



## 過飽和気体における核生成過程の大規模分子動力学計算 -はじめて室内実験との直接比較を実現-

### 研究成果のポイント

- ・大規模分子動力学計算によって、核生成過程の室内実験との直接比較を実現し、核生成率の室内実験値の再現に成功。
- ・核生成過程を決める臨界核の形成エネルギーや凝縮係数の実測に成功。
- ・様々な温度や過飽和度で得られたデータは、高精度かつ普遍的な核生成モデルの構築に重要。

### 研究成果の概要

過飽和気体の凝縮核生成は理工学の幅広い分野で重要となるプロセスですが、定量的に信頼できる理論モデルは未だ存在していません。本研究では、気体からの凝縮過程について、超並列計算機を用いて 80 億分子までの大規模計算を行いました。その結果、室内実験条件と同様の低過飽和状態においてアルゴンガスの核生成を定量的に再現することに成功しました。核生成過程を決めるナノサイズの臨界核の形成エネルギーを分子動力学計算によって実測した結果、臨界核の形成エネルギーは従来の巨視的な見積りより大幅に小さく、それにより室内実験で得られる高い核生成率を説明できることを明らかにしました。また、核への凝縮係数は温度と共に過飽和度にも強く依存することも確認しました。本研究において様々な温度や過飽和度に対し得られたデータは、高精度かつ普遍的な核生成モデルの構築に役立つと期待されます。

### 論文発表の概要

研究論文名 : Large Scale Molecular Dynamics Simulations of Homogeneous Nucleation (均質核生成の大規模分子動力学計算)  
著者 : 氏名 (所属) Juerg Diemand, Raymond Angelil (University of Zurich), 田中今日子, 田中秀和 (北海道大学低温科学研究所)  
公表雑誌 : Journal of Chemical Physics (オンライン先行出版)  
公表日 : 米国東部時間 2013 年 8 月 21 日 (水)  
論文掲載 URL : <http://dx.doi.org/10.1063/1.4818639>

## 研究成果の概要

### (背景)

核形成過程は物質が相変化する際に起きる物理現象であり、気象学(雲粒形成)や工学(ナノ粒子形成)などの理工学の幅広い分野で重要な研究対象となっています。核形成過程を扱う古典理論は核形成過程の巨視的な記述を与え広く用いられていますが、この理論が与える核生成率は室内実験で得られる実験値から数桁以上もずれることが指摘されており、定量的に信頼できる理論モデルは未だ存在していないのが現状です。この理論の問題点として、核生成の際に形成される臨界核の表面エネルギーの評価に巨視的な表面張力を用いるなど、分子レベルの効果を無視している点が挙げられています。この効果について明らかにするために、これまで分子の微視的な運動を計算することにより核生成現象を解析する分子動力学法が用いられてきました。しかし、通常の計算規模は千から数10万分子程度であり、計算できる温度および圧力の範囲は狭い領域に限られていました。

### (研究手法)

核生成過程は多数の分子の中から局所的にごく少数の核が形成される現象であり、核生成する頻度が低い場合を扱うには、多大な分子数が必要となります。従来の分子動力学法の研究では計算規模が小さいため核生成の頻度が高い高過飽和状態しか扱えませんでした。我々はスイスのチューリッヒ大学の研究者と共同で、超並列計算機を用い、従来よりも4桁大きい10億から80億の希ガス分子の核生成過程の大規模計算を実行することに成功しました。これにより、従来よりも核生成率が4桁程度低い核生成現象を扱えるようになり、これまで難しかった室内実験条件と同様の低過飽和状態での核生成過程を再現することに成功しました。

### (研究成果)

従来よりも幅広い条件下で核生成過程の大規模計算を行うことにより、核生成率の算出のみではなく、ナノサイズの臨界核の形成エネルギーや臨界核に分子が付着する際の凝縮係数などについて、均質核生成の素過程を総合的に精査することができました。核生成率を決めるナノサイズの臨界核の形成エネルギーを分子動力学計算によって実測した結果、臨界核の形成エネルギーは従来の巨視的な見積りより大幅に小さくなり、それにより室内実験で得られる高い核生成率を説明できることを示しました。また、分子から凝縮核に付着する際の凝縮係数が、従来想定されていた値より非常に小さくなることを示し、凝縮係数は温度だけでなく過飽和度にも強く依存することが確認されました。

### (今後への期待)

本研究において様々な温度や過飽和度に対し計算を行った結果、核生成率と温度や過飽和度との関係や臨界核の形成エネルギーや凝縮係数の温度や過飽和度に対する依存性などの詳細なデータが得られました。これらのデータは今後の新たな高精度かつ普遍的な核生成理論モデルの構築に役立つことが期待されます。

## お問い合わせ先

所属・職・氏名：北海道大学低温科学研究所 准教授 田中 秀和 (たなか ひでかず)

TEL: 011-706-5472 FAX: 011-706-7142 E-mail: hide@lowtem.hokudai.ac.jp

所属・職・氏名：日本学術振興会 特別研究員 田中 今日子 (たなか きょうこ)

TEL: 011-706-5486 FAX: 011-706-7142 E-mail: kktanaka@lowtem.hokudai.ac.jp

[参考図]

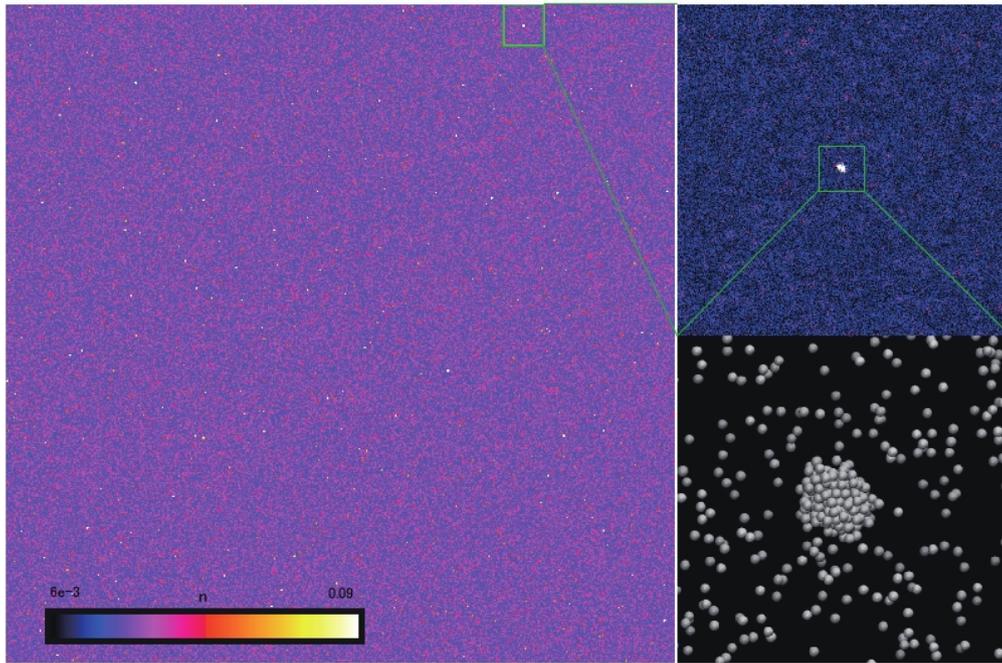


図 1)

凝縮核生成過程の分子動力学計算の一例。10 億分子のガスの中からごく少数のナノサイズの臨界核が形成され、それらの核が成長することで凝縮が進行します。そのため臨界核の生成率が凝縮の進行を律速します。本研究では幅広い条件下で核生成過程の大規模計算を行うことによって、核生成率とともに、臨界核の形成エネルギーや分子が臨界核に付着する際の凝縮係数を実測し、核生成過程を総合的に精査しました。

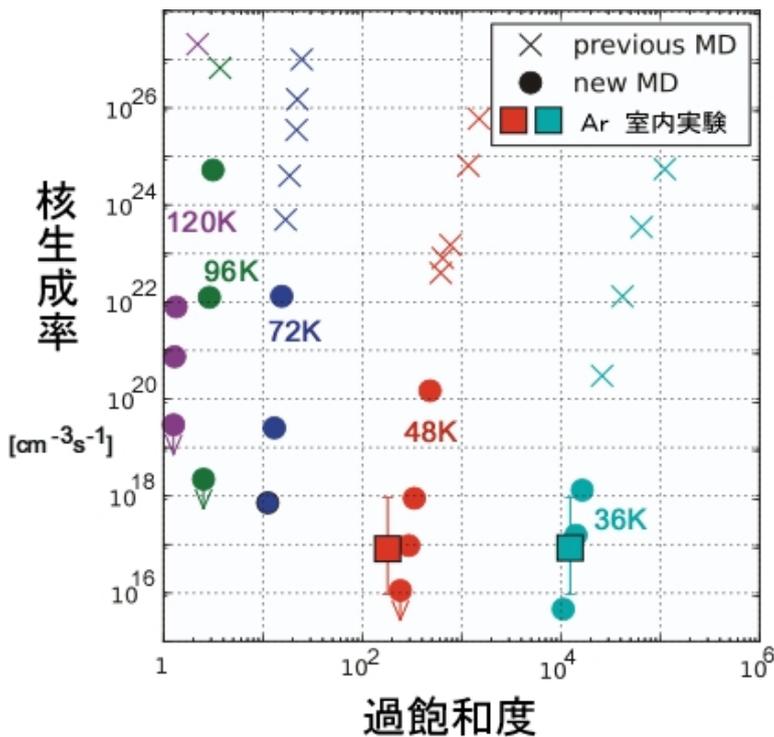


図 2)

分子動力学計算により得られた核生成率とアルゴン核生成室内実験との比較。超並列計算機を用いた大規模計算により、室内実験と同様な低過飽和領域において核生成過程を計算することが可能になり、実験値の再現に成功しました。

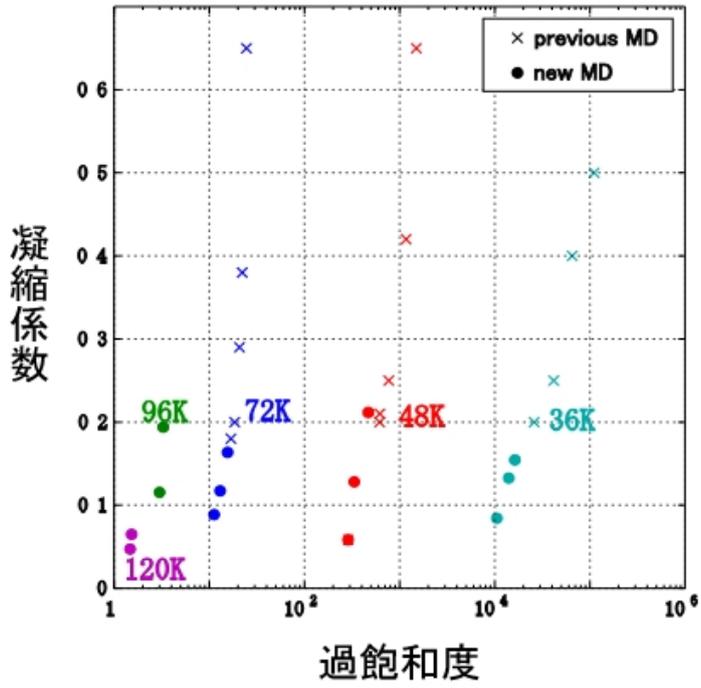


図 3)

分子動力学計算により得られた分子が凝縮核に付着する際の凝縮係数。凝縮係数は温度と共に過飽和度にも強く依存することが確認されました。