Письма в ЖЭТФ, том 51, вып. 1, стр. 28–31 *10 января 1990 г.*

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА УПРУГОЙ НЕСТАБИЛЬНОСТИ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

М.А.Фрадкин

Рассматривается разложение упругой энергии икосаэдрических квазикристаллов по "фононным" смещениям. Показано, что соответствующий функционал Гинзбурга – Ландау описывает фазовый переход первого рода с понижением симметрии до пентагональной или треугольной. Построена соответствующая фазовая диаграмма.

С времени открытия квазикристаллов [1], этот новый тип твердых тел вызывает повышенный интерес [2]. Многие квазикристаллы, полученные в различных экспериментах обладают определенным беспорядком по отношению к идеальной решетке Пенроуза, что проявляется в смещении и уширении дифракционных максимумов [3]. Принято интерпретировать этот беспорядок как определенное поле смещений, отвечающих "фазоновым" степеням свободы, которое возникает в процессе роста [4-6].

Однако вследствие присутствия в разложении упругой энергии икосаэдрического квазикристалла члена, связывающего фазоновые компоненты деформации с фононными [7,8], подобный беспорядок может сопутствовать обычным смещениям [9]. В работе [10] с помощью метода функционала атомной плотности были вычислены упругие постоянные (УП) икосаэдрического квазикристалла и обнаружена механическая неустойчивость по отношению к спонтанной деформации, отвечающей одному из 4-неприводимых представлений (НП) икосаэдрической группы Y, по сумме которых преобразуются 15 компонент тензора деформации квазикристалла. Симметрия спонтанной деформации фазонового типа была проанализирована в работе [11].

В настоящей работе изучается разложение Гинзбурга – Ландау для спонтанной деформации фононного типа как параметра порядка.

Теория Ландау таких фазовых переходов, иногда называемых ферроэластическими, представляет собой достаточно разработанную область [12,13]. Общая процедура состоит в определении из соображений симметрии ненулевых компонент тензора спонтанной деформации в низкосимметричной фазе и в последующем выражении коэффициентов разложения свободной энергии по величине деформации как однокомпонентного параметра порядка через УП различных степеней.

Тензор деформации в икосаэдрической среде преобразуется по прямой сумме двух НП группы Y: единичного и 5-тимерного. Единичное представление не отвечает понижению симметрии, поэтому структура низкосимметричной фазы будет определяться теми максимальными подгруппами Y, при редукции на которые от 5-мерного НП отщепляется единичное представление подгруппы. Легко убедиться, что такими подгруппами являются D_5 и D_3, обнаруженные ранее в [14] при анализе разложения свободной энергии по амплитудам волн плотности. Деформации относятся к четным представлениям, поэтому можно заменить D_m на C_m, не содержащую отражений.

Симметризация тензора сдвиговой деформации по C_m приводит к одноосной деформации:

$$\epsilon_{ij} = \epsilon(3n_i n_j - \delta_{ij}), \tag{1}$$

где $\mathbf{n}$ – единичный вектор вдоль оси вращения. В обозначениях Фойгта:

$$\begin{aligned} &\eta_1 = 3n_1^2 - 1; \qquad \eta_2 = 3n_2^2 - 1; \qquad \eta_3 = 3n_3^2 - 1 \\ &\eta_4 = 3n_2 n_3; \qquad \eta_5 = 3n_1 n_3; \qquad \eta_6 = 3n_1 n_2 \quad . \end{aligned} \tag{2}$$

Ограничимся в нашем разложении 4-ым порядком, как это обычно принято в такого рода задачах [15]. Число независимых УП 2-го, 3-го и 4-го порядка для икосаэдрической среды равняется кратности вхождения единичного НП во 2-ю, 3-ю и 4-ю симметрические степени представления, отвечающего тензору деформации (соответственно 2,4 и 6).

В базисе, определяющем направление осей 5-го порядка следующим образом:

$$\begin{aligned} &\mathbf{e}_{m+1} = (\sin(\frac{2\pi m}{5})\sin\theta; \quad \cos(\frac{2\pi m}{5})\sin\theta; \cos\theta) \\ &m = 1, 2, 3, 4, 5, \qquad \mathbf{e}_1 = (0, 0, 1), \end{aligned} \tag{3}$$

где $\theta = \mathrm{arctg}\,(2)$, возникает 26 УП 3-го порядка не равных 0; из них различными является 12. Для 4-го порядка соответственно 64 УП не равно 0 и 28 из них различны.

Если подставить в выражение Гинзбурга – Ландау для упругой энергии параметр порядка вида (2) то мы получим разложение по степеням компонент вектора $\mathbf{n}$, причем ν-му порядку по деформациям будет отвечать степень 2ν по $\{n_j\}$. Тогда число эффективных УП, определяющих разложение энергии по степеням одноосной деформации, будет равно кратности вхождения единичного НП в соответствующую симметрическую степень канонического 3-хмерного НП, по которому преобразуются координаты вектора $\mathbf{n}$. Для икосаэдрической симметрии эти кратности равны 1, 2, и 2 для 4-й, 6-й и 8-й степеней соответственно, поэтому числа эффективных "одноосных" УП 2-го, 3-го и 4-го порядков равно 1, 2, и 2.

В базисе (3) выражение для параметра порядка, отвечающего симметрии C_5 с осью 5-го порядка вдоль оси z, записывается в виде:

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{6}}(-\eta_1 - \eta_2 + 2\eta_3),$$

а разложение свободной энергии:

$$\Delta F = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}\eta^2 + \frac{1}{6\sqrt{6}}(4C_{114} + C_{456})\eta^3 + (-3C_{1444} + \frac{3}{8}C_{4444})\frac{\eta^4}{36} \ . \tag{4}$$

Для симметрии C_3 аналогично можно получить:

$$\eta = \sqrt{\frac{5}{23 - 3\tau}}\left(-\frac{\eta_1}{\tau} - \frac{\eta_2}{\tau + 2} + \frac{2\eta_3}{\sqrt{5}} + \eta_4\sqrt{\frac{3\tau + 2}{5}} + \eta_5\sqrt{\frac{\tau + 1}{\tau + 2}} + \frac{\eta_6}{\sqrt{\tau + 2}}\right),$$

где $\tau = (\sqrt{5}+1)/2$ – "золотое сечение".

$$\Delta F = \frac{15}{23-3\tau}(C_{11}-C_{12})\eta^2 + \frac{5\sqrt{5}}{(23-3\tau)^{3/2}}(-4C_{114}+C_{456})\eta^3 +$$

$$+ \frac{25}{(23-3\tau)^2}\left(C_{1444} + \frac{3}{8}C_{4444}\right)\eta^4 . \qquad (5)$$

Напомним, что разложение Гинзбурга – Ландау для однокомпонентного параметра порядка:

$$\Delta F = \frac{\alpha}{2}(T-T_c)\eta^2 + \frac{\beta}{3}\eta^3 + \frac{\gamma}{4}\eta^4 ; \qquad \alpha,\ \gamma > 0 \qquad (6)$$

описывает при $\beta \neq 0$ фазовый переход 1-го рода при температуре $T_* = T_c + {}^2/_9\theta$, где $\theta = \beta^2/\alpha\gamma$ (рис. 1). Преобразовав разложения (4) и (5) к виду (6) и обозначив:

$$\alpha_0 = \frac{\partial}{\partial T}\Big|_{T=T_c}(C_{11}-C_{12}); \quad \theta_0 = \frac{C^2_{456}}{\alpha_0 C_{4444}}; \quad \zeta_3 = \frac{C_{114}}{C_{456}}; \quad \zeta_4 = \frac{C_{1444}}{C_{4444}}$$

получим для возможных понижений симметрии:

$$Y \to C_5 \qquad \theta_5 = \frac{(1+4\zeta_3)^2}{1-8\zeta_4}\theta_0$$

$$Y \to C_3 \qquad \theta_3 = \frac{3(1-4\zeta_3)^2}{3+8\zeta_4}\theta_0$$

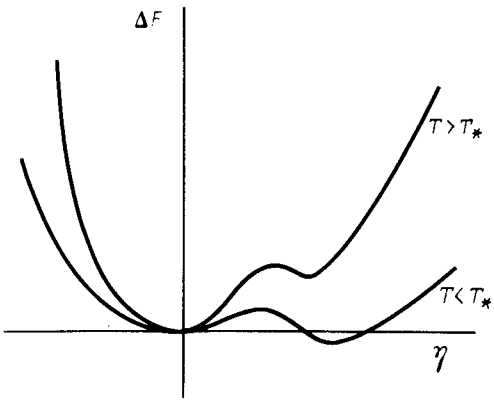

Рис. 1. Зависимость свободной энергии (6) от параметра порядка для различных температур. $T_* = T_c + \frac{2}{9}\theta$ отвечает фазовому переходу первого рода

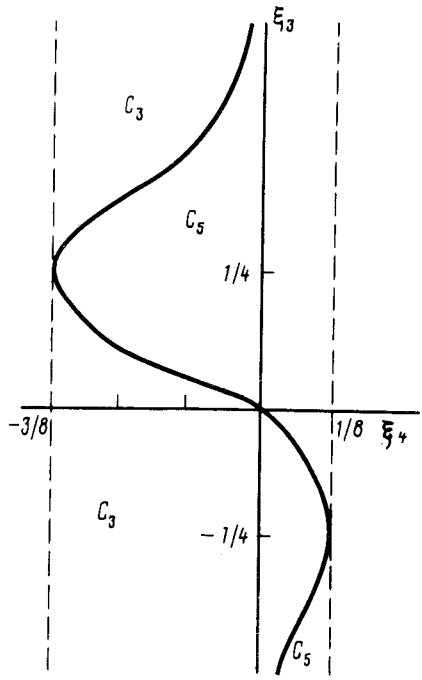

Рис. 2. Фазовая диаграмма, показывающая симметрию низкосимметричной фазы в зависимости от соотношений между эффективными упругими постоянными

В координатах (ζ_3, ζ_4) можно построить фазовую диаграмму, на которой области, отвечающие условию $\theta_5 > \theta_3$, где симметрия понижается до C_5 будут отделены от тех, где $\theta_3 > \theta_5$ и низкосимметричная фаза описывается подгруппой C_3.

Предположим, что $C_{4444} > 0$. Условие $\gamma > 0$ для обоих разложений (4) и (5) выделяет на плоскости полосу $-\frac{3}{8} < \zeta_4 < \frac{1}{8}$, в которой возможно понижение симметрии до обеих подгрупп в зависимости от соотношения между θ_3 и θ_5 (рис. 2). При $\zeta_4 \geqslant {}^1/_8$ может осуществляться переход только в C_3, а при $\zeta_4 \leqslant -{}^3/_8$ – только в C_5. Интересно отметить, что потеря устойчивости путем фазового перехода 2-го рода при $\beta = 0$ (т. е. $\zeta_3 = {}^1/_4$ для симметрии C_3 и $\zeta_3 = -{}^1/_4$ для C_5) не происходит в той области, где существует конкуренция между различными возможными низкосимметричными фазами.

Если $C_{4444} < 0$, то справа от линии $\zeta_4 = {}^1/_8$ осуществляется переход в C_5, а слева от линии $\zeta_4 = -\frac{3}{8}$ – в C_3; и области конкуренции не возникает.

Таким образом, можно утверждать, что в зависимости от соотношения между эффективными упругими постоянными 3-го и 4-го порядков, спонтанная деформация приводит к понижению симметрии из икосаэдрической в пентагональную или треугольную, причем в области конкуренции различных возможных низкосимметричных фаз переход относится к 1-му роду.

Литература

1. *Shechtman D. et al.* Phys. Rev. Lett., 1984, **53**, 1951.
2. *Henley C.L.* Comm. Cond. Matt. Phys., 1987, **13**, 59.
3. *Horn P.M. et al.* Phys. Rev. Lett., 1986, **57**, 1444.
4. *Budai J.D. et al.* Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, 2304.
5. *Socolar J.E.S., Wright D.C.* Phys. Rev. Lett., 1987, **59**, 221.
6. *Chen H.S. et al.* Phys. Rev. B, 1988, **38**, 1654.
7. *Bak P.* Phys. Rev. B, 1985, **32**, 5764.
8. *Levine D. et al.* Phys. Rev. Lett., 1985, **54**, 1520.
9. *Mai Z. et al.* J. Phys. Cond. Matt., 1989, **1**, 2465.
10. *Jaric M.V., Mohanthy U.* Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, 230.
11. *Ishii Y.* Phys. Rev. B, 1989, **39**, 11862.
12. *Boccara N.* Annals of Phys., 1968, **47**, 40.
13. *Sounders G.A.* Phys. Scripta T, 1982, **1**, 49.
14. *Biham O. et al.* Phys. Rev. Lett., 1986, **56**, 2191.
15. *Liakos J.K., Sounders G.A.* Phil. Mag. A, 1984, **50**, 569.

Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И.П. Бардина

Поступила в редакцию 15 ноября 1989 г.