

重力下の剛体球系結晶中の安定な積層不整の複合構造

(徳島大工) 森篤史、小林正裕、鈴木良尚

Zhu *et al.* [1]は、重力によりコロイド結晶における積層欠陥が制御されることを示している。同様な結果は Kegel and Dhont [2]によっても得られている。ところが、[1]では rhcp (random hexagonal close pack)と fcc の混合状態となっており、[2]では faulted twinned fcc だと報告されている。前者では fcc の割合が 0.5 程度であるのに対し、後者ではそれは 0.8 弱である。我々はモンテカルロ (MC) シミュレーションによって、欠陥を多く含んだ領域が欠陥の少ない領域へ変態することを見出している[3]。更に、欠陥消失機構についても解釈を与えている[4]。[1]と[2]の結果が異なることから、報告されている状態は準安定状態の一つであり、また、MC シミュレーションのデモンストレーション[3]も準安定状態への一つの遷移過程についてであろう。また、[1][2]では、重力下において積層不整が完全に消失していない。今回は、これらの問題に関連して、重力下で安定に存在する積層不整の複合構造について報告する。

剛体球の直径を σ 、質量を m 、重力加速度を g として、重力数 $g^*=mg\sigma/k_B T$ を定義する。 g^* を 2×10^5 MC サイクル毎に 0.1 ずつ段階的に増加させた。Fig.1 は粒子数 1664 個のシミュレーションの $g^*=1.5$ のときのスナップショットである。図に見られるのは、2 層からなる双晶帯である。双晶帯の端は、ショックレーの部分転位が 3 個連続したもので終端されている。この構造は、単一の積層欠陥のように部分転位のすべり (glide) によって消失するようなことはなく、重力下においても比較的安定に存在する。

[1] J. Zhu *et al.*, Nature **387** (1997) 883.

[2] W. K. Kegel and J. K. Dhont, J. Chem. Phys. **112** (2000) 3441.

[3] A. Mori *et al.*, J. Chem. Phys. **124** (2006) 174507.

[4] A. Mori *et al.*, submitted (cond-mat/0606657).

もりあつし、こばやしまさひろ、すずきよしひさ

徳島大学・工学部、光応用工学科、TEL: 088-656-9417 e-mail: mori@opt.tokushima-u.ac.jp

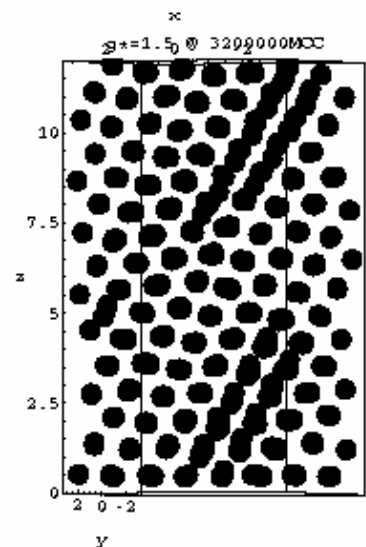


Fig. 1: Snapshot of 1664 particle system at $g^*=1.5$ (3.2×10^5 th MC cycle). Twin band made of two layers are seen.

Sessile structure of complex of stacking disorders in hard-sphere crystal under gravity

A. Mori, M. Kobayashi, and Y. Suzuki (Univ. Tokushima, mori@opt.tokushima-u.ac.jp)

We have performed a Monte Carlo simulation of hard spheres under gravity. The strength of the gravity has been increased stepwise as similarly as a stepwise control of the rotation rate in a centrifugal experiment. We already reported the improvement of crystallinity, as well as the enhancement of crystallization, due to gravity; disappearance of a stacking fault was demonstrated. Here, we report on the sessile structures of staking disorders, which have remained under gravity. Those structures are in contrast to the single stacking faults that disappear via glide of the Shockley partial dislocation. Figure 1 is one of sessile structure; we see twin bands made of two layers. The sides of the bands are terminated by three Shockley partial dislocations. We have found that some stacking disorders easily disappear under gravity and some complex structures do not. An account is given for experimental fact that the stacking disorders do not disappear completely under gravity.