

1-1. 液体金属の静的構造とイオン間多体力

東北大理 長谷川正之 渡部三雄

金属中のイオン間二体力は、イオン間の直接相互作用（クーロン斥力、閉殻電子の交換反撥力）の他に伝導電子を媒介とした間接相互作用、すなわちあるイオンの場によって偏極した伝導電子の遮蔽場を他のイオンが感ずることによる相互作用が存在することは良く知られている。全く同様に伝導電子を媒介とする多くのイオン間の相互作用が金属中のイオン間多体力の origin として考えられる。一般の多体力の定式化は、あるイオン配列に対する電子系の自由エネルギーを電子・イオン相互作用について展開することにより行うことが出来る。この際、二体力は電子ガス系の遮蔽関数により決められることが知られているが一般に有効 n 体力は電子の n 体のグリーン関数、いわば n 次の分極関数によって決められることが示される。

ここでは特に伝導電子の3次の分極に由来するイオン間相互作用に注目しよう。直接クーロン相互作用と伝導電子の偏極を通じての間接的な相互作用の間には微妙な打ち消し合いが起るために特に3次の偏極を通じてのイオン間相互作用を考慮することが重要であると思われる。摂動の収束性から判断して更に高次の偏極効果によるイオン間（多体）相互作用の重要性は急激に減少するであろう。3次の分極効果はダイアグラムで表わすと図1の3種類に分類される。図1のダイアグラムは電子・イオン相互作用に遮蔽効果を完全にとり入れてあり、その他の電子間相互作用については零次で取り扱っている。(1)はイオンの selfenergy を与え、イオン間相互作用には関係しない。(2)はイオン間二体ポテンシャルに対する寄与を与える。これを $U_2^{(3)}(r)$ とする。(3)はイオン間三体力を与える。実空間での三体力の計算はかなり大変であるから、ここでは3個のイオンが正三角形の頂点に位置する最も簡単な配列に対する結果だけを示しておこう。Na に対する結果は図3のようになる。3次の分極を通じての二体ポテンシャル $U_2^{(3)}(r)$ は図4に示してある。しかし我々はこの計算において電子・イオン相互作用に液体金属の電気抵抗を再現するようなモデル

ポテンシャルを採用しているため，このモデルポテンシャルは1個のイオンによる多重散乱を考慮した t -matrix と考えるべきであろう。したがって $U_2^{(3)}(r)$ は2次の分極による二体ポテンシャル $U_2^{(2)}(r)$ の計算においてすでに取り込まれていると考えるべきである。 $U_2^{(2)}(r)$ は図2のダイアグラムで表わされる。直接クーロン相互作用と $U_2^{(2)}(r)$ の和は図4に示してある。

上で三体ポテンシャルについての初歩的な計算結果を示したが，このような三体ポテンシャルが液体金属の種々の性質にどのような効果を及ぼすか調べることは興味深い。実際，場合によっては（特に多価金属）圧力や圧縮率に対してかなり大きな寄与をもつことが我々の計算で示されている。また三体ポテンシャルが存在する場合でも考える物理によっては有効二体ポテンシャルを定義できる。この際この有効ポテンシャルは三体分布関数を含む一般に複雑な熱力学的関数である。実際三体力が存在するときの全エネルギー及び圧力に対する有効二体ポテンシャルについては Casanova らが形式的な議論を与えている。また Percus-Yevick (PY) 理論に三体ポテンシャルを導入した時の有効イオン間ポテンシャルについての議論が Rowlinson によって与えられている。数年前 Johnson-Hutchinson-March (JHM) は実験で観測された構造因子を P-Y および Born-Green (BG) に用いて有効二体ポテンシャルを計算したが，これは三体ポテンシャル（および三体相関）を複雑に反映したものであろう。このように三体力が存在するとき一つの有効二体力で種々の物理量を統一的に記述できなくなり pair theory は破たんをきたす。その破たんが現実の液体金属でどの程度であるかを調べることが我々の今後の宿題である。

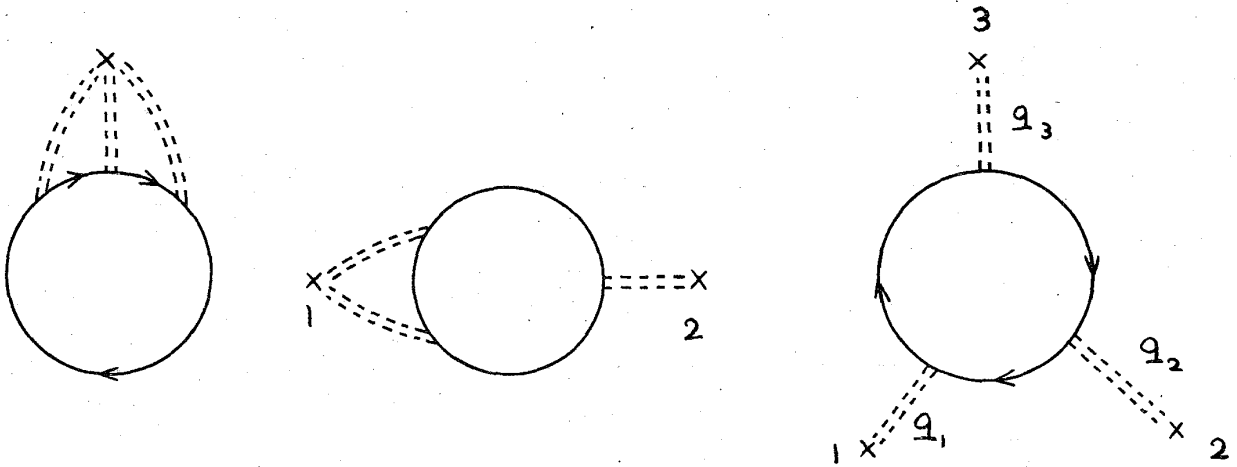


図 1. 3 次の分極によるイオン間相互作用。2 重の点線は遮蔽された電子・イオン相互作用を表わし，実線は電子の propagator であり，×印は $e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{R}}$ である。

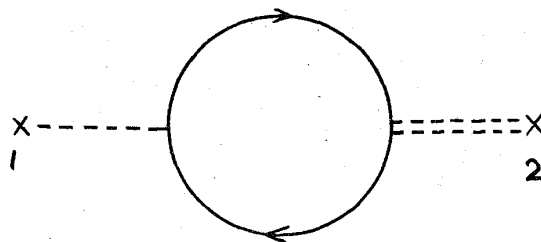


図 2. 2 次の分極によるイオン間二体ポテンシャル $U_2^{(2)}(\mathbf{R}_{12})$ 。

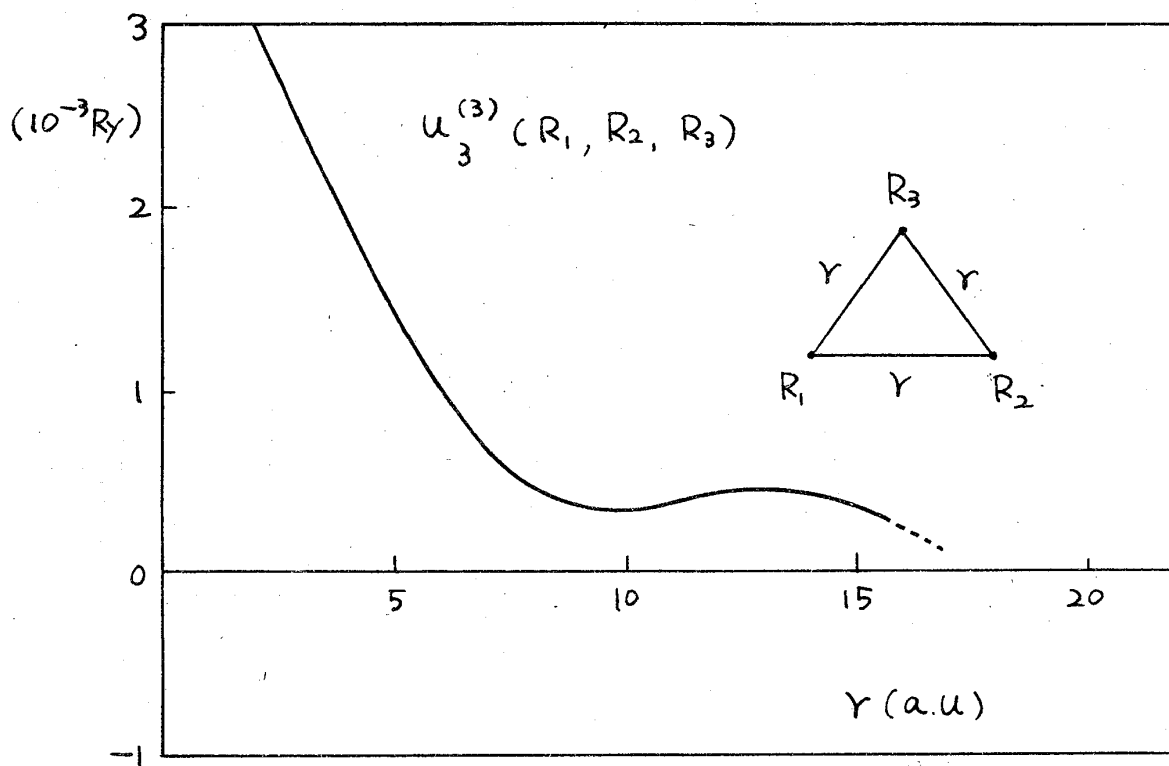


図 3. Na (100°C) の Three-Body Potential

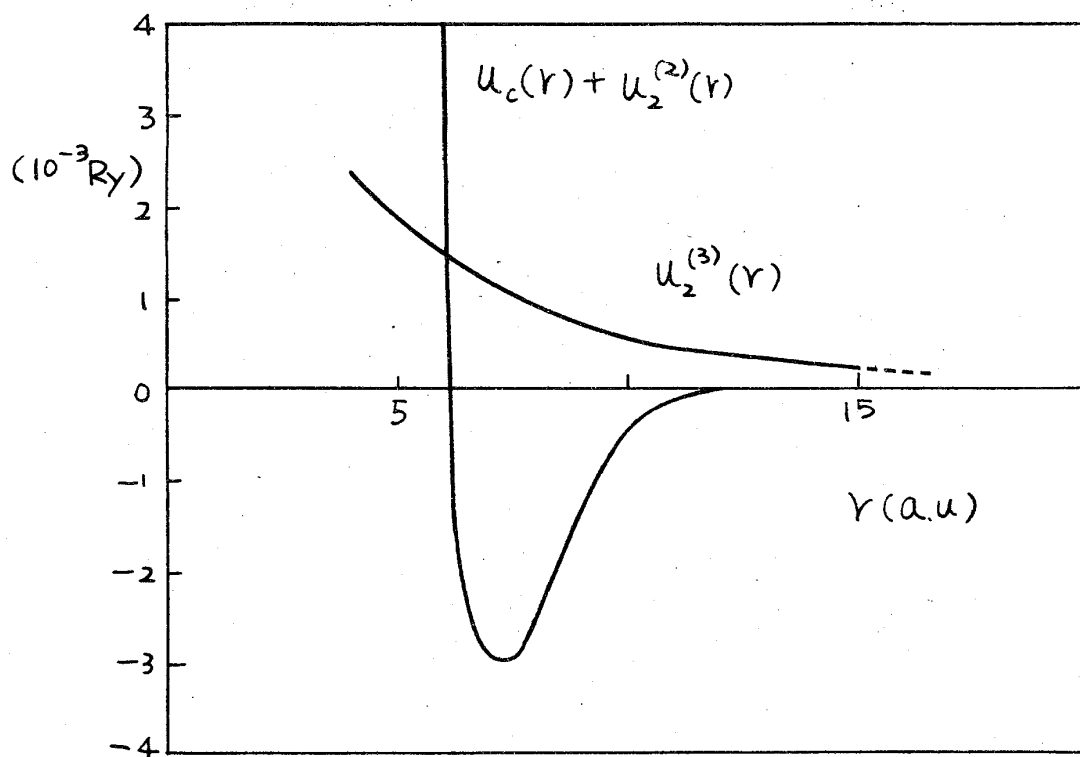


図 4. Na (100°C) の Pair Potential