) p14 (in Chinese) [葛德彪、闫玉波 2002 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 14 页]
- [20] Xue S W, Zu X T, Shao L X, Yuan Z L, Xiang X, Deng H 2008 *Chin. Phys.* **17** 2240
- [21] Zhou Z X, Wang H L, Shen Y Q, Liu D J, Liu H, He S Y, Yang D Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 592 (in Chinese) [周忠祥、王宏利、申艳青、刘大军、刘海、何世禹、杨德庄 2008 物理学报 **57** 592]

Three-dimensional numerical simulation of light field modulation in the vicinity of inclusions in silica subsurface*

Hua Jin-Rong¹⁾ Li Li¹⁾ Xiang Xia¹⁾ Zu Xiao-Tao^{1) 2)†}

1) (Institute of Physics and Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

2) (International Center for Material Physics, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015, China)

(Received 5 May 2010; revised manuscript received 31 May 2010)

Abstract

One of the important factors of the low laser induced damage threshold is the defects in the subsurface of fused silica. The three-dimensional model of a spherical inclusion in the subsurface is established in this study. Three-dimensional finite-difference time-domain method is used to calculate and simulate the light field distribution in the vicinity of inclusions. The effects of dielectric constant and inclusion size are analyzed, separately. The results show that the light intensity enhancement factor (LIEF) does not change with the size and the dielectric constant of the inclusions when the dielectric constant is smaller than that of fused silica, where the LIEF is kept at about 4. When the dielectric constant is 6.0, the LIEFs are 50.1588, 73.3904 and 102.9953 for the inclusions with sizes of 1.5λ , 2λ and 2.5λ respectively. When the inclusion size is constant, the LIEF will increase with the increase of dielectric constant. The light enhancement for the round inclusions is much higher than that for the ellipsoidal inclusions. Therefore, the round inclusions with large size and dielectric constant significantly enhance the electric field.

Keywords: inclusion, 3D FDTD, numerical calculation, LIEF

PACS: 42.60.JF, 42.62.-b, 42.70.Ce, 46.15.-x

* Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China (Grant Nos. 2007AA804233, 2008AA8040508), the Foundation for Young Scholars of University of Electronic Science and Technology of China (Grant No. L08010401JX0806), the NSAF joint Foundation of China (Grant No. 11070008).

† Corresponding author. E-mail: xztu@uestc.edu.cn