

超快激光切割金属材料中快速相变的数值模拟

张琦, 李凌

(上海理工大学 能源与动力工程学院, 上海 200093)

摘要: 采用二维双温度模型对多脉冲激光照射金薄板的相变传热情况进行研究, 通过等效比热容方法确定固液界面的位置并研究了激光参数对传热过程的影响。结果表明, 当激光垂直照射金薄板时, 表面整体温度不断上升, 而在脉冲间隔时间内略有下降, 但温度的峰值相比激光作用的中心有延迟。随着激光的移动, 激光照射点处的温度会出现一个峰值, 之后会回落。激光作用时间内热影响区的横向变化比纵向大, 移动光源向内部的热传递占主要作用, 脉冲间隔时间内, 热影响区的纵向变化比横向大, 金薄板内部导热占主要作用。随着激光的照射, 熔化状态横向不断增加的同时, 熔化的深度也在不断增加。提高入射脉冲激光能量, 会导致熔化的时间提前且熔化深度增加。

关键词: 多脉冲激光; 二维双温度模型; 固液界面; 等效比热容; 热影响

中图分类号: TN 249 **文献标志码:** A

Numerical simulation on the rapid phase transformation of metal under the action of moving light source

ZHANG Qi, LI Ling

(School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

Abstract: The phase change heat transfer of multi-pulse laser irradiated gold thin plates was studied by using a two-dimensional dual temperature model. The position of solid-liquid interface was determined by the equivalent specific heat capacity method and the influence of laser parameters on the heat transfer process was studied. The results show that when the laser illuminates the gold thin plate vertically, the overall temperature of the surface increases continuously, but decreases slightly during the pulse interval, and the temperature peak is slightly delayed compared to that at the center of the laser action. As the laser moves, the temperature at the laser spot will show a peak and then fall back. The lateral change of the heat-affected zone during laser action is larger than the longitudinal one, where the heat transfer from the moving light source to the inside plays a major role. During the pulse interval, the longitudinal change of the heat-affected zone is larger than the lateral one, where the internal heat conduction of the gold thin plate plays a major role. As the laser is irradiating, the melting state extends continuously in the lateral direction, while the depth of melting is also constantly increasing. Increasing

收稿日期: 2019-09-02

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (51476102)

第一作者: 张琦 (1993-), 男, 硕士研究生。研究方向: 激光与物质相互作用。E-mail: 602242450@qq.com

通信作者: 李凌 (1976-), 女, 教授。研究方向: 微尺度传热。E-mail: liling@usst.edu.cn

the incident pulse laser energy causes the melting time to advance and the melting depth to increase.

Keywords: multi-pulse laser; two-dimensional two-temperature model; solid-liquid interface; equivalent specific heat capacity; thermal influence

激光的微加工技术是利用激光束与物质相互作用的特性对材料(包括金属与非金属)进行切割、焊接、表面处理及打孔等的一门加工技术。超短脉冲激光切割材料时显现出的“冷加工^[1]”特性,使其成为近年来激光微加工领域的研究热点。利用超短脉冲激光峰值功率密度极高、热效应极小的特点^[2],可以有效地避免热效应所导致的各种影响。在激光与材料相互作用过程中,会出现熔化以及凝固^[3]等快速相变传热现象,与固体激光器和 CO₂ 激光器的“热”激光切割相比,超短激光的加工精度更高。目前对于超短激光和金属材料的研究很多^[4-6],但大多数是单脉冲且光源不动,Zhou 等^[7]研究了超短激光与纳米材料的微尺度的传热机理,金方圆等^[8]采用有限元的方法研究了铝膜内电子和晶格温度的分布变化。他们的研究表明,超短脉冲激光与金属相互作用过程中激光的能量通过光子沉积在金属材料的表面,而金属材料表面中的电子首先通过吸收光子的能量,并通过电子间的碰撞使电子系统在大约几百 fs 的时间内得到加热,而此时金属晶格温度并没有太大变化^[9]。随后,能量通过电子与离子的碰撞传递给晶格,使晶格系统得到加热。实际脉冲激光切割过程中,激光是以一定的速度移动的,激光能量的变化情况、脉冲激光的移动速度以及脉冲之间的间隔时间都对加工过程中材料的相变传热有很大影响,并进而影响成型件的质量。本文将双温度模型^[10]与等效比热容方法^[11]相结合,建立二维模型对多脉冲激光照射下的金薄板相变传热过程进行模拟研究,并探讨激光参数对该过程的影响,研究有助于推广激光微加工技术在工业中的应用。

1 物理模型与数学方法

1.1 物理模型

图 1 为物理模型,一束超短脉冲激光沿上表面从左侧对金薄板进行照射,并以速度 v 向右移动。为了简化计算,建立二维模型,如图 1 所

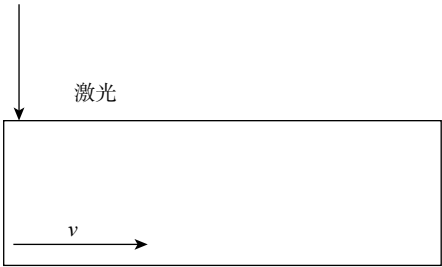


图 1 物理模型 激光照射表面
Fig. 1 Physical model. Laser irradiated surface

示,金的长度为 L ,高度为 H ,初始温度为 T_i ,其他表面均按绝热条件处理。

1.2 数学方法

当超短脉冲激光照射到金薄板表面时,电子和晶格之间处于不平衡传热,采用双温度模型(TTM)对上述非平衡过程进行描述,直角坐标系下的非线性方程为

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_e \frac{\partial T_e}{\partial y} \right) - G(T_e - T_l) + S \tag{1}$$

$$C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_l \frac{\partial T_l}{\partial y} \right) + G(T_e - T_l) + \rho L_f \frac{df}{dt} \tag{2}$$

式中: C 为体积热容; T 为温度; t 为时间; k 为导热系数; G 为电子-声子耦合因子; S 为热源,由于激光被用作边界条件,在本研究中 $S=0$; 下标 e 和 l 代表电子和晶格; ρ 为密度; L_f 为熔化潜热; f 为液体分数。

文献 [12] 可以获得金的物性参数。假设液体分数 f 随温度线性变化。

$$f = \begin{cases} 1, & T_l > (T_m + \delta T_l) \\ \frac{T_l - T_m + \delta T_l}{2\delta T_l}, & T_m - \delta T_l < T_l < T_m + \delta T_l \\ 0, & T_l < T_m - \delta T_l \end{cases} \tag{3}$$

在 T_m 是熔点温度的情况下, δ 是一个小数,以防止除以零。

图 2 是超快脉冲激光在时间及空间上的分布示意图,其函数表达式为

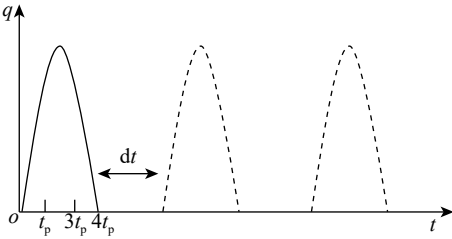


图 2 激光能量强度在时间和空间上的分布示意图

Fig. 2 Schematic diagram of laser intensity distribution in time and space

$$q = A \frac{2E}{\pi R^2 t_p} \exp\left(-2 \frac{r^2}{R^2}\right) \left\{ \exp\left[-2.77 \frac{(t-2t_p)^2}{t_p^2}\right] + \dots \right. \\ \left. \exp\left[-2.77 \frac{(t-nt_p)^2}{t_p^2}\right] \right\} \quad (4)$$
$$r = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} = vt$$

式中： x_0, y_0 为激光中心点； A 为金对激光的吸收率； E 为单脉冲能量； t_p 为脉冲宽度； R 为激光源的半径； n 的值与脉冲宽度和脉冲间隔以及脉冲数有关。

从 $t=0$ 开始计算，初始条件：

$$T_e(x, y, 0) = T_l(x, y, 0) = 300 \text{ K} \quad (5)$$

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial T_l}{\partial t} = 0 \quad (6)$$

金薄板上表面收到激光的辐照，忽略表面热辐射热损失，左、右、下设置为绝热条件：

$$y = H, \quad q = -k \frac{\partial T_e}{\partial y} \quad (7)$$

$$x = 0, \quad x = L, \quad \frac{\partial T_e}{\partial x} = \frac{\partial T_l}{\partial x} = \frac{\partial T_e}{\partial y} = \frac{\partial T_l}{\partial y} = 0 \quad (8)$$

$$y = 0, \quad \frac{\partial T_e}{\partial x} = \frac{\partial T_l}{\partial x} = \frac{\partial T_e}{\partial y} = \frac{\partial T_l}{\partial y} = 0 \quad (9)$$

2 结果与讨论

2.1 模型验证

为了对模型进行验证，首先对单脉冲激光照射金膜的传热过程利用软件 comsol5.3 进行模拟。金膜的初始温度为 300 K， $t_p=600 \text{ fs}$ ，模拟从 $-2t_p$ 开始，计算得到了金膜右侧刚发生熔化时的能量密度，将其损失阈值模拟结果与实验数据^[12]进行了对比，结果如图 3 所示。从图 3 中可以看出，模型与实验数据吻合良好。

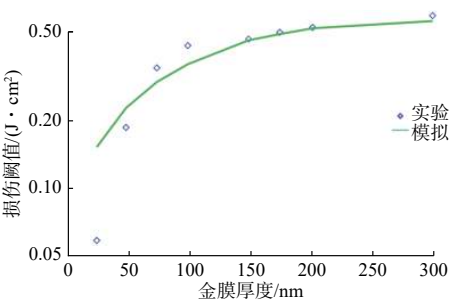


图 3 损伤阈值的模型和实验数据比较

Fig. 3 Model and experimental data comparison of the damage threshold

2.2 激光移动作用下金薄板的熔化过程

对 $E=0.3 \mu\text{J}$ ， $t_p=10 \text{ ps}$ ， $R=10 \mu\text{m}$ ，脉宽间隔 $dt=40 \text{ ps}$ 的移动激光照射金薄板的过程进行了模拟研究。金薄板 $L=25 \mu\text{m}$ ， $H=0.5 \mu\text{m}$ ，采用自适应网格技术生成网格，初始网格数为 100×100 ，初始温度为 300 K。图 4 给出了不同时刻其温度场的变化情况。从图 4 中可以看出，在激光移动过程中，表面温度 T 整体在不断地上升，而在 2 个脉冲间隔内即 $t=40 \sim 80 \text{ ps}$ 以及 $t=120 \sim 160 \text{ ps}$ 时，表面的最高温度有所降低，这是因为热量不断地向低温区传递。由图 4 中也可以发现，在脉冲间隔内，热影响区纵向的变化要比横向的变化大，而在激光照射期间，热影响区横向的变化要比纵向的变化大。这是因为脉冲间隔内没有能量的进入，金薄板内部导热占主要作用，而激光照射时则移动光源向内部的热传递占主要作用。

金薄板的相变熔化情况如图 5 所示。其中，红色部分是发生熔化区域。计算发现，在 $t=22 \text{ ps}$ 时开始发生熔化，此时熔化最深为 $0.007 \mu\text{m}$ 。而在 2 个脉冲间隔内，即 $t=40 \sim 80 \text{ ps}$ 以及 $t=120 \sim 160 \text{ ps}$ 时，熔化的部分开始缓慢地再凝固，熔化深度也由 $0.075 \mu\text{m}$ 到 $0.07 \mu\text{m}$ 以及 $0.105 \mu\text{m}$ 到 $0.102 \mu\text{m}$ ，这是由于热量向低温区域传递，温度有所降低。在激光作用时间内，随着激光的移动，熔化状态横向不断增加的同时，熔化的深度也在不断增加，在脉冲激光结束时， $t=200 \text{ ps}$ ，此时熔化深度为 $0.11 \mu\text{m}$ 。

图 6 是金薄板表面点 $(5, 0.5)$ ， $(12.5, 0.5)$ ， $(20, 0.5)$ 处电子和晶格温度随时间的变化曲线。从图 6 中可以看出，随着激光的移动，不同点的温度都会出现 3 个峰值，之后会回落。这是因为

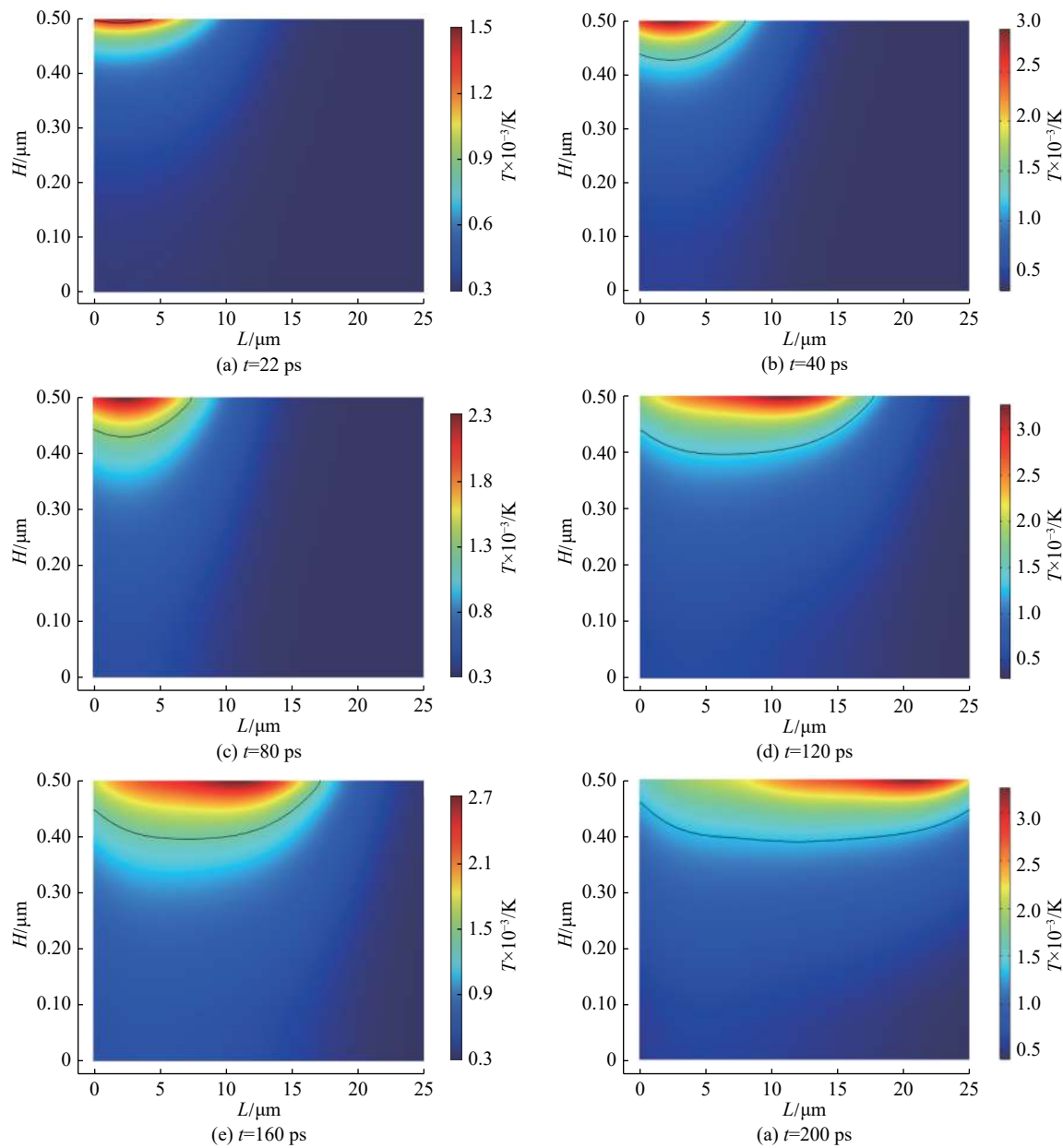


图 4 不同时刻金薄板晶格的温度分布
Fig.4 Lattice temperature at different time

激光包括 3 个脉冲，同一个点会受到 3 个脉冲的叠加影响，激光与金属作用过程中，激光能量在金属表面沉积，电子通过吸收能量从而转换为激发态，又由于电子温度高于附近的晶格温度，因此，电子的温度先是快速升高而后又迅速降低。而晶格接受电子传递的能量后温度会不断上升，之后由于向低温区传热温度逐渐降低。

2.3 激光能量对照射过程中金薄板快速相变的影响

研究激光能量对照射过程中快速相变的影响，图 7 为当激光脉宽 $t_p=10\text{ ps}$ ，激光半径 $R=10\text{ }\mu\text{m}$ ，

脉宽间隔为 40 ps 时，金薄板在不同能量 E 的激光照射下界面的温度及切割深度。从图 7(a) 可以看出，随着入射激光能量的增大，界面的温度峰值越来越高。当 3 个脉冲作用结束后，温度的最高值均在右侧，但温度的峰值相比激光作用的中心略有延迟，这是由于激光在照射过程中上一个脉冲对下一时刻激光中心位置热影响的累积，使得界面温度的峰值位置在激光中心点之后；在实际工程中，切面最高点与最低点之间的高差垂直距离越小，说明切割效果越好。从图 7(b) 可以看出，随着入射激光能量的增大，切割的深度也越

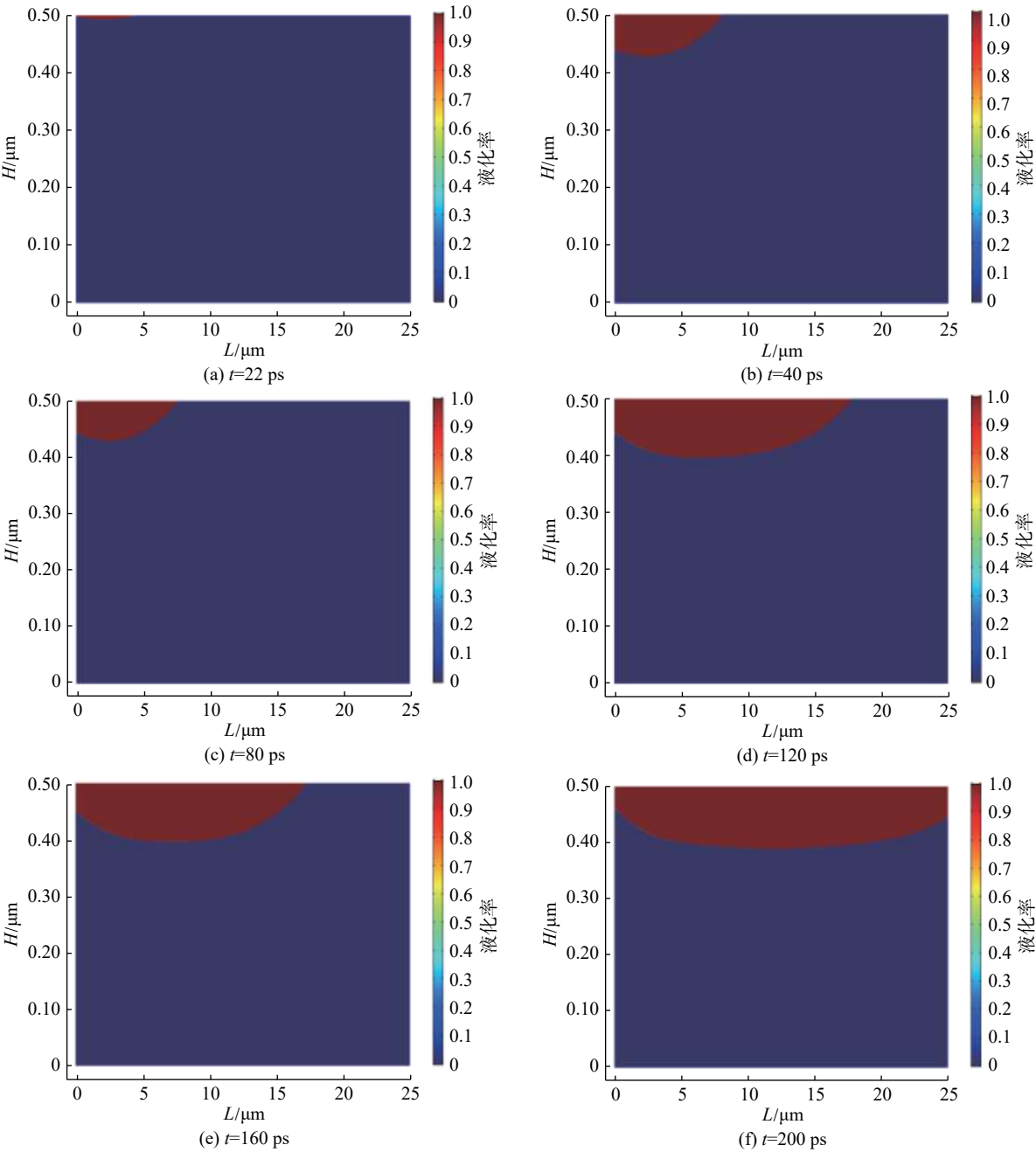


图 5 不同时刻金薄板熔化情况
Fig.5 Melting at different time

来越大,但相比较而言, $E=0.3\text{ }\mu\text{J}$ 时边缘处切割相对整齐,切割的效果相对较好。

不同能量 E 照射下金薄板相变熔化情况如图 8 所示。随着入射激光能量的增大,熔化的深度会增加且靶材的熔化体积越来越大,熔化开始的时间也从 25 ps 提前到 19 ps。这是因为,当其他因素都不变的情况下,提高激光能量,相同时间内表面接受能量多,使得温度上升速度变快,温度的峰值也提高。当激光作用结束后,激光能量越

大,靶材熔化体积到达最大值的时间越缓慢。在整个过程中靶材的熔化体积会有 3 个“台阶”,这是因为 3 个脉冲激光是间歇作用。在 $E=0.2, 0.3\text{ }\mu\text{J}$ 时,脉冲间隔时间内其熔化体积会略有减小,这是因为在这个时间内没有能量注入,无法使得熔化区域的温度持续高于熔化温度,而 $E=0.4\text{ }\mu\text{J}$ 时,由于能量过大,在最后一个脉冲结束后内部导热进行的时间比较长,但随着时间的推移,会发生再凝固现象。

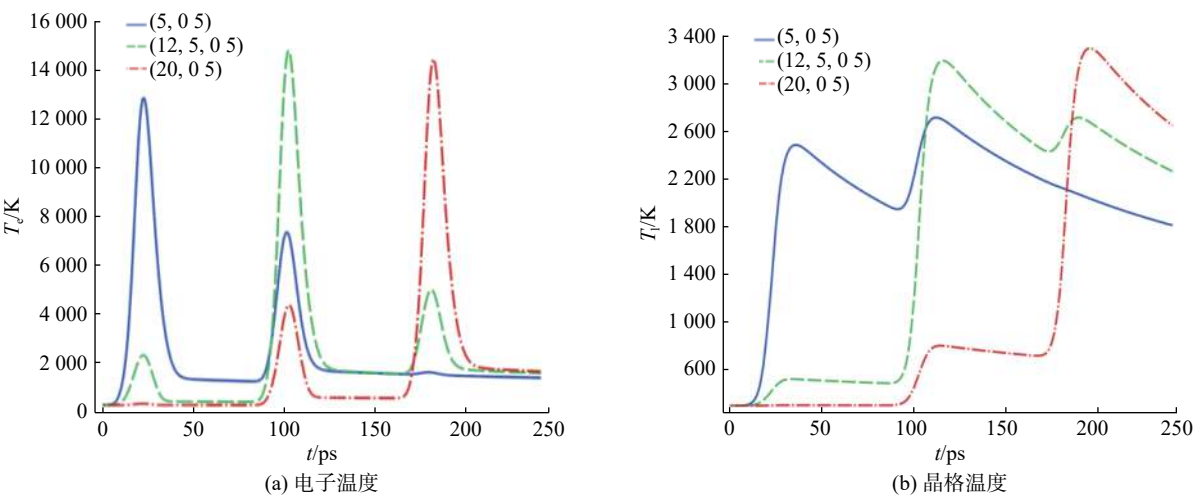


图 6 表面不同位置的温度
Fig.6 Surface temperature at different position

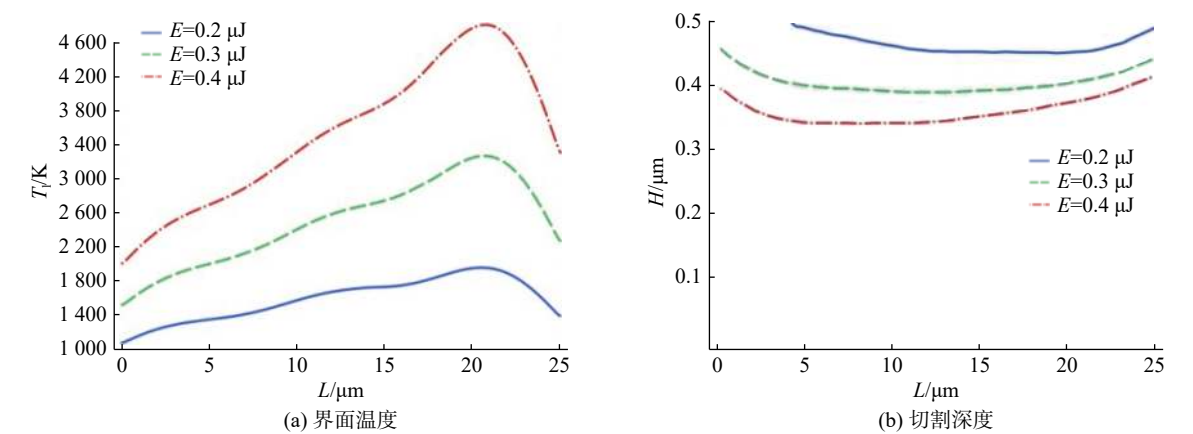


图 7 不同入射能量的温度
Fig.7 Temperature with different incident energy

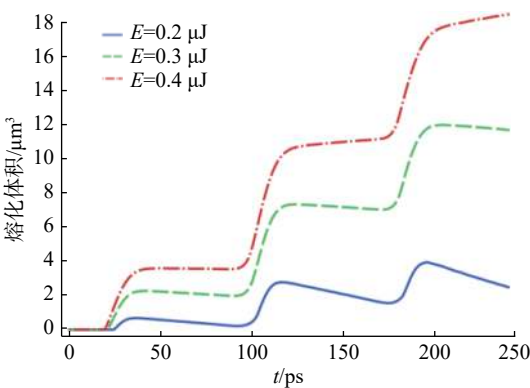


图 8 不同入射能量的熔化体积
Fig.8 Melting volume with different incident energy

3 结 论

当移动激光垂直照射金薄板时，在激光作用时间内随着激光的移动热影响区横向的变化要比纵向的变化大，熔化状态横向不断增加的同时熔

化的深度也在不断增加。在脉冲间隔时间内，表面的最高温度都有所降低，随着热量不断地向低温区传递，热影响区纵向的变化要比横向的变化大，熔化的部分会有缓慢的再凝固过程。随着入射激光能量的增加，会导致熔化的时间提前且熔化的深度增加。

参考文献:

[1] SUGIOKA K, CHENG Y. Ultrafast laser processing: from micro-to nanoscale[M]. Singapore: Pan Stanford Publishing, 2013.

[2] 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.

[3] 王志坚, 王宗园, 宋鸿武, 等. TC4 钛合金激光熔覆熔池凝固传热研究[J]. 机械设计与制造, 2018(10): 85-88.

[4] QIU T Q, TIEN C L. Heat transfer mechanisms during short-pulse laser heating of metals[J]. Journal of Heat

Transfer, 1993, 115(4): 835–841.

- [5] SHIOMI M, YOSHIDOME A, ABE F, et al. Finite element analysis of melting and solidifying processes in laser rapid prototyping of metallic powders[J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 1999, 39(2): 237–252.
- [6] AN W, ZHU T. Finite element method with diffusion synthetic acceleration for short pulsed laser in turbid media[J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2012, 29(1): 121–126.
- [7] ZHOU L, LI L, ZHANG Y W, et al. Source distribution based on Mie's scattering theory for heat conduction in nanoparticle subject to ultrashort laser irradiation[J]. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2014, 66(6): 605–621.
- [8] 金方圆, 陈波, 鄂书林, 等. 皮秒激光烧蚀 Al 膜的理论分

析与实验验证 [J]. *发光学报*, 2014, 35(6): 754–760.

- [9] RETHFELD B, KAISER A, VICANEK M, et al. Femtosecond laser-induced heating of electron gas in aluminium[J]. *Applied Physics A*, 1999, 69(7): S109–S112.
- [10] ANISIMOV S I, KAPELIOVICH B L, PERELMAN T L. Electron emission from metal surfaces exposed to ultra-short laser pulses[J]. *Soviet Physics, JETP*, 1974, 39(2): 375–377.
- [11] 周业涛, 关振群, 顾元宪. 求解相变传热问题的等效热容法 [J]. *化工学报*, 2004, 55(9): 1428–1433.
- [12] STUART B C, FEIT M D, HERMAN S, et al. Optical ablation by high-power short-pulse lasers[J]. *Journal of the Optical Society of America B*, 1996, 13(2): 459–468.

(编辑: 石 瑛)

(上接第 429 页)

- [11] ITO M. An extension of nonlinear evolution equations of the K-dV(mK-dV) type to higher orders[J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1980, 49(2): 771–778.
- [12] GÖKTAŞ Ü, HEREMAN W. Symbolic computation of conserved densities for systems of nonlinear evolution equations[J]. *Journal of Symbolic Computation*, 1997, 24(5): 591–622.
- [13] KAUP D J. On the inverse scattering problem for cubic eigenvalue problems of the class $\psi_{xxx}+6Q\psi_x+6R\psi=\lambda\psi$ [J]. *Studies in Applied Mathematics*, 1980, 62(3): 189–216.
- [14] POMEAU Y, RAMANI A, GRAMMATICOS B. Structural stability of the Korteweg-de Vries solitons under a singular perturbation[J]. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1988, 31(1): 127–134.
- [15] WHITHAM G B. Linear and nonlinear waves[M]. New York: John Wiley Sons, 1974.

- [16] LAMB K G, YAN L R. The evolution of internal wave undular bores: comparisons of a fully nonlinear numerical model with weakly nonlinear theory[J]. *Journal of Physical Oceanography*, 1996, 26(12): 2712–2734.
- [17] SALAS A H, GÓMEZ S C A. Application of the Cole-Hopf transformation for finding exact solutions to several forms of the seventh-order KdV equation[J]. *Mathematical Problems in Engineering*, 2010, 2010: 194329.
- [18] ZHANG Y P, ZHANG W G. Lax pair, Hirota bilinear form and soliton solutions of the seventh-order Kaup-Kupershmidt equation in plasma physics[C]//Proceedings of the 2017 International Conference on Mechanical Electronic, Control and Automation Engineering, 2017, 61: 408–411.
- [19] RUDIN W. Principles of mathematical analysis[M]. Beijing: China Machine Press, 2004.

(编辑: 丁红艺)