

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 体力の働く効果がかなり重要である。

液体金属はどのような意味で simple liquids か

従って、表題の問題について次のように考察してゆきたい。

- 1) 2 体力, 3 体力両方を持つ simple liquids について, 有効な統計力学的手法を考察すること。(単に pair theory の高次理論でない!)
- 2) その場合, Hamiltonian に表われた 2 体力, 3 体力から, 相関効果を取り入れた "2 体力" を設定できないであろうか。その "2 体力" を用いた effective pair interaction theory で, つじつまをあわせることが可能なであろうか。可能な限界, および決定的に破端をもち来たす物理量は何であろうか。
- 3) 電子論から導かれた, 液体金属の場合の 2 体力, 3 体力について, 2) の上述の問題点を詳細に検討することが最後の段階であろう。

### Ⅲ-5 液体金属中のイオン間多体力

東北大・理 渡 部 三 雄

金属中のイオン間二体力には, イオン間の直接相互作用(クーロン斥力, 閉殻電子の交換反撥力等)の他に, 伝導電子を媒介とした間接相互作用, すなわち或るイオンの場により偏極した伝導電子の遮蔽場を他のイオンが感ずることによる相互作用が存在することは良く知られている。全く同様に, 一般に多くのイオンの伝導電子を媒介とする相互作用が金属中のイオン間多体力の origin として考えられる。実際に, このような有効イオン間相互作用を定量的に評価する際に, 電子間相互作用の高次効果(いわゆる exchange, correlation effect)を考慮に入れることが重要であることが, 二体力の具体的計算の際に知られていることに注意したい。従って, 多体力の評価の際にも, 電子間の相互作用が正しく取扱える形にまず定式化することが必要である。

一般の多体力の定式化は, 或るイオン配置に対する電子系の自由エネルギーを電子・イオン間相互作用について展開することにより行うことが出来る。この際, 二体力は電子ガス系の遮蔽関数(電子間相互作用について exactなもの)によりきめられることが知られているが, 一般に有効  $n$  体力は電子の density