



Title	超短パルスレーザ照射による溶融・蒸発現象の分子動力学シミュレーション
Author(s)	福本, 一郎
Citation	大阪大学, 1999, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/41418
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	福 本 一 郎
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 1 4 6 3 6 号
学 位 授 与 年 月 日	平成11年 3 月 25 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科生産加工工学専攻
学 位 論 文 名	超短パルスレーザ照射による熔融・蒸発現象の分子動力学シミュレーション
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 宮 本 勇 (副査) 教 授 小林紘二郎 教 授 松 縄 朗 教 授 北 川 浩 助教授 大村 悦二

論 文 内 容 の 要 旨

短パルスレーザによる加工の多くは瞬間的な蒸発現象, いわゆるアブレーション現象を伴う。特に, ps 以下の短パルスレーザによる加工現象は, 時間的にも空間的にも計測が困難である。連続体モデルでは原子レベルの現象解析に限界がある。そこで本論文では, 分子動力学法を適用し, レーザ照射による熔融・蒸発現象を原子レベルで系統的に解析している。自由電子による熱伝導を補正しながら分子動力学計算を行う改良型分子動力学法を開発するとともに, 簡易なレーザ光吸収モデルを考案して分子動力学シミュレーションを可能にしている。以下に各章の概要を述べる。

第1章では, 研究の背景, 目的と意義を述べている。

第2章では, 原子配列モデルとレーザ光吸収モデル, 初期原子配列の作成法を述べ, 原子間距離, 熱平衡, 振動周期の点から初期原子配列の妥当性を確認している。

第3章では, 金属のための改良型分子動力学法について述べている。熱物性値の妥当性を確認し, 熱伝導論と比較できる範囲で解析解とよく一致することを示している。また, 超短パルス域ではレーザ光の内部吸収の影響が大きくなり, ダメージしきい値は $1/2$ 乗則で推定されるよりも大きくなることを示している。

第4章では, 熔融・蒸発過程を解析している。アニメーションによる視覚化によってまずそのプロセスを明らかにしている。レーザの照射開始から蒸発が始まるまでの遅れ時間がps オーダであること, 蒸発粒子は1個の原子からなるものがほとんどで, 残りの大部分を粒径1 nm 以下の粒子が占めること, 蒸発粒子の平均速度は数km/s 以上であることを示している。蒸発開始時には表面近傍は過熱状態となること, 蒸発中の沸点は文献値とほぼ等しくなるが, 融点はかなり上昇することも明らかにしている。さらに, ガウシアンビームを照射して, 金属では主に熔融原子が加工穴の周囲に堆積するが, シリコンでは蒸発原子が堆積すること, シリコンの創成面は粗く, 表面近傍に空孔が生成することを示している。

第5章では, レーザ衝撃現象を取り扱っている。レーザ照射により材料内に衝撃波が生成し, 縦波の速度で伝播すること, それに伴って刃状転位が生成し, 内部へ移動することを明らかにしている。衝撃波のピーク位置近傍では転位の移動速度が縦波の速度に達することがあること, 転位の生成と移動の駆動力は衝撃波のひずみエネルギーであること, 刃状転位近傍の応力分布は転位論と一致することを示している。

第6章では, 本研究の成果を総括している。

論文審査の結果の要旨

ps 以下の超短パルスレーザーによる精密微細加工で生じるアブレーション現象は観察が難しく、連続体モデルによる原子レベルの現象解析には限界がある。そこで本論文では、材料を原子の集合体として分子動力学法を適用し、レーザー照射による溶融・蒸発現象を系統的に解析している。自由電子による熱伝導を補正しながら分子動力学計算を行う改良型分子動力学法を開発するとともに、簡易なレーザー光吸収モデルを考案して分子動力学シミュレーションを可能にしている。これらは本研究の独創である。改良型分子動力学法については、熱物性値の妥当性を示し、熱伝導論と比較することによりその有用性を確かめている。シミュレーションによって得られた成果としては、まず溶融・蒸発過程をアニメーションによって明らかにし、レーザーの照射開始から蒸発が始まるまでの遅れ時間、蒸発粒子の粒径分布、蒸発粒子の平均速度、蒸発時の温度分布などを明らかにしている。さらに、穴あけ加工における表面創成プロセスを示すと同時に、金属とシリコンの相違を明らかにしている。材料の溶融・蒸発が材料内に及ぼす影響を特にレーザー衝撃現象に注目して解析し、衝撃波の速度、衝撃波の伝播に伴う刃状転位の生成と移動、それらに関わる衝撃波のひずみエネルギーの変化、転位の移動速度、刃状転位近傍の応力分布などを明らかにしている。

以上のように、本論文はシミュレーション方法に独創的な提案を行って、実験では観察が困難な超短パルスレーザーによる溶融・蒸発現象を原子レベルで明らかにしている。その成果は、レーザー加工と材料科学の発展に寄与するところが大きく、学術的にも工業的にも意義がある。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。