稠密不規則構造の 2 次元モデル

1　はじめに

金属非晶質の原子集合モデルとして，稠密不規則（Dense Random Packing - 以下 DRP）構造モデルが提案されている．これは「理想非晶質」モデルの試みとしても重要である．3 次元では可視化し難いので，2 次元モデルからはじめるのが適切である．3 次元においては同一サイズの剛体球によって詰め込みの無秩序性が実現できるが，2 次元詰め込みにおける円板では 2 種類以上のサイズでなければならない．1 種類では周期構造の三角格子が得られるだけである．

2　DRP モデル生成のアルゴリズム

半径が R_A, R_B の 2 種類の大きさの円板 A,B のいずれかをランダムに選び互いに接してくっつけるプロセスを考える．平面内の点をデカルト座標 (x, y) で表す．j 番目の円板の半径を R_j，中心座標を $\boldsymbol{r}_j = (x_j, y_j)$ とする．最初，2 個の円板が $\boldsymbol{r}_1 = (-R_1, 0)$ および $\boldsymbol{r}_2 = (R_2, 0)$ にあるとし，これらの円板をそれぞれS_1，S_2 としよう．3 番目の円板は図 1 に示すように，S_1 と S_2 の接点における凹みの部分の点線で示された円のいずれかである．これらの円の中心座標 $\boldsymbol{r}$ は次式から得られる．

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_1| = R_1 + R_A \quad \text{or} \quad R_1 + R_B, \tag{1}$$

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_2| = R_2 + R_A \quad \text{or} \quad R_2 + R_B. \tag{2}$$

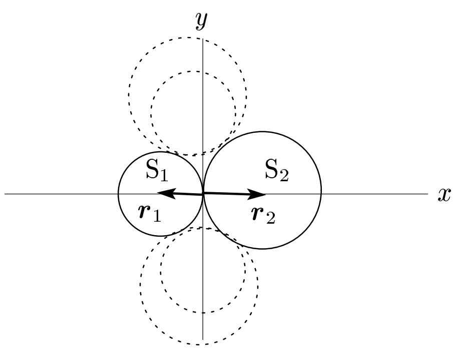


図 1: DRP 生成の初期条件

選ばれた第 3 番目の円板 S_3 によってその凹みには新たな円板をくっつけることができなくなる．これはあたかもポケットが一杯になったように喩えることができることから，この凹みをポケットと呼ぶことにする．すなわち，第 3 番目の円板をくっつけると 2 個のポケットのうち 1 個が消える．ところが，3 番目が追加されたので新しくポケットが現れることになる．1 つのポケットには半径 R_A，R_B いずれか 1 つの円板が入り得る．

円板を j 個くっつけた時点において，次にくっつけることが可能な円の中心座標を，A に対しては $\boldsymbol{r}_{A,1}, \boldsymbol{r}_{A,2}, \ldots, \boldsymbol{r}_{A,j_A}$，B に対して $\boldsymbol{r}_{B,1}, \boldsymbol{r}_{B,2}, \ldots, \boldsymbol{r}_{B,j_B}$ とする．これらの中から１つの座標をランダムに選び S_{j+1} とし，消すべきポケットおよび現れるポケットを考慮すれば，さらに円板をくっつけることができる．円板 S_{j+1} の出現によって消される円の中心座標の条件は

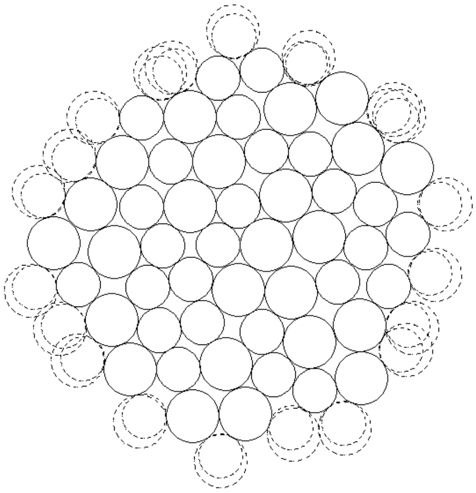
$$
\begin{aligned}
& |\boldsymbol{r}_{j+1} - \boldsymbol{r}_{A,k}| < R_{j+1} + R_A,\ (k = 1, 2, \ldots, j_A), && (3)\\
\text{or}\quad & |\boldsymbol{r}_{j+1} - \boldsymbol{r}_{B,k}| < R_{j+1} + R_B,\ (k = 1, 2, \ldots, j_B). && (4)
\end{aligned}
$$

円板 S_{j+1} によって現れるポケットにおける円の中心座標 $\boldsymbol{r}$ の条件は

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{j+1}| = R_{j+1} + R_A \quad \text{and} \quad |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_k| \geq R_A + R_k,\ (k = 1, 2, \ldots, j), \tag{5}$$

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{j+1}| = R_{j+1} + R_B \quad \text{and} \quad |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_k| \geq R_B + R_k,\ (k = 1, 2, \ldots, j). \tag{6}$$

3　DRP モデルの特徴



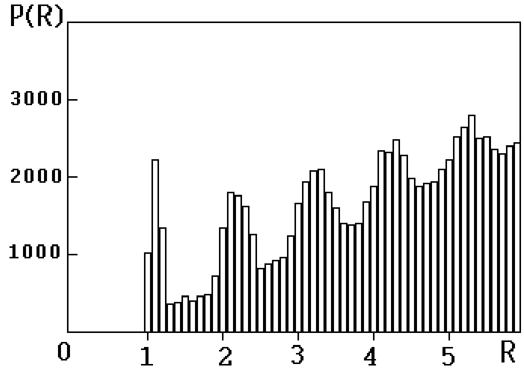


図 3: 1000 個からなる 2 次元 DRP の動径分布

図 2: 2 種類の円板 50 個からなる DRP モデル

半径の比が 1.2 の 2 種類の円板から無秩序に 50 個選び作成した円板の集合を図 2 に示す．外側の点線の円は 51 番目に選択可能なものを示している．任意の円板は周囲の約 5 個の円板と接触していることがわかる．接触円板間の距離は $2R_A$, $2R_B$, $R_A + R_B$ の 3 種類である．全体の集合状態は無秩序であるが近接秩序がある．これが非晶質物質における原子配列の特徴である．任意の円板のペアー間の距離 R についての動径分布関数 $P(R)$ が 1000 個の集合について図 3 に示されている．これは半径が $R_A = 0.5$, $R_B = 0.6$ の円板から得られたものである．近接ペアー間の距離, 1.0, 1.1 ,1.2 の各度数と集合の外周のペアーが半減することを考慮すると，円板の周囲の近接ペアー数 4.9 が得られる．