

B 11

液体の動的構造因子

京工織大 武野正三

京大炉 吉田不空雄

我々は古典液体の集団運動を、記憶関数法を用いて動的構造因子 $S(k, \omega)$ を求めることから調べ、その分散曲線を得た。その時、記憶関数を高振動数展開し相互作用を含まない部分と含む部分に分ける手法は、多原子の相関関数を含む項からの寄与を調べることができる上で有用であることを示した。そして、この手法を使って得た分散曲線は液体アルゴンで静的構造因子の first peak の付近で実験結果とよく一致した。しかし相互作用を含む部分を高振動数展開において有限項で打切っていることから、高振動数領域では系の動的性質をよく反映していると思われるものの、 $S(k, \omega)$ の形は問題としなかった。そこで記憶関数を定性的に理解するために相互作用を含む部分をできるだけ簡単な関数で表わして $S(k, \omega)$ を求めることを試みた。その結果を液体アルゴンの $k = 2.0, 3.0, 4.0 \text{ \AA}^{-1}$ の時の実験値と比較検討した結果を報告する。

動的構造因子は記憶関数を用いると

$$S(k, \omega) = (1/\pi) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Re} [G(k, i\omega + \epsilon)]$$

$$G(k, z) = S(k) / \{z + M(k, z)\}$$

で与えられる。但し、 $\text{Re} [\dots]$ は実数部を表わし、 $S(k)$ は静的構造因子である。

記憶関数 $M(k, z)$ は、

$$M(k, z) = \int_0^{\infty} dt \exp(-zt) M(k, t) = M_0(k, z) + M_1(k, z)$$

$$M_0(k, z) = \frac{S(k) z (z + M_f)}{z + (S(k) - 1)(z + M_f)} - z$$

のように相互作用を含まない部分からの寄与 $M_0(k, z)$ と含む部分からの寄与 $M_1(k,$

z) に分けられる。 $M_1(k, t)$ に次の三つの関数形を考えた。

$$M_1(k, t) = \begin{cases} A [\cos(\beta t) - 1 + \frac{1}{2} r^2 t^2] \exp(-\alpha t) & \text{(i)} \\ A [\cos(\beta t) - 1 + \frac{1}{2} r^2 t^2] \exp(-\gamma^2 t^2) & \text{(ii)} \\ A [\cos(\beta t) - \exp(-\frac{1}{2} \gamma^2 t^2)] \exp(-\gamma^2 t^2) & \text{(iii)} \end{cases}$$

(i), (ii) の場合で, $S(k, 0)$ が実験値に一致し, 四次の総和則を満足するようにパラメータ A, α, β, γ を決めて $S(k, \omega)$ を計算した。その結果, $k = 2.0 \text{ \AA}^{-1}$ の時はいずれの場合も実験値に近い形が得られたが $k = 3.0, 4.0 \text{ \AA}^{-1}$ の時は実験結果にみられない side peak が現われた。上で四次の総和則を考慮するために t^2 に比例する項を入れたわけであるが, 一般的には (iii) の形が妥当であると思われる。なお, (i) と (ii) の比較から指数型・ガウス型には上の結果はよらないと考え, ガウス型を使うことにした。この結果, (i), (ii) に比べて peak が低くなり改善されたが, 低振動領域での形はあまりよくない。これは $S(k, 0)$ を実験値に一致させたことに無理がある故と思われる, side peak が現われないように, また高振動数領域で実験と良く合うようにパラメータを選ぶことにした。そして $S(k, 0)$ を $k = 2.0 \text{ \AA}^{-1}$ の時は約三倍, $k = 3.0, 4.0 \text{ \AA}^{-1}$ の時は約六倍になる程度のパラメータの選び方で比較的よい一致を得た。しかし定量的な検討には仮定した簡単な関数でなく, もっと複雑なものが必要であると思われる。また, 低振動数領域でよい一致を得るには記憶関数に対して別の近似方法が考えられ検討中である。

参 考 文 献

- 1) F. Yoshida and S. Takeno, Prog. Theor. Phys. 53 (1975), 293.
- 2) F. Yoshida, Prog. Theor. Phys. 54 (1975), 1009.