

激光对光学薄膜加热过程的数值分析

赵 强 范正修 王之江

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

摘 要 采用“交替隐型算法”对光学薄膜中的加热过程进行了数值分析, 求解得到了薄膜中的二维温度场, 并给出了一些计算实例。

关键词 激光, 光学薄膜, 热过程, 数值计算。

1 引 言

从光与物质相互作用的观点来看, 包括“透明”介质在内的任何物质均存在对于入射光能的吸收。对金属材料而言, 其中的自由电子被入射光波电场加速而获得高能量, 并进而通过电子-声子作用将能量转移至晶格, 形成格波振荡, 此即焦耳热; 对于介质材料, 入射光波要消耗部分能量来激发束缚电子产生受迫振荡, 这些能量一部分又以次波的形式与入射波叠加成折射光波而射出介质。由于与邻近的原子、分子的相互作用, 束缚电子受迫振荡的能量一部分转变为分子热运动的能量, 从而产生加热现象。

光学薄膜材料的吸收可引入复折射率 $N = (n - ik)$ 进行描述, 其中消光系数 k 表征了材料的吸收大小。理论上任何物质的 k 值不为 0。

作为激光与光学薄膜相互作用中的一个必然现象, 人们对热过程进行了广泛而深入的研究, 并进而对其引致的力学效应进行了分析, 从而使其与激光损伤建立了直接或间接的联系^[1-4]。然而各种求解均限于一维温度场, 其附加的各种假设条件使最终求得的解与实际情况偏离甚大。本文针对光学薄膜激光损伤的情况, 建立了含热源的二维瞬态热传导的热学模型, 并通过“交替隐型算法”求得了二维温度场的数值解。

2 热学模型

图 1 给出了激光束辐照下的多层膜系的示意图。

令 $t = 0$ 时刻高斯光束正入射于膜面, 其强度分布为:

$$I(r, t) = [P_0(t)/(\pi r_0^2)] \exp[-(r/r_0)^2] \quad (1)$$

式中, r_0 为入射光束的半径, $P_0(t)$ 为激光的瞬时输出功率。以 $T(r, z, t)$ 表征 t 时刻 r 、 z 位置处膜层相对于环境的温升, 设 $t = 0$ 时刻温升为 0。

由于考虑吸收的存在, 各个膜层即成为“热源”。激光束的高斯分布以及光斑直径在各种

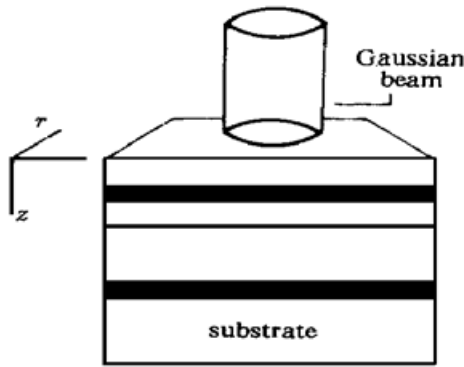


Fig. 1 Schematic diagram of the multilayer coating irradiated by laser beam

实际情况中的不同,使得研究膜层径向的温度分布与研究膜层纵深方向 z 的温度分布同样地有意义。为保证对于热交换方程的顺利求解,在这些方向加进两个“热沉”是必需的,即假定在径向和纵向的“无穷远”处温升永远为 0。在实际的计算中,这两个“无穷远”皆取为有限值,对于短脉冲激光辐射,这样的处理是合适的;对于从膜层表面通过热对流散失的能量,利用牛顿冷却定律[(3)式]进行描述;通过表面热辐射所散失的能量与热传导和热对流相比较而言是很小的,此处不予考虑。从而有以下的热交换方程^[5]:

$$C_n(\partial/\partial t)T(r, z, t) - K_n \nabla^2 T(r, z, t) = g(r, z, t); \quad (2)$$

$$(\partial/\partial z)T(r, z = 0, t) = \gamma T(r, z = 0, t); \quad (3)$$

$$T(r, z = \infty, t) = T(r = \infty, z, t) = 0; \quad (4)$$

$$T(r, z, t = 0) = 0 \quad (5)$$

在(2)式~(5)式中, C_n 为第 n 层膜比热, K_n 为第 n 层膜的热导率, $\nabla^2 = [(\partial^2/\partial r^2) + 1/r(\partial/\partial r) + (\partial^2/\partial z^2)]$ 为圆柱坐标系下的拉普拉斯算子, γ 为表面热交换系数, $g(r, z, t)$ 表示膜层中任一点处单位时间和单位体积内激光沉积的能量:

$$g(r, z, t) = d[I(r, t)Y(z)]/dz \quad (6)$$

式中 $Y(z)$ 为单位时间内流经 z 处平面的单位面积内的光波能量[$Y(z)$ 为归一化量]:

$$Y(z) = \text{Re} [(1/2)E(z)H^*(z)] \quad (7)$$

式中电磁场 E 、 H 可由麦克斯韦方程组求得,求解中令入射光强为单位光强,即 $I_0 = 1$ 。

3 数值计算

(2)~(5)式是不存在解析解的,数值计算是唯一的途径。

一般情况下,数值解法要求将连续变化的时空领域转变为一个无限细分的微时空领域,在这个微域内函数值保持一致。定义 T_{ijk} 为点

$$(r, z, t) = (i\Delta r, j\Delta z, k\Delta t)$$

处的温升,其中

$$0 \leq i \leq i_{\max} = r_{\max}/\Delta r, \quad 0 \leq j \leq j_{\max} = z_{\max}/\Delta z, \quad k \geq 0$$

先考虑一维热交换方程:

$$[C(\partial/\partial t) - K(\partial^2/\partial x^2)]T(x, t) = g(x, t); \quad 0 \leq x \leq L; t \geq 0 \quad (8)$$

其边界条件为

$$(\partial/\partial x)T(x = 0, t) = \gamma T(x = 0, t); \quad (9)$$

$$T(x = L, t) = 0; \quad (10)$$

$$T(x, t = 0) = 0; \quad (11)$$

对于(8)~(11)式,可有显型数值算法及隐型数值算法^[6]。

在显型技术中,(8)式可写为

$$C[(T_j^{k+1} - T_j^k)/\Delta t] - K[(T_{j+1}^k - 2T_j^k + T_{j-1}^k)/(\Delta x)^2] =$$

$$[1/(\Delta t \Delta x)] [\int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} dt \int_{(j-1/2)\Delta x}^{(j+1/2)\Delta x} g(x, t) dx]; \quad 1 \leq j \leq j_{\max} - 1; k \geq 0 \quad (8a)$$

也即

$$T_j^{k+1} = T_j^k + [D\Delta t/(\Delta x)^2][T_{j+1}^k - 2T_j^k + T_{j-1}^k] + [1/(C\Delta x)] [\int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} dt \int_{(j-1/2)\Delta x}^{(j+1/2)\Delta x} g(x, t) dx]$$

$$1 \leq j \leq j_{\max} - 1; k \geq 0 \quad (8b)$$

其中 $D = K/C$ 为扩散率。 $(k + 1)$ 时刻的温度值可直接从 k 时刻的温度值求得。然而这种解法却存在解的收敛性问题，即 $(K \Delta t/2C\Delta x)$ 必须小于 $1/2$ 方能保证解的稳定性。这就要求 Δt 须足够小，但这显然将导致计算时间过长，舍入误差增大。

在隐型技术中，(8) 式写为

$$C[(T_j^{k+1} - T_j^k)/\Delta t] - K[(T_{j+1}^{k+1} - 2T_j^{k+1} + T_{j-1}^{k+1})/(\Delta x)^2] = [1/(\Delta t \Delta x)] [\int_{k\Delta t}^{(k+1)\Delta t} dt \int_{(j-1/2)\Delta x}^{(j+1/2)\Delta x} g(x, t) dx]; \quad 1 \leq j \leq j_{\max} - 1; k \geq 0 \quad (8c)$$

推导可得

$$T_j^{k+1} = A_1^{(j)} T_{j+1}^{k+1} + A_2^{(j)}; \quad 0 \leq j \leq j_{\max} - 1 \quad (8d)$$

其中系数 $A_1^{(j)}$ 与 $A_2^{(j)}$ 的具体推导见文献[4]。

隐型技术使 T_{k+1} 摆脱了对 T_k 的依赖，也彻底消除了因解的收敛性条件而对 Δt 及 Δx 的限制。当然，为了使分立近似更接近于连续情况， Δt 与 Δx 应尽可能小一点。

由于是二维偏微分方程，上述的隐型技术不能直接应用于(2)式~(5)式。但通过对每一维分别使用一维隐型技术，仍可获得稳态解，此即“交替隐型技术”。将步进时间间隔 Δt 分成相等的两部分。在从 $k\Delta t$ 到 $(k + 1/2)\Delta t$ 的过程中，对 r 隐型，对 z 显型；在从 $(k + 1/2)\Delta t$ 到 $(k + 1)\Delta t$ 的过程中，对 r 显型，对 z 隐型。 $(r$ 与 z 的顺序可交换)。由此，获得了多层光学膜系的二维瞬态温度的数值解。

4 结果与讨论

对于任意设定的一个膜系，本文进行了温度场计算。膜系参数见表 1。入射激光波长为 $1.06 \mu\text{m}$ ， $r_0 = 2.5 \mu\text{m}$ ，其时间波形见图 2。计算中表面热交换系数取为 10^5 cm^{-1} ，对于本文的计算，此值是适合的。

Table 1. Numerical values for optical and thermal parameters of the multilayer coating used in calculation

layer	refractive index ($n - ik$)	specific heat c /[Jcm ⁻³ (°) ⁻¹]	heat conductivity k /[Jcm ⁻¹ s ⁻¹ (°) ⁻¹]	thickness z /nm
1. ZrO ₂	1.95	2.6	0.110	140
2. SiO ₂	1.46	2.0	0.015	186
3. aluminium	1.20~ i6.9	2.7	2.400	130
4. substrate (K9 glass)	1.50	2.0	0.015	∞

图 3 给出了多层膜内的光强分布, 此图直接反映了激光能量在膜层内的沉积情况。图 4、图 5、图 6 给出了此膜系的温度场计算结果。

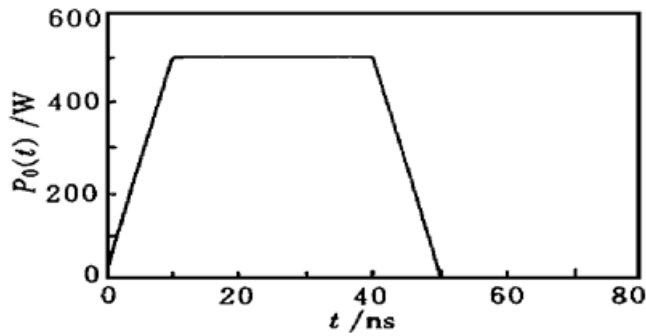


Fig. 2 Laser pulse used in the numerical calculation: 50 ps pulse with peak power of 500 W and total energy of 2×10^{-8} J

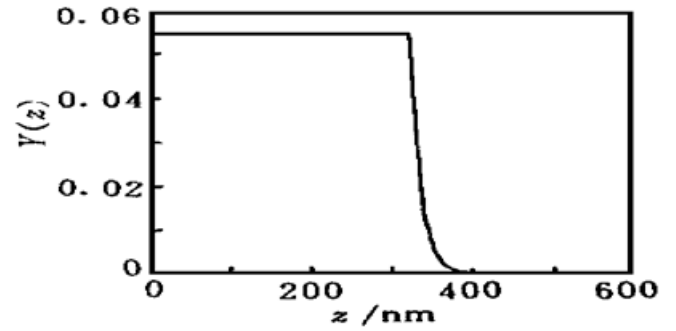


Fig. 3 Average rate of flow of optical energy through the multilayer for a plane wave with unit intensity

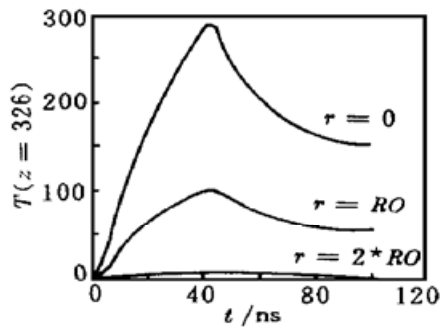


Fig. 4 Time dependence of the front surface of aluminium film's temperature at various radii

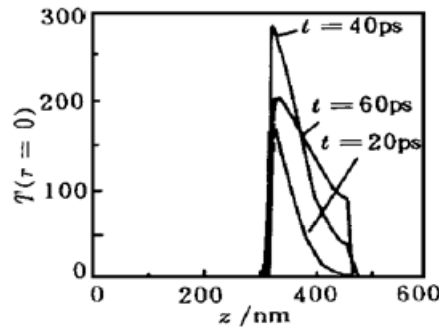


Fig. 5 Multilayer's temperature vs. Z at the center of the beam ($r = 0$) for several instants of time. At $t = 0$, the multilayer is at ambient temperature

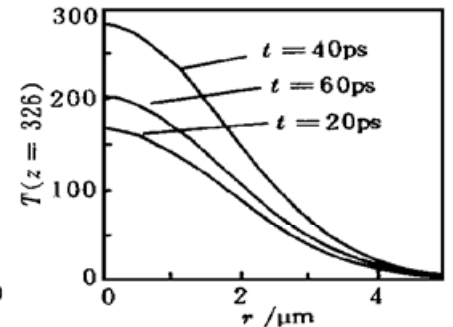


Fig. 6 Radial temperature distribution of the front surface of aluminium film at several instants of time

由此可以计算出任一时刻的膜系纵深方向及径向的温度分布、膜系内任一位置处的温升随时间的变化关系。这对于光学薄膜激光损伤研究无疑是很有意义的:

- 1) 可得出激光辐照下的峰值温升及其出现的位置, 从而可利用温度场设计技术使膜系内的温度场达到一种合理的分布^[7];
- 2) 对于重复频率激光损伤, 可计算出其积累温升, 从而为损伤的积累效应研究提供量的依据;
- 3) 若进一步对热引起的力学效应进行分析, 可得到膜层内的热应力分布及其热形变量, 从而与激光损伤建立起直接的联系。

限于计算处理的过于复杂, 本文在模型的建立和数值计算中均假设膜层的热物性参数不随温度而变化, 对于膜层界面热阻也未予考虑, 这与实际情况是有出入的。但损伤研究中由于临界温度(如熔点、沸点及热应力撕裂温度等)均是在一定的范围内变化的, 作为热过程的定性分析, 所得到的结果是有意义的。

对于膜层材料的光学、热学参数及膜系结构对光学场和温度场分布的影响, 本文作者已做了具体的理论分析计算工作, 详见文献[8]、[9]。

参 考 文 献

- [1] Palmer J R. Theoretical model for determining temperature transients in multilayer optical thin films subjected to high power continuous wave and repetitive pulsed lasers. *Proc. SPIE*, 1986, **655** : 241~262
- [2] Palmer J R. Theoretical model for determining temperature transients in multilayer optical thin films subjected to high power continuous wave and repetitive pulsed lasers. *Proc. SPIE*, 1986, **655** : 263~284
- [3] Cohen S S, Bermstein J B, Wyatt P W *et al.*. The effect of multiple laser pulses on damage to thin metallic films. *J. Appl. Phys.*, 1992, **71**(2) : 630~ 637
- [4] Palmer J R. Theoretical model for determining temperature transients in multilayer optical thin films subjected to high power continuous wave and repetitive pulsed lasers. In Bennet H E, Guentier A H, ed. *Laser Induced Damage in Optical Materials*: 1987, 1988, NIST(USA). Spec. Publ. 756, Washington: U.S. Government Printing Office, 1989, 519~ 540
- [5] Connel G A N, Goodman J W. Laser-induced local heating of multilayers. *Appl. Opt.*, 1982, **21**(6) : 1106~ 1114
- [6] 范正修, 汤雪飞. 光学薄膜的温度场设计. 光学学报, 1995, **15**(4) : 463~ 467
- [7] 赵 强, 范正修, 周冬平等. 利用电介质保护膜提高铝镜和硅窗口的抗激光强度. 中国激光, 1996, **A23**(1) : 85~ 90
- [8] 赵 强, 范正修. 光学薄膜界面吸收对温度场的影响. 光学学报, 1996, **16**(6) : 777~ 782

Digital Analysis of Laser Induced Thermal Process in Optical Coatings

Zhao Qiang Fan Zhengxiu Wang Zhijiang

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

(Received 12 February 1997; revised 22 May 1998)

Abstract The thermal process is an important process of interaction between laser and optical coating. The “alternate recessive algorithm” was applied to solve the equation of the heat transfers in multilayer optical coating. The two-dimension thermal field in coatings was obtained. Some examples to calculate the temperature field in typical optical coatings were shown.

Key words laser, optical coating, thermal process, digital algorithm.