8回対称2次元準結晶の構造因子*

Structure Factor of Two-dimensional Quasicrystal with Eightfold Rotational Symmetry*

南　宣行*

Nobuyuki MINAMI*

An eightfold two-dimensional quasi-lattice is given by projecting from four-dimensional hypercubic lattice. The quasi-lattice is divided into 6 sublattices. Eightfold quasicrystals are constructed by placing atoms in cells belonging to each sublattice. The theoretical structure factor for the quasicrystal is given as the expression of a sublattice-sum.

key words: Projection method, Quasicrystal, Eightfold symmetry, Self-similarity, Structure factor, Sublattice.

1　緒　論

準結晶の発見[1],[2]以来，準格子を構成する方法（タイル張り）が多くの研究者によって提案されている．任意の次元において，準周期的なタイル張りの一般的な方法がDuneau等によって与えられている[3],[4],[5]．これは以下に述べる，いわゆる投影法である．

n 次元空間における直交単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_1,\ldots,\boldsymbol{e}_n$ とすると，n 次元超格子点は

$$\boldsymbol{p}=\sum_{j=1}^{n}p_j\boldsymbol{e}_j \qquad (p_j:\text{整数}) \tag{1}$$

で与えられる．この空間に変換行列 T の直交変換を作用すると，基本ベクトル $\boldsymbol{e}_j$ は

$$\boldsymbol{e}'_j=\sum_{k=1}^{n}t_{jk}\boldsymbol{e}_k, \tag{2}$$

によって，新 $\boldsymbol{e}'_j$ に移される．ここに，t_{jk} は T の要素で，$t_{jk}=\boldsymbol{e}'_j\boldsymbol{e}_k$ である．また，座標 p_j は

平成元年5月8日受理

* 数学物理学科

* 日本物理学会（東海大学）に発表　平成元年3月31日

変換式

$$p'_j=\sum_{k=1}^{n}t_{jk}p_k \tag{3}$$

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 m 個（$\boldsymbol{e}'_1,\ldots,\boldsymbol{e}'_m$）で出来る m 次元部分空間，および残りの $n-m$ 個（$\boldsymbol{e}'_{m+1},\ldots,\boldsymbol{e}'_n$）で出来る $n-m$ 次元部分空間をそれぞれ $\mathrm{E}^{\parallel}$ および $\mathrm{E}^{\perp}$ とする．変換前の基本ベクトル $\boldsymbol{e}_j$ の $\mathrm{E}^{\parallel}$，$\mathrm{E}^{\perp}$ 成分をそれぞれ $\boldsymbol{e}_j^{\parallel}$および$\boldsymbol{e}_j^{\perp}$ とすると，

$$\boldsymbol{e}_j^{\parallel}=\sum_{k=1}^{m}t_{kj}\boldsymbol{e}'_k \tag{4}$$

$$\boldsymbol{e}_j^{\perp}=\sum_{k=m+1}^{n}t_{kj}\boldsymbol{e}'_k \tag{5}$$

格子点 $\boldsymbol{p}$ の $\mathrm{E}^{\parallel}-$，$\mathrm{E}^{\perp}-$ 成分 $\boldsymbol{p}^{\parallel}$,$\boldsymbol{p}^{\perp}$ は

$$\boldsymbol{p}^{\parallel}=\sum_{j=1}^{n}p_j\boldsymbol{e}_j^{\parallel}\quad(=\sum_{k=1}^{m}p'_k\boldsymbol{e}'_k) \tag{6}$$

$$\boldsymbol{p}^{\perp}=\sum_{j=1}^{n}p_j\boldsymbol{e}_j^{\perp}\quad(=\sum_{k=m+1}^{n}p'_k\boldsymbol{e}'_k) \tag{7}$$

次に，変換前の座標表現で 2^n 個の格子点 $(q_1,\ldots,q_n)$，$(q_j=0,1)$ を頂点とする n 次元超立方体Vを考える．Vの内部の領域を $\mathrm{E}^{\perp}$ に

投影して得られる $n-m$ 次元の範囲を W とする．無数の格子点 $\boldsymbol{p}$ のうち，その $\mathrm{E}^{\perp}$ – 成分 $\boldsymbol{p}^{\perp}$ が W に含まれるような格子点を $\mathrm{E}^{\parallel}$ に投影して得られる m 次元部分空間における格子点 $\boldsymbol{p}^{\parallel}$ を”準格子点”と定義する．この場合，W は $\mathrm{E}^{\perp}$ 空間内で $n-m$ 次元シフト量 $\boldsymbol{t}$ の任意性がある．これを考慮すると，$\boldsymbol{p}^{\parallel}$ を準格子点として採用するための条件は，$\boldsymbol{p}^{\perp}$ にたいして，

$$\boldsymbol{p}^{\perp} \subset \mathrm{W} = \left\{ \sum_{j=1}^{n} x_j \boldsymbol{e}_j^{\perp} + \boldsymbol{t} \;\middle|\; 0 \le x_j < 1 \right\} \quad (8)$$

すなわち,「W を通して，n 次元超格子を眺めたとき，見通すことが出来る格子を $\mathrm{E}^{\parallel}$ に投影すれば，m 次元準格子が得られる.」と云うことが出来るので，W は通常，窓（Window）と呼ばれる．

最も簡単な準格子の例は，フィボナッチ配列である．これは，$n=2,\ m=1$,

$$T = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \begin{pmatrix} \tau & -1 \\ 1 & \tau \end{pmatrix} \quad (9)$$

とすれば構成できる．こでは，$\tau = (\sqrt{5}+1)/2$ (黄金比) である．窓 W は長さ $(\tau+1)/\sqrt{1+\tau^2}$ の線分である．最近，寺内等 [6] による，この種の超格子構造の X 線的研究がある．2 次元の例では 5 回対称のペンローズ・タイリングがある [7]．これは，$n=5,\ m=2$ として，変換行列を

$$T = \sqrt{\frac{2}{5}} \quad \times$$
$$\begin{pmatrix} \cos\gamma & \cos 2\gamma & \cos 3\gamma & \cos 4\gamma & 1 \\ \sin\gamma & \sin 2\gamma & \sin 3\gamma & \sin 4\gamma & 0 \\ \cos 2\gamma & \cos 4\gamma & \cos\gamma & \cos 3\gamma & 1 \\ \sin 2\gamma & \sin 4\gamma & \sin\gamma & \sin 3\gamma & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (10)$$

として得られる．ただし，$\gamma = 2\pi/5$ である．窓は菱形 20 面体である．また，準結晶発見に導いた正 20 面体的対称性を持つ AlMn 合金の構造は，$n=6,\ m=3$，変換行列が

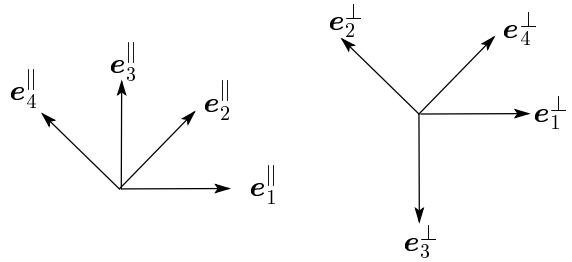
$$T = \frac{1}{\sqrt{4+2\tau}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \tau & -\tau \\ \tau & -\tau & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau & -\tau & 1 & 1 \\ \tau & \tau & 0 & 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & \tau & \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & \tau & -\tau \end{pmatrix} \quad (11)$$

から構成される [8]．この窓の形は菱形 30 面体である．

本報では，最近，V-Ni-Si 合金で発見された 8 回対称 2 次元準結晶 [9] を投影法によって構成し，その理論構造因子の一般的表現を与え，セル内の原子配列の回折強度に与える効果を検討する．

2　8 回対称 2 次元準格子の構成

4 次元直交単位ベクトルの 2 次元部分空間 $\mathrm{E}^{\perp}$ への投影ベクトルを 8 回対称を持つように，次のように選ぶ．(Fig. 1 a 参照)



(a)　(b)

Fig. 1: Projected unit vectors. (a) four unit vectors in $\mathrm{E}^{\parallel}$ and (b) in $\mathrm{E}^{\perp}$

$$\boldsymbol{e}_{j+1}^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_1' \cos j\alpha + \boldsymbol{e}_2' \sin j\alpha), \quad (j=0,\ldots,3) \quad (12)$$

ただし，$\alpha = \pi/4$ である．セルは $(\boldsymbol{e}_1^{\parallel},\ \boldsymbol{e}_3^{\parallel})$ および $(\boldsymbol{e}_2^{\parallel},\ \boldsymbol{e}_4^{\parallel})$ からなる 2 種の正方形と，$(\boldsymbol{e}_1^{\parallel},\ \boldsymbol{e}_2^{\parallel})$, $(\boldsymbol{e}_2^{\parallel},\ \boldsymbol{e}_3^{\parallel})$ $(\boldsymbol{e}_3^{\parallel},\ \boldsymbol{e}_4^{\parallel})$, $(\boldsymbol{e}_4^{\parallel},\ \boldsymbol{e}_1^{\parallel})$ からなる 4 種の菱形である．以下，$(\boldsymbol{e}_j^{\parallel},\ \boldsymbol{e}_k^{\parallel})$ からなる

セルを $(j,k)-$ セルと呼ぶ．$\mathrm{E}^{\parallel}$ に直交する空間 $\mathrm{E}^{\perp}-$ 成分は次式のように定義することができる．(Fig. 1 b 参照)

$$\boldsymbol{e}_{j+1}^{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_3' \cos j\beta + \boldsymbol{e}_4' \sin j\beta), \quad (j = 0, \ldots, 3) \tag{13}$$

ただし，$\beta = 3\pi/4$ である．したがって，

$$T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{14}$$

直交変換 (14) から得られる窓 W は 4 次元超

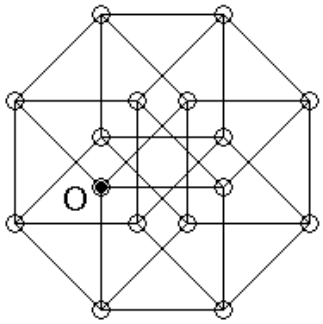


Fig. 2: Window for the construction of 8-fold quasi-lattice. O is the projection to $\mathrm{E}^{\perp}$ of the origin in four dimensional space.

立方体の $\mathrm{E}^{\perp}$ への投影で，Fig. 2 のような正 8 角形の内部で与えられる．O は 4 次元空間での原点（0,0,0,0) の $\mathrm{E}^{\perp}$ への投影点である．実線は 4 次元超立方体の各稜の $\mathrm{E}^{\perp}-$ 成分で，2^4 個の交点（小円）すべてから 4 本の直線が出ている．正 8 角形の窓の原点を 8 回対称の位置に選ぶため，シフト量を $\boldsymbol{t} = \sum_{j=1}^{4} \boldsymbol{e}_j^{\perp}/2$ とすると，窓は

$$\mathrm{W}_0 = \left\{ \sum_{j=1}^{4} x_j \boldsymbol{e}_j^{\perp} \;\middle|\; |x_j| < \frac{1}{2} \right\} \tag{15}$$

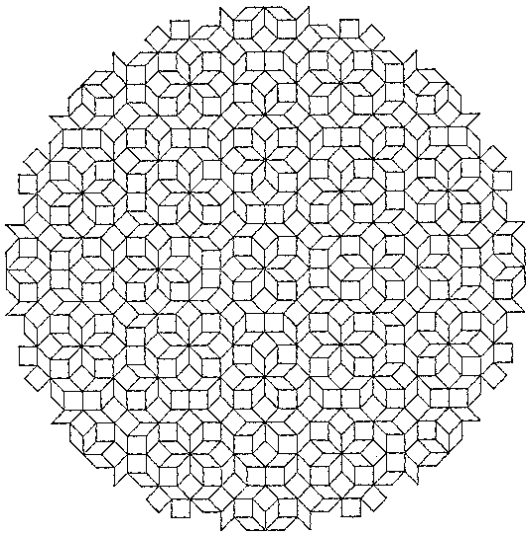


Fig. 3: 8-fold quasi-lattice produced by conditions, $\boldsymbol{p}^2 < 100$ and $\boldsymbol{p}^{\perp} \subset \mathrm{W}_0$ in eq.(15).

Fig. 3 は，$\boldsymbol{p}^2 < 100, \boldsymbol{p}^{\perp} \subset \mathrm{W}_0$ の条件で得られた準格子である．8 回対称点が図の中心にある．窓のシフト量を変えると，対称点は移動する．Fig. 4 に示すように，得られた準格子には自己相似性がある．正方形セル A，菱形セル B の 1 段大きいそれぞれのセルを A′，B′ とすると，A′=3A+4B，B′=2A+3B が成り立つ．この自己相似性を無限に適用することによって，6 種のセルで平面を隙間なく埋めることが証明できる．このとき，A の数と B の数の比は無理数 $1/\sqrt{2}$ に収束する [10] ことから周期性の可能性が否定される．

3 部分格子の導出

上で得られた準格子は 6 種類の $(j,k)-$ セル $(1 \le j < k \le 4)$ からなる．これらのそれぞれに属する準格子点は，正 8 角形の窓内部の或る部分領域から得ることができる．たとえば，(1,2)-セルのコーナーの 4 点に対応する $\mathrm{E}^{\perp}$ 空間内での各点が Fig. 5 に示されている．4 点が同時に窓の外部に出ない条件は，4 点のうちの 1 点 P が斜線の内部にある場合である．斜線の部分

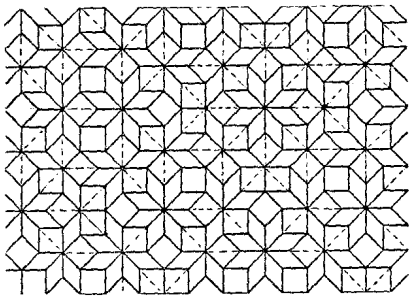


Fig. 4: Self-similarity of quasi-lattice. Dotted line are the lattice inflated by the similar ratio $1+\sqrt{2}$.

は $\boldsymbol{e}_3^{\perp}$ と $\boldsymbol{e}_4^{\perp}$ によって得られる菱形である．Fig. 6 は (1,2)-部分格子である．小円は窓内部の斜線領域内の点に対応する．他の $(j,k)-$ セルについても，同様なことを行うことによって，部分格子を得る条件は，Fig. 7 で示された W_{jk} の領域内であることがわかる．$(l,m)=(1,2,3,4)-(j,k)$ とすると，W_{jk} は，$\boldsymbol{e}_l^{\perp}$,$\boldsymbol{e}_m^{\perp}$ によって得られる正方形あるいは菱形である．各セルに属する準格子点は Fig. 8 の小円で示されている．以上のように，準格子を部分格子に分解することができるので，各セル内に任意の原子分布を配置した準結晶を構成することができる．したがって，一般的な準結晶の電子分布は W_{jk} によって，次式で与えられることができる．

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{(j,k)}\sum_{s=1}^{n_{jk}}\sum_{\boldsymbol{p}}\rho_{jks}(\boldsymbol{r}-\sqrt{2}a\boldsymbol{p}^{\parallel}-\boldsymbol{r}_{jks}) \quad (\boldsymbol{p}^{\perp}\subset \mathrm{W}_{jk}) \tag{16}$$

(j,k) は $1\le j<k\le 4$ を意味する．a はセルの一辺の長さである．n_{jk} は $(j,k)-$ セル内の原子の数，$\boldsymbol{r}_{jks}$, ρ_{jks} はそれぞれ，$(j,k)-$ セル内の s 番目の原子の位置ベクトルおよびその電子分布である．$\boldsymbol{p}^{\parallel}$,$\boldsymbol{p}^{\perp}$ は (13)，(15) を (6),(7) に代入して次式で与えられる．

$$\boldsymbol{p}^{\parallel}=\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{j=0}^{3}p_{j+1}\left(\boldsymbol{e}_1'\cos j\alpha+\boldsymbol{e}_2'\sin j\alpha\right), \tag{17}$$

$$\boldsymbol{p}^{\perp}=\frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{j=0}^{3}p_{j+1}\left(\boldsymbol{e}_3'\cos j\beta+\boldsymbol{e}_4'\sin j\beta\right). \tag{18}$$

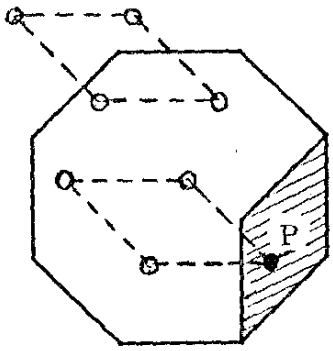


Fig. 5: A partial window for producing (1,2)-cell is shown by a shadowed range.

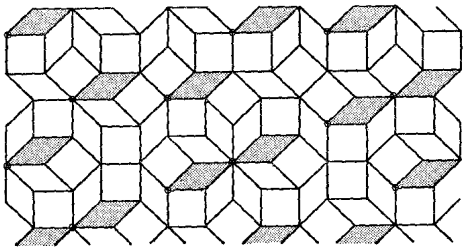


Fig. 6: (1,2) sub-lattice. The lattice points are shown by circles.

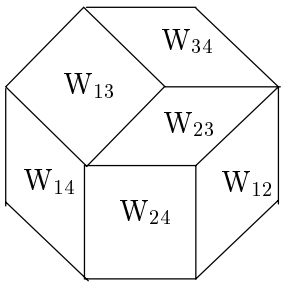


Fig. 7: A division of window W.

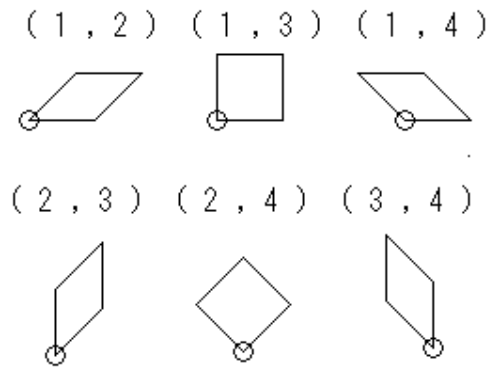


Fig. 8: (j,k)-cell $(1 \leq j < k \leq 4)$. Circles are quasi-lattice points in each cell.

4 準結晶構造因子

以上で得られた 8 回対称 2 次元準結晶による運動学的な 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 $\boldsymbol{b}$ とすると，回折振幅は電子単位で，

$$A(\boldsymbol{b}) = \sum_{(j,k)} F_{jk}(\boldsymbol{b}) \sum_{\boldsymbol{p}} s_{jk}(\boldsymbol{p}^{\perp}) \mathrm{e}^{2\pi\sqrt{2}a\boldsymbol{p}^{\parallel}\boldsymbol{b}} \tag{19}$$

ただし，$\boldsymbol{p}$ に関する和は p_1, p_2, p_3, p_4 のすべての整数についてである．F_{jk} は $(j,k)-$ セルの構造因子で，結晶と同様，次式で与えられる．

$$F_{jk}(\boldsymbol{b}) = \sum_{s=1}^{n_{jk}} f_{jks}(\boldsymbol{b}) \mathrm{e}^{2\pi\boldsymbol{b}\boldsymbol{r}_{jks}} \tag{20}$$

f_{jks} は $(j,k)-$ セルの s 原子の原子散乱因子，$s_{jk}(\boldsymbol{p}^{\perp})$ は Fig. 7 の各領域を示す関数で次式で与えられる．

$$s_{jk}(\boldsymbol{p}^{\perp}) = \begin{cases} 1 & \boldsymbol{p}^{\perp} \subset \mathrm{W}_{jk} \\ 0 & \text{others} \end{cases} \tag{21}$$

しかるに，ポアソンの和の公式

$$\sum_{\boldsymbol{p}} g(\boldsymbol{p}) = \sum_{\boldsymbol{h}} \int g(\boldsymbol{u}) \mathrm{e}^{-2\pi\boldsymbol{h}\boldsymbol{u}} \mathrm{d}\boldsymbol{u} \tag{22}$$

が成り立つ．$\boldsymbol{h}$ に関する和は h_1, h_2, h_3, h_4 のすべての整数についてである．したがって，(19) 式は $\boldsymbol{h}$ の和で次のように表現することができる．

$$A(\boldsymbol{b}) = \sum_{\boldsymbol{h}} F(\boldsymbol{h}) \delta(\sqrt{2}a\boldsymbol{b} - \boldsymbol{h}^{\parallel}) \tag{23}$$

ここで

$$F(\boldsymbol{h}) = \sum_{(j,k)} \sigma_{jk} g_{jk}(\boldsymbol{h}^{\perp}) (-1)^{h_j + h_k} \times F^0_{jk}(\boldsymbol{h}^{\parallel}/\sqrt{2}a) \tag{24}$$

σ_{jk} は $(j,k)-$ セルの面積（平方形では a^2，菱形では $a^2/\sqrt{2}$），$\boldsymbol{h}^{\parallel}$,$\boldsymbol{h}_{\perp}$ は (17)，(18) と同様，

$$\boldsymbol{h}^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=0}^{3} h_{j+1} \left(\boldsymbol{e}'_1 \cos j\alpha + \boldsymbol{e}'_2 \sin j\alpha \right) \tag{25}$$

$$\boldsymbol{h}^{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=0}^{3} h_{j+1} \left(\boldsymbol{e}'_3 \cos j\beta + \boldsymbol{e}'_4 \sin j\beta \right) \tag{26}$$

$$g_{jk}(\boldsymbol{h}^{\perp}) = \frac{\sin \pi \boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{e}^{\perp}_l}{\pi \boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{e}^{\perp}_l} \cdot \frac{\sin \pi \boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{e}^{\perp}_m}{\pi \boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{e}^{\perp}_m} \tag{27}$$

ただし，$(l,m) = (1,2,3,4) - (j,k)$,$\boldsymbol{r}^0_{jk}$ はセルの重心を原点として表された $(j,k)-$ セル内の s 原子の位置ベクトルである．F^0_{jk} は (20) 式において，$\boldsymbol{r}_{jks}$ の代わりに $\boldsymbol{r}^0_{jks}$ と置き換えたものである（付録参照）．

(23) 式より，$A(\boldsymbol{b})$ は $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{h}^{\parallel}/(\sqrt{2}a)$ のみ値を持つことがわかる．$\boldsymbol{h}^{\parallel}$ は (25) 式のように 4 個の整数 h_1, h_2, h_3, h_4 の 1 次結合で与えられるので，$A(\boldsymbol{b})$ の分布は 2 次元の逆空間を密に覆う．(23) 式は結晶構造因子と類似な表現をしていることから，$F(\boldsymbol{h})$ を”準結晶構造因子”と呼ぶことにする．(25) より，整数の組 (h_1, h_2, h_3, h_4) によって $\boldsymbol{h}^{\parallel}$ が定まる．逆に，その $\boldsymbol{h}^{\parallel}$ を与える別の整数の組は存在しない．(26) より，$\boldsymbol{h}^{\perp}$ についても同様なことが云える．従って，指数 (h_1, h_2, h_3, h_4) は $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{h}^{\parallel}/(\sqrt{2}a)$ における回折斑点を一意的に定め，$|F(\boldsymbol{h})|^2$ の強度を与えられることがわかる．さらに，窓のシフト量の効果は，構造因子の位相を変えるだけであるから，回折強度への寄与はない．3 種の 8 回対称準結晶構造およびその理論回折強度を Fig. 9 に示している．図の中央には，正方形，菱形の各セ

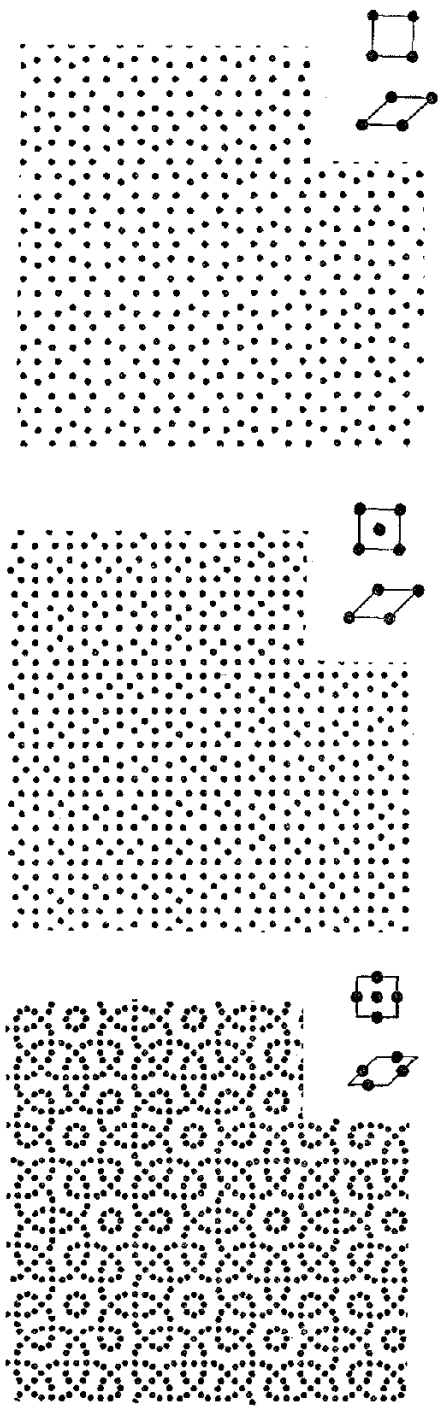


Fig. 9: Three kinds of 8-fold quasicrystals. positions in squares and rhombi are shown in the right side.

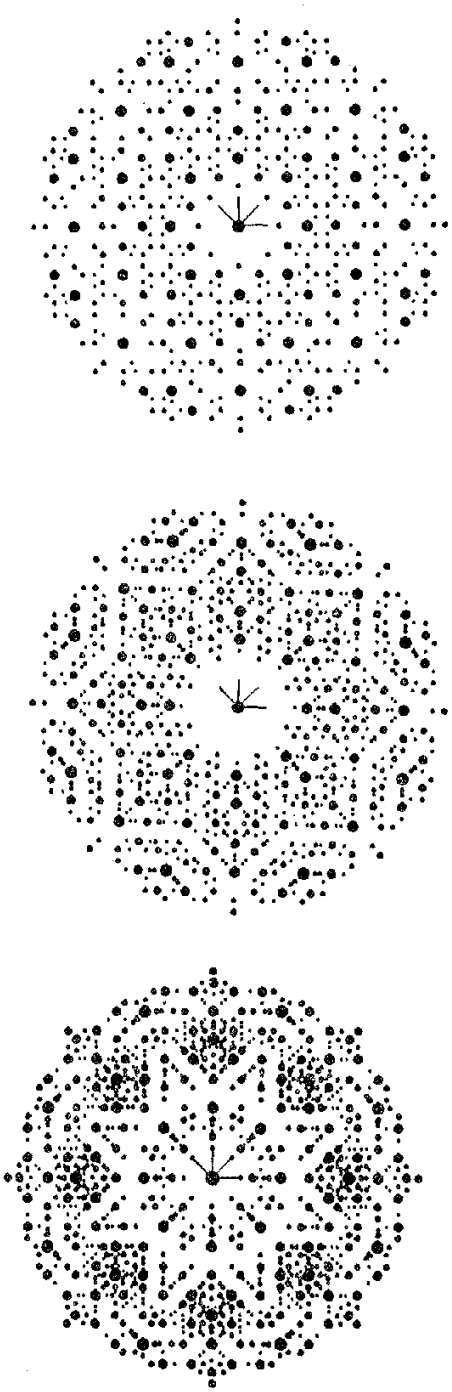


Fig. 10: The diffraction patterns of quasicrystals in left side. The radius of circle in their patterns is proportional $\log|F(\boldsymbol{h})|^2 + c$ (c :constant).

ル内の原子を黒丸で示している．回折強度の計算では，簡単のため，原子散乱因子を 1 とした．実際の電子分布では，回折像は中心から遠ざかると強度が弱くなる．各回折像の中心近くの 4 つの直線はそれぞれ指数 (1,0,0,0), (0,1,0,0), (0,0,1,0) (0,0,0,1) を示す．図からわかるようにセル内部の原子分布の違いが各斑点の強さに大きく影響することがわかる．Wang 等が得た電子回折像は鮮明でないので，我々の結果と比較できないが，実験技術の向上により，その準結晶の原子的構造が明らかにされるであろう．

5　結果と議論

n 次元格子を m $(<n)$ 次元に投影することによって得られる m 次元準格子は，$\frac{n!}{m!(n-m)!}$ 種類の部分格子に分解することができる．それは，窓を $\frac{n!}{m!(n-m)!}$ 個に区分することに対応する．n 次元格子点を $\mathrm{E}^{\perp}$– 成分が区別された窓に含まれるならば，その格子点の $\mathrm{E}^{\parallel}$– 成分が部分格子を構成する．これらの $\frac{n!}{m!(n-m)!}$ 種の部分格子点の各々に，任意の原子分布のセルを対応させると，一般の準結晶構造を構成することができる．このような準結晶の構造因子は各セルの構造因子の和で表現できる．窓のシフトにより，回折強度が変化しないのは，$n \leq 2m$ の場合である．ペンローズ·パターン $(n > 2m)$ では，窓のシフト量によって，局所的にも異なった種々の 5 回対称準格子ができ，それらの回折パターンは少し異なる．これらの特徴は石原等によって明らかにされた [11]．AlMn 合金などの 3 次元準結晶について，(24) 式に対応する準結晶構造因子は，菱形 30 面体の窓を区分して得られる．最近，完全度の高い準結晶サンプルが得られ，鮮明な電子回折像が得られている [12] ので，理論回折強度との比較から，セル内の原子配列が明らかにされるであろう．

付　録

部分準格子の回折振幅は，(22) 式より

$$A_{jk}(\boldsymbol{b}) = \sum_{\boldsymbol{p}} s_{jk}(\boldsymbol{p}^{\perp}) e^{2\pi i\sqrt{2}a\boldsymbol{p}^{\parallel}\boldsymbol{b}} \quad (28)$$

$$= \sum_{\boldsymbol{h}} \int s_{jk}(\boldsymbol{u}^{\perp}) e^{2\pi i\sqrt{2}a\boldsymbol{u}^{\parallel}\boldsymbol{b}} e^{-2\pi i\boldsymbol{u}\boldsymbol{h}} d\boldsymbol{u} \quad (29)$$

ここに，$\boldsymbol{p}, \boldsymbol{h}$ は整数の組 $(p_1p_2p_3p_4), (h_1h_2h_3h_4)$ であたえられる 4 次元格子点で，$\boldsymbol{u}$ は 4 次元体積素片である．$\boldsymbol{u}^{\perp}, \boldsymbol{u}^{\parallel}$ は部分空間 $\mathrm{E}^{\perp}$,$\mathrm{E}^{\parallel}$ 内のベクトルである．

$$\boldsymbol{h}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{h}^{\parallel}\boldsymbol{u}^{\parallel} + \boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{u}^{\perp} \quad (30)$$

$$d\boldsymbol{u} = d\boldsymbol{u}^{\parallel} d\boldsymbol{u}^{\perp} \quad (31)$$

であるから

$$\begin{aligned} A_{jk}(\boldsymbol{b}) &= \sum_{\boldsymbol{h}} \int s_{jk}(\boldsymbol{u}^{\perp}) e^{-2\pi i\boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{u}^{\perp}} d\boldsymbol{u}^{\perp} \\ &\quad \times \int e^{2\pi i(\sqrt{2}a\boldsymbol{b}-\boldsymbol{h}^{\parallel})\boldsymbol{u}^{\parallel}} d\boldsymbol{u}^{\parallel} \\ &= \sum_{\boldsymbol{h}} e^{2\pi i\boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{jk}} \int s^{0}_{jk}(\boldsymbol{u}^{\perp}) e^{-2\pi i\boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{u}^{\perp}} d\boldsymbol{u}^{\perp} \\ &\quad \times \delta(\sqrt{2}a\boldsymbol{b} - \boldsymbol{h}^{\parallel}) \end{aligned} \quad (32)$$

s^{0}_{jk} は (20) 式において，領域 W_{jk} の重心を原点とした関数表現である．$\Delta^{\perp}_{jk}$ は正 8 角形窓の中心から W_{jk} の重心へ引かれたベクトルである．各 j,k に対する $\boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{jk}$ は以下のごとくである．

$$\begin{cases} \boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{12} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}^{\perp}_{2} - \boldsymbol{e}^{\perp}_{1}) \\ \boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{23} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}^{\perp}_{2} + \boldsymbol{e}^{\perp}_{3}) \\ \boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{34} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}^{\perp}_{3} - \boldsymbol{e}^{\perp}_{4}) \\ \boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{41} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}^{\perp}_{4} + \boldsymbol{e}^{\perp}_{1}) \\ \boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{13} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}^{\perp}_{1} + \boldsymbol{e}^{\perp}_{3}) \\ \boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{24} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{e}^{\perp}_{2} + \boldsymbol{e}^{\perp}_{4}) \end{cases} \quad (33)$$

(30) より

$$\boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{e}^{\perp}_{j} = h_j - \boldsymbol{h}^{\parallel}\boldsymbol{e}^{\parallel}_{j} \quad (34)$$

であるから，$\mathrm{E}^{\perp}$ での表現 (33) は $\mathrm{E}^{\parallel}$ 空間で表される．したがって，

$$e^{2\pi\boldsymbol{h}^{\perp}\boldsymbol{\Delta}^{\perp}_{jk}} = (-1)^{h_j+h_k} e^{-2\pi i\boldsymbol{h}^{\parallel}\boldsymbol{\Delta}^{\parallel}_{jk}} \quad (35)$$

ここに，$\boldsymbol{\Delta}_{jk}^{\parallel}$ は (33) において，記号 $\perp$ の代わりに記号 $\parallel$ と置き換えたものである．Fig. 8 から明らかなように，$\boldsymbol{\Delta}_{jk}^{\parallel}$ は $(j,k)-$ セルに属する格子点から，そのセルの重心へ向かうベクトルであることが分かる．したがって，

$$\boldsymbol{r}_{jks}^{0} = \boldsymbol{r}_{jks} - \boldsymbol{\Delta}_{jk}^{\parallel} \tag{36}$$

として，$(j,k)-$ セルの構造因子を次のように定義する．

$$F_{jk}^{0}(\boldsymbol{b}) = \sum_{s} f_{jks}(\boldsymbol{b}) e^{2\pi i \boldsymbol{b}\boldsymbol{r}_{jks}^{0}} \tag{37}$$

また，(32) 式において，関数 s_{jk}^{0} を含む積分は (27) 式において定義された $\sigma_{jk} g_{jk}(\boldsymbol{h}^{\perp})$ であることを考慮すると，回折振幅の式 (23)，(24) を得る．

参考文献

[1] Shechtman,D., Blech, I., Gratias,D. and Cahn,J.W. *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984), 1951-1953.

[2] Levine,D. and Steinhardt,P.J., *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984), 2477-2480.

[3] Duneau,M. and Katz,A., *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985), 2688-2691.

[4] Elser,V,. *Acta Cryst.* **A42** (1986), 36-43.

[5] 新関駒二郎：日本結晶学会誌，Vol. 31 (1989), No.1, 1-7.

[6] Takeuchi,H.,Y., Kamigaki,K., Matsunaka,S., Nakayama,M., Kato,H., Sano,N. and Yamada,Y., *J. Phys. Soc. Jpn.* **57** (1988), 2416-2424.

[7] Penrose,R., *Bull. Inst. Math. Appl.* **10** (1974), 266.

[8] 石原慶一：フィジックス，Vol.8 (1987), No.6, 354-357.

[9] Wang,N., Chen,H. and Kuo,K.H., *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987), 1010-1013.

[10] Watanabe,Y., Ito,M, and Soma,T.,*Acta Cryst.* **A43** (1987), 133-134; 彼等は，A′=6A+8B, B′=4A+6B なる自己相似性を持つ準格子を取り扱ったが，A の数と B の数の比の収束値は我々の結果と一致している．

[11] Ishihara,K.N. and Yamamoto,A., *Acta Cryst.* **A44** (1988), 508-516.

[12] Hiraga,K., Zhang,B., Hirabayashi,M., Inoue,A. and Masumoto,T., *Jpn. J. Appl. Phys.* **27** (1988), L951-953.