

20面体対称稠密パッキングと 準結晶のクラスターモデル

山本 昭二 物質材料研究機構

準結晶とは

準結晶の分類とクラスター

クラスターの連結形態

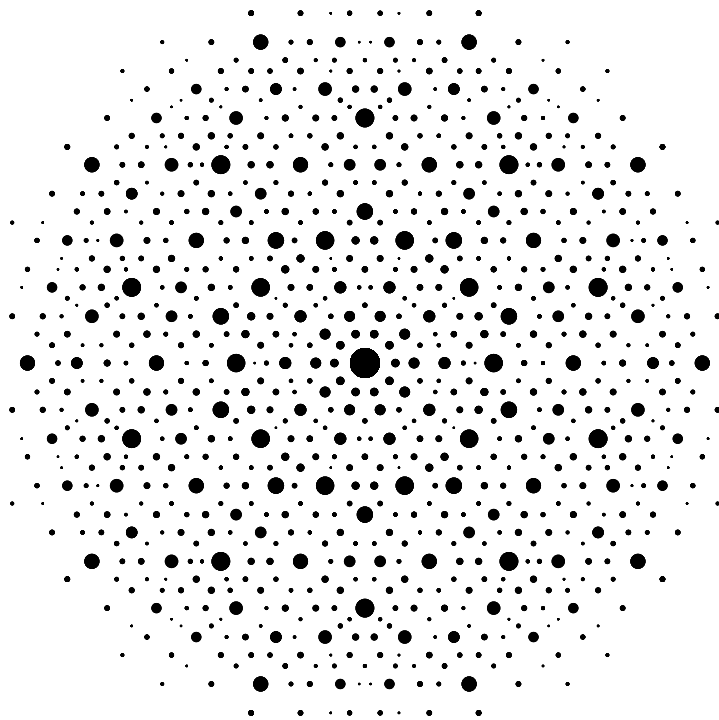
20面体対称稠密球パッキング



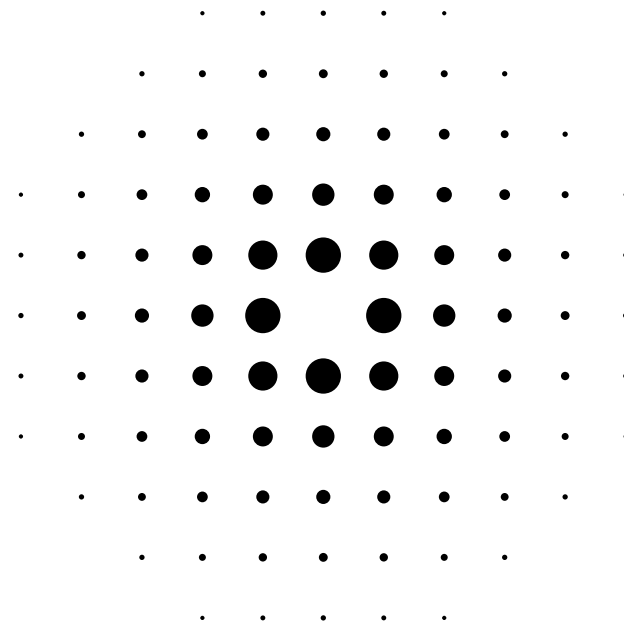
準結晶とは

- ◇ 回折図形がdelta関数の集合で結晶学点群以外の対称性を有するもの。(回折図形:電子密度のFourier積分の絶対値)

(a) Quasicrystal (Penrose patt.)



(b) Crystal (NaCl)



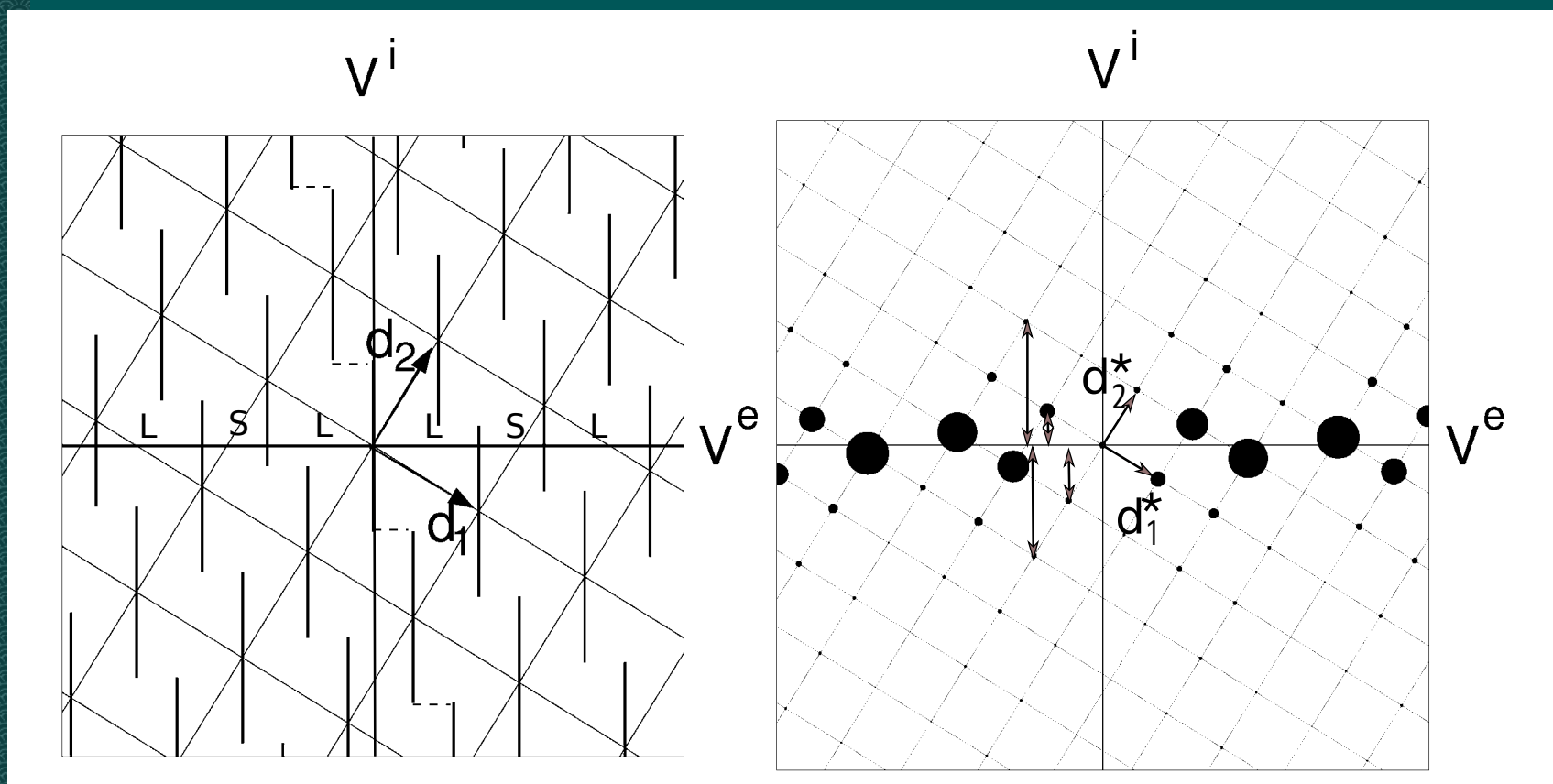
高次元結晶と回折図形



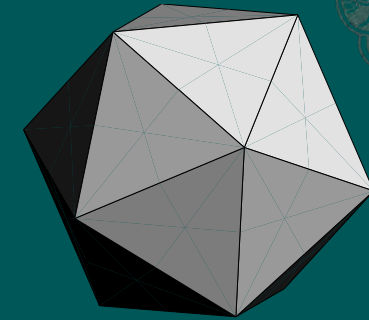
Fibonacci Lattice

Occupation domain (OD)

Diffraction pattern

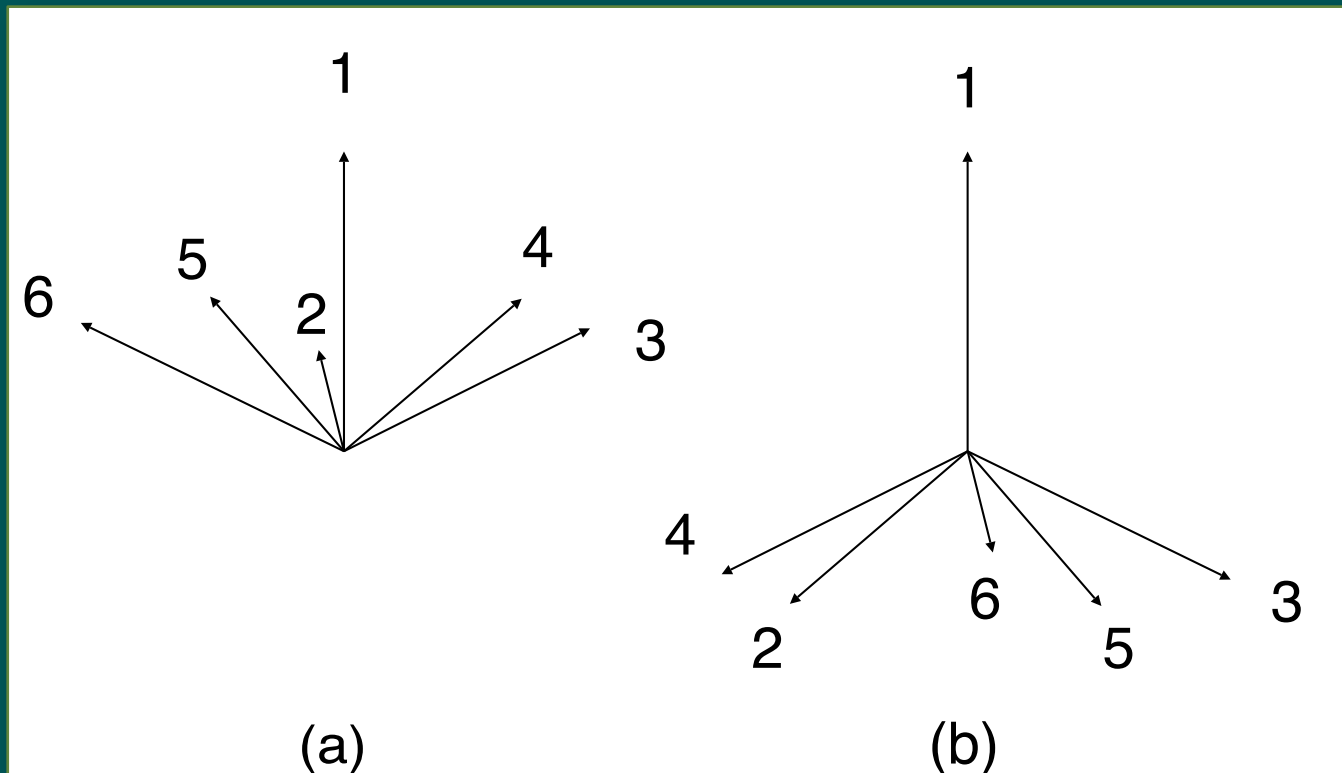


20面体対称準結晶の6次元周期構造と基底ベクトル



3D external space

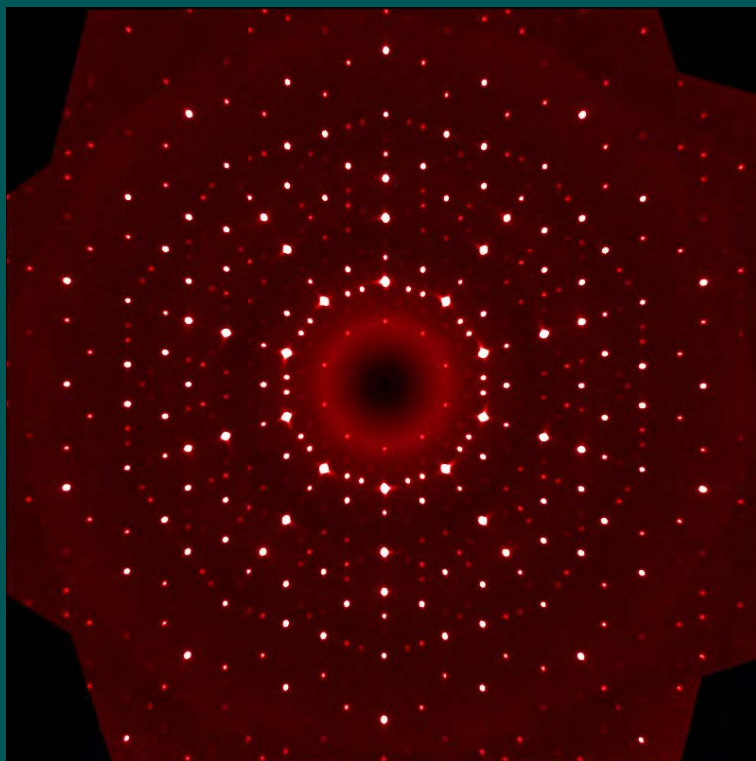
3D internal space



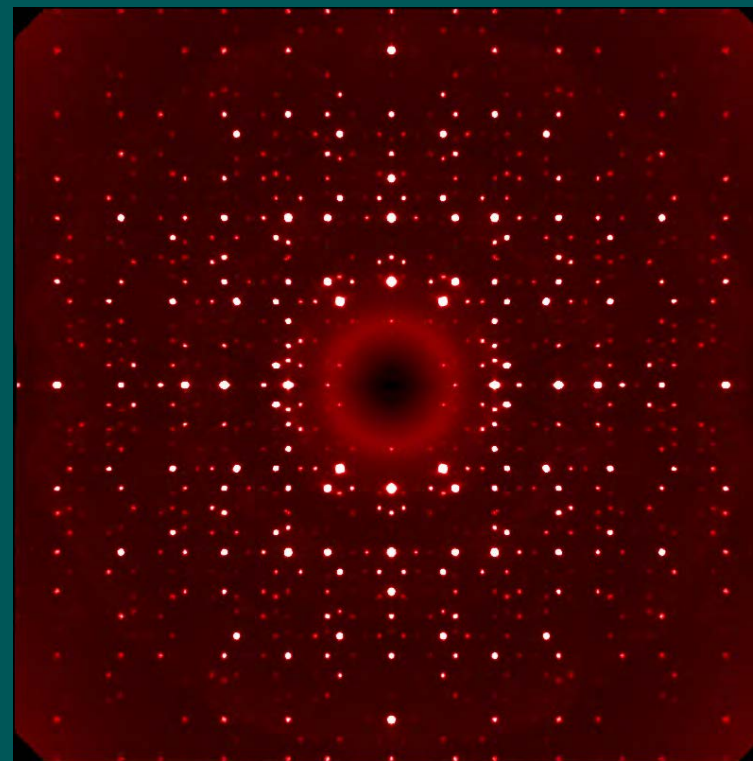
iCd-Yb準結晶のX線回折図形 (CCDカメラ)



5-fold plane



2-fold plane



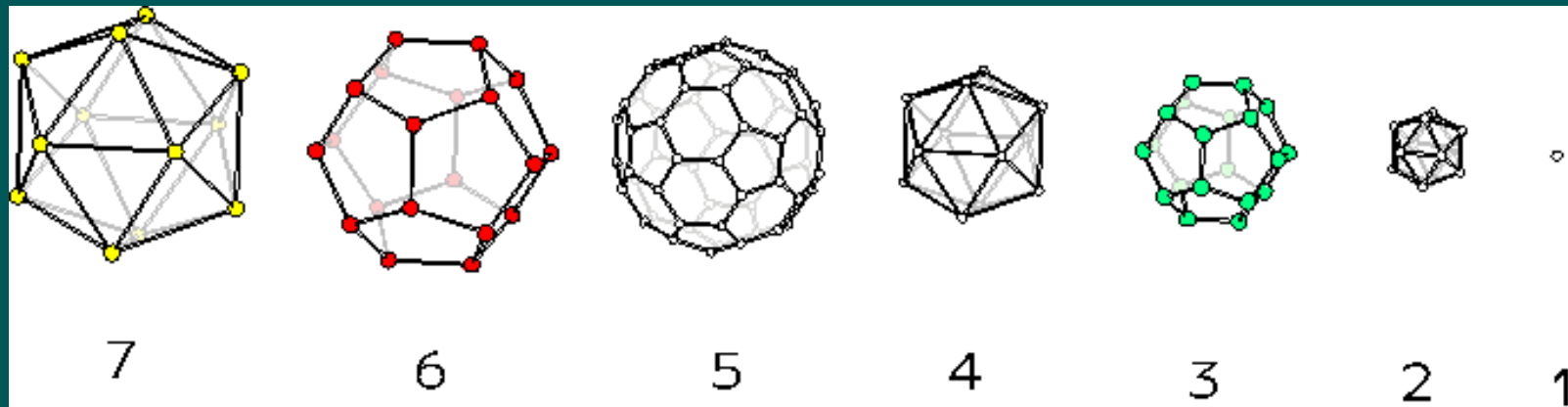
20面体対称準結晶の種類



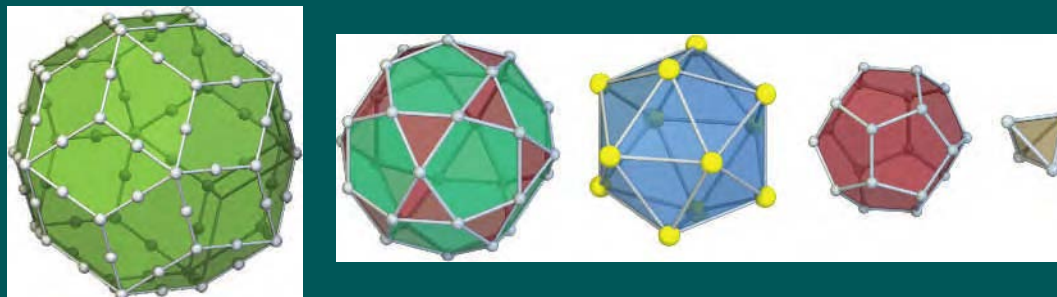
- ◇ Bergman型 Zn-Mg-RE (RE:希土類金属) (P型、F型20面体格子)
- ◇ Tsai型 Cd-Yb, Cd-Mg-RE (P型20面体型格子)
- ◇ Mackay型 Al-TH (TM:遷移金属) (F型20面体格子)

準結晶とクラスター (Bergman, Tsai)

Bergman cluster (1-4), Extended Bergman cluster (1-7)

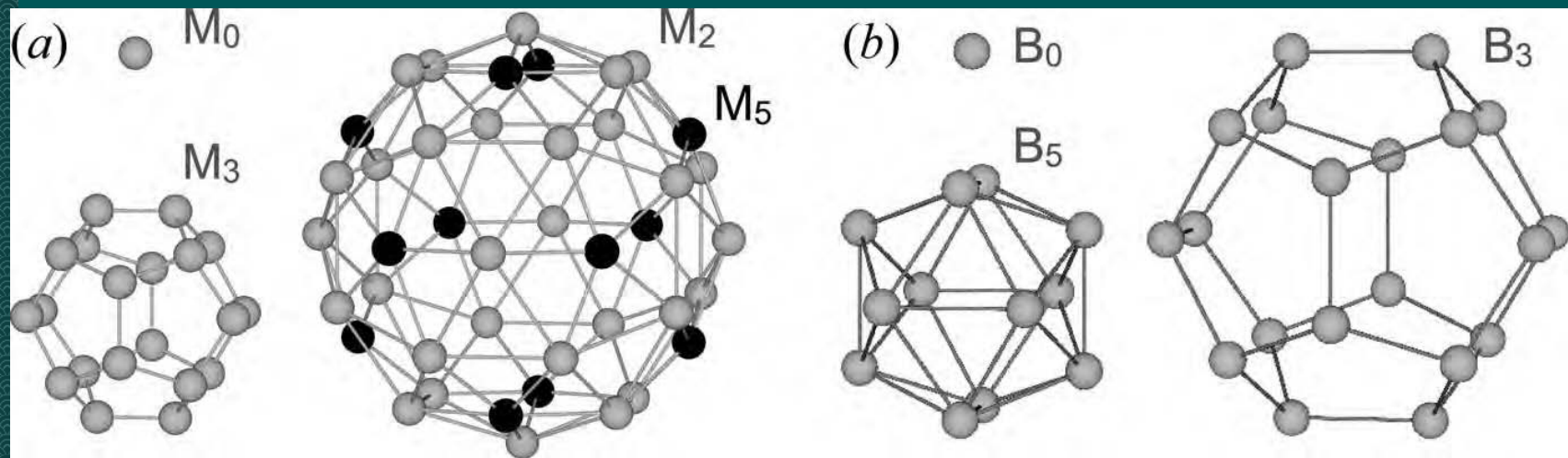


Tsai cluster



準結晶とクラスター (Mackay, $iAl-Pd-Mn$, $Al-TM$)

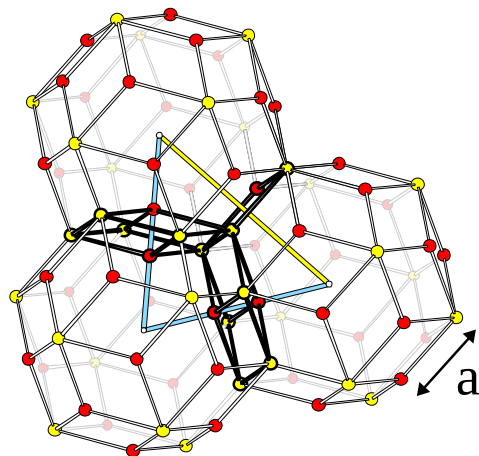
- ◇ 2つのクラスター: Pseudo-Mackay (M) and mini-Bergman (B) clusters
- ◇ Fujita等によって最近3/2近似結晶がこれで構成されていることが明らかになった。



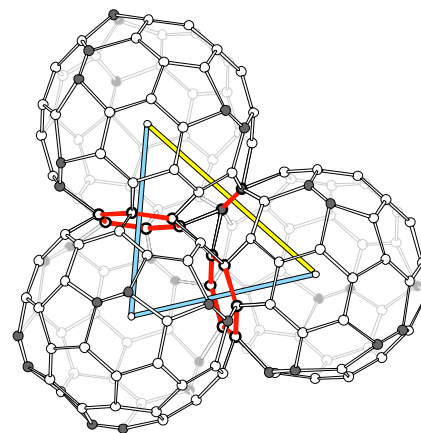
クラスターの結合様式

- ◆ 主にb ($\sqrt{2}$ -fold axis) c ($\sqrt{3}$ -fold axis) linkageで接続されている。

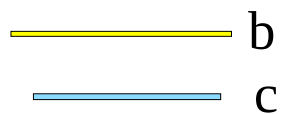
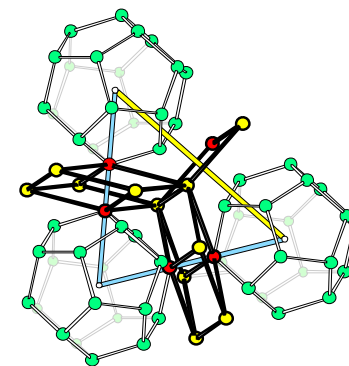
(a)



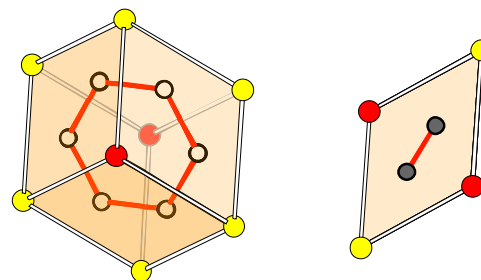
(b)



(c)

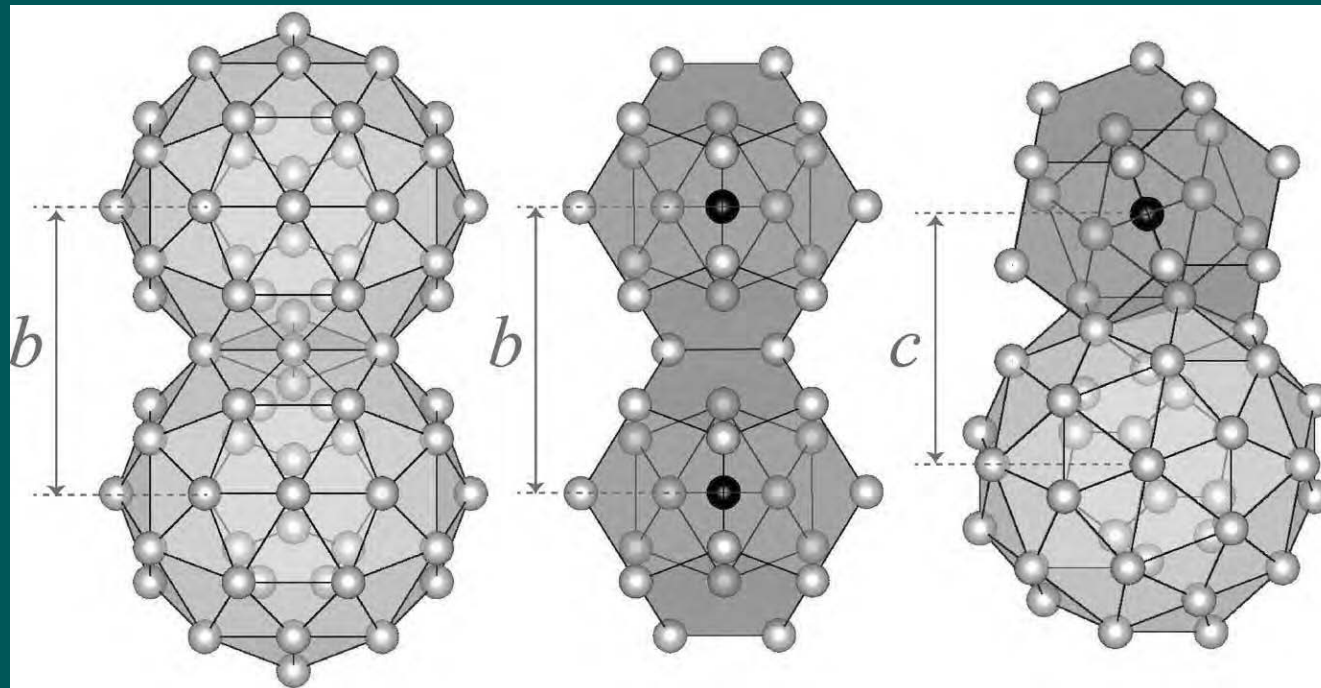


(d)

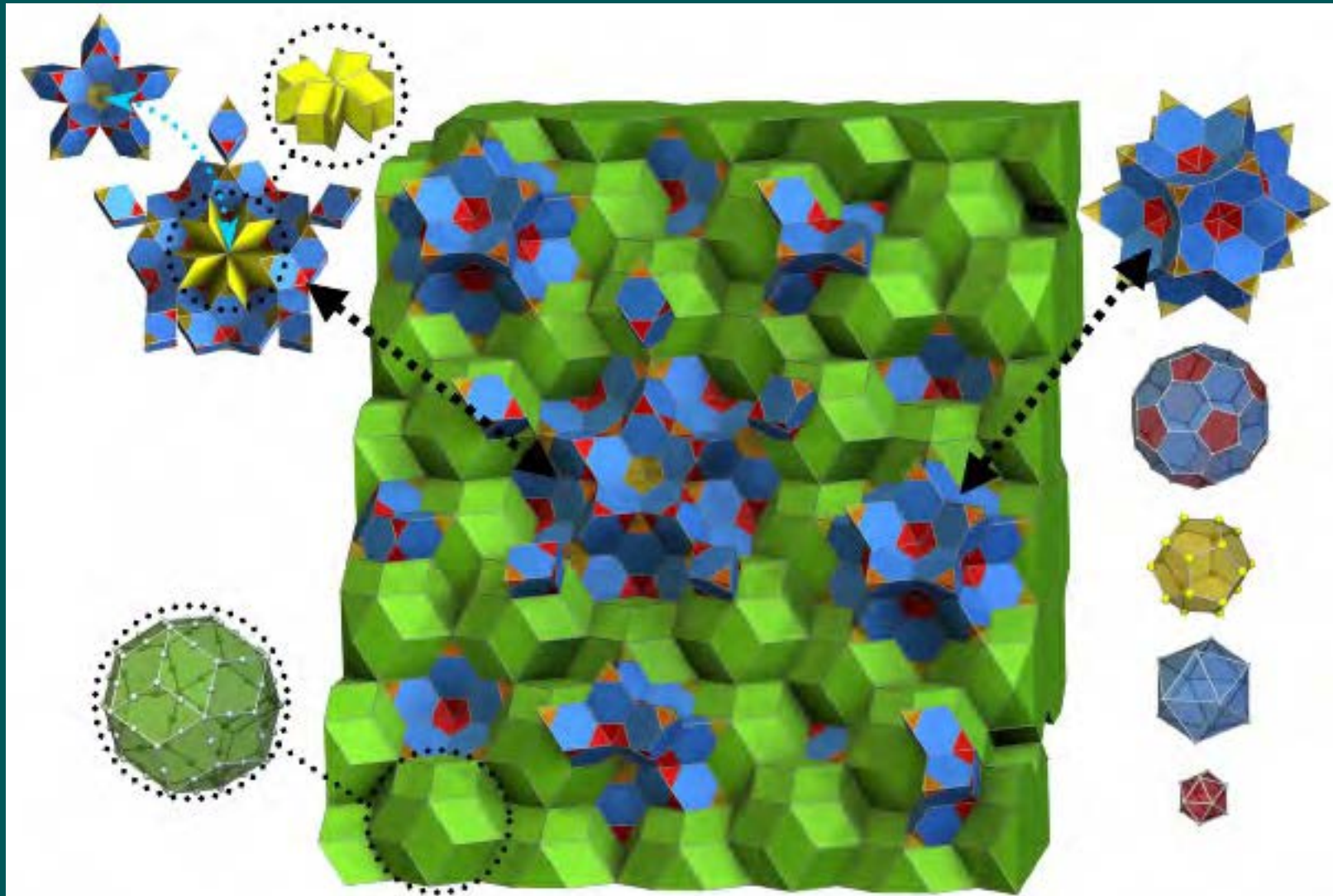


クタスターの連結形態

- ◇ 2回軸と3回軸方向に連結している。
- ◇ M-clusterは一部が貫入している。
- ◇ M-clusterとB-clusterは一部貫入している。
- ◇ B-cluster同士は貫入しない。

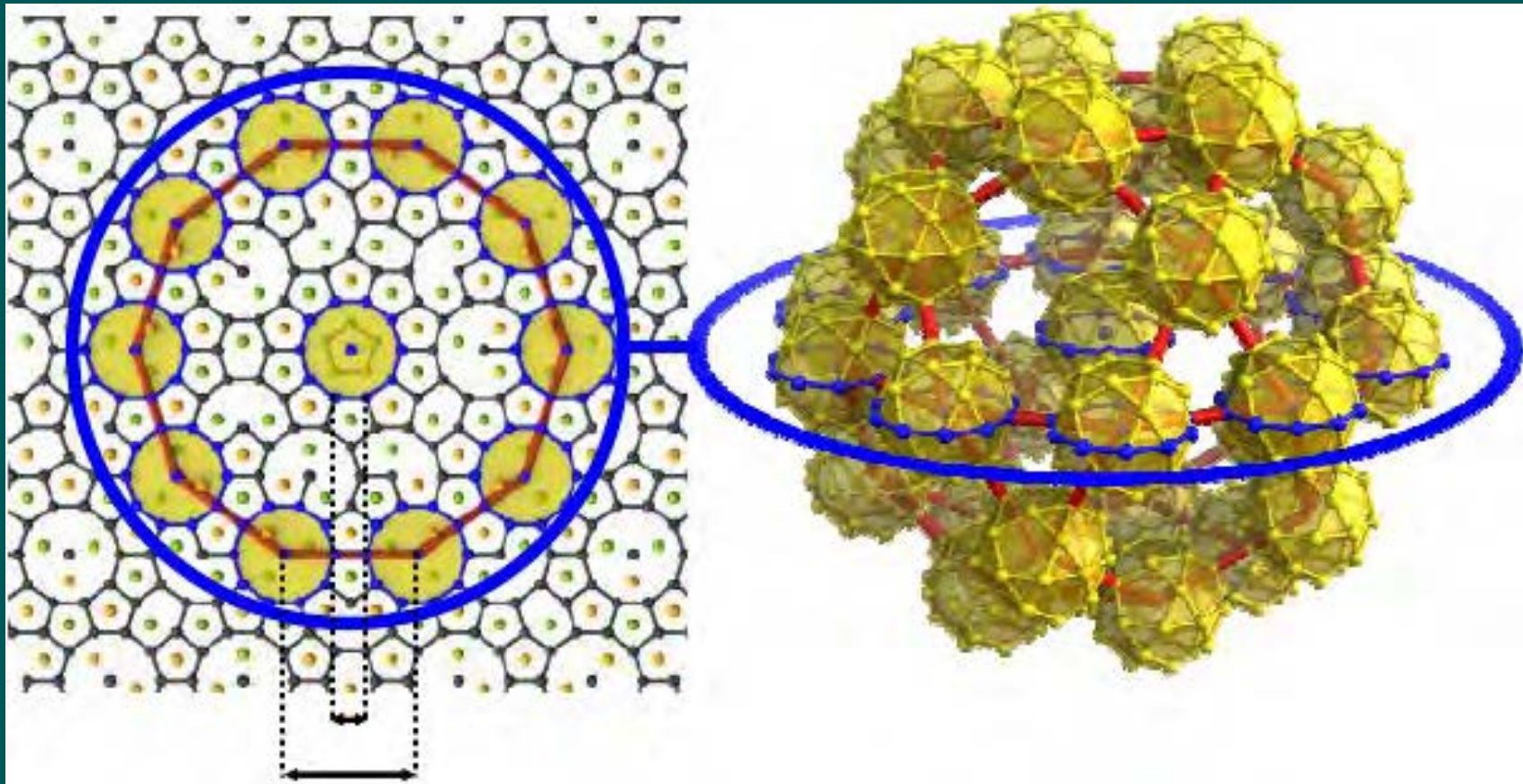


クラスターの配列 (P~type) I



クラスターの配列 (P-type) II

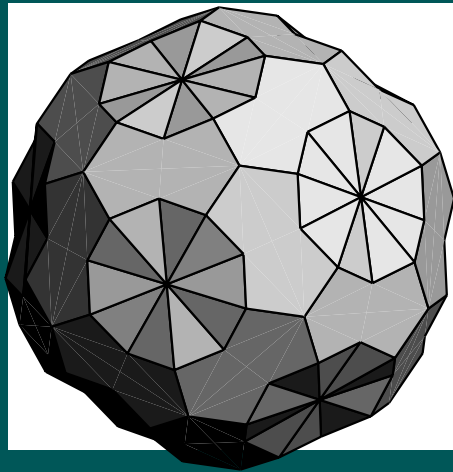
- ◆ クラスターを球で表示 (20面体対称稠密パッキング)



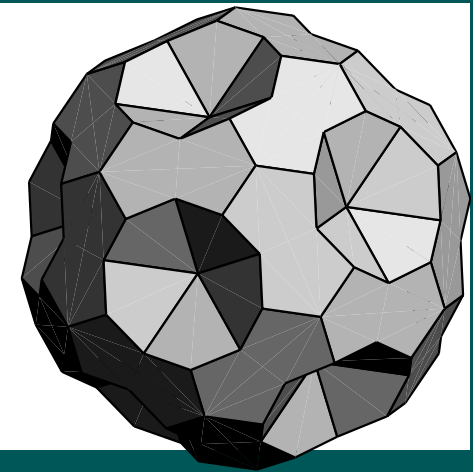
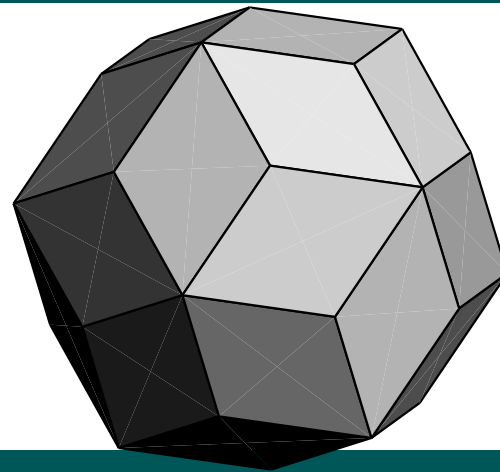
20面体稠密パッキングのOD

- ◇ クラスタ中心はP型の対称性を持つ20面体稠密パッキングのODで生成。
- ◇ これを変形するとF型の対称性を持つODが得られる。

P-type

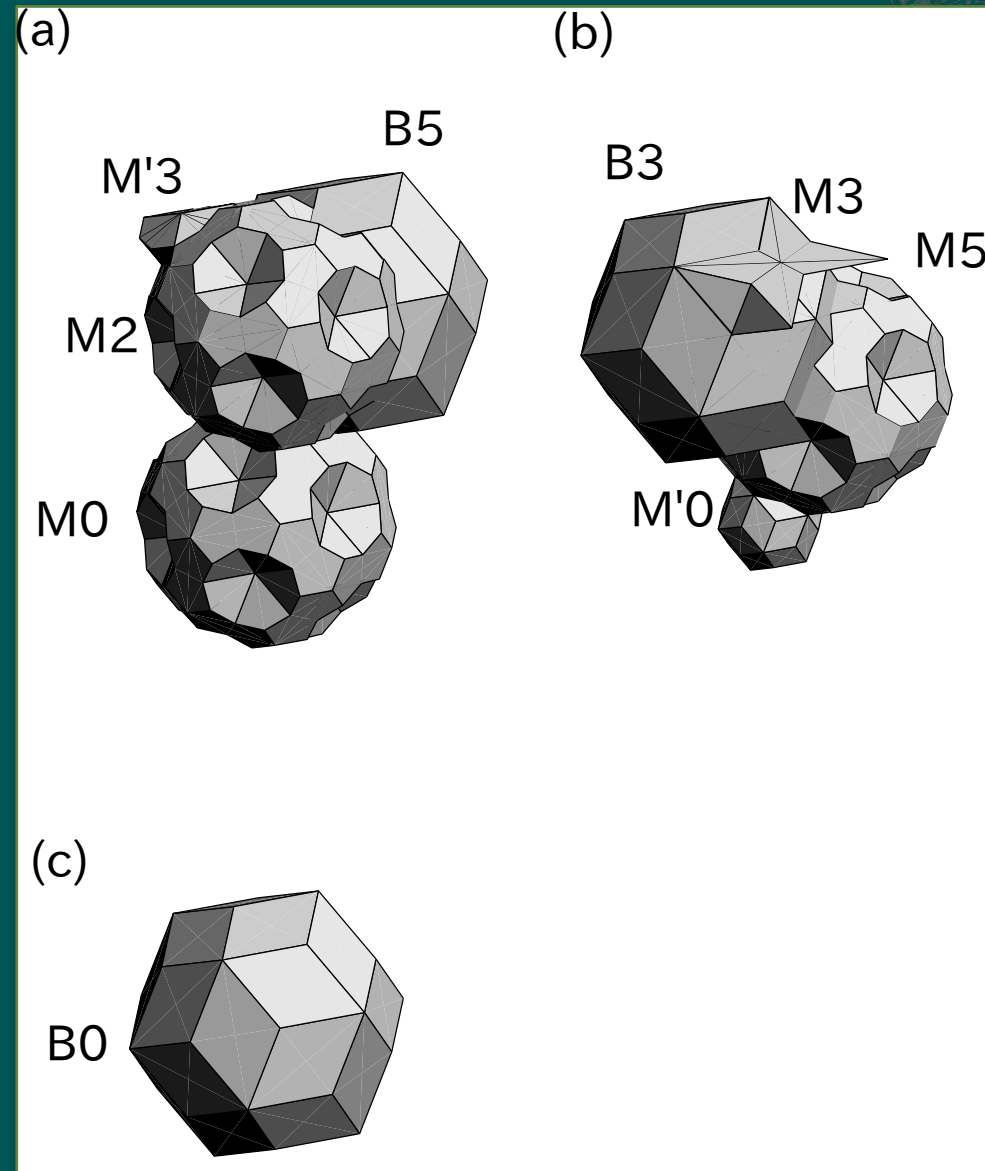


F-type



Independent ODs

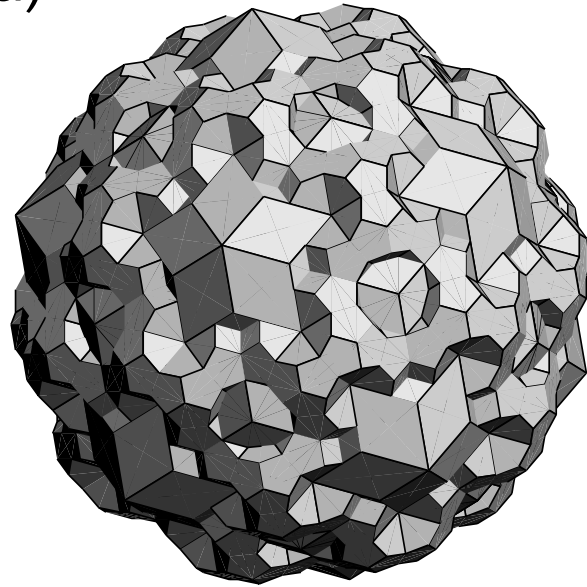
- ◆ Large ODs at even and odd parity vertices, odd-parity body-center
- ◆ Three cluster-center ODs
- ◆ OD $M'0$ provides new cluster centers



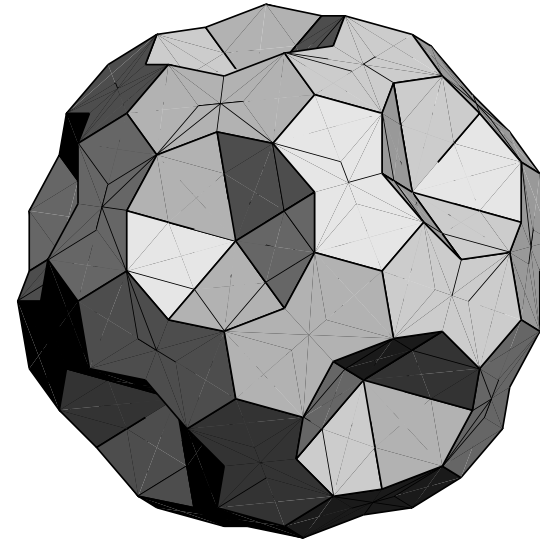
ODs for all atoms



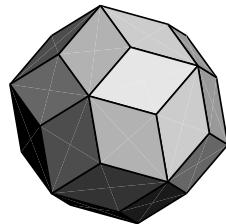
(a)



(b)

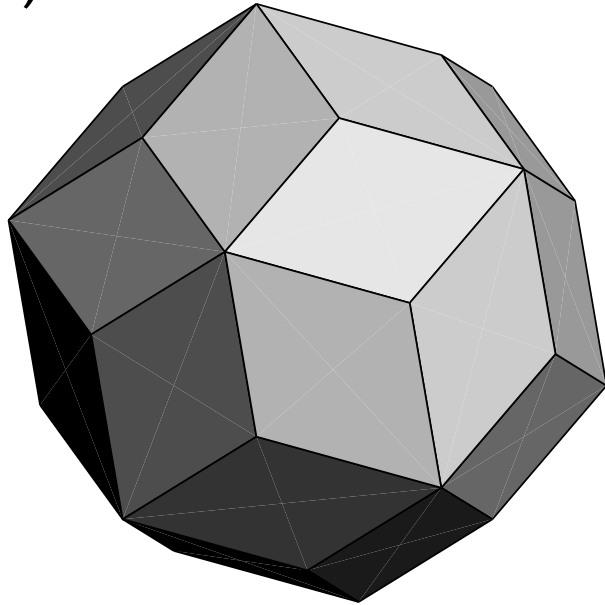


(c)

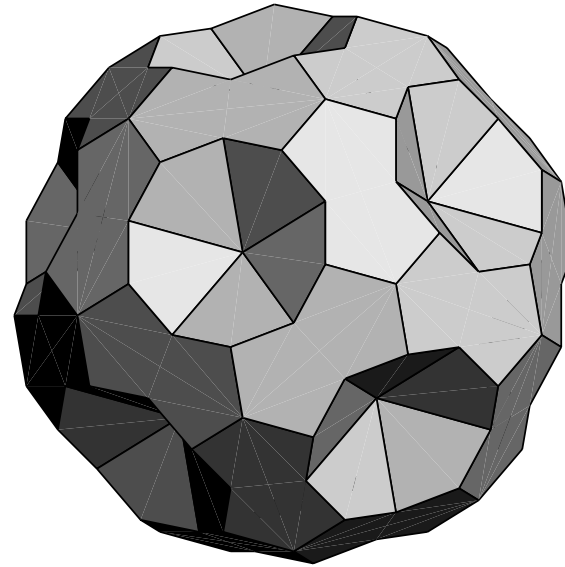


ODs of Katz-Gratias model

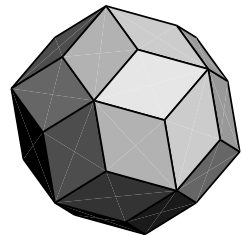
(a)



(b)



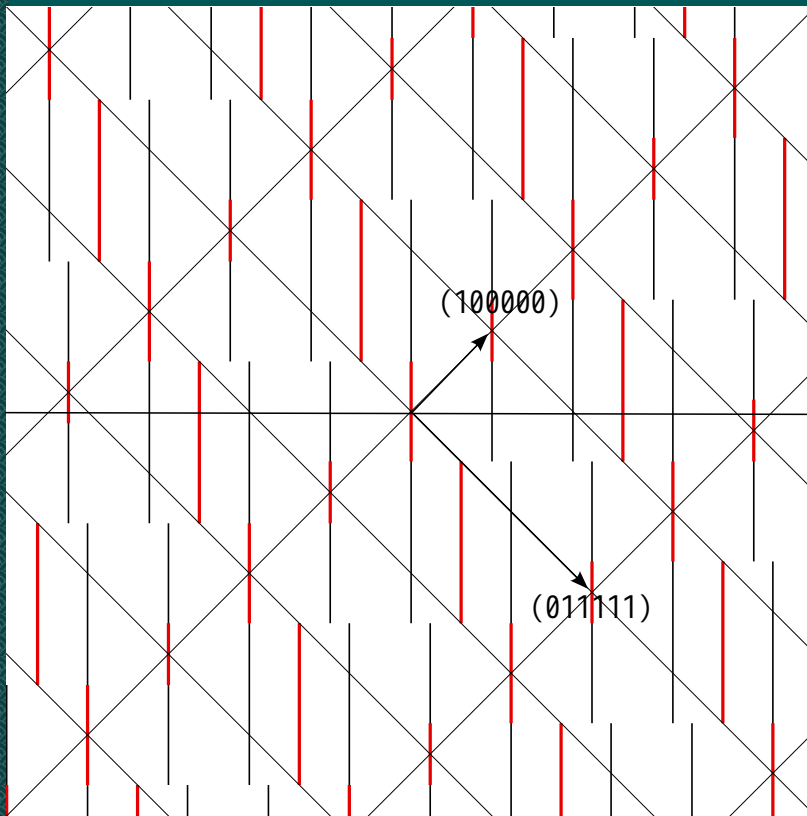
(c)



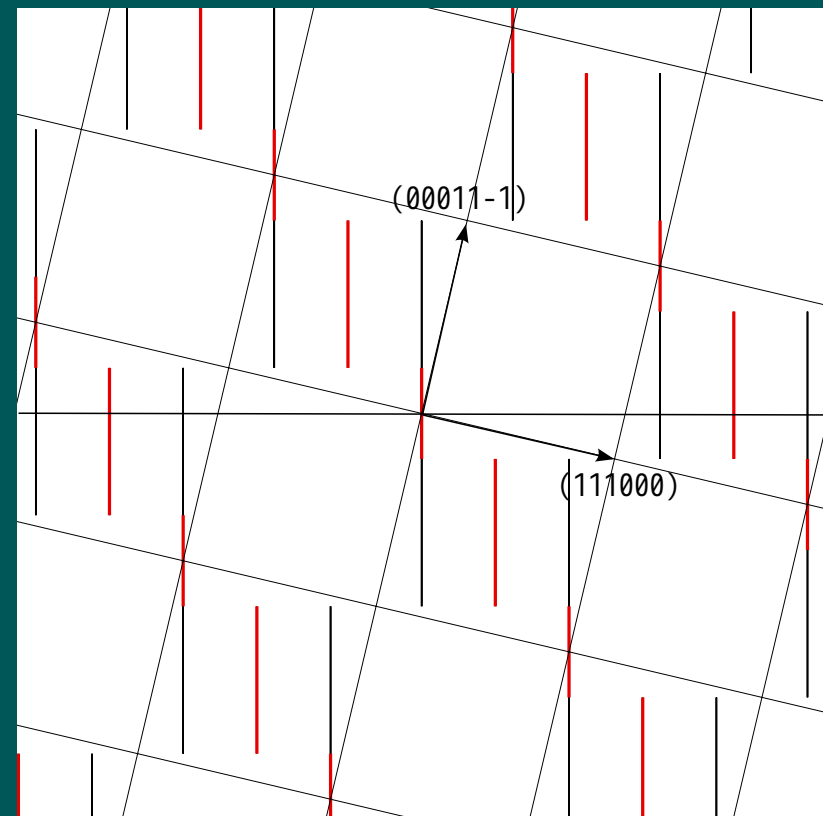
KG-modelと20面体対称稠密球 パッキング

(τ^2 scaling $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$)

5-fold plane



3-fold plane



20面体対称稠密パッキング



- ◆ 準結晶は単純な稠密準周期クラスター配列を仮定して構造解析されている。
- ◆ これまでに知られていた20面体対称球パッキングはP型(20面体対称6次元格子)。これは3次元Penroseタイリングの12-fold vertexの一部。(12-fold packing)
- ◆ これが最稠密ではない。最近約3%密度の高いF型20面体対称パッキングを発見した。
- ◆ より密度の高い20面体対称パッキングは可能か

まとめ

- ◇ 準結晶はクラスターで分類される。
- ◇ クラスターは20面体稠密パッキングをとる。
- ◇ 20面体最稠密パッキングは未知。数学的に解明されることを期待。
- ◇ 原子配置が複数の半径を持つ稠密パッキングで表されると考えられる。半径の違いで既知のクラスターが分類出来るか。



References

- ◆ A. Yamamoto *Acta Crystallogr.* A52 (1996) 509
- ◆ H. Takakura et al. *Nature Materials*, 6 (2007) 58
- ◆ N. Fujita et al. *Acta Crystallogr.* A65 (2013) 322

