

異方性を有する粒子からなる結晶の相転移と配向ガラス形成

(京大理) 高江恭平、小貫明

【はじめに】

KCN などの非対称な粒子による結晶には、低温で、粒子の配向に関する相転移により、立方晶から非立方晶へと構造相転移を示す物質がある。更に、 $(\text{KCN})_x(\text{KBr})_{1-x}$ などの混晶において、粒子の配向が乱れた状態で凍結した **orientation glass** の存在が、比熱、音波、誘電緩和測定から知られている[1]。Ti-Ni 合金においても、混合比を変えることで、ひずみがガラス状に凍結する (**strain glass**) ことが発見されており、外力に対する巨大応答として、形状記憶効果、超弾性を示すことが知られている[2]。これらの、ナノスケールでの不均一性と、外場に対する巨大応答は、他にもリクサーやソフトマターなどにおいて顕著に見出されるものであるが、現象論は多くあるものの、微視的な観点からの計算が望まれる。そこで我々は、粒子の角度に依存した相互作用を考えることで、上記の性質を示す分子動力学のモデルを提案し、数値計算により、構造相転移及びガラス的挙動の解析を行った[3]。

【結果と考察】

まず、単分散系における構造相転移と力学応答について調べた。粒子としては近似的な楕円体を考え、粒子間の斥力を粒子の向きに依存するとした。計算結果を図 1 に示す。上図において、色は粒子の向きを表し、温度変化による秩序 - 無秩序転移が観測された。粒子が異方的であるために、下左図に示すように、結晶構造が低温においては二等辺三角形(3次元では菱面体晶)になる。また下右図に示すように、低温の秩序相において、一軸伸張の外力をかけると大きなひずみを生ずる。除負荷後ひずみは大きいままであるが、温度を上げると、粒子配向が無秩序化するために歪みは無くなる(形状記憶効果)。

次に、不純物として、異方性のない球を混入した際の配向秩序のガラス化について調べた。不純物粒子の大きさによっては結晶秩序も消失するが、ここでは大きさはほとんど等しく、結晶秩序は保たれている系を調べた。結果を図 2 に示す。左図は定量化した配向秩序を表し、不純物濃度を上げると秩序が消失することが分かる。このとき、粒子配向と格子ひずみの結合により、巨視的なひずみもなくなるという、**orientation-strain** ガラスを形成することを発見した。右図では低温での力学応答を示す。図 1 と同種の形状記憶効果を見出すことができる。

【参考文献】

- (1) U. T. Höchli, K. Knorr, and A. Loidl, *Adv. Phys.* **39**, 405 (1990).
- (2) S. Sarkar, X. Ren, and K. Otsuka, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 205702 (2005);
Y. Wang, X. Ren, and K. Otsuka, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 225703 (2006).
- (3) K. Takae and A. Onuki, arXiv: 1203.2425.

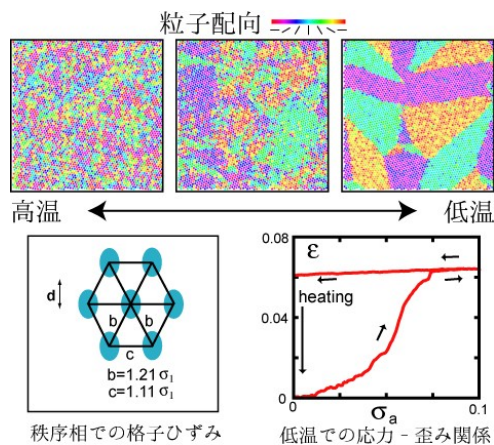


図 1. 粒子配向の相転移(上図)に伴う格子の自発ひずみ(下左図)と応力(σ_a) - 歪み(ϵ)関係(下右図)。

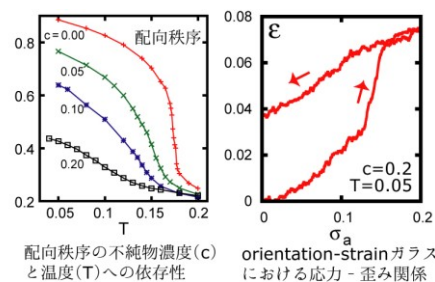


図 2. 不純物混入による秩序の消失(左図)と力学応答(右図)。