

Ⅲ-3 “原子間多体相関関数に対する近似法の検討”

東工大・理 米 沢 富 美 子

液体は固体とは異り，構成原子の配列が，長距離的な秩序は持たないが，短距離的な秩序は何らかの形で残されていると理解されている。しかし，この局所的な構造の様子は，温度や圧力（あるいは密度）の変化を敏感に反映して変ると考えられる。したがって，液体・原子の幾何学的な構造に関する情報を含んだ多体相関関数が液体金属の諸物性を知るための理論に組み込まれていなければならない。ここでは液体イオンを古典粒子とみなして，古典的イオン間多体相関関数について考えたい。

イオン配置に対する相関は，たとえそれが如何に“殆んど”完全にランダムな配置であるにせよ，又，如何に短距離的なものであるにせよ，いったんとり入れたが最後，イオンの数全部を考慮した N 体分布関数が与えられない限り，近似抜きを理論を構成することは不可能である。

一方，實際上，3 体以上の高次分布関数を実験的に得る手段は確立されておらず，多体分布関数に対しては，いくつかの理論的根拠に基いて近似を行わねばならない。これまでに提案されたいくつかの近似（Kirkwood の Superposition 近似，Edwards-Beeby の幾何学的近似，Cyrot-Lackmann の鎖近似など）は殆んど多体分布関数を 2 体の動径分布関数 $g(r)$ を使って近似するものであった。しかし，いずれも，当然満すべき要請を満していないとか，ある極限で明らかに誤りであるなどの欠点を持っていた。例えば，幾何学的近似，鎖近似などは，液体・原子間の体積排除効果を明らかに無視している。体積排除効率は，ひとつの原子の中心から一定の球内には他の原子の中心が来れないという 2 体間の体積効果以外に， n 個の原子の位置が決められた時に， $(n+1)$ 個目の原子に許される体積は全空間ではないという，一種の多体力効果をも含んでいる。

我々の仕事の目的は，多体分布関数がみたさねばならない条件を調べ上げ，これらの条件をみたす，最も簡単で物理的に意味のある多体相関関数を，原子間距離が短距離の極限と長距離の極限とに於て設定し，全ての中間領域で，上

米沢富美子・田中 実

記の条件を破らないような近似的多体相関関数を内挿法で求め、これを使っていくつかの物性を計算して、近似の性質を検討することである。

尚、この項に関する仕事の概要は、話題提供“多体分布関数と Cumulant 平均の問題”の中に少し詳しくふれられている。

Ⅱ-4 液体金属はどのような意味で simple liquids か

東北大・工 田 中 実

液体金属の諸物性のなかで、古典的液体としてとらえられる属性には、質量の殆んどを担うイオンが主役を演ずることは当然であろう。金属イオンは通常の圧力下で、3 重点近くの温度領域に関しては、外殻価電子を全て放出した球状の2 価の古典粒子とみなせる。従って相互作用の複雑さを別にすれば、アルゴンやクリプトン等の不活性(希)ガスの液体と同様に、いわゆる simple liquids の統計力学の対象と考えられよう。Ziman は、相互作用を電子の遮蔽効果を考えて推論し、大胆にイオンは結局ほとんど中性の粒子と見做せ、まさに simple liquids であるとした。彼の提案を neutral pseudo-atom の方法という。

Ziman の相互作用の推論は、たとえば Harrison によって電子論の立場から基礎づけがなされていると見てよからう。

しかし、多電子効果をとり扱う立場から、イオン系の全ポテンシャルエネルギーを書き下すとき、一般にイオン間には3 体以上の多体力が働く形式に到達し、通常の simple liquids の統計力学的手法である pair interaction Hamiltonian でイオン系の構造的性質を議論する pair theory が良い近似であるという保証は必ずしも明確ではない。

勿論、実はアルゴン・クリプトン等でも、全ポテンシャルエネルギーを原子分極率の3 次迄含めて評価する方が、高密度液相、固体結晶、双方の性質を正しく議論することになっていると報告されている。即ち3 体力の働く効果はかなり重要である。