## 超快激光加工过程主要数值模型研究进展

崔智铃1,管迎春1,2,3,4\*

<sup>1</sup>北京航空航天大学机械工程与自动化学院,北京 100191; <sup>2</sup>北京航空航天大学大型金属构件增材制造国家工程实验室,北京 100191;

<sup>3</sup>北京航空航天大学国际交叉研究院,北京 100191;

4北京航空航天大学合肥创新研究院,安徽 合肥 230013

**摘要** 超快激光具有脉冲能量高、加工精度高、热影响区小等特性,在材料加工尤其是微纳加工和表面改性中具有 独特优势。介绍了超快激光加工金属材料的典型数值模拟方法,综述了近十几年来关于超快激光加工金属材料过 程中烧蚀、等离子体效应和周期性表面结构形成机理的数值模拟研究进展,讨论了阐述三种机理的若干种模型和 局限,总结了当前超快激光加工数值模拟所面临的挑战,并对今后的研究重点进行了展望。

## **Review of Numerical Models of Ultrafast Laser Processing**

Cui Zhiquan<sup>1</sup>, Guan Yingchun<sup>1,2,3,4 \*</sup>

<sup>1</sup> School of Mechanical Engineering & Automation, Beihang University, Beijing 100191, China; <sup>2</sup> National Engineering Laboratory of Addictive Manufacturing for Large Metallic Components,

Beihang University, Beijing 100191, China;

<sup>3</sup> International Research Institute for Multidiscipline Science, Beihang University, Beijing 100191, China; <sup>4</sup> Hefei Innovation Research Institute of Beihang University, Hefei, Anhui 230013, China

**Abstract** Ultrafast lasers have the characteristics of high pulse energy, high processing accuracy, and small heat affected zone. They have unique advantages in material processing, especially in the fields of micro-nano processing and surface modification. This paper introduces the typical numerical simulation methods of ultrafast laser processing metal materials. It summarizes the research progress of numerical simulation based on the three mechanisms of ablation, plasma effect, and periodic surface structure formation in recent years. Several models and limitations of these mechanisms are introduced, the current challenges of numerical simulation for ultrafast laser processing are summarized, and future research focuses are prospected.

Key words laser technique; ultrafast laser; numerical simulation; laser processing; ablation; plasma; periodic surface structure

**OCIS codes** 140.3390; 140.7090

1 引 言

超快激光又称超短脉冲激光,是指脉冲宽度在 百皮秒(10<sup>-10</sup> s)至几飞秒(10<sup>-15</sup>)范围内的脉冲激 光。1964年,美国贝尔实验室的 Hargrove 等<sup>[1]</sup>发 明了被动锁模红宝石激光器,使激光脉宽第一次进 入皮秒(10<sup>-12</sup> s)量级。随着锁模技术、啁啾脉冲放 大(CPA)技术的发展和应用<sup>[2-4]</sup>,高功率超快激光脉 冲更易于获得,使其拥有广阔的应用空间和发展前 景。1987年,Srinivasan等<sup>[5]</sup>首次将超快激光应用 于材料加工过程中。由于其极小的热影响区<sup>[6]</sup>和较 小的碎屑污染,在之后的几十年中,超快激光被广泛

收稿日期: 2020-02-28; 修回日期: 2020-05-09; 录用日期: 2020-05-20

基金项目: 国家自然科学基金(51705013)、科技部重点研发计划重点专项 (2016YFB1102503)

<sup>\*</sup> E-mail: guanyingchun@buaa.edu.cn

用于高精度的微纳加工<sup>[7]</sup>,如表面改性、纳米粒子加工、特殊材料加工等<sup>[8-10]</sup>。

随着超快激光加工技术的广泛应用,人们开始 对激光与材料相互作用过程中的能量耦合、快速相 变和非线性过程[11]等展开研究。然而,在亚皮秒级 时间尺度和亚微米级的相互作用区域下,通过诊断 性实验难以对晶格温度、电子温度等物理量进行直 接测量,也难以对激光加工的复杂过程进行精确描 述。数值模型则可以解决信息缺失的问题,为解决 超快激光与材料之间相互作用机制的问题提供方 法,因而吸引了许多研究者的关注,如国内的陈烽课 题组对飞秒激光双脉冲辐照金膜的过程进行模拟, 以探究烧蚀的超快热力学过程[12-13];姜澜课题组对 超快激光脉冲串加工金属薄膜进行了深入的研 究[14-15];美国罗彻斯特大学郭春雷课题组分别通过 实验和数值建模的角度研究超快激光烧蚀金属过程 中纳米结构形成等的动力学机理[16-17]等。本文围绕 超快激光加工过程中的烧蚀、等离子体效应和周期 性表面结构形成三种机理,综述了近十几年来对超 快激光加工金属过程的数值模拟研究进展,介绍了 用于模拟超快激光加工的若干种数值模型及其局 限,总结了超快激光加工数值模拟在当前面临的主 要挑战,并对今后的研究重点进行了预测和展望。

2 主要数值模型

### 2.1 双温模型

超快激光和金属材料相互作用并产生烧蚀可以 被看作三个阶段:1)金属中的自由电子通过反向轫 至辐射效应吸收激光辐射[18];2)电子和晶格相互作 用,完成能量传递;3)晶格间建立热平衡,此时晶格 的温度和动能上升。由于电子热容很小,电子与电 子相互作用的时间极短(以百飞秒计),远少于电子 系统和晶格系统之间的能量交换时间(几皮秒到几 十皮秒),因此会出现强烈的非热平衡。1974年, Anisimov 等<sup>[19]</sup>首次使用双温模型(TTM)描述这一 非平衡过程。该模型通过求解一组耦合的非线性微 分方程描述电子-声子能量传递的时空演化,由于晶 格间的热导率远小于电子热导率,在双温模型中可以 忽略不计,晶格中的热扩散不予考虑,因此离子只能 与电子进行局部的能量交换。在双温模型创建之初, 该模型仅适用于金属材料,随着研究者们将电子-声 子耦合过程推广到声子-声子耦合,该模型可被广泛 用于对电解质、半导体、气体等多种类型材料的模 拟<sup>[20]</sup>。可以通过两个偏微分方程来描述双温模型:

$$C_{\rm e}(T_{\rm e}) \frac{\partial T_{\rm e}}{\partial t} =$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( K_{e} \frac{\partial}{\partial z} T_{e} \right) - g \left( T_{e} - T_{1} \right) + S(z, t), \quad (1)$$

$$C_{e} \left( T_{e} \right) \frac{\partial T_{1}}{\partial z} = g \left( T_{e} - T_{e} \right), \quad (2)$$

$$C_{l}(T_{1}) \frac{\partial T_{1}}{\partial t} = g(T_{e} - T_{1}), \qquad (2)$$

式中: $C_e$ 和  $C_1$ 分别为电子热容和晶格热容; $T_e$ 为电子温度; $T_1$ 为晶格温度; $K_e$ 为电子热导率;g为电子-声子耦合系数;S(z,t)为吸收激光能量(单位时间密度)。

为使双温模型更加准确地模拟激光和材料间的相 互作用,韩国中央大学的 Lee 等<sup>[21]</sup>研究了电子-声子耦 合系数对模拟结果的影响。结果表明,在高激光强度 下,恒定的电子-声子耦合不能考虑激发的 d 带电子的 增加对能量传递的影响,该研究者通过将电子-声子耦 合系数修正为温度的函数,更准确地模拟高激光通量 下的相爆过程。上海交通大学的 Zhang 等<sup>[22]</sup>在 2015 年对三维双温模型进行改进,用以模拟在真空条件下 多脉冲飞秒激光烧蚀厚铝膜、加工高深宽比孔洞的过 程。改进的模型将光斑尺寸从常数 w。替换为轴向位 置 z 的函数 w(z),更准确地描述了激光束的传播,通 过图 1 可以观察出改进前后的显著差异。





双温模型预测的热弛豫时间尺度为皮秒量级,当脉冲时间大于这个范围时,金属中电声弛豫过程结束,傅里叶热扩散机制会成为主要传热机制,因此,双 温模型的适用范围为脉冲持续时间小于等于皮秒量 级的脉冲激光。由于超快激光脉冲周期极短,在脉冲 周期时间内电子-晶格间的能量不平衡的问题更加突 出,因此双温模型广泛应用于超快激光仿真领域。由 于在超快激光和材料的作用过程中,许多物理参数会随着加工时间和温度变化发生改变,目前研究者们的研究重点集中在对相关参数变化规律的探索和对双 温模型的修正。通过双温模型对超快激光加工金属材料进行模拟,研究者们发现超快激光加工过程涉及 烧蚀、散裂、相爆、蒸发多种机制,是一种复杂的材料 去除过程。双温模型也存在着一些局限。例如,在构 建双温模型时需要借助很多拟合参数和假设条件,这 将严重影响模拟的准确度,并且双温模型无法模拟出 微观层面上分子振动、形核过程。

### 2.2 分子动力学模型

分子动力学(MD)模拟是一种利用计算机模拟 分子和原子相互作用,然后记录它们行为的方法,其 发展基于经典力学、量子力学和统计力学等理 论[23]。通常情况下,系统的传热过程因其自身复杂 性难以通过解析方法求解,使用 MD 模型可以有效 解决这一问题。此外,这种方法还能够获得粒子的 许多性质,如速度、温度、压力等[24],非常适合用来 研究固体材料的相变过程。MD模型由美国加利福 尼亚大学的 Alder 等<sup>[25]</sup>提出,如今被应用于医药、 化学、生物、材料、机械等各个领域。由于 MD 模型 直接模拟分子系统的运动,所以该模型适用于对各 种材料进行模拟,如金属、半导体、气体、有机材料 等<sup>[26-27]</sup>。为了将 MD 模型从量子机制简化为经典 牛顿力学机制,MD 模型的提出基于两个基本假设: 1)玻恩奥本海默绝热近似,即认为电子处于单一的 本征态,可以进行单独计算;2)原子核的质量远大于 电子,可视其为遵循经典牛顿动力学的点粒子。粒 子系统的控制方程可表示为

$$F(X) = -\nabla U(X) = ma, \qquad (3)$$

$$V(t) = X(t), \qquad (4)$$

式中:F 为作用在粒子上的力;U 为势能函数;X 为 粒子坐标;m 为粒子的质量;a 为加速度; $\nabla U$  为势 能函数U的微分;V 为粒子的速度; $\dot{X}$  为粒子位移 X 的微分。常用的势能函数U(X) 为非键合 Lennard-Jones 势,势能函数可表示为

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \frac{12\sigma_{\rm e}}{r_{ij}} - \left( \frac{\sigma_{\rm e}}{r_{ij}} \right)^6 \right], \qquad (5)$$

式中: $\epsilon$  为势阱的能量; $\sigma_e$  为粒子间势为 0 时的平衡 距离; $r_{ii}$  为粒子间的距离。

传统的 MD 模型难以描述粒子对激光能量的 吸收过程,为了更好地模拟激光吸收过程,许多研究 者尝试将双温模型与 MD 模型进行耦合。2010 年 凯泽斯劳滕工业大学的 Urbassek 等<sup>[28]</sup>通过 TTM 定量地描述电子动力学,并将其耦合到 MD 模型, TTM 模型描述了在电子-离子热化时间内电子的初 始加热,而所有后续引起烧蚀和剥落的过程均在 MD 框架下进行描述。同年,密苏里大学的 Gan 和 Chen<sup>[29]</sup>将一维热电子爆炸力模型加入到 TTM-MD 模型中,用以补充对激光与金属相互作用在极早期产 生的非平衡热态和显著的热电子爆炸波的描述。混 合模型既能在宏观尺度上描述电子对能量的吸收与 传递,也能利用分子动力学对微观现象进行模拟。

MD 模型能精确地再现原子级过程,例如亚稳态液相中的成核动力学等,但也存在着运算量极大的问题,导致 MD 模拟更加昂贵,并且无法模拟大面积区域或长时间过程。经典的 MD 方法还存在着不能描述激光与材料作用时电子晶格间的非平衡传热过程的问题<sup>[30]</sup>。

### 2.3 流体力学模型

超快激光加工过程中伴随着相变、亚稳态过程、 物质喷射、冲击波等动力学过程,因此常用流体动力 学(HD)模型对超快激光加工进行仿真。流体动力 学方法在计算材料性质和时间消耗方面取得了平 衡,能够模拟等离子体的运动过程。由于在超强激 光作用下,材料表层变成高温等离子体,人们对其性 质有着较为充分的研究,所以流体动力学方法可以 用于对多种材料的模拟,如金属、电介质、有机材料 等<sup>[31-32]</sup>。半经验双温状态(EOS)方程是计算材料演 变过程的关键因素,用于计算不同外部条件(温度和 压强)下材料的热学特性和电子特性。

HD 方法基于质量、动量和能量的守恒定律,用 具有速度 v 和温度 T 的单一流体分别近似处理三种 物质,包括电子、离子和辐射,计算了每种物质的温度 变化。通过求解 Navier-Stokes 方程得到速度 v:

$$\rho \, \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial(p+q)}{\partial z},\tag{6}$$

式中:ρ 为材料的质量密度; p 为压力;q 为冯诺依 曼黏度;t 为时间;z 为沿法向到固体表面的坐标。

温度 T 可通过求解能量守恒方程获得:

$$\left(\frac{\partial U_{\rm in}}{\partial T}\right)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} + \left[\left(\frac{\partial U_{\rm in}}{\partial \rho}\right)_T - \frac{p}{\rho^2}\right]\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = S(z,t), (7)$$

式中: $U_{in}$ 是物质的热力学能,是t的函数;S(z,t)可通过求解 Helmholtz 波动方程求解。

法国国立机械与航空技术大学的 Cuq-Lelandais 等<sup>[33]</sup>在一维 HD 模型中加入双温状态方 程模拟飞秒激光作用下铝的散裂过程,模拟结果证 明了在 HD 模型中加入双温状态方程的必要性, TTM 方程在模拟中用以处理激光物质相互作用的 非平衡效应。同时,研究者还在 HD 模型中加入动 态损伤模型,以再现飞秒尺度下的断裂力学。俄罗 斯科学院的 Povarnitsyn 等<sup>[34]</sup>在 HD 模型中加入了 成核动力学模型,该模型可以很好地模拟亚稳态液 相中同质成核转变为新平衡态的动力学过程。

与 TTM 相似, HD 模型也存在着依赖拟合参数、对激光能量的吸收过程过于简化、难以精确描述 微观尺度上的形核动力学等缺陷。

3 数值模拟的主要应用

### 3.1 超快激光烧蚀过程数值模拟

超快激光加工的主要过程为烧蚀过程。激光烧 蚀金属的过程复杂,涉及的加工种类多,烧蚀的深度 和时间范围广,不同激光强度的烧蚀机理不同。自 20世纪90年代以来,人们对超快激光烧蚀机制进 行了大量的研究。

一般情况下,激光光斑的尺寸会远大于热影响 深度,只有 z 方向的温度变化需要考虑,因此,很多 研究者采用一维双温模型对烧蚀过程进行模拟。 2010年,密苏里大学的 Huang 等<sup>[35]</sup>利用一维双温 模型对飞秒激光脉冲序列辐照金膜的超快相变过程 进行了数值模拟。模拟结果显示,通过将激光束分 裂成许多小的单脉冲,可以获得更深的熔化深度和 更低的温度;每次脉冲数越高,单脉冲之间间隔时间 越大,熔深和温度的变化越明显;而重复频率对过程 影响不大。台湾交通大学的 Wang 等<sup>[36]</sup>在 2013 年 利用一维双温模型对飞秒激光烧蚀铜进行了模拟仿 真,并与实验数据进行比较。结果表明,在 0.8~ 408 J/cm<sup>2</sup>的激光强度下,模拟结果与实验数据吻合

良好。然而,在激光强度小于 0.8 J/cm<sup>2</sup> 时,烧蚀主要 由非热机制控制,超出该模型适用范围,导致模拟结 果与实验数据出现差异。2016年,该团队又利用一 维双温模型模拟在 6.1~63.4 J/cm<sup>2</sup> 激光强度下的单 飞秒激光脉冲对铜箔表面的热烧蚀,得到了与实验数 据相匹配的模拟结果,并探究了表面反射率、吸收系 数、电子穿透深度随时间的变化情况[37]。邵俊峰 等[38]使用一维双温方程对飞秒单脉冲和双脉冲激光 照射下的金靶的热行为进行了对比分析。结果表明, 在高于能量阈值附近,双脉冲的熔化面深度小于单脉 冲的熔化面深度,然而,激光能量增加到3500 mJ/cm<sup>2</sup> 以上时,双脉冲激光优势明显,熔化面深度大于单脉 冲的熔化面深度。Saghebfar 等<sup>[39]</sup>在 2016 年通过一 维双温模型研究了多脉冲烧蚀中脉冲数和脉冲分离 时间对热响应的影响,同时还对不同的电子-声子耦 合系数、不同脉冲持续时间和弹道电子输运的不确定 度对双温模型输出的影响进行了研究,模拟结果证明 高温下光学性质的变化是影响超快激光加热金属试 样热响应的主要因素,另外,该研究还揭示了脉冲间 隔对"潜伏效应"(随着入射激光脉冲数量的增加,激 光对材料的烧蚀阈值降低的现象)的影响:较短的分 离时间内的热传导小于较长分离时间内的。2017 年,浙江大学的雷春霞[40] 建立了超快激光照射金箔 的一维和不规则二维双温模型,并分别采用物质点法 和差分法进行求解。结果表明,物质点法能够更加准 确便捷地应用到多维热力变形等不规则模型、不规则 粒子分布问题的研究。

为准确预测烧蚀孔的形状,上海交通大学的 Li 等<sup>[41]</sup>在 2011 年使用三维双温模型研究铝薄膜的单 脉冲飞秒烧蚀。通过该模型可以在烧蚀前预测烧蚀 半径和烧蚀深度,仿真结果如图 2 所示。



图 2 不同激光强度下单脉冲烧蚀产生的烧蚀坑的三维仿真结果<sup>[41]</sup>。(a) 2 J/cm<sup>2</sup>;(b) 5 J/cm<sup>2</sup>;(c) 8 J/cm<sup>2</sup> Fig. 2 Simulated 3D ablation craters by single pulses with different laser intensities<sup>[41]</sup>. (a) 2 J/cm<sup>2</sup>;

(b) 5  $J/cm^2$ ; (c) 8  $J/cm^2$ 

保加利亚科学院的 Nedialkov 等<sup>[42]</sup>在 2007 年 通过 MD 模型模拟超快激光在镍、铝材料上打孔。 在图 3 的模拟结果中可以观察到膨胀羽流由两部分 组成,即速度很快的原子羽流部分和膨胀速度很小的纳米簇。烧蚀深度与激光强度在烧蚀阈值到 0.4 J/cm<sup>2</sup>区间呈对数关系,而在通量大于0.5 J/cm<sup>2</sup>





时,这种依赖关系逐渐增大。

蒙特利尔大学的 Lewis 和 Perez<sup>[43]</sup> 通过使用二 维分子动力学模型模拟飞秒、皮秒激光的烧蚀过程, 研究导致烧蚀的物理机制。在飞秒条件下,烧蚀机 制会出现散裂(由拉伸应力引起的缺陷导致材料破 裂)、相爆炸(将热力学上稳定的均质液体分解为液 滴和气体的混合物)、碎裂(在大应变率的作用下将 匀质材料分解为团簇)、汽化(单体的集体喷射)4 种 情况。图 4 显示出不同激光强度和不同材料深度下 的不同烧蚀机制,使用的激光波长为 370 nm,脉宽 为 200 fs。在皮秒条件下,烧蚀则完全是由于琐碎 碎裂产生的。

俄罗斯科学院的 Povarnitsyn 等<sup>[44]</sup>在 2009 年 利用基于多材料的欧拉流体力学模型模拟 100 fs 脉 宽、800 nm 波长的飞秒激光与铝、金、铜、镍等金属 的相互作用,观察了激光烧蚀的三种机制:1)自由表 面的直接蒸发;2)临界点附近的均匀成核;3)液相 的机械空化。模拟结果显示烧蚀材料的质量分数主 要由机理 3)(~80%)决定,而机制 2)产生的烧蚀材 料质量分数约为 10%~15%。该团队在 2011 年使 用包含多相宽范围状态方程的 HD 模型模拟双脉冲 飞秒激光烧蚀铜的过程,通过 HD 模型模拟双脉冲 飞秒激光烧蚀铜的过程,通过 HD 模型模拟了激光 脉冲产生的冲击波,总结了不同脉冲间隔情况对烧 蚀深度的影响<sup>[45]</sup>。2013—2014 年,该团队使用一维 拉格朗日 HD 模型,模拟飞秒激光与金属在液体



图 4 烧蚀机理随材料深度和激光强度发生变化<sup>[43]</sup> Fig. 4 Ablation mechanism changes with material depth and laser intensity<sup>[43]</sup>

(水)和真空中相互作用产生纳米粒子的过程。结果 表明纳米颗粒的出现是由于液层的喷射和破碎引起 的,在周围液体存在的情况下,激光烧蚀被高度抑 制,相应的烧蚀阈值比在真空中要大得多<sup>[46-47]</sup>。 Povarnitsyn等<sup>[34]</sup>在2015年又使用流体力学模型 模拟飞秒激光烧蚀大块铝靶的过程,并与 MD 模拟 进行了对比。结果表明,HD 方法可以对激光烧蚀 的主要过程进行快速的初步建模。图 5 所示为该团 队利用 HD 模型绘制的不同金属烧蚀过程中的相态 时空分布图<sup>[34,44-46]</sup>。

圣彼得堡彼得大帝理工大学的 Davydov 等<sup>[48]</sup> 利用一维流体力学模型模拟 170 fs 脉宽的超快激光 烧蚀铜、铝材料,并与实验数据进行对比。结果表 明,激光强度在 0.5~35 J/cm<sup>2</sup> 范围内,铜和铝的模 拟结果与实验数据非常接近,可以利用该模型对烧 蚀过程的激光参数进行选择,从而提高纳米粒子制 备的精度。激光对铝烧蚀的实验和模拟数据对比如 图 6 所示。

南佛罗里达大学的 Demaske 等<sup>[49]</sup>模拟微米尺 度的金薄膜在超短脉冲激光辐照下的烧蚀和散裂的 协同动力学。该团队采用 MD/双温流体动力学 (2T-HD)方法模拟了应力约束状态的形成,该模型 能展现出烧蚀和剥落的基本微观机制,包括剥落与 烧蚀的耦合和解耦,通过此模型可估算出在超高应 变速率下熔融金的强度和固态金的剥落强度。图 7 所示为在散裂阈值(F<sub>s</sub>=193 mJ/cm<sup>2</sup>)附近的压力 和密度图,可以注意到膜的后部也发生了剥落。 2014年,干湧<sup>[50]</sup>利用 TTM-MD 对飞秒激光引起的 金纳米棒热应力行为开展了模拟研究。结果表明, 在飞秒激光照射下,金纳米棒先发生表面预熔,随后 出现面缺陷,并向纳米棒内部发展演化,最后形成相



图 5 HD 模拟烧蚀不同金属的相态时空分布图。(a)铜<sup>[45]</sup>;(b)铝<sup>[34]</sup>;(c)镍<sup>[44]</sup>;(d)金<sup>[46]</sup> Fig. 5 Spatial and temporal distributions of phase states of different ablation metals with HD method. (a) Copper<sup>[45]</sup>; (b) aluminum<sup>[34]</sup>; (c) nickel<sup>[44]</sup>; (d) gold<sup>[46]</sup>



# 图 6 铝的烧蚀深度与激光注量的关系(实验和 HD 模拟数据对比)<sup>[48]</sup>

Fig. 6 Relationship between ablation depth of aluminum and laser fluence (comparison between experimental data and HD simulation data)<sup>[48]</sup>

互平行的栾晶界。该研究有效解决了已有研究关于 金纳米棒的预熔和缺陷发生顺序的争论。同年,唐 一波等<sup>[51]</sup>使用 TTM-MD 模拟了脉宽为 100 fs 的 超短脉冲激光烧蚀 B2 结构镍钛形状记忆合金薄膜 的作用。结果表明,烧蚀产生的压力波传播时引起 靶材热能的弛豫,在低于烧蚀阈值的能量密度下 (20~35 mJ/cm<sup>2</sup>),烧蚀产生的压力波诱导了靶材 的相变行为并产生了三明治结构。2016 年,吴寒 等<sup>[52]</sup>通过构建 Ar-Al 相互作用势能函数实现飞秒



图 7 在散裂阈值 F<sub>s</sub>=193 mJ/cm<sup>2</sup> 附近的压力和 密度图<sup>[49]</sup>。(a)压力;(b)密度图

Fig. 7 Pressure and density near spallation threshold  $F_s =$  193 mJ/cm<sup>2[49]</sup>. (a) Pressure; (b) density

激光在氩气环境中烧蚀金属铝的 TTM-MD 模拟, 得到了皮秒量级时间延迟下的烧蚀动态图像和此过 程中氩气温度、密度的演化规律,并提供了一种构建 气体原子和固体原子相互作用势能函数的普遍方 法。2017年,雷春霞等<sup>[53]</sup>使用 TTM-MD 分别对动 态和常数光学性质下,超快激光作用下铜薄膜的热 响应进行了数值计算。结果表明,采用动态光学性 质和常数光学性质计算出的电子温度与晶格温度的 差别整体上并不明显。

#### 3.2 等离子体数值模拟

激光烧蚀材料的过程中,加工表面上方会形成 等离子体。不同激光强度下,等离子体对加工过程 会造成不同的影响:在低、中强度时,等离子体会吸 收一部分激光能量,造成等离子体屏蔽的现象;而当 激光强度提高后,伴随的压力和冲击波增强了激光 能量吸收<sup>[54]</sup>,这种能量耦合效应可以使加工表面产 生微观结构,因此超快激光加工产生的等离子体效 应也成为人们重点研究的对象。

2008 年加利福尼亚大学的 Chen 等<sup>[55]</sup>建立了 飞秒激光辐照金属表面早期等离子体起爆模型的理 论分析,并加入双温模型来描述电子和晶格子系统 与激光脉冲的相互作用。如图 8 所示,羽流对激光 的总吸收在激光强度 *I*=1.39×10<sup>12</sup> W/cm<sup>2</sup> 左右吸 收系数变化极大,可将其视为等离子体形成的阈值 激光强度。结果显示,当脉宽从 15 fs 增加到 200 fs 时,等离子体形成阈值仅降低 20%左右,阈值强度 与激光脉冲宽度的关系可以归结为激光诱导的表面 电子发射,其值受光电效应的影响。





2013 年美国普渡大学的 Zhao 等<sup>[56]</sup> 通过采用 二维轴对称流体力学模型比较了真空和空气中的烧 蚀现象。研究表明,等离子体会在激光强度达到 10<sup>14</sup> W/cm<sup>2</sup> 时吸收激光能量,这部分能量约占入射 激光束总能量损失的 30%,由于空气的击穿和空气 中等离子体的早期产生,激光在空气中的能量损失 比真空中的大得多。

2015年,俄罗斯科学院的 Povarnitsyn 等<sup>[57]</sup>使 用 MD-TTM 模型研究不同脉冲间隔对亚皮秒激光 烧蚀铝过程的影响。研究表明新生等离子体羽流对 第二脉冲的吸收率在延迟从 0 ps 到 200 ps 时从 25%增加到 98%,如图 9 所示。对于大于 20 ps 的 脉冲间隔,可以观察到等离子体屏蔽效果,并且第二 个脉冲未到达目标。这些原因造成了烧蚀坑深度呈





Fig. 9 Absorption of the first (blue squares) and the second (red circles) pulses by plasma plumes as a function of delay between them. Intensity of each pulse is 2 J/cm<sup>2[57]</sup>

单调减小。2017年,该团队对 HD-TTM 模型和 MD-TTM 模型模拟飞秒双脉冲激光烧蚀铝进行了 比较,分别用 HD 模型状态方程和 MD 模型原子间 势定义等离子系统,两种方法获得的等离子体动力 学非常相似<sup>[58]</sup>。

2015年俄亥俄州立大学的 Schumacher 等<sup>[59]</sup> 通过质点网格 (PIC) 法以及双温模型对飞秒激光 烧蚀铜形成周期性光栅结构的过程进行模拟。结 果表明,这种结构的形成与表面等离子体极化激 元(SPP)的形成及其对入射激光脉冲的干扰直接 相关。2017年,该团队又通过 PIC 方法模拟超快 激光烧蚀铝的热密物质(WDM)动力学<sup>[60]</sup>。热密 物质是固相和等离子体之间的过渡状态,对其行 为的研究对了解加工过程中等离子的形成有重要 意义。

### 3.3 周期性表面结构形成过程数值模拟

激光诱导的周期性表面结构(LIPSS)在1965 年首次被 Birnbaum 发现<sup>[61]</sup>, LIPSS 是一种普遍现 象,几乎可以在任何材料上观察到线性偏振激光束 辐照后的表面结构<sup>[62]</sup>。近年来,LIPSS 领域的研究 活动显著增加,这在一定程度上是由于商用超快激 光源更易获得,并且空间周期明显小于激光波长的 LIPSS 仅能通过超快激光辐照固体产生<sup>[63]</sup>。因此, 出现了一些基于 LIPSS 的应用,如颜色标记<sup>[64]</sup>、表 面润湿性<sup>[65-66]</sup>、生物相容性<sup>[67]</sup>、抗菌表面<sup>[68]</sup>等。然 而,人们对其形成机理的认识不足,限制了其进一步 的发展应用,因此研究者们利用超快激光模拟仿真 研究 LIPSS 的形成机理。

Djouder 等<sup>[69]</sup>在 2012 年用 PIC 方法预测飞秒

激光烧蚀铜引起的 LIPSS。结果表明:对于线性激 光偏振,LIPSS 结构显示为波纹形;对于圆形激光偏 振,LIPSS 结构则显示为纳米颗粒形式。这些结构 的数量级和空间周期的行为与文献中的一致,图 10、11 分别为烧蚀开始 10 fs 后线偏振和圆偏振的 模拟结果。2013 年,该团队又用结合有限差分时域 (FDTD)方法的 PIC 法模拟飞秒激光与光滑铜表面 作用形成 LIPSS 的过程。结果表明,以波纹形式形 成的 LIPSS 具有两个周期,分别对应于低空间频率 LIPSS (LSFL)或高空间频率 LIPSS (HSFL)结构, 该研究提出了由于自由电子密度不均匀而产生的库 仑爆炸的机理<sup>[70]</sup>。



图 10 10 fs 后线偏振模拟结果,光强 10<sup>10</sup> W/cm<sup>2[69]</sup>。(a)电子密度分布图;(b)电场分布图 Fig. 10 Simulation results obtained for linear polarization with intensity of 10<sup>10</sup> W/cm<sup>2</sup> after 10 fs<sup>[69]</sup>. (a) Electronic density profile; (b) electrical field profile





德国卡塞尔大学的 Ivanov 等<sup>[71]</sup>在 2015 年用 超大尺度 MD-TTM 模型模拟皮秒激光在厚金靶表 面形成 LIPSS。结果表明,LIPSS 的形成是三种机 制共同作用的结果:在惯性应力约束条件下,激光引 起的压缩应力的松弛促进了材料熔融部分中入射能 量最高区域的空隙的形成;孔隙的形成缓和了诱导 的拉伸应力,有助于上部液体流体动力运动的建立, 导致结构的生长;同时,靶体中快速的电子热传导为 上升结构提供了强烈的冷却,使其快速再分解。结 果还表明,LIPSS 由于位错面强化了其内部结构,具 有较高的耐磨性。

捷克科学院的 Levy 等[72] 在 2016 年利用二维

双温模型研究了钛表面激光能量周期性调制的时空 演化过程。模拟结果表明,光能的调制被传递到晶 格温度(热调制可以存在约 10 ps),材料可以在入射 波和表面散射波相互干扰的条件下在表面上经历瞬 态纳米熔融。

美国弗吉尼亚大学的 Shugaev 等<sup>[73]</sup>在 2017 年 利用大规模的 MD-TTM 模型研究在强烧蚀状态下 单脉冲 LIPSS 在铬表面形成的机理:激光脉冲的快 速加热导致约 30~40 nm 深的表面层爆炸分解为 蒸汽和液滴的混合物,由空间调制的激光烧蚀所产 生的羽流的侧压力梯度,将水汽和液滴驱动到目标 表面激光能量沉积最小值以上的区域,材料的再分 配导致高密度区域的形成,并演变成细长的液壁,在 靶表面以上延伸至约 600 nm,液体壁的顶部分解成 液滴,而壁的底部在~2 ns 的时间尺度上凝固, 产生~100 nm 长的冷却表面特征,图 12 所示为液体壁的形成过程。此模拟还显示了高密度位错的产生。



图 12 烧蚀过程中液体壁的形成<sup>[73]</sup> Fig. 12 Formation of liquid walls during ablation<sup>[73]</sup>

法国里昂大学的 Rudenko 等[74] 在 2019 年利用 多物理模型研究了亚、近和略高于阈值的多个飞秒 激光脉冲辐照下不锈钢表面的演化过程,该多物理 模型结合了麦克斯韦方程组、双温模型和可压缩纳 维-斯托克斯方程。结果表明,对于亚阈值烧蚀通 量,材料在初始表面水平以上膨胀并在表面以下形 成纳米腔,激光诱导的空腔数量和空腔周围的局部 场增强随外加脉冲数的增加而增加,使表面产生纳 米粗糙度,激光诱导的非均匀性的相干散射是波纹 的起源,并随着阈下通量的加深而加深,纳米结构的 空化和随之而来的局域场增强改变了纹波的形状, 从而促进了纹波的调节;而近阈值烧蚀脉冲的单脉 冲照射导致表面以下形成微孔洞,如果施加几次脉 冲,散裂会导致火山口形状的坑的形成,材料在坑周 围扩张,脉冲数量的增加导致波纹的形成和金属表 面的增强吸收,热烧蚀改变了波纹的形状,使整个表 面的温度分布均匀,纳米结构得到调节;烧蚀通量大 于阈值时,主要通过热烧蚀机制增加烧蚀深度。图 13 显示了多脉冲飞秒激光辐照下电磁和流体动力 学耦合过程。

### 4 结束语

随着超快激光在材料加工领域的应用日趋广 泛,人们通过数值模拟对加工过程的研究也愈加深 入,烧蚀、等离子体效应和周期性表面结构形成这三 种现象的机理是研究者关注的重点,常用的仿真模 型包括 TTM 模型、MD 模型、HD 模型等。数值模 拟可以帮助理解超快激光与材料相互作用过程中能 量耦合、快速相变、非线性过程对加工的影响,使加 工过程更加可控。

目前超快激光加工过程的数值模拟还面临一些难题:1)模拟结果对原子间势、介电常数和电子-声子耦合时间等拟合参数有较强的依赖性;2)双 温模型、分子动力学模型、流体力学模型等现有的 模拟方法都存在相应的局限,目前还没有一种模 型能完全准确描述加工过程;3)目前的模拟还只 局限在小范围、短时间过程,工业级的大规模模拟 还难以实现。

将多种模型进行耦合,提高建模质量将会是超 快激光模拟的发展趋势。另外,由于超快激光加工 过程涉及量子领域,利用量子力学求解加工过程也 会是未来的发展方向。超快激光烧蚀金属材料涉及 多种机制,建立一个能同时准确描述包括散裂、相 爆、蒸发等各种机制产生的物理现象的模型是研究 超快激光加工过程的关键问题<sup>[75]</sup>。另外,目前对超 快激光与材料相互作用的模拟多停留在对单脉冲作 用效果的研究,而在实际加工过程中,材料会受到多 个脉冲的作用,并且能量吸收率等会因为前序脉冲 的作用而改变,因此,对多个脉冲作用过程进行模拟 将有助于更好地模拟真实加工过程。随着仿真模型 的不断优化和计算效率的提高,未来人们将更准确 地模拟出超快激光的加工过程。



图 13 多脉冲飞秒激光辐照下电磁和流体动力学耦合过程的示意图[74]

Fig. 13 Schematics of electromagnetic and hydrodynamic coupling processes upon multipulse femtosecond laser irradiation<sup>[74]</sup>

### 参考文献

- Hargrove L, Fork R L, Pollack M. Locking of He-Ne laser modes induced by synchronous intracavity modulation [J]. Applied Physics Letters, 1964, 5 (1): 4-5.
- [2] Fork R L, Brito Cruz C H, Becker P C, et al. Compression of optical pulses to six femtoseconds by using cubic phase compensation [J]. Optics Letters, 1987, 12(7): 483-485.
- [3] Spence D, Kean P, Sibbett W. 60-fsec pulse generation from a self-mode-locked Ti: sapphire laser
   [J]. Optics Letters, 1991, 16(1): 42-44.
- [4] Squier J, Coe S, Clay K, et al. An alexandrite pumped Nd:glass regenerative amplifier for chirped pulse amplification [J]. Optics Communications, 1992, 92(1/2/3): 73-78.
- Srinivasan R, Sutcliffe E, Braren B. Ablation and etching of polymethylmethacrylate by very short (160 fs) ultraviolet (308 nm) laser pulses [J].
   Applied Physics Letters, 1987, 51(16): 1285-1287.
- [6] Zhang W G, Li Y Y, Dong X F, et al. Application of ultrafast laser in tungsten materials processing industry[J]. World Nonferrous Metals, 2019(19):

172, 175.

张卫刚,李媛媛,董新飞,等.超快激光在钨材加工 领域的应用[J].世界有色金属,2019(19):172, 175.

- [7] Yu Y C, Bai S, Wang S T, et al. Ultra-short pulsed laser manufacturing and surface processing of microdevices[J]. Engineering, 2018, 4(6): 779-786.
- [8] Sugioka K, Cheng Y. Ultrafast lasers: reliable tools for advanced materials processing [J]. Light: Science & Applications, 2014, 3(4): e149.
- [9] Wei C, Ma Y P, Han Y, et al. Femtosecond laser processing of ultrahard materials [J]. Laser &. Optoelectronics Progress, 2019, 56(19): 190003.
  魏超,马玉平,韩源,等. 飞秒激光加工超硬材料的 研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2019, 56(19): 190003.
- [10] Hu G Q, Song Y, Guan Y C. Tailoring metallic surface properties induced by laser surface processing for industrial applications [J]. Nanotechnology and Precision Engineering, 2019, 2(1): 29-34.
- [11] Cao L H, Chang W W, Yue Z W, et al. Particle simulation of vacuum heating in plasmas produced by an ultrashort laser pulse [J]. Chinese Journal of Lasers, 1997, 24(10): 947-951.

曹莉华,常文蔚,岳宗五,等.高强度超短脉冲激光 等离子体真空加热的粒子模拟[J].中国激光,1997, 24(10):947-951.

- [12] Du G Q, Wu Y M, Uddin N, et al. Ultrafast thermal dynamics of nano-ripples formation via laser double pulses excitation[J]. Optics Communications, 2016, 375: 54-57.
- [13] Du G Q, Yang Q, Chen F, et al. Ultrafast dynamics of laser thermal excitation in gold film triggered by temporally shaped double pulses [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2015, 90: 197-202.
- [14] Jiang L, Tsai H L. Modeling of ultrashort laser pulse-train processing of metal thin films [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2007, 50(17/18): 3461-3470.
- [15] Li X, Jiang L, Tsai H. Phase change mechanisms during femtosecond laser pulse train ablation of nickel thin films[J]. Journal of Applied Physics, 2009, 106 (6): 064906.
- [16] Wang J C, Guo C L. Numerical study of ultrafast dynamics of femtosecond laser-induced periodic surface structure formation on noble metals [J]. Journal of Applied Physics, 2007, 102(5): 053522.
- [17] Hwang T Y, Vorobyev A Y, Guo C L. Ultrafast dynamics of femtosecond laser-induced nanostructure formation on metals [J]. Applied Physics Letters, 2009, 95(12): 123111.
- [18] Nedialkov N N, Atanasov P A, Breitling D, et al.Ablation of metals by ultrashort laser pulses [J].Proceedings of SPIE, 2005, 5830: 80-84.
- [19] Anisimov S I, Kapeliovich B L, Perelman T L. Electron emission from metal surfaces exposed to ultra-short laser pulses [J]. Soviet Physics, 1974, 39: 776-781.
- [20] An M, Song Q C, Yu X X, et al. Generalized twotemperature model for coupled phonons in nanosized graphene[J]. Nano Letters, 2017, 17(9): 5805-5810.
- [21] Lee J B, Kang K, Lee S H. Comparison of theoretical models of electron-phonon coupling in thin gold films irradiated by femtosecond pulse lasers[J]. Materials Transactions, 2011, 52(3): 547-553.
- [22] Zhang J P, Chen Y P, Hu M N, et al. An improved three-dimensional two-temperature model for multipulse femtosecond laser ablation of aluminum [J]. Journal of Applied Physics, 2015, 117(6): 063104.
- [23] Lü H L, Mao Y D, Yu M Z, et al. Research progress on heat transfer theory in ultra-fast laser

heating technology [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2020, 57(1): 010005. 吕慧丽, 毛煜东, 于明志, 等. 超快激光加热技术传 热理论研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2020, 57(1): 010005.

- [24] Cheng J, Liu C S, Shang S, et al. A review of ultrafast laser materials micromachining [J]. Optics & Laser Technology, 2013, 46: 88-102.
- [25] Alder B J, Wainwright T E. Studies inmolecular dynamics. I. General method [J]. The Journal of Chemical Physics, 1959, 31(2): 459-466.
- [26] Wang L M, Zeng X W. Molecular dynamics simulations of femtosecond laser ablation of silicon[C] // Proceedings of 2011 International Conference on Electronics and Optoelectronics, July 29-31, 2011, Dalian, Dalian. New York: IEEE, 2011: 12221499.
- [27] Li B, Wong C H. Molecular dynamics studies of lubricant depletion under moving laser heating: effects of laser power and film thickness [J]. Tribology International, 2015, 92: 38-46.
- [28] Urbassek H M, Rosandi Y. Insight from molecular dynamics simulation into ultrashort-pulse laser ablation [J]. Proceedings of SPIE, 2010, 7842: 784214.
- [29] Gan Y, Chen J K. Thermomechanical wave propagation in gold films induced by ultrashort laser pulses [J]. Mechanics of Materials, 2010, 42 (4): 491-501.
- [30] Guan Y, Li L, Niu Z W. Molecular dynamics simulation of solid-liquid phase change considering non-Fourier effect [J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2019, 36(2): 312-318.
  关阳,李凌,牛泽伟.考虑非傅立叶效应的固液相变 分子动力学模拟[J].原子与分子物理学报, 2019, 36(2): 312-318.
- [31] Ding P J, Liu Q C, Lu X, et al. Hydrodynamic simulation of silicon ablation by ultrashort laser irradiation[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2012, 286: 40-44.
- [32] Yu D. Multiscale modeling and experimental study of ultrafast laser processing [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2016.
  余栋. 超快激光加工的多尺度建模及实验研究[D]. 北京:北京理工大学, 2016.
- [33] Cuq-Lelandais J P, Boustie M, Berthe L, et al. Spallation generated by femtosecond laser driven

shocks in thin metallic targets[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2009, 42(6): 065402.

- [34] Povarnitsyn M E, Fokin V B, Levashov P R. Microscopic andmacroscopic modeling of femtosecond laser ablation of metals[J]. Applied Surface Science, 2015, 357: 1150-1156.
- [35] Huang J, Zhang Y W, Chen J K, et al. Modeling of ultrafast phase change processes in a thin metal film irradiated by femtosecond laser pulse trains [C] // Proceedings of ASME Conference on ASME 2009 International Mechanical Engineering Congress and Exposition, 2010: 2069-2077.
- [36] Wang S Y, Ren Y, Cheng C W, et al. Micromachining of copper by femtosecond laser pulses[J]. Applied Surface Science, 2013, 265: 302-308.
- [37] Cheng C W, Wang S Y, Chang K P, et al. Femtosecond laser ablation of copper at high laser fluence: modeling and experimental comparison[J]. Applied Surface Science, 2016, 361: 41-48.
- [38] Shao J F, Guo J, Wang T F. Thermal behavior of metal thin film irradiated by femtosecond double-pulse laser [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2014, 26(9): 92-97.
  邵俊峰,郭劲, 王挺峰. 飞秒双脉冲激光照射金属薄 膜的热行为[J]. 强激光与粒子束, 2014, 26(9): 92-97.
- [39] Saghebfar M, Tehrani M K, Darbani S M R, et al. Femtosecond pulse laser ablation of chromium: experimental results and two-temperature model simulations[J]. Applied Physics A, 2016, 123(1): 28.
- [40] Lei C X. Material point method for thermal responses of metals by ultrashort pulse laser irradiation [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2017.
  雷春霞. 超短脉冲激光作用下金属热响应的物质点 法算法研究[D]. 杭州:浙江大学, 2017.
- [41] Li Q, Lao H Y, Lin J, et al. Study of femtosecond ablation on aluminum film with 3D two-temperature model and experimental verifications [J]. Applied Physics A, 2011, 105(1): 125-129.
- [42] Nedialkov N N, Atanasov P A, Amoruso S, et al. Laser ablation of metals by femtosecond pulses: theoretical and experimental study [J]. Applied Surface Science, 2007, 253(19): 7761-7766.
- [43] Lewis L J, Perez D. Laser ablation with short and ultrashort laser pulses: basic mechanisms from molecular-dynamics simulations [J]. Applied Surface

Science, 2009, 255(10): 5101-5106.

- [44] Povarnitsyn M E, Khishchenko K V, Levashov P R.
   Phase transitions in femtosecond laser ablation [J].
   Applied Surface Science, 2009, 255(10): 5120-5124.
- [45] Povarnitsyn M E, Itina T E, Levashov P R, et al. Simulation of ultrashort double-pulse laser ablation
   [J]. Applied Surface Science, 2011, 257(12): 5168-5171.
- [46] Povarnitsyn M E, Itina T E, Levashov P R, et al. Mechanisms of nanoparticle formation by ultra-short laser ablation of metals in liquid environment [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2013, 15(9): 3108-3114.
- [47] Povarnitsyn M E, Itina T E. Hydrodynamic modeling of femtosecond laser ablation of metals in vacuum and in liquid [J]. Applied Physics A, 2014, 117(1): 175-178.
- [48] Davydov R V, Antonov V I. Simulation of femtosecond pulsed laser ablation of metals [J]. Journal of Physics: Conference Series, 2016, 769: 012060.
- [49] Demaske B, Zhakhovsky V, Inogamov N, et al. Ablation and spallation of gold films irradiated by ultrashort laser pulses[J]. Physical Review B, 2010, 82(6): 064113.
- [50] Gan Y. Study on thermal stress response of gold nanorods under ultrafast laser [C] // Proceedings of the 13th National Academic Conference on Physical Mechanics, Xiangtan, 2014: 119.
  干湧. 超快激光作用下金纳米棒的热应力响应研究[C]//第十三届全国物理力学学术会议论文集, 湘潭, 2014: 119.
- [51] Tang Y B, Chen B, Chen Z Y, et al. Microscopicphase change of Ni-Ti shape memory alloy target under femto-second laser ablating [J]. Electro-Optic Technology Application, 2014(2): 22-26.

唐一波, 陈冰, 陈志勇, 等. 低能量密度下飞秒激光 烧蚀镍钛形状记忆合金靶材的微观相变行为[J]. 光 电技术应用, 2014(2): 22-26.

 [52] Wu H, Zhang N, He M, et al. Calculation of argonaluminum interatomic potential and its application in molecular dynamics simulation of femtosecond laser ablation [J]. Chinese Journal of Lasers, 2016, 43 (8): 0802004.

> 吴寒,张楠,何森,等.氩、铝原子相互作用势的计 算及其在飞秒激光烧蚀分子动力学模拟中的应用 [J].中国激光,2016,43(8):0802004.

- [53] Lei C X, Ren Y P, Gan Y, et al. Effect of optical properties on the thermal responses of copper films induced by ultrafast lasers[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2017, 29(7): 170017.
  雷春霞,任云鹏,干湧,等.光学性质对超快激光辐照下铜膜热响应的影响[J].强激光与粒子束, 2017, 29(7): 170017.
- [54] Fedosejevs R, Ottmann R, Sigel R, et al. Absorption of femtosecond laser pulses in highdensity plasma [J]. Physical Review Letters, 1990, 64(11): 1250-1253.
- [55] Chen Z Y, Mao S S. Femtosecond laser-induced electronic plasma at metal surface [J]. Applied Physics Letters, 2008, 93(5): 051506.
- [56] Zhao X, Shin Y C. Femtosecond laser ablation of aluminum in vacuum and air at high laser intensity[J]. Applied Surface Science, 2013, 283: 94-99.
- [57] Povarnitsyn M, Fokin V, Levashov P R, et al. Molecular dynamics simulation of subpicosecond double-pulse laser ablation of metals [J]. Physical Review B, 2015, 92(17): 174104.
- [58] Fokin V B, Povarnitsyn M E, Levashov P R. Simulation of ablation and plume dynamics under femtosecond double-pulse laser irradiation of aluminum: comparison of atomistic and continual approaches[J]. Applied Surface Science, 2017, 396: 1802-1807.
- [59] Schumacher D W, Chowdhury E A. First principles simulation of laser-induced periodic surface structure using the particle-in-cell method [J]. Proceedings of SPIE, 2015, 9632: 96320Y.
- [60] Russell A M, Schumacher D W. First principles simulation of the dynamics of transient warm dense matter during the formation of ultrashort laser pulse induced damage using the particle-in-cell method[J]. Proceedings of SPIE, 2017, 1044: 104470H.
- [61] Birnbaum M. Semiconductor surface damage produced by ruby lasers [J]. Journal of Applied Physics, 1965, 36(11): 3688-3689.
- [62] Bonse J, Kirner S V, Höhm S, et al. Applications of laser-induced periodic surface structures (LIPSS)[J].
   Proceedings of SPIE, 2017, 1009: 100920N.
- [63] Bonse J, Krüger J, Höhm S, et al. Femtosecond laser-induced periodic surface structures [J]. Journal of Laser Applications, 2012, 24(4): 042006.
- [64] Guay J M, Lesina A C, Baxter J, et al. Enhanced plasmonic coloring of silver and formation of large laser-induced periodic surface structures using multi-

burst picosecond pulses [EB/OL]. (2016-09-15)
[2020-02-03]. https: // arxiv. org/abs/1609.
04847.

- [65] Wang X C, Zheng H Y, Wan Y C, et al. Picosecond laser surface texturing of a stavax steel substrate for wettability control [J]. Engineering, 2018, 4(6): 816-821.
- [66] Zhang J Z, Chen F, Yong J L, et al. Research progress on bioinspired superhydrophobic surface induced by femtosecond laser [J]. Laser &. Optoelectronics Progress, 2018, 55(11): 110001.
  张径舟,陈烽,雍佳乐,等.飞秒激光诱导仿生超疏 水材料表面的研究进展[J].激光与光电子学进展, 2018, 55(11): 110001.
- [67] Hu G Q, Guan K, Lu L B, et al. Engineered functional surfaces by laser microprocessing for biomedical applications [J]. Engineering, 2018, 4 (6): 822-830.
- [68] Cunha A, Elie A M, Plawinski L, et al. Femtosecond laser surface texturing of titanium as a method to reduce the adhesion of Staphylococcus aureus and biofilm formation [J]. Applied Surface Science, 2016, 360: 485-493.
- [69] Djouder M, Itina T E, Deghiche D, et al. Modelling the formation of nanostructures on metal surface induced by femtosecond laser ablation [J]. Applied Surface Science, 2012, 258(7): 2580-2583.
- [70] Djouder M, Lamrous O, Mitiche M D, et al. Electromagnetic particle-in-cell (PIC) method for modeling the formation of metal surface structures induced by femtosecond laser radiation [J]. Applied Surface Science, 2013, 280: 711-714.
- [71] Ivanov D S, Lipp V, Blumenstein A, et al. Experimental and theoretical investigation of periodic nanostructuring of Au with ultrashort UV laser pulses near the damage threshold [J]. Physical Review Applied, 2015, 4(6): 064006.
- [72] Levy Y, Derrien T J Y, Bulgakova N M, et al. Relaxation dynamics of femtosecond-laser-induced temperature modulation on the surfaces of metals and semiconductors[J]. Applied Surface Science, 2016, 374: 157-164.
- [73] Shugaev M V, Gnilitskyi I, Bulgakova N M, et al. Mechanism of single-pulse ablative generation of laser-induced periodic surface structures[J]. Physical Review B, 2017, 96(20): 205429.
- [74] Rudenko A, Mauclair C, Garrelie F, et al. Amplification and regulation of periodic

nanostructures in multipulse ultrashort laser-induced surface evolution by electromagnetic-hydrodynamic simulations[J]. Physical Review B, 2019, 99(23): 235412.

[75] Kaselouris E, Nikolos I K, Orphanos Y, et al. A

review of simulation methods of laser matter interactions focused on nanosecond laser pulsed systems[J]. Journal of Multiscale Modelling, 2013, 05(4): 1330001.