

Title	soft-core modelの計算機実験(「強い相互作用をもつ体系の統計力学的研究」総合班研究会報告)
Author(s)	樋渡, 保秋; 小川, 泰; 荻田, 直史; 松田, 博嗣; 上田, 顕
Citation	物性研究 (1974), 22(1): 129-129
Issue Date	1974-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/88769
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

soft-core model の 計算機実験

金沢大理	樋 渡 保 秋
京 大 理	小 川 泰
理 研	荻 田 直 史
九 大 理	松 田 博 嗣
京 大 工	上 田 顕

われわれは対ポテンシャル $\phi(r) = C r^{-n}$ ($c > 0, n > 3$) をもつモデル系、いわゆる soft-core model が金属を含めて現実の単純液体の特徴をつかんだよいモデルであるとの認識のもとに、 $n=2$ の場合について、低密度より高密度非晶質状態、結晶状態にわたって計算機実験を行い、自己拡散係数、速度相間、動径分布函数を、剛体球モデルとの対比のもとに詳細に調べると同時に、ガラス状態生成の可能性を検討してきた。

その主な結果は次の通りである。

1) 上記3個の量は特定の密度を境として特徴的変化を示し、とくに fluid state では分子運動に気相的特徴と液相的特徴をもった状態に明瞭にわかれる。この特徴は剛体球モデルにはみられず、soft-core model 特有のものと考えられる。

2) 自己拡散係数を実験と比較した結果、不活性気体のそれをよく説明する。これは soft-core model が単純液体の熱力学的のみならず、運動学的特徴もとらえたモデルであることを示している。

3) 高密度液体を急冷、急圧縮すると、分子運動がある密度から非拡散的になり、かつ状態方程式が結晶と異なる分枝をもつことから、ガラス状態生成の可能性を示唆したが分子運動の動画化および分子配位を詳細に調べた結果、結晶状態が生成されていることを見出した。これにより、ガラス状態は否定されたが、結晶化の機構を調べる手掛りが得られた。シミュレーションによる結晶化は、われわれの知る限り、まだ報告されていない。