定エネルギー分子動力学によるアルゴンの 3 重点

（法政大、生命科学）片岡洋右

Triple point of Ar by constant energy molecular dynamics

(Faculty *of Chemistry, Hosei University*) Yosuke Kataoka

The triplet of argon was estimated by constant energy molecular dynamics. The basic cell consisted of 15552 Ar atoms. The initial atomic configuration had FCC, elongated FCC and vacuum part. The calculated triple point was consistent with the experimental and equation of state results.

Keywords : Triple Point; Molecular Dynamics; Ar; Constant Eenergy

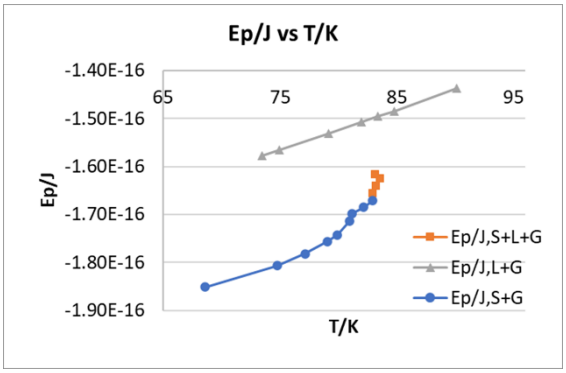
直方体的基本セル内に 15552 個のアルゴン原子を配置し、定エネルギー法(NEV-MD)により 3 重点を定めた。初期配置には結晶部分と液体的密度の部分と空白部分を用意した。X,y,z 方向に周期境界条件を課した。レナードジョーンズ関数を仮定した。ポテンシャルエネルギーの平均値と原子配置の温度変化から 3 重点を定めた。圧力は表面張力の影響を受けない z 軸方向の成分を使用した。得られた 3 重点温度と圧力は実験値と比較して合理的なものである

Fig.1 にポテンシャルエネルギーの平均値（Ep）の温度変化を示した。83K 付近のオレンジの点は固体液体気体が共存する(S+L+G)3 重点に対応する状態である。固体と気体の共存する系（S+G）の値よりわずかに高いエネルギーであり液体と気体の共存系(L+G)の値よりは低い値を取っている。83K という値は実験値 83.8K に近い。

Fig.2 の 3 重点に対応する原子配置の例を示した。規則的構造が固体部分であり、それに隣接するランダムな構造が液体であり、低密度の領域が気体部分である。

3 重点における圧力は圧力テンソルの z 成分から求めた。これは Fig.2 に示すように界面が z 軸に垂直であるため、この成分は表面張力の影響を受けないためである。得られた圧力は 1atm である。この値は実験値 0.89atm に近い。

今回は定エネルギー法(NEV-MD)であるが、別に定温定体積分子動力学法(NTV-MD)で 3 重点を求めたところ、ほぼ同様の結果を得ている。



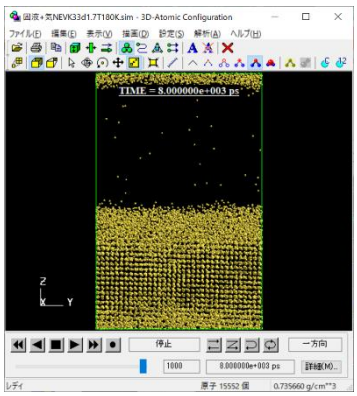


Fig.1 Potential energy vs temperature plot. Fig.2 Example of atomic configuration at triple point

© The Chemical Society of Japan