

超短パルスレーザー加工の統合シミュレーションコードの開発

古河裕之¹⁾、長友英夫²⁾、三間園興³⁾、矢花一浩⁴⁾、藤田和久³⁾

¹⁾ レーザー総研、²⁾ 阪大レーザー研、³⁾ 光産創大、⁴⁾ 筑波大学計算科学研究センター

1. はじめに

超短パルスレーザー加工では、レーザーの吸収は厚さ数十 nm の層で生じ、ピコ秒のオーダーで変化する混相状態物質と、超短パルスレーザーとの相互作用の理解が重要である。この吸収過程とその後の輻射流体運動の結果である、アブレーションや熔融層の生成と凝固を記述する統合シミュレーションコードの開発を目指す。図 1 は、開発する統合シミュレーションコードの構造である。

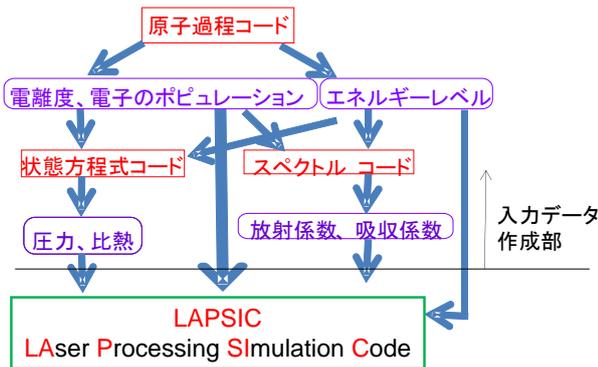


図 1 開発する統合シミュレーションコードの構造

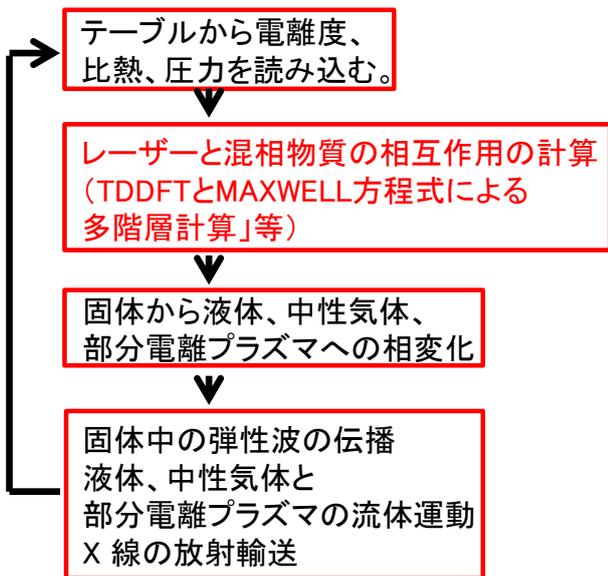


図 2 LAPSIC シミュレーションの流れ

図 2 は、LAPSIC シミュレーションの流れであり、図 3 は、レーザー加熱に伴って生成される多階層状態の構造の 1 例である。

統合シミュレーションコードの開発においては、極めて重要な役割を果たしている混相状態とレーザーの相互作用の物理を解明し、モデル化することにより、色々な照射条件での短パルスレーザー加工に適用可能なシミュレーションコードの開発を目指す。

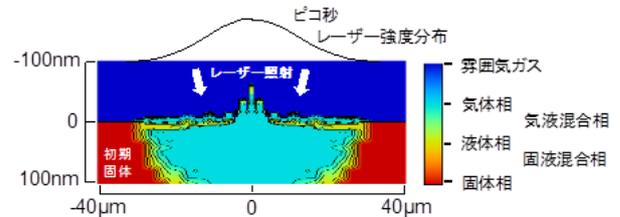


図 3 レーザー加熱に伴って生成される多階層状態の構造の 1 例

本年度は、固体とレーザーの相互作用の初期過程の解明に注視した。固体は、原子が結晶構造を組んでおり、電子の波動関数に周期性が表れ、所謂バンド構造を形成する。結晶中の電子の波動関数は、ブロッホの定理で表される関数形を持つ。

$$\varphi_{\mu}(\mathbf{r}-\mathbf{t}_n) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_n) \varphi_{\mu}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

第 2 章で、結晶中の波動関数の簡単な例として、クローニッヒ・ペニーモデルについて述べる。

2. クローニッヒ・ペニーモデル

レーザー場と相互作用する電子状態を記述する簡易モデルとして、図 4 のような井戸型の障壁が周期的に並んだポテンシャル中の電子状態を考えた。高さが V_0 で幅が b 、周期が $L=a+b$ の井戸型のポテンシャルで、幅 b は $b \ll a$ とすると、電子状態はポテンシャルの高さと幅の積 $V_0 b$ 、で決まる。積 $V_0 b$ はポテンシャル障壁の強さと呼ばれる。

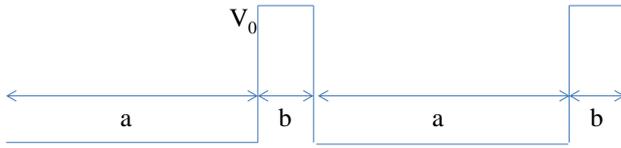


図4 井戸型の障壁をもつポテンシャル

上記ポテンシャル中では以下のように比較的簡単に、conduction band ($E > V_0$) に相当する波動関数を求めることができる。電子のシュレディンガー方程式は以下のように書ける。

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 \phi_1(x)}{dx^2} = E \phi_1(x) \quad 0 \leq x \leq a \quad (2)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \phi_2(x) = E \phi_2(x) \quad -b \leq x \leq 0 \quad (3)$$

この場合、波動関数は、次のようになる。

$$\phi_1(x) = C_1^+ e^{i\alpha x} - C_1^- e^{-i\alpha x} \quad 0 \leq x \leq a \quad (4)$$

$$\phi_2(x) = C_2^+ e^{i\beta x} - C_2^- e^{-i\beta x} \quad -b \leq x \leq 0 \quad (5)$$

$$\alpha = \sqrt{2E} \quad (6)$$

$$\beta = \sqrt{2(E - V_0)} \quad (7)$$

周期境界条件とブロッホの定理から、次の関係式が導ける。

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \alpha & -\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -\lambda e^{-i\beta b} & -\lambda e^{i\beta b} \\ \alpha e^{i\alpha a} & -\alpha e^{-i\alpha a} & -\lambda \beta e^{-i\beta b} & \lambda \beta e^{i\beta b} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^+ \\ C_1^- \\ C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} = 0 \quad (8)$$

$$\lambda = e^{ikL} \quad (9)$$

(8) 式が有意な解を持つためには、行列式が 0 でなければならない。

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \alpha & -\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -\lambda e^{-i\beta b} & -\lambda e^{i\beta b} \\ \alpha e^{i\alpha a} & -\alpha e^{-i\alpha a} & -\lambda \beta e^{-i\beta b} & \lambda \beta e^{i\beta b} \end{vmatrix} = 0 \quad (10)$$

(10) 式から(11) 式が得られる。

$$\begin{aligned} & \cos \sqrt{2E}a \cdot \cos \sqrt{2(E - V_0)}b \\ & - \frac{2E - V_0}{2\sqrt{E(E - V_0)}} \sin \sqrt{2E}a \cdot \sin \sqrt{2(E - V_0)}b \\ & = \cos kL \end{aligned} \quad (11)$$

Valence band の場合も同様にして、E と k の関係式が求められる。(12) 式に示す。

$$\begin{aligned} & \cos \sqrt{2E}a \cosh \sqrt{2(V_0 - E)}b \\ & + \frac{V_0 - 2E}{2\sqrt{E(V_0 - E)}} \sin \sqrt{2E}a \sinh \sqrt{2(V_0 - E)}b \\ & = \cos kL \end{aligned} \quad (12)$$

図5 は、 $V_0 = 1$ 、 $L = 7.6521$ (アルミの格子定数)、 $a = L \times 0.9$ 、 $b = L - a$ として得られたバンド構造である。

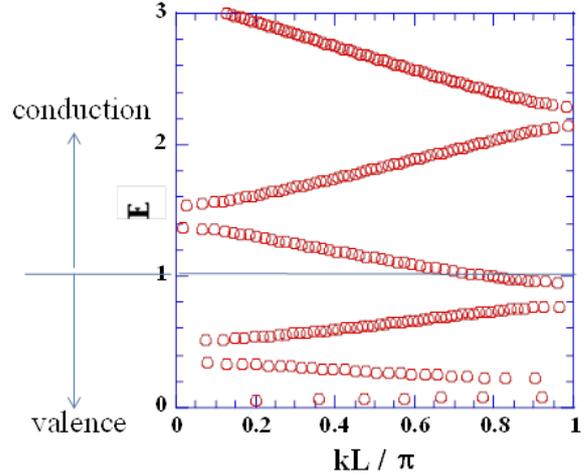


図5 得られたバンド構造

3. 時間依存密度汎関数理論

超短パルス光と物質の相互作用、特にパルス光が照射した直後の電子状態や、光から電子へのエネルギー移行を正確に見積もるための有効な手法として、第一原理計算手法である時間依存密度汎関数理論が挙げられる[1]。本年度は、筑波大学計算科学研究センターの矢花教授にご講演いただき、高強度パルス光が物質中をどのように伝搬するのか、また光から物質中の電子にエネルギーが移行する様子について、有意義な知見を得た。図6 は、時間依存密度汎関数理論による光の物質中での伝搬と吸収に関する解析の流れの概略図である。

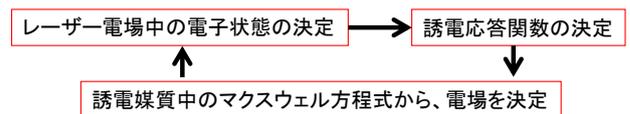


図6 時間依存密度汎関数理論による光の物質中での伝搬と吸収に関する解析の流れの概略図

REFERENCE

[1] 矢花一浩；レーザー研究 44 (2016) 789-793.