Письма в ЖЭТФ, том 65, вып.8, стр.635 - 640

ПРИМЕНЕНИЕ ОПЕРАЦИЙ СИММЕТРИИ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА ПЛОСКОСТИ

А.А.Поляков[1)]

Челябинский государственный технический университет
454080 Челябинск, Россия

Поступила в редакцию 25 декабря 1996 г.
После переработки 19 марта 1997 г.

Предложена методика построения квазипериодической структуры на плоскости из симметричных элементов: правильных пятиугольников и пятиконечных звезд. Рост структуры определяется действием операций симметрии, не полностью совпадающим с действием аналогичных операций классической кристаллографии. Рассматривается мотив ("Цветок из пятиугольников"), состоящий из центрального и пяти боковых пятиугольников, совмещенных по сторонам. Его рост сопровождается появлением "Цветка из звезд" и образованием изолированных пор в форме ромбов. Рассмотрена связь полученной структуры с мозаикой Пенроуза, отмечено совпадение некоторых узлов мозаики Пенроуза со всеми вершинами многоугольников полученной упаковки.

PACS: 61.44.+p

Экспериментальное открытие квазикристаллов [1] вызвало всплеск интереса к возможным способам разрешения конфликта между существованием квазипериодических структур, обладающих осями симметрии 5 и 10 порядков, и запрещением такого существования с точки зрения классической кристаллографии. До этого открытия были построены плоские квазипериодические структуры, обладающие осями пятого порядка, с использованием мозаики Пенроуза (Penrose tiling) [2]. Эта упаковка и целый класс квазипериодических структур были описаны с помощью различных методик, среди которых можно выделить проекционные (projecting methods) [3,4] и методики конструирования двумерной и трехмерной мозаики Пенроуза путем формулирования правил упаковки (matching rules) или правил размножения (deflation rules) [2,4,5] многоугольников или многогранников. В проекционных методах разрабатывался переход от кубических решеток в 5 и 6 измерениях к квазикристаллическим в 2 и 3 измерениях. Существование трансляционной и поворотной симметрий в таких моделях подразумевалось (в качестве исходной использовалась N-мерная периодическая решетка), но до сих пор не развит подход к построению таких структур с помощью операций симметрии, применяемых в классической кристаллографии и действующих на симметричные геометрические объекты.

В то же время осуществлялись попытки описать квазипериодические структуры с позиций закономерной дефектности обычных кристаллических упаковок, а также конструируя фазы Франка–Каспера с большой элементарной ячейкой [6,7]. Полинг [6] смог расположить ~ 2000 атомов в элементарной ячейке и рассчитать дифракционную картину, близкую картине, полученной от икосаэдрической фазы [1], применяя операцию двойникования к периодически расположенным атомам. Такой подход отличается тем, что на каком-то этапе происходит переход от квазипериодической структуры к периодической.

[1)]e-mail: poliakov@physics.tu-chel.ac.ru

В данной работе проведено построение модели квазикристаллической структуры в двух измерениях с использованием операций отражения от плоскости и вращения вокруг оси симметрии, при этом полученная структура не сводится к периодической. Рассмотрим мотив из правильных пятиугольников 5_τ и правильных пятиконечных звезд Z_1 с равными сторонами. Отношение стороны 5_τ к стороне внутреннего пятиугольника звезды Z_1, полученного продолжением ее сторон, равно $\tau : 1$, где $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 = 1.618-$ "золотое" число. На рис.1*d* показана структура, названная Маккеем "снежинкой" [5]. Ее рост сопровождается увеличением количества пор между пятиугольниками и слиянием их в фигуры большей площади. Сконструируем аналогичную структуру из пятиугольников и звезд, при этом изменим ее так, что поры в структуре окажутся изолированными. Построение связано с симметрией пятиугольника (рис.1 a), характеризующейся наличием оси 5 порядка в его центре и плоскостями симметрии. Если подействовать на пятиугольник 5_τ одновременно пятью плоскостями симметрии, проходящими через его боковые стороны (рис.1*b*), то получится структура, которую мы будем в дальнейшем называть "Цветок" (рис.1*c*). Операцию образования "Цветка" из пятиугольника назовем "Раскрытие цветка".

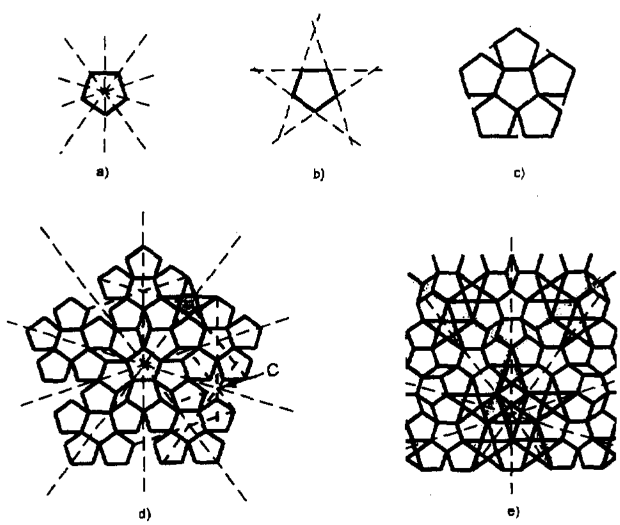

Рис.1. Рост квазипериодической упаковки пятиугольников и звезд с глобальной осью 5 порядка. Применение операций "Раскрытие цветка"

Продолжив внешние стороны 5_τ до пересечения, можно обобщить такой "Цветок" и назвать его обобщенным пятиугольником 5(I). Повторив операцию "Раскрытие цветка" по отношению к 5(I), получим "снежинку" А.Маккея. Дальнейшее развитие "Цветка" отличается от роста "снежинки", так как будет использован другой механизм заполнения пор. Заметим, что в точке *C* (рис.1*d*) пересекается множество плоскостей симметрии пятиугольников: а) глобальные - пятиугольников 5_τ , 5(I), 5(II); б)лепестков цветка 5(II); в)лепестков цветка 5(I), являющегося лепестком 5(II). По аналогии с классической кристаллографией можно предположить появление центра симметрии 5 порядка в этой точке. Действие этой оси вызовет образование звезды Z_1 на месте поры. Результатом повторения "Раскрытия цветка" по отношению к 5(II) и действия оси 5 порядка в межлепестковом пространстве будет кольцо из пяти звезд (рис.1*e*). Пространство в центре оказывается не заполненным. Логично применить к нему операцию, противоположную по направлению "Раскрытию цветка"("Закрытие цветка"). Она произведет "Цветок из звезд", в порах между лепестками которого уже находятся пятиугольники 5_τ. Повторение "Раскрытия цветка" к 5(III) породит между лепестками "Цветок из цветка звезд", в межлепестковом пространстве которого образуется "Цветок из 5_τ", совпадающий с 5(I). Таким образом, процессы роста структуры из пятиугольников и звезд оказываются переплетающимися. Можно получить аналогичную структуру с звездой в центре ("Цветок из звезд"), для этого в центр структуры помещается звезда Z_1 и начинается повторение операций "Раскрытие цветка". Этот процесс будет сопровождаться ростом цветка из 5_τ в порах и будет развиваться аналогично росту "Цветка из звезд" в порах "Цветка из пятиугольников".

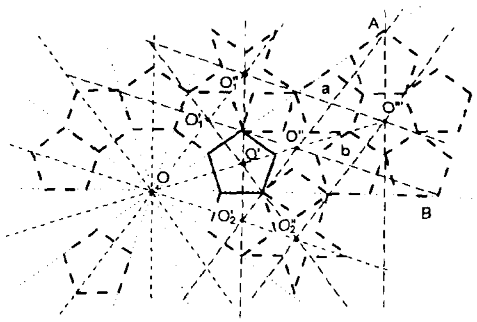

Рис.2. Оси и плоскости симметрии, действующие при росте квазипериодической структуры с глобальной осью 10 порядка

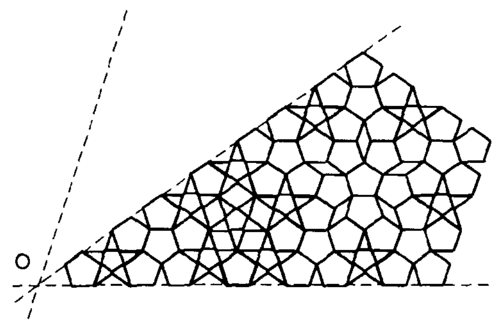

Рис.3. Упаковка пятиугольников и звезд в присутствии оси симметрии 10 порядка

Мотив "Цветок" можно использовать при формировании структуры с глобальной осью 10 порядка. Пусть через две несмежные стороны пятиугольника с центром O' (рис.2) проходят плоскости симметрии AO и BO, которые порождают 5_τ с центрами O'_1 и O'_2. Собственная плоскость симметрии исходного пятиугольника OO' и плоскости AO, BO пересекутся в точке O. Такое пересечение образует глобальную ось 10 порядка, поэтому все элементы, находящиеся в секторе AOB, автоматически появляются в других секторах поверхности. Собственные плоскости симметрии пятиугольников с центрами O'_1 и O'_2 (O'_1O'' и O'_2O'') пересекаются в точке O'' и вызывают появление в точке O'' оси симметрии пятого порядка, которая действует, в основном, в секторе AOB. Действие этой оси приводит к образованию звезды, пятиугольников a и b. В свою очередь, собственные плоскости симметрии O''_2O''', O''_1O''' звезд с центрами в O''_2 и O''_1 порождают ось симметрии пятого порядка в точке O'''. Действие этой оси (аналогично оси O'') внутри сектора AOB выразится в появлении кольца из пяти пятиугольников, а также в копировании всех фигур относительно плоскостей AO''' и BO'''. Пятиугольник 5_τ с центром O''' заполняется операцией типа "Закрытие цветка". Следует отметить, что элементами структуры являются увеличивающиеся "Цветки" из 5_τ и звезд Z_1 (рис.3).

Количественный анализ показал, что полученные мотивы ("Цветок из 5_τ", "Цветок из Z_1", структура с осью 10 порядка) характеризуются соотношением числа элементов, сходящимся с ростом к одним и тем же величинам. Поры в этих упаковках изолированы и представляют из себя ромбы двух типов, аналогичные ромбам мозаики Пенроуза, широкие (large) – L и узкие (small) – S. Стороны ромбов равны сторонам пятиугольников 5_τ, углы между сторонами равны $2\pi/5$ (L) и $\pi/5$ (S). Соотношение величин, обратных суммарным площадям пятиугольников, звезд, ромбов L и S равно $S_5^{-1} : S_Z^{-1} : S_L^{-1} : S_S^{-1} = 1 : (\tau^2 - 0.5) : \tau^3 : \tau^6$. Соотношение количества пятиугольников и звезд $N_5 : N_Z = \tau^2 : 1$. Доля пор по площади составляет 16.54%. Сходимость реальных величин к указанным очень медленная: погрешность составляет $\sim 10^{-3}\%$ при суммарном количестве пятиугольников $\sim 10^{20}$.

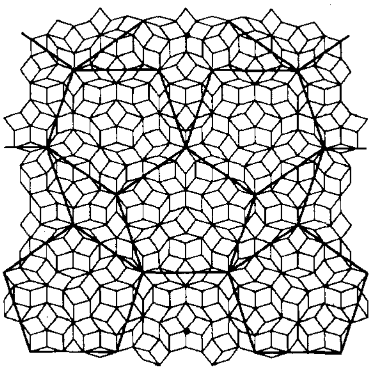

Рис.4. Совмещение "Цветка из пятиугольников" с мозаикой Пенроуза

Попытки описать полученную структуру с помощью декорирования (decoration) мозаики Пенроуза не удались. В то же время, если совместить (в случае построения "Цветка" из 5_τ) глобальный центр и центр симметрии первой звезды с истинными (по терминологии А.Маккея [5]) осями симметрии 5 порядка мозаики Пенроуза, отмеченными на рис.4 точками, то окажется, что все вершины 5_τ и Z_1 совпадают с некоторыми вершинами ромбов упаковки Пенроуза. Точки с "истинной" симметрией пятого порядка мозаики Пенроуза соответствуют вершинам обобщенного широкого (large) ромба после пяти операций дефляции (deflation). При таком построении сторона пятиугольника 5_τ равна сумме малой диагонали широкого (large) ромба и удвоенной большой диагонали узкого (small) ромба. В центрах пятиугольников 5_τ будут находиться десятиугольники, описанные вокруг звезд из широких ромбов с центром типа $< 22222 >^*$ и вокруг фигур с узлами $< 33121 >$ и $< 4222 >^*$, соединенных по центральному широкому ромбу (обозначения узлов мозаики Пенроуза взяты из статьи C.L.Henley [2]). Центры звезд Z_1 совпадут с центрами звезд из широких ромбов мозаики Пенроуза типа $< 22222 >$ и $< 22222 >^*$. В серединах всех сторон 5_τ и Z_1 окажутся широкие (large) ромбы, при этом стороны пятиугольников и звезд пройдут по наименьшим диагоналям ромбов.

Отметим особенности использованных приемов построения структур из пятиугольников и звезд: 1)операции симметрии действуют на существующие элементы структуры и порождают новые элементы, с которыми эти операции могут конфликтовать ("Раскрытие цветка"); 2)порождают новые элементы на свободном пространстве, не изменяя старые; 3)возможно локальное действие (оси симметрии, "Закрытие цветка"). Первая особенность не характерна для операций симметрии классической кристаллографии. Например, применяя операцию "Раскрытие цветка" для укладки сот из правильных шестиугольников, можно заметить, что для новых элементов действующие плоскости симметрии являются собственными. Очень важное свойство: операции симметрии включают время как один из параметров. Работает понятие "данный момент времени". Процесс роста можно описать только в терминах, которые включают направление времени. Обращение времени изменяет суть операций симметрии.

Концентрационные неоднородности структуры возрастают по линейным размерам с каждым шагом ее роста, в то же время амплитуда этих неоднородностей не превосходит первоначальных значений (максимальное значение соотношения пятиугольников и звезд в $5(\mathrm{I})$ $N_5 : N_Z = 30 : 5$, максимальное значение концентрации звезд в $Z(I)$ $N_Z : N_5 = 6 : 5$). В случае работоспособности данной модели, возможны следующие характеристики квазикристаллов: 1)дифракционная картина при рассеянии излучения на атомах поверхности или объема будет слегка изменяться при изменении области кристалла, на которой будет происходить дифракция, измельчение кристаллитов приведет к перераспределению интенсивности; 2)в случае монокристалла должна существовать слабая дифракционная картина для рассеяния излучения с длинами волн, во много раз большими, чем межатомное расстояние. Например: дифракция видимого света при отражении от граней кристалла.

Мотив "Цветка" является не единственным при построении плоских квазипериодических структур с помощью операций симметрии, но, по-видимому, наиболее простым. Возможно построение по аналогичным принципам структур из 5_τ и Z_1, в котором основным мотивом будет звезда. Звезда следующего порядка будет формироваться так, что ее внутренний пятиугольник будет состоять из одной звезды Z_1 и 15 пятиугольников 5_τ. Обобщение приведенных операций роста квазикристалла на три измерения приводит к появлению строительных элементов – двух типов икосаэдров, отличающихся размером в τ раз. Ориентация всех икосаэдров оказывается одинаковой. Соседние икосаэдры одного размера будут иметь общее ребро, при этом их центры и середина ребра будут лежать на одной линии. Икосаэдры разного размера касаются друг друга вершинами, их центры и общая вершина также лежат на одной прямой. Можно получить объемные структуры с глобальной осью 5 или 10 порядков и вышеприведенные рисунки считать сечением таких структур.

В книге [8], описывая реальные (дефектные) и несоразмерные (incommensurate) кристаллы с позиций современной кристаллографии, автор отмечает, что изменение симметрии по сравнению с идеальной решеткой кристалла проявляется не в уменьшении степени симметрии, а в увеличении (в случае учета цветной симметрии, использования более трех измерений при описании свойств, рассматривая кристалл в виде большой молекулы или кластера атомов). Как известно, несоразмерные кристаллы часто используются в качестве аналога квазикристаллов, поэтому не удивительно, что эти характеристики близки описанной в данной статье структуре.

В заключение мне хотелось бы выразить благодарность академику Н.А.Ватолину и профессору Б.Р.Гельчинскому за поддержку и критическое обсуждение материала.

---

1. D.Shechtman, I.Blech, D.Gratias, and J.W.Cahn, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
2. R.Penrose, Bull. Inst. Math. Appl. **10**, 266 (1974); C.L.Henley, Phys. Rev. **B34**, 797 (1986); F.Gähler, M.Baake, and M.Schlottmann, Phys. Rev. **B50**, 12548 (1994).

3. П.А.Кулагин, А.Ю.Китаев, Л.С.Левитов, Письма в ЖЭТФ **41**, 119 (1985).
4. N.G.de Bruijn, Ned. Akad. Weten. Proc. **A43**, 39 (1981); **A43**, 53 (1981); D.Levin and P.J.Steinhardt, Phys. Rev. **B34**, 596 (1986); J.E.S.Socolar and P.J.Steinhardt, Phys. Rev. **B34**, 617 (1986).
5. А.Маккей, Кристаллография **26**, 910 (1981).
6. L. Pouling, Nature **317**, 512 (1985).
7. Н.А. Бульенков, В.С.Крапошин, Письма в ЖТФ **19**, 1 (1993).
8. В.А.Копцик, *Закономерности развития сложных систем.* Л.: Наука, 1980.