

## 02 液体リンの圧力誘起相転移

多くの物質は、常温で固体であっても加熱によって融けて液体になります。このように、物質の状態が大きく変化することを、相転移といいます。例えば、水は零度以下まで冷やすと氷になりますが、これは液相から固相（結晶相）への相転移とすることができます。固体と液体の間だけではなく、気体と液体（水は100度以上で沸騰して気体になります）や、異なる性質の結晶相同士の間の変化も、相転移現象の一種です。

最近、液体のリンに圧力をかけると全く異なる性質の液体になることが実験で観測されました。このような液体（液相）間の相転移現象（液-液相転移）が現実の物質で観測されたのは初めてです。しかしながら、実験では原子レベルの変化までは観測することはできないため、何が原因で液体の性質が変化したかはわかりません。そこで我々はコンピュータシミュレーションを実行して、液体のリンを加圧するとどんな変化が生じるかということマイクロな視点から解明しました。加圧する前の液体は、四面体の形をした分子が動き回っている分子性液体です。シミュレーションのムービーは、この分子から構成されているリンの分子性液体をムービーの途中で加圧しています。ムービーからわかるように、圧力をかけると液体中の分子が崩壊し、3次元のネットワーク構造ができることがわかりました。さらに分子崩壊のため、体積が大きく縮むこともわかりました。シミュレーションで再現された体積変化は実験の観測値と良い一致を示しています。最終的に、我々のシミュレーション結果から、分子崩壊のために実験で観測されたような性質の変化が生じるということが明らかになりました。このリンの液-液相転移は、加圧ではなく温度を上げることによって生じることも、シミュレーションからわかりました。

このシミュレーションで用いた計算技法は最新のもので、液体の計算に用いたのは我々が世界で初めてです。今後このようなシミュレーションがたくさん行われるようになるはずです。