



ΕΘΝΙΚΟ
ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Α.Π. : 31619
Αθήνα, 26-6-25

ΚΟΣΜΗΤΟΡΑΣ

Προς
τα Μέλη ΔΕΠ της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ

Π Ρ Ο Σ Κ Λ Η Σ Η

Παρακαλείστε να παρευρεθείτε στην παρουσίαση της Διδακτορικής Διατριβής που εκπόνησε στον Τομέα Τεχνολογίας των Κατεργασιών της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ, η Υποψήφια Διδάκτορας **κ. Αλεξοπούλου Βασιλική του Ευαγγέλου**, Διπλωματούχος Μηχανολόγος Μηχανικός ΕΜΠ.

Η παρουσίαση θα πραγματοποιηθεί την **Παρασκευή 4 Ιουλίου 2025, ώρα 13:00**, στην Αίθουσα Τηλεδιάσκεψης 1 στο κτήριο της Κεντρικής Βιβλιοθήκης ΕΜΠ και διαδικτυακά στη διεύθυνση:

<https://teams.live.com/meet/9351099156913?p=bLjpCAW9yqN05FT5Pv>

Το θέμα της Διδακτορικής της Διατριβής είναι:

Αγγλικός τίτλος: «Advanced modeling of short and ultrashort laser irradiation of metals in micro-nano down to sub-atomic scale»

Ελληνικός τίτλος: «Μοντελοποίηση ακτινοβολήσης μετάλλων με λέιζερ βραχέων και υπερβραχέων παλμών σε μικρο-νάνο έως υπο-ατομική κλίμακα»

Ο Κοσμήτορας της Σχολής



Ι. Αντωνιάδης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Summary of the PhD thesis

Introduction

This PhD thesis focuses on modeling the interaction of short and ultrashort laser pulses with metals, progressively examining energy transfer and material ejection at the micro- and nanoscale, plasma formation, and ultimately, modeling of laser-driven particle acceleration at the sub-atomic scale. When these three stages are combined into a unified model, they fully describe the mechanism underlying the creation and operation of laser-driven particle accelerators.

Each of the three underlying physical processes – heat transfer, hydrodynamics and electromagnetism – can also independently simulate a variety of manufacturing techniques, such as micro-cutting, micro-drilling and plasma formation and expansion, as seen in pulsed laser deposition (PLD) processes.

However, the most compelling and high-impact application of this model emerges when these modules are integrated into a single undivided simulation. This enables the modeling of laser-driven particle accelerators – an emerging, powerful technology that utilizes intense laser pulses to accelerate charged particles (electrons, ions, positrons) within a plasma. Compared to conventional accelerators (e.g., linear accelerators, synchrotron-type circular accelerators), which require large infrastructure and substantial financial resources, laser-driven accelerators offer the potential for more compact, efficient and cost-effective systems.

Their development and optimization may have major implications across a range of fields, such as medicine (e.g., proton cancer therapy and improved medical imaging), nuclear fusion (plasma heating in inertial confinement fusion), space exploration (via advanced propulsion technologies), high-energy physics (e.g., laboratory simulation of astrophysical plasma) and material fabrication and processing at the atomic or near-atomic scale. This last application area encompasses methods and technologies collectively known as atomic and close-to-atomic scale manufacturing (ACSM).

Notably, one of the most immediate and already experimentally realized applications of laser-driven particle accelerators – which also served as a driving motivation for the development of the unified model presented in this thesis – is their implementation as advanced tools in ACSM processes. Specifically, these accelerators can supply high-energy electron, ion and photon beams needed to overcome the major challenge faced in ACSM today: the limited energy and resolution provided by existing tooling. Laser-driven particle accelerators thus emerge as a revolutionary solution capable of propelling ACSM techniques to the next technological frontier.

To study these phenomena, here an open-source computational model is developed as part of this doctoral research, simulating the interaction mechanism of short and ultrashort laser pulses with metallic targets. The model includes laser sources that span the full range of energy densities – from low to high – and incorporates the physical processes that govern heat transfer, hydrodynamic and electromagnetic effects. This enables precise modeling of the entire laser-driven acceleration mechanism and allows the model to be adapted for various accelerator applications, such as in ACSM.

Furthermore, the model has been validated both in its individual components (heat transfer, hydrodynamic and electromagnetic models) and as a whole, through comparison with experimental data from the following laser facilities:

TITAN/Jupiter Laser Facility – Lawrence Livermore National Laboratory

TPW/Texas Petawatt Laser Facility – University of Texas at Austin

OMEGA EP/Laboratory for Laser Energetics – University of Rochester

ORION/Orion Laser Facility – Atomic Weapons Establishment (AWE)

Simultaneously, the model's capabilities for predictive modeling and optimization are being tested using experimental data from the laser facility:

L4f ATON laser/Extreme Light Infrastructure (ELI Beamlines) – Extreme Light Infrastructure European Research Infrastructure Consortium (ELI ERIC)

Structure of the PhD thesis

Chapter 1 begins with an introduction to the fundamental principles of laser operation and their technological evolution, with an emphasis on methods for generating short and ultrashort pulses.

Chapter 2 presents the mathematical modeling of the laser source, reviewing existing theoretical approaches in the literature, analyzing their suitability and explaining the rationale behind those selected and implemented in the model developed in this research.

Chapter 3 describes the computational, analytical and statistical methods used for modeling laser–matter interactions, including optimizations made to reduce computational cost.

Chapter 4 details the heat transfer model developed, based on the two-temperature theory – with separate temperatures for electrons and ions – incorporating material ejection mechanisms such as spallation, explosive boiling and fragmentation. Given their explosive nature, these methods also necessitate the development of a hydrodynamic model.

Chapter 5 presents the hydrodynamic model, describing shock waves created by pressure-induced material ejection, as well as rarefaction waves that follow and lead to plasma expansion.

Chapter 6 introduces the electromagnetic model, used primarily to describe interactions between matter and high-energy-density laser pulses. It accounts for relativistic electron motion and includes phenomena such as the ponderomotive effect, attenuation, reflux, electron-positron pair production and the sheath electric field. Among the possible laser-based acceleration methods, this chapter focuses on direct laser acceleration of electrons and target normal sheath acceleration of ions.

Chapter 7 unifies the heat transfer, hydrodynamic and electromagnetic models into an undivided model for fully describing and optimizing the mechanisms of laser-driven particle acceleration. Additionally, the model's predictive capabilities are tested using next-generation petawatt-class lasers. Practical applications of laser-driven particle accelerators are analyzed, with case studies in ion implantation, vacancy defect engineering and ripples nanostructuring.

Chapter 8 summarizes the key conclusions of this research and outlines the next steps for further development of the open-source code. These include the integration of additional laser-driven electron and ion acceleration mechanisms (e.g., laser wakefield acceleration, radiation pressure acceleration and breakout afterburner), as well as a new code module dedicated to modeling interactions either directly of lasers or of laser-driven particle accelerators with hohlraums – a critical process for nuclear fusion, high-

energy physics and the study of materials under extreme pressure and temperature conditions.

Research contribution

This dissertation also serves as documentation for the open-source model, offering a valuable tool for the research community studying laser-matter interactions. The model is available on the Code Ocean platform under the GNU General Public License version 3 (GPLv3) and the validation results are available on figshare repository under the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-4.0) license. Additionally, the computational and theoretical analyses resulting from this research have been published in three peer-reviewed scientific papers, with a fourth currently under review.

Περίληψη διδακτορικής διατριβής

Εισαγωγή

Η παρούσα διδακτορική διατριβή αφορά στη μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης βραχέων και υπερβραχέων παλμών λέιζερ με μέταλλα, εξετάζοντας προοδευτικά τη μεταφορά ενέργειας και την αποβολή υλικού σε μικρο- και νανοκλίμακα, τον σχηματισμό πλάσματος και, τελικά, τη μοντελοποίηση σε υπο-ατομική κλίμακα της επιτάχυνσης σωματιδίων με λέιζερ. Καθένα από αυτά τα επιμέρους μοντέλα (θερμικό, υδροδυναμικό, ηλεκτρομαγνητικό) μπορεί να χρησιμοποιηθεί ξεχωριστά για τη προσομοίωση διαφόρων κατεργασιών, όπως είναι η μικροκοπές και ο σχηματισμός και η εκτόνωση του πλάσματος κατά τη μέθοδο pulsed laser deposition (PLD). Όταν αυτά τα τρία στάδια συνδυαστούν σε ένα ενιαίο μοντέλο, περιγράφουν πλήρως τον μηχανισμό δημιουργίας και λειτουργίας των επιταχυντών σωματιδίων με λέιζερ (laser-driven particle accelerators). Οι επιταχυντές σωματιδίων με λέιζερ αποτελούν μια καινοτόμο τεχνολογία που χρησιμοποιεί ισχυρούς παλμούς λέιζερ για την επιτάχυνση φορτισμένων σωματιδίων (ηλεκτρονίων, ιόντων, ποζιτρονίων) μέσα σε ένα πλάσμα. Σε σύγκριση με τους συμβατικούς επιταχυντές (π.χ. γραμμικοί επιταχυντές, κυκλικοί επιταχυντές τύπου synchrotron, κ.λπ.), οι οποίοι απαιτούν τεράστιες υποδομές και σημαντικούς οικονομικούς πόρους, οι επιταχυντές σωματιδίων με λέιζερ προσφέρουν τη δυνατότητα ανάπτυξης μικρότερων, αποδοτικότερων και οικονομικότερων συστημάτων. Η ανάπτυξη και βελτιστοποίησή τους μπορεί να έχει σημαντικές επιπτώσεις σε διάφορους τομείς, όπως η ιατρική (θεραπεία καρκίνου με πρωτόνια και βελτιωμένη ιατρική απεικόνιση), η πυρηνική σύντηξη (θέρμανση πλάσματος κατά την μέθοδο αδρανειακού περιορισμού), η εξερεύνηση του διαστήματος (μέσω προηγμένων τεχνολογιών πρόωσης), η φυσική υψηλών ενεργειών (προσομοίωση αστροφυσικού πλάσματος στο εργαστήριο) και η κατασκευή και επεξεργασία υλικών σε ατομικό ή σχεδόν ατομικό επίπεδο (περιλαμβάνει διάφορες μεθόδους και τεχνολογίες, γνωστές διεθνώς με τον όρο atomic and close-to-atomic scale manufacturing – ACSM –).

Για τη μελέτη των ανωτέρω, στο πλαίσιο αυτής της διδακτορικής έρευνας, αναπτύχθηκε ένα ανοιχτού κώδικα υπολογιστικό μοντέλο (open-source code) που προσομοιώνει τον μηχανισμό αλληλεπίδρασης βραχέων και υπερβραχέων παλμών λέιζερ με μεταλλικούς στόχους. Το μοντέλο περιλαμβάνει πηγές λέιζερ, που καλύπτουν όλο το φάσμα πυκνότητας ενεργειών – από χαμηλή έως υψηλή και ενσωματώνει φυσικές διεργασίες που περιγράφουν τις θερμικές, υδροδυναμικές και ηλεκτρομαγνητικές επιδράσεις, που λαμβάνουν χώρα. Αυτό επιτρέπει την ακριβή μοντελοποίηση ολόκληρου του μηχανισμού επιτάχυνσης σωματιδίων με λέιζερ, αλλά και την προσαρμογή αυτού του μοντέλου σε διαφορετικές εφαρμογές των επιταχυντών (από ιατρικές έως ACSM). Επιπλέον, το μοντέλο έχει επικυρωθεί τόσο κατά τμήματα (ξεχωριστά το θερμικό, υδροδυναμικό και ηλεκτρομαγνητικό μοντέλο) όσο και στο σύνολό του, μέσω σύγκρισης με πειραματικά δεδομένα από τις παρακάτω εγκαταστάσεις λέιζερ:

TITAN/Jupiter Laser Facility – Lawrence Livermore National Laboratory

TPW/Texas Petawatt Laser Facility – University of Texas at Austin

OMEGA EP/Laboratory for Laser Energetics – University of Rochester

ORION/Orion Laser Facility – Atomic Weapons Establishment

Ταυτόχρονα, οι δυνατότητες του μοντέλου για προβλεπτική μοντελοποίηση και βελτιστοποίηση δοκιμάζονται με πειραματικά δεδομένα από την εγκατάσταση λέιζερ:

L4f ATON laser/Extreme Light Infrastructure (ELI Beamlines) – Extreme Light Infrastructure European Research Infrastructure Consortium (ELI ERIC)

Δομή της διατριβής

Στο κεφάλαιο 1 η διατριβή ξεκινά με μια εισαγωγή στις βασικές αρχές λειτουργίας των λέιζερ και την τεχνολογική τους εξέλιξη, με έμφαση στις μεθόδους δημιουργίας βραχέων και υπερβραχέων παλμών.

Στο κεφάλαιο 2 παρουσιάζεται η μαθηματική μοντελοποίηση της πηγής λέιζερ, εξετάζοντας τις υπάρχουσες θεωρητικές προσεγγίσεις της βιβλιογραφίας, αναλύοντας την καταλληλότητά τους και εξηγώντας ποιες από αυτές επιλέγονται και εφαρμόζονται στο μοντέλο που αναπτύχθηκε στην παρούσα έρευνα.

Στο κεφάλαιο 3 περιγράφονται οι υπολογιστικές, αναλυτικές και στατιστικές μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν για τη μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης λέιζερ – ύλης, συμπεριλαμβάνοντας τις βελτιώσεις που έγιναν για τη μείωση του υπολογιστικού κόστους.

Στο κεφάλαιο 4 παρουσιάζεται το θερμικό μοντέλο που αναπτύχθηκε, το οποίο βασίζεται στη θεωρία των δύο θερμοκρασιών – ξεχωριστή θερμοκρασία για ηλεκτρόνια και ιόντα (two temperature model), ενσωματώνοντας μηχανισμούς αποβολής υλικού, όπως η αποκόλληση λόγω τάσης (spallation), ο εκρηκτικός βρασμός (explosive boiling) και ο κατακερματισμός με υπερκρίσιμες θερμοκρασίες και πιέσεις (fragmentation). Δεδομένου, όμως, ότι αυτές οι μέθοδοι είναι εκρηκτικού χαρακτήρα, η ανάλυσή τους απαιτεί και την ανάπτυξη υδροδυναμικού μοντέλου.

Στο κεφάλαιο 5 ακολουθεί το υδροδυναμικό μοντέλο, το οποίο περιγράφει τα κύματα κρούσης (shock waves) που δημιουργούνται λόγω της πίεσης από την αποβολή υλικού, καθώς και τα κύματα εκτόνωσης (rarefaction waves) που ακολουθούν οδηγώντας στην εκτόνωση του πλάσματος (plasma expansion).

Στο κεφάλαιο 6 παρουσιάζεται το ηλεκτρομαγνητικό μοντέλο, το οποίο χρησιμοποιείται κυρίως για την περιγραφή της αλληλεπίδρασης της ύλης με παλμούς λέιζερ υψηλής ενεργειακής πυκνότητας. Λαμβάνει υπόψη τη σχετικιστική κίνηση των ηλεκτρονίων (relativistic electrons), που οδηγεί τελικά σε φαινόμενα όπως η δύναμη που ασκείται σε φορτισμένα σωματίδια από μια ταχέως μεταβαλλόμενη ηλεκτρομαγνητική πηγή (ponderomotive effect), η πέδηση (attenuation), η ανακυκλοφορία (reflux), η δίδυμη γένεση για παραγωγή ζεύγους ηλεκτρονίων-ποζιτρονίων (electron-positron pair production) και το ηλεκτρικό πεδίο θύλακα πλάσματος (sheath electric field). Από όλες τις δυνατές μεθόδους για την επιτάχυνση σωματιδίων με λέιζερ, εδώ εξετάζεται η απευθείας επιτάχυνση των ηλεκτρονίων από το λέιζερ (direct laser acceleration) και η επιτάχυνση ιόντων μέσω πεδίου θύλακα (target normal sheath acceleration).

Στο κεφάλαιο 7 γίνεται η ενοποίηση του θερμικού, υδροδυναμικού και ηλεκτρομαγνητικού μοντέλου σε ένα ενιαίο μοντέλο για την πλήρη περιγραφή και

βελτιστοποίηση των μηχανισμών δημιουργίας των επιταχυντών σωματιδίων με λέιζερ. Επιπρόσθετα, οι προβλεπτικές δυνατότητες του μοντέλου δοκιμάζονται πάνω στην επόμενη γενιά λέιζερ – κλάσης PW (petawatt-class lasers). Τέλος, αναλύονται πρακτικές εφαρμογές των επιταχυντών και αναπτύσσονται τρεις μελέτες περίπτωσης (case studies) για τη χρήση των επιταχυντών σε εφαρμογές ACSM (εμφύτευση ιόντων, εισαγωγή ατελειών και δημιουργία νανοδομών).

Στο κεφάλαιο 8 συνοψίζονται τα βασικά συμπεράσματα της έρευνας και περιγράφονται τα αμέσως επόμενα βήματα αναφορικά με την περαιτέρω ανάπτυξη του μοντέλου ανοικτού κώδικα, όπως είναι η ενσωμάτωση και των υπόλοιπων μεθόδων επιτάχυνσης ηλεκτρονίων και ιόντων (ενδεικτικά: επιτάχυνση μέσω διεγερμένου πλάσματος από λέιζερ – laser wakefield acceleration, επιτάχυνση μέσω πίεσης ακτινοβολίας λέιζερ – radiation pressure acceleration, επιτάχυνση μέσω διάτρησης πλάσματος και μεταγενέστερης ενίσχυσης – breakout afterburner), αλλά και ενός νέου τμήματος κώδικα, εξειδικευμένου στην μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης είτε απευθείας με λέιζερ είτε μέσω επιταχυντών σωματιδίων με κοιλότητες έγκλειστης ακτινοβολίας (hohlraum), μια διαδικασία κρίσιμη για την πυρηνική σύντηξη, τη φυσική υψηλών ενεργειών και τη μελέτη υλικών σε ακραίες συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας.

Ερευνητική συμβολή

Η διατριβή αυτή αποτελεί ταυτόχρονα και τεκμηρίωση (documentation) του μοντέλου ανοικτού κώδικα που αναπτύχθηκε, προσφέροντας ένα εργαλείο για την κοινότητα των ερευνητών που ασχολούνται με την προσομοίωση αλληλεπιδράσεων λέιζερ-πλάσματος. Το μοντέλο ανοικτού κώδικα είναι διαθέσιμο στην πλατφόρμα Code Ocean υπό την άδεια GNU General Public License version 3 ([GPLv3](#)), ενώ τα αποτελέσματα επικύρωσής (validation) του είναι διαθέσιμα στο αποθετήριο figshare υπό την άδεια Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-4.0). Επιπλέον, οι υπολογιστικές και θεωρητικές αναλύσεις που προέκυψαν από αυτή την έρευνα έχουν δημοσιευθεί σε τρία επιστημονικά άρθρα, με ένα τέταρτο υπό αξιολόγηση.