

纳秒激光作用下金属靶烧蚀-等离子体 演化-辐射的耦合模型*

周颖¹⁾ 吴坚^{1)†} 孙浩¹⁾ 李京徽¹⁾ 李小璇¹⁾ 黄树志¹⁾
何佳瑶¹⁾ 刘星雨¹⁾ 杭玉桦²⁾ 裴翠祥³⁾ 李兴文¹⁾

1) (西安交通大学, 电工材料电气绝缘全国重点实验室, 西安 710049)

2) (苏州热工研究院有限公司, 苏州 215004)

3) (西安交通大学航天航空学院, 西安 710049)

(2025年10月27日收到; 2025年12月1日收到修改稿)

纳秒激光与金属材料相互作用涉及多个复杂物理过程, 构建能够统一描述各阶段的自洽模型是当前研究的重点. 本文以纯铁为研究对象, 建立了一个涵盖激光能量沉积、固液相变、气液界面动理学输运、等离子体膨胀电离、组分扩散、热/黏性输运与光谱辐射的多物理场耦合模型. 采用隐式紧致差分与 Mac-Cormack 显式格式对纯铁烧蚀动力学进行分区数值求解. 计算结果揭示了等离子体屏蔽效应的产生及其对蒸发过程的抑制作用; 明确了早期蒸发产物以声速逃离努森层, 蒸气质量占总烧蚀质量的 81.6%. 研究再现了等离子体羽流从高温高电离态 (Fe^{3+} 主导) 向低温中性原子 (Fe^0 主导) 演化的全过程, 以及光谱从“连续谱强、离子线主导”到“原子线凸显并出现自吸收”的动态转变. 通过与实验测量光谱以及 PrismSPECT、NIST LIBS 程序计算结果的定量对比, 验证了全链条自洽建模在预测等离子体辐射特性方面的必要性, 为激光加工、光谱分析等应用提供了一种可靠的数值模拟工具.

关键词: 多物理场耦合, 激光烧蚀, 等离子体光谱, 辐射输运

DOI: 10.7498/aps.75.20251464

CSTR: 32037.14.aps.75.20251464

1 引言

纳秒激光与金属材料相互作用作为高能密度物理、高精度制造、等离子体光源和材料改性等众多领域的核心物理过程, 一直是国内外研究的方向之一. 自 Maiman 于 1960 年在美国贝尔实验室制造出首台红宝石激光器以来, 激光技术在表面刻蚀、清洗、薄膜沉积、激光诱导击穿光谱 (laser-induced breakdown spectroscopy, LIBS) 及光学诊断等方向得到了广泛应用^[1]. 然而, 这一多物理

场体系具有高度非平衡、强耦合的特征^[2], 涉及激光能量吸收、材料热传导、相变蒸发、等离子体形成与膨胀、粒子电离与复合、辐射输运等多尺度、跨阶段的物理耦合^[3,4]. 这些过程在时间上跨越纳秒至微秒、空间上覆盖纳米至厘米, 其非线性特征和多参数间的复杂耦合使得实验诊断与理论建模均面临巨大挑战^[5,6]. 因此, 构建能够统一描述“激光-固体-蒸气-等离子体-辐射”全链条的数值模型, 是理解激光物质相互作用、指导实验参数优化及实现可控加工的重要理论支撑和研究难题.

过去几十年间国内外已有大量研究在单一

* 国家自然科学基金区域创新发展联合基金项目 (批准号: U24A20154)、能源陕西实验室科技项目 (批准号: ESLB202414) 和陕西省重点研发计划 (批准号: 2024PT-ZCK-48) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jxjawj@mail.xjtu.edu.cn

或部分阶段建模上取得了重要进展^[7-11]. 例如, Anisimov 和 Luk'yanchuk^[12] 提出的经典激光烧蚀理论能够较好地描述固体材料在强激光作用下的能量吸收与蒸发过程; Knight^[13] 建立的努森层模型揭示了气液界面处非平衡运输的基本规律. 此后伴随计算物理的发展, 国内外陆续开发了多种可用于激光-低温等离子体相互作用模拟的通用程序.

在流体建模方面, Fryxell 等^[14] 开发的 FLASH 程序是目前应用最广泛的开源流体力学框架之一, 能够同时处理激光能量沉积、冲击波传播与空间约束等多物理过程. Guthikonda 等^[15] 使用 FLASH 模拟了空间约束下的激光诱导等离子体及其冲击波的演化过程, 结果表明初级冲击波经多重反射、压缩等离子体后使其温度与密度倍增, 这有利于提升 LIBS 信号强度. Pert 等^[16,17] 开发的通量校正二维流体动力学程序 POLLUX, 通过结合 CHART-D 状态方程与 Thomas-Fermi 电子模型, 可实现低激光通量 ($\leq 10 \text{ J/cm}^2$) 下材料烧蚀相变的状态方程拓展, 以及等离子体早期膨胀的时空演化模拟. Hill 和 Wagenaars^[18] 使用 POLLUX 系统研究了 6 种金属的材料参数对激光烧蚀等离子体温度和粒子数密度的影响.

在辐射-流体建模方面, Basko 等^[19] 开发的 RALEF-2D 程序采用任意拉格朗日-欧拉 (ALE) 格式, 能够自洽描述激光驱动下的等离子体动力学演化与辐射特性. Torretti 等^[20] 使用 RALEF-2D 模拟了激光辐照锡液滴产生的等离子体, 证明了 13.5 nm 附近的极紫外辐射主要来自 Sn^{11+} - Sn^{14+} 的多重激发态跃迁而非单电子跃迁. MacFarlane 等^[21-23] 开发的 Prism 系列高能密度物理模块可实现多群辐射运输与流体力学的耦合求解、局部热力学平衡 (LTE)/碰撞辐射 (CR) 模型下的光谱计算. Joshi 等^[24] 基于 PrismSPECT 计算的合成光谱反推激光烧蚀硅等离子体的电子温度和电子数密度, 分析了恒定激光通量下脉冲宽度对等离子体电离的影响规律. 美国国家标准与技术研究院 (NIST) 开发的 NIST LIBS 程序^[25] 可用于计算 LTE 下具有混合组分的低温等离子体线谱. Veis 等^[26] 基于 NIST LIBS 程序模拟光谱, 证明了真空紫外区 ($< 200 \text{ nm}$) 内谱线的引入可以改进 Saha-Boltzmann 方法计算得到的电子温度准确度, 从而提升 LIBS 对 Si, B, C, S 等轻质元素的检测能力.

尽管现有模型和程序在激光烧蚀及等离子体

动力学建模上已经取得显著进展, 但多数研究仍在不同阶段采用独立的物理假设或经验参数, 例如在固/液/气/等离子体多相共存的早期阶段, 材料的相变潜热、蒸发前沿界面输运以及后续羽流电离往往被部分忽略或割裂处理^[27,28]. 流体力学和等离子体动力学模块虽然能够在较大时空尺度上描述等离子体的辐射输运与动力学演化, 但往往忽略激光能量在固体内部的沉积, 仅在固体区采用简化的“吸收层”边界条件^[29,30]; 或大多依赖高温状态方程, 虽然能够较好地处理稀薄高温区域的热力学性质, 但在固体/相变过渡区的适用性明显不足, 难以准确反映局部能量密度变化、潜热释放等微观过程^[31-33]. 此外不同模块间的耦合在实践中多以单向数据传递实现, 这种非自洽求解方式会导致能量守恒与物理连续性难以保持.

近年来, 学界逐步开展了跨阶段“全链条”建模研究. 例如, Haxhimali 等^[34,35] 开发的 ALE3D 程序采用混合有限元/有限体积法与非结构化网格, 集成了固体力学、传热、化学反应、组分扩散以及可压缩/不可压缩流动等多个物理模块, 但尚未包含辐射输运与光谱计算功能. Min 等^[36,37] 发展的多群辐射流体力学程序 RHDLP, 通过引入传热与努森层边界实现了固-等离子体区域耦合, 还开发了光谱后处理模块 RHDLP-SpeIma3D^[38], 用于辐射输运模拟与瞬态/时空积分光谱输出. 然而, 该模型基于忽略扩散、黏性与传热的欧拉方程描述流场, 限制了其对黏性耗散与能量输运过程的表征能力. Gornushkin 等^[9] 的研究表明, 黏性、扩散与热传导等运输机制对等离子体密度分布具有显著且时空分布不均的影响, 忽略这些物理过程可能影响对气氛效应与等离子体演化行为的准确评估.

基于上述研究现状与存在的不足, 本文以纯铁为研究对象, 尝试构建涵盖激光能量沉积、相变蒸发、气液界面输运、等离子体膨胀与电离、组分扩散、热/黏性输运、以及光谱辐射全过程的多物理场耦合计算模型. 为了验证计算结果的可靠性, 将计算光谱与实验测量结果以及 PrismSPECT, NIST LIBS 程序的计算结果进行定量对比, 为理解激光与物质相互作用的物理过程提供完整且可靠的数值模拟平台.

2 计算模型

纳秒激光与固体靶在背景气氛中的相互作用

是一个涉及多物理场耦合的复杂瞬态过程. 本文以铁靶为例, 建立了一个从激光烧蚀沉积到光谱辐射的完整计算模型及数值求解框架. 该模型依次描述了激光烧蚀靶材、气液界面动理学运输、等离子体膨胀与电离、组分扩散与热/黏性运输, 以及最终的光谱辐射.

2.1 考虑固液相变下的纳秒激光烧蚀模型

在纳秒激光烧蚀过程中, 激光入射引起的温度变化及其对材料的相变和烧蚀效应至关重要. 为了准确模拟这一过程, 本文采用的激光烧蚀模型需要综合考虑固液相变、热传导以及蒸发过程. 需要指出的是, 本模型主要针对单脉冲或低重复频率的情况 (通常指脉冲间隔远大于材料热弛豫时间, 例如百微米光斑尺寸下纯铁的热弛豫时间约为 440 μs). 在此条件下, 脉冲间的热累积效应可忽略, 每个脉冲的作用可视为独立.

首先为避免数值计算的不稳定性, 固液相变区域的温度场需要平滑过渡. 本文采用一个高斯分布算子来进行处理^[39]:

$$\delta(T - T_m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} \exp\left[-\frac{(T - T_m)^2}{2\Delta^2}\right], \quad (1)$$

其中, $\delta(T - T_m)$ 表示固液相变区域内温度随时间的变化, T_m 是材料的熔点, Δ 控制固液相变区的宽度、用于确定区域温度上限 (T_{mH}) 和下限 (T_{mL}).

由此固相 ($T < T_{mL}$)、液相 ($T > T_{mH}$) 和固液共存区域 ($T_{mL} < T < T_{mH}$) 内的热量传递过程可被该算子从温度的分布域上划分成 3 个区间. 结合不同区域内的物性参数, 具体的传热方程被展开为

$$\begin{cases} \rho_i c_i \left(\frac{\partial T}{\partial t} - u \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \lambda_i \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + (1 - R)\alpha I(t)e^{-\alpha x}, \\ T_{mH} < T \ (i = s); \ T < T_{mL} \ (i = l), \\ \rho_s [c_s + \Delta H_m \delta(T - T_m)] \left(\frac{\partial T}{\partial t} - u \frac{\partial T}{\partial x} \right) \\ = \lambda_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + (1 - R)\alpha I(t)e^{-\alpha x}, \ T_{mL} < T < T_{mH}, \end{cases} \quad (2)$$

其中, ρ_i , c_i 和 λ_i 分别为固态和液态质量密度、比热容和热导率; x 为空间坐标; α 为光学吸收系数; $I(t)$ 为随时间变化的入射激光辐照度; R 为材料表面对入射光的反射率; ΔH_m 为熔化潜热; u 为材料表面蒸发速率, 可通过 Clausius-Clapeyron 关系

与 Hertz-Knudsen 模型, 由材料表面饱和蒸气压 P_s 和表面温度 T_s 联合确定.

在材料表面, 激光入射能量通过热流传递进而影响材料的表面温度和蒸发速率. 在 $x = 0$ 处, 与蒸发效应耦合的热流边界条件被描述为

$$\begin{aligned} & u (\rho \Delta H_e + \rho U + \rho v^2/2 + P) - \lambda_s \frac{\partial T}{\partial x} \\ & = (1 - R) I(t) e^{-\alpha x}, \ x = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, 等号左侧依次独立描述了蒸发过程中潜热 ($u \rho \Delta H_e$)、蒸气膨胀储存的内能 (ρU)、宏观动能 ($\rho v^2/2$)、膨胀压力做功 (P) 以及传导热量 ($\lambda_s \partial T / \partial x$) 的变化, 右侧则表示激光辐照度在材料表面的沉积.

此后随着材料表面温度不断升高, 蒸发效应逐渐成为主导, 进而影响气液界面的速度分布和质量运输.

2.2 气液界面的速度分布和质量运输

为了模拟气液界面的动态行为, 本文引入努森层作为界面处动理学不连续面. 在该区域内, 蒸气粒子的速度分布最初遵循半麦克斯韦分布, 此后随着粒子间碰撞的增加, 逐渐趋向平衡的麦克斯韦分布, 最终在努森层外恢复为平衡的麦克斯韦分布.

在此定义下, 层内粒子速度分布函数 $f(x, \mathbf{v})$ 可表述为两侧速度分布函数的加权和^[40]:

$$f(x, \mathbf{v}) = \alpha(x) f_1(\mathbf{v}) + [1 - \alpha(x)] f_2(\mathbf{v}), \quad (4)$$

其中, $a(x)$ 为空间过渡权重函数, 满足 $a(0) = 1$, $a(\infty) = 0$. $f_1(\mathbf{v})$ 表示液面附近刚释放粒子的速度分布函数, $f_2(\mathbf{v})$ 表示蒸气侧平衡态的麦克斯韦速度分布:

$$f_1(\mathbf{v}) = \begin{cases} n_s \left(\frac{m}{2\pi k T_s} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m v_s^2}{2k_B T_s}\right), & v_k > 0, \\ \beta f_2(\mathbf{v}), & v_k < 0, \end{cases} \quad (5)$$

其中, $f_1(\mathbf{v})$ 的正半支为液面温度 T_s 的半麦克斯韦分布, 负半支通过调节回流粒子通量的系数 β 保证界面两侧动量守恒. k_B 为玻尔兹曼常数; T_k 为蒸气温度; n_s 和 n_k 分别为液面附近及蒸气粒子数密度; v_k 为蒸气平均速度.

将以上速度分布代入层两侧的质量、动量和能量守恒关系, 可以得到气液界面两侧的温度比、密

度比和回流系数:

$$\begin{cases} \frac{T_k}{T_s} = \left(\sqrt{1 + \pi \left(\frac{\gamma_k - 1}{\gamma_k + 1} \frac{m}{2} \right)^2} - \sqrt{\pi} \frac{\gamma_k - 1}{\gamma_k + 1} \frac{m}{2} \right)^2, \\ \frac{\rho_k}{\rho_s} = \sqrt{\frac{T_s}{T_k}} \left[\left(m^2 + \frac{1}{2} \right) e^{m^2} \operatorname{erfc}(m) - \frac{m}{\sqrt{\pi}} \right] \\ + \frac{1}{2} \frac{T_s}{T_k} \left[1 - \sqrt{\pi} m e^{m^2} \operatorname{erfc}(m) \right], \\ \beta = \left[(2m^2 + 1) - m \sqrt{\frac{\pi T_s}{T_k}} \right] e^{m^2} \frac{\rho_s}{\rho_k} \sqrt{\frac{T_s}{T_k}}, \end{cases} \quad (6)$$

其中, ρ_s 和 ρ_k 分别为液面和蒸气密度, γ_k 为蒸气的比热容比; 无量纲马赫数 $m = \frac{u_k}{\sqrt{2R_s T_k}}$, R_s 为气体常数; 互补误差函数 $\operatorname{erfc}(m) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_m^\infty \exp(-v^2) dv$.

根据 (6) 式可知界面两侧物理量由自由变量——层外出口无量纲马赫数 m 决定. 当层外蒸气以亚声速逃逸时, 描述理想气体激波关系的 Rankine-Hugoniot 守恒被引入用于给出定解条件:

$$\begin{aligned} \frac{P_2}{P_1} = 1 + \gamma_1 M_2 \frac{a_2}{a_1} \left[\frac{1 + \gamma_1}{4} M_2 \frac{a_2}{a_1} \right. \\ \left. + \sqrt{1 + \left(\frac{1 + \gamma_1}{4} M_2 \frac{a_2}{a_1} \right)^2} \right], \end{aligned} \quad (7)$$

其中, P_1 和 P_2 分别为激波前 (静止气氛一侧)、后 (蒸气侧) 压强; γ_1 为气氛介质的比热比; M_2 为努森层出口马赫数; a_1 和 a_2 分别为气氛和蒸气侧声速.

另一方面, 当层外蒸气回流至液相表面, 形成冷凝反向流时, 努森层两侧的质量通量通过额外的动理学平衡来补充:

$$n_k u_k = \frac{P_s - P_k}{(2\pi m_v k_B T_s)^{1/2}}, \quad (8)$$

其中, n_k 为层外蒸气数密度, P_s 和 P_k 分别为液面和蒸气压强; m_v 为单个蒸气分子质量.

联立上述方程可以统一求得蒸气侧压强、温度、速度和质量密度的初始分布, 从而实现从烧蚀区域向蒸气侧流场分布的过渡求解.

2.3 等离子体膨胀和电离分布

在进行蒸气侧流场计算时, 产生的蒸气经由逆韧致辐射和光电离效应迅速吸收激光能量, 形成由电子、离子和中性粒子共存的等离子体. 为了描述

这一过程, 考虑激光吸收、组分扩散、自生压力梯度驱动、辐射损失和热损失的黏性流动方程组被引入:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho v}{\partial x}, \\ \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\frac{\partial \rho_i v}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho D_i \frac{\partial w_i}{\partial x}), \quad i=1, 2, \dots, k, \\ \frac{\partial (\rho v)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (\rho v^2 + P - \tau_{xx}), \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] \\ = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\rho \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right) v + P v + q - \tau_{xx} v \right] \\ + (\alpha_{IB} + \alpha_{PI}) I - \varepsilon_{rad}, \end{cases} \quad (9)$$

其中, ρ 为总密度; ρ_i , D_i 和 w_i 分别为第 i 组分的密度、扩散系数和质量分数; v 为流速; P 为压强; τ_{xx} 为剪切应力; U 为单位质量内能; q 为热导通量; α_{IB} 和 α_{PI} 分别表示逆韧致辐射吸收系数和光电离吸收系数, 其计算方法可参考文献 [41]; ε_{rad} 为辐射能量损失, 在这里以韧致辐射的能量损失为代表进行计算. 此外理想气体状态方程被用于将粒子质量、温度与压力联系起来.

在电离过程的建模中, 本文采用基于局部热力学平衡的框架描述. 该假设在等离子体演化主体阶段及近场区域成立, 适用于峰值辐照度在 10^8 — 10^{10} W/cm² 量级的纳秒脉冲烧蚀场景. 其中各电离态粒子数密度通过萨哈方程计算, 结合电荷守恒和质量守恒封闭方程组:

$$\begin{aligned} \frac{x_{i+1} n_e}{x_i} &= 2 \left[\frac{m_e c^2 k_B T}{2\pi (\hbar c)^2} \right]^{3/2} \frac{Z_{i+1}(T)}{Z_i(T)} \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \\ &= F_{i+1}(T), \quad i=0, 1, \dots, (Z-1), \end{aligned} \quad (10)$$

其中, x_i 为第 i 级离子的质量分数, n_e 为电子数密度, m_e 为电子质量, c 为光速, \hbar 为约化普朗克常数, E_i 为第 i 级电离能.

2.4 空气气氛下扩散系数和热/黏性输运系数的计算模型

考虑到实际激光加工、测量和诊断等领域常常使用常温常压空气作为背景气体, 为简化计算, 空气被简化为 78% N₂ 和 22% O₂ 的混合气体. 接下来本节依次介绍空气气氛的扩散系数和输运系数

的计算模型.

首先扩散系数决定了物质如何在流场中扩散, 影响金属蒸发物与背景气体的混合均匀性和能量传递速率. 当气氛中存在 3 种及以上组分时, 基于 Maxwell-Stefan 理论, Wilke 引入有效扩散系数以描述某一组分相对于整体混合物的迁移速率, 给出的多组分扩散系数为^[42]

$$D_v = \frac{1 - x_v}{\sum_{v \neq p} \frac{x_p}{D_{vp}}},$$

$$D_{vp} = \frac{2}{3} \left(\frac{k_B T}{\pi} \right)^{3/2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_v} + \frac{1}{m_p} \right) \right]^{1/2} \times \frac{4}{P(d_v + d_p)^2}, \quad (11)$$

其中, x_v , x_p 分别为组分 v , p 的摩尔分数; m_v , m_p 为分子质量; d_v , d_p 为有效分子半径; P 为体系总压强; D_{vp} 为组分 v 相对于其他每一组分的二元扩散系数, 可通过 Fick 定律确定.

此外输运系数 (黏性系数和热导率) 也对流场结构和能量传递效率产生重要影响. 对于单原子气体 (如蒸发金属原子), Chapman-Enskog 理论中硬球模型被用于近似描述分子间的碰撞行为, 其表达式为

$$\mu = \frac{\sqrt{mk_B T}}{d^2 \pi^{3/2}}, \quad \lambda = \frac{25}{32} \frac{\sqrt{\pi mk_B T}}{\pi d^2} \frac{k_B}{(\gamma - 1)m}. \quad (12)$$

对于双原子气体 (如空气中的 N_2 , O_2), 则需要引入 Lennard-Jones 势来描述分子间的长程吸引力和短程排斥势, 以修正输运系数的计算:

$$\mu = \frac{5}{16\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{mk_B T}}{\sigma^2 \Omega(T)}, \quad \lambda = \left(\hat{c}_p + \frac{5}{4} \frac{R}{M} \right) \mu, \quad (13)$$

其中, σ 为分子间有效碰撞直径, $\Omega(T)$ 为碰撞积分.

对于多组分混合物, 无量纲耦合因子 $\phi_{\alpha\beta}$ 被用于修正不同组分间分子质量与黏性比值的影响, 得到的等效黏性系数与热导率可表示为

$$\mu_{\text{mix}} = \frac{\sum_{\alpha=1}^N \frac{x_{\alpha} \mu_{\alpha}}{\sum_{\beta} x_{\beta} \phi_{\alpha\beta}}}{\sum_{\alpha=1}^N \frac{x_{\alpha} \lambda_{\alpha}}{\sum_{\beta} x_{\beta} \phi_{\alpha\beta}}},$$

$$\phi_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_{\alpha}}{M_{\beta}} \right)^{-1/2} \times \left[1 + \left(\frac{\mu_{\alpha}}{\mu_{\beta}} \right)^{1/2} \left(\frac{M_{\beta}}{M_{\alpha}} \right)^{1/4} \right]^2, \quad (14)$$

其中, x_{α} , x_{β} 为各组分摩尔分数, μ_{α} , λ_{α} 为单一组分黏性系数与热导率, M_{α} , M_{β} 分别为各组分摩尔质量.

2.5 基于辐射输运模型的光谱计算

在完成等离子体膨胀与电离分布的求解后, 等离子体相对低的温度 (10^3 — 10^5 K) 使得辐射能量损失相较于粒子的动能和热能较小, 因此辐射可视作流场计算的后处理过程. 在此过程中, 光谱强度 I 的分布是通过求解辐射输运方程来获得:

$$\frac{\partial I(z; \nu)}{\partial \tau} = -I(z; \nu) + S(z; \nu), \quad (15)$$

其中, τ 为光学厚度, $S(z, \nu)$ 为源函数 (在 LTE 下, 源函数为普朗克黑体函数).

对 (15) 式积分可以得到光谱强度沿着空间输运的递推格式:

$$I_{\nu_i} = I_{\nu_{i-1}} e^{-\kappa dz} + I_{\nu_i}^B (1 - e^{-\kappa dz}), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (16)$$

其中, I_{ν_i} 为第 i 网格边界处的辐射强度; κ 为该频率对应的总吸收系数; dz 为空间网格尺寸; $I_{\nu_i}^B$ 为由该网格温度决定的黑体辐射源项.

根据 Kirchhoff 定律线谱吸收系数 κ_{bb} 定义为

$$\kappa_{\text{bb}}(\nu) = \frac{\pi e^2 f}{m_e c} g_{\text{low}} n_i \frac{e^{-E_{\text{low}}/k_B T}}{Z_i(T)} \times \left(1 - e^{-h\nu/k_B T} \right) P(\nu; \Gamma; \sigma), \quad (17)$$

其中, f 为振子强度; g_{low} 为下能级简并度; n_i 为离子数密度; E_{low} 为下能级能量; $Z_i(T)$ 为配分函数; $P(\nu)$ 为线谱的 Voigt 线型函数, 是谱线中心的洛伦兹型展宽函数 ($L(\nu; \Gamma)$, Stark 展宽) 和谱线远翼的高斯型展宽函数 ($G(\nu; \sigma)$, 实验仪器展宽) 的卷积:

$$P(\nu; \Gamma; \sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' L(\nu; \Gamma) G(\nu - \nu'; \sigma). \quad (18)$$

连续谱辐射由自由-自由的韧致辐射 (长波段、红外区主导) 与自由-束缚的辐射复合 (短波段、紫外区主导) 两部分贡献, 分别描述了电子与背景离子库仑场的相互作用和自由电子被离子捕获形成束缚态, 并在上述过程中发射光子的过程. 基于 Kramers 理论, 其表达式分别为^[43]

$$\kappa_{\text{ff}}(\nu) = \frac{32\pi^3}{3\sqrt{3}} \frac{e^6 (\hbar c)^2}{m_e c^2} \frac{1}{(2\pi m_e c^2 k_B T)^{1/2}} \times \bar{Z}^2 n_e n_i \frac{1}{(\hbar\nu)^3} g_{\text{ib}}(\nu) \left(e^{h\nu/k_B T} - 1 \right), \quad (19)$$

其中, \bar{z} 为平均电荷数; $g_{\text{ib}}(\nu)$ 为 Gaunt 因子, 用于修正经典推导的量子效应:

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{fb}}(\nu) = & \frac{32\pi^3 e^6 (\hbar c)^2}{3\sqrt{3} m_e c^2} \frac{1}{(2\pi m_e c^2 k_B T)^{1/2}} \\ & \times \bar{Z}^2 n_e n_i \frac{1}{(\hbar\nu)^3} \xi_z(\nu) \\ & \times e^{h\nu/k_B T} \left(1 - e^{-h\nu/k_B T}\right)^2, \end{aligned} \quad (20)$$

其中, $\xi_z(\nu)$ 为修正原子电子结构影响的因子, 在本文涉及的温度和光子频率计算域内取 1; 其他符号的含义与 (19) 式相同.

2.6 计算域和数值计算框架

本文选择的计算对象为纯铁, 涉及的物性参数列于表 1, 这些物性参数为烧蚀蒸发、电离辐射的计算提供了必要的基础. 其中电离部分计算了纯铁的前三级电离, 不考虑背景气体的击穿. 这是由于在大多数激光加工、测量或诊断应用中, 通常不希望背景气体发生电离击穿. 这会导致一部分激光能量被背景气体吸收并转化为热能, 从而减少有效入射到靶材的激光能量, 造成激光的能量损失.

表 1 纯铁物性参数

Table 1. Physical properties of pure iron used for calculations.

物性参数	符号/单位	数值
固相(液相)密度	$\rho_i/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	7874(6980)
固相(液相)比热容	$c_i/(\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	449(507)
固相(液相)热导率	$\lambda_i/(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	80.2(34.5)
熔化焓	$\Delta H_m/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	14
蒸发焓	$\Delta H_e/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	350
熔点	T_m/K	1808
沸点	T_b/K	3023
固液共存区间宽度	Δ/K	30
反射率(@1064 nm)	R	0.6602
光学吸收系数 (@1064 nm)	$\alpha/(10^7 \text{ m}^{-1})$	5.1043
原子直径	d_{Fe}/pm	252
一/二/三级电离能	$E_i/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	762.5/1562/2957

在激光参数的设置上, 本文选择峰值辐照度为 $0.2 \text{ GW}/\text{cm}^2$, 脉宽为 10 ns 的高斯脉冲激光, 假设其在 $t = 0$ 时刻入射. 在辐射计算方面, 覆盖了 180—830 nm 范围内的中紫外与可见光线谱和连续谱, 其中线谱选择 NIST 原子光谱数据库中 180—830 nm、准确度在 B 级及以上、相对强度靠前的前 170 条 Fe I 线和 96 条 Fe II 线进行计算. 具体的谱线列表及其原子跃迁特性在本文的补充

材料 (online) 中被逐一列出.

在数值计算框架的设计方面, 靶材区域与气氛区域采用了不同的时空推进格式. 这是由于靶材区域涉及激光与固体材料相互作用后的热传导、物质扩散及相变, 该区域需要处理的是非定常的对流扩散方程. 在这种情况下, 由于物质的传递是较为平稳的、并且计算精度要求较高, 因此选择 3 层全隐式紧致差分格式 [44], 这一格式在时间方向上具有二阶精度, 在空间方向上具有四阶精度, 并且具有无条件稳定性, 可以准确捕捉热传递、物质扩散过程中的细节变化, 并且避免数值不稳定问题.

与靶材区域不同, 气氛区域涉及强非线性输运、黏性扩散以及辐射损耗的耦合作用, 并且包含激波及大流动梯度的计算, 因此需要采用更稳健保守的数值格式. 本文选择了 Mac-Cormack 显式预测-校正格式, 在每一时间步长内, 待求解的通量变量 U 的时间导数平均值等于预测值和校正值的算术平均:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{\text{av}} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_i^t + \left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t}\right)_i^{t+\Delta t} \right]. \quad (21)$$

该方法具有较低的数值耗散, 适用于求解同时包含抛物型与椭圆型项的非定常 Navier-Stokes 方程组, 同时具有二阶时间精度与空间精度.

为进一步保证计算稳定性, 额外的四阶人工黏性校正项 $\bar{S}_i^{t+\Delta t}$ 被引入以实现激波和流动梯度过大区域的自动平滑:

$$\begin{aligned} U_i^{t+\Delta t} = & U_i^t + \left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{\text{av}} \Delta t + \bar{S}_i^{t+\Delta t}, \quad (22) \\ \bar{S}_i^{t+\Delta t} = & \frac{C_x \left| \bar{P}_{i+1}^{t+\Delta t} - 2\bar{P}_i^{t+\Delta t} + \bar{P}_{i-1}^{t+\Delta t} \right|}{\bar{P}_{i+1}^{t+\Delta t} + 2\bar{P}_i^{t+\Delta t} + \bar{P}_{i-1}^{t+\Delta t}} \\ & \times \left(\bar{U}_{i+1}^{t+\Delta t} - 2\bar{U}_i^{t+\Delta t} + \bar{U}_{i-1}^{t+\Delta t} \right), \quad (23) \end{aligned}$$

其中, C_x 为无量纲系数, 用于调节人工黏性的强度, 其取值基于平衡激波结构与计算稳定性的原则. 通过参数敏感性分析, 本文选定 $C_x = 0.2$.

在计算域和时空设置方面, 本文也采用了不同的网格划分策略. 在空间网格划分上, 靶材区域总长为 $37.5 \mu\text{m}$, 单位网格尺寸为 25 nm . 气氛区域总长为 1.5 cm , 单位网格尺寸为 $10 \mu\text{m}$. 在计算时间上, 设定总时长为 $1 \mu\text{s}$, 时间步长为 0.1 ns . 这样的设置在满足显式时间推进格式的 CFL 稳定性判据的同时, 保证了对激光烧蚀过程中迅速发生的热和流动效应的准确捕捉.

3 结果与讨论

3.1 激光能量沉积和烧蚀过程

图 1(a) 所示为激光脉冲作用下材料表面激光辐照度随时间的演化过程. 黑色曲线表示初始入射激光辐照度 I_{input} , 蓝色曲线表示实际到达材料表面的激光辐照度 I_{target} . 从图 1(a) 可以看出, 初期 I_{input} 与 I_{target} 几乎重合, 这表明在激光入射早期, 由于等离子体尚处于“生长阶段”, 等离子体屏蔽效应并不显著. 此时几乎所有的激光能量都能有效到达材料表面. 然而, 随着时间的推移, I_{target} 出现了明显的下降, 特别是在 ~ 15 ns 后, I_{target} 显著低于 I_{input} , 这主要是由于等离子体逐渐形成, 等离子体层对入射激光的屏蔽作用增强, 导致材料表面接收到的激光能量减少. 图 1(b) 给出了空气气氛下材料内部温度随着时间和空间的演化. 可以看出激光辐照后材料表面附近的温度急剧升高、并逐步向内扩展. 在 8 ns 左右开始出现比较明显的固液分界 (l-s interface), 在 ~ 15 ns 等离子体屏蔽效应显著的前一刻, 内部最高温度接近 6700 K. 随着时间的

推进蒸发效应逐渐主导, 气液界面 (g-l interface) 也向材料内部逐渐移动.

3.2 气液界面输运过程

在明确了烧蚀阶段能量沉积与温度响应后, 本节针对气液界面这一过渡区域, 通过研究过渡区蒸发粒子的动力学参数来进一步分析气液界面输运特性的瞬态演化规律.

首先图 2(a) 展示了前 40 ns 内液相烧蚀速率 u_s 的演化过程. 在激光脉冲起始阶段 (约 0—13 ns), u_s 随入射激光能量的积累而迅速攀升, 这对应于表面温度升高、蒸发加剧的过程. 然而, 在约 15 ns 附近, u_s 曲线出现了一个明显的“缺口”, 此时间点与图 1(a) 中表征等离子体屏蔽效应开始显著的時刻精确对应. 由于等离子体对激光能量的吸收, 实际到达靶面的能量 I_{target} 骤降, 导致用于维持蒸发的能量供应减少, 从而引起 u_s 的突然下降. 此后, 随着激光脉冲能量的衰减与等离子体的持续生长, u_s 逐渐下降, 并在约 18 ns 时归零, 此时 I_{target} 已降至零, 蒸发过程几乎终止. 表面饱和蒸气压 P_s 的演化如图 2(b) 所示, 其趋势与 u_s 高度

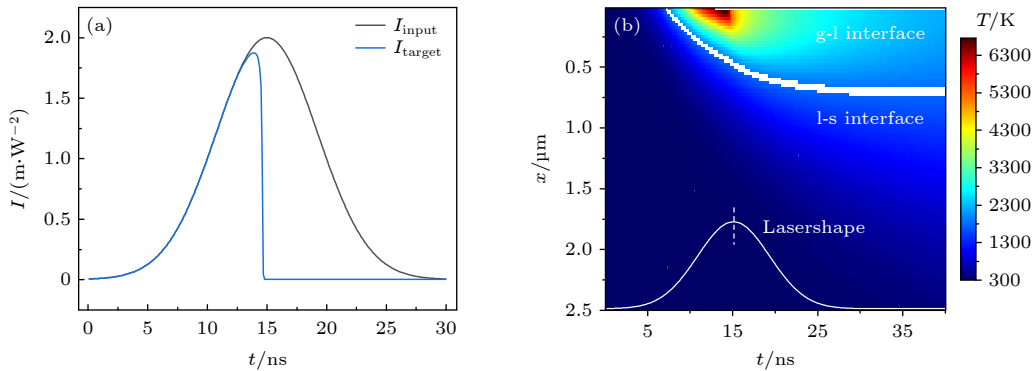


图 1 (a) 材料表面激光辐照度随时间的变化; (b) 材料内部温度的时空演化

Fig. 1. (a) Temporal evolution of laser irradiance on the material surface; (b) temporal-spatial evolution of temperature inside the material.

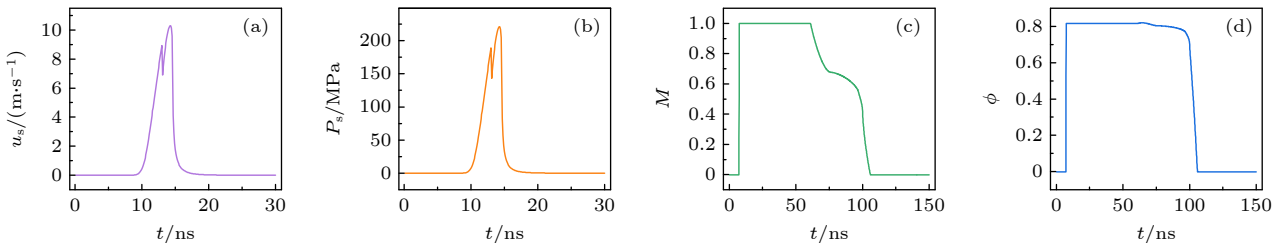


图 2 激光作用下气液界面输运特性的演化 (a) 液相烧蚀速率 u_s ; (b) 表面饱和蒸气压 P_s ; (c) 努森层外侧蒸气的马赫数 Ma ; (d) 跨努森层的蒸气质量流率 Φ

Fig. 2. Evolution of interfacial transport characteristics under laser irradiation: (a) Liquid-phase ablation velocity u_s ; (b) surface saturated vapor pressure P_s ; (c) Mach number Ma ; (d) vapor mass flux across the Knudsen layer Φ .

一致, 同样在约 15 ns 和 18 ns 处观察到“缺口”和归零现象. 这验证了 Hertz-Knudsen 模型及努森层边界条件所建立的表面温度、蒸发速率与蒸气压之间的强耦合关系.

努森层外侧蒸气的动力学状态由图 2(c) 中的马赫数 Ma 控制. 在蒸发初期, Ma 即迅速到达 1, 表明蒸气是以声速状态逃离气液界面. 这一声速流态持续了绝大部分的有效蒸发时间, 直至约 60 ns 后才回落至亚声速, 在 ~ 70 ns 之后马赫数 $Ma < 0.7$. 马赫数 Ma 作为努森层边界 ((6) 式) 中的关键自由变量, 其值无法超过 1 的数值结果是由跨努森层的动理学跃迁只能将蒸气流加速到声速状态决定的. 与之相对, 图 2(d) 中的蒸气质量流率 Φ 则定量描述了层两侧物质运输的强度. 在努森层阻塞 ($Ma = 1$) 的整个时段内, 层外侧逃逸出的蒸气质量流占总蒸发质量的 81.6%. 这意味着绝大部分的烧蚀产物是在声速膨胀状态下输运至蒸气区, 仅有 18.4% 的蒸气停留在层内非平衡区, 这一结果说明在纳秒激光烧蚀的早期, 动理学非平衡效应主导下的高速喷射是物质运输的主要模式.

3.3 流体结果对比

在厘清气液界面处的初始输运特性后, 烧蚀产

物以高温高压蒸气的形式进入背景气氛, 后续的膨胀动力学、能量演化及靶粒子的电离状态构成了本节分析核心.

首先展示了等离子体羽流参数的时空演化规律. 图 3(a), (b) 分别描绘了在 $1 \mu\text{s}$ 时间尺度内, 等离子体速度 v_g 与温度 T_g 的分布. 可以观察到在激光脉冲结束后, 羽流伴随着气氛介质中产生的激波仍持续向前推进, 激波锋面在 ~ 400 ns 时已传播至约 2 mm 处. 在羽流演化的早期, 材料表面附近存在一个高速向外膨胀、高温的等离子体核心区, v_g 最高可达约 6 km/s, T_g 最高超过 90000 K. 该高温高压核心区的形成, 是等离子体在烧蚀阶段通过逆韧致辐射和光电离机制持续吸收激光能量, 并在随后的膨胀过程中受自身压力梯度驱动的综合结果. 与此同时, 图 3(c) 中的压强 P_g 与图 3(d) 中的等离子体能量 E_{tg} 则揭示了羽流的能量储存与耗散过程. P_g 在初期高达约 10^8 Pa 量级, 构成了羽流膨胀的直接驱动力; 而 E_{tg} 的演化则表明在激光脉冲结束后, 系统能量因对外做功而迅速衰减.

等离子体的电离状态是其辐射特性的决定性因素. 图 3(e)–(h) 展示了在空气气氛下, 不同时刻各电离态铁粒子质量分数的空间分布. 在 30 ns 的早期阶段 (图 3(e)), 从高温高电离度核心区到低温

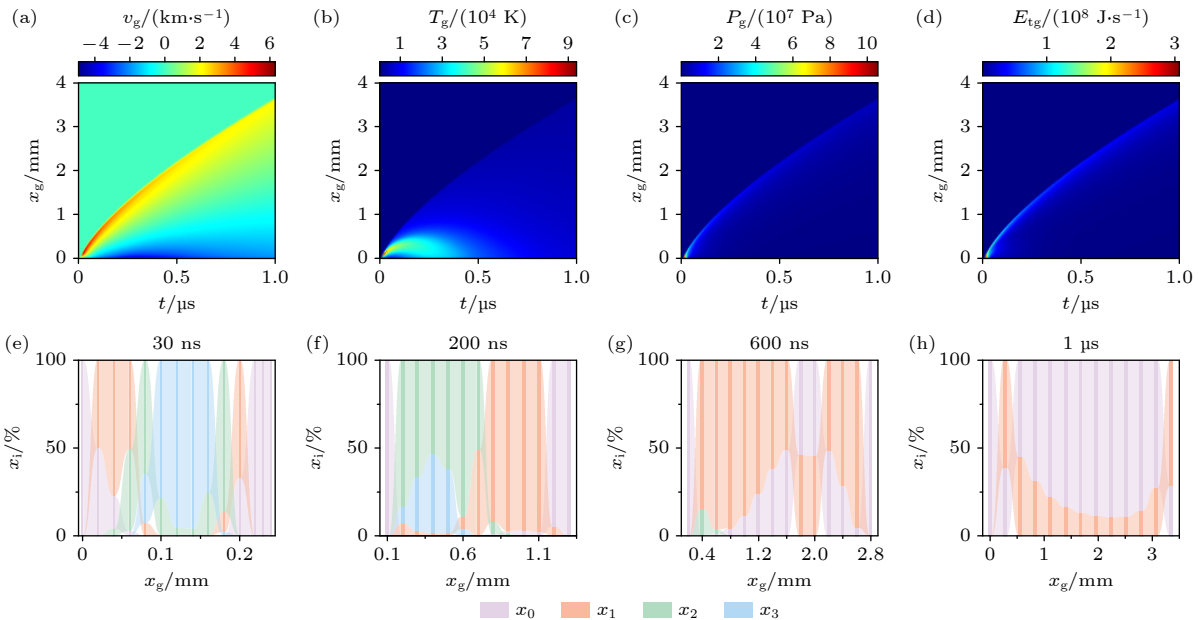


图 3 等离子体参数的时空演化 (a) 等离子体速度 v_g ; (b) 等离子体温度 T_g ; (c) 等离子体压强 P_g ; (d) 等离子体能量 E_{tg} ; (e) 30 ns, (f) 200 ns, (g) 600 ns 和 (h) $1 \mu\text{s}$ 各电离态铁粒子质量分数的空间分布

Fig. 3. Spatio-temporal evolution of key parameters of the laser-induced plasma plume: (a) Plasma velocity v_g ; (b) plasma temperature T_g ; (c) plasma pressure P_g ; (d) plasma energy E_{tg} ; spatial distributions of mass fractions in different ionization states for iron under air atmosphere at (e) 30 ns, (f) 200 ns, (g) 600 ns, and (h) $1 \mu\text{s}$.

低电离度边缘区的空间渐变结构被展示出来, 其中羽流核心区由高价 Fe^{3+} 离子主导, 这对应于该区域极高的局部温度 (>50000 K), 使得萨哈方程 ((10) 式) 强烈地向高阶电离平衡偏移. 此后随着羽流的膨胀和冷却, 在 200 ns 时 (图 3(f)), Fe^{2+} 成为主导离子. 至 600 ns (图 3(g)) 和 1 μs (图 3(h)) 时, 羽流核心区已由 Fe^+ 过渡到以中性铁原子 (Fe^0) 主导.

3.4 光谱结果对比

等离子体的辐射光谱由其内部物理状态和组分信息直接决定. 基于 2.5 节描述的辐射运输模型, 本节进一步分析了激光诱导铁等离子体在膨胀过程中光谱的时间演化规律. 图 4(a)—(e) 分别展示了 400, 600, 800 ns 和 1 μs 下轫致辐射 I_{ff} 、辐射复合 I_{fb} 、Fe I 原子线谱 I_{FeI} 、Fe II 离子线谱 I_{FeII} 以及连续谱与线谱叠加的总辐射谱 I_{all} 的演变规律.

在演化早期 (400 ns), 由于等离子体处于高温高密度状态, 其辐射光谱呈现出连续谱背景强烈、离子线主导的特征. 图 4(a), (b) 分别展示了长波主导的 I_{ff} 与短波主导的 I_{fb} 的强度分布. 如图 4(a) 所示, I_{ff} 随波长增大而显著增强, 在长波波段 (500—700 nm) 贡献突出. 这一趋势符合 Kramers 理论 ((19) 式). 与之形成互补的是, 图 4(b) 显示 I_{fb} 随波长减小而急剧增强, 在短波波段 (180—400 nm 的紫外区) 占据主导地位. 这是因为 κ_{fb} 在光子能量高于相应电离能阈值时显著增大 ((20) 式), 使得自由电子被离子捕获时释放出的高能光子主要集中在短波区域. 在此连续背景之上, 图 4(c), (d) 的线谱对比显示, Fe II 离子谱线强度普遍高于 Fe I 原子谱线. 这与此阶段等离子体核心区高电离度 (见图 6(e)) 的流体计算结果一致.

随着羽流膨胀冷却 (600 ns—1 μs), 光谱主导形态逐渐发生转变. 连续辐射强度因为等离子体温度与总粒子数密度的下降而显著衰减. 与此同时, Fe I 原子线谱的相对强度逐渐提升. 这是由于等离子体温度的降低导致萨哈平衡向中性原子偏移 (图 3(e)—(h)), Fe^0 数密度增大、 Fe^+ 数密度减小, 导致原子谱增强的同时离子谱线减弱.

图 4(f), (g) 通过两个波段的局部放大突出了线谱演化的两个特征. 在图 4(f) 所示范围内, 可以观察到 3 条典型 Fe I 线 (404.6, 406.4 和 407.2 nm) 自吸收现象随时间的演化: 在 400—600 ns, 3 条谱线整体强度增强、展宽增大; 到 800 ns—1 μs 时, Fe I 404.6 nm 的峰值区域开始出现凹陷, 呈现出

中心强度低于两侧翼的“自蚀”特征, 同时谱线宽度变窄; 而 Fe I 406.4 nm 和 Fe I 407.2 nm 的“自蚀”特征则不太明显, 仅表现出展宽变窄、1 μs 时的强度略低于 800 ns 时的强度. 这是因为当等离子体外部较冷区域的中性原子数密度足够高时, 会吸收来自内部高温核心区同种元素发射的特征光子. 这种自吸收效应是等离子体空间非均匀性 (存在温度与数密度梯度) 的直接结果, 其出现和增强说明演化后期等离子体羽流在膨胀过程中已经形成了足够宽且冷的外部区域.

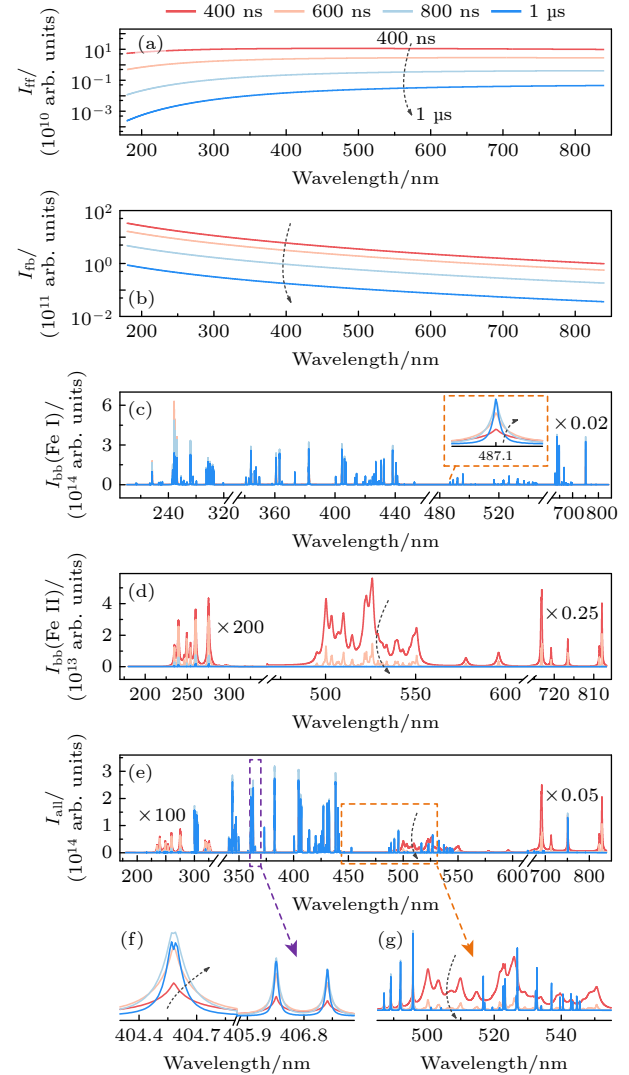


图 4 空气氛围下激光诱导等离子体辐射谱的演化特性 (a) 轫致辐射谱 I_{ff} ; (b) 辐射复合谱 I_{fb} ; (c) Fe I 原子线谱 I_{FeI} ; (d) Fe II 离子线谱 I_{FeII} ; (e) 总辐射谱 I_{all} combining continuum and line emissions; (f) 总辐射谱的局部放大 1; (g) 总辐射谱的局部放大 2

Fig. 4. Evolution of the radiation spectra of the laser-induced plasma: (a) Bremsstrahlung radiation I_{ff} ; (b) radiative recombination I_{fb} ; (c) Fe I atomic line spectrum I_{FeI} ; (d) Fe II ionic line spectrum I_{FeII} ; (e) total radiation spectrum I_{all} combining continuum and line emissions; (f) local enlargement 1 of I_{all} ; (g) local enlargement 2 of I_{all} .

图 4(g) 则展示了总辐射谱中 Fe I 与 Fe II 谱线竞争主导性的动态演化过程. 在 400—600 ns 时, 该波段被强烈展宽且相互重叠的 Fe II 谱线所主导, Fe I 谱线几乎被淹没. 这对应于等离子体早期高温、高电离度的状态. 随着时间的推移, Fe II 线因电离度下降和冷却而迅速减弱、变窄, 随后 Fe I 线逐渐凸显, 在 800 ns—1 μ s 时成为该波段内相对孤立、清晰的主导谱线. 这再现了等离子体羽流从离子主导到原子主导的冷却过程.

3.5 与实验结果对比

在系统分析了空气气氛下激光烧蚀、等离子体演化及光谱辐射的全过程后, 为了验证本文计算结果的可靠性, 本节将本文的计算光谱与实验测量、其他光谱计算程序的结果进行对比.

实验采用纳秒激光 (Lapa 80, 镭宝光电; 脉冲能量 \sim 12 mJ; 光斑直径 \sim 750 μ m) 直接聚焦烧蚀标准纯铁样品 (YSBS11058-2021, 钢研纳克), 使用十通道光谱仪 (AvaSpec-ULS2048-10-USB2-RM Multi Channel, 爱万提斯; 光谱探测范围为 180—1060 nm; UF/UE 光栅; 平均光谱分辨率为 0.05—0.18 nm) 采集等离子体光谱. 探测延时设为 400 ns, 积分时间设置为 1.05 ms (更具体的实验设置可参考我们之前的文献 [45]). 为了匹配实验光谱仪的积分时间, 本文将计算得到的瞬态光谱从 400 ns 开始积分, 以 100 ns 为步长, 一直积分到 4 μ s 时刻 (此时光谱强度相较于 400 ns 已衰减 7 个数量级). 同时, 为建立基准验证, 还将流场计算结果输入到两种光谱计算程序同步进行计算光谱对比: PrismSPECT (基于空间平均的等离子体参数计算包含连续谱发射和线谱跃迁的等离子体光谱, 分别计算了考虑光学厚度的一维平面构型 “planar” 和光学薄的零厚度构型 “zero-width” 光谱, 对于该程序的详细介绍可参考文献 [21]) 与 NIST LIBS (计算 LTE 下给定温度密度下的光学薄稳态等离子体线谱, 对于该程序的详细介绍可参考文献 [25]).

图 5 依次展示了实验测量光谱 (图 5(a))、本文计算光谱 (图 5(b))、PrismSPECT planar 计算光谱 (图 5(c))、PrismSPECT zero-width 计算光谱 (图 5(d)), 以及 NIST LIBS 计算光谱 (图 5(e)), 此外还标注了实验用光谱仪前 6 个通道的波长覆盖范围. 从整体光谱形态上可以直观看出, 本文计算

光谱与实验光谱的相似度最高. 两者在各个波段均呈现出相似的谱线分布形态. 这是由于本文建立的多物理场耦合模型通过自洽求解辐射输运方程, 完整考虑了等离子体参数的空间非均匀性和光学厚度. 相比之下, PrismSPECT planar 光谱虽然在通道 1, 3, 5 和 6 内与实验谱形态相似, 但通道 2 中谱线展宽过宽, 通道 4 内谱线的相对强度与实验存在明显偏差. 这可能来自其部分考虑了光学厚度下的辐射输运, 但其基于空间平均参数的假设, 未能考虑实际等离子体核心区与边缘的温度、密度梯度. 此外, PrismSPECT zero-width 与 NIST LIBS 则因忽略光学厚度导致共振线的强度被过高估计,

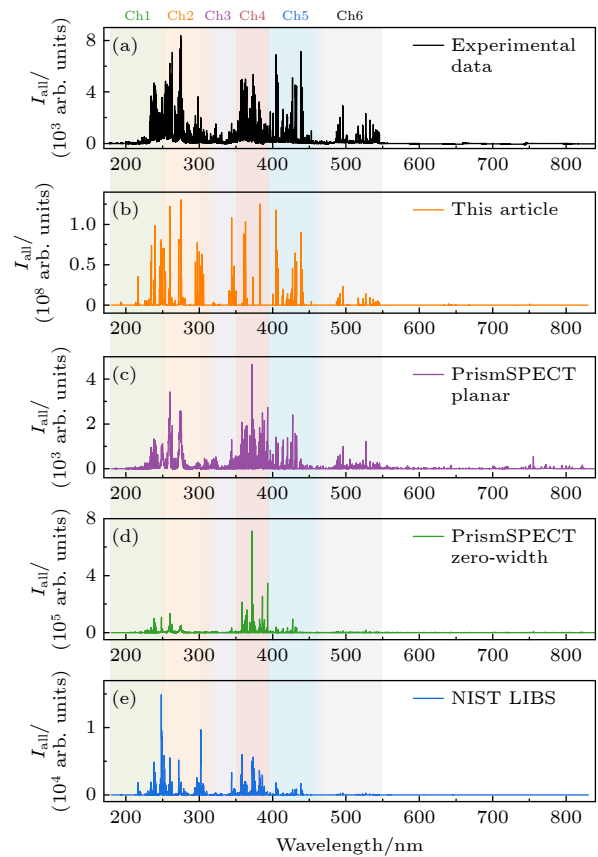


图 5 纯铁激光诱导等离子体时间积分光谱的实验与计算对比 (a) 实验测量光谱; (b) 本文计算光谱; (c) PrismSPECT planar 计算光谱; (d) PrismSPECT zero-width 计算光谱; (e) NIST LIBS 计算光谱; 阴影区标注为光谱仪通道 (Ch1—Ch6) 的波长覆盖范围

Fig. 5. Experimental and simulated comparison of the time-integrated spectra from a pure iron laser-induced plasma: (a) Experimentally measured spectrum; (b) spectrum calculated by this article's model; (c) spectrum calculated by PrismSPECT planar; (d) spectrum calculated by PrismSPECT zero-width; (e) spectrum calculated by NIST LIBS; the shaded areas indicate the wavelength coverage of the spectrometer channels (Ch1—Ch6).

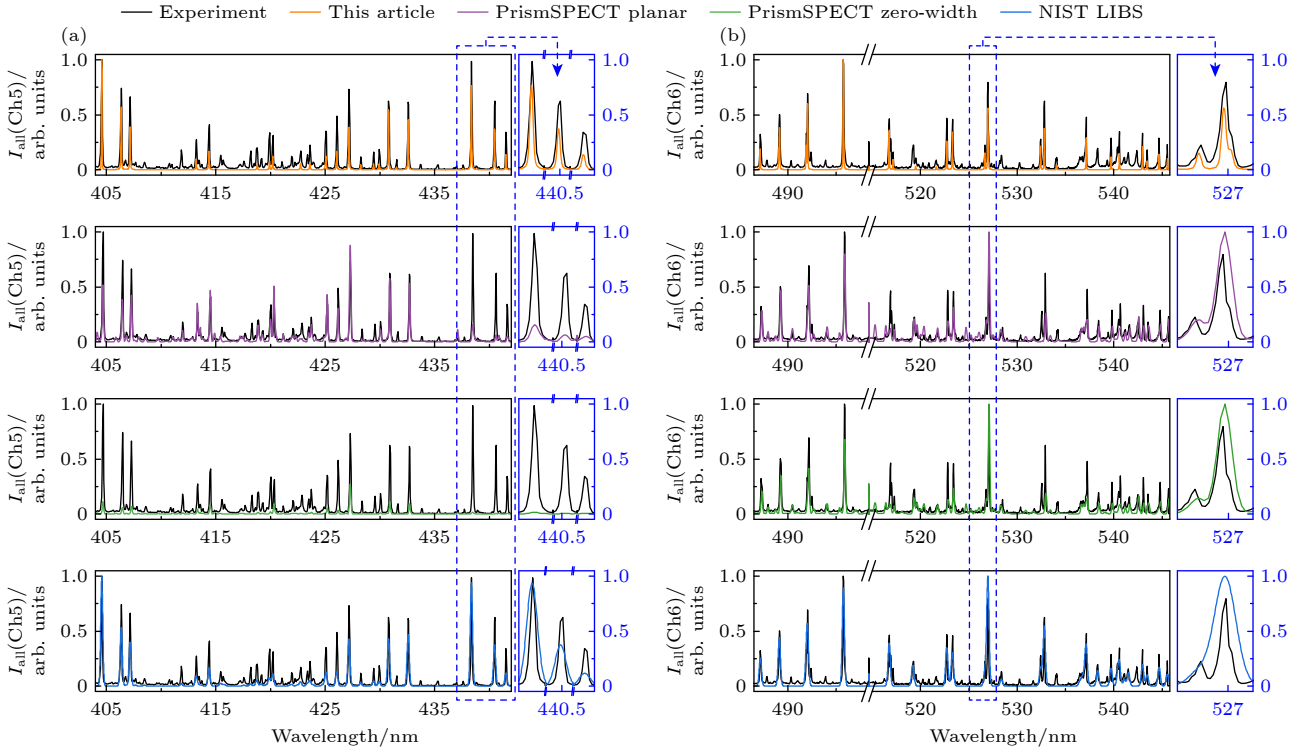


图 6 光谱仪两个通道的局部对比 (a) 通道 5 (390—480 nm) 光谱对比; (b) 通道 6 (478—550 nm) 光谱对比

Fig. 6. Local detailed comparison of two spectral channels: (a) Spectral comparison for Ch5 (390–480 nm); (b) spectral comparison for Ch6 (478–550 nm).

从而与实验谱在各个波段内的相对强度差异最为显著。图中还观察到本文计算谱相对稀疏, 这主要受限于当前模型中采用的原子数据规模 (170 条 Fe I 线与 96 条 Fe II 线), 未来可通过扩充线谱计算数目加以改善。图 6 进一步展示了光谱仪通道 5 (390—480 nm, 图 6(a)) 和通道 6 (478—550 nm, 图 6(b)) 的局部放大对比。可以看出本文计算谱与实验谱相对强度吻合度最高的同时, 在波长解析度方面表现最优。

为定量评估各计算方法的性能, 本节引入两个统计指标进行系统评价: 基于每个通道内各谱线的实验与计算谱线面积比值相对标准偏差的 RSD_{a-a} , 以及基于峰值比值相对标准偏差的 RSD_{p-p} .

$$RSD_{a-a}(\%) = \frac{1}{\bar{y}^{a-a}} \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i^{a-a} - \bar{y}^{a-a})^2} \times 100(\%),$$

$$y_i^{a-a} = \frac{\int_{\text{area}} I_i^{\text{simu}} d\lambda}{\int_{\text{area}} I_i^{\text{exp}} d\lambda}, \quad (24)$$

$$RSD_{p-p}(\%) = \frac{1}{\bar{y}^{p-p}} \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i^{p-p} - \bar{y}^{p-p})^2} \times 100(\%),$$

$$y_i^{p-p} = \max(I_i^{\text{simu}}) / \max(I_i^{\text{exp}}), \quad (25)$$

其中, n 为每个通道内谱线总数量, I_i^{exp} 和 I_i^{simu} 为第 i 条谱线的实验光谱强度和计算光谱强度。

再将 4 种计算方法在每个通道的 RSD_{a-a} 和 RSD_{p-p} 根据值的大小由低到高排序进行打分 (RSD 越小代表计算光谱与实验光谱的匹配度越高, 最高

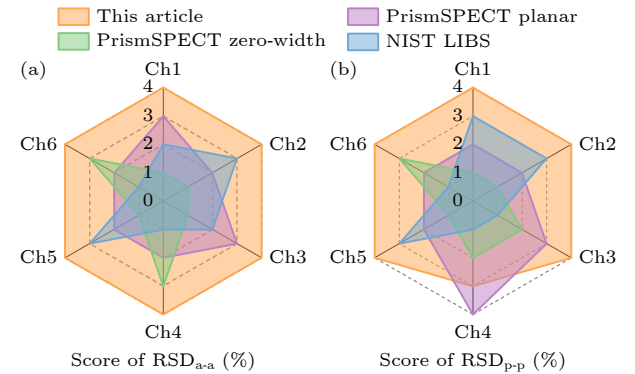


图 7 不同计算方法光谱预测性能的定量评估雷达图 (a) 基于谱线面积比值相对标准偏差 (RSD_{a-a}) 的评分; (b) 基于谱线峰值比值相对标准偏差 (RSD_{p-p}) 的评分

Fig. 7. Quantitative assessment (radar chart) of the spectral prediction performance for different calculation methods: (a) Scores based on the relative standard deviation of the spectral line area ratio (RSD_{a-a}); (b) scores based on the relative standard deviation of the spectral line peak ratio (RSD_{p-p}).

4分,最低1分)。图7雷达图结果显示,本文模型在几乎所有通道和指标上均取得了最高综合得分。具体而言,对于 RSD_{a-a} 指标(图7(a)),本文在全部6个通道均获得满分4分,显著优于其他方法(PrismSPECT planar的得分为3,2,3,2,2,2; NIST LIBS得分为2,3,2,1,3,1; PrismSPECT zero-width得分为1,1,1,3,1,3)。对于 RSD_{p-p} 指标(图7(b)),本文在6个通道中的5个获得最高分(得分依次为4,4,4,3,4,4),仅在通道4得分略低于PrismSPECT planar。

4 结 论

本文发展了一个从激光能量沉积到光谱辐射的全链条、多物理场耦合模型,系统地揭示了纳秒激光与铁靶相互作用的完整物理过程。该模型通过自洽耦合激光能量沉积诱导的相变烧蚀,考虑动力学非平衡的努森层界面、流体电离膨胀、组分扩散、热/黏性输运,以及光谱辐射输运,实现了对跨区域跨尺度复杂物理的统一描述。

研究定量刻画了等离子体屏蔽效应的产生与发展,并将气液界面蒸发速率、饱和蒸气压的骤降与之关联。进一步通过努森层模型,明确了早期烧蚀产物以声速膨胀为主导输运模式,并量化了该阶段逃逸蒸气质量占总蒸发质量的81.6%。形成的等离子体羽流在膨胀中逐渐冷却,其电离状态随之从高价离子(Fe^{3+})逐步过渡至中性原子(Fe^0)。在此基础上,光谱计算展示了辐射特性从早期“连续谱背景强、离子线主导”到后期“连续谱衰减、原子线凸显并出现自吸收”的动态转变过程。其中自吸收现象的出现证明了模型能够有效捕捉等离子体空间非均匀性带来的光学厚度效应。

通过与实验测量光谱、PrismSPECT和NIST LIBS光谱计算程序的系统性对比,本文模型在多个通道的定量评估(RSD_{a-a} 和 RSD_{p-p})中综合得分最高。这验证了全链条自洽建模相较于依赖空间平均或光学薄近似的传统方法,在描述等离子体非均匀性和辐射输运方面的必要性和优势,也为激光加工参数优化、激光诱导击穿光谱定量分析以及新型等离子体光源设计等应用领域提供了一种数值模拟框架。

参考文献

- [1] Wu J, Qiu Y, Li X W, Yu H, Zhang Z, Qiu A C 2020 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53** 023001
- [2] Liu J B, Zhang D H Y, Fu Y Y 2023 *New J. Phys.* **25** 122001
- [3] Wu J, Zhou Y, Chen M, Li X 2025 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **58** 143004
- [4] Wen S B, Mao X L, Greif R, Russo R E 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 043103
- [5] Bleiner D, Chen Z Y, Autrique D, Bogaerts A 2006 *J. Anal. At. Spectrom.* **21** 910
- [6] Vanraes P, Venugopalan S P, Bogaerts A 2021 *Appl. Phys. Rev.* **8** 041305
- [7] Yin P Q, Xu B P, Liu Y H, Wang Y S, Zhao W, Tang J 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 095202 (in Chinese) [尹培琪, 许博坪, 刘颖华, 王屹山, 赵卫, 汤洁 2024 物理学报 **73** 095202]
- [8] Zhang D H Y, Liu J B, Fu Y Y 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 025201 (in Chinese) [张东荷雨, 刘金宝, 付洋洋 2024 物理学报 **73** 025201]
- [9] Shabanov S V, Gornushkin I B 2014 *Spectrochim. Acta Part B* **100** 147
- [10] Lu Q M, Mao S S, Mao X L, Russo R E 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 083301
- [11] Gaft M, Nagli L, Gornushkin I, Raichlin Y 2020 *Spectrochim. Acta Part B* **173** 105989
- [12] Anisimov S I, Luk'yanchuk B S 2002 *Phys. Usp.* **45** 293
- [13] Knight C J 1979 *Aiaa J.* **17** 519
- [14] Fryxell B, Olson K, Ricker P, Timmes F X, Zingale M, Lamb D Q, MacNeice P, Rosner R, Truran J W, Tufo H 2000 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **131** 273
- [15] Guthikonda N, Kameswari D P S L, Manikanta E, Shiva S S, Harsha S S, Ikkurthi V R, Kiran P P 2023 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **56** 305501
- [16] Pert G J 2009 *J. Plasma Phys.* **35** 43
- [17] Al-Khateeb A, Doyle L A, El-Astal A H, Lamb M J, Lewis C L S, Martin G W, Morrow T, Pert G J, Riley D, Weaver I, Williamson T P 1999 *Appl. Phys. A* **69** S479
- [18] Hill M, Wagenaars E 2022 *Photonics* **9** 937
- [19] Basko M M, Sasorov P V, Murakami M, Novikov V G, Grushin A S 2012 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **54** 055003
- [20] Torretti F, Sheil J, Schupp R, Basko M M, Bayraktar M, Meijer R A, Witte S, Ubachs W, Hoekstra R, Versolato O O, Neukirch A J, Colgan J 2020 *Nat. Commun.* **11** 2334
- [21] MacFarlane J J, Golovkin I E, Woodruff P R, Kulkarni S K, Hall I M 2013 *Simulation of Plasma Ionization and Spectral Properties with PrismSPECT* p1-1
- [22] MacFarlane J J, Golovkin I E, Woodruff P R 2006 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99** 381
- [23] MacFarlane J J, Golovkin I E, Wang P, Woodruff P R, Pereyra N A 2007 *High Energy Density Phys.* **3** 181
- [24] Joshi T R, Bailly-Grandvaux M, Turner R E, Spielman R B, Garay J E, Beg F N 2023 *Phys. Plasma* **30** 122109
- [25] Ralchenko Y, Kramida A 2020 *Atoms* **8** 56
- [26] Veis P, Marín-Roldán A, Kristof J 2018 *Plasma Sources Sci. Technol.* **27** 095001
- [27] Wang J X, Zhang L, Wang S Q, Su M G, Sun D X, Han J H, Xia G F, Dong C Z, Min Q, Ma W G, Dong L, Yin W B, Xiao L T, Jia S T 2021 *Plasma Sci. Technol.* **23** 035001
- [28] Palya A, Ranjbar O A, Lin Z, Volkov A N 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **132** 1029
- [29] Gornushkin I, Shabanov S, Omenetto N, Winefordner J 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 073304
- [30] Zeifman M I, Garrison B J, Zhigilei L V 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 2181

- [31] Heltemes T A, Moses G A 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 2629
- [32] Faik S, Tauschwitz A, Iosilevskiy I 2018 *Comput. Phys. Commun.* **227** 117
- [33] More R M, Warren K H, Young D A, Zimmerman G B 1988 *Phys. Fluids* **31** 3059
- [34] Haxhimali T, Echeverria M, Najjar F, Tzeferacos P, Ali S J, Park H S, Eggert J, Huntington C, Morgan B, Ping Y, Rinderknecht H G, Saunders A M 2020 *AIP Conf. Proc.* **2272** 120006
- [35] Noble C, Anderson A, Barton N, Bramwell J, Capps A, Chang M, Chou J, Dawson D, Diana E, Dunn T, Faux D, Fisher A, Greene P, Heinz I, Kanarska Y, Khairallah S, Liu B, Margraf J, Nichols A, White J 2017 *ALE3D: An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Multi-Physics Code*
- [36] Min Q, Xu Z Y, He S Q, Lu H D, Liu X B, Shen R Z, Wu Y H, Pan Q K, Zhao C X, Chen F, Su M G, Dong C Z 2024 *Comput. Phys. Commun.* **302** 109242
- [37] Min Q, Wang G D, He C W, He S Q, Lu H D, Liu X B, Wu Y H, Su M G, Dong C Z 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 033201 (in Chinese) [敏琦, 王国栋, 何朝伟, 何思奇, 卢海东, 刘兴邦, 武艳红, 苏茂根, 董晨钟 2025 物理学报 **74** 033201]
- [38] Min Q, Su M G, Cao S Q, Sun D X, O'Sullivan G, Dong C Z 2016 *Opt. Lett.* **41** 5282
- [39] Bulgakova N M, Bulgakov A V, Babich L P 2004 *Appl. Phys. A* **79** 1323
- [40] Anisimov S I 1968 *Soviet Physics JETP-USSR* **27** 182
- [41] Nosrati Y, Tavassoli S H, Hassanimatin M M, Safi A 2020 *Phys. Plasma* **27** 023301
- [42] Fairbanks D F, Wilke C R 2002 *Ind. Eng. Chem.* **42** 471
- [43] Gornushkin I B, Stevenson C L, Smith B W, Omenetto N, Winefordner J D 2001 *Spectrochim. Acta Part B* **56** 1769
- [44] Huang X F, Guo R, Ge Y B 2014 *Chin. J. Eng. Math.* **31** 371 (in Chinese) [黄雪芳, 郭锐, 葛永斌 2014 工程数学学报 **31** 371]
- [45] Zhou Y, Wu J, Shi M X, Chen M X, Li J H, Guo X Y, Hang Y H, Pei C X, Li X W 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 034103

Coupling model of metallic target ablation-plasma evolution-radiation under nanosecond laser irradiation*

ZHOU Ying¹⁾ WU Jian^{1)†} SUN Hao¹⁾ LI Jinghui¹⁾ LI Xiaoxuan¹⁾
 HUANG Shuzhi¹⁾ HE Jiayao¹⁾ LIU Xingyu¹⁾ HANG Yuhua²⁾
 PEI Cuixiang³⁾ LI Xingwen¹⁾

1) (State Key Laboratory of Electrical Insulation and Power Equipment, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

2) (Suzhou Nuclear Power Research Institute Co., Ltd., Suzhou 215004, China)

3) (School of Aerospace Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 27 October 2025; revised manuscript received 1 December 2025)

Abstract

The interaction of nanosecond laser pulses with metallic materials involves multiple complex physical processes, and constructing a self-consistent model capable of uniformly describing all stages remains a significant challenge. This work establishes a multi-physics coupling model for pure iron, encompassing laser energy deposition, solid-liquid phase transition, gas-liquid interfacial kinetic transport, plasma expansion and ionization, and spectral radiation. The numerical solution adopts a partition method, utilizing an implicit compact difference scheme for the target area and a Mac-Cormack explicit scheme for the ambient atmosphere, to simulate the ablation dynamics.

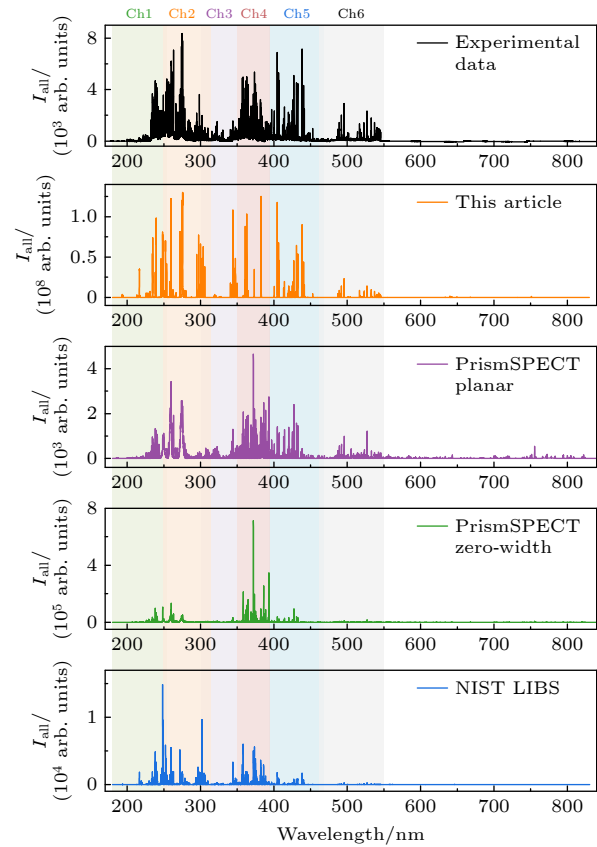
The simulations elucidate the emergence of plasma shielding and its inhibitory effect on the evaporation process, thereby confirming that 81.6% of the early-stage ablation products are transported through a supersonic expansion mode. The model successfully captures the complete evolution of the plasma plume from a high-temperature, highly ionized state (dominated by Fe³⁺) to a low-temperature, neutral atomic state

* Project supported by the Joint Funds for Regional Innovation and Development of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U24A20154), the S&T Program of Energy Shaanxi Laboratory, China (Grant No. ESLB202414), and the Key Research and Development Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2024PT-ZCK-48).

† Corresponding author. E-mail: jxjawj@mail.xjtu.edu.cn

(dominated by Fe^0). Based on this, spectral calculations demonstrate the dynamic evolution of radiative characteristics from an early stage featuring a “strong continuum background dominated by ion lines” to a later stage where “the continuum attenuates, atomic lines become prominent, and self-absorption appears”. The emergence of self-absorption proves the ability of the model to effectively capture the optical thickness effects arising from spatial inhomogeneity within the plasma.

Through systematic comparison between experimentally measured spectra and calculated results from the PrismSPECT and NIST LIBS spectral programs, the model presented here achieves the highest comprehensive scores in quantitative evaluations of multiple channels. This validates the necessity and superiority of the full-chain self-consistent modeling approach over traditional methods relying on spatial averaging or optically thin approximation, especially in describing plasma inhomogeneity and radiation transport. It also provides a numerical simulation framework for applications such as laser processing parameter optimization, quantitative spectroscopic analysis, and the design of novel plasma light sources.



Keywords: multi-physics field coupling simulation, laser ablation, plasma spectroscopy, radiation transport

DOI: [10.7498/aps.75.20251464](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251464)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251464](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251464)

纳秒激光作用下金属靶烧蚀-等离子体演化-辐射的耦合模型

周颖 吴坚 孙浩 李京徽 李小璇 黄树志 何佳瑶 刘星雨 杭玉桦 裴翠祥 李兴文

Coupling model of metallic target ablation-plasma evolution-radiation under nanosecond laser irradiation

ZHOU Ying WU Jian SUN Hao LI Jinghui LI Xiaoxuan HUANG Shuzhi HE Jiayao LIU Xingyu
HANG Yuhua PEI Cuixiang LI Xingwen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 050502 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251464

CSTR: 32037.14.aps.75.20251464

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251464>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

激光烧蚀固体碳氢材料的离子组分分离研究

Separation of ion component from solid hydrocarbon materials by laser ablation

物理学报. 2023, 72(7): 075201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230013>

激光维持等离子体多物理场耦合模型与仿真

Multiphysics modeling and simulations of laser-sustained plasmas

物理学报. 2024, 73(2): 025201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231056>

烧蚀等离子体流场尾迹区的天线辐射特性

Antenna radiation characteristics of wake region in ablative plasma flow

物理学报. 2025, 74(11): 114202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250154>

表面烧蚀对等离子体的影响及其与电磁场相互作用

Influence of surface ablation on plasma and its interaction with electromagnetic field

物理学报. 2024, 73(11): 115204 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231733>

粒径对激光驱动颗粒溅射动力学特征的影响

Influence of grain size on dynamic characterizations of laser-driven grain ejection

物理学报. 2022, 71(14): 145203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220243>

高斯与平顶光束纳秒脉冲激光物质蒸发烧蚀动力学仿真研究

Simulation of evaporation ablation dynamics of materials by nanosecond pulse laser of Gaussian beam and flat-top beam

物理学报. 2024, 73(9): 095202 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231625>