科研費

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 9 月 6 日現在

機関番号: 11301

研究種目: 基盤研究(C)(一般)

研究期間: 2018~2021

課題番号: 18K04677

研究課題名(和文)複雑合金結晶の相形成マップと構造制御

研究課題名(英文)Diagramatic mapping of key factors for controlling the structure and formation of complex alloy crystals

研究代表者

藤田 伸尚 (Fujita, Nobuhisa)

東北大学・多元物質科学研究所・講師

研究者番号:70431468

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文):AI-Pd-TM(遷移金属)系およびCd-Mg-RE(希土類)系において元素種やその混合比率が異なる合金試料を多数作製し、正二十面体準結晶および各種の近似結晶の相形成挙動を明らかにした。また、Cd-Mg-Ce系非従来型1/1近似結晶などの新規関連相を複数発見した。さらに、数種類の近似結晶に対して単結晶X線回折を用いた構造決定に成功した。一方、関連相のTM元素種によらない普遍的な形成挙動を抽出するために、AI-Pd-TM系状態図や実験結果から得た各相の組成を平均価電子濃度およびd軌道空席率を直交軸とする統一マップ上にプロットする新しい方法を検討した。

研究成果の学術的意義や社会的意義 準結晶や様々な近似結晶の相形成挙動に関する調査は、準結晶の発見から長きにわたり世界中で行われてきた。 これらの新規複雑合金相の探索指針として固溶合金に対するヒュームロザリー則が適用されてきたが、元素置換 による構造変化には電子の干渉効果に加えて軌道混成効果の影響も無視できず,その詳細なメカニズムの理解は 道半ばである。本研究では元素の部分置換による相形成挙動の変化を系統的に調査するとともに、平均価電子濃 度やd軌道空席率等を座標軸とするマッピング法を考案することで、準結晶や近似結晶の普遍的な形成挙動を部 分的にあぶりだした。この試みをさらに進めれば、構造変化の支配因子を解明できると期待できる。

研究成果の概要(英文): By synthesizing many alloy samples with different choices of elements and mixing ratios, the formation behaviors of complex alloy phases, namely, icosahedral quasicrystals and their approximants, in the AI-Pd-TM (=transition metal) and Cd-Mg-RE (=rare earth element) systems were studied in detail. A few novel complex alloy crystals including an unconventional 1/1 approximant in the Cd-Mg-Ce system were discovered. Moreover, the crystal structures were determined for some of the approximants using single-crystal X-ray diffraction technique. Meanwhile, a new mapping method was examined in order to reveal any universal trends in the formation behaviors irrespective of TM species. In this method, compositions of related phases were projected onto a planar map in which the mean number of valence electrons per atom and the vacant fraction of d-orbitals as calculated from the composition were used as the orthogonal coordinate axes.

研究分野:金属物性、結晶学、物性基礎

キーワード: 準結晶 近似結晶 複雑合金 合金状態図 構造安定性 構造解析

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等に ついては、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1.研究開始当初の背景

準結晶や近似結晶,長周期積層構造などの複雑な構造秩序を持つ金属間化合物は複雑合金結 晶と呼ばれ,その構造形態に起因する特異な物性(高電気抵抗,高熱電性能,高強度材料,異常 量子臨界現象,など)を示すことから,潜在的な応用の可能性が注目されている.研究代表者ら のグループでは準結晶や近似結晶の新規合金探索を精力的に進めており,2010年以降,アルミ -遷移金属合金系において単位胞に約500~4300個もの原子をもつ複雑合金結晶を複数見出し てきた.これらの物質はアルミ(Al)-パラジウム(Pd)-マンガン(Mn)系 F 型正二十面体準結晶に 対する高次の近似結晶に相当し,単結晶 X 線回折を用いた構造解析により,8 Å 程度の直径を 持つ二種類の基本クラスタによる高密度空間充填構造であることが示された、それと同時に、四 種類の多面体からなるタイリング(=カノニカルセルタイリング)の頂点上にクラスタが配置し た構造として,これらの構造が一般に理解できることが明らかになった.この構成原理を任意の カノニカルセルタイリングに当てはめれば、無限に多様なクラスタ配列をもつ複雑合金結晶の 理論モデルを作ることが出来る .また ,これらのいくつかは ,未発見の新物質として実現する可 能性が期待できる.実際に,この構成原理に従う少なくとも三種類の新種の構造が,新規または 構造未知の高次近似結晶相において見出された.しかし,その一方で,クラスタの配列を変化さ せる物理・化学的条件は全く解明されておらず、現状では経験に基づく「勘」を頼りに組成や熱 処理温度を選択し試行錯誤を繰り返す他に ,多様な構造を持つ物質を見出す手段がない .より効 率的な物質探索の指針を得るためには、最新の構造研究に立脚した構造安定性に関する新たな 学理を構築することが不可欠である.特に,クラスタ配列を変化させる支配因子を解明すること は、準結晶や近似結晶の構造安定化機構の解明と密接に関わる重要な課題である、

2.研究の目的

アルミ(AI)-遷移金属系における F 型正二十面体準結晶 , カドミウム(Cd)-マグネシウム(Mg)-希土類系における P 型正二十面体準結晶 , およびこれらに対する各種の近似結晶の構造安定化における物理・化学的条件の解明を本研究の目的とする . そのための第一歩として , 既知の準結晶相または近似結晶相の間を補間するように元素の部分置換を行った試料作製を行い , 相形成挙動の変化を実験的に調査する . これにより , 実験的知見を点から線へ , 線から面へと拡張し , 準結晶や近似結晶の相形成挙動をより高次の視点から理解することを目指す .また ,第一原理計算を用いた元素ごとの特性抽出を行うことで ,得られた知見に対する科学的解釈を試み ,構造の系統変化の物理・化学的因子を明らかにする .例えば ,アルミ(AI)-パラジウム(Pd)-遷移金属(TM)系の場合を例とすると , 既存の AI-Pd-TM 三元系合金相図の間を補間する組成条件を用いた試料作製から複雑合金結晶の相形成挙動の理解の高次化を図り , 第一原理電子構造計算を用いた遷移金属種の違いによる関連相の安定性に関する定量的知見を得 , 遷移金属種による差異を包含したより普遍的な構造制御因子 (価電子濃度 ,幾何学的因子 ,化学的因子)を およびの結果に基づいて同定し ,制御パラメタ空間における各相の相形成域をプロットした「相形成マップ」を作る . これにより ,単なる経験やそれに基づく「勘」に頼らない効率的な物質探索に活用し , 新規の複雑合金結晶を複数発見することを目指す .

3.研究の方法

補間的相形成条件の調査 (実験):

アルミ(Al)-パラジウム(Pd)-遷移金属(TM)系(遷移金属として TM = Cr, Mn, Fe, Co, Ru, Rh, Re, Ir などを想定)における正二十面体準結晶および既存の近似結晶相の平衡組成域を互いにつなぐよう第三元素(TM)を二種類の遷移金属の部分混合(例えば Fe+Ru)で置換した試料作製を行い,相形成挙動を調査する。基礎データとして, $2000 \sim 2010$ 年に B. Grushko(Jülich, Germany) らのグループによって詳細に調べられた三元合金状態図を用いる。特に,同一組成比における形成相が第三元素により異なる場合(例えば,Al-Pd-Ru:準結晶,Al-Pd-Fe: 1/1 近似結晶)に注目し,混合比率を連続的に変化させ(例えば,Fe:Ru=1:0 から 0:1 に変化させ)た場合の形成相の変化を調べる。第三元素としては,周期律表の縦方向の元素ペア(同族ペア)を混ぜた場合と,横方向の元素ペアを混ぜた場合について調べる。このような調査は,原子半径(幾何学的因子)や価電子濃度(電子的因子)など,構造制御の支配因子を抽出する上で有効であるとともに,元素混合によるエネルギーとエントロピーの内部バランスにおける微妙な変化が生じることで新規の複雑合金結晶が形成する可能性が期待できる。

カドミウム(Cd)-マグネシウム(Mg)-希土類金属(RE)系 (希土類金属として RE = Y , Ce , Sm , Gd , Tb , Dy , Ho , Er を想定) に対しては , Cd/Mg 比率を連続的に変化させた場合の正二十面体準結晶および近似結晶の平衡組成域を調査し , 相形成挙動や構造変化を調べる .

構造安定性の定量的評価(計算): 第一原理電子構造計算を用いて比較的簡単な構造を持つ アルミ(AI)-遷移金属系化合物における電子構造を調べ,遷移金属種による違いを考察する.得ら れた結果に基づき,複雑合金結晶の安定性と遷移金属種の間の関係を考察する.また,実験的に 決定された単位胞当たり 100~500 個程度の原子を含む複雑合金結晶に対して第一原理計算を 用いた構造安定性の定量的評価を行うことも検討する.

相形成マップの作製(実験と理論の統合): 上記の実験的知見と理論的知見を組み合わせて, 遷移金属種による差異を統合した相形成マップを作成する.その際,平均価電子濃度 e/a(電子的因子),Al と遷移金属の占有体積比 v(Al)/v(TM)(幾何学的因子),Al と遷移金属間の電離度の差(化学的因子),など,相形成マップの座標軸として最適なパラメタの組み合わせを探索する.また.相形成マップを実際に活用した複雑合金結晶の探索を行い,有効性と限界を検証する.

4. 研究成果

(1) アルミ(Al)-パラジウム(Pd)-遷移金属 (TM) 系

Al-Pd-(Ru,Fe)系近似結晶の相形成挙動における同族置換の効果

Fe および Ru は共に 8 族元素であり、価電子供給能は等しいと考えられるため、Al-Pd-Ru 系および Al-Pd-Fe 系は類似した相形成挙動をもつと期待される。しかし、Al-Pd-Ru 系においては正二十面体準結晶や 3/2 近似結晶が形成し Al-Pd-Fe 系においてはそれらが形成しないという、顕著な違いが実際には存在する。この要因を明らかにするために、 $Al_{72.0}$ Pd $_{16.4}$ (Ru,Fe) $_{11.6}$ の組成において Ru:Fe 比を 1:0 から 0:1 まで変化させた合金を 1035°C で 48 時間熱処理した試料を作製した。この組成に対して、Al-Pd-Ru 系では 3/2 近似結晶(P_{40} 相)が、Al-Pd-Fe 系では 1/0 近似結晶(C 相)が形成する。Ru を Fe で部分置換していくと、最初、3/2 近似結晶の格子定数が徐々に収縮し、置換率がある程度大きくなると 1/0 近似結晶に転化した。Fe と Ru が同一の価電子供給能を持つと仮定すると、Fe が Ru よりも原子半径が小さいことが格子定数の減少、さらに近似結晶の次数の変化に至った原因と考えられる。

TM = Fe に対する 1/1 近似結晶の相形成と構造

前節の調査で Ru:Fe 比 0:1 とした $Al_{72.0}Pd_{16.4}Fe_{11.6}$ 合金試料は 1/1 近似結晶(C 相 ,空間群 Pm_3)の安定組成域に位置する . この合金を十分に長時間熱処理すると ,組成的に隣接した倍周期秩序を有する 1/1 近似結晶(C_1 相 ,空間群 Im_3)と同様の超格子反射が現れることが分かった . このことは , C 相が既存の構造モデルとは異なる最安定構造を持つ可能性を強く示唆する . そこで ,C 相からわずかに液相フラックスを含むように調整した仕込み組成 $Al_{73}Pd_{16}Fe_{11}$ の合金を C 相の融点直下で B 日間アニールし ,安定構造を実現した C 相の単結晶試料(粒径~数百 μm ,図 1 左)を得た . 単結晶粒の一つを取り出し X 線構造解析を行った結果,空間群が Im_3 である格子定数 15.3 Å を持つ C_1 相と極めて類似した結晶構造を持つことが分かった (図 1 右). 但し ,この構造は C_1 相とは遷移金属種の分布に違いが見られ , C_1 相との間には明確な組成ギャップが存在する . 段階的に熱処理温度を変化させ C 相の形成挙動をさらに詳細に調べると , C 相と C_1 相の組成域は約 C_1 1000 以上の温度域で融合しており , ある温度以下でスピノーダル分解よる組成ギャップが生じて二相に分離したものであることが強く示唆された .

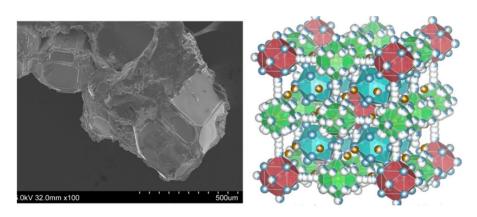


図1: (左) Al-Pd-Fe 系 1/1 近似結晶 (C相) の単結晶試料の SEM 画像 .(右)単結晶 X 線回 折を用いた構造解析により明らかになった C相の安定構造 (空間群 Im-3,格子定数 15.3 Å).

F型正二十面体準結晶および近似結晶の相形成マップ

正二十面体準結晶や近似結晶は,フェルミ準位近傍に形成した擬ギャップにより電子的に構造安定

性を実現した物質群である. 擬ギャップ形成には Hume-Rothery 機構および sp-d 軌道混成効果が関 与し、これらは合金を構成する遷移金属種に大き〈依存する、相形成を遷移金属種の違いを超えて統 一的に理解する為に, TM = Mn, Fe, Co, Ru, Rh, Re, Ir に対する Al-Pd-TM 状態図における正二 十面体準結晶および近似結晶の相形成組成域を, 価電子濃度(一原子当たりの平均価電子数=e/a) および Al の体積分率(φAl:各原子の Wigner-Seitz 球体積と組成からの見積もり)を軸とする2次元の 座標空間に射影すると図2が得られる.図2(a)では遷移金属に対して G.V. Raynor (Prog. Met. 1 (1949) 1~76) による負の e/a 値を用い、図2(b)では水谷&佐藤(内田老鶴圃、2015)による価電子の遍 歴電子成分値を用いた、Raynorの負の価数モデルはアルミ原子から遷移金属への過大な電子供与と いう固体物理の常識と相いれない描像に基づいており、結果の解釈に難がある、にもかかわらず、全体 的な相形成挙動があぶりだされているように見える.一方,水谷&佐藤の遍歴的 e/a 値は Hume-Rothery 機構に基づいて相形成挙動を理解する上でより有効性と考えられるが、Raynor の値と大きく 異なり,これを用いたマップでは φΑΙと価電子濃度に強い線形相関が見える.この図は,合金中の遍歴 電子が実効的に Al 原子が占める空間領域に広がって分布し,Hume-Rothery 機構による干渉効果 により構造を安定化させていることを示唆している.一方で,軌道混成効果に注目し,d軌道の平均空 席数を新たな座標軸に採用すると,図2(a)と似た分布図が得られる.従って,Raynor の値を用いた図 2(a)のマップには、干渉効果とともに軌道混成効果が重畳して混在していると思われる、実は、今回用 いた水谷&佐藤(2015)の遍歴的 e/a 値はFLAPW法による第一原理計算を用いて導出されているが、 その導出過程および解釈には依然として議論の余地が残されており,将来的にはより精密化された e/a 値を用いて相形成マップを作ることが出来れば,図2(b)に見られる3d,4d,および5d遷移金属の間の 食い違いが解消されたより統一的な相形成挙動を明らかにすることができると期待している.

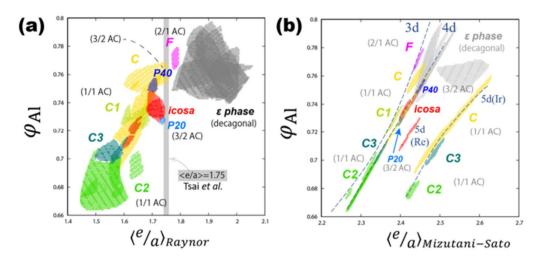


図2: 三元系状態図における準結晶および近似結晶の組成域を,価電子濃度 ($<e/a>) および Al の体積分率 (<math>\phi_{Al}$) をそれぞれ横軸および縦軸とする二次元座標空間に射影したマップ. (a)Raynor による負の価電子数を用いた場合. (b)水谷&佐藤による遍歴的 e/a 値を用いた場合.

(2) カドミウム(Cd)-マグネシウム(Mg)-希土類金属(RE)系

P型正二十面体準結晶および立方晶近似結晶の相形成

カドミウム(Cd)-マグネシウム(Mg)-希土類金属(RE = Y, Ce, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm)系において,P型正二十面体準結晶および立方晶近似結晶(1/1 近似結晶、2/1 近似結晶)の形成挙動に関する詳細な実験的調査を行った.Cd-RE 二元系においては準結晶および 1/1 近似結晶の形成がすでに報告されているので,ここでは Cd を Mg で部分置換した場合の相形成挙動に焦点を当てた.希土類の低濃度領域において組成の異なる多数の合金試料を作製し,粉末 X 線回折(XRD)および走査型電子顕微鏡(SEM)等を用いての相形成挙動を調べた.これにより Mg 濃度や熱処理温度,希土類元素種による相形成挙動の系統的変化を明らかにした.また,Ce,Smおよび Gd を除く希土類元素に対しては,適当な Mg 濃度において Cd-RE 二元系においては報告例がない 2/1 近似結晶相の形成を見出した.自己フラックス法を用いて準結晶,2/1 および 1/1 近似結晶の単結晶粒を育成することにも成功した.Cd-Mg 固溶体マトリクス中にミクロドメインを形成した正二十面体準結晶や近似結晶をもつ試料に対して,電子線後方散乱回折(EBSD)法および透過型電子顕微鏡(TEM)観察による結晶方位解析を行い,Cd-Mg-Yb 系において報告されている準結晶相と Cd-Mg マトリックスの間の結晶方位関係が今回調べた希土類の系でも実現していることを確認した.RE = Ce の場合には,他の希土類の場合とは顕著に異なり正二十面体準結晶や 2/1 近似結晶はいかなる組成比においても形成しないこと明らかになったが,

1/1 近似結晶は他の希土類の場合と同様に Cd と Mg の置き換えをかなり許容して形成することが分かった.ただし,この場合の 1/1 近似結晶は他の希土類の場合と大きく異なるタイプの金属間化合物相と二相共存領域を持つことが分かった.

カドミウム(Cd)-マグネシウム(Mg)-希土類金属(RE)系立方晶近似結晶の構造解析

RE = Y および Er に対する 2/1 近似結晶,RE = Y および Ce に対する 1/1 近似結晶の結晶構造解析を行った(図3). 二種類の 2/1 近似結晶は空間群 Pa-3 の同型構造であり,Nずれも RE = Yb に対する 2/1 近似結晶に関する過去の報告と合致するクラスタの配列をもつ.しかし,クラスタ内の希土類サイトである正二十面体シェルの特定のサイトが Mg に部分置換されている点や,クラスタの最内殻の原子配置が 3 個の Cd(Mg)原子からなる三角形の配置をもつ点において,RE = Yb の場合とは細かい特徴が異なる.一方,RE = Y に対する 1/1 近似結晶は空間群 Im-3 をもち,RE = Yb に対する 1/1 近似結晶と基本的に同型構造を持つ.しかし,RE = Ce に対する 1/1 近似結晶は Cd-Ce 二元系において Pn-3 であることが知られている.今回,Cd を Mg で置換した単結晶試料を得て構造解析を行うと,RE = Ce に対するこれまでの報告とは全く異なり,空間群 Fd-3 をもち二倍周期の超構造を形成していることが明らかになった(図4). 後者と同型構造は Cd-Eu 二元系における 1/1 近似結晶として過去に報告例がある.現在,Mg 濃度の増大による Pn-3 から Fd-3 構造への構造変化がどのように起きるのか,詳細な調査を進めている.このように,RE = Ce に対する 1/1 近似結晶の結晶構造およびその形成挙動は,他の三価の希土類金属の場合と比較して顕著な違いが見られることが明らかになった.

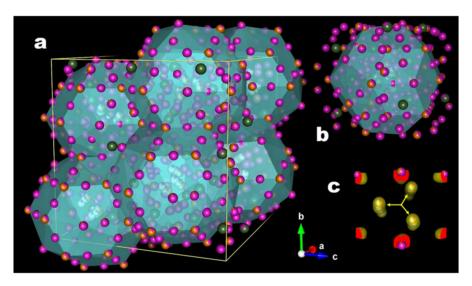
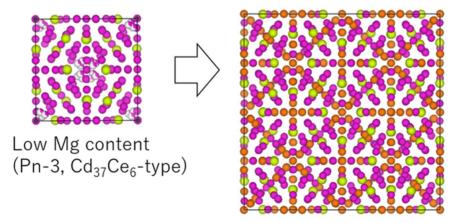


図3: Cd-Mg-Er 系 2/1 近似結晶の結晶構造解析の結果.(a) 8 個のクラスタからなる単位胞の構造.(b) 菱形三十面体の外形をもつクラスタ.(c) クラスタの中心付近の電子等密度面.三つのさやえんどう状に引き延ばされた電子分布が三角形の頂点に配置している.



High Mg content (Fd-3, Cd₂₅Eu₄-type)

図4: Cd-Mg-Ce 系 1/1 近似結晶の Mg 組成の増大に伴う構造変化.

5 . 主な発表論文等

「雑誌論文〕 計4件(うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件)

1 . 著名名 Fujital Nobubhisa, Ogashisa Makoto 2 . 論文標語 A Unitied Genetical Framework for Faca-Centered Icosahedral Approximants in AIPPdTTM (TN = 2021年 2021	〔雑誌論文〕 計4件(うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件)	
2. 論文標證 A Unified Secretical Framework for Face-Centered Icosahedral Approximants in AI7Pd7TM (TII) = 17minist (ton Netal) Systems		
A Unified Geometrical Framework for Face-Centered Icosahedral Approximants in AI7877M (TN = Transition Metal) Systems 6. 最初と最後の頁 329 - 337 329 -		UZ
Transition Metal) Systems 3 . Mist A		1 - 1,- 1
Matterials TransActions 329 - 337		2021年
お野爺文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 投票機能 日間の		
10.2320/mater trans. MT-IB20200007 有	MATERIALS TRANSACTIONS	329 ~ 337
10.2320/mater trans. MT-IB20200007 有		
A - ブンアクセス		_
1. 著名名 Labib Farid、Fujita Nobuhisa、Ohhashi Satoshi、Tsai An-Pang 4 . 整 822 822 822 823		
1. 著名名 Labib Farid、Fujita Nobuhisa、Ohhashi Satoshi、Tsai An-Pang 2. 論文標題 Locoshedral quasicrystals and their cubic approximants in the Cd-Mg-RE (RE?= Y, Sn, Gd, Tb, Dy, Ho. Er, Tim) systems 3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds 4. 巻 R2020年 1. 著名名 アカーブンアクセス 1. 著名名 Yamada Tsunetono、Fujita Nobuhisa、Labib Farid 2. 論文標題 2.1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>Retained Type Type Type Type Type Type Type Type</i>		国際共著
Labib Farid, Fujita Nobuhisa, Ohhashi Satoshi, Tsai An-Pang 822 2. 論文標題	オープンテクセスとしている(また、その子をもある)	-
2 - 論文標題 cosahedral quasicrystals and their cubic approximants in the Cd-Mg-RE (RE?= Y, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm) systems 6 - 最初と最後の頁 153541 ~ 153541 153		
Locahedral quasicrystals and their cubic approximants in the Cd-Mg-RE (RE?= Y, Sm, Sd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm) systems 3. 雑誌名	Labib Farid、Fujita Nobuhisa、Ohhashi Satoshi、Tsai An-Pang	822
# A	2.論文標題	5 . 発行年
3 . 雑誌名		2020年
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 直読の有無 有 日際共著 日 日 日 日 日 日 日 日 日		6.最初と最後の頁
10.1016/j.jallcom.2019.153541 有	Journal of Alloys and Compounds	153541 ~ 153541
10.1016/j.jallcom.2019.153541 有		
オープンアクセス 国際共著 1 . 著者名 Yamada Tsunetomo, Fujita Nobuhisa, Labib Farid 4 . 巻 77 2 . 論文標題 2/1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>R 5 . 発行年 2021年 3 . 雑誌名 Acta Crystal lographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials 6 . 最初と最後の頁 638~648 掲載論文のDOI (デジタルオプジェクト識別子) 10.1107/S2052520621006715 査読の有無 有 オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である) 4 . 巻 56 2 . 論文標題 カノニカルセルタイリング 正 2 0 面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 5 . 発行年 2021年 3 . 雑誌名 固体物理 6 . 最初と最後の頁 5~22 掲載論文のDOI (デジタルオプジェクト識別子) なし 有 査読の有無 有 オープンアクセス 国際共著</i>		
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	10.1016/j.jallcom.2019.153541	有
1 . 著者名 Yamada Tsunetomo, Fujita Nobuhisa, Labib Farid 4 . 巻 77 2 . 論文標題 2/1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>R</i> Since Indian 1/1 cubic approximants in the ternary <i>R 5 . 発行年 2021年 3 . 雑誌名 Acta Crystallographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials 6 . 最初と最後の頁 638 - 648 掲載論文のDOI (デジタルオプジェクト識別子) 10.1107/S2052520621006715 査読の有無 6 オープンアクセス 国際共著 1 . 著者名 藤田 仲尚 4 . 巻 8 2 . 論文標題 カノニカルセルタイリング 正20面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 5 . 発行年 2021年 3 . 雑誌名 固体物理 6 . 最初と最後の頁 5 - 22 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし 査読の有無 有 オープンアクセス 国際共著</i>		国際共著
Yamada Tsunetomo, Fujita Nobuhisa, Labib Farid 77 2. 論文標題 2/1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>R</i> 5. 発行年 2021年 3. 雑誌名 Acta Crystallographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials 6. 最初と最後の頁 638~648 掲載論文のDDI (デジタルオプジェクト識別子) 10.1107/S2052520621006715 査読の有無 有 オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である) 国際共著 5. 発行年 2021年 1. 著者名 藤田 伸尚 2. 論文標題 カノニカルセルタイリング 正20面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 2021年 5. 発行年 2021年 3. 雑誌名 固体物理 6. 最初と最後の頁 5~22 4. 最初と最後の頁 5~22 掲載論文のDDI (デジタルオプジェクト識別子) なし 有 査読の有無 有 オープンアクセス 国際共著	オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	-
2 . 論文標題 2/1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>2/1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>3 . 雑誌名 Acta Crystal lographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials 6 . 最初と最後の頁 638~648 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2052520621006715 査読の有無 有 オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である) 国際共著 5 . 発行年 2021年 2 . 論文標題 カノニカルセルタイリング 正20面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 2021年 5 . 発行年 2021年 3 . 雑誌名 固体物理 6 . 最初と最後の頁 5~22 6 . 最初と最後の頁 5~22 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし 7 . 2 . 2 . 3 . 3 . 3 . 3 . 3 . 3 . 3 . 3</i></i>	1.著者名	4 . 巻
2/1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>R</i> -Cd-Mg (<i) i="" r<="">-Cd-Mg (<i>R</i>-Cd-Mg (<i) i="" r<="">-Cd-Mg (<i) i="" r<=""> 6 . 最初と最後の頁 638 ~ 648 3 . 雑誌名 6 . 最初と最後の頁 638 ~ 648 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2052520621006715 重藤の有無 6 オープンアクセス 国際共著 7 1 . 著者名 8</i)></i)></i)></i)></i)></i)></i)>	Yamada Tsunetomo, Fujita Nobuhisa, Labib Farid	77
2/1 and 1/1 cubic approximants in the ternary <i>R</i> -Cd-Mg (<i) i="" r<="">-Cd-Mg (<i>R</i>-Cd-Mg (<i) i="" r<="">-Cd-Mg (<i) i="" r<=""> 6 . 最初と最後の頁 638 ~ 648 3 . 雑誌名 6 . 最初と最後の頁 638 ~ 648 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S2052520621006715 重藤の有無 6 オープンアクセス 国際共著 7 1 . 著者名 8</i)></i)></i)></i)></i)></i)></i)>	2.論文標題	5.発行年
Acta Crystal lographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials 638~648 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)		
Acta Crystal lographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials 638~648 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	3 雑誌名	6 最初と最後の百
10.1107/S2052520621006715 有 国際共著 オープンアクセスとしている(また、その予定である)		
10.1107/S2052520621006715 有 国際共著 オープンアクセスとしている(また、その予定である)		
オープンアクセス 国際共著 1 . 著者名	掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
オープンアクセスとしている(また、その予定である) - 1 . 著者名 4 . 巻 56	10.1107/\$2052520621006715	有
1 . 著者名 藤田 伸尚 4 . 巻 56 2 . 論文標題 カノニカルセルタイリング 正20面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 5 . 発行年 	オープンアクセス	国際共著
藤田 伸尚 56 2 . 論文標題 カノニカルセルタイリング 正 2 0 面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 5 . 発行年 2021年 3 . 雑誌名 固体物理 6 . 最初と最後の頁 5 ~ 22 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし 有 査読の有無 有 オープンアクセス 国際共著		-
藤田 伸尚 56 2 . 論文標題 カノニカルセルタイリング 正 2 0 面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 5 . 発行年 2021年 3 . 雑誌名 固体物理 6 . 最初と最後の頁 5 ~ 22 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし 有 査読の有無 有 オープンアクセス 国際共著	1	Δ 券
カノニカルセルタイリング 正 2 0 面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 2021年 3 . 雑誌名 固体物理 6 . 最初と最後の頁 5~22 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) なし 査読の有無 有 オープンアクセス 国際共著		
カノニカルセルタイリング 正 2 0 面体ハイパーマテリアルへの幾何学的アプローチ 2021年 3 . 雑誌名 固体物理 6 . 最初と最後の頁 5~22 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) なし 査読の有無 有 オープンアクセス 国際共著	2 绘文極暗	5
3.雑誌名 6.最初と最後の頁 固体物理 5~22 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 なし 有 オープンアクセス 国際共著		
固体物理 5~22 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 査読の有無 なし 有 オープンアクセス 国際共著	2 74424-47	•
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)		
なし 有 インアクセス 国際共著		
なし 有 インアクセス 国際共著	掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査詩の有無
	オープンアクセス	国際共著
TO THE THE TANK A PRINCIPLE OF THE TANK	オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	- -

〔学会発表〕 計11件(うち招待講演 2件/うち国際学会 2件)
1.発表者名 藤田伸尚,阿部圭史,福島武
2 . 発表標題 AI-Pd-TM(TM:遷移金属)系正二十面体準結晶および関連化合物の形成条件と電子構造
3 . 学会等名 日本物理学会 第 76 回 年次大会
4 . 発表年 2021年
1.発表者名 藤田伸尚,阿部圭史,福島武
2 . 発表標題 AI-Pd-TM(TM:遷移金属)系正二十面体準結晶および関連化合物の形成条件と電子構造
3.学会等名 第25回準結晶研究会
4.発表年 2021年
1.発表者名藤田伸尚,阿部圭史,福島武
2 . 発表標題 アルミニウム-遷移金属合金における準結晶および高次近似結晶の相安定性について
3 . 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第 5 回領域会議
4 . 発表年 2020年
1.発表者名 阿部 圭史 , 藤田 伸尚 , 山根 久典
2 . 発表標題 Al-Pd-(Ru, Fe)系近似結晶相の形成および構造
3.学会等名 日本金属学会2020年秋期講演大会 4.発表年

2020年

3.学会等名

日本金属学会2020年秋期講演大会

4.発表年

2020年

1.発表者名

Farid Labib, Takayuki Shiino, Daisuke Okuyama, Nobuhisa Fujita, Tsunetomo Yamada, Daisuke Morikawa, Keiichiro Imura, Kazuhiko Deguchi, Kenji Tsuda, Taku Sato, Noriaki Sato, An-Pang Tsai

2 . 発表標題

Effects of Mg addition on magnetic behavior of Cd-Mg-RE (RE = Tb, Ce) 1/1 approximants

3 . 学会等名

日本物理学会 2020年秋季大会

4 . 発表年 2020年

1.発表者名

Nobuhisa Fujita, Marek Mihalkovic

2 . 発表標題

Canonical-cell geometry: a practical framework for describing the packing of icosahedral clusters

3 . 学会等名

Interdisciplinary Symposium for Quasicrystals and Strongly Correlated Electron Systems (QSC2019)(招待講演)(国際学会)

4 . 発表年

2019年

1.発表者名

Nobuhisa Fujita, Marek Mihalkovic

2 . 発表標題

Canonical-cell geometry: a renewed perspective

3 . 学会等名

14th International Conference on Quasicrystals (ICQ14)(招待講演)(国際学会)

4. 発表年

2019年

1	以

Farid Labib, Daisuke Okuyama, Nobuhisa Fujita, Tsunetomo Yamada, Satoshi Ohhashi, Taku J. Sato, An Pang Tsai

2 . 発表標題

Magnetic properties of Icosahedral quasicrystals and their cubic approximants in Cd Mg RE (RE = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm) systems

3 . 学会等名

第24回準結晶研究会

4.発表年

2020年

1. 発表者名

福島武, 藤田伸尚, 大橋諭

2 . 発表標題

AI-Pd-Ru 系正二十面体準結晶の相安定性に対する Cr 置換の影響

3.学会等名

第24回準結晶研究会

4.発表年

2020年

1.発表者名

阿部 圭史, 大橋 諭, 藤田伸尚, 蔡 安邦

2 . 発表標題

AI-Pd-(Fe, Ru)系近似結晶の同族置換による相形成要因の調査

3 . 学会等名

日本金属学会2019年春期講演大会

4.発表年

2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6.研究組織

	· W/ プルボニ 声以			
	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考	
	蔡 安邦 東北大学・多元物質科学研究所・教授			
石写技プ者	(Tsai An-Pang)			
	(90225681)	(11301)		

6.研究組織(つづき)

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考	
	大谷 博司	東北大学・多元物質科学研究所・教授		
研究協力者	(Ootani Hiroshi)			
	(70176923)	(11301)		

7.科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
インド	UGC-DAE Consortium for Scientific Res.			
スロバキア	Slovak Academy of Sciences			