レーザー加工過程の学理：マイクロ-マクロシミュレーションによる解析

Numerical Approaches for Laser Processing: Analysis by Micro-Macro Simulations

量研¹, 東大光量子² ○乙部智仁^{1,2}

QST KPSI¹, UT-PSC², °Tomohito Otobe^{1,2}

E-mail: otobe.tomohito@qst.go.jp

レーザー加工過程は光・電子相互作用（アト秒）から加工（ナノ秒以上）に至る幅広い時間領域に渡る現象である。このような多くの物理現象が関連する複雑な過程の理論研究もまた、一つの枠組みで対応し切れるものではなく、量子力学からニュートン力学、流体力学へと重要な物理量を渡し粗視化していく必要がある。

我々は多電子運動を第一原理から計算可能な時間依存密度汎関数法（TDDFT）と Maxwell 方程式を融合して解く SALMON を開発した [1]。SALMON を用いて物質表面での非線形光吸収の特徴を調べ、電子と空孔の温度は大きく違い、その違いは有効質量の違いと定性的に一致する事が分かった[2,3]。そこで、一般に利用されている 2 温度（電子・格子温度）モデルを 3 温度（電子・空孔・格子温度）モデルに拡張し Maxwell 方程式と融合させて計算し、シリコンの加工閾値がどの物理量と相関しているかを調べた。その結果、損傷確率 0% で定義される閾値は格子温度と励起電子放出に相関する事が示唆された[4]。一方、損傷確率 100% で定義される閾値は温度ではなくシリコンの結合エネルギー（2.3 eV/atom）を超えるエネルギー吸収が相関している事が分かった[5]。いずれの定義による実験に対しても 3 温度モデル + Maxwell 方程式アプローチは非常に良い一致を示している。

SALMON は非常に早い時間スケールに対し

ては非常に強力であるが、電子-電子が重要な場合は慎重に利用すべきである。そこで我々は電子-電子衝突も取り入れられる手法として、周期系での半古典 Vlasov 方程式の擬似粒子法プログラムを開発しアルミに適応した。まず我々の手法の信頼性の検証のため、電子-電子衝突を無視し SALMON の計算結果および実験と比較した。その結果、アルミの線形光応答と高強度レーザー励起過程のいずれも SALMON の結果と良い一致を示し、線形応答では実験とも一致することを確認する事ができた[6]。

以上のように、加工現象を量子力学の知見から積み上げマクロな結果解析にまで至る各手法を開発してきた。詳細とこれからの展望について講演にて紹介したい。

[1] M. Noda, et al, *Comput. Phys. Comm* **235**, 356 (2019)

[2] T. Otobe, T. Hayashi, and M. Nishikino, *Appl. Phys. Lett.* **111**, 171107 (2017)

[3] T. Otobe, *J. Appl. Phys.* **126**, 203101 (2019)

[4] P. Venkat and T. Otobe, *APEX* **15**, 041008 (2022)

[5] P. Venkat and T. Otobe, *Appl. Phys. A* **128**, 810 (2022)

[6] M. Tani, et al, *Phys. Rev. B* **104**, 075157 (2021)