Письма в ЖЭТФ, том 50, вып. 3, стр. 153 – 156 *10 августа 1989 г.*

ЛОКАЛЬНАЯ АНИЗОТРОПИЯ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

В.Е.Дмитриенко

Показано, что локальная анизотропия диэлектрической восприимчивости квазикристалла может радикально изменить правила погасания и поляризационные свойства наблюдаемых брэгговских рефлексов, особенно в случае несимморфных пространственных групп симметрии квазикристаллов

Высокая симметрия икосаэдрических квазикристаллов (точечная симметрия 532 или $\bar{5}3\frac{2}{m}$ [1-4] приводит к изотропии их средней диэлектрической восприимчивости. Однако в рентгеновском диапазоне длин волн могут проявляться локальные свойства квазикристаллов. По крайней мере три физические величины, относящиеся к взаимодействию рентгеновского и мессбауэровского излучения с веществом, чувствительны к локальной анизотропии: это диэлектрическая восприимчивость [5,6], анизотропия фактора Дебая–Валлера (Лэмба–Мессбауэра) и градиент электрического поля на мессбауэровском ядре [7]. Симметрия этих величин и их распределение в пространстве определяется не точечной, а пространственной группой симметрии; физической причиной их анизотропии является асимметрия локального окружения атомов, изучение которого очень важно для понимания структуры квазикристаллов. Ниже в основном рассматривается диэлектрическая восприимчивость[1)], которая квазипериодически изменяется в пространстве и приводит к возникновению брэгговских рефлексов.

В обычных кристаллах наличие локальной анизотропии восприимчивости (ЛАВ) приводит к снятию погасаний с некоторых рефлексов, связанных с винтовыми осями и (или) плоскостями скользящего отражения, а также к изменению поляризационных свойств рефлексов [5-8]. Общий вид тензора ЛАВ может быть получен для любой из 230 кристаллографических групп. Расположение атомов в квазикристаллах и соответствующие пространственные группы до сих пор точно неизвестны, поэтому в настоящей работе для нахождения вида тензора ЛАВ будет использована одна из возможных моделей квазикристалла – проекция из шестимерного пространства [1,2]. Предполагается, что имеется шестимерная периодическая структура, соответствующая одной из икосаэдрических групп симметрии, перечисленных в [1-4]. Тензор ЛАВ такой структуры является периодическим шестимерным тензором второго ранга, инвариантным относительно всех операций симметрии данной группы. Затем этот тензор стандартным для квазикристаллов образом проецируется на трехмерное пространство, в котором возникает некоторое уже квазипериодическое распределение тензорной величины. Таким способом получается наиболее общий для данной модели вид тензора ЛАВ квазикристалла, а его фурье-гармоники определяют интенсивность и поляризационные свойства рефлексов, которые, как будет видно ниже, весьма необычны.

Периодический в шестимерном пространстве тензор ЛАВ $\hat{\chi}(\mathbf{R})$, инвариантный относительно данной группы симметрии, строится точно так же, как в трехмерном случае [6,8]. Ниже рассматриваются только икосаэдрические группы, содержащие операции поворотов $\hat{A}_5$, $\hat{A}_3$ и $\hat{A}_2$ пятого, третьего и второго порядков, а в случае центральносимметричных групп еще и операцию инверсии $\hat{I}$ (используются обозначения работы [2]). В несимморфных группах поворот $\hat{A}_5$ сопровождается трансляцией с вектором $\mathbf{a}_5$. Для некоторого произвольного вектора обратной решетки $\mathbf{H} = 2\pi(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6)$, где n_i – шести-

---

1) Хотя используемое симметрийное рассмотрение применимо и к двум другим величинам

мерные индексы Миллера, фурье-гармоника $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$ тензора $\hat{\chi}(\mathbf{R})$ является произвольным комплексным симметричным тензором; для любого эквивалентного вектора $\mathbf{H}'$, связанного с $\mathbf{H}$ операцией симметрии $\hat{A}$ (так, что $\mathbf{H}' = \hat{A}\,\mathbf{H}$), тензор $\hat{\chi}_{\mathbf{H}'}$ уже не произволен, а выражается через $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$:

$$\hat{\chi}_{\mathbf{H}'} = \hat{A}\chi_{\mathbf{H}}\hat{A}^T \exp(i\mathbf{H}\,\mathbf{a}_A), \tag{1}$$

где $\mathbf{a}_A$ – вектор трансляции, соответствующий операции $\hat{A}$, значком T обозначено транспонирование[2]. Если вектор $\mathbf{H}$ инвариантен относительно операции $\hat{A}$, то $\mathbf{H}' = \mathbf{H}$, и соотношение (1) накладывает ограничения на тензорный вид $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$. Таким образом, задавая $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$ только для неэквивалентных $\mathbf{H}$ и определяя остальные гармоники из (1), мы получаем наиболее общий вид тензора $\hat{\chi}(\mathbf{R})$, инвариантного относительно данной пространственной группы.

Рассмотрим какие ограничения на вид $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$ возникают для рефлексов, направленных вдоль осей пятого порядка. Выбирая ось (100000), легко получить из (1), что для $\mathbf{H} = 2\pi(n, l, l, l, l, l)$ тензор $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$ имеет вид

$$\hat{\chi}_{\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} b_1^H\delta_{m0} & b_2^H & b_2^H s_m & b_2^H s_m^2 & b_2^H s_m^3 & b_2^H s_m^4 \\ b_2^H & b_3^H & b_4^H s_m^3 & b_5^H s_m & b_5^H s_m^4 & b_4^H s_m^2 \\ b_2^H s_m & b_4^H s_m^3 & b_3^H s_m & b_4^H s_m^4 & b_5^H s_m^2 & b_5^H \\ b_2^H s_m^2 & b_5^H s_m & b_4^H s_m^4 & b_3^H s_m^2 & b_4^H & b_5^H s_m^3 \\ b_2^H s_m^3 & b_5^H s_m^4 & b_5^H s_m^2 & b_4^H & b_3^H s_m^3 & b_4^H s_m \\ b_2^H s_m^4 & b_4^H s_m^2 & b_5^H & b_5^H s_m^3 & b_4^H s_m & b_3^H s_m^4 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где $b_1^H, \ldots, b_5^H$ – произвольные комплексные числа, δ_{ik} – символ Кронекера, $s_m = \exp(2\pi i m/5)$, $m = 0, \pm 1, \pm 2$.

При действии операции поворота $\hat{A}_5$ тензор $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$ переходит в $s_{-m}\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$. Поэтому, если группа симморфная ($\mathbf{a}_5 = 0$), то из условия (1) получаем, что $m = 0$ для всех рефлексов $\mathbf{H} = 2\pi(n, l, l, l, l, l)$. Если же группа несимморфная, то, выбирая $\mathbf{a}_5 = (\frac{1}{5}, \frac{2}{5}, \frac{2}{5}, \frac{-1}{5}, \frac{-2}{5}, \frac{-1}{5})$, получаем из (1) и (2), что разрешенное значение параметра m зависит от первого индекса рефлекса:

$$m = n \pmod 5. \tag{3}$$

Из (3) следует, что при $n = 5k$ (k – целое число) $m = 0$ и $\mathrm{Sp}(\hat{\chi}_{\mathbf{H}}) \neq 0$, т. е. такие рефлексы могут существовать и в отсутствие анизотропии восприимчивости [2,3]. Рефлексы с $n \neq 5k$ могут возбуждаться только благодаря анизотропии.

Получим теперь тензорный вид $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ в трехмерном пространстве. Для этого произведем проекцию из шестимерного пространства: $\hat{\chi}_{\mathbf{h}} = \hat{P}\hat{\chi}_{\mathbf{H}}\hat{P}^T$ и $\mathbf{h} = \hat{P}\mathbf{H}$, где $\mathbf{h}$ – трехмерная проекция вектора $\mathbf{H}$, $\hat{P}$ – матрица проецирования. Из (2) получаются следующие выражения для тензорных фурье-гармоник $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ в трехмерном пространстве (ось z направлена па-

---

[2] Формулу (1) можно было бы записать и для трехмерных $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$ и $\hat{A}$, но экспоненциальный множитель все равно останется шестимерным.

раллельно $\mathbf{h}$):

$$\hat{\chi}_{\mathbf{h}} = \begin{cases} b_1^H \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (b_3^H + \tau^{-1} b_4^H - \tau b_5^H) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \text{если } m = 0 \\ (\sqrt{5} b_2^H + b_3^H - \tau b_4^H + \tau b_5^H) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \pm i \\ 0 & 0 & 1 \\ \pm i & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \text{если } m = \mp 1 \\ (b_3^H + 2b_4^H + 2b_5^H) \begin{pmatrix} -1 & \pm i & 0 \\ \pm i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \text{если } m = \mp 2, \end{cases} \quad (4)$$

где $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$. Таким образом и в трехмерном пространстве $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ преобразуется в $\hat{\chi}_{\mathbf{h}} e^{im\varphi}$ при повороте вокруг $\mathbf{h}$ на угол φ. По аналогии с несимморфными кристаллами [6,8] можно сказать, что тензорный вид $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ таков, как если бы была ось 5_1, но с различными (вообще говоря, несоразмерными) векторами трансляции для различных $\mathbf{h}$ (либо, эквивалентно, любая из осей 5_2, 5_3 или 5_4). Аналогичным образом могут быть получены тензоры $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ для рефлексов, запрещенных (в случае изотропной восприимчивости) наличием плоскостей скользящего отражения [2,3].

Тензорный вид $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ радикальным образом сказывается на поляризационных свойствах рефлексов. При $m = 0$, как и в изотропном случае, падающая волна с линейной $\sigma(\pi)$-поляризацией, вектор которой перпендикулярен (параллелен) плоскости рассеяния, дает дифрагированную волну также с $\sigma(\pi)$-поляризацией. При $m = \pm 1$ волна с σ поляризацией дает дифрагированную волну с π-поляризацией и наоборот. При $m = \pm 2$ дифракцию испытывает только волна с определенной эллиптической поляризацией (при дифракции назад она вырождается в круговую поляризацию: правую – если $m = -2$ и левую – если $m = 2$). Таким образом, по поляризационным свойствам можно различить энантиоморфные пары квазикристаллов. Подробнее поляризационные свойства таких рефлексов, уже наблюдавшихся в кристаллах [5], обсуждаются в [6,8].

Исследованные до сих пор квазикристаллы, по-видимому, являются симморфными. Тензорный вид $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ в таких квазикристаллах оказывается довольно естественным: если вектор $\mathbf{h}$ параллелен осям пятого и третьего порядков, то $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ является одноосным тензором; если $\mathbf{h}$ параллелен оси второго порядка, через которую проходит плоскость зеркального отражения, то $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ является двуосным диагональным тензором с осями, направленными вдоль $\mathbf{h}$ и двух ортогональных $\mathbf{h}$ осей второго порядка. Двуосность $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ приводит к тому, что интенсивность и поляризационные свойства рефлексов зависят от азимутального угла поворота φ вокруг $\mathbf{h}$. В случае поликристаллов происходит усреднение по азимутальному углу, что может приводить к частичной деполяризации дифрагированного излучения (для одноосных $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ такая деполяризация отсутствует). Отметим еще, что в несовершенных квазикристаллах длина когерентности для анизотропной части $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ может не совпадать с длиной когерентности для плотности, причем соотношение между этими длинами зависит от модели квазикристалла и характера несовершенства.

Можно также показать, что анизотропия фактора Дебая–Валлера не изменяет общих правил погасания в квазикристаллах, тогда как и анизотропия фактора Лэмба–Мессбауэра, и градиенты электрического поля на мессбауэровских ядрах (уже наблюдавшиеся в квазикристаллах) должны приводить к изменению правил погасания, интенсивности и поляризационных свойств рефлексов (при наличии градиентов электрического поля анизотропная часть тензора $\hat{\chi}_{\mathbf{h}}$ может быть сравнима с изотропной частью). Полученные выше ограничения на тензорный вид фурье-гармоник могут быть также полезны при рассмотрении икосаэдрических фаз в жидких кристаллах [9–11].

Литература

1. *Janssen T.* Acta Cryst. A, 1986, **42**, 261.
2. *Левитов Л.С., Ринер Х.* Письма в ЖЭТФ, 1988, **47**, 658; *Levitov L.S., Rhyner J.* J. Phys. France, 1988, **49**, 1835.
3. *Rokhsar D.S. et al.* Phys. Rev. B, 1988, **37**, 8145.
4. *Olami Z., Alexander S.* Phys. Rev. B, 1989, **39**, 1478.
5. *Templeton D.H., Templeton L.K.* Acta Cryst. A, 1986, **42**, 478.
6. *Беляков В.А., Дмитриенко В.Е.* УФН, 1989, **158**, 679.
7. *Беляков В.А.* УФН, 1975, **115**, 553.
8. *Dmitrienko V.E.* Acta Cryst. A, 1983, **39**, 29; 1984, **40**, 89.
9. *Hornreich R.M., Shtrikman S.* Phys. Rev. Lett., 1986, **56**, 1723.
10. *Rokhsar D., Sethna J.* Phys. Rev. Lett., 1986, **56**, 1727.
11. *Филев В.М.* Письма в ЖЭТФ, 1986, **43**, 523.

Всесоюзный научно-исследовательский центр
по изучению свойств поверхности и вакуума

Поступила в редакцию
22 мая 1989 г.
После переработки
12 июля 1989 г.