



|                  |   |
|------------------|---|
| Title            | 非晶質アルミニウムの構造模型  |
| Author(s)        | 前田, 正雄; Maeda, Masao; 小栗, 章 他   |
| Citation         | 北海道大學工學部研究報告, 140, 155-166  |
| Issue Date       | 1988-05-30  |
| Doc URL          | <a href="https://hdl.handle.net/2115/42090">https://hdl.handle.net/2115/42090</a> |
| Type             | departmental bulletin paper   |
| File Information | 140_155-166.pdf   |



## 非晶質アルミニウムの構造模型

前田 正雄\* 小栗 章\*\*

藤田 勝康\*\*\* 谷脇 雅文

(昭和 62 年 12 月 26 日受理)

### Computer Simulation of Amorphous Structure of Aluminium

Masao MAEDA, Akira OGURI

and Katsuyasu FUJITA, Masafumi TANIWAKI

(Received December 26, 1987)

#### Abstract

The structure of amorphous aluminium was simulated in a computer using Ichikawa's method. The splitting of the second peak in the radial distribution function of the amorphous aluminium structure disappeared by increasing the hard spheres used in the simulation. From this fact it is considered that the structure of amorphous aluminium is not an ideal dense random packing of hard spheres. The relaxation of the amorphous aluminium made by Ichikawa's method was performed by molecular dynamics using Morse potential. By this relaxation, the amorphous structure with the splitting of the second peak in its radial distribution function was obtained. The present result was compared with the amorphous structure models simulated by other researchers and it was concluded that the amorphous structure consisting of an element does not depend on its kind.

#### 序

非晶質は結晶とは異なった多くの性質を持っている。これらの性質を説明するためには、実際とよく一致する構造模型が必要とされる。Bernal<sup>1)</sup>は液体構造を説明するために多くのボールベアリングをつかって DRP (dense random packing) 構造をつくり、その中に含まれる多面体について調べた。市川<sup>2)</sup>は計算機によって DRP 構造をつくり、その二体分布関数を Fe 蒸着非晶質薄膜の実験データと比較して二体分布関数が実験値とかなり良く一致する構造模型を作った。山本ら<sup>3)</sup>は市川の DRP 構造を緩和させることによって二体分布関数、密度ともに非晶質 Fe の実測値と良く一致する構造模型を作った。本研究ではモースポテンシャルをつかって非晶質アルミニウムの構造模型をつくって他のモデルおよび Fe の実験値と比べた。

---

電子工学科 固体電子工学講座

\* 現 金沢工業大学電子工学科

\*\* 現 名古屋大学理学部

\*\*\* 北海道工業大学経営工学科

## 方 法

### 1. 市川の方法による剛体球集団の作製

#### 作製手順

市川の方法<sup>1)</sup>は、初期条件として4つの剛体球をぴったりくっつけて、各球の中心を線で結ぶと正四面体になるように配置した集団に、剛体球を1個ずつつけて増やして非晶質構造模型をつくる方法である。以後この正四面体の重心を原点と呼び、剛体球の直径を $\sigma$ とする。

まず、パラメーター $K(1 \leq K \leq 2)$ を定め、互いの中心距離がそれぞれ $K\sigma$ より小さい3個の剛体球からなるグループをすべて選び出し、それぞれのグループにおいて、その3つの剛体球すべてに接し、かつ集団内の他の剛体球と重ならないように、第4の剛体球が付け加えられる場所があるかどうかを調べる。この条件が満たされる場所をポケットと呼ぶ。すべてのポケットの中で一番原点に近い位置に剛体球を1個付け加える。この手順をくりかえすことによって任意の数の剛体球集団を作製することができる。

#### ポケット座標の求め方

今、与えられた1つのグループの3つの剛体球中心の座標をそれぞれ $(x_1, y_1, z_1)$ ,  $(x_2, y_2, z_2)$ ,  $(x_3, y_3, z_3)$ とする。ポケット座標を $(x, y, z)$ とするとポケットにおいた剛体球はこのグループの3つの剛体球全てに接するので、次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} (x-x_1)^2 + (y-y_1)^2 + (z-z_1)^2 &= \sigma^2 \\ (x-x_2)^2 + (y-y_2)^2 + (z-z_2)^2 &= \sigma^2 \quad (\sigma > 0) \\ (x-x_3)^2 + (y-y_3)^2 + (z-z_3)^2 &= \sigma^2 \end{aligned} \quad (1.1)$$

この連立方程式の実数解がポケット座標であり、実数解がない場合にはこのグループはポケットを持たない。

(1.1)式は半径 $\sigma$ の3つの球の球面の交点を求める式と考えることができる。問題を解きやすくするために、図1のように球1が原点、球2が $\xi$ 軸上にあり、球3が $\xi-\eta$ 平面の $\xi > 0$ の範囲にある座標系を選ぶ。そうするとこの座標系での各球の中心の座標は次のようになる。

球1 :  $(0, 0, 0)$ , 球2 :  $(0, 0, c)$ , 球3 :  $(a, 0, b)$

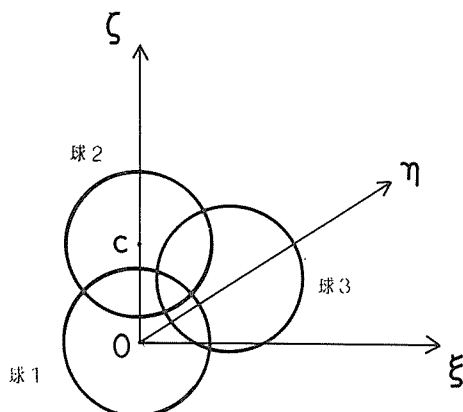


図1 球1が原点、球2が $\xi$ 軸上、球3が $\xi-\eta$ 軸上になるように選んだ $\xi-\eta-\xi$ 座標系

ここで $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ をもとの集団の原点を始点とした各球の中心の位置ベクトルとし、 $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1$ ,  $r_{12} = |\mathbf{r}_{12}|$ ,  $r_{13} = |\mathbf{r}_{13}|$ とおくと、これらのベクトルの成分は各球の中心の座標より計算できる。そこでこれらを用いて $a, b, c$ を表すと

$$\begin{aligned} c &= r_{12} \\ b &= \mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{r}_{13} / r_{12} \\ a &= \sqrt{r_{13}^2 - b^2} \end{aligned} \quad (1.2)$$

この座標系では、(1.1)は次のような簡単な形になる。

$$\begin{aligned} \xi^2 + \eta^2 + \xi^2 &= \sigma^2 \\ \xi^2 + \eta^2 + (\xi - c)^2 &= \sigma^2 \quad (\sigma > 0) \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$(\xi - a)^2 + \eta^2 + (\xi - b)^2 = \sigma^2$$

これから

$$\xi = c/2 \quad (c \neq 0) \tag{1.4}$$

$$\xi^2 + \eta^2 = \rho^2 \quad \text{ただし} \quad \rho = \sigma^2 - (c/2)^2 \tag{1.5}$$

となる。これは図2・aのような円であり、解が存在するためにはこの円が球3の球面と共有点を持たなければならない。それは以下のように判断する。図2・bのように  $\xi - \xi$  平面を考え、球3において  $\eta = 0, \xi = c/2$  を満たす点が存在し、それらのなかで  $\xi$  軸に近い方の  $\xi$  座標を  $\xi_0$  とすると  $-\rho \leq \xi_0 \leq \rho$  であれば3つの球面が交点を持つ、すなわち(1.1)の実数解が存在する。 $\xi_0$  は(1.3)の第3式に  $\eta = 0, \xi = c/2$  を代入すると求まる。

$$\xi_0 = a \pm \sqrt{\sigma^2 - (c/2 - b)^2} \tag{1.6}$$

ここで

$$D = \sigma^2 - (c/2 - b)^2 \tag{1.7}$$

とおくと、 $\xi$  が実数であるためには  $D \geq 0$  でなければならない。もし  $D \geq 0$  なら

$$\xi_0 = a - \sqrt{D} \tag{1.8}$$

となる。解の存在条件をまとめると次のようになる。

$$\begin{aligned} D &\geq 0 \\ |\xi_0| &\leq \rho \end{aligned} \tag{1.9}$$

この2つの条件が満たされる時、解が存在する。そこで(1.3)の第3式に  $\xi = c/2$  を代入し、それから第1式をひくと

$$\xi = (a^2 + b^2 - bc) / 2a \tag{1.10}$$

これで  $\xi$  と  $\xi$  が求まったので、 $\eta$  は

$$\eta = \pm \sqrt{\sigma^2 - \xi^2 - \xi^2} \tag{1.11}$$

となる。 $\eta \neq 0$  の時は2つの解がある。

これで  $\xi - \eta - \xi$  の座標系で解((1.4), (1.10), (1.11))が求められたので、あとは座標変換をしてもとの座標系で解を表せばよい。

## 2. 緩和

市川の方法で作製した剛体球の集団を実際非晶質構造に近づけるために緩和を行う。これは

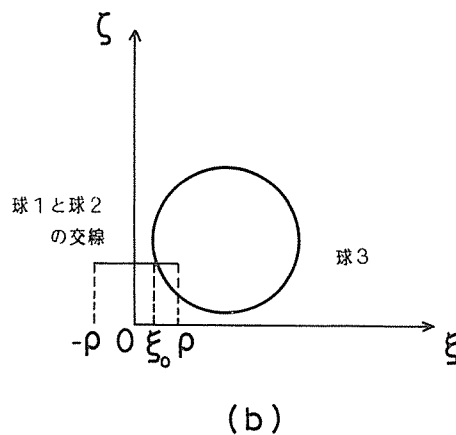
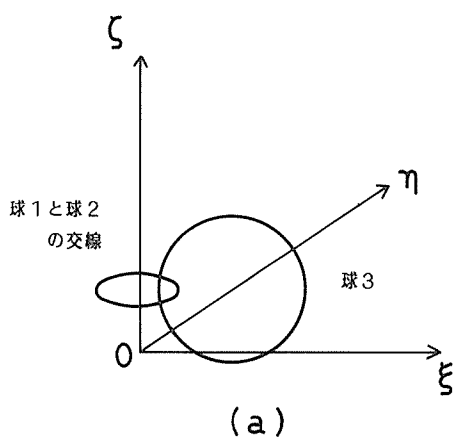


図2 (a) 球1と球2の交線と球3  
(b)  $\xi - \xi$  平面の図

実際非晶質金属の内部で考えられる原子間の相互作用ポテンシャルを剛体球間でも考慮し、集団全体のポテンシャルが小さくなるように、剛体球を始めの位置から少しずつ動かして行くものである。緩和には大きく分けて動力的な方法と静力的な方法があるが、ここでは動力的な方法をとる。

二原子間の相互作用として、原子間の距離  $r$  のみに依存するポテンシャル  $\phi(r)$  を考えると集団の中の  $i$  番目の剛体球の感じる全ポテンシャル  $U_i$  は

$$U_i = \sum_{j(i \neq j)} \phi(r_{ij}) \quad \text{ただし } r_{ij} = r_j - r_i \quad (2.1)$$

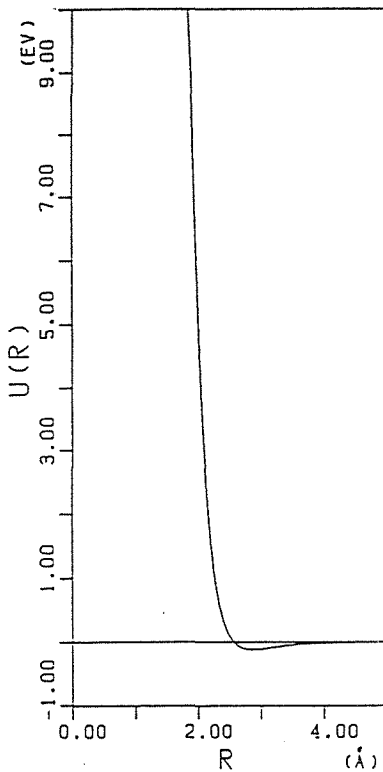


図3 A1のモースポテンシャル

となる。2体相互作用ポテンシャルとして、ここではモースポテンシャルを用いた。アルミニウムのモース・ポテンシャルは<sup>4)</sup>

$$\phi(r) = 0.119306 \{ \exp(-2 \times 2.353643(r - 2.864944)) - 2 \exp(-2.353643(r - 2.864944)) \} \quad (2.2)$$

となる。ここで  $r$  はオングストローム単位で表す。図3にこのポテンシャルの形を示す。

一節で配置した剛体球集団で相互作用ポテンシャルを考えると、集団の表面付近の球は内側の球とポテンシャルのかかり方が異なってくる。そこで、この影響を除くために周期的境界条件を用いた。ここで  $L$  を  $\phi(L)$  が無視できる程度の大きさに取り、一辺  $L$  の立方体を単位として、周期性をもたせる。ちょうどルービック・キューブのように並べた27個の立方体を考え、その一番真中にある立方体内の球にかかるポテンシャルを考えることによって、表面の影響を取り除いた。

球  $i$  に働く力は

$$F_i = \sum_{j(i \neq j)} \frac{\phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \cdot \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (2.3)$$

(2.3)で各球に働く力を求めて運動方程式を差分方程式で解く。加速度を  $\mathbf{a}$  とすると

$$\mathbf{a}_i(t) = \mathbf{F}_i(t)/m \quad (m \text{ は剛体球つまり原子の質量}) \quad (2.4)$$

$$\mathbf{v}_i(t + 1/2 \cdot \Delta t) = \mathbf{v}_i(t - 1/2 \cdot \Delta t) + \mathbf{a}_i(t) \cdot \Delta t \quad (2.5)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t + 1/2 \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \quad (2.6)$$

初期条件として  $\mathbf{v}_i(t - 1/2 \cdot \Delta t) = 0$  とおくと(2.1) - (2.4)より、加速度が求まり、それによって(2.4) - (2.6)から時間的経過を追うことができる。さらに剛体球同志が衝突する場合も考慮して、集団内である衝突から次における衝突までの時間  $\Delta t$  を求め各球を  $\mathbf{v}_i \cdot \Delta t$  だけ進めそこで衝突をおこした2つの球だけ速度を変えてまた次の衝突を求めるといった手続きをくりかえせばよい。ここで、各球について衝突を調べ、その中から集団内で最初に起きる衝突をさがし、 $\Delta t$  と衝突後の各球の速度を求めなければならない。

いま注目している球の静止系においてその球が原点にあるとする。そしてまわりにある球のその座標系での位置と速度を求め、それらの球が原点に向かってきているのか遠ざかっているのかを調べる。これは図4を見るとわかるように、この座標系での剛体球の位置ベクトルと速度ベクトルのなす角が $90^\circ$ 以上であるか以下であるかで判断できる。この角が $90^\circ$ 以上であれば、換言すれば $\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}$ が負であれば剛体球は原点の剛体球に近づいているといえる。このような球としては原点から $2\sigma$ 以内にあるものを調べれば十分であろう。

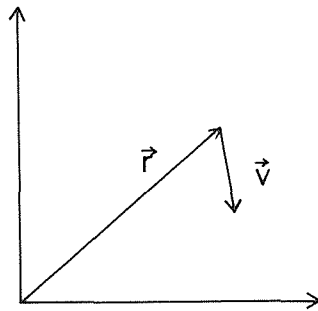


図4 原点に注目している剛体球がある。座標系はその球に関する静止系でとられている。 $\mathbf{r}$ はそのまわりにある球の位置ベクトリ、 $\mathbf{v}$ はその速度(相対速度)である。

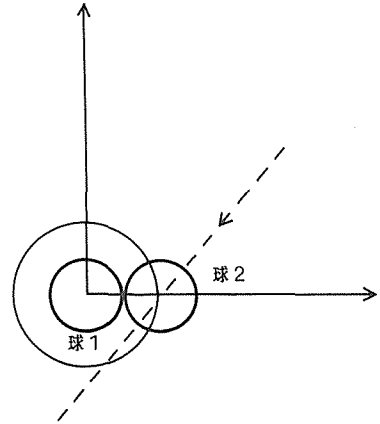


図5 球2が球1に衝突するのは、球2の軌道(点線でしめされている)が原点を中心とする直径 $2\sigma$ の球と交わる場合

衝突が起きるか起きないかは、図5のように原点を中心とする直径 $2\sigma$ の球面と原点に向かって飛んでくる剛体球の中心の軌跡が交わるか交わらないかによって決まる。原点に向かって

いる剛体球の初期座標を $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ 初速度を $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ とすると交点は次の4つの式を満たす $(x, y, z)$ で与えられる。

$$\begin{aligned} x^2 + y^2 + z^2 &= (2\sigma)^2 \\ x &= x_0 + v_x t \\ y &= y_0 + v_y t \\ z &= z_0 + v_z t \end{aligned} \tag{2.7}$$

この方程式を解いて $t$ の小さいほうを求めると

$$t = \frac{-\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{v} - \sqrt{(\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{v})^2 - (\mathbf{r}_0^2 - 4\sigma^2) v^2}}{v^2} \tag{2.8}$$

ここで

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \tag{2.9}$$

$$\mathbf{r}_0^2 = x_0^2 + y_0^2 + z_0^2 \tag{2.10}$$

衝突が起きるためには

$$D = (\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{v})^2 - (\mathbf{r}_0^2 - 4\sigma^2) v^2 \geq 0 \tag{2.11}$$

衝突による速度の変化は重心系を用いて求める。まず、もとの座標系における2つの剛体球の位置と速度をそれぞれ $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ とすると質量が等しいので重心 $\mathbf{R}$ の重心の速度 $\mathbf{V}$ は

$$\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) / 2 \tag{2.12}$$

$$\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2) / 2 \tag{2.13}$$

となる。衝突の前後で運動量が保存されるため  $\mathbf{V}$  は一定である。重心系での位置と速度をそれぞれ  $\mathbf{r}_{10}$ ,  $\mathbf{r}_{20}$ ,  $\mathbf{v}_{10}$ ,  $\mathbf{v}_{20}$  とおくと

$$\mathbf{r}_{10} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) / 2 \quad (2.14)$$

$$\mathbf{r}_{20} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{R} = -(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) / 2 = -\mathbf{r}_{10} \quad (2.15)$$

$$\mathbf{v}_{10} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{V} = (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) / 2 \quad (2.16)$$

$$\mathbf{v}_{20} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{V} = -(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) / 2 = -\mathbf{v}_{10} \quad (2.17)$$

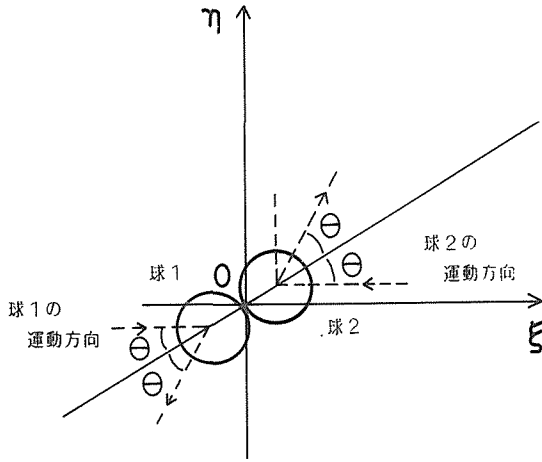


図6 二つの球が  $\xi$ - $\eta$  面内でおきる。点線は球の運動方向を示す。

したがって、衝突後も2つの剛体球は同じ速さで逆向きに進む。ここ衝突が完全に弾性的であるとすると、それぞれの剛体球の速さは衝突前後で等しくなる。速度の変化については、さらに座標軸を回転して図6に示すような座標系で考える。すなわち、衝突は  $\xi$ - $\eta$  平面の第3象限で起きるように  $(\xi, \eta, \zeta)$  軸を選ぶのである。座標系  $(\xi, \eta, \zeta)$  軸の決め方は次の通りである。まず  $\xi$  軸は球1の衝突前の速度の方向で決まる。すなわち

$$\mathbf{e}_\xi = (\mathbf{v}_{10x} \mathbf{e}_x + \mathbf{v}_{10y} \mathbf{e}_y + \mathbf{v}_{10z} \mathbf{e}_z) /$$

$v_{10}$

$$(2.18)$$

球1が正面衝突するときはこの軸を決める

だけでよいが、そうでない時つまり  $\mathbf{v}_{10} \times (-\mathbf{r}_{10}) \neq 0$  と時は

$$\mathbf{e}_\xi = \mathbf{v}_{10} \times (-\mathbf{r}_{10}) / |\mathbf{v}_{10} \times (-\mathbf{r}_{10})| \quad (2.19)$$

$$\mathbf{e}_\eta = \mathbf{e}_\xi \times \mathbf{e}_\zeta \quad (2.20)$$

座標系  $(\xi, \eta, \zeta)$  によって衝突後の速度を表すと

$$v_{10\xi}' = -v_{10\xi} \cos 2\theta \quad (2.21)$$

$$v_{10\eta}' = -v_{10\eta} \sin 2\theta \quad (2.22)$$

$$v_{20\xi}' = -v_{10\xi}' \quad (2.23)$$

$$v_{20\eta}' = -v_{10\eta}' \quad (2.24)$$

またここで

$$\cos \theta = 2\mathbf{r}_{20} \cdot \mathbf{e}_\eta / \sigma \quad (2.25)$$

球1のもとの座標系での衝突後の速度を  $\mathbf{v}_1'$  は

$$\mathbf{v}_1' = v_{10\xi}' \mathbf{e}_\xi + v_{10\eta}' \mathbf{e}_\eta + \mathbf{V} \quad (2.26)$$

これによってもとの座標系での衝突後の速度を求めることができる。

### 3. 動径分布関数

動径分布関数はここでは次のようにして求めた。位置  $\mathbf{r}$  に原子を見いだし、かつ位置  $\mathbf{r}'$  に原子を見いだす確率、二体分布関数は

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho(\mathbf{r}) \cdot \rho(\mathbf{r}') \cdot g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (3.1)$$

で表される。ここで  $\rho(\mathbf{r})$  は粒子の数密度、 $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  は相関関数である。 $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  を  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  の関数としてあらわしたとき、 $g(R)$  の動径分布関数とする。

粒子の分布が一様で等方的であれば

$$\rho(\mathbf{r}) = \text{一定} (\rho_0) \quad (3.2)$$

となるので(3.1)式は次式のようになる。

$$\rho^{(2)}(R) = \rho_0^2 \cdot g(R) \quad (3.3)$$

剛体球集団の動径分布関数を数値的に求めるため、次の2つのことを仮定する。すなわち剛体球の分布を剛体球の中心、すなわち点の分布として考え、動径成分の差分  $\Delta R$  を適当な大きさに決めたとき、 $R$  と  $R + \Delta R$  の間で  $g(R)$  は一定であるとする。この時、集団内で数個の剛体球の中心をかわるがわる原点とみて、 $R$  と  $R + \Delta R$  の間の球殻内にある点の数を数え平均したものを  $N(R)$  とおくと

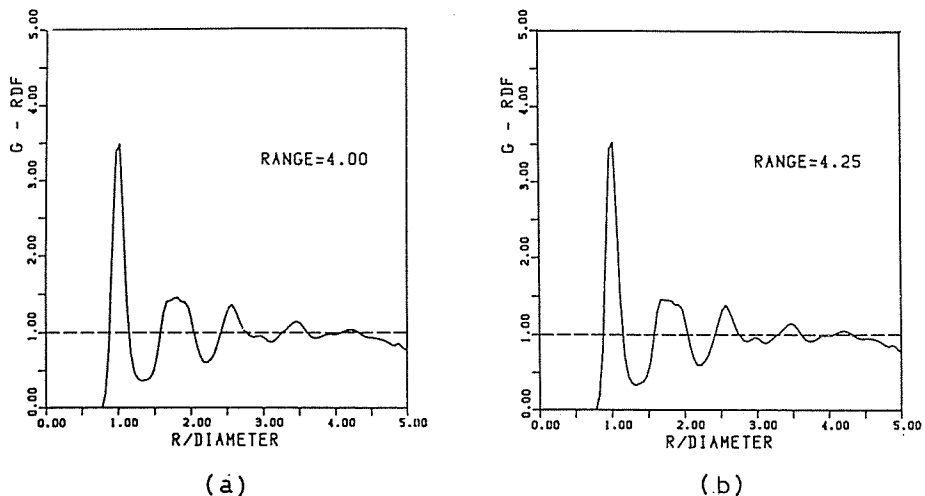
$$g(R) = N(R) / (4\pi R^2 \Delta R \cdot \rho_0) \quad (3.4)$$

となる。

## 結果と考察

### 1. 市川の方法

市川の方法によって  $K=2.0$  の1000個の剛体球からなる集団を作った。その結果充填率は63.4%となった。動径分布関数は何通りか求めてみた。図7に結果を示す。それによると平均を取る球の数が少なければ少ないほど第2ピークの分裂が大きくなっている。平均をとる球の数を少なく



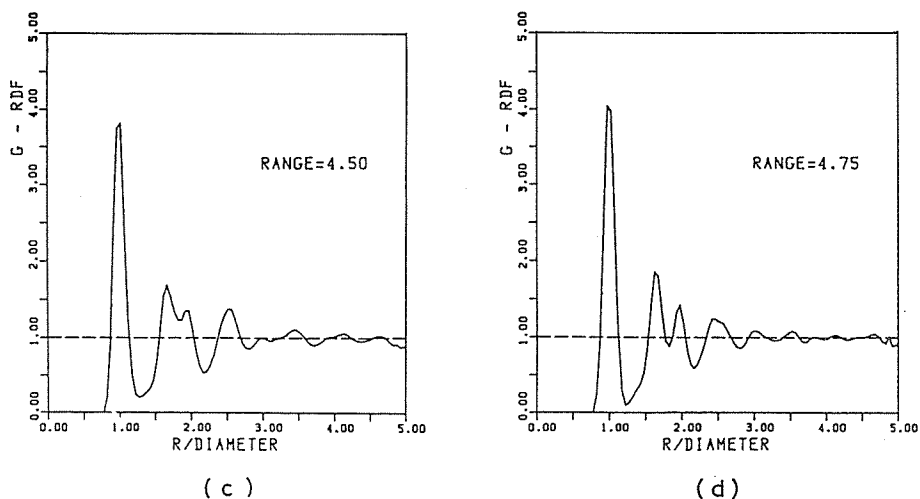


図7 市川の方法によって求めたAlのDRP構造の動径分布関数。表面の影響を除くために剛体球の集団の表面からRANGE以上内側にある原子についてのみ求めた。

すると、これらの球は初期集団である正四面体付近の球に限られて行くことを考えると、これは第2ピーク分裂と正四面体構造の間に何らかの関連性があることを意味している。この方法によれば平均をとる原子数を多くすればするほど第2ピークの分裂がみられなくなるわけであり、実際の非晶質構造を説明できなくなることになる。これは明らかにおかしい。この欠点はあとで行った緩和によって除かれた。尚、このことは実際の非晶質構造が理想的なDRP構造ではなく短範囲の規則性を持っていることを意味している。

## 2. 緩和

緩和は、市川の方法によって  $K=2.0$  の条件で配置された1000個の剛体球の集団から、35個の剛体球を含む立方体状の集団を切り出し、これを単位として作製した周期的境界条件に従う27個の立方体集団からなる集団を用いて行った。運動方程式を差分近似で解くときの  $\Delta t$  については、

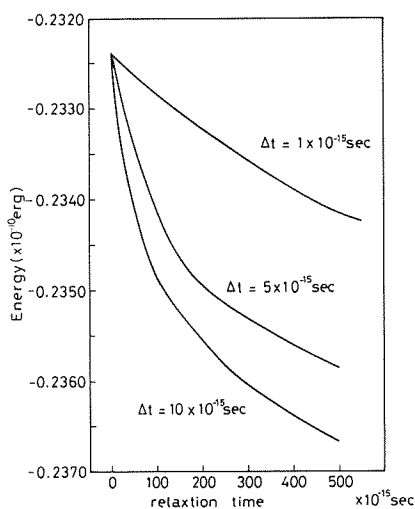


図8 緩和時間と系全体のポテンシャルエネルギーの関係。運動エネルギーはこの  $10^{-4}$  以下である

$1.0 \times 10^{-15}$ (秒),  $5.0 \times 10^{-15}$ (秒),  $10.0 \times 10^{-15}$ (秒)の場合について計算した。また計算はどの  $\Delta t$  に関しても step 数  $\times \Delta t$  が  $5.0 \times 10^{13}$  秒間以上になるまで行った。緩和時間 (step 数  $\times \Delta t$ ) と系のポテンシャルエネルギーの関係を図8に、求めた動径分布関数を図9—図11に示す。 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-15}$  の時は547 stepの計算を行ったが、衝突はあまり起きていない。434 step目に系として初めて衝突が起こりその後も1 step当りの衝突回数はたかだか7~15回程度である。また他の2つの  $\Delta t$  の場合に比べて、緩和時間 (step 数  $\times \Delta t$ ) に対する系のポテンシャルエネルギーの減少は小さく、547 step緩和後の動径分布関数(RDF)の第2ピーク分裂も小さい。 $\Delta t = 5 \times 10^{-15}$  の場合は100 stepの計算を行った。衝突の頻度はstepを追うごとに大きくなり、後半は1 step当り70~120回程度起こっている。系のポテンシャルエネルギーの減少は  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-15}$  の場合に比べるとかなり大きい。RDFの第2ピークに関して

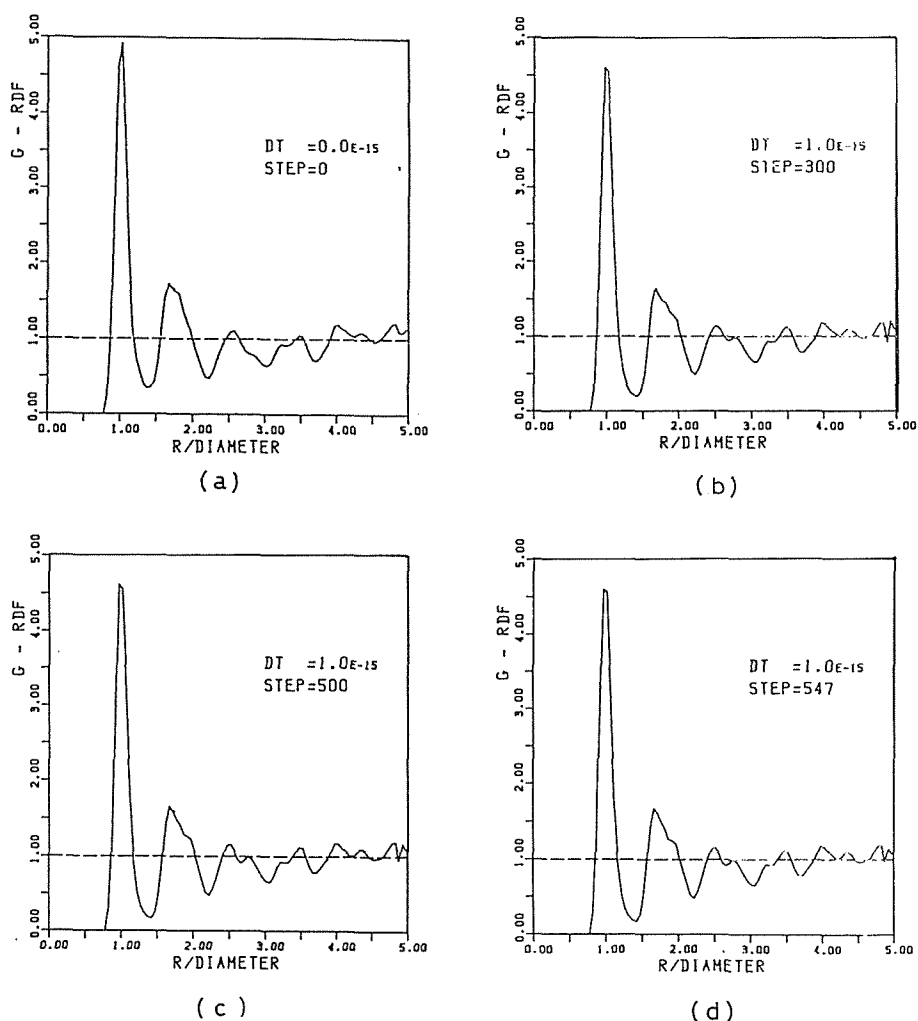


図9 時間きざみ  $\Delta t$  を  $1.0 \times 10^{-15}$  sec とし緩和して得られた動径分布関数。a, b, c, d はそれぞれ 0 step, 300 step, 500 step, 543 step の計算結果

は 48 step 緩和したものと 100 step 緩和したものにほとんど差はない。 $\Delta t = 10.0 \times 10^{-15}$  に関しては 50 step 緩和したが、 $\Delta t = 5.0 \times 10^{-15}$  の時に現れた特徴がいつそうはつきりとでてくる。衝突は 1 step 当り 80~150 回程度起こり、系のポテンシャルエネルギーの減少は  $\Delta t = 5.0 \times 10^{-15}$  の時よりさらに急激になっている。

結局 3 つの  $\Delta t$  を用いて緩和時間  $5 = 10^{-13}$  秒に相当する緩和をしたが、系のポテンシャルエネルギーは  $\Delta t$  が大きいほど緩和時間に対して急速に小さくなっている。このことは差分方程式に用いた  $\Delta t$  が運動方程式を解く上で十分良い近似ではないことを示している。しかしながらこのことは、良い非晶質構造模型を得るためには運動方程式を良い近似で解くことが絶対必要であることを示しているわけではない。RDF の形と系のポテンシャルエネルギーとを見比べてみると、ポテンシャルエネルギーがある程度以下になれば(この集団では  $-0.2350 \times 10^{-10}$  erg 程度)それ以後 RDF はほとんど変化していない。しかしたとえ  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-15}$ , 547 step の場合などはただこの値よりポテンシャルエネルギーが大きくなり第 2 ピークの分裂はあまい。 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-15}$  で 500 step

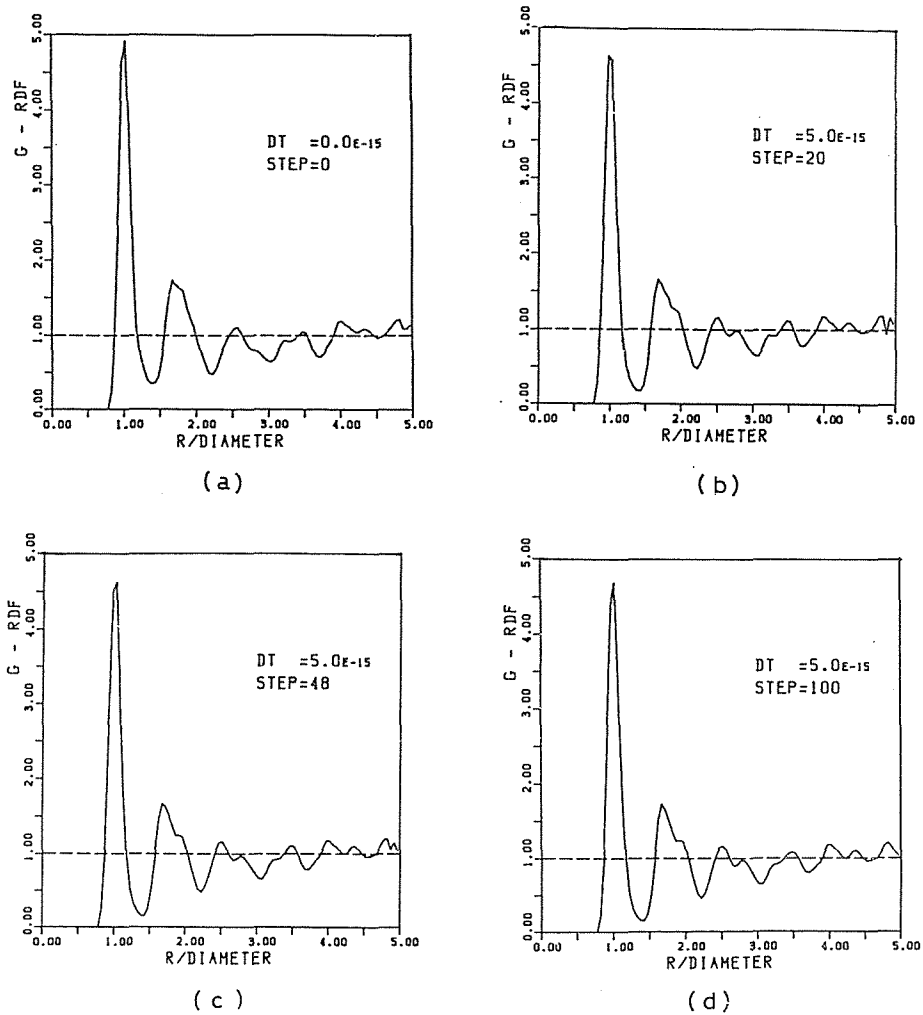


図10 時間きざみ  $\Delta t$  を  $5.0 \times 10^{-15}$  sec とし緩和して得られた動径分布関数。a, b, c, d はそれぞれ 0 step, 20 step, 48 step, 100 step の計算結果

緩和したものと、 $\Delta t = 5.0 \times 10^{-15}$  で 20 step 緩和したものの系のポテンシャルエネルギーは、緩和による系のポテンシャルエネルギーの変化量を基準としてみるとほとんど等しく、RDF のグラフがぴったりと重なる。つまり  $\Delta t$  をどのように選んでも、系のポテンシャルエネルギーが同じになれば同じ RDF が得られる。市川の方法によって作った DRP 構造は実際の非晶質の構造つまり第 2 ピークの分裂を十分に表せなかったが、緩和すること、すなわち系のポテンシャルエネルギーを小さくすることによって、RDF の第 2 ピークの分裂が得られた。つまりより実際に近いと考えられる構造モデルを作ることができた。

最後に、実験値及び何人かの研究者たちによって求められた非晶質構造モデルと本研究結果とを比較しておく(表 1)。本研究の結果は蒸着非晶質 Fe の実験値とほぼ同一の  $r_2/r_1$ ,  $r_3/r_1$ ,  $r_4/r_1$  を与えている。おそらくどのようなポテンシャルを使おうとも、あるいはまたどのような金属であろうとも、単一金属元素からなる非晶質の構造はほぼ同じようになるものと考えられる。

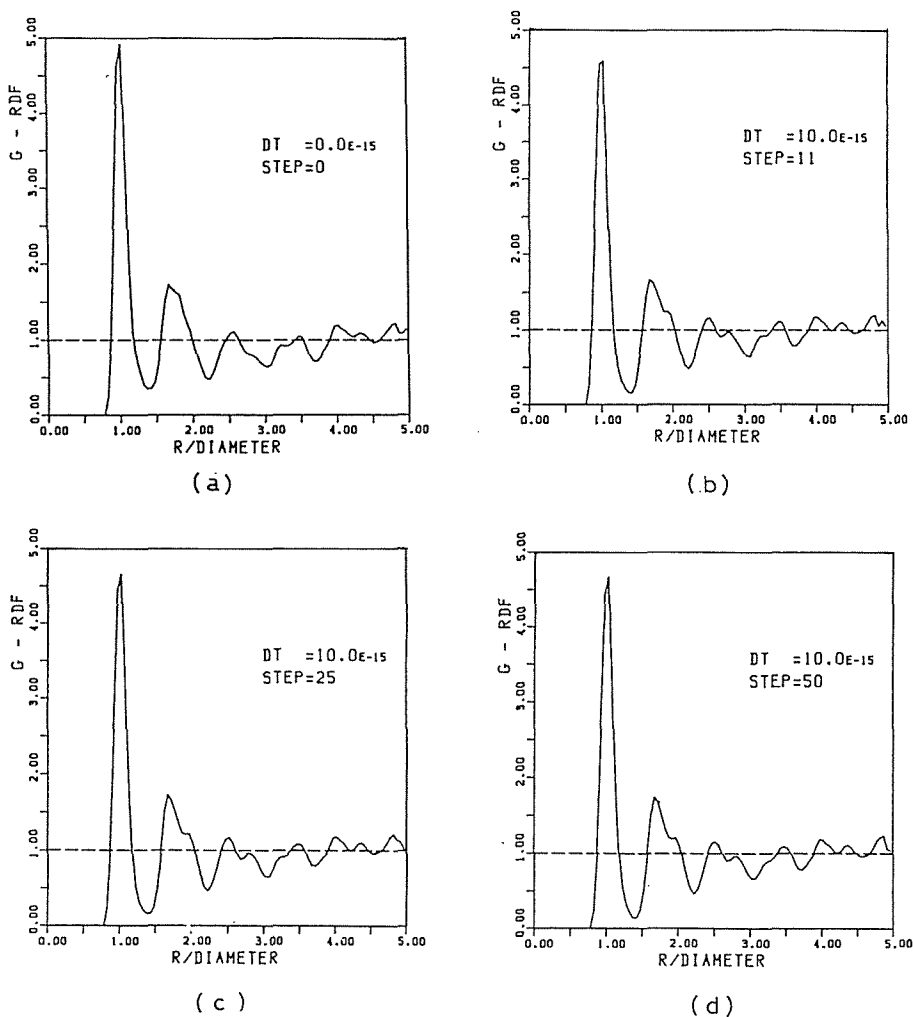


図 11 時間きざみ  $\Delta t$  を  $10.0 \times 10^{-15}$  sec とし て緩和して得られた動径分布関数。a, b, c, d はそれぞれ 0 step, 11 step, 20 step, 50 step の計算結果

表 1 非晶質構造のモデルの比較

|                              | $r_2/r_1$ | $r_3/r_1$ | 充填率   |
|------------------------------|-----------|-----------|-------|
| Fe 蒸着非晶質膜 <sup>(6)</sup>     | 1.67      | 1.96      |       |
| 非晶質構造モデル                     |           |           |       |
| Finney (1970) <sup>(6)</sup> | 1.73      | 2.00      | 0.637 |
| Sadoc (1973) <sup>(7)</sup>  | 1.65      | 2.00      | 0.52  |
| 市川 <sup>(2)</sup>            | 1.66      | 1.99      | 0.50  |
| 山本ら <sup>(3)</sup>           | 1.66      | 1.97      | 0.66  |
| 本研究                          |           |           |       |
| 緩和前                          | 1.66      | 2.00      | 0.634 |
| 緩和後                          | 1.68      | 1.99      | —     |

$r_1, r_2, r_3$  は第一、第二、第三ピークに対応する原子間距離

## 謝 辞

本研究に際して援助をいただいた固体電子工学講座の諸氏に御礼を申し上げます。

## 文 献

- 1) J. D. Bernal: Nature (London) 183, (1959) p. 141: ibid 185, (1960) p. 68.
- 2) T. Ichikawa: phys. stat. sol. a29, (1975) p. 293.
- 3) R. Yamamoto and M. Doyama: J. Phys. F9, (1979) p. 617.
- 4) 橋本 稔: 修士論文(東京大学), 1980年.
- 5) T. Ichikawa: phys. stat. sol. a19, (1973) p. 707.
- 6) J. L. Finney: Proc. Roy. Soc. Ser. A319, (1970) p.479.
- 7) J. F. Sadoc, J. Dixmier and A. Gunier: J. Noncryst. Solids 12, (1973) p. 46.