

ДИФфуЗНОЕ РАССЕЯНИЕ В КВАЗИКРИСТАЛЛАХ

Л.С.Левитов

Рассмотрены дефекты в идеальных квазикристаллических решетках, связанные с голдстоуновскими фазонными модами. Вычислено вызванное ими диффузное рассеяние. Обсуждается связь с экспериментом ¹.

Недавно в квазикристалле Al_6CuLi_3 было обнаружено диффузное рассеяние, сложным образом распределенное в k -пространстве ¹. Соединение Al_6CuLi_3 является, вероятно, термодинамически равновесным квазикристаллом, т. к. структура, обладающая икосаэдрической симметрией, получается при сколь угодно малой скорости охлаждения (для ранее открытых квазикристаллов эта скорость очень велика). В связи с этим возникает вопрос о беспорядке в регулярных квазикристаллических решетках. В этой заметке рассматриваются дефекты, которые могут привести к рассеянию, подобному наблюдавшемуся в работе ¹. Поскольку расположение атомов в соединении Al_6CuLi_3 до сих пор точно не установлено, изложенные ниже рассуждения имеют, в основном, качественный характер.

Для описания структуры квазикристаллов было предложено несколько моделей ²⁻⁴, в существенных чертах эквивалентных друг другу. Согласно этим моделям, положения атомов получаются проектированием целых точек шестимерной решетки, находящихся внутри трубы. Важной для нас деталью этой конструкции является резкий край трубы, который, как будет ясно, приводит к особому классу дефектов.

Допустим, что взаимодействие между составляющими структуру атомами делает описанную выше конфигурацию энергетически выгодной. Примем во внимание наличие трех дополнительных фазонных степеней свободы у такой структуры, соответствующих возможности параллельного смещения трубы, не приводящего к изменению энергии. При таком смещении в структуре происходят локальные перестройки, т. к. некоторые точки исчезают, пересекая границу трубы, а другие, наоборот, появляются. Это значит, что локальные конфигурации, содержащие точки, полученные проектированием точек, близких к краю трубы, образуют двухуровневые системы (ДУС), переходящие из одного состояния в другое при малом фазонном сдвиге. Каждая такая ДУС может находиться в двух состояниях, "правильном" и "неправильном", с энергиями E_{Π} и $E_{\text{н}}$ соответственно. Правильное (неправильное) состояние соответствует точке внутри (снаружи) трубы, близкой к ее границе. Примем допущение согласованное с голдстоуновским характером фазонов, что $\Delta E = E_{\text{н}} - E_{\Pi}$ тем ближе к нулю, чем меньше расстояние x от соответствующей точки до границы трубы:

$$\Delta E(x) \rightarrow 0, \text{ когда } x \rightarrow 0, \quad (1)$$

причем выполнено условие термодинамической устойчивости $\Delta E > 0$. Используя условие (1), можно описать дефекты следующим образом. Пусть каждая ДУС находится в одном из двух состояний с вероятностью, зависящей от ΔE (или от x — см (1)) как показано на рис. 1. Происхождение этого распределения для нас не очень существенно, оно может быть как термодинамическим, так и связанным с кинетикой роста. Если размытие трубы x_0 невелико, то концентрация ДУС, находящихся в неправильном положении, порядка x_0 .

Опишем дефекты более подробно для так называемой стандартной модели, в которой труба получается с помощью шестимерного куба ⁵, а ее сечение представляет собой триаконтаэдр. ДУС в этом случае расположены вдоль пятнадцати семейств параллельных плоскостей, перпендикулярных осям второго порядка дифракционной картины. ДУС, относящиеся к одной плоскости, распределены вдоль нее с конечной, не зависящей от x_0 плотностью. Расстояние между соседними параллельными плоскостями порядка x_0^{-1} (см. разд. 5,7 в работе ⁵). Поскольку для любой ДУС найдутся другие ДУС близкие к ней, различные ДУС⁴

нельзя рассматривать как статистически независимые. Естественно предположить, что при малом x_0 , т. е. при большом расстоянии между плоскостями, корреляция ДУС, близких к одной плоскости, сильная (корреляционный радиус велик), в то время как ДУС, соответствующие разным плоскостям, коррелированы слабо.

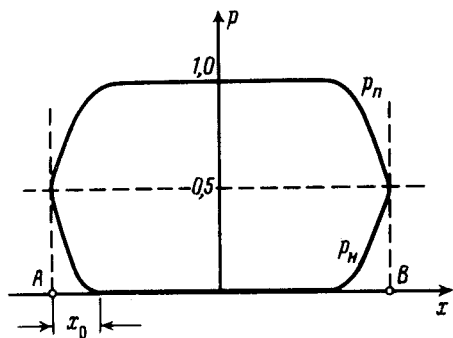


Рис. 1. Для правильного и неправильного состояний ДУС показаны их вероятности p_{Π} , $p_{Н}$ как функции положения в трубе

Для получившейся системы плоских, редко расположенных дефектов, состоящих из сильно коррелированных ДУС мы вычислим диффузное рассеяние, предполагая, что различные дефекты рассеивают некогерентно (это верно при малых x_0). Рассмотрим один дефект, считая сначала радиус корреляции ДУС вдоль его плоскости бесконечным. Положения атомов в правильном и неправильном состояниях получаются проектированием точек, находящихся на противоположных параллельных гранях трубы (при проектировании на R^{3*} эти точки попадают на противоположные ромбические грани триконтаэдра). Для того, чтобы вычислить некогерентную часть рассеяния, нужно взять с противоположными знаками вклады в фурье-образ от правильных и неправильных положений. Пусть единичный вектор n направлен по оси второго порядка, а единичные векторы a, b образуют стороны грани триконтаэдра-проекции шестимерного куба, параллельной плоскости дефекта. Приведем ответ для фурье-образа дефекта $F(k) = F(k_{\parallel}, k_{\perp})$ ($k = k_{\parallel}n + k_{\perp}$, $k_{\parallel} = (k, n)$, $(k_{\perp}, n) = 0$).

$$F(k_{\parallel}, k_{\perp}) = 2i \sin(\lambda k_{\parallel}) \sum_m \delta(k_{\perp} - k_m) \frac{\sin(k_m^*, a) \sin(k_m^*, b)}{(k_m^*, a) (k_m^*, b)}, \quad (2)$$

где $\lambda = \cos(\theta/2) - \sin(\theta/2)$, $\cos \theta = 1/\sqrt{5}$ (суммирование в (2) производится по четырех-мерным целочисленным векторам $m = (m_1, m_2, m_3, m_4)$). Двумерные векторы k_m, k_m^* определены так:

$$(k_m, x_i) + (k_m^*, y_i) = 2\pi m_i, \quad (3)$$

где $x_1 = a, x_2 = b, x_3 = \varphi(b - a), x_4 = \varphi^{-1}(a + b), y_1 = a, y_2 = -b, y_3 = \varphi^{-1}(a + b), y_4 = \varphi(b - a), \varphi = (\sqrt{5} + 1)/2$, причем векторы a, b выбраны так, что $(a, b) = 1/\sqrt{5}$. Функция $F(k)$ отлична от нуля на линиях, параллельных вектору n . Для получения интенсивности диффузного рассеяния необходимо размазать δ -особенности функции $|F(k)|^2$ перпендикулярно n на величину порядка обратного корреляционного радиуса в плоскости дефекта и учесть, что такие же диффузные линии получаются и для остальных осей второго порядка.

Отметим наиболее существенные черты вычисленной таким образом картины диффузного рассеяния: 1) система диффузных линий имеет икосаэдрическую симметрию и довольно сложный характер распределения в k -пространстве; 2) каждая диффузная линия проходит через точки дифракционной картины, 3) интенсивность рассеяния осциллирует вдоль диффузной линии; 4) пики, имеющие небольшую величину R^{3*} -проекции волнового вектора, попада-

ют в те места диффузных линий, где интенсивность рассеяния мала. Это относится ко всем достаточно ярким пикам (о связи этого свойства с голдстоуновским характером фазонов — см. 6).

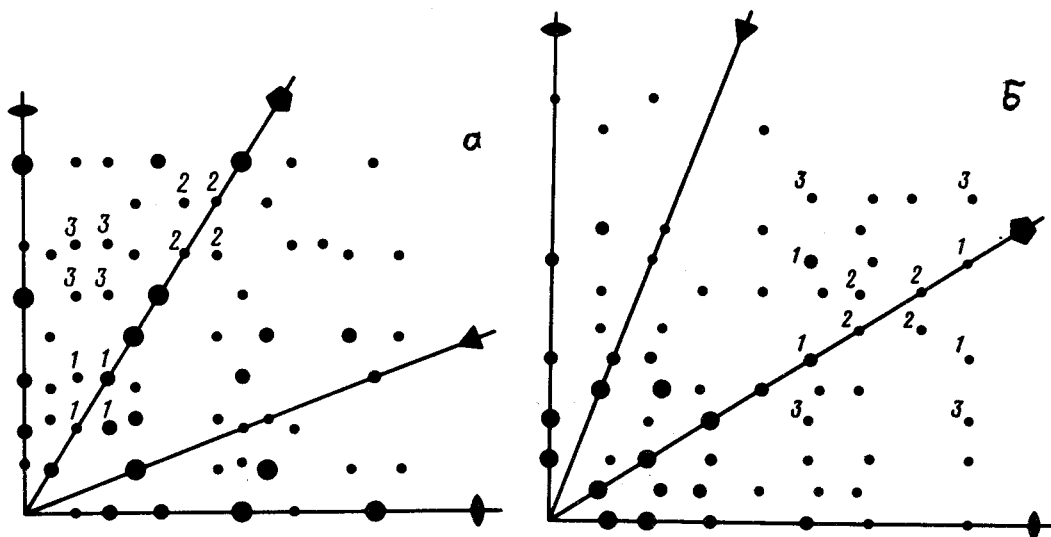


Рис. 2. *a* — Показаны полученные в работе ¹ пики, лежащие в плоскости второго порядка дифракционной картины. Пики условно разбиты на три группы по интенсивности (большой, средней и малой) и изображены кружками соответствующей величины. Три группы пиков, попадающие в области диффузного рассеяния, отмечены цифрами 1, 2, 3; *b* — показаны пики рис. 2*a*, спроектированные на ортогональное дополнение R^{3*} (обозначения те же)

Обсудим теперь имеющиеся экспериментальные данные. На рис. 2*a* показаны приведенные в ¹ пики, лежащие в плоскости симметрии второго порядка, а на рис. 2*b* изображены R^{3*} -проекции этих пиков. Прежде всего отметим наблюдающееся в среднем убывание интенсивности пиков с увеличением длины R^{3*} -проекции, что согласуется с моделью трубы. Видно, однако, что интенсивность пиков зависит не только от R^{3*} -проекции. Это, скорее всего, связано со сложным строением элементарной ячейки (вещество трехкомпонентно), что делает стандартную модель неприменимой в количественном отношении.

Области диффузного рассеяния, обнаруженные в ¹, содержат пики, отмеченные на рис. 2*a*. Проекция этих пиков на ортогональное дополнение R^{3*} , показанные на рис. 2*b*, имеют сравнительно большую длину. Это согласуется с приведенными свойствами 2, 4.

Мы видим, что диффузное рассеяние в квазикристаллах сильно зависит от геометрии поверхности трубы. Точное измерение распределения интенсивности рассеяния в k -пространстве могло бы быть полезным для определения атомной структуры этих веществ.

Я благодарен П.А.Калугину и А.Ю.Китаеву за полезные обсуждения.

Литература

1. Denoyer F., Heger G., Lambert M. et al. J. de Phys., 1987, 48, 1357.
2. Калугин П.А., Китаев А.Ю., Левитов Л.С. Письма в ЖЭТФ, 1985, 41, 119.
3. Elser V. Acta. Cryst., 1985, A 42, 36.
4. Duneau M., Katz A. Phys. Rev. Lett., 1985, 54, 1730.
5. Левитов Л.С. ЖЭТФ, 1987, 93, 1832.
6. Levitov L.S. Europhys. Lett., (to appear)