

# 複雑構造を持つHume-Rothery合金の 相安定性機構に関する研究

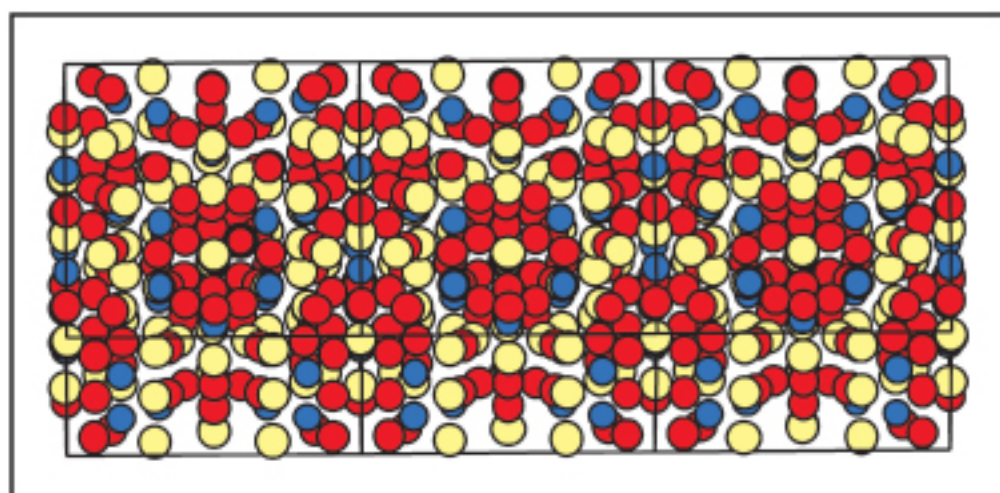
(財)豊田理化学研究所  
フェロー 水谷 宇一郎

## 目的

多くの準結晶・近似結晶は特定の電子濃度（一原子あたりの平均価電子数）で安定化している。特定の相が特定の電子濃度で安定化する性質はHume-Rothery則（略してH-R則）として知られてきた。本研究は、単位胞に数10個以上の原子を含む複雑構造物質が何故特定の電子濃度で安定化するかその相安定化機構を明らかにすることを目的とする。

## 方法

1. 単位胞に52個の原子を含むガンマ相合金は20以上の2元合金系で生成し、1930年代よりH-R合金として知られてきた。本研究では $\text{Al}_8\text{V}_5$ ,  $\text{Ag}_4\text{Li}_9$  ガンマ相合金について構造解析、光電子分光実験、第一原理のバンド計算を行い相安定化機構を実験と理論計算を併用して研究する。
2. ガンマ相よりさらに複雑で単位胞に130個を越える原子を含むAl-Cu-TM-Si (TM=FeとRu) 近似結晶についてそのH-R則を検証する。



単位胞に160個の原子を含む $\text{Al}_{42}\text{Li}_{26}\text{Cu}_{12}$ 結晶

自然はどのような機構で  
複雑な構造物質を安定化  
させているのだろうか？

## 期待される成果

1920年代より冶金学の重要な法則として知られてきたH-R則の裏に潜む物理を解明出来る。