

[研究·设计]

DOI:10.3969/j.issn.1005-2895.2020.03.007

# 超短激光与金属材料作用时的热效应

范米, 王媛, 程小劲\*

(上海工程技术大学机械与汽车工程学院, 上海 201620)

**摘要:**为了探究皮秒和飞秒激光在金属材料加工和表面处理方面的应用,课题组以金、铜、铬3种金属为研究对象,借助有限元软件,从热传导双温方程出发,研究不同脉冲宽度激光作用于金属材料时的热产生和热积累,从理论上确立不同激光参数时被加工材料表面的电子和晶格温度分布规律。分析结果表明,激光的脉冲宽度会影响材料电子温度的峰值大小与电子晶格耦合的时间长短,在相同的脉冲能量下,脉冲宽度越窄,电子温度最高值越高,电子晶格温度达到平衡的时间越短;热力学模型的准确性与激光脉冲宽度密切相关,当激光脉冲宽度大于10 ps时,单温和双温模型均可描述激光作用到材料的热效应,但当激光脉冲宽度小于10 ps时,则需要采用双温模型来描述。

**关键词:**超短激光脉冲;热效应;有限元;双温方程

中图分类号:O436;TH140.7 文献标志码:A 文章编号:1005-2895(2020)03-0033-05

## Thermodynamic Effects of Ultrashort Laser Pulses Acting on Metal Materials

FAN Mi, WANG Yuan, CHENG Xiaojin\*

(School of Mechanical and Automotive Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai 201620, China)

**Abstract:** In order to explore the application of picosecond and femtosecond laser in metal material processing and surface treatment, based on the heat conduction equation and finite element software, the thermal generation and accumulation of different pulse widths and pulsed energy laser irradiation on Au, Cu and Cr were studied. The results show that the laser pulse width will affect the peak value of the electron temperature and the time of the electron lattice coupling. With the same pulse energy, the narrower the pulse width is, the higher the maximum value of electron temperature is, and the shorter the time of reaching equilibrium of electron lattice temperature is. The accuracy of the thermodynamic model is closely related to the laser pulse width. When the laser pulse width is greater than 10 ps, the single temperature and double temperature model can describe the thermal effect of laser on materials, but when the laser pulse width is less than 10 ps, the double temperature model is needed to describe.

**Keywords:** ultrashort pulse laser; thermal effect; finite element; double temperature equation

金属材料的高硬度和高耐磨性等特点使得采用传统的接触式加工方式时刀具磨损较为严重。激光加工属于非接触式加工,不会引入接触应力,从而避免了刀具磨损等问题,纳秒激光加工主要是利用激光的热效应来实现被加工材料的去除,因此在加工过程中的热控制直接决定了加工的质量,近些年,随着皮秒、飞秒激光光源的日益成熟,超快激光加工成为激光加工领

域的研究热点。

LIU Xila 和 HORVATHC 等在上世纪 90 年代就开展了关于飞秒激光与物质烧蚀效应的研究<sup>[1-2]</sup>。Jiang L 等以金为研究对象,对双温方程的准确性进行了初步研究,通过量化双温方程中的光学和热学参数,准确的预测了金的烧蚀阈值和加工深度<sup>[3]1167,[4]</sup>。在国内,张伟等对飞秒激光作用到镍基合金时的损伤机制和阈

收稿日期:2019-10-28;修回日期:2020-01-20

基金项目:国家自然科学基金青年基金项目(11604205);上海工程技术大学研究生创新项目(18KY0112)。

第一作者简介:范米(1994),男,四川内江人,硕士研究生,主要研究方向为激光与物质的相互作用。通信作者:程小劲(1978),男,安徽怀宁人,博士,副研究员,主要研究方向为高功率固体激光器及其相关技术。E-mail:xjcheng@sues.edu.cn

值进行了研究<sup>[5]</sup>;李舒畅则对飞秒激光辐照金属材料诱导产生的电子发射开展了详细的研究<sup>[6]</sup>。

相较于纳米激光加工,皮秒和飞秒激光加工的热影响和热缺陷较少,因此加工质量也有所提高。但即便采用皮秒或飞秒激光加工,仍有可能因为激光参数的选取不当造成材料表面的热累积,从而影响材料的加工质量。因此课题组以金、铜、铬为研究对象,借助有限元软件,从热传导方程出发,研究不同脉冲宽度和脉冲能量激光作用到复合材料上时的热产生和热积累,从而从理论上确立不同激光参数对加工质量的影响规律。

### 1 热传导方程

图1所示为激光作用到金属材料的示意图。当激光作用到被加工材料后,随着辐照时间的增加,材料表面和内部的温度会升高。当激光脉冲为纳秒量级时,传统的傅里叶热传导方程已被研究人员证实能较为准确的描述被加工材料的热问题<sup>[7]</sup>。当激光脉冲宽度降到皮秒甚至飞秒量级后,由于激光加工材料过程中电子和晶格之间的能量转移时间小于脉冲激光加工靶材的时间,因此传统的热力学模型已经不能准确的描述加工过程中热的产生和传导,研究人员采用了双温模型、流体力学模型以及分子动力学模型等多种物理模型来试图描述超短激光作用到被加工材料后的热力学特性<sup>[8-10]</sup>。其中经典的双温模型方程如下<sup>[3]1168,[11]</sup>:

$$\left. \begin{aligned} C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( K_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) - G(T_e - T_l) + S(x, t); \\ C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} &= G(T_e - T_l)。 \end{aligned} \right\} (1)$$

式中: $T_e, T_l$ 分别表示电子与晶格系统的温度; $C_e, C_l$ 则表示电子与晶格单位体积的比热容; $K_e$ 为电子热导率; $G$ 是电子与晶格之间的耦合参数。

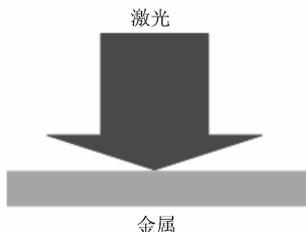


图1 激光作用于金属材料

Figure 1 Laser acting on metal materials

双温模型将激光照射时材料的热行为分为3个阶段:电子受激吸收激光的能量,从而摆脱束缚状态;电子通过退相、散射等过程达到一个准平衡状态;热电子通过与晶格耦合,进一步将能量转移给晶格。

$S(x, t)$ 为激光光源强度分布,当激光热源强度为高斯分布时<sup>[12]</sup>有:

$$S(x, t) = \sqrt{\frac{\beta I(1-R)}{\pi t_p \alpha}} \exp \left[ -\frac{x}{\alpha} - \beta \left( \frac{t-2t_p}{t_p} \right)^2 \right]。 (2)$$

式中: $R$ 为材料对激光的反射率; $\alpha = 1/\delta$ 为飞秒激光的吸收系数; $I$ 为激光的能量密度; $\beta$ 为常数,这里取值为 $4 \ln 2$ ;  $t_p$ 激光脉冲宽度。

公式(1)中的第1项表示的是电子与电子之间的能量传递的热传导项,第2项表示的是电子与晶格之间的能量传递。

边界条件是热分析是需要考虑的重要因素,假设环境温度为室温(300 K),被加工材料的表面为空气对流冷却。

### 2 热分析结果及讨论

直接求解热传导方程较为复杂,课题组借助COMSOL Multiphysics有限元软件来分析在不同的激光能量密度和脉冲宽度下被加工材料内部的温度变化。利用有限元软件对双温模型进行计算时需要对模型的参数进行合理的假设<sup>[6]</sup>:电子比热容 $C_e$ 与电子温度 $T_e$ 成线性关系;电子热导率与电子和晶格的温度有关;晶格的比热容 $C_l$ 为常数。由于材料的厚度相对于激光束的半径很小,因此可以近似为一维问题。又由于被加工材料为各向同性,因此可忽略材料表面的磨损对结果产生的影响。从公式(1)可以看出,电子热容、晶格热容、电子热导率和电声融合系数是求解双温方程的几个关键参数。研究人员已经对这些参数开展了研究,并取得了有价值的研究成果:Lin等得到了铜电子的热容表达式<sup>[13]</sup>;Anisimov等提出了电子热导率表达式为<sup>[14]</sup>

$$k_e = \chi \frac{(v_e + 0.16)^{5/4} \cdot (v_e^2 + 0.44)v_e}{(v_e^2 + 0.092)^{1/2} \cdot (v_e^2 + \eta v_l)}。 (3)$$

式中: $\chi$ 和 $\eta$ 是常数; $v_l = T_l/T_F, v_e = T_e/T_F$ ,其中, $T_l$ 为晶格温度, $T_F$ 为费米温度。

晶格比热容 $C_l$ <sup>[15]</sup>有:

$$C_l(T_l) = 313.7 + 0.324T_l - 2.687 \times 10^{-4} T_l^2 + 1.257 \times 10^{-7} T_l^3。 (4)$$

综合相关文献,课题组模拟中用到的金、铜和铬的相关参数如表1所示<sup>[16-19]</sup>。

图2所示为脉冲能量0.1 J/cm<sup>2</sup>,脉冲宽度100 fs超快激光辐射金属材料表面后金属电子和晶格温度的变化。从图2可以看出,无论是金、铜还是铬,电子温度都会在短期内快速上升,晶格温度的上升则相对比

较缓慢,但经过一段时间的电子晶格温度融合,电子和晶格温度会达到平衡。对于金,达到平衡的时间约为

13 ps,铜和铬的电声融合系数都比金大,因此达到平衡的时间要短,分别为8和5 ps。

表1 热分析相关参数

Table 1 Parameters in thermal analysis

材料	吸收系数 (800 nm)/ $\mu\text{m}^{-1}$	反射率	电子常温比热容/ ( $\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-2}$ )	晶格比热容 $\times 10^6$ / ( $\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-2}$ )	电声耦合系数 $\times 10^{17}$ / ( $\text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$ )	电子热导率/ ( $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ )
金	60	0.930	68.0	2.50	0.22	315
铜	70	0.610	96.6	3.43	1.00	400
铬	68	0.631	194.0	3.43	4.20	95

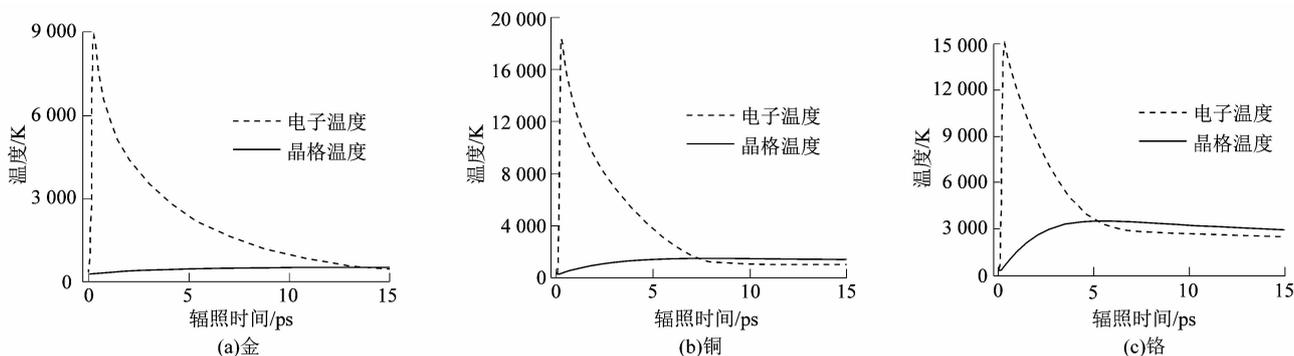


图2 脉冲宽度100 fs且脉冲能量0.1 J/cm<sup>2</sup>时3种金属的电子和晶格温度

Figure 2 Electron and lattice temperature changes of three metals with pulse width of 100 fs and pulse energy of 0.1 J/cm<sup>2</sup>

为了进一步了解电子和晶格温度与激光脉冲的关系,以金为例,分析了脉冲能量为0.1 J/cm<sup>2</sup>时,不同的脉冲宽度下的电子和晶格温度,结果如图3所示。随着脉冲宽度的增加,激光作用到金上的实际时间变长,因此电子和晶格温度达到平衡的时间也变长。

为了研究双温模型和单温模型(传统傅里叶热传导模型)在描述材料热效应方面的差异及适用范围,针对相同激光能量密度(0.1 J/cm<sup>2</sup>)、不同激光脉冲宽度下的双温模型和单温模型下晶格温度的最大值进行多次计算,并将多个结果拟合成一条平滑的曲线。图5所示为拟合后金、铜和铬的晶格温度变化。从图5可以看出,不管是金、铜还是铬,当激光脉冲宽度逐渐增加时,单温方程和双温方程的模拟结果越来越接近,当脉冲宽度达到10 ps时,单温方程和双温方程的计算结果几乎一致。分析结果表明,当激光脉冲宽度较

图4所示为金、铜和铬3种金属的电子温度最高随激光脉冲宽度的变化规律,当脉冲能量为0.1 J/cm<sup>2</sup>,随着脉冲宽度的增加,电子最高温度变小。这是由于在脉冲能量保持不变的情况下,脉冲宽度增加意味着峰值功率的下降,因此最高电子温度会降低。

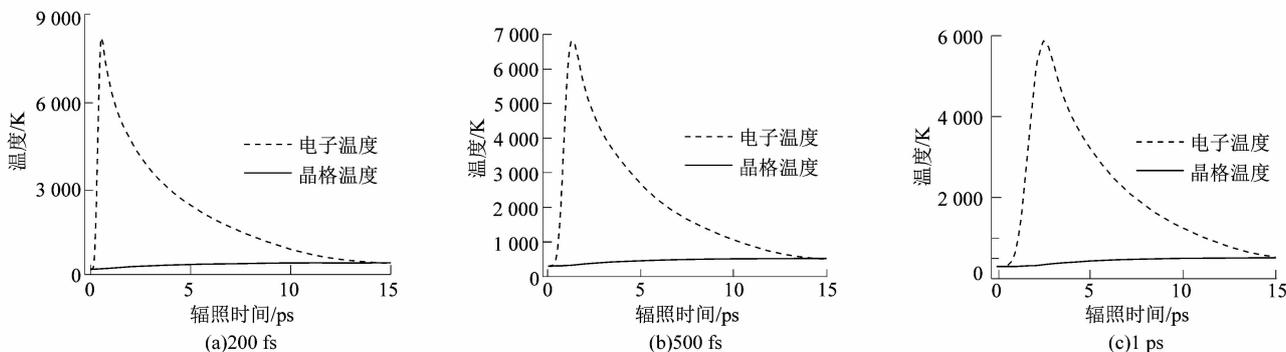


图3 不同脉冲宽度时金的电子和晶格温度

Figure 3 Electron and lattice temperature changes of gold with different pulse width

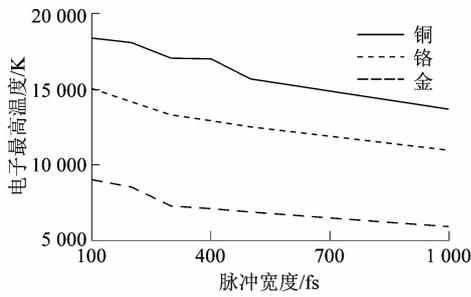


图4 电子最高温度随激光脉冲宽度的变化规律  
Figure 4 Variation of maximum electron temperature with laser pulse width

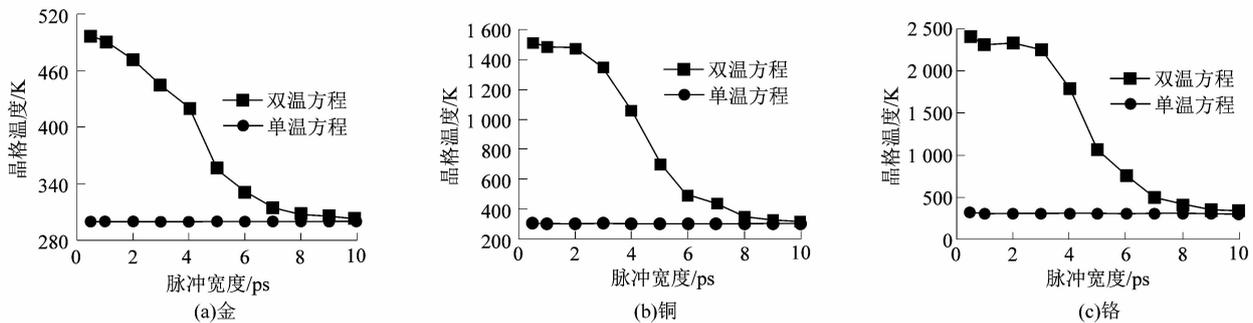


图5 单温方程和双温方程下3种金属的晶格温度最高值的拟合曲线  
Figure 5 Fitting curve of three metals under single and double temperature equations

### 3 结语

在以皮秒和飞秒激光为代表的超短激光加工领域,热积累仍是影响激光加工质量的关键因素。因此,构建准确的超短激光辐照被加工材料的热动力学模型对于评估加工过程中热累积的大小及其可能造成的对加工质量的影响具有重要的作用。课题组以常见的金、铜和铬金属为研究对象,借助有限元软件和双温方程,对不同激光参数作用下的被加工材料的电子和晶格温度进行了详细的研究,取得的主要成果有:当超短激光辐照到金属材料的表面后,金属的电子温度迅速上升到较高的值,而晶格温度则上升的较为缓慢,经过一段时间的电子晶格融合后,电子和晶格温度会达到近似平衡,达到平衡的时间与金属的电声耦合系数和激光的脉冲宽度有关,脉冲宽度越宽,平衡需要花费的时间越长;热力学模型的准确性与激光脉冲宽度密切相关,当激光脉冲宽度大于10 ps时,单温和双温模型均可描述激光作用到材料的热效应,但当激光脉冲宽度小于10 ps时,则需要采用双温模型来描述。课题组研究的成果为超短激光技术在金属材料加工上的应用提供了参考,接下来的工作将通过实验研究对理论计算的结果和热力学模型进行进一步的修正。

宽时( $\geq 10$  ps),激光辐照材料表面的热过程既可以用单温方程描述,又可以用双温方程描述。但当激光脉冲较窄( $< 10$  ps)时,2种模型的分析结果会出现较大差异,这主要是因为单温方程忽略了电子和晶格间的融合。当激光脉冲较宽时,电子和晶格有足够的时间去达到平衡,因此忽略电子晶格温度融合对最终的结果没有影响;但当激光脉冲较窄时,激光的作用时间短,电子和晶格温度无法达到平衡,晶格温度在激光作用一段时间后才缓慢并达到最高值,在如此短的时间间隔内电子与晶格之间的耦合是相当重要的,是不能忽略的,因此必须使用双温模型对其进行研究。

### 参考文献:

- [1] LIU Xila, DU Detao, MOUROU G. Laser ablation and micromachining with ultrashort laser pulses [J]. IEEE Journal of Quantum Electronics, 1997, 33(10): 1706 - 1716.
- [2] HORVATH C, BRAUN A, LIU H, et al. Compact directly diode-pumped femtosecond Nd: glass chirped-pulse-amplification laser system [J]. Optics Letters, 1997, 22(23): 1790 - 1792.
- [3] JIANG L, TSAI H L. Improved two-temperature model and its application in ultrashort laser heating of metal films [J]. Journal of Heat Transfer, 2005, 127(10): 1167 - 1173.
- [4] JIANG L, TSAI H L. Plasma modeling for ultrashort pulse laser ablation of dielectrics [J]. Journal of Applied Physics, 2006, 100(2): 023116.
- [5] 张伟,冯强,程光华,等.飞秒激光对镍基合金的损伤机制和阈值行为[J].光学学报,2014,34(12):340-346.
- [6] 李舒畅.飞秒激光辐照金属的超快电子行为研究[D].长春:吉林大学,2016:31-37.
- [7] 张朋波,秦颖,赵纪军,等.纳秒激光烧蚀铝材料的二维数值模拟[J].物理学报,2010,59(10):7120-7128.
- [8] ANISIMOV S I, KAPELIOVICH B L, PERELMAN T L. Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses [J]. Zhurnal Eksperimental' noi i Teroreticheskoi Fiziki, 1974, 66(2): 776 - 781.

(下转第42页)