

文章编号: 1001-3806(2007)06-0578-03

## 飞秒激光烧蚀金属镍热影响区的数值模拟

王志军, 贾 威\*, 倪晓昌, 彭志农, 杨 丽, 王清月

(天津大学 精密仪器与光电子工程学院 超快激光研究室, 天津 300072)

**摘要:** 为了定量分析飞秒激光金属加工中的热影响, 基于一个二维的双温模型, 采用有限差分法计算了飞秒激光烧蚀金属镍的径向热影响区。提出一种飞秒激光烧蚀热影响区定义, 把热影响区定义为两部分, 一部分是熔化再凝固区(晶格温度介于相爆炸温度和熔化温度之间的区域), 另一部分是热激活区(晶格温度介于熔化温度和热激活温度之间的区域)。通过研究表层晶格不同时刻的径向温度分布, 得到飞秒激光烧蚀 500nm 厚金属镍的径向热影响区是 160nm。结果表明, 飞秒激光加工的热影响区非常小, 可以实现对金属材料超精密加工。并分析了电子热导率和电子比热容对径向热影响区的影响。

**关键词:** 超快光学; 热影响区; 有限差分; 双温模型

**中图分类号:** TG 156.99 **文献标识码:** A

### Numerical Simulation of the heat affected zone of Nickel ablated with femtosecond laser

WANG Zhi-jun, JIA Wei, NI Xiao-chang, PENG Zhi-nong, YANG Li, WANG Ching-yue

(Ultrafast Laser Laboratory, School of Precision Instruments and Optoelectronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

**Abstract:** In order to quantify the heat affected zone (HAZ) of femtosecond machining Based on a two-dimensional model of the two temperature model (TIM), the radial heat affected zone of femtosecond laser ablation on nickel was simulated numerically with finite-difference method. The radial HAZ was defined as two parts, one was the melting and resolidification zone (between melting temperature and phase explosion temperature) and the other was thermal activation zone (between thermal activation temperature and melting temperature). The evolution of the temperature as a function of time was studied, leading to a radial HAZ width of 160nm for 500nm thick Ni samples, which showed that the heat affected zone of femtosecond machining is very small. Besides, the effects of the thermal conductivity and the specific heat of the electron on the radial HAZ were analyzed.

**Key words:** ultrafast optics; heat affected zone; finite-difference; two temperature model

## 引 言

飞秒激光脉冲宽度极短, 峰值功率极高, 与金属材料相互作用时, 首先电子吸收激光能量, 在极短的时间内, 达到极高的温度, 而此时晶格还处于“冷”状态, 通过电子-晶格碰撞, 电子将热量传递给晶格, 晶格温度迅速升高, 达到烧蚀温度后喷发出去。整个烧蚀过程在几个到几十个皮秒内完成, 在这么短的时间内, 晶格的热传导是非常有限的。因此, 飞秒激光微加工的热影响区比较小, 一般情况下, 不考虑热影响区。

基金项目: 天津市科技发展计划资助项目 (043103911); 总装精密加工技术国防科技重点实验室基金资助项目 (51464010205JW 14)

作者简介: 王志军 (1982-), 男, 硕士研究生, 主要从事飞秒激光微加工方面的研究。

\* 通讯联系人。E-mail: jia w @ tju . edu . cn

收稿日期: 2006-09-19; 收到修改稿日期: 2006-12-07

但是随着研究的深入, 人们开始考虑飞秒激光加工的热效应, 例如: LE HARZIC 利用透射电子显微镜研究了金属铝的热影响区<sup>[1]</sup>; VALETTE 采用二维双温模型计算了铝的热影响区<sup>[2]</sup>。激光加工热影响区的研究对探索最佳的飞秒激光加工工艺是至关重要的, 但这方面的报道还很少。

镍是一种良好的抗氧化性和抗腐蚀性材料, 强度和塑性也很好, 可以用来制不锈钢和其他抗腐蚀性合金, 还可用作加氢催化剂, 有着广泛的应用前景。因此, 作者采用二维双温模型<sup>[3]</sup>来模拟飞秒激光烧蚀金属镍的过程, 采用有限差分法通过分析表层晶格在径向的温度分布, 得出飞秒激光烧蚀金属镍的热影响区范围, 并分析了材料的特征参数对径向热影响区的作用, 以此作为制定飞秒激光加工金属工艺的依据。

## 1 理论模型

双温模型 (two-temperature model, TIM) 是把电子

和晶格作为两个系统来进行分析。利用二维的双温模型可分析超短激光脉冲烧蚀金属的径向热量扩散<sup>[3,4]</sup>,从而求得径向热影响区的范围。方程如下:

$$q_{ve}(T_e) \frac{\partial}{\partial t} T_e = \nabla (\kappa_e \nabla T_e) - g(T_e - T_l) + S(z, r, t) \quad (1)$$

$$q_{vl} \frac{\partial}{\partial t} T_l = g(T_e - T_l) \quad (2)$$

$$S(z, r, t) = \begin{cases} F_{abs} \frac{1}{\lambda_0} \frac{\exp(-z/\lambda_0)}{1 - \exp(-d/\lambda_0)} \frac{1}{\pi \frac{d}{2}} \times \exp[-\ln(2) \frac{t^2}{\tau_0^2}], & (0 < r \leq r_0) \\ 0, & (r > r_0) \end{cases} \quad (3)$$

式中,  $T_e, T_l$  为电子和晶格系统的温度,  $q_{ve}(T_e), q_{vl}$  为电子及晶格系统的定容比热容,  $\kappa_e$  为电子系统的热导率,  $g$  为电子与晶格耦合常数,  $S(z, r, t)$  为与激光脉冲相对应的热源项。

在模型中,热源项采用了一个时域和轴向上呈高斯分布的平顶脉冲,其中  $d$  为样本的厚度,  $z$  为轴向,  $F_{abs}$  为吸收的激光能流密度 ( $\text{mJ}/\text{cm}^2$ ),  $\lambda_0$  为激光吸收深度,  $\tau_0$  为脉冲宽度,  $r_0$  为焦点半径。

一维模型只能模拟激光入射方向的温度场分布情况,而激光入射方向的样品结构变化在显微镜观察上有困难,不容易进行实验分析,因此,作者在一维的基础上,开发了二维双温模型计算程序,进行飞秒激光加工金属镍的径向温度场分布的计算机模拟,以分析径向热影响区。

### 2 计算结果与分析

对于飞秒激光,材料的去除主要是由相爆炸引起的<sup>[15~17]</sup>。在模拟中,只要该点晶格的温度达到  $0.9T_{cr}$ <sup>[18]</sup>,就认为该点发生烧蚀,材料以气相喷出,因此,作者认为文献[2]中将晶格温度介于  $T_a$  和  $T_m$  之间的区域定义为热影响区范围,这只是熔化的热影响区;只有晶格温度高于相爆炸温度 ( $0.9T_{cr}$ ) 时,金属材料才发生材料的去除。所以,提出一种飞秒激光烧蚀热影响区定义,将其分为两个部分:一部分是熔化再凝固区 (melting and resolidification zone, MRZ),这部分是晶格温度介于熔化温度 ( $T_m$ ) 和相爆炸温度 ( $0.9T_{cr}$ ) 之间的区域,即材料出现熔化却没有被烧蚀的部分;另一部分是热激活区 (thermal activation zone, TAZ),这部分是晶格温度介于热激活温度 ( $T_a$ ) 和熔化温度 ( $T_m$ ) 之间的区域<sup>[2]</sup>,这里的材料没有发生熔化,但在该温度范围内材料处于热激活状态,可能出现晶粒长大等微观结构变化。

参数为<sup>[12,9,10]</sup>:  $q_{ve} = c_e T_e, c_e = 1065 \text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$ ,

$\kappa_e = \kappa_{e0} T_e / T_i, \kappa_{e0} = 9 \text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}, g = 36 \times 10^{16} \text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}, q_{vl} = 4.1 \times 10^6 \text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}, F_{abs} = 48.88 \text{mJ}/\text{cm}^2, \lambda_0 = 3.13 \text{nm}, d = 500 \text{nm}, \tau_0 = 150 \text{fs}, r_0 = 10 \mu\text{m}, T_{cr} = 7810 \text{K}, T_m = 1728 \text{K}, T_a = 0.4 T_m$ 。

本模型用有限差分法进行数值求解,电子晶格的初始温度都是室温 300K,用 500nm 厚的镍片基本可以保证下表面的温度在烧蚀过程中基本保持室温,因此,也可以认为材料是纵向无限厚。

计算得到的表层电子和晶格的温度随时间的变化如图 1 所示。计算结果表明,在脉冲作用期间,电子吸

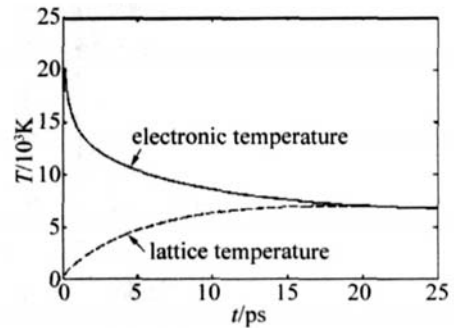


Fig 1 Variation of surface electronic temperature and lattice temperature with time

收能量,温度迅速上升,而晶格温度几乎没有变化,当脉冲结束后,晶格与电子耦合,温度迅速上升,经过 20ps 电子和晶格温度达到平衡,当激光能流密度足够大的情况下,电子与晶格平衡温度大于临界温度,发生烧蚀。

表层晶格在不同时刻的径向温度分布曲线如图 2 所示,  $T_m$  温度以上直至  $0.9T_{cr}$  为熔化再凝固区 (MRZ)

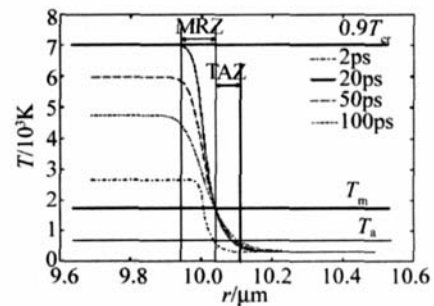


Fig 2 The radial lattice temperature in the surface at different time

约为 90nm,而  $T_a$  温度以上直至  $T_m$  为热激活区 (TAZ) 约为 70nm,总的热影响区 160nm,也就是飞秒加工金属的热影响区在纳米量级。文献[2]中模拟的是金属铝,不过它只计算了热激活区,大约 220nm,为什么 Al 和 Ni 会有这样的差距呢,这是因为热影响区是这样形成的:在烧蚀区域边界处,电子热传导使得烧蚀区域周围的电子先得到能量,使得电子温度升高,然后电子跟周围的晶格耦合,使得晶格的温度升高,从而在径向产生晶格的温度梯度,形成热影响区。

从表 1 可以看出, Ni 和 Al 的电子晶格耦合系数

Table 1 The parameters of Ni and Al<sup>[2,10]</sup>

	$\kappa_{e0}/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K} \cdot ^{-1})$	$c_e' / (\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$	$g / (\text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_{v1} / (\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1})$
Ni	91	1065	$36 \times 10^{16}$	$4.1 \times 10^6$
Al	238	135	$56.9 \times 10^{16}$	$2.43 \times 10^6$

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] Le HARZIC R, HUOTN, AUDOUARD E *et al* Comparison of heat-affected zones due to nanosecond and femtosecond laser pulses using transmission electronic microscopy [J]. A P L, 2002, 80 (21): 3886~3888.

[2] VALETTE R, Le HARZIC R, HUOTN *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, GUDDE J *et al* The role of electron-phonon coupling in femtosecond laser damage of metals [J]. Appl Phys, 1999, A69 (7): 99~107.

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

[6] KELLY R, MDTELO A, MELE A *et al* Gas-dynamic effects in the laser-pulse sputtering of AN: 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]. Appl Phys, 2001, A73 (2): 199~208.

[8] CHEN J K, BERAUN J E. 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] MARTYN YUK M M. Critical constants of metals [J]. Russian Journal of Physical Chemistry, 1983, 57 (4): 494~500.

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

(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52μm,深度为4.9μm。这个模拟结果和 DOBREV 等人实验的结论<sup>[11]</sup>(直径49μm,深度4.65μm)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 multigrid 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).

[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 ALLMEN M. Laser-beam interactions with materials [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1987. 121~129.

[7] LU 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] NARA YANA 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, DMOV S S A. simulation model for crater formation in laser milling [D]. Cardiff: Cardiff University, 2003. 124~131.