

非晶質における中距離秩序の記述

(東北大学 WPI-AIMR) 中村壮伸

【はじめに】

結晶固体にくらべ原子構造による非晶質固体の記述は十分であるとは言えない。なぜならば結晶性固体に見出されるような長距離秩序が非晶質固体の構造には見つかっていないからである。そのため非晶質構造の研究は詳細な局所構造の解析に基づいて進められてきた。局所構造のうち短距離秩序 (SRO: short range order) と呼ばれる最近接原子で作られる構造に関しては理解が進んでいる。しかしながら SRO だけでは非晶質構造を十分に記述できないことも知られており、実際、非晶質固体では中距離秩序 (MRO: medium range order) と呼ばれる構造が存在することが多くの実験やシミュレーションの研究で示唆されている。具体的には、共有結合性材料の場合は構造因子の最初の鋭い回折ピーク (FSDP: first sharp diffraction peak) が、金属結合性材料の場合には動径分布関数の第二ピークの分裂が、それぞれ SRO よりも大きな長さスケールのなんらかの構造の存在を示唆している。しかしながら MRO の幾何学的な実体、および、それがもたらす物性への影響などはまだ明らかではない。これは明らかに MRO を構成する多体の原子配置を記述する汎用的・系統的手法が欠如していることに由来する。そのため多体の原子配置を記述する新たな数学的な言語が待望されている [1-2]。

我々はパーシステントホモロジー [3] という、21 世紀に入って誕生した数学の手法を用いて、非晶質構造の記述を試みる。パーシステントホモロジーでは任意の数の多体の原子配置を対象とし、ホモロジーで定義される穴を 2 つの長さの分布関数として系統的に記述できる。それゆえ、MRO の汎用的な記述手段となりうる。

【結果と考察】

我々は、アモルファスシリカを例に、パーシステントホモロジーの可視化であるパーシステンダイアグラム (PD: persistence diagram) を得た。その結果、PD において特徴的な曲線を発見した。この曲線を含む PD のみから FSDP を再構成することができることから PD が MRO を適切に記述していることを確認した。さらに、曲線が多体の原子配置の中に含まれる幾何学的な拘束を意味し、同時に拘束条件下の形状のゆらぎを意味しているということを確認した。この曲線はひずみ変形で不変に保たれ、弾性応答などの力学物性と関係しているということもわかった。これらの結果は PD が単に形を分類するための汎用的な道具であるというだけでなく、動径分布関数のように物性を計算する道具としても役立つ可能性があることを示唆している。 [4]

【参考文献】

- (1) S. R. Elliott. "Physics of Amorphous Material" Longman; 2nd edition (June 4, 1990).
- (2) 金森 順次郎, 川村清, 米沢富美子, 寺倉清之, “固体・構造と物性(現代物理学叢書)” 岩波書店 (March 15, 2001)
- (3) H. Edelsbrunner and J. Harer. "Computational Topology: An Introduction" (Amer. Math. Soc., 2010).
- (4) T. Nakamura et.al, “Description of Medium-Range Order in Amorphous Structures by Persistent Homology” in preparation