Письма в ЖЭТФ, том 56, вып.10, стр.547 - 549 25 ноября 1992 г.

О СТУПЕНЯХ НА ПОВЕРХНОСТИ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

В.И. Марченко

Институт физики твердого тела РАН
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 29 октября 1992 г.

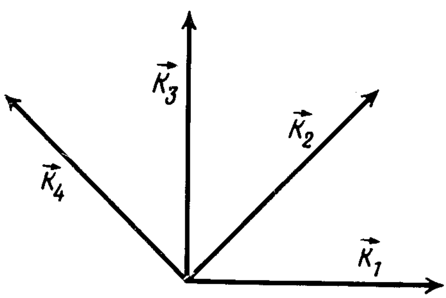
Показано, что поверхность квазикристаллов может находиться в атомногладком состоянии. Энергия элементарных ступеней на такой поверхности имеет логарифмический характер.

Возможность существования атомногладкого состояния какой-либо грани обычного кристалла обусловлена его периодичностью в направлении перпендикулярном к границе. В квазикристаллах, как будет показано в настоящей заметке, также есть причина для осуществления атомногладкого состояния. Поскольку симметрия квазикристаллов выше, чем симметрия кристаллов, то здесь атомногладкое состояние имеет ряд особенностей. Высота ступеней может принимать дискретный бесконечный набор несоизмеримых значений, а их энергия имеет логарифмическую расходимость (характерную для дислокаций).

Рассмотрим простейшую из возможных квазикристаллических структур – двумерный квазикристалл с осью восьмого порядка. Симметрия структуры определяется набором фурье-компонент пространственной модуляции функции плотности $\rho(\mathbf{r})$

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 + \Sigma|\rho_{\mathbf{k}}|e^{i(\mathbf{kr}-\varphi_{\mathbf{k}})}. \tag{1}$$

Деформации квазикристалла описываются четырьмя фазовыми полями φ_1, φ_2, φ_3, φ_4, соответствующими основным гармоникам с минимальными по модулю волновыми векторами, ориентированными под углами $\pi/2$ и $\pi/4$ по отношению друг к другу (см. рисунок); в силу вещественности плотности $\varphi_{\mathbf{k}} = -\varphi_{-\mathbf{k}}$.



Введем комплексные поля

$$u_x + iu_y = \frac{a}{2\pi}(\varphi_1 + e^{i\pi/4}\varphi_2 + e^{i2\pi/4}\varphi_3 + e^{i3\pi/4}\varphi_4)$$

$$\xi + i\chi = \frac{a}{2\pi}(\varphi_1 + e^{i3\pi/4}\varphi_2 + e^{i6\pi/4}\varphi_3 + e^{i9\pi/4}\varphi_4). \tag{2}$$

Компоненты u_x, u_y представляют собой вектор смещения квазикристалла как целого, величины же ξ, χ соответствуют внутреннему так называемому фазовому движению; ось x направлена вдоль вектора $\mathbf{k}_1$, ось y вдоль $\mathbf{k}_3$. Заметим, что величины ξ, χ можно рассматривать как поле встречного перемещения двух решеток, одна из которых построена на паре векторов $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$, а другая – $\mathbf{k}_3$, $\mathbf{k}_4$. При этом ξ – соответствует такому движению вдоль оси x, а χ – вдоль y.

Пусть поверхность квазикристалла ориентирована вдоль вектора $\mathbf{k}_1$. Распространение полученных ниже результатов на иные возможные ориентации не вызывает принципиальных затруднений, но для изложения это самый простой случай. Состояние квазикристалла изменится, но его объемная энергия останется прежней, при добавлении к каждой из фаз постоянных величин $\delta\varphi_i$. Нет, однако, оснований для того, чтобы энергия поверхности не менялась при произвольном таком преобразовании. Действительно, если изменяется величина χ, соответствующая встречному движению указанных выше решеток вдоль нормали к поверхности, то энергия поверхности должна измениться – ясно, что структура границы и, в частности, ее эффективная толщина не может оставаться постоянной при таком движении. Минимуму поверхностной энергии соответствует какое-то вполне определенное значение χ и ничто не мешает нам считать, что это χ равно нулю. Для величины ξ и вектора смещения $\mathbf{u}$ нет такого фиксирующего их значения условия. Таким образом, для уравнений равновесия, описывающих некоторое деформированное состояние квазикристалла, по переменным $\mathbf{u}$ и ξ имеем естественные граничные условия – отсутствие соответствующих напряжений, а переменная χ должна быть равна нулю.

В обычных кристаллах множество эквивалентных по энергии состояний границы получается с помощью наращивания целого числа атомных плоскостей. В квазикристаллах такое множество для рассматриваемой границы возникает при наращивании квазикристалла на высоту

$$h = a(N + \sqrt{2}M) \tag{3}$$

и одновременном фазовом сдвиге

$$\chi = a(N - \sqrt{2}M); \qquad \xi = u_x = u_y = 0, \tag{4}$$

где N и M – целые числа. Функция плотности (1) в координатах отсчитываемых от положения каждой из этих границ будет одной и той же. Именно это свойство и необходимо для возможности существования атомногладкого состояния. Так как, при переходе от одного возможного состояния к другому необходимо делать фазовое преобразование (4), то вблизи ступени в объеме квазикристалла должны возникнуть деформации характерные для дислокаций.

Энергия фазовой деформации квазикристаллов [1] в случае с данной симметрией сводится к следующему выражению (см. [2], ф-ла (6))

$$\lambda_1(\partial_x + i\partial_y)(\xi + i\chi)(\partial_x - i\partial_y)(\xi - i\chi) + \lambda_2(\partial_x + i\partial_y)(\xi - i\chi)(\partial_x - i\partial_y)(\xi + i\chi) +$$

$$+\lambda_3\{(\partial_x + i\partial_y)(\xi + i\chi)(\partial_x + i\partial_y)(\xi + i\chi) + \text{к.с.}\}. \tag{5}$$

Ограничиваясь лишь целью продемонстрировать дислокационный эффект, не учитываем перекрестные члены связывающие фазовые и обычные упругие степени свободы. Тогда вблизи ступени возникнут только фазовые деформации описываемые уравнениями

$$\alpha\Delta\xi + (\partial_x^2 - \partial_y^2)\xi - 2\partial_x\partial_y\chi = 0; \quad \alpha\Delta\chi - (\partial_x^2 - \partial_y^2)\chi - 2\partial_x\partial_y\xi = 0, \tag{6}$$

где $\alpha = (\lambda_1 + \lambda_2)/2\lambda_3$, и граничными условиями на поверхности $y = 0$: условием отсутствия тангенциальных фазовых ξ -напряжений

$$(\alpha - 1)\partial_y\xi + (\beta - 1)\partial_x\chi = 0, \tag{7}$$

где $\beta = (\lambda_l - \lambda_2)/2\lambda_3$, и условий фиксирующих скачок фазы χ при переходе с одной стороны ступени $x < 0$ на другую – $x > 0$:

$$x < 0: \quad \chi = 0; \quad x > 0: \quad \chi = b = a(N - \sqrt{2}M). \tag{8}$$

Решение задачи (6)–(8) нетрудно найти, воспользовавшись очевидной аналогией с краевой дислокацией (см. [3], задача 4 к §27):

$$\xi = -\frac{b}{\pi}\ln\sqrt{x^2 + y^2}; \qquad \chi = \frac{b}{2} + \frac{b}{\pi}\mathrm{arctg}\frac{x}{y}. \tag{9}$$

Энергия ступени равна

$$\frac{4}{\pi}\lambda_2 b^2 \ln\frac{L}{a}, \tag{10}$$

где длина L порядка размера образца или, если есть ступень с противоположным знаком, то – порядка расстояния между ступенями.

Полученный результат приводит к ряду очевидных следствий для свойств квазикристаллов.

Во-первых, при достаточно низких температурах в равновесной форме квазикристаллов должны быть представлены лишь несколько граней. Нельзя, впрочем, исключить и стрикционную неустойчивость ребер [4], тогда грани будут сопрягаться скругленными участками.

Во-вторых, рост атомногладкой грани должен происходить путем зарождения и разрастания новых слоев - вполне похоже на послойный механизм роста атомногладких граней кристаллов. Здесь , однако, задача существенно усложняется появлением ступеней различной высоты и характером энергии ступеней, причем основная трудность не в логарифме, а в зависимости величины b от чисел M и N определяющих параметры ступени.

В-третьих, фазовый переход в атомношероховатое состояние должен иметь существенное отличие от такого перехода на поверхности кристаллов.

В-четвертых, на поверхности квазикристаллов отсутствует запрет на двумерные фазовые переходы первого рода имеющийся в кристаллах и жидкостях, так как обнаруженный "фазовый логарифм" возникнет на границе двумерных поверхностных фаз и будет конкурировать с неустойчивостями указанными в работах [4,5]. Однако кинетика такого перехода имеет свои особенности [6].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Фонда Сороса и Американского Физического Общества.

1. D.Levin, T.C.Lubensky, S.Ostlund,et al., Phys. Rev. Lett. **54**, 1520 (1985).
2. В.И.Марченко, Письма в ЖЭТФ **54**, 333 (1991).
3. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Теория упругости. М.: Наука, 1987.
4. В.И.Марченко, ЖЭТФ **81**, 1141 (1981).
5. В.И.Марченко, Письма в ЖЭТ.Ф **33**, 397 (1981).
6. В.И.Марченко, ДАН **274**, 312 (1984).