

文章编号: 1001-4322(2004)06-0745-04

光学元件微缺陷处电磁场分布特性的数值计算方法*

柴立群, 许 乔

(成都精密光学工程研究中心, 四川 成都 610041)

摘 要: 神光 的光学系统具有高功率密度运行的特点,对光学元件的抗激光损伤能力等提出了很严格的要求。光学元件内部的微缺陷会引起局域场强增强,采用时域有限差分方法对亚波长量级的缺陷进行了电磁场的数值模拟,并对数值计算的参数选取给出了定量的判断。

关键词: 时域有限差分方法; 微缺陷; 激光损伤

中图分类号: TH745 文献标识码: A

神光 的光学系统由上万件大口径的光学元件组成。这样一个大型强激光系统具有高功率密度运行的特点,因此对光学元件的抗激光损伤能力等提出很严格的要求。目前已经提出的光学材料激光诱导损伤的主要物理机制有:电子雪崩电离、多光子吸收电离、杂质缺陷导致的局域强场吸收等。损伤机制大体上可分为场致损伤和热致损伤两类。但无论是哪一类,损伤都与材料内部的场强有关,场强越大,损伤的可能性也越大。

光学材料在加工的过程中,不可避免地要在光学元件内部及亚表面有损伤存在。损伤缺陷在局部区域会产生光场增强效应,因此关于光场分布的理论计算就显得十分必要。已有的散射理论涉及到复杂的理论基础和分析算法,且不能够通用。本文尝试采用时域有限差分方法(FDTD)来进行材料内部微缺陷处电磁场的数值模拟,对计算过程中参数的选取给出了定量的判据,为进一步在元件表面及亚表面缺陷情形下的电磁场数值模拟打下基础。

1 时域有限差分方法(FDTD)

1.1 直角坐标中二维 FDTD^[1,2]

麦克斯韦旋度方程为

$$\begin{cases} \nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t} + J \\ \nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} - J_m \end{cases} \quad (1)$$

式中: E 为电场强度; D 为电通密度; H 为磁场强度;

B 为磁通密度; J 为电流密度; J_m 为磁流密度。令 $f(x, y, z, t)$ 代表 E 或 H ,在时间和空间域中的离散取以下符号表示

$$f(x, y, z, t) = f(i \ x, j \ y, k \ z, n \ t) = f^n(i, j, k) \quad (2)$$

对于二维问题,离散化 Yee 元胞如图 1 所示。

二维情况下,设所有物理量均与 z 坐标无关,即 $\partial/\partial z = 0$ 。于是由(1)式可得 TE 波的 FDTD 公式^[1]为

$$\begin{cases} E_x^{n+1}(i+1/2, j) = C_A(m) E_x^n(i+1/2, j) + C_B(m) \times \\ \quad [H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2) - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2)] / y \\ E_y^{n+1}(i, j+1/2) = C_A(m) E_y^n(i, j+1/2) - C_B(m) \times \\ \quad [H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2) - H_z^{n+1/2}(i-1/2, j+1/2)] / x \\ H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2) = C_P(m) H_z^{n-1/2}(i+1/2, j+1/2) - C_Q(m) \times \\ \quad \{ [E_y^n(i+1, j+1/2) - E_y^n(i, j+1/2)] / x - [E_x^n(i+1/2, j+1) - E_x^n(i+1/2, j)] / y \} \end{cases} \quad (3)$$

式中:

$$\begin{aligned} C_A(m) &= [1 - (m) \ t/2(m)] / [1 + (m) \ t/2(m)], & C_B(m) &= [t / (m)] / [1 + (m) \ t/2(m)], \\ C_P(m) &= [1 - (m) \ t/2\mu(m)] / [1 + (m) \ t/2\mu(m)], & C_Q(m) &= [t / \mu(m)] / [1 + (m) \ t/2\mu(m)] \end{aligned} \quad (4)$$

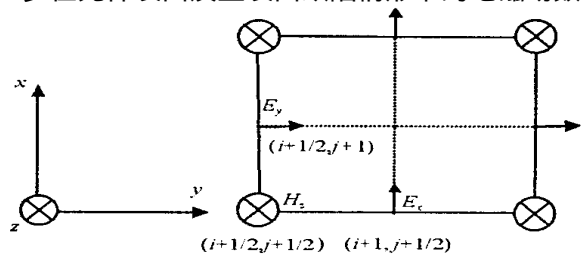


Fig. 1 Two-dimensional Yee cell of TE wave

图 1 二维 TE 波 Yee 元胞

* 收稿日期:2003-05-06; 修订日期:2004-01-08
基金项目:中国工程物理研究院基础研究基金资助课题
作者简介:柴立群(1973—),女,硕士,研究方向为光学元件的制造与检测。

m 为格点编号, t 为时间步长, ϵ 为介电常数, μ 为磁导率, σ 为电导率, μ_m 为磁导率。由于 TM 波与 TE 波存在对偶关系, 具体公式可以通过 ϵ 与 μ , σ 与 μ_m , E 与 H 交换得出。

1.2 边界条件

由于计算机容量的限制, FDTD 计算只能在有限区域进行。为了能模拟开域的电磁散射过程, 在计算区域的截断边界处必须给出吸收边界条件, 否则会在计算场区引入反射波。在总场-散射场区的分界面上也必须满足一定的条件才能将入射波只引入到总场区。用 FDTD 计算散射问题时通常将计算区域划分为总场区和散射场区, 如图 2 所示。

边界条件主要涉及到两个方面:

1. 利用二维 Mur 吸收边界条件^[3]及线性插值等关系, 离散化后可得 TE 波吸收边界条件的二阶近似为

$$H_z^{n+1}(i, j) = H_z^n(i+1, j) + \frac{c \cdot t -}{c \cdot t +} [H_z^{n+1}(i+1, j) - H_z^n(i, j)] + \frac{c^2 \cdot t}{2(c \cdot t +)} \times [E_x^{n+1/2}(i, j + \frac{1}{2}) - E_x^{n+1/2}(i, j - \frac{1}{2}) + E_x^{n+1/2}(i+1, j + \frac{1}{2}) - E_x^{n+1/2}(i+1, j - \frac{1}{2})] \quad (5)$$

式中: δ 为空间步长。但对于二维矩形计算区域的角点, 吸收边界条件的离散式需要特殊考虑。如对于左上角角点 (i_0, j_0) , TE 波的情况下, 本文采用的离散形式为

$$H_z^{n+1}(i_0, j_0) = H_z^n(i_0+1, j_0+1) + [(c \cdot t - \sqrt{2}) / (c \cdot t + \sqrt{2})] [H_z^{n+1}(i_0+1, j_0+1) - H_z^n(i_0, j_0)] \quad (6)$$

2. 电磁散射问题中空间场可以写成入射场和散射场之和, 这样, 在截断边界附近只有散射场, 是外向行波。为将入射波引入到总场区, 需要在分界面上设置入射波电磁场的切向分量^[4]。总场边界的四个角点也要作相应的处理。

1.3 离散间隔及计算时间步的估计

FDTD 方法是以一组有限差分方程来代替麦克斯韦方程, 即以差分方程组的解来代替原来电磁场偏微分方程组的解。只有离散后差分方程组的解是收敛和稳定的, 这种代替才有意义。为了满足数值稳定性, 时间和空间步长都必须满足一定的条件。通常来说, 时间间隔必须小于波以光速通过 Yee 元胞对角线长度的 1/2 (二维情况) 所需的时间。空间间隔必须小于 $\lambda/12$ 。从理论上说离散间隔越小, 目标建模越准确, 计算结果也越精确, 但为了使计算达到快速稳定, 需要对计算时间及计算精度有一个折中。在实际计算中发现计算所需时间步按照电磁波往返穿越 FDTD 计算区对角线的 3~5 次来估计, 或者说计算时间步为 FDTD 计算区对角线上元胞数目的 12~20 倍比较合理。

2 计算模型的选取和计算

入射波采用一维 FDTD 随时间逐步推进地在总场区引入射波, 这样可以减少散射场区的泄露, 以下以 3 类情况为例对算法进行验证: (1) 在均匀的体材料中传输的光波相位分布如图 3 所示, 呈现标准的正弦波形式; (2) 熔石英内部有一圆形气泡的电磁场模拟, 计算参数为: 气泡半径为 $\lambda/4$, 位于计算区域中间。熔石英的介电常数取为 2.5, 电导率为 10^{-12} 。电场幅值为 1 的 TM 波自左边入射, 步长为 $\lambda/40$, 总场边界: 10, 140, 吸收边界: 0, 150, 时间步等于 1200。计算得到电场幅值最大为 3.57。同样的计算条件下, 改变气泡半径为 $\lambda/2$, 电场最大幅值为 4.32, 参见图 4; 气泡半径为 λ 时, 电场幅值的最大值为 3.52; (3) 熔石英亚表面有一圆形导体的电磁场模拟示意图, 参见图 5。亚表面问题相对较为复杂, 涉及到半无限空间的离散与截断问题, 还需要应用到阻抗边界条件^[5,6]。

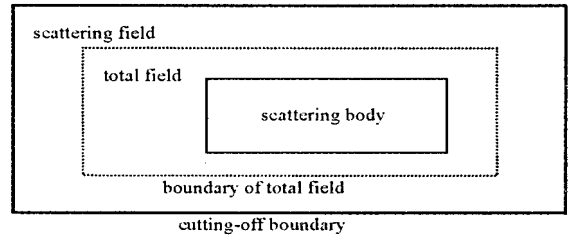


Fig. 2 Separation of domain of total field and scattering field

图 2 总场区和散射场区的划分

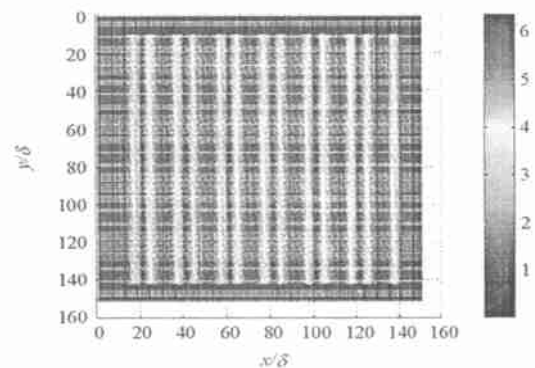


Fig. 3 Distribution of amplitude of electric field in homogeneous optical material

图 3 均匀材料中的光场幅值分布

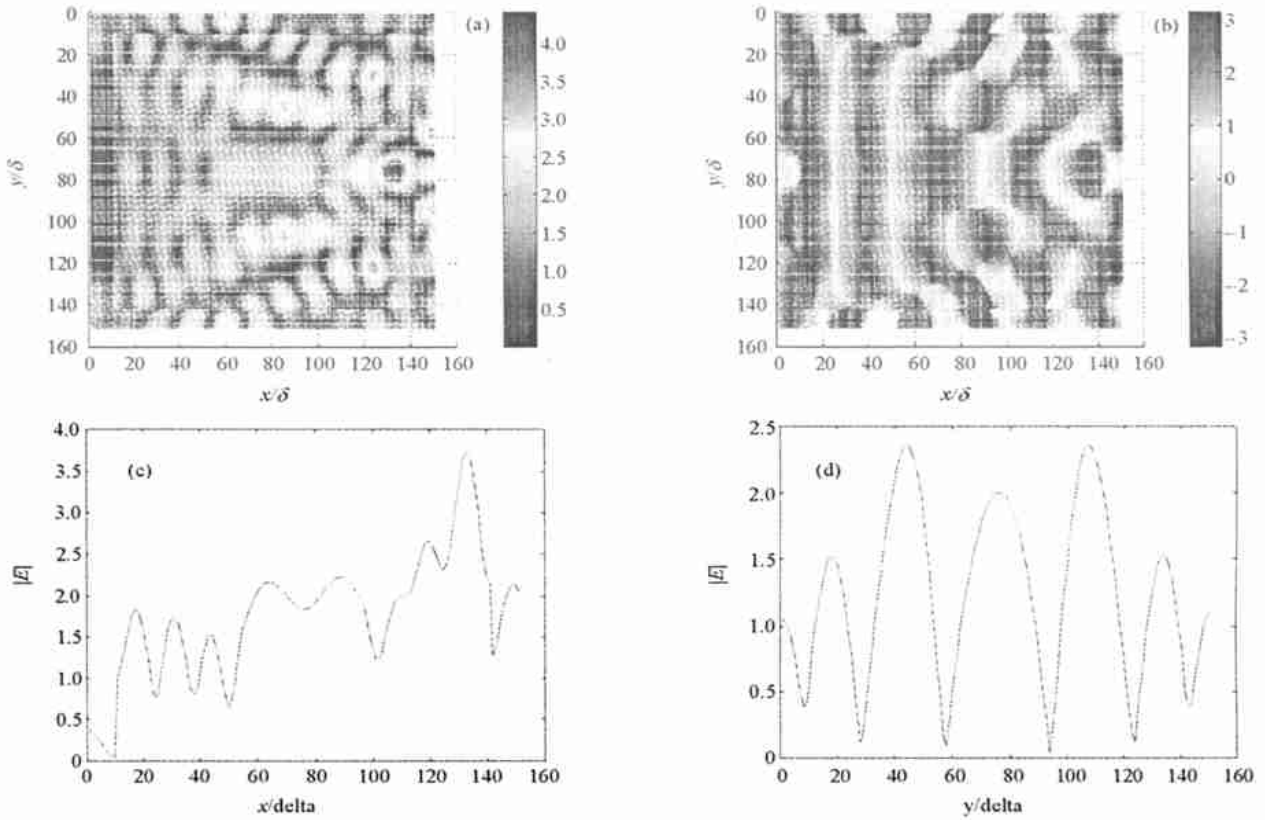


Fig. 4 Distribution of electric field with circular pore in fused silica, $\epsilon = 1/40$. (a) Distribution of amplitude; (b) Distribution of phase; (c) Distribution of amplitude of horizontal cross section; (d) Distribution of amplitude of vertical cross section

图 4 熔石英内部存在圆形气泡时的 E_z 近场光强分布。(a)时谐场幅值分布;(b)相位分布;
(c)横向剖面幅值曲线;(d)纵向剖面幅值曲线

3 结 论

采用时域有限差分方法,模拟了熔石英中存在亚波长量级缺陷时的时谐场场强幅值及相位分布。当缺陷位于元件较深处时,可以不考虑分界面问题。通过计算模型参数的改变可以看出,当均匀材料中存在介电常数大于或小于材料的介电常数的杂质时,无论其形状及大小如何,都会毫无疑问地造成局域光场增大,增大的幅度与介质参数及相对位置有关系。

当光学材料亚表面存在缺陷时问题较复杂,本文初步模拟了熔石英中存在导体时的电场分布,为进一步光学元件表面及亚表面微缺陷二维及三维的数值计算,奠定了理论基础。

总之,时域有限差分方法作为一种数值计算的手段,不仅适用于导体,同样也适用于介质情况,对于光学材料缺陷的电磁场模拟,实际计算结果证明该方法是适用的。

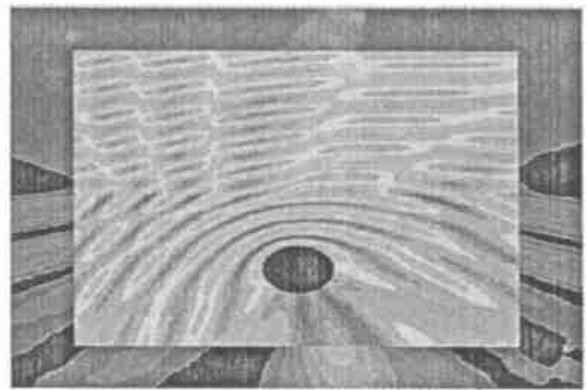


Fig. 5 Distribution of amplitude of electric field with circular conductor in subsurface of fused silica

图 5 熔石英亚表面有一圆形导体时的电场幅值分布

参考文献:

[1] 葛德彪,闫玉波.电磁波时域有限差分方法[M].西安:西安电子科技大学出版社,2002.(Ge D B, Yan Y B. Method of electromagnetic finite-difference time-domain. Xi an: Publication of Xidian University, 2002)

[2] Taflov A. Review of the formulation and application of the finite-difference time-domain method for numerical modeling of electromagnetic wave interaction with arbitrary structures[J]. *Wave Motion*, 1998, **10**: 547—582.

- [3] Mur G. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic field equations[J]. *IEEE Trans Electromagn Compat*, 1981, **23**(4): 377—382.
- [4] 葛德彪,石守元. 一种新的 FDTD 入射场设置方法[J]. *微波学报*, 1995, **11**(3): 187—190. (Ge D B, Shi S Y. A novel arrangement method of finite-difference time-domain incident field. *Microwave Transaction*, 1995, **11**(3): 187—190)
- [5] Barnes P R, Tesche F M. On the direct calculation of a transient plane wave reflected from a finitely conducting half space[J]. *IEEE Trans Electromagn Compat*, 1991, **33**(2): 125—129.
- [6] Maloney J G, Smith G S. The use of surface impedance concepts in the finite-difference time-domain method[J]. *IEEE Trans Antennas Propagat*, 1992, **AP-40**(1): 38—48.

Numerical computation method about distribution of electromagnetic field at micro-defect in optical element

CHAI Li-qun, XU Qiao

(Chengdu Fine Optical Engineering Research Center, P. O. Box 450, Chengdu 610041, China)

Abstract: Optical system of Shengguang works under high power condition and demands that optical elements are highly resistant to laser damage. Micro-defects in optical element may cause enhancement of electric field in small area which will lead to lower laser damage threshold. In this paper, Time-domain finite difference method(FDTD) is used to simulate distribution of electromagnetic field. Quantitative judgement of selection of computation parameters is given. The results show that if micro-defects(such as pore, impurity, etc) exist in the optical material, the intensity of electric field is enhanced by several times.

Key words: Time-domain finite difference method(FDTD); Micro-defect; Laser-induced damage