

模拟激光与物质的相互作用

劳伦斯利弗莫尔国家实验室的研究人员通过多物理场仿真开发出了一种用于修复熔融石英光学元件的技术。

作者: CHRIS HARDEE

激光器具有可调谐和精确等优点, 广泛应用于从普通家用电器到先进研究设备的诸多应用中, 较突出的日常应用包括汽车零部件、条形码扫描仪、DVD 播放器和光纤通讯等。虽然也许很少有人会把激光器看作一个高精度热源, 但正是这项特性才使它成为材料处理应用中一个非常有效的工具, 它可以实现纳米级精度的材料控制或更改, 比如玻璃、金属, 或聚合物等特定物质。

在任何应用中, 理解激光与物质间的相互作用都是设计和优化激光系统的关键。Manyalibo Matthews 是劳伦斯利弗莫尔国家实验室 (LLNL) 材料科学部的副组长, 他正在研究这些复杂的激光与物质间的相互作用。他的研究涉及世界上最易扩展的激光系统中熔融石英光学元件的修理和保养。

→ 利用激光修复大功率系统光学元件

位于加州的 LLNL 负责管理国家点火装置 (NIF), 这里拥有世界上最大、功率最高的激光器。这台巨型机器能发出 192 条独立的激光束, 包含 40,000 个光学元件, 用于聚焦、反射和引导这些激光

束, 它们可以将发射的激光脉冲能量放大 100 亿倍, 然后将其导向至类似铅笔上橡皮擦大小的一个目标。该激光器产生的温度、压力和密度类似于恒星、超新星和大型行星内核中的情况。天体物理和核研究人员正使用该巨型激光来更好地了解宇宙, 用作惯性约束聚变 (ICF) 技术, 即加热氢燃料, 并将其压缩到可以发生核聚变反应的临界点。

但是, 这个强大激光器的反复使用会破坏系统中的光学元件。“这些光学元件相当昂贵。” Matthews 说: “NIF 产生的高功率激光会破坏部分熔融石英光学元件, 比如表面会出现小坑, 就像石头撞到您汽车挡风玻璃时留下的痕迹一样。我们正在全力修理和回收已损坏的那些元件。” 图 1 中的示例显示了两个受损的光学表面修复前和修复后的样子。

虽然由于激光器反复使用所累积的能量会随着时间的继续而破坏光学元件, 但我们也可以利用激光器来修复。不同于 NIF 所用的横跨三个足球场大小的巨大激光器系统, 我们使用了一个较小的、集成了光束和脉冲成形单元的桌面型系统来制作损害缓解系统, 从而修复受损的光学元件。Matthews 最近在

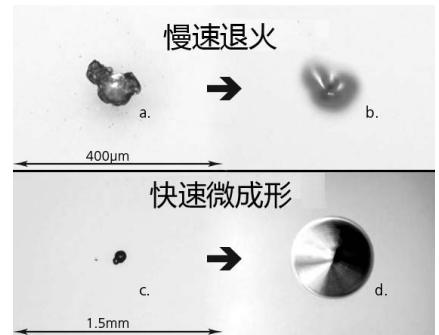


图 1. 反复暴露于高峰值功率激光脉冲下而损坏的光学元件示例。(a) 和 (c) 点为受损的光学表面, (b) 和 (d) 对应于修复后的受损点。使用慢速退火工艺修复 (a) 处的受损, 而 NIF 现在正使用快速微成形技术来修复 (c) 处的受损, 因此它在光学上是良性的。

LLNL 的研究侧重于光学元件修复的新技术, 从更广泛的角度来看, 涉及激光与熔融石英或玻璃¹之间的相互作用。

→ 模拟激光与玻璃的相互作用

Matthews 和他的团队使用仿真探讨了用于修复损坏光学元件的三项技术: 红外线 (IR) 脉冲激光微成形/微机械加工、慢速退火, 以及激光化学气相沉积 ((L-CVD)²)。

在第一个研究周期中，他们重点分析了不同温度下熔融石英暴露于激光中所发生行为背后的基础物理学和材料科学。

他们的温度区间研究包含几个关键温度点：首先是理解材料在温度达到玻璃转化温度 (1,300 K) 时的热弹性响应，此时，熔融石英的弹性响应会突然增加，流阻降低。随后，他们研究了当温度介于玻璃转化温度和蒸发点 (约 2,200

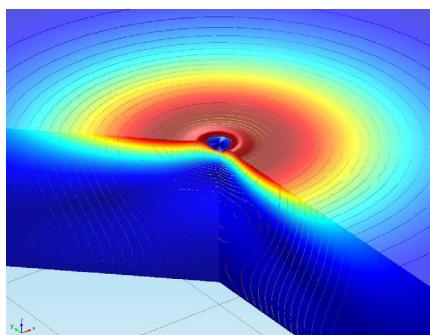


图 2. 仿真结果显示了激光加热玻璃的 Marangoni 流。当激光加热在依赖于温度的表面张力中造成梯度时，就会使材料快速向外流动，形成看起来很像波纹或层级的形状。

K) 时，玻璃在粘性流动下的分子弛豫。最终的目标是分析当温度介于 2,200 和 3,400 K 时，材料的蒸发和再沉积。

为了探讨用于修复损坏光学元件的特定技术，Matthews 转向 COMSOL Multiphysics® 软件寻求帮助。“我决定使用 COMSOL 来更好地了解到底发生了什么。” Matthews 说道：“软件包含了所有必需的物理场，因此我可以轻松尝试我的想法，省去了从头开始编写代码所需花费的时间和精力。”

根据 Matthews 的说法，COMSOL 在帮助他们理解激光与熔融石英之间的相互作用，以及完善特定修复方法方面发挥了巨大的作用。“高功率激光系统对光学元件表面粗糙度的容许度较低。要实现如此高标准的平坦度，需要进行多方面的仿真。”他说道。他所进行的仿真包括流体中的传热、化学反应、结构力学、传质，以及流体流动。

→ 红外脉冲的激光微成形

虽然首先使用了慢速退火这一简单的方

法来缓解光学元件的损伤（见图 1 上部），实验和仿真都显示当放置于激光束中的元件表面包含由热毛细流或马朗戈尼剪切应力引发的表面波纹时，会造成我们不希望的光调制。图 2 显示了由于马朗戈尼剪切应力造成的激光诱导温度剖面 and 材料位移仿真。

为了消除该效应，Matthews 和他的同事们探讨了使用更短激光脉冲（几十微秒相对于每分钟）来精确“切削”材料形状，当置于激光系统中时，切削后的形状受到下游光调制的影响更小。在快速烧蚀缓解 (RAM) 方法中，使用红外激光以略高于蒸发点的温度加热基底，这将精确地移除极少量的材料，并生成一个光滑、无裂隙的表面。材料的纳米级烧蚀将会重复上千次，甚至几百万次，最终会形成一个光滑的圆锥形坑，该形状是“光学上良性”的，不会造成下游光调制（见图 1 下部）。

“尽管使用红外激光来加工石英光学元件的历史很长。” Matthews 说道：“人们却很少尝试通过理解其中的能量耦合和热流来优化这一工艺。通过在 COMSOL 中仿真大范围的激光参数和材料属性，我们能够回答许多这类问题。”

对烧蚀区域温度和材料行为的仿真结果较好地契合了团队的实验结果。“我们的研究成果将具有深远的影响。” Matthews 说道：“除了能用于修复高功率脉冲激光系统中的损伤，还能用于几乎所有需要激光抛光、退火，以及石英表面¹微成形的系统。”

→ 用于大型修复的激光化学气相沉积

LLNL 团队研究的第三种用于修复受损光学元件的方法是激光-化学气相沉积 (L-CVD)。在此增材工艺中，石英前体气体通过喷嘴“流到”表面上。利用一个窗口（见图 3）将聚焦的 CO₂ 激光束

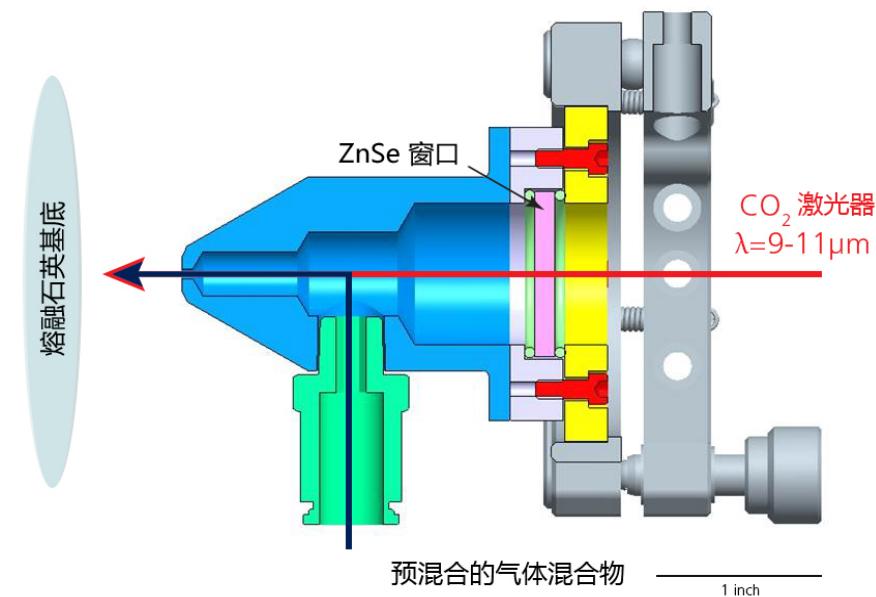


图 3. 用于激光 CVD 工艺的光学耦合气体喷嘴示意图，气体通过侧向端口进入，红外激光通过 ZnSe 窗口沿轴向进入。

耦合到喷嘴，分解前体并在受损坑处沉积固体 SiO_2 玻璃。对于带有较大缺陷且较难使用红外微成形或其他去除方法修复的光学元件表面，他们正在研究使用 L-CVD 来对表面进行纳米精度的修复。最终，将可能完全恢复这些光学元件的性能。

“通过仿真，我们实验了激光束强度、位置和脉冲时长会如何影响沉积在光学元件上的材料数量。” Matthews 解释说。仿真可以确定石英分解时的浓度和流动，以及沉积材料的位置（见图 4）。

研究小组发现，如要避免一些较常见于 L-CVD 沉积剖面的多余特征，比如著名的“火山”特征，激光功率是一个关键的工艺参数。

“就我们所知，迄今为止，还没有任何其他方法可以通过将缺损材料替换为高等级基底材料来增材修复损伤。” Matthews 说道：“这一方法的成功应用可以降低加工成本、延长光学元件的使用寿命，并为一般的高功率激光应用带来抗刮伤能力更强的光学元件。此外，相对常规方法，L-CVD 对除石英玻璃之外的其他材料系统也颇具优势。能够模拟瞬态流动、反应和传热，对探索新应用有很大的帮助。”

→ 从玻璃修复到制造

虽然使用 L-CVD 工艺翻新光学元件这一技术仍处于探索阶段，但作为 NIF 的光学修复项目之一，团队已经实现了基于 CO_2 激光器的表面微成形，并通过多物理场仿真进行了优化。2014 年，NIF 已经使用红外微成形和其他技术修复了 13,000 个以上的受损点，他们正不断循环利用光学元件，保证了日常使用。

不过，他们对激光与物质之间相互作用的研究并没有止步于光学元件的修复。Mathews 和他的团队还进一步开发出了一项称作选择性激光烧结 (SLM)³ 的

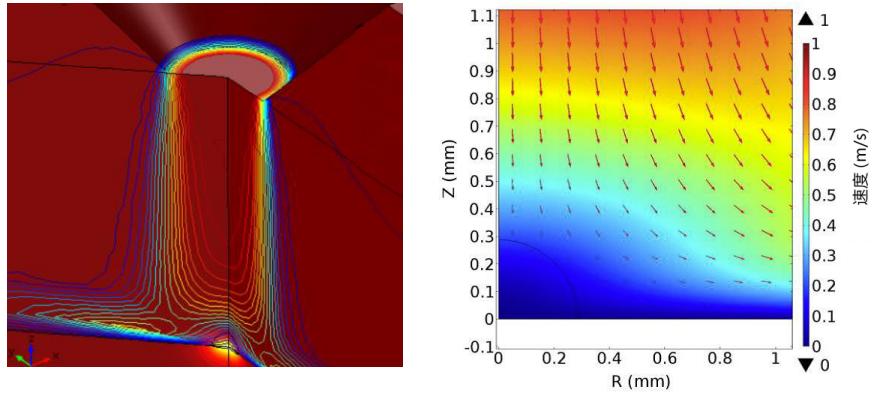
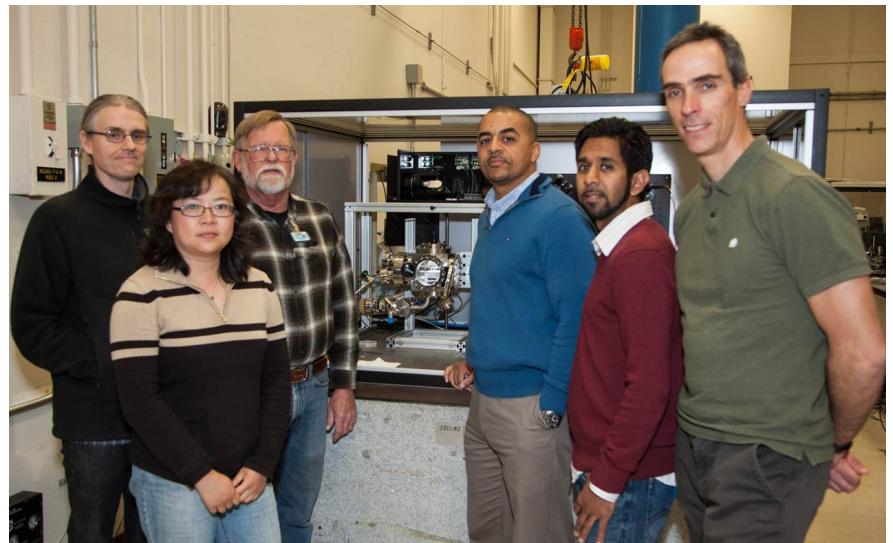


图 4. L-CVD 的速度和温度场仿真。左：从直径 3 mm 的喷嘴中流出的 L-CVD 前体流动速度等值线，以及由于空气玻璃界面处激光加热诱发的温度场。右：汽化石英的速度流线，在左下角可以看到以扩散为主的玻璃传递（深蓝色）。

3D 打印增材工艺，以支持一个实验室级别的增材制造计划。“这项研究让我感觉非常兴奋。” Matthews 说道：“找出如何优化 3D 打印系统会给这一正在快速发展的行业带来重大的影响，在过去，我们很大程度上只能依赖试错法，现在则将从这一基于模型的方法中受益。” ❖

参考文献

- ¹ M. J. Matthews, S. T. Yang, N. Shen, S. Elhadj, R. N. Raman, G. Guss, et al., “Micro-Shaping, Polishing, and Damage Repair of Fused Silica Surfaces Using Focused Infrared Laser Beams, *Advanced Engineering Materials*, vol. 17, p. 247, 2015.
- ² M. J. Matthews, S. Elhadj, G. M. Guss, A. Sridharan, N. D. Nielsen, J.-H. Yoo, et al., “Localized planarization of optical damage using laser-based chemical vapor deposition, in *SPIE Laser Damage*, 2013, pp. 888526-888526-9.
- ³ N. E. Hodge, R. M. Ferencz, and J. M. Solberg, “Implementation of a thermomechanical model for the simulation of selective laser melting, *Computational Mechanics*, vol. 54, pp. 33-51



LLNL 光学元件损伤缓解和激光材料加工研究小组（从左到右）：Gabe Guss、Nan Shen、Norman Nielsen、Manyalibo Matthews、Rajesh Raman 和 Selim Elhadj。他们背后的设备用于研究高功率激光辐射下的金属粉末熔融动力学，这是金属基增材制造（3D 打印）领域的一个重要课题。