

分子動力学シミュレーションで探るダストモノマー間相互作用

吉田雄城^{1,2}, 小久保英一郎^{2,1}, 田中秀和³

¹ 東京大学, ² 国立天文台, ³ 東北大学

惑星形成は原始惑星系円盤の中で進行する。原始惑星系円盤はガスと固体成分(ダスト)から構成されており、惑星の主な材料であるダストが微惑星や原始惑星を経て惑星へと成長する。mm-cm以下の大きさを持つダストは、分子間力による付着により衝突合体成長することが考えられているが、その成長過程は明らかではない。ダストの最小構成単位であるダストモノマーやダストモノマーが合体して形成されるアグリゲイトの衝突合体による成長過程は、室内実験と数値計算の両方から研究されている。数値計算ではモノマー間相互作用として2つのモノマー間に働く付着や回転、滑り、ひねりなどの相互作用を与えるJKR理論が用いられている。しかしこのJKR理論に基づいた数値計算から得られる結果について、室内実験の結果との違いが指摘されてきた。Poppe et al. (2000) はモノマー同士の衝突室内実験を行い、モノマーが衝突で跳ね返る限界速度がJKR理論の予測より大きいことを示唆した。また、Gundluch & Blum (2015) ではアグリゲイト衝突の室内実験を行い、跳ね返りの限界速度は温度依存性を持つことを示唆している。このような限界速度の違いや温度依存性はJKR理論では説明することができない。これらの違いは、JKR理論が弾性球を仮定していることが原因であると指摘されており(Krijt et al. 2013; Tanaka et al. 2015)、Tanaka et al. (2015) は分子動力学法によるモノマー衝突シミュレーションによって、衝突のエネルギーの一部がモノマーを構成する分子の振動励起に用いられることを指摘している。JKR理論は分子レベルでの物理を考慮しておらず、モノマー間相互作用を正しく与えるためには分子レベルでの衝突現象を調べて、JKR理論を修正もしくは拡張する必要がある。

本研究はモノマー衝突の分子動力学計算を行うことにより、分子レベルでのモノマー間相互作用を明らかにすることを目的とした。我々は、半径が7.6–23 nmのモノマーを用意して、サイズや衝突速度、温度を変化させてシミュレーションを行った。すると、モノマーが小さいと跳ね返りが起きにくいことが分かった。このようなサイズ依存性はJKR理論でも確認できる。また、衝突速度を大きくするとモノマーが変形しやすくなり、圧縮時と伸張時にズレ(ヒステリシス)が起こることがわかった(図2)。この変形はJKR理論とのズレの要因の一つと考えられる。次に温度依存性について、本研究では低温度範囲($T < 100\text{K}$)で衝突計算を行い、その温度範囲内ではモノマーに働く力には変化が見られないことがわかった。

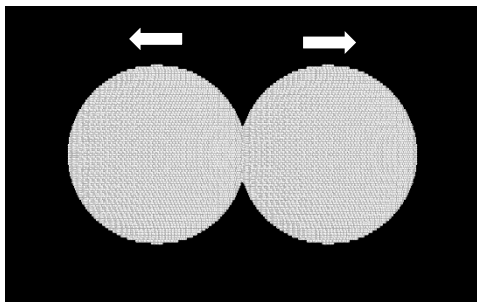


図1: モノマー衝突計算のスナップショット。モノマーが接触する前後では分子間力による引力が働き、圧縮していくと斥力が働く。ここでは斥力を正、引力を負とするようにしている。

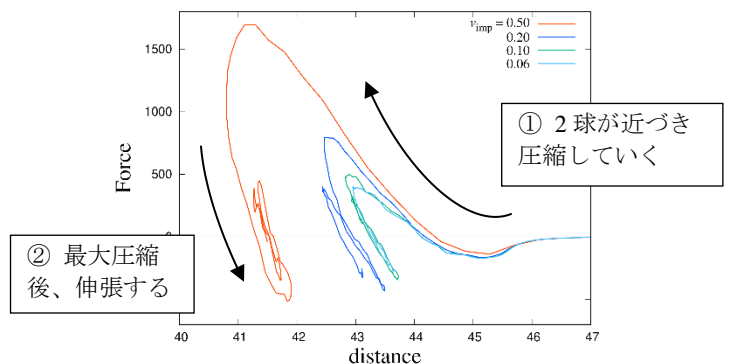


図2: 2つのモノマー重心間距離とモノマーに働く力の関係。距離は0.3405 nmで規格化されている。圧縮時と伸張時で異なる様子(ヒステリシス)が見られる。