

準結晶のモデルとその回折像

京都大学工学部 石原慶一 新宮秀夫

準結晶の構造のモデルとして3次元ペンローズ模様(3DPT)や20面体最密充填構造(DPI)が提案されている。3DPTは6次元空間からの投影により作ることができるのでその構造因子を比較的簡単に計算することができる。我々は3DPTの基本構造となる2種類の菱面体の頂点、稜心、面心、体心に原子が存在する場合の構造因子を計算した。又、その結果から得られる粉末回折図形と報告されている実験で求められた粉末回折図形と比較検討した。

3DPTを6次元単純立方格子からの投影により作る際、投影するときの制限空間は菱形30面体である。ところが菱面体の頂点以外に原子を置いたときは、6次元超立方格子の対応する所に原子を置くだけでなく、例えば稜心のときその稜の両端が菱形30面体内に入っている必要がある。そのため頂点以外の位置では制限空間を変える必要があり、その制限空間は稜心のときは菱形20面体、面心のときは菱形12面体、体心のときは菱面体となる。この構造因子をもとめるためにフーリエ変換する場合、これらの制限空間内で体積積分する必要がある。しかしこれらの体積空間はいずれも2種類の菱面体からできており菱面体の積分を加え合わせる事により積分を解析的に計算することができる。図1に計算された構造因子を元に描かれた粉末回折図形を示す(1)。

Al系合金の準結晶はこれまでにその粉末回折図形から大別してAl-Mnに代表されるAl-遷移金属系とAl-Li-CuなどのAl-アルカリ(土類)金属系に分けることができる。Al-遷移金属系では頂点だけに原子をおき、 a (菱面体の一片の長さ) $=0.46\text{ nm}$ とした場合、ある程度計算結果と一致するが、密度等を考慮した場合、うまく説明できない。しかし、Al-Li-Cu(T2)合金では、準結晶が安定相でできるため、詳しく回折図形を得ることができる。図2にPoonらによって得られた粉末回折図形を示す(2)。但し、インデックスはBancelらによるものを用いた。この回折線の強度は図1-(B)に示した頂点と稜心に原子を置いた場合と大変よく一致している。この場合 $a=0.50\text{ nm}$ である。

さらにPoonらによると我々の示したこのモデルはDPIモデルにおける同様の計算結果に比べてより良く一致しておりAl-アルカリ金属系では3DPTが準結晶の構造をよく説明していると言える。

1) K.N.Ishihara and P.H.Shingu; J.Phys.Soc.Jpn. 55 (1986) 1795.

2) S.J.Poon; 私信.

