

量子効果を含む剛体球相転移

東教大・光研 戸田盛和

Alder らが計算機実験により示した剛体球の相転移は実際の物質の融解現象に対応するものである。剛体球系は外部から圧力が加えられた状態で相転移を起すが、実際の物質では分子間力による凝縮圧（内部圧力）が加わった状態で、分子間斥力によって Alder 転移が起る。

分子間引力による凝縮圧が小さくて Alder 転移を起さない場合は外部圧を加えた状態で融解現象が起るわけである。これは高温で斥力による圧力が大きい場合と共に、量子効果の零点振動のための反発によって固化しにくい場合が考えられる。この量子効果はヘリウムにおいて著しく、 ^4He では 0K で約 25 気圧、 ^3He で約 30 気圧の圧力を加えないと固化しない。このようなヘリウムなどの固化の現象も Alder 転移の典型的なものとみなせる。

古典液体の場合とヘリウムの場合とを平行させて、上の観点から考察しよう。いずれの場合でも、液体の圧力は分子の斥力による寄与 p_r と、分子間引力による負の圧力（凝縮圧） $-p_0$ とからなり

$$p = p_r - p_0$$

と書ける。融解の体積変化は小さいので p_0 は一定であると考えておく。

(1) 古典液体、斥力をもつ分子の運動による自由エネルギーを F_r とすれば（図 1，図 2 (a) 参照）

$$p_r = -\frac{\partial F_r}{\partial V} = \frac{NkT}{V_0} f_A(V/V_0)$$

と書ける。 V_0 は分子を剛体球とみたときの closed packed の体積であり、 $f_A(V/V_0)$ は

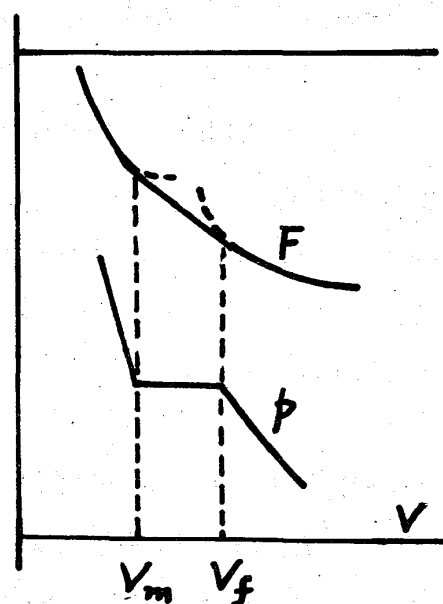


図 1

Alder の計算機実験から与えられる。Alder 転移では融解点 $V_m/V_0 = 1.36$ ，凝固点 $V_f/V_0 = 1.50$ において $f_A = 8.3$ である。

(2) ヘリウム，斥力をもつ分子の零点エネルギーを E_r とすると，絶対零度において（図 3 参照）

$$p_r = -\frac{\partial E_r}{\partial V} = \frac{Nk\tau_Q}{V_0} f(V/V_0)$$

と書ける。 f はある関数， τ_Q は量子効果を表わすある定数で温度の次元をもつ。ここで f の関数形を f_r と同じ（転移の近傍で）とおいてみよう。すなわち

$$f(V/V_0) = f_r(V/V_0)$$

とおく。

ヘリウムの 0K における（25 気圧）融解点と凝固点との体積は $V_m = 21.2 \text{ cm}^3$ と $V_f = 23.25 \text{ cm}^3$ であって（図 2 (b)），これらを Alder 転移と比べると，それぞれ $V_0 = 15.6 \text{ cm}^3$ ， $V_0 = 15.5 \text{ cm}^3$ となってよく一致する。したがって液体ヘリウムにおける有効な値 $V_0 = 15.5 \text{ cm}^3$ を用いることができる。

また液体ヘリウム（0K）では $p \approx 0$ で $V = 27.5 \text{ cm}^3$ であり，これは $V/V_0 = 1.77$ にあたる。このとき

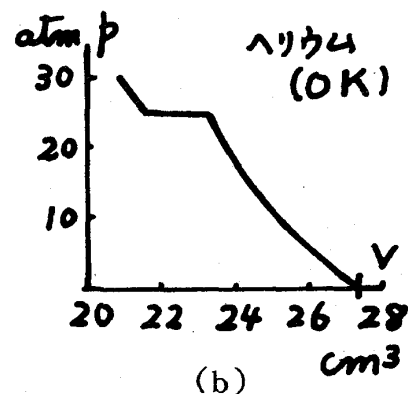
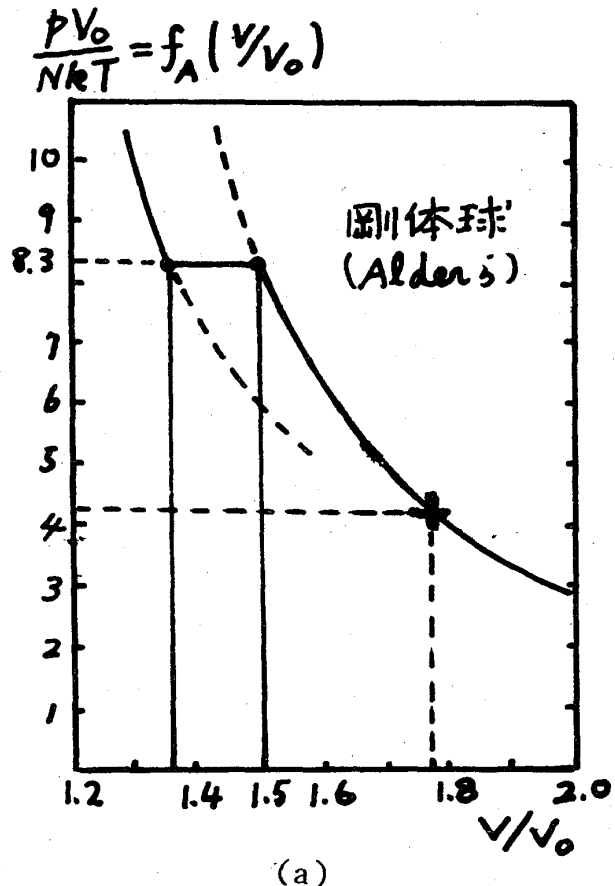


図 2

$$p = \frac{Nk\tau_Q}{V_0} f_r(1.77) - p_0 = 0$$

Alder のデータから $f_r(1.77) = 4.2$ 。したがって、

$$p_0 = 4.2 \frac{Nk\tau_Q}{V_0}$$

故に

$$p = \frac{Nk\tau_Q}{V_0} \{ f_r(V/V_0) - 4.2 \}$$

これが 0 K の融点付近のヘリウムの状態式である。25 気圧を加えると固化が起るから (そのとき $f_r = 8.3$)

$$25 \text{ atm} = \frac{Nk\tau_Q}{V_0} (8.3 - 4.2)$$

これから τ_Q を求めると $\tau_Q = 1.14 \text{ K}$ が得られる。

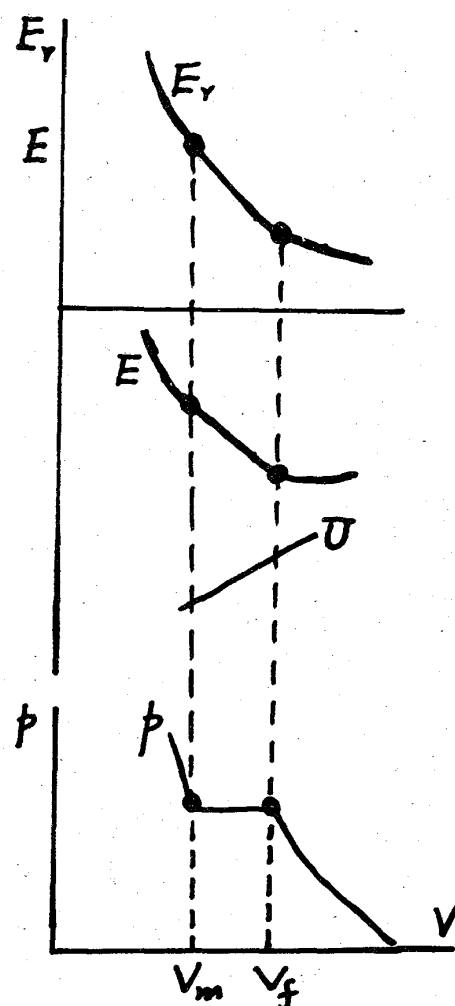


図 3

「気相 - 液相転移における quantum crossover effect について」

東大物性研 鈴木 増 雄

臨界現象に関する最近の実験的、及び理論的研究は適当な系の次元や対称性や potential - range の重要性を強調している。しかしながら、臨界指数に対する量子効果の重要性については、まだ問題が残っている。量子効果が超伝導や超流動に対してきわめて重