

# B-Ti-Ru準結晶の発見

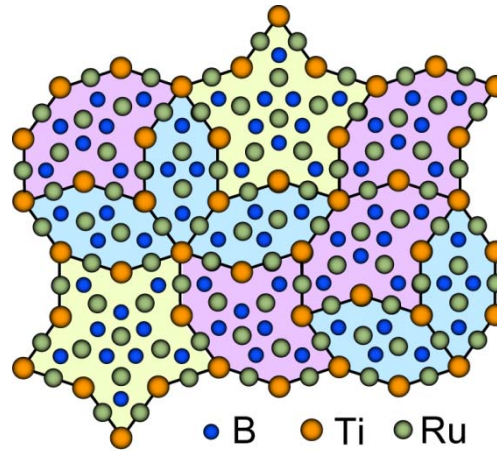
Y. Miyazaki, J. T. Okada, E. Abe, Y. Yokoyama and K. Kimura, et. al. JPSJ, **79** 073601 (2010)

$B_{38}Ti_{14}Ru_{48}$  合金

液体急冷

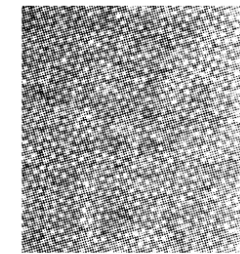
準結晶化

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用し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を、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。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ざまな分野で新規材料として期待されている。

世界で初めてこのホウ素は強い共有結合をつくることから、高効率な熱電材料の新規開発につながる可能性がある。

東大が熱電材開発に応用も

40%のホウ素含む準結晶

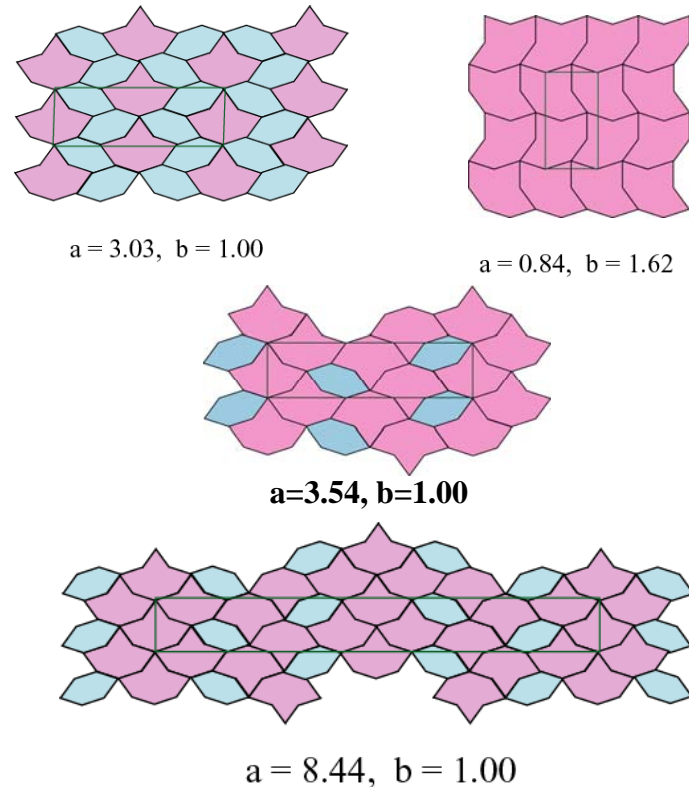
日刊工業新聞 2010.7.1

- 従来準結晶と異なり、非金属元素であるボロンを含む
- 従来準結晶と比較して、  
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

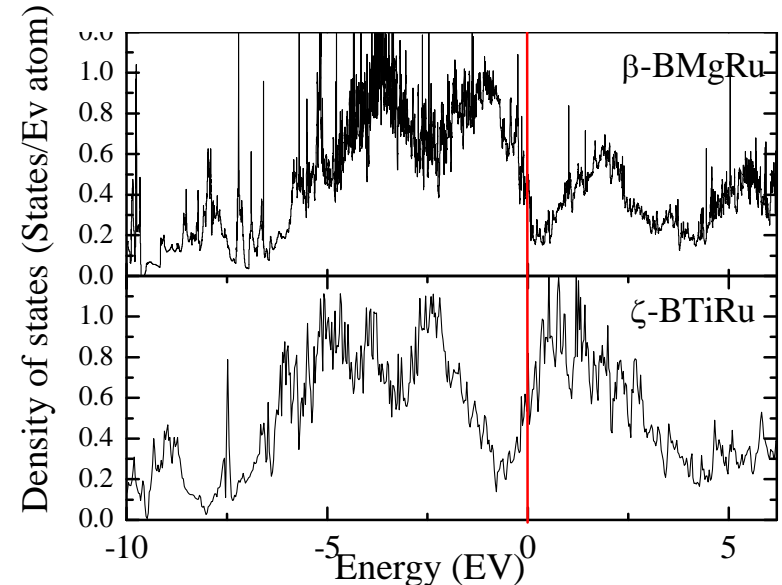
Y. Miyazaki, J. T. Okada, E. Abe and K. Kimura, Phil. Mag. **88** 1935 (2008)

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。