

KDP 晶体中杂质缺陷吸收引起的温度场模型

张英聪 沈华 朱日宏

南京理工大学电子工程与光电技术学院, 江苏 南京 210094

摘要 在点源热脉冲传热模型的理论基础上,采用格林函数法建立了由于单个杂质缺陷吸收引起的温度场模型,得到了杂质附近温度场的解析表达式,分析了激光脉冲参数对温度场的影响情况,并在单个杂质吸收的理论基础上推导得到 KDP 晶体某一区域内含多个杂质吸收的模型。结果表明杂质吸收引起的温度变化与激光脉冲参数密切相关。当杂质间距离小于激光持续时间内产生的热扩散距离时,就会引起杂质间温度场的叠加,并且当杂质密度大到一定程度时,会使杂质团区域的温升加剧,导致晶体发生激光诱导损伤的可能性加大。

关键词 材料;KDP 晶体;杂质;吸收;损伤

中图分类号 O437 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/LOP51.021602

Model of Temperature Field Caused by the Impurity Defect Absorption in KDP Crystal

Zhang Yingcong Shen Hua Zhu Rihong

*School of Electronic and Optical Engineering, Nanjing University of Science and Technology,
Nanjing, Jiangsu 210094, China*

Abstract The analytical expression of temperature field around inclusion is obtained by establishing the model of temperature field due to the absorption of the single impurity defect in the KDP crystal using Green's function method based on the theoretical solution of the point source heat transfer model. The influence of pulsed laser parameters on the temperature field is analyzed and the model of multi-inclusions absorption in the certain area of KDP crystal is obtained based on the single impurity defect absorption theory. The results show that the temperature variation caused by the inclusion absorption is closely related to the parameters of the pulsed laser. When the distance among the inclusions is less than the thermal diffusivity length in the duration of laser pulses, it will lead to the cumulative effect of temperature field. If the density of the inclusions is large enough, the temperature around the inclusion group will rise rapidly, which will enlarge the possibility of laser induced damage for crystals.

Key words materials; KDP crystal; impurity; absorption; damage

OCIS Codes 160.4330; 160.2220; 010.1030; 140.3330

1 引言

大口径优质 KH_2PO_4 (KDP)晶体是目前唯一可用于惯性约束核聚变(ICF)^[1]高功率激光器中的电光开关和激光倍频的非线性光学材料。KDP 晶体在生产过程中由于材料纯度、生产工艺等原因,不可避免地产生杂质等缺陷,从而严重影响晶体的光学质量。当光通过 KDP 晶体时,由于杂质缺陷区域对激光的吸收远高于 KDP 基体本征吸收,在杂质缺陷强烈吸收激光能量后,缺陷区域附近温度升高,当温度达到某一临界值时,就会导致晶体发生激光损伤。因此,为了控制晶体损伤的形成,有必要了解 KDP 晶体的损伤机制,以改进晶体在生长环节的结晶工艺。目前人们普遍认为晶体内部由于缺陷吸收导致局部温度达到 10000 K^[2]时

收稿日期: 2013-10-28; 收到修回稿日期: 2013-10-30; 网络出版日期: 2013-01-14

基金项目: 江苏省普通高校研究生科研创新计划(CXLX13_176)、江苏省自然科学基金(BK2012802)

作者简介: 张英聪(1987—),男,博士研究生,主要从事精密光学测试、光声光热检测方面的研究。

E-mail: zhangleo1987@gmail.com

导师简介: 朱日宏(1964—),男,博士,教授,主要从事精密光学测试方面的研究。E-mail: zhurihong@njjust.edu.cn
(通信联系人)

会产生损伤,其随后产生的冲击波能传播几个微米的距离,并产生激光诱导缺陷,该现象已经在实验上用光学手段观察到^[3-4],但在物理机制及理论模型上很少见有详细、直观的分析。为了表征这种杂质缺陷的损伤,有必要了解由于杂质缺陷吸收导致KDP晶体发生损伤的物理机制。陈明君等^[5]采用有限元分析的方法得到了KDP晶体杂质附近的温度场。Sparks等^[6]用一种简化的数学解析式分析了单个杂质的温度场。然而有限元分析很难反映出材料特性等对温度场的影响,而简化解析表达式在一定程度上也降低了理论的准确性,同时上述方法都将KDP晶体当成各向同性材料进行近似处理。

本文旨在建立各向异性KDP晶体含杂质时的更为准确和直观的温度场模型。将杂质缺陷看作点热源,利用格林函数法针对强脉冲激光照射下KDP晶体中含杂质缺陷吸收模型进行了解析研究,得到了杂质缺陷附近的瞬态温度场。分析了由于单个孤立杂质吸收引起的温度变化,讨论了不同脉冲参数对温度场的影响,并在单个杂质模型的基础上,推导出KDP晶体内含多个杂质吸收体的理论模型,讨论了杂质间距及杂质密度对晶体激光损伤的影响。

2 单个点热源模型

本模型仅考虑杂质的线性吸收,即基体在激光辐照过程中不随温度而变化。假设KDP晶体的尺寸为 $a \times b \times c$,沿 x, y, z 三个方向的导热系数分别为 k_1, k_2 和 k_3 。脉冲激光从其一端的中心入射,光强度分布为 I ,时间分布函数为 $f(t)$,假设单个杂质缺陷位于晶体内部 (x_1, y_1, z_1) 处,晶体表面处于绝热条件,初始与环境温度均假定为零,如图1所示。

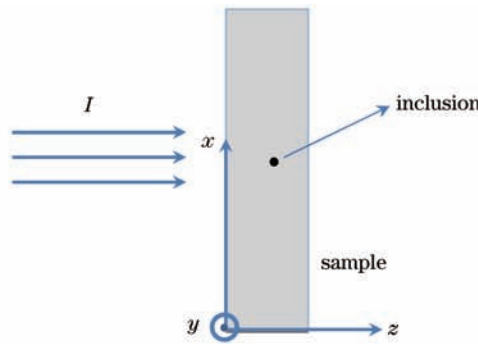


图1 热传导方程坐标系示意图

Fig.1 Diagram of the heat conduction equation coordinate system

由于杂质很小,可以认为杂质处在半无限大物体,在笛卡儿坐标系下,正交各向异性晶体的三维瞬态热传导微分方程可表示为

$$k_1 \frac{\partial^2 \theta(x, y, z, t)}{\partial x^2} + k_2 \frac{\partial^2 \theta(x, y, z, t)}{\partial y^2} + k_3 \frac{\partial^2 \theta(x, y, z, t)}{\partial z^2} + q(x, y, z, t) = \rho c_p \frac{\partial \theta(x, y, z, t)}{\partial t} \quad 0 \leq x < \infty, 0 \leq y < \infty, 0 \leq z < \infty, \quad (1)$$

式中 ρ, c_p 分别为材料的密度和比热容, q 为晶体吸收激光能量产生的内热源。由于KDP晶体对激光的本征吸收很小,缺陷对激光的吸收比晶体的本征吸收高出几个数量级,因此可以忽略晶体的体吸收,同时考虑到杂质缺陷尺寸远小于基体,将该杂质缺陷看作点热源。假设热源强度为 g ,则晶体内热源可表示为

$$q(x, y, z, t) = g \delta(x - x_1) \delta(y - y_1) \delta(z - z_1) f(t), \quad (2)$$

式中 δ 为狄拉克函数。

边界条件为

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = 0, \quad x = 0, \quad t > 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = 0, \quad y = 0, \quad t > 0; \quad (4)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad z = 0, \quad t > 0; \quad (5)$$

初始条件为 $\theta = 0, t = 0$ 。

令 $\alpha = \frac{k_1}{\rho c_p}$, 则该问题的格林函数为

$$G(x, y, z, t | x', y', z', \tau) = \frac{\alpha}{k_1} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\exp[-\alpha(\beta^2 + \gamma^2 k_2/k_1 + \eta^2 k_3/k_1)(t - \tau)]}{N(\beta)N(\gamma)N(\eta)} X(\beta, x)Y(\gamma, y)Z(\eta, z)X(\beta, x')Y(\gamma, y')Z(\eta, z')d\beta d\gamma d\eta, \quad (6)$$

其中本征函数和本征值可根据边界条件查表^[7]得到:

$$\begin{cases} X(\beta, x) = \cos \beta x, & N(\beta) = \frac{\pi}{2} \\ X(\gamma, y) = \cos \gamma y, & N(\gamma) = \frac{\pi}{2} \\ X(\eta, z) = \cos \eta z, & N(\eta) = \frac{\pi}{2} \end{cases}. \quad (7)$$

将(7)式代入(6)式, 得格林函数为

$$G(x, y, z, t | x', y', z', \tau) = \frac{\alpha}{k_1 \sqrt{4\pi\alpha(t - \tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{4\alpha(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(x + x')^2}{4\alpha(t - \tau)}\right] \right\} \times \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi k_2/k_1 \alpha(t - \tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(y - x')^2}{4k_2/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(y + x')^2}{4k_2/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] \right\} \times \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi k_3/k_1 \alpha(t - \tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(z - x')^2}{4k_3/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(z + x')^2}{4k_3/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] \right\}, \quad (8)$$

则(1)式的解为

$$\theta(x, y, z, t) = \int_0^t d\tau \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty [G(x, y, z, t | x', y', z', \tau) g \delta(x' - x_1) \delta(y' - y_1) \delta(z' - z_1) f(t)] dx' dy' dz' = \\ \int_0^t \frac{\alpha g f(t)}{k_1 \sqrt{4\pi\alpha(t - \tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x - x_1)^2}{4\alpha(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(x + x_1)^2}{4\alpha(t - \tau)}\right] \right\} \frac{1}{\sqrt{4\pi k_2/k_1 \alpha(t - \tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(y - y_1)^2}{4k_2/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(y + y_1)^2}{4k_2/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] \right\} \times \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi k_3/k_1 \alpha(t - \tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(z - z_1)^2}{4k_3/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(z + z_1)^2}{4k_3/k_1 \alpha(t - \tau)}\right] \right\} d\tau. \quad (9)$$

(9)式即为采用格林函数法得出的含单个点热源时 KDP 晶体内部的三维瞬态温度场解析表达式。

3 仿真计算

3.1 单个点热源模型的温度场

假设单个杂质位于晶体内部中心 $(a/2, b/2, c/2)$ 处, KDP 晶体尺寸为 $10 \text{ mm} \times 10 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$, 其物理参数如表 1 所示。由于无法得知晶体内部的杂质缺陷吸收特性, 在这里假设当杂质很小时, 杂质单位体积吸收能量与入射激光能量及杂质半径成正比, 即 $g = \xi a_1 I$, a_1 为杂质半径, ξ 为比例常数。

表 1 KDP 晶体的物理参数

Table 1 Physical parameters of KDP crystal

Density $\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	Specific heat capacity $c_p / (\text{J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	Thermal conduction coefficient $k / (\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$
2.332	0.857	$k_x = 1.34, k_y = 1.34, k_z = 1.21$

假设入射激光为矩形脉冲, 则在一个周期 T 内有

$$f(t) = \begin{cases} 1, & 0 \leq t \leq \tau \\ 0, & \tau < t \leq T \end{cases}, \quad (10)$$

式中 τ 为脉宽。

假设脉冲激光功率密度为 $I = 2 \times 10^{10} \text{ W/cm}^2$, 脉宽 $\tau = 3 \text{ ns}$, 杂质半径 $a_1 = 10 \text{ nm}$, 比例常数 $\xi = 10^5$ 。现讨论在一个脉宽时间内, KDP 晶体杂质缺陷附近的温度场。图 2 即为在 $t = 1 \text{ ns}$ 及 $t = 3 \text{ ns}$ 时, 单个杂质在 x 方向上的瞬态温度分布图。从图中可以看出, 在 $t = 1 \text{ ns}$ 时, 晶体的温升变化主要集中在离杂质中心 90 nm 的范围内, 最高温度达 2500 K , 且在远离杂质中心方向上的温度迅速下降, 晶体温度变化只集中在杂质附近

一个很小的区域内。随着照射时间的增加,到 $t=3\text{ ns}$ 时,由于热传导的原因,温度变化范围扩散到离杂质中心 150 nm 左右的范围内,最高温度达到了 4500 K 。因此,杂质附近温度将随激光辐照时间的增加而不断增大和扩散。

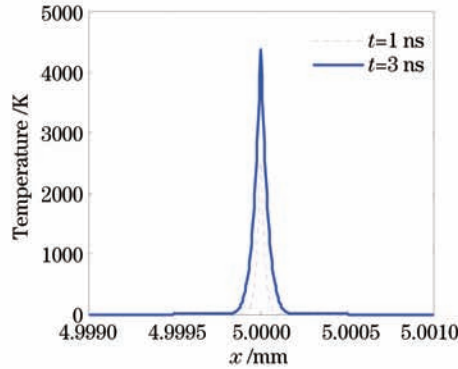


图2 单个杂质在 x 方向上的温度分布

Fig.2 Temperature distribution of single inclusion along x -axis

3.2 脉冲参数对温度场的影响

为了了解杂质的损伤机理,有必要讨论温度场与激光照射时间的关系。这里只讨论线性吸收的情况。图3为脉冲激光能量密度为 $I=2 \times 10^{10}\text{ W/cm}^2$ 时,在一个脉冲宽度范围内,KDP 晶体杂质处温度随时间的变化情况。从图中可以看出,随着时间的增加,杂质中心的最高温度不断增加。当激光脉宽大到一定时间时,就会使温度达到使晶体产生激光损伤的临界温度,从而使晶体产生损伤。

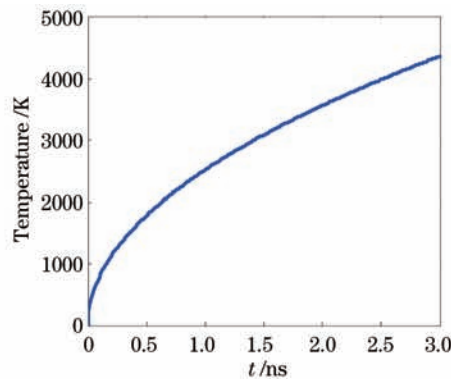


图3 温度场与激光脉冲时间的关系

Fig.3 Relationship between the temperature field and the laser duration

3.3 随机分布的杂质温度场

前面只讨论了有单个杂质位于 KDP 晶体内的温度场情况,但实际可能存在多个这样的杂质,并且这种情况是可能导致晶体损伤的关键因素^[8-9]。因此有必要了解晶体内部某个小区域内含多个杂质的温度场模型。假设 N 为杂质的个数,由于只改变了晶体的内热源,因此只需将(2)式改写为

$$q(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^N g_i \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i) \cdot f(t) \quad (11)$$

为方便讨论,只考虑在 x 轴一维方向上的温度场情况。按上述格林函数的求解过程得

$$\theta(x, t) = \sum_{i=1}^N \int_0^t \frac{\alpha g_i f(\tau)}{k_1 \sqrt{4\pi\alpha(t-\tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-x_i)^2}{4\alpha(t-\tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(x+x_i)^2}{4\alpha(t-\tau)}\right] \right\} d\tau \quad (12)$$

假设 $N=5$,并都位于上述 KDP 晶体中心附近,脉冲激光参数同 3.1 节。考虑到晶体内部存在不同种类的杂质,由于吸收特性不同,设定了不同的 g_i 。

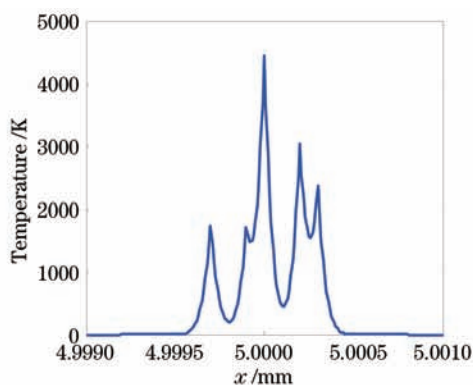


图4 多个杂质共同作用形成的空间温度场分布

Fig.4 Spatial temperature distribution caused by multiple inclusions

图4即为在强脉冲激光照射下,相邻多个杂质的共同作用下产生的空间瞬态温度分布图。从中可以看出在 $2\ \mu\text{m}$ 的范围内,由于相邻杂质吸收能量产生的温度相互影响,导致在微米量级的区域内产生了一个局部高温。在脉冲持续的时间内,由于热扩散将使相邻杂质的温度场进行叠加,从而使杂质的温升更加剧烈。同时从(12)式可以看出, N 的大小也会影响最后的温度变化,这与文献[10]的结论相吻合,即当 N 增加时(杂质密度变大时),杂质区域的温升也会随之增加,当杂质密度大到一定程度时,其产生的温度就会超过KDP晶体的临界温度 T_c ,使晶体产生激光损伤。因此,多杂质情况下KDP晶体内部发生损伤的可能性大大增加,有理由相信多杂质模型是KDP晶体产生激光损伤的一种重要机理模型。

4 结 论

对强脉冲激光辐照含杂质缺陷的KDP晶体进行解析法分析,建立了单个杂质缺陷吸收引起的温度场模型,模拟了杂质附近的瞬态温度场,分析了激光脉冲参数对温度场的影响情况,并在单个杂质的理论上推导得到KDP晶体某一小区内含多个杂质吸收的模型,通过数值仿真,得到该区域的温度场分布情况。结果表明随着激光脉冲时间的增加,晶体内部的温度会显著升高。在KDP晶体内部含多个杂质的模型下,在脉冲激光的持续时间内,热扩散会使相邻杂质之间温度场叠加,并且如果杂质密度达到一定程度,就有可能导致KDP晶体内某一局部区域产生一个能导致晶体产生损伤的温度。因此,当单个杂质缺陷吸收无法达到导致KDP晶体损伤的临界温度时,多个杂质共同作用可能会使KDP晶体发生损伤。上述研究为改进KDP晶体研制工艺和预测其在高功率激光系统中发生损伤的可能性提供了依据。

参 考 文 献

- 1 Lin Zunqi. Progress of laser fusion [J]. Chinese J Lasers, 2010, 37(9): 2202-2207.
林尊琪. 激光核聚变的发展[J]. 中国激光, 2010, 37(9): 2202-2207.
- 2 C W Carr, H B Radousky, A M Rubenchik, *et al.*. Localized dynamics during laser-induced damage in optical materials [J]. Phys Rev Lett, 2004, 92(8): 087401.
- 3 J J Adams, J R Bruere, M Bolourchi, *et al.*. Wavelength and pulselength dependence of laser conditioning and bulk damage in doubler-cut KH_2PO_4 [C]. SPIE, 2005, 5991: 59911R.
- 4 C W Carr, M D Feit, M A Johnson, *et al.*. Complex morphology of laser-induced bulk damage in $\text{K}_2\text{H}_{(2-x)}\text{D}_x\text{PO}_4$ crystals [J]. Appl Phys Lett, 2006, 89(13): 131901.
- 5 Chen Mingjun, Pang Qilong, Liu Xinyan. Finite element analysis on influence of micro-nano machined surface impurity on optical performance of crystal [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2008, 20(7): 1182-1186.
陈明君, 庞启龙, 刘新艳. KDP晶体微纳加工表层杂质对其激光损伤阈值影响的有限元分析[J]. 强激光与粒子束, 2008, 20(7): 1182-1186.
- 6 M Sparks, C J Duthler. Theory of infrared absorption and material failure in crystals containing inclusions [J]. J Appl Phys, 1973, 44(7): 3038-3045.
- 7 Hu Hanping. Heat Conduction Theory [M]. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2010.
胡汉平. 热传导理论[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2010.