



水の凝縮核生成の大規模分子動力学シミュレーション ～室内実験レベルの低生成率での凝縮核生成の再現に成功～

研究成果のポイント

- ・大規模分子動力学シミュレーションにより水蒸気からの均質凝縮核生成を再現。室内実験レベルの低生成率で進行する水凝縮核生成を、世界で初めて分子動力学シミュレーションで実現。
- ・今回の分子動力学シミュレーションや従来の室内実験などで得られた、30桁にわたる水蒸気からの核生成率のデータをすべてよく再現する新たな理論モデルを提唱。

研究成果の概要

飽和した蒸気から液滴が生まれる際の凝縮核生成は、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。しかし、最初につくられる凝縮核はナノサイズと極めて微小なため、その生成率を精度よく予言することは困難であり、有効な一般的理論は未だ存在していません。北海道大学とスイス・チューリッヒ大学との国際共同研究チームは、スーパーコンピュータを駆使し、1200万原子までの大規模分子動力学シミュレーションを行うことで、水蒸気からの均質凝縮核生成過程を明らかにしました。その結果、従来計算の10万分の1という低い核生成率で進行する現象を再現し、室内実験で得られている核生成率と同レベルにまで到達することに成功しました。我々が様々な温度や圧力に対し得た水蒸気からの凝縮核生成率やこれまでの室内実験などで得られていたデータは30桁という広範囲にわたりますが、我々はこれらのデータをすべてよく再現する理論モデルも新たに提唱しました。

論文発表の概要

研究論文名：Homogeneous SPC/E water nucleation in large molecular dynamics simulations
（大規模分子動力学シミュレーションによる SPC/E 水蒸気からの均質核生成）
著者：Raymond Angéilil, Jürg Diemand（University of Zürich）、田中 今日子、田中 秀和（北海道大学）
公表雑誌：Journal of Chemical Physics（AIP Publishing）
公表日：米国東部時間 2015年8月11日（火）（オンライン公開）

研究成果の概要

(背景)

飽和した蒸気から液滴が生まれる凝縮現象は、雲や霧が発生する際に起こる私たちに身近な現象です。蒸気のみが存在し凝縮の核となるものが他にない場合には、均質凝縮核生成と呼ばれ、まずナノサイズの凝縮核を蒸気分子自らつくるところから始まります(図1)。均質凝縮核生成は、気象学や工学など理工学の幅広い分野で重要なプロセスですが、ナノサイズの凝縮核形成の詳細は未だ解明されていません。水は地球や生命にとって重要な存在であり、水の凝縮核形成を解明するための室内実験や分子動力学シミュレーション^{※1}は、これまで盛んに行われてきました。室内実験で得られた水の均質核生成率^{※2}は、従来の核生成理論が与える値から数桁以上ずれていることが報告されており、有効な理論が存在しないことは深刻な問題となっています。一方、多数の分子のミクロな運動をコンピュータ上で計算する分子動力学シミュレーションは核生成現象の詳細を比較的容易に調べることが可能であり、これを用いた研究は数多く行われてきました。しかし、多数の分子を計算しなければならない困難に加え、ごく短時間のシミュレーションしか行えないという制約もあり、その結果、従来は室内実験に比べ数桁も高い核生成率で起こる急激な現象しか調べることができませんでした。

(研究手法)

北海道大学とスイス・チューリッヒ大学との国際共同研究チームは、世界第6位のスーパーコンピュータを用い、1200万原子に対し長時間の大規模分子動力学シミュレーションを実行することにより、従来よりも10万分の1の低い核生成率で進行する水の均質凝縮核生成を再現可能にしました。

(研究成果)

以上のような大規模分子動力学シミュレーションにより、室内実験レベルの低生成率で進行する水凝縮核生成を世界で初めて分子動力学シミュレーションで実現し、室内実験と分子動力学シミュレーションの間に存在した大きな隔たりを埋めることに成功しました(図2)。我々が様々な温度と圧力に対し得た水蒸気からの凝縮核生成率に従来の室内実験などで得られていたデータを合わせると、核生成率で30桁という非常に広範囲にわたります。生成率で30桁の違いとは、例えば、1秒間に1兆個の割合で生成される現象と百億年という宇宙年齢の間に1回しか起こらない生成現象との間の違いに対応します。我々は、このような膨大な範囲にわたる水蒸気からの核生成率のデータをすべてよく再現する理論モデルも新たに提唱しました(図2)。

(今後への期待)

分子動力学シミュレーションではその計算データから、生成された凝縮核の形状など室内実験では観察することが困難である凝縮核に関する詳細な情報を得ることができ、今後の発展が期待されます。また、水以外の揮発性物質や金属などの難揮発性物質に対しても、今回提唱した均質核生成率の理論モデルが成立しているかを確かめることが新たな研究課題になっています。

【用語解説】

※1 分子動力学シミュレーション

コンピュータの中で原子や分子の個々の運動を計算しシミュレーションすることで、ミクロな物質の性質を解明する手法。室内実験に比べ、原子の位置や運動などの完全な情報を容易に得ることができる。

※2 均質核生成率

蒸気から液滴がつくられる際に、凝縮の核となる他の物質がない場合に、蒸気分子自身が集まり微小な凝縮核を生成する率。最終的につくられる液滴の個数やサイズなどを決定する。

[参考図]

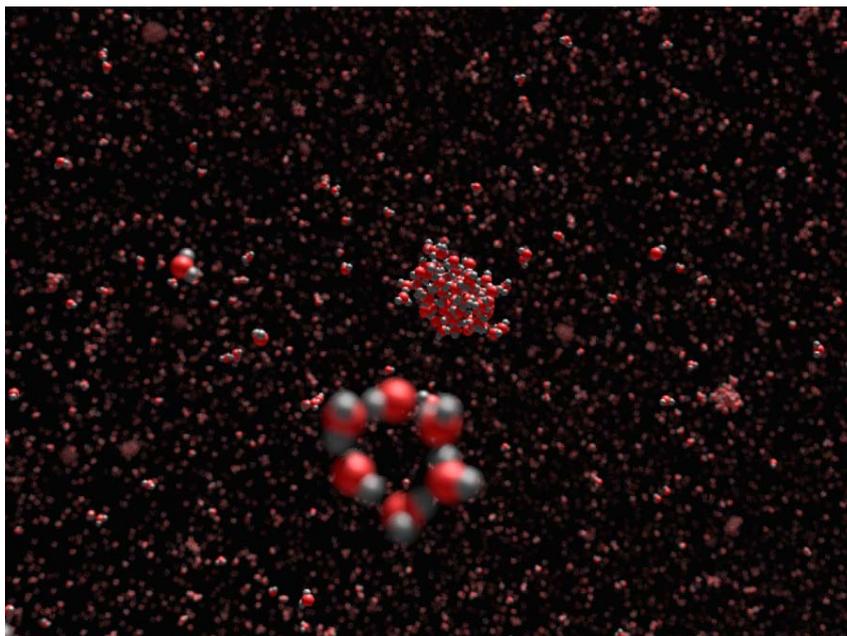


図1 分子動力学シミュレーションでつくられた水の凝縮核。数個または多数の水分子からなる様々なサイズや形状をもつ凝縮核が形成される。これら凝縮核が成長し最終的に水滴となる。

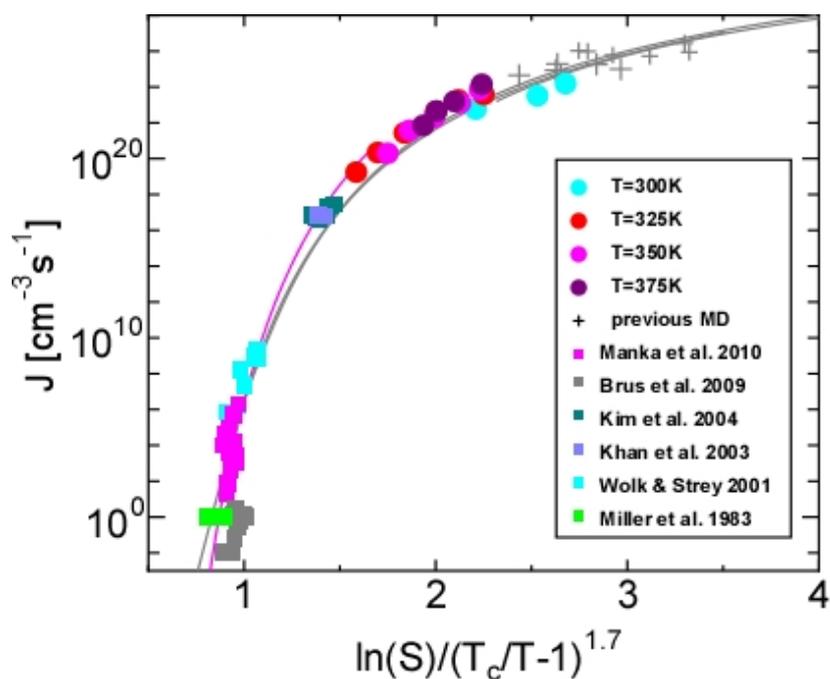


図2 分子動力学シミュレーション及び室内実験から得られた核生成率のデータと新たに提唱した理論モデル（灰色とピンクの実線）。縦軸は核生成率，横軸に含まれる過飽和度 S は圧力と飽和蒸気圧との比。●印は本研究の分子動力学シミュレーションで得られた核生成率で，+印は従来のシミュレーションの結果，■印は室内実験値を示す。今回の大規模シミュレーションにより，核生成率における室内実験と分子動力学シミュレーションの間の隔たりが埋められた。核生成率の30桁にわたる範囲で，我々が提唱した理論モデルはシミュレーションと室内実験両方の結果をよく再現する。

お問い合わせ先

所属・職・氏名：北海道大学低温科学研究所 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
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