

数部分である。(b)によりモード α は(a)の対流ロールの峰部分に上昇または下降する流体運動を付加し、(c)、(d)によりモード β はロールの横波振動を発生させることがわかる。

最後に体系の分岐構造の要約をのべる。(i) $\Gamma_Y < \Gamma_{Y_0}$ の場合には、体系は非常に長い周期の saddle-saddle loop に沿った運動を行い、 R を増加させていくとき、周期解と周期解の間に微細構造としてSilinikov 型の非周期解が多数発生する。(ii) $\Gamma_Y > \Gamma_{Y_0}$ の場合には、 R を増加させるとき通常のHopf 分岐による周期的運動を経て準周期的運動が発生し、トーラスは lockig などを通して崩壊して非周期的運動となる。

詳細は他に発表の予定である。

文献

- 1) H. Yahata: Prog. Theor. Phys. 75 (1986) 790; 76 (1986) 333.

微粒子のダイナミクス

日電基礎研 沢 田 信 一

最近、電子顕微鏡で、遷移金属の微粒子（原子数数百）の動的挙動が観察された¹⁾。その結果、微粒子においては、“準固体相”と呼ぶべき相の存在が発見された。この相では、微粒子は、様々な形（八面体、正二十面体、双晶など）をとり、それらの間を1/10秒のオーダーで転移している。ここでは、この現象を次のように解釈する。ポテンシャル面には、多くの極小点があるが、それらの点が微粒子の異なる形に対応し、ある一つの極小点のまわりに、しばらく振動した後、別の極小点に移行し、そのまわりにしばらく振動するということをくり返している。

以上のことが、原子6個及び7個のクラスターで起こることを、分子動力学によるシミュレーションで示した²⁾。極小点間の転移は、まったくランダムに起こり、この運動は、多次元ハミルトン系のカオスである。以下に、原子6個の場合の結果を報告する。

モデルポテンシャルとして、遷移金属を対象としていることを考慮し引力部分に多体効果を含む、次のポテンシャルを用いる。（ただし、結果の定性的なふるまいは、他のポテンシャルを用いても変わらないであろう。）

$$V = 1/2 \cdot U \sum_j \{ A \sum_i \exp(-p(r_{ij} - r_0)) - [\sum_i \exp(-2q(r_{ij} - r_0))]^{1/2} \}$$

$$(A = 0.101035, p = 9 r_0^{-1}, q = 3 r_0^{-1})$$

r_0 は、バルクの格子定数である。格子和をとることにより、完全結晶 (FCC) の凝集エネルギーは $E_{\text{bulk}} = 1.17674 \cdot U$ で与えられる。以下では、長さ、エネルギー、時間の単位として、それぞれ、 r_0 , E_{bulk} , $r_0 \cdot (m/E_{\text{bulk}})^{-1/2}$ を用いる (m は原子の質量)。この単位系では、原子の平衡点のまわりの振動周期が 1 のオーダーである。

このポテンシャルの極小点に対応して図 1 に示すように、クラスターの安定形 (Octahedron (OCT)) と準安定形 Tripyramid (TP) が存在する。分子動力学においては、初期条件は、OCT において各原子の速度ベクトルをランダムに分布されることにより決定する。相図を図 2 に示す。温度は運動エネルギーの時間平均

$$T = (3N/3N - 6) \cdot (2/3) \cdot \langle N^{-1} \sum_i m v_i^2 / 2 \rangle$$

で定義される。(ただし、 $3N/3N - 6$ という因子は、並進運動と回転運動を凍結していることに由来する。)

クラスターの形の時間的变化を知るために、隣接距離 r_n ($= 1.2$ とする。) を定義し、隣接行列 D ($r_{ij} \leq r_n$ のとき $D_{ij} = 1$, 他は $D_{ij} = 0$) を各時刻において計算し、さらに次の量 δ を計算する。

$$\delta = \| D - D_{\text{OCT}} \|^2 / 2$$

ここで、 $\| A \|$ ($\equiv \sum_{ij} A_{ij}^2$) は行列 A のノルムである。 $\delta = 0, 2$ がそれぞれ OCT と TP に

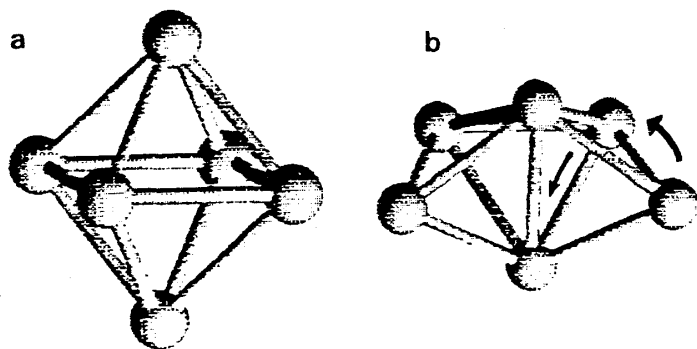


図 1. 6原子のクラスター: (a) Octahedron (OCT), (b) tripyramid (TP)。(矢印は置換運動を表わす)

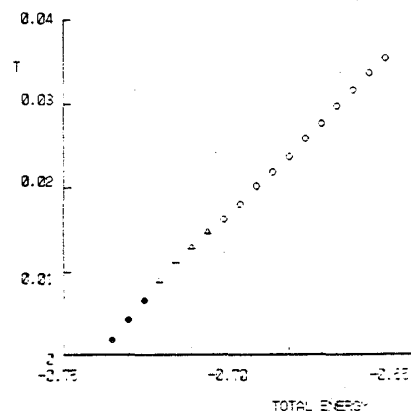


図 2. 相図 (エネルギー対温度曲線): ● 固体相, △ 準固体相, ○ 液体相。

対応する。 δ は、初期のOCTから変化したボンド数を表す。固体相及び準固体相での δ の時間的変化を図3に示す。固体相ではクラスターは、OCTにとどまっているが、準固体相では、OCTとTPの間の遷移をくり返している。しかも、この遷移では、トポロジカルな構造の変化はなく、いわゆる“breathing motion”を行なっている。一方、液体相では、 δ は3以上の値もとる。このとき、隣接行列の時間的変化を追跡した結果、図1(b)の矢印で示した2原子の協調的な運動により、一つのTPから異なるTP(置換異性体)へ遷移していることがわかった。液体相でも、やはりbreathing motionをくり返しているが、それがときどき置換運動によって中断される。温度が上がるにつれ、この置換運動の起こる割合は増してくる。このように、6個の原子のクラスターにおいては、運動の様子により、準固体相を区別することができる。

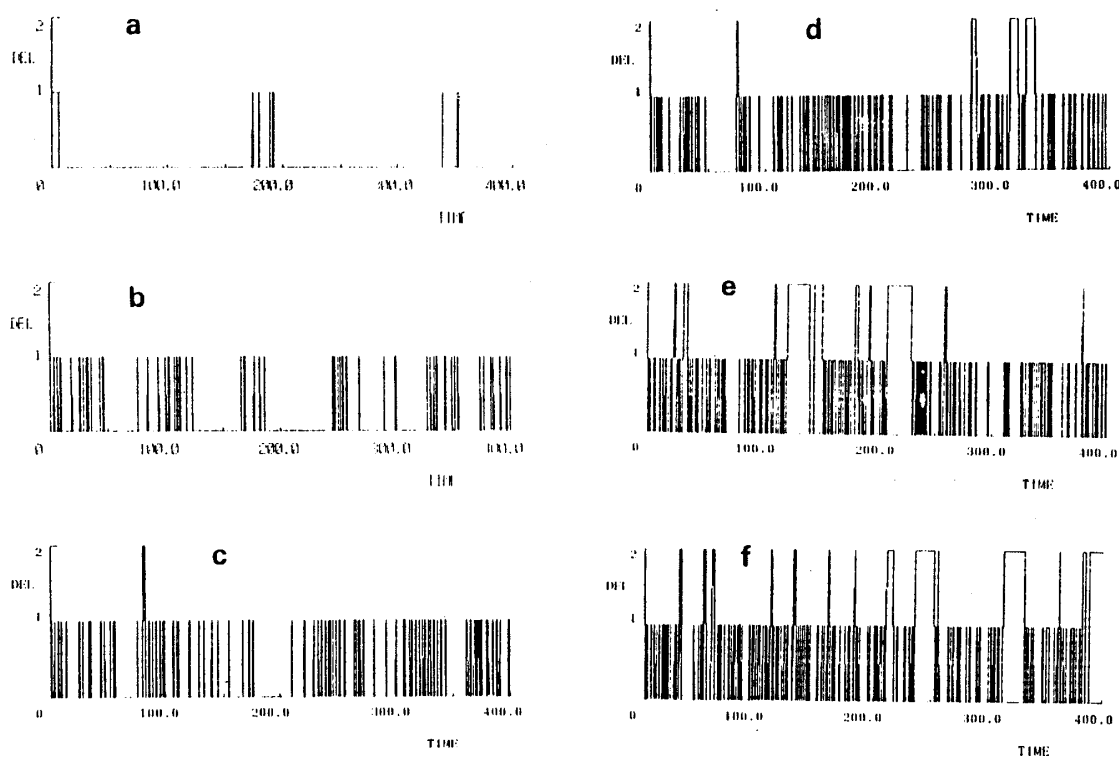


図3. δ の時間的発展: $E =$ (a) -0.730 , (b) -0.725 , (c) -0.720 , (d) -0.715 , (e) -0.710 , (f) -0.705 。

参考文献

- 1) S. Iijima and T. Ichihashi: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 616
飯島澄男: 応用物理 **54** (1985) 926; 固体物理 **21** (1986) 296。
- 2) S. Sawada: Dynamics of Transition-metal clusters, in *Microclusters* (Springer-Verlag 刊行予定, 第1回NECシンポジウムの proceedings)