

一般ペンローズ・パターンよりの回折強度*

Diffraction Intensity from Generalized Penrose Pattern*

南 宣行*

Nobuyuki MINAMI*

Penrose quasi-lattices are produced by projection of a regular lattice in five-dimensional space. The shift-effect of so-called "window" with a Rhombic-icosahedron, on the assembly of the quasi-lattice points and on the diffraction intensity from them, is investigated. Various Penrose patterns are obtained by shifting the window along 5-fold axis in it, and diffraction patterns from them are different from each other. Generally, in case where a dimension of producing space is larger than twice of a dimension of produced space, the shift effect appears in the assembly of the quasi-lattice points and its diffracted intensity.

key words: Quasicrystal, Penrose pattern, Projection method, Window, Diffraction intensity.

1 緒 論

一般に, n 次元格子を m 次元空間 ($n > m$) に投影することによって得られる準格子は, $n \leq 2m$ の場合には, いわゆる「窓」のシフト量に依存しない^[1]. しかし, 5 次元超立方格子を 2 次元空間に投影することによって得られるペンローズ・パターンのように $n > 2m$ の場合には, 窓のシフト量により, 種々のパターンが得られる. 本稿では窓のシフト量を変えることによってできるより一般的なペンローズ準格子を作成する. また, その準格子による回折強度式がシフト量にどのように依存するか明らかにする.

2 一般ペンローズ・パターンの構成

5 次元空間における直交単位ベクトルを $e_1, \dots, e_5$ とすると, 5 次元超格子点は

$$\mathbf{p} = \sum_{j=1}^5 p_j \mathbf{e}_j \quad (p_j \text{ は整数}) \quad (1)$$

平成 2 年 5 月 7 日受理

* 数学物理学科

* 日本物理学会に発表, 平成元年 10 月 6 日

で与えられる. この座標表現に次式で与えられる変換行列 T (t_{jk} : 行列要素) の直交変換を用いる^[2].

$$T = \sqrt{\frac{2}{5}} \begin{pmatrix} \cos \gamma & \cos 2\gamma & \cos 3\gamma & \cos 4\gamma & 1 \\ \sin \gamma & \sin 2\gamma & \sin 3\gamma & \sin 4\gamma & 0 \\ \cos 2\gamma & \cos 4\gamma & \cos \gamma & \cos 3\gamma & 1 \\ \sin 2\gamma & \sin 4\gamma & \sin \gamma & \sin 3\gamma & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2)$$

ただし, $\gamma = 2\pi/5$ である. 基本ベクトル $\mathbf{e}_j$ は

$$\mathbf{e}'_j = \sum_{k=1}^5 t_{jk} \mathbf{e}_k \quad (3)$$

によって, 新 $\mathbf{e}'_j$ に移される. また, 座標 p_j は変換式

$$p'_j = \sum_{k=1}^5 t_{jk} p_k \quad (4)$$

によって, 新しい座標 p'_j に変わる. 直交変換によって得られた基本ベクトルのはじめの 2 個 $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2$ でできる 2 次元の部分空間および残りの 3 個の $\mathbf{e}'_3, \mathbf{e}'_4, \mathbf{e}'_5$ でできる 3 次元の部分空間をそれぞれ $E^{\parallel}$ および $E^{\perp}$ とする. 変換前の基本ベクトル $\mathbf{e}_j$ の $E^{\parallel}$ および $E^{\perp}$ 成分をそれぞれ $\mathbf{e}_j^{\parallel}$

および $e_j^\perp$ とすると

$$e_j^\parallel = \sum_{k=1}^2 t_{kj} e'_k \quad (5)$$

$$e_j^\perp = \sum_{k=3}^5 t_{kj} e'_k \quad (6)$$

格子点 p の $E^\parallel$ -, $E^\perp$ -成分 $p^\parallel$, $p^\perp$ は

$$p^\parallel = \sum_{j=1}^5 p_j e_j^\parallel \left(= \sum_{k=1}^2 t_{kj} e'_k \right) \quad (7)$$

$$p^\perp = \sum_{j=1}^5 p_j e_j^\perp \left(= \sum_{k=3}^5 t_{kj} e'_k \right) \quad (8)$$

次に，変換前の座標表現で 2^5 個の格子点 $(q_1, \dots, q_5)$, $(q_j, 0, 1)$ を頂点とする 5 次元超立方体 V を考える． V の内部の領域を $E^\perp$ に投影して得られる 3 次元の範囲を W とする． W はいわゆる窓 (Window) で，この場合では，Fig.1 に示すような菱形 30 面体である．無数の格子点 p のうち，その $E^\perp$ -成分 $p^\perp$ が W に含まれるような格子点を $E^\parallel$ に投影して得られる 2 次元部分空間における格子点 $p^\parallel$ がペンローズ・パターンを与える． W は $E^\perp$ 空間内で 3 次元シフト量 Δ の任意性がある．これを考慮すると， $p^\parallel$ を準格子点として採用するための条件は， $p^\perp$ にたいして，

$$p^\perp - \Delta \subset W = \left\{ \sum_{j=1}^5 x_j e_j^\perp \mid |x| < \frac{1}{2} \right\}. \quad (9)$$

Fig.1 における O は菱形 20 面体 W の重心である． W は AF に関して 5 回対称と 5 個の鏡映面をもつので，領域 W は回転軸 AF の周りの回転角を ϕ とすると，

$$W_0 = \{\phi \mid 0 < \phi < \pi/5\}, \quad (10)$$

の範囲にある 10 分の 1 の領域によって代表的に表現される． B, C, D, E はそれぞれその部分空間の境界にある点である． $p^\perp - \Delta$ が W の内部にある条件を求めるため，まず，その点を対称操作で W_0 の領域に移し，その点を $p'^\perp - \Delta'$

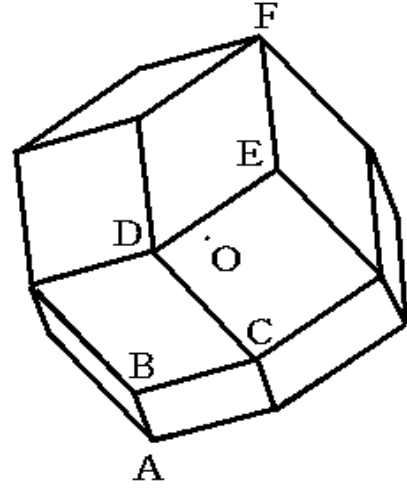


Fig. 1: A window with a rhombic-icosahedron obtained by projection to three-dimensional space from five-dimensional hypercube. O is a center of the window. $A \sim F$ place at the boundary of $1/10$ part of the window.

とした後，その点が 4 平面 ABC , BCD , CDE , DEF より点 O 側にある条件を求める．ベクトル $\vec{OA} \sim \vec{OF}$ はそれぞれ次式で表される．

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{OA} = -\sum_{j=1}^5 \frac{1}{2} e_j^\perp \equiv -e_0^\perp \\ \vec{OB} = \vec{OA} + e_1^\perp \\ \vec{OC} = \vec{OB} + e_4^\perp \\ \vec{OD} = \vec{OC} + e_3^\perp \\ \vec{OE} = \vec{OD} + e_2^\perp \\ \vec{OF} = \vec{OE} + e_5^\perp = e_0^\perp \end{array} \right. \quad (11)$$

n_1, n_2, n_3, n_4 をそれぞれ，平面 ABC , BCD , CDE , DEF の法線を持ち， O からそれぞれの平面までの距離の逆数を大きさにもつベクトルとすると，それらの 3 成分は，それぞれ，次の連立方程式の解で与えられる．

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{OA} \cdot n_1 = \vec{OB} \cdot n_1 = \vec{OC} \cdot n_1 = 1 \\ \vec{OB} \cdot n_2 = \vec{OC} \cdot n_2 = \vec{OE} \cdot n_2 = 1 \\ \vec{OC} \cdot n_3 = \vec{OD} \cdot n_3 = \vec{OE} \cdot n_3 = 1 \\ \vec{OD} \cdot n_4 = \vec{OE} \cdot n_4 = \vec{OF} \cdot n_4 = 1 \end{array} \right. \quad (12)$$

$p'^\perp - \Delta'$ がこれらの 4 平面の O 側にある条件

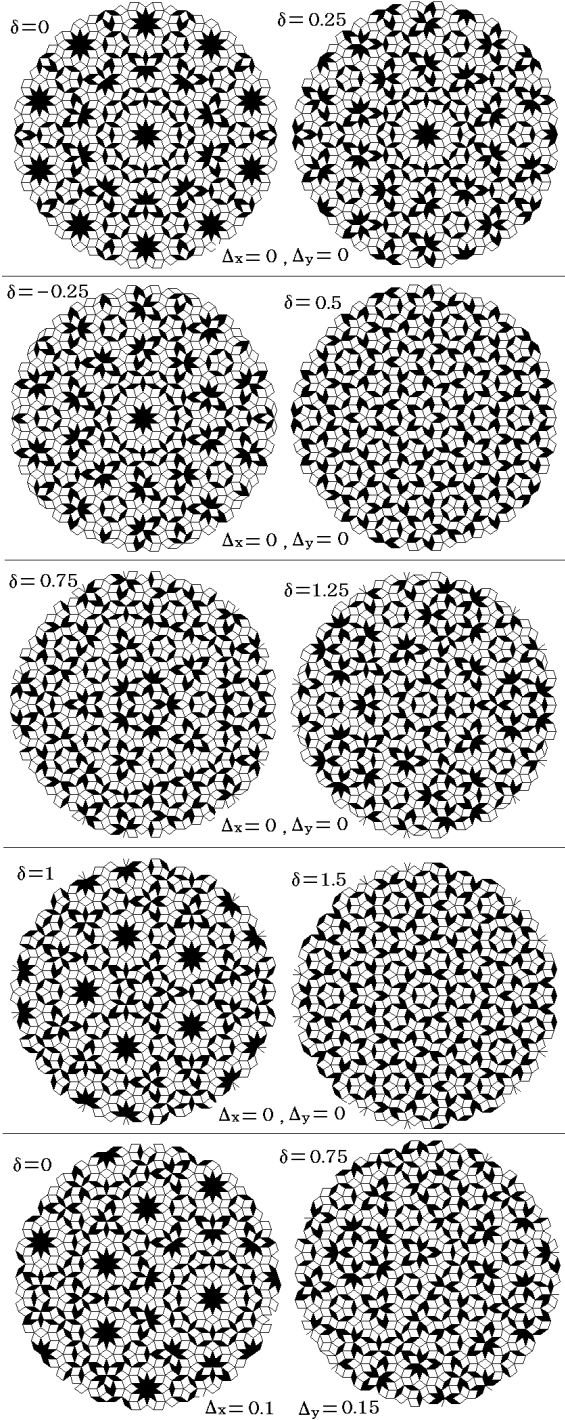


Fig. 2: Generalized Penrose patterns for various shifts of the window produced by conditions. $p^2 < 100$ and $p^\perp \in W$ in eq.(9). δ is shift along 5-fold axis in the window.

は，次の4条件を同時に成立することである．

$$(p'^\perp - \Delta') \cdot n_j < 1 \quad (j = 1, 2, 3, 4). \quad (13)$$

Fig.2 は，種々の Δ について， $p^2 < 100$, $p'^\perp - \Delta' \in W$ の条件で得られたペンローズ・パターンである．AF に沿って z 軸 (e'_5 に対応)，それに垂直な面内に x, y 軸 (e'_3, e'_4 に対応) を選び，

$$\Delta = \Delta_x e'_3 + \Delta_y e'_4 + \Delta_z e'_5 \quad (14)$$

とした．ただし，

$$\delta = 2|e'_0| \Delta_z = \sqrt{5} \Delta_z \quad (15)$$

である．得られるペンローズ準格子は部分空間 $E^\parallel$ における5個の基本ベクトル $e_1^\parallel, \dots, e_5^\parallel$ のうちから2個の基本ベクトルが選ばれ，10種類のセルから構成されている．これらのセルは大きさが相似の2種の菱形に分類できる．図では見易くするため，小さい方の菱形を黒く塗っている．窓の xy 平面に平行に移動すると，単に対称点が平行移動するだけで全体のパターンは変わらないことがわかる． $(\Delta_x, \Delta_y) = (0, 0)$ の場合には5回対称点が各パターンの中心にあることが分かる．オリジナルなペンローズ・パターンは $\delta = 0.5$ の場合である．

3 一般ペンローズ・パターンによる回折振幅

一般ペンローズ・パターンの各準格子点が，電子分布 ρ_a の原子1種類によって占められているとすると，位置ベクトル r における，この原子集団の電子分布 ρ は

$$\sum_p s(p^\perp - \Delta) \rho_a(r - ap^\parallel) \quad (16)$$

ここで， p に関する和は， p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 について $-\infty$ から ∞ のすべての整数をとる． a はセルの一辺の長さの $\sqrt{5/2}$ 倍である．関数 s は窓の外形関数である．すなわち，

$$s(r) = \begin{cases} 1 & r \in W \\ 0 & \text{others} \end{cases} \quad (17)$$

運動学的な X 線回折振幅は (16) 式のフーリエ変換で与えられる．散乱ベクトルを $\mathbf{b}$ とすると，回折振幅は電子単位で次式で与えられる．

$$A(\mathbf{b}) = f(\mathbf{b}) \sum_{\mathbf{p}} s(\mathbf{p}^\perp - \Delta) e^{2\pi i \mathbf{a} \mathbf{p}^\parallel \mathbf{b}}, \quad (18)$$

ここで， f は原子散乱因子で，

$$f(\mathbf{b}) = \int \rho_a(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{b} \mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (19)$$

ポアソンの和の公式より，

$$A(\mathbf{b}) = f(\mathbf{b}) \sum_{\mathbf{h}} \int s(\mathbf{u}^\perp - \Delta) e^{2\pi i (\mathbf{a} \mathbf{u}^\parallel \mathbf{b} - \mathbf{u} \mathbf{h})} d\mathbf{u} \quad (20)$$

ここに， $\mathbf{h}$ は $(h_1 h_2 h_3 h_4 h_5)$ で与えられる 5 次元格子点， $\mathbf{u}$ は 5 次元座標点を表す． $d\mathbf{u}$ は 5 次元体積素片である． $\mathbf{u}^\perp, \mathbf{u}^\parallel$ は部分空間 $E^\perp, E^\parallel$ 内のベクトルである．

$$\mathbf{h} \mathbf{u} = \mathbf{h}^\parallel \mathbf{u}^\parallel + \mathbf{h}^\perp \mathbf{u}^\perp, \quad (21)$$

$$d\mathbf{u} = d\mathbf{u}^\parallel d\mathbf{u}^\perp, \quad (22)$$

であるから，

$$A(\mathbf{b}) = f(\mathbf{b}) \sum_{\mathbf{h}} \int s(\mathbf{u}^\perp) e^{2\pi i \mathbf{h}^\perp (\mathbf{u}^\perp + \Delta)} \times \int e^{2\pi i (\mathbf{a} \mathbf{b} - \mathbf{h}^\parallel) \mathbf{u}^\parallel} d\mathbf{u}^\parallel$$

第 2 の積分は δ 関数で表され，

$$A(\mathbf{b}) = f(\mathbf{b}) \sum_{\mathbf{h}} e^{-2\pi i \mathbf{h}^\perp \Delta} S(\mathbf{h}^\perp) \delta(\mathbf{a} \mathbf{b} - \mathbf{h}^\parallel) \quad (23)$$

ここに， S は菱形 20 面体のフーリエ変換で次式で与えられる．

$$S(\mathbf{h}^\perp) = \int s(\mathbf{u}^\perp) e^{2\pi i \mathbf{u}^\perp \mathbf{h}^\perp} d\mathbf{u}^\perp \quad (24)$$

$\mathbf{h}^\parallel$ および $\mathbf{h}^\perp$ は $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2$ および $\mathbf{e}'_3, \mathbf{e}'_4, \mathbf{e}'_5$ によって次式で与えられる．

$$\mathbf{h}^\parallel = \sum_{k=1}^2 \left(\sum_{j=1}^5 t_{jk} h_j \right) \mathbf{e}'_k \quad (25)$$

$$\mathbf{h}^\perp = \sum_{k=3}^5 \left(\sum_{j=1}^5 t_{jk} h_j \right) \mathbf{e}'_k \quad (26)$$

(23) 式から分かるように $A(\mathbf{b})$ は $\mathbf{b} = \mathbf{h}^\parallel / a$ にのみ値をもつ． $\mathbf{h}^\parallel$ は 2 次元空間内のベクトルであるので，ロッド状の分布を与える．いま， $\mathbf{h}^\parallel$ の $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2$ 成分をそれぞれ $h_x^\parallel, h_y^\parallel$ とし，(2) 式の行列要素 t_{jk} を (25) に代入して整理すると，次のように，整数を係数として，1 と無理数 $\sqrt{5}$ の 1 次結合の表現を得る．

$$\begin{cases} h_x^\parallel = \kappa_1 (H_1 + H_2 \sqrt{5}) \\ h_y^\parallel = \kappa_2 (H_3 + H_4 \sqrt{5}) \end{cases} \quad (27)$$

$$\text{ここで, } \kappa_1 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{5}}, \quad \kappa_2 = \sqrt{\frac{2}{5}} \frac{\sqrt{10 + 2\sqrt{5}}}{8}$$

$$\begin{cases} H_1 = 4h_5 - h_1 - h_2 - h_3 - h_4 \\ H_2 = h_1 - h_2 - h_3 + h_4 \\ H_3 = 2h_1 - h_2 + h_3 - 2h_4 \\ H_4 = h_2 - h_3 \end{cases} \quad (28)$$

上式より明らかなように，5 個の整数の組 $(h_1, \dots, h_5)$ と $(h_x^\parallel, h_y^\parallel)$ は 1 対 1 の関係にない． $\mathbf{h}^\parallel$ が同一の相違な整数の組 $(h'_1, \dots, h'_5)$ が無数存在する．(28) 式および，(28) で $h_j \rightarrow h'_j$ ($j = 1, \dots, 5$) と置いた式とが等しいとする関係から，次式を得る．

$$h'_j - h'_5 = h_j - h_5 \quad (j = 1, \dots, 4). \quad (29)$$

したがって，(23) 式における $\mathbf{h}$ に関する和，すなわち 5 個の整数 $h_1, \dots, h_5$ に関する和のうち，最初の 4 個の和を次の変換によって書き換える．

$$h_j - h_5 \rightarrow h_j, \quad (j = 1, \dots, 4). \quad (30)$$

新しい整数の組によって $h_x^\parallel, h_y^\parallel$ を表すと，それらは当然ながら， h_5 に依存しない．それらは行列要素 t_{jk} を使って，

$$h_x^\parallel = \sum_{k=1}^4 t_{1k} h_k, \quad h_y^\parallel = \sum_{k=1}^4 t_{2k} h_k. \quad (31)$$

$\mathbf{h}^\perp$ の $\mathbf{e}'_3, \mathbf{e}'_4, \mathbf{e}'_5$ 成分をそれぞれ $h_z^\perp, h_y^\perp, h_x^\perp$ とすると，

$$\begin{cases} h_x^\perp = \sum_{k=1}^4 t_{3k} h_k, & h_y^\perp = \sum_{k=1}^4 t_{4k} h_k, \\ h_z^\perp = \sqrt{5} + \frac{H}{\sqrt{5}} & (H = \sum_{k=1}^4 h_k). \end{cases} \quad (32)$$

(23) の和において, h_5 に関する項を抜き出すと,

$$\sum_{h_5=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \sqrt{5} h_5 (u_z^\perp - \Delta_z)}$$

上式は δ 関数の和

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\sqrt{5} u_z^\perp - \sqrt{5} \Delta_z - n)$$

で与えられるので, (24) 式において $u_z^\perp$ に関する積分をし, (23) を書き換えると,

$$A(\mathbf{b}) = f(\mathbf{b}) \sum_{\mathbf{h}} F(\mathbf{h}) e^{-2\pi i (h_x^\perp \Delta_x + h_y^\perp \Delta_y)} \delta(\mathbf{ab} - \mathbf{h}^\parallel) \quad (33)$$

ここに,

$$F(\mathbf{h}) = \sum_n e^{2\pi i H n / 5} \int \int s(u_x, u_y, \Delta_z + n / \sqrt{5}) e^{2\pi i (h_x^\perp \Delta_x + h_y^\perp \Delta_y)} du_x du_y / \sqrt{5} \quad (34)$$

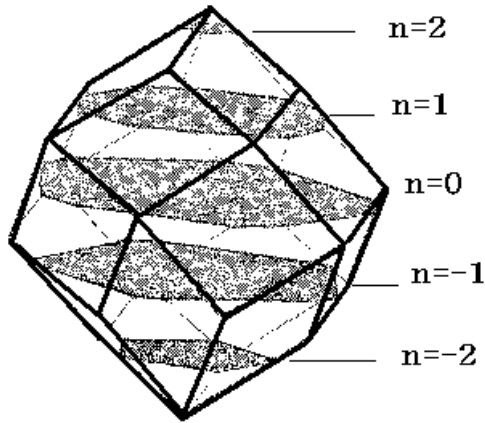


Fig. 3: Range of the integration in eq.(34) is shown for $\delta = 0.25$ by shadowed parts. The values of n for each part are given.

関数 s は有限な領域より外では 0 となるので, n に関する和の範囲は有限で,

$$n = n_0, n_0 + 1, \dots, n_0 + 4, \quad (35)$$

ただし, $n_0 = [\sqrt{5} \Delta_z - 2.5]$ である. また, u_x, u_y に関する積分範囲は菱形 20 面体を $u_z = \Delta_z + n / \sqrt{5}$ の平面で切った 5 枚の断面である. Fig.3 には $\Delta_z = 0.25 / \sqrt{5}$ の場合の積分範囲を示している.

4 シフト量の回折強度への影響

回折強度は (33) 式の絶対値の 2 乗であるので, 整数の組 (h_1, h_2, h_3, h_4) に関する和が 2 重に現れる. 一方, (31) 式より, これら 4 整数によって一意的に $h^\parallel$ が定まるので, これらの整数に関する 1 重和で表される. また, 位相の部分に現れている $h_x^\perp, h_y^\perp$ も (32) 式より一意的に定まることから, 複素共役との積で 1 となる. したがって, 1 原子当りの回折強度は Δ_z のみに依存し, 次式で与えられる. N を原子数とすると

$$I(\mathbf{b}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{|A|^2}{N} = f^2 \sum_{\mathbf{h}} |F|^2 \delta(\mathbf{ab} - \mathbf{h}^\parallel) \quad (36)$$

F はペンローズ格子の構造因子である. (34), (35) を考慮すると, 回折強度は Δ_z に関して周期 $1/\sqrt{5}$ の偶関数であることが分かる. これらの特徴は石原等の結果と一致する^[2], しかし, 2 節において得られた準格子では回折強度と同様の Δ_z 依存性を示さない. 例えば, $\delta = 0.25, 0.75, 1.25$ 等は同じ回折強度を与えるが 5 回対称点の周りの模様が明らかに異なっている. 一つのパターンには 5 回対称点はただ 1 つのみであるので, それらは互いに並進操作によって一致することはあり得ない. 準格子と回折強度のこれらの関係は, 投影法によって準格子をつくる場合, n が $2m$ より大きいときに生ずる一般的な特徴と考えられる.

参考文献

- [1] 南 宣行: 近畿大学理工学部研究報告, **23** (1989), 35.
- [2] Ishihara, K.N. and Yamamoto, A., *Acta Cryst.* **A44** (1988), 508.