

MIS024-06

会場:301B

時間:5月25日 15:30-15:45

均一蒸気-液体核生成の分子シミュレーション Molecular Simulation of Homogeneous Vapor-Liquid Nucleation

河野 明男^{1*}, 河村洋史¹, 草野 完也²

Akio Kawano^{1*}, Yoji Kawamura¹, Kanya Kusano²

¹ 独立行政法人海洋研究開発機構, ² 名古屋大学太陽地球環境研究所

¹ Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, ² Solar-Terrestrial Environment Laboratory

大気エアロゾルは大気中に広く存在し、太陽放射の吸収や散乱によって、または雲凝結核として雲形成や降水に関与することによって地球環境に多大な影響を与えている。前駆気体からの新粒子生成は大気微小エアロゾルの主要なソースであり、雲凝結核の個数濃度を支配していると考えられている。新粒子生成は微小な分子クラスターを生成する核生成過程とそれに引き続く成長過程からなるが、それらの過程の理解はいまだ十分ではない。

核生成過程のメカニズムの一つとして、宇宙線やラドンのような放射性物質などによって生成した大気イオンによるイオン誘発核生成過程が提案されている。宇宙線強度は太陽活動、地磁気、宇宙線放出源、宇宙線伝播などによって変動するため、宇宙環境の変化がイオン誘発核生成を通じて地球気候に影響を与えているとする仮説が提案されている。この仮説をめぐる活発な議論が続いている。イオン誘発核生成の気候への影響を議論するためには、新粒子生成における微物理過程を理解することが重要である。

核生成過程の記述には古典核生成理論 (CNT) が広く使われている。しかし単純な単成分核生成過程でさえ CNT による予測は実験結果との間にしばしば非常に大きな差がみられる。CNT では核生成に関与する分子クラスターはマクロな液滴と同様の性質を持つと近似する。核生成過程を支配しているクラスターはわずか数個から数十個の分子からなり、そのような微小クラスターはマクロな液滴とは異なった性質を持つ。破綻の主な原因はこの液滴モデルそのものにあるとみられている。核生成過程を正しく記述するためにはこのクラスターの性質を分子レベルで理解する必要がある。

本研究では、分子動力学法を用いて核生成過程のシミュレーションを行うとともに、その結果に基づいて核生成過程を記述する速度論モデルを構築した。また、電子状態理論を用いてイオン誘発核生成過程の初期に生成されるイオンクラスターの熱力学量を決定するとともに、中性クラスターの結果と比較することによってそれらの安定性を議論する。

キーワード: 蒸気液体核生成, 分子動力学シミュレーション

Keywords: Vapor-Liquid Nucleation, Molecular Dynamics Simulation