

1 P03 分子動力学法による水のマイクロクラスターの相転移

○蟹江了允¹、片岡洋右²

¹ 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】

分子間力をミクロに研究するための分子の最小集団をクラスターと言い、分子が数個～数千個集まった物を指す。今回、分子数が数十個程度なのでこの集団をマイクロクラスターと呼ぶ。そこで本研究では水分子 30 個及び 15 個のマイクロクラスターが温度変化及び粒子数の変化に伴いどのような挙動を示すか分子動力学方法を用いて調べた。

【方法】

シミュレーション方法と条件及び解析方法

分子動力学ソフト：WinMASPHYC-Pro¹⁾ 分子数：H₂O×30、Ar×60(Blend Cell を使用) H₂O×15、Ar×60

温度設定：50K からスタートして 25K 刻みで 400K まで加熱。

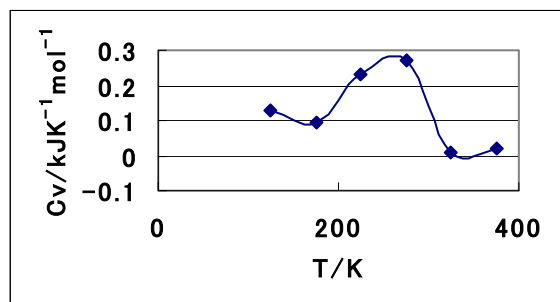
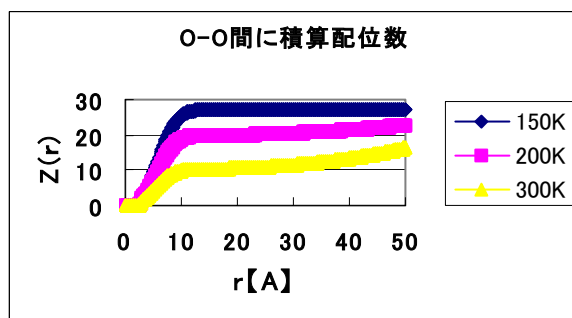
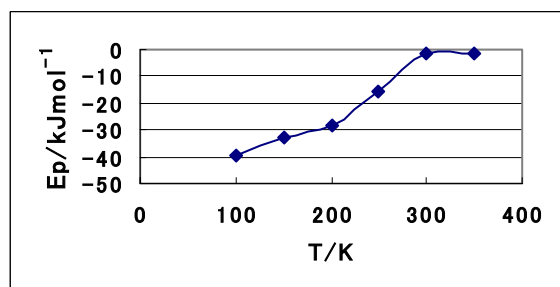
分子の初期配置：クラスター形成までの計算時間短縮のためにあらかじめ H₂O 分子同士が固まった位置に置きその周りに Ar を配置した。ここで、Ar はキャリアガスの役目をしている²⁾。

その他の設定：NTV アンサンブル, 周期境界条件有り, Keeps Cubic, Length of Run=1000000steps, dt=0.2fs

解析方法：計算により内部エネルギーU を求める事ができる。Ep、Cv、エントロピーS をだし解析を行う。

二体相関及び積算関数を用いて温度変化によってマイクロクラスターの構造変化を調べた。

【結果】



この結果より、低温状態で安定だったマイクロクラスターが温度上昇により内部エネルギーが高まったことで不安定になり、より安定で自由エネルギーの低い気体へと相転移したことが確認された。しかし、今回載せた結果は計算点が少なく、相転移の明確な温度はわかりにくい。そこで、現在温度の刻み幅を多くして計算を行っている。

【参考文献】

1. WinMAPHYC-Pro ユーザガイド、富士通

2. Yasuoka and Matsumoto, J.Chem.Phys.109.8463 (1998)