

1 P07

Ar クラスターの相転移近傍の圧力不連続

○伊藤 伸一、重枝 仁志

京都教育大学(〒602-0863 京都市伏見区深草藤森町 1)

【緒言】

Ar クラスターの相転移現象を分子動力学によりシミュレートし、熱力学状態量（圧力—密度、全エネルギー—温度）の変化を数値的に調べた。これは、粒子数密度、粒子座標などから固相—液相間の相転移に相当すると考えられる。結果、圧力—体積(P-V)の状態図において不連続が観測された。不連続は温度が高温になるにつれて、連続曲線に移行した。得られた P-V 曲線は、系が有限個のクラスターであるため圧力が極小を示し、またその極小からの状態変化が急激なものであった。本シミュレーションの結果から 3 次元 Lennard-Jones(L-J)粒子においても固相・液相相転移が観測され、それが 1 次転移的であることが示された。

【方法】

N,V,E 一定の条件で、108 個の Ar クラスターに対して、MD を実行した。初期座標は面心立方格子に設定した。この系の全エネルギーPV を

$PV = \text{運動エネルギー} + L\cdot J \text{ ポテンシャル変化} + \text{セル和補正}$
により求めた。各計算は 10000 ステップ行った。

【結果】

P-V 状態曲線は L-J ポテンシャルを反映し、極小を示した。極小付近を詳しくとると、低温では V に対する P の変化が不連続を示した。極小の V の値から平均原子間距離を求めると、初期座標に比べて約 5 % 長い値であった。このことから固体から液体への遷移であると考えられる。また、系の温度が 40(K)程度の場合に不連続がみられ、それ以上の高温になるにつれて連続曲線に移行した。

参考文献

- [1]J.Q.Broughton et.al., Phys.Rev.B 25, 4651 (1982).
- [2]Y.Ueda et.al., J.Comput.Chem.Jpn. 1, 89 (2002).
- [3]J.M.Kosterlitz and D.J.Thouless, J.Phys.C. 6, 1181 (1973).