**doi**:10.3788/gzxb20164505.0514002

# 飞秒激光多脉冲烧蚀镍钛合金的数值模拟

# 张彦斐,王雷雷,宫金良

(山东理工大学 机械工程学院,山东 淄博 255049)

摘 要:为了研究飞秒激光多脉冲累积效应对镍钛合金材料的影响,通过考虑多脉冲之间的时间间隔改 写激光光源项,利用改进的双温模型,采用有限差分法,对飞秒激光三脉冲烧蚀镍钛合金的温度场分布 进行数值模拟,得到了电子和晶格温度随时间和烧蚀深度的演化规律.分析了多脉冲累积效应的内在机 理;讨论了三脉冲条件下不同参量对电子和晶格温度的影响.结果表明:镍钛合金在飞秒激光三脉冲的 作用下,电子有3个递增的峰值温度,相比单脉冲的作用,三脉冲使电子和晶格温度明显升高;多脉冲的 时间间隔直接影响多脉冲的累积效应;脉冲宽度影响电子的峰值温度和达到峰值温度所用的时间;激光 能量密度影响电子和晶格的温度;电声耦合常量对电子与晶格的耦合时间和电子晶格的平衡温度也有 重要影响.

# Numerical Simulation of Femtosecond Laser Multi-Pulse Ablation of Ni-Ti Alloy

ZHANG Yan-fei, WANG Lei-lei, GONG Jin-liang

(School of Mechanical Engineering, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255049, China)

**Abstract**: In order to study the influence of the femtosecond multi-pulsed laser accumulation effect on the Ni-Ti alloy material, by considering the time interval to rewrite the laser source terms in the two-temperature equation, improving the two-temperature model, and using the finite-difference method, the distribution of femtosecond three-pulse laser ablation of Ni-Ti alloy temperature field was simulated. The temperature evolution of electron and lattice with time and ablation depth was attained, and the internal mechanism of multi-pulse accumulation effect was also analyzed. Then the influence of different parameters on the temperature of electrons and lattices under the condition of three pulses was discussed. The results show that, under the ablation of the femtosecond three-pulses on Ni-Ti materials, electron has three increments of peak temperature, which is compared with the effect of single pulse, the three-pulses make the electron and lattice temperature increase significantly. The time interval is an important parameter for multi-pulse, which can directly affect the accumulation effect of multi-pulses. The pulse width mainly affects the peak temperature and the time to reach the peak temperature. The laser energy density mainly affects the temperature of electrons and lattices. The electron-lattice coupling coefficient also has an important influence on the coupling time of electron and lattice and the equilibrium temperature of electron and lattice.

**Key words**: Laser technique; Femtosecond laser; Numerical simulation; Ni-Ti alloy; Electron temperature; Lattice temperature

OCIS Codes: 140.0140; 320.2250; 320.5550; 160.3900

收稿日期:2015-12-09;录用日期:2016-01-27

基金项目:国家自然科学基金(No. 61303000)、山东省优秀中青年科学家科研奖励基金(No. BS2012ZZ009)和山东理工大学青年教师发展 支持计划项目(No. 2014-03)资助

第一作者:张彦斐(1977-),女,副教授,博士,主要研究方向为飞秒激光和微纳加工. Email:1392076@sina.com 通讯作者:宫金良(1976-),男,副教授,博士,主要研究方向为飞秒激光与微纳制造系统. Email:gilwing@qq.com

# 0 引言

镍钛形状记忆合金在不同条件下可以实现不同微观组织的可逆性改变,还可以融合感知和驱动为一体, 其不仅具有很好的生物相容性和超强的形状记忆效应,还具有良好的机械性能、力学性能、耐腐蚀性、耐磨 性等,因此在军事、航空航天、生物医学以及机械电子 等领域有着广泛应用<sup>[1-2]</sup>.由于镍钛合金的性能依赖于 其独特的微观组织结构,传统的机械加工方法容易产 生热应力和热变形,会破坏材料的相组织结构,因此会 降低镍钛合金的优异特性,导致无法实现预期功能.

飞秒激光方法是目前非常具有竞争力的微纳加工 手段之一,可以使物质在极小的瞬间从固态变为高温、 高压的等离子体状态,最终使被加工区域内的材料得 以去除,实现材料的"非热熔"加工,因此飞秒激光加工 具有热影响范围小、定位准确度高、无机械应力等优 点[3-6]. 如果能够充分利用飞秒激光对镍钛合金进行微 纳加工,就可以保证加工的质量和准确度,实现材料的 应用价值.飞秒激光加工金属靶材受激光加工工艺参 量和材料的特性等众多因素影响,其内在加工机理也 比较复杂,国内外研究者对此进行了长期研究,理论研 究主要集中在单脉冲或双脉冲的数值模拟[7-9],而在实 际加工中以多脉冲加工为主.在多脉冲作用时,必须考 虑累积效应和相邻两个脉冲的时间间隔,因此,为了高 效利用飞秒激光并使其在加工金属时达到更为理想的 实际效果,从微观角度理论分析多脉冲对靶材内部的 温度影响规律显得十分必要.

本文介绍了多脉冲累积效应对材料烧蚀阈值的影响,采用双温方程,通过改写激光光源项法对三脉冲烧 蚀金属进行数值模拟,分析了不同时间间隔下多脉冲 的累积效应,探究了三脉冲条件下不同飞秒激光参量 对电子和晶格温度变化的影响规律.

# 1 计算模型

#### 1.1 多脉冲累积效应

烧蚀阈值是指在飞秒激光加工材料中对靶材产生 不可逆的破坏时,去除单层材料所需要的激光能量密 度<sup>[10]</sup>.在单脉冲模拟条件下,同种材料的烧蚀阈值是 确定的.而在飞秒激光多脉冲条件下,材料烧蚀阈值与 脉冲数量成反比,较小的能量密度同样可以达到靶材 料烧蚀的目的,这种现象就是多脉冲累积效应,并可以 建立数学模型为<sup>[11]</sup>

$$F_{\rm th}(N) = F_{\rm th}(1) N^{\xi - 1} \tag{1}$$

式中, N 为脉冲个数;  $F_{th}(N)$  为 N 个脉冲对应的烧蚀 阈值;  $F_{th}(1)$  为单脉冲烧蚀阈值;  $\xi$  为多脉冲累计系数.

#### 1.2 双温方程

基于超短超强激光脉冲烧蚀金属的独特机理,前

苏联学者 S. I. Anisimov 建立了飞秒激光与金属材料 作用的双温模型<sup>[12]</sup>,到目前为止,一直被认为是最适 合描述飞秒激光脉冲与金属作用的理论模型.具体表 达式为

$$C_{e} \frac{\partial T_{e}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_{e} \frac{\partial T_{e}}{\partial x} \right) - g(T_{e} - T_{i}) + S(x, t) \quad (2)$$

$$C_{i} \frac{\partial T_{i}}{\partial t} = g(T_{e} - T_{i}) \quad (3)$$

式中,*C*。为电子热容,*T*。为电子系统温度,*k*。为电子的 热传导率,*g*为电子晶格的能量耦合系数,*C*i为晶格热 容,*T*i为晶格系统温度.式(2)右边第一项为热传导项, 第二项为电子和晶格的能量耦合,第三项为飞秒激光 热源.式(3)的右边项只含有电子和晶格的能量耦合.

#### 1.3 光源项改写

采用高斯光束进行模拟,则单脉冲的光源项 S(x, t)表达式为<sup>[9]</sup>

$$S(x,t) = \frac{A_{\alpha}F}{\sqrt{\pi/4\ln(2)}\tau_{\rm L}} \exp((-\alpha x) \cdot$$

 $\exp[-4\ln(2)(t/\tau_{L}-2)^{2}]$  (4) 式中,A 是表面透射率, $\alpha$  为材料吸收系数,F 为激光能 流密度, $\tau_{L}$  为激光脉冲宽度,x 为距材料表面的轴向 距离.

如果有三个脉冲连续作用于靶材,就会有两个脉冲时间间隔 dt<sub>1</sub> 和 dt<sub>2</sub>,因此三脉冲的激光光源项为

$$S(x,t) = \frac{A\alpha F}{\sqrt{\pi/4\ln(2)}\tau_{\rm L}} \exp(-ax) \exp[-4\ln(2) \cdot (t/\tau_{\rm L}-2)^2 - 4\ln(2)((t-dt_1)/\tau_{\rm L}-2)^2 - 4\ln(2) \cdot ((t-dt_2)/\tau_{\rm L}-2)^2]$$
(5)

式中, $dt_1$ 和  $dt_2$ 都是相对于第一个脉冲的延迟时间,也就是说如果  $dt_1 = 4$ , $dt_2 = 10$ ,实际上是指前两个脉冲的时间间隔为 4 ps,后两个脉冲的时间间隔为 6 ps.

可以采用隐含式有限差分求解双温方程,此时三 脉冲光源项表达式为

$$S(i\Delta x, j\Delta t) = \frac{A\alpha F}{\sqrt{\pi/4\ln(2)}\tau_{\rm L}} \exp(-ai\Delta x) \cdot \exp\left[-4\ln(2)(j\Delta t/\tau_{\rm L}-2)^2 - 4\ln(2)((j\Delta t - dt_1)/\tau_{\rm L}-2)^2 - 4\ln(2)((j\Delta t - dt_2)/\tau_{\rm L}-2)^2\right]$$
(6)

初始条件和边界条件满足

 $T_{i,0} = T_0 = 300 \text{ K}(i=1,2,3,\cdots,n); T_{n,j} = 300 \text{ K}(j=0,1,2,\cdots,m).$ 

### 2 计算结果与分析

模拟条件基于美国 Raytum Corp 的二极管直接泵 浦超快激光器 Inteli,具体参量为,激光能量密度 F 为 100 J/m<sup>2</sup>,脉宽为 300 fs,激光波长为 1 030 nm.

有限差分法求解过程中,选取时间差分步长为 0.1 fs,纵向空间差分步长为1 nm,即每 0.1 fs 计算一

次,每1	nm 分为一	层.镍钛	合金的	参量如表	1.
	表 1		·全的参	<b>景</b> [13]	

 Table 1
 Parameters of NiTi allov [13]

Parameter	Value	
$C_{ m e}/({ m J}{f \cdot}{ m m}^{-3}{f \cdot}{ m K}^{-2}$ )	67.5	
$C_{\rm i}/({ m J} \cdot { m m}^{-3} \cdot { m K}^{-1})$	5.36 $\times 10^{6}$	
$g / (\mathbf{W} \cdot \mathbf{m}^{-3} \cdot \mathbf{K}^{-1})$	7.0 $\times 10^{18}$	
A	0.52	
$\alpha \ / \ \mathrm{m}^{-1}$	$4.2 \times 10^{-7}$	

双温方程三脉冲的数值模拟如图 1,表明电子和 晶格温度场随延迟时间和纵向传递深度的演化规律.





取飞秒激光的脉冲间隔分别为  $dt_1 = 2$  ps 和  $dt_2 = 6$  ps,对比相同参量下单脉冲的电子晶格温度场分布 可以看出,当三个脉冲作用于靶材时,电子温度分别有 3 个对应的峰值温度,其中第一个峰值温度与单脉冲 作用的情况相同,为 3 371 K;第二个脉冲来临时,电子 仍处于较高的温度,因此此时的峰值温度要高于第一 个峰值温度,为 4 198 K;同理第三个脉冲作用之后电 子的峰值温度进一步提高,三个脉冲作用之后电子的 峰值温度升高了1039 K,最后电子和晶格的平衡温度 升高大约10<sup>3</sup> K.

对于晶格而言,温度的变化趋势和单脉冲作用相同,不同之处是最后的平衡温度因电子温度的升高而 升高.原因是电子和晶格之间的能量传输要通过电声 耦合作用,当三脉冲作用时间间隔小于电声耦合作用 时间时,电子没有足够的时间将能量及时传输给晶格, 接下来的脉冲就再次作用于电子并使其温度继续升 高,耦合作用会减弱,表现出晶格温度持续升高,并最 终达到平衡状态.由于后续的脉冲提升了电子和晶格 在烧蚀过程中的温度,因此沿着靶材深度传递的温度 也随之升高,表现出后续脉冲的烧蚀深度大于第一个 脉冲的烧蚀深度.

分析可知,在其他参量一定的情况下,多脉冲作用 相比单脉冲而言,由于电子和晶格的温度高,靶材的汽 化和等离子体喷射强烈,所以烧蚀速率和深度明显 提高.

图 2 为给定不同脉冲个数,但是保持其他参量不 变的情况下,电子和晶格的温度变化曲线.图 2 (a)为 单脉冲作用在金属表面的情况,初期时电子的温度急 剧升高,最高温度为 3 377 K;通过耦合作用使晶格的 温度升高,在 8 ps两者达到一个稳定的平衡状态,平衡





Fig. 2 Temperature field distribution of electrons and lattices under different pulse numbers

温度为992.5 K.图2(b)是三脉冲作用下,电子和晶格的耦合规律.设三脉冲的时间间隔分别为 $dt_1 = 2$  ps和 $dt_2 = 12$  ps,第一个脉冲达到最高温度之后因为耦合作用电子温度下降,温度达到2582 K时,在第二个脉冲的作用下电子的温度升高到4198 K,然后电子会通过电声耦合作用将能量传递给晶格,在14 ps时两者达到平衡温度,比之前的平衡时间延长了6 ps.平衡状态之后第三个脉冲来临时,此时电子的峰值温度约为4012 K,比第二个脉冲的峰值温度要低,最后两者的平衡温度从两个脉冲的1630 K提高到2189 K,升高了559 K,对比第二个脉冲升高的637.5 K,也有所下降.

由此可见,多脉冲作用时,两个脉冲的时间间隔是 一个很重要的参量,它对电子和晶格的温度场分布有 至关重要的作用.当两个脉冲的时间间隔小于电声耦 合时间时,第二个脉冲的作用效果比较明显,对电子的 峰值温度和最后的平衡温度都有很大提升;如果两个 脉冲的时间间隔大于电声耦合时间,第二个脉冲作用 时,靶材的电子和晶格已经达到了平衡状态,此时第二 个脉冲对两者温度的影响要小很多,造成了能量的损 失.因此为了提高飞秒激光的烧蚀效率,需要合理选择 脉冲时间间隔.

取 dt<sub>1</sub>=2 ps 和 dt<sub>2</sub>=4 ps,图 3 给出了三脉冲作用 下电子和晶格温度在不同脉宽条件下的变化规律.图 3(a)表明脉宽越长,达到峰值所用的时间越长,每个脉 冲电子温升越慢,因此导致电子耦合的时间延长.与单 脉冲不同的是:第一个脉冲烧蚀之后,200 fs 和 800 fs 的峰值温差在 643 K,第三个脉冲作用之后这一温差 下降到 374K.分析表明脉宽对电子峰值温度的影响作 用会随着脉冲个数的增加而逐渐减弱.原因在于当脉 冲个数增加时,相应的累积效应会更加明显,前面的脉 冲作用之后,电子仍处在高温阶段,后面的脉冲就开始 产生作用,使电子温度继续升高<sup>[14]</sup>.对于晶格而言,由 于后续脉冲作用时,电声耦合的作用会削弱,晶格在后





图 3 三脉冲不同脉宽下电子和晶格的温度分布

Fig. 3 Temperature distribution of electrons and lattices under three pulses of different pulse width

续脉冲到来之前会有一个微弱的温度降低趋势,但不 会影响最终的平衡温度.通过以上分析可得,脉宽不同 时,在累积效应的影响下,多脉冲作用主要对电子温度 产生影响.

图 4 为不同激光能量条件下,三脉冲作用时电子 和晶格的温度变化规律.当激光能量不同时,连续三个





脉冲的作用并不影响电子达到峰值温度所用的时间和 电声耦合时间,但是对电子和晶格的温度影响比较大. 在第一个脉冲作用下,当能量为200 J/m<sup>2</sup>时电子峰值 温度为2204 K,当能量为800 J/m<sup>2</sup>时电子峰值温度 为4690 K,这两个峰值温度差异为2486 K,当第三个 脉冲作用时,相应的峰值温度差异为3730 K,这也影 响了电子和晶格的平衡温度,最终在三脉冲的作用下, 晶格的温度有明显提高.分析表明多脉冲的累积效应 对靶材电子和晶格温度会产生重要影响.

电子和声子的耦合系数 g 是材料的重要参量,在 电子能量向晶格传递的过程中占据重要地位.一般情况下,在利用有限差分法求解双温方程的过程中,认为 耦合系数 g 是一个常量,但是实际 g 值是随着温度的 变化而改变的,可表示为<sup>[15]</sup>

$$g = g_{\rm rt} = \left[\frac{A_{\rm e}}{B_{\rm 1}}(T_{\rm e} + T_{\rm 1}) + 1\right]$$
(8)

式中,g<sub>n</sub>是常温下的耦合系数;A<sub>e</sub>和 B<sub>1</sub> 是与材料有关 的常量,因此可以看出 g 是随着电子温度和晶格温度 变化的函数,有必要讨论其值的变化对双温方程模拟 结果的影响.在不同 g 值条件下,三脉冲对电子温度场 和晶格温度场的影响规律如图5,分析表明,在三脉冲





Fig. 5 Temperature distribution of electrons and lattices with three pulses of different electron-lattice coupling coefficient 作用时,g值大小对电子与晶格的耦合时间和平衡温度具有很大影响.随着g值的增大,电子与晶格的温度达到平衡状态所需要的时间就越短.取g值为2×10<sup>18</sup>时,电子和晶格耦合时间约为20ps,三个脉冲作用完成,晶格的平衡温度差值约为1200K.

通过对飞秒激光烧蚀镍钛合金的数值模拟,得到 了电子与晶格温度随时间和烧蚀深度的变化规律.计 算结果表明:1)在飞秒激光三脉冲作用下,对应电子有 3个递增的峰值温度,因为后续脉冲在前一个脉冲的 基础上继续作用,所以后一个峰值温度要高于前一个 峰值温度,而晶格温度会一直升高直到达到平衡状态; 2)对比单脉冲的模拟结果发现,同样参量下三脉冲作 用下的靶材内部温度有明显升高,不同的时间间隔对 累积效应有重要影响;3)三脉冲作用时,降低激光脉 宽,能够增加电子和晶格的温升速度,同时缩短达到平 衡的时间.4)电子和晶格的温度与激光能量密度成正 比;5)在双温方程其他参量不变时,电子和晶格的耦合 时间与耦合系数成反比.

## 3 结论

为了研究飞秒激光多脉冲累积效应对镍钛合金材 料的烧蚀效应,通过考虑多脉冲的时间间隔改写激光 光源项,提高多脉冲烧蚀金属的双温模型准确度,最后 应用该模型对飞秒激光多脉冲烧蚀镍钛合金情况进行 了数值模拟,得到了三脉冲条件下,电子温度和晶格温 度在不同脉冲个数、脉冲宽度、激光能量密度、电声耦 合参量下的变化规律,得出了多脉冲累积效应的内在 机理和加工工艺参量对烧蚀过程的影响规律,研究结 果对实际生产中如何提高飞秒激光加工镍钛合金材料 的质量和效率具有重要意义.但是在多脉冲模拟的过 程中,对于后续脉冲作用时材料参量会有微小变化等 细节尚未充分考虑,后续研究可以将双温方程继续优 化,使其更加符合飞秒激光烧蚀金属的实际应用.

#### 参考文献

- [1] SEDLAK P, FROST M, BENESOVA B, et al. Thermomechanical model for NiTi-based shape memory alloys including R-phase and material anisotropy under multi-axial loadings[J]. International Journal of Plasticity, 2012, 39: 132-151.
- [2] WANG Yong-shan, HE Zhi-rong, WANG Qi, et al. Research progress on properties and application of Ti-Ni shape memory alloys[J]. Material & Heat Treatment, 2009, 38(20): 18-21.

王永善, 贺志荣, 王启, 等. Ti-Ni 形状记忆合金性能及应用研究 进展[J]. 热加工工艺, 2009, **38**(20):18-21.

[3] HU Ming-lie, SONG You-jian, LIU Bo-wen, et al. Development and advanced applications of femtosecond photonic crystal fiber laser technique[J]. Chinese Journal of Lasers, 2009, 36(7): 1660-1670.

胡明列,宋有建,刘博文,等.光子晶体光纤飞秒激光技术研究进展及其前沿应用[J].中国激光,2009,36(7):1660-1670.

- [4] BALLING P, SCHOU J. Femtosecond-laser ablation dynamics of dielectrics: basics and applications for thin films [J]. *Reports on Progress in Physics*, 2013, 76(3): 036502.
- [5] ZHANG Shuang-gen, YAO Jiang-hong, LI Yong-nan, et al. Experimental research on congruent LiNbO<sub>3</sub> waveguide fabricated by femtosecond laser pulses [J]. Acta Photonica Sinica, 2009, 38(1): 26-29. 张双根,姚江宏,李勇男,等. 飞秒激光刻写铌酸锂光波导的实

验研究[J]. 光子学报, 2009, 38(1):26-29.

[6] REN Huan, WANG Jun-bo, QIU Rong, et al. Ultrafast dynamics of intense femtosecond laser ablation of silicon[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2012, 24(12): 2787-2790.

任欢,王俊波,邱荣,等.飞秒脉冲烧蚀单晶硅的超快动力学 [J].强激光与粒子束,2012,24(12):2787-2790.

- [7] AMRUSO S, BRUZZESE R, WANG X, et al. Femtosecond laser ablation of nickel in vacuum[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2007, 40(2): 331.
- [8] NI Xiao-chang, WANG Qing-yue, LIANG Jian-guo, et al. The thermal character analysis of the femtosecond laser pulse parameters effect on metal surface[J]. Acta Photonica Sinica, 2006, 35(1): 1-4.

倪晓昌,王清月,梁建国,等.飞秒脉冲参量影响金属表面热特性的研究[J].光子学报,2006,**35**(1):1-4.

[9] SHAO Jun-feng, GUO Jin, WANG Ting-feng, et al. 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,等.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.

[10] NING Xiao-chang, WANG Qing-yue. Research progress of femtosecond laser ablation [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2002, **39**(12): 4-9.

倪晓昌,王清月.飞秒激光烧蚀研究进展[J].激光与光电子学进展,2002,**39**(12):4-9.

- [11] BONSE J, BAUDACH S, KRVGER J, et al. Femtosecond laser ablation of silicon - modification thresholds and morphology[J]. Applied Physics A, 2002, 74(1): 19-25.
- [12] CHEN An-min, JIANG Yuan-fei, LIU Hang, et al. Numerical simulation of femtosecond laser ablation by twotemperature model[J]. Laser & Infrared, 2012, 42(8): 847-851.

陈安民,姜远飞,刘航,等.双温方程用于飞秒激光烧蚀金属的 模拟分析[J].激光与红外,2012,42(8):847-851.

- [13] ZHU Shi-jia, WANG Xin-lin, ZHU Wei-hua, et al. Numerical simulation for influence of pulse duration on femtosecond laser ablation of alloy [J]. Electro-Optic Technology Application, 2011, 26(6): 39-44.
  朱诗佳,王新林,朱卫华,等. 脉宽对飞秒激光烧蚀合金影响的 数值模拟[J].光电技术应用,2011, 26(6): 39-44.
- [14] LI Li, ZHANG Duan-ming, FANG Ran-ran, et al. Residual energy in femtosecond multiples laser ablation of metal[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2009, 21 (11): 1671-1676.
  李莉,张端明,房然然,等. 飞秒多脉冲激光烧蚀金属过程中的 能量剩余现象[J].强激光与粒子束,2009, 21 (11):1671-

1676

[15] XU Bin, WU Xiao-yu, LING Shi-quan, et al. Numerical simulation of thermal electron emission in metal films ablated by multi-pulse femtosecond laser[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2012, 49(8): 083201.
徐斌,伍晓宇,凌世全,等. 多脉冲飞秒激光烧蚀金属箔的热电子发射数值分析[J]. 激光与光电子学进展, 2012, 49(8): 083201.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (No. 61303006), the Research Award Fund for Outstanding Young Scholars of Shandong Province (No. BS2012ZZ009) and the Shandong University of Technology Supporting Plan for Development of Young Teacher (No. 2014-03)