

文章编号: 1001-3806(2007)06-0565-03

激光微造型中烧蚀热场及弹坑的数值模拟

王 霄, 陈怡星, 刘会霞, 刘长京, 匡民
(江苏大学 机械工程学院, 镇江 212013)

摘要: 在摩擦副表面激光微细加工技术中, 为了确定其表面形貌, 采用有限差分法对激光微造型中的烧蚀温度场和烧蚀产生的弹坑进行了数值模拟, 计算模型在能量平衡方程的基础上, 将入射脉冲激光在空间以高斯分布考虑, 模拟出了激光微造型中靶材的温度场分布和变化规律, 以及弹坑的深度和直径, 进行了理论分析和实验验证, 将此模拟结果(弹坑直径和深度)和现有文献中的实验进行比较, 得到了良好的一致性。这对于激光微造型技术的理论研究是有帮助的。

关键词: 激光技术; 微造型; 脉冲激光; 数值模拟; 弹坑; 温度场

中图分类号: TG156.99 **文献标识码:** A

Numerical simulation of the ablation thermal field and crater in the laser micro-texture sculpt

WANG Xia, CHEN Yi-Xing, LIU Hui-Xia, LIU Chang-Jing, KUANG Ming
(School of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China)

Abstract Numerical simulation for temperature field and crater in laser ablation in laser micro-texture sculpt was performed by means of finite difference method. Based on energy conservation equation, Gaussian distribution of the incident laser pulse was taken into account in the numerical model. The distribution of the temperature field of the target in the laser micro-texture sculpt was simulated and so were the depth and diameter of the crater. The simulated results were compared with the experiment before. The former accorded well with the latter. This study established the basic theory in laser micro-machining.

Key words laser technique; micro-texture sculpt; laser pulse; numerical simulation; crater; temperature field

引 言

近年来, 随着对物体表面, 特别是对重要摩擦副表面性能的要求越来越高, 表面微造型技术以其优异改善摩擦性能的特点得以快速发展。在表面微造型技术发展过程中, 激光表面微造型技术由于其良好的操控性, 被广泛认为目前最好的微加工技术。因此, 根据摩擦副表面的润滑抗磨性能要求, 优化设计出与之匹配的激光微细造型微观几何形貌的理想表面具有其非常重要的意义^[1-3]。

脉冲激光加工具有形变小、处理区域可选择、无环境污染等优点。而用脉冲激光对不同材料进行烧蚀, 为了得到合适的烧蚀凹坑, 往往需要通过一系列试验后, 才能确定较为合适的工艺参数, 既费时又费力; 同

时, 由于激光功率的不稳定性、温度场的瞬时变化且难以测量, 使工艺的移植性很差, 这也成为此项技术迅速推广的主要障碍。

由于激光烧蚀过程在微结构应用范围内有广泛的使用, 这个模拟可以用来作为来优化激光烧蚀过程的一个工具。因此, 采用数值模拟的方法对不同工艺参数条件下的激光烧蚀温度场进行分析可以达到优化参数、主动设计的目的, 有其重大的意义。

1 脉冲激光微造型烧蚀温度场的数学模型

脉冲激光对金属靶材烧蚀的温度场计算, 本文中利用能量平衡的方程即传统的热扩散方程来分析其中的能量变化^[4-6]:

$$\rho(T) c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [K(T) \frac{\partial T}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial y} [K(T) \frac{\partial T}{\partial y}] + \frac{\partial}{\partial z} [K(T) \frac{\partial T}{\partial z}] + H \quad (1)$$

式中, ρ 为材料密度; c_p 为比定压热容; K 为传热系数; H 为相变潜热; T 为温度; t 为时间。(1)式解的初始条件为: 当 $t = 0$ 金属靶材具有均匀的温度分布 T_0 (300K):

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50475122); 江苏省科技攻关资助项目 (BE2001013)

作者简介: 王 霄 (1964), 男, 副教授, 主要研究方向为微造型及性能数值模拟, CAD/CAE/CAM, 虚拟样机技术等。

E-mail: wx@uj.edu.cn

收稿日期: 2006-10-20 收到修改稿日期: 2006-11-02

$$T(x, y, z, 0) = T_0 = 300\text{K} \quad (2)$$

而金属靶材与环境的周围边界, 能量通过对流辐射进行热交换, 由传热学, 即由文献 [2] 可知通过界面的对流传热热流为:

$$q_1 = -h(T_s - T_o) \quad (3)$$

式中, h 为对流换热系数, T_s 和 T_o 分别是固体表面和环境温度。

通过界面的辐射传热热流为:

$$q_2 = -\sigma f_3(T_s^4 - T_o^4) \quad (4)$$

式中, σ 为 Stefan-Boltzman 常数, f_3 为受物体相对位置和物体是否为黑体等因素影响而产生的无量纲的比例常数。因此, 金属靶材的边界条件为:

$$-K(T) \frac{\partial T}{\partial n} = h(T_s - T_o) + \sigma f_3(T_s^4 - T_o^4) \quad (5)$$

式中, $\frac{\partial T}{\partial n}$ 指温度沿试样外法线的变化率。在试样底面 ($z = L_z$), 热能通过接触传导给热沉, K_c 为接触传热系数 ($\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$), T_b 为热沉温度 (K)。

$$q_c = K_c [T(x, y, L_z, t) - T_b] \quad (6)$$

式中, q_c 表示通过加热表面的热量。在靶材上表面分为光斑以内和光斑以外两个区域, 光斑以外, 激光功率为 Q , 光斑以内, 激光功率密度为 $P(x, y, Q, t)$, 于是, 靶材上表面光斑以内边界条件为:

$$-\frac{\partial T(x, y, Q, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{1}{K} \alpha_1 P(x, y, Q, t) + \frac{1}{K} h [T(x, y, Q, t) - T_o] +$$

$$\begin{cases} \left[\frac{T_{ijk}^{n+\frac{1}{3}} - T_{ijk}^n}{\frac{\Delta t}{3}} \right] = \rho_p \left[\frac{T_{i-1jk}^{n+\frac{1}{3}} - 2T_{ijk}^{n+\frac{1}{3}} + T_{i+1jk}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x^2} \right] + \rho_p \left[\frac{T_{ijl-1k}^n - 2T_{ijk}^n + T_{ijl+1k}^n}{\Delta y^2} \right] + \rho_p \left[\frac{T_{ijk-1}^n - 2T_{ijk}^n + T_{ijk+1}^n}{\Delta z^2} \right] \\ \left[\frac{T_{ijk}^{n+\frac{2}{3}} - T_{ijk}^{n+\frac{1}{3}}}{\frac{\Delta t}{3}} \right] = \rho_p \left[\frac{T_{i-1jk}^{n+\frac{1}{3}} - 2T_{ijk}^{n+\frac{1}{3}} + T_{i+1jk}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta x^2} \right] + \rho_p \left[\frac{T_{ijl-1k}^{n+\frac{2}{3}} - 2T_{ijk}^{n+\frac{2}{3}} + T_{ijl+1k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y^2} \right] + \rho_p \left[\frac{T_{ijk-1}^{n+\frac{1}{3}} - 2T_{ijk}^{n+\frac{1}{3}} + T_{ijk+1}^{n+\frac{1}{3}}}{\Delta z^2} \right] \\ \left[\frac{T_{ijk}^{n+1} - T_{ijk}^{n+\frac{2}{3}}}{\frac{\Delta t}{3}} \right] = \rho_p \left[\frac{T_{i-1jk}^{n+\frac{2}{3}} - 2T_{ijk}^{n+\frac{2}{3}} + T_{i+1jk}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta x^2} \right] + \rho_p \left[\frac{T_{ijl-1k}^{n+\frac{2}{3}} - 2T_{ijk}^{n+\frac{2}{3}} + T_{ijl+1k}^{n+\frac{2}{3}}}{\Delta y^2} \right] + \rho_p \left[\frac{T_{ijk-1}^{n+1} - 2T_{ijk}^{n+1} + T_{ijk+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right] \end{cases} \quad (11)$$

式中, $T^{n+\frac{1}{3}}$, $T^{n+\frac{2}{3}}$, T^{n+1} 分别代表 $(n+1/3)\Delta t$, $(n+2/3)\Delta t$, $(n+1)\Delta t$ 时刻的温度值。选取均匀网格进行划分, 对 (11) 式求解。对以上方程进行计算机编程 [8], 进行温度场的模拟计算。

3 材料的参数处理以及热源的分析 and 加载

材料是使用纯铜。脉冲激光烧蚀过程中的热传导问题是一个复杂的非线性问题, 所以热物理参数如热传导率、密度、比热容等随温度的变化而变化 [9, 10]。因此, 需要建立工程数据库, 提供材料物理特性、传热和传质过程参数等数据。根据典型温度处的参数值建立表格矩阵, 使用插值法和外推法确定未知温度处的值。

$$T_o] + \frac{1}{K} \sigma f_3 [T^4(x, y, Q, t) - T_o^4] \quad (7)$$

式中, α_1 是一个整体参数。靶材上表面光斑以外边界条件为:

$$-\frac{\partial T(x, y, Q, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{1}{K} h [T(x, y, Q, t) - T_o] + \frac{1}{K} \sigma f_3 [T^4(x, y, Q, t) - T_o^4] \quad (8)$$

2 方程的数值解法

对于能量平衡方程 (1) 式, 以及以上涉及到的 (2) 式 ~ (8) 式边界条件, 使用有限差分法 [4] 对其进行数值解。具体方法是: 从微分方程出发, 将求解区域经离散处理后近似地用差分差商来代替微分微商 [7]。将微分方程和边界条件归结为求线性代数方程组的解, 从而得到数值解。

采用隐格式差分方法计算, 考虑三维非稳态热传导方程 (1) 式, 在热传导区域内划分步长分别为 Δx , Δy , Δz 的网格, 取时间步长为 Δt , 于是 x, y, z, t 可表示为:

$$x = i\Delta x, y = j\Delta y, z = k\Delta z, t = n\Delta t \quad (9)$$

在时间为 t 位置为 (x, y, z) 时的温度 $T(x, y, z, t)$ 表示为:

$$T(x, y, z, t) = T(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = T_{ijk}^n \quad (10)$$

式中, i, j, k 和 n 都是整数。此时能量平衡方程 (1) 式可表示为如下差分方程:

本文中模拟的激光热源代表了 Nd:YAG 激光器发出的脉冲, 光强分布的剖面是时间和空间的高斯分布, 脉宽是 $\tau = 50\text{ns}$, 波长 355nm , 光斑半径是 $42.25\mu\text{m}$, 激光功率密度是 $I = 1.7 \times 10^8 \text{W}/\text{cm}^2$ 。因靶材是纯铜, 通常激光在金属表面吸收发生在表层约 $1\mu\text{m}$ 的范围内, 故激光在金属中的热作用看成是发生在表面一个无限薄的区域内 [4]。因此, 作者就把激光热源当成表面热源。

4 结果和讨论

4.1 试样的温度场分布

为方便分析内部温度场, 特取试样 1/4 来研究。图 1 是单个激光脉冲作用后靶材的温度场分布图。从

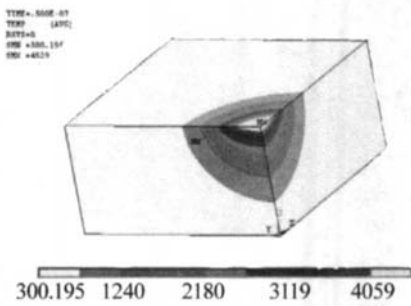


Fig 1 The distribution of temperature field in the target when a laser pulse was finished

图中可以看出, 脉冲激光的光斑区域内的温度分布有着显著的差别。光斑区域内的温度急剧上升, 绝大部分区域温度超过了试样的液化 (1356K) 和汽化温度 (2816K)。而光斑区域以外, 温度基本保持室温 (300K)。这表明在单个激光脉冲作用以后, 试样被烧蚀液化和汽化了。图 2 为单个激光脉冲作用结束时靶

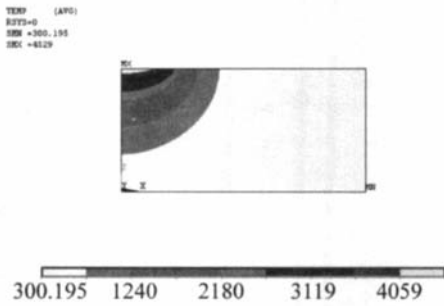


Fig 2 The distribution of temperature field in the target in depth when a laser pulse was finished

材试样沿烧蚀坑深度方向的温度分布。图 3 为单个激

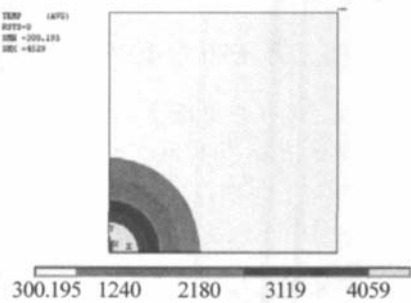


Fig 3 The distribution of temperature field in the target in diameter when a laser pulse was finished

光脉冲作用结束时靶材试样沿烧蚀坑直径方向的温度分布。图 4 是靶材试样的光斑中心沿单个脉冲时间内

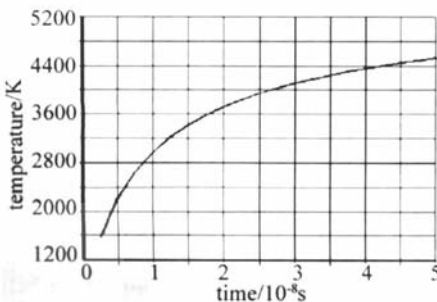


Fig 4 The transformation of temperature in the focus of the spot along one laser pulse duration

的温度变化, 由图中可知道在单个脉冲内沿时间的增加光斑中心温度是非线性的增加的。图 5 是靶材试样的

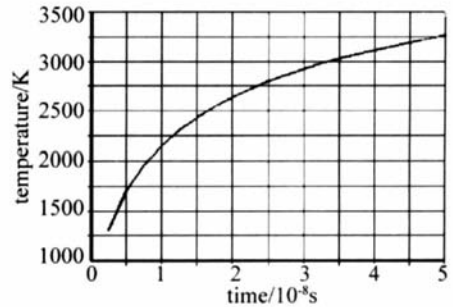


Fig 5 The transformation of temperature in the point of the spot radius along one laser pulse duration

光斑半径上的点沿单个脉冲时间内的温度变化情况。

4.2 试样的烧蚀弹坑

图 6 是单个激光脉冲作用后靶材的产生的弹坑形貌图。此形貌的产生是基于以下原理: 首先通过计算机编程, 计算式样温度场, 随着激光脉冲能量的渗入, 温度升高, 当达到材料的汽化温度时, 设定此时材料失效, 去将其去除, 于是能量直接进入下一层, 而不影响

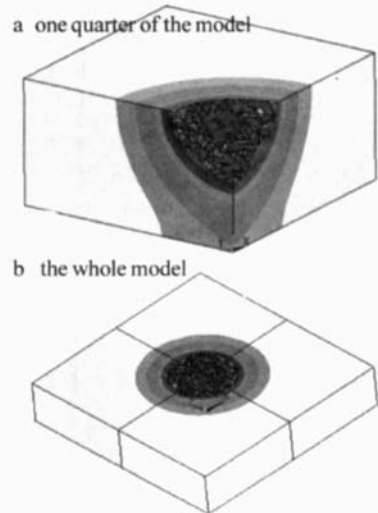


Fig 6 The ablation crater shape after one laser pulse on the target 能量的损失, 以此保持计算的精确性。图 7 为作用 1

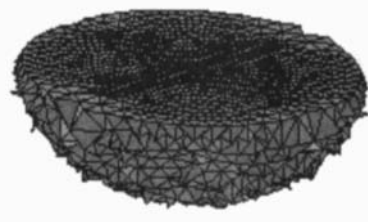


Fig 7 The ablation volume after one laser pulse on the target 个激光脉冲后靶材烧蚀的体积。数值模拟出的弹坑的直径是 52μm, 深度为 4.9μm

Table 1 The parameters of Ni and Al^[2,10]

	$\kappa_0 / (\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_e' / (\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$	$g / (\text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_{V1} / (\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$
Ni	91	1065	36×10^{16}	4.1×10^6
Al	238	135	56.9×10^{16}	2.43×10^6

和晶格比热容差距不大,而电子热导率和电子比热容差距比较大,这两个参数决定了热影响区。这是因为电子热扩散产生电子温度梯度,然后通过电子晶格耦合产生晶格温度梯度,从而产生热影响区,所以电子热扩散的距离直接决定了热影响区范围的大小,而电子热扩散是由电子热导率和电子比热容两个参数所决定的,因此,电子热导率和电子比热容对热影响区起着决定性的作用。

3 结论

采用二维双温模型对飞秒激光烧蚀金属镍的热影响区进行了数值计算,结果表明,熔化再凝固区为90nm,热激活区为70nm,总的径向热影响区为160nm,并简要分析了材料的特征参数对径向热影响区的作用。此模拟结果表明飞秒激光加工金属的热影响区极小,可实现对金属材料的超精密加工。

参考文献

[1] LeHARZIC R, HUOT N, AUDOUARD E *et al* Comparison of heat affected zones due to nanosecond and femtosecond laser pulses using transmission electronic microscopy [J]. *Applied Physics Letters*, 2002, 80(21): 3886~3888

(上接第567页)

5 结论

通过计算机模拟,得出了激光微造型中的烧蚀温度场和烧蚀产生的弹坑。弹坑的直径是52 μm ,深度为4.9 μm 。这个模拟结果和DOBREV等人实验的结论^[11](直径49 μm ,深度4.65 μm)是基本吻合的。说明此模拟有效可行。此研究对摩擦副表面激光微细加工技术奠定了理论基础。

参考文献

[1] ZHANG W, YAO Y L, CHEN K. Modelling and analysis of UV laser micromachining of copper [J]. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2001, 18(5): 323~331

[2] CHEN W. Research on the tribological performance of micro surface texturing by multigrad method [D]. Zhenjiang Jiangsu University 2006 3~10 (in Chinese).

[3] ZHANG Zh Y, ZHANG Y K. The new processing method of the cylinder wall Laser honing [J]. *Laser Technology*, 2003 27(1): 59~63 (in Chinese).

[2] VALETTE R, LeHARZIC R, HUOT N *et al* 2D calculations of the thermal effects due to femtosecond laser metal interaction [J]. *Applied Surface Science*, 2005 247(1~4): 238~242

[3] CORKUM P B, BRUNEL F, SHERMAN N K *et al* Thermal response of metals to Ultrashort Pulse laser excitation [J]. *Phys Rev Lett* 1988 61(25): 2886~2889

[4] WELLERSHOFF S S, HOHLFELD J, GUDDÉ J *et al* The role of electron-phonon coupling in femtosecond laser damage of metals [J]. *Applied Physics* 1999, A69(7): 99~107.

[5] MOTOELLO A, KELLY R. Laser-induced phase explosion: new physical problems when a condensed phase approaches the thermodynamic critical temperature [J]. *Applied Physics* 1999, A69(7): 67~73

[6] KELLY R, MOTOELLO A, MELE A *et al* Gas dynamic effects in the laser pulse sputtering of Al₂O₃: is there evidence for phase explosion [J]. *Applied Surface Science*, 1998 133(4): 251~269

[7] BULGAKOVA N M, BULGAKOV A V. Pulsed laser ablation of solids: transition from normal vaporization to phase explosion [J]. *Applied Physics* 2001, 73(2): 199~208

[8] CHEN JK, BERAUN JE. Modeling of ultrashort laser ablation of gold films in vacuum [J]. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics* 2003 5(3): 168~173.

[9] MARTYNYUK M M. Critical constants of metals [J]. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 1983, 57(4): 494~500

[10] LU Y Q, ZHANG J, LIANG W X. Interaction of femtosecond laser pulses with metal photocathode [J]. *Chinese Physics* 2005 14(8): 1671~1675

[4] CHEN Q H. Laser beam interactions and thermal simulation with materials [M]. Kunming Yunnan Science and Technology Publishing Company, 1999. 136~141 (in Chinese).

[5] SUN Ch W. The effect of laser irradiation [M]. Changsha National Defence Science and Technology University Publishing Company 1990 55~67 (in Chinese).

[6] von ALIMEN M. Laser beam interaction with materials [M]. Berlin Springer Verlag 1987. 121~129

[7] LIU J T. Numerical solution of the partial difference equation [M]. Changsha National Defence Science and Technology University Press 1990 113~121 (in Chinese).

[8] TAN H Q. Project of C program [M]. Beijing Tsinghua University Press 1991 99~107 (in Chinese).

[9] RAVI VISHNU P, LIW B, EASTERLING K E. Heat flow model for pulsed welding [J]. *Materials Science and Technology*, 1991(7): 649~659

[10] NARAYANA L, BROWN W L, LEMONS R A. Laser solid interactions and transient thermal processing of materials [M]. New York North Holland Publishing Company, 1983 113~119

[11] DOBREV T, PHAM D T, DIMOV S S A simulation model for crater formation in laser milling [D]. Cardiff Cardiff University, 2003. 124~131.