

P208a 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 (東京大学), 小久保英一郎 (国立天文台), 田中秀和 (東北大学)

原始惑星系円盤内のダストの初期成長段階は、ダストの衝突合体による成長である。ダストはモノマーと呼ばれるサブミクロン粒子の集合体であると考えられている。ダスト集合体の衝突過程では、衝突速度が大きい場合にモノマーが飛び散って集合体が破壊される可能性が考えられ、ダスト成長を阻害する問題として指摘されている。この問題を解決するためにはダスト衝突過程を理解する必要がある。ダスト衝突過程は数値計算で調べられているが、その際にモノマー間相互作用として用いられてる、弾性球間の相互作用を与える JKR モデル (Johnson et al. 1971) は分子運動などのミクロな現象を考慮していないという問題点が指摘されている。そこで我々は、分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて、モノマー間相互作用を調べることにした。

MD シミュレーションは、分子の運動を解析し物理現象を調べる方法であり、本研究では最大1億個の分子で構成されたモノマーを取り扱った。まず、2つのモノマーの正面衝突をシミュレーションして反発係数を調べ、そのサイズ依存性、衝突速度依存性を明らかにした。その結果、サイズが小さいほど分子運動の影響が強く、衝突運動エネルギーの強い散逸が確認された。また、衝突速度が大きい場合にはモノマーの変形により、顕著な反発係数の減少が見られた。

また、回転相互作用についても MD シミュレーションを行った。接触している2つのモノマーに互いに逆向きの回転角速度を与え、その時間進化を調べた。その結果、互いの角速度は振動しながら減衰する振る舞いが見られた。既存の回転相互作用モデル (Dominik & Tielens 1995) ではこの減衰効果は考慮されていないことから、分子運動が原因であると考えられる。本発表ではこれらの結果について述べる。