



正 20 面体準結晶の原子的構造の決定と フェイゾン乱れとの関係を解明

研究成果のポイント

- ・ Sc-Zn 正 20 面体準結晶の原子的構造を明らかにした。
- ・ フェイゾン乱れ（準周期系特有の乱れ）と原子的構造との関係を明らかにした。

研究成果の概要

Sc-Zn 正 20 面体準結晶の放射光を利用した詳細な X 線回折実験により、その原子的構造を決定し、Yb-Cd 正 20 面体準結晶との構造の違い、フェイゾン乱れ（準周期系特有の乱れ）の詳細と原子的構造との関係を明らかにしました。

本研究は、日本学術振興会科学研究費 JP2156003, JP24560002, JP15K0465 の助成を受けたものです。

論文発表の概要

研究論文名: Atomic structure and phason modes of the Sc-Zn icosahedral quasicrystal (Sc-Zn 正 20 面体準結晶の原子的構造とフェイゾンモード)

著者: 山田庸公 (東北大学多元物質科学研究所), 高倉洋礼 (北海道大学大学院工学研究院), Holger Euchner (ウィーン工科大学), Cesar Pay Gómez (ウプサラ大学), Alexei Bosak (欧州シンクロトロン研究所), Pierre Fertey (ソレイユ放射光施設), Marc de Boissieu (グルノーブル大学, フランス国立科学研究センター)

公表雑誌: IUCrJ (国際結晶学連合 (IUCr) により, 2014 年 1 月に新しく創刊されたオープンアクセスジャーナル)

公表日: 英国時間 2016 年 6 月 14 日 (火) (オンライン公開)

doi:10.1107/S2052252516007041

研究成果の概要

（背景）

準結晶は、1982年にDan Shechtman教授（イスラエル）によりその存在が初めて確認された、新しい秩序状態をもつ一群の固体物質です（Shechtman教授は2011年にノーベル化学賞を受賞）。普通の結晶（食塩、ダイヤモンド、半導体物質など）は、原子が繰り返して（周期性という）配列します。一方、準結晶では、原子の配列に繰り返しはありませんが、規則正しい（準周期性という）特異な配列の仕方をします。そのため、普通の結晶では考えられないような新しい性質をもつ準結晶が発見されることが期待されています。また、原子的構造をコントロールすることにより、有用な性質をもたせることができると考えられています。この目的のためには、準結晶中で原子がどのような配列をしているかを知ることが重要となります。しかし、現在でも、原子的構造が解明されている準結晶は極めて少数です。2007年に高倉准教授らの研究グループは、今回原子的構造を解明したスカンジウムと亜鉛の2種類の元素からなるSc-Zn正20面体準結晶と同種の構造を持つ、イッテルビウムとカドミウムの2種類の元素からなるYb-Cd正20面体準結晶の高次元結晶構造解析に初めて成功しました。

（研究手法と主な成果）

研究グループは、放射光（欧州シンクロトロン研究所（ESRF）及びソレイユ放射光施設（SOLEIL）；フランス）を用いて、Sc-Zn正20面体準結晶の詳細なX線回折実験を行いました。Sc-Zn準結晶は、2010年に新しく発見された正20面体準結晶です。回折強度データを用いた高次元結晶構造解析により、Sc-Zn正20面体準結晶の原子レベルの構造を明らかにしました。また、X線散漫散乱の絶対強度を測定することによって、Sc-Zn正20面体準結晶には準周期系特有の構造の乱れである、フェイゾン乱れが多く含まれることを明らかにし、原子的構造に基づいてフェイゾン乱れによるX線散漫散乱を再現することに成功しました。そして、フェイゾン乱れの微視的な起源を、(a)Tsai型クラスターと呼ばれる準結晶構造を特徴づける原子クラスターの再配列、(b)クラスター以外の部分でのScとZn原子の無秩序な配置、または、(c)原子クラスターの中心にあるZn原子4つからなる四面体の回転の自由度、で説明できることを指摘しました。“準周期性”という特異な構造秩序は、準周期タイリングのタイルの乱れた配列（フェイゾン乱れ）によるエントロピーの寄与により安定化される（このようなモデルをランダムタイリングモデルという）と考えられていましたが、原子から構成される実際の準結晶構造中で、フェイゾン乱れはどのようなになっているのかを、今回初めてSc-Zn正20面体準結晶において明らかにしました。

（今後への期待）

準結晶は、普通の結晶では見られない性質が期待される“準周期性”という新しい秩序状態を持った固体です。工業的に応用されている半導体をはじめとする、結晶性物質の多くの性質は、周期的な原子配列を前提とした物理モデルにより理解されています。準結晶では、原子が準周期的に配列するため、このアプローチが使えません。そのため、原子的構造をはじめとして、いまだに多くのことが解明されていません。今後、準結晶の原子的構造が次々と明らかとなっていくことで、準周期性の不思議が解明され、準周期性を利用した新しい物質・材料開発が可能となると期待されます。

お問い合わせ先

所属・職・氏名：北海道大学大学院工学研究院 准教授 高倉 洋礼（たかくら ひろゆき）

TEL：011-706-6644 FAX：011-706-6859 E-mail：takakura@eng.hokudai.ac.jp

ホームページ：<http://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/crystal/>

所属・職・氏名：東北大学多元物質科学研究所 日本学術振興会 PD 研究員

山田 庸公（やまだ つねとも）

TEL：022-217-5723 FAX：022-217-5723 E-mail：tntmymd@tagen.tohoku.ac.jp