

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には、正4面体、正8面体のランダムな充填と見たことが出来るので、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より調べる。

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

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

で与えられる。ネットワーク中のセルが、 (p, q) リングを $f(p, q)$ 個含んでおり、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⁾

$$\begin{aligned} \frac{4\pi - \Omega}{4\pi} &= \frac{1}{2} \sum_{p, q} \frac{\delta(p, q)}{2\pi} f(p, q) \\ &= \frac{\delta(3, 1)}{2\pi} l_+ + \frac{\delta(4, 1)}{2\pi} l_- \end{aligned} \quad (1)$$

また

$$\begin{aligned} l_+ &= \frac{1}{2} \sum_{p, q} [(2-p) + 2(2-q)] f(p, q) \\ l_- &= \frac{1}{2} \sum_{p, q} [(p-2) + (q-2)] f(p, q) \end{aligned} \quad (2)$$

l_+, l_- は拡張した意味での *Rivier line* の本数 (セルが含む *Rivier line* の本数) で、 $l_+ \leq 6, l_- \geq -4$ である。*Rivier line* の性格は、*partial disclination* と *partial dislocation* の組み合わせたもので、*dispiration* になっている。²⁾

ユークリッド空間充填のため、 Ω の平均値により

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

を要請すると、

$$\langle l_+ \rangle = \frac{108 \delta(4, 1) (7 - \frac{2}{3})}{2\pi [1 - 3(4 - \frac{90}{\pi}) (7 - \frac{2}{3})]} \quad , \quad \langle l_- \rangle = \frac{108 \delta(3, 1) (7 - \frac{2}{3})}{2\pi [1 - 3(4 - \frac{90}{\pi}) (7 - \frac{2}{3})]} \quad (4)$$

$$\text{また} \quad \frac{\eta}{1 - \eta} = \frac{\text{4面体の数}}{\text{8面体の数}}$$

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* + *hcp* 結晶の場合である。)

球の充填に伴う歪み³⁾の大きさは、 $\pi - \Omega/4\pi$ であり、 $4\pi - \Omega/4\pi$ で与えられると考えられている³⁾。(1)式で与えられたように、 $4\pi - \Omega/4\pi$ 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 $\langle 4\pi - \Omega \rangle / 4\pi = 0$ になるように、まいるった状態と考えられる。 $\langle l_+ \rangle$ (or $\langle l_- \rangle$) を disorder parameter として、歪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。

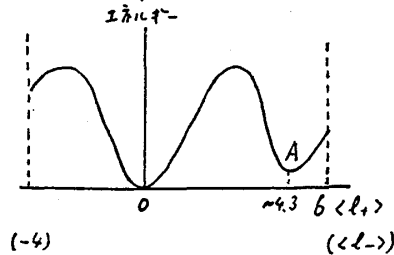


図1

Aの状態では、 $(4, 5)$ と $(5, 6)$ が 0.71:0.29 の割合にまいるっている。これは、 $\pi - \Omega/4\pi$ に対応しているとして、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 がある。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、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. Yonegawa and Ninomiya (Springer 1983) p.40
- 2) T. Ninomiya, J. Non-crystalline Solids 75 (1985) 489
- 3) T. Ninomiya, to be published