

## プラズマ中におけるクーロン結晶形成のダイナミクスに関する 分子動力学計算

<sup>1</sup>九大基幹, <sup>2</sup>九大院総理工

○古屋謙治<sup>1,2</sup>

### Molecular dynamics calculations for the formation of Coulomb crystals in plasmas

○Kenji Furuya<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Arts and Science, Kyushu University, Japan

<sup>2</sup> Department of Molecular and Material Sciences, Kyushu University, Japan

**【Abstract】** Classical molecular dynamics calculations were carried out to investigate the formation dynamics of Coulomb crystals experimentally observed in the DC plasma equipment originally developed in our laboratory. The one-component plasma model which takes only highly charged  $\mu\text{m}$ -size particles interacting with each other under the Yukawa potential was adopted. The results gave the bcc structure, but many defects appeared in comparison of the observed one.

**【序】**我々は昨年の本討論会において、新たに開発したクーロン液体・クーロン結晶観測装置について報告した[1]。この装置はDCプラズマ源と独自の電極形状を有しており、プラズマ中で負に帯電した $\mu\text{m}$ サイズの微粒子は半球型ポテンシャル内にトラップされ、クーロン結晶が形成される。この結晶は集団の厚みが増すと、緩やかな結晶構造を保ちながら流動性を示し、横方向の流れ（渦）や縦方向の流れ（対流）が観測されたり、明確な層分離が観測されたりなど、既報の現象のみならず、新たな現象を観測することにも成功した。そこで、これらの現象を発生原因を調べるために古典分子動力学計算を行った。

**【計算】**DCプラズマ中では希ガス正イオンの流れに拮抗する負に帯電した $\mu\text{m}$ サイズの微粒子が、重力と電位勾配による力のバランスによって空間に浮遊している。微粒子は $10^3$ のオーダーに帯電しているが、周囲を取り囲む正イオンによって遮蔽されている。また、プラズマ中には遊離した電子も存在する。そこで、微粒子間に働くポテンシャルをYukawa型で表し、帯電した微粒子のみを考慮する一成分プラズマモデルに基づき古典MD計算を行った。計算プログラムにはLAMMPS[2]を用いた。5mm正方の底面を有する直方体領域内に微粒子をランダムに配置すると、微粒子は互いの反発力によって激しく動き回りながら落下する。1nsステップでMD計算を行い、1秒（100万ステップ）程度で微粒子の運動が落ち着くよう微粒子速度の減衰因子を適切に調整した。また、領域の境界では鏡面反射するよう設定した。なお、実験で観測されたような半球型の境界を用意し、境界での微粒子の反射を適切に扱えるようプログラムの改良を進めている。

**【結果と考察】**種々の半径を有する、電荷 $1000\text{ C}$ 、密度 $1\text{ g cm}^{-3}$ の微粒子500個のMD計算を行った結果を図1に示す。微粒子半径が大きいほど微粒子間距離が小さくなるのは重力の影響であろう。微粒子はfcc構造を取ろうとするが、上層側から下層側へ少し沈み込んだ微粒子がいくつも存在し、最下層においてもfcc構造は少し崩れている（図2,3参照）。

微粒子にランダム力を加え、結晶化後も微粒子がある程度動けるようなシミュレー

シオンを行って見たところ、あまりランダム力を大きくしてしまうと結晶構造自身が崩れてしまい、結晶化を促進するには至らなかった。この結果は計算ステップ数の不足に由来するものではない。また、微粒子全体の流動も見られなかった。一方、観測されたクーロン結晶では、個々の微粒子はほとんど静止しているが、比較的上層においても乱れの無い構造を形成している（図4）。

直径  $0.22 \mu\text{m}$  の単分散シリカを用いて観測されたクーロン結晶は、図5に示すように2つの結晶領域に分かれていた。この図の左側の領域の結晶は右側のそれよりも微粒子間距離は小さいが、右側の微粒子に比べて激しく動いている。2つの結晶領域が構成された理由として、微粒子モノマーによる結晶領域とダイマーによる結晶領域が分離したことが考えられる。しかし、半径の異なる微粒子を混ぜたMD計算を行っても微粒子集団は分離しなかった。微粒子間ポテンシャルの形状についても改良する必要があると考えられる。

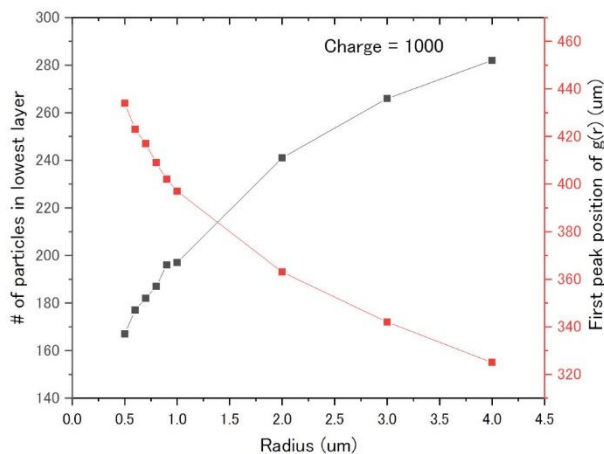


図1. 微粒子半径と微粒子間距離との関係

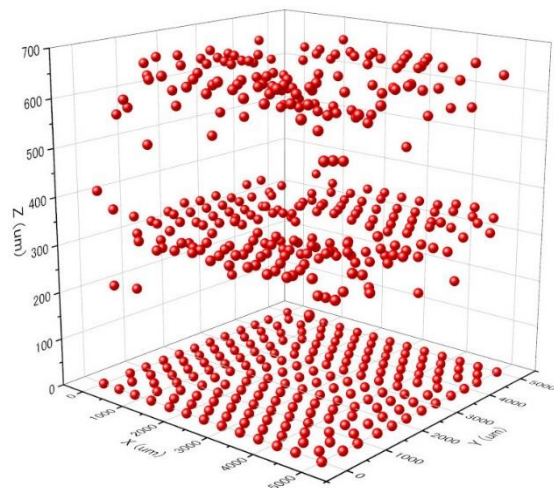


図2. 電荷 1000 C, 半径  $1 \mu\text{m}$  の微粒子 500 個の MD 計算で得られた 3 次元配列

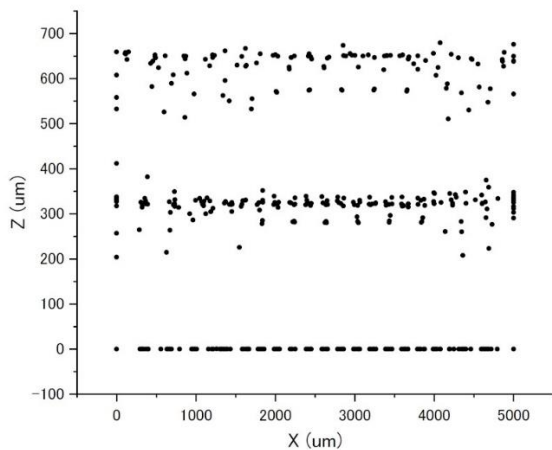


図3. 図2の XZ 平面へ射影

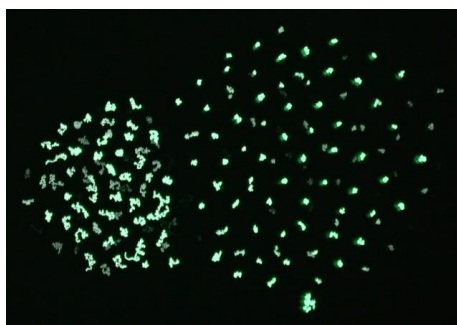


図5. 直径  $0.22 \mu\text{m}$  の単分散シリカによるクーロン結晶 (1 s の比較明合成)

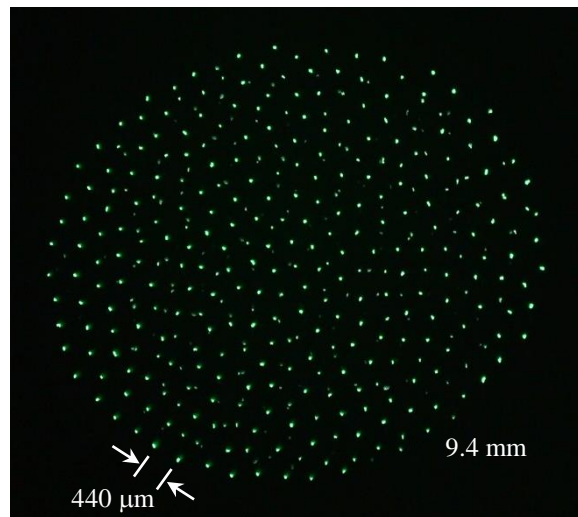


図4. 水平方向のレーザーシートを用い上部から観測した直径  $2.9 \mu\text{m}$  の単分散アクリル系高分子によるクーロン結晶 (100 ms の比較明合成)

#### 【参考文献】

- [1] 古屋, 第11回分子科学討論会, 1P054 (2017).
- [2] URL: <https://lammmps.sandia.gov/>