

- (5) T. Nishiyama, Prog. Theor. Phys. 50(1973), 329(L) ;
50(1973), 726 .
- (6) K. Nagai, Prog. Theor. Phys. 49(1973), 46.

液体ヘリウムの転位模型

東大理 鈴木秀次

§ 1 まえがき

液体 He の理論は多くの場合液体の原子構造に立入らないで、液体だから流動できるということから出発する。その流れの中の個々の原子は重なり合わないように相関をもって運動すると考えてはいないが、その条件さえ満足すればすべての原子は自由に運動できるとしている。筆者のように、固体中の原子がどのような条件のもとで運動できるかということを経年におわたって考えてきたものが液体 He の理論を理解しようとするとき、まずここでつまづいてしまう。古典的な固体がそうであるように、固体 He 中の原子の並進運動は転位の運動、すなわち、多数の粒子が強い相関をもった集団運動として起こる¹⁾。融点において平均の原子間隔が約 3% 増すと、原子の運動形態がこれほど根本的に変るのはなぜか。この疑問が障害となるのである。このような理由から、まず液体の構造を考えた上で液体ヘリウムの性質を理解しようと試みることになったのである。

液体の構造としては転位模型が最も本質をついたものであるように思われる。これはすでに 1950 年代から提案され、水島²⁾、大川³⁾らの先駆的な研究があるにもかかわらず、液体の研究者からはほとんど完全に無視されてきた。その理由は、主として、転位が現在の物理の理論的手法で取扱うことが困難な対象であること、また従って転位の重要性が十分に理解されていないためと考えられる。もちろん、現在の転位論が完全に近い結晶中の転位に関するものであり、液体のような高密度の転位を取扱うのに適当な形に作られていないことも、液体の転位論を説得力の欠けたものになっている主要な原因の一つであろう。

以下液体の転位模型を考える根拠を述べ、その模型を液体ヘリウムにあてはめるとき、どのような結論が得られそうか極めて定性的に述べることにする。

§ 2 液体の転位模型

固体中の原子の集団運動はフォノンによってあらわされるが、液体においてはフォノンの自由度の一部は転位の運動に変わり、液体の最も特徴的な原子の集団運動は転位の運動によってあらわされると考えられる。その根拠は次の通りである。

(1) 結晶と余り変らぬ密度をもつ乱れた構造は結晶に転位、空格子点、格子間原子を入れ、格子振動を重ね合わせて表わすことができる。乱れた原子配列に対して格子欠陥の分布は必ずしも一意的にはきまらないが、格子欠陥の分布に対応して乱れた原子配列は一意的に決まる。同一の原子配列に対応して考えられ得る幾つかの格子欠陥の分布は等価であり、これは結晶中のフォノンの波動ベクトルが逆格子ベクトルだけ異なったものと等価であるのと同様である。

(2) 音波のうち縦波は振巾が増しても縦波として伝わるが、横波は転位対に変わることができる。

(3) 空格子点や格子間原子の流れに対しては境界条件に依存しない粘性係数 η を一意的に定義できない。これに対して転位の運動によるせん断流動速度は、

$$\dot{\epsilon} = n \langle v \rangle b \quad (1)$$

で与えられる。ここに n は転位密度、 v は転位の速度、 b はバーガース・ベクトルの大きさである。 $\langle v \rangle$ がせん断応力 τ に比例し、 n が一定の場合、粘性係数は境界条件に無関係に定まる。

(4) 古典液体の動径分布関数は最近接位置に 8 ~ 12 個の原子が存在することを示している。これは原子間距離をあらわす関係式が原子 1 個当り 4 ~ 6 個存在することを意味する。N 個の粒子の位置は 3 N 個の関係式で完全に決定されるから、このことは全粒子の位置を完全に決定するだけの数の関係式が存在することを示唆している。転位模型は全粒子の相関分布関数が転位の運動によって表現されると主張するものである。

(5) 固体中の転位は熱力学的に安定には存在し得ない。刃状転位の単位長さ当りのエネルギーは、

$$E = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_0}{r'_0} \quad (2)$$

で与えられる。ここに μ は剛性率， ν はポアソン比， r_1 は転位のまわりの歪場の有効半径であり転位間距離程度の大きさを持ち， r'_0 は転位の真のエネルギーに等しい弾性エネルギーをもつように弾性体に入れた切断半径で $b/3$ 程度の大きさをもつ。 r_1 は転位密度の増加によって減少するから，もし転位 1 本当りのエントロピーが大体一定であれば，多数転位を含んだ状態が自由エネルギーの極小に対応し，その極小値が転位 0 の状態の自由エネルギーに等しい温度が存在する。これより高い温度では高密度転位状態が安定であり，低温では転位 0 の状態が安定である。高密度転位状態は液体の性質を具えている。

転位のエントロピーとしては転位が種々の配置をとることによるもの²⁾，フォノンスペクトルを変化させることによるもの³⁾ が考えられている。転位が動力学的な欠陥であることを考えると，転位の配置によるものの代りに転位の自由粒子的運動によるエントロピーを考える方がよいであろう。すなわち，転位の運動中振巾の小さい振動はフォノンの重ね合せで表わすことができ，振動数の減少を起こすだけであるが，半円形以上に飛び出す振動は転位線にそって伝わらず，またもとの位置にも戻らないで自由粒子に近い。これによるエントロピー増加が融解に最も大きな影響をもつ。

§ 3 液体ヘリウムの模型

液体の転位模型では基礎となる結晶型をきめなければならない。 He^3 も He^4 も零点エネルギーの低い体心立方構造をもつと考えられる。X線回折では可干渉領域が転位の間隔程度であるために回折線の巾が広がって分離できないと考えられる。しかし最小の回折角の (110) 反射は端にあり，最も強く，また線巾が最もせまいので，ピークを測定できる。2 K 附近の飽和蒸気圧下の最初のピーク⁴⁾ から，格子定数は 4.40 Å，1 モルの体積は 25.6 cm³ となり，実測値 27.6 cm³/mol に比べて約 8% 小さい。この差のかなりの部分は空格子点によるものと考えられる。

0 K の相転移はエンタルピーだけによって定まる。液体のエンタルピーは固体を基準にして近似的に，

$$H = V \frac{n\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{r_1}{r_0'} - \sum_i \frac{\hbar}{2} \Delta\omega_i + P\Delta V \quad (3)$$

と書くことができる。ここに V は 1 モルの体積、 n は単位体積中の転位の全長、 $\Delta\omega_i$ は転位の導入による振動数の変化、 P は圧力、 ΔV は液相と固相の 1 モル当りの体積差であり、大体 $Vnb^2/2$ の程度である。 μ は圧力に比例し、 $\Delta\omega_i \propto \omega_i \propto \sqrt{\mu}$ であるから、圧力の低いときには (3) 式の右辺第 2 項が支配的で液体であったものが、圧力の増加とともに第 1, 3 項が重要になって固相が安定になる。 μ , b , ν に固体 He の値を入れ、 $n \approx 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ とすると $\langle \Delta\omega_i / \omega_i \rangle$ は 0.1 程度となる。この値が妥当であるか否かは、高密度転位状態の振動数スペクトルを計算してみなければ判らない。しかし妥当でないとはいえない値である。

He I の粘性係数が低温ほど小さくなるのは液体 He 中の原子が気体と同じように自由に運動している証拠だといわれることがある。しかし、転位模型でも同様の温度係数を期待できる。古典液体では転位の運動に対する障壁を熱活性化によって通過するために粘性係数は低温ほど大きくなる。そのような障壁で最も大きなものは異なったすべり面上の互に引力を及ぼし合う転位が通過するときにあられる。体心立方結晶の 2 本の $\frac{a}{2}\langle 111 \rangle$ 型の転位が反応して mb の長さをもった $a[100]$ という転位になったものを引離すのに必要なエネルギーは、

$$\frac{m\mu b^3}{6\pi(1-\nu)} \log \frac{r_1}{r_0'}$$

の程度である。4 K 附近の飽和蒸気圧下の値を入れるとこのエネルギーは $m=4$ とおくと約 $3 k_B$ である。したがって転位の運動に熱活性化の必要はなく、粘性係数は転位同志の衝突によってきまり、気体と同様の温度依存性を示すはずである。

しかし μb^3 は圧力が 25 気圧になると約 4 倍になり、上述のエネルギーは $12 k_B$ 程度になる。このように圧力が加わると熱活性化が必要になり、ふつうの液体と同様、粘性係数の温度係数は負となるのである。

§ 4 Bose 粒子と Fermi 粒子

転位模型で統計が入るのは転位に沿って空格子点を媒介として運動する原子に対してである。この場合は空格子点そのものを運動する粒子と考える方が便利である。空格子点はほとんど理想気体のように振舞い、 He^4 の場合は Bose 統計に従い、 He^3 の場合には Fermi 統計に従う。Andreev と Lifshitz⁵⁾ が論じたように、空格子点の形成エネルギーは完全結晶中でも負になることがあり得る。しかし、Hetherington⁶⁾ の計算から知られるように固体ヘリウムでは実現しないと考えられるが、 He^3 の液体の比体積まで膨張すれば可能性がある。そのような場合には空格子点は転位と無関係に運動する。

温度の低下とともに転位の熱運動は不活発となり、転位は定まった形に並んで歪エネルギーを減少させようとする。エネルギーを減らす配列には二通りある。一つは数種の同一符号の転位群が転位網を作る方法であり、他は正負の転位が対を作るように並ぶ方法である。同符号の転位で網目構造を作る方がエネルギーは低く、各転位の位置は鋭いエネルギーの極少になっている。正負転位対を作るときには転位の位置は底の平らなエネルギーの窪みに対応している。転位線にそって空格子点が流れると転位は上昇運動をする。それが熱運動であると転位の位置はすべり面に垂直な方向に変動する。 He^4 の場合には空格子点を $k = 0$ の状態に押込めて転位の位置のゆらぎをなくし、同符号の転位群を用いた転位網を作ることができる。これに対して He^3 の場合には Fermi 面上の原子は、熱運動をしなければならない。このため、 He^3 中では転位の不規則な上昇運動が起こるので、正負の転位対を作ろうとする、転位網を作る場合には協力現象となり、 λ 点を示す。しかし、正負転位対を作ると他の転位との相互作用が弱くなるので、乱れた転位構造が少しずつ規則的になるだけである。

超流動は管壁などに van der Waals 力で強く引きつけられてできた固体状 He 層内の misfit dislocation の運動によって起こると考えられる。 λ 点と関係するのは、misfit dislocation が液体内の転位と無関係な規則配列をもった系にならないとエネルギー消散を起こしてしまうからである。

§ 5 むすび

以上簡単に液体の転位論を考える理由を述べ、それを He に適用してみた。まだ大変不満足なものであるが、どのようなことをしようとしているかということは御理解頂け

たと思う。これまでの理論との関連について附加えるならば、 He^4 の理論に対しては概念の変更を提案するだけで、二流体理論など実際の計算にはほとんど変更を要しない。ただこのような模型を用いれば、これまで理論的に取扱われなかった多くの性質が計算でき、また実験に合うように決めるパラメーターは含まれなくなる。 He^3 の場合には Fermi 粒子の数は空格子点の数であり、Landau の理論で自明とされた仮定を変更しなければならない。これによって有効質量にしろよせされていた無理は取除かれるように思われる。

文 献

- 1) H. Suzuki ; J. Phys. Soc. Japan, 35(1973)1472.
- 2) S. Mizushima ; J. Phys. Soc. Japan, 15(1960)70.
- 3) A. Ookawa ; J. Phys. Soc. Japan, 15(1960)2191.
- 4) D. G. Henshaw ; Phys. Rev. 119(1960)9.
- 5) A. F. Andreev & I. M. Lifshitz : Sov. Phys.-JETP, 29(1969)1107.
- 6) J. H. Hetherington : Phys. Rev. 176(1968)231.

固体ヘリウム中の超音波伝播

東工大理 比 企 能 夫

固体ヘリウムは、その原子間ポテンシャルの特異性から考えて、格子振動が著しく非調和的であると想像される。この特性はその音響的性質に大きく反映すると思われる。例えば、下図は音速の圧力変化のデータである (Vignos et al. : Phys. Rev. 147(1966)185)。一般に3次の非調和性(ポテンシャルの変位についての3次の項までかんがえる)の範囲では、音速は圧力に比例して変化し、通常の結晶では実際そのようになるが、固体ヘリウムでは更に高次の非調和性の考慮が必要なことをこのデータは