

# B-Ti-Ru準結晶の発見

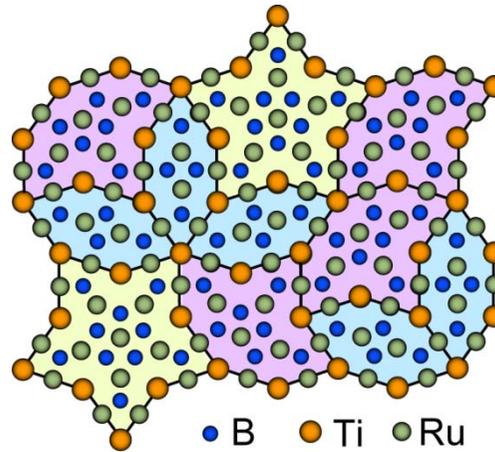
Y. Miyazaki, J. T. Okada, E. Abe, Y. Yokoyama and K. Kimura, et. al. JPSJ, **79** 073601 (2010)

$B_{38}Ti_{14}Ru_{48}$  合金

液体急冷

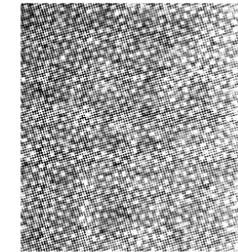
準結晶化

電子顕微鏡により確認



B-Ti-Ru準結晶の構造図

3種類の単位構造(H, B, S)  
による非周期タイリング



東京大学大学院新領域  
創成科学研究科の木村薫  
教授らの研究グループ  
は、40%のホウ素を含む  
「準結晶」(用語参照)  
の生成に成功した。急冷  
ロール装置を使  
って生成したホウ素  
とチタンとルテ  
ニウムからなる  
準結晶の電子顕  
微鏡写真。ルテ  
ニウムのみが明  
るく光る

【用語】準結晶は固体  
中の原子の並び方による  
分類の一つ。原子が規則  
的ではあるが周期を持た  
ずに並んだ状態のことだ  
。1984年に発見され  
た。それまでは原子が規  
則正しく詰まった「結  
晶」と不規則に並んだ  
「アモルファス」の二分  
類しかなかった。特殊な  
性質を示すためさまま  
な分野で新規材料として  
期待されている。

東大が、電子顕微鏡  
を使って準結晶であるこ  
とを確かめた。40%とい  
う大量の非金属元素を含  
む準結晶を確認したのは  
世界で初めてのこと。ホ  
ウ素は強い共有結合をつ  
くるところから、高効率の  
熱電材料の新規開発につ  
ながる可能性がある。

東大が  
生成 熱電材開発に応用も

40%のホウ素含む準結晶

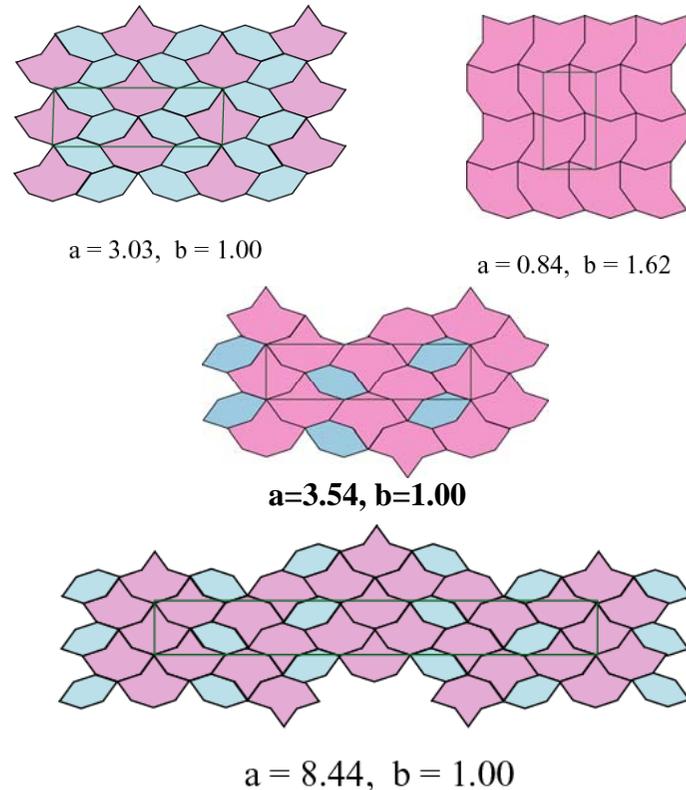
日刊工業新聞 2010.7.1

- ・ 従来の準結晶と異なり、非金属元素であるボロンを含む
- ・ 従来の準結晶と比較して、  
非金属性の強化 → 電子構造に深い擬ギャップ  
熱電材料として期待

# B-Ti-Ru準結晶の近似結晶

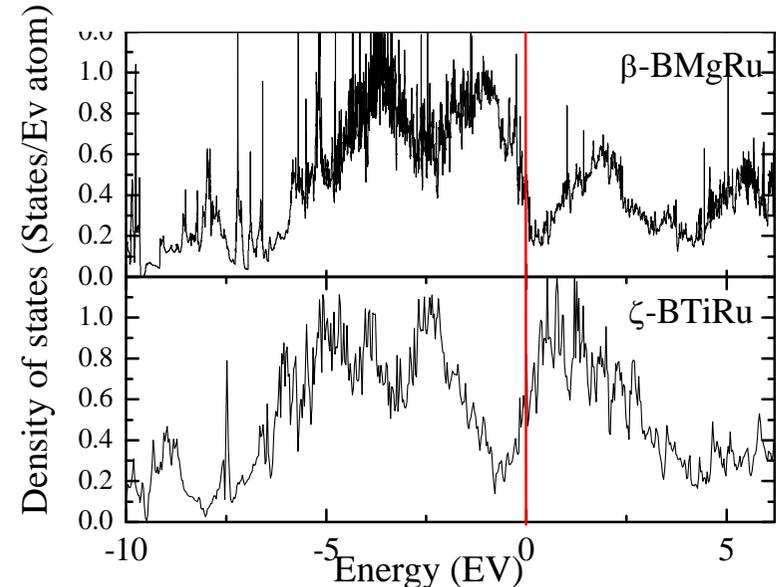
Y. Miyazaki, J. T. Okada, E. Abe and K. Kimura, Phil. Mag. **88** 1935 (2008)

Y. Miyazaki, J. T. Okada and K. Kimura, Phil. Mag. **87** 2701 (2007)



さまざまなボロン系近似結晶の構造

前頁の準結晶構造の単位構造  
(HとB)を用いた周期タイリング



ボロン系近似結晶の電子状態密度  
(第一原理計算)

- \* 近似結晶 = 準結晶と同一の単位構造を周期的に配列した構造
- \* 周期の大きな近似結晶は準結晶と同様の物性
- \* B-Ti-Ru準結晶の近似結晶を多種類発見、状態密度に擬ギャップを有することが示された。
- \* 準結晶と同様に熱電材料として期待。