

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОДЕКАГОНАЛЬНЫХ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

*A. B. Смоляков**, *B. B. Гиржсон***

Запорожский национальный университет
69063, Запорожье, Украина

Поступила в редакцию 20 февраля 2017 г.

Рассмотрен способ построения додекагональных квазирешеток, который заключается в рекуррентном размножении исходной группы узлов, являющихся вершинами правильного двенадцатигольника. Проанализирован алгоритм моделирования обратных решеток додекагональных квазикристаллов. Проведено сопоставление используемого метода моделирования с традиционным методом проецирования. Выполнена индексация дифракционной картины от додекагональных квазикристаллов, аналогичная индексации, предложенной Каном для икосаэдрических квазикристаллов. Рассмотрен вопрос о неоднозначности выбора базисных векторов обратной решетки квазикристаллов.

DOI: 10.7868/S0044451017090097

1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментально установлено, что в настоящее время существуют квазикристаллы (quasicrystals, QC), имеющие оси симметрии пятого, восьмого, десятого и двенадцатого порядков. Наиболее многочисленными группами QC являются икосаэдрические и додекагональные квазикристаллы, которые характеризуются осьми симметрии пятого и десятого порядков [1]. Большинство QC-сплавов являются метастабильными. Вместе с тем, с каждым годом возрастает общее количество новых QC-сплавов и обнаруживаются новые стабильные QC, в частности додекагональные, формирование которых происходит в равновесных условиях [2]. Формирование конденсированного вещества с квазипериодическим дальним порядком и ротационной осью симметрии двенадцатого порядка установлено не только в металлических системах (например, Ni–V [3], Cr–Ni [4], Bi–Mn [5], Ta–Te [6], Mn–Si–V [7]), но и в жидких кристаллах [8], коллоидных растворах [9] и полимерных системах [10].

Несмотря на большое количество работ, касающихся исследований QC, проблемы, затрагивающие корректное описание их структуры, остаются решенными не полностью, что, в первую очередь, свя-

зано с невозможностью выбора элементарной ячейки. Необходимо отметить, что существуют достаточно результативные подходы к установлению атомарного строения QC, в основе которых лежит замощение пространства параллелепипедами или многоугольниками, «декорированными» атомами [11–14]. Кроме того, широко используется метод проецирования периодической структуры с повышенной размерностью на «физическое» пространство [15–18]. В ряде работ [13, 19–21] установлены возможные кристаллографические пространственные группы QC. Однако, по нашему мнению, классификация всевозможных QC структур, которая может быть выполнена на основе уже известных методов, является недостаточно полной.

Интерпретация картин дифракции электронов и рентгеновских лучей от QC также является неоднозначной, что обусловлено неопределенностью индексации дифракционных рефлексов. Такая неопределенность является следствием инфляционно-дефляционной симметрии, присущей QC, в результате чего соотношения между абсолютными значениями векторов обратной решетки выражаются через так называемый масштабный фактор [20–23]. При электронографических исследованиях QC довольно часто базисным векторам ставятся в соответствие самые близкие к следу первичного пучка рефлексы, которые, как правило, имеют очень малую интенсивность. Вследствие этого определяемые в дифракционном эксперименте ми-

* E-mail: asmolyakov@mail.ru

** E-mail: vgirzhon@gmail.com

нимимальные (базисные) векторы обратной решетки оказываются зависимыми от условий эксперимента.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАЗИРЕШЕТОК С ДОДЕКАГОНАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ

В работах [24, 25] нами предложен метод моделирования двумерных QC-структур, который заключается в рекуррентном размножении групп узлов, изначально имеющих симметрию моделируемой решетки, по определенному алгоритму. Формально алгоритм записывается одинаково как для октагональных, так и декагональных квазикристаллов и может быть представлен в виде рекуррентных соотношений

$$D_n = D_{n-1} + \{k^{n-2}\mathbf{q}_i\}D_{n-1}. \quad (1)$$

Отметим, что запись типа (1) обозначает прибавление к группе узлов, обозначенной как D_{n-1} , таких же групп, смешенных от начала координат (центра симметрии) на векторы $\pm k^{n-2}\mathbf{q}_i$, где $\pm\mathbf{q}_i$ — базисные векторы, задающие вершины исходного правильного многоугольника. Для октагональных QC в качестве исходной группы узлов выбираются вершины правильного восьмиугольника и параметр (масштабный фактор) $k = \delta_s = 1 + \sqrt{2}$ — число, известное как серебряное сечение. В случае декагональных QC исходная группа узлов — это вершины правильного десятиугольника, а $k = \tau = (1 + \sqrt{5})/2$ — золотое сечение.

Применим алгоритм (1) для построения двумерной обратной додекагональной квазирешетки. В этом случае параметр k (для додекагональной решетки обозначим его через t) выбирался исходя из геометрической интерпретации чисел τ и δ_s , а также из условия принадлежности данных чисел к множеству чисел Пизо [20–23] ($\tau = 2 \cos(2\pi/10)$ и $\delta_s = 1 + 2 \cos(2\pi/8)$) следующим образом:

$$k = t = 1 + 2 \cos \frac{2\pi}{12}, \quad (2)$$

$$k = t_1 = 2 + 2 \cos \frac{2\pi}{12}. \quad (3)$$

На применение параметров (2) и (3) как масштабных факторов для додекагональной решетки уже указывалось ранее [2, 20, 23].

В работах [23, 24] показано, что реализация алгоритма (1) для октагональных и декагональных QC приводила к полному соответствуию полученных квазирешеток с экспериментальными электронограммами. Реализация алгоритма (1) с парамет-

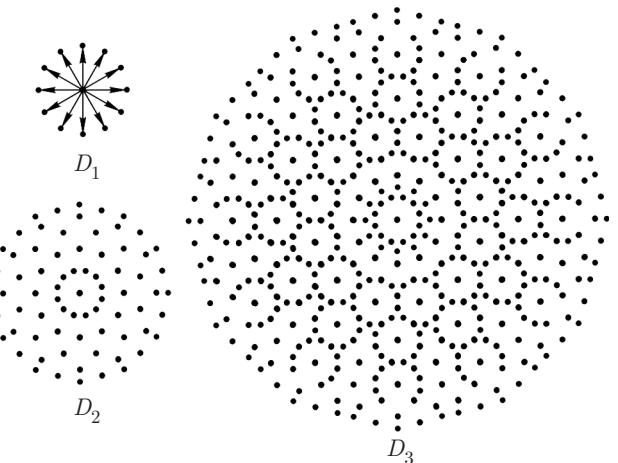


Рис. 1. Группы узлов, получаемые по алгоритму (1) с параметром (2) (D_1 — исходная группа узлов)

ром (2) приведена на рис. 1. Сопоставление полученной картины и взятой из работы [26] электронограммы додекагонального QC (рис. 2) показывает лишь качественное соответствие между ними. Использование параметра (3) для реализации алгоритма (1) приводит к разрывам сплошности решетки. Соответствие модельной квазирешетки с приведенной выше электронограммой наблюдается при изменении алгоритма (1) на предложенный ранее алгоритм [27], записываемый в виде следующих рекуррентных соотношений (рис. 3):

$$\begin{aligned} D_2 &= D_1 + \{\mathbf{q}_i\}D_1, & D_3 &= D_2 + \{2\mathbf{q}_i\}D_2, \\ D_4 &= D_3 + \{t_1\mathbf{q}_i\}D_3, & D_5 &= D_4 + \{2t_1\mathbf{q}_i\}D_4, \\ D_6 &= D_5 + \{t_1^2\mathbf{q}_i\}D_5, & D_7 &= D_6 + \{2t_1^2\mathbf{q}_i\}D_6, \dots \end{aligned} \quad (4)$$

Числа t и t_1 являются решениями квадратных уравнений соответственно $x^2 = 2x + 2$ и $x^2 = 4x - 1$. Отсюда следует, что любая степень t и t_1 может быть выражена через сами эти числа (например, $t^3 = 6t + 4$, $t^4 = 16t + 12, \dots$, $t_1^3 = 15t - 4$, $t_1^4 = 56t - 15, \dots$). Учтем, что между базисными векторами \mathbf{q}_i додекагональной решетки существуют соотношения типа $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = t\mathbf{q}_2$ и $\mathbf{q}_1 + 2\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = t_1\mathbf{q}_2$. Тогда легко видеть, что положение всех узлов, появляющихся при реализации приведенных выше алгоритмов, может выражаться через линейную комбинацию векторов \mathbf{q}_i . Следовательно, каждый узел модельных квазирешеток (см. рис. 1, 3) может быть проиндексирован.

Метод проецирования периодических решеток с высокой размерностью на пространство с меньшей размерностью является одним из наиболее распространенных методов моделирования и анализа ква-

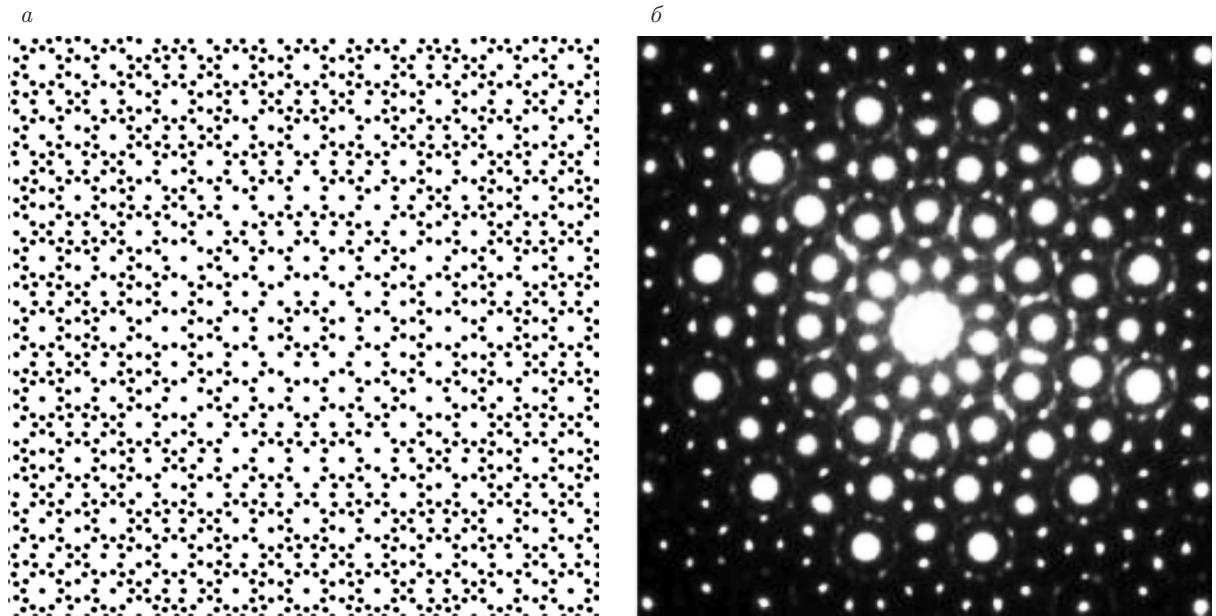


Рис. 2. Сравнение фрагмента группы D_5 (а) (алгоритм (1) с параметром (2)) с электроннограммой от додекагонального квазикристалла (б) системы Та–Tl, полученной в работе [26]

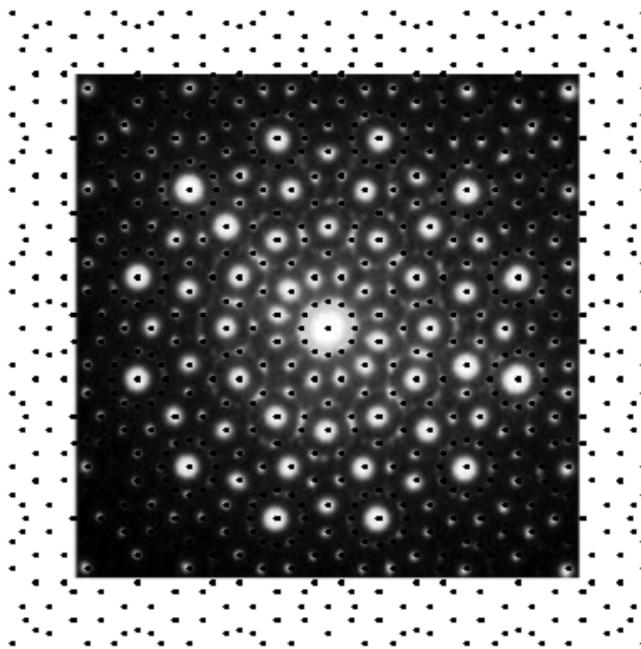


Рис. 3. Наложение группы D_5 (алгоритм (4)) на электроннограмму от квазикристалла системы Та–Tl, полученную в работе [26]

зипериодических решеток [20, 21]. Сопоставим предложенный метод рекуррентного размножения групп узлов с методом проецирования. Поскольку в плоской додекагональной решетке используются шесть

базисных векторов, логично использовать шестимерную гиперкубическую решетку. Потребуем, чтобы первые две компоненты координат базисных шестимерных векторов выражали координаты базиса двумерной додекагональной квазирешетки. Тогда можно использовать единичные ортогональные векторы, предложенные в работе [20],

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(1, 0, 1, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \\ \mathbf{u}_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \\ \mathbf{u}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \\ \mathbf{u}_4 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(0, -1, 0, -1, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \\ \mathbf{u}_5 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \\ \mathbf{u}_6 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \end{aligned} \quad (5)$$

или несколько иной набор аналогичных векторов, предложенный нами,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 0, 1, 0, 1, 0), \\
 \mathbf{u}_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0, 1\right), \\
 \mathbf{u}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, -1, 0\right), \\
 \mathbf{u}_4 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(0, 1, 0, -1, 0, -1), \\
 \mathbf{u}_5 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 1, 0\right), \\
 \mathbf{u}_6 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0, 1\right).
 \end{aligned} \tag{6}$$

Каждый из векторов (5) или (6) имеет две компоненты, соответствующие двумерному «физическому» пространству, и четыре компоненты, соответствующие «перпендикулярному» пространству. Поэтому эти векторы можно записать в виде $\mathbf{u}_i = (\mathbf{q}_i^{\parallel}; \mathbf{q}_i^{\perp})$. Для того чтобы каждому узлу в физическом пространстве однозначно соответствовал вектор в перпендикулярном пространстве, необходимо, чтобы для линейной комбинации векторов \mathbf{q}_i^{\parallel} , дающей нулевой вектор (например, $\mathbf{q}_1^{\parallel} - \mathbf{q}_3^{\parallel} + \mathbf{q}_5^{\parallel} = 0$, $\mathbf{q}_2^{\parallel} - \mathbf{q}_4^{\parallel} + \mathbf{q}_6^{\parallel} = 0$ для приведенных ниже векторов (7)), соответствующая комбинация \mathbf{q}_i^{\perp} также равнялась нулю. Оказалось, что векторы (5) и (6) не отвечают этому требованию. Тогда в качестве базисных векторов можно выбрать векторы, получаемые из системы (6), следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}_1^* &= \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_6 = (1, 0, -1, 0, 0, 0), \\
 \mathbf{u}_2^* &= \mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_3 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\right), \\
 \mathbf{u}_3^* &= \mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_4 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0\right), \\
 \mathbf{u}_4^* &= \mathbf{u}_3 + \mathbf{u}_5 = (0, 1, 0, 1, 0, 0), \\
 \mathbf{u}_5^* &= \mathbf{u}_4 + \mathbf{u}_6 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0\right), \\
 \mathbf{u}_6^* &= \mathbf{u}_5 - \mathbf{u}_1 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\right).
 \end{aligned} \tag{7}$$

Отбросив в выражениях (7) две последние координаты, приходим к четырехмерному неортогональному базису решетки, который является аналогичным базису, предложенному в работе [20]. Можно убедиться, что взаимные углы между тройками четырехмерных векторов $(\mathbf{u}_1^*, \mathbf{u}_3^*, \mathbf{u}_5^*)$ и $(\mathbf{u}_2^*, \mathbf{u}_4^*, \mathbf{u}_6^*)$ составляют 60° и 120° . В то же время каждый вектор

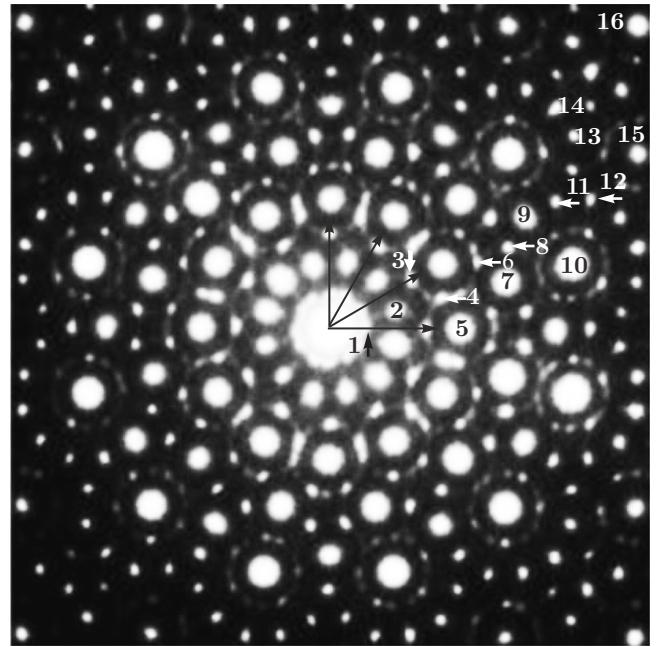


Рис. 4. Рефлексы экспериментальной электронограммы [26] и соответствующие базисные векторы обратной решетки

из одной тройки ортогонален векторам из другого набора. Отсюда следует, что данную четырехмерную решетку можно рассматривать как комбинацию двух двумерных гексагональных подрешеток, причем пространства этих подрешеток взаимно ортогональны. Согласно работе [28], такая решетка относится к ди-изогексагональной ортогональной сингонии. В данном базисе линейно независимыми являются только четыре вектора. Поэтому два вектора, например \mathbf{u}_5^* и \mathbf{u}_6^* можно отбросить, записав базис четырехмерной решетки в виде

$$\begin{aligned}
 \mathbf{q}_1^* &= (1, 0, -1, 0), & \mathbf{q}_2^* &= \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right), \\
 \mathbf{q}_3^* &= \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), & \mathbf{q}_4^* &= (0, 1, 0, 1).
 \end{aligned} \tag{8}$$

Очевидно, что если базисной группе узлов в предлагаемой модели поставить в соответствие векторы (8), то генерируемые по алгоритму (4) узлы будут проекциями определенных узлов указанной четырехмерной решетки.

В работах [20, 21, 29, 30] указывается, что применительно к обратной решетке QC интенсивность дифракционных рефлексов зависит от расстояния проецируемого узла периодической решетки с повышенной размерностью до физического простран-

Таблица 1. Индексы и характеристики рефлексов, отмеченных на рис. 4 (P — количество самоналожений узлов при построении группы)

№	$(n_1 n_2 n_3 n_4)$	N^*, M^*	N, M	N_1, M_1	$ \mathbf{Q}^\parallel ^2$	$ \mathbf{Q}^\perp ^2$	P
1	(2 -2 0 1)	7, -4	11, -4	15, -4	0.072	13.928	37
2	(1 0 -1 1)	2, -1	3, -1	4, -1	0.268	3.732	182
3	(1 -1 1 0)	4, -2	6, -2	8, -2	0.536	7.464	118
4	(-1 1 2 -2)	6, -3	9, -3	12, -3	0.804	11.196	76
5	(1 0 0 0)	1, 0	1, 0	1, 0	1	1	245
6	(2 -1 0 1)	5, -2	7, -2	9, -2	1.536	8.464	144
7	(0 1 1 -1)	2, 0	2, 0	2, 0	2	2	266
8	(1 1 -1 1)	4, -1	5, -1	6, -1	2.268	5.732	194
9	(1 0 1 0)	3, 0	3, 0	3, 0	3	3	350
10	(1 1 0 0)	2, 1	1, 1	0, 1	3.732	0.268	326
11	(0 2 0 0)	4, 0	4, 0	4, 0	4	4	335
12	(2 0 0 1)	5, 0	5, 0	5, 0	5	5	328
13	(1 1 0 1)	4, 1	3, 1	2, 1	5.732	2.268	346
14	(-1 2 2 -1)	6, 0	6, 0	6, 0	6	6	292
15	(1 1 1 0)	4, 2	3, 2	1, 2	7.464	0.536	387
16	(1 1 1 1)	6, 3	3, 3	0, 3	11.196	0.804	440

ства, т. е. от величины вектора \mathbf{q}^\perp , соответствующего каждому рефлексу (чем меньше \mathbf{q}^\perp , тем больше интенсивность). В то же время в работах [24, 25] отмечается корреляция между интенсивностью рефлексов и количеством самоналожений узлов, которое происходит в процессе их рекуррентного размножения. Нами установлено, что при размножении узлов додекагональной решетки по алгоритму (4) также наблюдается корреляция между числом самоналожений узлов и интенсивностью соответствующих дифракционных рефлексов (рис. 4, табл. 1).

Сопоставим интенсивности рефлексов с расстоянием узлов четырехмерной решетки до физического пространства. Каждый узел этой решетки может быть представлен виде $\mathbf{Q} = (\mathbf{Q}^\parallel; \mathbf{Q}^\perp)$, где

$$\mathbf{Q}^\parallel = \sum_1^4 n_i \mathbf{q}_i^\parallel, \quad \mathbf{Q}^\perp = \sum_1^4 n_i \mathbf{q}_i^\perp. \quad (9)$$

Квадраты модулей векторов \mathbf{Q}^\parallel и \mathbf{Q}^\perp можно записать в виде

$$|\mathbf{Q}^\parallel|^2 = \left(\sum_1^4 n_i^2 + n_1 n_3 + n_2 n_4 \right) + \\ + (n_1 n_2 + n_2 n_3 + n_3 n_4) \sqrt{3} = N^* + M^* \sqrt{3}, \quad (10)$$

$$|\mathbf{Q}^\perp|^2 = \left(\sum_1^4 n_i^2 + n_1 n_3 + n_2 n_4 \right) - \\ - (n_1 n_2 + n_2 n_3 + n_3 n_4) \sqrt{3} = N^* - M^* \sqrt{3}. \quad (11)$$

Расчет величины $|\mathbf{Q}^\perp|^2$ с использованием соотношения (11) для рефлексов на рис. 4 показал, что и в данном случае наблюдается связь между $|\mathbf{Q}^\perp|^2$, количеством наложений узлов при моделировании и интенсивностью рефлексов (см. табл. 1).

В работе [29] Кан предложил индексировать дифракционную картину от икосаэдрических QC с помощью двух целых чисел (N, M) , подобных числам (N^*, M^*) из уравнений (11) и (12). Величины $|\mathbf{Q}^\parallel|^2$ и $|\mathbf{Q}^\perp|^2$ для таких QC определяются по формулам [28]

$$|\mathbf{Q}^\parallel|^2 = N + M\tau, \quad |\mathbf{Q}^\perp|^2 = \tau(N\tau - M). \quad (12)$$

Аналогичные результаты были получены для декагональной решетки [24],

$$|\mathbf{Q}^{\parallel}|^2 = N + M\tau, \quad |\mathbf{Q}^{\perp}|^2 = \frac{1}{\tau^3} (N\tau - M), \quad (13)$$

и октагональной решетки [25],

$$|\mathbf{Q}^{\parallel}|^2 = N + M\delta_s, \quad |\mathbf{Q}^{\perp}|^2 = \frac{1}{\delta_s} (N\delta_s - M). \quad (14)$$

В случае додекагональной решетки, выражение для $|\mathbf{Q}^{\parallel}|^2$ с использованием как параметра t , так и параметра t_1 можно свести к похожим по виду на уравнения (12)–(14) соотношениям

$$|\mathbf{Q}^{\parallel}|^2 = N + Mt, \quad |\mathbf{Q}^{\parallel}|^2 = N_1 + M_1 t_1, \quad (15)$$

где $N = N^* - M^*$, $M = M^*$, $N_1 = N^* - 2M^*$, $M_1 = M^*$. При этом величина $|\mathbf{Q}^{\perp}|^2$ (в отличие от икосаэдрической, декагональной и октагональной квазирешеток) к выражению типа $|\mathbf{Q}^{\perp}|^2 \sim Nk - M$ не сводится:

$$|\mathbf{Q}^{\perp}|^2 = N - M \frac{2}{t}, \quad |\mathbf{Q}^{\perp}|^2 = N_1 + M_1 \frac{1}{t_1}. \quad (16)$$

В работе [2] базисные векторы обратной решетки приписываются малоинтенсивным рефлексам, которые располагаются ближе всех к следу первичного пучка. Для этого случая индексы рефлексов и величины соответствующих векторов пересчитываются по формулам

$$N_{Ch} = 7N^* + 12M^*, \quad M_{Ch} = 4N^* + 7M^*,$$

$$\begin{aligned} |\mathbf{Q}_{Ch}^{\parallel}|^2 &= \frac{|\mathbf{Q}^{\parallel}|^2}{7 - 4\sqrt{3}} = |\mathbf{Q}^{\parallel}|^2 \left(7 + 4\sqrt{3}\right), \\ |\mathbf{Q}_{Ch}^{\perp}|^2 &= \frac{|\mathbf{Q}^{\perp}|^2}{7 + 4\sqrt{3}} = |\mathbf{Q}^{\perp}|^2 \left(7 - 4\sqrt{3}\right). \end{aligned} \quad (17)$$

Результаты расчетов характеристик рефлексов (см. рис. 4), полученные по формулам (17), приведены в табл. 2.

Следует отметить, что при такой индексации для интенсивных рефлексов округление величины $M_{Ch}\sqrt{3}$ до большего целого числа дает значение N_{Ch} . Величины $|\mathbf{Q}_{Ch}^{\parallel}|^2$ и $|\mathbf{Q}_{Ch}^{\perp}|^2$ также определяются лишь числом M_{Ch} , т. е.

$$\begin{aligned} N_{Ch} &= \left[M_{Ch}\sqrt{3} + 1\right], \\ |\mathbf{Q}_{Ch}^{\parallel}|^2 &= \left[M_{Ch}\sqrt{3} + 1\right] + M_{Ch}\sqrt{3}, \\ |\mathbf{Q}_{Ch}^{\perp}|^2 &= \left[M_{Ch}\sqrt{3} + 1\right] - M_{Ch}\sqrt{3}. \end{aligned} \quad (18)$$

Таблица 2. Индексы узлов (рис. 4) с базисными векторами, которые соответствуют рефлексам, расположенным около центрального пятна

№	$(n_1 n_2 n_3 n_4)_{Ch}$	N_{Ch}, M_{Ch}	$ \mathbf{Q}_{Ch}^{\parallel} ^2$	$ \mathbf{Q}_{Ch}^{\perp} ^2$
1	(1 0 0 0)	1, 0	1	1
2	(1 1 0 0)	2, 1	3.732	0.268
3	(1 1 1 0)	4, 2	7.464	0.536
4	(1 2 1 -1)	6, 3	11.196	0.804
5	(2 2 0 -1)	7, 4	13.928	0.072
6	(2 2 1 0)	11, 6	21.392	0.608
7	(2 3 1 -1)	14, 8	27.856	0.144
8	(2 3 1 0)	16, 9	31.588	0.412
9	(2 3 2 0)	21, 12	41.785	0.215
10	(3 4 1 -1)	26, 15	51.981	0.019
11	(2 4 2 0)	28, 16	55.713	0.287
12	(3 4 2 0)	35, 20	69.641	0.359
13	(2 4 3 1)	40, 23	79.837	0.163
14	(1 4 4 1)	42, 24	83.569	0.431
15	(3 5 3 0)	52, 30	103.96	0.038
16	(2 5 5 2)	78, 45	155.94	0.058

Согласно работам [31, 32], малоинтенсивные рефлексы вблизи центрального пятна на электронограммах являются результатом многократной дифракции, характерной для QC. В то же время многие авторы принимают эти рефлексы за соответствующие базисным векторам [2, 26]. В нашей модели базисные векторы обратной решетки соответствуют рефлексам типа 5 (см. рис. 4), что согласуется с результатами работ [31, 32]. Таким образом, предложенная модель рекуррентного размножения групп узлов учитывает явление многократной дифракции и в то же время корректно отображает базисные векторы на дифракционной картине.

Существование корреляции между количеством самоналожений узлов и интенсивностями дифракционных рефлексов говорит о том, что процедура рекуррентного построения групп узлов является некоторым аналогом процессов многократной дифракции.

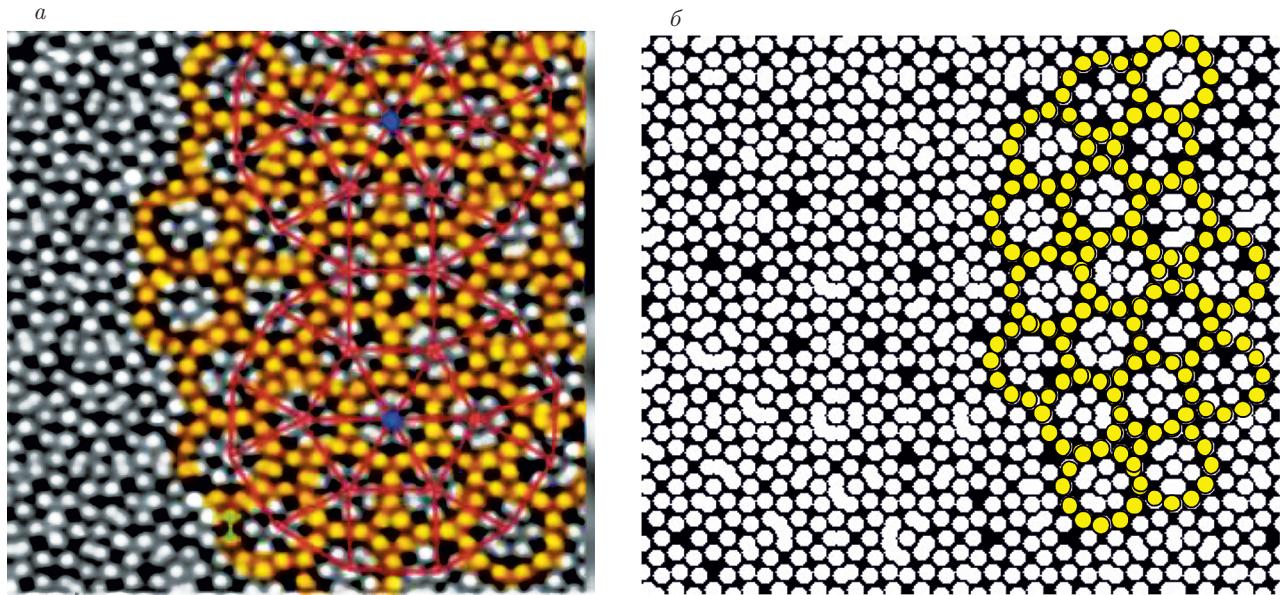


Рис. 5. (В цвете онлайн) Сопоставление атомарной структуры тонкого слоя BaTiO₃ на платиновой подложке [33] (а) и фрагмента группы D₅, полученной по алгоритму (23), (б)

Для перехода от обратного пространства к прямому векторы (8) перепишем в виде

$$\mathbf{a}_i^* = \frac{a_{4D}^*}{\sqrt{2}} \mathbf{q}_i^*,$$

где a_{4D}^* — период четырехмерной обратной решетки. Из условия $\mathbf{a}_i^* \cdot \mathbf{a}_j = \delta_{ij}$ определим базисные векторы прямой решетки \mathbf{a}_j в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a_{4D}}{\sqrt{2}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a_{4D}}{\sqrt{2}} (1, 0, 1, 0), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a_{4D}}{\sqrt{2}} (0, 1, 0, -1), \\ \mathbf{a}_4 &= \frac{a_{4D}}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

где период решетки $a_{4D} = 2/\sqrt{3}a_{4D}^*$. Обозначая межплоскостное расстояние, соответствующее базисному вектору обратной решетки, через d_q и учитывая, что $a_{4D}^*/\sqrt{2} = 1/d_q$, находим выражения для периода четырехмерной решетки и для квазипараметра a двумерной квазирешетки:

$$a_{4D} = d_q \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad a = \frac{a_{4D}}{\sqrt{2}} = \frac{d_q}{\sqrt{3}}. \quad (20)$$

Тогда расчет межплоскостных расстояний может быть выполнен таким образом:

$$d_{(N^*, M^*)} = \frac{a\sqrt{3}}{\sqrt{N^* + M^*\sqrt{3}}}. \quad (21)$$

Если же базисным векторам приписаны рефлексы, расположенные около следа первичного пучка, то выражение остается таким же, как и (21):

$$d_{(N_{Ch}, M_{Ch})} = \frac{a_{Ch}\sqrt{3}}{\sqrt{N_{Ch} + M_{Ch}\sqrt{3}}}, \quad (22)$$

причем $a_{Ch} = a\sqrt{7 + 4\sqrt{3}} = at_1$.

Индексы (N^*, M^*) с физической точки зрения являются более корректными, поскольку связаны с фундаментальными векторами обратной квазикристаллической решетки. Тем не менее более удобными являются индексы (N_{Ch}, M_{Ch}), так как знание лишь одного индекса из этой пары позволяет достаточно просто определить второй индекс и оценить интенсивность соответствующего рефлекса (см. формулы (18)).

Таким образом, додекагональная система «выпадает» из общей закономерной связи $|\mathbf{Q}^\perp|^2 \sim Nk - M$, которая наблюдается для других существующих типов квазикристаллов, однако возможность индексации дифракционных рефлексов с помощью целых чисел сохраняется. Однако с учетом периодичности додекагональных QC вдоль оси симметрии двенадцатого порядка все дифракционные максимумы на порошковых рентгенограммах можно проиндексировать с помощью трех индексов, как и для октаэональных и декагональных QC.

Наряду с анализом дифракционной картины от квазикристаллических материалов довольно слож-

ной задачей является описание и классификация реальных квазикристаллических структур. В нашей предыдущей работе [25] предложен способ описания разновидностей октагональных квазирешеток. Возможность такого описания обусловлена тем, что в исходном алгоритме (1) можно изменять коэффициенты при векторах \mathbf{q}_i . Так, изменение даже одного коэффициента будет приводить к изменению квазирешетки без изменения ее симметрии. Например, в работе [33] получено изображение атомарной структуры тонкого слоя BaTiO₃ на платиновой подложке. Практически такая же геометрия расположения узлов (рис. 5) получена нами при использовании алгоритма

$$\begin{aligned} D_2 &= D_1 + \{2t^{-1}\mathbf{q}_i\}D_1, & D_3 &= D_2 + \{2\mathbf{q}_i\}D_2, \\ D_4 &= D_3 + \{t\mathbf{q}_i\}D_3, & D_5 &= D_4 + \{2t\mathbf{q}_i\}D_4. \end{aligned} \quad (23)$$

Используя ранее предложенное обозначение классов квазикристаллических структур [25], структуру, приведенную на рис. 5, можно обозначить как $D(2t^{-1}, 2, t, 2t)$.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлено, что метод рекуррентного размножения исходной группы узлов, являющихся вершинами правильного двенадцатигольника, может применяться для моделирования квазирешеток с осью симметрии двенадцатого порядка. Применение моделирования для анализа картины дифракции от додекагональных QC требует изменения алгоритма, используемого для декагональных и октагональных QC. Как и для других типов QC, периодичных вдоль одного направления, установлено, что порошковые дифрактограммы от веществ с додекагональной структурой могут быть проиндексированы с помощью трех чисел. Установлено соответствие между методом проецирования периодических решеток и методом рекуррентного размножения групп узлов. Преимуществом последнего метода являются возможность оперировать координатами лишь двухмерного пространства и корректность определения рефлексов, которые соответствуют базисным векторам обратного пространства.

Предложенный метод моделирования может использоваться для анализа атомарной структуры додекагональных QC. Варьирование числовых параметров в алгоритмах моделирования открывает возможность для определенного описания разновидностей квазикристаллических структур. Полученные нами предварительные результаты указывают на возможность использования этого метода для анализа структуры также икосаэдрических QC.

С учетом результатов работ [24, 25] установлено, что метод рекуррентного размножения групп узлов применим для анализа всех известных на данный момент квазипериодических структур, имеющих периодичность вдоль одной из запрещенных классической кристаллографией осей симметрии.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Steurer, Z. Kristallogr. **219**, 391 (2004).
2. S. Iwami and T. Ishimasa, Phil. Mag. Lett. **95**, 229 (2015).
3. H. Chen, D. X. Li, and K. H. Kuo, Phys. Rev. Lett. **60**, 1645 (1988).
4. T. Ishimasa, H.-U. Nissen, and Y. Fukano, Phys. Rev. Lett. **55**, 511 (1985).
5. K. Yoshida, T. Yamada, and Y. Taniguchi, Acta Cryst. B **45**, 40 (1989).
6. M. Uchida and S. Horiuchi, J. Appl. Cryst. **31**, 634 (1998).
7. H. Iga, M. Mihalkovic, and T. Ishimasa, Phil. Mag. **91**, 2624 (2011).
8. X. Zeng, G. Ungar, Y. Liu et al., Nature **428**, 157 (2004).
9. S. Fischer, A. Exner, K. Zielske et al., Proc. Nat. Acad. Sci. **108**, 1810 (2011).
10. K. Hayashida, T. Dotera, A. Takano, and Yu. Matsushita, Phys. Rev. Lett. **98**, 195502 (2007).
11. M. Oxborrow and C. L. Henley, Phys. Rev. B **48**, 6966 (1993).
12. S. E. Burkov, Phys. Rev. B **47**, 12325 (1993).
13. A. Yamamoto, Acta Cryst. A **52**, 509 (1996).
14. T. Ishimasa, Isr. J. Chem. **51**, 1216 (2011).
15. A. Cervellino, T. Haibach, and W. Steurer, Acta Cryst. B **58**, 8 (2001).
16. S. Weber and A. Yamamoto, Phil. Mag. A **76**, 85 (1997).
17. A. Yamamoto, H. Takakura, and A. P. Tsai, Phys. Rev. B **68**, 094201 (2003).
18. A. P. Smith, J. Non-Cryst. Sol. **153/154**, 258 (1993).
19. B. T. Janssen, Acta Cryst. A **42**, 261 (1986).
20. W. Steurer and S. Deloudi, *Crystallography of Quasicrystals: Concepts, Methods, and Structures*, Springer-Verlag, Berlin (2009), p. 384.

- 21.** C. Janot, *Quasicrystals: A Primer*, Oxford Univ. Press (1994), p. 409.
- 22.** A. E. Madison, Struct. Chem. **26**, 923 (2015).
- 23.** Joshua E. S. Socolar, Phys. Rev. B **39**, 10519 (1989).
- 24.** V. V. Girzhon, V. M. Kovalyova, O. V. Smolyakov, and M. I. Zakharchenko, J. Non-Cryst. Sol. **358**, 137 (2012).
- 25.** V. V. Girzhon, O. V. Smolyakov, and M. I. Zakharenko, ЖЭТФ **146**, 973 (2014).
- 26.** M. Conrad, F. Krumeich, and B. Harbrecht, Angew. Chem. Int. Ed. **37**, 384 (1998).
- 27.** В. В. Гиржон, О. В. Смоляков, И. В. Гайворонський, Патент України на полезну модель № 80699, МПК: G09B 23/06, G09B 23/26 опубл. 10.06.2013, Бюлл. № 11.
- 28.** B. Souvignier, Acta Cryst. A **59**, 210 (2003).
- 29.** J. W. Cahn, D. Shechtman, and D. Gratias, J. Mater. Res. **1**, 13 (1986).
- 30.** Ю. Х. Векилов, М. А. Черников, УФН **180**, 561 (2010).
- 31.** P. A. Bancel, P. A. Heiney, P. W. Stephens et al., Phys. Rev. Lett. **54**, 2422 (1985).
- 32.** F. Gähler, in *Conf. Proceedings “Quasicrystalline Materials”*, ed. by C. Janot and J. M. Dubois, World Sci., Singapore (1988), p. 272.
- 33.** S. Förster, K. Meinel, R. Hammer et al., Nature **502**, 215 (2013).