

单晶铁金属表面污染物的激光烧蚀机理

白清顺 张凯 沈荣琦 张飞虎 苗心向 袁晓东

Laser ablation mechanism of contamination on surface of single crystal iron

Bai Qing-Shun Zhang Kai Shen Rong-Qi Zhang Fei-Hu Miao Xin-Xiang Yuan Xiao-Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 234401 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180999

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180999>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[基于拓展分离变量法的层合材料瞬态传热分析](#)

Transient heat transfer analysis of laminated materials based on extended separation of variables

物理学报.2018, 67(21): 214401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180743>

[非均匀背景中任意柱状热斗篷的研究与设计](#)

Design and research of columnar thermal cloak with arbitrary shape in inhomogeneous backgrounds

物理学报.2017, 66(11): 114401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.114401>

[基于变换热力学的三维任意形状热斗篷设计](#)

Design and research of three-dimensional thermal cloak with arbitrary shape based on the transformation thermodynamics

物理学报.2017, 66(10): 104401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.104401>

[纳晶铜晶粒尺寸对热导率的影响](#)

Influence of grain size on the thermal conduction of nanocrystalline copper

物理学报.2016, 65(10): 104401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.104401>

[基于\(火积\)理论的“+”形高导热构形通道实验研究](#)

Experimental study on “+” shaped high conductivity constructal channels based on entransy theory

物理学报.2016, 65(2): 024401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.024401>

单晶铁金属表面污染物的激光烧蚀机理*

白清顺^{1)†} 张凯¹⁾ 沈荣琦¹⁾ 张飞虎¹⁾ 苗心向²⁾ 袁晓东²⁾

1) (哈尔滨工业大学机电工程学院, 哈尔滨 150000)

2) (中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2018年5月23日收到; 2018年8月24日收到修改稿)

激光惯性约束核聚变装置中要求光学元件能够承受极高的激光通量, 因此对装置内部洁净度有很高的要求. 研究表明装置内部的颗粒污染物主要来源于装置内的机械结构件, 杂散光作用下机械结构件表面的损伤将产生颗粒污染物. 精密金属构件的激光诱导损伤问题是制约高功率激光装置超洁净制造的重要因素. 由于机械结构件表面不可避免地存在污染物, 因此本文基于传统的分子动力学能量耦合方式, 模拟了激光与表面吸附污染物单晶铁的相互作用过程, 探讨了铁材料在激光作用下的烧蚀行为, 并分析了激光加载方式和激光能量密度对铁材料烧蚀的作用情况, 对比研究了材料表面有无污染物对材料烧蚀的影响情况. 研究表明: 激光作用下铁材料表面原子在污染物原子的剧烈碰撞下呈现出不同的运动状态; 激光能量瞬时加载时更容易烧蚀铁材料; 当激光能量密度低于 0.0064 J/cm^2 时, 将去除铁材料表面的污染物并不会对铁材料产生烧蚀现象, 进一步分析表明铁材料表面吸附污染物时更容易被激光烧蚀. 研究结果可为提高高功率激光装置的内部洁净度、实现系统超洁净控制提供理论依据.

关键词: 单晶铁, 污染物, 激光烧蚀, 分子动力学

PACS: 44.10.+i, 52.38.Mf, 36.40.-c

DOI: 10.7498/aps.67.20180999

1 引言

随着高功率激光装置的不断发展^[1-3], 对装置元器件负载能力的要求不断提高, 目前元器件的污染问题已经成为制约激光惯性约束核聚变发展的瓶颈问题之一. 高功率激光装置内部机械结构件与光学元件是密不可分的, 激光作用下机械结构件表面的污染物将扩散到光学元件表面, 在激光的作用下引起光学元件的损伤^[4,5], 进而影响装置的整体性能. 高功率激光装置的特殊环境要求某些金属构件或光学元件达到超洁净要求, 并且具备超洁净制造的能力^[6,7]. 对高功率激光装置内部污染物的成分分析表明: 污染物通常包含有机污染物、无机污染物和金属颗粒污染物. 兰州空间物理研究所通过实验方法对机械结构件表面有机污染物的成分进

行分析, 研究结果表明有机污染物以烷烃为主^[8]. Raman等^[9]和Bude等^[10]的研究表明不同类型的颗粒污染物将对光学元件表面造成不同的损伤形貌. Manenkov^[11]对激光作用下污染物诱导光学材料的损伤机理进行了研究, 研究表明污染物热量的非线性增长将导致污染物附近的光学材料产生光致电离现象. 在聚变装置激光直接驱动加载准等熵压缩的研究中, 结果表明: 超高压同时保持低温状态对激光加载金属靶产生影响^[12]. 此外还有一些学者对光学材料表面的氢氟酸刻蚀等处理工艺进行研究, 旨在提高光学元件表面洁净度, 提高光学材料的激光损伤阈值^[13-15]. 目前的研究主要集中在抑制光学材料表面吸附污染物对光学材料的损伤方面^[16-18], 而高功率激光装置内部的金属颗粒污染物和有机污染物大多来源于机械构件. 因此有必要对激光作用下机械构件表面污染物的扩散情

* 国家自然科学基金(批准号: 51535003, 51575138)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: qshbai@hit.edu.cn

况进行研究, 从污染物的来源上对其分析. 采用精密超精密加工工艺获得的机械构件引入的金属颗粒污染物多来自于切屑, 或者是激光作用下微观损伤所形成的金属微屑 [19]. 同时, 精密运动机构内部的微量油脂是其有机污染物的主要来源. 因此, 本文采用十二烷分子和切屑分别模拟金属构件表面的有机污染物和金属颗粒污染物.

2 仿真模型与参数设置

在建立仿真模型的过程中, 本文分别采用切屑和十二烷作为单晶铁表面吸附的金属颗粒污染物和有机污染物. 单晶铁基体材料的尺寸为 $120 \text{ \AA} \times 120 \text{ \AA} \times 140 \text{ \AA}$, 金属颗粒污染物切屑为直径 40 \AA 的球体, 有机污染物十二烷分子的数量为 100 个. 取单晶铁的 (1 0 0) 晶面平行于 xoy 平面, 在 x 和 y 方向施加周期性边界条件, 污染物沿 z 轴的负方向吸附到铁表面上. 选择嵌入原子法 (embedded atom method, EAM) 势函数描述铁原子之间的相互作用, 并采用 L-J 势描述十二烷分子与铁原子之间的相互作用 [20], 截断半径为 10 \AA . 表 1 所列为仿真采用的参数. 结合 Lorentz-Berthelot 法则, 可以得到不同原子之间的相互作用力, 具体表现形式如 (1) 式所示 [21]. 选取污染物吸附到单晶铁表面的稳态构型作为激光烧蚀污染金属的初始模型. 颗粒污染物和十二烷污染物吸附的初始构型和稳态构型分别如图 1 和图 2 所示. 颗粒污染物和十二烷污染物吸附的初始构型皆为球形, 稳态吸附后二者表现不同的形式. 其中, 颗粒污染物吸附后表现为椭球型, 而十二烷污染物则铺展在单晶铁表面.

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}, \quad \sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2, \quad (1)$$

式中 ε_i 和 ε_j 分别表示同类原子 i 和 j 相互作用时的势阱深度, 反应两个原子间相互吸引作用的强弱; ε_{ij} 表示不同类原子 i 和 j 相互作用时的势阱深度; σ_i 和 σ_j 分别表示同类原子 i 和 j 作用势

表 1 模型的 L-J 势函数参数

Table 1. L-J potential function parameters of the model.

Atoms pair	ε/eV	$\sigma/\text{\AA}$
Fe—Fe	0.5260	2.321
C—C	0.0024	3.430
H—H	0.0032	2.928

等于零时原子间的距离; σ_{ij} 表示不同类原子 i 和 j 作用势等于零时原子间的距离.

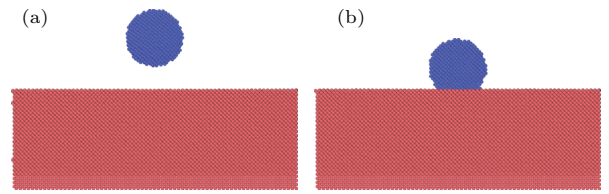


图 1 颗粒污染物在单晶铁表面吸附的初始构型和稳态构型 (a) 初始构型; (b) 稳态构型

Fig. 1. Initial and steady-state configurations of particulate contaminants adsorbed on single crystal iron surface: (a) Initial configuration; (b) steady state configuration.

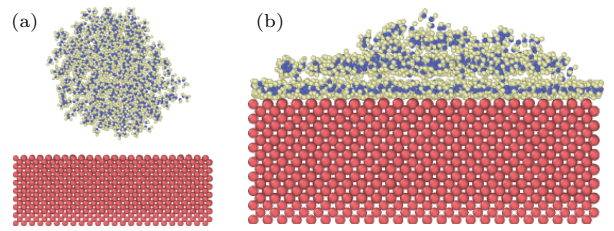


图 2 十二烷污染物在单晶铁表面吸附的初始构型和稳态构型 (a) 初始构型; (b) 稳态构型

Fig. 2. Initial and steady-state configurations of dodecane pollutants adsorption on single crystal iron surface: (a) Initial configuration; (b) steady-state configuration.

分别采用功率密度为 0.0159 和 0.1014 J/cm^2 的激光沿 z 轴负方向辐照表面吸附切屑和十二烷分子的单晶铁, 脉宽为 1 ps . 模型的初始温度满足 300 K 下的高斯分布, 激光加载前系统进行平衡态模拟, 在宏观正则系综 (NVT) 下进行. 当激光辐照后, 整个模拟过程在微正则系综 (NVE) 下进行. 由于激光与金属材料之间的相互作用是十分复杂的能量传递过程, 材料的反射率、吸收率等参数对烧蚀过程具有重要的影响. 激光的波长远大于原子尺度, 其对烧蚀也将产生影响. 为了重点分析给定激光能量密度下激光作用于污染物原子之后对基体的损伤情况, 因此本文采用简化模型进行描述. 模型忽略材料对激光反射率的作用, 简化了激光波长的作用, 认为激光持续作用到污染物材料微观区域上, 激光辐照的能量全部被污染物原子吸收. 污染物原子吸收的能量沿 z 轴负方向呈指数衰减, 吸收能量后的污染物原子将能量传递给单晶铁进行烧蚀. 模拟系统中激光沿 z 轴负方向辐照, 距离激光辐照表面 z 长度处粒子吸收的激光能量可以通过 (2) 式进行计算 [22],

$$I = I_0 e^{-z}, \quad (2)$$

式中 I_0 表示入射激光的初始光强, z 为激光辐照表面的距离. 激光作用表面吸附污染物单晶铁基体的初始模型如图 3 所示. 其中图 3 (a) 为单晶铁表面吸附切屑污染物的初始模型, 图 3 (b) 为单晶铁表面吸附十二烷污染物的初始模型.

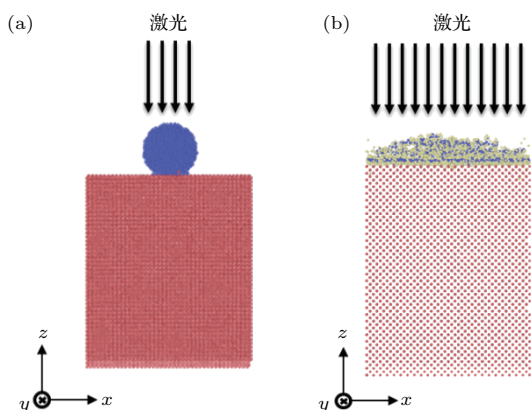


图 3 激光作用表面吸附污染物的单晶铁基体初始模型 (a) 单晶铁表面吸附切屑污染物; (b) 单晶铁表面吸附十二烷污染物

Fig. 3. Initial model of single crystal iron absorbed pollutants by laser irradiation on surface: (a) Adsorption of chip contaminants on surface of single crystal iron; (b) adsorption of dodecane pollutants on single crystal iron.

3 结果与讨论

3.1 烧蚀现象分析

根据污染物的属性不同, 分别研究了激光烧蚀表面吸附有切屑和十二烷分子单晶铁基体的变化过程, 分析了污染物对单晶铁的影响情况. 研究表明: 污染物对激光烧蚀单晶铁具有重要的影响. 当

激光作用在无污染物的单晶铁表面时, 光能首先沉积在金属自由电子中, 随后金属电子吸收的能量开始在内部弛豫, 最后通过电子-声子耦合相互作用将动能或热能传递给晶格. 能量逐渐传递到单晶铁材料的各个部分, 吸收较多能量的材料将被烧蚀.

而当单晶铁表面吸附污染物时, 根据本文简化模型的仿真结果, 认为激光能量全部被污染物吸收. 此时, 激光能量超过污染物的原子间作用力, 破坏了污染物原本的稳态结构. 获得较高能量的污染物原子溅射到单晶铁表面, 并以动能或热能的形式传递能量, 对单晶铁材料进行烧蚀. 当单晶铁表面吸附污染物时, 单晶铁材料发生烧蚀时的激光能量密度明显降低. 由此可以证明污染物的存在将加剧单晶铁材料的损伤.

1) 激光烧蚀表面吸附切屑的单晶铁

采用单晶铁表面吸附切屑污染物的仿真模型, 进行了 5 ps 的平衡态模拟和 295 ps 激光-切屑-单晶铁相互作用过程的模拟. 烧蚀过程中的瞬间原子位图及相应时刻的系统动能如图 4 (a) 所示. 初始时刻切屑吸附在铁材料表面, 铁材料和切屑原子规则排列. 加载激光后切屑原子吸收能量产生相变, 克服金属原子之间的相互作用力以较快的速度向外溅射. 当温度较高的原子运动到铁表面时, 通过热量的传递导致材料烧蚀, 单晶铁表面原子吸收能量脱离基体产生相变, 此时能量传递以热传导为主. 随着时间的推移, 具有较高能量的原子部分远离单晶铁基底表面, 部分被重新吸附到铁材料表面, 单晶铁基体开始趋衡, 能量较高的原子逐渐将能量向下传递, 系统逐渐趋于稳定状态.

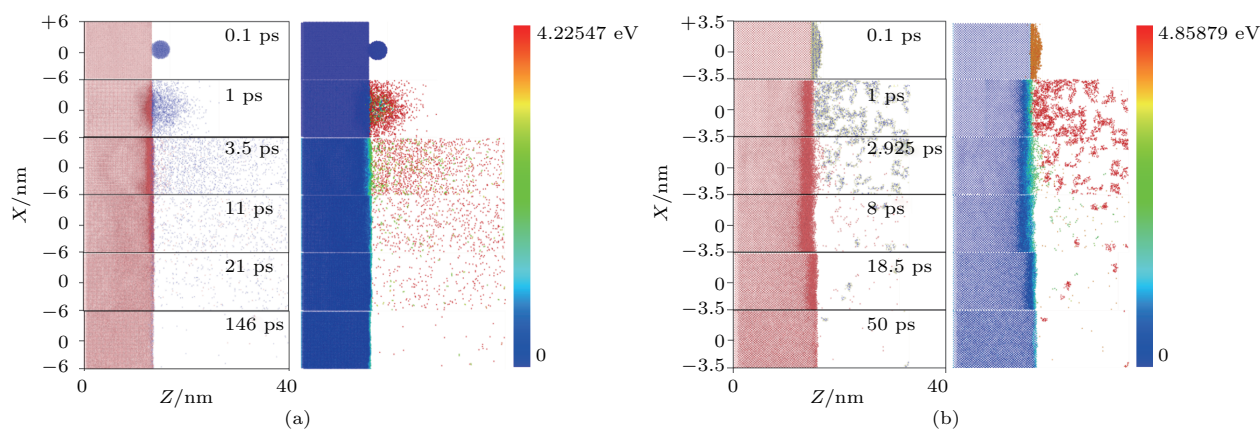


图 4 激光烧蚀过程中的瞬间原子位图和系统动能图 (a) 单晶铁表面吸附切屑; (b) 单晶铁表面吸附十二烷

Fig. 4. Transient atomic position and system kinetic energy during laser ablation: (a) Adsorption of chip on surface of single crystal iron; (b) adsorption of dodecane on single crystal iron.

2) 激光烧蚀表面吸附有机物的单晶铁

利用单晶铁表面吸附十二烷污染物的原始模型,进行了0.5 ps的平衡态模拟和50 ps激光-十二烷分子-单晶铁相互作用过程的模拟.烧蚀过程中的瞬间原子位图及相应时刻的系统动能如图4(b)所示.可以看出,初始时刻有机物分子在单晶铁表面分层排列,加载激光后有机物分子吸收能量超过单晶铁对有机物分子的吸附力,位于表面的有机物分子率先脱离基底表面,位于内部的有机物分子与单晶铁表面原子产生剧烈碰撞而传递能量,最终导致材料的烧蚀.当有机物分子全部脱离单晶铁表面时,单晶铁基底开始趋向平衡状态,能量分布逐渐均匀,恢复规则的晶体结构.

3.2 烧蚀区和熔化区分析

在强激光作用下,污染物吸收能量与单晶铁表面原子剧烈碰撞导致材料表面的烧蚀.根据单晶铁基体原子结构分布情况将其分成烧蚀区、熔化区和晶体区.烧蚀区原子规则的晶体结构被严重破坏,粒子由固态转变为气态.熔化区原子的初始结构破坏程度较低,原子处于熔融态.晶体区原子吸收较少能量动能增大,但仍保持原有的晶体结构.为了进一步分析激光对基底材料造成的损伤影响,采用温度和质量密度作为判断材料被烧蚀和熔化的依据,进一步确定材料的烧蚀深度和熔化深度.

在模拟过程中,将基底原子沿模拟区域 z 轴方向,将基底划分出25个 $12\text{ nm} \times 12\text{ nm} \times 0.286\text{ nm}$ 的区域,其中 12 nm 为模拟材料沿 x 方向和 y 方向的长度, 0.286 nm 为材料的晶格常数.分别考察表面吸附切屑和有机物时基底材料烧蚀过程中各区域的温度和质量密度的变化情况.图5(a)和图5(b)分别表示单晶铁表面吸附切屑和有机物时各区域温度变化情况.

对比图5中材料各区域温度变化情况可以发现,由于材料烧蚀区和熔化区原子受激光影响,吸收激光能量后温度首先上升.激光加载结束后一段时间后,基底材料温度开始趋衡,基底上层温度较高的原子通过碰撞将能量传递给基底下方的原子,基底材料各部分温度逐渐保持一致,烧蚀区和熔化区的温度逐渐下降至稳态温度.材料烧蚀区原子温度急剧升高,达到单晶铁的沸点,所包含的原子被气化,这是由于烧蚀区的原子位于金属材料表面,吸收较多能量.材料熔化区温度升高超过材料的熔点,材料由固态转变为熔融态,由于熔化区原子位

于烧蚀区原子下方,激光能量大部分被烧蚀区原子吸收,因此熔化区原子温度变化幅度较小.由于激光能量被单晶铁上方原子吸收,因此晶体区原子基本不受激光影响.随着基底材料的能量趋衡过程,晶体区温度逐渐上升至平衡温度后保持不变.对比表面吸附不同污染物的各区域温度变化情况可以发现,当表面吸附有机污染物时各区域温度均有突变现象.这是由于单个有机物分子能量较大,当加载激光后有机物分子脱离基底表面随机运动,当有机物分子再次与基底材料表面碰撞时,导致基底材料各区域温度产生较大的变化.

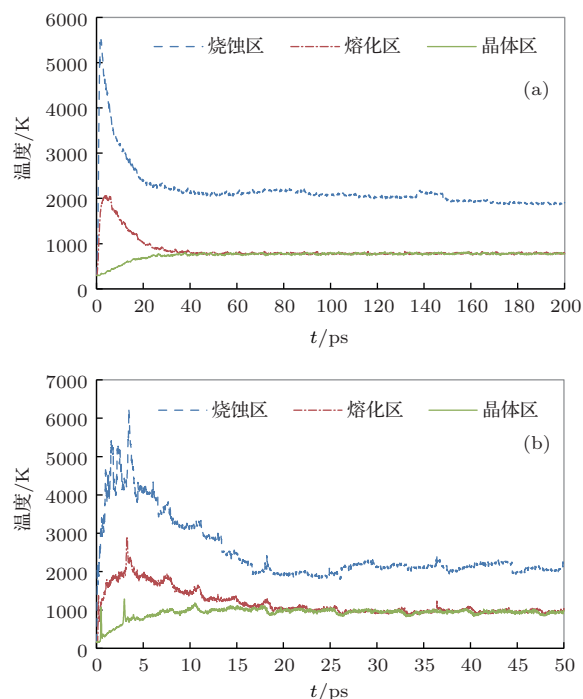


图5 激光烧蚀过程中的各区域温度变化 (a)单晶铁表面吸附切屑;(b)单晶铁表面吸附十二烷
 Fig. 5. Temperature changes in various regions during laser ablation: (a) Adsorption of chip on surface of single crystal iron; (b) adsorption of dodecane on single crystal iron.

质量密度是描述基底材料烧蚀深度和熔化深度的主要依据.当该激光作用区域材料被烧蚀或熔化时,由于材料相态的转变会导致该区域质量密度发生变化.图6所示为不同时刻基底材料各区域的密度分布情况.由图6可知,初始时刻基底材料保持较规则的晶体结构,各区域的密度均为 7930 kg/m^3 ,与铁的宏观密度一致.当加载激光后,基底材料由于温度的改变开始发生相变,各区域的密度随着材料的相变而发生变化.8 ps时刻基底材料表层密度下降较多,加载激光后表面原子气化

对材料内部施加反冲作用, 导致材料内部密度略有上升. 随着时间的推移, 基底材料不断吸收激光能量, 16 ps时刻位于基底上方的区域密度进一步下降. 同一时刻越靠近材料表面材料烧蚀现象越严重, 材料密度越小, 综合各区域的密度变化情况及温度变化情况即可确定材料的烧蚀深度和融化深度. 激光加载结束一段时间后基底材料开始趋向平衡状态, 25 ps时刻位于基底材料上方的区域密度略有增加, 80 ps时刻除材料表层外其他区域密度已基本达到稳定状态, 基底材料各区域密度逐渐趋于一致, 200 ps时刻基底材料各区域密度保持为 7850 kg/m^3 . 系统稳定后基底材料的密度略低于初始时刻的密度, 这是由于基底材料在激光加载结束后整体温度有所提高, 导致密度略有下降.

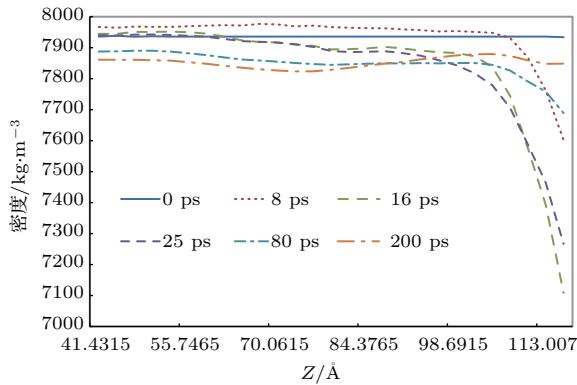


图6 不同时刻基底材料各区域的密度分布情况
Fig. 6. Density variations in regions of substrate material at various times.

为了进一步观察基底材料烧蚀区、融化区和晶体区的密度, 分别记录3个区域密度随时间的变化情况. 激光加载后一段时间内, 由于烧蚀区内的粒子吸收较高能量, 不断有粒子被气化, 因此密度不断下降. 随后部分被气化的原子及切屑原子被重新吸附到单晶铁表面, 烧蚀区的密度开始逐渐升高. 融化区原子初始时刻由于原子相态的转变导致密度下降, 随着温度的下降, 熔融态原子重新恢复规则的晶体结构, 密度恢复至单晶铁的固态密度. 激光加载后单晶铁基体温度整体升高, 因此材料晶体区的密度略有下降, 如图7所示. 对比两种情况可以发现, 当单晶铁表面吸附有机物时, 初始时刻单晶铁各区域的密度均有较明显的升高, 这是由于初始时刻有机物分子在单晶铁表面的分层排列引起的. 由于有机物分子的分层排列, 初始时刻与单晶铁表面紧邻的有机物分子无法突破上方的油层, 与

铁表面原子剧烈碰撞并进一步限制了铁基体表面原子的飞溅, 因此初始时刻后铁基底各区域密度均表现为略有上升.

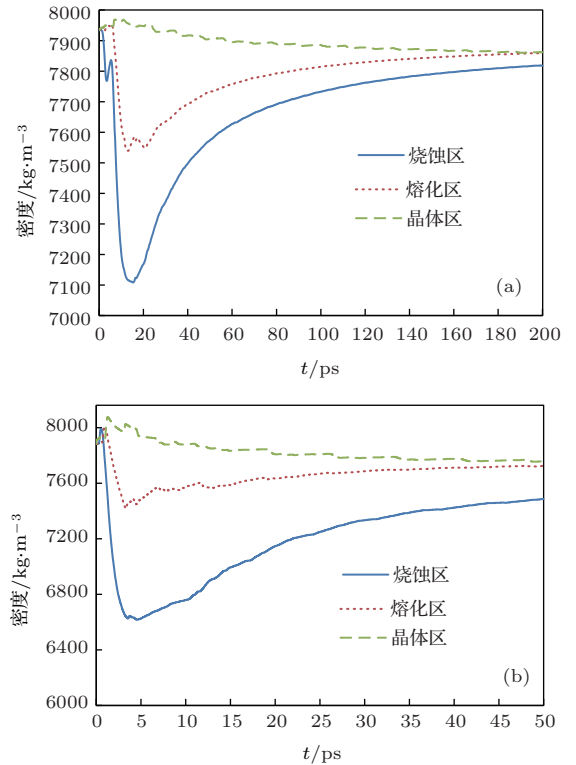


图7 激光烧蚀过程中的单晶铁各区域密度的变化 (a) 单晶铁表面吸附切屑; (b) 单晶铁表面吸附十二烷
Fig. 7. Density variations of single crystal iron during laser ablation: (a) Adsorption of chip on surface of single crystal iron; (b) adsorption of dodecane on single crystal iron.

3.3 能量加载方式对材料烧蚀的影响

能量加载方式对材料烧蚀将产生重要的影响. 分别选取能量密度为 0.0159 和 0.1014 J/cm^2 的激光辐照表面吸附切屑和有机物分子的单晶铁表面, 激光脉宽分别为 1 ps 和 10 ps , 即同样的激光能量分别以 1 ps 和 10 ps 的时间加载到单晶铁表面.

不同加载方式下系统动能的变化情况如图8和图9所示, 可以发现激光能量瞬时加载时对单晶铁材料影响较大, 当激光能量瞬时加载时, 1 ps 时刻基底材料已经有部分材料被烧蚀, 材料热影响区较多. 而此时当激光能量较长时间加载时基底材料基本不受影响, 基底材料热影响区较少. 同样 10 ps 时刻激光能量瞬时加载导致材料热影响区较多, 烧蚀现象较严重. 另一方面当加载激光总能量一致时, 激光加载结束时刻加载时间较长时系统能量分布较均匀.

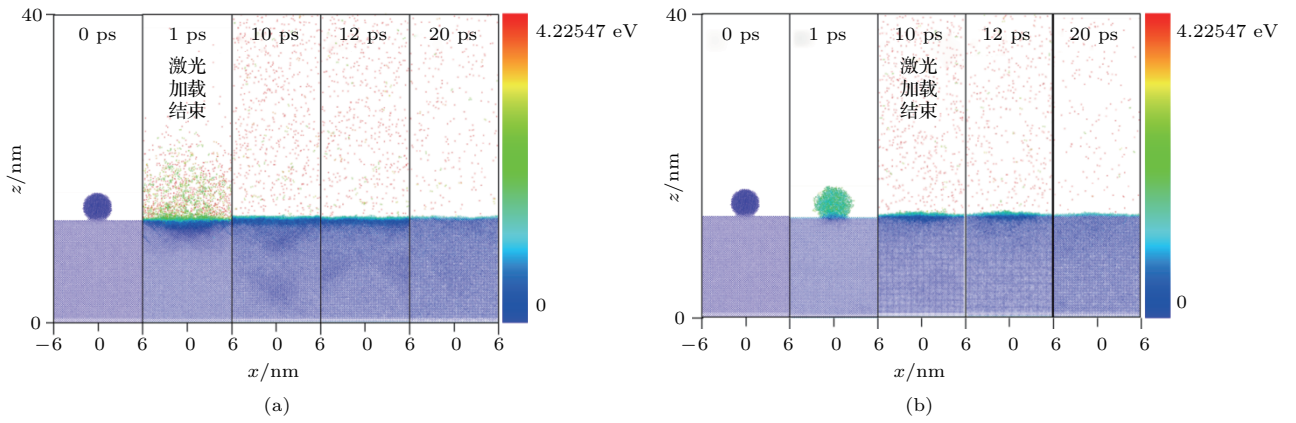


图8 不同加载方式下单晶铁表面吸附切屑的动能图 (a) 瞬时加载; (b) 持续加载

Fig. 8. Kinetic energy diagram of single crystal iron adsorbed iron chips in various loading modes: (a) Instantaneous loading; (b) continuous loading.

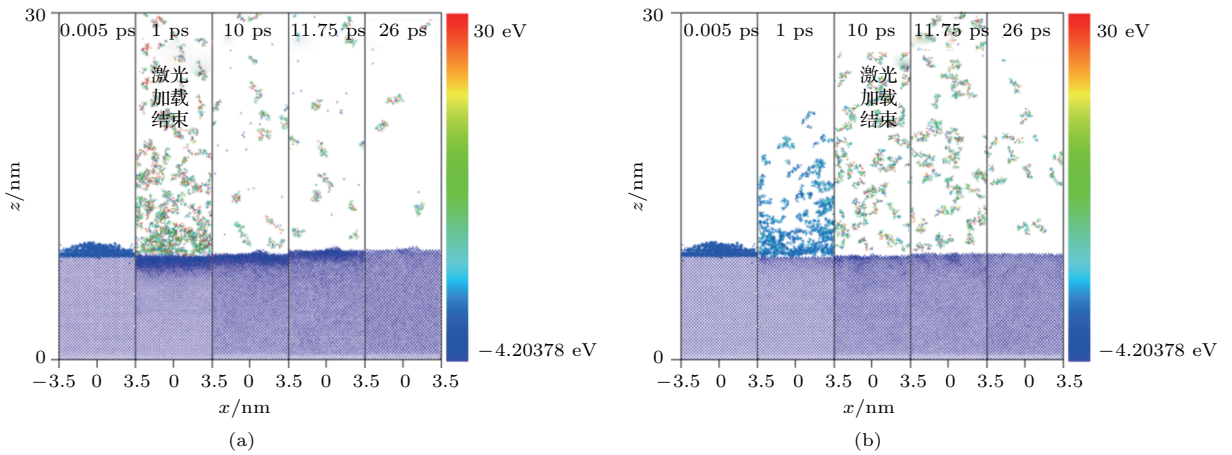


图9 不同加载方式下单晶铁表面吸附十二烷的动能图 (a) 瞬时加载; (b) 持续加载

Fig. 9. Kinetic energy diagram of single crystal iron adsorbed dodecane in various loading modes: (a) Instantaneous loading; (b) continuous loading.

对比单晶铁基体的势能和动能演化曲线可知, 激光脉宽较小时铁材料的势能和动能变化较大, 如图10所示. 由图10可知, 当单晶铁表面吸附切屑时, 激光脉宽较小时单晶铁基体势能的变化量是激光脉宽较大时的1.3倍, 激光脉宽较小时单晶铁基体动能的变化量是激光脉宽较大时的1.4倍. 当单晶铁表面吸附有机物时, 激光脉宽较小时单晶铁基体势能的变化量是激光脉宽较大时的1.6倍, 激光脉宽较小时单晶铁基体动能的变化量是激光脉宽较大时的2倍.

激光脉宽较小的条件下, 材料更容易被烧蚀. 当加载激光能量相同时, 激光能量加载时间较长时基底材料能量演化较缓和. 可以发现激光持续加载时基底材料的动能和势能上升至稳态后基本保持不变, 而激光瞬时加载时基底材料的动能势能上升至稳态后波动较大, 势能和动能之间不断进行转

换. 另一方面, 对比激光不同加载方式下基底材料烧蚀区温度变化情况, 当激光脉宽较小时, 基底材料烧蚀区温度明显升高, 超过金属材料的沸点, 位于烧蚀区域内的原子被气化, 并且系统稳定时的平衡温度也相对较高. 而当激光脉宽较大时, 材料烧蚀区温度上升较少, 低于金属材料的沸点, 原子不会被气化, 此时不会对金属材料产生烧蚀现象.

通过上面的讨论可以发现激光不同能量加载方式对材料烧蚀有显著的影响, 这是由于能量加载方式直接影响热量的传递方式. 在脉冲宽度较小的条件下, 激光能量瞬间释放是一个绝热过程, 更容易导致材料的气化和熔化. 而脉冲宽度较大的激光能量长时间加载时, 其烧蚀机理以热效应为主. 此时, 材料的相变是能量沉积等因素综合作用的结果.

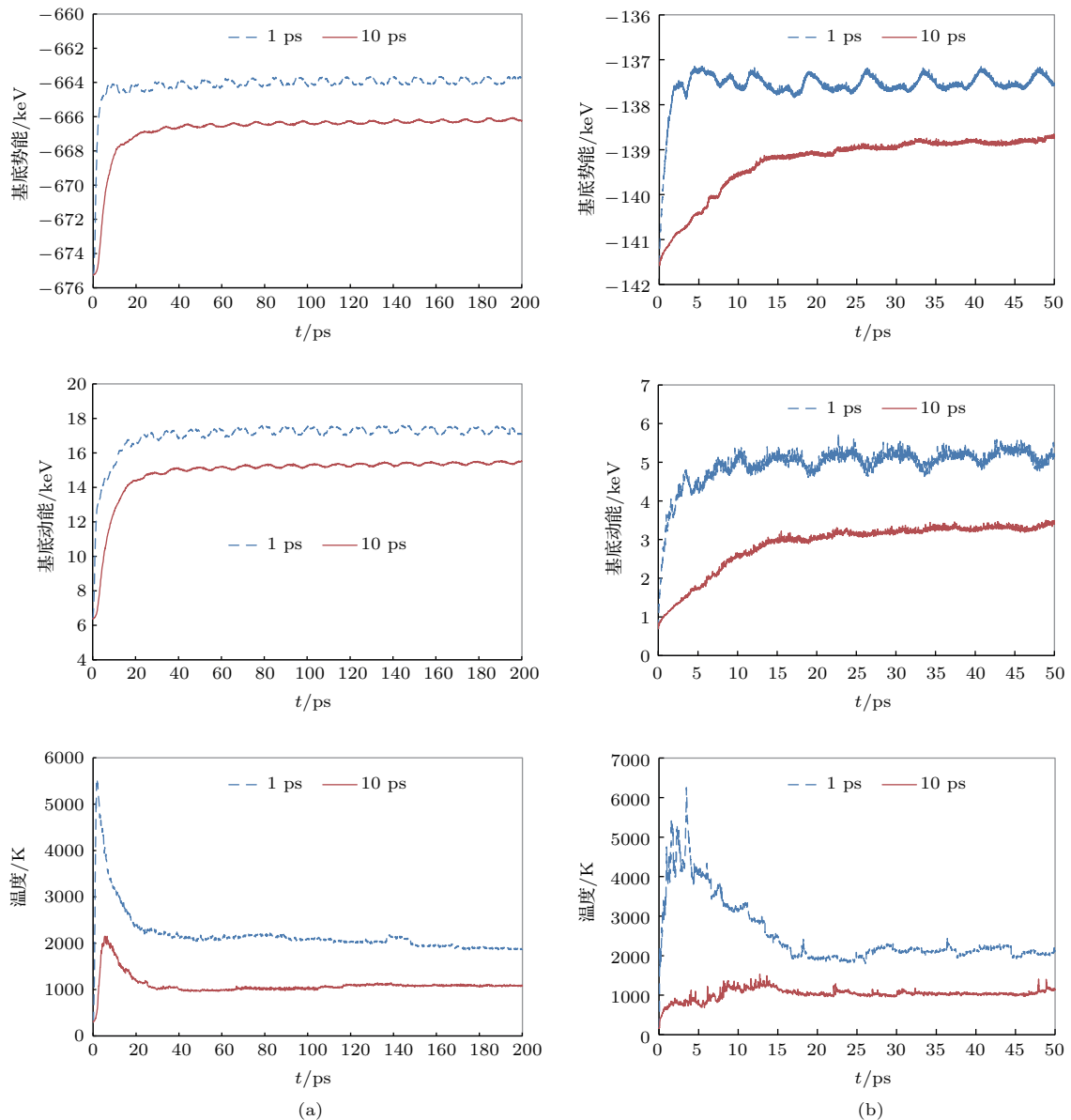


图 10 不同加载方式下表面吸附污染物的单晶铁基体势能、动能和烧蚀区温度演化图 (a) 单晶铁表面吸附切屑; (b) 单晶铁表面吸附十二烷

Fig. 10. Potential energy, kinetic energy and temperature evolution diagrams of ablation area of single crystal iron adsorbed contaminant in various loading modes: (a) Adsorption of chip on surface of single crystal iron; (b) adsorption of twelve alkane on single crystal iron.

3.4 激光能量对材料烧蚀的影响

为了分析激光能量对材料烧蚀的影响, 针对单晶铁表面吸附切屑的体系, 仿真中分别加载 0.0191, 0.0159, 0.0127, 0.0096 J/cm² 和 0.0064 J/cm² 5 种不同的能量. 针对单晶铁表面吸附有机物的体系, 仿真中分别加载 0.1521, 0.1352, 0.1183, 0.1014, 0.0845 J/cm² 和 0.0676 J/cm² 6 种不同的持续能量. 图 11 所示为不同能量作用下几个时刻材料烧蚀形态对比图. 随着激光能量的增大, 同一时刻铁

材料受影响区域逐渐增大. 激光加载结束时刻基底材料均受到不同程度的烧蚀, 激光能量越大材料热影响区越多. 随后加载激光能量较小的系统已经初步达到平衡状态, 此时基底材料各区域基本达到平衡状态. 而加载激光能量较大的系统内基底材料仍有部分热影响区, 且加载激光能量越大的系统内基底材料的热影响区越多. 随着时间的推移, 按照激光加载能量由小到大的顺序系统内基底材料将依次达到平衡状态.

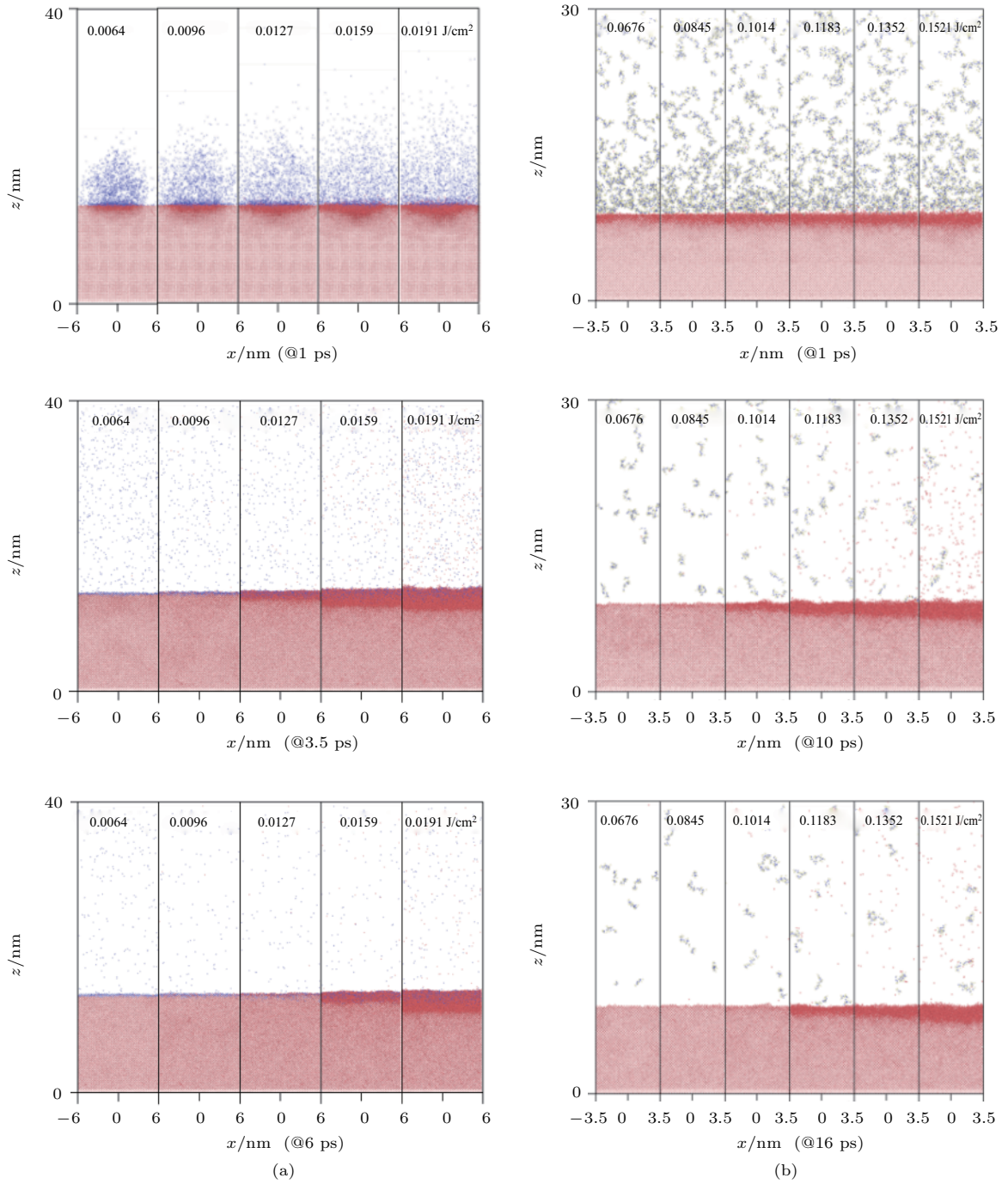


图 11 表面吸附污染物的单晶铁材料在不同能量激光作用下材料烧蚀形态对比 (a) 单晶铁表面吸附切屑; (b) 单晶铁表面吸附十二烷

Fig. 11. Comparison of ablation patterns of single crystal iron adsorbed iron chips (a) and dodecane (b) in various energies of lasers.

为了进一步定量比较不同激光能量作用下铁材料的热影响区域, 根据铁材料各区域的温度及质量密度变化情况确定烧蚀深度和熔化深度. 当铁材料表面吸附切屑时, 材料表面烧蚀深度为0对应的激光能量密度为 0.0064 J/cm^2 . 当铁材料表面吸附有机物时, 材料表面烧蚀深度为0对应的激光能量密度为 0.0676 J/cm^2 . 此时激光对单晶铁材料的影

响可以近似忽略, 对比激光作用下表面没有污染物的单晶铁的烧蚀阈值 0.18 J/cm^2 , 可知当单晶铁表面吸附污染物时, 更容易被激光烧蚀^[23]. 文献^[24]的实验研究结果表明当激光能量在一定范围内时, 可以去除工件表面上的颗粒污染物且不会对工件表面产生影响, 此时激光起到清洗的效果^[24], 与本文模拟结果一致.

4 结 论

采用分子动力学方法模拟了激光与表面吸附污染物的单晶铁的相互作用过程, 采用传统的分子动力学能量耦合方式分析激光作用下铁材料被烧蚀的过程, 在此基础上研究了不同加载方式及不同激光能量密度对铁材料烧蚀的影响情况, 得出以下结论.

1) 铁材料的烧蚀源于污染物与铁原子之间的剧烈碰撞, 激光加载后根据铁材料各区域原子的温度和质量密度变化情况可分为烧蚀区、熔化区和晶体区, 各区的原子分别表现出气态、液态和固态原子的宏观特征.

2) 依据不同脉冲宽度条件下, 单晶铁基体的势能和动能演化规律可知, 激光脉宽较小时铁材料的势能和动能变化较大. 不同能量加载方式直接影响热量的传递方式. 激光脉宽较小时的加载是绝热过程, 更容易导致单晶铁材料的烧蚀, 而激光脉宽较大条件下的长时间加载, 烧蚀则以热效应为主.

3) 随着激光加载能量的增大, 铁材料热影响区域逐渐增大. 单晶铁的烧蚀阈值为 0.18 J/cm^2 , 而当铁材料表面吸附多种污染物时, 激光能量密度高于 0.0064 J/cm^2 时将会对铁材料产生烧蚀, 因此当铁材料表面吸附污染物时更容易被激光烧蚀. 当激光能量密度低于一定值时, 对铁材料表面产生激光清洗的效果.

参考文献

- [1] Hossain M I, Alharbi F H 2013 *Mater. Technol.* **28** 88
- [2] Moses E I 2010 *IEEE T. Plasma Sci.* **38** 684
- [3] Cavailler C 2005 *Plasma Phys. Contr. F.* **47** B389
- [4] Palmier S, Rullier J L, Capoulade J, Natoli J Y 2008 *Appl. Optics* **47** 1164
- [5] Bude J, Miller P, Baxamusa S, Shen N, Laurence T, Steele W, Suratwala T, Wong L, Carr W, Cross D, Monticelli M 2014 *Opt. Express* **22** 5839
- [6] Bai Q S, Guo Y B, Chen J X, Lu L H, Zhang Q C, Zhang F H, Zhao H, Yuan X D, Liang Y C 2016 *Chin. J. Mech. Eng.* **52** 145 (in Chinese) [白清顺, 郭永博, 陈家轩, 卢礼华, 张庆春, 张飞虎, 赵航, 袁晓东, 梁迎春 2016 机械工程学报 **52** 145]
- [7] Spaeth M L, Manes K R, Honig J 2016 *Fusion Sci. Technol.* **69** 250
- [8] Li D M, Sun X Q, Ye Z Y, Zhu Z K 2013 *Vacuum and Cryogenics* **4** 203 (in Chinese) [李丹明, 孙小菁, 叶自煜, 朱忠奎 2013 真空与低温 **4** 203]
- [9] Raman R N, Demos S G, Shen N, Feigenbaum E, Negres R A, Elhadj S, Alexander M, Rubenchik A M, Matthews M J 2016 *Optics Express* **24** 2634
- [10] Bude J, Carr C W, Cross D, et al 2017 *Opt. Express* **25** 11414
- [11] Manenkov A A 2013 *Optical Engineering* **53** 010901
- [12] Xue Q X, Jiang S E, Wang Z B, Wang F, Zhao X Q, Yi A P, Ding Y K, Liu J R 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 045202 (in Chinese) [薛全喜, 江少恩, 王哲斌, 王峰, 赵学庆, 易爱平, 丁永坤, 刘晶儒 2018 物理学报 **67** 045202]
- [13] Suratwala T I, Miller P E, Bude J D, Steele R A, Shen N, Monticelli M V, Feit M D, Laurence T A, Norton M A, Carr C W, Wong L L 2011 *J. Am. Ceram. Soc.* **94** 416
- [14] Bude J, Miller P, Baxamusa S, Shen N, Laurence T, Steele W, Suratwala T, Wong L, Carr W, Cross D, Monticelli M 2014 *Opt. Express* **22** 5839
- [15] Bass I L, Guss G M, Nostrand M J, Wegner P L 2010 *Laser-Induced Damage in Optical Materials, International Society for Optics and Photon (Boulder: SPIE)* p784220
- [16] Bertussi B, Cormont P, Palmier S, Legros P, Rullier J L 2009 *Opt. Express* **17** 11469
- [17] Han W, Feng B, Zheng K X, Zhu Q H, Zheng W G, Gong M L 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 246102 (in Chinese) [韩伟, 冯斌, 郑奎兴, 朱启华, 郑万国, 巩马理 2016 物理学报 **65** 246102]
- [18] Chambonneau M, Chanal M, Reyne S, Duchateau G, Natoli J Y, Lamaignere L 2015 *Appl. Opt.* **54** 1463
- [19] Feigenbaum E, Raman R N, Cross D, Carr C W, Matthews M J 2016 *Opt. Express* **24** 10527
- [20] Rajgarhia R K, Spearot D E, Saxena A 2009 *Comp. Mater. Sci.* **44** 1258
- [21] Alvarez M, Lomba E, Martin C, Lombardero M 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 3680
- [22] Khosroshahia M E, Pour F A, Hadavi M, Mahmoodi M 2010 *Appl. Surf. Sci.* **256** 7421
- [23] Hirayama Y, Atanasov P A, Obara M, Nedialkov N N, Imamova S E 2006 *Jpn. J. Appl. Phys.* **45** 792
- [24] Miao X X, Yuan X D, Lü H B, Cheng X F, Zheng W G, Zhou G R 2015 *Chinese J. of Lasers* **42** 1 (in Chinese) [苗心向, 袁晓东, 吕海兵, 程晓锋, 郑万国, 周国瑞 2015 中国激光 **42** 1]

Laser ablation mechanism of contamination on surface of single crystal iron*

Bai Qing-Shun^{1)†} Zhang Kai¹⁾ Shen Rong-Qi¹⁾ Zhang Fei-Hu¹⁾
Miao Xin-Xiang²⁾ Yuan Xiao-Dong²⁾

1) (School of Mechanical and Electrical Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150000, China)

2) (Research Center of Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 23 May 2018; revised manuscript received 24 August 2018)

Abstract

The laser induced damage in high-power laser system has received much attention in the area of laser engineering. Optical components with contaminants, which are installed in the final optical assembly (FOA), can be severely damaged under the action of extremely high laser energy. So the ultra-high cleanliness inside the high-energy laser system is required for both optical and mechanical components. Research shows that a large part of the metal particulate contaminants inside the device come from the mechanical components. The metal particulate contaminants are produced when mechanical structure surface is damaged under the irradiation of stray light. However the research about the cleanliness inside the device is mostly concentrated on the surfaces of optical components currently. The laser ablation of the mechanical components absorbing contaminants is studied little, so it is quite important to investigate the ablation mechanism of mechanical components under laser irradiation. Due to the presence of contaminants on the surfaces of mechanical components, laser ablation of monocrystalline iron absorbing contaminants is investigated by using molecular dynamics simulation. The ablation process of iron material under laser irradiation is presented. The influences of loading mode and energy density of laser as well as contamination on the surface are analyzed in the ablation process of monocrystalline iron. The results indicate that the surface atoms of monocrystalline iron show different motion states under the violent collision of contaminants atoms after laser loading. Ablated iron can be divided into ablation zone, melting zone and crystal zone according to the variation of the temperature and mass density of the atoms in each region of the ablated material. The atoms in each region show macroscopic characteristics of gaseous, liquid and solid atoms respectively. Iron is damaged more easily when laser energy is instantaneously loaded. Contaminants on the surface of iron can be removed, and iron cannot be damaged when laser energy density is below 0.0064 J/cm^2 . The result of the analysis shows that the presence of contaminants makes the ablation of iron easier. Different energy loading modes affect the heat transfer mode directly. Monocrystalline iron materials are more likely to be damaged in the mode of adiabatic laser ablation in the case of short laser pulse. Thermal effect can be thought as a dominant factor for the ablation in the case of long laser pulse. The research results of this paper are helpful for providing the theoretical basis for improving the cleanliness of high-power laser system.

Keywords: single crystal iron, contaminants, laser ablation, molecular dynamics

PACS: 44.10.+i, 52.38.Mf, 36.40.-c

DOI: [10.7498/aps.67.20180999](https://doi.org/10.7498/aps.67.20180999)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51535003, 51575138).

† Corresponding author. E-mail: qshbai@hit.edu.cn