一次元準結晶の回折図形の解釈

東北大学　理学部　　田中通義　鈴木すすむ

準結晶は新らしい概念ではあるが，準結晶が従来の結晶とそれ程かけはなれたものとも思われない。一次元準結晶からの回折図形が今までの結晶学での知識で近似的に説明できることを示す。

図3(c) は一次元準結晶 $x_n = n + \frac{1}{\rho}\left[\frac{n}{\tau}\right]$，$\rho = \tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ からの回折図形である。長周期規則合金の回折図形に通じている人であれば，その回折図形が準結からのそれに類似していることに気がつくはずである。図1に CuAu 合金の構造とその回折図形を示す。(a)に規則格子の単位胞を示す。(b)にその回折図形を示す。大きい白丸は Cu と Au が disorder のときにすでにあらわれる反射で基本格子反射という。小さい黒丸は Cu と Au が order して(a)のように配列したときにはじめて現われる反射で規則格子反射という。(c)はこの規則格子がMをつづくと逆位相境界（変位ベクトル $\frac{b+c}{2}$）が入りMコの規則格子がつづく。全体として2M の周期ができる。その結果あらわれる回折図形を(d)に示す。すなわち，(b)での規則格子反射は消え，分裂し(d)のようになる。となり合う回折点の間の距離は $\frac{1}{M}$ に比例する。図では2次の反射までしか画いていないが，高次反射の出方は逆位相境界付近での原子の配列に依存する。Au と Cu が一つの正弦関数でかけるような占め方をすれば，一次の反射しかでない。図3(c)の 3, 5, 8（フィボナッチ数）を基本格子反射と考えると，それらの半分の距離のところに仮想的に規則格子反射を考え，それが分裂した長周期規則格子反射がみえていると云える。簡単のために，$x_n = n + \frac{1}{\rho}\left[\frac{n}{\tau}\right]$ で $\rho = \tau = 2$ の場合に図1の考えを適用する。図2(a)は disorder，(b)は order 相，ここで $\frac{5}{2}$ おきに逆位相境界を入れる。その結果，黒丸に注目すると $\rho = \tau = 2$ から期待される LSLS…（$L = 1.5$, $S = 1$）の並びが得られた。それぞれから期待される回折図形もつけた。次に，図3(c)の 3，5，8 にあらわれる peak は正確には整数ではない。これを従来の結晶学で理解するには，二つのコメンシュレートな構造の不規則かつ一様な混合を考える（Fujiwara: J. Phys. Soc. Japan 12 (1957) 7）。図3(b)と(d)は $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ の近似値 $\frac{8}{5}$，$\frac{13}{8}$ の場合の回折図形である。表1の3での周期はX，5での周期はYである。これらの不規則かつ一様な混合として，$\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ (4)の並びを作ることができる。混合比は無理数になるであろう。近似としてのコメンシュレート構造（表1の3と5）からの回折図形，図3(b)と(d)が，すでに図3(c)とかなりよく似た回折図形を示していることに注目しよう。ただし，図3(b)では図形は4の位置に関して対称，(d)では $6.5 = \frac{13}{2}$ の位置に関して対称になっている。これらの混合によって作られる図3(c)では，このような対称性は消失している。表1に示したように，$\tau = \frac{8}{5}$ (3) の周期は τ^5 であり，$\tau = \frac{13}{8}$ (5) の周期は τ^6 である。したがって，τの冪でインフレーションできる $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ の構造は，$\tau = \frac{8}{5}$ と $\tau = \frac{13}{8}$ の混合でかける。興味あることとして $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ の一つの近似値である $\tau = \frac{5}{3}$ は循環小数 1.66… となる。この場合もコメンシュレート構造にはならず，LSLLS, LLS, LS（τ^4, τ^3, τ^2）の複雑な混合になる。インフレーションのことはさておき，一考に値するかもしれない。

図1

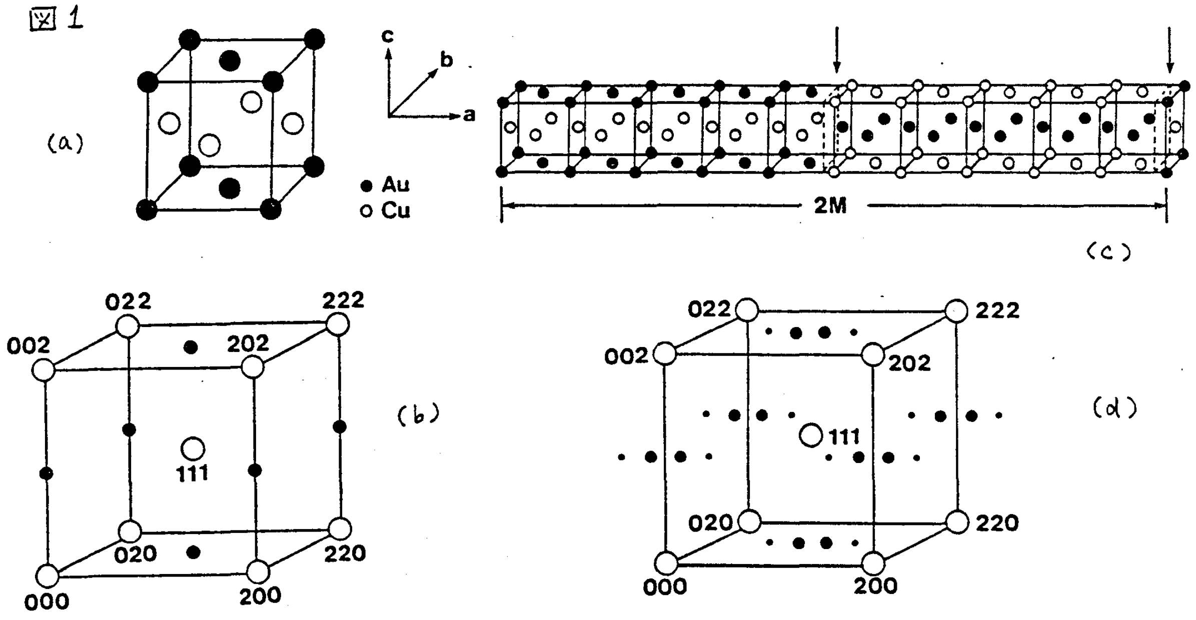


図2

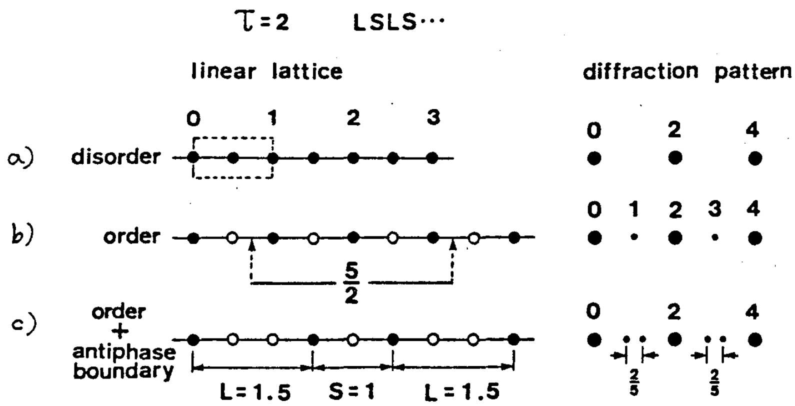
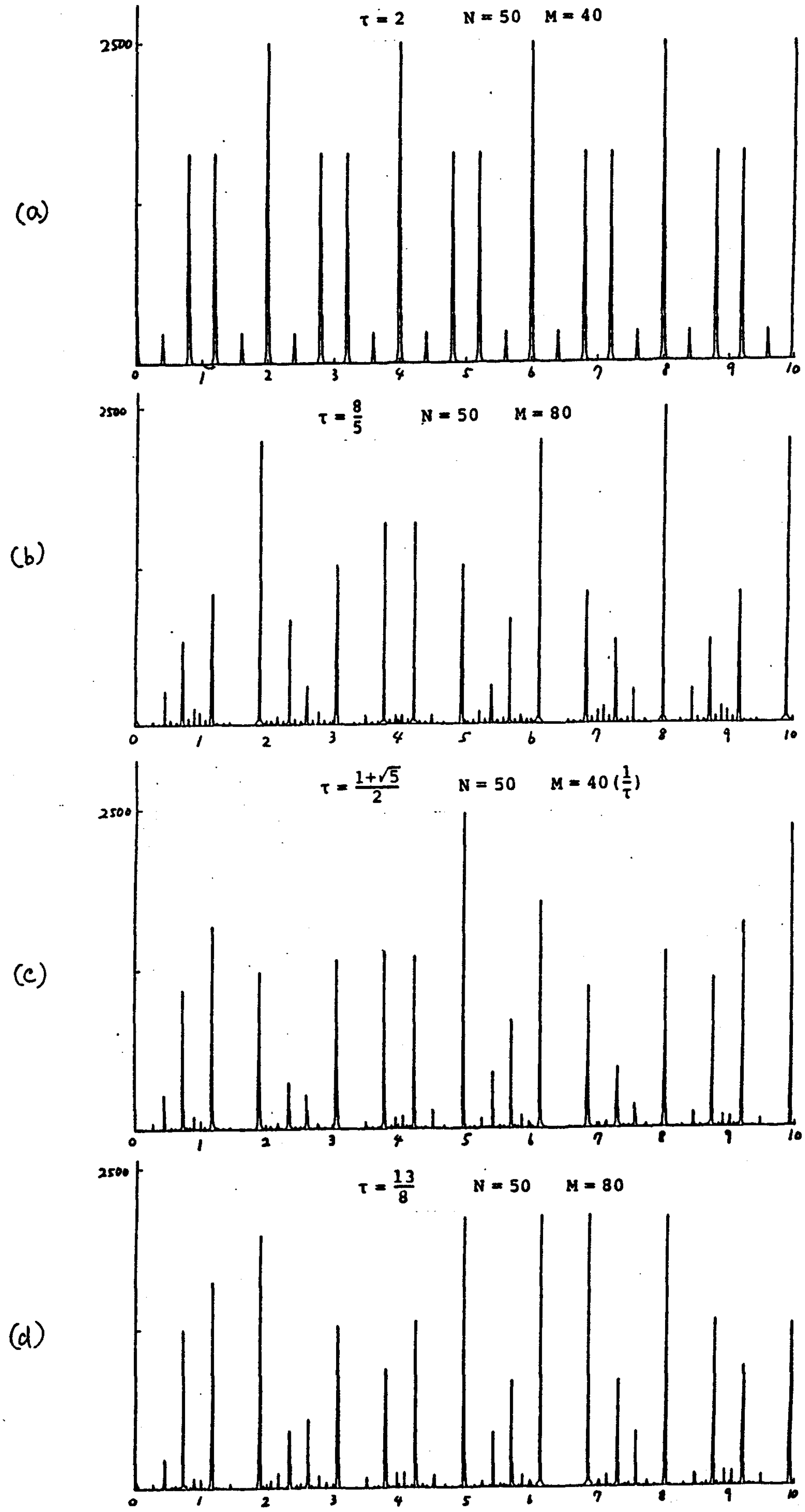


表1

$$x_n = n + \frac{1}{\rho}\left[\frac{n}{\tau}\right]$$

	τ	Sequence
1.	$\frac{3}{2} = 1.5$	LLS
2.	2	LS
3.	$\frac{8}{5} = 1.6$	LSLLSLLS ≡ X = τ^5
4.	$\frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1.618\cdots$	YYXYYXYXYYXYY··· irregular-uniform mixing of Y and X
5.	$\frac{13}{8} = 1.625$	LSLLSLSLLSLLS ≡ Y = τ^6
6.	$\frac{5}{3} = 1.66\cdots$	LSLLS, LLS, LS

図 3


(a)
τ = 2 N = 50 M = 40
2500
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
(b)
τ = 8/5 N = 50 M = 80
2500
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
(c)
τ = (1+√5)/2 N = 50 M = 40 (1/τ)
2500
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
(d)
τ = 13/8 N = 50 M = 80
2500
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10