アモルファス構造の多面体解析

東大理　二宮敏行

アモルファス金属の構造は，球の最密不規則充填によりシミュレートされる。同じ径の球の充填の場合は，正4面体，正8面体のランダムな充填と見ることが出来るので，その構造の幾何学的特徴を，4，8面体のつながりを示すネットワークについて調べる。

ネットワークの要素であるリングは角度欠損δで特徴づけられるが，p個の4面体とq個の8面体のリングの場合，その角度欠損$\delta(p,q)$は

$$\delta(p,q) = 2\pi - [p\theta + q(\pi-\theta)] \quad , \qquad \theta \text{は正4面体の2面角}$$

で与えられる。ネットワーク中のセルが，(p,q)リングを$f(p,q)$個含んでいると，セルの中心の球のまわりの多面体の頂角の和Ωは，次式で与えられる。[1]

$$\frac{4\pi-\Omega}{4\pi} = \frac{1}{2}\sum_{p,q}\frac{\delta(p,q)}{2\pi}f(p,q) = \frac{\delta(3,1)}{2\pi}l_+ + \frac{\delta(4,1)}{2\pi}l_- \qquad (1)$$

ただし

$$l_+ = \frac{1}{2}\sum_{p,q}[(2-p)+2(2-q)]f(p,q)$$
$$l_- = \frac{1}{2}\sum_{p,q}[(p-2)+(q-2)]f(p,q) \qquad (2)$$

l_+, l_- は拡張された意味での *Rivier line* の本数（セルが含む *Rivier line* の本数）で，$l_+ \le 6$，$l_- \ge -4$ である。*Rivier line* の性格は，*partial disclination* と *partial dislocation* の組み合わさったもので，*dispiration* になっている。[2]

ユークリッド空間充填のため，Ωの平均値について

$$\left\langle \frac{4\pi-\Omega}{4\pi} \right\rangle_{cell} = 0 \qquad (3)$$

を要請すると，

$$\langle l_+ \rangle = \frac{108\,|\delta(4,1)|(\eta-\frac{2}{3})}{2\pi[1-3(4-\frac{9\theta}{\pi})(\eta-\frac{2}{3})]} \quad , \qquad \langle l_- \rangle = \frac{108\,\delta(3,1)(\eta-\frac{2}{3})}{2\pi(1-3(4-\frac{9\theta}{\pi})(\eta-\frac{2}{3}))} \qquad (4)$$

ただし，$\dfrac{\eta}{1-\eta} = \dfrac{4\text{面体の数}}{8\text{面体の数}}$

となる。$\eta=2/3$ の場合を除き，*Rivier line* は必然的に存在する。また，$\langle l_+ \rangle$, $\langle l_- \rangle$ は無理数となるため，必然的に非周期的な構造になる。（$\eta=2/3$ は fcc や hcp 結晶の場合である。）

球の充填に伴なうひずみの大きさは，第一近似では，$4\pi-\Omega/4\pi$ で与えられると考えてよいであろう[3]。(1) 式で与えられるように，$4\pi-\Omega/4\pi$ は，Rivier line の本数 l_+，l_- で与えられるが，l_+，l_- が整数であるため，$|(4\pi-\Omega)/4\pi|$ が小さい値をとる (l_+, l_-) は $(l_+, l_-)=(0, 0)$，$(4, 5)$，$(5, 6)$ の組である。$(0, 0)$ は，結晶に対応する。アモルファス構造に対応するのは，$(4, 5)$ と $(5, 6)$ が $\langle(4\pi-\Omega)/4\pi\rangle_{cell}=0$ になるように，まじりあった状態と考えられる。$\langle l_+\rangle$ (or $\langle l_-\rangle$) を disorder parameter として，ひずみエネルギーを描くと，図1のようになるであろう。0 の状態が結晶，A の状態がアモルファス状態（あるいは，液体状態）である。

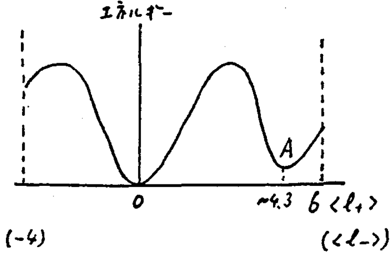

図1

A の状態では，$(4, 5)$ と $(5, 6)$ が $0.71:0.29$ の割合いでまじっている。これらがランダムに存在していると，configuration entropy は，1 モルあたり $\sim 0.60R$（R は気体定数）となる。Stishov によれば，Ar, Na などの高圧下の melting entropy から，等体積の melting entropy は $\sim 0.7R$ と外挿される。上に得られた $0.6R$ は，ほゞ，これに対応すると考えてよいであろう。

1) T. Ninomiya, in Topological Disorder in Condensed Matter, ed. Yonezawa and Ninomiya (Springer 1983) p.40

2) T. Ninomiya, J. Non-crystalline Solids 75 (1985) 489

3) T. Ninomiya, to be published