Письма в ЖЭТФ, том 47, вып. 12, стр. 658 – 660 *25 июня 1988 г.*

СИММЕТРИЯ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Л.С.Левитов, Ж.Ринер

Перечислены группы симметрии икосаэдрических квазикристаллов. Выяснена роль масштабных преобразований. Определены картины погасаний в рентгенограмме, соответствующие несимморфным группам.

В последнее время было открыто много новых квазикристаллов, имеющих икосаэдрическую группу симметрии. Дифракционные эксперименты дают большое количество острых пиков различной интенсивности, по которым, в принципе, можно было бы определить атомную структуру этих веществ. Структурный анализ, так же как и для обычных кристаллов, должен начинаться с выяснения типа симметрии. В настоящей заметке описаны все возможные группы симметрии икосаэдрических квазикристаллов. Показано, что они обладают существенными особенностями по сравнению с обычными кристаллографическими группами.

Каждая группа симметрии связана с определенной точечной группой и решеткой Бравэ. Существует две различных точечных группы: группа Y всех поворотных симметрий икосаэдра (не содержит инверсию, состоит из 60 элементов), группа Y' всех симметрий икосаэдра (содержит инверсию, состоит из 120 элементов). Решетки Бравэ квазикристаллов можно понимать как группы трансляций, сохраняющие соответствующие шестимерные периодические структуры, а можно считать, как мы и будем делать, что решетка Браве описывает положения дифракционных пиков в трехмерном k-пространстве и правила сумм для них. В связи с этим, нам будет удобно использовать трехмерные обозначения шестимерных целочисленных векторов, введенные Каном, Шехтманом и Гратиасом [1]. Примем три взаимно перпендикулярные оси симметрии икосаэдра 2-го порядка за оси координат. При соответствующем выборе масштаба проекция любого целочисленного вектора из R^6 записывается в этих координатах как

$$(k_1/k'_1, k_2/k'_2, k_3/k'_3), \qquad (k/k' = k + k'\tau, \quad \tau = \frac{1}{2}(\sqrt{5}+1)), \tag{1}$$

где k_i и k'_i целые, а суммы $k_1 + k'_2$, $k_2 + k'_3$, $k_3 + k'_1$ четны (икосаэдр ориентирован относительно осей x, y, z так, что вектор (1/0, 0/1, 0/0) является осью 5-го порядка).

Существует три различных решетки Бравэ [2,3], которые можно определить с помощью условий на векторы (1). Это – а) простая кубическая решетка ПК$_6$ (имеется в виду шестимерный куб), состоящая из всех векторов вида (1); б) гранецентрированная решетка ГЦК$_6$, состоящая из таких векторов (1), что $k_1 + k_2 + k_3$ четно; в) объемоцентрированная решетка ОЦК$_6$, состоящая из таких векторов (1), что все k_i четны и числа $k_1 + k'_2$, $k_2 + k'_3$, $k_3 + k'_1$ дают одинаковые остатки при делении на 4. Замечательным свойством этих решеток является неоднозначность в выборе индексов Миллера, связанная с масштабной инвариантностью. Так решетки ГЦК$_6$ и ОЦК$_6$ не меняются при изменении масштаба в τ раз, а для решетки ПК$_6$ этот масштабный фактор равен τ^3. Закон преобразования индексов при изменении масштаба вытекает из тождества $\tau(k/k') = k'/(k' + k)$. Учет масштабной инвариантности оказывается важным при определении групп симметрии.

Всякая группа симметрии, соответствующая некоторой решетке Бравэ L и точечной группе G, состоит из пар (g, h_g), где g – операция из G, h_g – вектор, определенный с точностью до вектора решетки L. Преобразования симметрии (g, h_g) действуют на фурье-образ структуры $\rho(k)$ так

$$\rho'(k) = \exp(2\pi i(k, h_g))\,\rho(g(k)). \tag{2}$$

Здесь (k, h_g) – шестимерное скалярное произведение, которое для $h_g = (h_1/h'_1, h_2/h'_2, h_3/h'_3)$ равняется $\frac{1}{2}\sum_i (k_i h_i + k'_i h'_i)$. Для полного описания симметрии достаточно задать векторы h_g для тех элементов точечной группы, которые порождают ее при перемножении. Группа Y порождается двумя элементами: поворотом A на угол 72° вокруг оси $(1/0, 0/1, 0/0)$ и поворотом B на угол 120° вокруг оси $(1/2, 0/1, 0/0)$. У группы Y' порождающих элементов три: преобразования A и B, а также инверсия.

Если индексация решетки Бравэ выбрана, то неэквивалентные друг другу группы симметрии можно легко найти с помощью компьютера [4], или аналитически [3] (как обычно, две группы симметрии считаются эквивалентными, если одна получается из другой изменением начала отсчета: $h'_g = h_g + g(a) - a$). Приведем в качестве примера ответы для случая $L = $ ПК$_6$, $G = Y$. Имеется пять групп, которые задаются векторами h_A и h_B:

$$h_A = \frac{m}{5}(1/\bar{1}, 1/1, \bar{1}/\bar{1}), \quad h_B = 0, \quad (m = 0, \ldots, 4) \tag{3}$$

Примем теперь во внимание масштабные преобразования. Вычисления показывают, что растяжение в τ^3 раз действует на группах (3) так: $m \to 2m \pmod 5$. Мы видим, что учет масштабных преобразований уменьшает число неэквивалентных групп до двух, т. к. любые две группы (3) с $m \neq 0$ можно перевести друг в друга масштабным преобразованием. Таким образом, в этом случае имеется только две группы симметрии: симморфная ($h_A = 0$, $h_B = 0$) и несимморфная, для которой h_A и h_B можно задать соотношениями (3) с $m = 1$.

При другом выборе точечной группы и решетки Бравэ ситуация оказывается сходной: учет масштабного преобразования эквивалентности важен и приводит к отождествлению большей части групп симметрии. Неэквивалентных групп, остающихся после такого отождествления, довольно мало. Имеется по одной симморфной ($h_A = 0$, $h_B = 0$) и одной несимморфной ($h_A \neq 0$, $h_B = 0$) группе для каждой точечной группы G и решетки Бравэ L, кроме $G = Y'$, $L = $ ГЦК$_6$. Для этого последнего случая есть только симморфная группа. Приведем векторы h_A для несимморфных групп: 1) $G = Y$ – а) $L = $ ПК$_6$, $h_A = \frac{1}{5}(1/\bar{1}, 1/1, \bar{1}/\bar{1})$; б) $L = $ ГЦК$_6$, $h_A = \frac{1}{10}(1/\bar{1}, 6/1, \bar{1}/\bar{6})$; в) $L = $ ОЦК$_6$, $h_A = \frac{1}{10}(1/\bar{1}, 6/1, \bar{1}/\bar{6})$. 2) $G = Y'$ – а) $L = $ ПК$_6$, $h_A = \frac{1}{2}(\bar{1}/0, 1/1, 0/\bar{1})$; б) $L = $ ОЦК$_6$, $h_A = \frac{1}{4}(1/0, 1/\bar{1}, 0/\bar{1})$. Таким образом, всего имеется 11 групп.

Несимморфные группы симметрии, как и для обычных кристаллов, приводят к погасанию некоторых пиков рентгенограммы, разрешенных правилами сумм решетки. Эти погасания расположены либо на осях симметрии 5-го порядка (если $G = Y$), либо в плоскостях симметрии 2-го порядка (если $G = Y'$). Приведем координаты гаснущих пиков: 1) $G = Y$, $L = $ ПК$_6$, ГЦК$_6$, ОЦК$_6$: $(m - n/2n, 2n/m + n, 0/0)$, где m и n целые, m не делится на 5; 2) $G = Y'$, $L = $ ПК$_6$: $(m/n, 0/0, q/r)$, где n и q нечетные, а m и r четные целые числа; 3) $G = Y'$, $L = $ ОЦК$_6$ $(2m/2n, 0/0, 2q/2r)$, где m и r четны, а n и q нечетны. Здесь указаны только пики, лежащие на одной из осей или плоскостей симметрии (остальные получаются из них применением операций точечной группы). Интересно, что семейства погасаний для всех случаев, кроме $L = $ ОЦК$_6$, $G = Y'$, инвариантны относительно масштабных преобразований соответствующих решеток. Для $L = $ ОЦК$_6$, $G = Y'$ картина погасаний инвариантна относительно растяжений в τ^3 раз, а инвариантность относительно масштабных преобразований решетки ОЦК$_6$ (с фактором τ) отсутствует.

В заключение отметим, что в работе [4] роль масштабных преобразований не была принята во внимание, что привело к ошибочным результатам: многие из полученных в [4] групп симметрии эквивалентны друг другу.

Замечание. Для сравнения с другими работами важно подчеркнуть, что наши решетки ПК$_6$, ГЦК$_6$, ОЦК$_6$ определены не в x-пространстве, как это бывает обычно, а в k-пространстве.

Соответствующие решетки в x-пространстве получаются так: $\text{ПК}_6^x = 2\pi\,\text{ПК}_6$, $\text{ГЦК}_6^x = \pi\text{ОЦК}_6$, $\text{ОЦК}_6^x = \pi\text{ГЦК}_6$.

Мы благодарны Ф.Галеру, П.А.Калугину, А.Ю.Китаеву и Г.У.Ниссену за полезные обсуждения.

Литература

1. *Cahn J.W., Shechtman D., Gratias D.,* J. Mater. Res., 1986, **1**, 13.
2. *Rokhsar D.S., Mermin N.D. Wright D.C.* Phys. Rev., 1987, **B35**, 548.
3. *Levitov L.S., Rhyner J.* J. Phys., to appear.
4. *Janssen T.* Acta. Cryst., 1986, **A42**, 261.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
20 мая 1988 г.