

アモルファス構造における幾何学的秩序

二宮敏行 (東大理)

アモルファス固体の中では、原子の配置は大きく乱れている。しかし、これは結晶と同じ密度を持ったため、希薄気体の場合と異なり、原子の配置は全くランダムではあり得ない。原子間相互作用の影響が強いため、隣接原子同士の関係(原子間距離、配位数)は、ほぼ、結晶の場合と同じになり、大域的な原子のつながり方の乱れがアモルファス構造を特徴づけた乱れになる。

結晶の場合、電子状態、格子振動を理論的に求めるための切り口は並進対称性であった。大域的に原子のつながり方が乱れている場合は、並進対称性の局所的な乱れと見ることが出来るから、アモルファス固体中の電子状態を求めるには、並進対称性にかわる構造上の特徴を明らかにせねばならない。

一方、実験的には、低温(1K以下)における熱的性質の異常から、二準位系がアモルファス固体の中には、結合の性質、組成によらず存在することを知られており、これは、アモルファス構造には、化学的性質によらず、幾何学的に生じる共通の特徴が存在することを示唆している。

1979年に、M. Rivier¹⁾ は、任意のランダム・ネットワークの中で、奇数員環は孤立したり、勝手に配置されることはなく、奇数員環のみを貫く剛性なループが描けることを示した。すなわち、幾何学的な性質から、ネットワーク中の幾何奇数員環は強い相関を持って配置される。

アモルファス構造における、このように線(Rivier line)の存在が、アモルファス固体に共通の性質であるのか、また、線の長さは何で決まっているのかを明らかにするため、金属の場合も、球のランダムパッキングでシミュレートした系について調べた。^{2,3)}

球を密に詰めると、4つの球で正四面体が、また、6つの球で正八面体がつくられる。したがって、アモルファス金属の構造は、四面体と八面体のランダムパッキングの系と見ることが出来る。四面体(T)と八面体(O)のつながりも示すTOネットワークの性質として、次の事が見出された。

1) ネットワーク中の、非結晶的なリングを貫く2種類の Rivier line が存在する。一つの線は、正の局所空間曲率を伴い、他方の線は、負の局所曲率を伴っている。

2) 平均曲率=0 の条件を要請すると、線の長さは四面体と八面体の割合のみによって決まる。結晶(fcc, hcp)の場合は、この割合は2:1であり、線の長さは、この割合の2/3から決まると考えられる。

3) アモルファス構造における任意性は、線の configuration の任意性で与えられる。すなわち、アモルファス構造の configuration entropy は、線の configuration

entropy を与えられた。

4) 計算機シミュレーションにおける Voronoi 多面体の統計と比較すると、TO ネットワーク中のセルを通る平均の線の数は、 $\sqrt{2}$ 本である。すなわち、Rivier line は分離して存在するよりも、むしろ、かきみ合っており、かきみ合の方がセルからセルへと変化している。

文献

- 1) N. Rivier, *Philos. Mag.* **A** 40 (1979) 859
- 2) T. Ninomiya, *Structure of Non-crystalline Materials*, ed. P.H. Gaskell et al. (Taylor and Francis, 1983) p558
- 3) T. Ninomiya, *Topological Disorder in Condensed Matter*, ed. F. Yonezawa and T. Ninomiya (Springer 1983) p40