

纳秒激光烧蚀钛合金微坑形貌的数值模拟分析

王一飞¹, 虞宙², 李康妹^{1,3,4}, 胡俊^{2*}

¹ 东华大学机械工程学院, 上海 201620;

² 东华大学人工智能研究所, 上海 201620;

³ 上海高性能纤维复合材料协同创新中心, 上海 201620;

⁴ 数字化制造装备与技术国家重点实验室, 湖北 武汉 430074

摘要 钛合金微坑边缘的火山口形貌会显著影响干细胞的黏附形态和增殖。本文采用数值模拟方法研究了钛合金烧蚀温度场随时间的演变规律, 分析了表面张力和马兰戈尼效应等因素对烧蚀区速度场的作用, 预测了钛合金微坑的几何尺寸, 通过实验验证了预测模型的可靠性。结果表明: 在重力、浮力、反冲压力和表面张力的作用下, 熔融液滴以最高 0.3 m/s 的速度向烧蚀边缘迁移; 当考虑马兰戈尼效应后, 最高流速达到 14 m/s, 马兰戈尼效应显著影响液相的迁移和表面形貌的形成。熔化、气化、液相迁移、溅射以及凝固是纳秒激光烧蚀钛合金的主要物理过程。随着烧蚀次数的增加, 通过气化去除和迁移的材料体积增加。然而, 随着烧蚀次数的增加, 在烧蚀边缘的水平方向, 因较低的表面张力和反冲压力导致孔径无显著增长。

关键词 激光技术; 激光烧蚀; 钛合金; 微坑; 有限元分析

中图分类号 TN249

文献标志码 A

doi: 10.3788/CJL202249.0802008

1 引言

Ti6Al4V 具有较低的细胞毒性, 已成为骨科和齿科植入物的首选材料。然而, 未经改性的钛合金植入物具有较差的生物活性^[1]。一般认为, 钛合金的表面形貌、表面粗糙度、表面化学和表面润湿性会直接或间接影响骨髓间充质干细胞的黏附、增殖和成骨分化。因此, 国内外专家和学者们提出了喷砂、酸蚀^[2]、机械抛光^[3]和等离子体^[4]等方法, 通过调控表面的物理和化学性质以改善钛合金植入物的骨整合性能。然而, 尽管改性钛合金植入的成功率较高, 仍会出现种植体周围炎、骨质流失等问题^[5]。因此, 市场对具有更好的骨整合以及抗菌性能的植入物具有迫切需求。

最近, 经过短脉冲和超短脉冲激光加工的表面微结构被认为可提高表面的摩擦磨损^[6]和耐腐蚀性能^[7], 更重要的是, 还可以通过微结构刺激干细胞黏

附和增殖^[8]。Luo 等^[9]发现激光诱导的周期性表面微结构(LIPSS)可以促进干细胞的增殖并且防止细菌定植。Purnama 等^[10]使用近红外纳秒激光加工具有链状结构的凹槽, 与宽度分别为 75 μm 和 150 μm 的微沟槽阵列相比, 宽度为 25 μm 的微沟槽可显著促进细胞的黏附、增殖和定向排布。Brånemark 等^[11]对比了激光和机械加工钛植入物的生物力学和组织学反应。结果表明, 激光改性植入物的去除扭矩提高了 250%, 表面微结构和表面氧化层促进了骨-植入物界面的锚定。Dumas 等^[12]使用飞秒激光在钛合金上制备具有微槽和 LIPSS 特征的结构。结果表明, 细胞对凹槽中定向的纳米结构更敏感, 该结构可以使细胞外基质和细胞定向排布。

特别地, 在钛合金的纳秒激光烧蚀过程中, 烧蚀微坑和微沟槽的边缘会形成火山口形貌。与未经激光改性的磨削表面相比, 这些火山口结构具有更高

收稿日期: 2021-07-28; 修回日期: 2021-08-23; 录用日期: 2021-09-30

基金项目: 国家自然科学基金(51605296)、数字化制造装备与技术国家重点实验室开放基金(DMETKF2021019)、上海市高性能纤维复合材料协同创新中心开放基金(X12812001/047)

通信作者: *hjmorning@hotmail.com

的硬度^[13]。Chen 等^[14]研究表明,细胞优先黏附在微结构的边缘,并且细胞取向越强,细胞与结构之间的黏附力越高。Heinrich 等^[15]发现细胞优先黏附在激光烧蚀微坑的边缘,并随着时间的推移逐渐覆盖孔,最终可有效阻止细菌定植。此外,烧蚀边缘火山口的高度和宽度的变化,还会引起细胞骨架内张力的变化,从而影响干细胞的成骨分化^[16]。

激光烧蚀钛合金微坑的火山口形貌和微坑尺寸显著影响材料的表面性能和生物活性。因此,为获得适当尺寸和良好质量的微坑,首先要弄清表面形貌的成形过程。关于纳秒激光与金属的相互作用过程,我国专家和学者做了突出贡献^[17-21]。简而言之,在纳秒激光与金属的相互作用中,光子能量通过逆韧致辐射机制被目标表面内的自由电子吸收^[22]。然后,吸收在金属表面上的激光能量通过电子-声子耦合传递到晶格。然后能量进一步向四周传递,钛合金在烧蚀区域被加热;当超过液相温度时材料将熔化,当超过气化温度时材料通过气化被去除。同时,当激光能量聚集到钛合金表面时,表面上方将形成等离子体羽流,在激光的持续作用下,等离子体将削弱后续激光对材料的作用。此外,在烧蚀区域内的高温 and 高压导致液态金属向四周溅射。由于钛合金的纳秒激光烧蚀过程是一个复杂的多物理场问题,并且烧蚀过程发生在纳秒时间域内,因此,一般采用数值模拟方法模拟材料的烧蚀过程。

Ren^[23]和刘丹^[24]等利用 ANSYS 模拟了纳秒激光烧蚀钛合金微坑的温度场和形貌,建立的模型可以有效预测烧蚀坑深度。刘会霞等^[25]对加工过程的温度场进行数值模拟,得到了烧蚀过程中温度的变化曲线和微坑形貌的变化规律。罗焱等^[26]模拟了在脉冲能量为 24 mJ 时,脉冲宽度对微孔再铸层的影响,结果表明,脉宽越小,熔体速度越大,流动

越剧烈,制孔后形成的再铸层厚度越薄。Zhang 等^[27]研究了在低能量密度下纳秒激光烧蚀医用不锈钢沟槽的热影响区,结果表明,热蒸发主要发生在脉冲持续时间内,热影响区在脉冲持续时间后显著增加。这些方法可以有效预测烧蚀坑的几何特征,然而,这些研究较少考虑烧蚀边缘火山口形貌的成形过程。Yan 等^[28]采用 COMSOL 多物理场仿真软件建立了一个包含材料熔化、气化、液相流动和等离子体屏蔽的二维轴对称模型。结果表明,在钛合金的烧蚀区域,反冲压力和表面张力持续推动液相,并在熔融区边缘形成火山口形貌。COMSOL 作为一种多物理场仿真软件,可以用于研究钛合金在激光烧蚀过程中的传热、流体流动、气体动力学等物理过程,可有效提高烧蚀形貌的预测精度。然而,较少有学者研究钛合金微坑的动态形成过程,因此,本文重点研究了烧蚀温度场、速度场和形貌随烧蚀时间的变化规律。

2 纳秒激光烧蚀钛合金的有限元建模

2.1 材料与实验系统

本研究所采用的激光加工平台主要包括纳秒激光系统、扫描振镜和数控运动平台等装置,激光系统为 Nd:YVO₄ 型纳秒紫外激光系统(Huaray, China)。激光器的额定平均功率 P_a 为 20 W,激光的脉宽 τ 为 50 ns,波长 λ 为 355 nm,重复频率 f 为 20~50 kHz。激光束为高斯光束,光束质量 $M^2 = 1.2$,有效光束直径 D_s 约为 35 μm 。另外,采用 NOVA II 功率计和 30A-BB-18 功率探头(Ophir, Israel)测试平均功率,检测结果如表 1 所示。根据式(1)~(4)分别计算得到该激光器的脉冲能量约为 0.4 mJ、峰值功率约为 7.5 kW、激光通量约为 41.6 J/cm² 和激光峰值强度约为 7.8×10^8 W/cm²。

表 1 平均功率随重复频率的变化

Table 1 Variation of average power with repetition frequency

f /kHz	20	25	30	35	40	45	50
P_a /W	7.5	9.6	11.7	13.9	16.0	18.2	20.0

$$J_c = \frac{P_a}{f}, \quad (1)$$

$$P_p \approx 0.94 \times \frac{J_c}{\tau}, \quad (2)$$

$$F = \frac{4 \times J_c}{\pi \times D_s^2}, \quad (3)$$

$$I_p = \frac{4 \times P_p}{\pi \times D_s^2}, \quad (4)$$

式中, J_c 为脉冲能量, P_p 为峰值功率, F 为激光通量, I_p 为激光峰值强度, D_s 为有效光束直径。

烧蚀材料为 Ti6Al4V,是一种使用频率较高的医用钛合金,又被称为 TC4 或 5 级钛合金。该材料具有高强度重量比,并且具有出色的耐腐蚀性。样品的化学组成通过 X 射线光谱仪测量,结果如表 2 所示。从表中可知,样品的主要元素为 Ti,还存在

少量的 Al 和 V。

表 2 Ti6Al4V 的元素组成

Table 2 Chemical composition of Ti6Al4V

Element	Ti	Al	V	Fe
Mass fraction /%	91.4	5.6	2.7	0.1

2.2 传热和流体动力学模型

为了研究表面形貌随着烧蚀时间的演变规律,采用 Osher-Sethian 水平集方法追踪液-气相界面,该方法通过将界面嵌入为有符号距离函数的零水平集来跟踪界面的运动。界面的运动与水平集函数的零水平集匹配,并且所得到的用于水平集函数演变的初始值偏微分方程类似于 Hamilton-Jacobi 方程,因此可用于计算界面的曲率和法线方向^[29]。此外,该方法使用固定网格并在整个计算域中定义水平集函数 φ ,在气相内部取值为 1,在液相和固相内部取值为 0,而在液体和气体之间的分界面上,水平集函数值为 $\varphi = 0.5$ 。采用水平集方法追踪由 Navier-Stokes 方程计算的速度矢量,其水平集输运方程表示为

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \cdot \nabla \varphi = \gamma_{ls} \nabla \cdot \left[\epsilon_{ls} \nabla \varphi - \varphi(1 - \varphi) \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \right], \quad (5)$$

式中, t 为时间, u 为热流速度, γ_{ls} 为初始化参数, ϵ_{ls} 为界面厚度。

表面形貌的形成主要与材料的传热和熔融液滴的流动相关。传热过程主要遵循能量守恒方程,如下所示

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \cdot \nabla T - \nabla \cdot (k \nabla T + q) = Q - S, \quad (6)$$

式中, T 为温度, ρ 为密度, C_p 为定压比热容, k 为导热系数, q 为空气对流 q_0 和热辐射项 q_1 之和, Q 为体积热项, S 为由于气化引起的能量损失项。

由于采用的激光为高斯光束,因此式(6)中热源项 Q 可以表示为

$$Q = 2 \times (1 - R) \times I_p \exp\left(-\frac{2x^2}{D_s^2}\right) \times T_p(t), \quad (7)$$

$$T_p(t) = G_p(t - 2 \times \tau), \quad (8)$$

$$G_p = \exp\left(-\frac{2x^2}{\tau^2}\right), \quad (9)$$

式中: R 为反射系数,约为 $0.4^{[30]}$; x 为位置矢量; $T_p(t)$ 为高斯时间脉冲序列; G_p 表示脉冲函数。

式(6)中 S 项可表述为

$$S = L_v \dot{m} \delta(\varphi), \quad (10)$$

$$\dot{m} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\sigma}} \times \frac{P_{\text{sat}}(T)}{\sqrt{T}}, \quad (11)$$

$$P_{\text{sat}}(T) = P_0 \exp\left[\frac{mL_v}{\sigma T_{\text{vap}}}\left(1 - \frac{T_{\text{vap}}}{T}\right)\right], \quad (12)$$

$$\delta(\varphi) = 6 |\varphi(1 - \varphi)| |\nabla \varphi|, \quad (13)$$

式中: L_v 为气化潜热; \dot{m} 为气化的质量通量; $P_{\text{sat}}(T)$ 为饱和蒸气压力; P_0 为一个标准大气压; T_{vap} 为气化温度; σ 为玻尔兹曼常数,其值约等于 1.38×10^{-23} J/K。

激光烧蚀的熔融液态金属被认为是不可压缩的牛顿流体,流动状态为层流^[31]。层流过程主要遵循 Navier-Stokes 方程和连续性方程,如下所示

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-PI + \mu(\nabla u + (\nabla u)^T)] + \rho g - \rho_l \beta_l (T - T_m) g \varphi, \quad (14)$$

$$\rho \nabla \cdot u = 0, \quad (15)$$

式中: P 是压力; I 为单位矩阵; μ 为动态黏度; ρ_l 为液相密度; β_l 为液体的体积膨胀系数; g 为重力加速度; T_m 为熔点。

在高斯光束作用下,表面张力会产生温度和物质浓度的梯度,因此,不可避免地将产生马兰戈尼效应。马兰戈尼效应提供一个切向力,主要与切向温度梯度有关。在 COMSOL 中通过马兰戈尼效应接口将传热和流体流动过程耦合,如下所示

$$\left\{ -PI + \mu[\nabla u + (\nabla u)^T] - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot u)I \right\} n = \gamma \nabla_t T, \quad (16)$$

式中, γ 为表面张力系数。

除了表面张力和马兰戈尼效应会显著影响表面形貌,反冲压力也影响液相的流动,其值约为 0.55 倍的饱和蒸气压力^[28]。

最后,通过 COMSOL 中的弱贡献方法分别将速度源项和水平集源项加入到连续性方程和水平集输运方程中,如下所示

$$\nabla \cdot u = \dot{m} \delta(\varphi) \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_v} \right), \quad (17)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \cdot \nabla \varphi - \dot{m} \delta(\varphi) \left(\frac{\varphi}{\rho_l} + \frac{1 - \varphi}{\rho_v} \right) = \gamma_{ls} \nabla \cdot \left[\epsilon_{ls} \nabla \varphi - \varphi(1 - \varphi) \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \right], \quad (18)$$

式中, ρ_v 为气相密度。

2.3 网格和边界条件

假设激光脉冲的时空能量分布遵循高斯分布,并沿着轴线对称分布,那么二维几何模型可以用于模拟

烧蚀截面形貌的形成。在该模型中,划分为两个区域,分别为液固区域和气体区域,液固区域宽度为 0.1 mm,高度为 0.03 mm;气体区域宽度为 0.1 mm,高度为 0.04 mm。由于本研究更多关注表面形貌的形成,因此将液固区域和边界设定为最精细的极细化网格,网格类型为三角形网格,最大单元大小(D_{\max})为 1×10^{-3} mm,最小单元大小为 2×10^{-6} mm,最大单元增长率为 1.1,曲率因子为 0.2。

由于网格单元的大小会影响仿真精度和仿真时间,因此,重点对气相区域进行网格收敛分析以确定最佳网格尺寸。首先,分别改变气相区域的 D_{\max} ,以确保既具有仿真精度又可缩短仿真时间。图 1 表示在不同 D_{\max} 下,烧蚀区域最高温度随烧蚀时间的变化。当 $D_{\max} > 0.005$ mm 时,烧蚀时间内最高温度值随着 D_{\max} 的减少而升高;当 $D_{\max} \leq 0.005$ mm 时,温度随时间的变化规律不受单元大小的影响。因此,为缩短仿真时间,选择 $0.002 \text{ mm} \leq D_{\max} \leq$

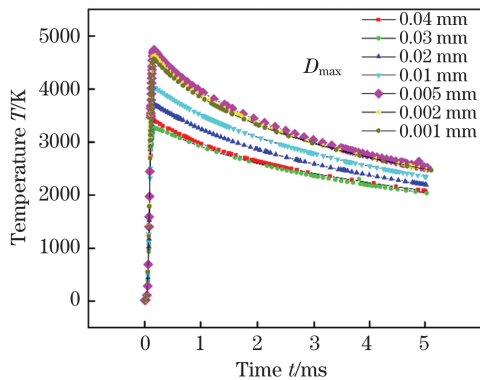


图 1 网格收敛性分析

Fig. 1 Mesh convergence analysis

0.005 mm,并设定气体区域的网格为较细化网格。最后,气相区域的最大单元大小为 3.7×10^{-3} mm,最小单元大小为 1.25×10^{-5} mm,最大单元增长率为 1.25,曲率因子为 0.25。

图 2 为网格划分结果,仿真环境的初始温度设定为 $T_{\text{ext}} = 293.15$ K。边界 3 为热绝缘,边界 1、2、4、5 和 7 被施加热对流和热辐射,分别满足式(19)、(20),边界 6 为流体流出边界,并且马兰戈尼效应、热源 Q 和能量损失项 S 作用在边界 1。初始的液相流速为 0 m/s,加工环境为一个标准大气压,边界 2、3、4、5、7 设定为无滑移壁面,并且边界 6 设置为出口。表 3 描述了钛合金的热力学参数。

$$q_0 = h \cdot (T_{\text{ext}} - T), \quad (19)$$

$$q_1 = k_b \epsilon (T_{\text{ext}}^4 - T^4), \quad (20)$$

式中, h 为对流传热系数, ϵ 为热辐射率, k_b 为斯忒藩-玻尔兹曼常数,约为 5.67×10^{-8} W/($\text{m}^2 \cdot \text{K}^4$)。根据实验测量, h 和 ϵ 分别为 15 W/($\text{m}^2 \cdot \text{C}^\circ$)和 0.7^[32]。

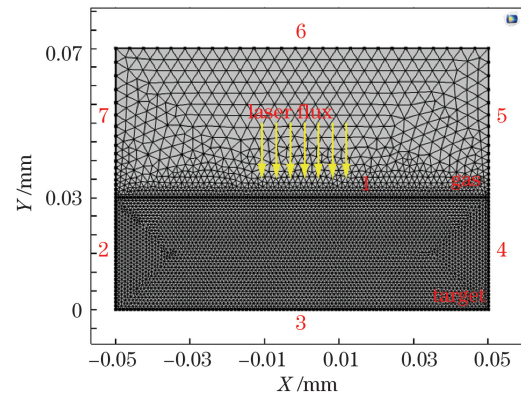


图 2 网格和边界条件的设置

Fig. 2 Setting of grid and boundary conditions

表 3 钛合金的热力学参数

Table 3 Thermodynamic parameters of titanium alloy

Material parameters	Symbol	Value	Unit
Melting point	T_m	1923	K
Vaporization temperature	T_{vap}	3533	K
Latent heat of fusion	L_f	2.86×10^5	J/kg
Latent heat of vaporization	L_v	9.83×10^6	J/kg
Specific heat capacity	C_p	$483 + 0.22T, T \leq 1268 \text{ K};$ $412 + 0.18T, 1268 \text{ K} < T < 1923 \text{ K}$ $831, T \geq 1923 \text{ K}$	J/($\text{kg} \cdot \text{K}$)
Thermal conductivity	k	$1.26 + 0.016T, T \leq 1268 \text{ K};$ $3.51 + 0.013T, 1268 \text{ K} < T < 1923 \text{ K}$ $-12.75 + 0.024T, T \geq 1923 \text{ K}$	W/($\text{m} \cdot \text{K}$)
Solid phase density	ρ_s	$4420 - 0.154 \times (T - 298)$	kg/m^3
Liquid density	ρ_l	$3920 - 0.680 \times (T - 1923)$	kg/m^3
Dynamic viscosity	μ	$\exp(-1.6 + 5346/T) \times 10^{-3}$	N/($\text{m} \cdot \text{s}$)
Surface tension	σ	$1.53 - 0.28 \times 10^{-3} (T - 1941)$	N/m
Surface tension coefficient	γ	-2.8×10^{-4}	N/($\text{m} \cdot \text{K}$)
Standard atmospheric pressure	P_b	1.01×10^5	Pa

3 结果与分析

3.1 钛合金温度场随烧蚀时间的演变规律

图 3 描述了 $F = 41.6 \text{ J/cm}^2$ 、 $\tau = 50 \text{ ns}$ 和 $f = 50 \text{ kHz}$ 时,钛合金温度场随着烧蚀时间的变化。在烧蚀时间为 150 ns 时[图 3(a)],由于高斯光束在烧蚀中心的强度远高于边缘,因此,在烧蚀中心的气-液界面上的温度最高,并且温度以椭圆形向周边逐渐降低,这与 Pariona 等^[33]的研究结果一致。此时熔融区

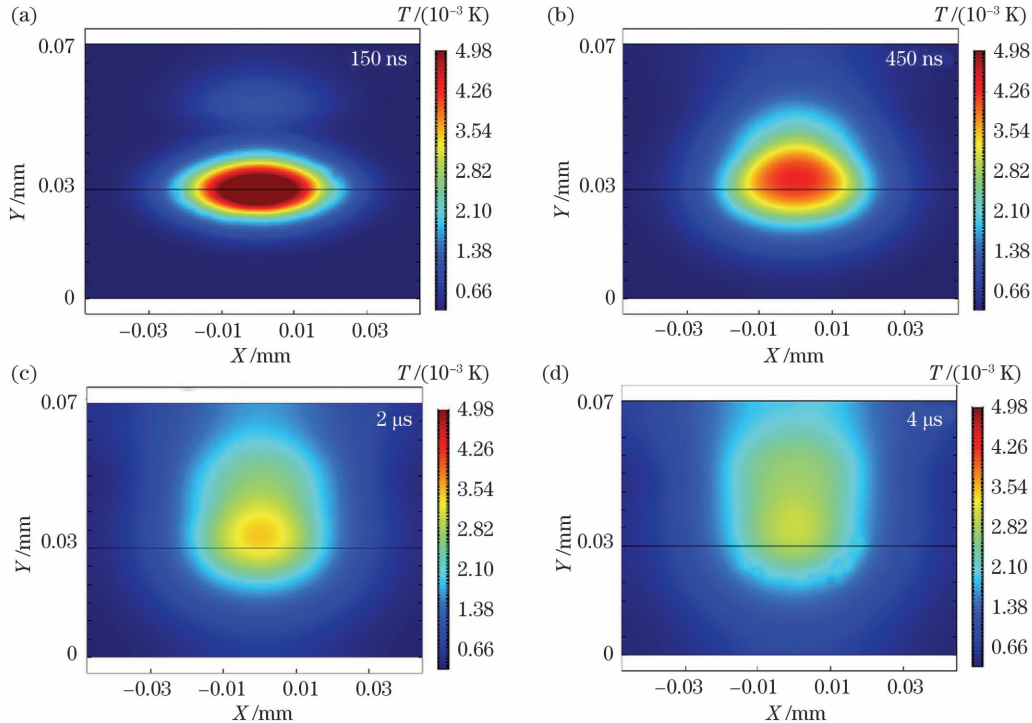


图 3 单个脉冲周期内温度场随烧蚀时间的变化。(a)烧蚀时间为 150 ns ; (b)烧蚀时间为 450 ns ; (c)烧蚀时间为 $2 \mu\text{s}$; (d)烧蚀时间为 $4 \mu\text{s}$

Fig. 3 Change of ablation temperature within a single pulse period. (a) Ablation time is 150 ns ; (b) ablation time is 450 ns ; (c) ablation time is $2 \mu\text{s}$; (d) ablation time is $4 \mu\text{s}$

为研究后续激光光束对已形成的温度场的影响,将 $f = 50 \text{ kHz}$ 、 $\tau = 50 \text{ ns}$ 的脉冲函数作为时间脉冲序列。图 4(a)描述了在两个脉冲周期内,烧蚀区域的最高温度随时间的变化。在第一个周期内,温度迅速上升,在约为 150 ns 时达到 5000 K 左右(图 3),此时烧蚀中心的部分材料通过气化被去除。随后在第二个脉冲烧蚀前,温度逐渐降低到 2000 K 左右,说明此时熔融液滴已经凝固。在第二个脉冲的作用下,最高温度再次升高到 5700 K 左右,此时,最高温度周边的材料主要通过气化被去除。随后最高温度逐渐下降到 3300 K 左右,此时,最高温度周边的材料处于熔融状态。不论在第一个周期还是第二个周期,温度均经历了快速升高和缓慢下降过程。温度的下降被认为主要与热传导、空气对流和热辐

射相关。图 4(b)探究了热传导对烧蚀温度的影响。由图可知,随着导热系数 k 的增加,温度下降较快,在单个脉冲作用后,温度约为 1800 K ,因此,降温过程主要与热传导有关,钛合金较低的导热系数导致降温时间较长。然而,空气对流和热辐射在短时间内对降温过程的影响不显著[图 4(c)、(d)]。温度升高的快慢和最高温度大小主要与激光的脉宽、激光通量和烧蚀材料的热力学性能有关^[34]。激光通量的增加减少了达到熔化温度的时间,较高的脉宽会促进熔融液相通过流体流动被推向火山口边缘。而较低的脉宽会增加最高温度,当温度超过气化温度,在气化羽流的压力下,熔融液相在火山口边缘产生飞溅。

图 5 描述了在第二个脉冲周期内表面的温度场随烧蚀时间的变化。第一个脉冲在冷却过程中,尽

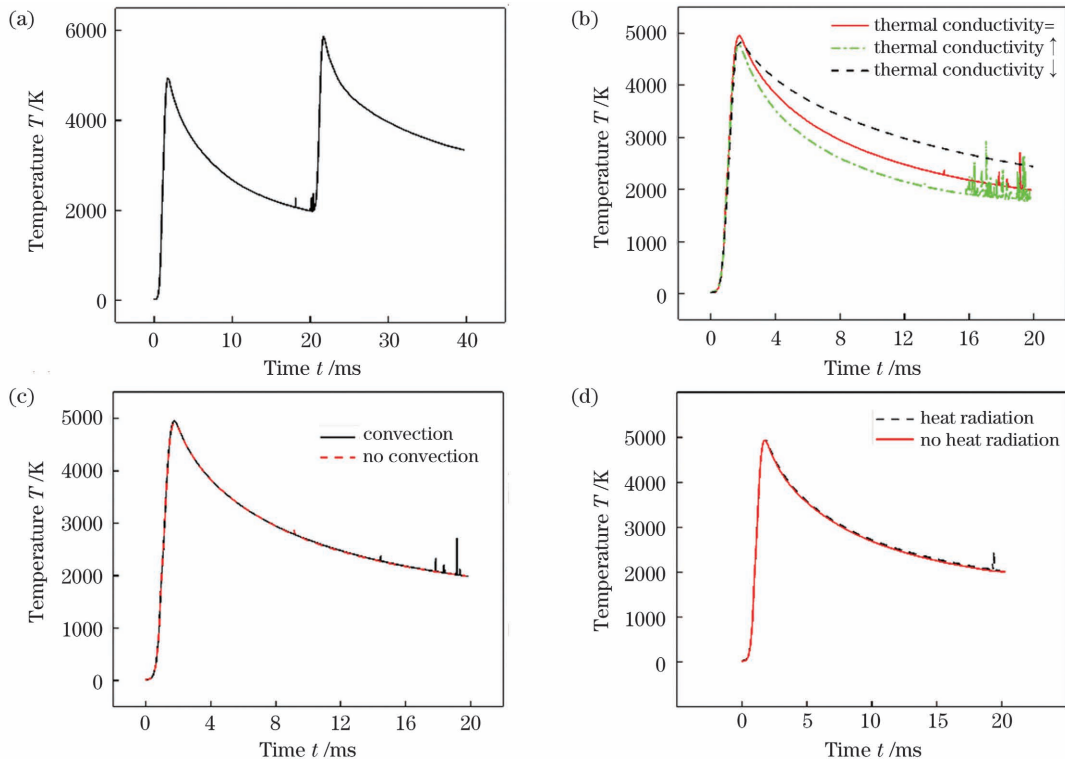


图 4 散热条件对温度场的影响。(a)两个烧蚀周期内的温度变化;(b)导热系数的影响;(c)空气对流的影响;(d)表面辐射的影响
 Fig. 4 Influence of heat dissipation conditions on temperature field. (a) Temperature change during two ablation cycles; (b) effect of thermal conductivity; (c) effect of air convection; (d) effect of surface radiation

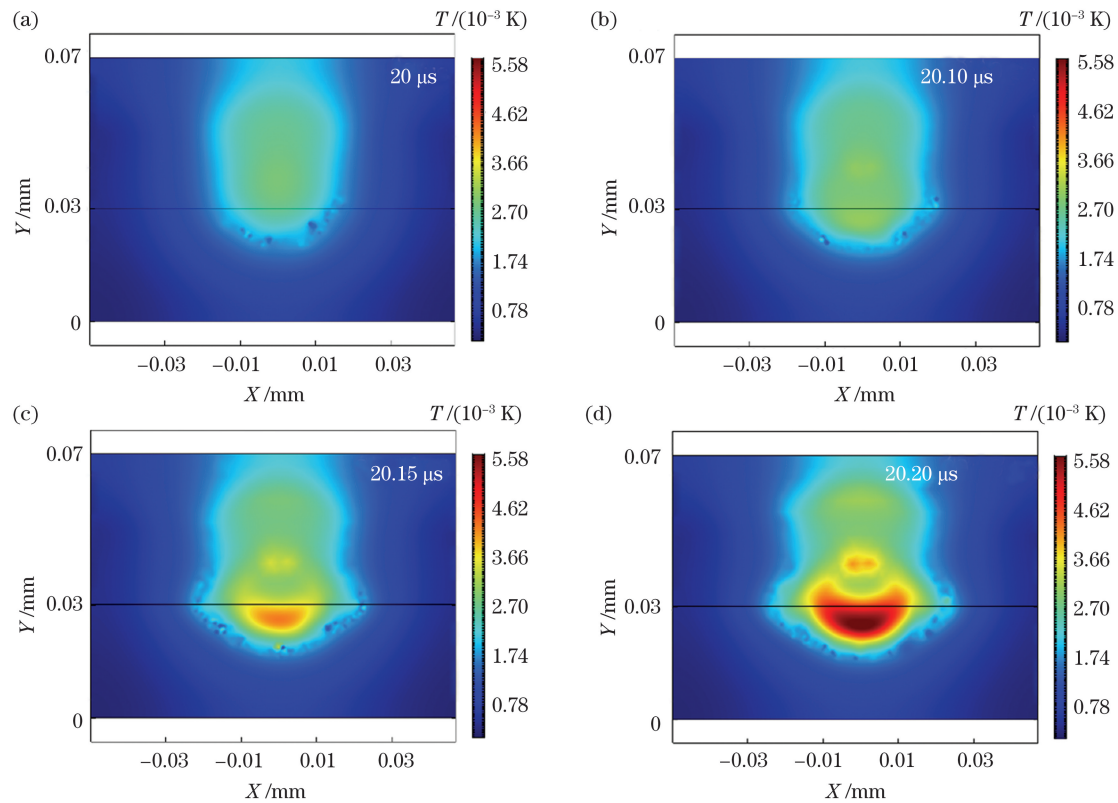


图 5 第二个脉冲周期内的温度场。(a)烧蚀时间为 $20 \mu\text{s}$; (b)烧蚀时间为 $20.10 \mu\text{s}$; (c)烧蚀时间为 $20.15 \mu\text{s}$; (d)烧蚀时间为 $20.20 \mu\text{s}$

Fig. 5 Temperature field in the second pulse period. (a) Ablation time is $20 \mu\text{s}$; (b) ablation time is $20.10 \mu\text{s}$; (c) ablation time is $20.15 \mu\text{s}$; (d) ablation time is $20.20 \mu\text{s}$

管温度不断下降,但是温度分布并未发生显著变化。在烧蚀时间为 $20.10 \mu\text{s}$ 时,在第二个脉冲的作用下,熔池中的金属进一步被加热,此时最高温度约为 3100 K ,材料仍处于熔融状态,通过吸收热量蒸气温度继续升高[图 5(b)]。当烧蚀时间达到 $20.15 \mu\text{s}$ 时,温度场发生显著变化,烧蚀温度骤然升高,在水平面下 $0 \sim 5 \mu\text{m}$ 内,熔融液态金属的温度升高到气化温度以上,这将导致烧蚀深度快速增加。同时,在熔融态中存在部分固相。随后到 $20.20 \mu\text{s}$ 时,温度升至最高,约为 5700 K ,烧蚀区的大部分材料通过气化蒸发到空气中,此时温度场呈现月牙形分布。表面张力是一个随温度变化的量,在整个烧蚀过程中,从烧蚀中心向烧蚀边缘的温度场存在梯度。当两相界面存在表面张力梯度时,便会产生马兰戈尼效应^[35]。

3.2 表面张力和马兰戈尼效应对烧蚀区速度场的作用

图 6 为在单个脉冲周期内,只考虑表面张力而

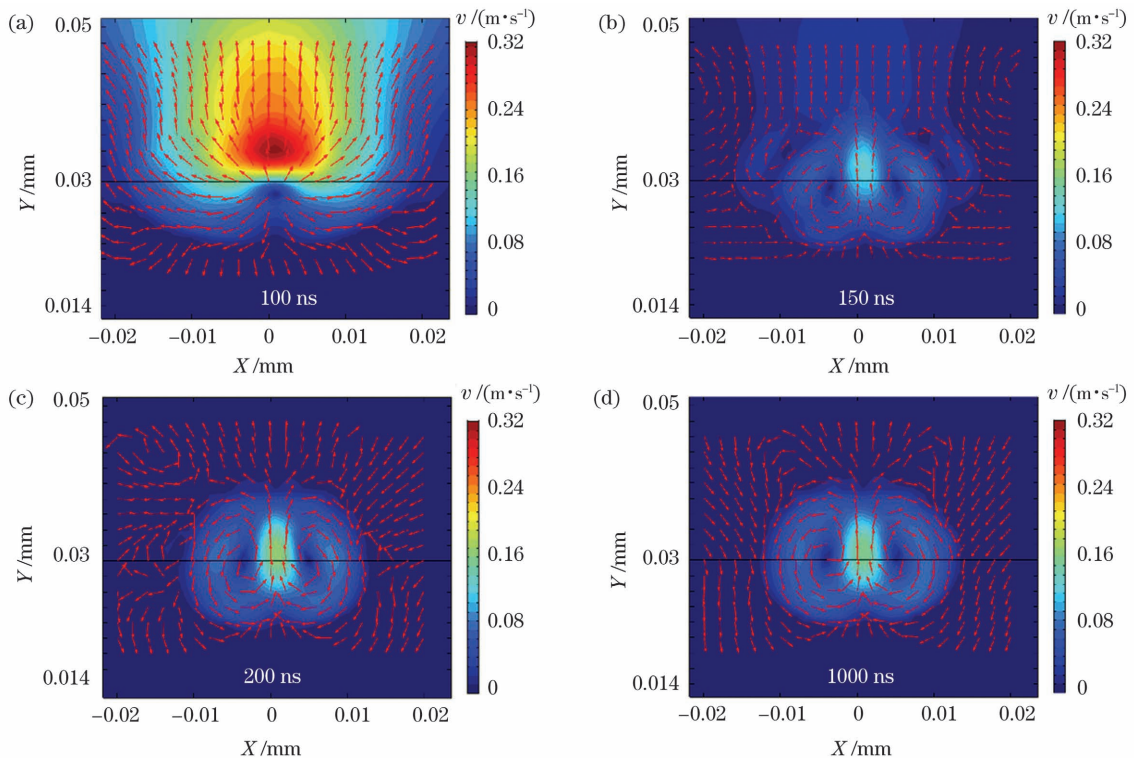


图 6 不考虑马兰戈尼效应时单个脉冲周期内的速度场。(a)烧蚀时间为 100 ns ; (b)烧蚀时间为 150 ns ; (c)烧蚀时间为 200 ns ; (d)烧蚀时间为 1000 ns

Fig. 6 Velocity field within a single pulse period when Marangoni is not considered. (a) Ablation time is 100 ns ; (b) ablation time is 150 ns ; (c) ablation time is 200 ns ; (d) ablation time is 1000 ns

图 7 为在单个烧蚀周期内,既考虑表面张力又考虑马兰戈尼对流时,液相和气相材料的流速分布。在烧蚀时间为 100 ns 时,此时最高流速高达 14 m/s ,流动的方向与液相线平行。这表明,与表

面张力相比,马兰戈尼对流对于表面液相的流动影响更大。当烧蚀时间为 150 ns 时,在烧蚀边缘熔融部分,有一小部分流体发生回流。当时间为 200 ns 时,涡流在整个熔融区域形成。随后到 1000 ns 时,不考虑马兰戈尼对流时,液相和气相材料的流速分布。当烧蚀时间为 100 ns 时,有部分材料处于熔融状态,此时在重力、浮力、反冲压力、表面张力作用下,熔融液滴从烧蚀中心沿着烧蚀轨迹向边缘移动,并且熔融液滴移动的速度较低,约为 0.13 m/s 。此时,表面上 $4 \mu\text{m}$ 处的蒸气流速最高,约为 0.3 m/s 。在烧蚀时间为 150 ns 时,由于熔融金属的表面张力随着温度的升高而升高,在烧蚀边缘的表面张力将远小于烧蚀中心的表面张力。表面张力的梯度使得流场发生显著变化,并且由表面张力引起的流体流动呈现出两个对称于烧蚀中心的对称涡流。此外,在表面张力和浮力的共同作用下,中心处的熔融液滴和蒸气向上运动。在作用时间为 200 ns 时的速度场与 150 ns 时无显著差异,蒸气移动的方向仍为竖直向上。与 100 ns 时相比,在烧蚀中心上方,由于烧蚀温度的下降,使得最高速度降低到约为 0.15 m/s 。随后,在 $200 \sim 1000 \text{ ns}$ 时间内,速度场趋于稳定。

面张力相比,马兰戈尼对流对于表面液相的流动影响更大。当烧蚀时间为 150 ns 时,在烧蚀边缘熔融部分,有一小部分流体发生回流。当时间为 200 ns 时,涡流在整个熔融区域形成。随后到 1000 ns 时,

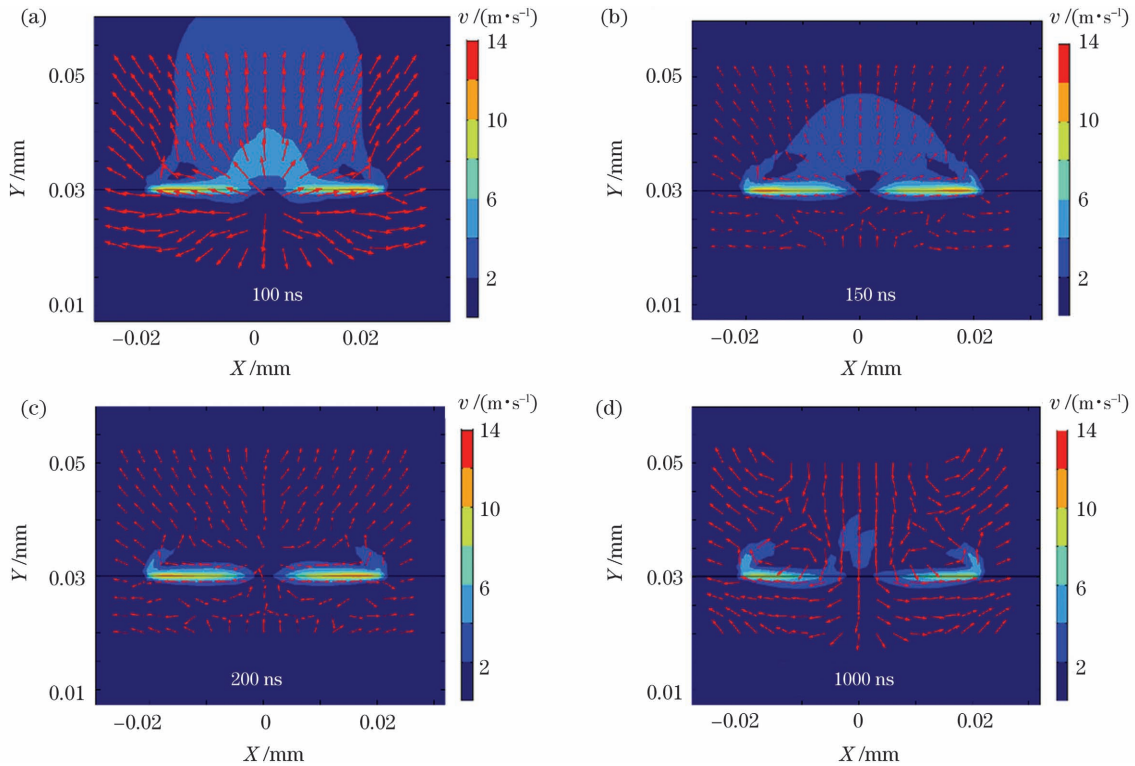


图 7 考虑马兰戈尼效应时单个脉冲周期内的速度场。(a) 烧蚀时间为 100 ns; (b) 烧蚀时间为 150 ns; (c) 烧蚀时间为 200 ns; (d) 烧蚀时间为 1000 ns

Fig. 7 Velocity field in a single pulse period when Marangoni is considered. (a) Ablation time is 100 ns; (b) ablation time is 150 ns; (c) ablation time is 200 ns; (d) ablation time is 1000 ns

随着温度的下降, 熔融液体的流速减慢, 涡流消失, 但马兰戈尼对流引起的液相流动的速度仍强于表面张力对流速的影响。与不考虑马兰戈尼对流的结果相比, 马兰戈尼效应改变了熔融液相的流动方向和大小, 并且在与液相界面相切的方向上速度最快。Yan 等^[28]研究表明, 反冲压力通过影响液相的速度场分布决定火山口形貌的位置, 而熔融液相的速度大小受马兰戈尼效应产生的热毛细管力的影响, 最终决定火山口的形貌。另外, 随着激光功率和激光脉冲持续时间的增加, 由热毛细力驱动的流体流动加剧, 烧蚀区域的峰值温度和速度均增加^[36]。

3.3 钛合金微坑结构的动态形成机制

通过水平集方法识别液(固)与气体界面, 并通过区分烧蚀温度与熔点的大小识别固体和液体界面, 实现对固相、液相和气相界面的跟踪。图 8 描述了在单脉冲作用下, 材料在烧蚀过程中的熔化和气化过程。在第一个阶段, 当烧蚀时间为 90 ns 时, 随着温度的升高, 一部分材料超过熔点开始熔化[图 8(a)]。到 120 ns 时, 一部分材料达到气化温度, 蒸发到空气中。温度从烧蚀中心向深度和宽度方向逐渐下降, 并且在固相和液相界面出现非稳定状态, 有部分固相材料被卷入液相材料中。当烧蚀

时间为 200 ns 时, 烧蚀温度继续升高, 因此, 材料在气化作用下被去除。此外, 随着温度向材料内部传播, 熔化面积也进一步增加, 当烧蚀时间在 120 ns 到 1.5 μs 时, 处于气化温度的材料逐渐被去除, 在 1.5 μs 时, 通过气化去除的深度约为 4 μm 。同时, 熔融液滴从中心向边缘迁移, 边缘的高度开始高于表面。特别地, 尽管在烧蚀时间为 100 ns 时, 沿着表面切线方向的液相流速较高[图 7(a)], 但直到 1.5 μs 时, 才明显观察到液相的流动引起了烧蚀边缘火山口的形成。这表明, 表面形貌的演变是材料气化去除和液相流动共同作用的结果。

在烧蚀时间为 1.7 μs 时, 烧蚀温度低于气化温度, 此时通过气化去除材料的过程结束。图 9 描述了液相的迁移和溅射过程。当烧蚀时间为 3 μs 时[图 9(a)], 烧蚀表面的熔融液滴以约为 10 m/s 的速度继续从中心向四周扩散。在 1.7~3 μs 烧蚀时间内, 液相的迁移促进火山口高度升高和宽度减小。当烧蚀时间为 3.5 μs 时[图 9(b)], 火山口的高度继续上升, 然而, 由于在距烧蚀中心 2~3 μm 宽度内的液相流速较低, 此时液相迁移对烧蚀深度的影响较小, 液相的流动主要集中在距离中心 3 μm 以外的区域。当烧蚀时间为 3.60 μs 时, 烧蚀边缘熔融

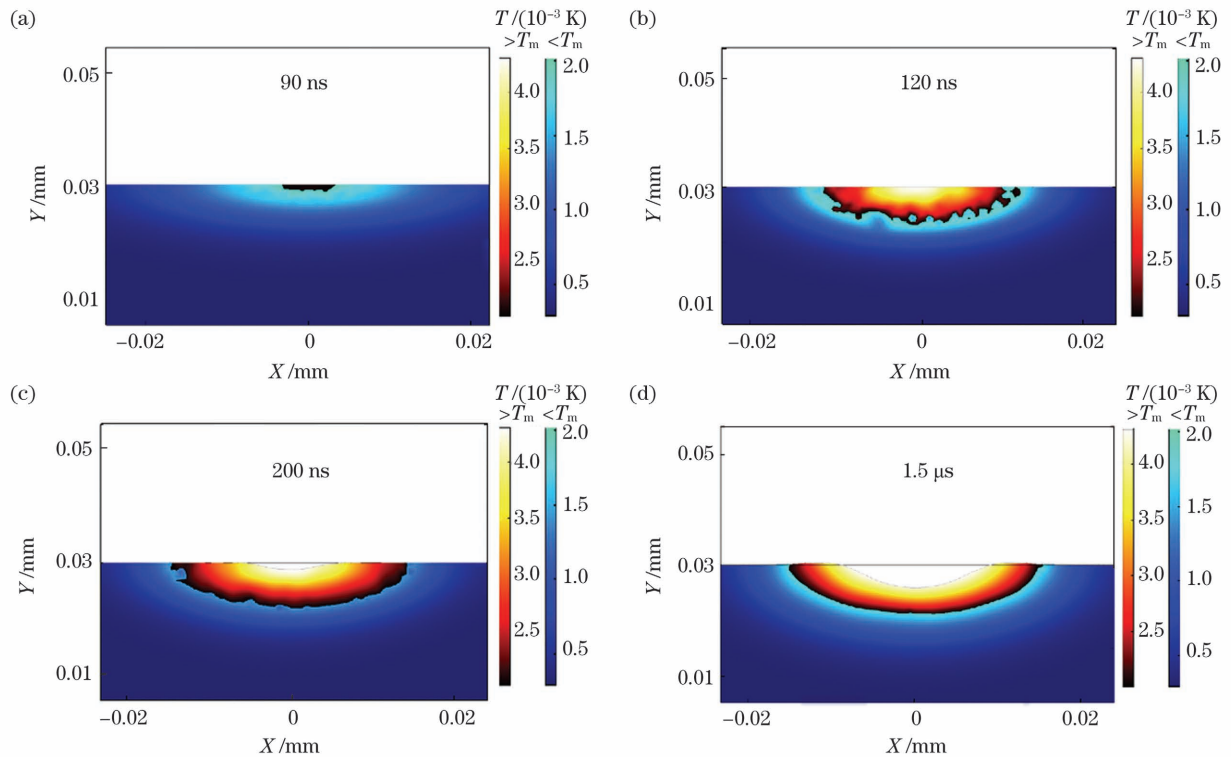


图 8 钛合金的熔化和气化过程。(a)烧蚀时间为 90 ns;(b)烧蚀时间为 120 ns;(c)烧蚀时间为 200 ns;(d)烧蚀时间为 1.5 μs
 Fig. 8 Melting and vaporization processes of titanium alloy. (a) Ablation time is 90 ns; (b) ablation time is 120 ns; (c) ablation time is 200 ns; (d) ablation time is 1.5 μs

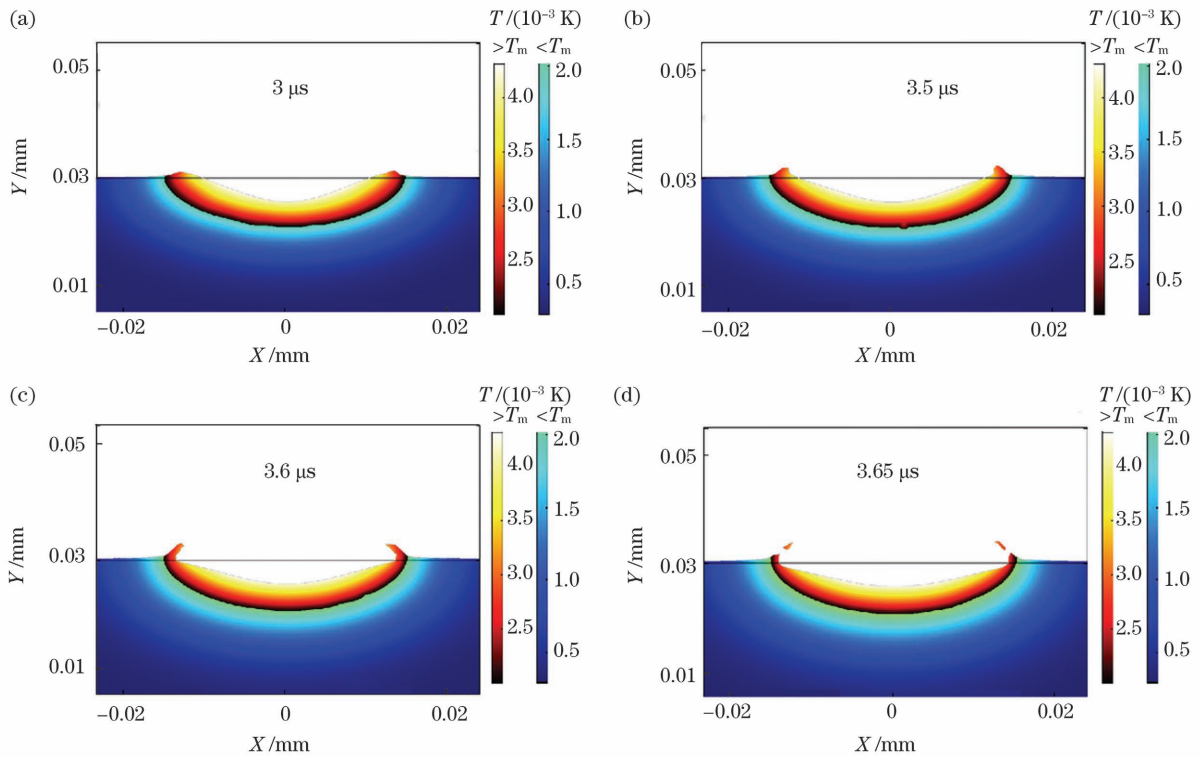


图 9 液相的迁移和溅射过程。(a)烧蚀时间为 3 μs ;(b)烧蚀时间为 3.5 μs ;(c)烧蚀时间为 3.6 μs ;(d)烧蚀时间为 3.65 μs
 Fig. 9 Liquid phase migration and sputtering. (a) Ablation time is 3 μs ; (b) ablation time is 3.5 μs ; (c) ablation time is 3.6 μs ; (d) ablation time is 3.65 μs

液相的高度进一步增加,并且有脱离表面的趋势。烧蚀时间到 $3.65 \mu\text{s}$ 时,边缘材料从基体脱离,并向烧蚀中心方向溅射,溅射的速度约为 3 m/s 。在此过程中,火山口形貌逐渐形成,并且在烧蚀边缘产生了溅射液滴,同时部分溅射液滴滴落到烧蚀区域,并在后续的凝固过程中,参与表面形貌的形成。但在此过程中,烧蚀区域的温度在熔点以上,气化温度以下,因此温度场分布和固液界面的位置无显著变化。主要物理现象为反冲压力、表面张力和马兰戈尼效应作用下液相的迁移和溅射。

图 10 描述了液相的凝固过程。随着烧蚀时间的增加,部分熔融液相逐渐低于熔点而凝固,液相层的厚度减少。由于烧蚀中心的温度高于边缘的温度,凝固首先发生在烧蚀边缘,与中心液相相比,边

缘液相的厚度下降速度更快,因此,不可避免将产生残余应力。在烧蚀时间为 $10 \mu\text{s}$ 时,液相仍向边缘迁移,因此,边缘火山口的高度继续升高。熔融液滴的迁移和凝固过程同时进行,这导致边缘的材料浓度逐渐增加,而中心的浓度逐渐降低,这与采用 X 射线能谱仪检测的结果相符^[37]。并且从液相转变到固相的过程中,由于密度增加,体积减小,导致烧蚀中心的深度加深。随后,在烧蚀时间为 $15 \mu\text{s}$ 时,液相的流速逐渐降低,火山口高度不再升高,此时,处于熔融态金属的体积较小。烧蚀时间到 $20 \mu\text{s}$ 时,烧蚀区域内的温度低于熔点,几乎全部处于固体状态。与熔化和气化过程相比,空气对流和辐射散热对温度的变化无显著影响(图 4),并且钛合金的导热系数较低,因此钛合金凝固过程的时间跨度较长。

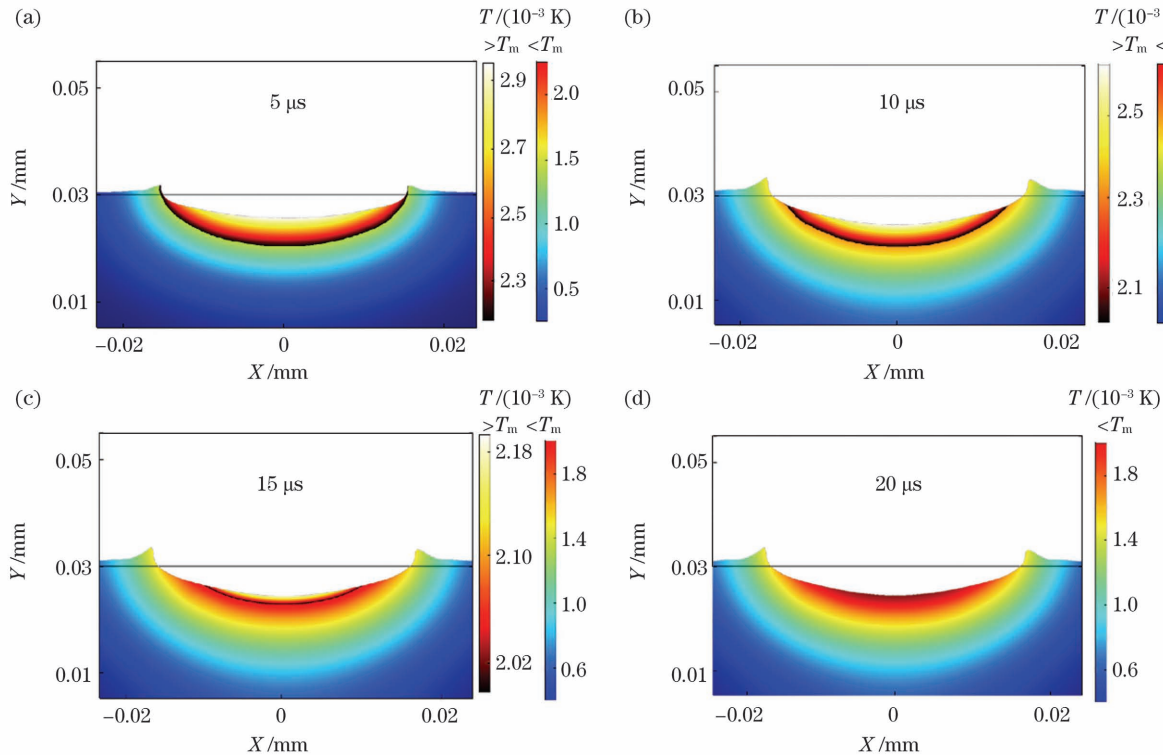


图 10 液相钛合金的凝固过程。(a)烧蚀时间为 $5 \mu\text{s}$; (b)烧蚀时间为 $10 \mu\text{s}$; (c)烧蚀时间为 $15 \mu\text{s}$; (d)烧蚀时间为 $20 \mu\text{s}$
Fig. 10 Solidification process of liquid titanium alloy. (a) Ablation time is $5 \mu\text{s}$; (b) ablation time is $10 \mu\text{s}$; (c) ablation time is $15 \mu\text{s}$; (d) ablation time is $20 \mu\text{s}$

由实验研究可知^[38],金属在短脉冲激光作用下,表面形貌和微观结构是在熔化层的再凝固过程中产生的,这与本研究的仿真结果相似。另外,在烧蚀坑内可观察到液相沿着径向迁移的痕迹,并且在烧蚀边缘可见液滴溅射特征(图 11)。这些结果表明,微坑形貌的形成与熔化、气化、液相迁移和溅射以及凝固等物理过程相关,而该物理过程主要受激光脉宽、重复频率、激光通量、激光波长和材料热力学性能等因素的综合影响。

3.4 数值仿真模型的实验验证

通过分析烧蚀次数对微坑关键几何尺寸的影响,评估仿真模型的可靠性。图 12(a)、(b)分别为 $P_a = 20 \text{ W}$ 、 $f = 50 \text{ kHz}$ 、 $N = 1$ 和 $P_a = 20 \text{ W}$ 、 $f = 50 \text{ kHz}$ 、 $N = 3$ 时烧蚀坑的仿真形貌。其中, H_1 为微坑的深度, D_1 为微坑的宽度, H_2 为火山口的高度, D_2 为包含火山口和凹坑的总宽度。另一方面,采用 KH-7700 型视频显微镜 (HIROX, China) 获得了微坑的光学形貌,如图 12(c)、(d) 所示。由图可知,与

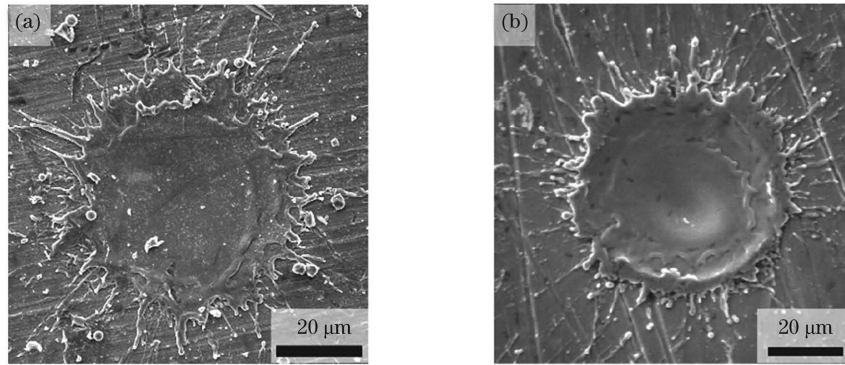


图 11 钛合金微坑的表面形貌。(a) $P_a=7.5\text{ W}$, $f=20\text{ kHz}$, $N=1$; (b) $P_a=20\text{ W}$, $f=50\text{ kHz}$, $N=1$

Fig. 11 Surface morphology of titanium alloy micro-pits. (a) $P_a=7.5\text{ W}$, $f=20\text{ kHz}$, $N=1$; (b) $P_a=20\text{ W}$, $f=50\text{ kHz}$, $N=1$

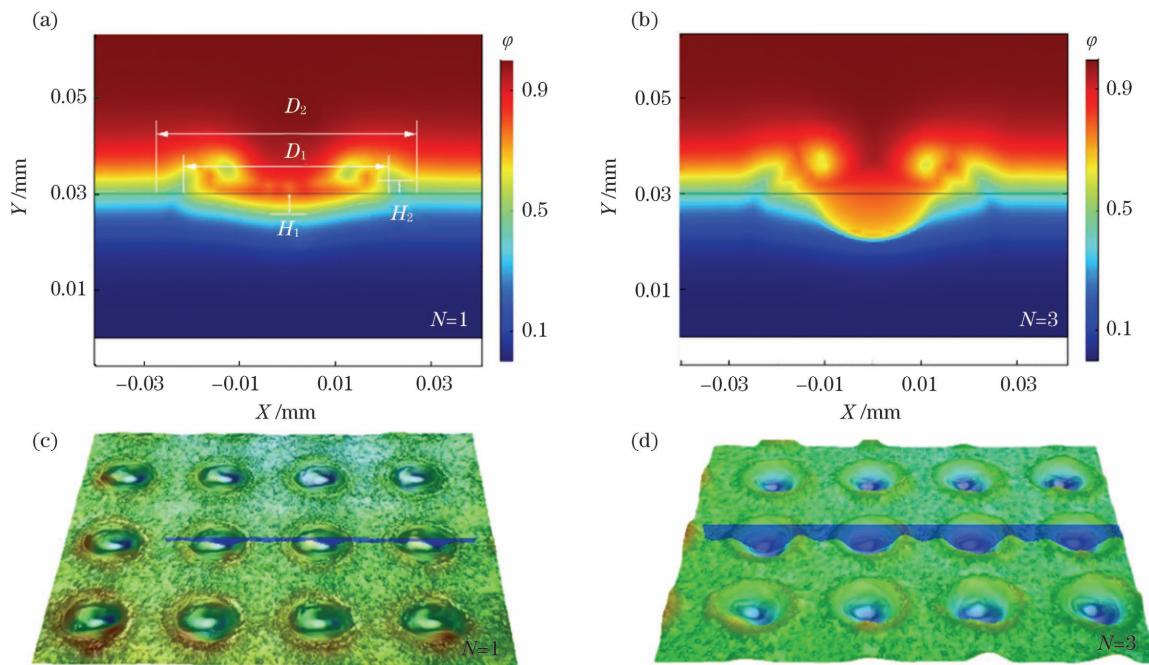


图 12 烧蚀次数分别为 1 和 3 次时的仿真和光学形貌。(a) 烧蚀次数为 1 次时的仿真形貌; (b) 烧蚀次数为 3 次时的仿真形貌; (c) 烧蚀次数为 1 次时的光学形貌; (d) 烧蚀次数为 3 次时的光学形貌

Fig. 12 Simulation and experimental morphologies when number of ablations is 1 and 3. (a) Simulated morphology when number of ablation is 1; (b) simulated morphology when number of ablation is 3; (c) optical morphology when number of ablation is 1; (d) optical morphology number of ablation is 3

其他几何尺寸相比,微坑的深度 H_1 随着烧蚀次数的增加而显著增加,在烧蚀次数较低时,仿真和实验的结果相符。

进一步分析了在工艺参数 $P_a=20\text{ W}$ 和 $f=50\text{ kHz}$ 时烧蚀次数对关键几何尺寸的影响,如图 13 所示。与其他几何尺寸相比,微坑深度 H_1 和火山口高度 H_2 随着烧蚀次数 N 的增加,近似线性增加[图 13(a)],这与 Ulerich 等^[39]的实验结果相符。相反,不同的烧蚀次数对微坑宽度 D_1 和总宽 D_2 影响不显著[图 13(b)]。在 $N \leq 15$ 时,实验和仿真的差异较小,仿真模型具有较好的可靠性。然

而由于本模型未考虑等离子体屏蔽作用,当 $N > 15$ 时,实验和仿真结果之间的差距逐渐增大。

Yan 等^[28]研究表明,微孔的直径随着激光通量的增加而线性增加。本文的研究表明,在 $N \leq 15$ 时,烧蚀次数显著影响烧蚀坑的深度,但是对孔径的影响较小。烧蚀截面的激光通量呈现高斯分布[图 14(a)],随着激光通量的增加,超过烧蚀阈值的材料被去除,其去除面积 A 由 A_1 增加到 A_2 ,因此,激光通量显著影响微坑的直径。然而,当激光通量不变时,随着烧蚀次数的增加,在超过烧蚀阈值的区域材料通过气化去除[图 14(a)];另一方面,在马兰

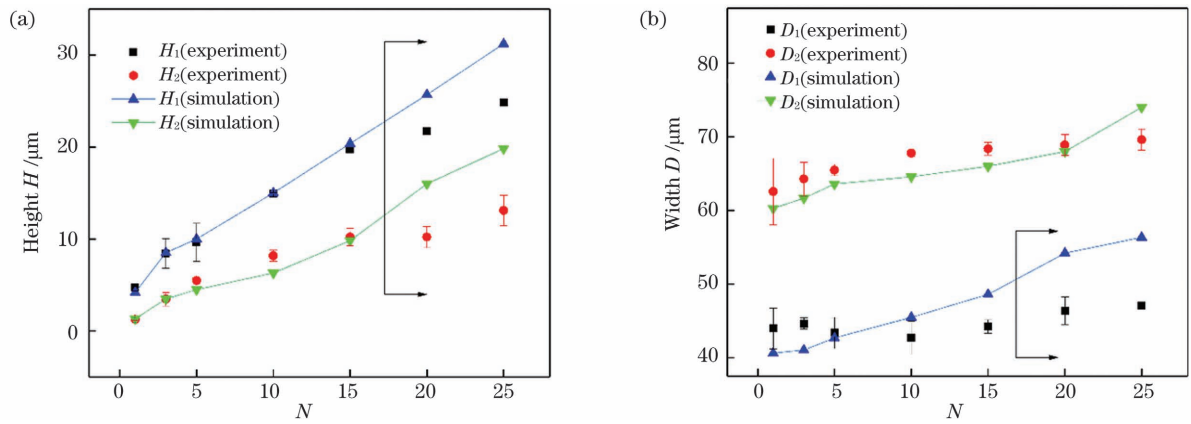


图 13 实验尺寸与仿真结果对比。(a) H_1 和 H_2 ; (b) D_1 和 D_2

Fig. 13 Comparison of experimental sizes and simulation results. (a) H_1 and H_2 ; (b) D_1 and D_2

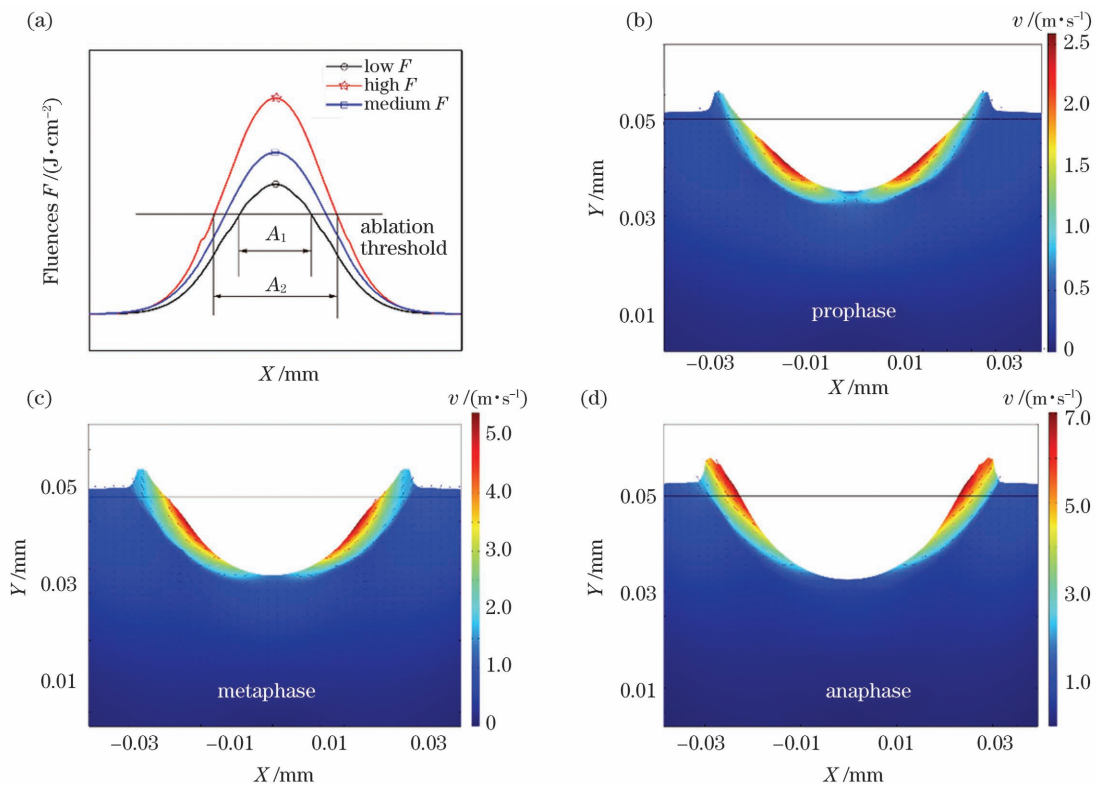


图 14 激光工艺参数对烧蚀尺寸的影响。(a) 激光通量对烧蚀面积的影响; (b)~(d) 烧蚀次数为 10 次时不同烧蚀阶段液相的迁移速度和尺寸的变化

Fig. 14 Influence of laser process parameters on ablation size. (a) Effect of laser flux on ablation area; (b)~(d) changes of migration speed and size of liquid phase in different ablation stages when number of ablation times is 10

戈尼效应、表面张力和反冲压力的共同作用下,液相由距离烧蚀中心一定距离的位置向烧蚀边缘迁移,并且迁移的速度逐渐增大,这导致微坑的深度和火山口高度进一步增加[图 14(b)、(c)、(d)]。

然而,孔径随着烧蚀次数的增加变化较慢[图 13(b)],这主要与烧蚀边缘的作用力相关。图 15 提取了在烧蚀次数为 10 次时,不同烧蚀时间内距烧蚀中心不同位置处的温度、反冲压力和表面张力。由图可知,随着与烧蚀中心之间距离的增加,

烧蚀温度逐渐下降,到烧蚀边缘温度下降到熔点以下[图 15(a)],并且反冲压力迅速降低[图 15(b)]。另外,表面张力在烧蚀表面的不同位置存在相反的方向,在烧蚀边缘,水平 X 方向的表面张力较小[图 15(c)],而在竖直 Y 方向上存在一定的表面张力[图 15(d)],这使得烧蚀边缘火山口高度显著增加,而宽度增加缓慢。而马兰戈尼效应主要与表面张力梯度有关,因此在水平 X 方向马兰戈尼效应产生的热毛细力也较低。因此,在表面张力、反冲压

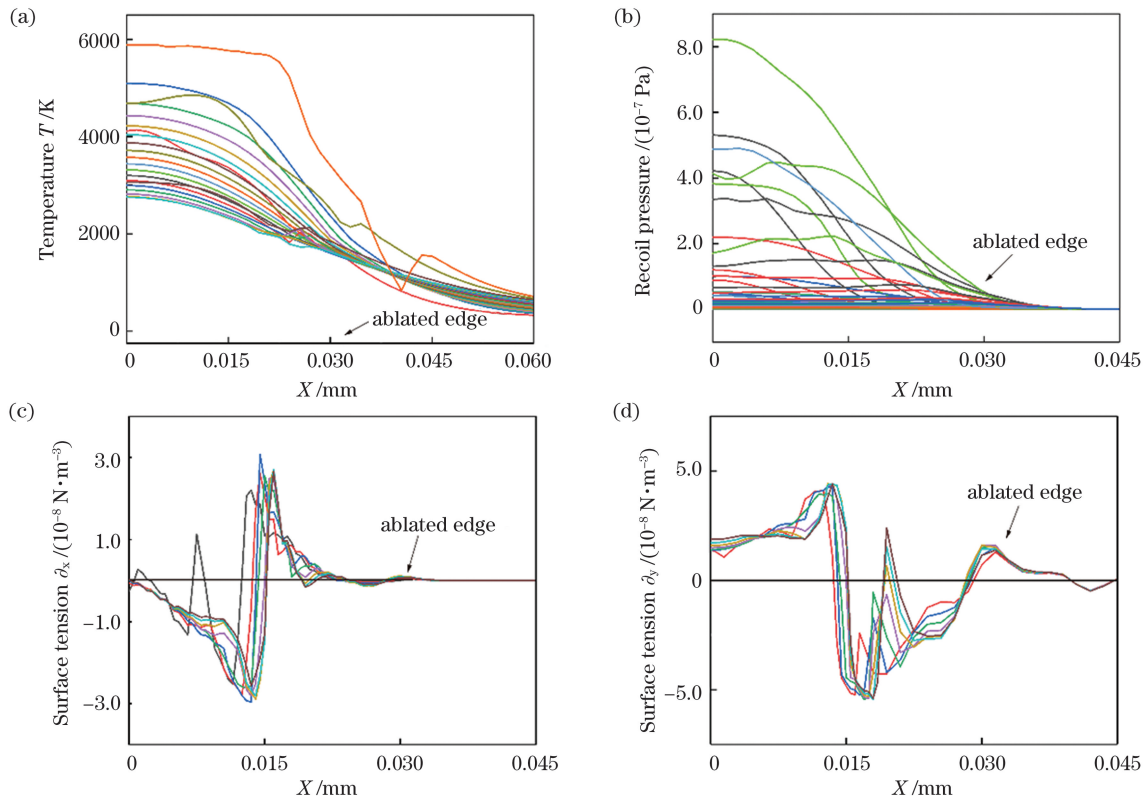


图 15 在第十个脉冲周期内,不同烧蚀时间下烧蚀中心到烧蚀边缘的参数。(a)温度;(b)反冲压力;(c)表面张力 X 分量;(d)表面张力 Y 分量

Fig. 15 Parameter from ablation center to ablation edge at different ablation times in the tenth pulse period.

(a) Temperature; (b) recoil pressure; (c) X component of surface tension; (d) Y component of surface tension

力、热毛细力的共同作用下,烧蚀边缘火山口的高度显著增加,但对 X 方向的尺寸影响较小。

4 结 论

本研究采用 COMSOL 水平集方法建立了一个涵盖传热、流场、表面张力、反冲压力和马兰戈尼效应的纳秒激光烧蚀钛合金微坑的二维模型。结果表明,在高斯光束作用下,温度场呈椭圆形分布,后续脉冲使温度场呈现月牙形分布。在一个脉冲周期内,在马兰戈尼效应、反冲压力和表面张力的共同作用下,液相向烧蚀边缘迁移,边缘的液相在一定速度下脱离基体并向四周溅射,导致烧蚀周边形成液滴溅射特征。降温过程主要受热传导影响,而空气对流和热辐射对单脉冲周期内的降温过程影响较小;当烧蚀温度低于熔点,液相从烧蚀边缘向烧蚀中心逐渐凝固,最终形成火山口形貌。随着烧蚀次数的增加,在气化和液相迁移的共同作用下,烧蚀坑的深度和火山口的高度显著增加;然而,烧蚀边缘处较低的反冲压力和水平方向表面张力导致槽宽和火山口宽度未随烧蚀次数显著增加。

参 考 文 献

- [1] Nie X, Leyland A, Matthews A, et al. Effects of solution pH and electrical parameters on hydroxyapatite coatings deposited by a plasma-assisted electrophoresis technique [J]. *Journal of Biomedical Materials Research*, 2001, 57(4): 612-618.
- [2] Wang Y F, Yu Z, Guo X R, et al. Surface morphology of modified titanium alloy affects proliferation stability of bone marrow mesenchymal stem cells [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2019, 366: 156-163.
- [3] Ozdemir Z, Ozdemir A, Basim G B. Application of chemical mechanical polishing process on titanium based implants [J]. *Materials Science and Engineering: C*, 2016, 68: 383-396.
- [4] Cunha A, Renz R P, Blando E, et al. Osseointegration of atmospheric plasma-sprayed titanium implants: influence of the native oxide layer [J]. *Journal of Biomedical Materials Research*, 2014, 102(1): 30-36.
- [5] van Velzen F J, Ofec R, Schulten E A, et al. 10-year survival rate and the incidence of peri-implant disease

- of 374 titanium dental implants with a SLA surface: a prospective cohort study in 177 fully and partially edentulous patients [J]. *Clinical Oral Implants Research*, 2015, 26(10): 1121-1128.
- [6] Ming R, Shen J W, Lai M T, et al. Characteristics of Femtosecond Laser Microprecision Ablation of 18Cr2Ni4WA Steel Used in Face Gears[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2021, 58(9): 0914001.
明瑞, 申警卫, 赖名涛, 等. 面齿轮材料 18Cr2Ni4WA 的飞秒激光精微烧蚀特性研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2021, 58(9): 0914001.
- [7] Wang Q H, Wang H X, Wang Z D, et al. Highly efficient nanosecond laser-based multifunctional surface fabrication and corrosion resistance performance[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2021, 48(14): 1402018.
王青华, 王慧鑫, 王占栋, 等. 高效纳秒激光多功能表面制备及抗腐蚀性研究[J]. *中国激光*, 2021, 48(14): 1402018.
- [8] Yu Z, Zhang W J, Hu J. Micromachining of titanium alloy implant by picosecond laser surface texturing and alloy biocompatibility [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(1): 0102014.
虞宙, 张文杰, 胡俊. 皮秒激光对医用钛合金植入物表面微加工及生物相容性的研究[J]. *中国激光*, 2017, 44(1): 0102014.
- [9] Luo X, Yao S L, Zhang H J, et al. Biocompatible nano-ripples structured surfaces induced by femtosecond laser to rebel bacterial colonization and biofilm formation[J]. *Optics & Laser Technology*, 2020, 124: 105973.
- [10] Purnama A, Furlan V, Dessi D, et al. Laser surface texturing of SS316L for enhanced adhesion of HUVECs[J]. *Surface Engineering*, 2020, 36(12): 1240-1249.
- [11] Brånemark R, Emanuelsson L, Palmquist A, et al. Bone response to laser-induced micro- and nano-size titanium surface features [J]. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*, 2011, 7(2): 220-227.
- [12] Dumas V, Rattner A, Vico L, et al. Multiscale grooved titanium processed with femtosecond laser influences mesenchymal stem cell morphology, adhesion, and matrix organization [J]. *Journal of Biomedical Materials Research*, 2012, 100(11): 3108-3116.
- [13] Xu Y, Liu W, Zhang G Q, et al. Friction stability and cellular behaviors on laser textured Ti-6Al-4V alloy implants with bioinspired micro-overlapping structures[J]. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2020, 109: 103823.
- [14] Chen J, Ulerich J P, Abelev E, et al. An investigation of the initial attachment and orientation of osteoblast-like cells on laser grooved Ti-6Al-4V surfaces[J]. *Materials Science and Engineering: C*, 2009, 29(4): 1442-1452.
- [15] Heinrich A, Dengler K, Koerner T, et al. Laser-modified titanium implants for improved cell adhesion [J]. *Lasers in Medical Science*, 2008, 23(1): 55-58.
- [16] Kilian K A, Bugarija B, Lahn B T, et al. Geometric cues for directing the differentiation of mesenchymal stem cells[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2010, 107(11): 4872-4877.
- [17] Wu J, Wei W F, Li X W, et al. Infrared nanosecond laser-metal ablation in atmosphere: initial plasma during laser pulse and further expansion[J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102(16): 164104.
- [18] Tan X Y, Zhang D M, Li Z H, et al. Ionization effect to plasma expansion study during nanosecond pulsed laser deposition[J]. *Physics Letters A*, 2007, 370(1): 64-69.
- [19] Tan X Y, Zhang D M, Yu B M, et al. Vaporization effect studying on high-power nanosecond pulsed laser deposition[J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2005, 358(1/2/3/4): 86-92.
- [20] Zhang D M, Tan X Y, Li Z H, et al. Thermal regime and effect studying on the ablation process of thin films prepared by nanosecond pulsed laser [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2005, 357(3/4): 348-355.
- [21] Zhang Z Y, Nian Q, Doumanidis C C, et al. First-principles modeling of laser-matter interaction and plasma dynamics in nanosecond pulsed laser shock processing [J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 123(5): 054901.
- [22] Li X X, Guan Y C. Theoretical fundamentals of short pulse laser-metal interaction: a review [J]. *Nanotechnology and Precision Engineering*, 2020, 3(3): 105-125.
- [23] Ren N F, Jiang L L, Liu D, et al. Comparison of the simulation and experimental of hole characteristics during nanosecond-pulsed laser drilling of thin titanium sheets [J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2015, 76(5/6/7/8): 735-743.
- [24] Liu D, Kong D X, Miao Z Q, et al. Simulation and experimental investigation on nano-second pulsed laser drilling of titanium alloy[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2018, 30(6): 069001.
刘丹, 孔德新, 苗在强, 等. 钛合金纳秒激光打孔数值模拟和实验研究[J]. *强激光与粒子束*, 2018, 30

- (6): 069001.
- [25] Liu H X, Yang S J, Wang X, et al. Experiment study and numerical simulation of pulsed laser ablation crater[J]. Chinese Journal of Lasers, 2009, 36(1): 219-223.
刘会霞, 杨胜军, 王霄, 等. 脉冲激光烧蚀凹腔的实验分析及数值模拟[J]. 中国激光, 2009, 36(1): 219-223.
- [26] Luo Y, Pang S Y, Zhou J X, et al. Numerical simulation of recast layer formation in nanosecond pulse laser drilling on nickel-based high-temperature alloy[J]. Chinese Journal of Lasers, 2014, 41(4): 0403007.
罗垚, 庞盛永, 周建新, 等. 镍基高温合金纳秒激光脉冲制孔再铸层形成过程数值模拟[J]. 中国激光, 2014, 41(4): 0403007.
- [27] Zhang J J, Zhao L, Rosenkranz A, et al. Nanosecond pulsed laser ablation on stainless steel-combining finite element modeling and experimental work[J]. Advanced Engineering Materials, 2019, 21(8): 1900193.
- [28] Yan Z X, Mei X S, Wang W J, et al. Numerical simulation on nanosecond laser ablation of titanium considering plasma shield and evaporation-affected surface thermocapillary convection [J]. Optics Communications, 2019, 453: 124384.
- [29] Osher S, Fedkiw R, Piechor K. Level set methods and dynamic implicit surfaces[J]. Applied Mechanics Reviews, 2004, 57(3): B15.
- [30] Yang C C, Lin Y C, Yang C C, et al. Laser-induced coloring of titanium alloy using ultraviolet nanosecond pulses scanning technology[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2017, 715: 349-361.
- [31] Li K, Zhao Z Y, Zhou H M, et al. Numerical analyses of molten pool evolution in laser polishing Ti_6Al_4V [J]. Journal of Manufacturing Processes, 2020, 58: 574-584.
- [32] Xue A T, Lin X, Wang L L, et al. Heat-affected coarsening of β grain in titanium alloy during laser directed energy deposition [J]. Scripta Materialia, 2021, 205: 114180.
- [33] Pariona M M, Taques A F, Woiciechowski L A. The Marangoni effect on microstructure properties and morphology of laser-treated Al-Fe alloy with single track by FEM: varying the laser beam velocity[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 119: 10-19.
- [34] Williams E, Brousseau E B. Simulation and experimental study of nanosecond laser micromachining of commercially pure titanium[J]. Journal of Micro and Nano-Manufacturing, 2016, 4(1): 011004.
- [35] Lee Y, Nordin M, Babu S S, et al. Effect of fluid convection on dendrite arm spacing in laser deposition [J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2014, 45(4): 1520-1529.
- [36] Meng Q B, Zhou X L, Li J H, et al. High-throughput laser fabrication of Ti-6Al-4V alloy: part I. Numerical investigation of dynamic behavior in molten Pool[J]. Journal of Manufacturing Processes, 2020, 59: 509-522.
- [37] Wang Y F, Zhang M J, Li K M, et al. Study on the surface properties and biocompatibility of nanosecond laser patterned titanium alloy [J]. Optics & Laser Technology, 2021, 139: 106987.
- [38] Grabowski A, Florian T, Wieczorek J, et al. Structuring of the Ti_6Al_4V alloy surface by pulsed laser remelting [J]. Applied Surface Science, 2021, 535: 147618.
- [39] Ulerich J P, Ionescu L C, Chen J B, et al. Modifications of Ti-6Al-4V surfaces by direct-write laser machining of linear grooves [J]. Proceedings of SPIE, 2007, 6458: 645819.

Numerical Simulation of Micro-pit Morphology of Titanium Alloy Ablated by Nanosecond Laser

Wang Yifei¹, Yu Zhou², Li Kangmei^{1,3,4}, Hu Jun^{2*}

¹ College of Mechanical Engineering, Donghua University, Shanghai 201620, China;

² Institute of Artificial Intelligence, Donghua University, Shanghai 201620, China;

³ Shanghai Collaborative Innovation Center for High Performance Fiber composites, Donghua University, Shanghai 201620, China;

⁴ State Key Laboratory of Digital Manufacturing Equipment & Technology, Wuhan 430074, Hubei, China

Abstract

Objective The titanium alloy microstructure processed by pulsed laser has been widely used in orthopedics or dental implants. It has been an essential method in the surface modification of medical titanium alloys. The surface microstructure processed by the short-pulse laser can promote the adhesion and proliferation of stem cells and inhibit bacterial colonization. The shape of the crater at the edge of the ablated micro-pit significantly affects the osseo integration and antibacterial properties of the implant. However, nanosecond laser ablation process of titanium alloy is a complex multiphysics problem, and the ablation process occurs in nanoseconds. The ablation process experiment cannot fully reveal the influence of process parameters on the formation of surface morphology. Therefore, this study employed the finite element method to simulate the forming process of titanium alloy micro-pit morphology. The changes in the temperature field, velocity field, and morphology with ablation time were also investigated. This research will promote the application of nanosecond laser modification technology in the field of titanium alloy implant surface treatment.

Methods The Osher-Sethian level set method was used to describe the surface tension using the curvature of the level set isosurface of the free boundary. Additionally, the surface tension was introduced into the source term of the Navier-Stokes equation. Considering the effect of surface tension, Marangoni effect, and recoil pressure on the liquid phase under the action of Gaussian beam, a two-dimensional finite element model of nanosecond laser ablation of titanium alloy micro-pit was established. The evolution of the ablation temperature field with the ablation time was investigated to analyze the effect of surface tension and Marangoni on the velocity field of the ablation zone. The dynamic formation process of the titanium alloy micro-pit structure was clarified. The scanning electron microscopy was used to observe the morphology of the micro-pits, and a video microscope was used to obtain information on the optical topography and geometric dimensions of the surface. Finally, the reliability of the simulation model was verified by comparing simulation and process experiments.

Results and Discussions Under the action of a Gaussian beam, the temperature field has an elliptical distribution (Fig. 3), and subsequent pulses cause the temperature field to have a crescent-shaped distribution (Fig. 5). In a pulse period, under the combined action of the Marangoni effect, recoil pressure, and surface tension, the liquid phase at the edge leaves the matrix at a certain speed and splashes around; thereby, forming droplet sputtering features around the ablation (Fig. 11). The formation of surface morphology has successively undergone melting, vaporization (Fig. 8), liquid phase migration, sputtering (Fig. 9), and solidification (Fig. 10). The cooling process is mainly affected by heat conduction. In contrast, air convection and heat radiation have little effect on the cooling process in a single pulse period (Fig. 4). The liquid phase gradually solidifies from the ablation edge to its center when the ablation temperature is lower than the melting point, forming the crater morphology (Fig. 10). The depth of micro-pits and height of the crater significantly increased as the number of ablation increased (Fig. 13). However, the width of the groove and crater did not increase significantly with the number of ablation increased (Fig. 15).

Conclusions This study employed a level set method to establish a two-dimensional finite element model of nanosecond laser to simulate the forming process of titanium alloy micro-pit structure covering heat transfer, fluid flow, surface tension, and Marangoni effect. In a single pulse period, the Marangoni effect caused by the surface tension gradient significantly affects the formation of the crater structure during melting, vaporization, liquid phase

migration, and solidification of the material. The formation of sputtered droplets arises from the combined effect of recoil pressure, surface tension, and thermal capillary force on liquid phase migration and sputtering. In the multipulse period, the differential surface tension of the ablation edge in the horizontal and vertical directions causes the height of the crater to increase significantly with the number of ablation; however, the width of the crater does not change significantly. Because the influence of plasma shielding on the incident laser was not considered in the model, it was only suitable for predicting the geometric size of the micro-pits when the number of ablation was less than 15 times.

Key words laser technique; laser ablation; titanium alloy; micro-pit; finite element method