2006

周期的階段関数系の*pVT*関係

○片岡洋右、山田 祐理
法政大学工学部物質化学科（184-8584 小金井市梶野町 3-7-2）

【緒言】

分子間相互作用が剛体壁の外に有限の高さの階段関数で表されるポテンシャル障壁を持つ球形分子系を、階段関数系と呼ぶ。このモデルポテンシャル関数は 2 種類の固体を実現する簡単な関数として有名である。[1]

今回モンテカルロ法で立方体的周期境界条件下で、無限粒子系を近似して圧力・体積・温度の関係を調べた。

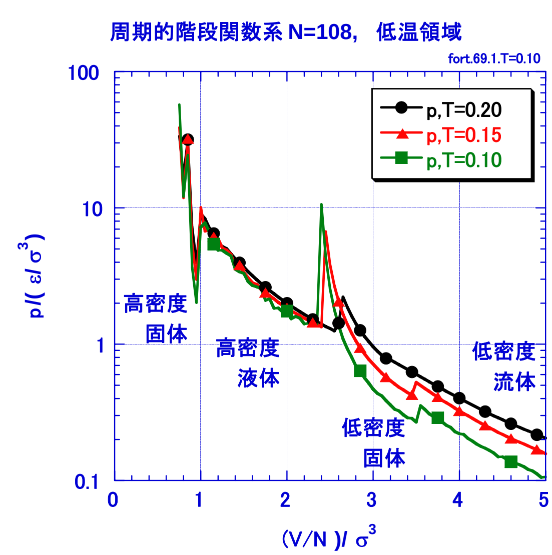
【方法】下に示したポテンシャル関数 u(r)と立方体的周期境界条件を仮定し、基本セルに *N* = 108 個の球形分子を含む系についてメトロピリス法モンテカルロ・シミュレーションをいった。初期条件は FCC 格子である。*N* 回の試行を 1MC ステップと呼ぶ。1.e7MC ステップの平衡化計算の後、同じ長さの熱平均のための計算を行った。

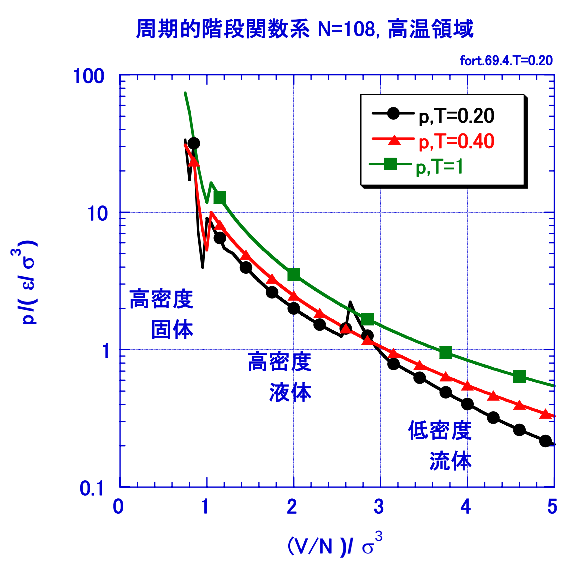
圧力の計算は 2 体相関関数 g(r) からビリアル方程式を使って計算した。[2] 一定温度 *T* で体積 *V* を幅広く変えて状態を探索した。

$$u(r) = \infty,\ (r \le \sigma) \qquad \frac{pV}{NkT} = 1 + \frac{2\pi N}{3V}\sigma^3 \left\{ g(\sigma_+) - g(\lambda\sigma_-)\left(1-\exp(\beta u(\lambda\sigma_-))\right)\lambda^3 \right\},$$

$$u(r) = \varepsilon,\ (\sigma < r \le \lambda\sigma) \qquad g(\sigma_+) = g(\sigma+\delta), \delta \to 0, (\delta > 0),$$

$$u(r) = 0,\ (\lambda\sigma < r),\ \ \lambda = 1.5. \qquad g(\lambda\sigma_-) = g(\lambda\sigma-\delta), \delta \to 0, (\delta > 0).$$





【結果】圧力の等温線を低温と高温領域で図に示した。4 種類の状態が区別できた。

参考文献

1 Young, D. A. and Alder, B. J.(1977) ”Melting-Curve Extrema from a Repulsive ‘Step’ Potential”, *Phys. Rev. Letters* **38**, 1213 .

2 Rotenberg, A. (1963) “Monte Carlo equation of state for hard spheres in an attractive square well”, *J. Chem. Phys.*, **43**, 1198.