

分子運動と素励起 (Review)

原研 小 幡 行 雄

熱中性子の非弾性散乱は波長 $\sim 1 \text{ \AA}$, 角振動数 $\sim 10^{13} \text{ sec}^{-1}$ 程度の時空間的ゆらぎを測定するのに適しており, 凝縮系の動力学ふるまいを調べる有力な一手段である。散乱断面積は通常非干渉項と干渉項とからなる。

I 非干渉性散乱 : 断面積は次の量に比例し, 一つの粒子の運動に関係

$$S_s(Q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} I_s(Q, \omega) e^{-i\omega t} dt$$

$$I_s(Q, \omega) = \langle \exp(-iQr(0)) \exp(iQr(t)) \rangle$$

している。固体で非調和効果を見れば $S_s(Q, \omega)$ は $\delta(\omega)$ のピークとならだかな肩の部分からなる。液体では $\omega = 0$ のまわりの broad peak (quasi-elastic peak) の巾が簡単な拡散モデルの値 DQ^2 より小さくなることと

$$\lim_{Q \rightarrow 0} \left[\frac{\omega^2 S_s(Q, \omega)}{Q^2} \right] = \frac{k_B T}{2M} f(\omega)$$

で求められる振動数分布 $f(\omega)$ および速度相関函数

$$\Phi(t) = \langle v(0) \cdot v(t) \rangle / \langle v^2 \rangle$$

のふるまいが問題になる。

$$f(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \Phi(t) \cos \omega t dt$$

理論的取扱いとしてはSingroi-Sjölander, Rhaman-Singroi-Sjölander, Chudley-Elliott, Egelstaff-Schoffield, Sears,¹⁾ Takahashi-Nakahara 等の模型的計算, Berne-Boone-Rice, Singroi-Tosi 等のmemory function method による計算²⁾ がある。前者は

-
- 1) 「熱中性子散乱の現状と問題点」JAERI レポート No. 1086 第1章(1965)をみよ。
 - 2) 「中性子非弾性散乱研究会報告(第2回)」全上 No. 1157 §4.1(1968)をみよ。

概括すれば一つの粒子が $(0, 0)$ から (n, t) に行く過程を“振動”と“拡散”のくりかえしからなるとして quasi-elastic peak の巾や $f(\omega)$ を求めるものであり、後者は $\Phi(t)$ の従う微積分方程式にあらわれる積分核 — 力の相関函数 — を exponential 又は Gaussian decay にとって $\Phi(t)$, $f(\omega)$ を求めて、Ar についての Rahman の数値実験と大体よい一致を得ている。

II 干渉性散乱 : 断面積は密度のフーリエ成分の相関に比例する

$$S_{\text{coh}}(Q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} I_{\text{coh}}(Q, t) e^{-i\omega t} dt$$

$$I_{\text{coh}}(Q, t) = \frac{1}{N} \langle \rho_{-Q}(0) \rho_Q(t) \rangle$$

$$\rho_Q(t) = \sum_j \exp(iQ \cdot r_j(t))$$

こゝでは固体や液体ヘリウムの phonon のような elementary excitation の存否が問題となる。1965 年の Egelstaff-Cocking, Dorner 等の Pb, Sn についての実験以来多くの実験が主として TOF 法（飛行時間法）でなされており、inelastic peak の存在とそれから導いた分散則が若干の液体（主として液体金属）について報告されている。実験結果の主なところは 1) 分散則は固体の phonon のそれと似ている。2) $\omega(Q)$ は Q の小さいところでは Q に linear で、 $S(Q)$ が極大になるところで $\omega(Q)$ は極小になる。3) branch の数についてははっきりしないが、Pb, Al などでは二つ以上あるとみられる。4) 巾は固体の phonon peak の巾と同程度である。

この現象を説明する試みのうち有力なものの一つとして Kinetic Equation Method について述べる。一般化された Vlasov 方程式から $S(Q, \omega)$ を求める。一体分布函数と二体相関 $S(Q, \omega)$ とを結びつけるのに i) 誘電応答函数の方法, ii) 初期条件の方法, iii) 分布函数のゆらぎの方法の三通りがある。i) について述べれば, $\exp(iQ \cdot r - \omega t)$ で振動する test particle density を導入したときの系の density-density response $\chi(Q, \omega)$ を K.E. を用いて求めれば, $S(Q, \omega) \propto \text{Im} \chi(Q, \omega) / \omega$ より二体相関が求められる。上述の三方法は Vlasov 方程式にあらわれる有効ポテンシャルを「直

接相関函数」に比例するととれば同等になり, 得られた $S(Q, \omega)$ は零次, 二次モーメントまで正しく与えることが示される。こうして求めた分散則は実験結果と大体よくあう。また中性子非弾性散乱で観測される (Q, ω) 領域では衝突項³⁾ はあまりきかず excitation の本質は零音波である。

最近カナダの Chalk-River のグループは TOF 法で求めた結果にやゝ批判的態度をとっている。Cowley は $S(Q, \omega)$ として ω について Gauss 型 (したがって inelastic peak はない。) をとりこれを TOF に換算すると Egelstaff 等のデータとよく一致するみかけの peak があらわれることを示し, Sears は連分数法を用いて Ar については Q の大きいところでの peak の存在に否定的見解を述べている。

$S(Q, \omega)$ をきちんと求める高精度の実験がのぞまれる。

3) J.Chinara : Prog. Theor. Phys. 41 285(1969).

古典液体と固体, He-II, He³

原研 千原 順 三

液体は固体とどう違うかを考えるに当って, すでに液体としてより多く研究されている量子液体, He-II, He³ を含めて比較検討することが, 液体の本質, 量子効果の本質をつかむためにも重要である。

一般的に, (古典) 液体, 量子液体 (He-II, He³), 固体, 気体を, ハミルトニアンを次のように分けることにより統一的にながめることができる。

$$H = H_c + H_{\text{Ind}} + H_{c-\text{Ind}}$$

$$\begin{pmatrix} H_c ; \text{collective motion, } H_{\text{Ind}} ; \text{individual motion} \\ H_{c-\text{Ind}} ; \text{その間の interaction} \end{pmatrix}$$

これを基に, 次のような表を作ることができる。