

文章编号: 1001-4322(2005)01-0067-04

熔石英表面划痕附近电磁场分布模拟分析*

王 毅¹, 许 乔¹, 柴立群¹, 陈 宁¹, 朱湘琴²

(1. 成都精密光学工程研究中心, 四川 成都 610041; 2. 西安电子科技大学 物理系, 陕西 西安 710071)

摘 要: 亚表面缺陷是造成固体激光器光学器件损伤阈值过低的重要原因, 而表面划痕是缺陷中重要的一种。使用时域有限差分方法(FDTD)模拟了熔石英表面圆柱形、三角形划痕对激光电磁场的调制作用, 绘出了 2 维电磁场强度分布图, 计算出划痕尺寸不同时电磁场的最大强度。数值计算结果表明, 尺寸为二倍波长的划痕可以获得最大的电磁场强度, 此时容易导致自聚焦。亚波长级和足够大尺寸的划痕作用基本可以忽略。一定尺寸的划痕, 深度越大, 最大场强也越大, 但当划痕过深时最大场强反而会降低。

关键词: 激光损伤; 亚表面缺陷; 时域有限差分方法; 电磁场分布

中图分类号: TN012 **文献标识码:** A

当前随着固体激光器输出功率逐渐提高, 激光光学器件在紫外波段会受到严重的损伤, 成为限制 ICF(激光约束聚变)系统进一步提高功率密度的主要障碍, 导致损伤阈值太低的一个主要因素是亚表面缺陷。近年来亚表面缺陷研究已经成为世界各国研究的热点, 美国 Livermore 国家实验室(LLNL)已经获得大量损伤阈值测试结果^[1,2], 从理论上提出数种损伤产生机制^[3]。

光学器件制造流程中(如切割、抛光)难以避免地会引入许多形状复杂、尺寸深度不同的划痕, 它们使元件在受到激光照射时, 在材料内部形成集中的电磁场分布, 容易引发自聚焦、电子崩电离等, 直接导致材料抗损伤能力下降。本文就基于简化的划痕模型, 用时域有限差分方法, 模拟附近电磁场分布, 研究电场分布随划痕尺寸等因素变化的规律, 为光学元件的制造误差控制提供依据, 以便在工程加工中尽力避免这些尺寸的划痕。

1 理 论

熔石英表面划痕多为三角形和圆形槽, 在高功率激光照射下, 需要确定各位置电磁场的瞬态分布, 时域有限差分法(FDTD)是适用有效的方法。

研究表面划痕对激光的散射作用, 可以采用将二维三波(入射波、反射波和透射波)时域有限差分法应用于半空间情况的散射分析途径^[4]。在直角坐标系中, 对于二维问题, 令所有物理量均与 z 坐标无关, 即 $\partial/\partial z = 0$ 。电磁场直角分量可分为两组, 即 E_x, E_y, H_z 为一组, 称为对于 e_z 的 TE 波; H_x, H_y, E_z 为一组, 称为对于 e_z 的 TM 波。令 $f(x, y, t)$ 代表 E 或 H 的某一分量, 在时间和空间域中的离散约定为以下符号:

$$f(x, y, t) = f(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t) = f^n(i, j) \quad (1)$$

图 1 为电场和磁场各节点空间排布, 最初由 Yee 提出^[5]。 E, H 场分量取样节点在空间和时间上采取交替分布, 每个 E (或 H)分量周围由 4 个 H (或 E)分量环绕, 这种抽样方式称为 Yee 元胞。

离散麦克斯韦旋度方程并使用平均值近似可得到 TE 波和 TM 波的 FDTD 公式, 对 TM 波, FDTD 公式为

$$H_x^{n+1/2}(i, j + \frac{1}{2}) = CR(m)H_x^{n-1/2}(i, j + \frac{1}{2}) - CQ(m) \frac{E_z^n(i, j + 1) - E_z^n(i, j)}{\Delta y} \quad (2)$$

$$H_y^{n+1/2}(i + \frac{1}{2}, j) = CR(m)H_y^{n-1/2}(i + \frac{1}{2}, j) + CQ(m) \frac{E_z^n(i + 1, j) - E_z^n(i, j)}{\Delta x} \quad (3)$$

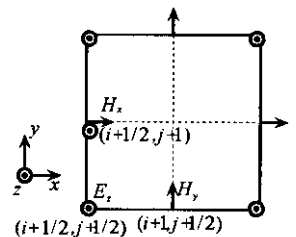


Fig. 1 2D Yee cell(TM mode)

图 1 二维 TM 波 Yee 元胞

* 收稿日期 2004-06-16; 修订日期 2004-09-03

基金项目: 中国工程物理研究院基金资助课题

作者简介: 王 毅(1980—), 男, 硕士研究生, 主要从事亚表面缺陷研究, E-mail: bcswy_ffm1st@sina.com.

$$E_z^{n+1}(i, j) = CA(m)E_z^n(i, j) + CB(m) \left[\frac{H_y^{n+1/2}(i+1/2, j) - H_y^{n+1/2}(i-1/2, j)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+1/2}(i, j+1/2) - H_x^{n+1/2}(i, j-1/2)}{\Delta y} \right] \quad (4)$$

式(2)~(4)中 m 与坐标对应,如式(2)中 $m = (i, j+1/2)$; $CA(m)$, $CB(m)$, $CP(m)$, $CQ(m)$ 的定义如下

$$\left. \begin{aligned} CA(m) &= \frac{\varepsilon(m)/\Delta t - \sigma(m)/2}{\varepsilon(m)/\Delta t + \sigma(m)/2} \\ CB(m) &= \frac{1}{\varepsilon(m)/\Delta t + \sigma(m)/2} \end{aligned} \right\}, \quad \left. \begin{aligned} CP(m) &= \frac{\mu(m)/\Delta t - \sigma_m(m)/2}{\mu(m)/\Delta t + \sigma_m(m)/2} \\ CQ(m) &= \frac{1}{\mu(m)/\Delta t + \sigma_m(m)/2} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

式中 ε 表示介电常数; μ 表示磁导率; σ 表示电导率; σ_m 表示导磁率。计算中 Yee 元胞为正方形,即等间隔离散

$$\Delta x = \Delta y = \delta \quad (6)$$

为保证计算的稳定性,空间和时间离散间隔应当满足 Courant 稳定性条件^[6]。对散射问题,在 FDTD 计算区域中引入总场边界,把计算区域分为总场区和散射场区,在总场边界处设置入射波。对于二维半空间问题,入射波在两种介质的分解面会产生反射和透射,可用三波法设置入射波,即在上半空间引入入射波和反射波,在下半空间引入透射波,如图 2 所示。

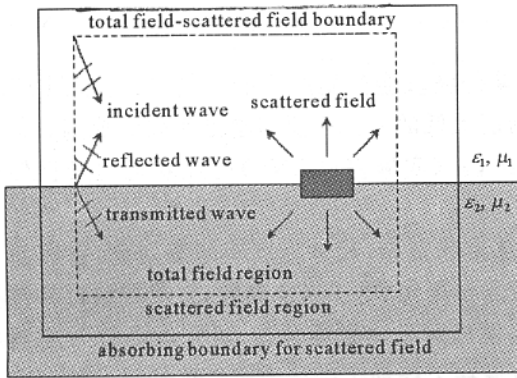


Fig. 2 2D total field and scattering field

图 2 二维总场与散射场的划分

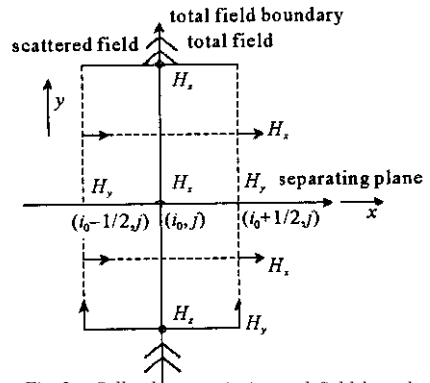


Fig. 3 Cells along $x = i_0 \Delta x$ total field boundary

图 3 $x = i_0 \Delta x$ 总场边界附近元胞

如图 3,以总场左边界 $x = i_0 \Delta x$ 为例,对二维 TM 波,上半空间的 E_z 满足

$$E_z^{n+1}(i_0, j) = E_z^n(i_0, j) + \frac{\Delta t}{\varepsilon_1 \delta} \left[H_y^{n+1/2}(i_0 + \frac{1}{2}, j) - H_y^{n+1/2}(i_0 - \frac{1}{2}, j) - H_x^{n+1/2}(i_0, j + \frac{1}{2}) + H_x^{n+1/2}(i_0, j - \frac{1}{2}) \right] - \frac{\Delta t}{\varepsilon_1 \delta} \left[H_y^{n+1/2}(i_0 - \frac{1}{2}, j) + H_y^{n+1/2}(i_0 + \frac{1}{2}, j) \right] \quad (7)$$

式中 ε_1 为上半空间介电常数; $H_{y, inc}$, $H_{y, ref}$ 分别为入射波和反射波磁场的 y 分量。下半空间的 E_z 满足

$$E_z^{n+1}(i_0, j) = E_z^n(i_0, j) + \frac{\Delta t}{\varepsilon_2 \delta} \left[H_y^{n+1/2}(i_0 + \frac{1}{2}, j) - H_y^{n+1/2}(i_0 - \frac{1}{2}, j) - H_x^{n+1/2}(i_0, j + \frac{1}{2}) + H_x^{n+1/2}(i_0, j - \frac{1}{2}) \right] - \frac{\Delta t}{\varepsilon_2 \delta} H_{y, tran}^{n+1/2}(i_0 - \frac{1}{2}, j) \quad (8)$$

式中 ε_2 为下半空间介电常数; $H_{y, tran}$ 为透射波磁场的 y 分量。计算中必须在计算区域截断边界上设置吸收边界条件,二维半空间问题可采用 Mur 二阶近似吸收边界条件^[3]。

2 数值计算结果及分析

计算针对的材料为均匀熔石英,相对介电常数 $\varepsilon_r = 2.25$,入射激光的波长 $\lambda = 355 \text{ nm}$,设入射波电场幅值为 1.0 V/m 。入射面为 xoy 面,材料表面与 y 轴垂直,入射角 $\theta_i = 0$,模式为 TM 波,圆柱形划痕尺寸 $D = 2r$,三角形等腰,宽度为 a ,深度为 d ,见图 4。

实际加工产生的半圆柱形划痕尺寸 D 较小,约为 $\lambda/10 \sim \lambda/2$,对于典型尺寸 $D = \lambda/2$,可取网格尺寸 $\delta = \lambda/40 = 8.875 \text{ nm}$,总场的边界取 $-90 \sim 90; -150 \sim 60$ (单位 δ),FDTD 计算时间步为 4 000 步,电场分布见图 5 万方数据

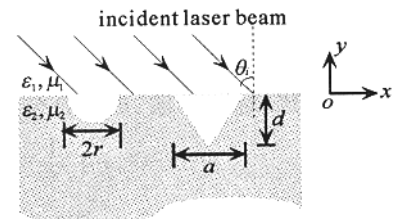


Fig. 4 Geometrical illustration of all parameters

图 4 各参数几何图示

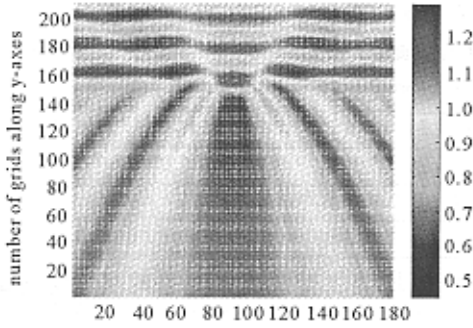


Fig. 5 Electric field amplitude distribution around one semicircle scratch

图 5 半圆形划痕附近电场幅值分布

从图5可知,划痕下方两侧出现了电场增强的现象(自聚焦),正下方出现低强度弱场区,横向强度分布成间隔状。熔石英内(106 δ ,142 δ)处有最大强度 $E_{\max} = 1.044$ 。图6为纵坐标 $y = 30, 60, 90, 120, 140$ (单位 δ ,下同)时沿 x 轴各网格的电场幅值分布。

综合图5和图6可知,图样相对中轴线大致对称,两侧各有1~3个幅值峰,划痕中离表面越浅的位置其对应的峰越靠近中轴,且幅值更大。

用同样的方法推算出 $D = \lambda/4$ 时, $E_{\max} = 0.912 < 1$,说明划痕尺寸小到亚波长级时电场增强作用基本可以忽略; $D = \lambda$ 时 $E_{\max} = 1.179$; $D = 2\lambda$ 时 $E_{\max} = 1.385$; $D = 3\lambda$ 时 $E_{\max} = 1.348$,说明尺寸达到 μm 级时电场最大值又减小。各尺寸划痕的增强倍数见表1。

从表1数据可看出,在 $D = 2\lambda$ 附近电场有最大增强,易产生自聚焦。划痕尺寸逐渐增大时,电场最大值先由小变大,再逐渐减小。

三角形是加工中产生划痕的典型形状,主要尺寸较大, $a = 5\lambda \sim 50\lambda$, $d = \lambda \sim 2\lambda$ 。图7为 $a = 10\lambda = 3.55 \mu\text{m}$, $d = 2\lambda = 710 \text{ nm}$ 时电场强度分布,取网格尺寸 $\delta = \lambda/30 = 11.7 \text{ nm}$,总场区域为 $-230, 230; -200, 110$ (单位 δ),FDTD 计算时间步为 8 000 步。熔石英内部(64 δ ,22 δ)处取得电场强度最大值 $E_{\max} = 1.116$ 。其他尺寸和深度的划痕下的强度分布与之类似。

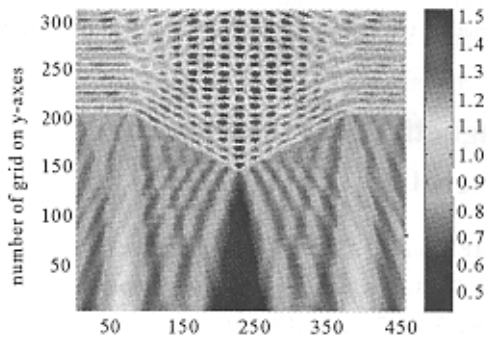


Fig. 7 Electric field amplitude distribution around one triangular scratch

图 7 三角形划痕附近电场幅值分布

从图7可看出,入射波在划痕的两个斜边发生反射和透射,在上半空间发生干涉,形成明显的驻波;在下半空间两侧电场增强,正下方有小电场强度阴影区,图样关于中轴线对称。图8为纵坐标 $y = 20, 40, 60, 90, 120$ 时沿 x 轴各网格电场幅值分布。从图8可见,幅值曲线比图6复杂,两侧各有数个峰,最大值靠近外侧,大的幅值出现在离表面较深的位置。

用相同的方法计算典型深度 $d = 2\lambda$, $a = 5\lambda$ 的情况,最大电场强度 $E_{\max} = 1.341$; $a = 20\lambda$ 时, $E_{\max} = 0.989$,说明当尺寸大到 20λ 附近时,电场增强基本可以忽略; $a = \lambda/4$ 时, $E_{\max} = 1.030$,尺寸小到亚波长级时电场增强

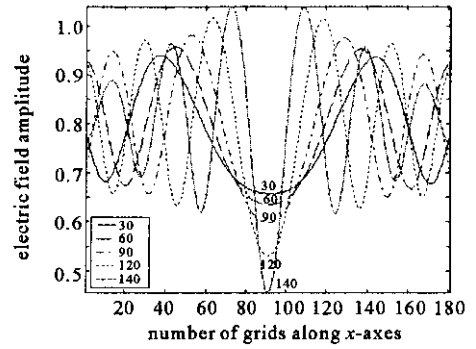


Fig. 6 Electric field amplitude distribution along x-axes grids in various scratch depths

图 6 不同深度下沿 x 轴的电场幅值分布

表 1 各尺寸半圆柱形划痕作用下熔石英内电场强度最大值
Table 1 Maximal electric field amplitudes E_{\max} in fused silica vs the sizes of semicircle scratch D

D	$\lambda/10$	$\lambda/5$	$\lambda/4$	$\lambda/3$	$\lambda/2$
E_{\max}	0.823	0.876	0.912	0.964	1.044
D	λ	2λ	3λ	4λ	
E_{\max}	1.179	1.385	1.348	1.327	

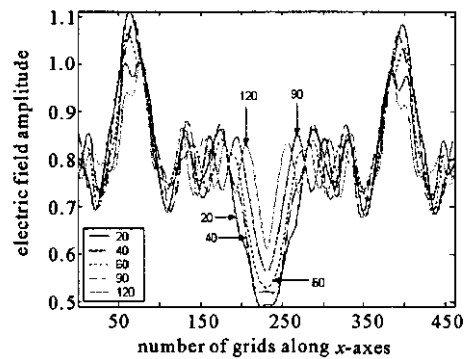


Fig. 8 Electric field amplitude distribution along x-axes grids in various depths

图 8 不同深度下沿 x 轴电场幅值分布

也不明显。 $d = 2\lambda$ 时,各尺寸三角形划痕作用下熔石英内电场最大值如表 2 所示。

表 2 各尺寸三角形划痕作用下熔石英内电场强度最大值

Table 2 Maximal electric field amplitudes in fused silica E_{\max} vs the widths of triangular scratch a

a	$\lambda/6$	$\lambda/5$	$\lambda/4$	$\lambda/2$	λ	2λ
E_{\max}	0.989	1.006	1.030	1.178	1.438	1.566
a	5λ	10λ	15λ	18λ	20λ	25λ
E_{\max}	1.341	1.116	1.033	1.001	0.989	0.969

从表 2 可看出,对于相同深度的三角形划痕,尺寸 $a = 2\lambda$ 附近时电场强度受到最大值的调制。电场最大值随尺寸增加先增大后减小,但在较大尺寸范围内值仍然较大。对于典型尺寸 $a = \lambda$,不同深度的划痕对电场作用不同,见表 3。

从表 3 可看出,对同一尺寸的划痕,深度 $d = 3 \sim 4\lambda$ 时电场增强最明显,电场最大值基本随深度增大而增大,但深度继续增大时电场增强作用又逐渐减弱。

表 3 各深度三角形划痕作用下熔石英内电场强度最大值

Table 3 Maximal electric field amplitudes in fused silica E_{\max} vs the depths (d) of triangular scratch at width $a = \lambda$

d	λ	2λ	3λ	4λ	5λ
E_{\max}	1.298	1.438	1.480	1.481	1.475

3 结 论

总体上说,对于常见的半圆柱形和三角形划痕,尺寸为 2λ 左右的划痕对电场增强最明显,电场最大值随尺寸减小而减小,当小到亚波长级时电场增强基本可以忽略,它也随尺寸增大而逐渐减小,足够大的某种形状划痕的作用亦可忽略,划痕深度对电场增强贡献相对较小,表现为深度越大,电场越强,当深度继续增大时,电场强度反而逐渐减小。

参考文献:

- [1] Camp D W , Kozlowski M , Sheehan L , et al. Subsurface damage and polishing compound affect the 355 nm laser damage threshold of fused silica surfaces[R]. USA : LLNL , 1997.
- [2] Yoshiyama J , Genin F Y , Salleo A , et al. A study of the effects of polishing , etching , cleaving , and water leaching on the UV laser damage of fused silica[R]. USA : LLNL , 1997.
- [3] Feit M D , Rubenchik A M. Laser intensity modulation by nonabsorbing defects[R]. USA : LLNL , 1996.
- [4] Wong P B , Tyler G L , Baron J E , et al. A three-wave FDTD approach to surface scattering with application to remote sensing of geophysical surfaces [J]. *IEEE Trans Antennas and Propagation* , 1996 , **44**(4) : 504—514.
- [5] Yee K S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell equations in isotropic media[J]. *IEEE Trans Antennas Propagation* , 1966 , **14**(3) : 302—307.
- [6] Taflov A. Computational electrodynamics : the finite difference time domain method (second edition) [M]. Norwood , MA : Artech House , 2000.

Simulation and analysis of electromagnetic field distributing around fused silica scratch

WANG Yi¹ , XU Qiao¹ , CHAI Li-qun¹ , CHEN ning¹ , ZHU Xiang-qin²

(1. Research Center of Fine Optical Engineering , P. O. Box450 , Chengdu 610041 , China ;

2. Department of Physics , Xidian University , Xi'an 710071 , China)

Abstract : Subsurface damage has been the main cause to lower the laser-induced damage threshold of optics components in high power solid laser system , and one important kind of these is scratch. Finite difference time domain (FDTD) method was used to simulate the electromagnetic distribution around column form or triangular scratch in fused silica. 2D electric field amplitude distribution was illustrated , and maximal values of electric field amplitude vs scratch sizes were calculated. The conclusion displays that the electric field amplitude is maximal when the scratch size is 2λ wide , which is easy to cause self-focusing , the effect can be neglected when scratchsize is sub-wavelength level or large enough. The larger the depth is , the larger the maximal value is when the size is the same , but it becomes smaller when scratch is too deep.

Key words : Laser damage ; Subsurface damage ; FDTD ; Electromagnetic field distribution