

多分散 LJ 流体の気体-液体-結晶・ガラス相転移

(東北大 流体研) 寺田弥生

(ボストン大 化学科) T. Keyes, J. Kim (東北大 WPI-AIMR) 徳山道夫

【はじめに】

液体相から結晶相への相転移を生じる単一粒子からなる系において、粒子サイズの粒度分布を大きくすることによって、液体状態からガラス状態への遷移が起きることが知られているが、多分散度の影響が相転移にどのように影響を与えるのかはいまだ明らかになっていないところが多い。そこで、レナードジョーンズ (LJ) 流体において、分散度の変化が、気体-液体相転移と液体-結晶相転移、および、液体-ガラス相転移へどのように影響を与えるかを、一次相転移近傍の不安定なエネルギー状態にアクセス可能な一般化されたレプリカ交換法 (1) を用いたシミュレーションによって議論する。

【結果と考察】

図 1 は分散度 s を 0% から 20% まで変化させた場合のエンタルピーの温度依存性である。分散度 s が小さい場合は、高温側から、気体ブランチ、気体-液体相転移に対応する S 字カーブ、液体ブランチ、液体-結晶相転移に対応する S 字カーブと結晶ブランチが見られる。高温の気体ブランチでは、分散度の影響はほとんど見られないが、分散度が大きくなるにつれ、低温側で液体ブランチから結晶ブランチへの S 字カーブが消失し、ガラスブランチへのスムーズな遷移に変化している。粒度分布が異なる影響は特に低温で大きいことがわかる。エンタルピーの温度変化より、図 2 に多分散 LJ 流体の相図を示す。

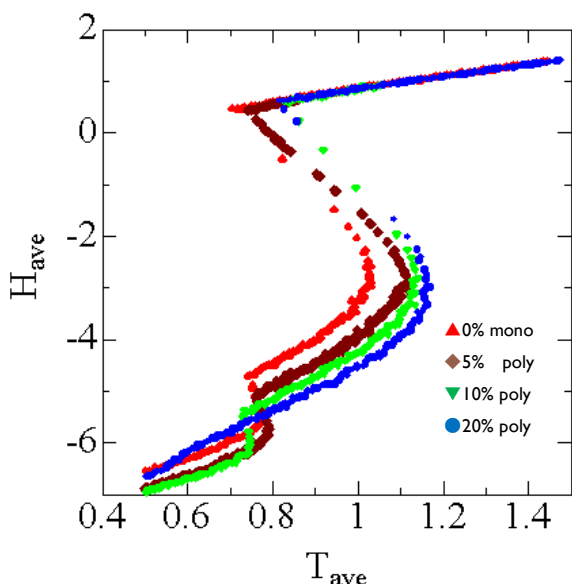


図 1 : エンタルピーの温度依存性。

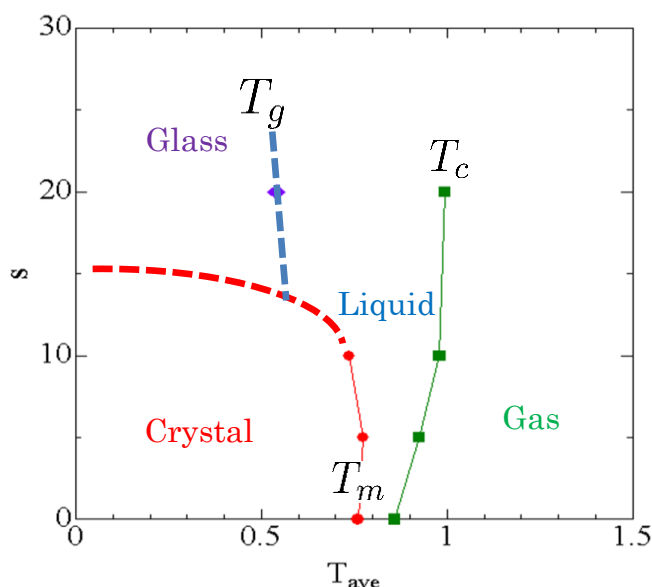


図 2 : 多分散 LJ 流体の相図

【参考文献】

(1) J. Kim, T. Keyes, and J. E. Straub, JCP vol.132, 224107 (2010).