

分子動力学法による荷電粒子系の圧力等温線

○ 老沼 宏益¹、片岡 洋右²¹法政大学大学院工学研究科物質化学専攻(〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)²法政大学工学部(〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

【緒言】

汎用分子動力学シミュレーション・ソフトウェアである WinMASPHYC2.0Pro を用いて、様々な条件下での荷電粒子系の圧力等温線を検証する。一定温度で体積を変えて圧力を観測するとその変化の様子から臨界温度を推定できる。精密な実験で圧力等温線が求められた場合はこの曲線の変曲点が臨界点である。ここでは塩化カリウムについての解析を行った。

【方法】

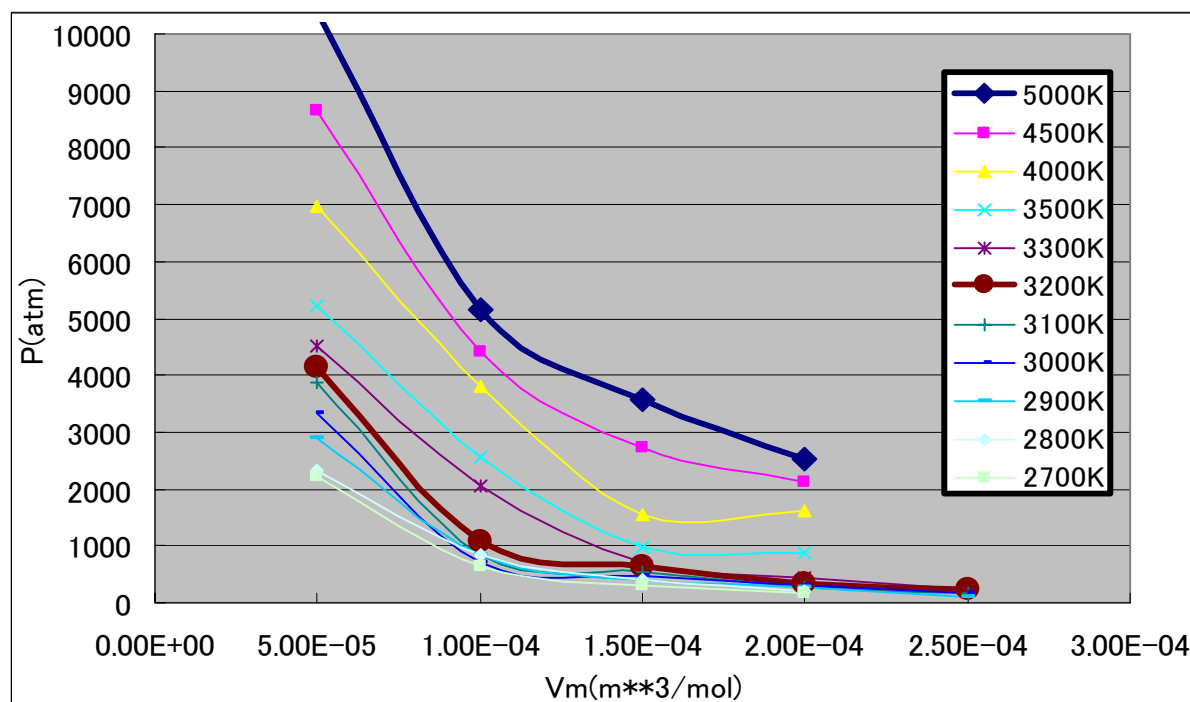
塩化カリウム (KCl) のシミュレーション条件は以下のように設定する。

NTV アンサンブル、 分子数 $N=256$ 、 ステップ数=100000step

時間刻み $dt=0.1\text{fs}$ 、 圧力= $1.0 \times 10^5\text{Pa}$ 、 シミュレーション温度範囲：2700K～5000K

【結果】

P-V 図



上図より、3200K 付近の曲線のモル体積 $1.0 \times 10^{-4} \sim 1.5 \times 10^{-4} \text{ (m}^3/\text{mol)}$ 間に臨界点があると期待することができる。また 3200K を超えるような高温下では超臨界流体の存在が考えられる。

参考文献

¹ 片岡洋右、三井崇志、竹内宗考、分子動力学法による物理化学実験、三共出版 (2000)

² P. W. Atkins、アトキンス物理化学 (上)、(千原秀昭、中村旦男訳) 東京化学同人 (1995)