

別紙 4

報告番号	※	第	号
------	---	---	---

主 論 文 の 要 旨

論文題目 強い斥力ポテンシャルが作用する多粒子系の
気体-固体相転移に対する量子効果の研究

氏 名 山下 耕平

論 文 内 容 の 要 旨

一般に与えられた系の相図に対する量子効果はきわめて重要である。ヘリウムは、常圧下で絶対零度まで固化せずに液体相にとどまる。これは相互作用が弱いというのに、原子質量が軽く零点振動が大きいために、原子の局在が妨げられるからと考えられている。つまり、量子効果によって固化が抑制されている。一方、古典および量子剛体球に対する数値計算では、量子性が強いほど固化しやすいという結果が得られている。本研究では、この一見すると相矛盾する結果をはじめとして、多粒子系の気体 - 固体相転移に対する量子効果の包括的理解を目指す。

本研究では原子間距離が近づくに従い冪的に発散する斥力相互作用を及ぼしあう粒子系を考える。粒子としては、区別できる粒子およびボソンの両方の場合を考える。引力成分は存在しないので液体相への凝縮の可能性を考える必要はなく、広いパラメータ範囲で気体 - 固体相転移を研究することができる。また、この相互作用は、極限として剛体球系も含んでいる。この系に対して、拡散モンテカルロ法および経路積分モンテカルロ法を適用し、基底状態および有限温度における相図を確定する。その際、粒子の質量を変化させることによって零点振動の大きさを変化させ、これが相図に与える影響を明らかにする。

数値計算に先立ち、まず、この系におけるスケーリング則を調べた。その結果、自由エネルギーは有効温度と有効密度の二つの変数で記述され、零点振動には相反する二つの効果があることが明らかとなった。ひとつ目は、温度および密度を一定にして質量を軽くすると、有効密度が小さくなる効果であり、これは固化を妨げる働きがある。もうひとつは、質量が軽くなると有効温度が減少する効果であり、これは固化を促進する。剛体球系においては後者のみが存在する。一般には、両者の競合により、

固化に対する零点エネルギーの効果が決まる。

数値計算の結果、温度ゼロでは零点振動による有効密度減少の効果のみが見られ、質量が軽い物質ほど高密度で固化し、量子効果によって固化は抑制されることが確かめられた。一方、熱エネルギーが零点エネルギーより大きい有限温度領域で零点エネルギーを大きくすると、有効温度減少の効果が勝り、固化が促進されることが明らかとなった。つまり、熱エネルギーが支配的な古典領域から零点エネルギーが支配的な量子領域へクロスオーバーする中間の過程において、零点振動による固化の促進が観測されることが示された。

さらに、圧力 - 温度相図において、融解圧力曲線に弱い極小が現れることを見出した。これは固体相が気相に比べて高エントロピーの状態にあることを示唆する。この現象を理解するために、固体相におけるズリ弾性を調べ、相境界近傍でこれがソフト化することを見出した。このため、固体相での横波フォノンの速度が減少し、エントロピーの相対的な増加の原因となっていると考えられる。

以上のように本研究では、スケーリング則による議論と数値計算によって、有効密度の減少が支配的な領域では、量子効果によって固化が抑制され、有効温度の減少が勝る領域では量子効果によって固化が促進される事を示した。