

PPS025-08

会場:101

時間:5月23日 16:00-16:15

気相からの凝縮過程における均質核生成の分子動力学シミュレーション Molecular dynamics simulation of nucleation from vapor

田中 今日子^{1*}, 田中 秀和¹, 山本 哲生¹, 河村 雄行²

Kyoko Tanaka^{1*}, Hidekazu Tanaka¹, Tetsuo Yamamoto¹, Katsuyuki KAWAMURA²

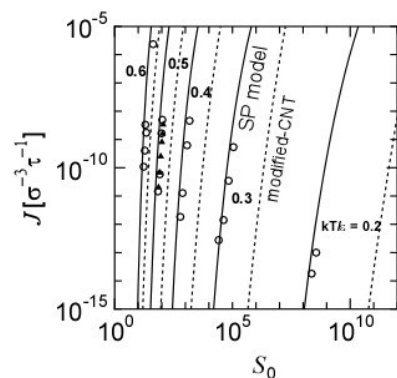
¹ 北海道大学低温科学研究所, ² 東京工業大学大学院理工学研究科

¹ILTS, Hokkaido Univ., ²Tokyo Institute of Technology

気相からの凝縮に伴う均質核生成の記述において、古典的核生成理論はさまざまな分野で用いられているが、これから得られる核生成率は多くの場合実験値と比較すると桁で合わないことが知られている。実験値を良く再現するものとして半現象論的モデルが1990年代に提唱された[1]が、その適用の可能範囲は明らかではない。本研究ではレナードジョーンズ型分子(Arを想定)に対し気相からの均質核生成過程の分子動力学シミュレーションを行い、核生成理論の検証を行った。我々の以前の研究[2]ではガスから液相に凝縮する温度領域(80-120K)に対し計算結果が古典的理論よりも半現象論モデルで良く再現されることを示した。本研究では固体に凝縮する低温領域(24-72K)における1万-10万粒子の分子動力学シミュレーションを行った。その結果、凝縮核はまず液相として形成し50Kよりも低温の場合にはその後凝縮核の成長に伴い結晶化する様子が得られた。得られた核生成率はすべての計算において半現象論的モデルと高い精度で一致していることを表す(図参照)。我々の結果はレナードジョーンズ型分子系において半現象論的モデルが広い温度、過飽和度範囲に対して非常に有効であることを示す。

[1]A.Dillmann,G.E.A.Meier,J.Chem.Phys.,94,3872(1991)

[2]K.K.Tanaka,K.Kawamura,H.Tanaka,K.Nakazawa,J.Chem.Phys. 122,184514 (2005)



キーワード: 核生成, 凝縮, 分子動力学シミュレーション

Keywords: nucleation, condensation, MD simulation