

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

(Dust monomer interactions explored by
the molecular dynamics simulations)

吉田 雄城 (東京大学)

共同研究者: 小久保 英一郎 (国立天文台), 田中 秀和 (東北大学)

2024/02/13 CPSセミナー

吉田 雄城

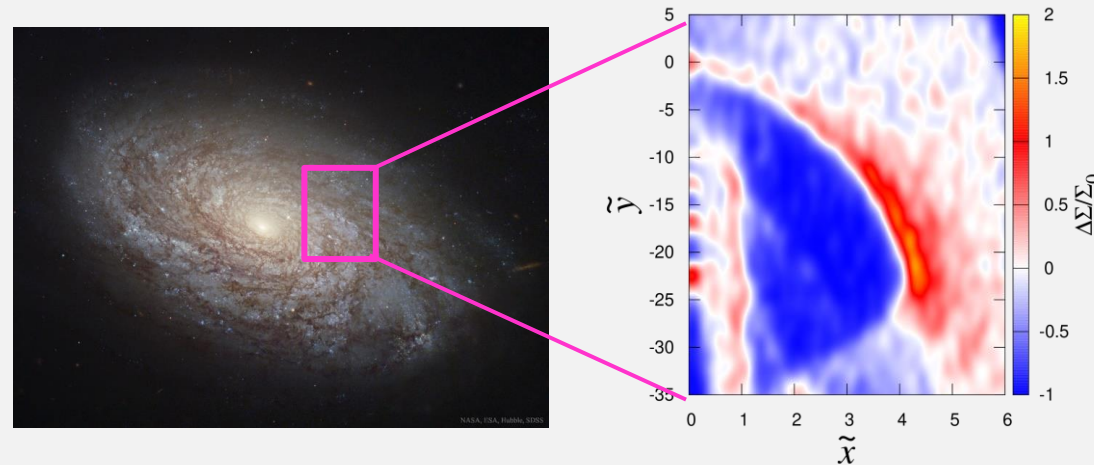
所属: 東京大学大学院 理学系研究科 天文学専攻, 学振特別研究員 (DC2)

研究歴:

2017. 4 – 2019. 3 : 東京大学 理学部 物理学科

2019. 4 – 2021. 3 : 東京大学大学院 理学系研究科 天文学専攻 (修士)

2021. 4 – 現在 : 東京大学大学院 理学系研究科 天文学専攻 (博士) ← today's talk

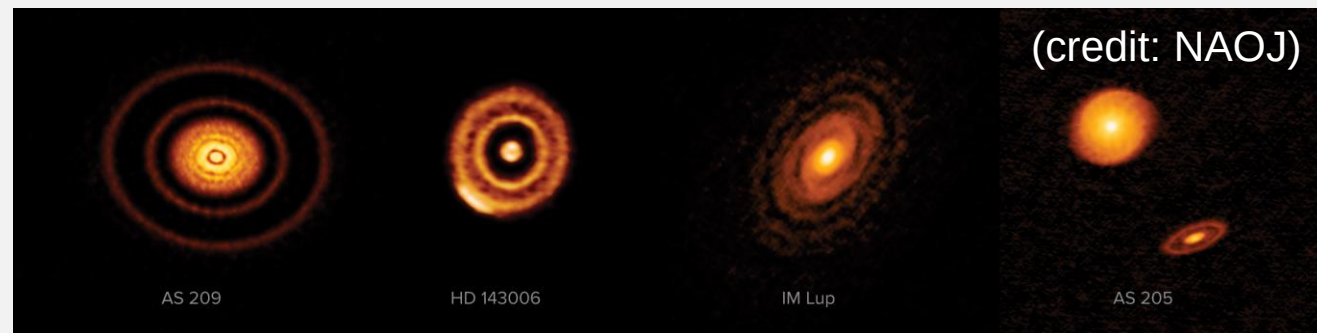
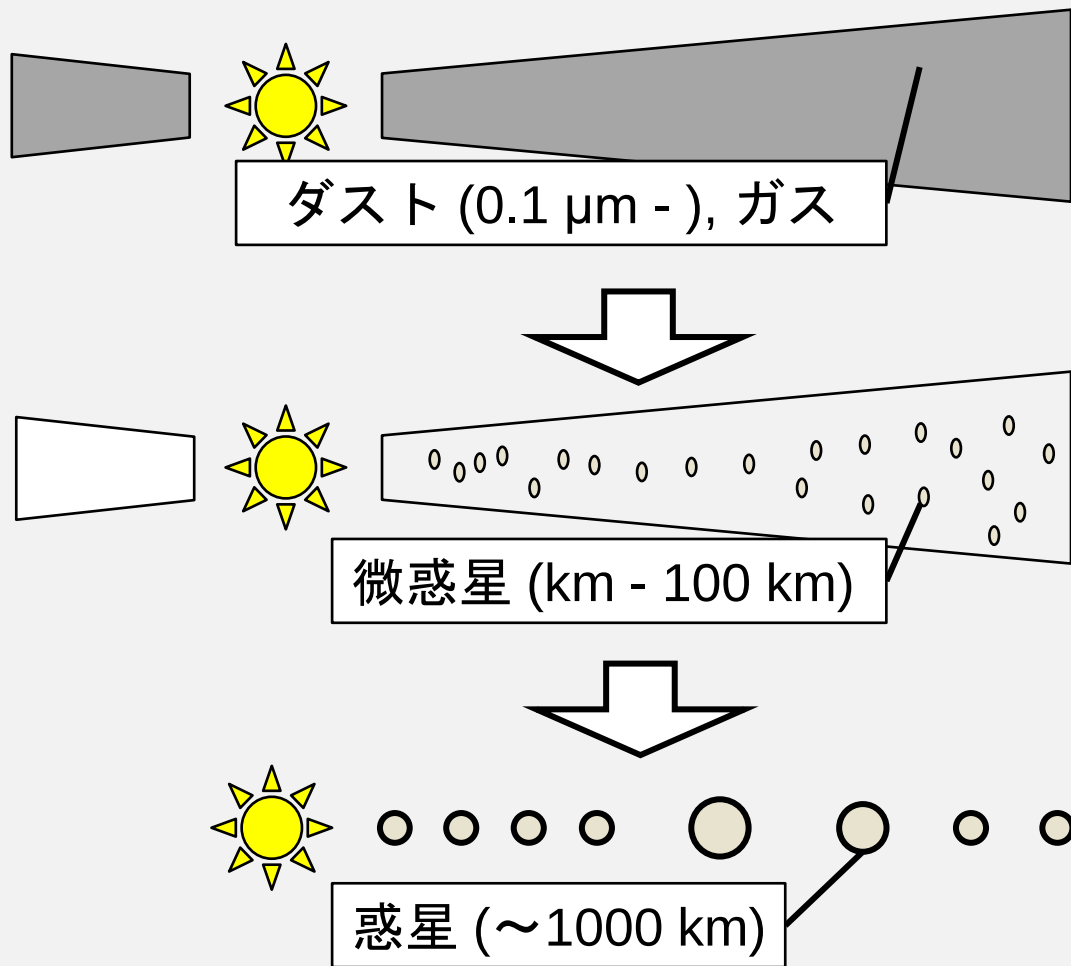


銀河渦状腕形成の素過程 (修士)

(Yoshida & Kokubo 2021; 2023)

- はじめに
 - 惑星形成, ダスト成長シナリオ
 - ダスト成長研究 (室内実験, 数値計算, 相互作用モデル)
- 研究手法
 - 分子動力学シミュレーション(LAMMPS)
 - 分子間ポテンシャル
- 研究結果
 - 正面衝突 (衝突速度・サイズ依存性, 新モデルの構築)
 - 回転運動
- まとめ・展望

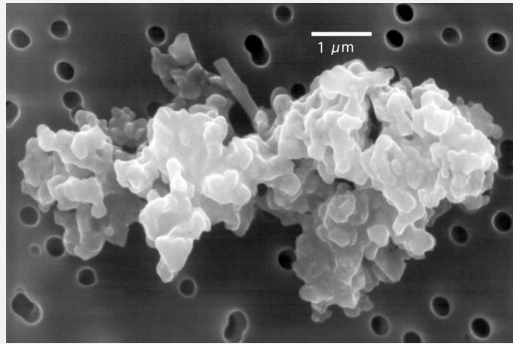
- 惑星は原始惑星系円盤から形成される



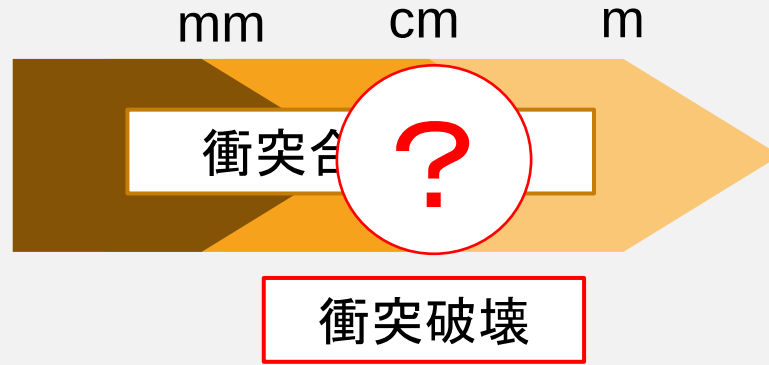
- ALMA観測による円盤構造
(リング, スパイラル, ...)
- ダストの詳しい性質は？
(内部構造, サイズ, ...)

ダスト成長

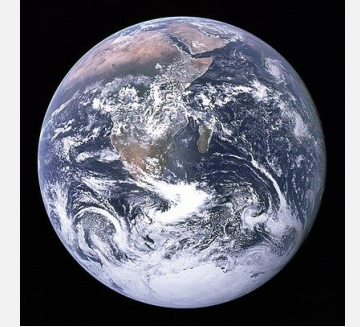
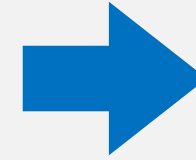
5/45



ダスト ($0.1 \mu\text{m} -$)



微惑星 ($\geq \text{km}$)

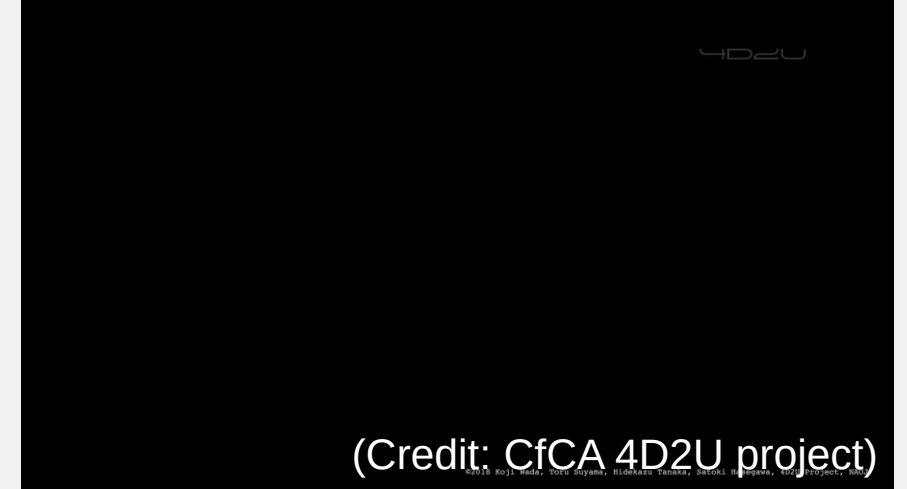


惑星 ($\geq 1000 \text{ km}$)

ダストモノマー ($\sim 0.1 \mu\text{m}$):
最小構成単位



ダスト集合体 (アグリゲイト):
モノマーの集合体



Q. どのように成長するのか? (破壊限界速度, 衝突後の密度, 破片分布, ...)
→ 衝突エネルギー (並進運動のエネルギー) の散逸が重要!

- ・ シミュレーション

(e.g., Suyama+12, Wada+13)

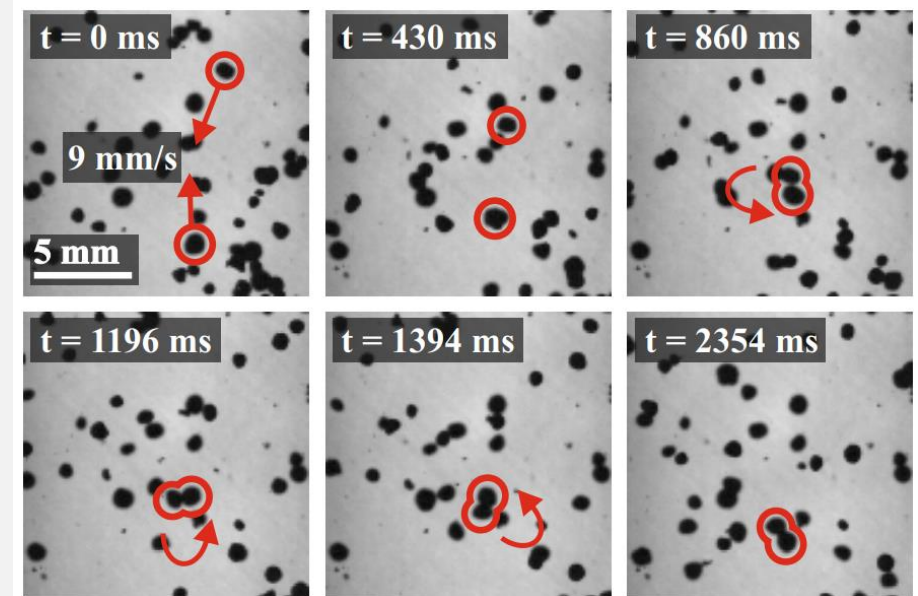


合体臨界速度

~ 8 m/s ($0.1 \mu\text{m SiO}_2$)

~ 5-10 m/s ($0.6 \mu\text{m SiO}_2$)

- ・ 室内実験



(Weidling+15)

合体臨界速度

~ cm/s (Weidling+15, $0.1\text{-}10 \mu\text{m}$)

~ 50 m/s (Teiser & Wurm 2009, cm SiO_2)

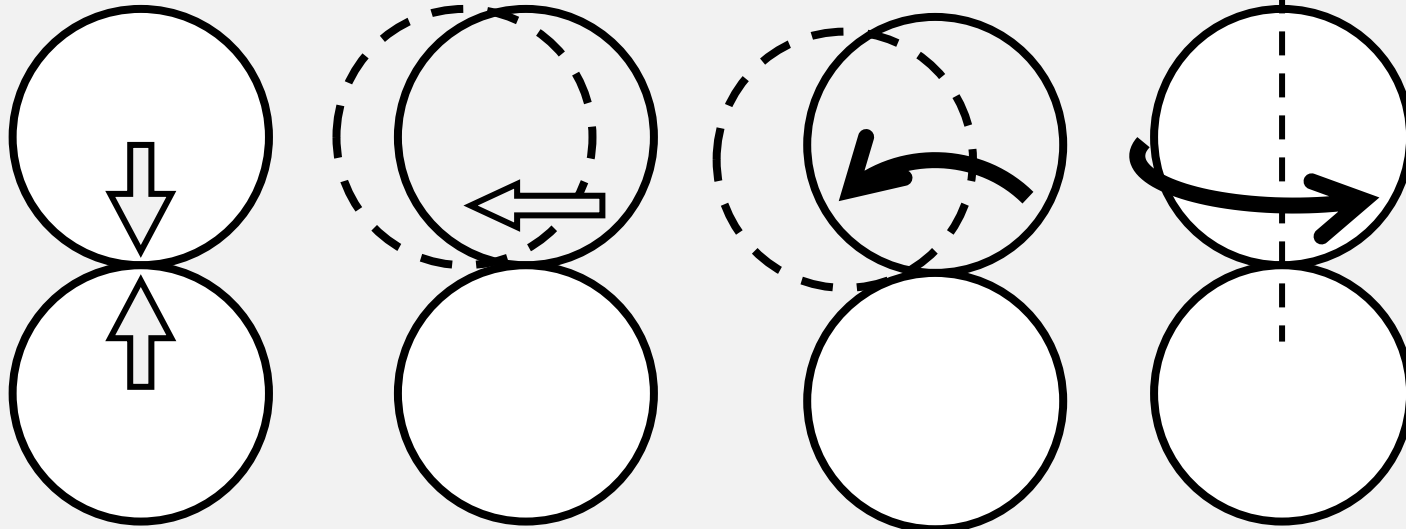
合体臨界速度が矛盾している

粒子(モノマー)間相互作用モデル

JKR (Johnson, Kendall and Roberts) + DT (Dominik & Tielens) モデル:

2球の弾性球間に働く付着、滑り、回転、ひねりの相互作用を与える接触理論
モノマーの内部運動、内部構造は考慮されていない

相互作用



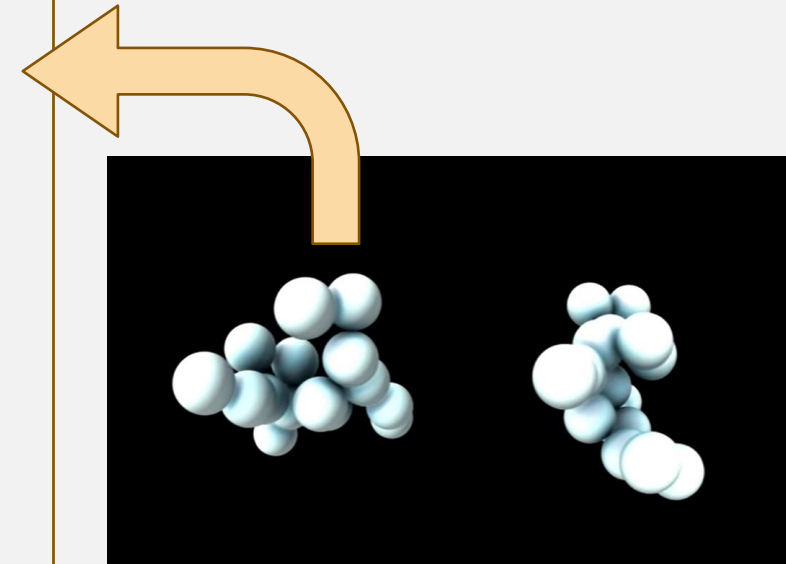
法線方向

接線方向
(滑り)

接線方向
(回転)

接線方向
(ねじれ)

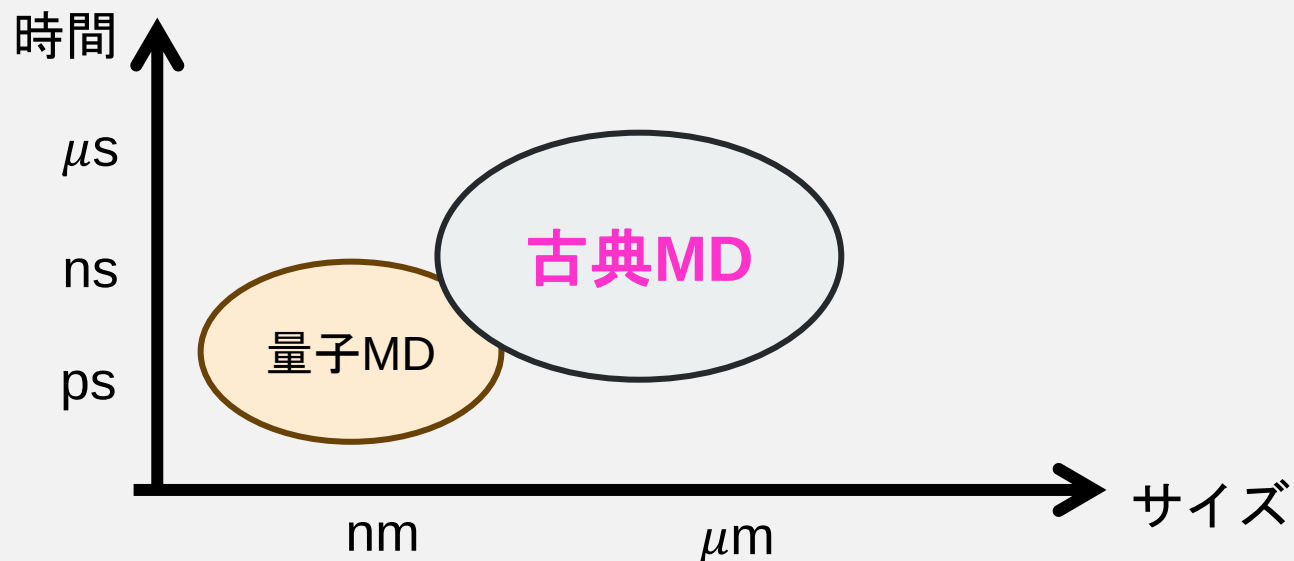
(Johnson et al. 1971; Dominik & Tielens 1995;1996;1997)



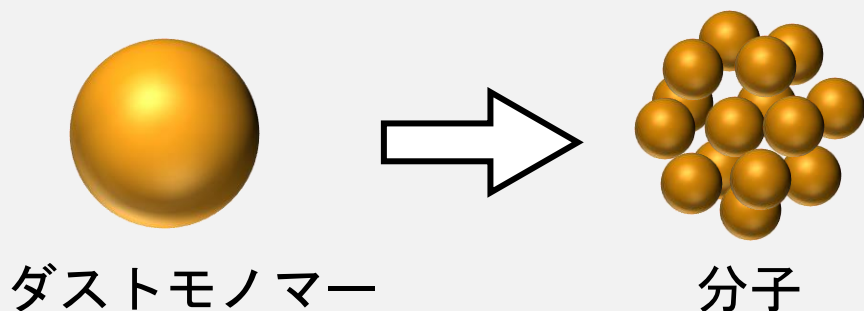
- **ダストから微惑星への成長過程を理解したい**
 - 衝突破壊などダスト成長を阻害する問題の解決が必要
 - ダストアグリゲイト衝突過程の理解が不可欠
- **衝突シミュレーション結果はモノマー間相互作用モデルに依存する**
 - 正確なダストモノマー間相互作用の理解が必須
 - 衝突エネルギーの散逸を正しく評価する必要がある
- **分子動力学 (MD) シミュレーションでモノマー間相互作用を調べる**
 - より現実的な新しいモノマー間相互作用モデルの構築

研究手法: 分子動力学シミュレーション

分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) の現象スケール



古典分子動力学シミュレーション



・ ニュートンの運動方程式に基づいて時間発展を計算

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \nabla U_{ij} \quad (U_{ij} : \text{分子間ポテンシャル})$$

レナード・ジョーンズポテンシャル

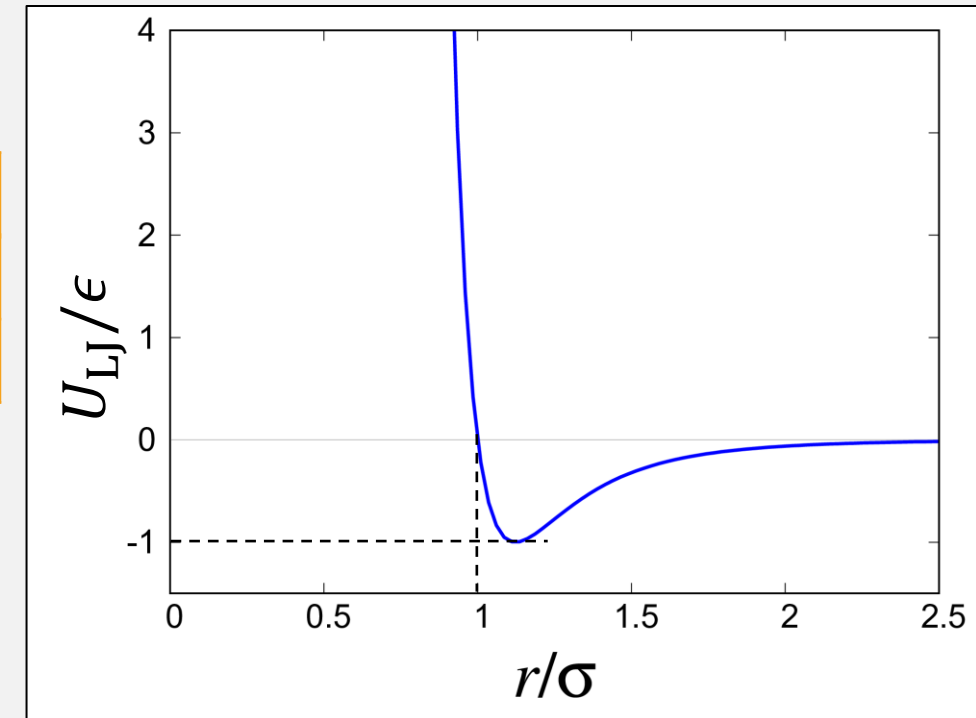
10/45

レナード・ジョーンズ (Lennard-Jones: LJ) ポテンシャル

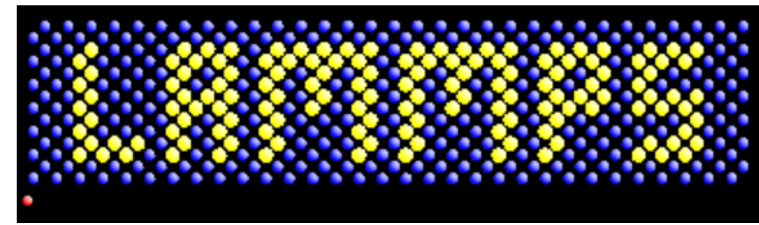
$$U_{\text{LJ}}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{r_{ij}}{\sigma} \right)^{-12} - \left(\frac{r_{ij}}{\sigma} \right)^{-6} \right]$$

	長さ σ (nm)	温度 T (K)	時間 t (ps)	分子量 m
Ar	0.341	120	2.2	39.95
Ag	0.264	4000	0.48	107.9

- カットオフ: 5.0σ
- LJポテンシャル系では物理量は σ, ϵ, m で規格化



研究手法: LAMMPS

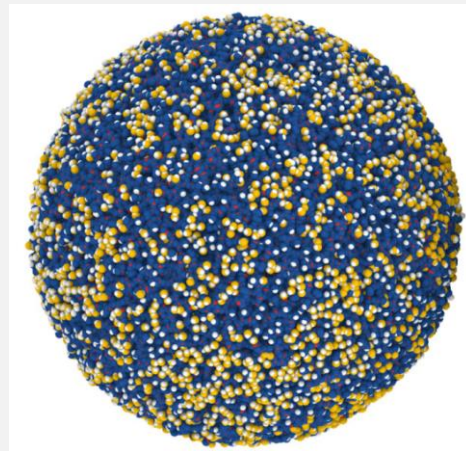


11/45

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

(Thompson+22)

- 並列計算に特化した分子動力学シミュレーションコード
- 材料力学の研究によく用いられている
- LJポテンシャルの他にも様々なポテンシャルに対応 (特に金属などが強い)



アモルファス構造を持つシリカ球
(Nietiad+20)

- 時間積分: 速度ベルレ法 (2次精度)
- 力の計算: 直接, P^3M , ...
- 本研究の実行環境: GPU cluster, Cray XC50 (CfCA / NAOJ)

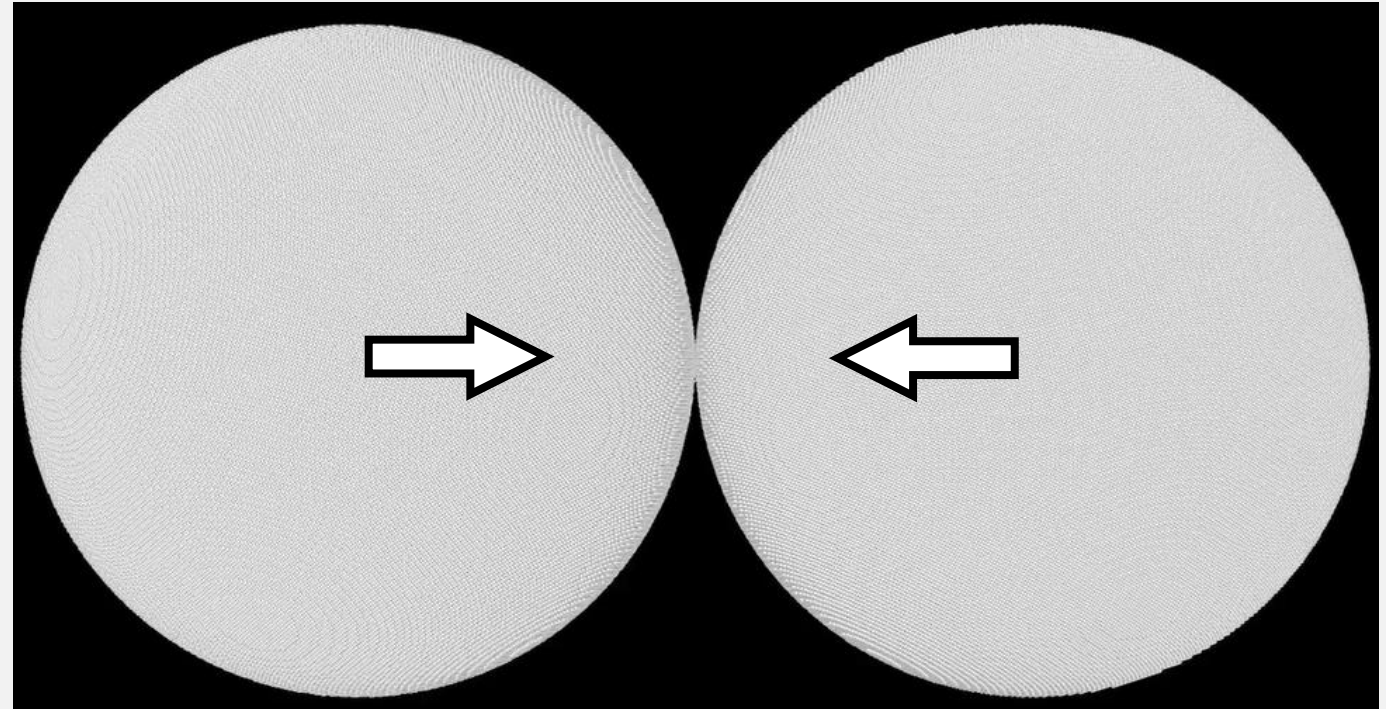
Part I. 正面衝突

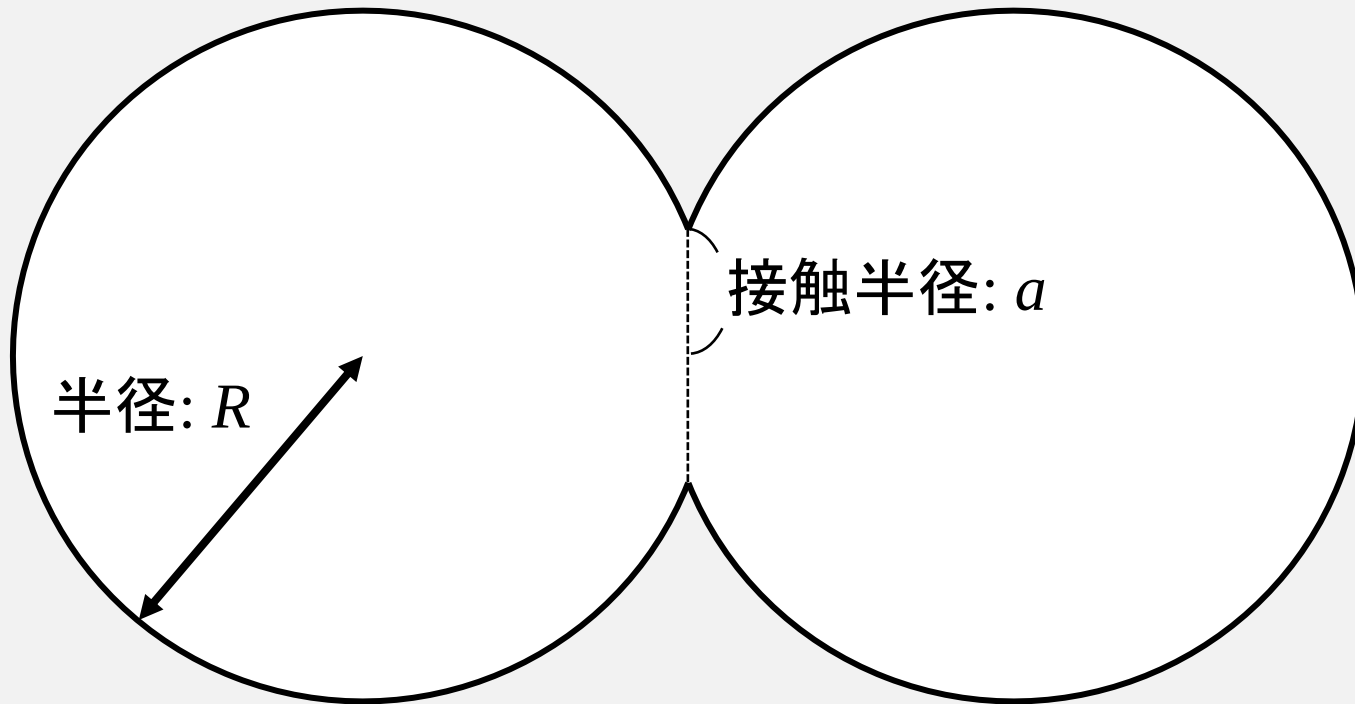
粒子間力

反発係数

パラメータ依存性

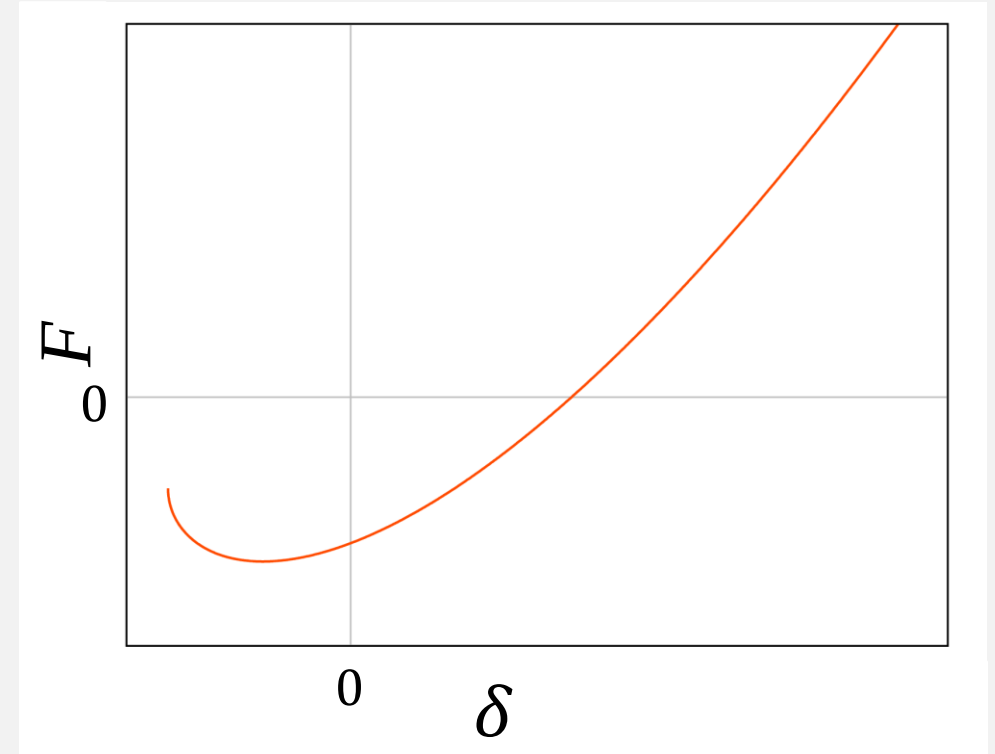
新接触モデル





重心間距離: X

圧縮距離: $\delta = 2R - X$



$$F = \frac{8E^*a^3}{3R} - \sqrt{16\pi\gamma E^*a^3}$$

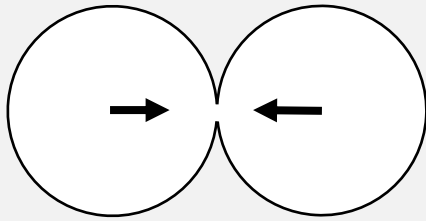
γ : 表面エネルギー
 E^* : 換算ヤング率

$F > 0$: 斥力
 $F < 0$: 引力

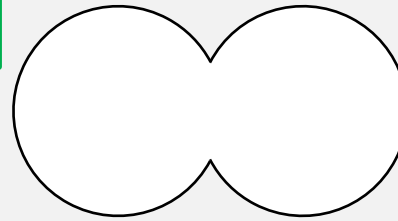
粒子間力: JKRモデル

14/45

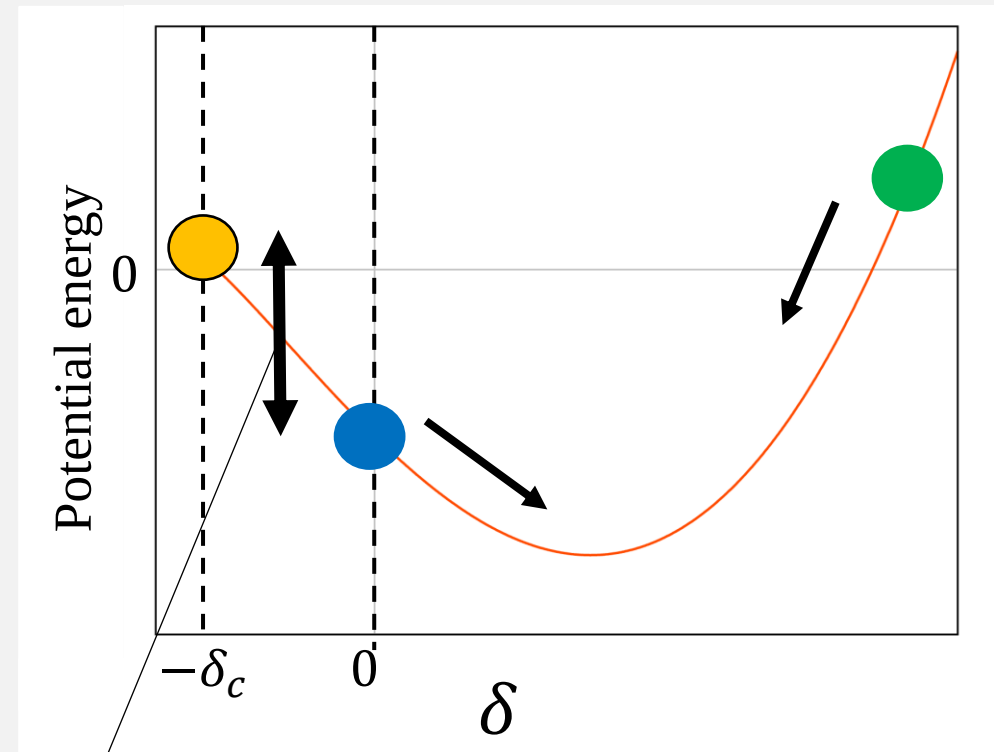
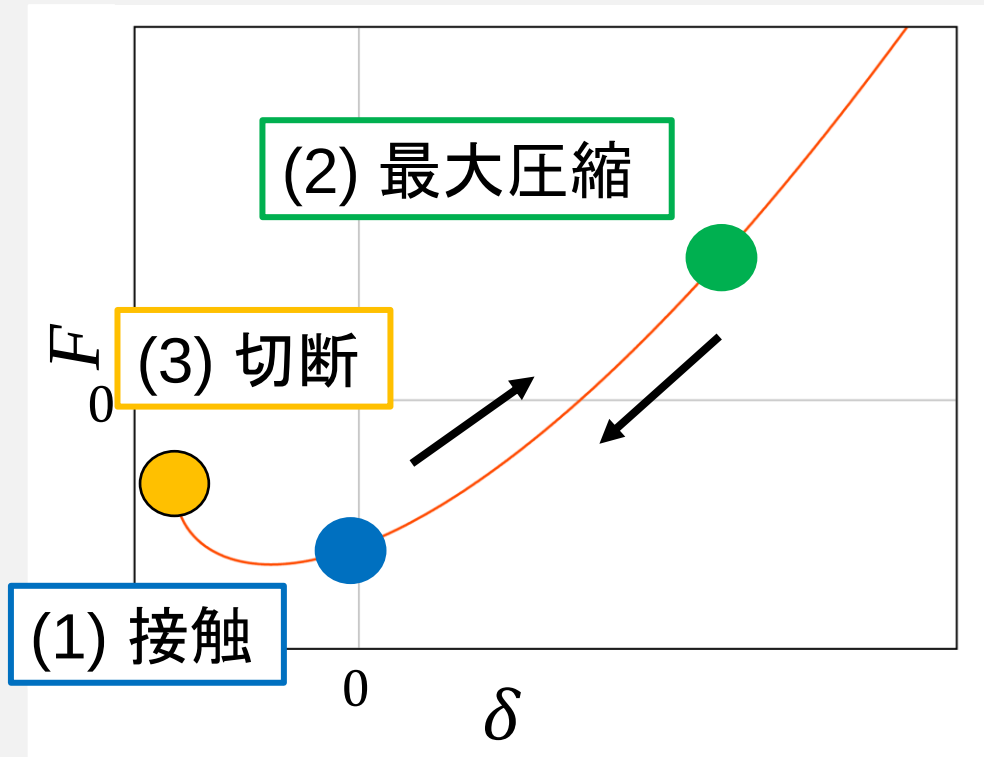
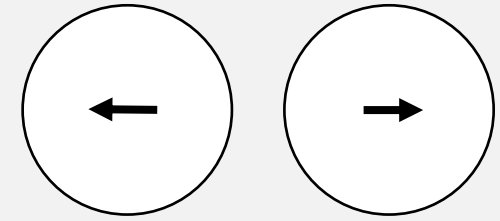
(1) 接触



(2) 最大圧縮



(3) 切断



切断が起こる場合は一定の並進運動エネルギーが消失

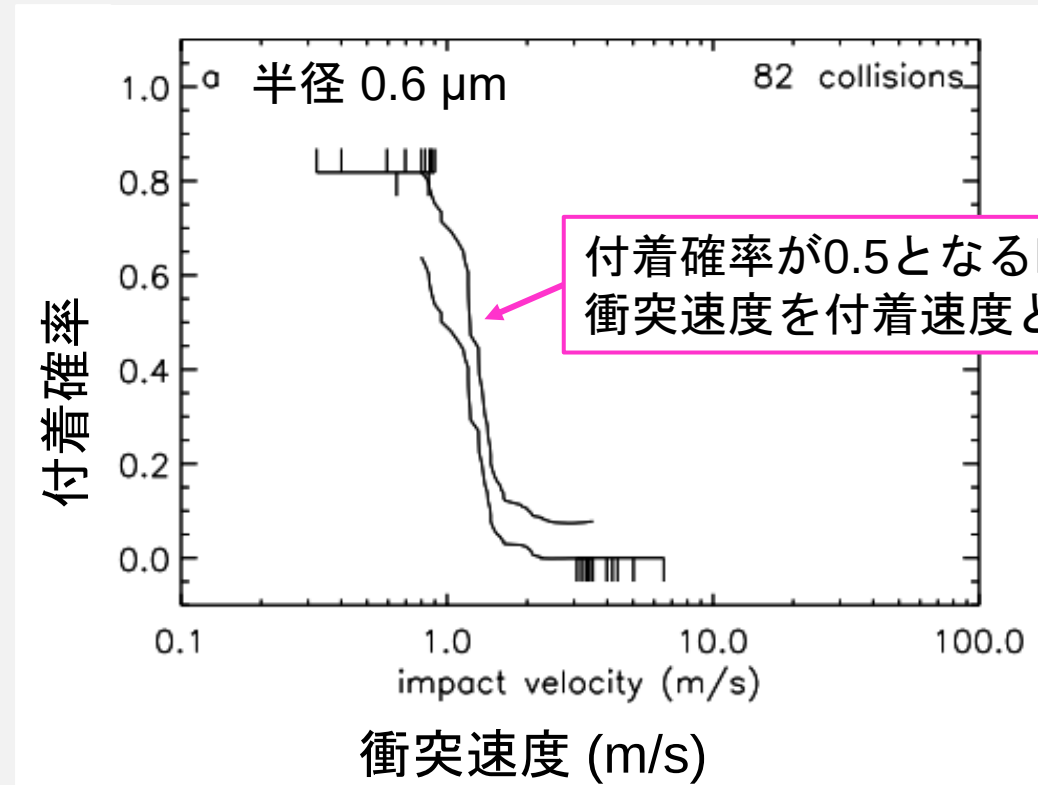
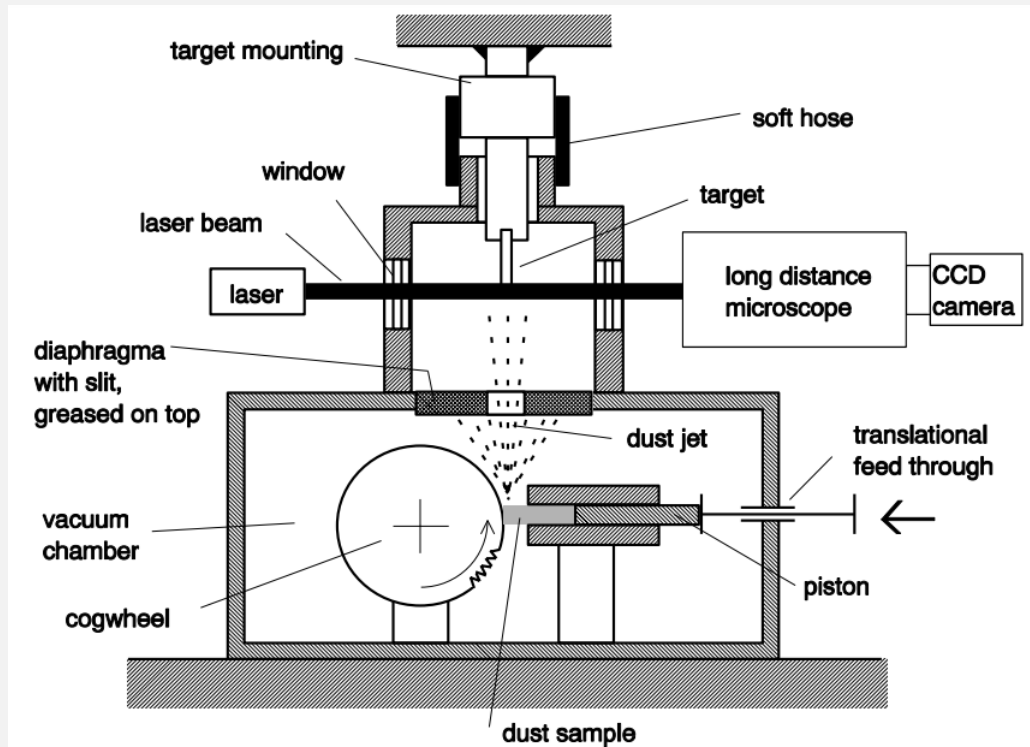
モノマー衝突の先行研究：室内実験

Poppe et al. (2000)

半径 $r = 0.25, 0.6 \mu\text{m}$ の SiO_2 球

$$v_c \simeq 0.9 \left(\frac{r}{1 \mu\text{m}} \right)^{-0.53} \text{ m/s}$$

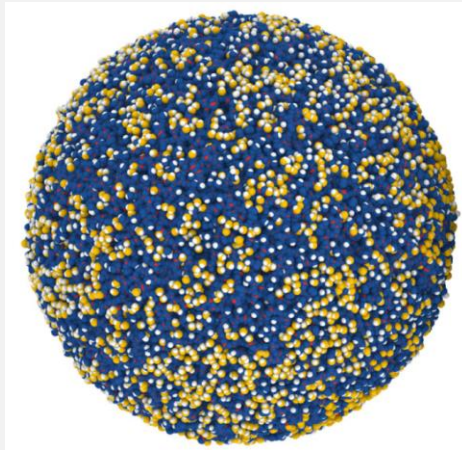
(JKR値より1桁大きい)



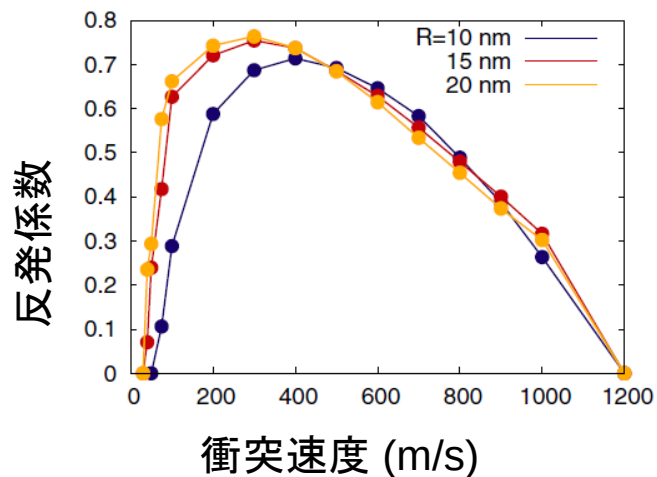
モノマー衝突の先行研究: MDシミュレーション

16/45

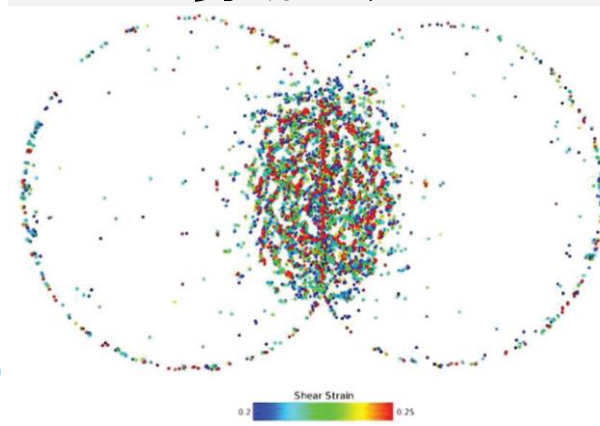
- シリカナノ粒子衝突 (Nietadi+17; 20)



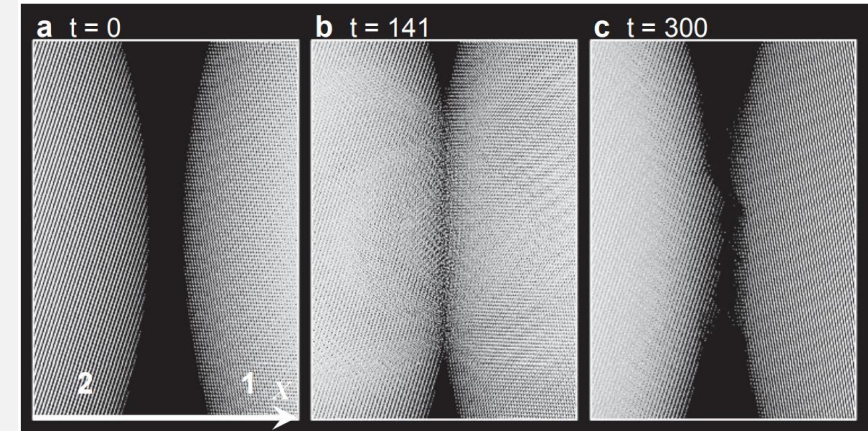
反発係数



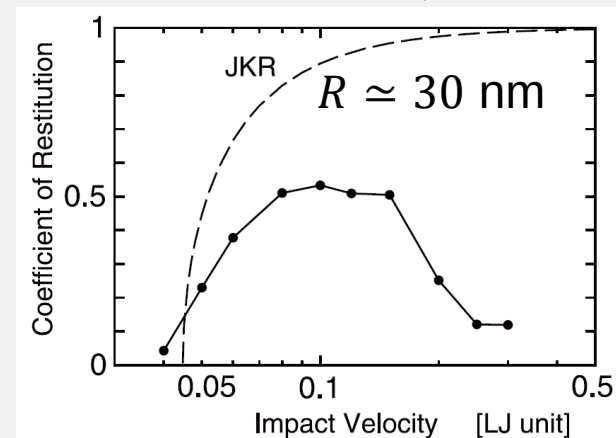
剪断ひずみ



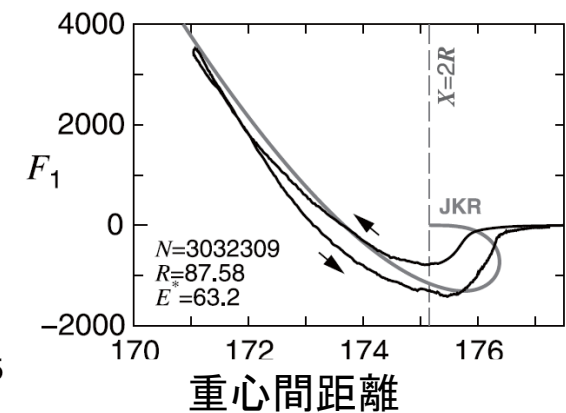
- LJ分子を用いた粒子衝突 (Tanaka+12)



反発係数



粒子間力

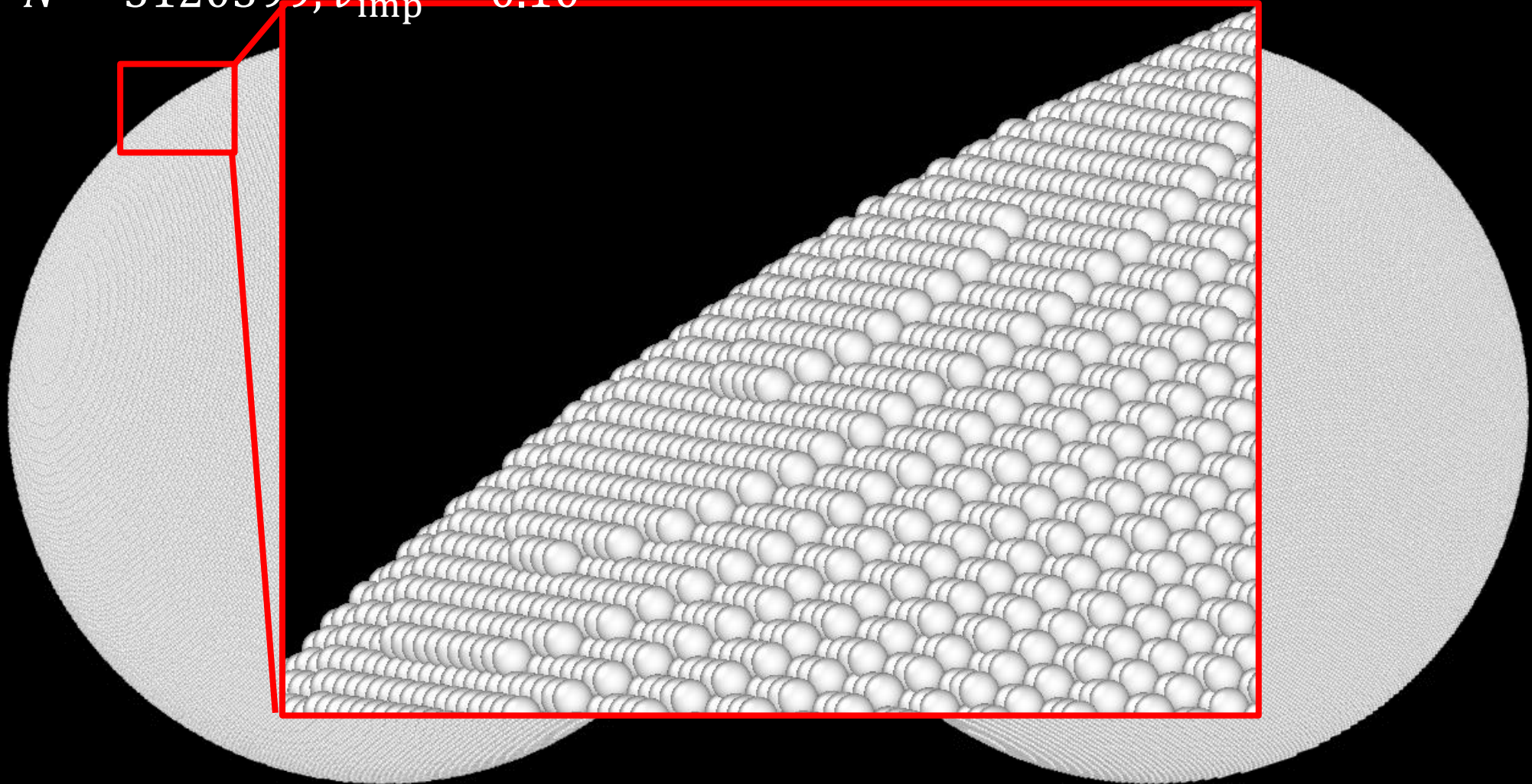


- 法線方向の相互作用は、ダストの合体限界速度と関係している (Wada+13) ため、衝突エネルギー散逸の正確な評価が必要。
- 法線方向のモノマー間相互作用を明らかにする必要がある。
- 正面衝突のMDシミュレーションを行い、散逸的なふるまいを調べる。
- 既存MD研究より幅広いパラメータ領域で衝突過程を詳しく理解する。
- JKRモデルとの違いについてのパラメータ依存性を明らかにし、新しいモデルの構築を目指す。

シミュレーション例

18/45

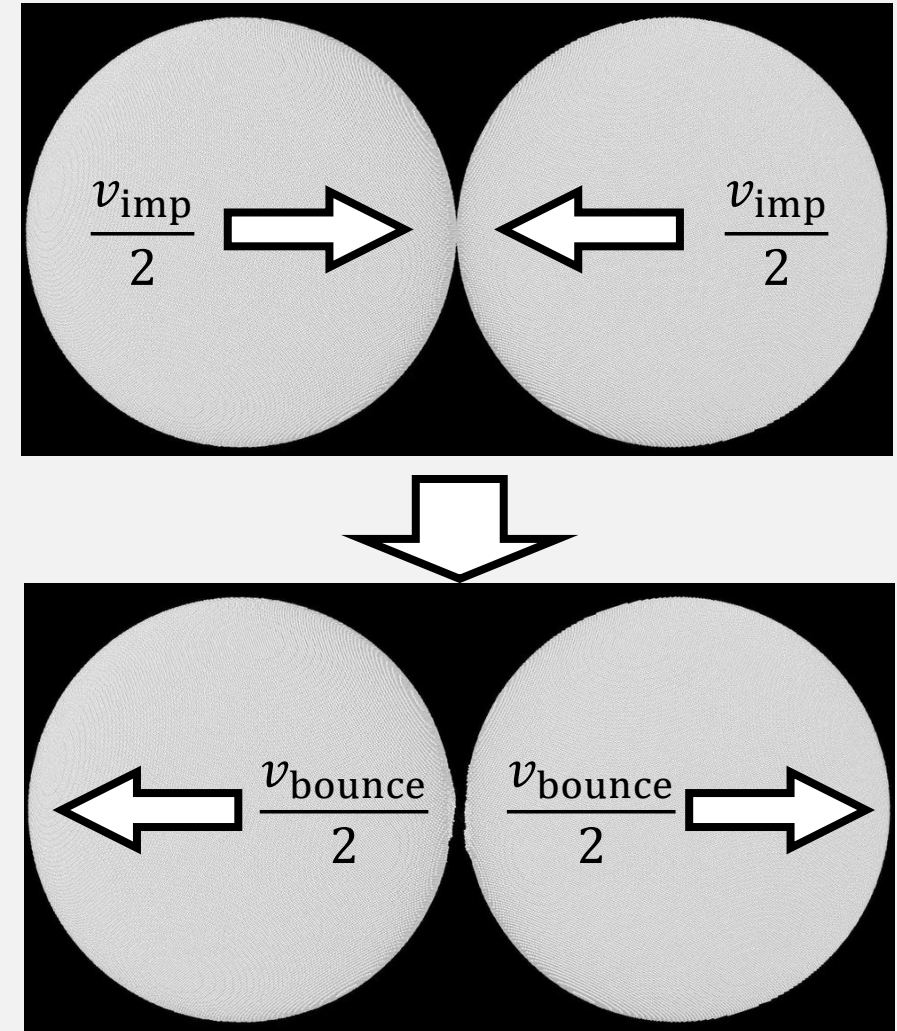
$N = 3120599, v_{\text{imp}} = 0.10$



シミュレーションモデル

19/45

モノマー半径 R	29.6, 58.9, 88.4, 147, 294 (10 - 100 nm)
分子数	$10^5 - 10^8$
温度 T	10^{-6} , 10^{-2} , 0.05, 0.10, 0.20
衝突速度 v_{imp}	0.04 - 0.30
衝突角度	0° (正面衝突)
結晶構造	面心立方格子
結晶方向	ランダム (8-20ラン)

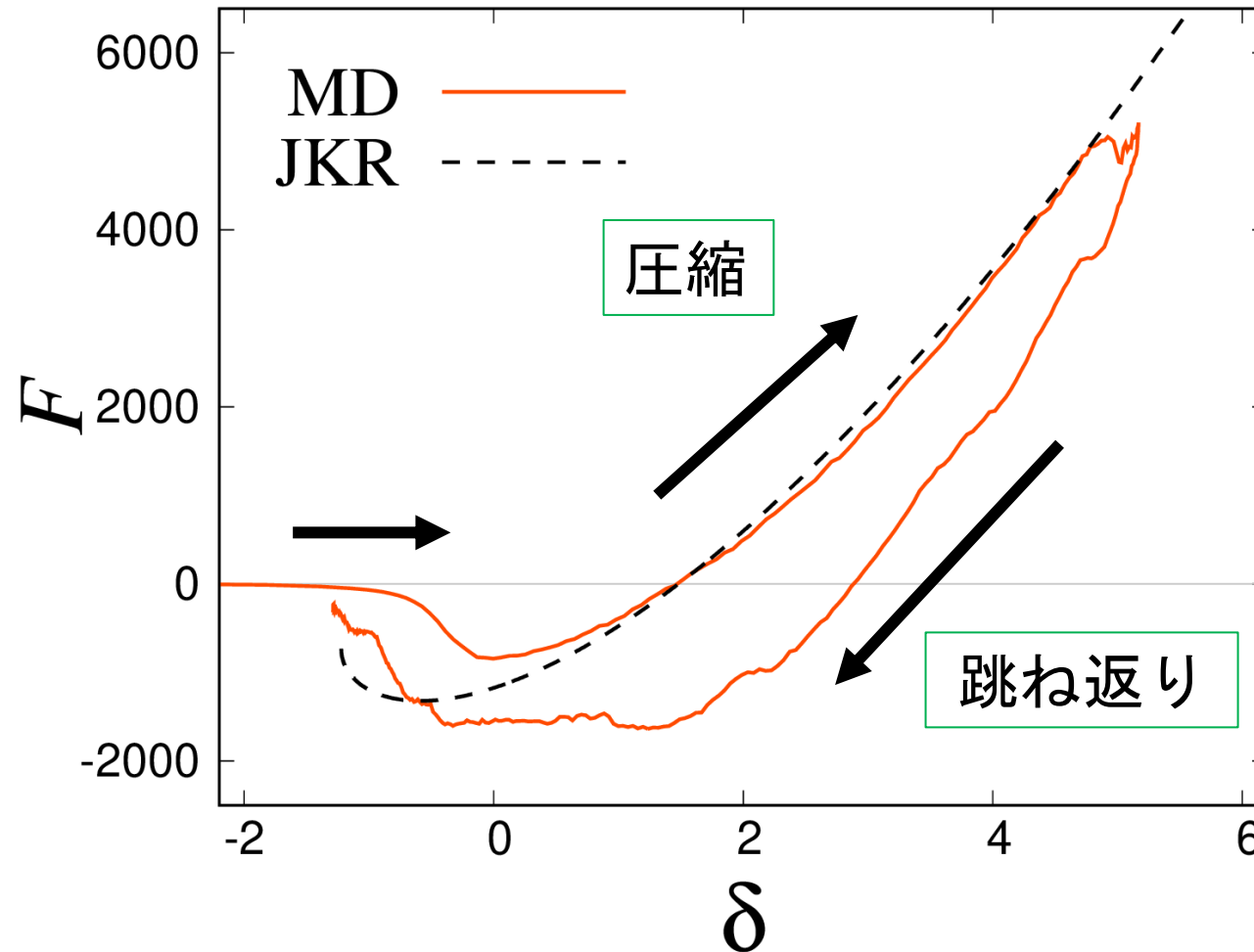


モノマー間に働く力と反発係数 e を調べる

粒子間力: MDシミュレーション

20/45

$R = 88.4$ (30 nm), $v_{\text{imp}} = 0.10$

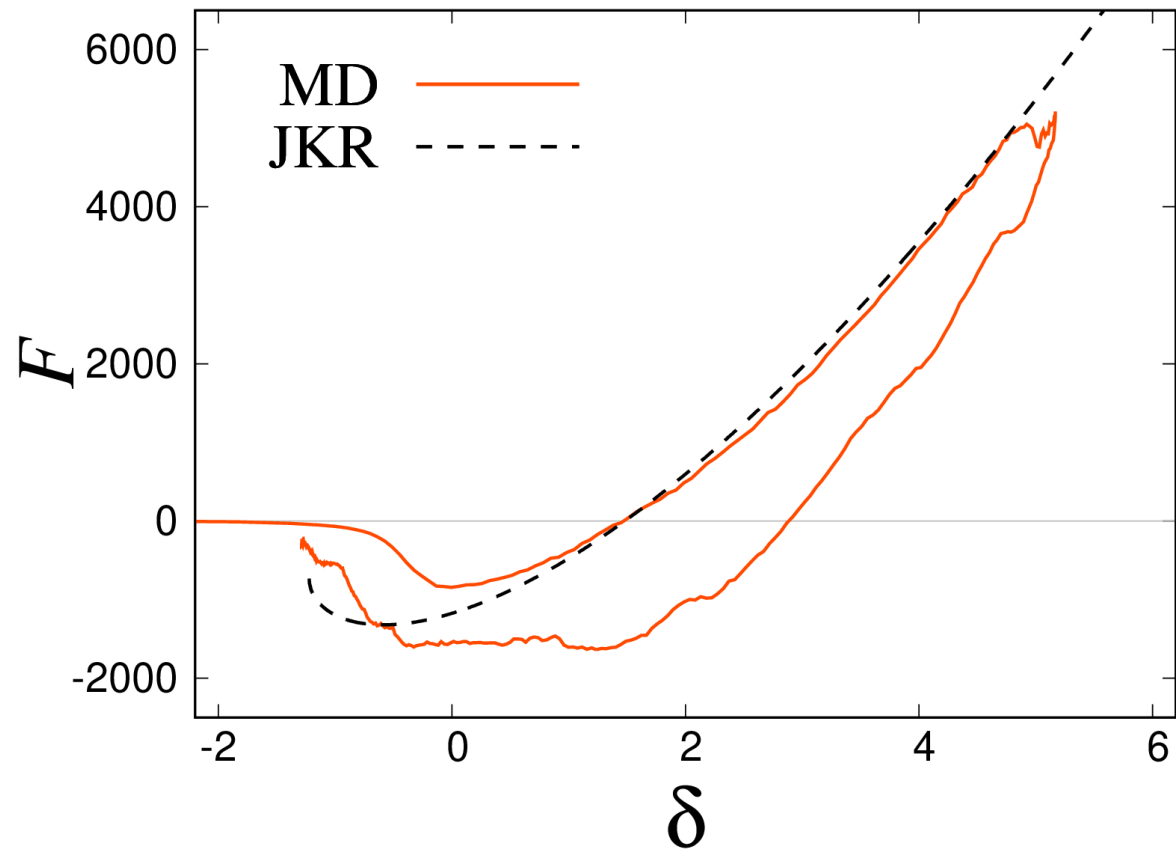


圧縮と跳ね返りの経路に差 (ヒステリシス) が存在

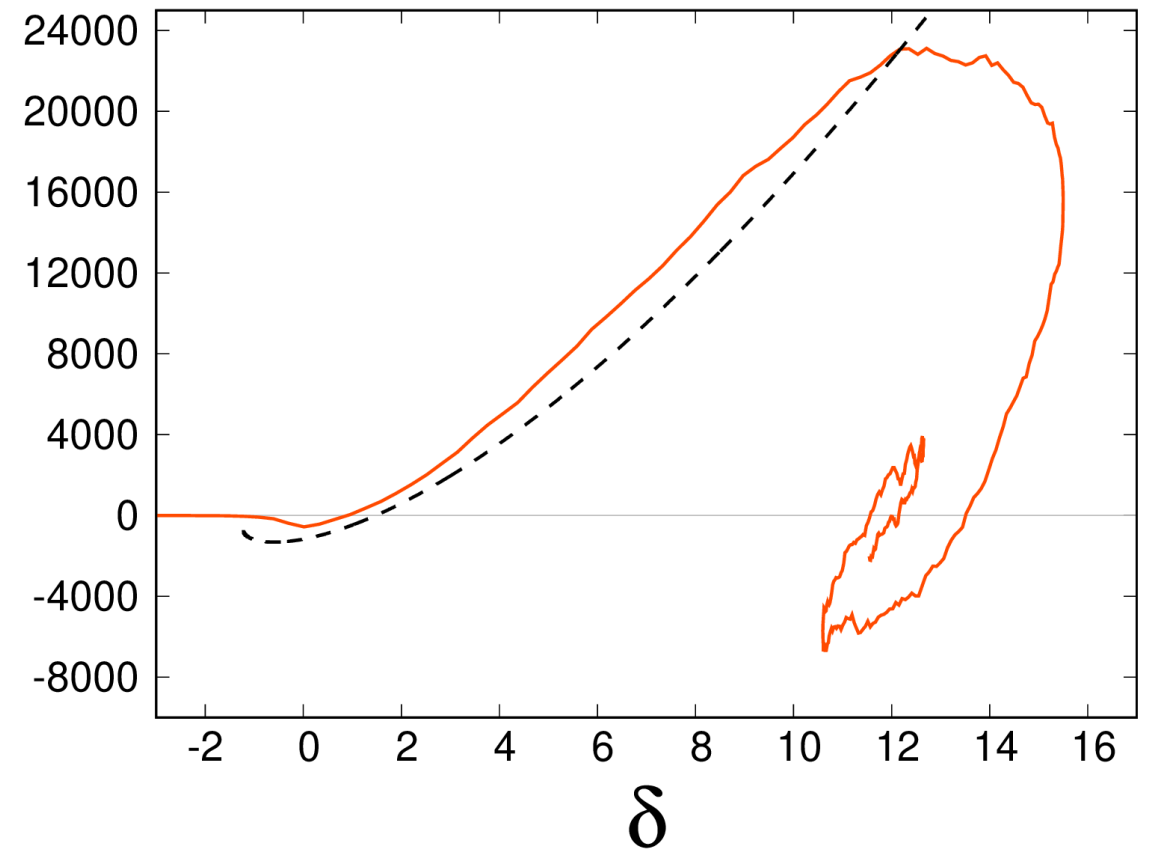
粒子間力: 衝突速度依存性

21/45

$R = 88.4$ (30 nm), $v_{\text{imp}} = 0.10$



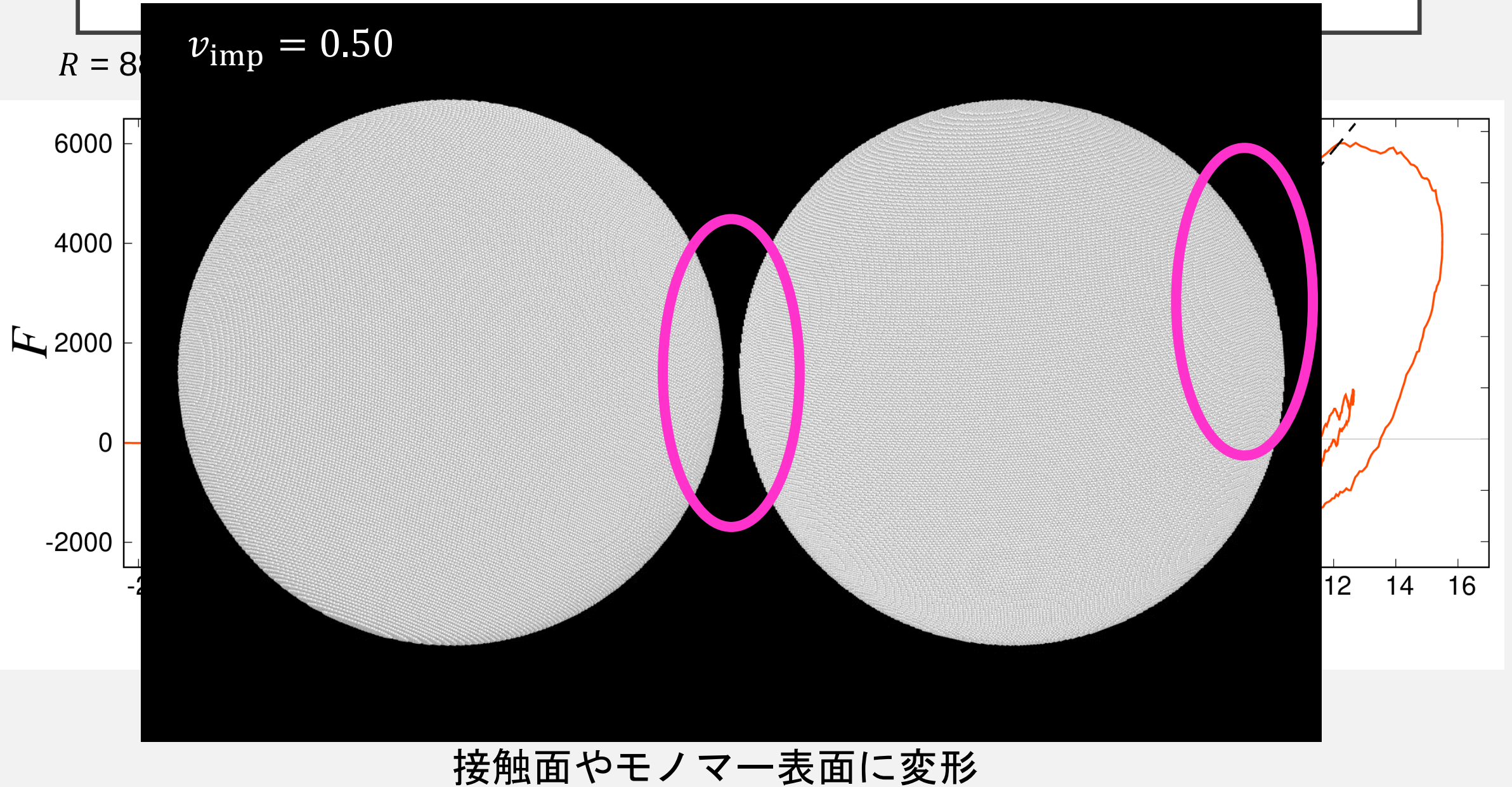
$v_{\text{imp}} = 0.50$



高衝突速度ほどヒステリシスは増大
→ 高い圧力による変形が原因

粒子間力：衝突速度依存性

22/45



粒子間力: 半径依存性

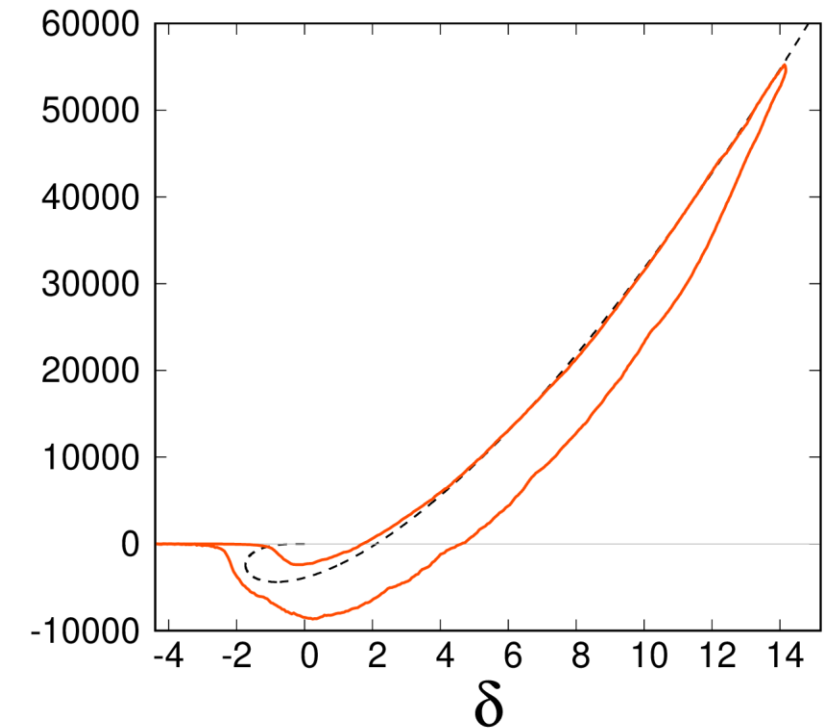
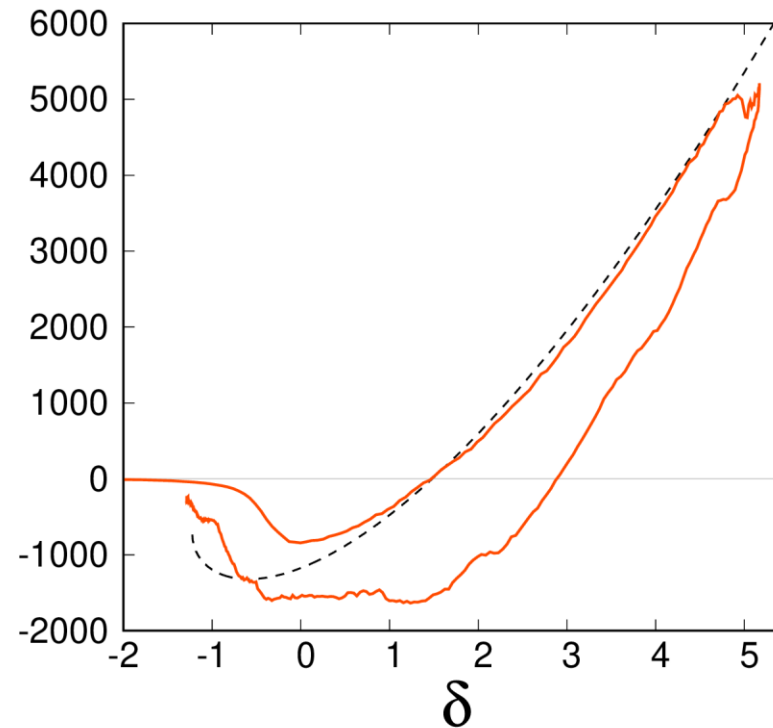
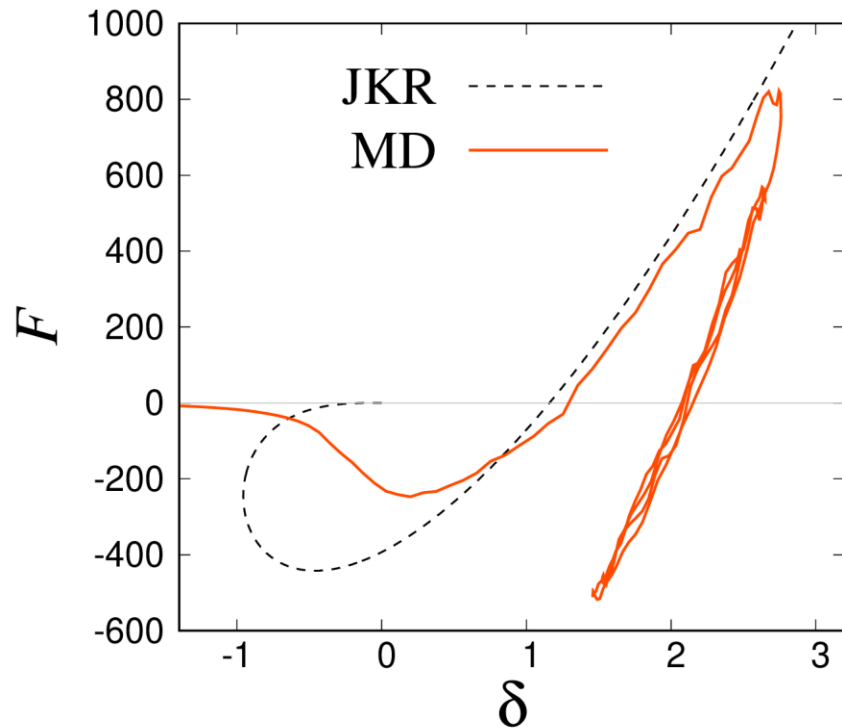
23/45

$$v_{\text{imp}} = 0.10$$

$$R = 58.9 \text{ (20 nm)}$$

$$R = 88.4 \text{ (30 nm)}$$

$$R = 147 \text{ (50 nm)}$$



同じ衝突速度では、半径小ほどヒステリシスは増大
→ 半径小ほど圧力大 ($R = 29.6 : p_c = 0.28E^*$, $R = 147 : p_c = 0.21E^*$)

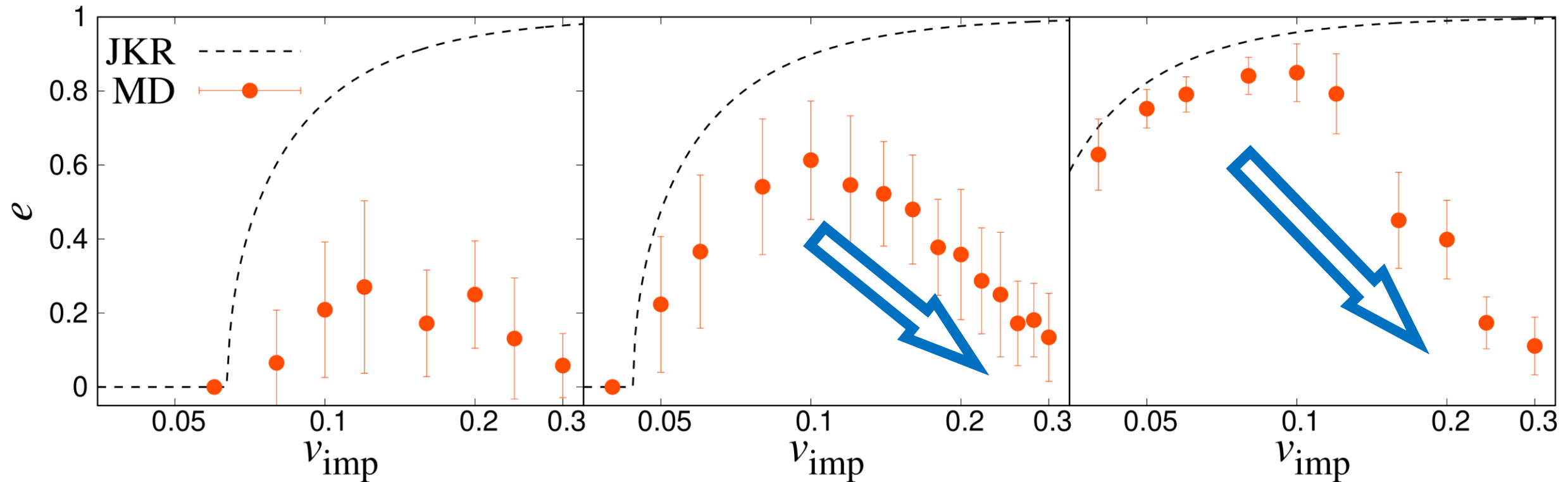
反発係数：衝突速度依存性

24/45

$R = 58.9$ (20 nm)

$R = 88.4$ (30 nm)

$R = 147$ (50 nm)



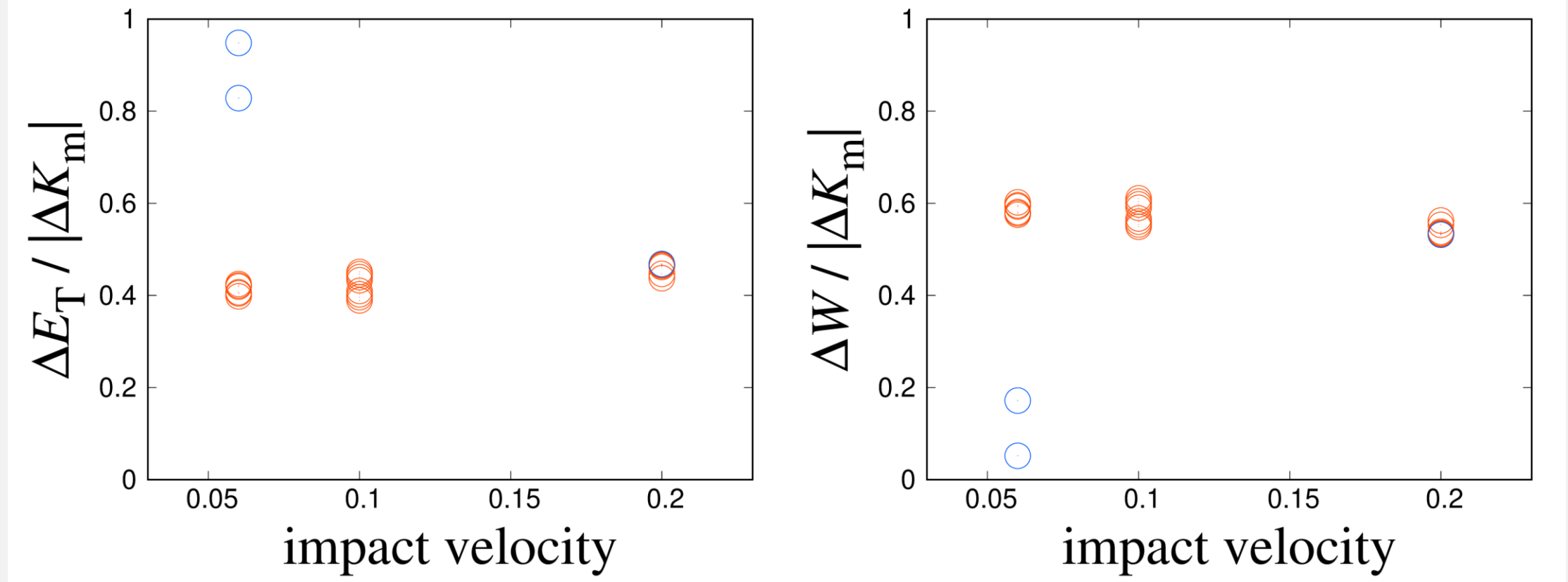
半径が小さいほど反発係数 e は減少

$v_{\text{imp}} \sim 0.1$ で e は最大

(半径大・高衝突速度ほどエネルギー散逸大)

$$e = -\frac{v_{\text{bounce}}}{v_{\text{imp}}}$$

$R = 88.4$ (30 nm)



初期の並進運動エネルギーは分子のランダム運動エネルギー (熱化) とポテンシャルエネルギー増加 (形状変化) 分に変化

Krijtモデル (Krijt+13)

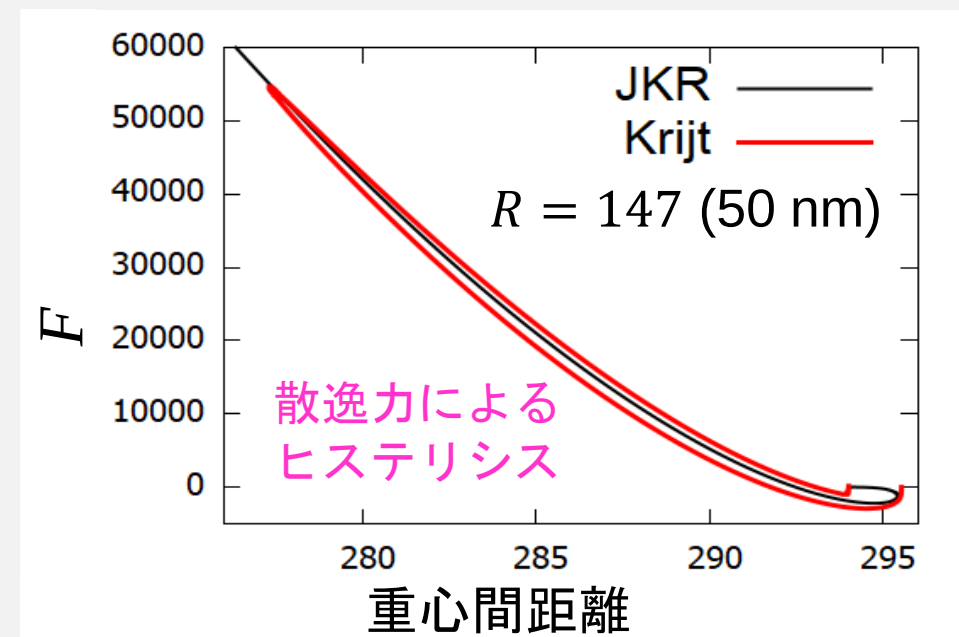
散逸力 (Brilliantov+04) + 接触半径進化 (Greenwood+07)

$$F_{\text{dis,K}} = 2AE^* v_{\text{rel}} a$$

A : 係数 ($A \propto$ モノマー半径)

v_{rel} : 相対速度

低速度衝突のMD結果は再現するが、
半径小・高速度衝突時でのエネルギー散逸は不十分
→ 圧力に依存する散逸力が必要



新接触モデル

散逸力の係数 A が圧力に依存するモデル (stress-dependent dissipative model)

$$A = A_0 \exp \left[\left(B \frac{p_c}{E^*} \right)^\zeta \right]$$

A_0, B, ζ : 係数, 指数
 p_c : 接触面中心の圧力

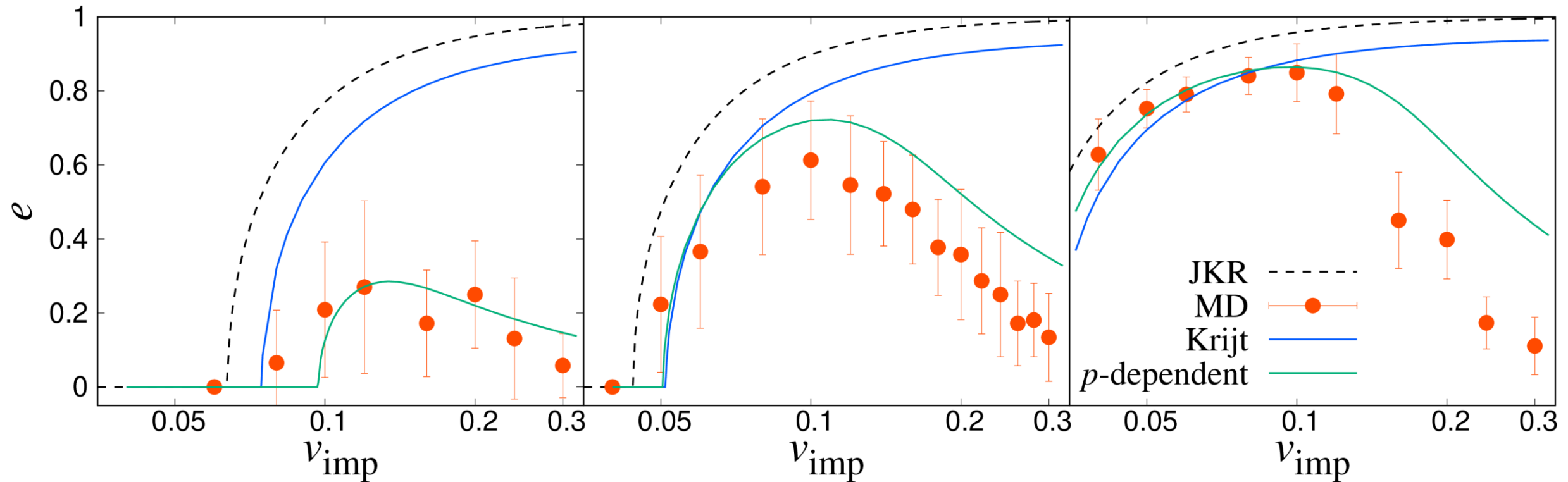
反発係数：圧力依存散逸モデル

27/45

$R = 58.9$ (20 nm)

$R = 88.4$ (30 nm)

$R = 147$ (50 nm)

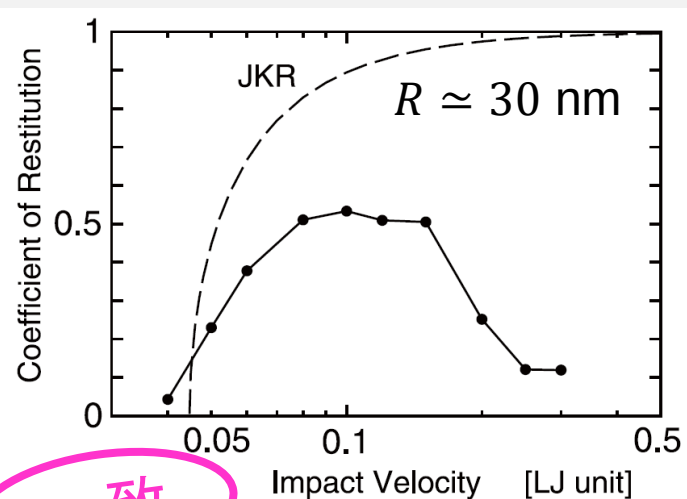
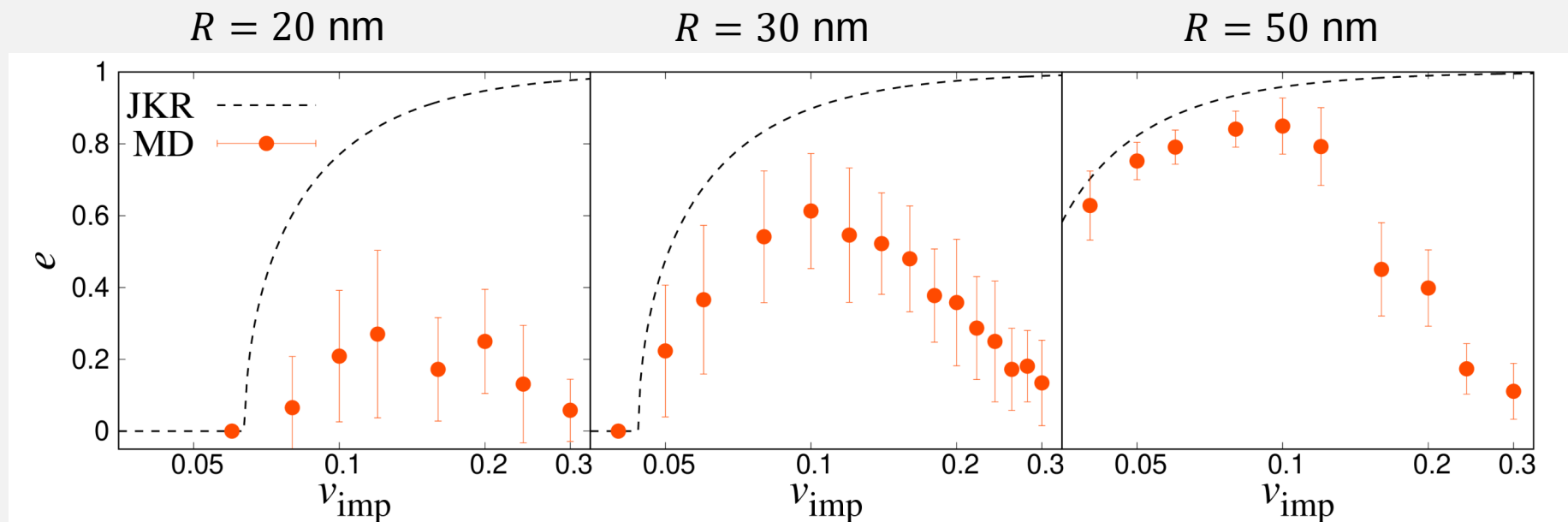


新接触モデルは高速度衝突でもMDシミュレーションを再現

$$A_0(R) = 0.5 \left(\frac{R}{147} \right), B \simeq 6.4, \zeta = 4.0$$

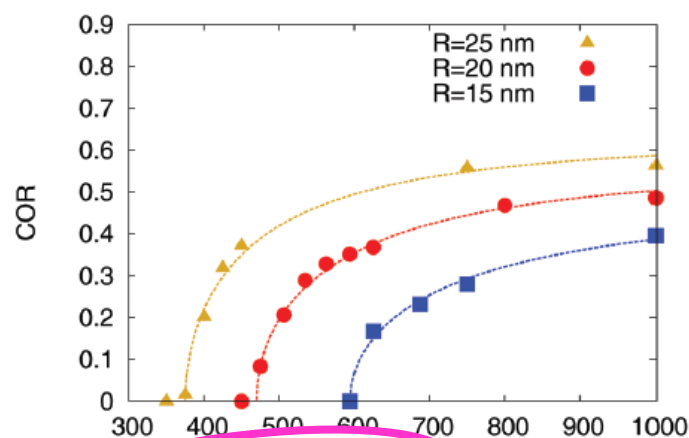
議論：先行研究との比較

28/45



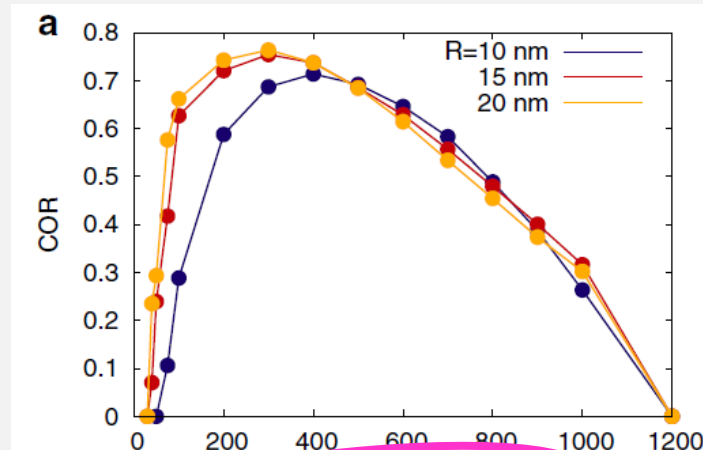
一致

Tanaka+12



ピーク無し

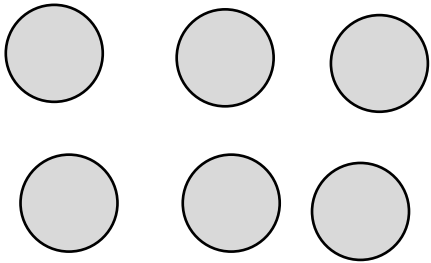
Nietadi+17



サイズ依存性弱

Nietadi+20

分子結晶

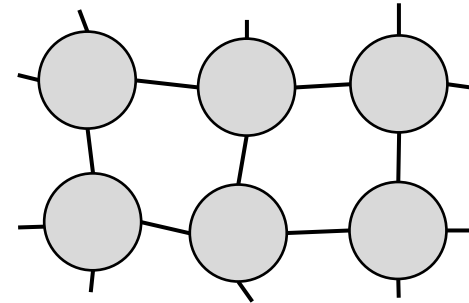


- 分子運動は共有結合と比べて自由
- 並進エネルギーは熱エネルギーへ変換されやすい
- 変形しやすい

→ 合体しやすい

- 氷ダストが当てはまる

共有結合結晶



- 共有結合により、分子運動が制限
- 並進エネルギーから熱エネルギーへの変換が抑制

→ 合体しにくくなる

- 岩石ダストは共有結合結晶？

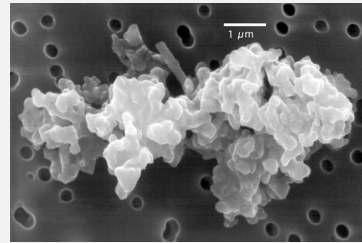
Part I. まとめと展望

まとめ

- ・モノマー正面衝突のMDシミュレーションを行った
- ・モノマー間に働く力と反発係数を調べ、MDシミュレーション結果を再現する接触モデルの構築を試みた
- ・主な結果
 - 圧縮と跳ね返りの間で力はヒステリシスを示し、小半径・高衝突速度時に大きくなる
 - 反発係数は最大値を持ち、高速度衝突において急激に減少
 - 圧力に応じて散逸力が増大するモデルでMDシミュレーション結果をよく再現できた
- ・衝突エネルギー散逸が生じることから、既存のダスト衝突数値計算で見積もられている破壊限界速度が増加する可能性がある → 新たなダスト成長の描像

展望

- ・他の分子結晶構造
- ・氷モノマー
- ・温度依存性を含んだ新相互作用モデル



ダスト

衝突合体成長



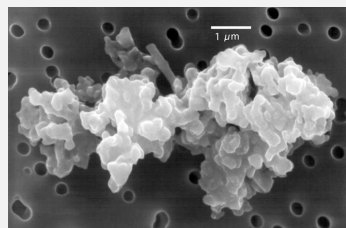
微惑星

ダストアグリゲイト衝突シミュレーション

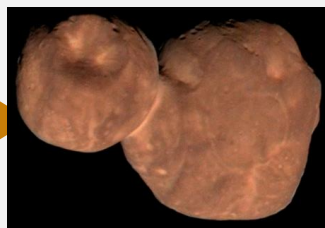
ダストモノマー間相互作用
法線, 回転, 滑り, ねじれ

- ・ 衝突エネルギーがより散逸
→ 合体限界速度はより大きくなる
- ・ 小さな ξ_{crit}
→ ダスト構造が変化しやすい
圧縮され密度がより高くなる

本研究: モノマーの正面衝突と回転運動をMDシミュレーションで調べた
散逸力や散逸トルクによってMDシミュレーション結果の再現に成功



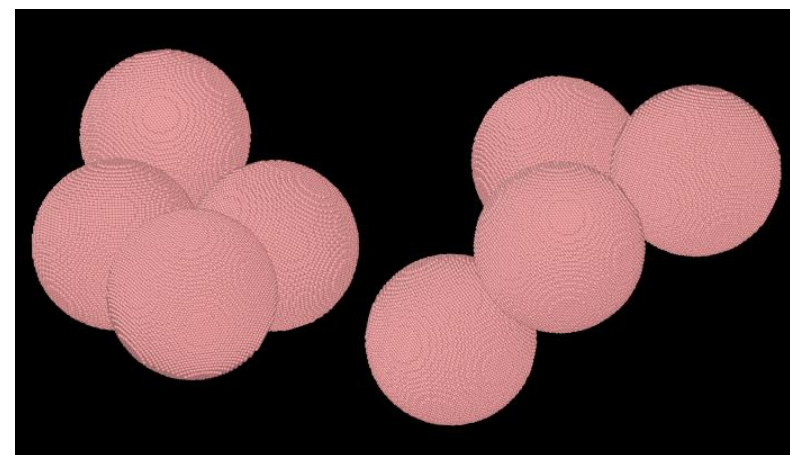
衝突合体成長



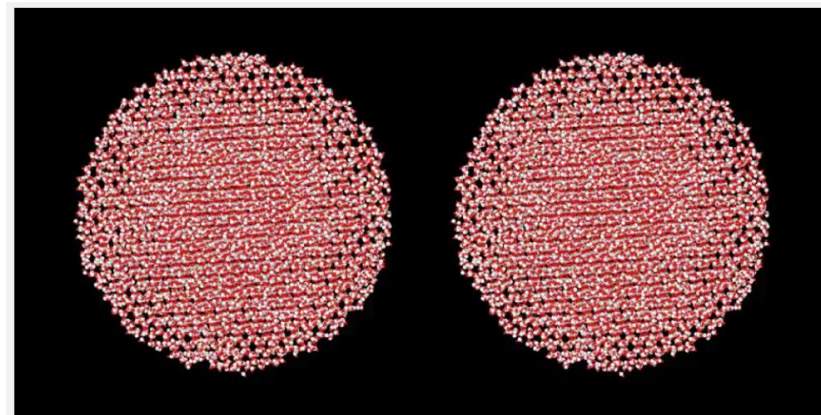
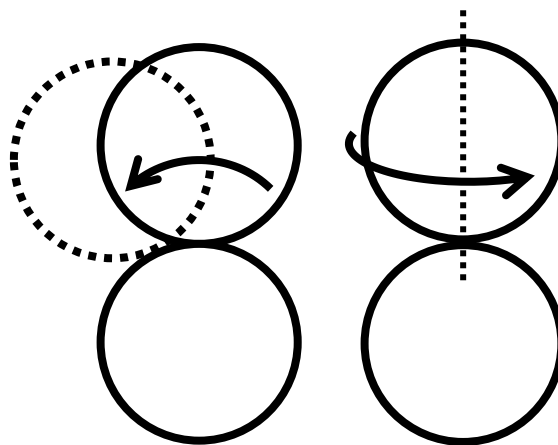
ダストアグリゲイト衝突シミュレーション

ダストモノマー間相互作用
法線, 回転, 滑り, ねじれ

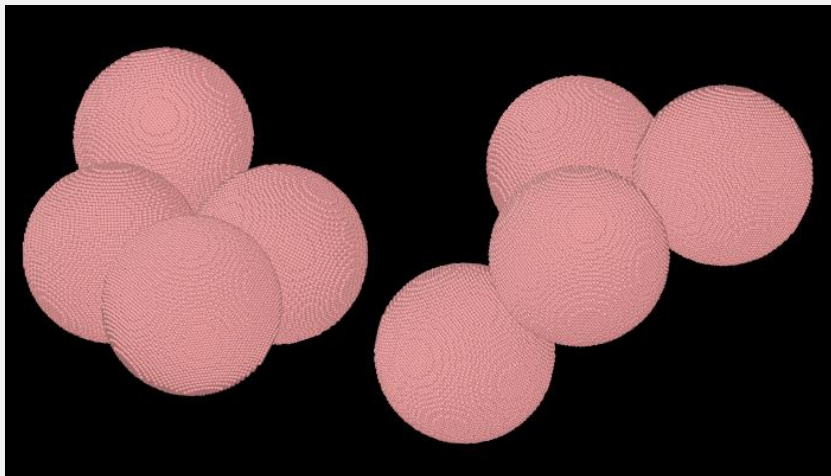
- ・ 新モデルを組み込んだダスト衝突計算
- ・ MDシミュレーションを用いたダストアグリゲイト衝突計算



- ・ 温度依存性
- ・ 回転相互作用のサイズ依存性
- ・ 滑り, ねじれの相互作用
- ・ 氷モノマー

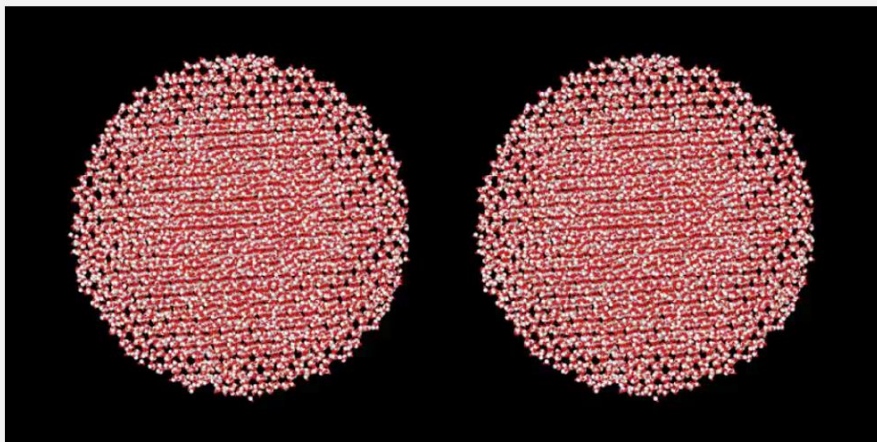


- MDシミュレーションを用いたダストアグリゲイト衝突計算

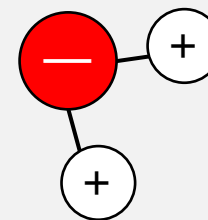
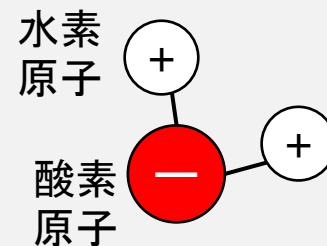


- 膨大な分子数が必要
- 既存のシミュレーション研究と比較が可能に？
512個のモノマーからなるアグリゲイトならMD可能？

- 氷モノマー



- 水ポテンシャルは複雑 (LJ + クーロン ポテンシャル) のため、計算量はLJの10倍以上



水のポテンシャルは
LAMMPSに実装済み

- より現実的なダストモノマー間相互作用の解明