

分子動力学計算による微粒子付着過程の解明

Molecular dynamics simulation of sticking process of sub-micron particles

田中 秀和^{1*}TANAKA, Hidekazu^{1*}¹ 北海道大学低温科学研究所¹ILTS, Hokkaido University

惑星形成の第一段階は固体微粒子合体成長過程であり、微粒子間の付着力がこの過程を支配している。付着合体においては付着力と同時に微粒子間の摩擦などによるエネルギー散逸も重要である。粒子の付着や摩擦は地球惑星科学のみならずトライボロジーなど理工学の広範な分野において重要な研究課題であり詳細に研究されてきた。最近ナノサイズ粒子では大きな付着力が働き強い散逸過程が起こることが知られているが、そのミクロな現象がマクロでの理論(JKR理論)へどのように遷移するのかは明らかになっていない。本研究では、百万から1億のレナード-ジョーンズ分子からなる固体微粒子の衝突の分子動力学計算(MD計算)を行うことにより、ナノサイズからサブミクロンサイズの範囲で粒子間相互作用と散逸過程の詳細を調べた。百万分子以上からなる粒子付着の大規模MD計算は他に行われておらず、本研究は挑戦的な課題といえる。

まず、多数分子で構成された微粒子の正面衝突を分子動力学計算により調べた。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(垂直方向の力)の大きさを求めることができる。下図には、約3百万分子からなる直径60nmの球粒子2体の衝突計算から得られた粒子間力を2球重心間距離の関数として示した。粒子間相互作用はマクロな表面張力を用いたJKR理論にておおよそ説明できる。一方、2球衝突の往復の間で相互作用のヒステリシスもみられる。これは衝突時の運動エネルギー散逸を引き起こす。球粒子サイズや衝突速度を変え多数の計算を行った結果、他の場合でも粒子間相互作用とエネルギー散逸に関して同様な結果が得られた。エネルギー散逸過程は摩擦力を導入することで表される。この摩擦力は速度と粒子半径にほぼ比例する形で定式化できることも明らかにした。2粒子間の垂直方向の運動の場合以外に、2球の転がりや、すべり、ねじれの各運動についても分子動力学計算を行い、相互作用や摩擦を調べた。得られた結果は従来の微粒子相互作用の理論モデルとおおよそ調和的であった。

以上のように、数値計算機の高速化により分子動力学計算は微粒子相互作用の研究手法として強力なものとなっている。より複雑で現実的な表面状態を再現した分子動力学計算を今後行うことも可能であろう。

キーワード: 宇宙ダスト, グレインアグリゲイト, 惑星形成, 微惑星, トライボロジー

Keywords: cosmic dust, grain aggregate, planet formation, planetesimal, tribology

