金属におけるフェムト秒レーザーアブレーションの二温度モデル分子動力学計算

Two-temperature model molecular dynamics calculations of femtosecond laser ablation for metals

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

低フルエンスのフェムト秒(fs)レーザーを用いることで熱損傷の小さなレーザー加工が可能となる。アブレーション閾値フルエンス程度のfsレーザーを金属に照射することによって、高エネルギー粒子の放出[1]やナノメートル(nm)以下のアブレーション[2]が実験的に報告されているが、これらの物理機構は未だ明らかになっていない。今までに我々は、金属におけるfsレーザーアブレーションでは電子エントロピーの効果が支配的な役割を担っていると主張する「電子エントロピー誘起(EED)機構」を提案し、さらに、この機構を取り込んだ連続体モデル計算によって、低フルエンス領域のアブレーション深さの実験結果を定量的に再現できることを示してきた[3]。本研究の目的は、電子エントロピーの効果を取り込んだ分子動力学(MD)計算により、金属のfsレーザーアブレーションを原子スケールから理解する事とこの現象における電子エントロピーの寄与を議論する事である。

本計算では、MD計算のみでは考慮できない電子熱拡散等の効果を二温度モデルにより表現した。そして、電子エントロピーの効果を考慮しながらもエネルギー保存則を満たす我々の開発した計算手法に基づき、fsレーザーが照射された銅のMD計算を行った。その際、電子温度依存の原子間ポテンシャルを用いることで、励起状態における原子間力を表現した。MD計算の結果、アブレーション閾値フルエンス程度のfsレーザーを照射することで、実験で報告されているnm以下のアブレーションや高エネルギー粒子の放出が確認できた[図(b)]。一方、比較のために行った電子エントロピーの効果を無視したMD計算では、これらのアブレーションは起こらず、アブレーション閾値フルエンス程度で誘起されるアブレーションでは電子エントロピーの効果が支配的であることが分かった。

講演では、計算手法の正当性の議論、フルエンスに対する物理機構の変化の説明に加え、連続体モデルの計算結果[3]や実験結果との比較を行う。

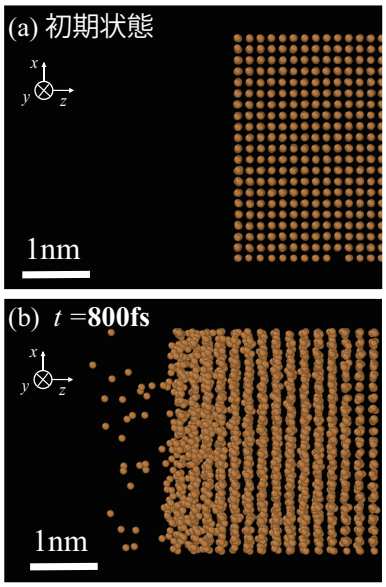


図: MD 計算の静止画。(a)初期状態、(b)アブレーション閾値フルエンス程度のレーザー照射後 800fsにおける原子配置。*x, y* 方向には周期境界条件を適用している。

[引用文献]
[1] M. Hashida *et al*., Phys. Rev. B **81**, 115442 (2010).
[2] M. Hashida *et al*., Appl. Surf. Sci. **197**, 862 (2002).
[3] Y. Tanaka and S. Tsuneyuki, Appl. Phys. Exp. **11**, 046701 (2018).

© 2019年 応用物理学会