

## ОТНОСИТЕЛЬНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ И ФАЗ ФРАНКА–КАСПЕРА БЛИЗКОГО СОСТАВА

М.А. Фрадкин

В приближении почти свободных электронов проанализирован электронный вклад в энергию квазикристаллов и кристаллических фаз близкого состава, структура которых описывается рациональным сечением шестимерного пространства. Показано, что предложенный механизм объясняет стабильность таких фаз в системе Al–Li–Cu.

Известно <sup>1</sup>, что во многих случаях квазикристаллические сплавы соседствуют на фазовой диаграмме с периодическими фазами близкого состава, имеющими большую элементарную ячейку. Дифракционные эксперименты <sup>2</sup> свидетельствуют о том, что локальная структура этих фаз (относящихся к фазам Франка–Каспера) мало отличается от наблюдаемой в квазикристаллах. Было показано <sup>3</sup>, что структура таких сплавов может быть получена икосаэдрической проекцией на трехмерное "физическое" пространство точек шестимерной кубической решетки, попадающих внутрь "трубы", проходящей в рациональном направлении вдоль векторов  $\mathbf{l}_1 = (p, p, q, 0, 0, q)$ ;  $\mathbf{l}_2 = (q, -q, 0, p, p, 0)$ ;  $\mathbf{l}_3 = (0, 0, p, q, -q, -p)$ , где  $p$  и  $q$  – соседние члены последовательности Фибоначчи. В результате получается кубическая решетка с векторами трансляции  $\{t_\alpha = \hat{P}_I \mathbf{l}_\alpha\}$  ( $\hat{P}_I$  – оператор икосаэдрической проекции), составленная из тех же двух ромбоэдров с ребром длины  $a_R$ , что и квазикристалл.

Многие фазы Франка–Каспера описываются (I,I)-проекцией с  $p = q = 1$  <sup>4</sup>. В этом случае период получающейся ОЦК решетки равен  $t = a_R \tau(2 + 2\sqrt{5})^{1/2}$ , где  $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2$  – золотое сечение; а отношение числа больших и малых ромбоэдров, равное  $\tau$  в квазикристалле, принимает значение  $5/3$ .

Рассмотрим электронный вклад в энергии квазикристалла и фазы Франка–Каспера. В приближении почти свободных электронов (ПСЭ) этот вклад будет определяться возникновением энергетических щелей в зонном спектре вблизи поверхности Ферми. Приближение ПСЭ было использовано для анализа электронной структуры квазикристаллов в работах <sup>5-7</sup>. Обнаружено, что, хотя волновые векторы квазикристалла плотно заполняют обратное пространство, щели достаточно большой ширины возникают на дискретном наборе рефлексов, отстоя-

ших друг от друга на конечное расстояние. Поэтому можно оценивать стабильность квазикристаллов по теории Джонса сплавов Юм–Розери <sup>7,8</sup>, в которой анализируется положение векторов обратной решетки относительно сферы радиуса  $2k_F$ .

Известно, что для квазикристалла обратные векторы могут быть записаны в виде <sup>9</sup>

$$\mathbf{G}^Q = \frac{\pi}{a_R} \sum_{j=1}^6 m_j \mathbf{n}_j,$$

где  $\mathbf{n}_j$  — единичные векторы, направленные к вершинам икосаэдра,  $m_j$  — произвольные целые числа.

В кубическом единичном базисе с осями вдоль векторов  $\mathbf{t}_\alpha$

$$\mathbf{G}^Q = \frac{\pi}{a_R} \frac{1}{\sqrt{\tau+2}} ((m_1 + m_2)\tau + (m_3 + m_6); (m_4 + m_5)\tau + (m_1 - m_2); (m_3 - m_6)\tau + (m_4 - m_5)),$$

Обратные векторы (I,I)-проекции образуют в этом базисе ГЦК решетку:

$$\mathbf{G}^C = \frac{\pi}{a_R} \frac{\sqrt{\tau+2}}{\tau+1} (k_1, k_2, k_3),$$

причем сумма индексов  $k_1 + k_2 + k_3$  должна быть четной.

С учетом ренормировки валентности меди <sup>7</sup> для  $R$ -фазы Франка–Каспера AlLiCu, исследованной в <sup>10</sup>, можно получить выражение для импульса Ферми:

$$2k_F = 5,027 \frac{\pi}{a_R},$$

что близко к вектору обратной решетки (I,I)-проекции с индексами (444):

$$G_{444}^C = 5,034 \frac{\pi}{a_R}.$$

В <sup>11</sup> было обнаружено, что в серии сплавов  $\text{Al}_x\text{Li}_3\text{Cu}$  квазикристаллу отвечает  $x = 5,1$ ; а кубической  $R$ -фазе —  $x = 4,8$ . Отношение среднего числа электронов на атом квазикристалла  $Z_Q$  и  $R$ -фазы  $Z_C$  оказывается равным  $Z_Q/Z_C = 1,013$ . Если предположить, что  $R$ -фаза стабилизируется при  $2k_F = G_{444}^C$ , а квазикристалл — в области ближайшего из обратных векторов с широкой щелью:  $2k_F = G_{222100}^Q = 5,052 \frac{\pi}{a_R}$ , то получаем:  $Z_Q/Z_C = (G_{222100}^Q/G_{444}^C)^3 (n_{\text{ат}}^C/n_{\text{ат}}^Q)$ , где  $n_{\text{ат}}^Q, n_{\text{ат}}^C$  — атомные плотности квазикристалла и фазы Франка–Каспера. В <sup>12</sup> было показано, что

$$n_{\text{ат}}^Q \sim \frac{\Lambda_1 + \tau\Lambda_2}{1 + \tau^2},$$

где  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  — суммарные числа атомов в малом и большом ромбоэдрах соответственно. С учетом того, что отношение количества больших и малых ромбоэдров в  $R$ -фазе равно  $5/3$ , можно аналогично получить:

$$n_{\text{ат}}^C \sim \frac{\Lambda_1 + \frac{5}{3}\Lambda_2}{1 + \frac{5}{3}\tau}.$$

Приняв значения  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  из <sup>12</sup>, окончательно получаем  $Z_Q/Z_C = 1,012$ , что почти совпадает с экспериментальным значением.

Таким образом, можно утверждать, что приближение ПСЭ удовлетворительно описывает относительную стабильность квазикристалла и кубической  $R$ -фазы в системе Al–Li–Cu.

Автор выражает признательность А.Я.Беленькому и П.А.Калугину за полезные обсуждения затронутых вопросов.

#### Литература

1. Nelson D.R., Halperin B.I. Science, 1986, 229, 233.

2. *Egami T., Poon S.J.* Mat. Sci. and Eng., 1988, 99, 323.
3. *Elser V., Henley C.L.* Phys. Rev. Lett., 1985, 55, 2883.
4. *Sanyal M.K., Sahni V.C., Dey G.K.* Nature, 1987, 328, 704.
5. *Lu J.P., Birman J.L.* Phys. Rev. B, 1987, 36, 4471.
6. *Smith A.P., Ashcroft N.W.* Phys. Rev. Lett., 1987, 59, 1365.
7. *Vaks V.G., Kamysheiko V.V., Samolyuk G.D.* Phys. Lett. A, 1988, 132, 131.
8. *Bancel P.A., Heiney P.A.* Phys. Rev. B, 1986, 33, 7917.
9. *Elser V.* Phys. Rev. B, 1985, 32, 4892.
10. *Audier M. et al.* Phys. B, 1988, 153, 136.
11. *Chen H.S., Kortan A.R., Parsey J.M.* Phys. Rev. B, 1987, 36, 7681.
12. *Калугин П.А.* Письма в ЖЭТФ, 1989, 49, 226.

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

Поступила в редакцию  
17 апреля 1989 г.