

液体のダイナミクスと中性子散乱

理論物理学研究所(スウェーデン)

A. Sjölander

アルゴンヌ国立研究所(U. S. A)

液体中の原子或いはイオンの運動を議論する段階では液体が金属か非金属かはさほど重要な区別にはならない。伝導電子系による Screening の効果はイオン間相互作用を他の非金属液体の原子間相互作用に類似な本質的に短距離力にしてしまう。Johnson-Hutchinson-March の long-ranged oscillation の結論はむしろ計算過程中の誤差の蓄積によるものと推測されている。イオンの運動を考える場合には電子は各瞬間毎のイオンの配位に基いた平衡分布に relax するものと仮定され、従ってイオン間相互作用は常に screened ejective interaction として考慮することが許されよう。電子の screening cloud をまとして短距離力によるイオン間相互作用の考え方は Ziman の Pseudo-neutral atom model に到達する。

さて液体のダイナミクスに関する実験的知識は主に中性子非弾性散乱断面積の解析から得られる。欠けている長波長極限の知見は光の散乱または超音波実験から得られるがそれ等は巨視的なパラメーターを含む hydrodynamical equation of motion で十分正しく記述されることが知られている。しかし平均イオン間隔と同程度のスケールの運動を記述するための必要な運動方程式としては十分実用的なものは知られていない。我々は以下に定義する速度自己相関関数が一方実験もしくは数値実験 (simulation) から詳しく知られ、他方理論的に種々の輸送現象の議論において重要なことから、特定の液体のモデルには依らずにその時間的変化を議論することを試みた。

速度自己相関関数を次の如く定義しよう。

$$\phi(t) = \langle \vec{V}(t) \cdot \vec{V}(0) \rangle / \langle V^2 \rangle.$$

ここに平均は系の熱平衡状態に涉ってとる。 $\phi(t)$ の時間変化は次の如く memory function $\Gamma(t)$ を用いて表わされる。

$$\frac{d}{dt} \phi(t) + \int_0^t \Gamma(t-t') \phi(t') dt' = 0$$

simulation の結果によれば、 $V(t)$ は極めて短い時間 ($10^{-13} \sim 10^{-12}$ sec) に急速に減衰する部分と、比較的長時間に渉って持続する2つの部分よりなるように見える。我々の目的はイオン間(原子間)相互作用 $V(\vec{x} - \vec{x}')$ 、及び粒子対分布函数 $g(\vec{x})$ 、 $g^{(3)}(\vec{x}, \vec{x}')$ を含む形で Van Hove の時空相関函数 $G(\vec{x}, t)$ ($G_S(\vec{x}, t)$, $G_D(\vec{x}, t)$) の時間変化を記述する方程式を求め、 $\phi(t)$ の時間変化の式を導き、 $\Gamma(t)$ の特徴を議論することにある。

結果としては、自己拡散、 $G_S(\vec{x}, t)$ の運動には他の粒子の Path に exclusive な効果を正しくとり入れることが重要に反映し、 $\Gamma(t)$ の時間の短い部分での急速な減衰及び負の値をとることは半定量的に Simulation の結果と比較して説明できた。しかし他方長時間の挙動を正しく与えるかどうかは現在の $\phi(t)$ の式の形では結論が下せない。

最後に、より具体的な模型として、イオンを hard core の部分と long-ranged Coulomb tail を持つイオンプラズマとして扱い、例えば current の相関を議論する試みが行われつつあることを附言しよう。

(文責 在田中実)

参 考 文 献

- K. S. Singwi and A. Sjölander Phys. Rev. 167(1968), 152
 A. Rahman, Phys. Rev. 136(1964), A405, J. Chem. Phys. 45
 (1966), 2585