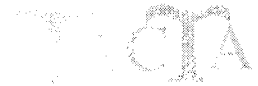


# フログストン



## 構造相転移

(structural phase transition)

結晶相間の相転移のうち二つの相が構造的に関係づけられるものをいう。一般に相転移の前後で対称性が変化するが両者には関係があり、群論的な議論(ランダウの現象論)の対象となる。一次相転移である場合もあるが、多くは高次相転移としての議論が展開できる。

その微視的相転移機構から一般に変位型と秩序-無秩序型に分類される。変位型相転移は格子振動のある特定のモードが相転移点に近づくにつれその固有振動数がしだいに減少し、ついには0となって初めとは異なる平衡位置をもつようになるものである。この固有振動数の減少をソフト化、ソフト化するモードをソフトモードという。

これに対し秩序-無秩序型相転移は、相転移温度以上では原子・イオンの位置、分子の配向等が無秩序な状態にあったものが低温で秩序化することにより生じる。

この両者を両極限として含み、構造相転移の機構を統一的に扱う理論が幾つか提出されている。これらの理論では系を非調和振動子の集合体と考え、その非調和ポテンシャルの形状の変化により機構が連続的に移行することが示されている。

(北陸先端科学技術大学院大学 山村泰久)

## 分子内自由度

(intramolecular degree of freedom)

分子は数多くの構成粒子からなり、様々な内部自由度を持つ。これを分子内自由度という。重心運動である並進の自由度と分子全体としての回転運動を除いたすべての自由度が含まれる(回転の自由度も内部自由度に含める流儀もある)。このため分子内部の振動といった励起エネルギーが比較的低いものから、電子状態、ラジカルスピンの自由度や、大きな量子化エネルギーを持ち熱容量にはほとんど寄与しない原子核の状態、といったものまで様々なものがある。これらの自由度はそれぞれ電気伝導性や磁性などに関係していて、様々な物性を生み出している。運動自由度以外の自由度(電子状態・スピンなど)については、分子運動を無視すれば理論的取り扱いが比較的容易であり理解が進んでいる。一方、高分子では主に分子内運動自由度が物性を支配しており分子を紐のように取り扱うことが行われている。比較的小さな分子の内部運動自由度については、物性との関連での研究はあまり多くない。

(北陸先端科学技術大学院大学 山村泰久)

## 【国際会議のお知らせ】

### 9th CTTA

9th National Conference on Chemical Thermodynamics and Thermal Analysis

August 23 - 27, 1998 Beijing

Contact: Prof. Jiawu Gao

104 Education and Research Laboratory  
Dept. of Material Science & Engineering  
Beijing University of Aeronautics and  
Astronautics, Beijing 100083  
TEL. +86-10-6201-7251 ext. 7684(o);  
TEL. +86-10-6202-6677 ext. 3384(h);  
FAX. +86-10-6202-8356

### ATPC'98

5th Asian Thermophysical Properties Conference

August 30 - September 2, 1998 Seoul, Korea

<http://atpc98.snu.ac.kr>

Contact: Prof. M. S. Kim

Secretary General of ATPC'98  
Department of Mechanical Engineering  
Seoul National University  
TEL. +82-2-880-8362  
FAX. +82-2-883-0179  
E-mail: [minskim@plaza.snu.ac.kr](mailto:minskim@plaza.snu.ac.kr)