

01 Теория кристаллизации Ландау и самосборка октагональных квазикристаллов

© О.В. Коневцова¹, С.Б. Рошаль¹, В.Л. Лорман²

¹ Южный федеральный университет,
Ростов-на-Дону, Россия

² Laboratoire Charles Coulomb, CNRS — Université Montpellier 2,
Montpellier, France

E-mail: rochal_s@yahoo.fr

(Поступила в Редакцию 9 января 2013 г.)

Предложена теория кристаллизации квазикристаллических структур, не использующая для описания квазикристаллического порядка концепций многомерной кристаллографии. На примере структуры октагонального квазикристалла MnSiAl показано, что координаты узлов соответствующей квазикристаллической решетки (КР) можно рассчитать путем условной минимизации свободной энергии Ландау. Отказ от безусловной минимизации свободной энергии обосновывается особенностями локального атомного порядка в рассматриваемой структуре. Предложенная теория придает новый физический смысл традиционным понятиям многомерной кристаллографии и может быть также применена для объяснения образования квазикристаллических структур с другими КР.

1. Введение

В конце 1984 г. был обнаружен металлический сплав Al_6Mn с исключительными свойствами [1]. Его дифракционная картина подобно дифрактограмме обычного кристалла состояла из ярких рефлексов, регулярное расположение которых характеризовалось „икосаэдрической“ симметрией, строго запрещенной в кристалле из геометрических соображений. Это удивительное открытие вызвало огромный интерес в физике твердого тела и в кристаллографии. Определение атомной структуры веществ, названных квазикристаллами (КК), стало нетривиальной задачей, так как из-за их апериодичности стандартные кристаллографические методы не могли использоваться напрямую. Почти сразу возникло два подхода к моделированию квазикристаллических структур, основанных на двух различных теоретических концепциях строения КК.

Первой была концепция высокомерной кристаллографии, введенная де Вольффом для несоразмерно модулированных структур [2] и развитая Янссеном для квазикристаллического случая [3]. Данный подход основывался на том, что брегговская дифракционная картина вещества в основном определяется Фурье-спектром его электронной плотности. Симметрия КК в соответствии с этой теорией могла быть задана пространственной группой в N -мерном пространстве, а его структура — трехмерным сечением периодической структуры в этом же пространстве. Принципиальное отличие КК от модулированных структур состояло в том, что в КК невозможно выделить единственную 3D-периодическую подсистему сильных брегговских рефлексов, а это означает, что в них не существует средней кристаллической структуры с трехмерной периодичностью, небольшими искажениями которой можно было бы образовать КК.

Другой подход моделирования атомной структуры КК основывался на декорировании КР или укладок [4,5] атомами. Впервые пентагональная КР была предложена Пенроузом [6] за 10 лет до открытия КК. Данная КР и многие другие квазикристаллические укладки состоят всего из двух типов базисных ромбов или ромбоздров, которые возможно интерпретировать [4,5] как элементарные ячейки (тайлы), содержащие атомы. В данном подходе предполагалось, что структура всех тайлов одного типа одинакова, подобно тому, как в кристалле одинаково устройство всех элементарных ячеек.

В первые несколько лет после открытия КК идеи декорирования квазикристаллических укладок и идеи многомерной кристаллографии никогда не перемежались и часто рассматривались как несовместимые. Однако впоследствии подходы взаимно интегрировались. Впервые компромиссная модель КК, названная в последствии кластерной и совместимая как с идеями сечения многомерного пространства, так и с идеями декорирования КР, была предложена Бурковым [7–9] для объяснения структуры декагонального КК $Al_6Cu_{20}Co_{15}$ [10]. Согласно подходу Буркова структура КК формируется только из одного строительного блока — симметричного кластера, размещаемого в узлах КР. В отличие от элементарных ячеек кристалла, кластеры в модели Буркова перекрываются, но число разных вариантов перекрытия минимально. Так, для структуры $Al_6Cu_{20}Co_{15}$ оказалось необходимо всего два типа перекрытий. Аналогичная кластерная модель была предложена и для октагональной КР сплава MnSiAl [11], рассматриваемого в данной работе. Однако кластеры в модели [11] в отличие от модели Буркова не являются симметричными и имеют гораздо более сложную структуру, чем структуры квадратной и ромбической ячеек, из которых они состоят, поэтому описание данной квазикристаллической струк-

туры вне кластерного подхода представляется нам более разумным.

Целью настоящей работы является получение КР, соответствующей структуре октагонального КК MnSiAl в рамках теории кристаллизации Ландау [12,13]. При этом понятия многомерной кристаллографии явно не используются. В то же время квазикристаллическая структура, получаемая путем минимизации свободной энергии, оказывается идентичной КР, порождаемой обычным для многомерной кристаллографии методом проекционного окна, что обеспечивает новое физическое обоснование для применения методов многомерной кристаллографии.

2. Построение квазикристаллических структур в рамках теории кристаллизации Ландау

Как известно, свободная энергия в теории Ландау разлагается в степенной ряд амплитуд ρ_k критических волн плотности [12,13]. В отличие от первоначального варианта теории, мы не считаем амплитуды ρ_k малыми и явно учитываем зависимость величин ρ_k от координат узлов КР, что и позволяет применить теорию Ландау для определения положений узлов КР. Кроме того, при минимизации свободной энергии мы накладываем простейшие ограничения на возможные расстояния между соседними узлами, связанные с тем фактом, что КР, пригодная для построения структуры MnSiAl должна состоять исключительно из двух типов не перекрывающихся элементарных ячеек — квадрата и 45° -ромба [11].

Согласно теории Ландау [12,13] вблизи точки кристаллизации распределение плотности структурных единиц может быть записано в следующем виде:

$$\rho(\mathbf{R}) = \rho_0 + \delta\rho(\mathbf{R}), \quad (1)$$

где ρ_0 — плотность до кристаллизации, а $\delta\rho(\mathbf{R})$ соответствует критической добавке к функции плотности, вызванной образованием квазикристаллического порядка. Функция $\delta\rho(\mathbf{R})$ преобразуется по одному неприводимому представлению группы симметрии изотропного состояния, и для октагональной низкосимметричной фазы разложение этой функции по плоским волнам принимает вид

$$\delta\rho(\mathbf{R}) = \sum_{k=0}^7 \rho_k \exp(i\mathbf{b}_k \mathbf{R}), \quad (2)$$

где \mathbf{R} — радиус-вектор, $\mathbf{b}_k = b^0 \langle \cos(k\pi/4), \sin(k\pi/4) \rangle$. Так как $\rho_k = |\rho_k| \exp(i\phi_k^0)$ и отклонение плотности $\delta\rho(\mathbf{R})$ действительны, то $\rho_0 = \rho_4^*$, $\rho_1 = \rho_5^*$, $\rho_2 = \rho_6^*$ и $\rho_3 = \rho_7^*$, где звездочка обозначает комплексное сопряжение. Соответственно число независимых фаз ϕ_k^0 равно 4.

Простейшее разложение свободной энергии Ландау вплоть до члена шестого порядка в данном случае

может быть представлено как инвариантная функция амплитуд ρ_k

$$F = F_1 I_1 + F_2 I_2 + F_3 I_1^2 + F_4 I_1^3 + F_5 I_1^2 I_2, \quad (3)$$

где $F_i = F_i(P, T)$ — феноменологический коэффициент, зависящий от температуры T и давления P ; $I_1 = \rho_0 \rho_4 + \rho_1 \rho_5 + \rho_2 \rho_6 + \rho_3 \rho_7$, $I_2 = \rho_0 \rho_1 \rho_4 \rho_5 + \rho_2 \rho_3 \rho_6 \rho_7 + \rho_2 \rho_3 \rho_7 \rho_8$.

Инварианты I_1 и I_2 не зависят от фаз ϕ_k^0 , как и любые другие члены старшего порядка, которые можно включить в энергию (3). Поэтому в любом случае свободная энергия октагонального состояния не будет зависеть от 4 фаз ϕ_k^0 . Две из четырех линейных ортогональных комбинаций этих фаз соответствуют произволу в выборе начала координат, а две другие — фазонным степеням свободы данного КК [14].

Классические теории кристаллизации и фазовых переходов Ландау не рассматривали явной зависимости параметра порядка от атомных координат. Впервые такая зависимость была учтена в работе [15] для построения теории реконструктивных фазовых переходов между кристаллическими фазами, не связанными соотношением группа–подгруппа. Использование данной идеи привело к решению множества сложных кристаллофизических задач [16]. Для вычисления координат узлов квазикристаллической укладки \mathbf{r}_n мы будем следовать тому же самому принципу и подставим амплитуды $\rho_k(\mathbf{r}_n) = \frac{1}{S} \sum_{n=1}^M \exp(-i\mathbf{b}_k \mathbf{r}_n)$ в энергию (3). Здесь M — число узлов, а S — площадь структуры. После этого, минимизируя энергию (3), можно найти координаты узлов квазирешетки \mathbf{r}_n . Однако решение данной задачи нетривиально и выходит за рамки данной работы. Поэтому мы ограничимся тем, что заменим разложение (3) на эффективную свободную энергию октагональной фазы. Ее симметрия приводит к равенству всех модулей $|\rho_k|$. Используя параметризацию фаз через голдстоуновские переменные \mathbf{u} и \mathbf{v} , функцию $\delta\rho(\mathbf{R})$ можно переписать в следующем действительном виде:

$$\delta\rho(\mathbf{R}) = 2\rho_\Delta \sum_{n=0}^3 \cos(\mathbf{b}_n \mathbf{R} + \phi_n^0), \quad (4)$$

где $\phi_n^0 = \mathbf{b}_n \mathbf{u} + \mathbf{b}_n^\perp \mathbf{v}$, $\rho_\Delta = |\rho_k|$, $\mathbf{b}_n = b^0 \langle \cos(n\pi/4), \sin(n\pi/4) \rangle$, $\mathbf{b}_n^\perp = b^0 \langle \cos(n3\pi/4), \sin(n3\pi/4) \rangle$. Соответственно свободная энергия (3) упрощается до вида

$$F_q = A_1 \rho_\Delta^2 + A_2 \rho_\Delta^4 + A_3 \rho_\Delta^6, \quad (5)$$

где коэффициенты A_i линейно зависят от коэффициентов F_i свободной энергии (3). Коэффициент A_3 принимает только положительные значения, что связано непосредственно с существованием у энергии (5) глобального минимума.

Эффективный параметр порядка ρ_Δ должен быть полностью симметричен в низкосимметричной фазе [17], и

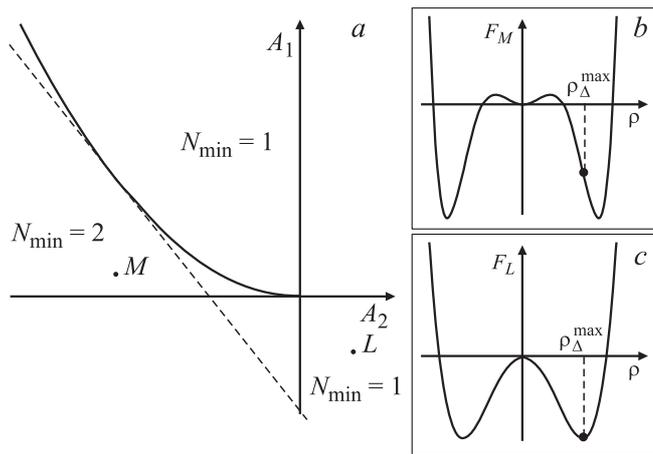


Рис. 1. Фазовая диаграмма, соответствующая эффективной свободной энергии (5). *a*) Области устойчивости решений. Жирные линии разделяют диаграмму на области с различным числом неэквивалентных минимумов N_{\min} свободной энергии $F_q(\rho_\Delta)$. Минимум $\rho_\Delta = 0$ (жидкое состояние) существует только в области $A_1 > 0$, в то время как предельная фаза $\rho_\Delta = \rho_\Delta^{\max}$ существует лишь только слева от штриховой линии. В этой широкой области минимизация свободной энергии эквивалентна максимизации эффективного параметра порядка. Вставки *b*) и *c*) показывают вид функции (5) в областях, содержащих точки *M* и *L* и соответственно расположенных слева и справа от штриховой линии.

поэтому может быть записан как среднее амплитуд ρ_k

$$\rho_\Delta = \frac{1}{4S} \sum_{n=0}^3 \sum_{i=1}^M \cos(\mathbf{b}_n \mathbf{r}_i + \phi_n^0). \quad (6)$$

Параметр порядка ρ_Δ (6) всегда ограничен своим максимальным значением: $|\rho_\Delta| \leq \rho_\Delta^{\max}$. Это ограничение определяется его зависимостью от координат узлов \mathbf{r}_i . Максимальное значение величины (6) $\rho_\Delta = \rho_\Delta^{\max}$ достигается, когда все максимумы ($\delta\rho(\mathbf{r}_i) > \rho_{cf}$) функции (4) совпадают с координатами узлов квазирешетки \mathbf{r}_i . Параметр обрезания ρ_{cf} определяется поверхностной концентрацией узлов M/S . Отметим также, что определение координат \mathbf{r}_i в рамках эффективного потенциала (5) невозможно, если сложная функция координат узлов $F_q = F_q(\rho_\Delta(\mathbf{r}_i))$ имеет глобальный минимум в точке $\rho_\Delta = \rho_\Delta^0$, где $|\rho_\Delta^0| \leq \rho_\Delta^{\max}$ (смотри вставку *c* на рис. 1). В этом случае равенства $\rho_\Delta(\mathbf{r}_i) = \rho_\Delta^0$ недостаточно для того, чтобы определить координаты \mathbf{r}_i . Напротив, пусть $\partial_{\rho_\Delta} F_q(\rho_\Delta) \leq 0$ (функция $F_q(\rho_\Delta)$ убывает) в точке $\rho_\Delta = \rho_\Delta^{\max}$ (см. вставку *b* на рис. 1). Тогда глобальный минимум сложной функции $F_q = F_q(\rho_\Delta(\mathbf{r}_i))$ достигается в той же самой точке $\rho_\Delta = \rho_\Delta^{\max}$, а значения \mathbf{r}_i получаются в результате максимизации параметра порядка (6). Область фазовой диаграммы $\partial_{\rho_\Delta} F_q(\rho_\Delta^{\max}) = 0$, соответствующая стабильному состоянию, расположена слева от штриховой линии $A_1 = -2A_2\rho_\Delta^2 - 3A_3\rho_\Delta^4$, где $\rho_\Delta = \rho_\Delta^{\max}$ (см. рис. 1) В этой области минимизация

свободной энергии эквивалентна максимизации эффективного параметра порядка (6).

Проанализируем теперь структуру, которая получается в результате максимизации параметра порядка (6). Для максимизации (6) узлы КР должны размещаться в наиболее высоких максимумах функции (4). Чтобы найти координаты $\mathbf{R} = \mathbf{r}_j$ таких узлов, используем следующую систему:

$$\mathbf{b}_n \mathbf{r}_j + \Delta\phi_n^j + \phi_n^0 = 2\pi N_n^j, \quad (7)$$

где N_n^j целые, $n = 0, 1, 2, 3$, а $\Delta\phi_n^j$ — малые фазовые отклонения. Данные фазовые отклонения появляются вследствие того, что волны, входящие в суперпозицию (4), несоизмерны друг с другом, и даже в самых высоких максимумах функции (4) фаза каждой из волн немного отлична от $2\pi N_n^j$. После параметризации малых фазовых отклонений $\Delta\phi_n^j$ 2-мерными векторами $\Delta\mathbf{r}_j$ и \mathbf{r}_j^\perp : $\Delta\phi_n^j = \mathbf{b}_n \Delta\mathbf{r}_j + \mathbf{b}_n^\perp \mathbf{r}_j^\perp$ решение системы (7) может быть записано в следующем виде:

$$\mathbf{r}_j + \Delta\mathbf{r}_j = \sum_{i=0}^3 N_i^j \mathbf{a}_i - \mathbf{u}, \quad (8)$$

$$\mathbf{r}_j^\perp = \sum_{i=0}^3 N_i^j \mathbf{a}_i^\perp - \mathbf{v}, \quad (9)$$

где \mathbf{u} и \mathbf{v} — однородные фоновые и фазовые сдвиги структуры соответственно; $\mathbf{a}_i = \frac{\pi}{b_0} (\cos(i\pi/4), \sin(i\pi/4))$, $\mathbf{a}_i = \frac{\pi}{b_0} (\cos(i3\pi/4), \sin(i3\pi/4))$, $i = 0, 1, 2, 3$. Вблизи любого высокого максимума \mathbf{r}_j функция (4) может быть аппроксимирована как

$$\delta\rho(\mathbf{R}) \approx 2\rho_\Delta \left(4 - \sum_{n=0}^3 (\Delta\phi_{2n}^j)^2 / 2 \right).$$

Откуда координаты данного максимума могут быть представлены как

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_j = \sum_{i=0}^3 N_{2i}^j \mathbf{a}_i - \mathbf{u}, \quad (10)$$

а величина функции в максимуме

$$\delta\rho(\mathbf{r}_j) \approx 2\rho_\Delta (4 - (\mathbf{r}_j^\perp)^2 b_0^2). \quad (11)$$

Следовательно, отклонения $\Delta\mathbf{r}_j$ в соотношении (8) малы и $|\Delta\mathbf{r}_j| \ll |\mathbf{r}_j^\perp|$ для любого высокого максимума функции (4). Выражения (8)–(9) полностью совпадают с обычными уравнениями для проектирования плоской ортогональной квазирешетки из четырехмерного пространства. На рис. 2 представлена функция плотности (4) в области $\delta\rho(\mathbf{R}) > 1.5\rho_\Delta$ и спроектированы соответствующие узлы четырехмерного пространства. Видно очень хорошее совпадение наиболее интенсивных максимумов $\delta\rho(\mathbf{r}_i)$ с проекциями узлов четырехмерного пространства. Все максимумы $\delta\rho(\mathbf{r}_j) > 1.5\rho_\Delta$ однозначно индексируются целочисленными индексами N_n^j . В масштабе

рисунка отклонения Δr_j между позициями максимумов и проекциями узлов четырехмерного пространства практически незаметны.

3. Условная минимизация свободной энергии Ландау в случае октагональных квазикристаллов

Проанализируем подробнее КР, изображенную на рис. 2. Так же, как и идеальная октагональная мозаика, использованная в работе [11] для построения модели структуры MnSiAl, решетка, показанная на рис. 2, состоит из квадратов и ромбов. Однако некоторые квадраты в данной решетке перекрываются. Перекрывание происходит в областях выделенных, на рис. 2 темно-серым цветом. При этом атомные мотивы, задаваемые перекрывающимися квадратными ячейками, не являются когерентными (см. расположение атомов в квадратных ячейках в работе [11] на рис. 1 и 2). Возникшие пересечения структурных элементов очевидно вызваны наличием в решетке лишних узлов, которые придется исключить. Из рис. 2 видно, что узлы, один из пары которых является лишним, — ближайšie соседи. Расстояние между ними примерно в $\sqrt{2} - 1$ раз меньше длины стороны элементарной ячейки. Для решетки, вершинами которой являются максимумы функции $\delta\rho(\mathbf{R})$, данное

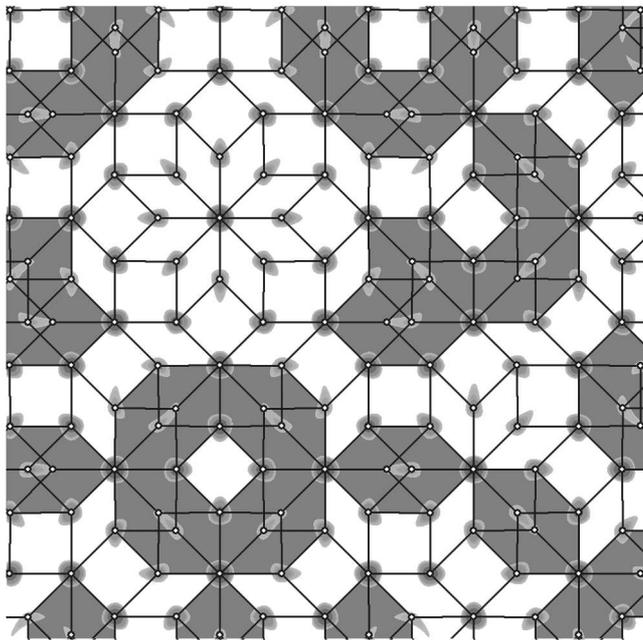


Рис. 2. Функция плотности (4) в области $\delta\rho(\mathbf{R}) > 1.5\rho_\Delta$ и проекции узлов 4D пространства, которые соответствуют максимумам функции $\delta\rho(\mathbf{R})$. Изменение цвета от светло-серого до черного соответствует изменению величины функции $\delta\rho(\mathbf{R})$ в пределах от $1.5\rho_\Delta$ до $8\rho_\Delta$. Вершины построенной квазикристаллической решетки совпадают с максимумами $\delta\rho(\mathbf{R})$ и лишь немного отклоняются от идеальных положений (10), показанных незаполненными кружками (10).

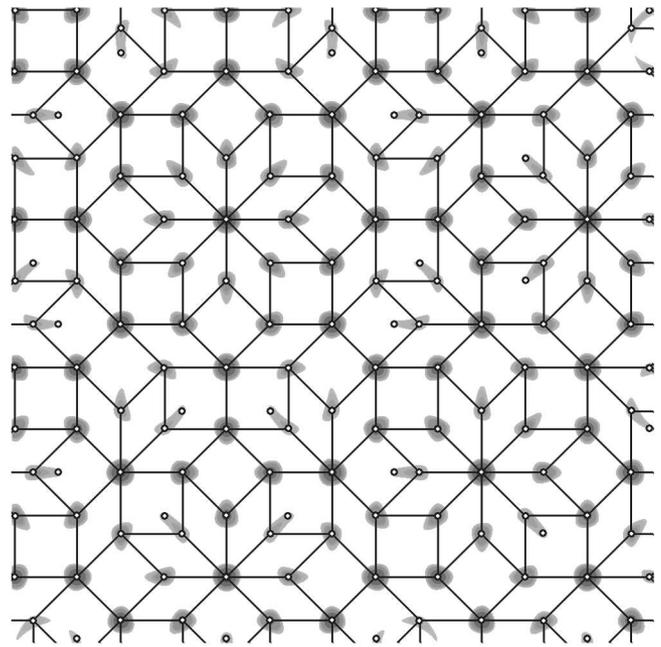


Рис. 3. Октагональная квазирешетка квазикристалла MnSiAl, построенная в рамках теории кристаллизации Ландау. Максимумы функции плотности (4) в области $\delta\rho(\mathbf{R}) > 1.5\rho_\Delta$ представлены незаполненными кружками. Максимумы функции $\delta\rho(\mathbf{R})$, не включенные в квазирешетку, исключены рассмотренной в тексте процедурой условной минимизации свободной энергии (5).

соотношение между расстояниями выполняется с очень хорошей точностью, так как все максимумы $\delta\rho(\mathbf{R})$ в области $\delta\rho(\mathbf{R}) > 1.5\rho_\Delta$ практически совпадают с проекциями узлов четырехмерного пространства (10).

Таким образом, становится понятным, что процесс минимизации свободной энергии (5) (и максимизации амплитуды (6)) должен быть условным, а именно необходимо учитывать геометрическое ограничение на включение координат максимума функции $\delta\rho(\mathbf{R})$ в множество узлов конструируемой КР. Вводимое ограничение является запретом на одновременное размещение двух узлов КР в паре максимумов, разделенных одним из восьми векторов \mathbf{S}_i , транслирующих ближайšie максимумы $\delta\rho(\mathbf{R})$ друг в друга. Тогда, очевидно, максимизировать свободную энергию (5) будет такой способ размещения узлов КР по максимумам функции (4), при котором узлу КР соответствует наиболее высокий максимум, по сравнению со всеми его соседями, разделенными с данным максимумом векторами \mathbf{S}_i . На рис. 3 представлена идеальная октагональная КР, построенная путем условной минимизации энергии (5). Узлами КР по-прежнему являются максимумы функции (4).

Разъясним теперь физический смысл векторов \mathbf{S}_i , приводящих к невозможности наложения элементарных ячеек в структуре MnSiAl. При постоянной величине голдстоуновской степени свободы ν переключения между максимумами, связанными этими векторами, соответ-

ствуют фазонным прыжкам с наименьшей энергией, которые совместимы с реальной геометрией пространства рассматриваемой КР. Данные фазонные прыжки переключают одну позицию в центре сплюснутого шестиугольника, состоящего из квадрата и двух ромбов (аналогичные шестиугольники выделены серым цветом на рис. 2). При этом шестиугольник остается по-прежнему разбитым на два ромба и квадрат. Прыжки на большее расстояние, не соответствующее звезде векторов \mathbf{S}_i , в принципе могут иметь меньшую энергию возбуждения ΔF_q , однако такие переключения позиций очевидно несовместимы с геометрией данной КР. Такая интерпретация \mathbf{S}_i может позволить применить нашу теорию к квазикристаллическим структурам, описание которых невозможно в подходе двух элементарных ячеек [18]. Для всех типов КК наиболее интенсивные максимумы функции плотности (2) связаны с узлами КР, которые наиболее устойчивы по отношению к единичному фазонному возбуждению. Например, на рис. 3, узлы решетки, соответствующие стабильному состоянию, совпадают с наиболее интенсивными максимумами функции плотности, показанными наиболее темным цветом, в то время как узлы с высокой долей вероятности возникновения фазонных прыжков можно связать векторами \mathbf{S}_i и совместить с менее интенсивными максимумами функции плотности, обозначенными более светлыми оттенками. Аналогичная фазонно-энергетическая иерархия нестабильных областей, расположенных на стабильном острове, следует из рассмотрения электронной стабилизации КК в рамках механизма Юм–Розери [19].

Рассмотрим теперь предложенный алгоритм построения октагональной квазирешетки с точки зрения традиционной многомерной кристаллографии. Заметим, что так как интересующие нас максимумы (4) индексируются целочисленными индексами N_n^j , то векторы \mathbf{S}_i (с точностью до малых отклонений $\Delta \mathbf{r}_j$) являются параллельными проекциями $4D$ трансляций. Все они симметрично эквивалентны трансляции $\mathbf{Z}_1 = \langle 1, 0, 0, 0 \rangle$ и получаются из нее в результате циклической перестановки и инверсии. Тогда, используя соотношение (11), приведенный выше энергетический алгоритм построения октагональной КР можно переформулировать следующим образом: Узел $4D$ пространства проектируется в квазирешетку, если соседи этого узла, транслируемые из него векторами \mathbf{Z}_i и характеризующиеся меньшим значением $|\mathbf{r}_j^\perp|$, отсутствуют. Несложно убедиться в том, что такая формулировка алгоритма отбора узлов эквивалентна проверке, согласно которой перпендикулярные координаты узла \mathbf{r}_j^\perp попадают внутрь проекционного окна в форме правильного восьмиугольника с расстоянием между противоположными сторонами, равным длине перпендикулярной проекции вектора \mathbf{Z}_1 .

Также интересно отметить, что данная октагональная квазирешетка, построенная на максимумах волн плотности (4), является первой в ряду самоподобных квазирешеток с последовательно большими длинами ребер,

которые также строятся на максимумах той же функции (4). Так, если изменить условие минимизации энергии (5) и выбрать длины векторов \mathbf{S}_i в $\tau = \sqrt{2} + 1$ раз больше (тогда они будут параллельными проекциями $4D$ трансляций, симметрично эквивалентных трансляции $\langle 1, 1, 1, 0 \rangle$), то получится октагональная КР с длинами ребер в τ раз больше. Для каждой последующей КР в данном ряду отношение длины максимального отклонения $\Delta \mathbf{r}_j$ к ребру КР будет уменьшаться, и положения включаемых в решетку максимумов функции (4) будут все лучше и лучше совпадать с положениями соответствующих проекций узлов $4D$ пространства.

4. Заключение

В заключение отметим, что аналогичным образом в рамках теории кристаллизации Ландау можно описать образование структур многих КР. В частности, путем минимизации свободной энергии, зависящей от одного неприводимого параметра порядка можно получить координаты узлов следующих квазикристаллических решеток: пентагональной укладки Пенроуза, образованной из пятиугольников, ромбов и звезд (иногда усеченных) [6]; укладку Амман–Макея из сплюснутых и вытянутых ромбов [20]; додекагональную укладку, состоящую из квадратов, правильных треугольников и сплюснутых шестиугольников [21]. Во всех случаях идеальные квазирешетки получаются путем минимизации свободной энергии с учетом запрета на одновременное размещение атомов в парах позиций, разделяемых определенными векторами \mathbf{S}_i . Таким образом, кристаллографическая концепция построения квазирешеток путем проектирования узлов многомерного пространства с использованием проекционного окна получает ранее неизвестное физическое обоснование. Те же самые квазикристаллические решетки можно получать в рамках теории кристаллизации Ландау путем минимизации соответствующей свободной энергии с учетом простейших ограничений на относительное расположение структурных единиц в квазикристаллической фазе.

Список литературы

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn. Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
- [2] P.M. de Wolff. Acta Cryst. A **30**, 777 (1974).
- [3] T. Janssen. Acta Cryst. A **42**, 261 (1986).
- [4] M. Duneau, A. Katz. Phys. Rev. Lett. **54**, 2688 (1985).
- [5] A. Katz, M. Duneau. J. Phys. (Paris). **47**, 181 (1986).
- [6] R. Penrose. Bull. Inst. Math. Appl. **10**, 266 (1974).
- [7] D. Romeu. Int. J. Mod. Phys. B **2**, 265 (1988).
- [8] J.L. Aragón, D. Romeu, A. Gómez. Phys. Rev. B **44**, 584 (1991).
- [9] S.E. Burkov. Phys. Rev. Lett. **67**, 614 (1991).
- [10] A. Yamamoto. Sci. Rep. Res. Inst. Tokohu Univ. A **42**, 207 (1996).
- [11] S.I. Ben-Abraham, F. Gahler. Phys. Rev. B **60**, 860 (1999).

- [12] Л.Д. Ландау. К теории фазовых переходов I. Т. 1. Наука, М. (1969). С. 234.
- [13] Л.Д. Ландау. К теории фазовых переходов II. Т. 1. Наука, М. (1969). С. 253.
- [14] D. Levine, T.C. Lubensky, S. Ostlund, S. Ramaswamy, P.J. Steinhardt. Phys. Rev. Lett. **14**, 1520 (1985).
- [15] V.P. Dmitriev, S.B. Roshal, Yu.M. Gufan, P. Toledano. Phys. Rev. Lett. **60**, 1958 (1988).
- [16] P. Toledano, V. Dmitriev. Reconstructive Phase Transitions in Crystals and Quasicrystals. World Scientific, Singapore (1996). 397 p.
- [17] J.L. Birman. Theory of crystal space groups and infra-red and Raman lattice processes of insulating crystals. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, N.Y. (1974). 538 p.
- [18] S. Fischer, A. Exner, K. Zielske, J. Perlich, S. Deloudi, W. Steurer, P. Lindner, S. Forster. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **108**, 1810 (2011).
- [19] C. Janot. Quasicrystals: A Primer. Oxford Univ. Press, Oxford (1997). 409 p.
- [20] A.L. Mackay. Physica A **114**, 609 (1982).
- [21] F. Gähler. In: Quasicrystalline Materials / Ed. Ch. Janot, J.M. Dubois. World Scientific, Singapore (1988). P. 272.