

環オホーツク情報処理システムを用いた 微粒子衝突の大規模分子動力学計算

田中 秀和

雪氷新領域部門理論惑星科学分野

背景と研究目的

惑星形成の第一段階である固体微粒子(ダスト)の合体成長過程において、ダストの衝突速度は最大時速 100 km 以上に達する。このような高速衝突でダストが破壊せず微惑星へと成長を続けることが可能であるかが、惑星形成論における大問題となっている。我々のグループによるダスト衝突数値計算(Wada *et al.* 2009)から、氷ダストは衝突速度が時速 200 km 以下の場合成長可能であることが示された。しかし、この数値計算において仮定している、ダストを構成するサブミクロン微粒子間の JKR 理論(Johnson 1985)をもとにした相互作用モデルがどの程度有効なのかについては、未だ不定性が残されている。

本研究の目的は、サブミクロン微粒子 1 つを多数の分子で構成し、その微粒子間の相互作用を分子動力学計算により調べ、従来の相互作用モデル(JKR 理論)の妥当性を明らかにすることである。ミクロン以下の微粒子相互作用は、天文学のみならず理工学の多くの分野に関連しており重要であるが、室内実験や大規模分子動力学計算を用いた研究はあまり行われておらず、本研究は未開拓分野への挑戦的な課題といえる。今回は第一段階として微粒子の正面衝突の際の相互作用について調べた。

数値計算方法

多数の分子で構成された微粒子の衝突を分子動力学計算により調べる。計算から得られる衝突の際の微粒子の加速度から各時刻における微粒子間相互作用の大きさを求めることができる。分子間の相互作用としては簡単のためレナード・ジョーンズ型相互作用を仮定した。1つの微粒子を構成する分子数はパラメータであり、微粒子半径を決める。本研究では分子数が 5 万から 1 億という 2 千倍の範囲、半径では 13 倍程度の範囲に対して計算を行った。衝突する 2 つの微粒子で 2 億分子という大規模な分子動力学計算は、環オホーツク情報処理システム(SGI UV100)を用いることにより可能とした。衝突速度はもう 1 つのパラメータであり、様々な衝突速度に対し計算を行った。各分子の運動の数値時間積分には leap-frog 法を用いた。系の温度は操作せず全エネルギーを保存させた。数値時間積分における時間ステップはレナード・ジョーンズの単位 (LJ 単位、以下参照) で 0.01 とした。

微粒子の分子構造は面心立方格子結晶とした。レナード・ジョーンズ系においてはこの結晶が低温低圧において安定であることが知られている。数値計算における初期微粒子は結晶から与えた半径の球領域を切り取るにより作成した。JKR 理論において微

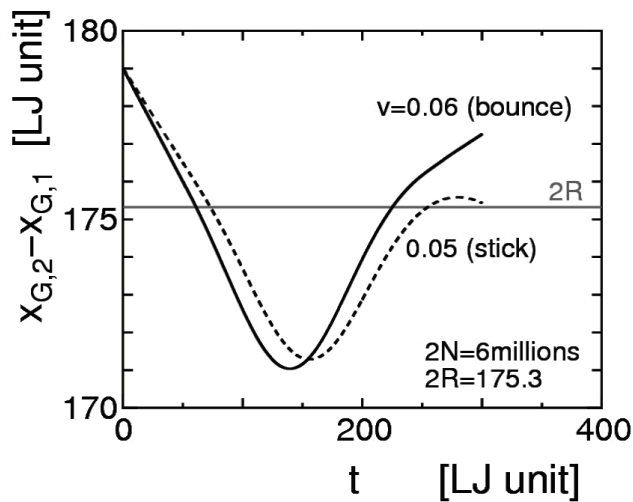


図1 2粒子の重心間距離の時間進化。

粒子間相互作用は表面張力とヤング率により表されている。レナード・ジョーンズ分子系において表面張力はLJ単位で3.0、ヤング率は接触面にもよるが、おおよそ60程度である。アルゴン原子を想定した場合のレナード・ジョーンズ単位の数値を列挙すると次のようになる：単位長は0.34 nm（相互作用距離）。単位質量はアルゴン原子質量。単位エネルギーは約0.01 eV。単位速度は160 m/s。単位時間は2.2 ps。これらの数値を用いて本文中のLJ単位の量に対して具体的な値を得ることができる。

結果

まず、約300万分子で構成された微粒子の衝突結果を紹介する。この微粒子の半径RはLJ単位で88であり、アルゴンの系では30 nmである。図1に、この微粒子2つを速度0.05と0.06で衝突させた場合の2粒子の重心間距離の時間進化を示した。重心距離が半径Rの2倍程度となると2球は接触して互いに減速し始める。ある程度食い込んだところで停止しその後跳ね返り始める。速度0.05の場合には最終的に接触が切れず付着し、0.06の場合には接触が切れた。

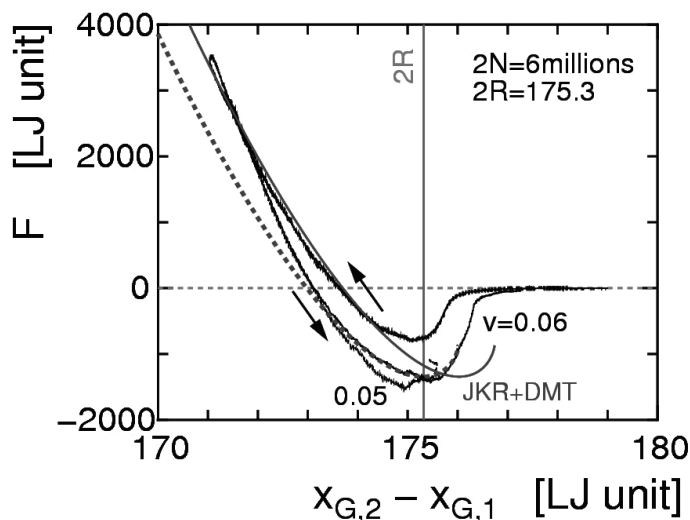


図2 2粒子相互作用の計算値と理論モデルの比較。灰色の実線はMaugis (1992)による理論線。点線はそれを横にずらしたもの。

このような 2 粒子の相対位置と速度の変化(加速度)から 2 粒子間に働く相互作用を相対位置の関数として求めることができる。図 2 にその結果を示した。相互作用の力には 2 粒子が食い込むときと跳ね返るときとで多少のずれが見られる。このヒステリシスは 2 粒子が接触している際の表面分子再配置による緩和過程により生じている。従来の理論モデルではこのようなヒステリシスは説明できない。速度 0.05 と 0.06 の間で相互作用の大きな違いはみられない。図 2 では数値計算から得られた相互作用と従来の相互作用モデルとの比較も行った。比較する相互作用モデルとしては、巨視的理論である JKR 理論に分子相互作用距離というミクロの効果を入れて拡張した Maugis (1992) のモデルを採用した(但し、粒子半径が 88 と大きい場合には JKR 理論との差は大きくない)。この相互作用理論モデル(灰色の線)と数値計算は、食い込み期にはよく合っている。重心間距離が $2R$ より大きいところではずれているが、これはまだ接触していないためである。跳ね返り期では、ヒステリシスのため理論モデルとの間にずれが生じている。しかし、この時も理論モデルの線を水平方向にずらすことにより数値計算結果をよく再現することができる。水平方向のずれは非弾性変形によるものと考えられる。

図 3 では、様々な衝突速度に対する計算結果における粒子の重心運動エネルギーの変化の様子を横軸重心距離で表した。この図より、食い込み期と跳ね返り期の間でのヒステリシスによる重心運動エネルギーの散逸の様子をみることができる。衝突速度が 0.06 以下では、どの数値計算も同じ曲線上を通る。これは低速度では相互作用や重心運動エネルギー散逸が速度に依らないことを示している。一方、衝突速度が 0.06 を越えると、衝突速度とともにエネルギー散逸が大きくなる。このエネルギー散逸の増大のため、衝突速度 0.15 以上の計算では 2 粒子は跳ね返らず付着するという結果になっている。

計算でみられたヒステリシスによるエネルギー散逸は JKR 理論ではおこらない。その代わりに 2 球の接触する時とその接触が切れる時に、重心運動エネルギーの一部が粒子表面の弾性波エネルギーに変換され、実効的にエネルギー散逸がおこるとされている。本研究における低衝突速度 0.06 の場合のエネルギー散逸量は JKR 理論での値の約 1.5 倍程度になっている。構成粒子数を変えることで粒子半径を変えて同様な計算を行った。衝突速度 0.06 の場合には、エネルギー散逸量はどのサイズでも JKR 理論のおよそ 2 倍で与えられる(図 4)。

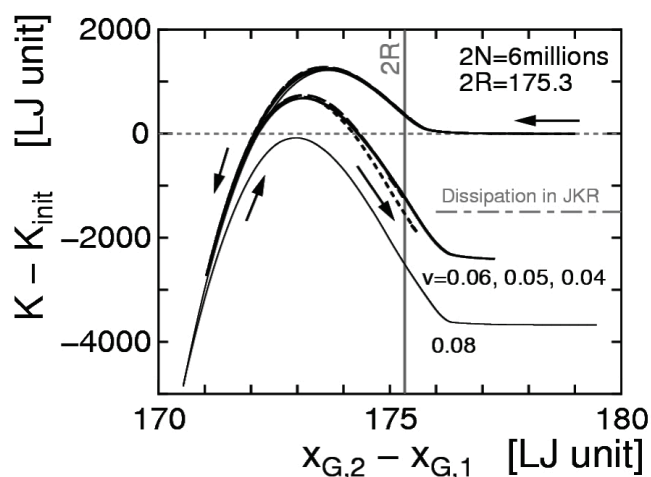


図 3 2 粒子の並進運動エネルギーの変化の様子。

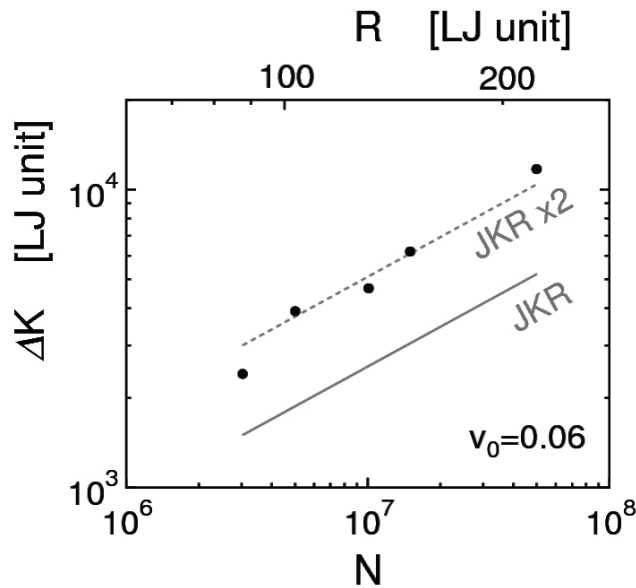


図4 2粒子のはねかえり時のエネルギー散逸量のサイズ依存性。

まとめと今後

粒子正面衝突の数値計算から得られた相互作用は従来のJKR理論(を拡張したモデル)とおよそ一致することが示された。跳ね返りの際のエネルギー散逸量については、低速衝突ではJKR理論と同程度であるが高速衝突ではエネルギー散逸量は非常に大きくなることを明らかにした。またエネルギー散逸機構は従来の理論モデルと定性的に異なっており、さらに詳細な検討が必要である。正面衝突の他に、2粒子をすべらせた場合や転がした場合の数値計算も容易に行うことができ、今後計算する予定である。これらの計算から、すべり摩擦やころがり摩擦を得ることができる。このような結果をもとにして従来の理論モデルにかわる新しい粒子相互作用モデルを構築することが、この研究の最終目標である。

参考文献

- Johnson, K. L., 1985, *Contact Mechanics* (Cambridge: Cambridge Univ. Press).
- Maugis, D., 1992, Adhesion of Spheres: The JKR–DMT Transition Using a Dugdale Model, *Journal of Colloid and Interface Science* **150**, 243–269.
- Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H., and Yamamoto, T., 2009, Collisional Growth Condition for Dust Aggregates, *Astrophysical Journal* **702**, 1490–1501.