

準結晶の構造について.

筑波大学理工学系 11、111 泰

準結晶については、前回(86年3月)の研究会で紹介を行ったが、発端となった Shechtman らの実験の論文¹⁾以来、おそらく40編程の論文が出ている。しかし、そのうちの半数は preprint として流布されてあり、日本での情報は一テン不遅れしているのかともれない。

日本でも、物性研・竹内・本村ら²⁾、東北大金研・平賀ら³⁾による実験が行われており、私も、幸い、Penrose 変換の3次元版を発見することができ⁴⁾、彼らの実験の解釈にも役立っているようである。

従来の結晶学が並進対称性(周期性)を最重視した体系であったのに対して、周期性の代りに、方向秩序や自己相似性をもった秩序をもとり入れた、空間秩序の体系化が必要となっている。現在、これにふえる決定版はないが、高次元結晶の低次元への射影でみよとか、数組の平行線群を描いたときに出来る二直線の交点を菱形に置き換える(2次元の場合)とか、いろいろな方法で、かなり普遍的に準結晶状のものを導き出すことができる。自己相似性は必ずしも必要ではない。

これらの考えは、一般的な体系を念頭に置いて、条件を緩め...このようなものも準結晶的である、と枠をなげる方向の議論といえよう。

一方、高度の対称性をどれだけ共存させようか、最も理想的な準結晶構造は何かと探る別の方向がありうる。私が試みるのはこの方向の研究であり、2次元の場合の Penrose の論理を、3次元に適用するつもりは、いわば、立派なスルに挑戦した。

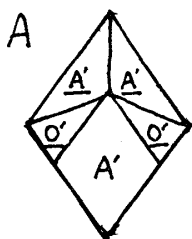
以下、その要点を簡単に紹介する。

Penrose の論理、Penrose 変換.

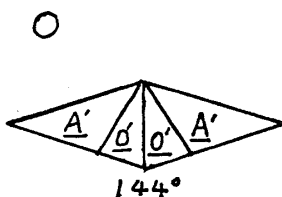
それらだけを使って空間を埋めつくせるような、複数種類の基本図形(タイル)に対して、それらの相似縮小版のみによる絵柄を与える。一枚のタイルの絵柄には縮小図形のはんば⁵⁾があってもよいが、タイル貼りの際に必ず完成されなければならない。もしこのような絵柄タイルがあれば、絵柄全体を作り出す紋様は、タイル貼り自体の紋様と其面の性質をもつ。絵柄の縮小図形がタイルの大きさになるまで拡大すれば、あるタイル貼り構造から、他の、一より広い領域のタイル貼り構造への変換になる。この変換は、各タイルの絵柄で規定されているので、このような性質の絵柄を P Penrose 変換と呼べる。Penrose 変換を無限回繰り返せば、一つの無限紋様に収束することがある。この無限紋様を Penrose tiling と呼ぶ。

2次元のタイルは、頂角の一つが 72° の菱形 A (Acute 鋭角の意) と 144° の星形 O (Obtuse 鈍角の意) の二種類である。その縮小版を A' , O' とすると、 A は 210分

の A' と $\frac{1}{10}$ 分の O' で、 O は それぞれ $\frac{1}{10}$ 分の A' と O' で 全柄を占める。残りのタイルと半分ずつ持ちよ、て 1 個の A' や O' を完成させる部分もある。



72° (A', O' は A, O の半分)



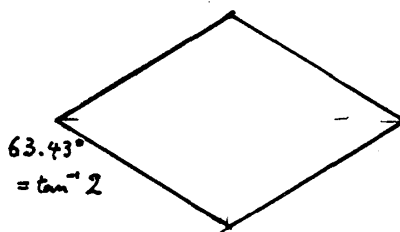
左図の A, O それぞれの 上側の 2 枚と 下側の 2 枚は、扱いが異なっていることに注意する必要がある。この差異のために、ほんの 2 枚の図形が残る。全て図形が完成するまでにタイル貼りは制限を受ける。

また、2次元の場合には、厳密にいうと紋様は 4 通りの変位とし、使い意味での極限図形ではない。しかし、変位の前後の紋様を比較する際に、対応させる点について条件をゆめめるならば、不変な紋様になっている。Fractal の場合には、海岸線のようなものと自己相似と呼ぶ以上に、はるかに高度の (統計的に) 自己相似になっている。

3次元の場合

3次元タイルは右図の星形を面にもつ。2枚組の平行6面体 A_6 と O_6 である。

鋭角の頂角が $\tan^{-1} 2 = 63.43^\circ$ で、1辺を 1 としたとき、対角線の長さは、 $\sqrt{2+2/\sqrt{5}} = 1.701$ 及び $\sqrt{2-2/\sqrt{5}} = 1.052$ で、これらの比が黄金比



$\tau = (\sqrt{5}+1)/2 = 0.618$ になっている。 $\tan^{-1} 2$ は、正 20 面体の 12 頂点に向けて中心からベクトルを出るときに出来る中心角である。このときとさう一対の角はこの角の補角 116.57° である。これらの 12 ベクトルから 3 本選んでとることでできる平行6面体は 2 種類あり、3 つの鋭角頂点のうちの 1 点に含めたのが A_6 、鋭角頂点から 1 辺を引いたのが O_6 である。このとき、相似比 $\tau^3 = 2+\sqrt{5}$ の Penrose 変換が存在する。 τ^{-3} の縮小版 A'_6, O'_6 を用いて、 A_6 は 55 個分の A'_6 と 34 個分の O'_6 、 O_6 は 34 個分の A'_6 と 21 個分の O'_6 で立体的全柄をつけることができる。

3次元のときの特性を列挙すると、

- 1) 基本骨格のみ一意に決定するが、それ以外の部分には自由度が残る。この自由度は、対称性の余りによる内部構造を問わず外観の対称性が高い局所部分が存在すること。2) の性質とも関連する。
- 2) A_6 と O_6 と、どの面も変位の基本骨格をもつ。これは、2次元の場合のタイル貼りについての観測から導き出されたこと。どの面とどの面も合わせることができる。
- 3) 各頂点は、 A_6 の鋭角頂点のみが 20 個集った構造になっている。

O_6 の対角線は $\sqrt{3-6/5} = 0.563$ で、かなり短い。各頂点にのみ粒子がいて、粒子間隔が1であるところからは許されない距離である。しかし、幸いにも、Al-Mn 合金の組成比は、Mn がほぼ 20 at.% である。A₆ は Al₄Mn、O₆ は Al₂Mn である。A₆ と O₆ の混合比が黄金比。つまり $\tau^{-1} : \tau^{-2} = 0.618 : 0.382$ となる。21.7% になる。このとき、平行六面体頂点に Mn があり、稜や細胞内は Al がいるのである。Mn 間距離として 0.563 は短くても、Al-Mn の間隔と比べて無理はない。構造をも含めて果敢との比較は現在のとおりよい。仮に Al-Mn 系がこの構造であるとしても、一帯理想的な半結晶構造と考へられる。

Bloch 定理や, Bragg-Lane 反折を考へると、現在の回折図は周期性及び前記と一致している。今後、周期性と前記といふ記述が一致することはない。周期性をもつて、長距離の方向秩序や自己相似性をもつ場合について、Bloch 定理に代る波の一般論や、このような秩序へ移行する際に、Goldstone mode に代るものは何か? など興味深い問題が多い。問題は当然、形や構造の問題に付くのではない。しかし、形や構造を取り上げて解決しないことも明らかである。

- 1) D. Shechtman et al. Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 1951.
- 2) K. Kimura et al. J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3217.
- 3) K. Hiraga et al. Sci. Rep. RITU. 32 (1985) 309. J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 4077.
- 4) T. Ogawa, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3205.

なお、3次元 Penrose 定理の解説は、数学会誌 86 年 1.2 月号連載、及び ^{日本}金属学会報 86 年 2 月号に書いた(小川)。半結晶についての解説は、固体物理 20 (1985) 897 (木村・竹内)。日本物理学会報 40 (1985) 961 (竹内)。物性研究奨励予選(液体の構造と電子物性)研究報告 (木村・竹内)、日本金属学会報 1986 年 2 月号に発表。などがある。

この機会に昨年の報告のミスと訂正しておきたい。(物性研究 44 (1985) no. 4, 号末 p. 22)

p. 21 ↑ 4 「同じ星形 A, O. → 「対角線の長さの比が黄金比の星形」

図 2a A と O が反対になる。

図 2b. Dant と Kite が反対になる。