7) E.C.Svensson, W.J.L.Buyers ; Phys.Rev. 165 (1968), 1063.
8) M.Nelkin, S.Ranganathan ; Phys.Rev. 167 (1967), 222.
J.Chihara ; Prog.Theor.Phys. 41 (1969), 285.
9) D.R.Fredkin, N.R.Werthamer ; Phys.Rev. 138 (1965), A1527.
N.S.Gillis, N.R.Werthamer ; Phys.Rev. 167 (1968), 607.
R.Brout ; Physica 29 (1963), 1041.
10) J.K.Percus, G.J.Yevick ; Phys.Rev. 110 (1958), 1.

簡単な液体の密度応答関数とその動的振舞い

東大教養物理　村　瀬　千　明

簡単な古典液体の密度応答関数を調べることにより，液体の動的な振舞い，特に素励起について理論的な議論をする。

冷中性子による液体での散乱の実験[1]により古典液体に準規準モード（quasi-normal mode）が存在することが示され，その励起エネルギーが示す分散関係が得られた。この励起の特長は，この励起が大きい波数kと振動数ωを持っていることで，そのオーダーはそれぞれ10^8 cm^{-1}と10^{13}sec である。ここでは，主としてこの励起について考え，そのような素励起が古典液体に存在するか，存在するとすれば，その励起エネルギーの分散関係$\omega(k)$はどうなるか，また，その励起の減衰γはどうなるか等を理論的に考察した。

液体の密度をゆっくり変化させる外場に対する系の応答の一次までを記述する密度応答関数$G(\mathbf{k}, z)$（$\mathbf{k}$は波数，zは時間に関するLaplace 変換の変数）を調べれば，液体の動的振舞いを知ることができるが，特に素励起は$G(\mathbf{k}, z)$のzに関する根で記述されることから，この密度応答関数を調べる必要がある。ここでは，森[2]の導いた一般化されたランジュバン方程式を用いて，密度応答関数を求める。系を記述する動的変数Aとして，局所密度，エネ

ルギー，粒子流のフーリエ変換の係数$\rho(\mathbf{k})$，$\varepsilon(\mathbf{k})$，$\mathbf{I}(\mathbf{k})$をとる。このようなAの時間的な相関を求めることにより，密度応答関数が得られる。このようにして得られたG（**k**，z）は，波数や振動数の小さい流体力学的領域では，既に得られたものと一致していることから，このG（**k**，z）を，今考えている中性子散乱実験で問題になるような**k**とωの領域（ここでは動的領域と呼ぶことにする）にまで拡張して使う。液体の動的領域を記述するG（**k**，z）を求めるために，いくつかの近似をするが，その中で最も重要と思われる近似は，力の時空相関を表わす量F_{xx}（**k**，z）に対する近似である。液体は，動的領域では固体的な振舞いをすることが予想される。粘弾性論では，このようすをある緩和時間τ（Maxwell の緩和時間）を導入し，振動数に依存する粘性率を考えることにより記述する。我々も，これと同じやり方でF_{xx}（**k**，z）を近似した。

このようにして求めたG（**k**，z）の根を数値的に求めた。具体的な計算は84°Kの液体 Ag の場合について行った。その結果を図1と2に示す。第1図は，τをパラメーターとして変えてやったとき，波数によって励起エネルギー（実線の方）と減衰（点線）が大きさをどのように変えるかを図式的に示したもので，(a)は緩和時間を短くし，(c)は長くしたもの，(b)はその中間で，この領域はτが$0.6 \sim 0.7 \times 10^{-13}$sec くらいである。$\tau$がこの範囲にあるとき，励起エネルギーは$\tau$の変化に敏感であり，$\tau$を上述の範囲で大きくするとき，励起エネルギーは(a)の型から(c)の型へ急速に変化した。減衰の方は，τによる変化は少ない。これまで助変数としたτを，励起エネルギーがその実験値と合うように決めてやった結果が図2であり，緩和時間τは0.65×10^{-13}Dec となった。図2の斜線が実験値で，リボン型の実線が理論値であり，かなり良く一致している。分散曲線が$\omega = 0$の曲線を切る程に下って，励起エネルギーだけ見ると非常に固体的であることが特徴と思われる。曲線が$\omega = 0$を切る波数 k_0は，ほぼ構造因子S（k）の第1最大値の波数$2.0\ A^{-1}$に対応するが，少し大きく$2.2\ A^{-1}$となった。図2の点線は減衰を示し，減衰がかなり大きく，また k_0付近で減衰が急速に下がっている。これは $k_0 \lesssim k$の振動はk～0付近のものと似ていて，k～0付近の振動の減衰は小さいことを反映していると考えられる。

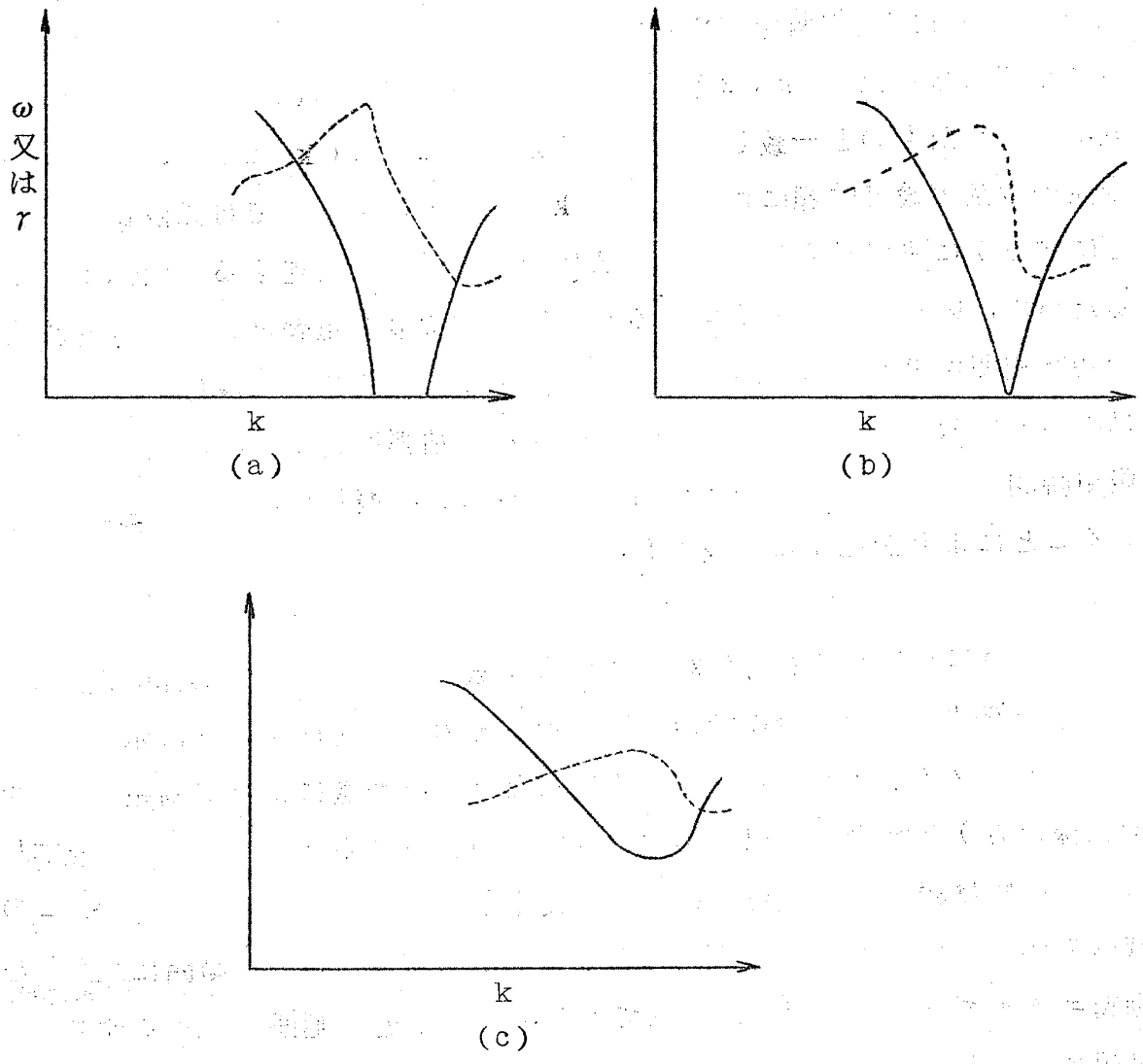

図1　τの変化による励起エネルギー及び減衰の変化

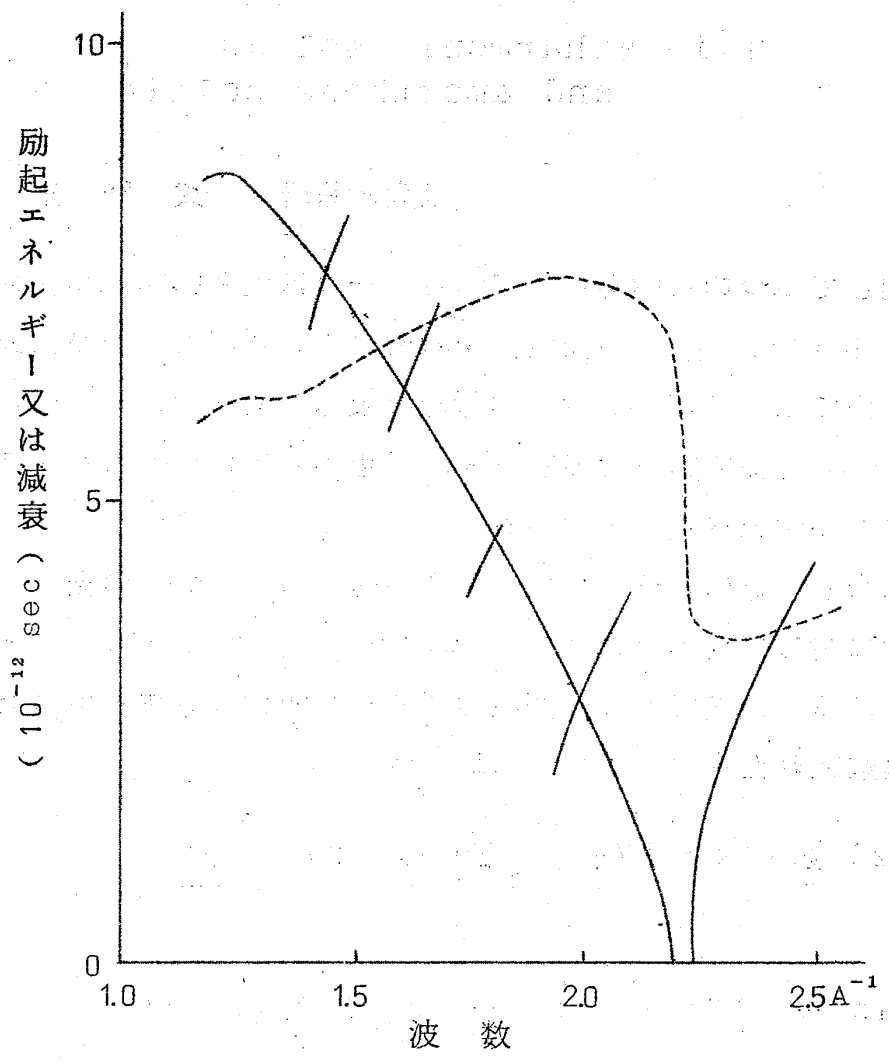

図2　液体アルゴンの分散曲線及び減衰

これらのことから，簡単な古典液体には減衰は大きいが，固体に良く似た励起エネルギーを持つ素励起が存在すると結論する。

文　　献

1) S.H.Chen et al ; Phys.Rev. 161 (1967) 102.

2) H.Mori ; Theo.Phys.(Kyoto) 33 (1965) 423.