

## 2種イオンクーロン結晶のMDシミュレーション MD Simulation of two-species ion Coulomb crystals

角田匠, 竹川拓希, 工藤海也, 後藤泰輔, 荒巻光利

TSUNODA Takumi, TAKEGAWA Hiroki, KUDO Hiroya, GOTO Taisuke,  
ARAMAKI Mitsutoshi

日大生産工  
Nihon Univ

### 1. はじめに

プラズマ中の荷電粒子の間にはクーロン相互作用が働く。次の式で定義されるクーロン結合係数 $\Gamma$ がクーロン相互作用の影響の大きさの目安を与える。

$$\Gamma = \frac{\text{平均クーロンポテンシャルエネルギー}}{\text{熱運動エネルギー}}$$

$\Gamma$ が1よりも大きくなればクーロン相互作用がプラズマに大きく影響を与え、このようなプラズマを強結合プラズマといい、 $\Gamma$ が1よりも十分小さければ弱結合プラズマと呼ばれる。弱結合プラズマは気体の状態であり強結合プラズマは液体の状態の性質を示す。 $\Gamma$ が約170を超えると強結合プラズマはクーロン結晶となることが知られている。

イオントラップは、閉じ込めたイオンをレーザー冷却することで弱結合プラズマからクーロン結晶にいたる広い範囲の状態のプラズマを生成することができ、精密分光や量子演算などの研究で用いられる。

我々は、2種類のイオンを個別に温度制御し、冷却過程の違いが最終的な結晶構造にどのような影響を与えるかを研究する目的でCa, Sr混合プラズマ実験を進めている。今年度より、実験的研究に加えて、2種イオンクーロン結晶の構造を評価するためのMDシミュレーションの開発を始めている。

本講演では、シミュレーションコードの開発状況と、初期の解析結果について報告する。

### 2. MDシミュレーション

荷電粒子が受けるクーロン相互作用と電場から受ける力を計算し、イオントラップ内でのイオンの運動を明らかにする。

クーロン相互作用の計算は、 $x$ 方向の場合、次式で表せる。

$$F_x = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} \frac{r_x}{r}$$

$y$ 方向、 $z$ 方向も同様に表せる。

イオントラップ内のポテンシャルは、 $z$ 軸上に近い $x-y$ 平面上のポテンシャル $\phi_{RF}(x, y, t)$ と $z$ 軸の中心付近のポテンシャル $\phi_{END}(x, y, z)$ は次式で表せる。

$$\phi_{RF}(x, y, t) = \frac{V_{RF} \cos \Omega t + \kappa V_{DC}}{r_0^2} (x^2 - y^2)$$

$$\phi_{END}(x, y, z) = \frac{\kappa V_{END}}{z_0^2} \left[ z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2) \right]$$

$\kappa$ は幾何因子と呼ばれ、イオントラップの構造によって決まる。

クーロン相互作用と電場から受ける力を考慮した運動方程式から粒子軌道を計算する。その計算過程で質量をCaとSrに場合分けし、2種イオンの運動を明らかにした。

### 3. 実行結果

2種イオンを冷却した結果をFig.1に示す。プログラムでは、粒子数各50個、高周波電極の周波数を3.2MHz、動作電圧 $V_{rf}=230V$ 、エンドキャップ電極の動作電圧 $V_{end}=60V$ として計算し、トラップパラメータは、Ca : a値=0、q値=0.2815、Sr : a値=0、q値=0.1280である。

Fig.1では、青色で示したCa粒子の周りを橙色で示されたSr粒子が囲う様子が確認できる。これは、イオントラップが質量に対して感度を持っているために起こる現象である。次式は時間平均したときの $x$ 方向に作る実効的なポテンシャルの深さ $\overline{D}_x$ である。

$$\overline{D}_x = \frac{qV_{RF}^2}{mr_0^2\Omega^2}$$

ポテンシャルの深さ $\overline{D}_x$ より、質量の軽いCaはSrより強い力を受け、中心に集まる。

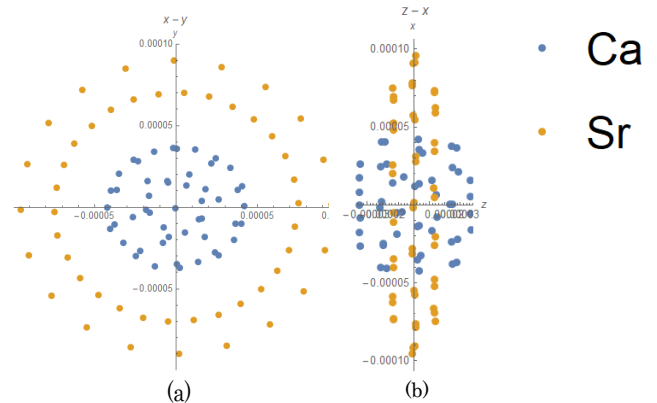


Fig.1 2種イオンの冷却結果(a)x-y平面、(b)z-x平面