

超流動ヘリウム内の量子論的溶媒和 に関する理論的研究

(岡崎機構・計算科学) 三浦伸一

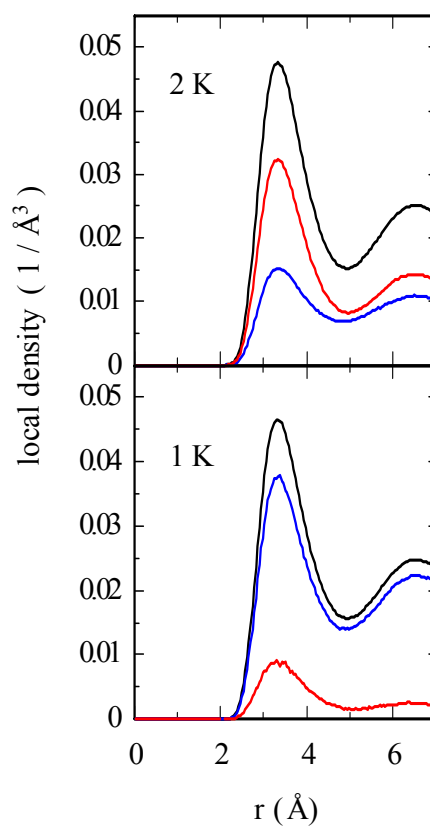
ヘリウムは極低温下においても結晶化せず液体状態を保ち、その物性には量子力学な特徴が顕著に表れる。特に、気液共存曲線に沿って系の温度を下げていくと、2.17K で相転移を起こし、超流動相と呼ばれる新たな液相に転移する。この相転移はボーズ統計に由来する現象であり、超流動相では通常の液体状態には見られない種々の特異な性質を示すことが知られている。例えば、粘性率が極めて小さい (~ 0)、熱伝導効率が桁違いに良いなどの性質が挙げられる。このような特異な媒体内での化学的なプロセスはどのようなものになるであろうか？近年の実験技術の進歩によりこの問いに迫ることが可能になってきた。分光学的な測定から明らかになってきたことは、超流動ヘリウム内の化学的なプロセスは媒体の量子性に由来する様々な“奇妙な”振る舞いを示すということである¹⁾。

我々はこのような状況に鑑み、量子凝縮相内での化学的なプロセスを記述する方法論の開発を行っている。その中の一つにボーズ多体系に対する経路積分ハイブリッドモンテカルロ法²⁾がある。経路積分量子化法によればボーズ液体を古典的な“高分子系”に射影することができる。我々の経路積分ハイブリッドモンテカルロ法は、この古典的な高分子系の配位を分子動力学法に基づく方法で効率的に生成し、ボーズ統計に由来する状態の粒子の置換に関する対称性はモンテカルロ法により満たされる。またこの複合アルゴリズム全体は温度一定のカノニカルアンサンブルを生成する。先に行われた予備的な計算より、このハイブリッドモンテカルロ法により超流動相および常流動相にあるヘリウムの物性を極めて良く記述できることを示した。

本研究では超流動状態にある液体ヘリウム内での希ガス原子の溶媒和を取りあげる。この系は液体ヘリウム内の不純物状態を理解するための雛形の一つであり、種々のモデルによる解析がなされている。また最近の実験より希ガス原子の集合体が液体ヘリウム（液滴）内での化学反応を促進する“触媒”の役割を果たすという報告もあり、微視的な解析が待たれている系の一つである。本研究では、希ガス原子 (^3He , Ne と Xe) が超流動ヘリウム内に溶媒和している系を経路積分ハイブリッドモンテカルロ法により解析した。

超流動性を特徴づける巨視的なパラメータとして超流動密度が挙げられる。これは液体ヘリウムの物性を記述する二流体模型に表れるパラメータであり、このモデルにおいてはヘリウムの数密度は超流動密度と常流動密度の和で表される。本研究では溶質まわりの微視的な環境を特徴づけるために“微視的な超流動密度”を新たに導入した。これにより溶質まわりの密度プロファイルは超流動成分と常流動成分に分割されることになる。図に計算より得られた溶質周りの密度プロファイルを示す (Ne-He のみ)。黒線は数密度を、青線は超流動密度を、赤線は常流動密度を示している。図に示されている数密度プロファイルより、溶質まわりには振動的な密度の構造、つまり溶媒和殻が形成されていることが見て取れる。この溶媒和殻の構造は温度によりほとんど変化していない。し

かしながら超流動密度（および相補的な常流動密度）は、この温度変化により大きく様相が変化していることがわかる。つまり温度が低下するに従い超流動成分の顕著な発達が見られる。このような知見はヘリウム内での化学過程をモデル化する際に重要な役割を果たすだろう。当日は、しばしば用いられる他の微視的な超流動密度と本研究で導入したものを比較し、問題点を検討する。



参考文献

- 1) J. P. Toennies and A. F. Vilesov, Annu. Rev. Phys. Chem. **49**, 1 (1998).
- 2) S. Miura and S. Okazaki, Chem. Phys. Lett. **308**, 115 (1999).