

飞秒脉冲参量影响金属表面热特性的研究*

倪晓昌 王清月 梁建国

(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 采用有限差分法对约化后的双温方程进行数值模拟. 研究了飞秒激光与金属铜相互作用时, 脉冲形状对烧蚀结果的影响. 结果表明: 脉冲能量确定时, 脉冲形状对烧蚀结果影响不大; 多脉冲作用时, 脉冲重复频率只有在一定范围内(随材料属性改变), 脉冲间的热累积效应才存在; 对导热性好的金属材料, 热累积效应不明显. 并实验证实了上述结果.

关键词 飞秒激光; 有限差分; 双温方程; 热累积效应

中图分类号 TN249 **文献标识码** A

0 引言

随着飞秒激光放大技术以及自锁模机制的研究进步^[1], 飞秒激光加工技术得到广泛研究, 加工介质涉及到金属、半导体、电介质以及聚合物材料^[2~7]. 特别是近年来, 用飞秒激光在透明材料内部进行烧蚀的研究成为一个热门课题^[8]. 飞秒激光烧蚀材料与长脉冲的本质区别是脉宽短, 峰值功率高. 也正是飞秒激光的高峰值功率, 使得飞秒激光加工材料没有选择性, 可以对任何材料加工甚至使透明材料改性. 所以, 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, 为更深入掌握飞秒激光与材料作用的机理积累经验. 目前, 国外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, 国内也有部分学者开展了飞秒激光烧蚀研究, 但多局限于与透明材料的烧蚀研究. 飞秒激光与金属材料作用的理论模型仍以双温模型为主^[8], 最近也有将该模型与热电子爆炸模式相结合, 对一些实验现象进行解释^[9], 但出发点仍然是讨论飞秒激光对材料温度场的影响.

本文在已有研究基础上^[10], 采用有限差分法, 研究了飞秒激光脉冲参量对金属材料表面电子温升的影响, 同时考虑双脉冲作用时, 不同的脉冲间隔对电子温度的影响程度. 并采用飞秒激光微加工平台(UMW-2110i, Clark-MXR Inc. con.)实验证实了模拟结论.

1 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, 加工材料受飞秒激光脉冲热源扰动情形.

1.1 约化后的双温方程

由于模型采用的是有限差分网格方式模拟计算, 因此, 只要网格空间步长大于脉冲间隔内热量的传递程长, 双温方程中的传导项可以忽略不计. 因此, 约化后双温方程差分格式为^[10]

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

$$C_i \times \left(\frac{T_{i,j+1}^i - T_{i,j}^i}{\Delta t} \right) = g \times (T_{i,j+1}^e - T_{i,j+1}^i) \quad (2)$$

式中 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量, R 和 α 分别为材料表面反射率(0.61)及材料的吸收系数(0.07/nm), $I(t)$ 代表脉冲形状. 以往大多实验模型采用矩形脉冲, 而实际脉冲多为高斯形或双曲正割形, 实验用了高斯形脉冲进行了模拟比较. 高斯形脉冲的表达式为

$$I(t) = I_0 \exp \left[-\left(\frac{t}{T_0} \right)^2 \right] \quad (3)$$

式中 T_0 为脉冲半宽度(1/e 处), 其与全波半极大脉冲宽度 T_{FWHM} 的关系为

$$T_{FWHM} = 2(\ln 2)^{1/2} T_0 \approx 1.665 T_0 \quad (4)$$

因此, 式(3)变为

$$I(t) = I_0 \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{t}{T_{FWHM}} \right)^2 \right] \quad (5)$$

但是, 式(5)的脉冲中心在 0 点(图 1), 实际计算时间轴是从 0 开始的, 因此, 式(5)必须与时间轴上的网格数(j)及时间改变量(Δt)联系起来, 所以差分过程中脉冲强度表达式为

$$I(t) = I_0 \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{j \Delta t - T_{FWHM}}{T_{FWHM}} \right)^2 \right] \quad (6)$$

图 1 给出了计算时的脉冲分布示意图.

*教育部科学技术研究重大项目(G10410)、国家自然科学基金(G60278003)、天津市科技发展计划科技攻关培育项目(G043103911)、高等学校博士学科点专项科研基金(G2003056021)和中国博士后科学基金资助
Tel: 022-27404673 Email: xiaochang_ni@sina.com
收稿日期: 2004-11-23

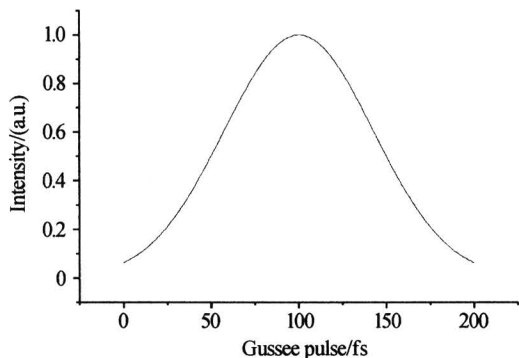


图1 脉冲中心在 100 fs 处的能量分布 ($T_{FWHM}=100$ fs)

Fig. 1 The energy distribution when the center of the pulse at 100 fs

1.2 采用参量

烧蚀材料为金属铜,其参量为: $C_e(T_e)=96.6 \cdot T_e \text{ J/K} \cdot \text{cm}^3$; $k_e(T_e)=k_0 \cdot T_e/T_i$, $k_0=401 \text{ W/mk}$; 脉冲宽度 $t=100$ fs; 脉冲能流密度 1.25 mJ/cm^2 , $g=1.02 \times 10^{17} \text{ W/m}^3 \text{ k}$. 计算方法详见参考文献[10].

2 结果与分析

2.1 脉冲形状的影响

对式(1)和(2)进行差分模拟,利用 1.2 节的参量,即可计算出不同深度下的电子温升情况. 图 2、图 3 给出了脉冲能流密度为 1.25 mJ/cm^2 , 矩形脉

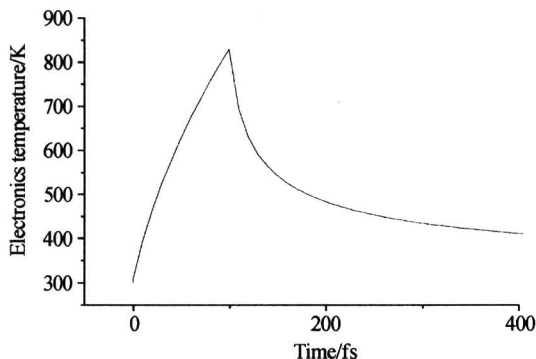


图 2 矩形脉冲对铜材料表层电子温度的影响

Fig. 2 The effect of the rectangle pulse on the electronic temperature of the copper surface electrons

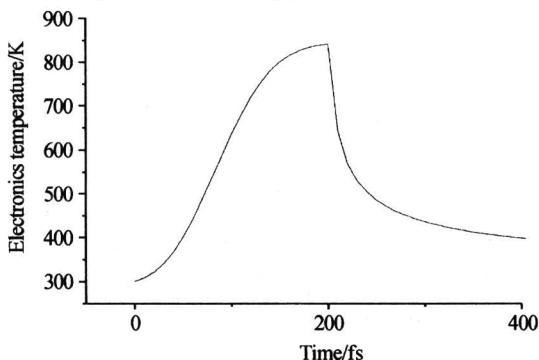


图 3 高斯形脉冲对铜材料表层电子温度的影响

Fig. 3 The effect of the gussee pulse on the electronic temperature of the copper surface electrons

冲与高斯形脉冲时,材料表层电子温度随时间的变化情况.

从图 2、图 3 可以看出,脉冲形状对材料电子温升影响不大. 虽然高斯形脉冲能量分布范围大于两倍脉宽,但大部分能量是在 T_{FWHM} 时间内注入的,因此,脉冲形状不影响材料电子温升. 也就是说,参考文献[10]计算的结果具有普遍意义. 但是,高斯形脉冲作用的区域,能量分布大多也是高斯形的,即聚焦区域的能量空间分布成高斯形状. 然而,飞秒激光在聚焦区域内空间能流密度梯度比长脉冲大得多,因此,更容易控制飞秒脉冲能量,使得材料比聚焦区域还小的部分出现烧蚀,甚至突破衍射极限,形成了特有的飞秒激光加工特性. 图 4 为采用飞秒激光微加工平台加工的微点,脉冲能流密度: 0.309 J/cm^2 , 聚焦物镜:5x 聚焦束腰半径: $11 \mu\text{m}$,可以看出,烧蚀区域已远小于焦斑.

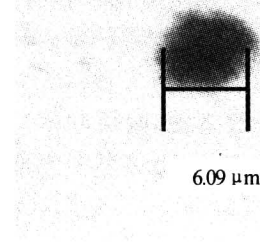


图 4 飞秒激光微加工平台(UMW-2110i)在铜表面打的微点

Fig. 4 The dots are ablated by UMW-2110i on the surface of Cu

2.2 多脉冲情形

前面模拟了单脉冲情形. 如果脉冲重复频率较高的话,会不会存在脉冲的热累积效应,也就是说,前一个脉冲引起的材料电子或晶格温度的提升,在下一个脉冲到来时还没有被材料散开,而在烧蚀区域形成积压. 那么,下一个脉冲将是在积压能量的基础上对材料进行烧蚀,这一脉冲引起的材料电子温度势必较第一个脉冲引起的电子温度上升. 因此,单脉冲能量低于阈值时,上述脉冲热累积效应若存在,也可以实现材料的烧蚀. 为了研究这种多脉冲效应,实验模拟了多脉冲作用时,铜材料表层电子温升情况.

模拟时假定脉冲中心在脉冲间隔的整数倍位置处. 多脉冲时系列脉冲的表达式改写为

$$I(t) = I_0 \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{j \times dt - k \times T_{FWHM}}{T_{FWHM}} \right)^2 \right] \quad (7)$$

式中, $k=4, 5, 6, \dots$, 所以,脉冲的重复频率为 $1/((k-1) \times T_{FWHM})$.

实际模拟时只考虑了双脉冲情形,图 5(a)、(b) 给出了脉冲能量 1.25 mJ/cm^2 , 重复频率分别为 $25 \times$

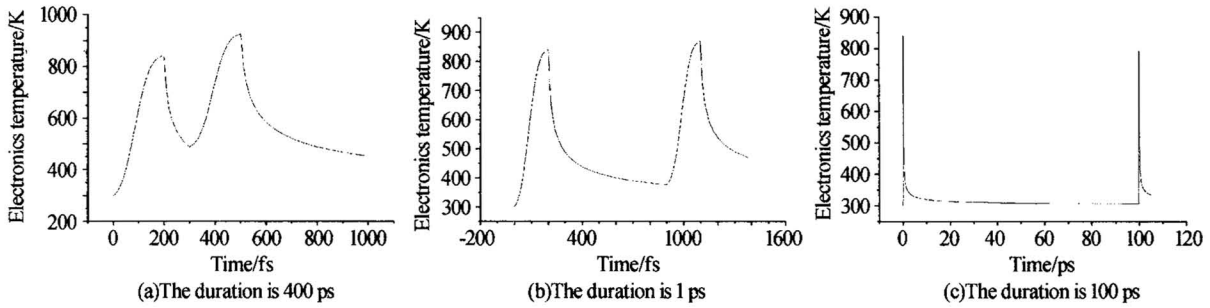


图 5 双脉冲对材料表层电子温升的影响
 Fig. 5 The effect of the double pulses on the electron temperature of material surface

10¹¹ Hz、10 × 10¹¹ Hz 时双脉冲对铜表层电子温升的曲线。

从图 5(a)、(b)可以看出,飞秒激光与铜材料相互作用时,脉冲重复频率只有很高,相当于连续光时,脉冲热累积效应才明显。目前实验室从振荡器引出的飞秒激光,重复频率最高也就是千兆(1G)量级。图 5(c)说明了脉冲重复频率为万兆赫兹时,对铜材料的脉冲热累积效应已经不明显了(第一脉冲峰值电子温度:841.09576,第二脉冲峰值电子温度:843.52197)。图 6(a)、(b)是脉冲能量增加,脉冲中心间隔为 100 ps,脉冲能流密度为 0.8 J/cm² 时,双脉冲对表层电子和晶格温升影响曲线,此时,晶格温度已经接近材料熔融温度(1356K),但前后脉冲作

用结果仍然较小。因此,相对于热传导性好的金属材料来讲,脉冲热累积效应所起作用很小。但是,对电介质以及热传导性较差的材料来讲,进行飞秒激光与其相互作用的研究时,必须要考虑脉冲热累积效应^[11]。图 7 为采用 1 kHz 飞秒微纳加工机,脉冲能流密度为 0.824 J/cm²,在脉冲能量确定时,采用不同脉冲串在铜膜表面打的微点。从图中可以看出,曝光时间增加时,烧蚀点横向尺度有所增加,其原因是脉冲形状为高斯分布,当脉冲能量高于材料烧蚀阈值时,烧蚀时间增加,烧蚀区域必然向高斯外沿扩展,进而造成烧蚀孔径的增加(脉冲叠加效应^[11]),但热传导引起的热累积效应已经不存在了。

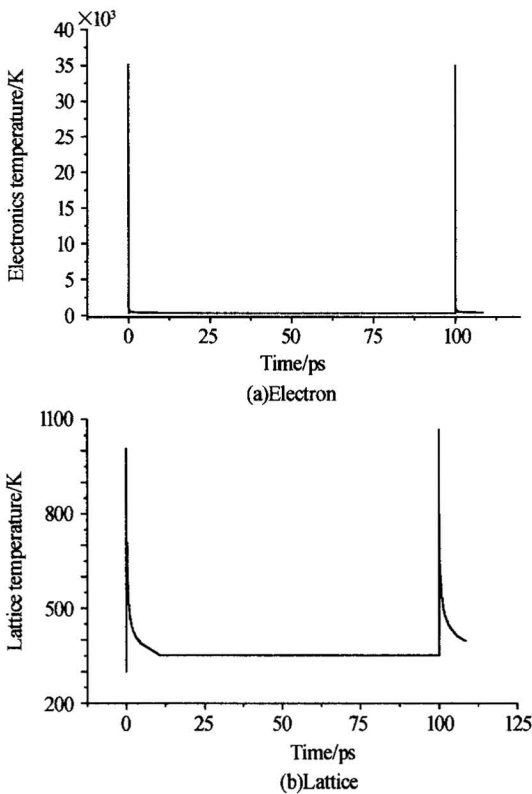


图 6 双脉冲对材料表层电子和晶格温升的影响
 Fig. 6 The effect of the double pulses on the electron and lattice temperature of material surface

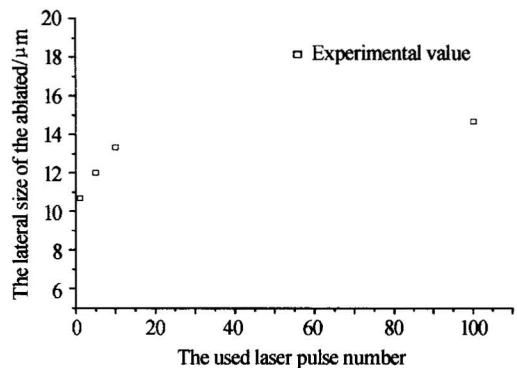


图 7 飞秒激光微加工平台在铜膜表面打的微点
 Fig. 7 The dots on the surface of Cu film with UMW-2110i

3 结论

数值模拟了飞秒脉冲与金属铜相互作用情况。发现:脉冲能量确定时,脉冲形状对材料表层电子温升的影响不大;对于金属等传导性好的材料,脉冲重复频率只有很高时,脉冲热累积效应才明显。这对飞秒激光微纳加工技术在金属材料上进行微纳雕刻, MEMS 等领域具有重要指导意义。

参考文献

1 Spence D E, Kean P N, Sibbett W. 60 fs pulse generation from a self-mode-locked Ti : sapphire laser. *Opt Lett*, 1991, **16**(1):42~44

- 2 Dumitru G, Romano V, Weber H P, *et al.* Metallographical analysis of steel and hard metal substrates after deep-drilling with femtosecond laser pulses. *Applied Surface Science*, 2003, **208-209**(1): 181~188
- 3 Jia T Q, Xu Z Z, Li X X, *et al.* Microscopic mechanisms of ablation and micromachining of dielectrics by using femtosecond lasers. *Applied Physics Letters*, 2003, **82**(24):4382~4384
- 4 Nedialkov N N, Atanasov P A, Imamova S E, *et al.* Dynamics of the ejected material in ultra-short laser ablation of metals. *Appl Phys A*, 2004, **79**(4-6):1121~1125
- 5 倪晓昌,王清月. 时空分布的超短激光脉冲烧蚀电介质材料时等离子体的产生. 光子学报, 2004, **33**(9):1035~1039
Ni X C, Wang C Y. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(9):1035~1039
- 6 倪晓昌,王清月,胡名列. 飞秒激光微细加工中光耦合器参量的数值模拟. 光子学报, 2005, **34**(2):161~164
Ni X C, Wang C Y, Hu M L. *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(2):161~164
- 7 刘青,程光华,王屹山,等. 飞秒脉冲在透明材料中的三维光存储及其机理. 光子学报, 2003, **32**(3):276~279
Liu Q, Cheng G H, Wang Q S, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(3):276~279
- 8 倪晓昌,王清月. 飞秒激光烧蚀研究进展. 激光与光电子学进展, 2002, **39**(9):4~9
Ni X C, Wang Q Y. *Laser & Optronics Progress*, 2002, **39**(9):4~9
- 9 Chen J K, Beraun J E, Grimes L E, *et al.* Modeling of femtosecond laser-induced non-equilibrium deformation in metal films. *International Journal of Solids and Structures*, 2002, **39**:3199~3216
- 10 倪晓昌,王清月. 飞秒、皮秒激光烧蚀金属表面的有限差分热分析. 中国激光, 2004, **31**(3):278~280
Ni X C, Wang Q Y. *Chinese Journal of Lasers*, 2004, **31**(3):278~280
- 11 Bonse J, Wrobel J M, Krüger J, *et al.* Ultrashort-pulse laser ablation of indium phosphide in air. *Appl Phys*, 2001, **A72**(1): 89~94

The Thermal Character Analysis of the Femtosecond Laser Pulse Parameters' Effect on Metal Surface

Ni Xiaochang, Wang Ching-yue, Liang Jianguo

Key Laboratory of Optoelectronic Information Technical Science, EMC; Ultra fast Laser Laboratory, School of Precision Instruments and Optoelectronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072

Received date: 2004-11-23

Abstract The Double-Temperature Equation (DTE) was simulated with the finite difference method, which was formatted simply. The effect of the pulse shape on the ablation results had been studied when the femtosecond laser was irradiated on the copper surface. The simulation results show that if the laser pulse energy is not changed, the effect of the laser shape will be ignored. And if there are several laser pulses irradiated on the material, the thermal incubation effect would occur only when the repetition rate is in a scale (which is changed with the character of the materials). For the materials that have good conductivity, such as metals, the thermal incubation effect is not clear. Experiments show the same results.

Keywords Femtosecond laser ablation; Finite-difference method; Double-temperature equations; Thermal incubation effect



Ni Xiaochang was born on November 4, 1974. He received his B. S. degree from Hebei University in 1998, M. S. and Dr degree from Tianjin University in 2001 and 2004. Now he is a Post Dr. in School of Precision Instruments and Optoelectronics Engineering in Tianjin University. He is working in the fields of femtosecond laser technique and its application in micromachining.