

극초단 펄스 레이저를 이용한 응용 분야 및 미세 열전달 해석 기술

이 글에서는 펨토초급 펄스 레이저에 의한 응용분야와 레이저에 의해 발생하는 비평형 열 전달 해석 기법 그리고 향후 연구 과제 등에 대해 소개한다.

극 초단 펄스 레이저(ultrashort pulse laser)는 레이저의 조사시간이 10피코초(picosecond)보다 빠른 펄스를 가진 레이저를 의미한다. 여기에서 피코초는 1조분의 1초를 나타내며 펨토초(femtosecond)는 1,000조분의 1초를 나타낸다. 1990년대 초, 극초단 펄스 레이저의 등장은 기존 연속파 혹은 긴 펄스에 의해 가공에 의한 정밀도의 한계를 극복하는 계기가 되었고 최근에는 다양한 응용분야에서 사용되고 있다. 뿐만 아니라 아직 상용화 단계까지는 도달하지 않았지만 아토초(attosecond : 10^{-21} 초)급 레이저에

대한 개발 연구가 진행되고 있다. 극초단 펄스레이저의 응용에서 가장 큰 특징은 레이저와 물질간의 상호작용에 의해 발생하는 열이 주변 분자들로 전달되는 시간에 비해 상대적으로 레이저 펄스가 매우 짧다. 따라서 물질 내의 국부적인 열 발생을 제한할 수

있는 특징을 가진다. 다시 말하면, 시간 스케일의 차이로 인해 일반적으로 물질 내의 열확산을 방지함으로써 재료 가공 시 매우 높은 정밀도를 얻을 수 있다. 그림 1은 극초단 펄스 레이저에 의해 가공된 알루미늄과 강철의 표면 사진을 보여준다. 그림에서 볼

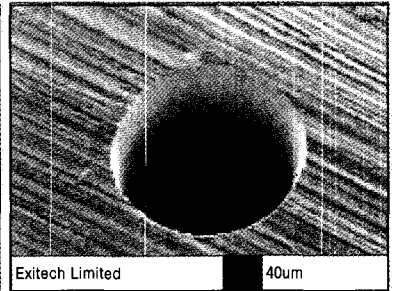
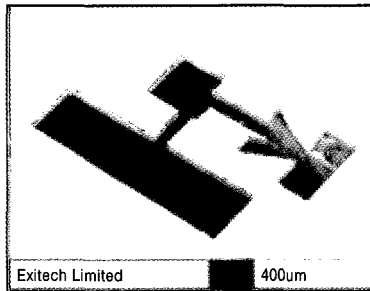


그림 1 펨토초급 레이저를 이용한 금속 가공 표면

수 있듯이 매우 정밀한 가공이 가능하며 깨끗한 표면을 유지함을 알 수 있다. 또한 그림 2는 펄스 레이저를 이용한 생체 친화적(biocompatible) 폴리머 스텐트(stent)를 보여준다. 그림에서 볼 수 있듯이 다양한 형태의 복잡한 형상도 펄스 레이저를 이용하여 정밀한 가공이 가능함을 볼 수 있다. 한편, 그림 3은 세포 내의 미토콘드리아를 펄스 레이저를 이용해 제거하는 나

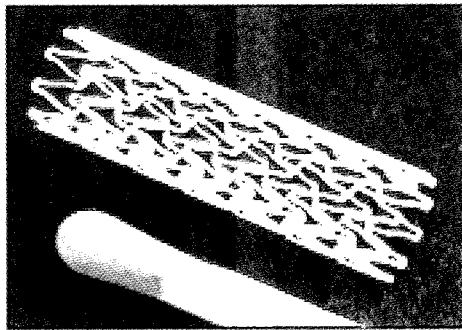


그림 2 극초단 펄스 레이저에 의해 가공된 생체 친화적 스텐트

노바이오 수술기법의 예이다. 그림과 같이 수술 후 다른 셀에 대한 영향 없이 제거할 수 있는 수술 기법을 확보함으로써 단백질

및 DNA 등과 같은 생체 내부의 세포 시스템의 시술이 가능하게 된다. 이 외에도 펄스 레이저를 이용한 라식(LASIK) 수술 기법 개발 및 재료 내부의 화학성분을 조사하는 기법 개발 등이 극초단 펄스 레이저를 이용한 연구 사례로서 보고되고 있다. 펄스 레이저를 이용한 재료 및 나노 바이오 기술에 대한 구체적인 연구 사례 및 중요성은 본 저널의 이전 테마 기획(기계저널, Vol. 45, No. 1)에서 이미 다룬 바 있으므로 이 글에서는 주로 극초단 펄스 레이저와 물질간의 상호작용에 대한 해석 기술에 대해 간략히 소개하고 향후 해석 기술의 개발 방향에 대해 언급하고자 한다.

에너지 전달자의 상호 작용 및 비평형 에너지 전달 특성

극초단 펄스 레이저와 물질과의 상호작용에서 가장 특이할 만한 사항은 에너지 전달 시간에 비해 펄스 레이저의 펄스가 짧기 때문에 물질로의 열확산이 거의 나타나지 않는 것이다. 그림 4는 나노초급 레이저와 펄스초급 레이저에 의한 물질내의 가공 메커니즘을 보여준다. 그림에서 나노초급 레이저를 이용한 취성재료 가공의 경우 에너지 전달 시간에 비해 레이저 펄스 지속시간이 길기 때문에 열 확산으로 인한 미세 크랙이 발생할 수 있는 반면,

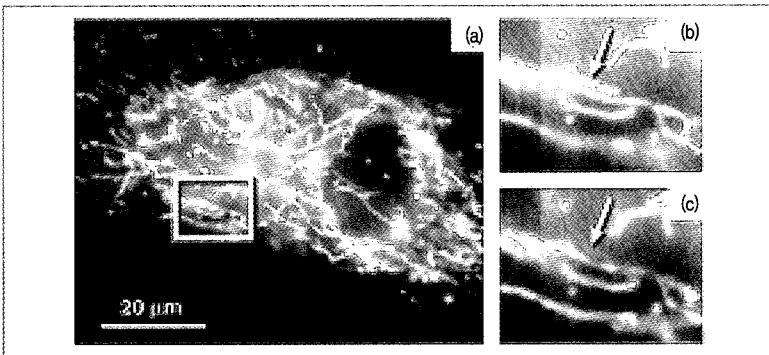
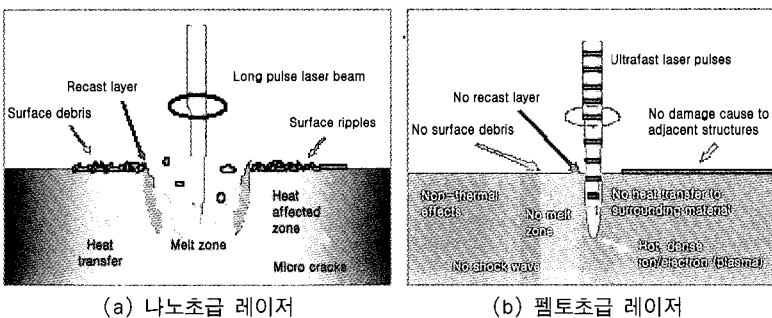


그림 3 극초단 펄스 레이저를 이용한 세포 시스템의 나노 바이오 수술 예 ((a) 펄스 레이저 어블레이션(ablation) 전의 현미경 사진, (b) 미토콘드리아 제거 전 (c) 미토콘드리아 제거 후)



(a) 나노초급 레이저

(b) 펄스초급 레이저

그림 4 나노초급 레이저와 펄스초급 레이저 내의 가공 메커니즘(www.cmxr.com)

펨토초급 레이저의 경우는 높은 에너지를 갖는 플라즈마(plasma)에 의한 가공이 이루어지기 때문에 열적 손상의 문제를 해결할 수 있다. 따라서 극초단 펄스 레이저에 의한 물질 가공 혹은 에너지 전달 특성을 이해하기 위해서는 우선 레이저에 의해 흡수된 에너지가 어떤 에너지 전달자에 의해 어떻게

전파되는지 알아야 한다. 일반적으로 잘 알려진 대표적인 에너지 전달자들은 포톤(photon), 자유전자(free electron), 포논(phonon) 등이 있다. 백과사전에서는 포논을 양자론에서 탄성체의 진동을 입자의 집합으로 간주했을 때의 입자라고 정의한다. 간단히 말해, 물질 내의 에너지 전달을 입자간의 상호작용에 의한 에너지 전달로서 설명하고자 도입된 양자화된 개념이다. 예를 들어, 고요한 호수에 돌을 던지면, 파동이 발생하고 주위로 퍼져나가는 것처럼, 물질 내에서도 에너지가 국부적으로 높아지면 물질 내의 분자들이 마치 파동과 같이 주변 분자들에게 에너지를 전달하게 되는데 이 파동을 입자 형태로서 정량화한 것이 바로 포논이다. 포논은 크게 음향포논(acoustic phonon)과 광학포논(optical phonon)으로 나눌 수 있다. 음

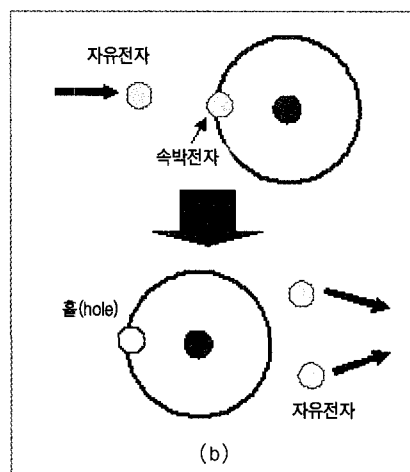
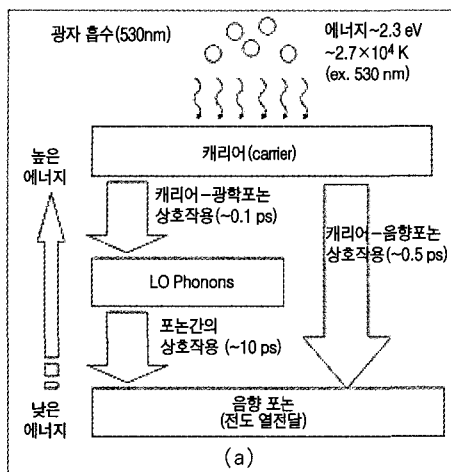


그림 5 (a) 에너지 전달자들의 상호작용, (b) 충돌 이온화 과정

향포논은 음속으로 에너지를 전달하고 궁극적으로 물질 내의 전도 열전달에 기여하는 반면, 광학포논은 에너지 전달 속도가 거의 없지만 음향포논에 비해 진동 주파수가 높기 때문에 포톤이나 전자들과 상호작용을 일으킬 가능성이 높다. 여기서 '광학'이라는 단어는 이 포논들이 물질의 광학 성질을 변화시키는 작용을 하기 때문에 붙여진 것이며 실제로 극초단 펄스 레이저를 이용하는 경우, 광학포논의 역할은 매우 중요하다. 극초단 펄스를 이용하는 경우, 상기에서 언급한 에너지 전달자들이 상호작용을 일으키면서 비평형에서 평형에 이르는 완화시간(relaxation time) - 대부분 물질에서 수 피코초 내지 수십 피코초 - 에 비해 레이저의 펄스가 짧아지면 에너지 비평형(nonequilibrium) 현상이 나타나고 이로 인해 앞서 언급한 펄

초급 레이저의 가공 특성이 나타나게 된다. 따라서 펨토초급 레이저를 이용한 가공 메커니즘을 명확히 이해하고 해석하기 위해서 자유전자들의 특성과 포논과의 상호작용 등을 명확히 이해하여야 한다. 그림 5(a)는 전달자들의 상호 작용을 나타낸다. 높은 에너지를 가진 포톤이 흡수하면 자유 전자 혹은 전자-홀 쌍(electron-hole pair)에 에너지를 전달하고 전달된 에너지는 광학포논과 음향포논들과 상호작용을 일으키게 된다. 예를 들어 우리와 같은 절연체의 경우, 포톤 에너지가 흡수되면 광이온화(photoionization)현상이 일어나 에너지 전달을 위한 자유전자분포가 형성된다. 광이온화현상은 포톤흡수에 의해 최외각 전자들이 전도대(conduction band)로 천이되어 나타나는 이온화현상이다. 물질에 따라 밴드갭

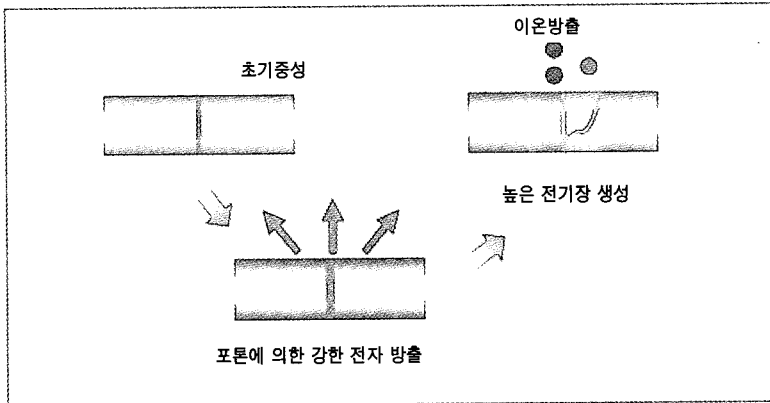


그림 6 쿨롱 폭발에 의한 레이저 어블레이션 메커니즘

(bandgap) 에너지가 다르므로 천이를 위해 요구되는 포톤의 개수가 레이저의 파장에 따라 혹은 물질에 따라 서로 다르게 나타날 수 있는데 이때, 한 개 이상의 포톤들이 밴드갭 천이를 위해 요구되는 이온화를 다광자(multi-photon) 이온화라고 한다. 그림 5(b)와 같이, 포톤 흡수에 의해 높은 운동에너지를 갖는 자유전자들은 주변의 충만대(valence band)에 있는 전자들과 충돌하여 이온화현상을 발생시키는데 이를 충돌이온화(impact ionization)라고 하며, 연속적인 충돌이온화 과정으로 거쳐 매우 짧은 시간에 자유전자의 밀도가 급증하는 현상을 애벌런치 이온화(avalanche ionization)라고 한다. 즉, 그림 6과 같이 절연체인 경우도 높은 레이저 에너지를 매우 짧은 시간 동안 흡수하면 국부적으로 강한 전자장이 형성되어 쿨롱(Coulomb)폭발을 일으키게 된다. 또한 임계값 이상의

자유전자가 발생하여 광학적으로 마치 금속과 같은 특성을 보이게 된다.

극초단 펄스 레이저 어블레이션 해석 기법

극초단 펄스 레이저에 의한 물질 내부의 에너지 전달 특성 혹은 가공 특성을 해석하기 위해서는 전달자들의 상호작용을 이해하고 이론적으로 모사할 수 있는 기법을 개발하여야 한다. 이를 위해서는 i) 전자 거동 및 포논과의 상호작용, ii) 광학특성 및 파동간섭현상, iii) 전도 열전달에 대한 미시적 접근 등이 연구되어야 하며 최근까지 많은 연구자들이 의해 이론적인 연구들이 수행되어 왔다. 가장 대표적인 연구 방법으로는 볼츠만 수송이론(Boltzmann transport theory)을 이용한 접근방법이다.

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

위 식에서 f 는 비평형상태의 분포함수를 나타내며 f_0 는 평형상태에서의 분포함수를 의미한다. 또한, r 는 완화시간을 나타내는데 입자의 모멘텀과 위치의 함수가 되어 매우 복잡한 형태를 가지게 된다. 통계학적으로 입자들의 산란율(scattering rate)을 통해 완화시간이 예측될 수 있다. 물론 볼츠만 수송 방정식을 이용하면 엄밀한 해를 얻을 수 있으나 이 과정(기본적으로 6차원 문제임)이 매우 복잡하기 때문에 많은 연구자들은 전자들의 거동을 예측하기 위해 볼츠만 방정식을 포커-프랑크(Fokker-Planck) 방정식으로 변환하여 해석하여 왔다. 이외에도, 전달자들의 에너지를 열역학적 시스템으로 환산하여 해석하는 2-온도 모델(two-temperature model : 2TM) 및 3-온도 모델(three-temperature model : 3TM)이 개발되어 왔다. 또한, 볼츠만 수송방정식을 근간으로 유도된 수력학 방정식(hydrodynamic equation)을 이용하며 전자 및 포논들의 에너지들을 온도 및 비열 등의 함수로 환산하여 사용한다. 이러한 방법들은 기본적으로 공학자들에게 익숙한 형태의 방정식이기 때문에 쉽게 에너지 전달 특성을 분석할 수 있는 장점이 있는 반면, 전자들의 에너지를 적분하여 사용하기 때문에 전자 거동을 엄밀히 분석하는 데에는 근본적으로 적용할 수 없다. 최근

컴퓨터의 비약적인 발전에 힘입어 분자동역학(MD) 시뮬레이션 기법을 이용한 극초단 펄스 레이저의 어블레이션 연구가 많은 연구자들에 의해 발표되고 있다. 그러나 잘 알려진 바와 같이 기존 고전적인 분자동역학 시뮬레이션은 전자와 포논간의 상호작용을 근본적으로 모사하기 어렵고 이온화 과정 및 재결합(recombination)현상에 대한 해석이 어렵다는 단점이 있다. 최근에 와서는 양자역학을 도입한 분자동역학 시뮬레이션이 연구되고 있으나 매우 복잡하고 시간 및 공간적인 제약조건에 따른 문제점들이 해결될 과제로 지적되고 있다. 이 외에도 분자동역학 시뮬레이션과 수력학 방정식을 이용한 하이브리드 기법 혹은 멀티스케일 기법들이 많은 연구자들에 의해 보고되고 있으나 아직도 극초단 펄스 레이저에 의한 해석 기술에는 해결해야 할 많은 문제점들이 존재하고 있다. 본 절에서는 이러한 연구 결과들 중에서 대표적인 예를 소개하고 해결하여야 할 향후 연구 주제들에 대해 언급하고자 한다.

극초단 펄스 레이저와 물질과의 상호작용에 대한 시뮬레이션 및 향후 과제

그림 7은 극초단 펄스 레이저에 조사된 물질의 반사율 및 임

계손상강도에 대한 해석 예를 보여준다. 해석 방식은 볼츠만 방정식에 근간한 포커-프랭크 방정식이 이용하였다. 극초단 펄스 레이저에 의해 여기된 자유전자들의 밀도가 급격히 증가하면서 절연체 내부의 광학 특성이 변화되고 그림에서 볼 수 있듯이 금속과 유사한 광특성을 보인다. 즉, 레이저 펄스 지속시간 동안에 반사율이 급격히 증가함을 볼 수 있다. 또한, 레이저에 의한 손상을 일으키는 레이저 강도를 예측한 결과, 실험결과와 매우 유사한 경

향을 보이고 있다. 한편, 극초단 펄스 레이저가 조사된 절연체(SiO₂) 구조물에 강한 전자장이 존재하는 경우, 실제 자유전자들이 높은 에너지대로 이동할 수 있는 가능성이 존재한다. 그림 8(a)와 같이 포커-프랭크 방정식을 이용하고 극초단 펄스 레이저와 물질 그리고 전자장의 상호작용을 해석하면 주어진 전자장에 따라서 임계손상레이저강도(damage threshold laser fluence)가 변화될 수 있음을 예측할 수 있다. 그림 8(b)는

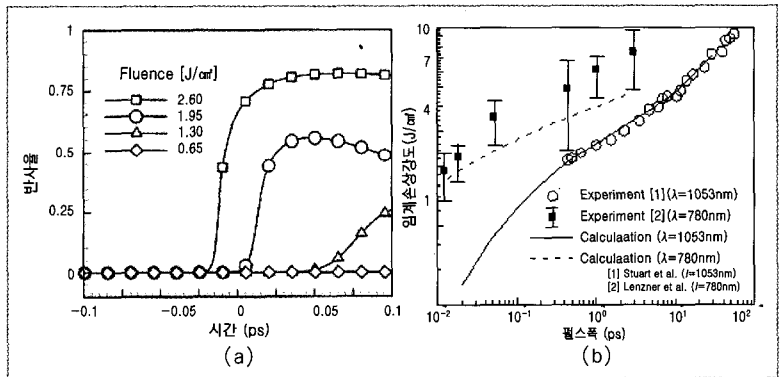


그림 7 극초단 펄스 레이저에 조사된 물질의 반사율 및 임계손상강도에 대한 시뮬레이션 결과

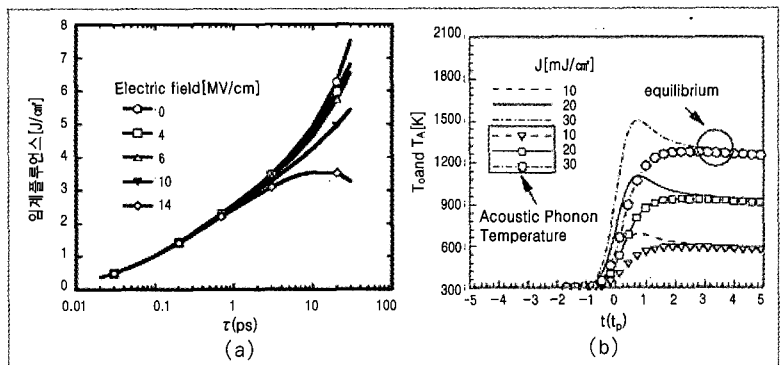


그림 8 (a) 극초단 펄스 레이저와 전자장과의 상호작용에 대한 해석 (b) 광학포논과 음향포논의 비평형 현상

3TM(3-온도 모델)을 이용한 광학포논온도와 음향포논온도를 시간에 따라 나타낸 것이다. 비록 매우 짧은 시간이긴 하지만 광학포논과 음향포논이 상호 비평형

상태에 놓여 있음을 확인할 수 있다. 이러한 비평형현상은 앞서 언급한 바와 같이 시간 스케일 차이에 기인한다. 그러나 포논과 전자 그리고 포논과 포논 사이의 산란율(scattering rate)에 대한 처리가 아직도 해결되어야 할 문제로 남아 있으며 실제로 이 산란시간을 정확히 예측하기 위한 이론 연구가 활발히 진행되고 있다.

큰 인위적 모델링이 포함되지 않으며, 이것은 새로운 현상을 연구하는 미세역학 관점에서는 매우 주요한 장전이라고 할 수 있다. 분자동역학 해석은 적절하고 정확한 분자 포텐셜이 주어져야 한다. 그러나 분자동역학 해석이 가지는 매우 큰 제약은 구현할 수 있는 시스템의 크기에 있다. 거시적인 크기의 유동을 직접 모사하는 것은 비현실적이다. 현재 컴퓨터의 계산능력으로는 $0.1\mu\text{m}$ 와 1ns ($1\text{ns}=10^{-9}\text{s}$)이 통상 접근할 수 있는 문제의 한계이다. 무엇보다 극초단 펄스레이저와 물질간의 상호작용에 대한 분자동역학 해석이 어려운 점은 전자들의 거동과 포논간의 상호작용을 예측할 수 있는 방법이 극히 제한적이고 너무 많은 계산시간을 요구하여 실제 산업에서의 응용 및 설계에서 직접적인 사용을 기대하기 힘들다는 데에 있다. 그럼에도 불구하고, 새로운 물리현상을 규명하고 기초 메커니즘을 규명하기 위한 분자동역학 연구는 매우 중요한 의미를 가지며 최근까지도 많은 연구자들이 활발한 연구를 수행 중에 있다. 그림 10은 레이저에 의한 에어로졸 입자의 분열 혹은 파괴 현상을 분자동역학 시뮬레이션을 통해 얻어진 결과이다. 이러한 연구는 분자동역학 해석의 장점을 부각시킨 좋은 예이며 그림에서와 같이 입자들의 분열현상을 실시간으로 매우 정확히 예측할 수 있다. 마지막으

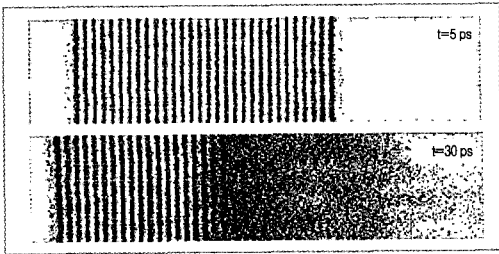


그림 9 $0.7\text{J}/\text{m}^2$ 에 대한 아르곤 고체의 레이저 어블레이션에 대한 분자동역학 해석 결과

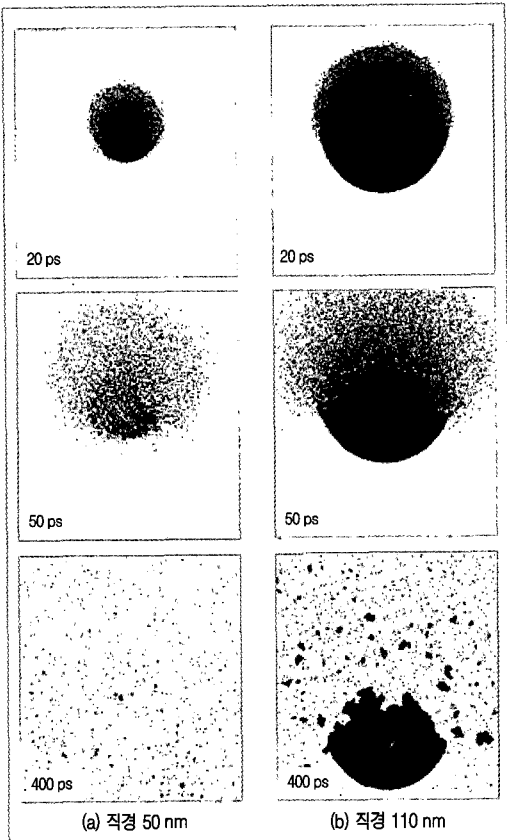


그림 10 조사된 레이저와 입자간의 상호작용

그림 9는 분자동역학 해석을 통해 예측된 결과로서 아르곤 고체에 조사된 레이저에 의한 에너지 흡수와 분자들의 거동을 해석한 것이다. 그림에서 시간에 따라 분자들이 어블레이션되고 있음을 확인할 수 있다. 일반적으로 분자동역학 해석은 물질의 기본 요소인 분자 관점에서 시작하여 분자간 상호작용(inter-molecular interaction)을 결정하고 분자의 운동을 뉴턴방정식에 따라 계산한다. 그러므로 기본적으로 분자간 상호작용에 대한 관계식 외에 다

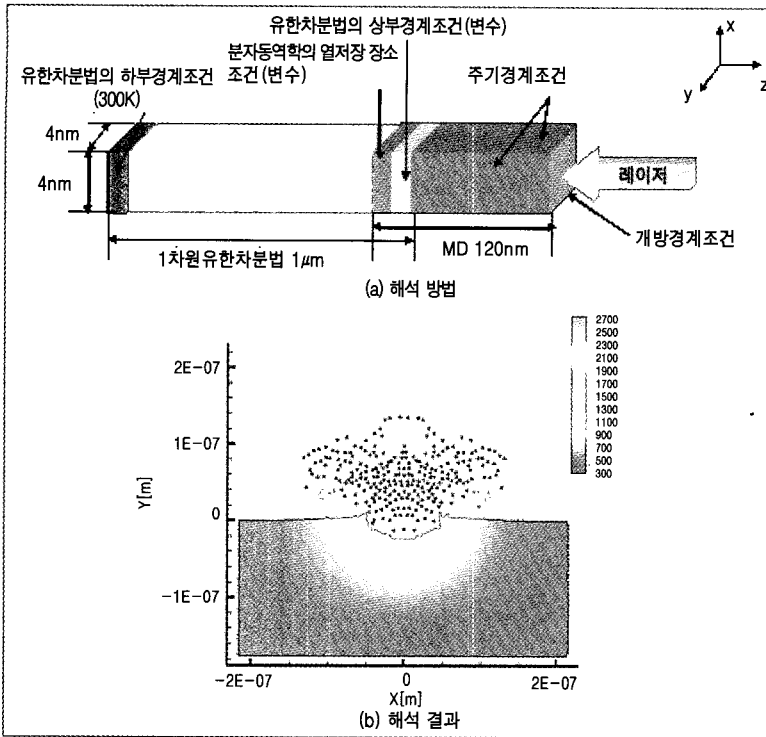


그림 11 하이브리드 방식을 이용한 레이저 어블레이션 해석

로 그림 11은 최근 활발히 연구되고 있는 하이브리드 해석법 혹은 멀티스케일 기법을 이용한 해석 결과를 보여준다. 그림 11(a)에서 보면 일정 영역 즉, 매우 얇은 두께의 영역을 분자동역학 해석영역으로 두고, 약 1 μ m 정도의 영역은 2TM 혹은 3TM 방법을 이용한다. 연속체 가정에 근간한 유한차분법(FDM : Finite

Difference Method)을 이용한 수치방법과 분자동역학 해석방법을 동시에 이용하고 적절한 영역 경계조건을 적용하여 해석한다. 이러한 수치기법은 실제 극초단 펄스 레이저에 의한 물질 내의 열전달 해석 혹은 어블레이션 특성을 효과적으로 예측할 수 있는 장점이 있으며 기존의 분자동역학 해석의 문제점을 보완할 수

있다. 이러한 해석 기법의 개발과 더불어, 명확한 레이저 어블레이션 메커니즘의 규명, 전자와 포논 간의 상호작용에 대한 엄밀한 모델 등이 아직도 해결되어야 할 연구 주제로 남아 있다. 뿐만 아니라, 최근 개발되고 있는 아토초급 레이저의 경우, 전자-전자간의 상호 충돌에 의한 산란 특성을 무시할 수 없기 때문에 전자들의 거동을 보다 엄밀히 해석할 필요가 있으며 기존 방식과 다른 해석 기법이 개발되어야 한다.

지금까지 언급한 바와 같이 극초단 펄스레이저는 다양한 분야에서 적용될 수 있으며 첨단기술 개발에 있어서 매우 중요한 측정 도구 및 가공 도구로서 이용될 수 있다. 극초단 펄스 레이저에 의해 조사된 물질 내부의 에너지 전달 특성과 광학 특성을 명확히 해석할 수 있는 이론 연구는 매우 중요한 연구 주제임에 틀림없다. 앞으로 보다 짧은 펄스의 레이저가 개발되면서 공학적으로 응용될 수 있는 영역이 확대될 것으로 기대하며, 이에 따른 보다 엄밀하고 정확한 해석기법이 개발되어야 할 것으로 생각된다.

기계용어해설

배플 보드 조절(Baffle Board)

(1) 수직형 증발기 등에서 증기 분출구의 수분을 취해 증기를 달아나게 할 목적으로 설치한 장애판. (2) 펄턴 수차 등에서 노즐로부터의 분류를 가감하기 위하여 노즐 입구에 고정시킨 판. (3) 버너와 마주보는 위치에 설치하여 완전 연소를 돕는 충돌판.