

で与えられる。変位型、秩序・無秩序型のばあい、各振動子はそれぞれ共鳴型、緩和型の振動子としてふるまうから、それに応じた $\chi_s(\omega)$ の形を用いることにより、変位型ではソフトモード周波数 ω_s が、また秩序・無秩序型では臨界緩和周波数 γ が、転移点で0になることが導かれる。二つの場合の実例として SrTiO_3 , NaNO_2 についての実験例がそれぞれ示された。

講義の後半では、構造相転移の動的機構の研究における問題点について説明がなされた。その項目を列挙すると、

- A. 構造相転移の型(簡単なばあい)
- B. ソフト・モードの減衰定数の大きいばあいの構造相転移の型
- C. ソフト・モードの減衰定数
- D. セントラル・ピーク
- E. Ising 変数系の臨界緩和

このような内容について、いろいろな物質での実験データを豊富に紹介しながら説明が行なわれた。また特に、セントラル・ピークに関しては、その発見から現在にいたるまでの過程が年代順にくわしく述べられた。(文責 江間健司)

液体の転位論

講師 東大・理 鈴木 秀 次

§ 1. 序

液体状態を“高密度な転位の入った状態”とする考えについて、お話しされた。結晶は融解によって10%以下の体積増加をするだけであるから、原子間距離で3%増加するだけである。従って、原子間相互作用もほとんど変らないはずであり、構成原子の相対並進運動は結晶中で可能な運動と同じであると考えられる。そこで、液体の流動を転位の運動として考えることができる。高密度の転位は、平衡状態で安定に存在し得る場合があるので、液体は高密度の転位を平衡状態で含んだ結晶であり、液体を特性づける原子の熱運動は、転位の運動によって記述されるという考えは極めて自然である。

§ 2. “液体の転位論”の実験との比較

実際に液体を高密度転位の状態とする考え方が、実験的にどのように観測されるかについて述べられた。

(a) 転位のエントロピー

転位によるエントロピーは液体の転位模型を論じた何人かの人達によって計算されている。水島は転位網の配置の数を考えて配置のエントロピーを計算し、これに転位芯にある原子の振動数が低下するためのエントロピーを加えて、 $1.77 \text{ cal deg}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ を得た。これは実験値の平均 $2 \text{ cal deg}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ にかなり近い。

(b) 結晶構造と電子状態

ダイヤモンド構造をもつ Si, Ge などは結晶構造が変わるとバンド構造が変わり金属になることが知られている。ところで、高密度の転位の入る条件は結晶構造によって影響を受け、単純に融点近傍の結晶に転位が入るのではなく、別の結晶に転位が入って液体となる場合がある。

転位のエネルギーはバーガスベクトルの大きさ b の自乗に比例するから、 b の小さい程融解エネルギーは小さくなる。しかし、 b は結晶の基本並進ベクトルと一致しなければならないから、面心立方、体心立方構造では最近接原子間距離と一致し得るが、他の結晶では一般にそれより大きい。例えば、ダイヤモンド構造で b は最近接原子間距離の $\sqrt{8/3}$ 倍である。もし面心または体心立方構造を作ったときの最近接原子間距離がダイヤモンド構造のときと変わらないとすれば、融解エネルギーは面心立方構造の $8/3$ でなければならない。このため、固体状態ではダイヤモンド構造よりエネルギーは高いが、バーガス・ベクトルが小さくなる構造があると、融解は結晶構造を変え、高密度の転位を導入して起こる。Ge, Si では高压下で実現する構造などもあり、上の条件を満足する結晶構造が存在する。このため、ダイヤモンド構造を基にした液体は存在し得ない。バーガス・ベクトルの小さな結晶は最近接原子数の多い構造をもち、金属的であると考えられる。融解状態の Ge, Si は金属的となる。

(c) 凝固過程

“液体を高密度転位状態”とすれば、結晶成長は、液体中の転位を掃き出す過程と考えられる。従って、結晶の成長速度は熱伝導や不純物拡散などの2次的なものを除くと転位が掃き出される速度である。この速度はまだ計算されていないが、明らかにすべり

運動だけで転位を掃き出せる方位の成長速度は大きい。

(d) その他

以上の他、液体の粘性係数、融点なども、この理論から予測され、実験的にも近い値をとることが示された。また、液体ヘリウムなどの量子液体も、この理論で説明できることは、大変興味深かった。

(文責 村上秀美)

非単純金属液体の電子的性質

講師 東工大・理 石 田 義 明

大半の出席者が修士課程 1 年の学生であったため、午前中は液体金属の概論的な話を中心に講義が行われた。

まず、動径分布関数、構造因子等と原子間 potential が実験的に、あるいは理論的にどのような関係にあるかの説明がなされ、これらの言葉を用いて、液体の構造についての話が行われた。また Ar, Na の具体例をとりあげて、熱容量、圧縮率などの実験値からふつうの液体と液体金属の違いが説明された。次に液体金属は電子とイオンの散乱が弱いアルカリ金属のような単純液体金属と d 電子のようにイオン近くに強く束縛されてそれが resonance level になっているような電子の効果が重要になってくる非単純液体金属の 2 つに分類されることが述べられた。

このあと主に、単純液体金属について、Hall 係数その他の実験的事実から NFE model の妥当性が述べられ、pseudo potential による散乱を Born 近似で計算し、抵抗率などの計算を行う Ziman の理論の説明がなされて、この理論が実験値を非常に良く説明することが強調された。そして単純液体金属の電子的性質は、概ね NFE pseudo potential の枠の中で統一的に理解されることが結論された。

午後は主に非単純液体金属の理論的取り扱いを中心とした講義が行なわれた。非単純の場合、平均自由行程が短く、電子はイオンの short range order に鋭敏であると考えられるため、tight binding な描像が良い model になると思われる。その一つの方法としてまず Ishida-Yonezawa 理論 (IY) について説明がなされ、その後、IY の拡張、effective