

文章编号: 0258-7025(2004)03-0277-04

飞秒、皮秒激光烧蚀金属表面的有限差分热分析

倪晓昌, 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, 光电信息技术科学教育部重点实验室, 天津 300072)

摘要 为描述飞秒激光烧蚀金属表面过程, 对双温方程进行了约化。用有限差分法对飞秒、皮秒脉冲激光在金属表面烧蚀过程的温度场进行了一维数值模拟。分析了在飞秒领域对双温方程约化的合理性。计算模型对电子与光子耦合系数的大小对金属表层电子温度的影响进行了分析, 同时考虑不同脉宽、不同能流及功率密度大小的因素。发现电子与晶格耦合系数影响材料表面电子的温升及电子与晶格温度耦合时间; 与皮秒激光比较, 脉冲功率密度是影响电子最终温度的主要因素; 飞秒激光烧蚀金属材料的厚度可达到表层厚度(吸收系数的倒数)量级。

关键词 激光技术; 有限差分; 飞秒激光加工; 双温模型

中图分类号 TG 156.99 文献标识码 A

Finite Difference Method for Thermal Analysis of Femtosecond-Picosecond Pulse Laser Ablation on Metal Surface

NI Xiao-chang, WANG Qing-yue

(Ultrafast Laser Laboratory, School of Precision Instruments and Optoelectronics Engineering, Key Laboratory of Optoelectronic Information Technical Science, EMC, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract To describe femtosecond laser ablation on metal surface, the double-temperature equation (DTE) was formatted simply. In this paper, numerical simulation for temperature field of femtosecond-picosecond pulse laser ablation on metal surface is performed by finite-difference method (FDM). It is reasonable to make the DTE simple in femtosecond scale. It is also analysed that the effect of electron-lattice couple coefficient g on surface temperature, and found that g determines the surface temperature rising rate and the electron-lattice couple time. Compared with picosecond pulse laser, the intense of pulse is the main factor of the finally temperature of electron. The ablated depth of femtosecond laser can be controlled as thick as the surface depth of metal.

Key words laser technique; finite-difference method; femtosecond laser ablation; double-temperature function

1 引言

随着激光技术的进步, 脉冲激光加热技术得到越来越广泛的应用, 如材料表面的改性、打孔、切割、焊接等。进入二十世纪九十年代后, 飞秒激光及其放大技术获得重大突破, 超短超强激光与物质相互作用的研究受到越来越多研究学者的重视^[1~3]。飞秒激光烧蚀材料就是使激光能量在飞秒时间内注入, 导致材料照射区域温度迅速升高, 因为注入时间

极短, 能量来不及扩散而使很薄的一层材料快速达到气化温度并从材料表面喷出, 实现烧蚀。飞秒激光加工材料具有其自身的优点: 加工出的材料熔融区很小或没有, 具有清晰边缘, 可实现对材料层层微创蚀以及加工尺度可以突破衍射极限(工作波长的一半)等; 另外, 加工对象涉及金属、导体、半导体及高硬度材料^[4~8]。因此, 研究飞秒激光与物质作用时的材料表面温度场变化能进一步了解飞秒激光与物质作用的特性, 为更广泛应用飞秒激光加工技术

收稿日期: 2002-11-07; 收到修改稿日期: 2003-01-21

作者简介: 倪晓昌(1974—), 男, 天津大学精密仪器与光电子工程学院博士研究生, 主要从事飞秒激光应用领域的研究。

E-mail: nixiaochang@tju.edu.cn

万方数据

积累理论经验。

国际上对于这种超短超强激光与物质作用过程的理论分析还不多,国内大多仍局限于对纳秒甚至微秒范围的激光与物质作用的研究^[9]。前苏联学者 S. I. Anisimov 等于 1974 年提出了描述超短激光与金属作用的双温模型^[10]。该模型从一维非稳态热传导方程出发,考虑到超短脉冲有别于长脉冲与物质作用时的机理,对光子与电子及电子与晶格两种不同的相互作用过程,列出了电子与晶格的温度变化微分方程。由于该模型建立在合理的物理分析基础之上,许多学者以该模型为基础进行了大量的实验研究,用双温模型可以给出很好的物理解释^[2,3,11~14]。

本文在上述研究基础上,从双温方程本身入手,采用有限差分法,研究了飞秒激光与物质相互作用时简化双温方程的合理性;同时全面考虑了影响材料表面温度变化的各项因素并对飞秒激光烧蚀材料时的纵向厚度进行了定性研究。

2 模型建立

本模型是考虑材料相对烧蚀层为无限厚,横向无穷大的情况下,加工材料受超短超强矩形脉冲热源扰动情形。

2.1 适用于飞秒激光的双温方程

激光脉冲为飞秒量级时,在脉冲间隔内,电子热传导过程显得十分缓慢^[12],可忽略不计。因此由双温模型^[10],飞秒激光与物质相互作用的双温方程简化为

$$C_e(T_e) \frac{\partial}{\partial t} T_e = -g(T_e - T_i) + A(x, t) \quad (1)$$

$$C_i \frac{\partial}{\partial t} T_i = g(T_e - T_i) \quad (2)$$

其中 T_e, T_i 为电子及晶格系统的温度, $C_e(T_e), C_i$ 为电子及晶格系统的比热, g 为电子与晶格耦合常数, $A(x, t)$ 为与激光脉冲相对应的热源项。

2.2 采用参数

烧蚀材料选为金属铜,其参数为: $C_e(T_e) = 96.6 \text{ J/K} \cdot \text{cm}^3$; $k_e(T_e) = k_0 \cdot T_e/T_i$, $k_0 = 401 \text{ W/mK}$; 脉冲宽度 $t = 300 \text{ fs}, 1000 \text{ fs}$; 单脉冲能量: $35 \text{ nJ}, 60 \text{ nJ}$; 聚焦半径: $27 \mu\text{m}$; $A(x, t) = I(t)(1 - R)\alpha \exp(-\alpha x)$; R 和 α 分别为表面反射率(0.61)及材料的吸收系数(0.07 nm^{-1})。

2.3 计算方法

用有限差分法对双温方程进行数值求解,差分

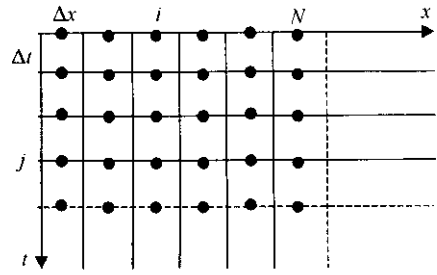


图1 一维有限差分示意图

Fig. 1 Chart of one dimension finite difference method

示意图如图 1,差分采用 FTCS(forward time and central space)全隐格式,迭代法求解。飞秒脉冲作用时双温方程差分表达式为

$$C_e \times \left(\frac{T_{i,j+1}^e - T_{i,j}^e}{\Delta t} \right) = -g \times (T_{i,j+1}^e - T_{i,j+1}^i) + I(1 - R)\alpha e^{-\alpha i \Delta x} \quad (3)$$

$$C_i \times \left(\frac{T_{i,j+1}^i - T_{i,j}^i}{\Delta t} \right) = g \times (T_{i,j+1}^e - T_{i,j+1}^i) \quad (4)$$

整理后得

$$T_{i,j+1}^e = \frac{1}{1 + g\Delta t/C_e} \times \left[T_{i,j}^e + g\Delta t/C_e T_{i,j+1}^i + \frac{I(1 - R)\alpha e^{-\alpha i \Delta x} \Delta t}{C_e} \right] \quad (5)$$

$$T_{i,j+1}^i = \frac{1}{1 + g\Delta t/C_i} (T_{i,j+1}^e + T_{i,j}^i) \quad (6)$$

当 $(j + 1)\Delta t$ 大于脉冲间隔时,(5)式变为

$$T_{i,j+1}^e = \frac{1}{1 + g\Delta t/C_e} (T_{i,j}^e + g\Delta t/C_e T_{i,j+1}^i) \quad (7)$$

初始条件

$$T_{i,0} = T_0 = 300 \text{ K} \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N) \quad (8)$$

边界条件

$$T_{N,j} = 300 \text{ K} \quad (j = 0, 1, 2, 3, \dots, t) \quad (9)$$

3 计算结果与分析

图 2 示出了脉冲能量不变(60 nJ),不同脉冲宽度对表层电子温度的影响。脉冲激光为飞秒时,电子与光子耦合时间基本不变,为 2~3 ps,与文献^[11]结果相吻合,可以用约化的双温方程进行描述。但是,脉宽大于 1 ps 时,耦合时间明显升高,电子温度大大降低。分析认为:脉宽达到皮秒,与电子和光子的耦合时间相当时,双温方程中的传导项不能忽略;在与电子晶格耦合时间量级相当的脉宽作用下,若保证功率密度不变,材料表面一薄层电子温升与短脉冲情形应一致,但由于存在部分热传导,电子温

度终归有所降低。

图 3(a), (b) 给出了脉宽为飞秒时表层电子及晶格的温度随时间变化关系曲线, 单脉冲能量为 60 nJ, 脉宽为 300 fs 时, 不同的电子晶格耦合常数 g 直接影响了电子与晶格耦合的时间, 由图 3(a), (b) 可以看出, 对于金属铜来说, 电子与晶格的耦合时间在皮秒量级, 若 g 为 $1.02 \times 10^{17} \text{ W/m}^3 \text{ K}^{[10]}$, 那么铜的电子晶格耦合时间为 $2 \sim 3 \text{ ps}$, 也就是说, 激光脉冲过后 $\sim 2 \text{ ps}$, 电子晶格温度才达到平衡。图 3(c), (d) 为单脉冲能量取 35 nJ 情形。电子与晶格耦合时间不变, 只是在脉冲结束时电子和晶格所达到的温度有所降低。

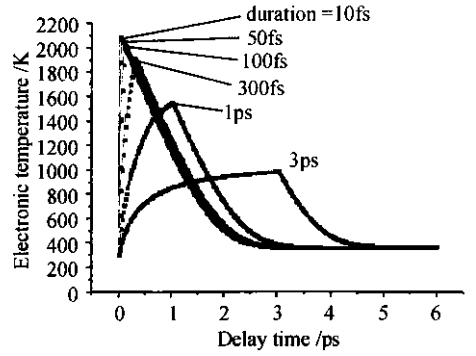


图 2 不同脉宽时表层电子温度与时间的关系
Fig. 2 Relation of surface electrons temperature with time in difference pulse width (F : 2.56 mJ/cm^2)

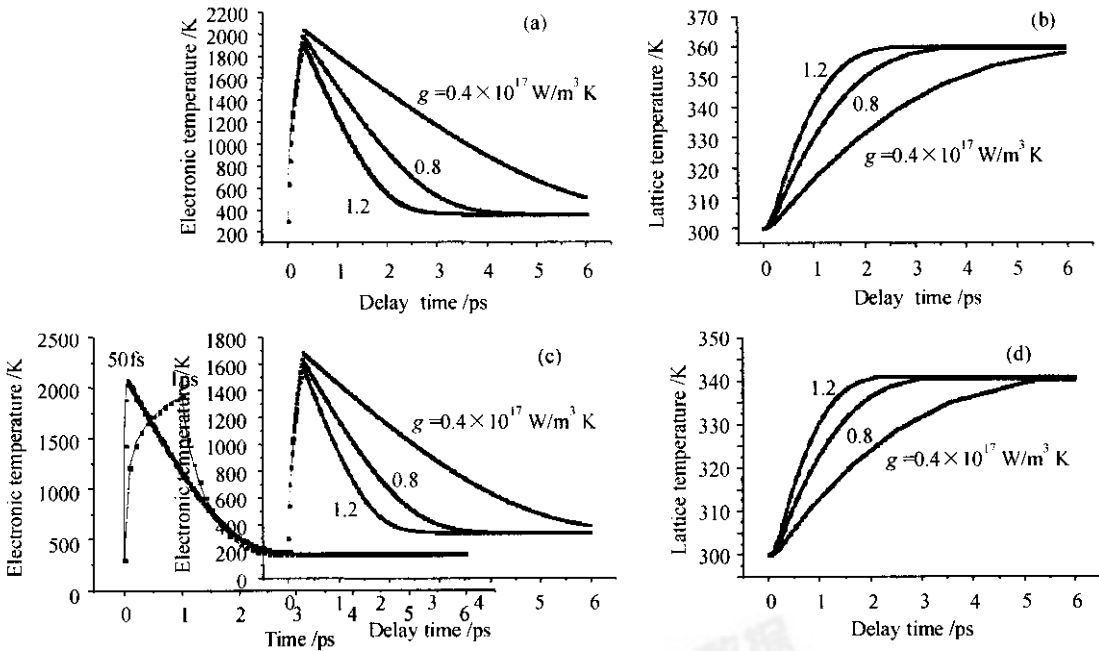


图 3 表层电子温度(a), (c)及表层晶格温度(b), (d)随时间的变化关系
Fig. 3 Relation of surface electrons temperature (a), (c) and surface crystal lattices temperature (b), (d) with time
(a), (b) $F = 2.56 \text{ mJ/cm}^2$, $t = 300 \text{ fs}$; (c), (d) $F = 1.52 \text{ mJ/cm}^2$, $t = 300 \text{ fs}$

图 4 证明了图 2 的分析, 模拟采用 50 fs, 1 ps 两种脉宽, 功率密度: $2.04 \times 10^{10} \text{ W/cm}^2$, 1 ps 时包含传导项, 网格厚度: 4 nm。结果显示两种情况下电子温度接近, 且电子晶格耦合时间约 3 ps。图 5 给出了 1 ps 脉冲结束时, 铜材料内部的电子温度分布情形。发现在前 20 nm 厚度内(接近铜表层厚度: 14 nm(1/0.07)), 电子温度非常接近, 之后, 电子温度成指数规律迅速衰减。表明该脉宽入射时能量主要被表层电子吸收, 如果吸收能量足够高, 只有表层晶格才能迅速与该电子交换能量, 使表层材料达到沸点, 与文献[7]的实验结果接近。

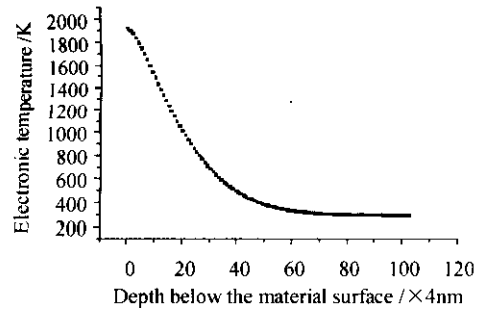


图 4 功率密度相同时, 皮秒、飞秒激光对表层电子温度的影响
Fig. 4 Effect of picosecond and femtosecond laser on surface electrons temperature with same intense (I : $2.04 \times 10^{10} \text{ W/cm}^2$)

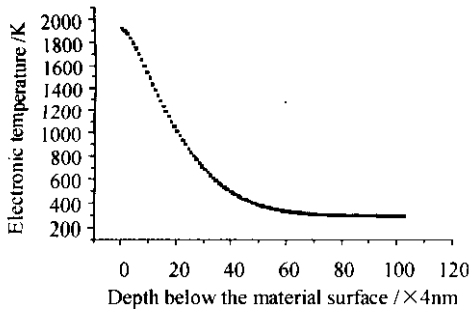


图 5 脉冲结束时,脉冲入射方向材料内部电子温度的分布曲线

Fig. 5 Electronic temperature distributes under the Cu surface in laser incidence forward at the end of pulse

4 结 论

数值模拟了飞秒脉冲与金属铜的相互作用情况,发现电子晶格耦合常数 g 是影响耦合时间的主要参量,耦合时间为 $2\sim 3$ ps;脉宽与耦合时间量级相当或比其大时,双温方程应包含传导项;脉宽低于耦合时间时,脉冲能量主要被表层电子吸收;功率密度的大小直接影响表层电子升温;脉冲能量主要被表层电子吸收。因此,用较小脉冲能量的飞秒激光就可以实现高能量长脉冲对材料的烧蚀,烧蚀厚度可以与表层厚度相当。

参 考 文 献

- 1 P. P. Pronko, S. K. Dutta, J. Squier *et al.*. Machining of sub-micron holes using a femtosecond laser at 800 nm [J]. *Opt. Commun.*, 1995, **114**:106~110
- 2 B. C. Stuart, M. D. Feit, S. Herman *et al.*. Nanosecond-to-femtosecond laser-induced breakdown in dielectrics [J]. *Phys. Rev. B*, 1996, **53**(4):1749~1761

- 3 Shinki Nakamura, Katsumi Midorikawa, Hiroshi Kumagai *et al.*. Effect of pulse duration on ablation characteristics of tetrafluoroethylene-hexafluoropropylene copolymer film using Ti:sapphire laser [J]. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1996, **35**(Part. 1, No. 1A):101~106
- 4 X. Zhu, D. M. Villeneuve, A. Yu. Naumov *et al.*. Experimental study of drilling sub- $10\mu\text{m}$ holes in thin metal foil with femtosecond laser pulses [J]. *Appl. Surf. Sci.*, 1999, **152**:138~148
- 5 Kaoru Minoshima, Andrew M. Kowalevich, Ingmar Hartl *et al.*. Photonic device fabrication in glass by use of nonlinear materials processing with a femtosecond laser oscillator [J]. *Opt. Lett.*, 2001, **26**(19):1516~1518
- 6 Li Cheng-De, Wang Dan-Ling, Luo Le *et al.*. Feasibility of femtosecond laser writing multi-layered bit planes in fused silica for three-dimensional optical data storage [J]. *Chin. Phys. Lett.*, 2001, **18**(4):541~543
- 7 Andreas Ostendorf. Precise structuring using femtosecond lasers [J]. *The Review of Laser Engineering*, 2002, **30**(5):221~225
- 8 Hiroaki Misawa. Functionalization of transparent dielectric materials by femtosecond fabrication with super-resolution [J]. *The Review of Laser Engineering*, 2002, **30**(5):239~243
- 9 Ni Xiaochang, Wang Qing-yue. The femtosecond laser ablation research progress [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2002, **39**(12):4~9
倪晓昌,王清月. 飞秒激光烧蚀研究进展[J]. *激光与光电子学进展*, 2002, **39**(12):4~9
- 10 S. I. Anisimov, B. L. Kapeliovich, T. L. Perelman *et al.*. Electron emission from metal surfaces exposed to ultra-short laser pulses [J]. *Sov. Phys. JETP*, 1974, **39**:375~378
- 11 H. E. Elsayed-Ali, T. B. Norris, M. A. Pessot *et al.*. Time-resolved observation of electron-phonon relaxation in copper [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(12):1212~1215
- 12 B. N. Chichkov, C. Momma, S. Nolte *et al.*. Femtosecond, picosecond and nanosecond laser ablation of solids [J]. *Appl. Phys. A*, 1996, **63**:109~115
- 13 D. Y. Tzou, K. S. Chiu. Temperature-dependent thermal lagging in ultrafast laser heating [J]. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2001, **44**:1725~1734
- 14 J. K. Chen, J. E. Beraun, L. E. Grimes *et al.*. Modeling of femtosecond laser-induced non-equilibrium deformation in metal films [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2002, **39**:3199~3216