

分子動力学計算を用いた塩の溶解度と結晶成長の観察 Molecular Dynamics Study of Aqueous solutions: solubility calculation and crystallization process

小林 和弥^{1*}, 梁云峰¹, 松岡俊文¹

KOBAYASHI, Kazuya^{1*}, LIANG, Yunfeng¹, MATSUOKA, Toshifumi¹

¹ 京都大学工学研究科

¹ Kyoto University, Faculty of Engineering

水溶液の性質は化学、生物学そして地質学において基礎となっている。水溶液が高温高压状態にさらされたとき、水溶液は一般の液体の状態とは性質の異なった超臨界状態となることが一般的に知られている。しかしながら実験室での超臨界状態の観察は困難となっている。分子動力学計算はこのような高温高压状態を自由に制御できるため、超臨界状態の再現に有効だと考えられる。水溶液の性質として重要な物性値として溶解度が挙げられるが、分子動力学計算を用いて溶解度を計算することができる。分子動力学計算を用いた塩の溶解度計算には二つのアプローチが提案されている。ひとつは熱力学的なアプローチを用いた自由エネルギー計算である。自由エネルギー計算は計算コストが少ない代わりにエネルギー以外の情報を得ることが難しい。もうひとつが運動学的アプローチである直接計算である。直接計算は溶液と固体の塩を共存させた系を用いる計算方法で、結晶化や溶解現象の過程を観察することができる。しかしながら、現段階では二つの計算方法についての知見が不足している。そこで、最初に我々は常温常圧状態において二つの計算方法を検証し、二つが良い一致を示していることを確認した。これは超臨界状態の溶解度を求めることだけでなく計算化学の分野においても大きな貢献である。超臨界状態での水溶液の挙動計算は現在進行中である。

キーワード: 塩化ナトリウム, 溶解度, 結晶, 分子動力学, 超臨界水溶液, 結晶界面

Keywords: sodium chloride, solubility, crystallization, molecular dynamics, supercritical solution, interface of solid