Члены второго порядка фонон-фазонной динамической матрицы икосаэдрического квазикристалла

© С.Б. Рошаль

Ростовский государственный университет,
344090 Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: rochal@phys.runnet.ru

(Поступила в Редакцию 11 января 2001 г.)

Получены члены фонон-фазонной динамической матрицы икосаэдрического квазикристалла, имеющие четвертую степень по компонентам волнового вектора. В этой степени динамическая матрица имеет девять независимых коэффициентов: три фонон-фононных, три фазон-фононных и три фазон-фазонных. Фононный блок построенной динамической матрицы имеет на один независимый коэффициент больше, чем в случае изотропной среды. Обсуждаются соответствующие особенности дисперсии акустических фононов в i-AlPdMn сплаве. Показано, что при учете членов четвертой степени интенсивность диффузного рассеяния вблизи брэгговских рефлексов спадает по закону типа $\alpha/(q^2+\beta q^4)$, где q — расстояние до рефлекса в обратном пространстве, а коэффициенты α и β зависят от направления вектора q.

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за материальную поддержку.

Открытые в 1984 г. квазикристаллы [1] обладают дополнительными голдстоуновскими степенями свободы [2], отсутствующими в кристаллическом состоянии. В отличие от обычных модулированных кристаллических фаз, которые, как известно, также обладают фазонными степенями свободы, фазонные деформации в квазикристаллах ассоциируются с дискретными атомными смещениями, или перескоками. В длинноволновом пределе энергия фазонных мод, подобно энергии акустических мод, стремится к нулю [2]. Фазонная мода в квазикристаллах соответствует скоррелированным атомным перескокам или диффузии [3,4], а не непрерывным атомным смещениям. Фазонные степени свободы в квазикристаллах при комнатной температуре заморожены. Активация фазонных степеней свободы при росте температуры меняет физические свойства квазикристаллов. В квазикристаллическом сплаве AlPdMn при повышении температуры от 700 до 1100 K теплоемкость при постоянном объеме возрастает более чем в 1.5 раза [5]. По известным кристаллофизическим теоремам наличие оси пятого порядка приводит к изотропности тензора четвертого ранга относительно вращения вокруг этой оси, поэтому наличие икосаэдрической симметрии приводит к полной изотропности любого тензора четвертого ранга. Поэтому вид модулей упругости икосаэдрического квазикристалла совпадает с изотропным случаем. Однако высокочастотная методика исследования собственных колебаний [6] показывает разницу величин эффективных модулей сдвига, измеренных в монокристалле AlPdMn вдоль направления осей второго и пятого порядков. Расщепление становится ясно различимым при температурах выше 700°C. Этот эффект можно объяснить как результат динамического взаимодействия фононных и фазонных степеней свободы в рамках модели [7].

Центральным объектом, возникающим при решении различных задач, связанных с фонон-фазонной динамической упругостью квазикристаллов, является фонон-фазонная динамическая матрица (ДМ) $C_{ij}(\mathbf{q})$, где $i, j = 1, 2, \ldots, 6$, $\mathbf{q}$ — трехкомпонентный волновой вектор. В качестве примера одной из первых работ, где ДМ была получена для икосаэдрического квазикристалла, можно привести работу [3]. Физический смысл матрицы C_{ij} довольно прост и подобен физическому смыслу (3×3) ДМ акустических фононов в обыкновенном кристалле. Если шестикомпонентный вектор $U_i(\mathbf{q})$ состоит из трех компонент, описывающих амплитуды обычных (фононных) волн с волновым вектором $\mathbf{q}$, и из трех компонент, характеризующих амплитуды фазонных волн, то шестикомпонентный вектор $C_{ij}U_j$ равен амплитуде упругой возвращающей силы. Первые три его компоненты соответствуют обычной, а вторые три компоненты — обобщенной фазонной силам. Соответственно скалярная величина $1/2C_{ij}U_i(\mathbf{q})U_j(-\mathbf{q}) = E(\mathbf{q})$ равна объемной плотности фонон-фазонной упругой энергии в обратном пространстве. К настоящему времени рассчитаны только первые, квадратичные по компонентам волнового вектора элементы ДМ икосаэдрического квазикристалла, существенные при малых величинах вектора $\mathbf{q}$. Поэтому решение эластодинамических задач возможно только в длинноволновом пределе, соответствующем простейшей квадратичной зависимости энергии фононных и фазонных возбуждений от волнового вектора. Для примера укажем, что даже ДМ периодической одномерной линейной атомной цепочки соответствует более сложному виду дисперсии: $2\lambda/M(1-\cos qa)$, где a — период, M — масса атомов, λ — упругая постоянная [8]. Цель настоящей работы — построение старших слагаемых ДМ, позволяющих учесть следующую степень в зависимости энергии фонон-фазонных мод от волнового вектора.

1. Теоретико-групповое рассмотрение

Традиционно для выражения упругой энергии квазикристалла используют модель непрерывной среды с икосаэдрической симметрией. Энергия записывается в виде суммы дифференциальных инвариантов от пространственных первых производных полей фононных и фазонных смещений [2]. Фурье преобразование данного выражения практически сводится к формальным заменам

$$\partial_i w_j(\mathbf{R}) \to q_i w_j(\mathbf{q}), \quad E_{ij}(\mathbf{R}) \to 1/2\big(q_j u_i(\mathbf{q}) + q_i u_j(\mathbf{q})\big),$$

где u_i и w_j — две составляющие компоненты шестимерного вектора $\mathbf{U}$, а символ $\partial_i w_j$ обозначает производную i-й компоненты фазонного поля $\mathbf{w}$ по i-й компоненте радиус-вектора. Величины $\partial_i w_j$ и E_{ij} являются компонентами тензоров фазонной и обычной деформаций. Вектор $\mathbf{U}(\mathbf{R})$ характеризует поле обобщенных смещений в прямом пространстве, а вектор $\mathbf{U}(\mathbf{q})$ определяет амплитуды этих же смещений в обратном пространстве. Сохраняя определение пяти упругих коэффициентов икосаэдрического квазикристалла и используя систему координат [9], квадратичную по компонентам волнового вектора плотность упругой энергии в обратном пространстве можно записать в виде

$$E = \lambda I_1 + \mu I_2 + K_1 I_3 + K_2 I_4 + K_3 I_5, \tag{1}$$

где инварианты I_j выражаются в следующем виде

$$I_1 = 1/2(\mathbf{uq})^2, \quad I_2 = 1/2\{(\mathbf{uq})^2 + |\mathbf{u}|^2|\mathbf{q}|^2\},$$

$$I_3 = 1/2|\mathbf{w}|^2|\mathbf{q}|^2,$$

$$I_4 = 1/2\{-(|\mathbf{w}|^2|\mathbf{q}|^2)/3 + 4[q_1q_2w_1w_2 + \tau q_3^2 w_1^2$$

$$- 1/\tau q_2^2 w_1^2 + \text{циклическая перестановка}]\};$$

$$I_5 = \{q_1^2u_1w_1 + 1/\tau q_1^2 u_2 w_2 - \tau q_1^2 u_3 w_3 + 2/\tau q_1 q_2 u_1 w_1$$

$$-2\tau q_1 q_2 u_2 w_1 + \text{циклическая перестановка}\}. \tag{2}$$

Компоненты квадратичной по волновым векторам ДМ могут быть получены как вторые производные энергии (1) по обобщенным амплитудам

$$C_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial U_i \partial U_j}. \tag{3}$$

Блоки данной матрицы с точностью до переобозначений и современного переопределения упругих модулей [10] (см. Приложение, матрицы (17)–(19)) совпадают с матрицами, данными в работе [9], или с точностью до двух исправленных опечаток в фазон-фононном блоке совпадают с результатами работы [10]. Заметим, что построение следующих по степеням компонент волновых векторов членов в модели сплошной среды в традиционном подходе эквивалентно построению упругой энергии, квадратичной по пространственным производным поля $\mathbf{U}(\mathbf{R})$ более высокого порядка.

Значительно проще отказаться от построения подобных дифференциальных инвариантов и строить непосредственно инвариантные слагаемые Фурье-образа упругой энергии. Фактически необходимы все линейно независимые инварианты, квадратичные по компонентам поля $\mathbf{U}(\mathbf{q})$ и имеющие четвертую степень по компонентам волнового вектора $\mathbf{q}$. При этом следует помнить, что компоненты волнового вектора и компоненты поля $\mathbf{u}$ преобразуются по одному обычному (первому) векторному представлению группы I_h, а компоненты поля $\mathbf{w}$ — по второму векторному представлению той же группы. Воспользовавшись фактом, что при ограничении группы I_h на группу T_h оба векторных представления становятся эквивалентными, задачу можно решать последовательно. Построим сначала инварианты группы T_h. В качестве генераторов этой группы можно выбрать следующие элементы симметрии $C_2^x, C_2^y, C_3^{xyz}, C_2^{xy}$ и I. Матрицы, соответствующие этим генераторам в векторном представлении, приведены далее

$$m(C_2^x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad m(C_2^y) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$m(C_3^{xyz}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad m(C_2^{xy}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$m(I) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Всего существует девять инвариантов четвертой степени, построенных из компонент волнового вектора и компонент еще одного вектора v:

$$J_1 = q_1^4 v_1^2 + q_2^4 v_2^2 + q_3^4 v_3^2,$$

$$J_2 = q_1^4 v_2^2 + q_2^4 v_3^2 + q_3^4 v_1^2,$$

$$J_3 = q_1^4 v_3^2 + q_2^4 v_1^2 + q_3^4 v_2^2,$$

$$J_4 = q_1^3 q_2 v_1 v_2 + q_2^3 q_3 v_2 v_3 + q_3^3 q_1 v_3 v_1,$$

$$J_5 = q_1^3 q_3 v_1 v_3 + q_2^3 q_1 v_2 v_1 + q_3^3 q_2 v_3 v_2,$$

$$J_6 = q_1^2 q_2^2 v_1^2 + q_2^2 q_3^2 v_2^2 + q_3^2 q_1^2 v_3^2,$$

$$J_7 = q_1^2 q_2^2 v_2^2 + q_2^2 q_3^2 v_3^2 + q_3^2 q_1^2 v_1^2,$$

$$J_8 = q_1^2 q_2^2 v_3^2 + q_2^2 q_3^2 v_1^2 + q_3^2 q_1^2 v_2^2,$$

$$J_9 = q_1^3 q_2 q_3 v_2 v_3 + q_2^3 q_3 q_1 v_3 v_1 + q_3^3 q_1 q_2 v_1 v_2. \tag{4}$$

Под действием поворота вокруг оси пятого порядка, лежащей вдоль направления $\langle 1, \tau, 0 \rangle$, где $\tau = (\sqrt{5}+1)/2$, вектор $\mathbf{q}$ преобразуется при помощи матрицы

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1/\tau & \tau & -1 \\ -\tau & 1 & 1/\tau \\ 1 & 1/\tau & \tau \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Вектор **u** преобразуется также, а вектор **w** — под действием матрицы

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\tau & -1/\tau & -1 \\ 1/\tau & 1 & -\tau \\ 1 & -\tau & -1/\tau \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Выполняя усреднение по группе I_h инвариантов (4) и понимая под величиной **v** вектор **u**, находим три линейно независимых фонон-фононных инварианта:

$$T_1 = I_1|\mathbf{q}|^2,$$

$$T_2 = I_2|\mathbf{q}|^2,$$

$$T_3 = 1/\tau J_2 - \tau J_3 + 8/\tau J_4 - 8\tau J_5 + 6/\tau J_6 - 6\tau J_7 + 4J_8 + 16J_9. \tag{7}$$

Таким образом, фононную часть поправки к упругой энергии можно записать как $\Delta E^{\text{phonon}} = \lambda' T_1 + \mu' T_2 + \xi_{\parallel} T_3$. Слагаемые, соответствующие первому и второму инвариантам, легко получить, умножая на $|\mathbf{q}|^2$ блок (17) и выполняя замену λ на λ' и μ на μ'. Вид добавки к фонон-фононному блоку, соответствующий T_3, приведен в Приложении в форме матрицы (20).

Понимая под величиной **v** вектор **w** и усредняя по группе I_h инварианты (4), находим три линейно независимых фазон-фазонных инварианта:

$$T_4 = I_3|\mathbf{q}|^2,$$

$$T_5 = I_4|\mathbf{q}|^2,$$

$$T_6 = 2J_1 - 1/\tau J_2 + \tau J_3 - 4\tau J_4 + 4/\tau J_5 + 6J_8 - 12J_9. \tag{8}$$

Окончательно фазонную часть поправки к упругой энергии можно записать как $\Delta E^{\text{phason}} = K_1' T_4 + K_2' T_5 + \xi_{\perp} T_6$. Слагаемые, соответствующие четвертому и пятому инвариантам, легко получить, умножая на $|\mathbf{q}|^2$ блок (19) и выполняя замену K_1 на K_1' и K_2 на K_2'. Вид добавки к фазон-фазонному блоку, соответствующий T_6, приведен в Приложении в форме матрицы (21).

Три фонон-фазонных инварианта можно представить в виде линейных комбинаций от 12 слагаемых, каждое из которых инвариантно относительно действия группы T_h,

$$S_1 = q_1^4 u_1 w_1 + q_2^4 u_2 w_2 + q_3^4 u_3 w_3,$$

$$S_2 = q_1^4 u_2 w_2 + q_2^4 u_3 w_3 + q_3^4 u_1 w_1,$$

$$S_3 = q_1^4 u_3 w_3 + q_2^4 u_1 w_1 + q_3^4 u_2 w_2,$$

$$S_4 = q_1^3 q_2 u_1 w_2 + q_2^3 q_3 u_2 w_3 + q_3^3 q_1 u_3 w_1,$$

$$S_5 = q_1^3 q_2 u_2 w_1 + q_2^3 q_3 u_3 w_2 + q_3^3 q_1 u_1 w_3,$$

$$S_6 = q_1^3 q_2 u_1 w_3 + q_2^3 q_1 u_2 w_1 + q_3^3 q_2 u_3 w_2,$$

$$S_7 = q_1^3 q_3 u_3 w_1 + q_2^3 q_1 u_1 w_2 + q_3^3 q_2 u_2 w_1,$$

$$S_8 = q_1^2 q_2^2 u_1 w_1 + q_2^2 q_3^2 u_2 w_2 + q_3^2 q_1^2 u_3 w_3,$$

$$S_9 = q_1^2 q_2^2 u_2 w_2 + q_2^2 q_3^2 u_3 w_3 + q_3^2 q_1^2 u_1 w_1,$$

$$S_{10} = q_1^2 q_2^2 u_3 w_3 + q_2^2 q_3^2 u_1 w_1 + q_3^2 q_1^2 u_2 w_2,$$

$$S_{11} = q_1^2 q_2 q_3 u_2 w_3 + q_2^2 q_3 q_1 u_3 w_1 + q_3^2 q_1 q_2 u_1 w_2,$$

$$S_{12} = q_1^2 q_2 q_3 u_3 w_2 + q_2^2 q_3 q_1 u_1 w_3 + q_3^2 q_1 q_2 u_2 w_1. \tag{9}$$

Окончательно имеем

$$T_7 = I_5|\mathbf{q}|^2 = S_1 + 1/\tau S_2 - \tau S_3 + 2/\tau S_4 - 2\tau S_5 - 2\tau S_6 + 2/\tau S_7 - 1/\tau S_8 + \tau S_9 - S_{10} + 2/\tau S_{11} - 2\tau S_{12},$$

$$T_8 = 5S_1 + (3\tau - 2)S_2 + (1 - 3\tau)S_3 + (12\tau - 8)S_4 - 4\tau S_5 + (4 - 12\tau)S_6 + (4\tau - 4)S_7 - 6\tau S_8 + (6\tau - 6)S_9 - 6S_{10} - 12S_{11} - 12S_{12},$$

$$T_9 = (3\tau - 2)S_1 + (9 - 3\tau)S_2 - 3S_3 + 12S_4 - 8S_5 + 0S_6 + (16 - 12\tau)S_7 + (6\tau - 6)S_8 - 6S_9 - 6\tau S_{10} + (12 - 12\tau)S_{11} - 24S_{12}. \tag{10}$$

Фонон-фазонную часть поправки к упругой энергии можно записать как $\Delta E^{\text{inter}} = K_3' T_7 + K_4 T_8 + K_5 T_9$. Слагаемые, соответствующие T_8 и T_9, можно получить, выполнив дифференцирование данных инвариантов по соответствующим обобщенным амплитудам в соответствии с формулой (3).

2. Обсуждение полученных результатов

В качестве первого примера обсудим дисперсию акустических фононов в сплаве i-AlCuLi, измеренную в работе [11] при комнатной температуре. Уже при волновых векторах порядка $0.2\,\text{A}^{-1}$ становится заметным отклонение закона дисперсии $\omega(q)$ от прямой линии вниз. При волновых векторах порядка $0.4\,\text{A}^{-1}$ становится заметной разница между скоростями акустических фононов, распространяющихся в различных симметричных направлениях. Ответственным за данный эффект является вклад инварианта T_3, приводящий к тому, что упругая симметрия задачи становится в точности икосаэдрической. Очевидно, что инварианты I_1, I_2, T_1 и T_2 являются изотропными. Если рассматривать фазонные степени свободы замороженными, что соответствует условию комнатной температуры, и пренебречь различными механизмами затухания фононов, то законы дисперсии поперечных и продольных акустических волн можно найти, решая традиционную систему уравнений

$$c_{ij}(\mathbf{q})u_j = \rho\omega^2 u_i, \tag{11}$$

где $c_{ij}(\mathbf{q})$ — фононный блок построенной ДМ, а ρ — массовая плотность квазикристалла. Если волновой вектор фононов лежит вдоль оси пятого, третьего или второго порядков (эти направления обычно экспериментально

Таблица 1. Собственные значения матрицы (20) в зависимости от направления волнового вектора **q** и поляризации **u**

$\mathbf{q} = \langle 1, \tau, 0 \rangle$		$\mathbf{q} = \langle \tau^2, 1, 0 \rangle$		$\mathbf{q} = \langle 1, 0, 0 \rangle$	
$\mathbf{u} = \langle 1, \tau, 0 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = -6\xi_{\parallel}$	$\mathbf{u} = \langle \tau^2, 1, 0 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = 10/9\xi_{\parallel}$	$\mathbf{u} = \langle 1, 0, 0 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = 0$
$\mathbf{u} = \langle -\tau, 1, 0 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = 2\xi_{\parallel}$	$\mathbf{u} = \langle 1, -\tau^2, 0 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = -14/9\xi_{\parallel}$	$\mathbf{u} = \langle 0, 1, 0 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = 2/\tau$
$\mathbf{u} = \langle 0, 0, 1 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = 2\xi_{\parallel}$	$\mathbf{u} = \langle 0, 0, 1 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = -14/9\xi_{\parallel}$	$\mathbf{u} = \langle 0, 0, 1 \rangle$,	$\delta_{\mathrm{ef}} = -2\tau$

исследуются), то законы дисперсии продольных и поперечных фононов имеют следующий вид:

$$\rho\omega^2 = (\lambda + 2\mu)\mathbf{q}^2 + (\lambda' + 2\mu')\mathbf{q}^4 + \delta_{\mathrm{ef}}\mathbf{q}^4, \qquad (12)$$

$$\rho\omega^2 = \mu\mathbf{q}^2 + \mu'\mathbf{q}^4 + \delta_{\mathrm{ef}}\mathbf{q}^4. \qquad (13)$$

Сравнение с экспериментальными данными для i-AlCuLi [11] показывает, что величины $\lambda' + 2\mu'$ и μ' являются отрицательными. Величины δ_{ef}, приведенные в табл. 1, определяются собственными значениями матрицы (17), зависящими от направлений волнового вектора **q** и поляризации **u**. Естественно, для всех эквивалентных направлений собственные значения совпадают.

Данные табл. 1 показывают, что поперечные волны, распространяющиеся вдоль осей пятого и третьего порядков, в отличие от оси второго порядка остаются дважды вырожденными и при учете членов четвертого порядка. К сожалению, на основе экспериментальных измерений работы [11] достоверно количественно оценить величины λ', μ' и $\xi_{\parallel}$ не представляется возможным. Используя построенную ДМ, можно рассмотреть и случай термически активированных фазонов и получить законы дисперсии взаимодействующих фонон-фазонных возбуждений, подобно тому как это было сделано в длинноволновом пределе в работе [7].

Второй интересной областью, в которой могут найти применение полученные результаты, являются теоретические и экспериментальные исследования диффузного рассеяния в квазикристаллах. В отличие от кристаллического случая форма контуров линий равной интенсивности вокруг брэгговских рефлексов квазикристаллов является анизотропной, а основной вклад в диффузное рассеяние вносят пространственные флуктуации фазонных степеней свободы [12]. Исследование профиля интенсивности вокруг брэгговских рефлексов в настоящее время является основным способом определения фазонных констант упругости в квазикристаллах. Не останавливаясь на теоретическом обосновании, укажем, что в работах де Буасье последнего времени [12–14] интенсивность диффузного рассеяния вблизи рефлекса, соответствующего вектору обратного пространства **Q** на конечном расстоянии **q** от рефлекса, аппроксимируется выражением типа

$$I(\mathbf{Q}^{\parallel} + \mathbf{q}) = \sum_{i,j=1}^{3} \alpha_Q [c_{ij}(\mathbf{q})^{\parallel}]^{-1} Q_i^{\parallel} Q_j^{\parallel} + \sum_{i,j=1}^{3} \beta_Q [c_{ij}(\mathbf{q})^{\perp}]^{-1} Q_i^{\perp} Q_j^{\perp}, \qquad (14)$$

где α_Q и β_Q — коэффициенты пропорциональности, зависящие от индекса рефлекса, фактора Дебая–Валера, температуры кристалла, температуры замораживания фазонных степеней свободы и некоторых других факторов. Векторы $\mathbf{Q}^{\parallel}$ и $\mathbf{Q}^{\perp}$ — так называемые параллельная и перпендикулярная проекции шестимерного вектора обратного пространства **Q**. Матрицы $c_{ij}(\mathbf{q})^{\parallel}$ и $c_{ij}(\mathbf{q})^{\perp}$ — фононный и фазонный блоки ДМ соответственно. Поскольку сами компоненты ДМ пропорциональны парным произведениям компонент волнового вектора, интенсивность, определяемая формулой (14), спадает прямо пропорционально квадрату расстояния в обратном пространстве до брэгговского рефлекса. В то же время экспериментально наблюдаются отклонения убывания интенсивности диффузного рассеяния $I(q)$ от закона $1/q^2$ [15]. (О необходимости учета старших членов ДМ смотрите также ссылку [23] в работе [10]). Поскольку именно флуктуации фазонных степеней свободы вносят превалирующий вклад в интенсивность диффузного рассеяния, представляется разумным учесть члены второго порядка именно в фазонном блоке.

Обычно интенсивность диффузного рассеяния измеряют в плоскости, перпендикулярной оси второго порядка икосаэдрического квазикристалла, пусть для определенности это плоскость $[0, 0, 1]$. В эту плоскость попадает шесть симметричных направлений: по две оси второго, третьего и пятого порядков. Для данных направлений возможно избежать процедуры обращения матриц, если воспользоваться известным из линейной алгебры соотношением

$$\sum_{i,j=1}^{3} (M_{ij})^{-1} Q_i Q_j = \sum_{l=1}^{3} (\mathbf{e}^l \mathbf{Q})^2 / n_l, \qquad (15)$$

где $\mathbf{e}^l$ и n_l — нормированные собственные векторы и собственные числа матрицы M_{ij}, а $(M_{ij})^{-1}$ — матрица, обратная к матрице M_{ij}. Один из нормированных собственных векторов матрицы $c_{ij}(\mathbf{q})^{\parallel}$ — параллельный вектору **q** единичный вектор. Соответствующее собственное

Таблица 2. Данные, необходимые для расчета фазонной составляющей интенсивности диффузного рассеяния

$\mathbf{q}_0$	$\langle\rangle^{\perp}$	K	K'	N
$q\langle 1,\tau,0\rangle/N$	$\langle\tau,-1,0\rangle/N$	$K_1-4/3K_2$	$2\xi_\perp+K'_1-4/3K'_2$	$\sqrt{\tau+2}$
	$\langle 0,0,1\rangle$	$K_1+2/3K_2$	$2\xi_\perp+K'_1+2/3K'_2$	
	$\langle 1,\tau,0\rangle/N$	$K_1+2/3K_2$	$2\xi_\perp+K'_1+2/3K'_2$	$\sqrt{\tau+2}$
$q\langle -1,\tau,0\rangle/N$	$\langle\tau,1,0\rangle/N$	$K_1-4/3K_2$	$2\xi_\perp+K'_1-4/3K'_2$	$\sqrt{\tau+2}$
	$\langle 0,0,1\rangle$	$K_1+2/3K_2$	$2\xi_\perp+K'_1+2/3K'_2$	
	$\langle 1,-\tau,0\rangle/N$	$K_1+2/3K_2$	$2\xi_\perp+K'_1+2/3K'_2$	$\sqrt{\tau+2}$
$q\langle\tau^2,1,0\rangle/N$	$\langle 1,\tau^2,0\rangle/N$	$K_1+4/3K_2$	$1\frac{5}{9}\,\xi_\perp+K'_1+4/3K'_2$	$\sqrt{3\tau+3}$
	$\langle 0,0,1\rangle$	$K_1-2/3K_2$	$3\frac{7}{9}\,\xi_\perp+K'_1-2/3K'_2$	
	$\langle -\tau^2,1,0\rangle/N$	$K_1-2/3K_2$	$3\frac{7}{9}\,\xi_\perp+K'_1-2/3K'_2$	$\sqrt{3\tau+3}$
$q\langle -\tau^2,1,0\rangle/N$	$\langle -1,\tau^2,0\rangle/N$	$K_1+4/3K_2$	$1\frac{5}{9}\,\xi_\perp+K'_1+4/3K'_2$	$\sqrt{3\tau+3}$
	$\langle 0,0,1\rangle$	$K_1-2/3K_2$	$3\frac{7}{9}\,\xi_\perp+K'_1-2/3K'_2$	
	$\langle\tau^2,1,0\rangle/N$	$K_1-2/3K_2$	$3\frac{7}{9}\,\xi_\perp+K'_1-2/3K'_2$	$\sqrt{3\tau+3}$
$q\langle 1,0,0\rangle$	$\langle 1,0,0\rangle$	$K_1-1/3K_2$	$4\xi_\perp+K'_1-1/3K'_2$	
	$\langle 0,1,0\rangle$	$K_1+(\tau-1/3)K_2$	$2(1-\tau)\xi_\perp+K'_1+(\tau-1/3)K'_2$	
	$\langle 0,0,1\rangle$	$K_1+(2/3-\tau)K_2$	$2\tau\xi_\perp+K'_1+(2/3-\tau)K'_2$	
$q\langle 0,1,0\rangle$	$\langle 0,1,0\rangle$	$K_1-1/3K_2$	$4\xi_\perp+K'_1-1/3K'_2$	
	$\langle 0,0,1\rangle$	$K_1+(\tau-1/3)K_2$	$2(1-\tau)\xi_\perp+K'_1+(\tau-1/3)K'_2$	
	$\langle 1,0,0\rangle$	$K_1+(2/3-\tau)K_2$	$2\tau\xi_\perp+K'_1+(2/3-\tau)K'_2$	

Примечание. В первом столбце таблицы приведено направление симметрии волнового вектора. Во втором столбце указан нормированный вектор фазонной поляризации $\langle\rangle^{\perp}$. Следующие два столбца содержат выражения для эффективных констант K и K'. В последнем столбце приведен нормировочный коэффициент.

число есть $\lambda+2\mu$. Два других единичных собственных вектора перпендикулярны волновому вектору, а соответствующие собственные числа равны между собой и равны μ. Знание собственных чисел и собственных векторов блока $c_{ij}(\mathbf{q})^{\perp}$ позволяет преобразовать фазонный вклад в интенсивность диффузного рассеяния к виду

$$I_{\text{phason}}(\mathbf{Q}^{\parallel}+\mathbf{q})=\sum_{i=1}^{3}\frac{\beta_Q|\langle\rangle_i^{\perp}\mathbf{Q}^{\perp}|^2}{(K_iq^2+K'_iq^4)}. \tag{16}$$

Данные, необходимые для практического использования формулы (16), приведены в табл. 2.

Приложение

Квадратичная по компонентам волнового вектора часть симметричной динамической матрицы $\begin{pmatrix} C^{\parallel} & C^{\parallel\perp} \\ C^{\perp\parallel} & C^{\perp} \end{pmatrix}$ может быть представлена в виде трех блоков: фонон-фононного

$$c^{\parallel}=$$
$$=\begin{pmatrix} \mu|q|^2+(\lambda+\mu)q_1^2 & (\lambda+\mu)q_1q_2 & (\lambda+\mu)q_1q_3 \\ (\lambda+\mu)q_1q_2 & \mu|q|^2+(\lambda+\mu)q_2^2 & (\lambda+\mu)q_2q_3 \\ (\lambda+\mu)q_1q_3 & (\lambda+\mu)q_2q_3 & \mu|q|^2+(\lambda+\mu)q_3^2 \end{pmatrix}, \tag{17}$$

фонон-фазонного

$$c^{\parallel\perp}=$$
$$=K_3\begin{pmatrix} q_1^2-\tau q_2^2+1/\tau q_3^2 & 2\tau^{-1}q_1q_2 & -2\tau q_1q_3 \\ -2\tau q_1q_2 & q_2^2-\tau q_3^2+\tau^{-1}q_1^2 & 2\tau^{-1}q_2q_3 \\ 2\tau^{-1}q_1q_3 & -2\tau q_2q_3 & q_3^2-\tau q_1^2+\tau^{-1}q_2^2 \end{pmatrix} \tag{18}$$

и фазон-фазонного

$$c^{\perp}=\begin{pmatrix} A_1 & 2K_2q_1q_2 & 2K_2q_1q_3 \\ 2K_2q_1q_2 & A_2 & 2K_2q_3 \\ K_2q_1q_3 & 2K_2q_2q_3 & A_3 \end{pmatrix}, \tag{19}$$

где $A_i=K_1q^2-K_2(q^2/3+\tau^{-1}q_{i+1}^2-\tau q_{i+2}^2)$.

Нетривиальная добавка четвертой степени к фонон-фононному блоку имеет вид

$$\xi_{\parallel}\begin{pmatrix} A_1 & B_1 & B_3 \\ B_1 & A_2 & B_2 \\ B_3 & B_2 & A_3 \end{pmatrix}, \tag{20}$$

где $A_i=\frac{2}{\tau}q_{i+2}^4+\frac{12}{\tau}q_i^2q_{i+1}^2-2\tau q_{i+1}^4+8q_{i+1}^2q_{i+2}^2-12\tau q_i^2q_{i+1}^2$ и $B_i=\frac{8}{\tau}q_i^3q_{i+1}-8\tau q_{i+1}^3q_i+16q_iq_{i+1}q_{i+2}^2$. Нетривиальная добавка четвертой степени к фазон-фазонному блоку имеет вид

$$\xi_\perp \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & B_3 \\ B_1 & A_2 & B_2 \\ B_3 & B_2 & A_3 \end{pmatrix}, \qquad (21)$$

где $A_i = 4q_i^4 + 2\tau q_{i+1}^4 - \frac{2}{\tau} q_{i+2}^4 + 12 q_{i+1}^2 q_{i+2}^2$ и $B_i = \frac{4}{\tau} q_i q_{i+1}^3 - 4\tau q_i^3 q_{i+1} - 12 q_i q_{i+1} q_{i+2}^2$.

Список литературы

[1] D. Shechtman, I. Blech, D. Chatias, J.W. Cahn. Phys. Rev. Lett. **53**, *20*, 1951 (1984).
[2] P. Bak. Phys. Rev. Lett. **54**, *14*, 1517 (1985).
[3] T.C. Lubensky. In: Introduction to Quasicrystals / Ed. by M.V. Jaric. Academic Press, Boston (1988). P. 200.
[4] G. Coddens, S. Lyonnard, B. Hennion, Y. Calvayrac. Phys. Rev. Lett. **83**, *16*, 3226 (1999).
[5] K. Edagava, K. Kajiaama. Contributed Talk at 7th International Conference on Quasicrystals. Stuttgart, Germany (1999).
[6] M. Feuerbacher, M. Weller, K. Urban. Proceedings of the 6th International Conference on Quasicrystals. Tokyo (1997).
[7] S.B. Rochal, V. Lorman. Phys. Rev. **B52**, *2*, 874 (2000).
[8] Дж. Эллиот, П. Добер. Симметрия в физике. Том 2: дальнейшие приложения. Мир, М. (1979).
[9] M.V. Jaric, D.R. Nelson. Phys. Rev. **B37**, *9*, 4458 (1988).
[10] M.J. Capitan, Y. Calvayrac, A. Quivy, J.L. Joulaud, S. Lefebre, D. Gratias. Phys. Rev. **B60**, *9*, 6398 (1999).
[11] M. Windisch, J. Hafner, M. Krajci, M. Mihalkovic. Phys. Rev. **B49**, *13*, 8701 (1994).
[12] M. de Boissieu, M. Boudard, B. Hennion, R. Bellisent, S. Kysia, A.I. Goldman, C. Janot, M. Audier. Phys. Rev. Lett. **75**, *1*, 89 (1995).
[13] M. Boudard, M. de Boissieu, A. Letoublon, B. Hennion, R. Bellisent, C. Janot. Europhys. Lett. **33**, *3*, 199 (1996).
[14] M. de Boissieu. Poster contribution at APERIODIC 2000. Nijmengen, Holland (2000).
[15] R. Bellisent, N. Schramchenko. Частное сообщение.