

ФАЗОННЫЙ БЕСПОРЯДОК В ДВУМЕРНЫХ КВАЗИКРИСТАЛЛАХ

П.А.Калугин

Изучены равновесные фазонные флуктуации в двумерных квазикристаллах, стабилизируемых короткодействующими силами. Показано, что, даже если квазикристалл является основным состоянием, фазонный коррелятор $\langle(\varphi(0) - \varphi(R))^2\rangle$ расходится при сколь угодно малых температурах не медленнее, чем $\exp(-C\epsilon/T)\ln R$, где ϵ – характерная энергия связи.

В известной модели квазикристалла, описываемой замощением пространства двумя типами элементарных ячеек ^{1,2}, используется специальный квазипериодический закон чередования этих ячеек. При отказе от какого бы ни было закона чередования эта модель переходит в модель случайного квазикристалла. Оказывается, однако, что случайный квазикристалл сохраняет многие черты регулярного, в частности, сингулярности в фурье-образе плотности (правда, степенные, а не δ -функциональные). Это связано с медленной расходимостью фазонного коррелятора ^{3,4}:

$$\langle(\varphi(0) - \varphi(R))^2\rangle \sim \ln R. \quad (1)$$

Фазонная координата φ определяется здесь так же, как и для регулярного квазикристалла, поднятием в многомерное пространство³. Такое поведение коррелятора отвечает связанному с фазонным градиентом вкладу в свободную энергию $\sim T(\nabla\varphi)^2$.

Возможна, однако, промежуточная ситуация между полностью случайным и идеальным квазикристаллами. Действительно, чередование элементарных ячеек в идеальных квазикристаллах может быть задано с помощью локальных правил^{5,6}. Если теперь каждому нарушению локальных правил приписать положительную энергию ϵ , то основным состоянием такой модели будет идеальный квазикристалл. При этом область $T \gg \epsilon$ будет отвечать полностью случайному квазикристаллу. В такой ситуации фазонный коррелятор мог бы иметь при низких температурах иной вид, нежели (1). Поясним это, пользуясь тем, что плоский квазикристалл можно рассматривать, как двумерный срез многомерного кристалла. Известно, что если короткодействующие силы стабилизируют атомно гладкую поверхность обычного кристалла при нулевой температуре, то атомная гладкость сохраняется и в конечном интервале температур вплоть до перехода шероховатости^{7,8}. В случае квазикристалла это означало бы, что $\langle (\varphi(0) - \varphi(R))^2 \rangle$ не расходится и при конечных температурах. Цель этой работы — показать, что это не так.

Прежде всего заметим, что величина фазонного сдвига φ может быть определена с точностью $h \ll 1$ только в областях размера не меньше $\sim h^{-1}$ (размер элементарной ячейки принят за 1). Это связано с тем, что перестановки элементарных ячеек при однородном фазонном сдвиге на h происходят на линиях, разделенных расстоянием порядка h^{-1} ⁵ — таково необходимое условие существования локальных правил. Исходя из этого, оценим статусумму дефектов, возникающих при малом фазонном градиенте $\alpha = |\nabla\varphi|$, снизу. При этом мы можем сузить конфигурационное пространство дефектов, потребовав, чтобы этот градиент реализовывался, как последовательность ступенек величины $h \ll 1$, разделенных шагом h/α . В силу сказанного выше, следует выбирать $h/\alpha > h^{-1}$ или:

$$h^2 > \alpha. \quad (2)$$

Дефекты при этом будут расположены в местах пересечения ступенек с линиями перестройки, связанных с соответствующим фазонным сдвигом, иначе говоря, на границах перестроившихся и неперестроившихся участков (рисунок). Потребовав, кроме того, чтобы ступеньки изгибались не слишком сильно, пересекая, скажем, прямые, параллельные линиям перестройки лишь по одному разу, получим следующую оценку статусуммы:

$$Z > \exp((- \epsilon/T) C' \alpha A) \xi, \quad (3)$$

где A — полная площадь, C' — число порядка 1, а ξ — комбинаторный множитель, то есть число различных расположений дефектов. Величина $C' \alpha A$ ограничивает в рассматриваемом случае полное количество дефектов. Заметим, что сами ступеньки "наблюдаемы" только в местах их пересечения с линиями перестройки, то есть там, где не выполняются требования локальных правил и возникает дефект. Далее, величина ξ также может быть оценена:

$$\xi > \exp(s_0 \alpha A) (1/h)^{C'' \alpha A}. \quad (4)$$

Здесь первый член дает число топологически разных положений ступенек среди линий перестройки, а второй возникает из-за того, что при заданной топологии ступенек и линий перестройки каждый дефект может независимо занимать $\sim h^{-1}$ положений (см. рисунок).

Отметим также, что величина s_0 конечна при $h/\alpha > h^{-1}$. Выбирая h^2 превосходящим α лишь в конечное число раз, получаем:

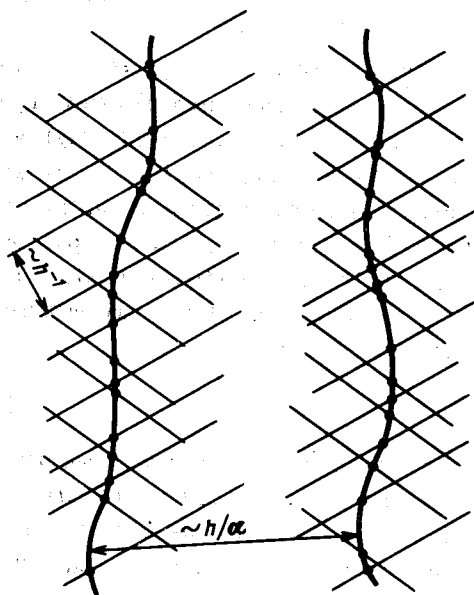
$$Z > \exp(\alpha A [(- C' \epsilon/T + s_0) + (C''/2) \ln \alpha]) \quad (5)$$

или

$$F/A < \alpha[(\epsilon C' - Ts_0) - (TC''/2) \ln \alpha]. \quad (6)$$

Отсюда видно, что при сколь угодно малых температурах имеются такие значения фазонных градиентов $\alpha \sim \exp(-\epsilon\epsilon/T)$, при которых плотность свободной энергии отрицательна. Такой порядок величины и должен иметь "типичный" фазонный градиент в областях размера $\sim \exp(\epsilon\epsilon/2T)$ (или h^{-1}). На расстояниях, много больших h^{-1} фазонные градиенты флуктуируют независимо, поскольку границе раздела участков с разными градиентами не соответствует никакая избыточная энергия (эта граница вообще никак не выделена). Задача, таким образом, снова приобретает вид задачи о полностью случайном квазикристалле, с тем отличием, что сглаживание начинается с фазонных градиентов порядка $\exp(-\epsilon\epsilon/T)$. Это приводит к следующему поведению фазонного коррелятора:

$$\langle (\varphi(0) - \varphi(R))^2 \rangle \sim \exp(-\epsilon\epsilon/T) \ln R/R_c, \quad R_c \sim \exp(\epsilon\epsilon/2T). \quad (7)$$



Фазонные ступеньки высоты h и линии перестроек, возникающих при соответствующем сдвиге (изображены только два семейства). Кружками отмечены положения дефектов

В заключение, следует сделать замечание о природе изучаемых дефектов. Формула (4) показывает, что основной объем рассмотренного конфигурационного пространства приходится на область, хуже всего удовлетворяющую условию $h^2 > \alpha$. Это означает, что реальные дефекты не соответствуют никакому ступенчатому фазонному сдвигу и не являются линейными. Вместе с тем, при малой плотности дефектов, каждый из них способен двигаться только вдоль связанной с ним некоторой линии перестройки. Это означает, что дефекты не являются точечными в обычном смысле слова. Несмотря на эти особенности, делающие невозможной их топологическую классификацию, изученные дефекты являются неустраняемыми.

Автор благодарит А.Ю. Китаева и Л.С. Левитова за полезные обсуждения.

Литература

1. Penrose R. Bull. Inst. Math. and its Appl., 1974, 10, 266.
2. Kramer P., Neri R. Acta Cryst. A, 1984, 40, 580.
3. Henley C.L. J. Phys. A, 1988, 21, 1649.
4. Strandburg K.J., Tang L.H., Jarić M.V. Preprint, 1988.
5. Levitov L.S. Comm. Math. Phys., 1988, 119, 627.
6. De Bruijn N.G. Math. Proc. A, 1981, 84, 27.

7. *Burton W.K., Cabrera N. Disc. Faraday Soc., 1949, 5, 33.*

8. *Van Beeren H. Phys. Rev. Lett., 1977, 38, 993.*

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

Поступила в редакцию
22 февраля 1989 г.