

講座

超高強度レーザーとプラズマの相互作用に関する物理 -ナノチューブ加速器からメガテスラ磁場生成まで-

Physics on Interaction between Intense Laser and Plasma -from Nanotube Accelerator to Mega-Tesla Magnetic Field Generation-

1. 超高強度レーザーによるプロトン加速

1. Proton Acceleration by Ultra-Intense Laser

村上匡且, 田中基彦¹⁾MURAKAMI Masakatsu and TANAKA Motohiko¹⁾大阪大学レーザー科学研究所, ¹⁾中部大学大学院工学研究科

(原稿受付: 2017年7月25日)

今回から三回シリーズとして超高強度レーザーとプラズマの相互作用というテーマで異なる3トピックにスポットを当てる。初回の本稿ではプラズマの強荷電分離現象とその結果としてのイオン加速を主題とする。続く第二回では「レーザー駆動イオンビーム生成とプロトン点火慣性核融合」というタイトルでエネルギー開発へとベクトルを向け、最終の第三回では「相対論領域におけるレーザーによる超高強磁場生成」と題し超高エネルギー密度下における複屈折現象からメガテスラ級磁場の生成といった幅広い素要素物理に触れることで新たな極限物理の展開を俯瞰する。

Keywords:

non-plasma approximation, two-fluid self-similar solution, relativistic molecular-dynamic simulation, nanotube accelerator, real electron-ion mass ratio

1.1 はじめに

高強度レーザー場によって原子から剥ぎ取られた電子は荷電分離を引き起こし、結果として生じる強力な電場によってダイナミックなプラズマ膨張が駆動される。従来、プラズマの膨張は準中性を仮定し流体方程式を適当な初期・境界条件の下で解くことにより近似的に記述されてきた。しかし、膨張するプラズマ先端部に見られる荷電分離を正確に扱うことで、初めて高エネルギーイオンのフロントの位置や最大エネルギー、さらには全体のエネルギーベクトルの定量評価が可能となる。加えて、各幾何形状におけるダイナミクスを定量的に扱うことにより、球状のクーロン爆発[1,2]と呼ばれるものから平板のTNSA (Target Normal Sheath Acceleration) [3]と呼ばれる加速方式まで一元的な議論が可能となる。本稿では、まず第1.2節で流体方程式とポアソン方程式を自己無撞着に成立させることでイオンの最大エネルギーやスペクトルを厳密に与える「静電シースによるイオン加速」理論モデルを紹介し、

続く第1.3節では特に強い荷電分離を利用した「ナノチューブ加速器」[4]の分子動力学シミュレーションについて述べる。

1.2 静電シースによるイオン加速

固体表面に $10^{18} - 10^{22}$ W/cm²程度の高強度レーザーを照射すると物質表面が瞬時にプラズマ化し、数百 keV～数 MeV の温度を持つ電子が生成され、照射された付近の物質を加熱するとともに真空中にも一部が飛び出す。これによって電子とイオンが荷電分離を起こし強力な静電場が生成されるが、真空中電子の圧力勾配による膨張しようとする力とイオン側に引き戻される静電力が均衡し、デバイス長程度の厚みを持つ高温電子層がイオンの前面に形成され、これが静電シースと呼ばれるものである[5-7]。静電シースによってイオンと電子が一体となってプラズマ膨張が駆動されるのである。膨張プラズマの先端部に見られる高エネルギーイオンの挙動は上記のように荷電分離に直接

authors' e-mail: murakami-m@ile.osaka-u.ac.jp, mtanaka@isc.chubu.ac.jp

起因するにもかかわらず従来の多くの理論モデルでは準中性として近似的にしか扱われてこなかった。それゆえ、先端イオンの正確な位置とエネルギーといった情報が正確に定量評価できていなかった。例えば Mora[8]によるシース電場によるイオン加速エネルギーに対する半解析モデルがしばしば引用されるところではあるが、結局、これも準中性という「思想」から抜けきれていない。

1.2.1 ポアソン方程式とカップルした電子・イオン2流体系の自己相似解

以下では、膨張プラズマをイオンと電子の二流体として扱い、従来の理論で無視されてきたポアソン方程式と連立させる。これによって初めて荷電分離によって駆動されるプラズマ膨張の自己無撞着な自己相似解を求めることができ、結果としてイオンの最大エネルギーを定量評価することが可能となる。本論から導かれる結論の一つは「加速イオンの最大エネルギーは単に電子温度だけでなくデバイ長によって規格化されるプラズマサイズにも大きく依存する」ことであり、このことは荷電分離を定量的に記述しない従来の理論では認識されていなかった点であることを強調しておきたい。

時間 $t = 0$ において初期温度 T_{e0} の電子が一様に分布している有限質量を持つプラズマの膨張運動について考える。簡単のためイオンは十分温度が低いものとし、電子温度は理想流体の熱力学に従い時間発展するものとする。このような一次元の二流体システムは次式により与えられる[7]：

$$\frac{\partial n_{i(e)}}{\partial t} + \frac{1}{r^{\nu-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{\nu-1} v_{i(e)} n_{i(e)}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial v_i}{\partial r} + \frac{Ze}{m_i} \frac{\partial \phi}{\partial r} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial v_e}{\partial t} + v_e \frac{\partial v_e}{\partial r} + \frac{T_e}{m_e n_e} \frac{\partial n_e}{\partial r} - \frac{e}{m_e} \frac{\partial \phi}{\partial r} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{1}{r^{\nu-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{\nu-1} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = 4\pi e (n_e - Zn_i). \quad (4)$$

ただし、 $\nu = 1, 2, 3$ は各々、平板、円筒、球の各幾何形状に対応し、添字の "e" と "i" は各々電子とイオンを表す。(1) は両者の連続方程式、(2) はイオンの運動方程式、(3) は電子の運動方程式、(4) はポアソン方程式である。さらに、 ϕ , e , Z は各々、静電ポテンシャル、電気素量、イオンの電離度を表す。空間的に一様な電子温度 $T_e(t)$ と電子密度 $n_e(t, r)$ との関係は、ポリトロピック指数 γ を使い $T_e(t)/T_{e0} = [n_e(t, 0)/n_e(0, 0)]^{\gamma-1}$ という形式に表すことができる。

従来、膨張プラズマが自己相似解を持つのは系が準中性 ($n_e = Zn_i$) の場合のみというのが通念であったが[9]、上記の(1)-(4)からなるシステムによく知られた次の Ansatz (解の取り得る数学的形式・仮説)[10]を適用することにより荷電分離した二流体プラズマにおいても物理的に有意な自己相似解が存在することが初めて見出された[11]。

$$v_{i(e)}(t, r) = \dot{R}\xi, \quad \xi = \frac{r}{R(t)}, \quad \dot{R} \equiv \frac{dR}{dt}, \quad (5)$$

$$n_e(t, r) = n_{e0} \left(\frac{R_0}{R} \right)^\nu N_e(\xi), \quad N_e(0) = 1, \quad (6)$$

$$Zn_i(t, r) = n_{e0} \left(\frac{R_0}{R} \right)^\nu N_i(\xi), \quad N_i(0) \neq 1. \quad (7)$$

(5)は、システム長 \gg 初期サイズとなる程度に時間が十分経過した状態では速度プロファイルは Taylor-Sedov 型[10]、すなわち線形で表されるという爆発・膨張といった諸現象において共通して成立する流体力学的要請を反映している。しかし、中性流体に対して成立する Sedov 解[10]とは異なり、(5)-(7)の形式からは一般には(1)-(4)の自己相似解は得られない。というのも、今考えている系にはデバイ長 $\lambda_D(t) = \sqrt{T_e/4\pi n_e e^2}$ とプラズマ半径 $R(t)$ という長さの次元をもつ2つの特性長が存在するためである。しかしこのことは、裏返せば $\lambda_D(t)$ と $R(t)$ とが次式の如くコヒーレントに時間発展すれば有意な解を持ち得ることを意味している：

$$\Lambda = \frac{R}{\lambda_D} = \frac{R_0}{\lambda_{D0}} = R_0 \left(\frac{4\pi e^2 n_{e0}}{T_{e0}} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

質量保存則 $n_e(t, 0) \propto [R(t)]^{-\nu}$ を使うと上式は

$$T_e R^{\nu-2} = T_{e0} R_0^{\nu-2} = const \quad (9)$$

と書き換えられ、ポリトロピック関係 $T_e(t) \propto [n_e(t, 0)]^{\gamma-1} \propto [R(t)]^{-\nu(\gamma-1)}$ を考慮すると(9)から系の熱力学的関係を定義するポリトロピック指数 γ と幾何形状を表す ν との間に

$$\gamma = 2 - \frac{2}{\nu} \quad (10)$$

という関係が成立する場合にのみ、今考えている系に解が存在することがわかる。一見すると、(10)には何の物理的含蓄もなく、むしろ人為的で限定的なものにさえ見えるが、下記のように物理的に有意な関係を示している。まず円筒幾何 ($\nu = 2$) では $\gamma = 1$ となり、これは多くの解析モデルで目にかかる等温膨張条件に他ならない。一方、球幾何 ($\nu = 3$) においては $\gamma = 4/3$ となるが、これは相対論的電子 ($T_e \gg m_e c^2$) の断熱係数に等しく、非常に興味深いケースである。ここで強調すべきことは、この解析モデルが単にこれら2つの特殊なケースに限らず、実際の実験にも対応する他の多様な γ 値に対しても適応できる、という点である。

ここで得られた自己相似解が記述するイオンと電子流体について補足しておく。イオンは $0 \leq r \leq R\xi_f$ の領域で記述され、明瞭なシャープなエッジを座標 ξ_f に持つ。物質と真空の境界においてシャープなプロファイルを持つという事実はイオンが十分低温であるという条件から得られる自然な帰結である。一方の電子は、イオン領域だけでなく真空中にも飛程を伸ばし無限の領域として $0 \leq \xi < \infty$ で定義される。

(5)-(7)を通じて連続の方程式が任意の $R(t)$, $N_e(\xi)$, $N_i(\xi)$ に対して自動的に満たされることは容易に確認され

る。次に、イオンの運動方程式(2)は次のように変数分離形に変形できる：

$$\frac{m_i R}{Z T_e} \frac{d^2 R}{dt^2} = \frac{R^{\nu-1}}{c_{s0}^2 R_0^{\nu-2}} \frac{d^2 R}{dt^2} = -\frac{1}{\xi} \frac{d\Phi}{d\xi} = 2. \quad (11)$$

ただし、時間依存 $T_e(t)$ を除去するために(9)を使うと共に、新たに境界条件 $\Phi(0)=0$ を持つ無次元ポテンシャル $\Phi(\xi) = e\phi/T_e$ を導入した。また $c_{s0} = (ZT_{e0}/m_i)^{1/2}$ は $t=0$ における音速を表す。上式の時間部分は直ちに積分でき次式が得られる。

$$\dot{R}(t) = \begin{cases} 2c_{s0}^2 t/R_0, & \nu = 1, \\ 2c_{s0} \sqrt{\ln[R(t)/R_0]}, & \nu = 2, \\ 2c_{s0} \sqrt{1-R_0/R(t)}, & \nu = 3, \end{cases} \quad (12)$$

電子の運動方程式(3)はすべての領域 $0 \leq \xi < \infty$ で成立する。(5)と(6)、さらに(11)の時間成分を使うと次式を得る。

$$N_e = \exp(\Phi - \mu_e \xi^2). \quad (13)$$

ここで $\mu_e = Zm_e/m_i \ll 1$ は電子・イオン間の質量/電荷比である。近似的に $\mu_e = 0$ とすると馴染みのあるボルツマン関係式となる。このボルツマン関係式は、通常、電子流体の方程式を厳密に解くことなく、イオンの流体方程式系(1),(2),(4)を解くために導入されるのであるが、我々は以下の理由によりボルツマン関係式を使わない。

1.2.2 非平衡な系における熱統計力学

そもそもボルツマン関係式 $n_e(t, r) = n_e(t, 0) \exp(e\phi/T_e)$ を動的システムに適用するということは、電子の質量を近似的にゼロだと仮定し、任意の時間において与えられるポテンシャル配位 $\phi = \phi(t, r)$ に対応した熱力学的平衡状態に瞬時に遷移することを意味している。しかしそうした平衡状態は、重力場の場合と同様[12]、平板幾何においては可能であっても、有限の電荷に対して記述される球対称系においては存在し得ない。このことは球対称プラズマ中心と無限遠との間のポテンシャルギャップが有限である ($\phi_\infty > -\infty$) ことを思い起こせば容易に理解されよう。すなわち、座標原点で $\Phi(0) = 0$, $N_e(0) = 1$ とすると、無限遠では $N_e(\infty) = \exp(\Phi_\infty) > 0$ となり、決して電子密度は0にならない。かくして、 $\mu_e = 0$ とする通常のボルツマン関係式を採用すると、球幾何 ($\nu = 3$) における定常的な系に対しては物理的に有意な解が存在しないことがわかる。これまでの導出からもわかるように、イオンと電子が連動して膨張し、ポアソン方程式も自己無撞着に満たしつつ、時間発展可能な解が存在するためには、電子質量は有限である ($\mu_e > 0$)、という事実をシステムに反映させる必要があり、その帰結として(13)が導かれるのである。

相似変数 ξ を使ってポアソン方程式を書き換えると次式となる。

$$\frac{1}{\xi^{\nu-1}} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^{\nu-1} \frac{d\Phi}{d\xi} \right) = \begin{cases} \Lambda^2 (N_e - N_i), & \xi \leq \xi_f, \\ \Lambda^2 \exp(\Phi - \mu_e \xi^2), & \xi > \xi_f, \end{cases} \quad (14)$$

(8)で定義したように $\Lambda = R/\lambda_D$ は今我々が考えている系で唯一の無次元変数であり、(9)が満たされる場合には

Λ が膨張プロセスを通じて一定に保たれることが保証される。(11), (13), (14)からイオン存在領域 ($\xi \leq \xi_f$) におけるすべての変数の振る舞いを得ることができる：

$$\Phi = -\xi^2, \quad (15)$$

$$N_e = \exp[-(1+\mu_e)\xi^2], \quad (16)$$

$$N_i = N_e + 2\nu\Lambda^{-2}. \quad (17)$$

最後に残された課題はイオンフロントの座標 ξ_f の決定であり、そのためには次の3つの境界条件と共にシース領域 ($\xi > \xi_f$) において(14)を解かなければならない。

$$\phi(\xi_f) = -\xi_f^2, \quad \frac{d\phi(\xi_f)}{d\xi} = -2\xi_f, \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} \xi^{\nu-1} \frac{d\phi}{d\xi} = 0. \quad (18)$$

こうして得られる微分方程式の解によって、ポテンシャル $\Phi(\xi)$ と座標 ξ_f を、系の固有値として初めて定量的に知ることができるのである。一般的には、この固有値問題は解析的には解けず数値的に解く以外にない。解析解は唯一 $\mu_e = 0$ を仮定した場合の平板幾何 ($\nu = 1$) において得られる：

$$N_e = \exp(\Phi) = 2\Lambda^{-2} (xi - \xi_f + \xi_f^{-1})^{-2}, \quad (19)$$

$$\xi_f^2 = W(\Lambda^2/2). \quad (20)$$

ここで $W(x)$ は $x = W \exp(W)$ の逆関数であり、ランベルトの W 関数[13]と呼ばれるものである。この W 関数は、 $x \ll 1$ に対して $W(x)$ 、逆に $x \gg 1$ に対して $W(x) \approx \ln(x/\ln x)$ という漸近的振る舞いをする。上記の解析解の他、 $\Lambda \gg 1$ または $\Lambda \ll 1$ であれば任意の ν に対し $\mu_e \geq 0$ であっても近似解析解が存在する。

実際、(18)の第2条件は、 $\xi_f^2 \gg 1$ の場合には $\xi = \xi_f$ 付近において電子密度 $N_e = \exp(\Phi - \mu_e \xi^2)$ が $\Delta\xi \approx \xi_f^{-1} \ll \xi_f$ のスケールで降下することを示している。これは発散を計算する際 $\xi^{\nu-1}$ で表される曲率の効果が無視できる場合であり、 $\mu_e \ll 1$ の場合、 $\mu_e \xi^2$ に代わって $\mu_e \xi_f^2$ が使えることを意味する。この時、 $\nu = 1$, $\mu_e = 0$ の場合の類推から

$$\xi_f^2 \approx (1+\mu_e)^{-1} W[(1+\mu_e)\Lambda^2/2], \quad (21)$$

が得られるが、これは(20)と実質的に等価である。

上記とは逆の極限である $\Lambda \ll \mu_e^{1/2}$ ($\nu = 1, 2$) の場合、あるいは $\Lambda \ll \mu_e^{3/4}$ ($\nu = 3$) の場合、 $\xi > \xi_f$ において $\Phi = 0$ とし、(14)を $0 \leq \xi < \infty$ の領域で積分することにより次式を得る。

$$\xi_f^2 \approx \left[\frac{1}{4} \Gamma(\nu/2) \right]^{2/\nu} \frac{\Lambda^{4/\nu}}{\mu_e} \quad (22)$$

ただし $\Gamma(x)$ はガンマ関数である。最も興味深いのは球幾何において、 $\Lambda \ll 1$ の極限で(22)は $\phi = -3\xi_f^2$ を使うことにより、より高い精度を持つ次式で与えられる。

$$\xi_f^2 \approx \frac{1}{2} W \left(\frac{\pi^{1/3}}{2\mu_e} \Lambda^{4/3} \right). \quad (23)$$

さて $\Lambda \ll 1$ の極限では、(17)より $N_i = 2\nu\Lambda^{-2} \gg N_e$ となり、ここで得られた自己相似解が一様な密度のイオン球による

クーロン爆発[1]を正確に再現することを強調しておきたい。図1は球幾何の下で得られた $\xi_f(\Lambda)$ の数値解を示したものである。 $m_i/Zm_e = \mu_e^{-1}$ の2つの値は、2000がプロトン、 10^5 が(例えば)電離度 $Z=4$ の金イオンを想定したものである。先に導出した漸近解(21)と(23)が Λ のほぼ全領域に渡って数値解をよく再現していることがわかる。

規格化された密度プロファイル N_i, N_e に加えポテンシャル Φ と電場 $E = -d\Phi/d\xi$ を図2に示す(ただし $\nu=3, \mu_e^{-1}=2000$)。ここではイオンフロントが $\xi_f=5$ であり、これは $\Lambda = 1.74 \times 10^6$ のケースに対応する。はっきりと $\Delta\xi \ll \xi_f$ のスパンで N_e と E が $\xi > \xi_f$ において急激に減少している様子が確認できる。

1.2.3 最大イオンエネルギーとエネルギースペクトル

次に静電場によって加速されるイオンのスペクトルについて考えよう。従来、プラズマの自由膨張によって得られるイオンのエネルギースペクトルを記述する最も一般的な方法は、荷電分離の効果を無視した上で中性プラズマとして近似される流体方程式を流体問題として解くというものであった。このことは、本稿で扱ってきた有限プラズマの場合であれば、温度が空間的に一定という仮定の下で準中性条件 $n_e = Zn_i$ を(1)~(7)の式に適用し流体方程式系を解くことになる。結果として得られる密度プロファイルは $N_e(\xi) = N_i(\xi) = \exp(-\xi^2)$ で表されるガウシアン形であり無限遠方に伸びている。 $t \rightarrow \infty$ で漸近的に得られる速度場は $v_{i(e)}(t, \xi) = v_\infty \xi$, ただし,

$$v_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} \dot{R} = \begin{cases} 2c_{s0} \sqrt{\ln(R/R_0)}, & \gamma = 1, \\ 2c_{s0} / \sqrt{\nu(\gamma-1)}, & \gamma > 1, \end{cases} \quad (24)$$

と表される。膨張の結果、大半のイオンが次式で与えられるオーダーの運動エネルギーを持つに至る。

$$\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2} m_i v_\infty^2 \quad (25)$$

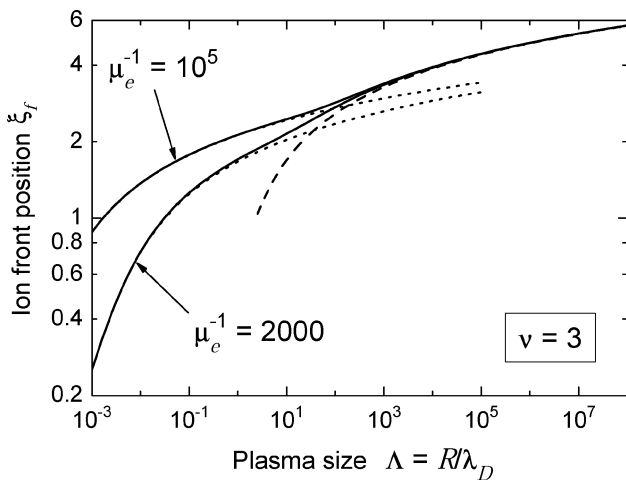


図1 球幾何($\nu=3$)の場合の規格化された膨張イオンフロントの座標 ξ_f をプラズマの厚み Λ の関数として表したものの(文献[11]より抜粋)。荷電分離の効果を正確に取り入れるためには電子とイオンの間の荷電質量比 $\mu_e^{-1} = m_i/Zm_e$ が重要な役割を演じる。図中、実線は数値計算結果、点線及び鎖線は解析解(21), (23)を表す。

例えば $\nu=3, \gamma=4/3$ の場合、 $\mathcal{E}_0 = 2ZT_{e0}$ である。上記の運動エネルギー \mathcal{E}_0 は任意の $\gamma > 1$ に対し有限値を持つが、等温膨張($\gamma=1$)の場合は時間 t と共に単調増大してゆく。

恐らくここで最も興味深い疑問は「最大イオンエネルギーは特性値 \mathcal{E}_0 の一体何倍か」であろう。中性プラズマに対する解析解は指数関数的に減少するが、その高エネルギー端は限りなく遠方に伸びるため、まさにマクスウエル分布がそうであるように、最大エネルギーは無限大となる。ただこのことは系の総エネルギーが有限であることと矛盾しない。 $\mathcal{E}_{i,\max}/\mathcal{E}_0$ の有意な数値は、本稿で述べてきたイオンと電子をに流体近似として記述し荷電分離を考慮することで初めて得られる。我々の自己相似解は極めてシンプルな形式でその答えを与えてくれる：

$$\mathcal{E}_{i,\max} = \mathcal{E}_0 \xi_f^2. \quad (26)$$

ここで規格化されたイオンフロントの座標 ξ_f は、固有値問題(14), (18)を数的に解くことにより得られる。こうして、理論から得られる最も重要な結論：最大イオンエネルギーの増倍率 ξ_f^2 は、プラズマスケール Λ を電子デバイ長で規格化した無次元量によって決定されるということであり(20)によって与えられる。近似式(20)は $\mu_e \ll 1$ 及び Λ が十分大きく、各幾何形状 $\nu=1, 2, 3$ のそれぞれに対し次の関係を満たす時に適用される； $\Lambda > \Lambda_* = 0.1, 5, 50$ 。プラズマのスケールが無限に大きくなると($\Lambda \rightarrow \infty$)、加速因子 ξ_f^2 も無限大となり、中性プラズマモデルの結論と一致する。

加速イオンのエネルギースペクトルは(5)及び $t \rightarrow \infty$ に対する $\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_0 \xi^2$ より $\mathcal{N}_i(\xi)$ の微分形式として次式で与えられる。

$$\frac{d\mathcal{N}_i}{d\mathcal{E}_i} = \frac{A}{\mathcal{E}_0} \left(\frac{\mathcal{E}_i}{\mathcal{E}_0} \right)^{\nu/2-1} \left\{ \frac{2\nu}{\Lambda^2} + \exp\left[-(1+\mu_e) \frac{\mathcal{E}_i}{\mathcal{E}_0}\right] \right\} \quad (27)$$

ここで $A = (2 \int_0^{\xi_f} N_i \xi^{\nu-1} d\xi)^{-1}$ で与えられ、定義域 $0 \leq \mathcal{E}_i \leq \mathcal{E}_{i,\max}$ での全積分が1となるよう \mathcal{N}_i が規格化されている。多くの応用において特に重要となる最大イオンエ

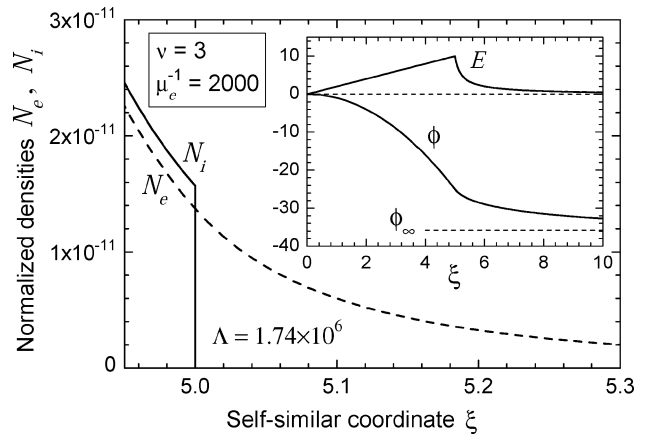


図2 イオンフロント周辺($\xi = \xi_f = 5$)の規格化されたイオン密度 N_i 、電子密度 N_e 、電界ポテンシャル Φ 、電場 $E = -d\Phi/d\xi$ (文献[11]より抜粋)。ただし球幾何($\nu=3$)およびプロトン($\mu_e^{-1}=2000$)を仮定。

エネルギー $\mathcal{E}_i \approx \mathcal{E}_{i,\max}$ 付近に存在する総イオン数は, (20), (27), (26)より近似的に

$$\Delta N_{if} \approx \mathcal{E}_{i,\max} \left. \frac{dN_i}{d\mathcal{E}_i} \right|_{\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_{i,\max}} = \frac{2}{\Gamma(\nu/2)} \frac{\xi_f^{\nu+2}}{\Lambda^2}, \quad (28)$$

として与えられる.

1.3 金イオンによる炭素ナノチューブ爆発過程の分子動力学

相対論による分子動力学法を用いて, 実質量のプロトン, 炭素, 金, 電子により炭素ナノチューブの数値シミュレーションを行う. そこではクーロン相互作用を基礎にして電磁場を解き, ニュートン運動方程式によって粒子運動を追跡する. 高輝度のレーザー強度 10^{22} W/cm^2 において, 正イオンはナノチューブの長軸方向に強く加速され, 亜相対論領域に近づく. 電子は正イオンから分離して光速度の90%で垂直方向に進行する.

1.3.1 炭素・金イオンのナノチューブ

最近, 二重構造を持つナノメートル (nm) サイズのカーボンナノチューブに高強度レーザーを照射することで, 単色で MeV オーダーのエネルギーを持った指向性のあるプロトンビームを生成できることが示された[4] (図3参照). 今後, レーザー強度を増すことで, 加速プロトンのエネルギーが数 10MeV の域にまで達するか否か, 応用の観点からも興味深い. というのも, MeV~数十 MeV の陽子線を使うことで, 例えば陽子線トモグラフィによる各種診断や, 陽子線による癌治療といった産業応用・医療応用など, 様々な近未来的応用が期待されているからである.

また, 近年, クラスターコンピュータの演算速度の増大と MPIシミュレーション技法の発展に伴い, 以前にも増して多様な物理化学過程が厳密かつ詳細に議論・評価されるようになってきた. 筆者(田中)が関与する分野でも, マイクロ波・遠赤外線加熱機構, DNA のナノ孔通過, 電荷逆転と電気泳動法, ナノチューブ加速器などがあげられる

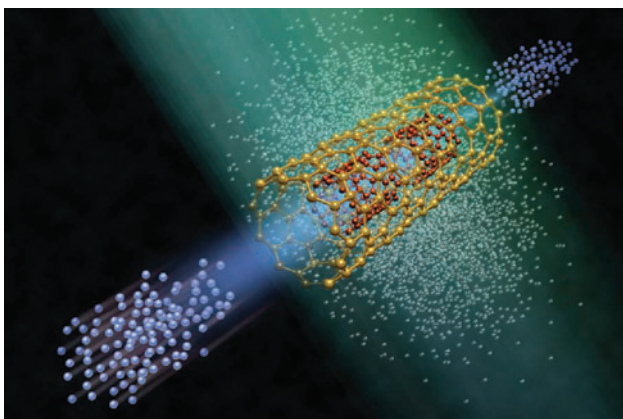


図3 ナノチューブ加速器 (概念図). 超高強度レーザーに照射されたナノチューブから, 瞬時に大半の電子 (白点) が剥ぎ取られ, その結果, クーロン反発力により初期に内部に装填されていた水素原子 (赤) はプロトンビーム (青) となってナノチューブ両端から射出される (参考文献[4]より抜粋).

[1, 4, 14-20]. その最新の研究では, 分子動力学法において実質量を取り扱うことが可能である. 実際, スーパーコンピュータ富士通FX100を使って, 実際の質量比プロトン1, 炭素12, 金197, そして電子1/1836で, イオンビームの発展が議論できる.

ところで以前の研究[4]では, 相対論的にプロトン, 炭素, 電子などの運動を追う静電波分子動力学を行った. しかし電子はプロトンの1/100の質量を仮定しており, 時間においてイオン間の分離は不十分であった. 今回は, 質量比を実際と同じ大きさにとり, 印加する $E \times B$ ドリフト場に時間・座標依存性として $(\omega t - k_y y)$ を取り入れる.

まず炭素間の距離 1.421 Å を基本にして, 2次元6員環ネットワークにより, 数 10 nm オーダーで炭素の円筒形を構築する. そこに金イオンを付加して, ナノチューブのイオン運動の発展を数値シミュレーションで調べよう. ここで金は独自のかたちを作らないが, 質量数197を持ち, イオン価数20-70価をもったナノチューブ籠の随伴物として, その振舞いが注目される.

1.3.2 3次元の分子動力学

この研究では, ニュートン運動方程式で粒子の座標 $\vec{r}(t)$, 速度 $\vec{v}(t)$ を解き, 時間発展を追跡する. これにはより原理的な分子動力学を用いた[1, 4]. その理由は, 置かれている状況ではイオン密度が場所により大きく異なり, 平均場であるプラズマ近似が成り立たないからである.

初期に炭素, 金粒子を2次元表面である, 約 15 nm (直径, 横) と 30 nm (高さ, 縦) の円筒形を構築する. その原点を含む内側に約 12 nm (直径), 27 nm (高さ) の円柱をとり, プロトン粒子を一様につめこむ. 約43万個になる粒子のプロトン, 炭素, 金そして電子は初期温度をゼロとする.

イオン運動は3次元の無限空間で定義されていて, クーロン相互作用を高い精度で解く縦電場を用いる. その運動方程式の右辺は,

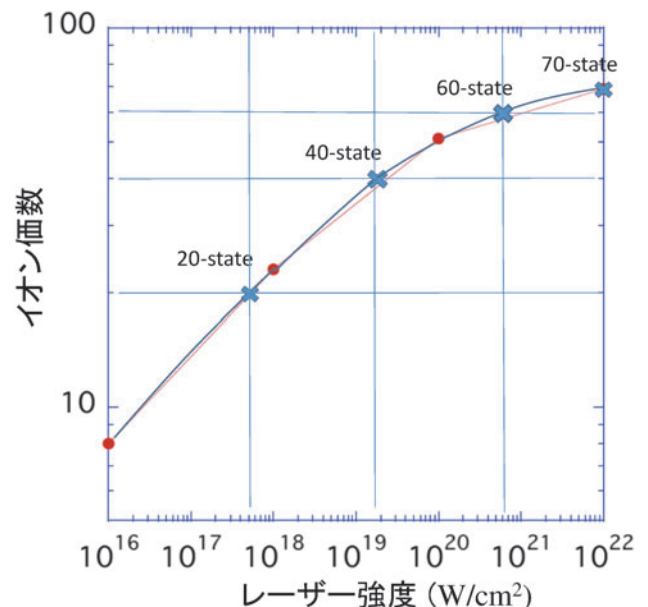


図4 レーザー強度と金のイオン価数.

$$F_{Coul}(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^N q_i q_j \vec{r}_{ij} / r_{ij}^3 \quad (29)$$

である。ここで、 q_i は i 番目の粒子の電荷、 \vec{r}_i は粒子の座標であり、 z 軸はナノチューブの長軸方向、 x, y 軸は垂直方向である。粒子数は $i = 1, \dots, N$ であり、 $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ は粒子 i, j の距離で、すべてのイオン種の組み合わせについて和をとる。

これとあわせて、3次元 Maxwell 方程式を解くことにする。横電場 $\vec{E}_T(\vec{r}, t)$ と磁場 $\vec{B}(\vec{r}, t)$ は有限領域のグリッド上で定義される。現実には使用可能な領域の大きさは資源から限りがあるが、ここでは正イオンと電子の双方が関わる電磁波相互作用について記述しよう。以下で述べるが、横電場 \vec{E}_T と縦電場について、電流項に関してグリッド上で直交性を満たすように分離する(後述)。内部領域は中心を原点として、 $M_x = 100$ セル、 $M_y = M_z = 200$ セルのグリッド点とし、 $500 \times 1000 \times 1000 \text{ \AA}^3$ とする。その外側領域では、ドリフト場 $(E_{z,0}, B_{x,0})(\vec{r}, t)$ のみ残して、それ以外の成分はゼロとする。

ここで運動量 \vec{p}_i 、位置 \vec{r}_i 、そして速度 \vec{v}_i として、運動方程式をまとめると、

$$\begin{aligned} d\vec{p}_i/dt &= \sum_{j=1}^N q_i q_j \vec{r}_{ij} / r_{ij}^3 \\ &\quad + q_i [\vec{E}_T(\vec{r}, t) + (1/c) \vec{v}_{T,i} \times \vec{B}(\vec{r}, t)], \quad (30) \\ d\vec{r}_i/dt &= \vec{v}_i, \quad \vec{p}_i = m_i \vec{v}_i / \sqrt{1 - (\vec{v}_i/c)^2} \quad (31) \end{aligned}$$

である。ここで、 d/dt は時間の全微分であり、(30)の右辺第1項は(29)であり、第2項の \vec{E}_T と \vec{B} は Maxwell 方程式で順次求めていく。

$$(1/c) \partial \vec{B} / \partial t = -\nabla \times \vec{E}_T \quad (32)$$

$$(1/c) \partial \vec{E}_T / \partial t = \nabla \times \vec{H} - (4\pi/c) \nabla \cdot \sum_i q_i \vec{v}_{T,i} S(\vec{r}). \quad (33)$$

ここで、 $\partial/\partial t \cdot \nabla$ は時間・空間の偏微分、 E_T, B は横電場と磁場、 c は光速であり、 $S(\vec{r})$ は近くのグリッド点で求める粒子和を表す。

このとき、原点を中心とする有限空間におけるグリッド点において、電流を横電流項とそれと直交する縦電流項で分離する。すなわち、

$$\vec{j}_T = \vec{j} - (\vec{j} \cdot \vec{E}_L) / |\vec{E}_L| \quad (34)$$

を用いて、電流項 \vec{j} から縦電場成分である第2項を引き去る。横電流項 \vec{j}_T はアンペールの式(33)の \vec{v}_T で現れ、そして左辺によって \vec{E}_T が求められる。最終的に、電場 \vec{E} は横電場 \vec{E}_T と縦電場についてクーロン相互作用 \vec{F}_{Coul} の和である。

与えた系を時間的にドライブするのは、 y 方向の左側から原点にむかってスタートし光速で進行する、電場 $E_{z,0}$ および磁場 $B_{x,0}$ である。電場、磁場はそれぞれ \sin, \cos の関数形をもつ正弦波であり、これが波長 800 nm 、周期 $2.67 \times 10^{-15} \text{ sec}$ を基本とする：

$$E_{z,0}(\vec{r}, t) = E_0 \sin(\omega t - k_y y), \quad (35)$$

$$B_{x,0}(\vec{r}, t) = B_0 \cos(\omega t - k_y y) \quad (36)$$

ここで、振動数は $\omega = ck_y$ 、 $E_0 = B_0$ (CGS系) であり、時間ステップとして $\Delta t = 5 \times 10^{-19} \text{ sec}$ である。

●粒子の個数、価数、クーラン拘束条件

用いる粒子の個数は、炭素は+6価で粒子数は約55,000個、金はイオン価として20価-70価の1つをもち約55,000個、プロトンは+1価で約10,000個である。それに対して、電子は-1価で、その個数は全イオンの荷電中性条件で決める。個々の炭素は6員環の籠の位置で決まり、対となる金は炭素の外側で 2 \AA のところに置く。プロトンは原点を中心にして、(横, 縦) $\approx 150 \times 300 \text{ \AA}^2$ (直径) 内の位置を一様に占めるように置く。初期エネルギー(温度)はゼロとする。

金イオンの価数は、各ランのレーザー強度に応じてひとつの価数が決まる[21]。図4において丸印が示すように、レーザー強度が $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ から $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ に応じて、それぞれ20価, 40価, 60価, 70価の金イオンが対応する。ランの物理時間は、 $2.5 \times 10^{-14} \text{ sec}$ (femto sec, 10^{-15} sec) を基本として、レーザー強度の大きさによってエネルギーがはやく変化するので、ランの長さを調節する。なお、レーザー強度 $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ に対応して、電場は $1.46 \times 10^{12} \text{ V/m}$ であり、CGS系では $4.58 \times 10^7 \text{ statV/cm}$ である。

ところで、数値計算に用いるコードが電磁波にとって安定であるためには、長さ Δx と時間 Δt にクーラン条件が必要である。つまり、 Δx と Δt の間には光速について不等号の関係式があり、

$$\Delta x / \Delta t > c. \quad (37)$$

いまの場合、拘束条件は $\Delta x / \Delta t$ が光速を超えること

$$\Delta x / \Delta t = 5 \times 10^{-8} \text{ cm} / 5 \times 10^{-19} \text{ sec} = 1 \times 10^{11} \text{ cm/sec} > c, \quad (38)$$

が条件である。

●MPI 集団通信の和について

数値コードにおいて、2粒子 i, j 間の粒子和(29)を求めるときは、MPI 技法の集団通信である2重ループの和計算を用いている。これは全粒子 N について、まず部分のランク size 個に分割して、 i_{start} をスタート値(1から size へ)として $i = i_{start}, N, \text{size}$ を外ループ、 i をもつ $j = i+1, N$ を内ループとして、2重ループの和が求められる。そこではランクが異なっても計算が均等に働くように、 size 個とびの和である Round robin 和がとられる(幼児玩具のコマドリの意味)。最後に、 size 個だけ生まれる部分和をすべての和に一致させるため、集団通信を用いて唯一の和(all-blackuce 和)を求める。

これは open MPI 法では広く用いられており、この数値コードでは普通のランで約 10^4 回計算される。しかしこの並列計算であるパラレル実行には約70%の時間が費やされており、この分子動力学では非常に重い計算である。

1.3.3 数値シミュレーション

4つのイオン種として、プロトン、炭素、金、そして電子を与えて、正イオンと電子の振舞いを分子動力学により追跡する。このとき、表1のように、レーザー強度は $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ から $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ のうちの1つに選んでいる。

(a) 正イオン種の時間発展

まず図5で、 $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ のランを見てみよう。レーザー場は 800 nm の正弦波 $(\omega t - k_y y)$ (36)であり、正方向に向かってナノチューブの側面から照射されている。yzプロットで両先端部にあるのはプロトン（青）、やや遅れて炭素（緑）、金（黄）が追っている。電子（赤）は右側のyx, yzプロットにある遠方に多くみられるが、ごく一部は左側のyzプロットの原点付近にも存在する。イオンの速さはゼロから急速に成長して、プロトンは初期の位置からナノチューブの縦方向（z軸）にむかって加速されていく。炭素、金イオンは走行するプロトンをガードするようにやや原点側にある。

一方、電子はプロトンに比べて質量が小さいため ($m_e = m_p/1836$)、 $v_{te} \gg v_{t,ion}$ のために大きな空間を運動する。軌跡をみると、電子は横向き（y軸）に開いていく扇形をしており、z, x方向は原点Oについて対称である。この

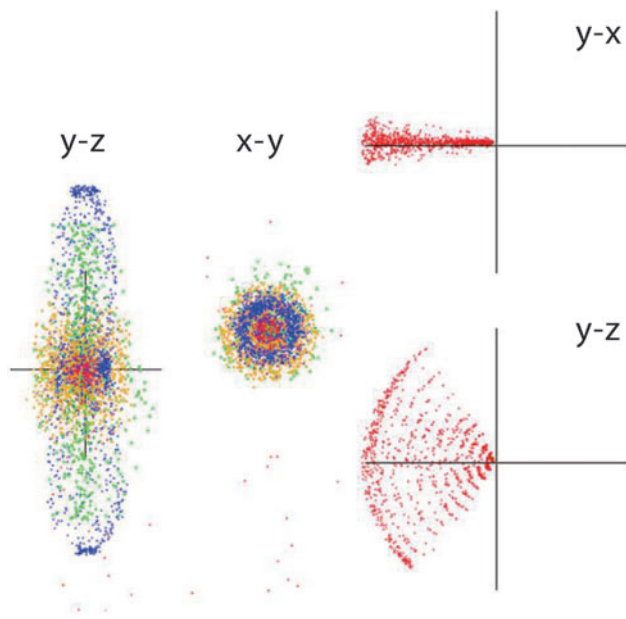


図5 レーザー強度 $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ (S1ラン)におけるyz,xyプロット。(赤:電子, 青:プロトン, 緑:炭素, 黄:金)および電子yx, yzプロット。時間は30 fs, 縮尺は $8.8 \times 10^{-6} \text{ cm}$ (左, 中), および $7.5 \times 10^{-4} \text{ cm}$ (右)。

表1 シリーズ名, レーザー強度, および結果で得られる炭素, 金, プロトン, 電子成分の運動エネルギー (MeV, 平均値)。

シリーズ	レーザー強度 W/cm^2	炭素	金	プロトン	電子
S1	5.0×10^{17}	0.16	0.42	0.042	1.18
S2	1.7×10^{19}	0.68	5.1	0.19	63.0
S3	6.0×10^{20}	1.1-1.4	19.4-20.6	0.32-0.45	2030
S4	1.0×10^{22}	1.3-7.6	23-59	0.7-3.1	3600

レーザー強度では、運動する範囲が座標面 $y < 0$ に限られている。軌跡の大きさは、時間を t (sec)として、 $2.7/t \mu\text{m/s}$ である。

図6には、S1ランの時刻 $t = 30 \text{ fs}$ において、速度分布関数を示す。プロトンは、縦成分 (V_{\parallel}) をみると、中央のボルツマン分布があると同時に、 $V_y < 0$ 方向に裾が長く伸びて最後に切り立っている。その大きさは $3 \times 10^8 \text{ cm/s}$ である。電子の分布では縦方向の裾がプロトンと同じであり、垂直方向では $-V_y$ 成分が大きく突起している。炭素、金イオンではわずかに V_{\parallel} の裾が見えている。一方、S4で正イオンのプロトンでは、光速の約1割での運動がみられる。

粒子s種の運動エネルギーは、 \vec{p}_i を個々の運動量として、s種の和をとって、 $W_{kin,s} = \sum_{i=1}^{N_s} (\vec{p}_i^2/2m_i)$ である。ここで、 N_s はs種の個数である。1個あたりの平均運動エネルギーは、 N_s で割って、 $w_{kin,s} = \sum_{i=1}^{N_s} (\vec{p}_i^2/2m_i)/N_s$ である。

表1に、4つのランの最終時刻における運動エネルギーの値を示す。運動エネルギーの時間変化を見てみると、図7a)に示すようにS1-S3では単調に増加していき、金、炭素イオンはプロトンよりも成長に時間がかかる、電場エネルギー E_z^2 は遠方まで届くクーロン場の発達が原因である。正弦波の時は、電子の小さい成長はいつまでも増大していく。運動エネルギーの最大値は、各イオン種とも平均運動エネルギーのほぼ3倍である。注目すべきことは、炭素と金イオンは、プロトンよりも質量の大きさだけ運動エネルギーが大きく、ランS1では金0.31 MeV、炭素0.11 MeV、プロトン0.031 MeVである。ちなみに電子は広い自由空間を運動しており、最速値は1.2 MeVである。運動エネルギーは質量に比例しており、正イオンでは金イオンが第1番、炭素は第2番、プロトンは第3番の順である。

レーザー強度が増加して $1.7 \times 10^{19} \text{ W/cm}^2$ のときでは、飽和が見えており、金5.1 MeV、炭素0.68 MeV、プロトン0.19 MeVである。エネルギーが比較的大きい $6 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$ (S3ラン)では収束しており、金13.7 MeV、炭素0.95 MeV、プロトン0.30 MeVである。

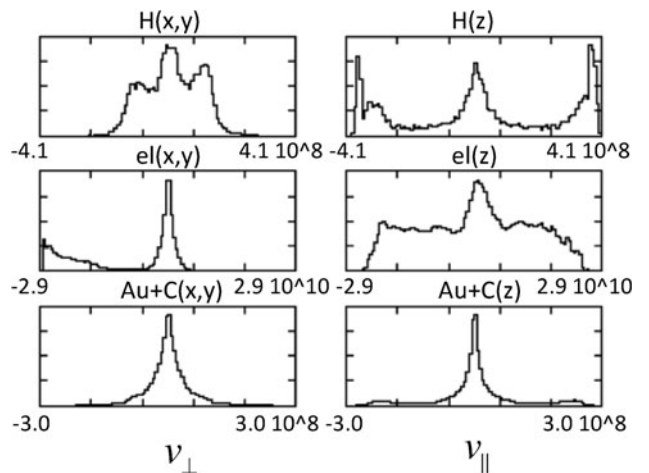


図6 レーザー強度 $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ (S1ラン)における、(上から順に)プロトン、電子、炭素+金の速度分布関数。時刻は30 fs。左側は垂直方向 (V_x, V_y)、右側は縦方向 V_{\parallel} 、横軸は速度 (cm/s)。

レーザー強度が $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ (S4, 図7b) では、正イオンの各成分は周期と密接に関連した大きな脈動振動をしている。金イオンは約20 MeVから60 MeVのあいだで振動している。その振幅は時間をかけて、最終的にはその中間値に収束すると見られる。

金イオンの存在とは別に、炭素は約1 MeV–8 MeVで振動している。大きさは金イオンの1割程度だが、初期構造において安定した6貝環の籠を保つため、必要なものである。なお、プロトンはその質量が金の約1/200倍であるので、エネルギー的に見ると小さいことがわかる。電子数は粒子数が多いので、全運動エネルギーで 10^{19} W/cm^2 のラン以降ですでにエネルギーが凌駕している。

(b) 電子の時間発展

電子における幾何空間の分布を、図5 (S1 ラン) と図8 (S4 ラン) の右側の yx, yz プロットで見てみよう。レーザー強度 $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ では、すでに図5で見たように、時間的に30 fsにおいてきれいな扇形に電子が広がっていた。このレーザー強度では電子の広がりは小さく、電子は領域 $y < 0$ に局在した。

$1.7 \times 10^{19} \text{ W/cm}^2$ のレーザー強度では、電子は正イオンを大きく取り囲む渦巻き状に発展し、 y 面において上下の両側をしめる。一方、 $6 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$ では、渦巻き状の軌跡は下側にきわめて偏っており、 yz 面では第3象限の偏った半円状アーク状になる。

図8で見るS4ラン $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ では、プロトン(青)は yz プロットにおいて外に出た「かぎ型」の振舞いをしている。右側の yx, yz プロットでは、電子(赤)は金(黄)、炭素(緑)より完全に分離して、 $y > 0$ そして $z < 0$ 方向に向かって $E \times B$ ドリフトで進行する。時間的には全体が短く、平均で電子は相対論的速さの90%の速度を持っている。

ただし正弦波がイオン群をドライブする場合、運動エネルギーは増大していく。とくに電子の場合、エネルギーは無敵大を目指しているので、電子の値は参考にとどめる。

(c) 速度空間での分布

速度空間での分布を、図9にS1, S4ランにおいて、(V_y, V_x) で示す。はじめに $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ のレーザー強度で

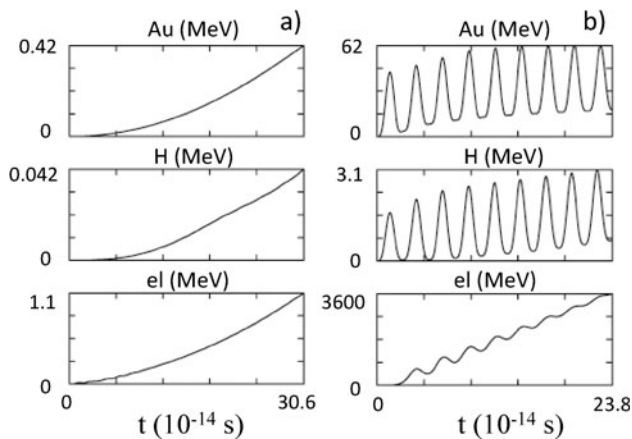


図7 レーザー強度 a) $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ (S1 ラン), および b) $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ (S4 ラン) における運動エネルギーの比較。上から順に金, プロトン, 電子。

は、正イオンのプロトン(青)、炭素(緑)、金(黄)は両半面を占めている。実際速度空間では、分布は蝶々のように上下に広がっている。電子(赤)は中央部のもつボルツマン分布と同時に、左側に見られる $V_y < 0$ をした傘の形を占めている。それに対して、 $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ では、エネルギー

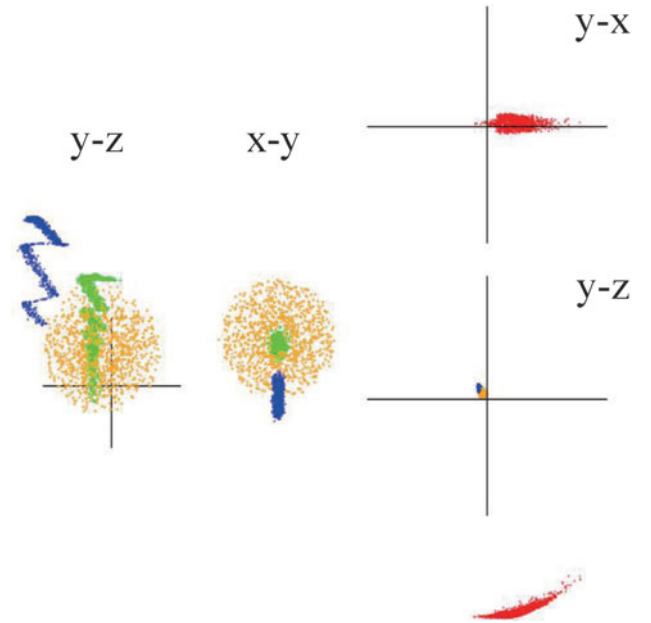


図8 レーザー強度 $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ (S4 ラン) における yz, xy プロット。(赤: 電子, 青: プロトン, 緑: 炭素, 黄: 金), および電子 yx, yz プロット。時間は 23 fs, 縮尺は $3.4 \times 10^{-5} \text{ cm}$ (左, 中), および $3.5 \times 10^{-4} \text{ cm}$ (右)。

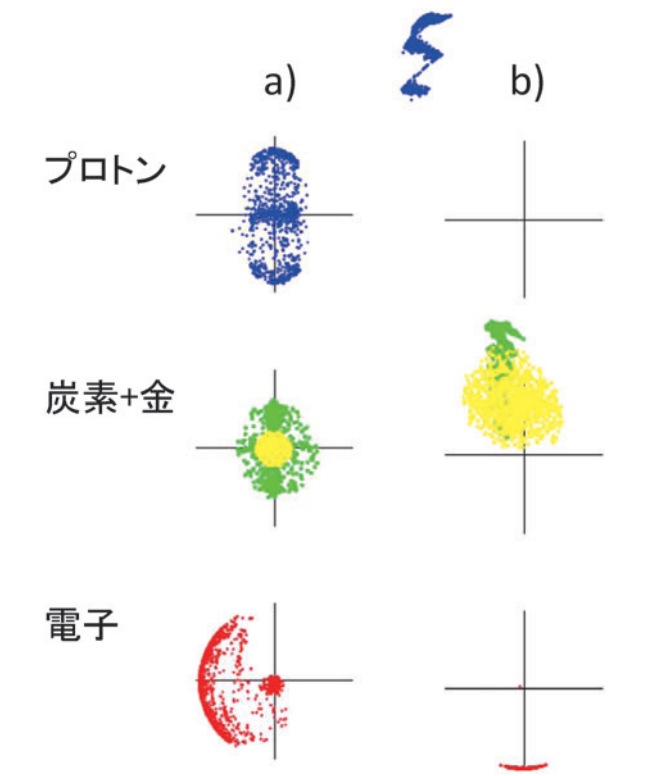


図9 (上から順に) プロトン, 炭素+金, 電子の速度分布。レーザー強度と時刻は, a) $5 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2, 30 \text{ fs}$ (S1 ラン), および b) $1 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2, 23 \text{ fs}$ (S4 ラン)。縮尺スケールは, 正イオンは a) 100倍, b) 50倍, および電子は全て 1.5倍。

が過渡的に大きな脈動振動をしており、プロトン、炭素、金は大きく突き出した「くちばし」の形状をもつ。電子は完全に $V_{\parallel} < 0$ (下方向) に偏る。

1.3.4 まとめ

相対論の静電気力場を中心に、電磁波を含めた分子動力学によって、高輝度のナノチューブ加速器の数値シミュレーションを行った。 $E \times B$ 場を時間的にドライブすると、正イオンはナノチューブの縦方向に強く加速され、亜相対論領域に近づいた。電子は強いレーザー場では正イオンを完全に離れて、光速度の90%でナノチューブの垂直方向に進んだ。参考として金イオンは、レーザー強度 10^{22} W/cm² において正弦波の場合は、約 20–60 MeV (脈動振動) の運動エネルギーに達した。

今後は、無限ソースである正弦波の $E \times B$ ドリフトから、有限時間で起きるパルス波のときの振舞いが知りたいところである。また、2重、3重の多重のナノチューブ籠や2次元の籠構造の振舞いも、実際にナノチューブのパフォーマンスを知るために大切だろう。3次元の相対論分子動力学の数値計算を、時間をかけて進めたい。

参考文献

- [1] M. Murakami and M. Tanaka, Phys. Plasmas **15**, 082702 (2008).
 [2] M. Murakami and K. Mima, Phys. Plasmas **16**, 103108 (2009).

- [3] S.C. Wilks *et al.*, Phys. Plasmas **8**, 542 (2001).
 [4] M. Murakami and M. Tanaka, Appl. Phys. Lett. **102**, 163101 (2013).
 [5] J.E. Crow *et al.*, J. Plasma Phys. **14**, 65 (1975).
 [6] J. Denavit, Phys. Fluids **22**, 1384 (1979).
 [7] C. Sack and H. Schamel, Phys. Rep. **156**, 311 (1987).
 [8] P. Mora, Phys. Rev. Lett. **90**, 185002 (2003).
 [9] A.V. Gurevich *et al.*, Eksp. Teor. Fiz. **49**, 647 (1965) [Sov. Phys. JETP **22**, 449 (1966)].
 [10] L.I. Sedov, *Similarity and Dimensional Methods in Mechanics*, 10th ed. (CRC Press, Boca Raton, 1993).
 [11] M. Murakami and M.M. Basko, Phys. Plasmas **13**, 012105 (2006).
 [12] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, 2nd ed. (Pergamon, Oxford, 1968), Chap. 38.
 [13] R.M. Corless *et al.*, Adv. Comput. Math. **5**, 329 (1996).
 [14] M. Tanaka *et al.*, Proc. Global Congress on Microwave Energy Applications, pp.146-158 (ed. R.L.Schulz and D. C.Folz, 2013).
 [15] M. Tanaka and M. Sato, J. Chem. Phys. **126**, 034509 (2007).
 [16] M. Tanaka *et al.*, Phys. Rev. B. **79**, 104420 (2009).
 [17] Y. Rabin and M. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **94**, 148103 (2005).
 [18] M. Tanaka, Phys. Rev. E **68**, 061501 (2003).
 [19] M. Tanaka and A. Yu. Grosberg, J. Chem. Phys. **115**, 567 (2001).
 [20] M. Tanaka *et al.*, Phys. Rev. E **56**, 5798 (1997).
 [21] P. Mulser and D. Bauer, *High Power Laser-Matter Interaction* (Springer, Heidelberg, 2010).



むら かみ まさ かつ
村上 匡 且

1988年大阪大学大学院工学研究科電気工学専攻博士後期課程修了，工学博士。西独 Max-Planck 量子光学研究所，レーザー技術総合研究所を経て現在大阪大学レーザー科学研究所教授。レーザー核融合，レーザーイオン加速など高エネルギー密度物理研究に従事。趣味はテニス，二胡演奏。



た なか もと ひこ
田中 基彦

1981年東京大学大学院理学研究科地球物理学博士課程修了，理学博士。アメリカ合衆国メリーランド州立大学，広島大学，核融合科学研究所，マサチューセッツ工科大学研究員を経て，中部大学大学院工学研究科，教授。マイクロ波・遠赤外線の加熱，DNAのナノ孔通過，電荷逆転と電気泳動法，レーザーのナノチューブ加速器，「自然世界の高分子」(翻訳，吉岡書店)の物理学理論。趣味は自然界の登山，Bach, Mozartなどの音楽鑑賞。