Advances in Condensed Matter Physics 凝聚态物理学进展, 2019, 8(3), 69-75
Published Online August 2019 in Hans. http://www.hanspub.org/journal/cmp
https://doi.org/10.12677/cmp.2019.83009

Hans汉斯

Simulation Study on the Effect of Solid Contaminants on the Laser-Induced Hot Damage of Al_2O_3

Jiaxuan Chen, Jianbo Qin, Shuai Zhang

School of Mechatronics Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin Heilongjiang
Email: chenjiaxuan@hit.edu.cn

Received: Nov. 6th, 2019; accepted: Nov. 21st, 2019; published: Nov. 28th, 2019

Abstract

Al_2O_3 is the most widely used in high power laser material, the surface damage at work can cause serious decline, optical device performance is the main factor restricting the development of high functional laser device further. One of the surface damages is mainly caused by the surface attachment of contaminants, among them, the solid contaminants are the main source of induced damage, therefore, research on the surface of Al_2O_3 solid contaminants laser damage resistance of the impact is particularly important. Effect on surface of Al_2O_3 based on solid inorganic contaminants was studied, with different types, different size of the surface of the solid pollutants of Al_2O_3 are simulated to examine the effects of temperature, and found that when Al_2O_3 surface contaminants, laser damage is more likely to occur, and different types, different sizes of contaminants have different effects on Al_2O_3 laser damage.

Keywords

Solid Contaminants, Al_2O_3, Laser Damage, Simulation Study

固体污染物对Al_2O_3激光诱导热损伤影响的仿真研究

陈家轩，秦建波，张　帅

哈尔滨工业大学机电工程学院，黑龙江　哈尔滨
Email: chenjiaxuan@hit.edu.cn

收稿日期：2019年11月6日；录用日期：2019年11月21日；发布日期：2019年11月28日

文章引用：陈家轩，秦建波，张帅．固体污染物对 Al_2O_3 激光诱导热损伤影响的仿真研究[J]．凝聚态物理学进展，2019, 8(3): 69-75. DOI: 10.12677/cmp.2019.83009

摘　要

Al_2O_3是高功率激光装置中广泛应用的材料，其在激光辐照工作时表面由于缺陷产生损伤，进而产生的大量污染物会造成光学元件性能严重下降，是制约高功能激光装置进一步发展的主要因素之一。表面损伤主要是由于表面依附污染物引起的，其中，固体污染物又是最主要的诱发损伤源，因此，研究固体污染物对Al_2O_3表面抗激光损伤性能的影响就显得尤为重要。本文针对固体类无机污染物对Al_2O_3表面影响进行了研究，对不同类型、不同尺寸的固体污染物对Al_2O_3表面温度的影响进行了仿真研究，发现当Al_2O_3表面存在污染物时，更容易发生激光损伤，且不同种类、不同尺寸污染物对Al_2O_3激光损伤的影响不同。

关键词

固体污染物，Al_2O_3，激光损伤，仿真研究

1. 引言

作为高能激光领域的典型代表装置，惯性约束核聚变被称为21世纪能源应用方面的曙光[1] [2]，世界上各大国家相继完成或正在建造ICF激光装置，如美国的国家点火装置(NIF)和OMEGA，法国的兆焦耳激光装置(LMJ)和我国的神光系列装置[3] [4] [5]。高能激光装置工作过程中存在大量杂散光[6] [7] [8]，这些杂散光会导致机械支撑结构表面烧蚀汽化，沉积在光学元件表面造成光学元件性能下降甚至损伤，当支撑结构表面存在污染物时，存在污染物处将会成为诱导损伤起始点，使得表面抗激光损伤能力下降，导致损伤严重[9] [10]。

研究污染物对材料激光损伤的影响，对光学系统装置的表面洁净控制以及抗激光损伤能力具有重要的意义，在激光诱导材料损伤机制的研究展开后，国外很多学者便对固体颗粒污染物诱导材料损伤的问题进行了大量的研究。1970年，Hopper等人对光学元件表面污染颗粒物特别是金属颗粒在激光辐照作用后的温度和应力的变化进行了研究，定性分析了杂质颗粒的大小、形状和热膨胀系数对材料损伤的影响[11]；Martin等人研究了玻璃表层含杂质在激光辐照下的损伤行为，得到玻璃表层的金属污染物会增大材料表面损伤的概率的结论[12]；Honig等人研究了颗粒状污染物在1064 nm激光波长的辐照作用下诱导熔石英材料的损伤问题，并探索了污染物尺寸、类别和损伤点的尺寸[13]；Génin等人用355 nm波长的激光对相同厚度(1 μm)不同大小、不同尺寸和形状的表面杂质进行辐照，对杂质诱导材料的损伤的机理进行了研究，获得了表面损伤的形貌以及损伤规律[14]；Feit等人通过实验和数值模拟的方法对表面污染物在激光作用下诱发材料的初始损伤和损伤增长行为进行了模拟研究，认为污染物首先吸收激光能量产生热效应，再产生等离子体，经热应力以及冲击波的产生导致了最终损伤形貌的生成[15]。

在固体颗粒污染物对损伤的影响方面，已经取得了一定的进展，但目前的研究主要是针对固体颗粒污染物对光学元件的硬性，Al_2O_3材料作为高功率多程激光放大系统中常用的材料，却少有研究，因此，对于固体颗粒污染物对Al_2O_3材料激光损伤影响的研究具有一定的现实意义。

2. 污染物的来源与分类

高功率激光装置生产、运输及使用过程中，不可避免会引入污染物，根据污染物在材料表面存在的

形态的不同，可分为固态颗粒污染物、液态污染物和分子态污染物。固体颗粒污染物主要包括电离化颗粒、研磨剖光材料、金属颗粒和矿物污染物等，主要存在于元件的表层与亚表层中；液态污染物主要包括化学试剂、硅油、润滑油等；分子态污染物主要包括材料本身在激光辐照下释放的气体和空气中存在的污染物。根据污染物化学成分的不同，分为无机污染和有机污染物，无机污染物包括金属颗粒、尘土颗粒、电介质颗粒等，有机污染物包括分子量较大或液态的非蒸发性残留和气态分子污染物。

3. 污染物对温度场影响的理论模型

表面固体颗粒污染物在激光的作用下会成为诱发激光损伤的起始点，为了探究固体颗粒污染物对表面激光损伤的影响机理，国内外学者进行了大量的研究，提出了多种理论模型，如 Kolunov 的热爆炸模型[16]和 Hopper 的污染物小球模型[11]，Hopper 的污染物小球模型将固体污染物简化为质量均匀的小球，污染物小球吸收辐照激光能量会产生高温，同时由于激光辐照的方向性，小球内部会由于温度不均匀的现象而产生应力，发生热力耦合造成材料表面损伤，相对于其他模型，Hopper 的小球模型更加完善有效，因此，本文采用 Hopper 的小球模型进行仿真分析。

温度场理论模型

常用的计算模型为球形吸收污染物，由标准热扩散方程，在激光辐照作用下，主要考虑污染物的吸收而忽略基体的吸收，球坐标中污染物和基体的温度变化由热传导方程(1)和(2)确定：

$$\frac{1}{D_i}\frac{\partial T_i}{\partial t}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial T_i}{\partial r}\right)+\frac{A}{k_i},\quad r<a \tag{1}$$

$$\frac{1}{D_s}\frac{\partial T_s}{\partial t}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial T_s}{\partial r}\right),\quad r>a \tag{2}$$

其中，$D_i=k_i/(\rho_i\cdot C_i)$，$D_s=k_s/(\rho_s\cdot C_s)$，为热扩散系数；下标 i 和 s 分别代表污染物和基体。

T_i，T_s——污染物温度，基底温度；

t——时间；

ρ_i，ρ_s——污染物密度，基底密度；

C_i，C_s——污染物质量热容，基底质量热容；

k_i，k_s——污染物导热系数，基底导热系数；

r——距离激光光斑中心距离；

a——球形污染物半径；

A——热源项。

热源由入射激光和污染物吸收截面确定：

$$A=\begin{cases}\dfrac{3QI}{4a^3} & 0<t\le t_p\\ 0 & t>t_p\end{cases} \tag{3}$$

$$Q=p\frac{16\pi^2a^3k}{\lambda}\int_0^{\pi/2}\sin\theta(\cos\theta)^3\,\mathrm{d}\theta \tag{4}$$

式中，Q——吸收截面；

I——入射激光功率密度；

t_p——激光脉冲宽度；

k——污染物的消光系数；

p——散射系数。

其中，由于污染物的热物参数在激光辐照过程中将会随温度的变化而变化，p 为考虑污染物小球非线性吸收的影响而引入的非线性系数(p = 1 时即为线性吸收情况)。该温度控制方程满足的初始条件和边界条件为：

$$T_i = T_s = T_0,\ \forall r, t = 0 \tag{5}$$

$$T_s = T_0,\ \forall t, r \to \infty \tag{6}$$

$$T_i = T_s,\ k_i \frac{\partial T_i}{\partial r} = k_s \frac{\partial T_s}{\partial r},\ r = a \tag{7}$$

主要考虑污染物的吸收而忽略基体的吸收，假定吸收截面和材料的热物特性不随温度发生变化，Goldenberg 和 Tranter 得出了上述热传导方程的解析解：

$$T = \frac{a^2 A}{k_i}\left[\frac{1}{3}\frac{k_i}{k_s} + \frac{1}{6}\left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right) - \frac{2aB}{r\pi}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-x^2\frac{t_p}{r}} \frac{(\sin x - x\cos x)\sin\left(\frac{rx}{a}\right)}{x^2\left((C\sin x - x\cos x)^2 + B^2x^2(\sin x)^2\right)}\mathrm{d}x\right],\ 0 < r < a$$

$$T = \frac{a^3 A}{Ek_i}\left[\frac{1}{3}\frac{k_i}{k_s} - \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{x^2 t_p}{r}} \frac{(\sin x - x\cos x)\left[Bx\sin x\cos Fx - (C\sin x - x\cos x)\sin Fx\right]}{x^3\left((C\sin x - x\cos x)^2 + B^2x^2(\sin x)^2\right)}\mathrm{d}x\right],\ r > a \tag{8}$$

其中，$B = \frac{k_s}{k_i}\sqrt{\frac{D_i}{D_s}}$；$C = 1 - \frac{k_s}{k_i}$；$E = \frac{a^2}{D_i}$；$F = \left(\frac{r}{a} - 1\right)\sqrt{\frac{D_i}{D_s}}$。

在对污染物诱导损伤的激光辐照计算过程中，当污染物的熔点低于基底时，且污染物吸收激光能量后，温度超过污染物熔点时，将会发生组织转化，从而吸收潜热，即相变潜热问题。一般而言，由于固体向液体转变时，相对于材料吸收的激光能量而言小很多，因此为了简化计算，忽略辐照过程中的相变潜热；或者考虑相变潜热的影响，把相变潜热叠加在材料比热容项上进行计算。

4. 仿真分析

4.1. 污染物对温度分布影响的仿真分析

采用多物理场耦合有限元仿真软件 COMSOL Multiphysics 进行激光辐照仿真计算，为了探究污染物对激光损伤的影响，仿真模型中仅考虑污染物对激光能量的吸收，忽略 Al_2O_3 基体对激光能量的吸收；激光能量通过体热源进行加载，并污染物的热生成率进行计算，激光参数与实验测试系统中的单纵模 SAGA 激光器参数相同，激光参数如表 1 所示。仿真模拟时，为了提高仿真效率，同时保证仿真结果的可靠性，基于实际情况对模型参数做了合理简化，假定污染物和基体材料各向同性，材料的热导率等热物参数不随温度的变化而变化。分别进行了不同种类、不同尺寸污染物对温度分布影响的仿真分析。

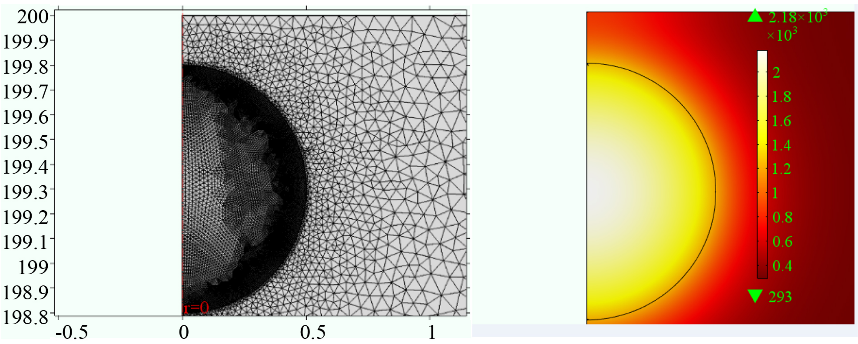
Table 1. Laser parameter
表 1. 激光参数

光斑面积(mm^2)	光路分光比	激光波长(nm)	激光脉宽(ns)	能量密度(J/cm^2)	激光功率(W)
0.80	22.50	355.00	6.00	E_density	$4/3 \times 10^6 \times$ E_density

4.1.1. 污染物种类对温度分布的影响

仿真污染物为激光装置中常见的金属固体颗粒污染物 Fe、Cr、Al、Cu、Pt 和 CrO_2，污染物半径为 0.5 μm，激光能量设定为 1 J/cm^2，脉宽为 6 ns，仿真时间为 100 ns，保持各类型污染物为单个污染物，镶嵌在微纳表层中，距离表面为 0.2 μm，对比分析各污染物对 Al_2O_3 基体材料的影响，以 Fe 为例，微纳表层中含 Fe 污染物的有限元模型计算图如图 1 所示。

由于不同污染物在激光辐照作用下对基体的热量传递不同，因此温度分布也有差异，污染物对基体破坏的发生主要是因为其与基体接触边界温度变化导致，不同污染物边界温度如图 2 所示。



(a) Fe 污染物有限元模型图　　(b) 1J/cm^2 能量通量下温度分布

Figure 1. Fe calculation model and temperature simulation results

图 1. Fe 计算模型与温度仿真结果

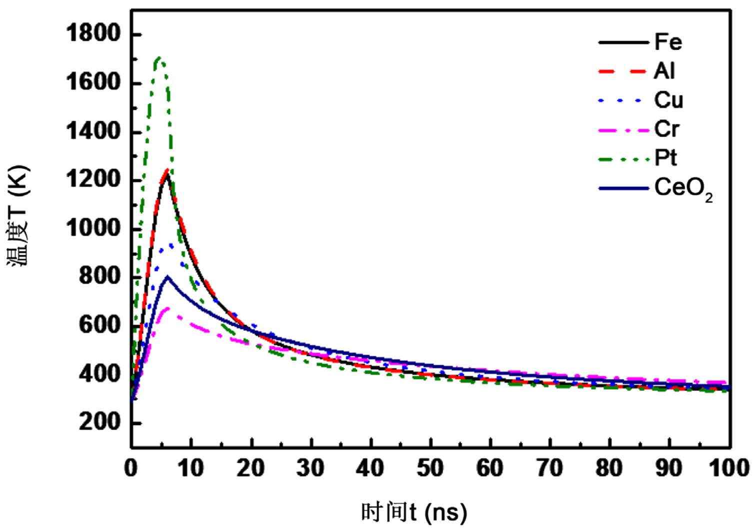


Figure 2. Comparison of temperature at different pollutant boundary

图 2. 不同污染物边界处温度对比

由图 2 可知，Pt 的峰值温度最高，为 1716 K，且远高于其他污染物边界温度，表明对基体材料的影响最大；Cr 的边界温度最低，对基体的影响最小，究其原因，在污染物吸收激光能量后向污染物内部和基体材料进行热量传递，由于 Pt 的导热系数最高，为 66.88 W/(m·K)，传递至基体的热量最多，因此接触边界处温度最高，而 Cr 的导热系数最低，为 2.1 W/(m·K)，传递至基体的热量最少，接触边界的温度则相对较低；从峰值温度方面看，在相同激光能量下，对基体材料的影响从大至小依次为 Pt、Al、Fe、Cu、CeO_2 和 Cr。其次，对边界处温度升高速率进行分析，在激光加载阶段，Pt 温度升高最快，Cr 温度

升高最慢，该规律和峰值温度大小规律一致，可知，在激光辐照过程中，导热系数对峰值温度和温升速率有很大的影响，在激光加载结束后，边界温度下降较快，由于导热系数的不同，各个污染物边界温度变化不尽相同。最后，从达到峰值的时间入手进行分析，与污染物中心处温度变化趋势相近，各污染物达到温度峰值总是滞后于高斯激光能量密度最大的时刻，其中，Pt 污染物在 $t = 5$ ns 时达到了温度峰值，说明在此时刻热吸收率和热扩散率达到平衡点；其余污染物均在 $t = 6$ ns (激光加载结束时刻)达到温度峰值。

4.1.2. 污染物尺寸对温度分布的影响

在污染物吸收激光能量对基体材料引起损伤的理论计算公式中，污染物半径是一个很重要的参数，处于污染物半径范围内和范围外的基底受激光辐照时的温度变化不同，处于污染物半径范围内的基底温度更高，容易损伤，这是由于污染物体积小，受激光辐照时会快速产生高温，造成基底与污染物接触部位温度高于基底其他部位。随着污染物半径的增大，污染物吸收的激光能量增加，温度升高，但其与基底接触的面积也相应增大，与基底之间的温度传递速率变高，污染物的温度会相应减小，因此，污染物半径必然存在一个临界值，在相同能量的激光辐照下，处于半径临界值的污染物温度最高。

在污染物粒子吸收激光功率项中，粒子的吸收系数和粒子尺寸大小有着密切的关系。污染物吸热传热过程中热量的传递和温度的变化是关于污染物半径、激光能量以及吸收时间等的函数，因此，建立了不同尺寸的污染物的基体材料热吸收仿真模型，基体尺寸、边界条件与网格划分等与污染物种类温度仿真相同，在 0.5 J/cm^2 激光能量作用下，分别对污染物半径为 0.05、0.1、0.2、0.3、0.4、0.5 和 1 μm 进行仿真，结果如图 3 所示。

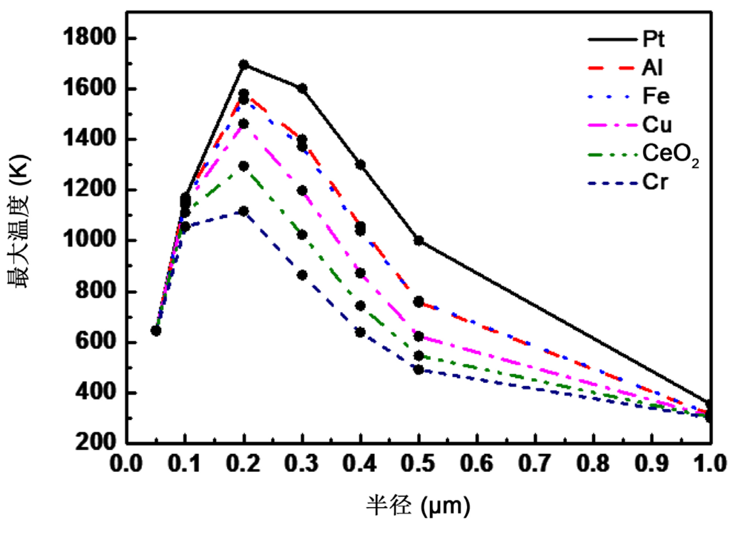


Figure 3. Comparison of the maximum temperature of different contaminants irradiated by 0.5 J/cm^2 laser at different radia
图 3. 不同半径条件下 0.5 J/cm^2 激光能量辐照下不同污染物的最大温度对比

从图中可知，对不同污染物而言，对基体材料影响最大的半径范围仍是亚微米级，0.2 μm 时温度最高，其中，Pt 污染物温度最高，影响最大，其次是 Al、Fe、Cu、CeO_2 和 Cr。

5. 结论

建立了基体表层内部污染物吸收激光能量的数学模型，计算了固体类无机污染物不同类型及尺寸对

温度和应力分布的影响，发现污染物存在的情况下，基体材料容易发生激光损伤，且不同参数的污染物对基体产生的影响不同：污染物的存在会影响基体温度的分布，污染物温升随入射激光能量近似呈现线性关系，对深度 0.2 μm、半径 0.5 μm 的 Fe 污染物而言，诱导基体材料损伤的临界激光能量为 2.1 J/cm^2；不同类型的污染物所产生的影响不同，由于热传导系数等污染物参数的不同导致其峰值温度、升温速率以及达到峰值温度的时间都不相同，其中，Pt、Al、Fe 污染物热量扩散较快，在污染物吸收激光能量后对基体材料的影响较大，而 Cu、CeO_2 和 Cr 的热扩散较慢，在 $t = 50$ ns 时，高温区域还分布在污染物内部，对基体容易产生持续性损伤；污染物尺寸对温升的影响很大，在特定的激光输入和污染物材料条件下，存在一个最有害的污染物临界尺寸值，使材料所受到的损伤最大，本文中污染物的临界尺寸为 0.2 μm。

基金项目

本文来源于国家自然科学基金重点项目“高能激光系统超洁净制造的关键基础科学问题研究”(项目编号：51535003)和黑龙江省自然科学基金“高真空、强辐射下精密零件的洁净制造相关问题研究”(项目编号：E2015007)的资助。

参考文献

[1] 张林, 杜凯. 激光惯性约束聚变靶技术现状及其发展趋势[J]. 强激光与粒子束, 2013, 25(12): 3091-3097.

[2] 刘成安, 师学明. 美国激光惯性约束聚变能源研究综述[J]. 原子核物理评论, 2013, 30(1): 89-93.

[3] Peng, H., Zhang, X.M. and Wei, X. (2008) Status of the SG-III Solid State Laser Project. *Proceedings of SPIE*, **3492**, 32009.

[4] Kalantar, D., Nelson, D. and Bliss, E. (2011) National Ignition Facility System Alignment. *Applied Optics*, **50**, 1136-1157. https://doi.org/10.1364/AO.50.001136

[5] Horvath, J.A. (1996) NIF/LMJ Prototype Amplifier Mechanical Design. Lawrence Livermore National Laboratory, 148-157. https://doi.org/10.1117/12.294298

[6] Schweyen, J.C. (1998) Ghost Reflection Analysis for the Main Laser of the National Ignition Facility. *Proceedings of SPIE*, **3482**, 748-753. https://doi.org/10.1117/12.321973

[7] 李良钰, 王仕, 李银柱. “神光”装置中空间滤波器的鬼点分析[J]. 中国激光, 2001, 28(9): 826-828.

[8] 王方, 朱启华, 张清泉. 高功率激光装置中透镜一阶“鬼”点形成规律分析[J]. , 2005, 29(3): 170-171.

[9] Feit, A. and Rubenchik, A.M. (2003) Influence of Subsurface Cracks on Laser-Induced Surface Damage. *Proceeding of SPIE*, **5273**, 265-273.

[10] Stuart, B.C., Feit, M.D. and Herman, S. (1996) Nanosecond-to-Femtosecond Laser-Induced Breakdown in Dielectrics. *Physical Review B Condensed Matter*, **53**, 1749-1756. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.1749

[11] Hopper, R.W. and Uhlmann, D.R. (1970) Mechanism of Inclusion Damage in Laser Glass. *Journal of Applied Physics*, **41**, 4023-4037. https://doi.org/10.1063/1.1658407

[12] Martin, P., Moroño, A. and Hodgson, E.R. (2004) Laser Induced Damage Enhancement Due to Stainless Steel Deposition on KS-4V and KU1 Quartz Glasses. *Journal of Nuclear Materials*, **329**, 1442-1445. https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2004.04.162

[13] Honig, J., Norton, M.A. and Johnson, M.A. (2005) Experimental Study of 351-nm and 527-nm Laser-Initiated Surface Damage on Fused Silica Surfaces Due to Typical Contaminants. *Proceedings of SPIE*, **5647**, 129-135. https://doi.org/10.1117/12.597314

[14] Génin, F.Y., Feit, M.D. and Kozlowski, M.R. (2000) Rear-Surface Laser Damage on 355-nm Silica Optics Owing to Fresnel Diffraction on Front-Surface Contamination Particles. *Applied Optics*, **39**, 3654-3663. https://doi.org/10.1364/AO.39.003654

[15] Feit, M.D., Rubenchik, A.M. and Faux, D.R. (1996) Modeling of Laser Damage Initiated by Surface Contamination. *Proceedings of SPIE*, **2966**, 417-424. https://doi.org/10.1117/12.274234

[16] Koldunov, M.F., Manenkov, A.A. and Pocotilo, I.L. (1994) Theory of Laser-Induced Damage to Optical Coatings: Inclusion-Initiated Thermal Explosion Mechanism. *Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering*, **2114**. https://doi.org/10.1117/12.180892