

Title	4."流れる固体"について(昭和51年度基研長期研究計画「配位相転移の研究」拡大世話人会)
Author(s)	上羽, 牧夫
Citation	物性研究 (1976), 27(2): B14-B20
Issue Date	1976-11-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/89234">http://hdl.handle.net/2433/89234</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

## “ 流れる固体 ” について

名大理 上 羽 牧 夫

通常、固体の特徴としては、周期性をもつこと、かたいこと、流れないこと、などがあげられる。液体やガラスとくらべて表にしてみると次のようになる。

	周 期 性	か た い	流 れ 不 い
ordinary solid	○	○	○
glass	×	○	○
liquid crystal (smectic)	△	△	△
liquid	×	×	×
quantum crystal	○	○	× ?

周期性とは1体の密度行列  $\rho(\mathbf{x})$  に対し

$$\rho(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = \rho(\mathbf{x}) \quad (1)$$

となるような  $\mathbf{a}$  があるということで、対称性による区別なのではっきりしている。ただしドメインをつくったりすると、長距離秩序をどのくらいの空間的なスケールでみるかに問題が生じる。これに対し、かたいとか流れないというのは時間的なスケールの問題である。有限温度では固体でも非常に長い時間待てば静的な剪断歪に対しても原子の再配列がおこるだろうし、粘性をもった液体は高振動数の運動に対しては固体と似たふるまいをする。剛体性をみるには、蹴とばしてみるのが簡便だが、物理屋にとっては粒子線をあててみるのがよい。衝突の瞬間に物体全体に運動量が移れば剛体的であると言える。Mössbauer 効果なども最も顕著なあらわれである。ガラスは対称性からは液体的だが動的なふるまいは固体的である。スメクチック液晶は1次元的な周期性を持ち、面

内では液体的な様相を示す。両方の性質を兼ねそなえているようなので△印にしておいた。

さて、絶対零度では通常の固体は流れないが、量子効果が非常に大きければ、熱的な励起によらずに隣の格子点へ次々ととび移っていくことができるので、流れることが理論的に可能である<sup>1), 2)</sup>。このときの流れは結晶の周期性を維持したままの流れである。金属中の電子はこのような、周期性と流動性を両方持っているが、この場合は電子状態の周期性は格子点に動かないイオンによって確保されている。外場として他のものから与えられた周期ポテンシャル中の周期状態ではなしに、自分自身で自己無種着的に周期場をつくる状態が考えられる<sup>3)</sup>。こうしてできる Bloch 状態を

$$\sum_{\mathbf{K}} C_{\mathbf{q} + \mathbf{K}} e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}} \quad (2)$$

と書けば、Hartree-Fock 方程式は

$$\left( \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - E_{\mathbf{q}} \right) C_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{K}'} \left[ \sum_{\mathbf{K}''} C_{\mathbf{k}''}^* C_{\mathbf{k}'' + \mathbf{K}'} (V_{\mathbf{K}'} - V_{\mathbf{k} - \mathbf{k}''}) \right] C_{\mathbf{k} - \mathbf{K}'} = 0 \quad (3)$$

となる<sup>4)</sup>。  $\mathbf{q} + \mathbf{K}$  を  $\mathbf{k}$  と書き  $V_{\mathbf{k}}$  は 2 体ポテンシャルの Fourier 変換である。この Bloch 状態にもしバンドの端までつまっていなければエネルギー・ギャップのない 1 粒子励起があり金属的な流動性が可能となる。スピンをもたない Fermion で格子点の数と粒子数が等しければバンドの端までつまるが、格子点の数と粒子数の異なる可能性、バンドが重なる可能性もあり Fermi 面が出現しうる。一方 Boson の場合には、もしこの描像がよければ流動性は常にある。

ところが現実の固体では量子効果は非常に小さい。量子効果もただ零点振動が大きいだけでは不十分で粒子が格子点をとび歩くまでになる必要がある。実験室で得られる量子効果の重要な固体は  $^3\text{He}$  と  $^4\text{He}$  である。 $^3\text{He}$  固体での 1.2 mK での反強磁性相の出現や、 $^4\text{He}$  固体中の  $^3\text{He}$  不純物の運動は原子がその位置を交換してとび移っていることを示しているし、空格子点も結晶中を自由に動きまわっている。だが、基底状態での流動性を示すような実験はない<sup>5)</sup>。実験室を離れて天体内部に目を移せば、高密度での原子核のつくる Wigner 結晶が大きな量子効果の期待できる固体である。また最近、高密度核物質でのパイ中間子の凝縮<sup>6)</sup> が問題になっているが、一様な Hartree-Fock 基底状態 (液体状態) の不安定性による周期的な状態の形成の問題と不可分である。核物質につ

上羽牧夫

いては、ヘリウムとのポテンシャルの類似性の観点からも固化の可能性が指摘されており<sup>7)</sup>、量子効果の非常に大きな固体として期待される。

実験室で得られる量子効果の最も大きなヘリウム固体でも、前述の周期的なHartree-Fock状態という描像は全く良くない。粒子間の相関が非常に強く、現実のヘリウムでは同じ格子点に2つの粒子がくる確率は殆どゼロに等しい。よって Bloch 状態よりも、局在化した波動関数から全系の状態を構成する方が現実的である。このような状態を簡単な模型で考えてみたい。

ハード・コアをもった Bose 粒子の結晶を想定する。格子点  $\mathbf{R}_\ell$  の近房  $\mathbf{r}_\ell (= \mathbf{R}_\ell + \mathbf{u}_\ell)$  を中心に局在化した波動関数  $|\mathbf{r}_\ell\rangle$  からつくられる状態に運動を制限する。この状態の“Hamiltonian”は次のように書いてよいだろう。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\ell, m} \langle \mathbf{r}_\ell | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \mathbf{r}_m \rangle a_\ell^\dagger a_m + \frac{1}{2} \sum_{\ell \neq m} \langle \mathbf{r}_\ell | \langle \mathbf{r}_m | v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{r}_m \rangle | \mathbf{r}_\ell \rangle n_\ell n_m \\ & + \sum_{\ell} \frac{m}{2} \dot{\mathbf{u}}_\ell^2 n_\ell - \mu \sum_{\ell} n_\ell \end{aligned} \quad (4)$$

ここでは、直観的な描像にたよって、格子点での粒子の有無と、格子の平衡位置からのずれをあらわす座標を別々に取りだせると考えた。第3項は後者による運動エネルギーである。格子間位置に粒子がくる自由度は無視している。Matsubara - Matsuda<sup>8)</sup> にならって、格子点での生成消滅演算子  $a_\ell^\dagger, a_\ell$  に対し、粒子が Bose 統計に従うこととハード・コアをもつことを次の交換関係でとり入れる。するとスピン系との対応がつく。

$$[a_\ell, a_m] = [a_\ell^\dagger, a_m^\dagger] = [a_\ell, a_m^\dagger] = 0, \quad \ell \neq m \quad (5)$$

$$\{a_\ell, a_\ell\} = \{a_\ell^\dagger, a_\ell^\dagger\} = 0, \quad \{a_\ell, a_\ell^\dagger\} = 1$$

(4) を Pauli スピンで書きかえると

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \sum_{\ell \neq m} \langle \mathbf{r}_\ell | \frac{\mathbf{P}^2}{2m} | \mathbf{r}_m \rangle \cdot \frac{\sigma_\ell^x \sigma_m^x + \sigma_\ell^y \sigma_m^y}{2} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\ell \neq m} \langle \mathbf{r}_\ell | \langle \mathbf{r}_m | v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{r}_m \rangle | \mathbf{r}_\ell \rangle \frac{1 + \sigma_\ell^z}{2} \frac{1 + \sigma_m^z}{2} \end{aligned} \quad (6)$$

$$+ \sum_{\ell} \frac{m}{2} \dot{\mathbf{u}}_{\ell}^2 \frac{1 + \sigma_{\ell}^z}{2} - \mu \sum_{\ell} \frac{1 + \sigma_{\ell}^z}{2}$$

第1項の  $\ell = m$  の部分は最後の項に含めた。これを使って励起モードを調べることができる。第1項、第2項の行列要素は  $\ell$  と  $m$  が近くのものだけしか残らないので、長波長の運動に対しては、連続体で近似して古典的なスピンとして扱える。結果は次のようになる。

まず、各格子点に粒子が全部つまっている完全結晶では図1のようなスペクトルが得られる。普通の縦波、横波の格子振動とエネルギー・ギャップをもった空格子点のモードがある。この空格子点は結晶中を自由に動きまわれるが基底状態では存在しない。

Matsuda-Tsuneto<sup>9)</sup>によって一般的な形で示されているように、完全結晶では ODLRO は

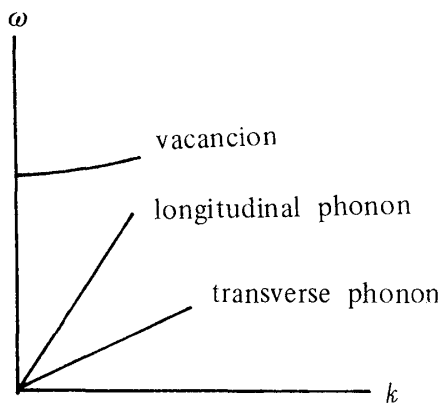


図 1.  
完全結晶での励起スペクトル

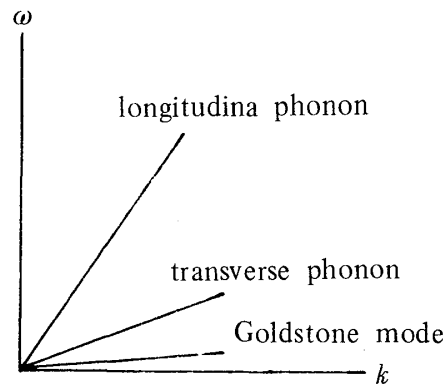


図 2.  
空格子点の凝縮相での励起  
スペクトル

存在しない。格子点から格子点へのとび移りが大きくなると、エネルギー・ギャップが消失し巨視的な数の空格子点が発生する可能性がある。この空格子点が Bose 凝縮をおこし ODLRO が生じる。この場合には格子点の運動とは別に結晶中での超流動がある。励起スペクトルは図2のようにかかれる。フォノン、特に横フォノンの音速は小さくなり、ギャップを持った励起にかわって、凝縮体の振幅に比例した音速をもつモードが出現する。このモードは凝縮体の出現に伴うゲージ不変性の破れに対する

上羽牧夫

Goldstone モードであり，縦フォノンと強く結合している。

こうした結晶のふるまいについては，Andreev-Lifshitz<sup>1)</sup>や Dzyaloshinskii<sup>10)</sup>らによって一般的に研究されている。現実の固体ヘリウムでの超流動固体の可能性については議論がわかれている<sup>11)</sup>。

#### 参 考 文 献

- 1) A. F. Andreev and I. M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP **29** 1107 (1969).
- 2) G. V. Chester, Phys. Rev. **A2** 256 (1970).
- 3) D. A. Kirzhnits and Yu. A. Nepomnyashchii, Sov. Phys. JETP **32** 1191 (1971)  
とそこに引用された論文。
- 4) J. F. Dobson, Phys. Lett. **57A** 73 (1976).
- 5) 鈴木秀次，日本物理学会講演 1975 年秋。  
比企能夫，日本物理学会講演 1975 年秋。
- 6) A. B. Migdal, Sov. Phys. JETP **36** 1052 (1973)
- 7) P. W. Anderson and R. G. Plamer, Nature Phys. Sci. **231** 145 (1971).
- 8) T. Matsubara and H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. **16** 569 (1956).
- 9) H. Matsuda and T. Tsuneto, Prog. Theor. Phys. **46** 411 (1970).
- 10) I. E. Dzyaloshinskii, P. S. Kondratenko, and V. S. Leuchenkov, Sov. Phys. JETP **35** 823 (1972), **35** 1213 (1972).  
I. E. Dzyaloshinskii and P. S. Kondratenko, Sov. Phys. JETP **40** 594 (1975).
- 11) R. A. Guyer, Phys. Rev. Lett. **26** 174 (1971).  
W. M. Saslow, Phys. Rev. Lett. **36** 1151 (1976).  
A. Widom and D. P. Locke, J. Low Temp. Phys. **23** 335 (1976).

質疑討論

- 紀本 1000 Å 程度の銀の粒子に 100 Å 程度の銀の粒子が吸着すると一瞬 (1/20 秒以下) のうちに吸いこまれ大きい方の表面全体にひろがってしまう。大きいもの同志ではゆっくりおこる。融点よりかなり低い温度だがどう理解したらよいのか。
- 大川 Driving force は表面張力以外にはないだろう。しかし何故そうはやいかはわからない。
- 戸田 小さければ amorphous 的だろうから分解しながらうつつっていく。大きくなればダメだろう。はやいのは接触している部分の粒子が移動し表面全体で都合しあって席をゆずるのだろう。
- 大川 大きければ芯は solid like でも表面は liquid like で、徐々に移っていくのだろう。
- 上田 計算機実験では共存面の解析はまだ進んでいない。強い重力をかけた soft core system で調べている。
- 戸田 Cell model を使って界面を調べたことがあるが、密度がだんだんと変わる層が一層はでてくる。固体の表面も 1~2 層は液体と考えてもよいのではないか。
- 紀本 電子線 (LEED) では液体らしい様子は全く見えない。
- 蓮 コロイド粒子でも結晶的な層との間に 2~3 層の液体的な層が見られる。
- 大川 氷でも表面が液体的であることを示す実験がある。ただし氷の表面は polarize しているという説がある。
- 小川 固体か液体かという分け方をして固体の表面は液相であるという見方は本当によいのだろうか。
- 蓮 もし液体という点とすると流動性の一点において液体だ。
- ？ 液れる固体と表面との関係は？
- 松田 原子間ポテンシャルの問題だろう。表面では可能であると思う。Matsuda-Tsuneto の理論では super solid になるためには 2nd neighbor に斥力が必要だが実際は引力なので bulk では実現しない。
- 大川 Lattice model と continuous space の違いは？

上羽牧夫

松田 格子間隔 $\rightarrow 0$ で同じと思う。Lattice modelにはdualityがある。Long range orderについては元の格子より対称性がおちることをそう見ている。Quantum lattice modelではdynamicsは出ないとの森氏の批判がある。

大川 計算機実験の原子多面体の転移のところで流動性はかわるのか？

小川 Kelvin 多面体の原子と他の原子の流動性の違いをみる予定。種村氏がやっている。

紀本 Voronoi 多面体の考え方はいつごろからあるのか。

小川 17世紀頃にエンドウ球をつめた野菜力学 vegetable mechanics というのがあるそう。Bernal は粘土をつかった。Finney が random packing の多面体の研究。Random packing の packing fraction は 0.64 となっているが定義によって値がちがう。

樋渡 粒子の動きを入れないともっと小さい。動きを入れると定義があいまいになる。

上田 Alder 転移の 0.55 から 0.64 までの間が metastable state でつながっているのかは疑問がある。

紀本 微粒子をつめても（丸くないから）0.3 くらいが限度だ。

蓮 急激なショックに対してかたいものと逆にやわらかいものがある。

戸田 衝撃に対して剛体的で、ゆっくりした力に対して流動的というのは time scale による。

大川 グリセリンを急激に打つと剛体的な割れ方をするようになる。

戸田 音速より速いというような条件があるのだろう。

小川 流動性とか剛性というのは量的なちがいでいいのかなのか。

戸田 Relaxation time が spectrum をもっていて frequency によって response が異なることも考えられる。