

УДК 535.5; 535.56; 535.568:681.785.3  
PACS 78.20.Ek, 78.20.Fm, 42.25.Ja, 33.55+b

## МОДЕЛЮВАННЯ ОБЕРНЕНОЇ ГРАТКИ ІКОСАЕДРИЧНИХ КВАЗІКРИСТАЛІВ

В.Гіржон, О. Смоляков, І. Гайворонський

*Запорізький національний університет  
вул. Жуковського, 66, 69600 Запоріжжя, Україна  
e-mail: igor.gayvoronsky@gmail.com*

Методом розмноження базисної групи векторів було побудовано тривимірну модель оберненої ґратки ікосаедричних квазікристалів. Показано можливість застосування алгоритму, запропонованого для моделювання структури декагональних квазікристалічних фаз. Отриману модель було порівняно з відповідною експериментальною електронограмою. З використанням результатів моделювання було проіндексовано дифракційні рефлекси від ікосаедричного квазікристалу.

**Ключові слова:** ікосаедрична фаза, обернена ґратка, золотий переріз, модельна група, дифракційні рефлекси.

### 1 ВСТУП

З моменту відкриття квазікристалів (QC) до них прикуто значну увагу науковців у зв'язку з особливостями їхньої структури та незвичними фізичними і механічними властивостями. Квазікристалічні матеріали характеризуються наявністю осей симетрії 5-го, 8-го, 10-го та 12-го порядків, заборонених класичною кристалографією [1–3]. При цьому комплекс фізичних та механічних властивостей обумовлює їх перспективність для промислового використання [3–5]. На сьогодні відкрито сотні QC-сплавів у різних металевих системах. Більшість із них – сплави на основі алюмінію [3]. Проте опис структури QC-фаз залишається актуальною задачею фізики твердого тіла. Серед методів теоретичної побудови QC-структур найбільш поширеною є двофрагментарна модель, в основі якої лежить заповнення прямої, площини чи об'єму двома елементарними структурними одиницями. У випадку одновимірного квазікристала такими одиницями є послідовність довгих і коротких відрізків; площини – «товстих» та «тонких» ромбів, що утворюють паркет Пенроуза [2]; об'єму – «товстих» та «тонких» ромбоєдрів, що формують сітку Аммана-Маккея. Двофрагментарну модель отримують за допомогою проєкційного методу, методу перерізів та методу, що використовує самоподібність квазікристалічної структури [3]. В роботах [6–8] було запропоновано інший метод моделювання оберненої ґратки QC, який полягав у розмноженні групи базисних векторів квазіґратки. За допомогою цього

методу було побудовано моделі октагональних, декагональних та додекагональних квазікристалів. Тому метою роботи є моделювання оберненої QC-ґратки з ікосаедричною симетрією, яка має тривимірну квазіперіодичність.

## 2 МОДЕЛЮВАННЯ

Для моделювання оберненої ґратки ікосаедричних квазікристалів було використано алгоритм, запропонований в [7] для декагональних QC. Відмінність полягала у тому, що за вихідну групу  $I_1$  було обрано 12 вузлів, які задають вершини ікосаедра. Вектори, проведені від початку координат до вузлів групи  $I_1$  було прийнято за базисні. Групу  $I_2$  отримували додаванням 12 груп  $I_1$ , зміщених відносно початку координат на базисні вектори. На наступному етапі будували групу  $I_3$  шляхом додавання до групи  $I_2$  12 груп, ідентичних до  $I_2$ , які зміщували на вектори, збільшені в  $\tau$  разів ( $\tau$  – золотий переріз). Наступну групу  $I_4$  отримували при додаванні до групи  $I_3$  груп вузлів, ідентичних до  $I_3$ , із зміщенням у  $\tau^2$  разів більшим. Алгоритм побудови групи  $I_5$  (рис. 1) є подібним до побудови попередніх груп, але зі зміщенням вузлів модельної групи  $I_4$  у  $\tau^3$  разів більшим. Тоді загальний алгоритм побудови оберненої ікосаедричної ґратки можна записати у вигляді:

$$I_2 = I_1 + \{q_i\}I_1 \rightarrow I_3 = I_2 + \{\tau q_i\}I_2 \rightarrow I_4 = I_3 + \{\tau^2 q_i\}I_3 \rightarrow I_5 = I_4 + \{\tau^3 q_i\}I_4 \rightarrow \dots \quad (1)$$

Тобто, побудову  $n$ -ої модельної групи можна представити так:

$$I_n = I_{n-1} + \{\tau^{n-2} q_i\}I_{n-1} \quad (2)$$

Для порівняння отриманої моделі з експериментальною електронограмою від ікосаедричної фази було графічно побудовано модельну групу, загальний вигляд якої представлено на рисунку 1.

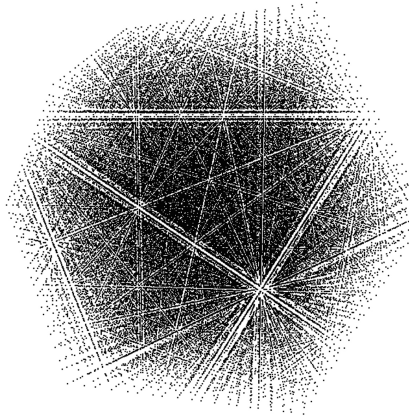


Рис. 1: Модельна група  $I_5$

На рис. 2, а представлено площину модельної групи, яка проходить через початок координат і орієнтована перпендикулярно до осі симетрії 5-го порядку модельного кластера. На рис. 2, б наведено експериментальну електронограму сплаву [3], із відповідною орієнтацією. Накладання пронормованої модельної групи на реальну електронограму від ікосаедричного квазікристалу (рис. 2, в) дозволяє стверджувати про коректність запропонованого способу моделювання. Виходячи із співвідношення між базисними векторами, які задають вершини ікосаедра, впливає, що будь-який вузол модельної ґратки може бути представленим у вигляді лінійної комбінації базисних векторів. Таким чином кожному вузлу цієї ґратки можна приписати індекси, які є цілочисловими коефіцієнтами при відповідних базисних векторах, а порівнюючи модельну ґратку з дифракційною картиною від квазікристалу можна встановити індекси дифракційних рефлексів.

Отже, запропонований спосіб дозволяє отримувати модель оберненої ґратки ікосаедричних квазікристалів, яка може бути використаною для ідентифікації квазікристалічних ікосаедричних фаз при дифрактометричних дослідженнях.

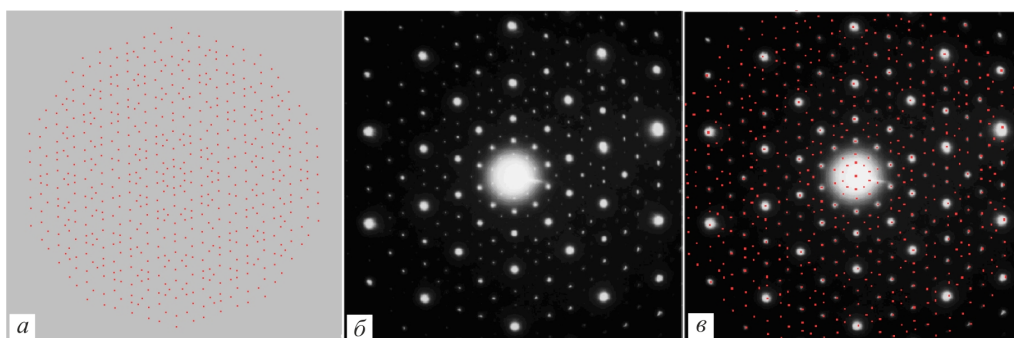


Рис. 2: Порівняння модельної групи з експериментальною електронограмою від ікосаедричної фази: а) переріз модельної групи, орієнтованої перпендикулярно до осі 5-го порядку; б) електронограма ікосаедричного сплаву [3]; в) накладання модельної групи на наведену електронограму.

Зазначимо, що зіставлення модельної ґратки з реальною електронограмою вимагає підбору деякого масштабу (нормування). При цьому можна визначити рефлекси, що відповідають базисним векторам. На відміну від електронограм, отриманих від кристалічних речовин, визначення цих рефлексів для квазікристалів не є очевидним. Це означає що зіставлення модельної групи точок оберненої ґратки з рефлексами електронограми дозволяє коректно їх проіндексувати.

### 3 ІНДЕКСАЦІЯ РЕФЛЕКСІВ

У роботі [9] було запропоновано індексацію дифракційних картин від ікосаедричних квазікристалів за допомогою двох цілих чисел  $N$  і  $M$ . Даний метод ґрунтується на проєцюванні періодичної шестивимірної оберненої кубічної гіперґратки на тривимірний простір.

Шестивимірний вектор такої ґратки задається у вигляді:

$$Q = Q_{\parallel} + Q_{\perp} = \sum_{i=1}^6 n_i \cdot q_i \quad (3)$$

де  $n_i$  – цілі числа;  $Q_{\parallel}$  та  $Q_{\perp}$  – складові шестивимірного вектора у фізичному та перпендикулярному просторах, відповідно;  $q_i$  – вектори базису періодичної шестивимірної оберненої гіперґратки, ортогональні між собою. Використаємо наступну ортогональну систему векторів  $q_i$  [9]:

$$\begin{aligned} q_1 &= (1 \ \tau \ 0 \bar{\tau} \ 1 \ 0) \\ q_2 &= (\tau \ 0 \ 1 \ 1 \ 0 \bar{\tau}) \\ q_3 &= (0 \ 1 \ \tau \ 0 \ \bar{\tau} \ 1) \\ q_4 &= (\bar{1} \ \tau \ 0 \ \tau \ 1 \ 0) \\ q_5 &= (\tau \ 0 \ \bar{1} \ 1 \ 0 \tau) \\ q_6 &= (0 \ \bar{1} \ \tau \ 0 \ \tau \ 1) \end{aligned} \quad (4)$$

де перші трійки компонентів векторів  $q_i$  визначають координати вектора у “фізичному” просторі  $Q_{\parallel}$ , а останні трійки – у “перпендикулярному”  $Q_{\perp}$ . Індекси тривимірного вектора в паралельному та перпендикулярному просторах можна виразити через індекси шестивимірного вектора (3).

Можна показати, що  $Q_{\parallel}^2 = N + M\tau$ , де

$$\begin{aligned} N &= 2 \sum_{i=1}^6 n_i^2 \\ M &= n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 + n_5^2 + n_6^2 + 2n_1n_2 + 2n_1n_6 + 2n_5n_6 + 2n_1n_2 + \\ &+ 2n_4n_5 + 2n_2n_3 + 2n_2n_6 + 2n_3n_4 + 2n_3n_6 + 2n_4n_6 - 2n_1n_3 - 2n_3n_5 - \\ &- 2n_1n_4 - 2n_2n_4 - 2n_2n_5 \end{aligned} \quad (5)$$

З формул (5) випливає, що вузол (100000) має індекси  $N=2$ ,  $M=1$ . Використовуючи це, а також прийнявши базисний вектор моделі за одиничний з індексами (або (2, 1) згідно з позначеннями Кана), було проіндексовано експериментальну електроннограму. На рис. 3 представлена електроннограма ікосаедричної фази [10] з нумерацією рефлексів у порядку зростання величини. В таблиці 1 наведено характеристики відповідних рефлексам вузлів оберненої ґратки.

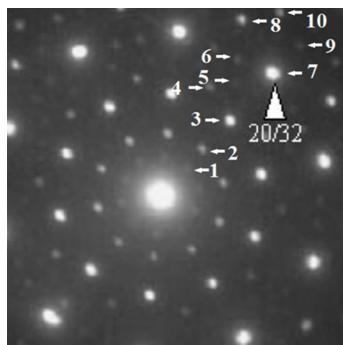


Рис. 3: Електроннограма від ікосаедричного квазікристалу [10].

Таблиця 1. Характеристики рефлексів, наведених на рис. 3.

№	N,M	$ Q_{\parallel}^2 $	$ Q_{\perp}^2 $
1	4	1.0515	1.7013
2	4.4	1.7013	1.0515
3	8.12	2.7528	0.6498
4	12.16	3.2361	1.2361
5	16.2	3.656	1.6228
6	20.28	4.2485	1.3965
7	20.32	4.4541	1.3965
8	28.44	5.2361	0.7639
9	32.48	5.055	1.2997
10	36.56	5.9156	1.0029

## Висновки

1. Запропоновано метод побудови моделі оберненої ікосаедричної ґратки, який полягає у рекурентному розмноженні базисної групи векторів квазіґратки.

2. Розроблено алгоритм індексації дифракційних рефлексів від ікосаедричних фаз за допомогою запропонованого методу.

- 
1. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J.W. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry // Phys. Rev. Lett. – 1984. – Vol. 53, № 20. – P. 1951–1953.
  2. Janot C. The structure of quasicrystals // J. Non-Cryst. Solids – 1993. – Vol. 156-158. – P. 852-864.
  3. Векилов Ю.Х., Черников М.А. Квазикристаллы // УФН. – 2012. – Т. 180. – С. 561–586.

4. *Feng L.P., Shao T. M., Jin Y.J. et al.* Temperature dependence of the tribological properties of laser re-melted Al-Cu-Fe quasicrystalline plasma sprayed coatings //J. Non-Cryst. Solids – 2005. – Vol. 351. – P. 280-287.
5. *Yamada H., Motomura S., Maezawa R et al.* Magnetic and electrical properties of a Cu-Ga-Mg-Sc icosahedral quasicrystal //J. Non-Cryst. Solids – 2004. – Vol. 334-335. – P. 398-402.
6. *Girzhon V.V., Smolyakov O.V., Zakharenko M.I.* Modeling quasi-lattice with octagonal symmetry //Zh. Eksp. Teor. Fiz. – 2014. – Vol. 119. – P. 854-860.
7. *Girzhon V.V., Kovalyova V.M., Smolyakov O.V., Zakharenko M.I.* Modeling of decagonal quasicrystal lattice //J. Non-Cryst. Solids – 2012. – Vol. 358. – P. 137-144.
8. *Smolyakov A.V., Girzhon V.V.* Modeling of dodecagonal quasicrystal lattices //Zh. Eksp. Teor. Fiz. – 2017. – Vol. 125. – P. 443-450.
9. *Cahn J.W., Shechtman D., Gratias D.* Indexing of icosahedral quasiperiodic crystals //J. Mater. Res. – 1986. – Vol. 1. – P. 13-26.
10. *Huang H.G., Qiang J.B., Bai B. et al.* Effect of Co substitution for Ni on the Ti-Zr-(Ni,Co) pseudo-ternary quasicrystal formation //J. Non-Cryst. Solids – 2007. – Vol. 353. – P. 1670-1675.

## MODELING OF RECIPROCAL LATTICE OF ICOSAHEDRAL QUASICRYSTALS

V. Girzhon, O. Smolyakov, I. Gayvoronsky

*Zaporozhye national university  
Zhukovsky str, 66, 69600 Zaporozhye, Ukraine  
e-mail: igor.gayvoronsky@gmail.com*

Most important problems, existing at studying of icosahedral quasicrystals as well as ways to solve them by theoretical and experimental methods are analyzed. Main attention is focused on considering of modelling methods. One of these methods suppose the modeling of reciprocal cell, which commonly has feature for each kind of quasicrystalline structures. Method, used in this work is based on the known early methods, but it is supposed on the assumption that initial group consists of 12 sites, which determine the tops of icosahedra. The second group has been formed adding together 12 initial groups, but shifted from the point of origin by basis vector. The next procedure was to add to obtained group the 12 identical groups, but in this case the shift was by  $\tau^2$  in respect to point of origin. The construction the reciprocal icosahedral cell of higher order groups is similar with shift  $\tau^n$  ( $\tau$ -golden ratio). Obtained in such the model group  $I^5$  was compared with appropriate experimental data on electron diffraction and good agreement was observed that confirms the ability of proposed modeling to describe the structure of real icosahedral materials. It is shown that any site of reciprocal cell can be presented as linear combination of basic vectors. Therefore each site corresponds to some indexes, which are integer-valued coefficients at corresponding basic vectors and comparing the model cell with diffraction pattern from quasicrystal it is possible to determine the indexes of diffraction reflexes. Method, proposed in this work can be used in diffraction studies, in particular at identification of quasicrystalline icosahedral phases. It should be noted that comparison of model cell with experimental electron diffraction pattern needs the fitting of certain scaling or in other words the normalization. At this procedure it is possible to determine the reflexes, which correspond to basic vectors. Contrary to case of electron diffraction patterns for crystalline materials, the determination of such reflexes for quasicrystalline phases is not trivial. This means that comparison of model group of points of reciprocal cell with reflexes of electron diffraction patterns allows obtaining the correct values of indexes. Method of indexation supposes the transition from periodic six-dimensional reciprocal cubic hyper cell to three-dimensional space. The equations, describing this transition are presented in detail.

**Key words:** icosahedral phase, reciprocal lattice, golden ratio, model group, diffraction reflexes.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ обратной решетки икосаэдрических  
квазикристаллов**

**В.Гиржон, О. Смоляков, И. Гайворонский**

*Запорожский национальный университет  
ул. Жуковского, 66, 69600 Запорожье, Украина  
e-mail: igor.gayvoronsky@gmail.com*

Методом размножения базовой группы векторов было построено трехмерную модель обратной решетки икосаэдрической квазикристаллов. Показана возможность применения алгоритма, предложенного для моделирования структуры декагональных квазикристаллических фаз. Полученную модель была по сравнению с соответствующей экспериментальной электронограмме. С использованием результатов моделирования были проиндексированы дифракционные рефлексы от икосаэдрических квазикристаллов.

**Ключевые слова:** икосаэдрична фаза, обратная решетка, золотое сечение, модельная группа, дифракционные рефлексы.

Статтю отримано: 10.10.2017  
Прийнято до друку: 13.12.2017