

最近発見されたAl-Mn及びAl-Feの10回対称(10方)相^{1,2)}は1本の10回軸を持ちこの方向に周期を持っているほか系統的な消滅則を示す(図1(b),(c))²⁾。この様な準結晶の対称性及び消滅則は超空間群によって表される³⁾。またこれらの10回軸に垂直な電子回折図形(図1(a))はPenrose図形(PP)の回折図形(図2(c))に似ている。このことから、これらの10回軸から投影はPPと関係が有ることが推測される。簡単のためここではvertexモデルを考える。PPを書くにはいくつかの方法が有るが、回折図形を計算するには投影法⁴⁾あるいはこれと等価な断面法が便利である。ここでは後者を用いる。PPを書くには5次元空間の結晶の2次元断面を考えるのが最も簡単である。この5次元結晶として超立方格子の各格子点に辺の長さが格子定数に等しい菱形20面体を5回軸が(11111)方向に一致するように置いたものを考える。この20面体は5次元格子のVoronoi多面体の2次元実空間(外部空間)に直交する3次元空間(内部空間)への投影に等しい。したがってこの結晶の外部空間での断面は点の集合となる。外部空間は(11111)方向に垂直である。断面は(11111)方向のどの点を通るかに依って異なる。この方向のベクトルを $t(11111)$ と書く。 t が0, 1/10, 1/20を通る

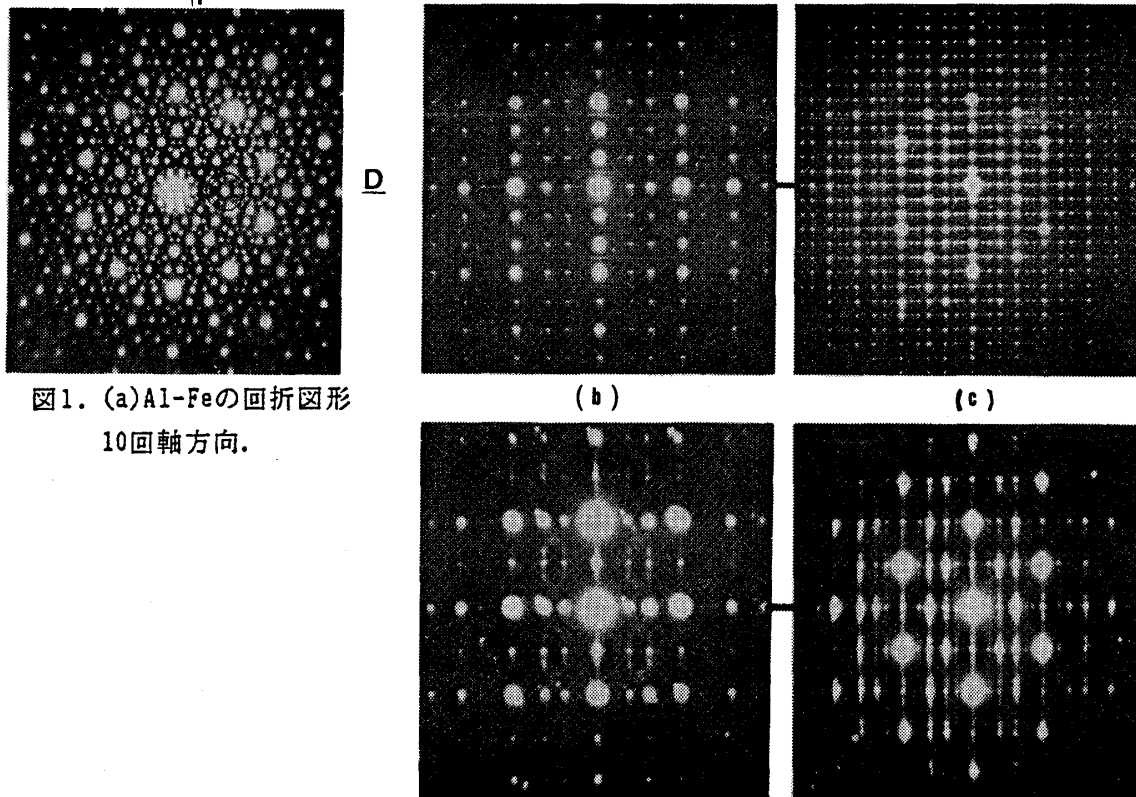


図1. (a) Al-Feの回折図形
10回軸方向.

図1. (b), (c) 10回軸とP, Dを通る面の回折図形
(上段: Al-Mn, 下段: Al-Fe)

断面とその回折図形を図2(a),(b),(c)に示す。これらはAで $t(11111)$ を切り点Aは(a),(c)では10回軸、(b)では5回軸となる。(c)がPPであるが、三つとも回折図形が似ていることが注目される。一般に t が0と $1/10$ の間の値を持つ点を通る断面は総て5回軸しか持たない。Al-Mn, Al-Feの10回軸からの投影は当然10回軸を持つことからこれらの中では(a)か(c)のみがモデルの候補と成り得る。この様にして、無限の類似な回折図形を示す図形の中から、対称性に依って候補を二つにまでしぼることが可能である。(a)と(c)の何れが10方相の構造と関係しているかは別の考察が必要であるが以下では(c)の場合についてのべる。

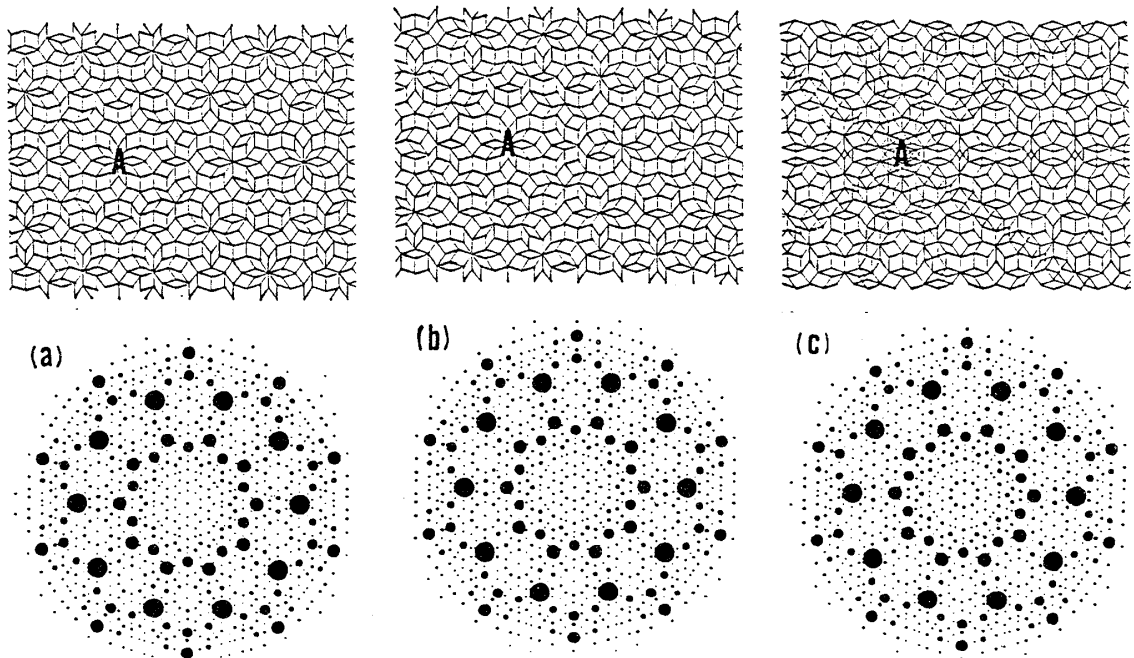


図2. 5次元結晶の2次元断面と回折図形。(a) $t=0$.(b) $t=1/20$.(c) $t=1/10$.

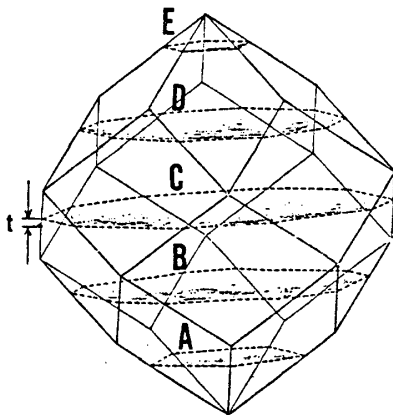


図3. 菱形20面体.

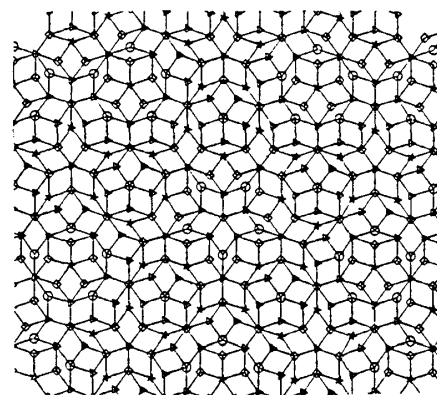


図4. Penrose図形のvertexの分類.

外部空間と交わるのは外部空間近傍の格子点にある菱形20面体だけであるが、5次元格子の各軸の (11111) 軸方向への投影は $(11111)/5$ であることから、ある菱形20面体が $t(11111)$

で外部空間と交わるときその他のものは $(t+\frac{1}{10})(11111)$ (i は整数)で交わる。(図3参照。) 菱形20面体の全ての部分が外部空間と交わるのではないことが重要である。(どの断面を取るかに依って、図形が異なるのはこのことによる。) 図1(c)は図3で $t=1/10$ としたときのABCDとの交点を描いたものである。図4にPPの各vertexをこの交点に依って分類したものを示す。10方相の構造を考えるために、ここで丸、三角、四角、星形で示した4種類のvertexからなる層を考えこれらをA,B,C,D層とする。図3のA,B,C,Dが $t=1/10$ では何れも正五角形でAとD, BとCが互いに反転で入れ替わることから、A,B,C,D層は5回軸を持ちA,D層, B,C層は反転で入れ替わること注目する。図1に示すAl-Mnの消滅則を説明するには10回軸が 10_5 螺旋軸でDに垂直な面が映進面であればよい。その様な構造はABDCDBの6相の積み重なりを繰り返すから成る周期構造を考えればよい。この構造はA,B層を $1/10$ 回回転して10回軸(c軸)方向に $1/2$ 並進するとD,C層に重なることから 10_5 螺旋軸を持つことが分かる。同様にしてc映進面があることも理解できる。このモデルの超空間群は $P10_5/mmc$ と書ける。点群は収束電子線回折の結果と一致する¹⁾。図5に示す回折図形は図1の特徴を再現しているのがわかる。

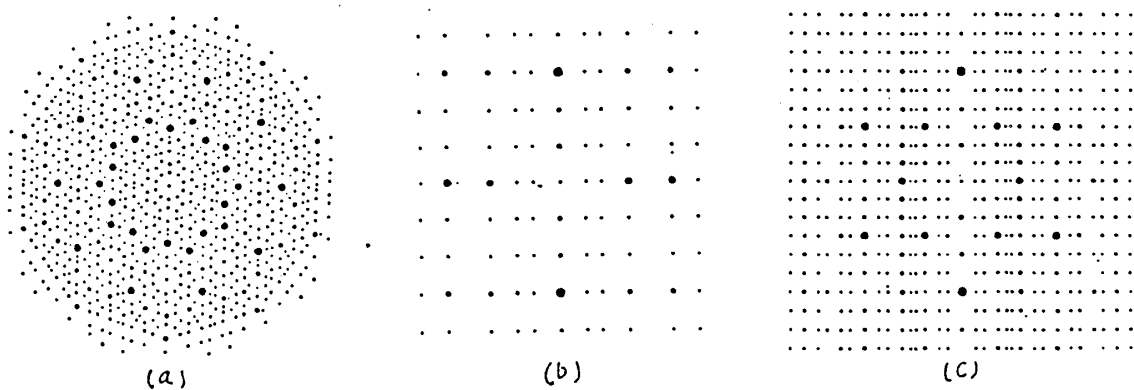


図5. Al-Mn10方相モデルの回折図形。(a),(b),(c)は図1の(a),(b),(c)に対応する。

一方Al-Feは螺旋軸と映進面だけでは説明できない消滅則をもっている。図1(c)では2,6,10層めが消えている。これは亜群の要素を考えることに依って説明できる。ABACDCDBの8層周期を持つ構造を考える。この構造は前述の螺旋軸および映進面のほかに1層おいた隣に同じ層が必ずありABCD4層からなる構造をc軸方向に $1/4$ 周期並進してえられる。この並進操作に依って2,6,10層めが消えることが説明できる。このモデルの超空間群は $P10_5mc$ であり点群は収束電子回折の結果と一致する²⁾。このモデルは消滅則は説明出来るが回折強度の実験との一致はAl-Mnの場合ほどはよくない⁵⁾。

参考文献. 1) L. Bendersky, R. J. Schaefer, F. S. Biancaniello, W. J. Boettinger, M. J. Kaufman and D. Shechtman: Scripta Met. 19, 909 (1985). 2) K. K. Fung, et al.: Phys. Rev. Letters 56, 2060 (1986). 3) T. Janssen: Acta Cryst. A42, 261 (1986). 4) V. Elser: Acta Cryst. A42, 36 (1986). 5) 山本昭二, 石原慶一: 日本結晶学会61年度年会26P33.