

融 解 の 理 論

九大理 森 肇
伊 佐 士 郎
岡 本 寿 夫

(1 0 月 1 7 日 受 理)

液体—固体転移の簡単な模型を作るために，液体の空孔理論における可変格子模型を改良して，Lennard—Jones，逆巾斥力およびHard core の各ポテンシャルを持つ体系の相転移を調べている。その基本的な観点は

- 1° 可変格子模型は1950年に Peek & Hillによって導入されたが，理論的に合理的な模型であったにも拘らず，液体の模型を作るのにも，また液体—固体転移を導くのにも失敗した¹⁾。その原因は“基礎格子”として面心立方格子をとったことであると考へ，われわれは“基礎格子”として単純立方格子をとったこと。
- 2° 最近接分子が単純立方格子点上にくる模型 (x_1 branch)，最近接分子が部分格子である面心立方格子点上にくる模型 (x_2 branch)，最近接分子が部分格子である体心立方格子点上にくる模型 (x_3 branch) 等を同時に考察することにしたこと。しかし，格子模型の特徴を失わないように，当面，exclusion core が小さい branch で模型を作ることとし， x_1 branch, x_2 branch および x_3 branch から現われる ordered branch (S branch) の3つの branch に限った。
- 3° 液体—固体転移は x_1 branch と S branch との間か， x_2 branch と S branch との間かで表現できるとして，この2つの場合をとくに追求することにした。($1/r^n$ で， n が小さな ($n \lesssim 7$) soft potential のときには， x_3 branch から現われる ordered branch を考える必要があると思われる。)

- 4° 3 重点 (気体，液体，固体の共存点) を出せる模型であること。

である。先づ cell 内にある粒子の平均自由体積 v_f を cell の体積 v_1 に等しい近似して研究した。その結果は文献 2), 3), 4) を参照されたい (興味のあるお方には preprints をお送りします)。

次の段階としてはこの v_f を取り入れることによって今迄の結果がどのように改善されまたは変更されるかを見ることである。

ここで我々が採用した v_f の計算法は字の通りである。i 番目の cell 内の粒子の自由体積を ω_i とし

$$v_f \cong \{ \omega_1 \omega_2 \cdots \omega_N \}^{1/N},$$

$$\omega_i = \int_{v_1} \exp \left[-\beta \psi_i(r_i) \right] d(i)$$

但し、N: 粒子数、 $\beta = 1/kT$ 、 $\psi_i(r_i)$: i-th cell のまわりの粒子は各々の cell の中心に位置するとして i-th cell 内の粒子が受けるポテンシャル。従って、着目している粒子のまわりの cell についての short-range な粒子の配置を S とし、そのような配置が現われる確率を $P(S)$ とし、またそのときの自由体積を $\omega(S)$ とすれば

$$\ln v_f = \sum_S P(S) \ln \omega(S)$$

と書ける。なお粒子の各 cell への分配は平均エネルギー近似 (MEA) を使い、Takagi 近似 (この場合 Bethe 近似と等価となる) で計算する。(計算中)。

参 考 文 献

- 1) T.L.Hill, Statistical Mechanics (Mc Graw-Hill, New York, 1956)
- 2) H.Mori, H.Okamoto and S.Isa, Prog. Theor. Phys. 47 (1972), 1087
- 3) H.Okamoto, S.Isa and H.Mori, Prog. Theor. Phys. 48 (1972), (No. 3)
- 4) H.Mori, S.Isa, H.Okamoto and H.Furukawa, Prog. Theor. Phys. 48 (1972), (No. 4)