# 金属における電子エントロピー誘起非熱的アブレーションのシミュレーション

## Simulations of Metal Non-Thermal Ablation Induced by Electronic Entropy

東大院理 [1]，東大物性研 [2]　○田中 悠太 [1]，常行 真司 [1,2]

Dept. of Phys., The Univ. of Tokyo[1], ISSP, The Univ. of Tokyo[2], ○Yuta Tanaka[1], Shinji Tsuneyuki[1,2]

E-mail: tanaka@cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp

固体表面に照射するレーザーのパルス幅を短くすることで、熱損傷領域の小さな加工のできた例が報告されている。これに関して近年、熱分布に従わない高エネルギー粒子[1]や融解の形跡がない物質[2]の噴出が、金属表面への超短パルスレーザーの照射で確認されている。これらの熱的機構では説明できない(非熱的)アブレーションの原因として、クーロン爆発[1]や価電子数の変化による電子圧力の効果[3]などが提案されているが、未だ結論は出ていない。このような非熱的アブレーションの理解が乏しい現状は、加工のシミュレーションにとって大きな障害である。

我々の研究目的は以下の二つである。一つ目は、金属における非熱的アブレーションのメカニズムを解明すること、もう一つは、アブレーション(加工)深さを定量的に予測できるシミュレーションモデルの構築である。計算対象として銅を用いた。本研究では、電子系が格子系とは異なる温度分布へ瞬間的に緩和すると仮定し、レーザー照射直後の非熱的過程を高温の電子系と低温の格子系として表現した(二温度モデル)。まず、非熱的アブレーションのメカニズムを明らかにするため、有限温度密度汎関数理論に基づく第一原理計算で自由エネルギーの体積、電子温度依存性を計算した。その結果、非熱的アブレーションが観測される電子温度程度で結晶が不安定になるという結果が得られた。我々は続く解析によって、その不安定性の原因は体積膨張によるバンドのフラット化から生じる電子エントロピーの利得によるものだと結論付けた。次に、上述の電子エントロピーの効果を含んだアブレーションのシミュレーションモデルを構築した後、連続体モデルを用いてアブレーション深さのフルエンス依存性を計算した。その結果、非熱的アブレーションが支配的に起こるアブレーション閾値程度の実験値も定量的に再現することに成功した(Fig.)。当日は、高温の電子温度における結晶の不安定性の原因とシミュレーションモデルの詳細に重点をおいて論じる予定である。

[1] Y. Miyasaka *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 075431 (2012). [2] M. Shaheen *et al.*, J. Appl. Phys. **114**, 083110 (2013). [3] V. Stegailov *et al.*, Molecular Phys. **114**, 509 (2016). [4] J. Nielsen *et al.*, Appl. Phys. A **103**, 447 (2011). [5] J. Colombier *et al.*, Phys. Rev. B **71**, 165405 (2005).

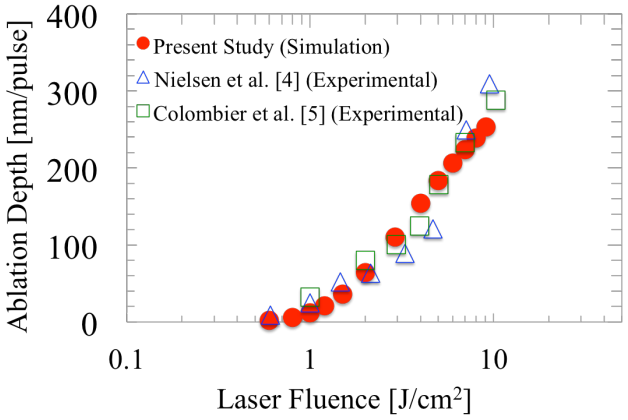


Fig. Dependence of ablation depth on laser fluence