

铝靶动态激光反射率的数值模拟

杨礼兵 章冠人 罗福 刘绪发

(中国工程物理研究院流体物理研究所, 成都523信箱 610003)

摘要 从金属近自由电子模型——Drude/Fresnel理论出发,分析了激光作用下铝靶表面反射率的动态变化规律。通过对铝电导率与温度变化关系的数值模拟,得到了凝聚态、液态、气态反射率的动态变化规律,且与实验结果基本符合。当激光功率密度处于 $10^{11} \sim 10^{15} \text{ W/cm}^2$ 范围内时,由等离子体模型和局部热力学平衡(LTE)理论,亦得到了反射率随温度变化的数值模拟结果,与国外的实验结果符合得较好。

关键词 激光与物质相互作用 反射率 电导率 数值模拟

1 引言

当激光辐照到金属表面时,金属就通过光子-自由电子-晶格三者的相互作用而实现对光能量的吸收,从而在靶表面产生一系列的热效应和力学效应^[1]。因此,靶对激光反射、吸收规律的研究是一个重要的课题。金属光学特性的变化主要取决于其复折射指数 n 或者复介电常数 ϵ 在外场作用下的变化。而这两者的变化都与金属电导率 σ 、或等离子体频率 ω_p 、电子弛豫时间 τ_e 等因素有关,本文将由此出发,对波长为 $1.06 \mu\text{m}$ 的短脉冲 ($\tau_e \sim 200 \text{ ns}$) 激光辐照 LY12 铝平面靶的动态反射变化规律(指在一个脉冲时间内反射率的变化规律)进行数值模拟,同时,对超短脉冲激光(所谓“超短”脉冲激光是激光脉宽为 $4.0 \times 10^{-4} \text{ ns}$, 波长为 308 nm , 经聚焦后,激光功率可达 $10^{11} \sim 10^{15} \text{ W/cm}^2$) 亦进行相应的数值模拟。通过实验结果与数值模拟结果的比较,得到了二者均可靠的结论。

2 金属凝聚态反射率的数值模拟^[2]

当入射光的角频率 ω 小于金属中自由电子的碰撞频率 ω_c ($\omega_c = 1/\tau_e$), 或者对处于室温(或更高温度)中的金属,入射激光波长 $\lambda > 1 \mu\text{m}$ 情况下,金属表面反射率作为波长和电导率的函数关系为

$$R = \frac{1 + \frac{0.5\sigma_c}{v\pi\epsilon_0} - \sqrt{\frac{\sigma_c}{v\pi\epsilon_0}}}{1 + \frac{0.5\sigma_c}{v\pi\epsilon_0} + \sqrt{\frac{\sigma_c}{v\pi\epsilon_0}}} \quad (1)$$

式中: σ_c 是金属直流电导率, v 是入射激光频率, ϵ_0 是真空介电常数。

金属电阻率 ρ 与温度 T 的关系取布洛赫-格临爱森经验公式,即

$$\rho = \frac{AT^5}{m\theta_D^5} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} \quad (2)$$

式中 A 是金属的特征常数, m 是金属原子量, θ_D 是金属的德拜温度。

根据 Carslaw 和 Jaeger 的研究工作, 当激光入射到金属靶面时, 焦斑中心的温度变化可用

$$T(t, 0) = \frac{1}{\rho' c_s \sqrt{\kappa\pi}} \int_0^t \frac{Q_a(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{r^2}{4\kappa(t-\tau)}\right) \right\} d\tau + T(0, 0) \quad (3)$$

描述。式中 ρ' 是金属物质密度, c_s 是比热, r 是焦斑半径, κ 是热扩散系数, $Q_a(t)$ 是在 t 时刻吸收的激光功率密度。如果初始入射激光波形可用 $Q(t)$ 表示, 则

$$Q_a(t) = [1 - R(t)]Q(t) \quad (4)$$

激光波形来源于实测的数据, 测出的数据经多项式拟合后, 即可得到一解析表达式

$$Q(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3$$

对温度计算, 参数取值如下: $\nu = 1.78 \times 10^{15} \text{ rad/s}$, $\epsilon_0 = 8.8542 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \cdot \text{N}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$, $\rho' = 2.7 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $c_s = 1.178 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\kappa = 0.71 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, 焦斑半径由发散角 θ (3 mrad) 和透镜焦距 f (420 mm) 得到 $r = f\theta/2 = 0.063 \text{ cm}$, 电阻率 ρ 与温度 T 的关系系数 $a = A/m\theta_D = 4.19 \times 10^{-10} \Omega \cdot \text{m} \cdot \text{K}^{-1}$, $a_0 = 0.215$, $a_1 = -3.313 \times 10^{-2}$, $a_2 = 1.489 \times 10^{-3}$, $a_3 = -1.649 \times 10^{-5}$, $t' = t + 14.5$ ($0 \leq t \leq 200 \text{ ns}$)。同时因 T 的表达式中含有反射率 R , 因而需进行迭代求解。图 1 是计算结果。

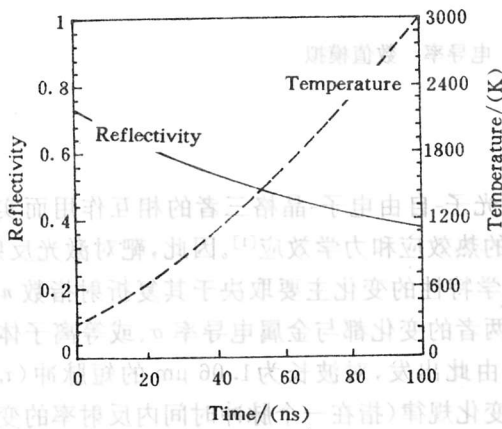


图 1 凝聚态温度、反射率的数值模拟结果
Fig. 1 The results of numerical simulation of temperature and reflectivity in the condensed state

3 金属三相反射率的数值模拟^[3]

3.1 固态

在固态情形下, 采用拟合表达式

$$\rho_s = (C_1 + C_2\theta^c) f_c \left(\frac{\nu}{\nu_0} \right) \quad (5)$$

来描述电阻率 ρ_s 随温度 θ (以电子伏特表示) 的变化。式中 C_1, C_2, C_3 为常数 (以下的 C_i 符号均为给定常数), ν 是当时比容 (cm^3/g), ν_0 是零压下的固态参考比容。比容变化的函数关系为 (对铝而言)

$$f_c \left(\frac{\nu}{\nu_0} \right) = \left(\frac{\nu}{\nu_0} \right)^{2\gamma-1} \quad (6)$$

式中 γ 是 Grüneisen 系数。作为比容的函数, γ 可表示成

$$\gamma = \gamma_0 - (\gamma_0 - \frac{1}{2})(1 - \frac{v}{v_0}) \quad (7)$$

式中 γ_0 是一参考值,对特定金属为常数。式(5)中的 θ 变化范围是 $0.001 \text{ eV} \leq \theta \leq \theta_m$, θ_m 是金属熔点。

3.2 液态

由 Lindeman 定律,金属熔化温度可表示为

$$\theta_m \propto \theta_D^2 (\frac{1}{v})^{-2/3}$$

式中 θ_D 是 Debye 温度。设在零压下熔化温度是 $\theta_{m,0}$,则有

$$\theta_m = \theta_{m,0} \exp[2 \int_{1/v_0}^{1/v} (\gamma - \frac{1}{3}) v d(\frac{1}{v})]$$

代入 γ 的解析表达式(7),则可得到

$$\theta_m = \theta_{m,0} (\frac{v}{v_0})^{-1/3} \exp[(2\gamma_0 - 1)(1 - \frac{v}{v_0})] \quad (8)$$

当金属温度上升到熔点时,由于液态时无序性的增长,使电阻率发生突变。Meadon 认为对许多金属有

$$\Delta\rho = (\frac{\rho_L}{\rho_s})_{\theta_m} = K \exp(80 L_F/T_m)$$

式中 T_m 是熔化温度(用绝对温标表示), L_F 是熔化潜热(kJ/mol), K 为常数。如果 L_F 用 $\text{GPa} \cdot \text{cm}^3/\text{mol}$,并以 θ_m 代替 T_m ,则上式为

$$\Delta\rho = K \exp(6.9 L_F/\theta_m) \quad (9)$$

从上式亦可看到,因 θ_m 随压力而增大,所以 $\Delta\rho$ 随压力而减小。从而可得液态金属电阻率 ρ_L 相对于固态 ρ_s 的关系为(在熔点)

$$(\rho_L)_{\theta_m} = \Delta\rho (\rho_s)_{\theta_m} \quad (10)$$

以此为起点,液态金属的电阻率可表示为

$$\rho_L = (\Delta\rho)_{\theta_m} (\frac{\theta}{\theta_m})^{c_4} \quad (\theta_m \leq \theta \leq \theta_b) \quad (11)$$

式中 θ_b 是金属气化温度。

3.3 气态

考虑部分电离的气体,其电阻率主要来源于电子和离子的碰撞及电子与中子的碰撞。这两种作用的贡献分别为

$$\rho_{ei} = \frac{C_5}{\theta} [1 + \ln(1 + C_6 v \theta^{3/2})] \quad (12)$$

及

$$\rho_{en} = C_7 \theta^{1/2} (P_1^{-1} + 1) \quad (13)$$

式中 P_1 与电离程度有关,由下式决定

$$P_1 = (1 + \frac{C_8 e^{c_9/\theta}}{v \theta^{3/2}})^{-1/2} \quad (14)$$

所以有

$$\rho_v = \rho_{ei} + \rho_{en}$$

3.4 混合态

在混合态中,只考虑由冷气态和凝聚态所组成。定义一个混合参数 m

$$m = (v - v_0) \frac{C_{10}}{C_{11}} e^{-C_{12}/\theta} \tag{15}$$

如果 $m=0$,则所有物质处于凝聚态; $m \geq 1$,则所有物质处于气态; $0 < m < 1$,则物质处于混合态。

再假设两个混合常数 X_c, X_v ,表示凝聚态和气态所占的权重

$$X_c = (1 - m)(v/v_0) \tag{16}$$

$$X_v = 1 - X_c \tag{17}$$

所以混合态的电阻率可表示成

$$\rho_{\text{mixed}} = \left(\frac{X_c}{\rho_c} + \frac{X_v}{\rho_v} \right)^{-1} \tag{18}$$

考虑常温常压下靶的状态,计算中比容选取如下:固态时取 $v=v_0$,液态时取 $v=0.42\text{cm}^3/\text{g}$,气体时取 $v=0.72\text{cm}^3/\text{g}$ 。由以上各式就可以得到电阻率 ρ 与温度 θ 的关系曲线,如图 2 所示,其中第三相态取气态。在实际情形中,当激光脉冲时间较短时,第三相态往往是气态和凝聚态并存的混合态。图 3 即为固态、液态、混合态下金属铝的电阻率与温度的关系曲线。

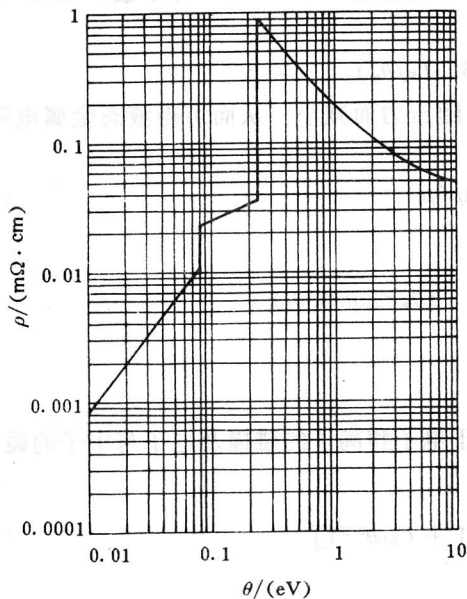


图 2 电阻率与温度关系曲线
(第三相态取气态)

Fig. 2 The curve of resistivity to temperature
(The third state is vapor)

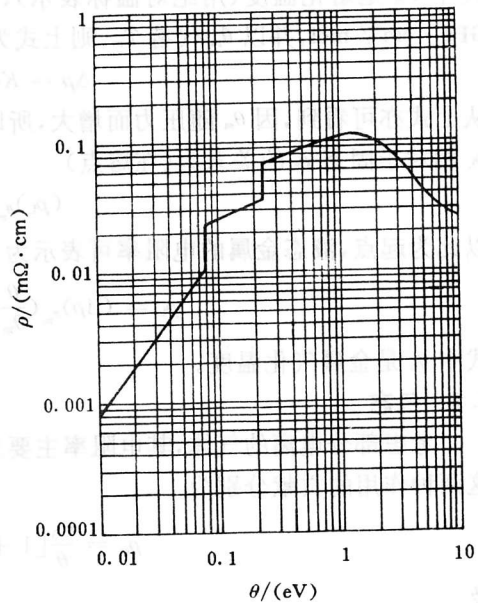


图 3 电阻率与温度关系曲线
(第三相态取混合态)

Fig. 3 The curve of resistivity to temperature
(The third state is mixed state)

对于反射率的计算,因(1)式只用于凝聚态下金属反射率计算,因而在此采用一种等

离子体近似模型。激光辐照下金属的温度上升规律仍用(3)式,反射率计算如下:

$$R = \left| \frac{1-n}{1+n} \right|^2 = \frac{(1-n_1)^2 + n_2^2}{(1+n_1)^2 + n_2^2} = 1 - \frac{4n_1}{(1+n_1)^2 + n_2^2} \quad (19)$$

$$n_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ [(1-Q)^2 + (\frac{Q}{\omega\tau_e})^2]^{1/2} - Q + 1 \right\}^{1/2}$$

$$n_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ [(1-Q)^2 + (\frac{Q}{\omega\tau_e})^2]^{1/2} + Q - 1 \right\}^{1/2} \quad (20)$$

$$Q = \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \tau_e^{-2}}, \tau_e = \frac{\sigma_{dc}}{\omega_p^2 \epsilon_0}$$

式中 τ_e 是电子弛豫时间, ω 是入射激光角频率 (1.78×10^{15} rad/s), ω_p 是等离子体频率。当靶表面的温度不高于铝的 Fermi 温度 (12 eV) 时, 可认为 ω_p 随温度变化很小^[4] (本文取 $\omega_p = 1.88 \times 10^{16}$ rad/s), σ_{dc} 即为电导率, 由相态模型给出。由以上几式就可得反射率的变化规律, 如图 4 所示。其中金属铝的第三相态取凝聚和冷气态并存的混合态参数进行计算。

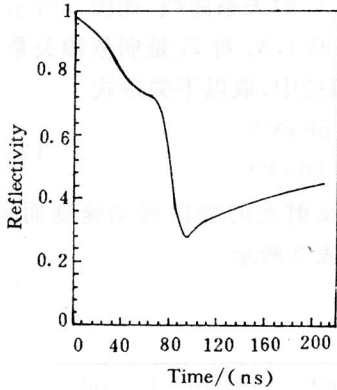


图 4 三态模型下铝表面的反射率的变化规律

Fig. 4 The variation of reflectivity of the metal aluminium surface based on three states model

在以上的数值模拟中, 铝的各项参数选取如表 1 所示^[3]。

表 1

Table 1

$v_0 / (\text{cm}^3/\text{g})$	γ_0	$\theta_{m,0} / (\text{eV})$	$L_F / (\text{GPa} \cdot \text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1})$	$C_1 / (\text{m}\Omega \cdot \text{cm})$	C_2	C_3	C_4
0.370	2.130	0.0804	0.0107	-5.35×10^{-5}	0.233	1.210	0.419

续表 1

Table 1 continued

K	$\theta_{b,0} / (\text{eV})$	C_5	C_6	C_7	C_8	C_9	C_{10}	C_{11}	C_{12}
0.878	0.235	0.150	1.2×10^{-2}	3.8×10^{-3}	18.50	0.950	0.440	3.58×10^{-2}	3.050

4 超短脉冲激光反射率的数值模拟^[4]

考虑激光脉宽很短, 因此认为在作用时间内铝靶表面未发生任何膨胀及相变, 在计算中仍采用固态铝的参数。反射率 R 用 Fresnel 方程(19)式描述, 且有

$$n^2 = (n_1 + in_2)^2 = 1 + i4\pi\sigma/\omega \quad (21)$$

式中 σ 是复电导率(亦即交流电导率)。可表示成

$$\sigma = \left(\frac{\omega_e}{4\pi}\right)\xi + i\left(\frac{\omega}{4\pi}\right)\xi \quad (22)$$

式中 ω_c 是电子碰撞频率, $\xi = \omega_p^2 / (\omega^2 + \omega_c^2)$ 。等离子频率 ω_p , 由其定义有

$$\omega_p^2 = \frac{N_e e^2}{m_e \epsilon_0} \quad (23)$$

即 ω_p 依赖于电子密度 N_e 的变化, 而电子密度 N_e 又依赖于电子温度 T_e 的变化。由局部热力学平衡(LTE)的假设^[4], 可以得到电子密度 N_e 与电子温度 T_e 的关系曲线, 如图 5 所示。从图中可以看出, 当 T_e 小于 50 eV 时(铝的 Fermi 温度是 12 eV), N_e 对 T_e 是弱依赖关系; 而大于 50 eV 时, 两者近似线性关系。为方便起见, 在数值模拟中, 取以下关系式

$$\frac{N_e}{N} = \begin{cases} 3.1 & (T_e \leq 50 \text{ eV}) \\ 0.047T_e + 0.85 & (T_e > 50 \text{ eV}) \end{cases} \quad (24)$$

至于电子温度 T_e 与激光功率密度 I 之间的关系可由反射光的频谱移动速度而得到^[4]。在本文数值模拟中, 将直接引用文献^[4]中的结果, 如表 2 所示

表 2
Table 2

$I / (\text{W} \cdot \text{cm}^{-2})$	10^{12}	5×10^{12}	10^{13}	5×10^{13}	10^{14}	5×10^{14}	10^{15}
$T_e / (\text{eV})$	0.8	2.2	6.3	19	40	65	105

ω_c 的变化可由下式描述

$$\omega_c = K' T_e^5 \int_0^{\theta_D/T_e} \frac{z^4 dz}{e^z - 1} \quad (25)$$

式中 K' 是常数。作一简单分析可知 ω_c 是一个随 T_e 增大而增大的函数。这意味着温度升高, 声子的分布增加, 因而电子与声子的碰撞频率增大。 K' 可由常温下的 ω_c 值得到, 设 $\omega_c|_{T_e=T_0} = \omega_{c0}$, 则有

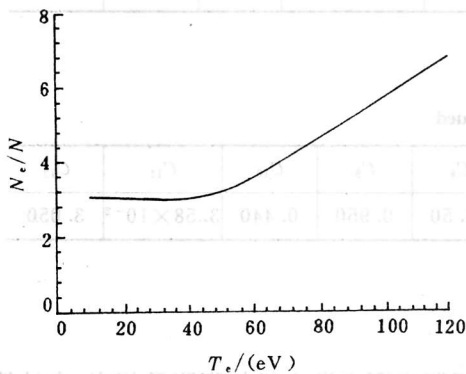


图 5 铝的电子密度 N_e 与温度的关系 (LTE, $N \approx 6.6 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$)

Fig. 5 The relation of aluminium electron density N_e to temperature

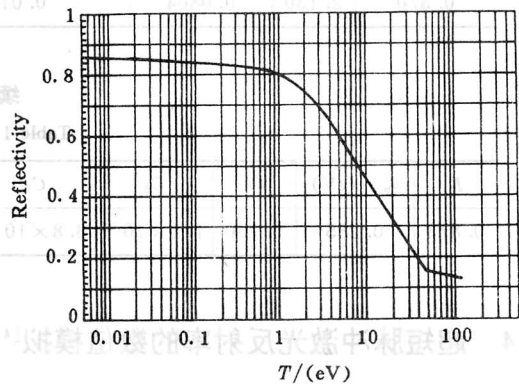


图 6 电子温度与反射率的关系曲线

Fig. 6 The curve of electron temperature to the reflectivity

$$K' = \omega_{e0} (T_{e0} \int_0^{\theta_0/T_e} \frac{z^4 dz}{e^z - 1})^{-1} \quad (26)$$

ω_{e0} 即可由 T_0 时金属的折射指数及等离子体频率求得,亦可查阅有关手册而获得。本文中我们取 $\omega_{e0} = 1.63 \times 10^{14}$ rad/s。图 6 是电子温度和反射率的关系曲线。

在本节中,数值模拟采用的一般数据均来自文献[5]。

5 结论

在数值模拟工作的同时,我们利用转镜调 Q 钕玻璃激光器(波长是 1.06 μm ,工作时脉宽 ~ 200 ns)、示波器和积分球装置(其内壁直径是 300 mm,内层涂料是 BaSO_4)进行了反射率的动态测量,激光功率跨越范围是 $10^6 \sim 10^9$ W/cm^2 。结果比较如图 7 所示。

从图 7 中可以看出,对于单纯采用凝聚态进行数值模拟,其结果(曲线 3)偏离实验结果较大(比实验结果小),并且反射率一直呈下降趋势,不能反映出铝靶的熔化过程。因此这种数值模拟方法更适合只有加热和熔化过程的作用效应(如对长脉冲、低功率,或连续激光的作用热效应可能适合)。而由金属三相态模型得到的结果(曲线 4)与实验结果符合得较好,其变化趋势一致。当有汽化效应产生时,考虑相应的等离子体模型后,亦可得到与实验结果一致的理论分析。此外从曲线 4 亦可以看到与材料相互作用的热效应物理过程。在最初一段时间内,靶迅速吸收能量,使靶被加热,从而反射率一直下降。当作用区温度达熔点时,靶作用区开始熔化,在尔后的一段时间内,反射率保持不变,靶吸收的能量主要用于克服熔化潜热;当靶继续吸收能量而达汽化点时,熔

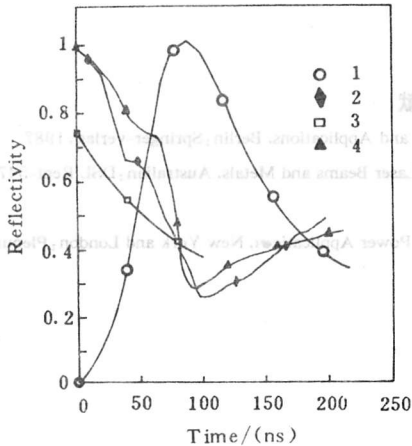


图 7 结果比较

1. 实测激光波形,
2. 实验结果 ($I = 5.06 \times 10^8$ W/cm^2),
3. 凝聚态模型数值模拟结果,
4. 铝三相态模型数值模拟结果

Fig. 7 The comparing result. 1. The real laser waveform, 2. The experimental result, 3. The numerical simulation result for condensed state model, 4. The numerical simulation result for three phases model

融铝开始汽化并形成蒸汽羽,由于蒸汽羽对激光的吸收作用以及内层固态铝的熔化,使得吸收再次增强,反射率再次陡降,直到最低点。因激光脉冲后期强度的减弱以及部分电离气体的屏蔽作用等影响,使汽化、熔化逐渐减退,因此靶对激光的吸收减弱,反射增

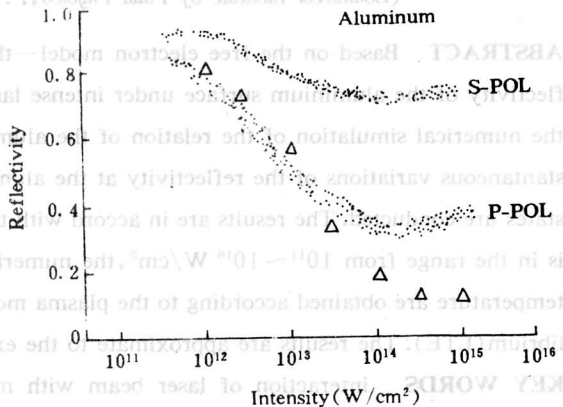


图 8 结果比较

Fig. 8 The comparing result

强,反射率增大。整个过程符合激光对材料的加热、熔化、汽化机理分析。

超短脉冲激光作用下反射率的变化规律如图 8 所示,其中 Δ 是数值模拟计算点,其余两曲线是 H. M. Milchberg 等人的实验结果^[4]。在实验结果中,作者考虑了光的极化(S 极化和 P 极化)、光的入射角($\theta=45^\circ$)与反射率的关系,而在我们的计算中未进行考虑。从图中可以看出两者的变化趋势是相同的,在后期因未考虑极化、入射角等因素的影响而差别较大。

由 S 极化、P 极化及数值模拟的相似性结果就支持了 Drude/Fresnel 模型的正确性。此外从图中可以看出在 $T_e \approx 40 \text{ eV}$ ($I \approx 10^{14} \text{ W/cm}^2$),反射率达最小值,尔后又逐渐有所增加,这与此时铝靶电阻率达“饱和”状态及电子密度的变化规律改变有关。

总的来说,通过实验结果与数值模拟结果的比较,可以得到:实验结果正确,理论模型恰当,从而亦说明金属的 Drude 理论仍能适合于强激光作用于金属靶的热效应分析。

参 考 文 献

- 1 Allmen M V, *Laser-Beam Interaction with Materials Physical Principles and Applications*. Berlin, Springer-verlag, 1987
- 2 Wendlandt B C H. *Theoretical Studies of the Interaction of High-Power Laser Beams and Metals*. Australian; DSL Rept-547, 1973
- 3 Burgess T J. In: Fowler C M, et al, ed. *Megagauss Technology and Pulsed Power Applications*. New York and London; Plenum Press, 1987. 307
- 4 Milchberg H M, et al. *Phys Rev Lett*, 1988, 61(20): 2364
- 5 饭田修一等合编. *物理学常用数表*. 北京: 科学出版社, 1979

THE NUMERICAL SIMULATION OF REFLECTIVITY OF ALUMINUM ALLOY IRRADIATED BY LASER BEAM

Yang Libing, Zhang Guanren, Luo Fu, Liu Xufa

(*Southwest Institute of Fluid Physics, P. O. Box 523, Chengdu 610003*)

ABSTRACT Based on the free electron model—the Drude/Fresnel theory, the variation of reflectivity of the aluminium surface under intense laser interaction is analysed in this paper. From the numerical simulation of the relation of the aluminium conductivity with temperature, the instantaneous variations of the reflectivity at the aluminium surface in the solid, liquid and vapour states are conducted. The results are in accord with the experiments. When the laser power density is in the range from $10^{11} \sim 10^{16} \text{ W/cm}^2$, the numerical simulation results of the reflectivity with temperature are obtained according to the plasma model and the assumption of local thermal equilibrium(LTE). The results are approximate to the experimental results from abroad.

KEY WORDS interaction of laser beam with materials, reflectivity, conductivity, numerical simulation.