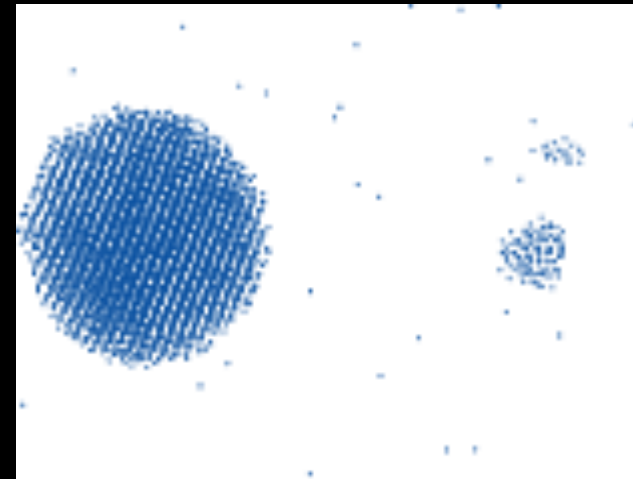
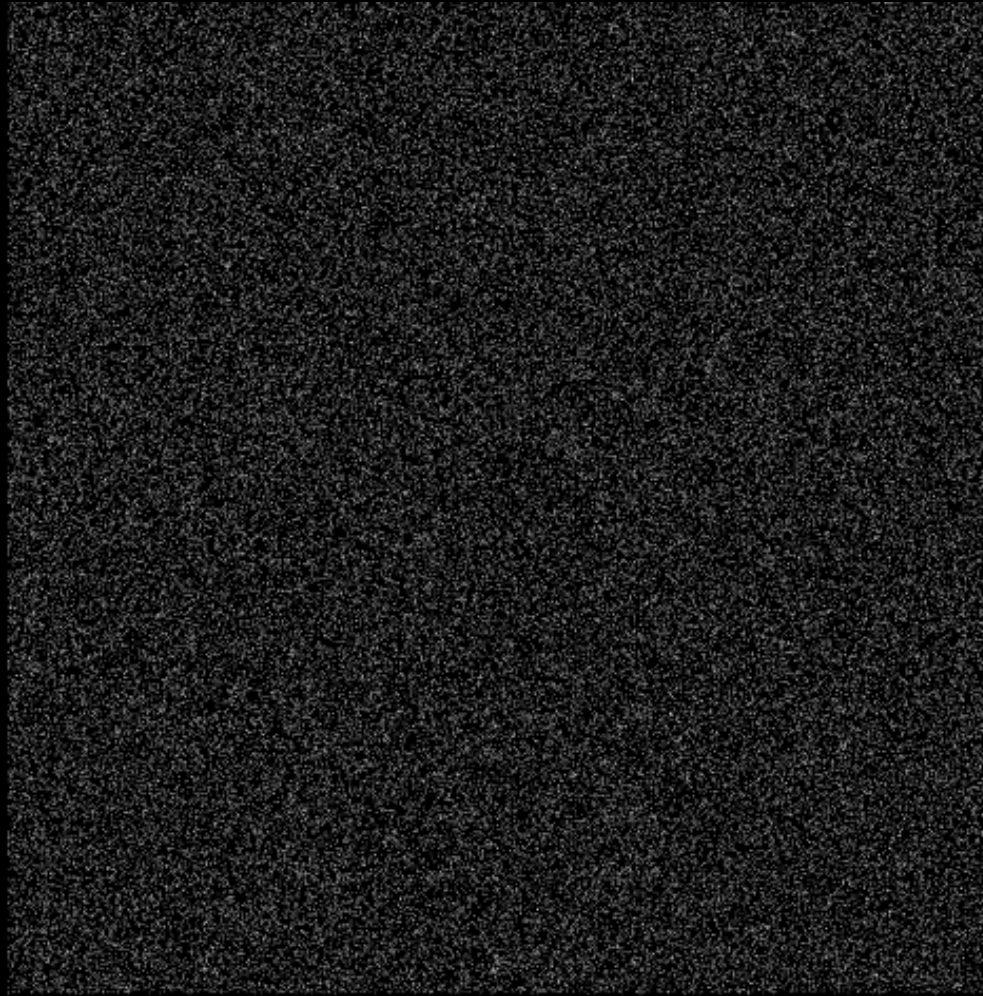


2010年9月3日GFW

分子動力学計算によるL-J型分子の ガスから固体への核生成と結晶化過程

田中今日子、田中秀和、山本哲生（北大低温研）



ガスから固体の核生成
クラスター内の核生成

宇宙環境の凝縮過程

- ・気体から固体への凝縮 (ダスト生成)

galaxy, AGB stars, super nova, solar nebula,

均質核生成、高過飽和状態

実際の凝縮温度 < 平衡凝縮温度

- ・問題点

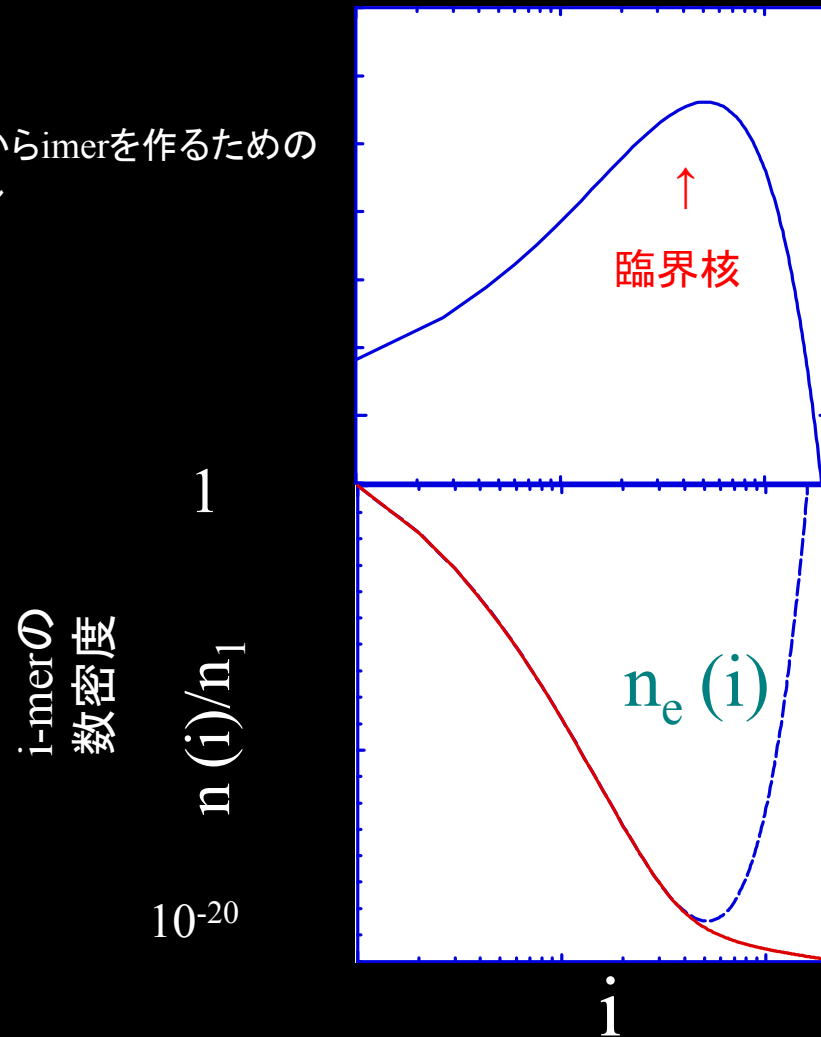
古典的核生成理論から得られる核生成率の不定性

実験値と比較すると桁で合わない(water, ethanol, etc)

(Feder 1966、Schmitt et al. 1982, Adams et al.1984)

核生成過程

i個のvapor分子からimerを作るための
化学ポテンシャル



臨界核：
ナノサイズ
→ 古典論の限界
原子レベルの
取り扱いが必要



分子動力学 (MD)シミュレーション

過去のMD計算

気体から液体への核生成：L-J分子（希ガス）

- Yasuoka & Matsumoto (1998, J.Chem.Phys.): Ar:80K, N=5000
- Toxvaerd (2001,2003, J. Chem.Phys.) : 90K N=40000

→ 古典的理論と桁で合わない

- Tanaka, Kawamura, Tanaka, and Nakazawa (2005, J.Chem.Phys.)

T=80,100,120 K , N=5000-20000

→ 半現象論的モデルと良い一致

クラスターの化学ポテンシャルを

表面エネルギーとdimer(第2ビリアル係数) で表したモデル

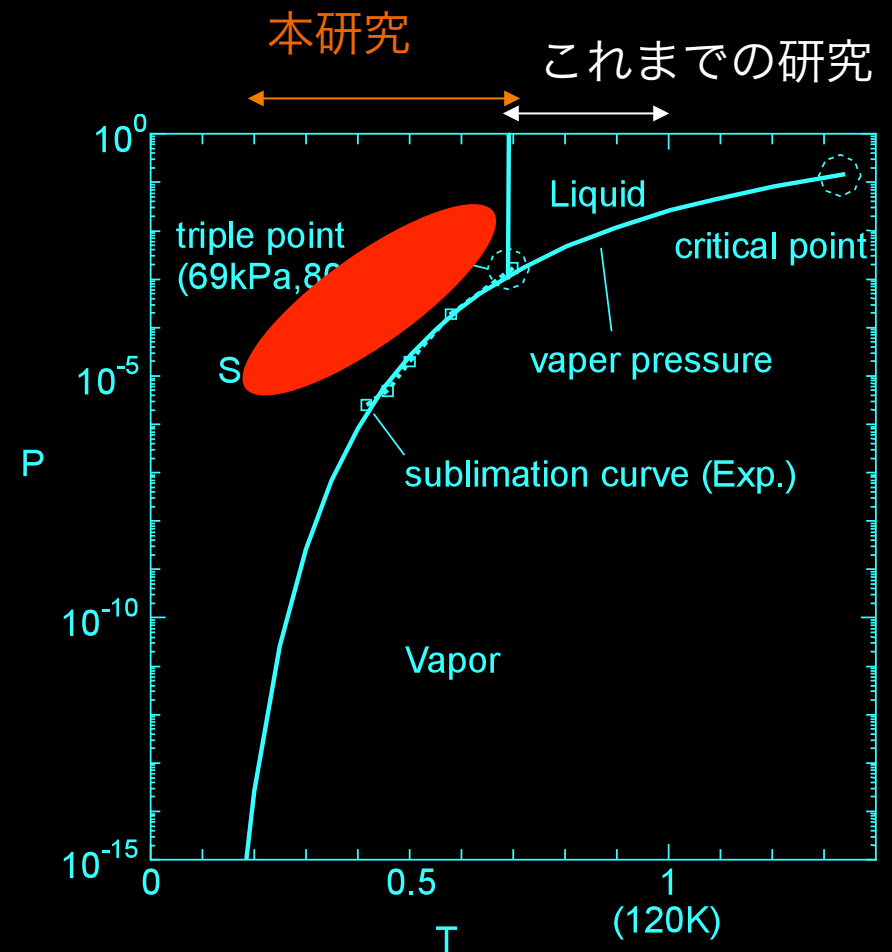
ガス—固体の核生成のMD計算なし

本研究

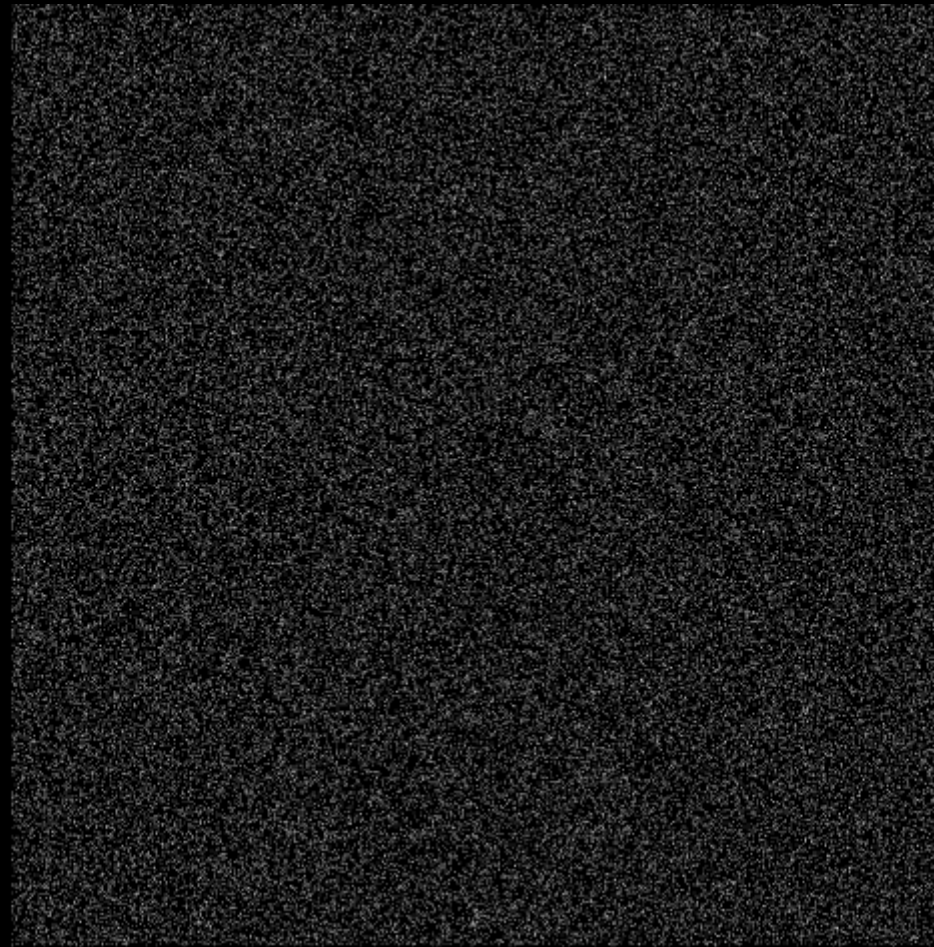
分子動力学シミュレーションによる気体から固体 (< 80K)
の核生成過程を調べる

L-J系分子 (アルゴン)
粒子数 = $10^4 - 10^5$
温度 = 20 - 80 K
飽和比 = $10 - 10^8$
Neighbor list 法

- ・ 核生成理論の検証
 - 古典論
 - 半現象論的モデル
- ・ 結晶化の様子



$T=0.6(72\text{K}): N=10\text{万}\text{体}, L=180, t=9000(19\text{ns})$

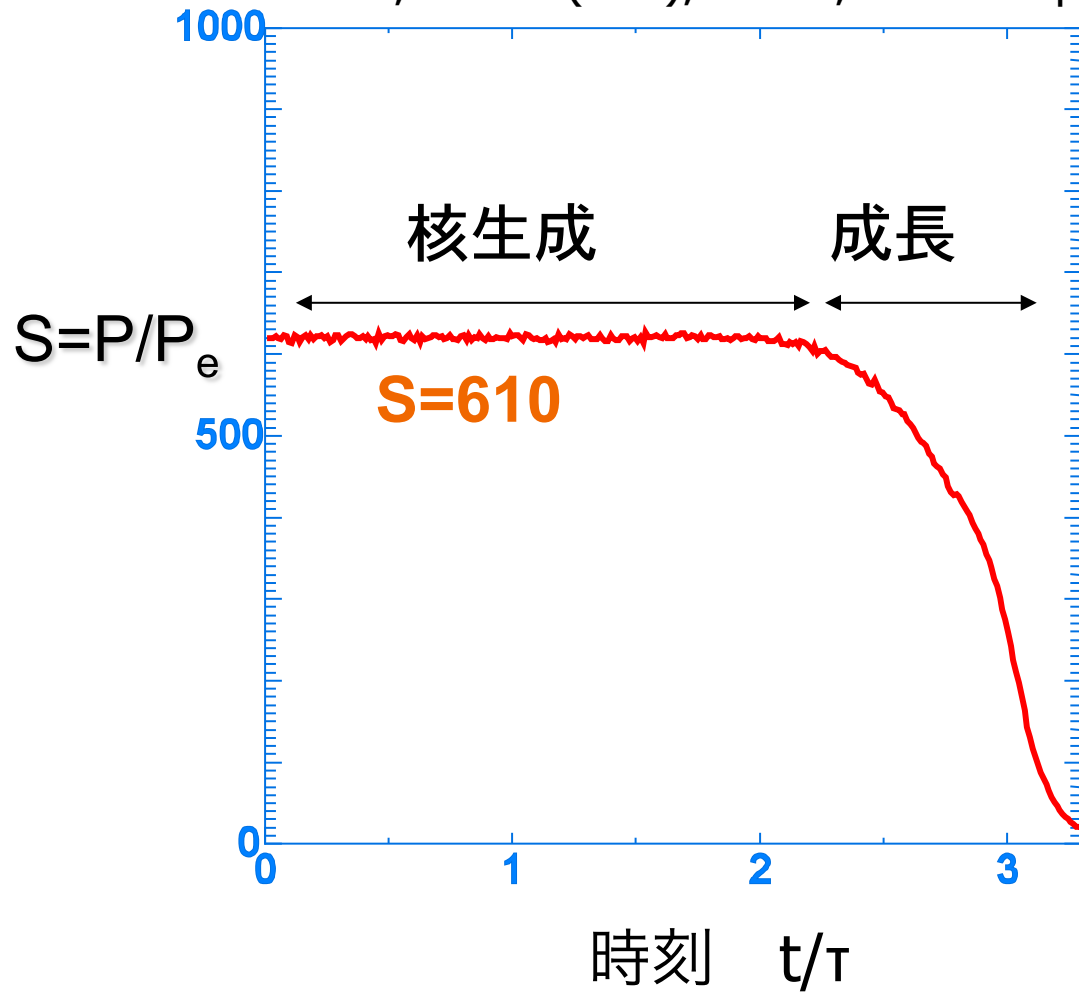


L-J分子 $U=4\epsilon[(r_0/r)^{12} - (r_0/r)^6]$

$T=0.4(48K): N=1\text{万}\text{体}, L=600, t=1.8e5(387\text{ns})$

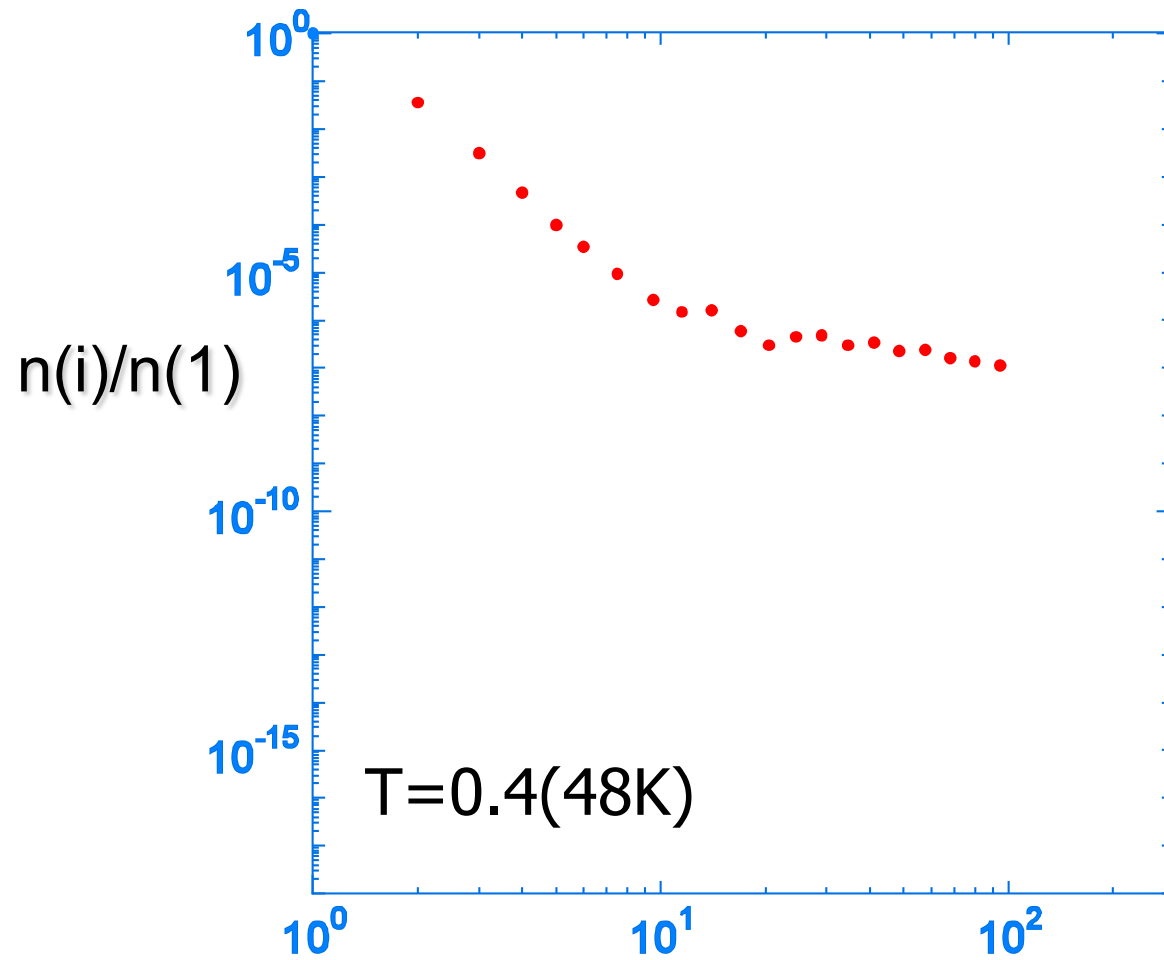
飽和比 S

$N=10^4, T=0.4E(48K), L=195, \text{Time}=0.7\mu\text{s}$



初期(S一定)
核生成
↓
クラスター成長

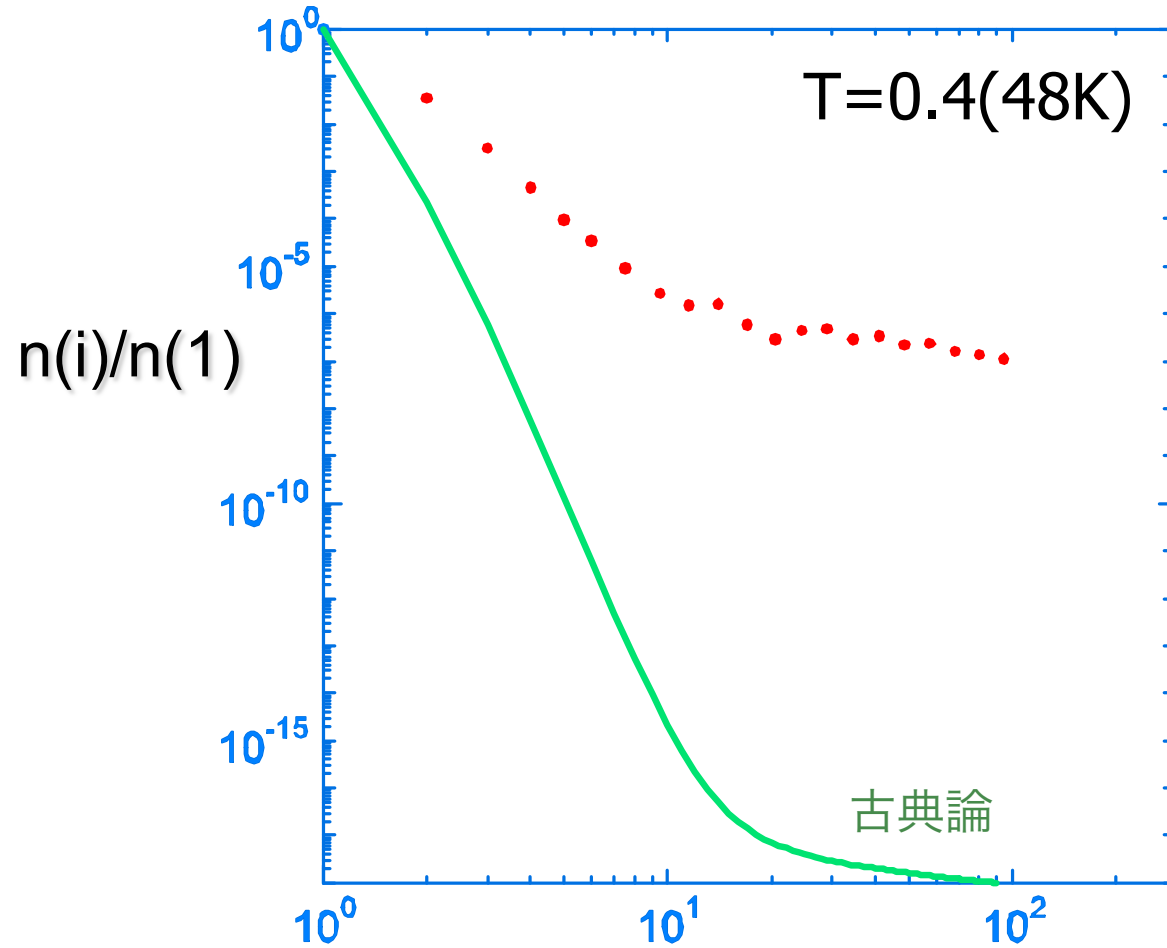
クラスター分布



核生成率
 $J=1 \times 10^{23} \text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$

i : クラスター内の分子数

クラスター分布

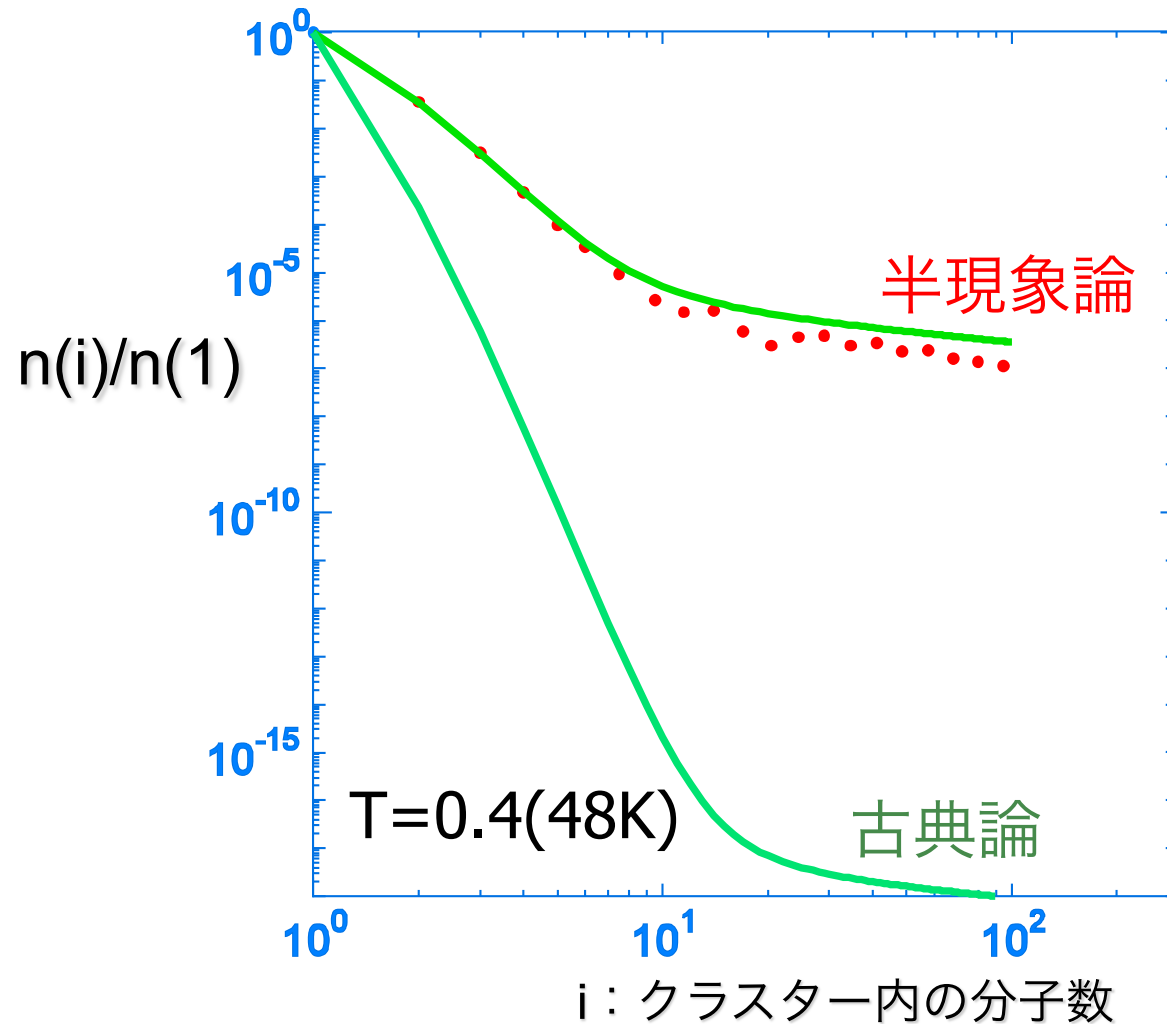


i : クラスター内の分子数

古典論はMD計算と
10桁以上の差

$$J \sim 10^{10} J_{\text{古典}}$$

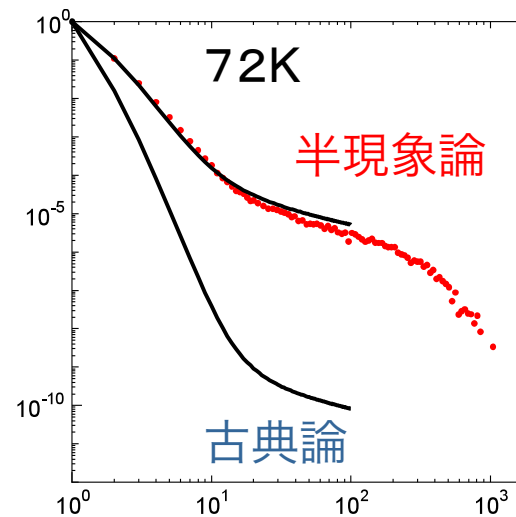
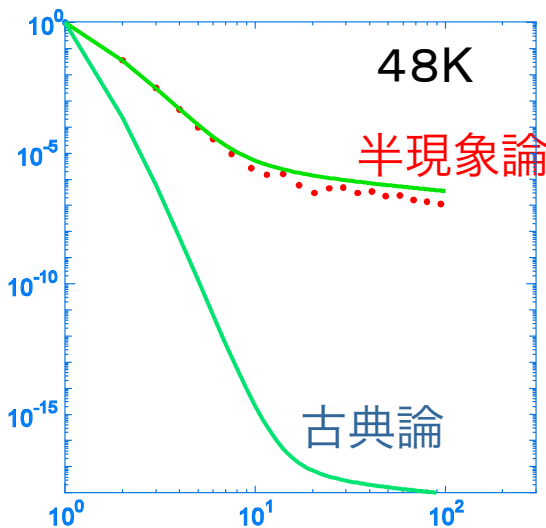
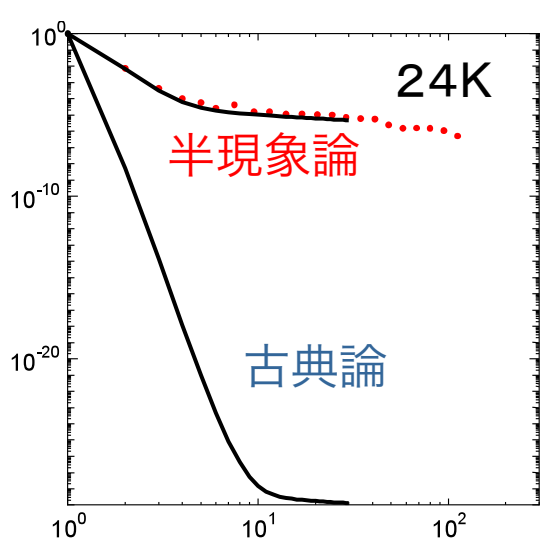
クラスター分布



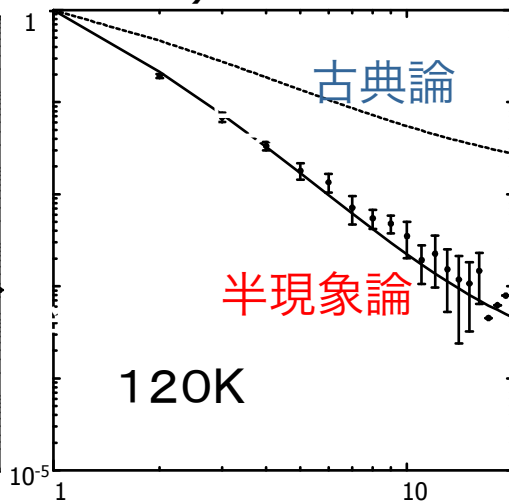
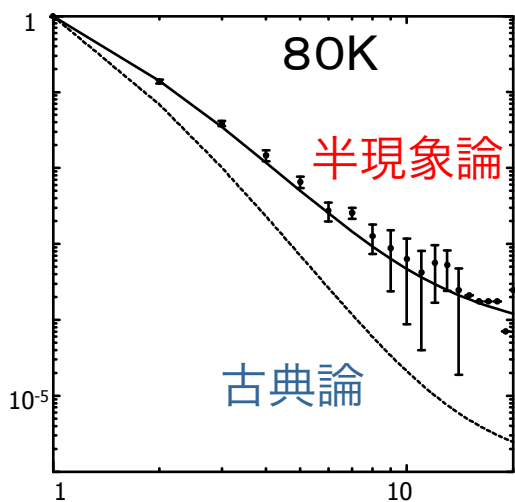
半現象論と
良く一致!

さまざまな温度のクラスター分布

固体領域 (本研究)



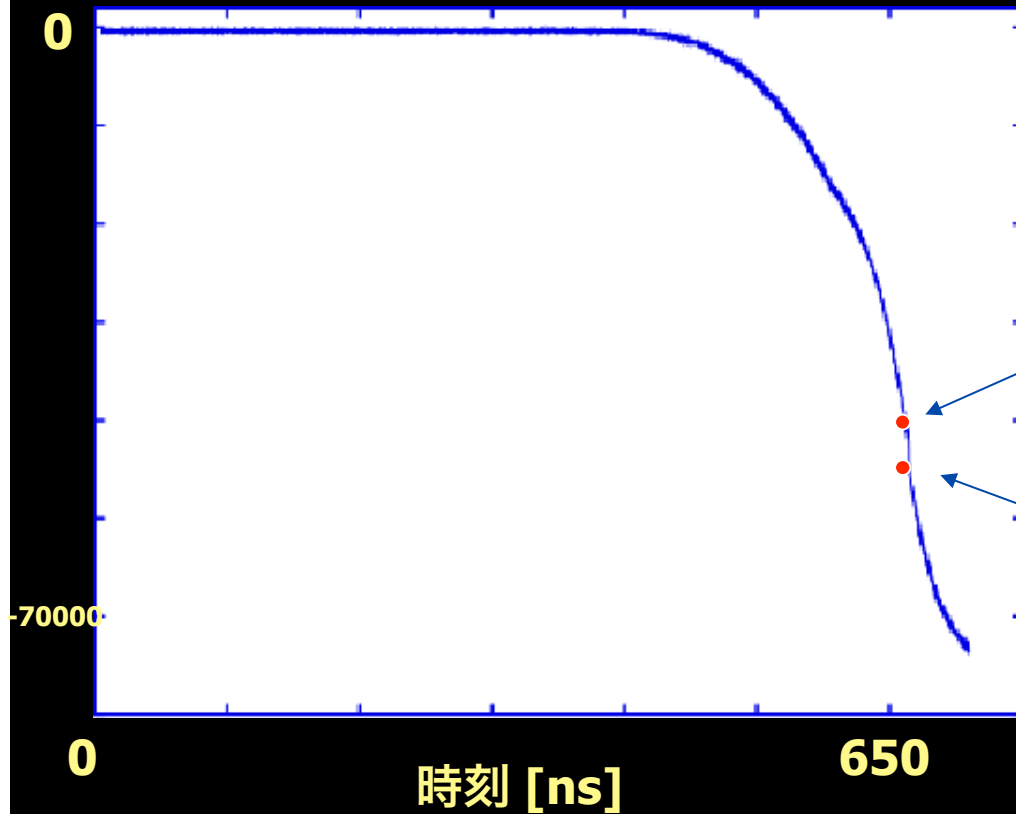
液体領域 (Tanaka et al. 2005)



固体、液体の広い温度領域
で半現象論と大変良く一致！

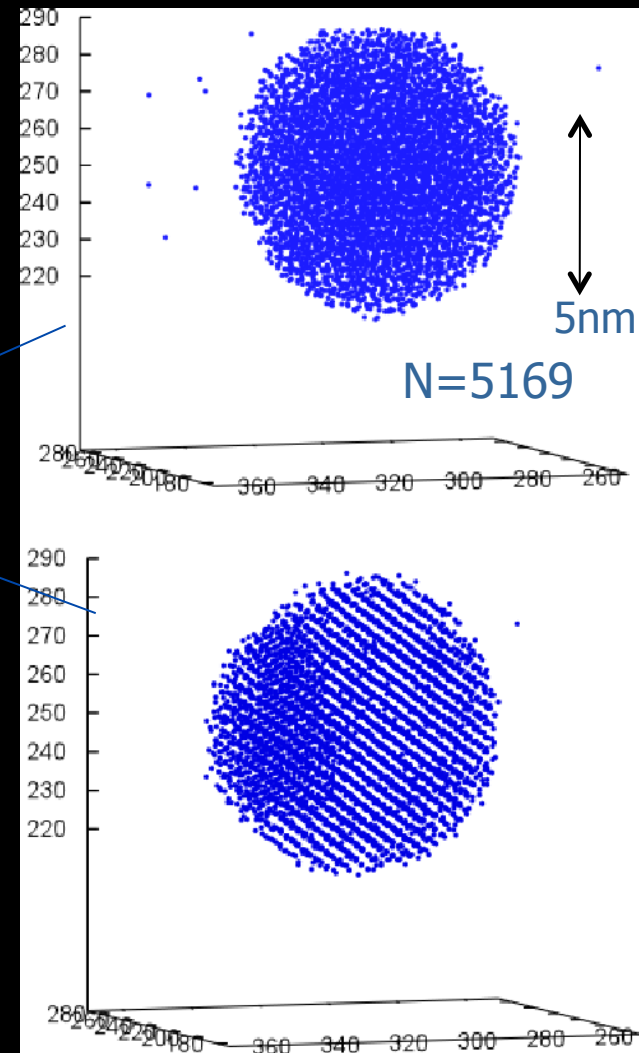
クラスターの結晶化

ポテンシャルエネルギー $T=0.4, N=10000$



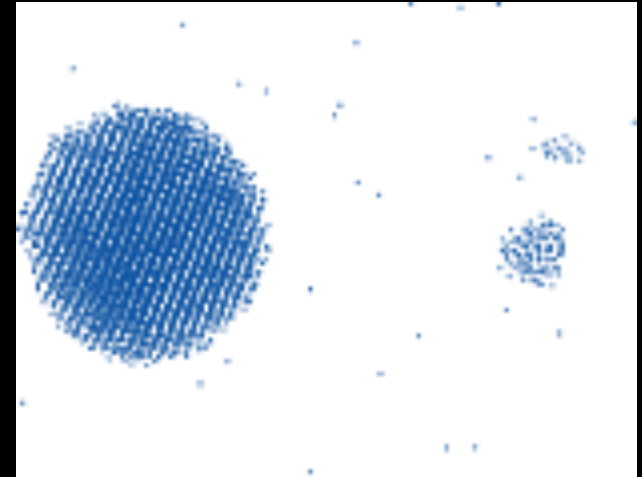
Potential energyの不連続を発見

クラスター構造が変化
1 ns以下で結晶化



議論とまとめ

- ◆ 気体-固体の核生成 (LJ系) のMD
⇒ クラスタ分布
核生成率



- 古典的理論とは5-20桁のずれ
低温ほどずれが大きい
- 半現象論的モデルは
シミュレーションを大変良く再現

気体-固体、気体-液体の相変化、共に半現象論で説明可能

- 固体領域でも液体状態で核生成 → 結晶化

宇宙のダスト生成問題 (凝縮温度、凝縮順番、ダストサイズ等) に影響