

P205a **ダストモノマーの回転とねじれ相互作用に関する分子動力学シミュレーション**

吉田雄城 (神戸大学), 小久保英一郎 (国立天文台), 田中秀和 (東北大学)

惑星形成の初期段階はダストの衝突合体による成長であると考えられており、数値計算や実験による成長過程の研究が行われている。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おり、ダスト衝突の数値計算ではDEM (離散要素法) に基づいた粉体計算が行われている (e.g., Hasegawa et al. 2021)。数値計算ではモノマー間相互作用として弾性球間相互作用を与える JKR モデル (Johnson et al. 1971) が用いられている。しかし、JKR モデルは分子運動などのミクロな現象を考慮しておらず、我々は分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて、接触面に対して法線方向に JKR モデルで考慮されていない散逸効果を確認した (Yoshida et al. 2024)。次に我々は、接線方向の相互作用についてシミュレーションを行った。

まず、接触した2つのモノマーを用意し、互いに逆向きの角運動量を与えて、モノマー同士が互いの表面を回転する運動を計算した。角速度進化から抵抗トルクの大きさを解析した結果、JKR モデルから導出される値 (Dominik & Tielens 1995) と整合的であることが分かった。また回転運動が始まる臨界変位は、初期角速度やダストモノマーサイズを変化させた場合においても整合的であり、Dominik & Tielens (1995) が予測した 2-3 Å 程度であることを示した。次に我々は接触面に対して法線方向に初期回転角速度を与え、ねじれ運動の計算を行った。回転運動と同様に角速度進化からねじれ運動における抵抗トルクの大きさと臨界角度を解析した。その結果、臨界角度の大きさは 0.004-0.006 程度であり、Dominik & Tielens (1997) で予測される値の範囲内であることが分かった。本発表ではこれらの結果について報告する。