

レーザー加工における初期過程の第一原理的解析

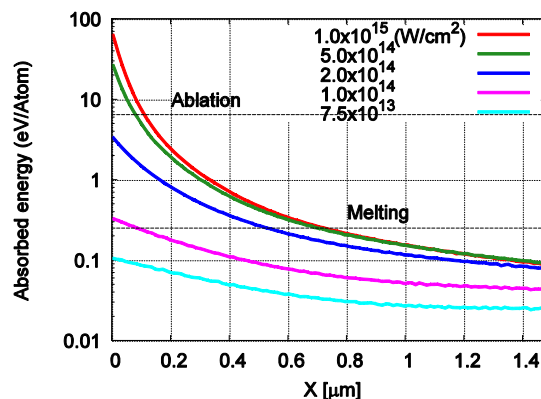
First-principles analysis of early process of laser-processing

筑波大数理科¹, 高等光技術研究所², Max Planck 研究所³, 原子力機構⁴, 筑波大計科セ⁵,○佐藤駿丞¹, 李畊旻², 篠原康³, 乙部智仁⁴, 矢花一浩^{1,5}University of Tsukuba¹, APRI², Max-Planck Institute³, JAEA⁴○Shunsuke Sato¹, Kyung-Min Lee², Yasushi Shinohara³, Tomohito Ootobe⁴, Kazuhiro Yabana¹

E-mail: sato@nucl.ph.tsukuba.ac.jp

我々のグループでは、時間依存密度汎関数理論(TD-DFT)に基づく第一原理計算により高強度超短パルス光と固体物質の相互作用を調べている。高強度な光は物質中に非線形な電子ダイナミクスを引き起こすため、高強度パルス光と物質の相互作用を記述するためには(i)物質中の光の伝搬(μm スケール)と(ii)物質中の電子ダイナミクス(nm スケール)を同時に扱う理論的枠組みが必要となる。このような問題を取り扱うために、我々は光と物質の相互作用に関するマルチスケール・シミュレーション法を開発してきた[1]。本研究では、このマルチスケール・シミュレーション法を用いて、高強度超短パルス光の固体 SiO_2 への照射シミュレーションを行い、レーザー加工の初期過程で起こる光から物質へのエネルギー移行について解析したので、その結果を報告する。

図には様々な光強度に対するパルス光照射シミュレーションによって得られた、光から物質へ移行したエネルギーの空間分布が示されている。(X = 0 μm が物質表面)。光の強度が強くなるにしたがって、パルス光が物質表面に落とすエネルギーが急激に増大している様子が図から確認できる。講演では、物質中に落とされたエネルギーの空間分布のパルス光強度依存性に加えて、パルス幅依存性についても併せて議論する予定である。



様々な強度を持つパルス光 (幅:10fs) から固体 SiO_2 へ移行したエネルギーの空間分布。X=0 μm が固体表面を表す。

[1] K. Yabana, et al, Phys. Rev. B 85, 045134 (2012).