

光渦レーザー照射による螺旋状ナノ針構造形成のMDシミュレーション MD simulation on structure formation of chiral nanoneedle by optical vortex laser irradiation

中村浩章^{1,2}, 土生 柊²
NAKAMURA Hiroaki^{1,2}, HABU Shu²
¹核融合研, ²名大院工,
¹NIFS, ²Nagoya Univ.,

1. 背景

ラゲルガウス (LG) ビームは、ビーム軸を中心とした軌道角運動量 (OAM) を持っている。[1]。電磁波の伝搬方向の角運動量フラックスの成分 $J = \epsilon_0 \omega (l_z + \sigma_z)/2$ である。ここで、 ϵ_0 は真空の誘電率、 ω は角周波数、 l_z 負でない整数。 $\sigma_z (= -1, 0, 1)$ は偏光。

尾松グループは、厚さ2mmのタンタル (Ta) を研磨して作ったターゲットにLGビームを照射すると、その表面にらせん状のナノニードルが形成されることを実証した[2]。彼らの結果によれば、Ta表面に起動角運動量を持つLGビームを照射すると、螺旋状のニードル構造が観察された。

そこで、本研究では、OAMを持っているEM波をTaに照射した際に、螺旋ナノニードル構造形成のメカニズムについて、分子動力学 (MD) を用いて調べた[3,4]。

2. 分子動力学シミュレーション

MDコードには、Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) コードを用いる[5]。図1のようにターゲットとして、300Kの体心立方 (BCC) Ta結晶を用意し、力場には原子間ポテンシャルであるEAM (embedded atom method) ポテンシャルを用いる。また、系の温度を制御するために、ランジュバンサーモスタットを用い、NVTアンサンブルにする。このMDシミュレーションでは、30秒の間にLGビームがTaに照射されたと仮定する[6]。具体的には、ターゲットに対して、らせん状の位相分布を持つLGモードの電場成分に比例した外力場が作用するというモデルにしている。

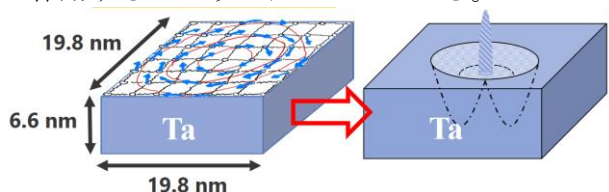


図1. シミュレーションモデル。タンタルBCC

結晶を用意して、タンタル原子に、LGモードの電場に比例する力が作用すると仮定する。すると、右のような螺旋ナノニードル形状が形成されるかを調べる。

3. シミュレーション結果

$(l_z, \sigma_z) = (1, 1)$ と $(-1, -1)$ の場合にMDシミュレーションを行った結果、螺旋ナノニードル構造乗作をすることができた(図2)。しかしながら、その他の場合には、同構造を作成はできなかった。

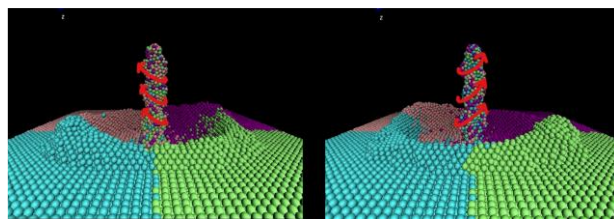


図2. シミュレーション結果。螺旋ナノニードル構造ができた。 $(l_z, \sigma_z) =$ 左図(1,1)と右図(-1,-1)。

謝辞

科研費18K11416と19K03800。NIFS共同研究NIFS20KNTS066, NIFS20KNTS070, NIFS20KNSS149, NIFS20KNSS150, NIFS21KKG030のサポートを受けた。IFERC-CS, 分子研計算機センター、NIFSプラズマシミュレータを使った。

References

- [1] L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw and J. P. Woerdman, Phys. Rev. A **45** 8185 (1992).
- [2] K. Toyoda, *et al*, Phys. Rev. Lett. **110**, 143603 (2013).
- [3] H. Nakamura, *et al*, In 38th JSST, Japan (2019).
- [4] S. Habu and H. Nakamura, In 40th JSST, Japan (2021).
- [5] <https://www.lammps.org/>
- [6] T. Omatsu, *et al.*, Opt. Express, **18**, 17967 (2010).