

ПЛОТНОСТЬ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

И.А.Калугин

Найдена связь между плотностью атомов в икосаэдрическом упорядоченном квазикристалле и волновым вектором дифракции Q_{100000} : $\pi = \alpha(\Lambda_1 + \Lambda_2\tau)Q_{100000}^3$, где Λ_1 и Λ_2 – целые числа, а τ – "золотое сечение". В частности, для стабильного квазикристалла $Al_{5,1}CuLi_3$ числа (Λ_1, Λ_2) равны $(2, 1)$ для Li и $(4, 2)$ для Al(Cu).

Как известно, расположение атомов в упорядоченных икосаэдрических квазикристаллах описывается сечением периодического семейства так называемых "атомных поверхностей" в шестимерном пространстве R^6 трехмерным физическим пространством R^3 – $^1 - ^3$. Условие полной упорядоченности квазикристалла, накладывает, однако, сильные ограничения на возможные разрывы атомных поверхностей. А именно, любой точке, лежащей на краю разрыва, может быть поставлена в соответствие другая точка края так, что соединяющий их отрезок параллелен физическому пространству и не превышает нескольких межатомных расстояний¹. Цель этой статьи – показать, что это условие приводит к ограничениям на допустимые значения плотности атомов в квазикристаллах.

Профакторизуем атомную поверхность по трансляциям шестимерной периодической решетки. Она превратится в трехмерное многообразие M^3 (возможно, с краем), вложенное в шестимерный тор T^6 . Для того, чтобы вычислить плотность атомов в реальном пространстве, напомним, что в модели⁴ она равняется отношению объема поперечного сечения "трубы" к объему элементарной ячейки в R^6 . Это связано с полной несоизмеримостью физического подпространства, приводящей к плотному заполнению поперечного сечения "трубы". Непосредственное обобщение выражения для плотности атомов в рассматрива-

мом случае выглядит так:

$$n = V_{\perp} / V_T , \quad (1)$$

где V_{\perp} – трехмерный объем проекции атомной поверхности на ортогональное к R^3 пространство $R^{3\perp}$, а V_T – объем шестимерной элементарной ячейки (тора T^6). Объем V_{\perp} может быть записан как

$$V_{\perp} = \int_{M^3} d\omega^{\perp} , \quad (2)$$

где $d\omega^{\perp}$ – 3-форма объема в пространстве $R^{3\perp}$, определенная на T^6 . Заметим, что добавление к M^3 трехмерных пленок, заклеивающих разрывы и составленных из отрезков, параллельных R^3 , не изменит значения интеграла (2). Это связано с тем, что $d\omega^{\perp}$ исчезает на таких пленках. В силу этого, ниже мы будем полагать, что разрывы заклеены и считать M^3 многообразием без края.

Для того, чтобы вычислить интеграл (2), заметим, что $d\omega^{\perp}$ является замкнутой формой на T^6 и интегрирование по M^3 можно заменить интегрированием по комбинации базисных 3-циклов на T^6 , гомологичной M^3 :

$$M^3 \propto \sum_{1 \leq i < j < k \leq 6} \lambda_{ijk} c^{ijk} , \quad (3)$$

где λ_{ijk} – целые числа, а c^{ijk} – базисные 3-циклы. Условия икосаэдрической симметрии многообразия M^3 приводят, однако, к тому, что только два коэффициента в (3) будут независимы:

$$\begin{aligned} M^3 \propto & \Lambda_1 (c^{123} - c^{126} + c^{134} + c^{145} + c^{156} + c^{235} + c^{245} + c^{246} + c^{346} + c^{356}) + \\ & + \Lambda_2 (c^{124} - c^{125} + c^{135} - c^{136} + c^{146} + c^{234} + c^{236} + c^{256} + c^{345} + c^{456}) . \end{aligned} \quad (4)$$

Базисные векторы в (4) пронумерованы так, что в проекции на $R^{3\perp}$ векторы 2, 3, 4, 5 и 6 образуют острые углы с проекцией вектора 1 и расположены по часовой стрелке (если смотреть вдоль просекции вектора 1).

Интегралы $d\omega^{\perp}$ по базисным 3-циклам равны соответствующим ориентированным объемам параллелепипедов в $R^{3\perp}$, построенных на проекциях базисных векторов. Их вычисление дает, с учетом (4), следующее выражение для атомной плотности:

$$n = \frac{20\tau}{(2+2\tau^2)^{3/2}} (\Lambda_1 + \Lambda_2 \tau) , \quad \text{где } \tau = (\sqrt{5}-1)/2 . \quad (5)$$

Объем шестимерной элементарной ячейки принят здесь за единицу. Значение n следует выразить через экспериментально определяемые величины, например, через волновой вектор Q_{100000} , измеряемый при дифракции:

$$n = \frac{(\Lambda_1 + \Lambda_2 \tau) 20\tau}{(1+\tau^2)^{3/2}} \left(\frac{Q_{100000}}{2\pi} \right)^3 . \quad (6)$$

Полезно сравнить (6) с формулой для плотности атомов в кубическом кристалле:

$$n_c = N (Q_{100}/2\pi)^3 , \quad (7)$$

где N – число атомов данного сорта в элементарной ячейке. Отсюда видно, что каждому сорту атомов в квазикристалле соответствует пара целых чисел (Λ_1 , Λ_2), подобно тому, как в кристалле каждому сорту атомов соответствует число N .

Прежде чем применять (6) к реальным веществам, следует заметить, что вектор Q_{100000} определен в квазикристаллах с простой кубической шестимерной решеткой с точностью

до скейлингового преобразования ⁵:

$$S : \begin{cases} Q_{100000} \rightarrow \tau^3 Q_{100000} \\ \Lambda_1 \rightarrow 55\Lambda_1 + 34\Lambda_2 \\ \Lambda_2 \rightarrow 34\Lambda_1 + 21\Lambda_2 \end{cases} . \quad (8)$$

Поэтому, из всех значений Q_{100000} , генерируемых преобразованием S , следует выбрать те, для которых Λ_1 и Λ_2 достаточно малы. Таким образом, мы выберем наименее запутанную атомную поверхность из всех, порождаемых преобразованием (8).

Рассмотрим, в заключение, с точки зрения (6) реальный стабильный квазикристалл состава $Al_{5,1}CuLi_3$ ⁶. При описании положений атомов Al и Cu в этом веществе следует, видимо, использовать одну и ту же атомную поверхность. Это связано с обнаруженным сильным перемешиванием атомных позиций Al и Cu в так называемой R -фазе Al_5CuLi_3 , имеющей близкий к квазикристаллу локальный порядок⁷. Дифракционный эксперимент дает для волнового вектора Q_{100000} два возможных значения $-0,623 \text{ \AA}^{-1}$ и $2,639 \text{ \AA}^{-1}$, связанных преобразованием (8). Величины $\Lambda_1 + \Lambda_2 \tau$ выраженные из (6) с использованием $Q_{100000} = 0,623 \text{ \AA}^{-1}$ равны 2,610 для Li и 5,290 для Al(Cu). Это очень близко к

$$\begin{array}{lll} \Lambda_1 = 2 & \text{для Li} & \Lambda_1 = 4 \\ \Lambda_2 = 1 & & \Lambda_2 = 2 \end{array} \quad \text{для Al (Cu).} \quad (9)$$

То, что числа Λ_1 и Λ_2 оказались малы, свидетельствует, видимо, что $Al_{5,1}CuLi_3$ является упорядоченным квазикристаллом и подчиняется ограничениям (6).

Автор благодарен В.Л.Покровскому, Л.С.Левитову и А.Ю.Китаеву за полезные обсуждения.

Литература

1. Frenkel D.M., Henley C.L., Siggia E.D. Phys. Rev. B, 1986, **34**, 3649.
2. Bak P. Phys. Rev. Lett., 1986, **56**, 861.
3. Bak P. Scripta Metallurgica, 1986, **20**, 1199.
4. Калугин П.А., Китаев А.Ю., Левитов Л.С. Письма в ЖЭТФ, 1985, **41**, 119.
5. Levitov L.S., Rhyner J. J. Phys. (Paris), 1988, **49**, 1835.
6. Chen H.S., Kortan A.R., Parsey J.M. J. Phys. Rev. B, 1987, **36**, 7681.
7. Audier M., Pannetier J., Leblanc M. et al. Phys. B, 1988, **153**, 136.

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

Поступила в редакцию
16 января 1989 г.