レーザー加工のシミュレーション*

Numerical Simulation for Laser Processing

砂原 淳**

Atsushi SUNAHARA

Key words laser processing, Two Temperature Model, radiation hydrodynamics, simulation, ablation

1. はじめに

レーザー照射による物質の加工は精密微細加工や溶接など、すでに多くの製造過程の現場で導入されている。レーザー光を物質に集光することで、局所的に大きなエネルギー密度状態を作り出すことが可能である。また、レーザー照射条件を適切に選択することによりさまざまな物質を加工することができる。その一方で、レーザー加工現象はいまだ物理的に十分理解されているわけではない。レーザー加工時のレーザー照射条件は経験則に頼る場合が多い。そこでレーザー加工に対する数値シミュレーションが可能になればレーザー加工現象をより深く理解することにつながり、レーザー加工の高精度化、条件設定の最適化において有益なツールとなり得る。本稿ではレーザー加工の数値シミュレーションの現状と課題を特に物理モデルの観点から述べ、シミュレーション例について紹介したい。

2. Two Temperature Model

レーザー光のパルス幅はフェムト秒からナノ秒、さらには連続光 (CW) に至るまで多岐にわたり、用途に応じて比較的容易に選択可能である。典型的なレーザー加工材料として、金属にレーザーを照射する場合を考えると、レーザー吸収から流体運動に至るまでのエネルギー緩和機構は図1に示すようになる。まず、フェルミ面近傍の金属固体内を自由に動くことが可能な電子がレーザー振動周波数に対応する振動エネルギーをレーザーから与えられ、電子-電子衝突および電子と格子振動衝突を経て Maxwell 分布に近づく緩和時間が τ_{Fe} であり、これは典型的には数 10 フェムト秒である。続いてピコ秒程度の時定数 τ_t で電子と格子振動 (フォノン) との散乱で緩和が生じる。それにより格子振動はエネルギーを受け取り、格子振動の温度が融点もしくは沸点を超えると物質は流体として運動を始める。流体の空間スケールの最小単位を金属の典型的なスキ

ン長である $0.01 \mu\text{m}$ として、典型的な音速を 10^6 cm/s とすると、流体が動く時間スケールはピコ秒のオーダーになる。そのため、フェムト秒レーザーを用いた加工では加熱時間が流体運動の時間スケールに比べて短い。この場合、物質の温度上昇を考える際に流体運動は無視できる。反対に 10 ピコ秒パルス以上のパルス幅のレーザーを照射した場合には、物質の加熱と流体運動が同時に生じ、物質の温度上昇を考える際に流体運動を考えることが重要になる。また、レーザー加工では物質を加熱するだけでなく、レーザー照射後、冷却し終わるまでの流体運動が重要であることを考えると、どのようなレーザーパルス幅のレーザーを選択するにしても物質の加熱の評価と流体運動の解析が重要になる。そのため、シミュレーションの基礎式として格子振動またはイオンと電子のそれぞれで熱輸送および熱緩和を考えるエネルギー式と流体運動を記述する運動の式、連続体を表す連続の式からなる一流体二温度 (Two Temperature Model: TTM) モデル¹⁾が広く使われる。本稿で示す計算例も TTM を用いている。

また、流体シミュレーションを行う際には流体现象が圧縮性か非圧縮性かを考えることが重要である。流体運動において、密度が変化する場合は圧縮性流れであり、密度が変化しない場合は非圧縮性流れである。レーザー加工において、固体物質にレーザーが照射され、融解するまでは密度変化は無視できるので非圧縮流れと見なせるが、沸点を超えて気化する際に密度は急激に変化し、気化する物質の運動は圧縮性流れと見なせる。また、現実のレーザー加工

図1 レーザーからエネルギーを得た金属固体中の電子が熱緩和する時間スケールと典型的な流体運動の時間スケール

*原稿受付 平成 26 年 7 月 22 日

**公益財団法人レーザー技術総合研究所 (大阪府吹田市山田丘 2-6)

図2 金属のレーザー加工時の典型的な相変化とエネルギー輸送

はほとんど大気中で行われるため、加工される物質は固体や液体であったとしても、周りの大気は気体であり、圧縮性が高い。このようにレーザー加工により生じる流体現象は図2に示すように圧縮性流れと非圧縮流れが同居する流れとなる。今日、圧縮性流れ、非圧縮流れのそれぞれに適した数多くの数値計算法が開発されているが、本稿では矢部等によって開発された、非圧縮性と圧縮性流れの統一解法であるCCUP法（CIP-Combined Unified Procedure）²⁾に基づいて流体部分を計算することとする。また、図2に示されているように、レーザー光のエネルギーはレーザー加熱された領域からさらに周囲へ種々の機構により熱輸送される。レーザー加工において考えられる熱輸送機構としてはレーザー光自身のエネルギー伝播、レーザー吸収、イオンまたは格子振動による熱伝導、電子熱伝導、輻射による熱輸送、電子とイオンまたは格子振動との間の熱緩和が考えられる。これらの機構を正確に見積もることが精度のよい数値シミュレーションには重要となる。本稿ではまず、流体の基礎式および流体計算法について説明し、続いて、レーザー光伝播から各種熱輸送機構に従って熱が運ばれ、熱緩和をして、最終的に流体運動に至るまでの物理モデルを説明する。また、物質の圧力や熱容量を与える状態方程式についても重要性を説明する。また、状態方程式や輻射輸送が重要となる流れについて、シミュレーション例を紹介する。

3. TTMの基礎方程式

TTMは連続の式、運動の式、エネルギー式で次のように表される¹⁾。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla (p_i + p_e) + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} \quad (2)$$

$$\rho c_{vi} \left\{ \frac{\partial T_i}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) T_i \right\} = -p_{thi} \nabla \cdot \mathbf{v} - Q_{ei} - \nabla \cdot \mathbf{q}_i \quad (3)$$

$$\rho c_{ve} \left\{ \frac{\partial T_e}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) T_e \right\} = -p_{the} \nabla \cdot \mathbf{v} + Q_{ei}$$

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_e + S_L + S_R \quad (4)$$

ここで ρ は質量密度、 $\mathbf{v}$ は速度、 T_i はイオンまたは格子振動の温度、 T_e は電子温度である。 q_i 、 q_e はそれぞれイオンの熱伝導フラックス、電子熱伝導フラックスである。 μ は粘性係数である。(1)～(4)式に加え、物質の状態方程式から圧力 $p_i = p_i(\rho, T_i)$ 、 $p_e = p_e(\rho, T_e)$ 、 $p_{thi} = T_i(\partial p_i / \partial T_i)_\rho$ 、 $p_{the} = T_e(\partial p_e / \partial T_e)_\rho$ 、およびイオンと電子の比熱 $c_{vi} = (\partial E_i / \partial T_i)_\rho$ 、 $c_{ve} = (\partial E_e / \partial T_e)_\rho$ を与える。また、エネルギー式の右辺には、格子振動またはイオンの熱伝導項 $-\nabla \cdot \mathbf{q}_i = \nabla \cdot (\kappa_i \nabla T_i)$ 、電子熱伝導項 $-\nabla \cdot \mathbf{q}_e = \nabla \cdot (\kappa_e \nabla T_e)$ 、電子と格子振動またはイオンとの熱緩和 Q_{ei} があり、電子のエネルギー式にはレーザー加熱項 S_L 、輻射加熱項 S_R がある。フェムト秒レーザーなど熱緩和と同等の時間スケールをもつ加熱を考える場合にはフェルミ面付近でレーザーにより励起された電子の伝播を考慮し、電子熱伝導項は

$$\tau_{Fe} \frac{\partial \mathbf{q}_e}{\partial t} + \mathbf{q}_e = -\kappa_e \nabla T_e \quad (5)$$

とする³⁾。さらに電子から格子振動またはイオンへの熱緩和 Q_{ei} は G を係数として

$$Q_{ei} = G(T_i - T_e) \quad (6)$$

と表される。この係数はさまざまな物質において議論されている⁴⁾が、電子-格子振動、電子-イオンの衝突周波数にもとづいて幅広い領域を統一的にモデルすることが可能である⁵⁾。以上のように、TTMは流体運動の支配方程式と、エネルギーの流れに関する項から成り立っている。式(4)において輻射加熱項は式(7)および(8)に示す輻射輸送方程式⁶⁾

$$\frac{\partial E_\nu}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_\nu = 4\pi\eta_\nu - c\chi_\nu E_\nu \quad (7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{F}_\nu}{\partial t} + \nabla \cdot (c^2 \mathbf{f}_\nu E_\nu) = -c\chi_\nu \mathbf{F}_\nu \quad (8)$$

を解く。ここで E_ν はエネルギー $h\nu$ の光子のエネルギー密度であり、 $\mathbf{F}_\nu$ はエネルギー $h\nu$ の光子のエネルギーフラックスを表す。 h はプランク定数であり、 c は光速、 $\mathbf{f}_\nu$ は輻射場の非等方性を表すEddingtonファクターである。 η_ν 、 χ_ν はエネルギー $h\nu$ の光子に対する物質の放射率、吸収率である。輻射輸送方程式を解くことで輻射加熱項を次のように求めることができる。

$$S_R = -\int_0^\infty (4\pi\eta_\nu - c\chi_\nu E_\nu) d\nu \quad (9)$$

レーザー光の伝播計算は大別するとMaxwell方程式を直接または近似的に解くものと、光線近似、すなわち、レーザー光を粒子と考えて軌道を求めるやり方の2通りがあるが、ここでは光線近似を採用する。光線近似ではレーザー光の波としての性質、すなわち、波としての干渉や焦点近傍の電場分布が扱えないが、Maxwell分布を解く場合に比べれば計算負荷が少なくすむ。光線の軌道 $\mathbf{x}$ は屈折率を n として

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -\frac{c^2}{2} \nabla (n^2) \quad (10)$$

と表すことができる。これをそれぞれの光線について解き、軌道にそって単位長さ ds あたりの吸収は光線強度を I 、単位長さあたりのレーザ吸収率を k として

$$\frac{dI}{ds} = -kI \quad (11)$$

で求めることができる。これにより、おのおのの計算格子ごとに各光線の吸収を足し上げて、 S_L を計算する。

4. 流体の数値計算法

本稿では CCUP スキーム²⁾を用いて流体を解くことにする。先述したように固体が加熱されて気化する過程において非圧縮性と圧縮性流体が共存するため、両者を統一して計算可能な CCUP 法はレーザ加工のシミュレーションに適している。すでに CCUP 法については多くの文献で紹介されているため、ここでは解法と計算精度向上のためのポイントを簡潔に記述するにとどめる。圧力を密度と温度の関数と見なす場合、TMM では時間 Δt の間の密度、温度の変化による圧力変化 Δp を連続の式、エネルギー式から時刻 n の係数と時刻 $n+1$ の変数を用いて次のように求めることができる。

$$\Delta p = \Delta(p_i + p_e) = \left(\frac{\partial p_i}{\partial \rho}\right)_{T_i} \Delta \rho + \left(\frac{\partial p_i}{\partial T_i}\right)_{\rho} \Delta T_i + \left(\frac{\partial p_e}{\partial \rho}\right)_{T_e} \Delta \rho + \left(\frac{\partial p_e}{\partial T_e}\right)_{\rho} \Delta T_e \quad (12)$$

ここで $\Delta \rho$ 、 ΔT_i 、 ΔT_e はそれぞれ

$$\Delta \rho = -\rho^n (\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} \Delta t \quad (13)$$

$$\Delta T_i = -\left(\frac{p_{thi}}{\rho c_{vi}}\right)^n (\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} \Delta t \quad (14)$$

$$\Delta T_e = -\left(\frac{p_{the}}{\rho c_{ve}}\right)^n (\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} \Delta t \quad (15)$$

式 (13)～(15) に示されているように、密度変化、イオンおよび電子の温度変化のそれぞれの項が $(\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} \Delta t$ に比例する形で表される。ゆえに圧力変化 Δp は $\Delta p = (\text{係数})^n (\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} \Delta t$ で表される。これは連続の式とエネルギー式を連立させたものであり、係数部分は時刻 n における状態方程式より求めることができる。次に運動の式 (2) を用いて $(\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1}$ を求める。式 (2) より時刻 n から時刻 $n+1$ への速度 $\mathbf{v}$ の時間発展は

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n - \frac{1}{\rho} \nabla (p_i + p_e) \Delta t \quad (16)$$

と書くことができ、両辺に対して発散をとると、

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{v}^n - \nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla (p_i + p_e) \Delta t \quad (17)$$

となる。式 (17) を式 (13)～(15) に代入して $(\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1}$ を消去すると最終的に連続の式、運動の式、エネルギー式を連立した圧力に関する拡散方程式に帰着する。これにより圧力が求まると、運動の式を用いて速度が求まり、連続の式とエネルギー式を用いて密度、温度の時間発展を解くことができる。ここまでは流体の非移流部分、すなわち、ある流体要素に着目したラグランジュ微分における変数 f の時間変化 (Df/Dt) であるので、最後に

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) f \quad (18)$$

の関係を用いて計算格子ごとの変数の時間変化 $(\partial f/\partial t)$ を求める。

次に計算精度向上について簡単に述べる。以上に述べた CCUP 法は、式 (13)～(15) に示されているように、変数の時間変化が時刻 n の係数を用いて線形化されているため、 Δt が大きくなると正しい解からのずれが大きくなる。これを回避するためにいくつか改良を試みる。一つは差分式の改良である。オリジナルの CCUP では式 (13)～(15) の差分において $(\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1}$ として、係数は時刻 n の値を用いている。これは速度の空間変化に比べて係数である密度や温度部分の変動が小さいことを仮定している。しかし、現実には圧縮性流体部分において密度変化は速度の空間変化に比べて必ずしも小さくない。そこで式 (11)～(13) において、

$$\Delta \rho / \Delta t = -\rho^n (\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} - \Delta \rho (\nabla \cdot \mathbf{v})^n \quad (19)$$

$$\Delta T_i / \Delta t = -\left(\frac{p_{thi}}{\rho c_{vi}}\right)^n (\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} - \Delta \left(\frac{p_{thi}}{\rho c_{vi}}\right) (\nabla \cdot \mathbf{v})^n \quad (20)$$

$$\Delta T_e / \Delta t = -\left(\frac{p_{the}}{\rho c_{ve}}\right)^n (\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1} - \Delta \left(\frac{p_{the}}{\rho c_{ve}}\right) (\nabla \cdot \mathbf{v})^n \quad (21)$$

とした差分式を用いることにする。この改良により解くべき計算式は複雑になるが、差分式の精度は向上し、その結果として密度や温度などの正值性が向上する。また、もう一つの改良点は式 (15) で速度の発散をとる際に速度の定義点が Δt の間で移動する、すなわち (2 点間の速度差)/(2 点間の距離) を行う際に 2 点間の距離が Δt 内で変化するということである。言い換えると時刻 n の $(\nabla \cdot \mathbf{v})^n$ と時刻 $n+1$ の $(\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1}$ は異なる。しかしながら、時刻 n の段階では時刻 n の $(\nabla \cdot \mathbf{v})^n$ しか分かっておらず、時刻 $n+1$ の $(\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1}$ は $\mathbf{v}^{n+1}$ を解いた後でないとわからない。これを解決するために時刻 $n+1$ の $(\nabla \cdot \mathbf{v})^{n+1}$ を予測しながら非移流項の計算を繰り返し実行する。

5. 状態方程式

次に状態方程式について述べる。すでに述べたように流体計算時には $(\partial p/\partial \rho)_T$ や $(\partial p/\partial T)_\rho$ など圧力の密度や温度に関する微係数、および c_{vi} 、 c_{ve} といった比熱が必要であり、これらは物質の状態方程式モデルから与えられる。固体で室温付近であれば、さまざまな物質に対して圧力や熱容量など、物性データが実測されていることが多いが、数千度以上になると実測値がない場合がほとんどである。一方、気化したガスがさらに高温に加熱され、高温・低密度プラズマになると、プラズマモデルが使用できる。よって、一番未知、あるいはモデリングが困難な領域は室温よりも高温の固体から比較的低温のプラズマ領域であり、いわゆる Warm Dense Matter (WDM) と呼ばれる領域である。この WDM における状態方程式モデルの改良、開発は現在も続けられている。ここでは改良の一例として、図 3 (a) に状態方程式モデルとして従来から広く使われ

図3 鉄の圧力の密度・温度依存性. (a) QEOS モデル (b) Thomas Fermi Correction モデルに基づくモデル

てきたトーマスフェルミ (TF) モデルをベースとした Quotidian equation state (QEOS) モデル⁷⁾で計算された鉄の状態方程式 $p(\rho, T)$, 図3 (b) に電子相関における量子効果を含んだトーマスフェルミコレクション (TFC) モデルをベースに計算された場合⁸⁾を示す. 図3 (a) と (b) の比較から, 固体密度から低密度側において, 温度が低いほど圧力の違いが大きくなることが分かる. 図3 (a) に示した QEOS モデルでは TF モデルをベースに bonding correction 項を導入して現実の物質の状態方程式を与えるように補正をするが, 現実には完全に補正しきれないことが多く, 固体密度付近で大きな精度の低下を招く. 電子相関をより正確に扱うことで, WDM 領域付近のモデリングに大きく差が出ることが分かる. また, 固体付近では電子系の他に格子系の状態方程式モデル, さらに温度に依存しないコールド曲線と呼ばれるファクターも重要になる. 現状では状態方程式の扱いとして, 固体で室温付近では実測データを用い, 電離してプラズマになれば, TF または TFC モデルをベースにした状態方程式に遷移するなど, さまざまな領域に利用可能なモデルをつなぎ合わせて連続的な状態方程式を得るというのが現実的な最良の策となっている.

6. レーザー吸収モデル

次にレーザー加工において重要なレーザー加熱項の計算について記述する. 金属にレーザーを照射すると照射された表面からスキン長程度でレーザーの電場が侵入し, 高周波の電流によるジュール加熱で物質は加熱される. その際, 加熱を定量的に評価するためには導電率が必要になる. しかし, 物質により導電率は異なり, 温度や密度の状態によっても導電率は大きく変化する. いわゆるレーザー加熱項はシミュレーション全体の計算精度に関わる重要な項であるが, 物質の全ての状態を網羅するモデルはない. そこで, 1) 光の反射率または吸収率の実測データを用いる, 2) 導電率のデータを用いる, などがレーザー溶接などの計算では主流であるが, レーザー強度が高い場合な

ど, 実測データがそろわない場合が多い. そこでレーザー吸収モデルについて述べる. 金属固体では導電率を決めているのは金属内の自由電子が格子振動によって散乱される電子-格子振動散乱 ν_{ep} である. また, 加熱され, プラズマ化すると電子-イオンとの散乱 ν_{ei} が電子を支配的に散乱する. これらの散乱過程による逆制動放射過程によりレーザー光は吸収される. プラズマの場合, 単位長さあたりの逆制動放射による吸収率 K_i ⁹⁾ はイオン密度を $n_i \text{ cm}^{-3}$, 電子密度を $n_e \text{ cm}^{-3}$, 電離度の2乗平均を Z^2 として具体的な数字を代入すると

$$K_i = 1.2683 \times 10^{-37} Z^2 \lambda^3 T_e^{-0.5} n_i n_e [1 - \exp(-h\nu/k_B T)] \quad (22)$$

となる. ここで $h\nu$ はレーザーの光子エネルギー, k_B はボルツマン定数, λ はレーザー波長で μm 単位, T_e は電子温度で eV 単位である. 金属の場合は自由電子があるため, 散乱する相手を考えることでレーザー吸収の定量評価はある程度できる. しかし, 絶縁体や気体にレーザーを照射するような場合は自由電子がないため, 逆制動放射吸収以前に最初の自由電子の生成を考える必要がある. 例えば気体中にレーザーを照射してプラズマを生成するレーザーブレイクダウンと呼ばれる手法が注目されているが, 多光子吸収過程による自由電子の生成を評価することが必要である. いったん, 自由電子ができてしまえば, レーザー電場によりエネルギーを得た自由電子がまわりの原子に衝突して衝突電離で多くの電子を生成するため, 逆制動放射過程にすみやかに移行すると考えられる. 図2に示したように実際のレーザー加工では大気中で物質にレーザー照射される場合が多く, 金属と気体が接した状況にある. レーザー強度が低いうちはレーザーと金属の相互作用を考えるだけでよいが, レーザー強度が高くなってくると気体の影響を考える必要がでてくる. レーザー強度を上げようとする, 雰囲気ガスでブレイクダウンが生じ, ターゲットまでレーザーが届かない可能性もある. 同様に, 金属蒸気が発生する場合でもレーザーは金属蒸気の影響を受ける. このため, 蒸気によるレーザー吸収を考える必要がある.

7. スズ平板へのレーザ照射

シミュレーションの例として図4に示すように厚さ $20\text{ }\mu\text{m}$ のスズ薄膜に波長 $1.06\text{ }\mu\text{m}$ 、レーザを強度 $1\times 10^{11}\text{ W/cm}^2$ で照射する場合のスズの密度と流体速度の時間変化を図5(a)~(d)に示す。レーザの時間波形はフラットトップであり、時刻 10 ns を中心に 10 ns 照射される。図5でレーザは右からスズ平板に照射される。図5(a)ではレーザ照射開始直後であり、スズの固体に衝撃波の伝播による圧縮が見られる。一方、アブレーションにより低密度に膨張している部分がある。図5(b)の時刻 10 ns でレーザピークでは衝撃波が厚さ $20\text{ }\mu\text{m}$ のスズを通り抜ける直前である。面白いのは図5(c)の時刻 50 ns で、衝撃波が裏面を抜けて、スズの裏面部分が本体から分離して後方に飛翔することである。分離した飛翔体とバルクのスズ固体の裏面との間は低密度のスズが広がっている。これは剥離 (spallation) を示しており、衝撃波がスズの裏面を抜ける際に衝撃波の波面が速度が大きく、衝撃波波面の後方では速度が小さいため、裏面部分が先行して飛んでいく。一方、密度の低下した比較的低温のスズは気体・液体の混合状態に入るために音速が比較的小さく、後方部分は先行する飛翔体に追いつくことができず、ギャップが埋まらない。しかし、さらに時間が経つと

図5(d)に時刻 100 ns の密度、速度分布を示すようにバルクがアブレーション圧力により加速され、先行していた飛翔体にスズバルクが追いついている。このように金属固体のスズにナノ秒レーザを照射するだけで複雑なダイナミクスを見ることができる。これらのダイナミクスは状態方程式の精度に依存する。ここに示したように剥離などの現象は気体・液体混合領域を扱うことのできる状態方程式を用いて初めて計算できるものであり、レーザ加工シ

図4 計算条件. スズターゲットにレーザを照射する.

図5 スズの密度、流速の時間発展. (a) 時刻 5 ns (レーザ照射開始) (b) 時刻 10 ns (レーザピーク), (c) 時刻 50 ns , (d) 時刻 100 ns . Position の原点は初期ターゲット裏面である.

図6. 計算条件. 窒素雰囲気中でアルミ平板にレーザーを照射する.

シミュレーションにおける状態方程式モデルの精度の重要性が示されている。

8. 雰囲気ガスへの輻射の影響

次の計算例として、レーザー加工を行う際に、まわりにあるガスの影響を考える。今、図6に示すように窒素雰囲気中アルミの平板を波長 $1.05\mu\text{m}$ 、強度 $I_L = 8 \times 10^9 \text{ W/cm}^2$ のレーザーで 17.5 ns の間、照射する。窒素の初期の気圧は 10 kPa である。このときアルミ平板はアブレーションによって表面が噴き出し、窒素雰囲気ガスを衝撃波が伝播する。この衝撃波の伝播により加熱された窒素気体は電離し、レーザー光を吸収する。続いてこのレーザー吸収が衝撃波を駆動し、レーザーデトネーションが生じる。ここでレーザー加工の見地から注目したいのは加熱されたアルミからの輻射が周りの窒素気体（プラズマ）に与える影響である。輻射の効果を比較するために図7(a)に $0 \sim 300 \text{ eV}$ の帯域で輻射輸送を計算したとき、図7(b)に $0 \sim 100 \text{ eV}$ までの帯域で輻射輸送を計算したときの電子密度分布の時間発展を比較する。ここでは遮蔽水素様モデル¹⁰⁾によりアルミおよび窒素プラズマからの輻射の放射率 η_ν 、吸収率 χ_ν を計算した。図7(a)と図7(b)の両者を比較すると、輻射のエネルギー帯域の違いによって衝撃波の伝播速度が異なり、その結果、電子密度分布の時間発展が異なっている。このことはレーザー照射されたアルミからの輻射によって、周りの雰囲気気体が影響を受けることを表している。また、図7(a)と(b)共に雰囲気ガスが電離すると、レーザー光が加工したい物質に照射される前に雰囲気ガスまたはターゲット自身のアブレーション気体により吸収されており、雰囲気ガスがターゲットへのレーザー照射を遮ってしまう可能性を示している。レーザー加工における輻射の影響をより正確に評価するために、目下、輻射の放射率、吸収率データの精度向上を図っているところである。

9. ま と め

レーザー加工のシミュレーションについて主に物理モデルを中心に記述した。また、状態方程式と輻射過程が特に重要になる場合の計算例を示した。レーザー加工はレーザー条件を比較的容易に変化させることができ、さまざまな

図7 窒素雰囲気中の電子密度の時間変化における計算輻射帯域依存性。(a) $h\nu=0 \sim 300 \text{ eV}$. (b) $h\nu=0 \sim 100 \text{ eV}$.

加熱条件を比較的容易に得ることができる。また、加工用途も多岐にわたっており、対象とする材料も多種多様である。このため、物性データが限られた密度、温度範囲でしか理解されていない材料も多く、実際の加工シミュレーションを行う際にはまず物性データやモデルを描えるところから始めなければならない。しかしながら、物性データベースや物理モデルは年々進化しており、レーザー加工シミュレーションが実際に使えるものになりつつある。また、本稿では物理モデルに着目したため、固体や流体としての数値計算法や多次元計算例についてはほとんどを割愛した。実際のレーザー加工のほとんどは多次元性が重要であり、これらの数値計算法もまた物理モデルと並び重要であることは明らかである。物理モデルと数値計算法の双方の進化により、レーザー加工シミュレーションがさらに精度を高め、実用的なレベルに発展していくことを確信している。

謝 辞

本論文で示した計算コードの開発や解析結果についての一部はNEDO 戦略的省エネルギー技術革新プログラム「高効率 LPP 法 EUV 光源の実証開発」(事業番号 13401019-0)、大阪大学レーザーエネルギー学共同研究「アブレーションによるブルームの発生と膨張のシミュレーション解析」(課題 ID: 2014B2-41)、「大気及び水中の金属アブレーション」(課題 ID: 2014B1-20)、科研費(基盤 C)「高速点火レーザー核融合における高速電子の発生と輸送の物理的制御」(課題 ID: 13207404)、科研費(挑戦的萌芽研究)「レーザープラズマ生成初期の構造形成のモデル化と EUV 光源の高効率励起の機構解明」(課題 ID: 14522596)の支援をそれぞれ受けました。ここに謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) S.I. Anisimov, B.L. Kapeliovich and T.L. Perelman: Electron Emission from Metal Surface Exposed to Ultrashort Laser Pulses, Sov. Phys. JETP, **39** (1974) 375.
- 2) T. Yabe and P. Wang: Unified Numerical Procedure for Compressible and Incompressible Fluid, J. Phys. Soc. Jpn., **60** (1991) 2105.
- 3) M.A. Al-Nimr and V.S. Arpaci: The Thermal Behavior of Thin Metal Films in the Hyperbolic Two Step Model, International Journal of Heat and Mass Transfer, **43** (2000) 2021.
- 4) T.Q. Qiu and C.L. Tien: Heat Transfer Mechanisms During Short-Pulse Laser Heating of Metals, J. Heat Transfer, **115** (1993) 835.
- 5) K. Eidmann, J. Meyer-ter-Vehn, T. Schlegel and S. Huller: Hydrodynamic Simulation of Subpicosecond Laser Interaction with Solid-density Matter, Phys. Rev. E, **62** (2000) 1202.
- 6) J. Castor: Radiation Hydrodynamics, Cambridge University Press, (2004).
- 7) R.M. More, K.H. Warren, D.A. Young and G.B. Zimmerman: A New Quotidian Equation State QEOS for Hot Dense Matter, Phys. Fluids, **31** (1988) 3059.
- 8) S. Elizer, A. Ghatak and H. Hora: Fundamentals of Equation of State, World Scientific Pub. Co. Inc., (2002).
- 9) S. Amoroso: Modeling of UV Pulsed-laser Ablation of Metallic Targets, Appl. Phys. A, **69** (1999) 323.
- 10) D. Saltzman: Atomic Physics in Hot Plasmas, Oxford University Press, (1998).

砂原 淳

1997 年大阪大学大学院工学研究科電磁エネルギー工学専攻博士後期課程修了。博士（工学）。専門はレーザー核融合や極端紫外光源プラズマなど、レーザー生成プラズマの理論・数値シミュレーション。現在、公益財団法人レーザー技術総合研究所理論・シミュレーションチーム副主任研究員。