

融解現象とその周辺 — はじめに

九大理 松 田 博 嗣

本研究会を開くに当って、少しく基研における研究会のあとなどを振り返ってみたい。

1963年12月、成人学校「地球と物性物理」が開かれ、小野周氏が惑星内部の状態を推定する上に基礎となる物性の問題として、高温、高压下の状態方程式、相平衡、輸送係数の研究の重要性を指摘している。これに引続いて、1965年、1966年に基研研究会「地球と惑星」が開かれているが、その主眼はむしろ太陽系の生成過程の分類と惑星の層状構造などの問題にあり、統計物理学者の一般的な関心を喚起するには至らなかった。

ところが、1968年10月開かれた基研15周年シンポジウムの席上、川井直人氏は天体内部特に流動性核の問題に関連して、種々の物質の融点の圧力依存性の実験データを調べると、すべての物質は圧力の関数として最大の融点を持ち、それ以上の温度では如何に高压を加えても団体状態は存在しないのではないかと思われる旨述べた。この発言は物質の存在様式に対する基本的な問題を含むものと思われ、われわれはこれに刺戟されて、翌1969年9月に「液体は固体とどう違うか」と云う研究会を開いた。

この研究会の内容は「物性研究 13 (1970), F1」に報告されているように、種々の面からのテーマへの接近が試みられている。筆者は、原子対ポテンシャルとして、 $\phi_n(r) = cr^{-n}$ ($c > 0$, $n \geq 3$, r は原子間距離) なる斥力部分と引力として Kac ポテンシャルをもつ系 (理想三相モデル) が簡単な scaling の性質を持ち、気・液・固体の三相を示す可能性をもつが、決して融点極大をもたぬこと、従って融点極大を導くためにはこのような簡単なモデルからのずれを仮定することの必要性を述べ、変曲点をもつ対ポテンシャルの場合には融点極大をもつ可能性があることを、cell モデルなどを用いて指摘した。

この研究会の後、吉田健氏らは必ずしも原子対ポテンシャルが変曲点をもたなくても、適当に斥力ポテンシャルが softening を示せば融点極大をもつ可能性があること、また蔵本由紀氏らは原子が大きい球と小さい球に当る二つの状態をもつとする Rapoport 流のモデルを解析し、やはりその可能性があることを指摘した。ここで前者を One-species モデル、後者を two-species モデルと呼ぶならば、この二つは電子励起がこの現象に

関与しているかどうかのちがいを示すと考えられ、実際の物質で起っているのはそのどちらであるかを確認せねばならない。このことは高圧下における原子の集合状態と電子状態との関わりあいを追求する一般的問題にもつながるであろう。

この間、森肇氏は expandable lattice モデルの研究において Lennard-Jones と Devonshire の cell モデルを改良し、また mean correlation の近似の導入により剛体球系の融解現象をも取扱得ることを示した。

一方、樋渡保秋氏は前記 $\phi_n(r)$ なる原子対ポテンシャルをもつ系に対する Hoover 氏らの Monte Carlo 法による計算機実験の結果を用いて理想三相モデルの融解現象その他の熱力学的性質と現実物質のそれとを比較し、稀ガス固体、アルカリ、アルカリ土類金属のちがいは高圧状態を除けば、そのちがいとしてこのモデルの枠内でかなりよく理解し得ることを示した。従って一つの理想物質として、このモデルの性質をさらに徹底的に解明することは興味がある。このモデルの拡散等動的性質はどのようなものであり、また現実物質との関係はどうなっているか等について上田顕氏は分子力学の方法によって調べつつある。通常結晶固体と液体とでは拡散係数に不連続的な差がある。ガラス状態は結晶ではないが拡散係数からみれば固体に分類されてよい。上のモデルのような簡単な相互作用をもつ系で果してガラス状態が存在し得るか、過冷却液体状態はどのように存在するか等についても興味があり、これについては樋渡氏が調べつつある。

以上に述べた研究は「分子間相互作用の特徴は物質の存在様式にどのように反映されるか」と云う研究の一部としても捉えることが出来る。因みに恒藤氏と私は斥力のみからなる原子対ポテンシャルをもつ系では off-diagonal long range order をもつ結晶であるいわゆる supersolid があり得るが、現実の He^4 では supersolid は多分存在しないと指摘したが、最近、Liu 氏と Fisher 氏はモデルパラメータのきめ方によっては存在する可能性もあるとしている。

融解現象とその周辺についての接近法は上に述べたものより広いものがあることは言うまでもない。今後は上記のような研究が更に進められると共に、「現実の物質の分子間相互作用、特に高密度におけるそれはどんな特徴をもつか」という研究が電子論的レベルからも解明されて行くことも望ましいことの一つであろう。