

レーザーアブレーションにおける電子温度効果：分子動力学シミュレーション
Electron-temperature effect on laser ablation: molecular dynamics simulation

小林亮¹, 乙部智仁²

NItech.¹, QST²

E-mail: kobayashi.ryo@nitech.ac.jp

超短パルスレーザーを用いた材料表面ナノ加工は、従来の機械加工に比べて非常に少ない損傷で、硬度の高い材料でも微細構造加工を行うことができるために、多くの応用が期待される。種々の材料において加工を制御するためにはレーザー照射下の材料表面で起こる現象をより深く理解することが求められている。しかしながら入射レーザーと材料表面の間の非線形かつ非平衡の相互作用を実験的観察・解析のみから理解することは難しい。そのため、大規模分子動力学(MD)シミュレーションを用いてレーザー照射下の材料表面応答を調べるアプローチが盛んに行われている。しかしながら、MDで用いる原子間相互作用のほとんどはレーザー照射による電子温度を考慮していないため、レーザー照射下における材料応答を正確に記述できておらず、レーザーアブレーション挙動が妥当なものとなっているか疑問が残っている。そこで、本研究では、電子温度依存の原子間力場を用いたレーザーアブレーションのMDシミュレーションを行い、電子温度効果がレーザーアブレーション挙動にどのような影響を及ぼすかを調べることを目的とする。

シリコンを対象とし、Shokeen¹⁾らによって開発された電子温度依存型原子間力場を実装した。また、レーザーアブレーションの大規模MDを可能とするため、2温度モデルとMDを組み合わせ電子温度と格子温度をcoupleさせ、レーザー照射の反対側では無限に深い熱拡散領域を扱うことのできる無反射境界条件を実装した。

上記の独自開発したMDコードを用い、シリコンの原子間相互作用が電子温度依存する場合と依存しない場合の2つのケースでのレーザーアブレーションMDを実施し、シリコン表面のアブレーション挙動を調べた。その結果、次のことが分かった。i) 表面近傍では非常に電子温度が高まるため、相互作用変化に起因する著しい圧縮応力が発生する。ii) 一方で圧縮応力の反動で生じる引力応力は両方で大きな違いはなく、結果として生じるアブレーション挙動も大きな影響が見られない。iii) 表面近傍では昇華が起こり原子状での飛散が多く見られる。講演では手法と結果について詳細に議論する。

参考文献

- 1) L. Shokeen and P. K. Schelling, Appl. Phys. Lett. 97, 151907 (2010)