

脉冲激光冲击液滴变形和破裂的数值仿真

文洲, 陆健*, 张宏超, 唐懋

南京理工大学理学院, 江苏 南京 210094

摘要 通过建立激光与液滴相互作用的物理模型,采用数值仿真研究了激光冲击液滴形成的速度场对液滴变形和流动的影响规律。使用流体体积法,结合层流模型,确定了变形的主要特征和流动的精确细节。结果表明,液滴变形过程和破裂时间与已报道的实验结果有很好的 consistency。同时,利用 Rayleigh-Taylor 不稳定性分析,确定了液滴形变、破裂时间与韦伯数的依赖关系。当韦伯数低于 110.7 时,液滴向前推进,不会发生整体破碎;韦伯数越高,液滴形变越剧烈,且液滴破裂的碎片越小。另外,液滴破碎后,由于涡量的作用,细小液滴出现自旋、融合、破裂等有趣的现象。

关键词 激光技术; 脉冲激光; 液滴破碎; 表面不稳定性; 流体体积; 极紫外光刻

中图分类号 TN249

文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL202249.2202008

1 引言

液滴破碎是一种常见的自然现象,包含了复杂而有趣的流体力学机理。在过去的十年里,激光与液体的相互作用一直是人们关注的焦点。脉冲激光冲击导致的液滴变形和破裂具有广泛的工业应用^[1-3]。其中重要的应用之一是在极紫外纳米光刻中产生激光等离子体光源^[4]。在这些光源中,纳秒激光脉冲对下落的锡液滴有预成形的作用,随后液滴被第二个激光脉冲电离。为了最大限度地将液态锡转化为等离子体,精确控制第一次激光冲击后的液滴形状和稳定性是至关重要的。当受到冲击的液滴通过表面边缘的加速膨胀或空化而膨胀时,流体首先变形为薄膜。在冲击后的特定时间内,薄膜上会形成孔洞。而这些孔洞会迅速扩张并融合在一起,形成韧带,然后断裂成中性团簇^[5]。这些中性团簇会损坏或覆盖敏感的光学器件和仪器。为了减轻这种损坏,有必要了解液滴对激光脉冲冲击的动态响应。

液滴在固体基体或支柱上的机械冲击破碎已经得到广泛的研究^[6]。在这些冲击下,破碎是由沿径向扩张的液滴边缘的 Rayleigh-Taylor 不稳定性 and Rayleigh-Plateau 不稳定性造成的。对于激光脉冲冲击水滴,其破碎是由多种因素引起的,如爆炸汽化、等离子体气泡形成、电致伸缩力、冲击波的产生、封闭爆炸气体的快速膨胀或声空化^[7-10]。相比之下,当激光脉冲冲击锡液滴或具有高吸收系数的水滴时,激光与

液滴的相互作用仍然局限在一个表面层。局部能量沉积引起相变,使液滴表面产生强烈的反冲压力。对于超短(即飞秒和皮秒)激光脉冲,这种猛烈的反冲压力会引起冲击波的产生、空化和溅射等^[11]。对于纳秒激光脉冲,液滴的这一响应发生在一个比声学时间大得多的时间尺度上,因此认为其是不可压的^[12]。随后,由于反冲压力,液滴向前推进、变形并最终碎裂。

Kurilovich 等^[11,13]采用高速频闪成像技术,实验研究了激光能量沉积诱发液滴推进和变形,通过将毫米大小的水滴染色,测量了液滴推进速度和变形的时间规律,从激光脉冲能量、液滴尺寸和液体性质等方面解释了液滴的推进和变形过程。Gelderblom 等^[14]利用边界积分模拟,将高斯型压力边界条件应用于液滴表面。该方法可以捕捉液滴变形的初始阶段,但是不能用于研究液滴的最终破碎。Hudgins 等^[15]采用 Rayleigh-Taylor 不稳定性分析,确定了锡液滴被皮秒激光脉冲照射后破裂时间与韦伯数的依赖关系,结果表明, Rayleigh-Taylor 不稳定性初始微扰波长与烧蚀深度相当。

激光辐射通过诱导相变推动液滴,进而加速液滴流动,产生大的变形。在不改变液滴初始几何形状的情况下,可以通过改变激光参数,如激光波长、激光能量及其空间分布等,改变激光对冲击液滴的影响。激光冲击导致液滴变形和碎裂的机理尚不明确。其中,脉冲在液滴内的速度分布是影响液滴变形破碎的重要因素,关于这一速度分布的研究鲜有报道。本文主要

收稿日期: 2021-12-06; 修回日期: 2022-02-17; 录用日期: 2022-03-07

基金项目: 国家自然科学基金(11774176)

通信作者: * lujian@mail.njust.edu.cn

研究了激光冲击液滴形成的速度场对液滴变形和流动的影响规律,使用流体体积法确定了变形的主要特征和流动的精确细节。

2 理 论

纳秒激光脉冲对液滴的冲击会引起大规模变形并最终使液体碎裂。激光冲击使球形液滴变成一层薄的液体薄片,随后分解成一组韧带和更小的液滴。在文献[13]中,采用波长为 532 nm、持续时间为 10 ns 的激光,在低于击穿阈值的情况下,冲击半径为 0.9 mm 的高吸收染色水滴。结果表明,液滴加速运动和变形的机制是激光能量被液滴表层吸收引起的局部沸腾。该层的厚度由溶解在液体中的染料浓度和染料在激光波长下的吸收系数决定^[16]。在蒸汽喷出时间尺度(τ_e)下,液滴表层蒸发,并以热学速度(u_e)喷出。同时,产生的反冲压力将液滴加速到质心速度(U)^[13]:

$$U \sim \frac{E_{\text{abs}} - E_{\text{th}}}{\rho R_0^3 \Delta H} u_e, \quad (1)$$

式中: E_{abs} 为吸收能量; E_{th} 为将液体表层温度加热到沸点所需的阈值能量; ΔH 为蒸发的潜热; R_0 为液滴半径; ρ 为液滴密度。也就是说推进速度 U 与吸收能量 E_{abs} 呈线性关系。

液滴膨胀动力学直接受到表面张力的影响,表面张力促进了液滴的缩回和可能的碎裂。描述膨胀的关键参数是韦伯数^[17](Weber number, W_e),它是液滴位移动能与其表面能的比值:

$$W_e = \frac{\rho R_0 U^2}{\gamma}, \quad (2)$$

式中, γ 为液体表面张力。

在进一步讨论之前,有必要明确激光与液滴相互作用这个问题所涉及的过程,其时间尺度具有清晰划分^[14]。持续时间(τ_p)为 $\sim 10^{-8}$ s 的几 mJ 的激光脉冲冲击液滴,导致液滴在 $\tau_e \sim 10^{-5}$ s 的时间范围内发生雾化并定向喷出蒸汽,此过程中出现的反冲压力使液滴加速。随后,液滴在惯性时间(τ_i)尺度上推进、变形,在毛细时间(τ_c)尺度上,变形因表面张力而减慢。

$$\tau_i \sim R_0 / U \sim 10^{-4} \text{ s}, \quad (3)$$

$$\tau_c = (\rho R_0^3 / \gamma)^{1/2} \sim 10^{-3} \text{ s}, \quad (4)$$

$$\tau_p \ll \tau_e < \tau_i < \tau_c. \quad (5)$$

可以看出,激光脉冲持续时间与蒸汽喷出的时间尺度和后续流体动力学响应的的时间尺度是强解耦的。在蒸汽喷出的时间尺度下,因为水的热扩散系数很小,能量不会被传导到液滴的更深一层。由于液相去除深度远小于吸收深度,界面衰退对液滴变形和扩展的影响可以忽略^[18]。在液滴受到脉冲激光冲击后,液滴表层蒸发诱导的反冲压力使液滴加速,进而在液滴内部形成速度场。

液滴受冲击后的加速度为

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \approx -\frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (6)$$

式中: \mathbf{u} 为速度; t 为时间; p 为液滴的表压。假设液滴的流动是不可压缩的,式(6)取散度后有

$$\Delta p = 0. \quad (7)$$

假设此时液滴的形状变化很小,可将该速度场做一阶近似。将式(6)对时间 t 积分,得到压力脉冲作用后的速度场^[14]:

$$\mathbf{u} \approx -\frac{1}{\rho} \nabla \int_0^{\tau_e} p(\tau) d\tau = -\frac{\tau_e}{\rho} \nabla p, \tau_e \leq t \ll \tau_i. \quad (8)$$

如图 1 所示,在以液滴中心为原点的坐标系下,压力脉冲的形状 $f(\theta)$ 是液滴表面($r'/R_0 = 1, \theta$)的边界条件:

$$p(r'/R_0 = 1, \theta) = f(\theta), \quad (9)$$

式中: r' 为极坐标长度; θ 为极角。

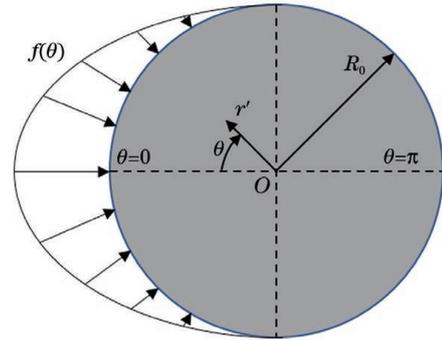


图 1 压力脉冲作用于液滴表面^[14]

Fig. 1 Pressure pulse applied on surface of droplet^[14]

均匀的激光束轮廓会在液滴表面形成余弦形的压力轮廓,即出现束腰半径大于液滴半径的情况:

$$f(\theta) = \frac{3}{2\pi} \cos \theta \times H(\pi/2 - \theta), \quad (10)$$

式中, H 为阶跃函数。用阶跃函数 H 将相互作用限制在激光照明面的一侧。对于中等聚焦的激光,在忽略压力轮廓对 $\cos \theta$ 依赖的情况下,在激光照明面的一侧施加高斯型压力边界条件:

$$f(\theta) = c \exp(-\theta^2 / 2\sigma^2), \quad (11)$$

式中, σ 为束腰半径的度量。利用边界条件求解式(7),可以描述液滴对任何压力脉冲和激光束剖面的响应,且利用式(8)可计算相应的速度场。

综上所述,通过在液滴表面施加反冲压力脉冲,可以模拟激光脉冲与高吸收液滴的相互作用。获得这一关系后,就可以从液滴对相应压力脉冲的响应获得液滴对激光冲击的流体力学响应(推进、膨胀、收缩以及碎裂)。这种方法可以研究液滴对不同形状和焦距的激光脉冲的响应。此外,还可以利用压力脉冲早期在液滴内部形成的速度场预测液滴的变形^[12]。

3 计算方法

通过建立液滴破碎的计算流体力学(CFD)模型,求解质量和能量守恒方程以及 Navier-Stokes 方程,

结合 Hirt 等^[19]的流体体积 (VOF) 法和层流模型, 捕获液体和气体之间的界面, 并分析液滴的界面不稳定性。该方法已经被成功地用于研究激光冲击时的液滴变形^[9], 以及液滴在激波管中的气动破碎^[20-21]。

两相的连续性方程 (不考虑质量源) 为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (12)$$

整个区域内单一的动量方程为

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{\text{vol}}, \quad (13)$$

式中: P 为压强; μ 为动力黏度; \mathbf{g} 为重力加速度; \mathbf{F}_{vol} 为表面张力。由此产生的速度场在相之间共享。

在连续表面张力 (CSF) 模型中, 表面张力 \mathbf{F}_{vol} 被包含在动量方程中。在 CSF 模型中, 体积力的计算方法为

$$\mathbf{F}_{\text{vol}} = \sigma \kappa \nabla \alpha, \quad (14)$$

式中: σ 是表面张力系数; κ 是界面曲率, 由界面单位法向量的散度定义; α 为体积分数, 定义为单个网格内的液体体积与这个网格总体积的比值。其中, $\alpha = 0$ 对应气相内部的一点, $0 < \alpha < 1$ 对应气液界面的一点, $\alpha = 1$ 对应液相内部的一点。

求解算法采用分离式的压力隐式算子分割算法 (PISO)。压力离散采用预压交错选项方案。由于避免了边界上的插值误差和压力梯度假设, 预压交错选项离散可以得到更精确的结果, 特别适用于具有较强表面张力和高密度比的情形。动量采用二阶迎风格式离散, 体积分数方程的离散采用几何重构方案。

在图 2(a) 所示的计算域内进行二维轴对称仿真, r 表示液滴径向, z 表示液滴轴向。半圆内设置为水, 密度为 998.2 kg/m^3 , 圆心距离左侧压力出口 3 mm ; 其他区域设置为空气, 密度为 1.225 kg/m^3 ; 表面张力系数为 0.073 N/m 。压强和温度分别设置为 101325 Pa

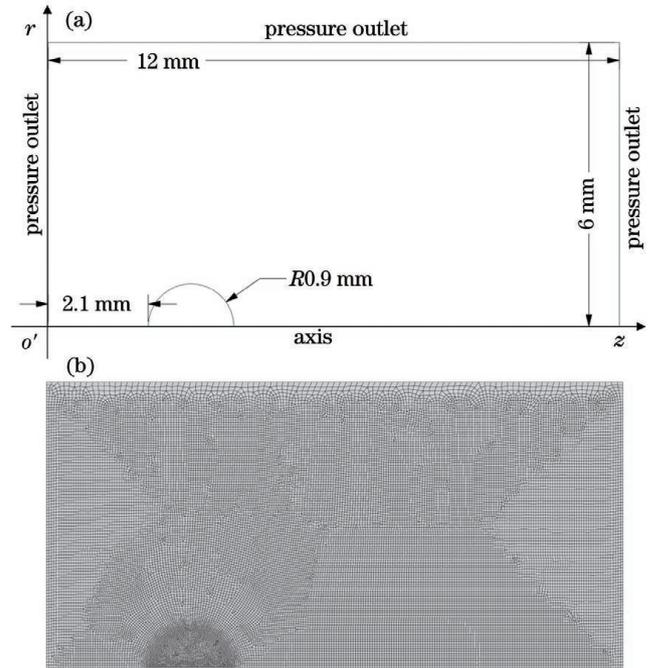


图 2 几何模型。(a) 计算域; (b) 网格划分
Fig. 2 Geometric model. (a) Computational domain; (b) meshing

和 279 K , 时间步长为 $3 \mu\text{s}$, 计算步数为 1000。

激光冲击液滴变形为薄层后, 产生的边缘破裂取决于由激光控制的两个参数: 1) 基于液滴推进速度的韦伯数, 该速度由作用在液滴表面的激光诱导反冲压力决定, 因此取决于激光脉冲能量; 2) 膨胀和推进之间的动能分配, 该参数取决于激光束轮廓。

图 3 所示为两种速度分布云图, 已作了归一化处理。在图 3(a) 中, 假设反冲压力在液滴内部照明面一侧, 速度呈均匀分布。这一速度分布是由液滴圆心右侧 0.6 mm 处半径为 1.3 mm 的圆分割得到的, 即

$$H [(z - 3.6)^2 + r^2 - 1.3^2], \quad (15)$$

式中, z 为液滴质心在轴向上与原点 o' 的距离。

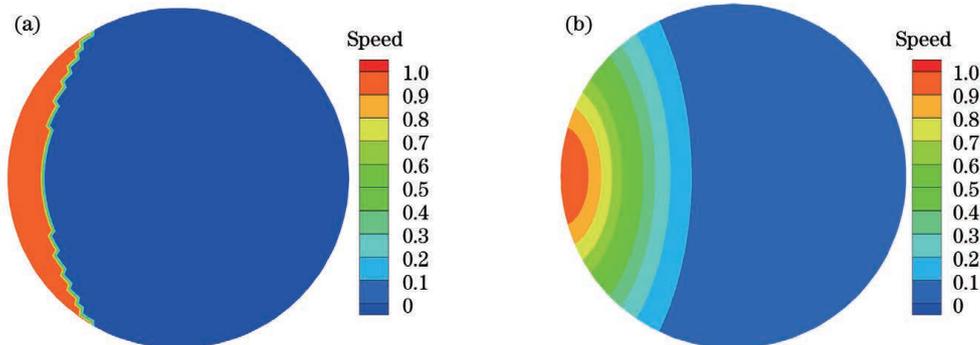


图 3 液滴内部的速度分布。(a) 照明面一侧均匀的速度分布; (b) 高斯型速度分布

Fig. 3 Speed distributions inside droplet. (a) Uniform speed distribution on one side of illuminated surface; (b) Gaussian-type speed distribution

图 3(a) 中液滴内部的锯齿是由网格划分造成的, 暂时忽略其对液滴后续形变破碎的影响, 其中锯齿左侧区域面积占整个液滴面积为 9.7% 。在此条件

下, 进行二维平面模拟, 以验证数值模型的有效性。

然后, 考虑中等聚焦激光的情况, 设置具有高斯空间分布的速度场, 如图 3 (b) 所示。该速度场为

$$u(z, r) = u_0 \exp \left[-(z - z_0)^2 / a^2 - (r - r_0)^2 / b^2 \right], \quad (16)$$

式中： u_0 为液滴内部的最大速度； (z_0, r_0) 为液滴内部最大速度处的坐标； a 和 b 是与激光束腰半径有关的系数，束腰半径的度量 σ 越小， a 和 b 越小， u_0 越大^[14]。

4 分析与讨论

4.1 模型验证

如图 4 所示， Δ 标记的是文献[13]中实验得到的液滴推进速度，与图中实线基本吻合，其中实线由式(1)给出。验证性模拟根据这一推进速度，设定初始速度大小 u 分别为 3、7、11、20 m/s。 ∇ 标记是计算得到的液滴推进速度。从图 4 中来看，恰巧与前两者基本吻合。将基于初始速度 u 计算的液滴变形破裂模

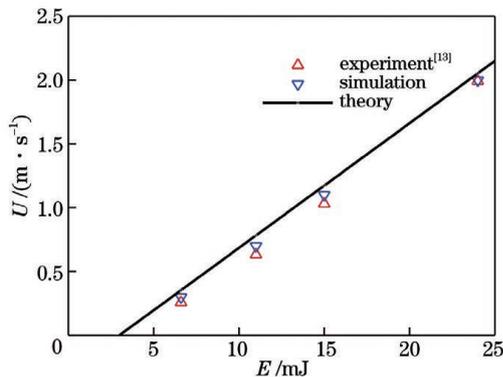


图 4 液滴推进速度随吸收的激光能量的变化

Fig. 4 Droplet propulsion speed versus absorbed laser energy

拟结果与已公布的实验和数值仿真数据进行了比较。在假设得到初始速度分布的情况下，液滴形状的时间演化、流向变形以及前缘位移变化规律与已有的实验和计算结果都有很好的一致性。因此可以判断，建立的模型有效，可以为接下来的研究提供参考。

尽管验证性模拟结果与已有的实验结果基本吻合，但是明显看出前者过于简化。根据前面的理论分析可知，液滴的形变和位移受韦伯数以及激光能量分布的影响。通过在液滴内部设置具有高斯轮廓的初始速度场分布，模型变得更有实际意义。考虑式(11)，当 $\sigma = 0.35$ 时，在计算域中，实际施加的速度场（仅取大小）为

$$u(z, r) = u_0 \times \exp \left[-(z - 2.1)^2 / 0.5^2 - r^2 / 0.9^2 \right], \quad (17)$$

式中， $u_0 = 3, 7, 9, 20$ m/s。根据式(17)给出的速度分布，可以研究韦伯数和激光能量分布对液滴变形和推进的影响规律。为了便于接下来的研究，使用速度 u_0 定义韦伯数，即

$$W_e = \frac{\rho R_0 u_0^2}{\gamma}. \quad (18)$$

因此 $W_e = 110.7, 602.9, 996.6, 4921.6$ 。

4.2 液滴形变过程和破裂时间

图 5 展示了在 $W_e = 4921.6$ 时，液滴由圆形变为薄片状的时间演化过程。可以看出，在 Rayleigh-Taylor 不稳定性的作用下，液滴的轴向厚度随时间逐渐压缩，径向半径随时间逐渐拉伸。在 $t = 450 \mu\text{s}$ 时，液滴边缘变得不稳定，在 $t = 600 \mu\text{s}$ 时，发生边缘破碎。

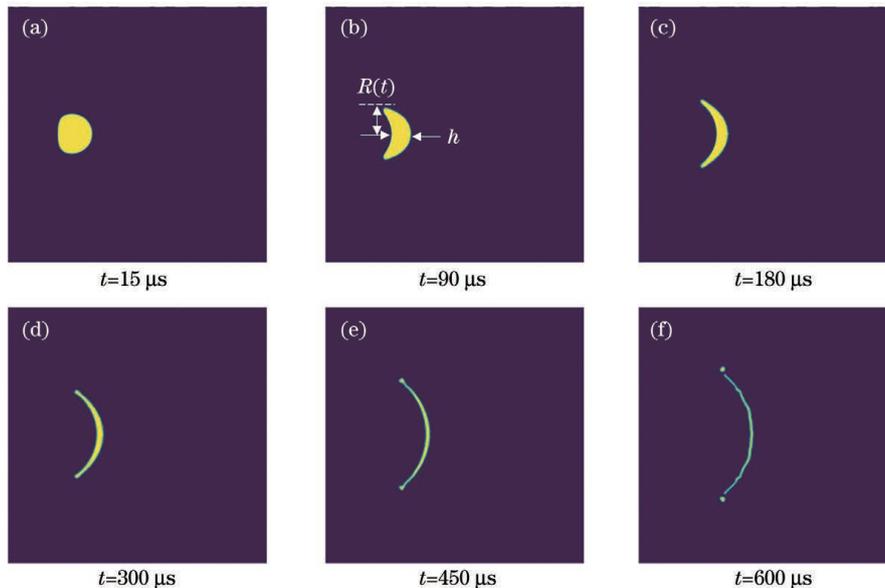


图 5 当 $W_e = 4921.6$ 时液滴形变随时间的演化

Fig. 5 Time evolution of droplet deformation when $W_e = 4921.6$

在其他实验系统中也能观察到类似的现象，例如，水滴冲击固体障碍物，或者冲击波冲击液体薄膜。由于脉冲激光与液滴相互作用的时间极短，且具有一定光束轮廓的激光带来的初始扰动会影响液滴后期的变

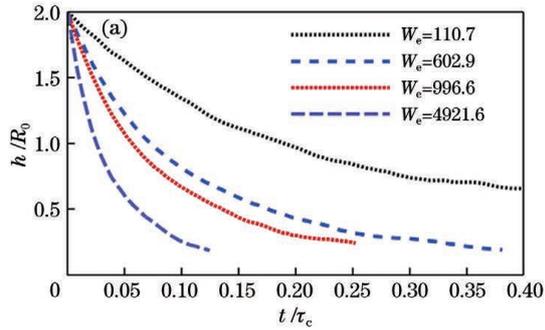
形破碎，因此脉冲激光冲击液滴在以下两方面与其他实验系统不同。一方面，激光冲击液滴加速的时间尺度和随后的变形和破碎的时间尺度有清晰的划分。在液滴撞击固体的过程中，液滴减速和变形都发生在同

一时间尺度上。另一方面,具有一定光束轮廓的激光脉冲冲击,会导致液滴膨胀或破碎,如在膨胀中的液滴薄层上形成孔洞。而在液滴撞击固体的过程中,液滴受到是均匀的冲击。这些差异会对液滴破碎动力学产生重要影响。

在没有摩擦的情况下,对于液滴冲击固体,这种液滴薄层的径向半径对韦伯数平方根的依赖性众所周知的。正如文献[13]中已经表明的那样,它也与激光冲击液滴的实验结果一致。重要的是,这里描述的液滴形变实际上受到流体力学不稳定性影响,最终可能出现破碎,如图 5 所示。另外,轴向厚度 h 和薄层半径 R 是描述液滴变形及边缘和薄层破碎的重要参数。采用与 Villermaux 等^[6] 相同的方法来描述空气动力效应导致的液滴形变破碎:

$$\frac{R(t) - R_0}{R_0} \sim \sqrt{W_e} \frac{t}{\tau_c} \left(1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{t}{\tau_c} \right)^2 \quad (19)$$

液滴的轴向厚度 h 用质量守恒和式(16)中的薄层半径近似为



$$\frac{h}{R_0} \sim \left(\frac{R}{R_0} \right)^{-2} \quad (20)$$

图 6(a) 给出了液滴的轴向厚度 h 随时间的演化,其截止时间为液滴边缘破碎的时间。另外,当 $W_e = 110.7$ 时,液滴向前推进,厚度压缩变缓。与高韦伯数下的情况不同,液滴没有发生类似的整体性破碎,而是出现了由边缘反包挤压引起的小型射流。这是由于其初始动量相对较小,近轴的动量相对于离轴的动量更难推动液滴前进。薄层半径 R 随时间的演变如图 6(b) 所示,其中虚线是数值模拟的结果,实线是根据式(19)得到的理论预测结果,其系数为 0.25。可见,模拟结果与理论预测结果基本吻合。质心位移 Z 随时间的演变如图 6(c) 所示。由于将液滴轮廓轴向坐标的平均值定义为质心位移,质心位移 Z 随时间的变化曲线出现了小幅振荡。对曲线作一阶线性拟合,可以得到质心的速度 $U = a_1 R_0 / \tau_c$,其中 a_1 为拟合系数。质心的速度已在图 6(c) 中标出。

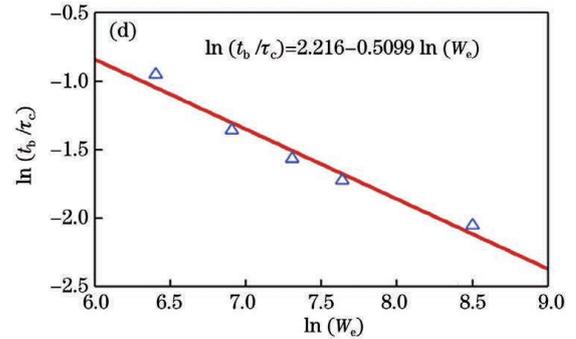
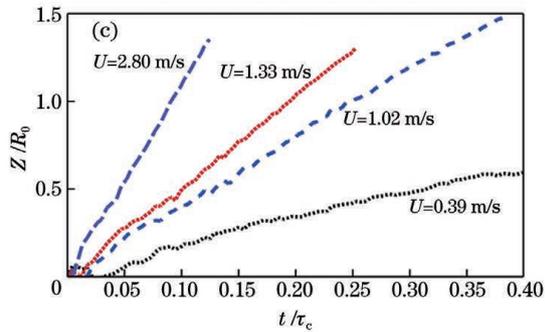
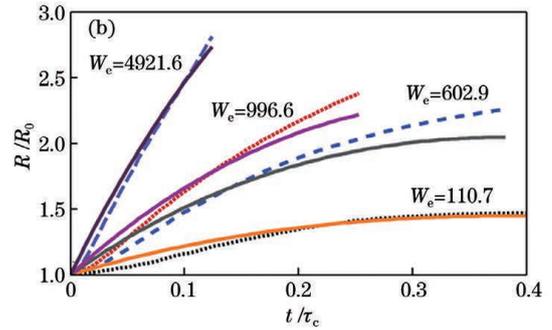


图 6 液滴形变参数随时间的演变。(a) h ; (b) R (虚线是模拟结果,实线是理论预测结果); (c) Z ; (d) 破裂时间与韦伯数的关系
Fig. 6 Droplet deformation parameters versus time. (a) h ; (b) R (simulation results are shown by dashed lines and theoretical prediction results are shown by solid lines); (c) Z ; (d) relationship between rupture time and Weber number

Hudgins 等^[15] 采用了与 Bremond 等^[22] 的类似方法,推导出了液滴破碎的时间与韦伯数的关系:

$$t_b / \tau_c \sim W_e^{-1/2} \quad (21)$$

式中, t_b 为液滴破碎时间。对数化后式(21)变为

$$\ln(t_b / \tau_c) = -\frac{1}{2} \ln W_e + b' \quad (22)$$

式中, b' 为与初始扰动相关的量。

图 6(d) 给出了在不同韦伯数下液滴的破裂时间,三角形表示模拟结果,实线表示线性拟合的结果。

图 6(d) 中给出了液滴破碎时间与韦伯数的关系式,其结果与理论式相符。

通过在液滴内部设置高斯型初始速度分布,得到了液滴形变参数的时间演化及破裂时间与韦伯数的关系,这些可以用已有的理论模型作预测。此外,这一速度分布可用于模拟中等聚焦状态下激光冲击液滴形变的动力学过程。

4.3 液滴碎片的动力学过程

当韦伯数高于 602.9 时,液滴会发生剧烈形变;当

韦伯数达到 4921.6 时,液滴破裂的碎片更小。图 7 给出了不同韦伯数下的液滴薄层破碎图和涡量图。而这些细小碎片在后期的时间演化中,由于涡量的作用,会发生自旋、融合、再次破裂等。值得注意的是,当 $W_e =$

996.6, $t/\tau_c = 0.501$ 时,液滴碎片的形态与 Hudgins 等^[5]给出的 $300 < W_e < 2000$ 时液滴破裂的形态基本吻合,液滴薄层中间形成的碎片相比于边缘形成的碎片更小。

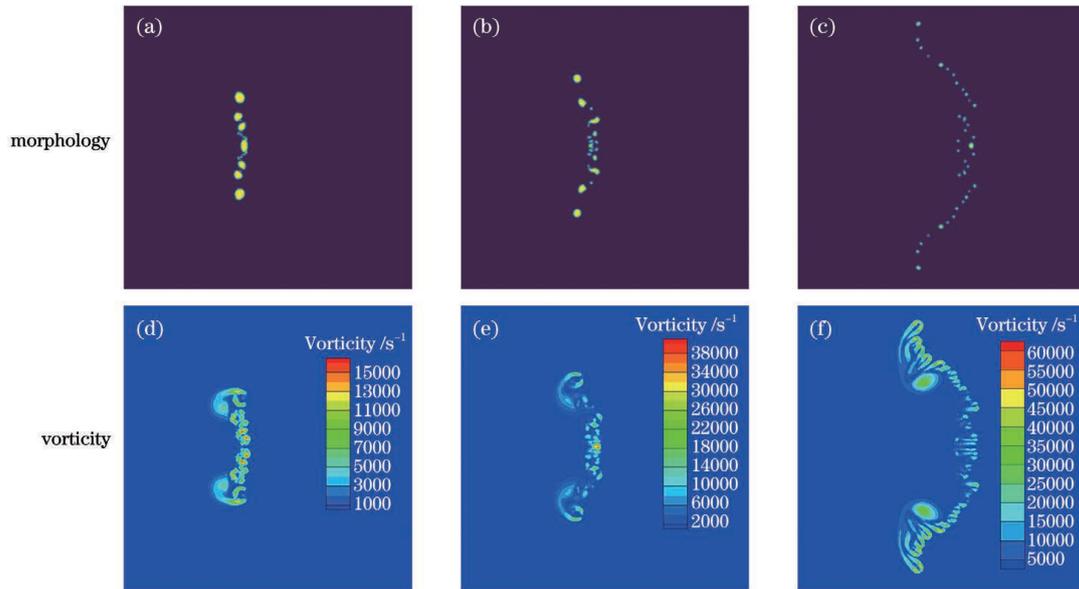


图 7 液滴破碎形态和对应的涡量大小。(a)(d) $t/\tau_c = 0.579$, $W_e = 602.9$; (b)(e) $t/\tau_c = 0.501$, $W_e = 996.6$; (c)(f) $t/\tau_c = 0.334$, $W_e = 4921.6$

Fig. 7 Droplet breakup morphologies and corresponding vorticities. (a)(d) $t/\tau_c = 0.579$, $W_e = 602.9$; (b)(e) $t/\tau_c = 0.501$, $W_e = 996.6$; (c)(f) $t/\tau_c = 0.334$, $W_e = 4921.6$

从图 7 中可以看出,韦伯数同样影响液滴破碎后的过程。韦伯数越大,相应的涡量也越大,液滴破裂形成的碎片越小。

液滴对激光的冲击响应受到激光能量及其空间分布的调制,即受韦伯数和液滴内部的速度分布调制。激光产生的压力冲量带来的液滴初始动量越大,也就是韦伯数越大,液滴形变越剧烈,液滴会在更短时间内形成薄层状,其轴向厚度也越薄,径向膨胀半径越大,且对应的破裂时间越小,向前运动的速度越大。激光与液滴的早期相互作用会影响后期的液滴破碎。激光能量越大,液滴破碎所形成的碎片粒径越小。

5 结 论

研究了由脉冲激光引起的液滴照明面相变导致的液滴碎裂及不同激光能量冲击液滴形成的速度场对液滴变形和推进的影响规律。激光诱导的液滴变形主要取决于激光能量及其分布,而这也会影响液滴的后期破碎。利用 Rayleigh–Taylor 不稳定性分析,得到了液滴形变参数以及破裂时间与韦伯数之间的关系。对激光烧蚀引起的液滴表面加速过程进行了模拟,结果与已报道的实验结果和理论分析结果基本吻合。另外,在高韦伯数下,液滴破裂的碎片更小。而这些细小碎片在后期的时间演化中,由于涡量的作用,会发生自旋、融合、再次破裂等现象。了解这种破裂背后的机制将是未来主要的工作,以便全面描述液滴对激光的冲

击响应。

参 考 文 献

- [1] 常峻巍, 许梦宁, 王頔, 等. 整形飞秒激光脉冲在熔融石英中的成丝控制研究[J]. 光学学报, 2019, 39(1): 0126021. Chang J W, Xu M N, Wang D, et al. Control of filament by shaped femtosecond pulses in fused silica [J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(1): 0126021.
- [2] 刘伟伟, 薛嘉云, 苏强, 等. 超快激光成丝现象研究综述[J]. 中国激光, 2020, 47(5): 0500003. Liu W W, Xue J Y, Su Q, et al. Research progress on ultrafast laser filamentation [J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(5): 0500003.
- [3] 鞠晶晶, 刘建胜, 孙海铁, 等. 飞秒激光人工影响天气的物理机理及研究进展[J]. 中国激光, 2019, 46(5): 0508004. Ju J J, Liu J S, Sun H Y, et al. Physical mechanism and research progress of femtosecond laser based artificial atmospheric modulation [J]. Chinese Journal of Lasers, 2019, 46(5): 0508004.
- [4] Keyser C, Schriever G, Richardson M, et al. Studies of high-repetition-rate laser plasma EUV sources from droplet targets [J]. Applied Physics A, 2003, 77(2): 217-221.
- [5] Hudgins D, Gambino N, Rollinger B, et al. Neutral cluster debris dynamics in droplet-based laser-produced plasma sources [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2016, 49(18): 185205.
- [6] Villermaux E, Bossa B. Drop fragmentation on impact [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2011, 668: 412-435.
- [7] Stan C A, Motomura K, Blaj G, et al. The magnitude and waveform of shock waves induced by X-ray lasers in water [J]. Applied Sciences, 2020, 10(4): 1497.
- [8] Gonzalez Avila S R, Ohl C D. Fragmentation of acoustically levitating droplets by laser-induced cavitation bubbles [J].

- Journal of Fluid Mechanics, 2016, 805: 551-576.
- [9] Wang J Z, Li H C, Guo W L, et al. Rayleigh–Taylor instability of cylindrical water droplet induced by laser-produced cavitation bubble[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2021, 919: A42.
- [10] Stan C A, Willmott P R, Stone H A, et al. Negative pressures and spallation in water drops subjected to nanosecond shock waves[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2016, 7 (11): 2055-2062.
- [11] Kurilovich D, de Faria Pinto T, Torretti F, et al. Expansion dynamics after laser-induced cavitation in liquid tin microdroplets [J]. Physical Review Applied, 2018, 10(5): 054005.
- [12] Reijers S A, Snoeijer J H, Gelderblom H. Droplet deformation by short laser-induced pressure pulses [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2017, 828: 374-394.
- [13] Klein A L, Bouwhuis W, Visser C W, et al. Drop shaping by laser-pulse impact[J]. Physical Review Applied, 2015, 3(4): 044018.
- [14] Gelderblom H, Lhuissier H, Klein A L, et al. Drop deformation by laser-pulse impact [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2016, 794: 676-699.
- [15] Hudgins D, Abhari R S. Rupture time of droplets impacted by a burst of picosecond laser pulses[J]. Physical Review. E, 2019, 99(3): 031102.
- [16] Klein A L, Lohse D, Versluis M, et al. Apparatus to control and visualize the impact of a high-energy laser pulse on a liquid target[J]. The Review of Scientific Instruments, 2017, 88 (9): 095102.
- [17] Klein A L, Kurilovich D, Lhuissier H, et al. Drop fragmentation by laser-pulse impact [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2020, 893: A7.
- [18] Zhao Z Y, Li W Z. Numerical study of nanosecond pulsed laser impact on a water droplet[J]. Physical Review Applied, 2021, 16(1): 014042.
- [19] Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries [J]. Journal of Computational Physics, 1981, 39(1): 201-225.
- [20] Stefanitsis D, Koukouvinis P, Nikolopoulos N, et al. Numerical investigation of the aerodynamic droplet breakup at Mach numbers greater than 1 [J]. Journal of Energy Engineering, 2021, 147(1): 04020077.
- [21] Poplavski S V, Minakov A V, Shebeleva A A, et al. On the interaction of water droplet with a shock wave: experiment and numerical simulation [J]. International Journal of Multiphase Flow, 2020, 127: 103273.
- [22] Bremond N, Villermaux E. Bursting thin liquid films [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2005, 524: 121-130.

Numerical Simulation on Deformation and Rupture of Liquid Droplet Impacted by Pulsed Laser

Wen Zhou, Lu Jian^{*}, Zhang Hongchao, Tang Mao

School of Science, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, Jiangsu, China

Abstract

Objective Droplet fragmentation is a common natural phenomenon. The study on droplet deformation and rupture caused by pulsed laser impact has not only theoretical importance in fluid mechanics but also practical application value in industrial fields. In the field of extreme ultraviolet nanolithography, it is required to understand the dynamic response of droplets to laser pulse impact to optimize the laser-produced plasma light sources. A laser-induced phase change is a method for moving liquids by optical radiation, allowing for large deformations and flow speeds. In this process, the speed distribution generated by the pulse within the droplet is a crucial factor influencing the droplet deformation and fragmentation. However, less attention has been paid to this speed distribution. Here, the effect of speed field formed by laser impacting droplets on droplet deformation and propulsion is mainly studied.

Methods Based on a physical model of the interaction between the laser and the droplet, numerical simulation is employed to investigate the influence of speed fields formed under various laser energies on the droplet deformation and propulsion. Employing the volume of fluid approach, combined with the laminar flow model, the primary characteristics of deformation and the precise details of flow are determined. The pressure implicit with the splitting of operators is employed to solve the problem. The pressure staggering option discretization scheme for pressure is employed. The pressure staggering option discretization gives more accurate findings since interpolation errors and pressure gradient assumptions on boundaries are avoided. For cases with strong surface tension and a high density ratio, this scheme works better. The momentum is discretized by employing the second-order upwind scheme and the volume fraction equation is discretized by the geometric reconstruction scheme. Meanwhile, a Rayleigh–Taylor instability analysis is performed to estimate the dependences of droplet deformation and breakup time on the Weber number. The kinetic process of droplet fragmentation is qualitatively examined.

Results and Discussions In the validation simulations, the obtained droplet propulsion speed are generally consistent with experimental results (Fig. 4). Then, a Gaussian-type initial speed distribution is set up inside the droplet. The time evolution of droplet deformation when $We = 4921.6$ is demonstrated in (Fig. 5). Because of the Rayleigh–Taylor instability, the axial thickness of droplet gradually compresses with time, while the radial radius gradually stretches with time. The laser-induced drop deformation mainly depends on the Weber number. The time evolutions of droplet

deformation parameters (Fig. 6) show the relationship between the rupture time and the Weber number. The thin layer radius and rim rupture time for droplets are in general agreement with theoretical models. The findings reveal that when the Weber number increases, the droplet deformation becomes more severe. A thinner sheet is formed in shorter time with a larger radial expansion radius. Furthermore, the greater the forward motion, the smaller the corresponding rupture time. This speed distribution can be employed to simulate the deformation dynamics of droplet impacted by laser in a moderately focused state. The early-time laser-matter interaction influences late-time fragmentation. The droplet advances without overall fragmentation at a Weber number below 110.7. The higher the Weber number, the greater the corresponding speed in the flow field, the more drastic the droplet deformation, and the smaller the debris formed by droplet rupture (Fig. 7). Additionally, after droplet fragmentation, due to the vortex volume, there are interesting phenomena including spin, fusion, and rupture of fine droplets.

Conclusions In this research, numerical simulation is employed to investigate the influence of speed fields formed under various laser energies on droplet deformation and propulsion. The droplet's response to laser shock is modulated by laser energy and spatial distribution (the Weber number and the speed distribution inside the droplet). Meanwhile, a Rayleigh-Taylor instability analysis is performed to estimate the dependences of droplet deformation and breakup time on the Weber number. The kinetic process of droplet fragmentation is qualitatively examined. Understanding these dynamics is required in the field of droplet target shaping to predict the maximum target surface size before disintegration at given laser parameters.

Key words laser technique; pulsed laser; droplet fragmentation; surface instabilities; volume of fluid; extreme ultraviolet lithography