

液体金属はどのような意味で simple liquids か

従って、表題の問題について次のように考察してゆきたい。

- 1) 2 体力, 3 体力両方を持つ simple liquids について, 有効な統計力学的手法を考察すること。(単に pair theory の高次理論でない!)
- 2) その場合, Hamiltonian に表われた 2 体力, 3 体力から, 相関効果を取り入れた "2 体力" を設定できないであろうか。その "2 体力" を用いた effective pair interaction theory で, つじつまをあわせることが可能なであろうか。可能な限界, および決定的に破端をもち来たす物理量は何であろうか。
- 3) 電子論から導かれた, 液体金属の場合の 2 体力, 3 体力について, 2) の上述の問題点を詳細に検討することが最後の段階であろう。

Ⅲ-5 液体金属中のイオン間多体力

東北大・理 渡 部 三 雄

金属中のイオン間二体力には, 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等)の他に, 伝導電子を媒介とした間接相互作用, すなわち或るイオンの場により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, 一般に多くのイオンの伝導電子を媒介とする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。実際に, このような有効イオン間相互作用を定量的に評価する際に, 電子間相互作用の高次効果(いわゆる exchange, correlation effect)を考慮に入れることが重要であることが, 二体力の具体的計算の際に知られていることに注意したい。従って, 多体力の評価の際にも, 電子間の相互作用が正しく取扱える形にまず定式化することが必要である。

一般の多体力の定式化は, 或るイオン配置に対する電子系の自由エネルギーを電子・イオン間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(電子間相互作用について exactなもの)によりき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 density

渡部三雄

fluctuation operator ρ_q が n 個かかった n 体のグリーン関数，いわば n 次の分極関数によりきめられることが示される。有効二体力を求める際にとられている電子間相互作用に対する種々の近似法はこの n 次の分極関数を計算する場合にも有効である。

今後の研究計画として，簡単な金属（アルカリ金属や非遷移多価金属）について，数値的に多体力の大きさを評価したい。更に，多体力がどのような効果を液体金属の諸物性に及ぼすか，多体力がどのような形で，またどのような近似で有効“二体力”としてくり込み得るか等，田中氏の項で述べられている問題点と関連して興味ある点である。