

## Q27a 分子動力学シミュレーションによる炭素ダスト発生機構の研究

伊藤 篤史 (名大)、中村 浩章 (核融合研)、高橋 順子 (明治学院大)

星間領域の波長観測で得られた分子の発光スペクトルのうち、ブロードに広がるスペクトル群が存在することから、PAHやQCCと呼ばれる炭素ダストの存在が提唱されている。PAHやQCCは数十個の炭素原子からなる巨大分子であり、さらにアモルファス形状ではなくグラフェンのような二次元平面構造をしているとされる。しかし星間空間においてこのような構造を持つ巨大分子がどのようにして生成されるのかは未解明である。

本研究では、分子動力学シミュレーションを用いてPAHやQCCの生成機構を明らかにする。それには我々が物性物理の研究でこれまで培ってきた炭素と水素の化学反応を高精度で取り扱う改良型 Brenner ポテンシャルモデルを相互作用計算に用いる。物性分野では同様のモデルを用いてフラーレンやナノチューブの生成シミュレーションが行われてきたが、星間空間では熱浴の役目を担う溶媒・溶液が存在しないため、従来の物性現象の温度制御モデルが適応できない。

我々は星間空間に適した温度制御モデルを構築・提唱し、炭素ダストの生成機構を探る。典型的に、質量放出の衝撃波面のような高密度領域においてC原子やC<sub>2</sub>分子が自己組織化して出来上がるダストはPAH形状をしており、グラファイト融解の様にして作られるダストはQCC形状をしていることが明らかになってきた。