

CIP 法によるレーザー誘起衝撃波伝播解析

Numerical study of the laser-induced shock propagation with the CIP method

内海 隆行, 日本原研, 〒572-0019 寝屋川市三井南町 25-1, E-mail: utsumi@popsvr.tokai.jaeri.go.jp

佐々木 明, 日本原研, 〒572-0019 寝屋川市三井南町 25-1, E-mail: sasaki@apr.jaeri.go.jp

Takayuki Utsumi, JAERI, 25-1 Miiminami-machi, Neyagawa city, Osaka-fu 572-0019, Japan

Akira Sasaki, JAERI, 25-1 Miiminami-machi, Neyagawa city, Osaka-fu 572-0019, Japan

The formation and propagation of the shocks induced by laser irradiation onto the solids are examined in numerical 2D hydrodynamic simulations using the CIP method. The results revealed that the flat thin layer representing shock wave were created by laser absorption and traveled for the time being by the almost same form in the solids. The results would play a role in helping us understand the dynamic structures of materials by optical pump x-ray diffraction probe measurements.

1. 概要

レーザー分野の超短パルス発生技術の進歩により、ピコ秒、フェムト秒といった短時間領域での物質の高速過渡現象に関わる動的物性研究が急速に発展している。日本原研においても先端的光量子光源の開発とその応用研究の一環として超短パルス・高ピーク出力で繰り返し動作可能な chirped-pulse amplification (CPA) 方式レーザー (Ti: Sapphire レーザー: 100 テラワット (TW) 20 フェムト秒 (fs) 10Hz) などが開発された。こういった超短パルス・高ピーク出力レーザー光をポンプ光と超短 X 線パルスプローブ光生成に分歧し、ポンプパルスにより試料物質中に誘起した物性変化を X 線回折像として取得する図 1 に示すような極短時間分解 X 線回折システムを構築することができる⁽¹⁾。

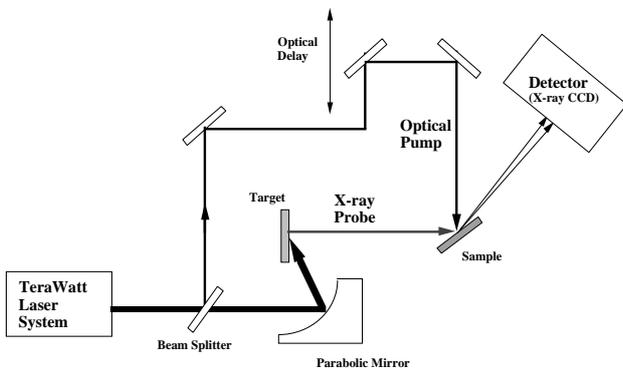


Fig.1 Schematic of X-ray diffractometry.

図 1 のシステムでは、レーザーシステムからの光はビームスプリッターでポンプ光とプローブ光を生成するビームに分歧される。後者は固体ターゲット上に集光され、高強度パルスレーザー照射により生成される高速電子が固体ターゲットに侵入し原子と相互作用することにより生じる特性 X 線、制動放射 X 線⁽²⁾であるプローブ光を発生させる。ポンプ光は撮像タイミングの調節のための光学路遅延を行った後に試料物質に照射される。超短パルスレーザーを用いることで、高輝度な極短 X 線パルスを発生させることが可能となる。また、固体ターゲット物質を変えることにより、特性 X 線である K 線の波長を選択することができる。この固体ターゲットへのレーザー照射による X 線発生過程を模式的に図 2 に示す。

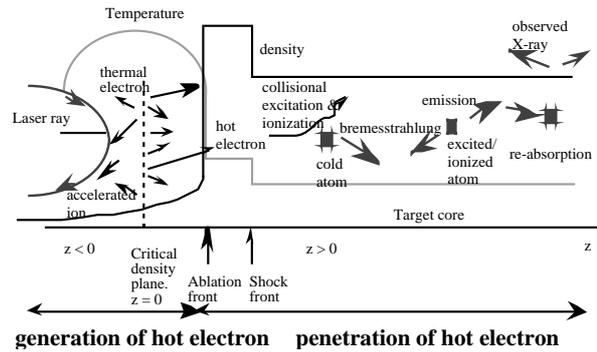


Fig.2 Schematic diagram of the laser-matter interaction.

図には温度、密度のプロファイルとその位置関係を概略的に表示した。まず、プリパルスまたは増幅された自然放射 (ASE) に起因するプリパルスにより固体ターゲット表面近傍に逆制動放射、真空加熱などによりプラズマが生成される。次に、入射角で固体表面に照射されたメインパルスのレーザー光は、レーザー生成プラズマ中を伝搬し、屈折率がゼロになる臨界密度面までに共鳴吸収などのメカニズムによりエネルギーが吸収される。吸収エネルギーは主として電子の運動エネルギーに変換され、ほぼ平面的に一樣で Maxwell 分布した高速電子 (hot electron) が生成されると考えられている。Z<0 方向に放射された高速電子もこれによって生じる空間荷電電場の影響によりやがては固体ターゲット内に引き戻され、Z>0 方向に放射された高速電子と同様に固体ターゲット内に侵入する。このようにして固体に侵入した高速電子は静止した原子と相互作用し、原子の励起・イオン化、および制動放射により運動エネルギーを失う。励起された原子は自然放射などにより光を放出して基底状態に戻り、放射された光はさらに固体内の原子・電子による再吸収、散乱などの相互作用を経て外部に放射されることとなる。

超短・高ピークパルスレーザーの固体ターゲット照射による超短 X 線パルスプローブ光生成や、ポンプ光による試料物質への衝撃などの光量子—物質相互作用過程は、マクロスコピックな連続体の運動として記述することができるが、固体ターゲットへの超短時間でのエネルギー注入に伴って生じる固・液・気相の多相流解析には、計算手法と、物質の状態方程式 (EOS) レーザー光と物質との相互作用と物質内の熱輸送の物質特性値が重要となる。

計算手法としては、矢部⁽³⁾によって提案された3次補間擬似粒子法(CIP:Cubic-Interpolated Propagation)とC-CUP(CIP-Combined Unified Procedure)法が固・液・気各相界面での大きな密度変化を精度良く捉え、圧縮性・非圧縮性流体の統一解法に有効な計算手法と考えられる。筆者らはこれまで、CIP法を異なる2種類の物質に対して適用できるように拡張し、多相・多成分の連続体が存在する系に適用可能なコード⁽⁴⁾を開発した。さらに、EOSや熱輸送モデルと物質特性値を本コードに組み込み、固体ターゲット照射に伴う熱流動現象を解析してきた⁽⁵⁾。

この極短時間分解X線回折システムを用いて、例えば、試料中にポンプ光で衝撃波を発生させることによりX線回折像⁽¹⁾することができる。これらは超高速現象であるために、実験の準備、X線回折像解析には数値シミュレーションが重要な要件となる。但し、X線回折像解析からは、結晶格子間隔の動的変化が計測されるが、これを連続体運動方程式でモデル化した場合には密度変化に対応させることができるものとする。本報告では、CIP法とC-CUP法に基づき開発したコードでポンプレーザーパルス光により試料物質中に発生するレーザー誘起衝撃波を解析した結果を記述する。

2. 支配方程式

系内に多相・多成分の流体が存在する場合、各成分の速度、圧力及び温度が局所的に平衡状態で同一とし、流体の内部エネルギーは各成分の内部エネルギーの和で表されると仮定する。この時、空間平均化された質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式及び各成分の質量保存式、存在率を記述する密度関数式は以下のとおり与えられる。

$$\frac{d}{dt} \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = -\rho \sum_i \rho_i \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt} \rho \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} = -\nabla p + \rho \mathbf{u} + F_{sa} + F_{ep} + \mathbf{g} \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt} \rho E + \rho E \nabla \cdot \mathbf{u} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{T} + \dot{Q} \quad (3)$$

$$\frac{d}{dt} \rho_i + \rho_i \nabla \cdot \mathbf{u} = -\rho_i \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (4)$$

$$\frac{d}{dt} \rho_i + \rho_i \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5)$$

$$\rho_i = \rho_i \rho_i, \quad E = \sum_i E_i \rho_i, \quad \rho_i = 1 \quad (6)$$

ここで、 \mathbf{u} は速度、 ρ は密度、 p は圧力、 E は内部エネルギー、 T は温度、 ρ_i は密度関数、 F_{sa} は流体境界に働く表面張力、 F_{ep} は弾性体応力による力、 \mathbf{g} は重力などの外力、 \dot{Q} は単位時間当たりの発熱密度、 \mathbf{q} は熱伝導率、 \mathbf{T} は動粘性係数であり、添字 i は成分を表わす。これらは時間 t 、位置座標 \mathbf{x} の関数である。ただし、流体の各成分は連続の式を満たすものとした。レーザー光及びふく射エネルギーは \dot{Q} を通じて内部エネルギーに変換される。

式(5)の密度関数 $\rho_i(x,t)$ は成分 i の存在領域を表わす関数であり、 $\rho_i(x,t)=1$ はすべてがそれで満たされていることを、 $\rho_i(x,t)=0$ は全く存在しないことを意味する。流体境界では、 $0 < \rho_i < 1$ となるが、これを流体成分の存在率であると解釈する。したがって密度関数により計算空間で物質を識別することができ、各物質の状態方程式などの特性値の設定や、表面張力などの計算に必要な流体境界の計算のためにもちいる。

本研究では、物質は局所熱平衡状態にあるとし、エネルギーと圧力は密度と温度の関数として次の状態方程式で与えられるものとする。

$$E = E(\rho, T), \quad p = p(\rho, T) \quad (7)$$

また、状態方程式は密度と温度についての1次偏導関数が連続であるとする。エネルギー式は、この状態方程式により圧力 p に関する次の方程式に変換することができる。

$$\frac{Dp}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \rho (\gamma - 1) (T + Q) \quad (8)$$

但しここで、

$$\gamma = \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial E}{\partial T} \right)_p - 1$$

$$\gamma = 1 + \left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_T$$

であり、1成分理想気体の場合には、 γ を比熱比とすると

$$\gamma = 1 + \left(\frac{E}{p} \right) = \gamma - 1, \quad \gamma = \left(\frac{\partial E}{\partial p} \right)_T - 1 \left(\frac{E}{p} \right) =$$

となり、圧縮性流体の支配方程式として一般に使用されているものと一致し、 γ は状態方程式から求められ一般化された比熱比と呼べる量である。

式(1)、(2)、(4)、(5)及び(8)が解くべき基礎方程式となる。移流計算にはCIP法を採用し、非移流計算はC-CUP法と同様な(8)式をMICCG(Incomplete Cholesky Decomposition Conjugate Gradient)法により計算する。

EOSは、局所熱平衡の仮定のもとでThomas-Fermiモデルによる電子EOS、CowanモデルによるイオンEOS、Barnesモデルによるコールド補正の加算により表わす。

熱伝導係数と電気伝導係数(直流成分)は、物質を高密度プラズマとみなしてプラズマ中の定常状態における電子の移動速度で近似するTKNモデルに基づいて計算し、各々 $\kappa = (\kappa, T)$, $\sigma_0 = \sigma_0(\kappa, T)$ で表わす。

物質に照射されたレーザー光は $I = I_0 \exp[-\alpha z]$ により物質中を伝搬する。ここで、 I_0, α, z は各々レーザー強度、入射レーザー強度、表面での透過率、吸収係数及び透過距離である。レーザー光透過率、レーザー光吸収係数は、真空中に接する半空間がプラズマで満たされている状態に電磁波が入射して生成されるエバネッセント波の空間分布から計算する。このとき、電気伝導率は、Drudeモデル $\sigma(\omega) = \frac{2}{p} / 4 (\epsilon_{ei} - i)$ で近似できるものとする。これより、透過率、吸収係数は、 $a = a(\kappa, T)$, $\alpha = (\alpha, T)$ で表わされる。ここで、 ω は入射光の振動数、 $p = (4 \pi n_i e)$ はプラズマ周波数、 $\epsilon_{ei} = Z^* n_i e^2 / m_e \omega_c$ は電子-イオン衝突頻度、 m_e は電子の静止質量、 e は素電荷、 n_i はイオンの数密度、 Z は平均イオン荷数、 ω_c はTKNモデルで求めた電気伝導係数(直流成分)である。

また、プラズマ中の屈折率は $(1 - \frac{p^2}{\omega^2})^{1/2}$ であり、臨界密度は、 $\rho_p = \frac{p}{4 \pi e^2}$ となる位置での電子密度であり $m_e / (4 \pi e^2)$ で定義される。平均イオン荷数 Z はThomas-Fermiモデルにおける自由電子の数から求められるが、ここではMoreの近似式⁽⁶⁾をもちいる。

3. 数値解析結果

解析コードに、 κ, T の関数としての状態方程式、熱伝導係数、レーザー光透過率、吸収係数の各テーブルを組み込み、レーザー光を固体Alに照射した2次元(x-y)シミュレーション

を行った。各格子点では、まず従属変数、 P から EOS の $P=P(T)$ により T を求め、必要な物性値を計算する。

図 3 に解析体系を示す。解析体系の大きさは $12\ \mu\text{m} \times 12\ \mu\text{m}$ 、分割数 100×100 である。

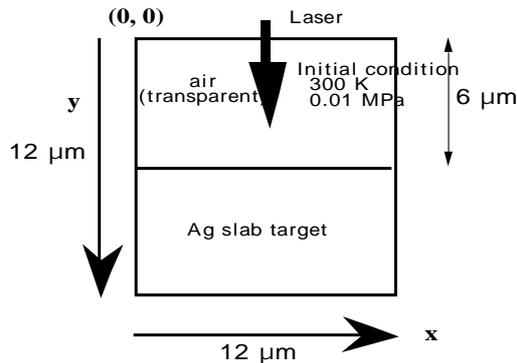


Fig.2 Geometry used in the simulation.

標準状態の銀(Ag)に強度 $10^{10}\text{W}/\text{cm}^2$ 、ガウス型の空間プロファイル(幅 $2\ \mu\text{m}$)のレーザー光(波長 800nm)を表面に垂直に照射した時の固体内の密度の等高線を図 4 に示す。(但し、 $0 < x < 12\ \mu\text{m}$, $5\ \mu\text{m} < y < 10\ \mu\text{m}$ の領域で、密度は $10\text{g}/\text{cc}$ から $12\text{g}/\text{cc}$ の範囲) $0 < x < 12\ \mu\text{m}$, $5\ \mu\text{m} < y < 6\ \mu\text{m}$ の低密度 ($10\text{g}/\text{cc}$ 以下)の領域が時間経過とともに広がっているのは固体ターゲットが溶融・蒸発しレーザー生成プラズマとなっていることを示す。また、図 5 にはレーザー光の中心軸に沿ったターゲット内の密度の変化を示す。(但し、 $x = 6\ \mu\text{m}$, $5\ \mu\text{m} < y < 10\ \mu\text{m}$) レーザー照射開始直後に、照射表面に薄い高密度領域が生成され、衝撃波の先端は音速とほぼ同じ約 $3.5\text{km}/\text{s}$ で固体内に伝播していくのがわかる。またレーザー誘起衝撃波は約 400ps までは平面的であるが、2 次元効果により時間とともに形状が変化して行く。 600ps での先端での圧縮率は約 20% であることから圧力は 10GPa 程度である。レーザー照射開始直後において衝撃波の先端がなだらかな形状であることは、レーザー吸収係数が $0.01\ \mu\text{m}$ 程度であるにもかかわらず、温度上昇に伴う熱伝導率の増加により生じたものであると考えられる。また、レーザー照射開始直後の密度プロファイルは、A.Ng⁽⁷⁾等のシミュレーション結果(ターゲット: Al)と定性的にはほぼ一致する。但し、本シミュレーションでは熱伝導フラックスは

$$F = \begin{cases} F_C, & F_C < F_L \\ F_L, & F_C > F_L \end{cases}$$

$$F_C = -K_C \frac{\partial T}{\partial x}$$

$$F_L = f n_e kT \left(\frac{kT}{m_e} \right)^{1/2}$$

とした⁽⁸⁾。ここで、 k はボルツマン定数、 n_e は電子密度、 m_e は電子の質量、 F_C はフーリエ則に基づくフラックスであり、 F_L はフラックスの上限である。フラックス・リミッタ係数 f として 0.5 を設定したが、この値は半経験的なものでありその妥当性に関しては実験との対比から今後検討を要する。図 5 からわかるように衝撃波の先端では徐々に圧縮領域が小さく、衝撃波の圧縮率が大きくなっている。このことは、衝撃波の進行方向前面の伝播速度に比して、後面がすでに加熱されているためにこの波の進行速度が大きいことから理解される。

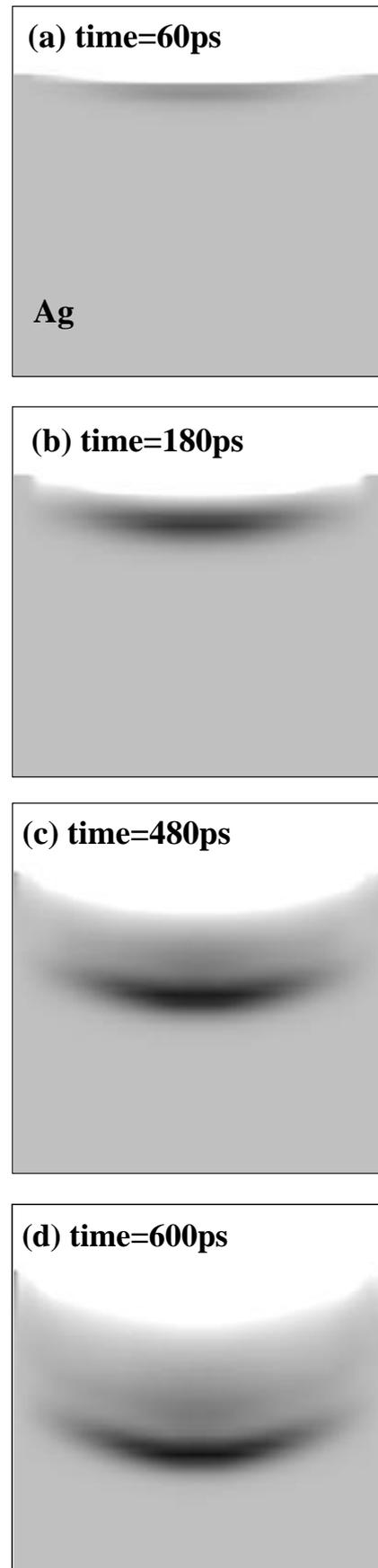


Fig. 4 Density contours in the case of $10^{10}\text{W}/\text{cm}^2$ laser irradiation with gaussian spatial profile onto the Ag solids.

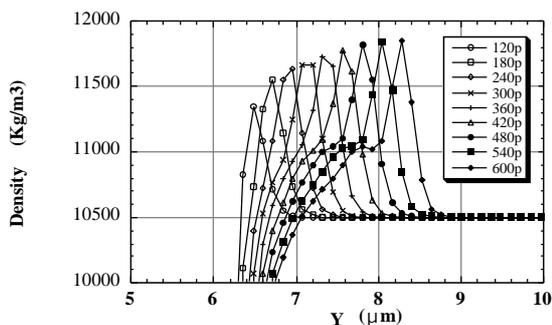


Fig. 5 Evolution of the density profile at the center of solid.

レーザー光は連続的に照射を続けているために、衝撃波の後方に高圧力領域が広く形成されると考えたが、シミュレーションからは薄い円盤状の衝撃波が固体ターゲット内を伝播するという結果となった。このことは、照射面ではアブレーションによりプラズマが生成されていて、照射の初期以降においては、レーザー光は主としてレーザー生成プラズマにより吸収され固体ターゲットには熱伝導により比較的ゆっくりとエネルギー伝播されるからではないかと推測している。現時点では衝撃波の形状を観測したデータがないためにこの推測を正当化するための実験を期待している。なお、この現象解析ではプラズマによるレーザー光吸収係数、高温領域における熱伝導係数が重要であり、レーザー生成プラズマ状態の実験との比較検討からこれらの係数の補正が必要である。

一方、レーザー生成プラズマ領域のシミュレーションにおいてしばしば負の圧力が現われてしまう。これは、使用した SESAME 状態方程式 (図6 参照) が低温 (1 eV 以下) 領域において精度が十分でないことに起因しておこる数値シミュレーション上の問題である。高強度プローブ光による固体ターゲット照射においては高温領域の状態方程式を用いるためにこの種の数値的問題はあまり現われなかったが、強度の低いポンプ光照射による固体の溶融・蒸発シミュレーションでは低温領域でのデータが重要となってくる。特に、凝縮のような過程を含むレーザー加工シミュレーションなどでは、ファンデル・ワールス・ループのモデル化を検討しなくてはならない。この時、シミュレーションにもちいられる一般化比熱比は

$$\begin{aligned}
 &= -\left(\frac{2}{P}\left(-\frac{E}{P}\right)_P - 1\right) / \left(-\frac{E}{P}\right) \\
 &= -\frac{V}{P} \frac{C_P}{C_V} \left(\frac{P}{V}\right)_P = \left(-\frac{\ln P}{\ln}\right)_T \\
 I &= 1 / \left(-\frac{E}{P}\right) \\
 &= \frac{1}{C_V} \sqrt{\frac{B}{T} (C_P - C_V)} \\
 &= C_P / C_V \\
 B &= -V \left(\frac{P}{V}\right)_T
 \end{aligned}$$

のように定積比熱、定圧比熱、体積弾性率などの測定量と関連づけられることを考慮しなくてはならない。

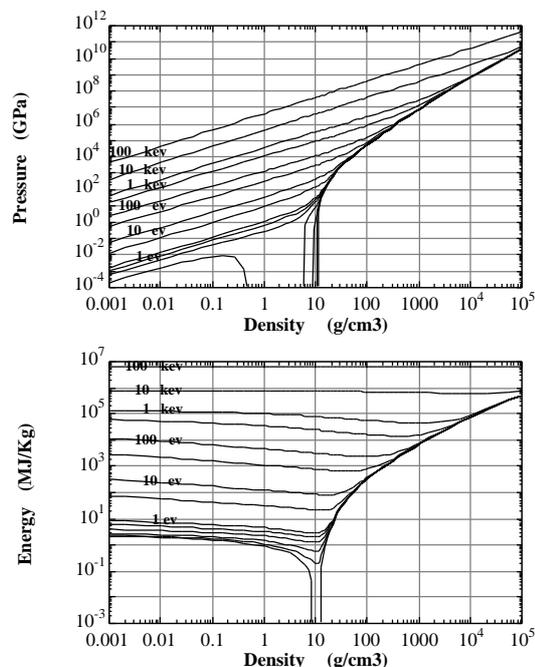


Fig.6 SESAME EOS data(ID=2720; Ag) used in the simulation.

4. まとめ

CIP 法と C-CUP 法に基づき開発したコードでポンプレーザーパルス光により試料物質中に発生するレーザー誘起衝撃波を解析した結果を記述した。

X 線回折像解析からは、結晶格子間隔の動的変化が計測されるが、これを連続体運動方程式でモデル化した場合の密度変化に対応させることができる。このことにより、今後、レーザー照射実験に重要なデータであるレーザー吸収係数、熱伝導係数、状態方程式 (EOS) の妥当性、高精度化を X 線回折と数値シミュレーションにより検証して行く予定である。

参考文献

- (1) T. Guo et. al., SPIE Vol. 3157(1997), pp. 84-92.
- (2) A. Zhidkov et.al, Phys. Rev. E, 62(2000), pp. 7232-7240.
- (3) T. Yabe and T. Aoki, Comput. Phys. Commun., 66 (1991) pp.219-232.
- (4) 内海、藤井、伝熱研究、7(1) (1999) pp.21-31.
- (5) T. Utsumi, A. Sasaki, T. Kunugi, S. Fujii and M. Akamatsu, CFD journal , 8(1), (1999)pp.128-134.
- (6) R.M. More, Adv. At. Mol. Phys., 21(1985) pp.305.
- (7) A. Ng, A. Forsman, and P. Celliers, Phys. Rev. E, 51 (1995) R5208.
- (8) R.C. Malone, R.L. McCrory, and R.L. More, Phys. Rev. Lett, 36(1976)35.