



I-3 高圧下における融解現象の理論的研究

京大基研 松田博嗣

融解現象を微視的立場から理解し、それを統一的に把握することは統計物理学者に課せられた重要な課題の一つである。宇宙天体の研究が進みつつあり、例えば中性子星における 10^{27} 気圧にも達する高圧が予測されている現在、圧力の領域は低圧（電子軌道の遷移を含まぬ領域、通常 $10^4 \sim 10^5$ 気圧以下）、中圧（価電子の電子軌道の遷移が起る領域、 $10^4 \sim 10^6$ 気圧）、高圧（内殻電子の電子軌道の遷移が起る領域、 $10^6 \sim 10^8$ 気圧）、超高圧（原子が完全にイオン化される領域 $10^8 \sim$ 気圧）および超々高圧（中性子量のように物質は核物質化している領域）と分けて考えるのが適当であろう。種々の領域における圧力の絶対値は、物質によって異なる。当面われわれの目標は低圧と中圧である。

低圧においては物質における分子の凝集力の起源のちがいが融解現象にどの

松田博嗣・米沢富美子

ような質的なちがいを生ずるかを理解することが、われわれの課題である。目下不活性気体の固体と金属の融解現象の実験値を整理し、そのちがいが原子が剛いか軟いかを表わす相互作用モデルでかなりよく整理されることが判った。今後はこのようなモデルの特性の統計力学的研究を分子力学の方法を中心として進める予定である。

fcc の Cs が示す融点極大の現象は加圧により 6s 電子が 5d 軌道に遷移することに関連して起る中圧領域の現象であるとわれわれは予想している。この融点極大現象は一応現象論的には考察したが、今後は上のような電子遷移との関連を追求して行きたい。

II-1 単純な NFE 近似の成り立たない液体金属の電子状態

“イオン相関を考慮した場合の Matsubara-Toyozawa 模型”

東工大・理 米沢 富美子

殆んど自由な電子の近似が破綻をきたすような液体金属の電子状態に、液体のイオン相関がどの様に反映されているかを調べるための理論を立て、又、逆に与えられた電子状態から、イオン相関に関する情報を取り出す方法を導くのが目的である。

遷移金属の様に、固相での電子の状態が狭いバンドで与えられる物質では、液体になっても強く束縛された電子の近似 (tight-binding approximation) が、電子構造を知る上での近道であると考えられる。

一方、不規則系に対する tight-binding 近似として、半導体の不純物伝導の問題を取り上げた Matsubara-Toyozawa の理論 (以後 MT 模型と呼ぶ) があるが、液体と、半導体の不純物の問題との本質的な相違は、前者に於ては、液体イオンの配置に関して局所的な秩序が残されていることである。しかも、強く束縛された電子は、殆んど自由な電子 (NFE) に比べてはるかに敏感に、この“局所的秩序”を感じると想像される。したがって、正しい電子状態を求めるためには、液体のイオン相関が何らかの形で理論に組み込ま