

光学材料、光学薄膜の損傷機構のパーコレーションモデル

佐々木 明

量子科学技術研究開発機構・関西光科学研究所

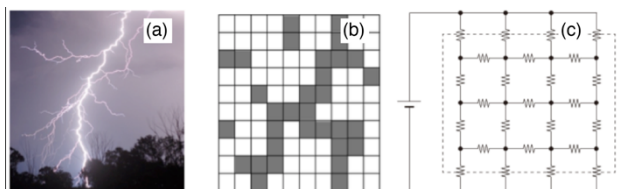
1. はじめに

本共同研究の目的は、光学素子のレーザー光による損傷、光学損傷のメカニズムを明らかにし、それによって、将来の、光学素子の耐力を高め、レーザーの性能、信頼性を高める研究・開発に貢献することである。

光学損傷は、レーザーの発明当時から研究されているが、複雑な現象で、メカニズムの解明は不十分である。光学損傷の特徴は、材料中の原子の多光子吸収、欠陥による吸収などのマイクロな過程がきっかけとなって、目で見える大きさのマクロな材料の破壊が起こること、損傷の発生には確率的な性質が強く、予想よりもはるかに低いレーザー強度で損傷が発生することもあり、その特性をよく理解することは、レーザー装置を適切に運用するためにも重要である。

光学損傷は、放電、ブレイクダウン現象の一つであると言われることがある。雷放電のような放電、ブレイクダウン現象において、マイクロな原子分子過程がきっかけになり、複雑な経路を辿って、放電が突然発生すること、マクロな現象が起こることに関し、本研究の研究代表者は、図1のように、現象の特性が、統計モデルの一つであるパーコレーションモデルによって表現されることを示した[1,2]。

光学損傷の場合は、材料中の原子の多光子吸収、欠陥による吸収などのマイクロな過程によって伝導電子が発生し、それがレーザー光の電界によって加速されて電子雪崩が起きることを経て、材料の損傷が起こると考え、本研究では、パーコレーションの考え方にに基づき、光学損傷の特性の理論、シミュレーションによる解析を試みることにした。



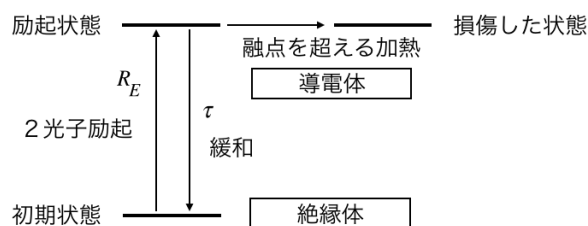
(図1) 放電のパーコレーションモデルの模式図。(a)大気中の放電の例、(b)セルでの表現、(c)電気回路での表現。

2. 光学損傷の理論的研究

強いレーザー光を照射された光学材料の内部では、伝導電子が生成されると考えられる[3,4]。その具体的な過程には、エキシトンやポーラロンが関与するもの、欠陥が関与するものなど、さまざまなの

のが考えられるが、それを抽象化、一般化すると、原子状態を初期状態と励起状態の二つで表した、図2のような原子過程モデルで表すことができると考えられる。

初期状態の光学材料は絶縁体で透明であるが、伝導電子が生じると、その場所が局所的に導電体に転移し、光を吸収するようになると考えられる。そして、それによって融点を超える温度まで加熱されると、材料の構造の破壊、損傷に至ると考えられる。



(図2) 光学材料の原子過程モデル

図2のような原子過程において、初期状態、励起状態、損傷した状態の分布、ポピュレーションは、レート方程式で表される。

均一な媒質の中では、レート方程式は、各場所でのそれぞれの状態の割合を与える。しかし、まれな現象を対象として、かつそれがそれぞれの場所で確率的に発生すると考えると、レート方程式を解いた結果は、空間の中で、それぞれの状態が実現している領域、ここではすなわち絶縁体と導電体の領域の体積の割合に対応すると考えられる。

パーコレーションの理論は、単純な立方格子を考えた場合、空間に絶縁体と導電体の領域が分布しているときに、もしも導電体の領域割合が、2次元で約0.5以上、3次元では約0.25以上であったとすれば、考えている領域全体が導電体になるという。

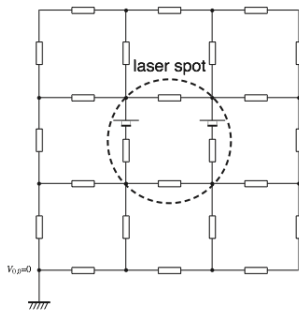
いくつかの光学材料については、二光子励起の吸収断面積や、それによって生成した、導電体の状態の光の吸収係数などの量が求められている。それを用いると、レーザー光を照射した時の加熱の大きさを評価することができ、それから損傷閾値のレーザー強度の大きさを推定することができる。また、励起状態からの緩和のレートが、励起のレートよりも十分小さい場合、損傷閾値のレーザー強度が、パルス幅の1/2乗に比例すると言う、実験でしばしば観測されている特性をも求めることができる。そこで本研究では、現在、ZnSeなどの材料について、パーコレーション理論で求められた損傷閾値とそのパラメータ依存性について、比較を行い、モデルの検証を進めている[5,6]。

3. 光学損傷のシミュレーション

パーコレーション理論は、0次元の物性値としての光学損傷の閾値を与えるが、実際の損傷の発生には、局所的な損傷が周囲へと発展する過程、すなわち材料の各場所の間で起こる相互作用、それによって生成する損傷のモルフォロジーも重要である。放電の生成においては、例えば、伝導電子が生成しドリフトすることで周囲の電界が歪み、電子が加速され、衝突電離などを経て増倍され、電子雪崩に発展することが知られている。そこで本研究では、損傷の時間的、空間的な発展を扱うシミュレーションのモデルを構築することにした。

シミュレーションのモデルは、電気回路の言葉でパーコレーション現象を表すモデルで、以前の放電のシミュレーションのモデル[1,2]をもとに、図3に示す抵抗ネットワークからなる電気回路のモデルを考えた。計算量の制約から、まず、薄膜などを想定して2次元のモデルを構築した。材料の特性を直流抵抗で表し、印加されたレーザーの電界を各要素に直列に挿入した起電力で与えた。そして、電気回路の方程式を解くことによって、各場所の電流、電界の値を求めた。

各抵抗の値は、絶縁体に当たる高い状態と、導電体に当たる低い状態の2値のいずれかとし、初期状態では高く、強いレーザー光の照射で二光子励起が起こったら、低い値に転移するとした。そして転移が起こる抵抗は、レート方程式で与えられる確率をもとにランダムに選択されるとした。



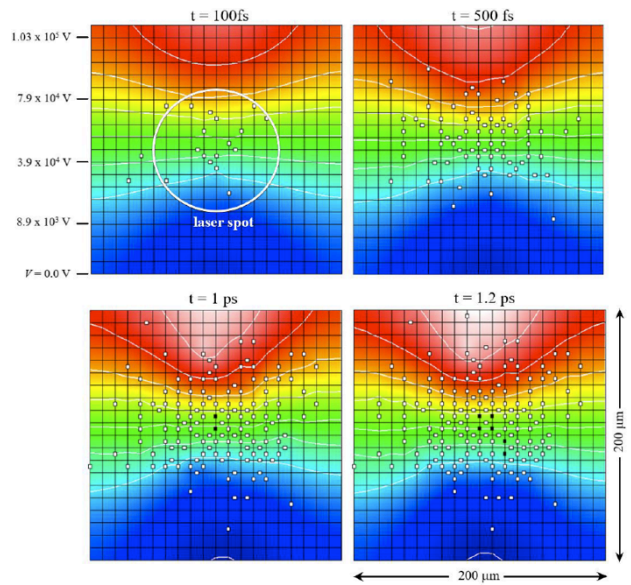
(図3) 光学材料の2次元の電気回路モデル

このモデルでは、ただ一点で絶縁体から導電体への転移が起こっても電流は流れない。周囲の要素でも導電体への転移が起こり、電流の経路ができることによって初めて大きな電流が流れるようになる。それはまた電界の歪みを引き起し、その大きさはレーザーの電界と同程度になるため、レーザーの直接の効果に加えた導体転移を起こす。このようにして最初に導電体への転移が起こった場所から現象が周囲に波及するという点で、要素間の相互作用も記述する。これによって、回路モデルは、電子雪崩の特性も適切に再現すると考えられる。

さらに、回路モデルは、レーザー光の電界によって駆動された電流が抵抗を流れることでジュール加熱が起こることも表現し、それによる各部の温度の上昇の計算を経て、損傷の発生も評価することができる。

具体的にテスト計算を行った結果を図4に示す[7]。ミラーの中央部に、時刻0sより強度が一定のレーザー光を照射したとして、損傷の時間発展の計算を行った。タイムステップごとに、各セルにお

ける二光子励起（および緩和）の確率を求め、乱数を用いて各セルの状態を評価した。同時に、タイムステップごとに回路方程式を解き、電流、電圧の分布を計算した。そしてその操作を繰り返し、現象の時間発展を解析した。



(図4) シミュレーションの結果のスナップショットの例。ミラー表面の電流、電圧の分布、各セルの状態等を示す。丸はレーザースポットを、白い四角は励起状態にあるセル、黒い四角は損傷されたセル、それ以外は初期状態にあるセルを示す。

4. 光学損傷のシミュレーション

パーコレーションの理論はスケールフリーであり、光学損傷がパーコレーションで説明できることが証明されれば、ミクロな原子過程がマクロな損傷を引き起こすことが説明できたことになる。

今後、ここで示した光学損傷のモデルを、理論および実験の結果によって確立し、光学材料の高耐力化、より良い特性をもつ光学材料の設計を行い、レーザー技術の進歩に貢献したい。

謝辞

この共同研究を行うにあたり、大阪大学レーザー科学研究センター、清水俊彦博士、ジャクリン・ガバイノ博士、メルビン・エンピゾ博士、ロン・ムーイ博士ほかのメンバーの方との議論、および産業技術総合研究所加藤進博士との議論に感謝します。

参考文献

- [1] A. Sasaki et al. Phys. Rev. Lett. 105, 075004 (2010).
- [2] A. Sasaki et al. Jpn. J. Appl. Phys. 55, 026101 (2016).
- [3] S. Kato et al. Opt. Mater. Exp. 6, 397 (2016).
- [4] S. Kato et al. Opt. Mater. 40, 10 (2015).
- [5] B. C. Stuart, et al. Phys. Rev. E53, 1749 (1996).
- [6] D. M. Simanovskii, et al. Phys. Rev. Lett. 91, 10761 (2003).
- [7] J. L. Gabayno, et al. Phys. Rev. E submitted.