

激光等离子体形成过程的数值模拟

肖刚 张建泉* 罗吉庭

(第二炮兵工程学院 西安 710025 *西北核技术研究所 西安 710024)

提要 采用一维单流体双温度辐射流体动力学模型,通过数值模拟方法,研究了XeCl准分子激光辐照金属Al靶时,气化等离子体的形成和演化过程。

关键词 准分子激光,激光等离子体过程,激光-靶相互作用

真空环境下,激光与靶材相互作用在实验和理论方面已得到广泛的研究,但绝大多数局限于红外激光区域。随着高功率紫外激光的出现,以及它与靶材耦合效率更高的特点,近年来受到人们的普遍关注^[1-6]。Rosen^[1,2]曾研究了XeF激光与铝靶和钛合金靶的耦合过程,并在均匀气化等离子体层的假定下,通过解气体动力学方程,得到感兴趣的力学参量。Newstein^[5]进一步推广了Harrach^[7]的理论研究,考虑了等离子体的对流效应,得到了气化等离子体有关参量。

脉冲强激光辐照靶材时,材料响应大体分为三种过程:靶面附近薄层物质温升、熔化和气化;气化物质吸收激光能量形成喷发的等离子体;喷发的等离子体施于靶面一个冲击加载,产生一个向靶内传播的激波。因此,研究脉冲强激光与靶材的相互作用过程,是高能量密度物理和材料冲击动力学领域的重要课题。

本文根据特定的激光器输出水平,研究了 10^9 W/cm^2 中等强度脉冲XeCl准分子激光与金属铝靶在真空环境下相互作用过程。所用物理模型类似于Harrach^[7]和Newstein^[5],但是考虑了气化等离子体空间分布的不均匀性。靶材的受热过程通过热传导方程描述,气化等离子体的形成和演化过程通过电子与离子的温度及密度相关的速率方程描述。数值模拟结果,给出气化等离子体形成和演化过程的物理图像,并得到了与实验测量相一致的冲量耦合系数。

1 理论模型

当一束激光遇到金属靶面时,一部分激光能量被靶面吸收,而其余部分被反射,结果使靶面温度升高,并向靶内传播一个热波。如果入射激光强度足够高或激光脉冲持续时间足够长,继而使靶面附近一个物质薄层发生熔化、气化,以致最后形成气化等离子体层,这个等离子体层的特征,将影响随后的激光靶材的耦合过程。

1.1 靶面反射系数

激光是一种电磁辐射,在靶面需服从电磁理论中的反射定律,反射系数为

$$R = \frac{(n-1)^2 + p^2}{(n+1)^2 + p^2} \quad (1)$$

其中

$$n^2 = \frac{1}{2} \left[\epsilon_r + \sqrt{\epsilon_r^2 + \left(\frac{\sigma}{2\pi\nu\epsilon_0} \right)^2} \right] \quad (2)$$

$$p^2 = \frac{1}{2} \left[-\epsilon_r + \sqrt{\epsilon_r^2 + \left(\frac{\sigma}{2\pi\nu\epsilon_0} \right)^2} \right] \quad (3)$$

电导率通常是温度的函数,即 $\sigma = \sigma(T)$,在临界温度以下,近似有^[8]

$$\sigma = \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{e}{k} \right)^2 \frac{K}{T} \quad (4)$$

以上方程中, ϵ_0 和 ϵ_r 分别为真空和相对介电常数, e 为电子电荷, k 为 Boltzmann 常数, K 为热导率, T_r 为靶面(固态或液态)温度。

1.2 气态速率方程

靶材表面发生气化后,气态物质内部会发生碰撞、激发、电离和复合等一系列的微观相互作用过程。在激光强度和气化等离子体温度不太高的情况下,我们涉及的粒子类型主要有电子、中性原子、一价和二价离子。

1.2.1 质量守恒方程

气化等离子体中,第 i 种粒子数密度的变化速率为:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_j S_{ij} - \frac{\partial}{\partial x}(n_i v_i) \quad (5)$$

其中, S_{ij} 代表生成或猝灭贡献,最后一项为对流贡献。

1.2.2 动量守恒方程

假定电子与离子(含原子)具有相同迁移速度(即单流体近似),则动量守恒方程为

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (6)$$

气化等离子体密度通常在 $10^{-3} \sim 10^{-2} \text{ g/cm}^3$ 范围,则在理想气体假定下,有

$$P = nkT + n_e kT_e \quad (7)$$

1.2.3 能量守恒方程

能量守恒方程被写成电子和离子温度的速率方程形式^[3,7],即

$$\begin{aligned} \text{电子: } \quad \frac{\partial T_e}{\partial t} = & \frac{2K_e I_e}{3kn_e} - \frac{S_1}{n_e} \left[T_e + \frac{2}{3k}(I_1 - E_e) \right] - \frac{S_2}{n_e} \left(T_e + \frac{2}{3k} I_1 \right) - \\ & \frac{S_3}{n_e} \left[T_e + \frac{2}{3k}(I_2 - I_1) \right] - \frac{S_4}{n_e} \left[T_e + \frac{2}{3k}(I_1 - E_e - h\nu_L) \right] - \\ & \frac{S_e}{n_e} \frac{2E_e}{3k} - \frac{T_e - T}{\tau_e} - v \frac{\partial T_e}{\partial x} + \frac{2}{3kn_e} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - \frac{2}{3kn_e} P_e \frac{\partial v}{\partial x} \end{aligned} \quad (8)$$

$$\text{离子: } \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{n_e}{n} \frac{T_e - T}{\tau_e} - v \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{2}{3kn} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{2}{3kn} P \frac{\partial v}{\partial x} \quad (9)$$

对热传导的限流形式取为^[9]

$$\lambda \frac{\partial T_e}{\partial x} = \left\{ \left(\lambda_e \left| \frac{\partial T_e}{\partial x} \right| \right)^{-1} + \left[\frac{3}{2} k T_e n_e \left(\frac{k T_e}{m_e} \right)^{1/2} \right]^{-1} \right\}^{-1} \quad (10)$$

其中, λ_e 和 λ 分别为电子和离子的热导率^[10]

$$\lambda_e = \frac{40(2/\pi)^{3/2} k (k T_e)^{5/2}}{m_e^{1/2} e^4 (Z + 3.44 + 0.26 \ln Z) \ln \Lambda} \quad (11)$$

$$\lambda = \frac{40(2/\pi)^{3/2} k (k T)^{5/2}}{M^{1/2} (Ze)^4 \ln \Lambda} \quad (12)$$

1.3 速率常数

在我们的模型中,主要微观过程是激发态、基态原子及一、二价离子的碰撞电离、激发态原子光电离、基态原子碰撞激发等。其速率常数可表示为

$$S_{ij} = \alpha_{ij}AB - \beta_{ij}CD \quad (13)$$

其中, A, B, C, D 代表反应物或生成物粒子种类, 反应系数可由量子力学氢近似计算。

1.4 激光能量的吸收

对 10^9 W/cm^2 的 XeCl 准分子激光 ($h\nu = 4.03 \text{ eV}$), 吸收机制主要是中性场和离子场中自由电子的逆韧致吸收和激发态原子的光电离吸收, 即

$$\begin{aligned} K_{e-i} &= 3.69 \times 10^8 \frac{n_e}{v_i^2 \sqrt{T_e}} \sum_i Z_i^* n_i \\ K_{e-o} &= 4.91 \times 10^{-18} \frac{n_e}{v_i^2} (n_0 + n_*) \left(\frac{8kT_e}{\pi m_e} \right)^{1/2} \\ K_* &= 7.9 \times 10^{-18} n_* \left(\frac{I_1 - E_*}{h\nu_L} \right)^3 \left(\frac{I_H}{I_H - E_*} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (14)$$

则, 总的吸收系数为

$$K_L = K_{e-i} + K_{e-o} + K_* \quad (15)$$

在气化等离子体层中, 任一空间点 x 处的激光强度为入射部分及靶面反射部分贡献之和, 即

$$I_L = \begin{cases} I_0 \left[\exp\left(-\int_0^x K_L dx'\right) + R \exp\left(-2\int_0^H K_L dx + \int_0^x K_L dx\right) \right] & (t \leq t \leq \tau_p) \\ 0 & (t > \tau_p) \end{cases} \quad (16)$$

I_0 为入射激光强度, R 为靶面反射系数, H 为气化等离子体厚度, τ_p 为激光脉冲持续时间。

1.5 靶材的受热模型

采用热传导模型, 描述靶内温度的时、空变化, 即

$$c_2 \rho_2 \frac{\partial T_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) \quad (17)$$

$$-\left(K_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) \Big|_{x=D_2(t)} = (1 - R_2) I_0 \exp\left(-\int_0^H K_L dx\right) - 0.82 \rho_2 \left(L_r + \frac{V^2}{2} \right) \frac{dD_2}{dt} \quad (18)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0 \quad (19)$$

$$T_2 \Big|_{x=D_2(t)} = T_s \quad (20)$$

$$D_2(t) = \int_{t_0}^t \frac{dD_2}{dt} dt \quad (21)$$

$$\rho_2 \frac{dD_2}{dt} = P(T_s) \left(\frac{M}{2\pi k T_s} \right)^{1/2} \quad (22)$$

$$P(T_s) = P_b \left(\frac{T_b}{T_s} \right)^{1/2} \exp\left[\left(\frac{L_r}{RT_b} + \frac{1}{2} \right) \left(1 - \frac{T_b}{T_s} \right) \right] \quad (23)$$

以上方程中, c, ρ, K 分别为靶材比热、密度和热传导率(对固态和液态平均), T 为温度, $D(t)$ 为热波阵面不同时刻的空间位置, L_m 和 L_r 分别为熔化和气化潜热, $P(T_s)$ 为与靶面温度 T_s 相对应的饱和蒸气压, 系数 0.82 计及反向凝聚的影响^[11]。

在气化发生前, 令激光吸收系数 K_L 和气化阵面传播距离 $D(t)$ 为 0 的热传导方程描述。

1.6 约束条件

靶材受热过程的约束条件在前面已给出。当气化发生后,凝聚态界面处电子和离子数密度由 Saha 方程和 Boltzmann 方程决定。气化等离子体厚度 H 由气化质量守恒方程决定:

$$\int_{D_2(t)}^{D_1(t)} (n_e m_e + n_i M) dx = \int_{t_1}^{t_2} \rho_2 \frac{dD_2(t)}{dt} dt \quad (24)$$

2 计算结果

针对特定的激光器输出水平,计算了强度为 $9.5 \times 10^8 \text{ W/cm}^2$ 、脉冲时间形状为高斯型 (FWHM 为 40 ns) 的 XeCl 准分子激光 ($\lambda = 0.308 \mu\text{m}$) 辐照金属铝靶时受热过程和气化等离子体生成与演化过程,靶材参数是: $\rho_2 = 2.64 \text{ g/cm}^3$, $C_2 = 1.28 \text{ J/g} \cdot \text{K}$, $K_2 = 1.19 \text{ J/s} \cdot \text{cm} \cdot \text{K}$, $E_a = 3.1 \text{ eV}$, $I_1 = 5.99 \text{ eV}$, $I_2 = 18.83 \text{ eV}$, $g_0 = 6, g_+ = 1, g_{+2} = 2, g = 2, T_m = 933 \text{ K}, T_b = 2767 \text{ K}, L_m = 401 \text{ J/g}, L_r = 10770 \text{ J/g}$ 。

图 1 给出入射激光强度随辐照时间变化关系,可以看出,约 55 ns 之后,激光几乎完全被气化等离子体屏蔽而不能到达靶面。

图 2 给出不同时刻靶内的温度分布,可以看出,靶面最高温度可达 6000K,熔化深度约为 2

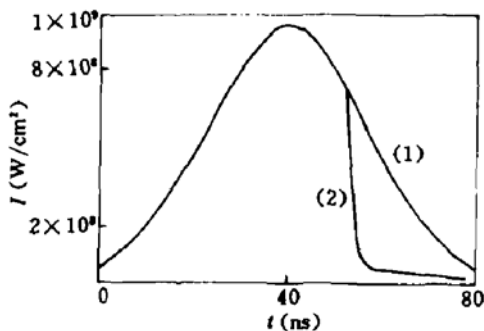


图 1 靶面激光强度随时间的变化
(1) 透明蒸气模型; (2) 等离子体模型

Fig. 1 The laser intensity versus time on the target surface

(1) Transparent vapour model; (2) Plasma corona model

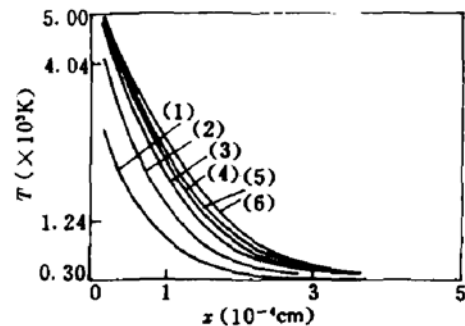


图 2 靶内温度的时空变化关系

Fig. 2 The temperature versus time-space in the target

(1) 29 ns; (2) 37 ns; (3) 41 ns; (4) 52 ns; (5) 53 ns; (6) 56 ns

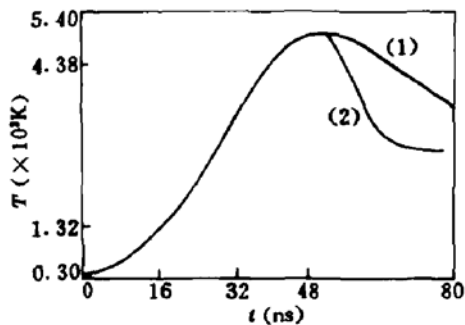


图 3 靶面温度随时间的变化关系
(1) 透明蒸气情况; (2) 等离子体模型

Fig. 3 The temperature versus time on the target surface

(1) Transparent vapour model; (2) Plasma corona model

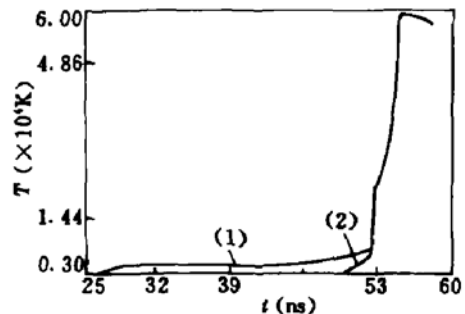


图 4 靶面附近电子和离子温度随时间的变化
(1) 电子; (2) 离子

Fig. 4 The temperature of electron and ion versus time near the target surface

(1) Electrons; (2) Ions

μm 。图3给出靶面温度随辐照时间的变化,并与透明蒸气模型进行了比较,从图可以看出,气化等离子体的存在使得靶面温度迅速下降,并在约55 ns时趋于稳定。

图4和图5分别给出靶面附近气化等离子体中电子与离子温度以及各种粒子数密度随时间的变化过程,从图中看出,在 $t = 27 \text{ ns}$ 时靶面开始气化。在 $t = 27.6 \sim 29 \text{ ns}$ 期间,由于电子或离子的数密度很低,它们之间碰撞能量交换速率极低,因此重粒子温度无明显变化,然而电子却被激光场迅速加热,致使电子温度在1 ns内很快上升到5000 K。在 $t = 29 \sim 53 \text{ ns}$ 期间,由于靶面气化效应的增强,中性原子数密度逐渐增加,伴随着碰撞、激发和电离过程的加剧,电子与重粒子交换能量的速率不断加快,致使经过一个漫长的稳定积累过程后,电子温度才升高到约11000 K,电子数密度升到 $10^{20}/\text{cm}^3$, $t = 53 \sim 55 \text{ ns}$ 为雪崩电离发生期间,中性原子明显电离,使电子数密度迅速增加到约 $2 \times 10^{21}/\text{cm}^3$ (比初始密度大几个量级)。同时强烈地吸收激光能量,致使电子温度上升到约58000 K。同时,粒子数密度的增加,加剧了电子与重粒子间的能量交换过程,使得重粒子与电子间很快达到温度平衡。在55 ns之后,随着入射激光的明显减弱,粒子温度开始逐渐下降。

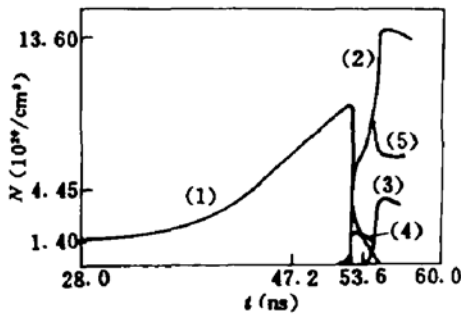


图5 靶面粒子数密度随时间的变化

(1) 基态原子;(2) 电子;(3) 一价离子;
(4) 激发态原子;(5) 二价离子

Fig. 5 The particle density versus time

(1) Normal atoms; (2) Electrons; (3) Singly ions;
(4) Excited atoms; (5) Secondly ions

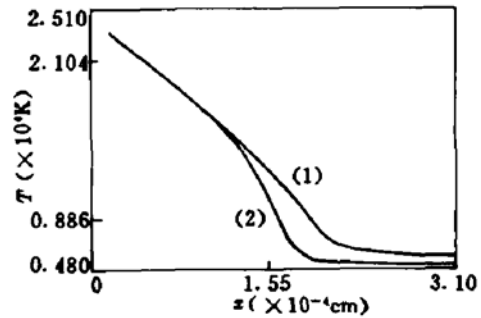


图6 电子、离子温度的空间分布 ($t = 53 \text{ ns}$)

(1) 电子;(2) 离子

Fig. 6 The temperature of electrons and ions versus space

(1) Electrons; (2) Ions

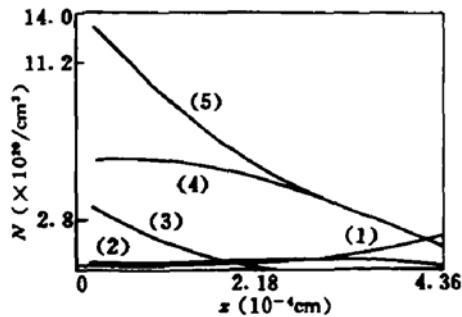


图7 电子、离子数密度的空间分布 ($t = 54 \text{ ns}$)

(1) 激发态原子;(2) 基态原子;(3) 二价离子;
(4) 一价离子;(5) 电子

Fig. 7 The particle density versus space

(1) Excited atoms; (2) Normal atoms; (3) Secondly ions;
(4) Singly ions; (5) Electrons

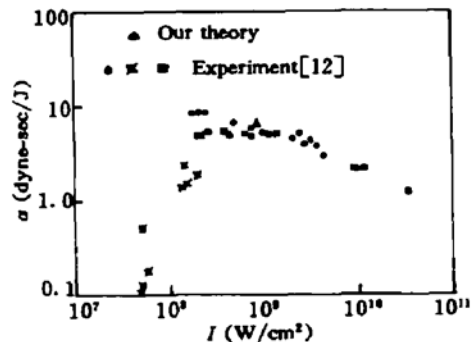


图8 冲量耦合系数比较

Fig. 8 Comparison of measured impulse coupling coefficient data with our theory

图 6 和图 7 分别给出气化等离子体层中电子和离子温度的空间分布以及各种粒子数密度的空间分布,可以看出,在距靶面约 $1 \mu\text{m}$ 范围内,由于粒子数密度大及其交换能量速率快,电子与离子达到温度平衡;在大于 $1 \mu\text{m}$ 时,两者的温度明显分离,同时,可以看出,电子数密度与重粒子数密度随空间呈指数分布。这些结论,与激光等离子体相互作用的有关理论是一致的。

在激光与靶材相互作用研究中,冲量耦合系数是关心的宏观量之一,本文通过气化层密度、飞散速度分布得到的冲量耦合系数为 $6.37(\text{dyne}\cdot\text{s}/\text{J})$ 。由图 8 看出,我们的结果与文献 [12] 的实验测量相一致。

参 考 文 献

- 1 D. I. Rosen, J. Mitteldorf, G. Kothandaraman *et al.*. Coupling of pulsed $0.35 \mu\text{m}$ laser radiation to aluminum alloys. *J. Appl. Phys.*, 1982, **53**: 3190
- 2 D. I. Rosen, D. E. Hastings, G. M. Weyl. Coupling of pulsed $0.35 \mu\text{m}$ laser radiation to titanium alloys. *J. Appl. Phys.*, 1982, **53**: 5882
- 3 C. Duzy, J. A. Woodroffe, J. C. Hsia *et al.*. Interaction of a pulsed XeF laser with an aluminum surface. *Appl. Phys. Lett.*, 1980, **37**: 542
- 4 J. A. Woodroffe, J. Hsia, A. Ballantyne. Thermal and impulse coupling to an aluminum surface by a pulsed KrF laser. *Appl. Phys. Lett.*, 1980, **36**: 14
- 5 M. Newstein, N. Solimene. Laser metal interaction in vacuum. *IEEE J. Quant. Electr.*, 1981, **QE-17**: 2085
- 6 P. K. Wu, P. E. Nebolsine. Laser-induced impulse to a phenolic surface. *AIAA. J.*, 1978, **16**: 1101
- 7 R. J. Harrach. Theory for the laser-induced breakdown over a vaporizing target surface. UCRL-52389, 1977
- 8 H. E. Hall. Solid State Physics, New York: John Wiley and Sons Ltd., 1974, 105
- 9 J. J. Duderstadt, G. A. Moses. Inertial confinement fusion. New York, 1982, 117
- 10 J. J. Duderstadt, G. A. Moses. Inertial confinement fusion. New York, 1982, 200
- 11 S. Anisimov. Vaporization of a metal absorbing laser radiation. *Sov. Phys.-JETP*, 1968, **27**: 182
- 12 西南工程物理研究院译. 定向能武器的科学与技术. 成都: 西南工程物理研究院科技书刊编辑部, 1987, 239

Numerical Calculation of Laser-generated Plasma Processes

Xiao Gang Zhang Jianquan* Luo Jiting

(Second Artillery Engineering School, Xi'an 710025 *Northwest Institute of Nuclear Technology)

Abstract Based on a one-fluid, two-temperature radiation hydrokinetics model, we study the interaction processes of XeCl laser radiation with a one-dimensional aluminium target. The heating processes of the target are described by nonlinear thermal conductive equations. The forming and evolution processes about the densities and the temperatures of laser-generated plasma are governed by the rate equations. According to this model, we give out the numerical code. Our results present the physical pictures of different stages about the plasma evolution. The impulse coupling coefficient agrees fairly well with the experimental results in literature.

Key words excimer laser, plasma processes induced by laser, laser-material interaction