

機関番号：32660

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2009～2010

課題番号：21760522

研究課題名 (和文) 正20面体クラスター特有の規則-不規則相転移における4面体配向メカニズムの解明

研究課題名 (英文) Study on the orientational ordering of the tetrahedron inside an icosahedral cluster

研究代表者

田村 隆治 (TAMURA RYUJI)

東京理科大学・基礎工学部・准教授

研究者番号：50307708

研究成果の概要 (和文)：亜鉛合金 (Zn6Sc) の相転移における Zn 4 面体の微視的挙動を放射光などを用いて調べ、以下の点を明らかにした。1. 高温から転移点に向かうにつれ、4 面体間の相関距離が発散的に増加し、転移点直上では約 1000 Å に達すること。2. 転移点で、立方晶から単斜晶に急峻に歪むこと。3. 転移点以下では、散漫散乱ピークがブラッグピークに移行し、ドメインサイズが約 1000 Å に達すること。以上より、Zn6Sc 合金の 4 面体の微視的挙動について一定の理解が得られた。

研究成果の概要 (英文)：The behavior of a tetrahedron in the Zn6Sc compound was investigated by using synchrotron radiation. As a result, following insights into its behavior has been obtained. 1. The correlation length between the tetrahedral develops and reaches ~1000 Å as temperature approaches  $T_c$ . 2. The crystal abruptly transforms from cubic to monoclinic lattice at  $T_c$ . 3. Diffuse scatterings observed above  $T_c$  merge into Bragg peaks below  $T_c$  and the domain size reaches ~1000 Å.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2011年度	1,800,000	540,000	2,340,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

研究分野：金属物性

科研費の分科・細目：材料工学・金属物性

キーワード：準結晶、近似結晶、規則-不規則相転移

## 1. 研究開始当初の背景

亜鉛合金 (Zn6Sc) の構造相転移は専らマクロな測定により調べられており、転移点、転移エントロピー、低温相の構造が明らかにされている。しかしながら、相転移の本質とされる 4 面体の配向規則化の微視的挙動については全くといって理解されていなかった。そこで、本研究では、放射光を用いて、4 面体の微視的挙動に関する知見を得ると

ともに、本相転移が 4 面体の配向の規則-不規則相転移と見なしえるかどうかを実験的に検証した。

## 2. 研究の目的

本研究では、放射光を用いて、転移点上下で散漫散乱、超格子反射、格子歪みの測定を行うことにより、Zn6Sc 化合物の規則-不規則相転移における 4 面体の挙動を明らかにす

ることを目的とした。

### 3. 研究の方法

合金の作製には、高純度金属原料をアルミナ坩堝に入れ、それを真空封入し電気炉で溶解することにより行った。次いで、溶解後徐冷し、セルフフラックス法により単結晶塊を得た。

得られた単結晶を所定の面方位に切出し、フランスの放射光施設 (ESRF) にて、散漫散乱、超格子反射の温度依存性、相転移に伴う格子歪みの温度依存性を精密に測定した。

### 4. 研究成果

得られた散漫散乱の温度依存性の一例を図1に示す。

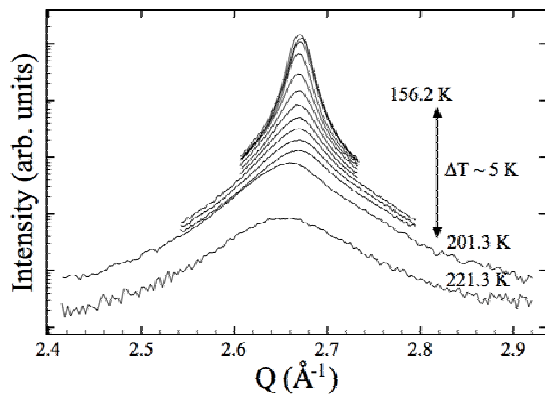


図1より転移点 (157K) よりかなり高温から、4面体間の短距離秩序の存在を示す散漫散乱が観測され、温度低下に伴い発散的にその強度が増加することが分かる。解析の結果、転移点直上では相関距離が約 1000 Å に達することが判明し、また、二次相転移から予想される転移点は実際の転移点よりも低くなることも判明した。さらに、散漫散乱プロファイルがガウシアン関数で良くフィッティングできることから、4面体間の相互作用が指数関数で良く表現できることも分かった。

一方、格子歪みの温度依存性の測定からは、転移点で格子が立方晶から単斜晶に歪み、また6種類のドメインが形成されることが明らかとなった。

転移点以下では、散漫散乱がブラッグピークへと移行し、長距離秩序が形成される様子が観察された。ピークの半値幅から見積もったドメインサイズは約 1000 Å であり、相関距離と良く対応することが分かった。

以上、Zn<sub>6</sub>Sc 化合物の Zn 4 面体の配向規則化の微視的過程について一定の理解が得られた。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 1 件)

T. Yamada, R. Tamura, Y. Muro, K. Motoya, M. Isobe, Y. Ueda, Experimental evidence for a phase transition in a Zn<sub>6</sub>Sc cubic approximant, Phys. Rev. B 82 (2010) 134121-1-5

[学会発表] (計 1 件)

T. Yamada, C. P. Gomez, R. Tamura, H. Euchner, A. Yamamoto, M. de Boissieu, Diffuse Scattering in the Zn<sub>6</sub>Sc 1/1 Cubic Approximant, 11th International Conference on Quasicrystals, 2010年6月14日 北海道大学 (札幌)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称 :  
発明者 :  
権利者 :  
種類 :  
番号 :  
出願年月日 :  
国内外の別 :

○取得状況 (計 0 件)

名称 :  
発明者 :  
権利者 :  
種類 :  
番号 :  
取得年月日 :  
国内外の別 :

[その他]  
ホームページ等

### 6. 研究組織

#### (1) 研究代表者

田村 隆治 (TAMURA RYUJI)  
東京理科大学・基礎工学部・准教授  
研究者番号 : 50307708

#### (2) 研究分担者 ( )

研究者番号 :

#### (3) 連携研究者 ( )

研究者番号 :