

УПРУГАЯ НЕСТАБИЛЬНОСТЬ И СПОНТАННЫЙ БЕСПОРЯДОК ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

М.А.Фрадкин

Топологический беспорядок в икосаэдрических квазикристаллах рассматривается как следствие фазового перехода упругой неустойчивости по "фононным" смещениям. "Фазонные" деформации в зависимости от условий задачи являются сопряженным параметром порядка или аналогом внешнего поля в соответствующем разложении Гинзбурга-Ландау. Предлагаемая модель удовлетворительно воспроизводит результаты дифракционных экспериментов в стабильных квазикристаллах.

Одной из характерных особенностей икосаэдрических квазикристаллов ¹ является присутствие спонтанного беспорядка, наблюдаемого в виде смещения дифракционных пиков по отношению к идеальной решетке Пенроуза или их уширения ². Имеется связь степени этого беспорядка с характеристиками способа получения образца, например со скоростью роста ³. Принято интерпретировать это явление как следствие "фазонных" смещений атомов квазикристалла, поскольку в ряде экспериментов на быстрозакаленных образцах наблюдалась зависимость ширины пиков от ортогональной составляющей их волновых векторов ⁴.

Однако, в недавно открытых стабильных квазикристаллах Al-Cu-Fe ⁵ и Al-Cu-Ru ⁶ наблюдается иная картина. В образцах, полученных медленным охлаждением или с помощью отжига, положения дифракционных максимумов совпадают с идеальными позициями, а их ширина зависит одновременно от "фазонной" и "фононной" компонент волнового вектора ⁷ или только от "фононной" ⁸, причем уширение пиков имеет гораздо меньшую величину, чем в быстрозакаленных образцах. В сплаве Al-Cu-Fe Банселом ⁹ было обнаружено искажение квазикристалла ниже температуры 670°С в результате неустойчивости по отношению к атомным смещениям.

Такая неустойчивость была предсказана в ¹⁰, где упругие постоянные икосаэдрического квазикристалла были вычислены с помощью метода функционала атомной плотности. Соответствующее диффузное рассеяние анализировалось в ¹¹, а симметрия "фазонных" смещений - в ¹². Однако, "фазонная" неустойчивость не в состоянии объяснить зависимость ширины пиков от продольного волнового вектора в сплаве Al-Cu-Ru ⁸.

В настоящей работе предлагается альтернативный подход, в рамках которого смещение и уширение дифракционных пиков рассматриваются в качестве следствия неустойчивости квазикристалла по отношению к "фононным" деформациям. При этом "фазонные" смещения возникают вследствие наличия в разложении упругой энергии икосаэдрического квазикристалла смешанного члена, связывающего "фононные" компоненты деформации с "фазонными" ¹³. Если T_c - температура неустойчивости, то ниже T_c в квазикристалле возникают спонтанные деформации, приводящие к сдвигу рефлексов в однодоменном образце и к их расщеплению - в полидоменном. На дифрактограмме это приводит к смещению и уширению пиков.

В работе ¹⁴ неустойчивость по отношению к "фононным" смещениям была исследована в рамках теории Ландау непрерывных фазовых переходов. В результате анализа соответствующей фазовой диаграммы было показано, что в зависимости от соотношения между упругими постоянными третьего и четвертого порядков, спонтанная деформация приводит к понижению симметрии из икосаэдрической в пентагональную или треугольную путем фазового перехода первого рода.

"Фазонные" смещения реализуются за счет атомных сдвигов на расстояния порядка межатомных, что требует преодоления активационного барьера. Поэтому их вклад в упругую энергию определяется кинетикой релаксации фазонов в интересующей нас области ¹⁵. Для удобства рассмотрения можно ввести эффективную температуру "замерзания" фазонов T_f , выше которой соответствующие степени свободы являются равновесными, а ниже - замороженными ¹¹.

Обратимся к разложению Гинзбурга-Ландау, относящемуся к рассматриваемой задаче. Поскольку структура спонтанной деформации ниже точки перехода фиксирована редукцией симметрии, то величину "фононной" деформации η_{\parallel} можно использовать в качестве однокомпонентного параметра порядка. В зависимости от соотношения между T_f и T_c "фазонные" члены в этом разложении имеют различный смысл. Если в критической области фазоны могут релаксировать, то величина симметризованной "фононной" деформации η_{\perp} является сопряженным (или вторичным) параметром порядка:

$$\Delta F = \frac{\alpha}{2}(T - T_c)\eta_{\parallel}^2 + \frac{\beta}{3}\eta_{\parallel}^3 + \frac{\gamma}{4}\eta_{\parallel}^4 + C_{\perp}\eta_{\perp}^2 + C_{int}\eta_{\perp}\eta_{\parallel}. \quad (1)$$

"Фононная" часть этого разложения описывает переход первого рода при температуре:

$$T_* = T_c + \frac{2\beta^2}{9\alpha\gamma}. \quad (2)$$

Равновесное значение η_{\perp} определяется минимизацией выражения (1):

$$\frac{\partial \Delta F}{\partial \eta_{\perp}} = 2C_{\perp}\eta_{\perp} + C_{int}\eta_{\parallel} = 0, \quad (3)$$

что приводит к соотношению:

$$\eta_{\perp} = -\frac{C_{int}}{2C_{\perp}}\eta_{\parallel}. \quad (4)$$

Подставив это выражение в (1), получим ренормированное однокомпонентное разложение:

$$\Delta F = \frac{\alpha'}{2}(T - T'_c)\eta_{\parallel}^2 + \frac{\beta}{3}\eta_{\parallel}^3 + \frac{\gamma}{4}\eta_{\parallel}^4, \quad (5)$$

где новые значения жесткости и критической температуры определяются формулами:

$$\alpha' = \alpha - 2\frac{\partial}{\partial T}\Big|_{T=T'_c}\left(\frac{C_{int}^2}{2C_{\perp}}\right); \quad T'_c = T_c + \frac{C_{int}^2}{2\alpha C_{\perp}}. \quad (6)$$

При малости поправки к T_c , рассмотрение "фононной" неустойчивости ¹⁴ остается справедливым, причем расположение областей фазовой диаграммы, отвечающих понижению симметрии до различных максимальных подгрупп икосаэдрической группы, не изменяется.

В тех квазикристаллах, где реализуется эта ситуация, уширение дифракционных пиков должно быть пропорционально одновременно продольной и поперечной компонентам соответствующего волнового вектора, причем отношение коэффициентов пропорциональности в силу (4) не меняется с температурой вплоть до "замерзания" фазонов при температуре T_f (см. рисунок). По-видимому, такая картина имеет место для квазикристалла Al-Cu-Fe ⁷, где было обнаружено понижение симметрии до D_{3h} ⁹, допускающее ненулевой смешанный член в разложении упругой энергии. Следует отметить, что в силу принадлежности фазового перехода "фононной" неустойчивости к первому роду, он проявляется в конечном скачке η_{\parallel} и может не сопровождаться заметным смягчением соответствующих мод ¹⁶.

Если температура "замерзания" фазонов T_f выше точки "фононной" неустойчивости T_c , то замороженная спонтанная "фононная" деформация $\eta'_{\perp}(\vec{r})$ является

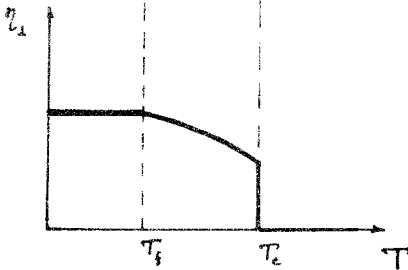
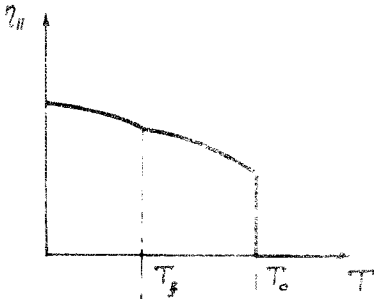
аналогом внешнего поля. Тогда вместо разложения (1) нужно записать функционал Гинзбурга-Ландау $\Delta \mathcal{F}\{\eta_{\parallel}(\vec{r}), \eta_{\perp}(\vec{r})\}$, описывающий зависимость свободной энергии от всех компонент тензора деформации квазикристалла. При этом смешанный член в разложении упругой энергии имеет вид:

$$\Delta \mathcal{F}_{int} = C_{int} \int d^3 \vec{r} \sum_k \eta_{\parallel 5}^k(\vec{r}) \eta_{\perp 5}^k(\vec{r}), \quad (7)$$

где $\eta_{\parallel 5}, \eta_{\perp 5}$ - соответственно "фононные" и "фазонные" компоненты деформации, преобразующиеся по пятимерному неприводимому представлению икосаэдрической группы симметрии ¹⁵. Тогда равновесная "фононная" деформация, определяемая из условий

$$\frac{\delta}{\delta \eta_{\parallel}(\vec{r})} (\Delta \mathcal{F}\{\eta_{\parallel}(\vec{r}), \eta_{\perp}(\vec{r})\}) = 0; \quad \eta_{\perp}(\vec{r}) = \eta_{\perp}^f(\vec{r}) \quad (8)$$

в случае $\eta_{\perp}^f(\vec{r}) \neq 0$ будет отлична от 0 при любых температурах и неустойчивость квазикристалла подавляется. Такая ситуация может иметь место при росте квазикристалла с достаточно большой скоростью, поскольку для формирования бездефектной структуры необходимо, чтобы расположение атомов на растущей поверхности было скоррелировано на больших расстояниях.



Температурная зависимость фононной и фазонной компонент спонтанной деформации, определяющих коэффициенты пропорциональности между шириной дифракционного пика и продольной и поперечной составляющими соответствующего волнового вектора

В случае отжига или медленного охлаждения может быть получен стабильный квазикристалл, не содержащий "фазоновых" смещений ⁸. Тогда в силу условия $\eta_{\perp}^f(\vec{r}) \equiv 0$ разложение (1) превращается в однокомпонентное выражение, приводящее к чисто "фононной" спонтанной деформации, проявляющейся в линейной зависимости ширины максимума дифрактограммы от продольной компоненты соответствующего волнового вектора. Именно этот случай реализуется в квазикристалле Al - Cu - Ru ¹⁷, где свежезакаленный образец проявляет топологический

беспорядок, превращающийся после отжига и последующего охлаждения в малое уширение пиков, зависящее только от "фононной" компоненты волнового вектора δ .

Таким образом, предложенная модель "фазонных" смещений, сопряженных "фононным" деформациям в критической области фазового перехода упругой неустойчивости, удовлетворительно воспроизводит топологический беспорядок в стабильных икосаэдрических квазикристаллах, наблюдаемый в дифракционных экспериментах.

Автор искренне признателен А.Я.Беленькому, Л.С.Левитову и Л.В.Михееву за полезные обсуждения затронутых в статье вопросов.

Литература

1. *Shechtman D. et al. Phys.Rev. Lett.*, 1984, 53, 1951.
2. *Horn P.M. et al. Phys.Rev. Lett.*, 1986, 57, 1444.
3. *Chen H.S. et al. Phys.Rev. B*, 1988, 38, 1654.
4. *Budai J.D. et al. Phys.Rev. Lett.*, 1987, 58, 2304.
5. *Tsai A.P. et al. Jap. J. Appl. Phys.*, 1987, 26, L1505.
6. *Tsai A.P. et al. Jap. J. Appl. Phys.*, 1988, 27, L1587.
7. *Calvayrac Y. et al. J. de Physique (Paris)*, 1990, 51, 417.
8. *Guryan C.A. et al. Phys. Rev. Lett.*, 1989, 62, 2409.
9. *Bancel P.A. Phys. Rev. Lett.*, 1989, 63, 2741.
10. *Jaric M.V., Mohanthy U. Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58, 230.
11. *Jaric M.V., Nelson D.R. Phys.Rev. B*, 1988, 37, 4458.
12. *Ishii Y. Phys. Rev. B*, 1989, 39, 11862.
13. *Bak P. Phys. Rev. B*, 1985, 32, 5764.
14. *Фрадкин М.А. Письма в ЖЭТФ*, 1990 51, 28.
15. *Lubensky T.C. et al. Phys. Rev. B*, 1985, 32, 7444.
16. *Krumhansl J.A., Gooding R.J. Phys. Rev. B*, 1989, 39, 3047.
17. *Hiraga K. et al. Jap. J. Appl. Phys.*, 1989, 28, L1624.

ЦНИИ черной металлургии
им. И.П.Бардина

Поступила в редакцию
24 сентября 1990 г.