

小倉久和, 上田 顕, 小川 泰, 種村正美, 荻田直史, 松田博嗣

ために, 上の得られた転移点における  $\Delta S^*$  と  $\Delta V^*$  の関係をプロットすると図 4 の様になり, MCM に於て  $\Delta S^* \approx 0$  の様に考えられる。従って MCM は 1 次転移点である。

## 液体と融解に対する動的な観点

戸 田 盛 和

液体の理論を大きく分けると平衡状態と非平衡状態とになる。平衡状態については静的な模型(たとえば格子モデル)が有効であり、各分子が感じる有効ポテンシャルを適切に評価すればよい近似が得られるわけで、剛体球分子の場合にもこの方法が用い得ることもこんどの研究会で示された。融解に対してはこの上に何かの秩序パラメータを入れればよいと感じられるが、分子場近似でこれをどのように定義できるかが今後の問題であろう。液晶の相転移に対してはかえって分子場近似の秩序パラメータが簡単に導入できるのは少々皮肉である。格子細胞の大きさを小さくとること、可変にとることによってこのようなパラメータを導入できるであろうか。

平衡状態についても動的模型を考えられるのではないかと思う。転位(ディスロケーション)モデルにおける転移の運動はこの考えにつながる。元来液体は流動するのが本質的な特徴であり、これが液体の平衡状態を取扱う上で反映されないのはおかしいと思う。この哲学に立って転位模型を見直したい。ただ転位を結晶の転位とあまり強く結びつけると、融解点の近く以外に適用できなくなるので、温度の高い低密度の液体にも適用し、したがって気体にも通用する模型は考えられないだろうか。

液体の中に古典統計の場合もロトンを考え得るのではなかろうかということ、転位の代りに渦糸をとり入れられないかということ、などの発想が実を結ぶことを望みたい。剛体球に対する統計的な幾何学は Percus-Yevic 近似同様のいい近似を与えている。これを融解点を越えて固体にも適用できればよいが、そのためには球をつぎつ

ぎとにおいていった鎖が閉じて元へ戻る場合を積分方程式の中に入れる必要がある。固体では閉じた鎖ばかりであり、これが切れていくのが融解であり、液体では多くの鎖が切れていくという扱いができないものだろうか。またこう考えると、融解現象を量子気体の permutation の輪を考えた Bose 凝縮の扱いとが似てくるようである。この類似は前の研究会でも注意しておいた。

平衡状態の中に非平衡の性質を求める方向ではたとえば Helfand (Phys. Rev. 119 (1960) 1) の輸送係数と時間相関関数の関係がある。これは拡散係数  $D$  に対する式と、粘性流体の運動方程式を平行して扱っていて、液体の特性と直接に結び付いた扱いである。同様なことを固体の弾性率に緩和時間を考えた粘弾性体について確立し固相液相を統一的に扱う立場もあり得るのではないだろうか。

いづれにしても、液体の平衡状態を扱う理論に動的な像を導入する方向を強調したい。