

## 补充材料

## 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

尹培琪<sup>1)2)</sup> 许博坪<sup>1)2)</sup> 刘颖华<sup>1)2)</sup> 王屹山<sup>1)2)</sup>赵卫<sup>1)2)</sup> 汤洁<sup>1)2)†</sup>

1) (中国科学院西安光学精密机械研究所, 瞬态光学与光子技术国家重点实验室, 西安 710119)

2) (中国科学院大学, 北京 100049)

本文档提供了文章“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”的补充信息。主要包括两个内容: Knudsen 层和材料参数。

## S1 Knudsen 层

激光辐照靶材使其升温, 当靶面温度达到沸点时开始蒸发。此时从靶面逸出的蒸汽粒子服从靶面温度下的麦克斯韦速率分布, 并且这些粒子的速度方向均是离开靶面的方向。在靶面前方若干个平均自由程的距离内, 蒸汽粒子间由于多次相互碰撞导致粒子速率呈各向异性, 这一区域被称为 Knudsen 层<sup>[S1]</sup>。Knudsen 层可被视为处于靶面和蒸汽相界面的薄层, 这一薄层内离开靶面的蒸汽粒子数目多于返回的粒子数目, 因此粒子处于平动非平衡状态。

在模型中, Knudsen 层相当于一个间断面, 因此可将 Knudsen 层两侧的蒸汽温度、密度和压力视为热模型中的不连续, 则 Knudsen 层两侧的蒸汽温度和密度的相关关系<sup>[S2,S3]</sup>如下:

$$T_p = 0.67T_s, \quad \rho_p = 0.31\rho_s \quad (S1)$$

蒸汽羽流可被视为理想的单颗粒气柱, 假设蒸汽的流速等于声速, 那么从表面逃逸的蒸汽粒子速度<sup>[S4]</sup>可表示为

$$v_p = \left( \frac{\gamma k_B T_p}{m} \right)^{1/2} = \left( \frac{5k_B T_p}{3m} \right)^{1/2}, \quad (\text{S2})$$

其中，下标  $p$  是指 Knudsen 层的外边界，下标  $s$  是指 Knudsen 层的内边界（靠近靶面）， $\gamma = 5/3$  为单原子理想气体的比热比<sup>[S4]</sup>。

## S2 材料参数

本模型使用的材料参数：反射率  $R(T)$ 、吸收系数  $\alpha(T)$ 、密度  $\rho(T)$  和热导率  $k(T)$  的详细计算过程如下。

### S2.1 反射率和吸收系数

根据 Drude 模型，金属的复折射率与复介电函数的相关关系<sup>[S5]</sup>：

$$\begin{aligned} \varepsilon = \varepsilon_R + i\varepsilon_I &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_c^2 + \gamma^2} + i \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega_c (\omega_c^2 + \gamma^2)}, \\ \varepsilon = n^2 &= (n_R + in_I)^2 = (n_R^2 - n_I^2) + i(2n_R n_I), \\ \begin{cases} n_R^2 - n_I^2 &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_c^2 + \gamma^2}, \\ 2n_R n_I &= \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega_c (\omega_c^2 + \gamma^2)}, \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{S3})$$

其中  $n_R$  和  $n_I$  代表折射率的实部和虚部； $\varepsilon_R$  和  $\varepsilon_I$  表示介电函数的实部和虚部； $\gamma$ ，

$\omega_p$  和  $\omega_c$  分别为电子碰撞频率、等离子体频率和激光圆频率，

$$\begin{aligned} \gamma(T) &= \frac{N_e e^2}{m_e \sigma(T)}, \\ \omega_p^2 &= \frac{N_e e^2}{m_e \varepsilon_0}, \\ \omega_c &= \frac{2\pi c}{\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{S4})$$

因此可确定的折射率和消光系数，如下：

$$\begin{cases} n_{\text{R}} = \sqrt{0.5(A + \sqrt{A^2 + B^2})}, \\ n_{\text{I}} = \sqrt{0.5(-A + \sqrt{A^2 + B^2})}, \end{cases} \quad (\text{S5})$$

其中

$$\begin{cases} A = 1 - \frac{\omega_{\text{p}}^2}{\omega_{\text{c}}^2 + \gamma^2(T)}, \\ B = \frac{\omega_{\text{p}}^2 \gamma}{\omega_{\text{c}}(\omega_{\text{c}}^2 + \gamma^2(T))}. \end{cases}, \quad (\text{S6})$$

最终可确定材料的反射率和吸收系数<sup>[S6]</sup>为

$$\begin{aligned} R(T) &= \frac{[n_{\text{R}}(T) - 1]^2 + n_{\text{I}}^2(T)}{[n_{\text{R}}(T) + 1]^2 + n_{\text{I}}^2(T)}, \\ \alpha(T) &= \frac{4\pi}{\lambda} n_{\text{I}}(T). \end{aligned} \quad (\text{S7})$$

## S2.2 密度

根据 Guggenheim 公式<sup>[S7]</sup>可获得不同温度下材料的密度, 即

$$\rho(T) = \rho_{\text{c}} \left[ 1 + 0.75(1 - T/T_{\text{c}}) + 3(1 - T/T_{\text{c}})^{1/3} \right]. \quad (\text{S8})$$

## S2.3 热导率和电导率

根据 Wiedemann-Franz 定理<sup>[S8]</sup>, 热导率  $k(T)$  的计算公式如下:

$$k(T) = 2.44 \times 10^{-8} \sigma(T) T, \quad (\text{S9})$$

其中  $\sigma(T)$  代表材料的电导率, 根据插值法, 可获得电导率<sup>[S9]</sup>为

$$\sigma(T) = \frac{10^8}{0.00852T + 15.329}. \quad (\text{S10})$$

## 参考文献

[S1] Mazzi A, Miotello A 2017 *J. Colloid Interface Sci.* **489** 126

[S2] Stafe M, Negutu C, Popescu I M 2007 *Appl. Surf. Sci.* **253** 6353

[S3] Ghalamdaran S, Parvin P, Javad Torkamany M, Sabbagh Zadeh J 2014 *J. Laser*

*Appl.* **26** 012009

[S4] Kelly R 1990 *J. Chem. Phys.* **92** 5047

[S5] Lutey, Adrian A H 2013 *J. Manuf. Sci. Eng.* **135** 061003

[S6] Gragossian A, Tavassoli S H, Shokri B 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 103304

[S7] Zhuang H Z, Zou X W, Jin Z Z, Tian D C 1998 *Phys. B* **253** 68

[S8] Brandt R, Neuer G 2007 *Int. J. Thermophys.* **28** 1429

[S9] Gathers G 1983 *Int. J. Thermophys.* **4** 209