Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Е. А. Амосов, Ю. К. Фавстов, О некоторых общих закономерностях кристаллических и квазикристаллических структур, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2007, выпуск 1(), 178–181

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu513>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.85.73.92

26 апреля 2023 г., 15:10:14

О НЕКОТОРЫХ ОБЩИХ ЗАКОНОМЕРНОСТЯХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ И КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Рассмотрены различные модели описания структуры и поведения твердых тел различной симметрии (как кристаллической, так и квазикристаллической): схема «сдвиг»+«поворот», модель волнового развития процесса и модель построения самоподобных фигур.

Известно, что для обеспечения дальнего порядка кристаллические структуры должны обладать трансляционной симметрией [1]: их кристаллическая решетка может быть построена путем бесконечного повторения в пространстве одного и того же структурообразующего элемента (куба, призмы и т.д.) путем его сдвига вдоль координатных осей. Следствием этого является, например, тот факт, что плоскость может быть покрыта без промежутков и наложений следующими фигурами: квадратами, прямоугольниками, ромбами, равносторонними треугольниками и шестиугольниками (см. рис. 1).

Р и с. 1. Фигуры, покрывающие плоскость без промежутков путем сдвига (трансляции)

Р и с. 2. Переход от покрытия квадратами и прямоугольниками к покрытию треугольниками

Р и с. 3. Покрытие плоскости путем сдвига и поворота равностороннего треугольника

Р и с. 4. Двумерная мозаика Пенроуза – модель квазикристалла

Отметим, что каждую из указанных фигур можно представить в виде комбинации равно-сторонних или равнобедренных треугольников. Ромб может рассматриваться как совокупность двух равнобедренных треугольников, а шести-угольник – как совокупность шести равносто-ронних. Переход от покрытия плоскости квадра-тами и прямоугольниками к покрытию равно-бедренными треугольниками представлен на рис. 2.

Переход от четырехугольников к треуголь-никам приводит к тому, что покрытие плоскости путем только трансляции (сдвига) структурооб-разующего элемента становится невозможной. Как видно из рис. 3, кроме сдвига в двух направ-лениях требуется ещё и поворот равнобедренно-го треугольника вокруг оси, проходящей через одну из сторон треугольника.

Таким образом, приходим к заключению, что плоскость может быть покрыта без проме-жутков и наложений путем выполнения двух операций: сдвига и поворота равнобедренных треугольников. Такой способ заполнения плос-кости хорош тем, что может быть применён и для описания квазикристаллических структур, не обладающих свойством трансляционной сим-метрии. Действительно, из литературы [2, 3] из-вестно, что в модели двумерных квазикристал-лов (мозаике Пенроуза) плоскость может быть заполнена без пустот и перекрытий путем сдвига и поворота ромбами двух видов (см. рис. 4).

Представляя ромб в виде совокупности равнобедренных треугольников, получаем, что в модели квазикристаллов плоскость заполняется путем поворота и сдвига равнобедренных треугольников двух видов, а в модели кристаллов — одного вида. Следовательно, принцип построения как квазикристаллических, так и кристаллических структур (или схема «сдвиг»+«поворот») одинаков, то есть является общим принципом. Отличается лишь количество или форма структурообразующих элементов — равнобедренных (в частности, равносторонних) треугольников.

Можно выделить и другие общие закономерности в твердых телах, обладающих кристаллической и квазикристаллической симметрией. Покажем это на примере сравнения процесса формирования квазикристалла с процессом мартенситного превращения.

Согласно модели мартенситного превращения, предложенной Э. Бейном [4, 5], описание перестройки одной кристаллической структуры в другую требует применения иррациональных чисел. Например, согласно расчетам, выполненным в [4], описание мартенситного превращения ГЦК структуры в ОЦК может быть проведено с помощью иррационального числа K_1 , равного

$$K_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \approx 0,816. \quad (1)$$

А, как отмечено в [2], построение модели квазикристалла также требует применения иррационального числа, известного как «золотое сечение», численно равного

$$K_2 \approx 1,618 \approx 2 \cdot K_1. \quad (2)$$

Кроме того, известно [2], что для построения плоских квазикристаллических структур могут быть использованы ромбы с внутренними углами, равными 36° , 72° , 108° , 144° , или углами, пропорциональными углу $\beta_1 = 36^\circ$. Представляя ромб как совокупность двух равных равнобедренных треугольников, получим, что построение плоских квазикристаллических структур требует использования треугольников с углами, пропорциональными углу $\beta_2 = 18^\circ$. А для описания процесса мартенситного превращения в рамках схемы, предложенной в [4], необходимо применять углы $\beta_3 = 10,5^\circ$ и $\beta_4 = 19,5^\circ$. Сравнивая между собой углы β_1 , β_2 , β_3 , β_4 заметим, что

$$\beta_4 \approx \beta_2, \quad (3)$$

$$\beta_3 \approx 0,618 \cdot \beta_2. \quad (4)$$

Так как число $K_3 = 0,618$ (равное $1/K_2$) является пропорцией «золотого сечения», то в итоге приходим к выводу, что описание и процесса мартенситного превращения, и алгоритма построения квазикристаллической структуры требует применения достаточно близких или пропорциональных чисел, что может быть свидетельством общности механизмов мартенситного превращения и образования квазикристалла.

Отметим также, что и в случае мартенситных превращений, и при образовании квазикристаллов конечные продукты обладают симметрией. Примем во внимание, что, согласно [3], мартенситное превращение является сильно неравновесным процессом с характерными признаками самоорганизации, а наличие осей симметрии 5-го порядка (что характерно для квазикристаллов [2]) также является характерным признаком самоорганизации. Эти факты непосредственно указывают на возможность существования сходных механизмов или общих моделей развития обоих процессов.

Одной из таких моделей, на наш взгляд, могла бы быть волновая модель развития процесса, то есть протекание рассматриваемого процесса можно уподобить распространению волны в той или иной среде. Действительно, согласно идее М. П. Кашенко, выдвинутой им в работе [6], в случае мартенситного превращения происходит образование и распространение в кристаллической решетке волн смещений. В случае же образования квазикристалла, по нашему мнению, также могут быть применены волновые представления.

Например, двумерную модель квазикристалла (или мозаику Пенроуза), по нашему мнению, можно построить по следующему алгоритму. Необходимо выделить некоторую точку А на плоскости и построить вокруг неё звездообразную фигуру из 5 одинаковых ромбов. Вокруг построенной фигуры создать следующую, также звездообразную фигуру из 5 одинаковых комбинаций двух видов ромбов. Этот процесс можно продолжать до бесконечности, и на каждом этапе будет возникать всё более сложная звездообразная фигура (рис. 5).

Иначе говоря, построение двумерной модели квазикристалла можно уподобить распространению на плоскости волны от точечного источника, находящегося на рис. 5 в точке А. Отсюда вытекает, что волновые представления, на наш взгляд, могут быть применены и при моделировании процесса образования квазикристалла.

Правомерность применения волновых представлений подтверждается и тем фактом, что и образование квазикристаллов, и мартенситные превращения протекают при достаточно быстром (резком) охлаждении веществ. Поэтому, на наш взгляд, эти процессы могут быть уподоблены хорошо известному процессу распространения волны по поверхности воды при бросании в неё какого-либо тяжелого предмета, например, камня.

Р и с. 5. Волновое построение двумерной модели квазикристалла

К числу общих закономерностей может быть отнесено и применение различных самоподобных фигур для изучения протекания того или иного процесса. Как было показано выше, мозаику Пенроуза можно рассматривать как самоподобную звездообразную фигуру, строящуюся по определенным правилам. При описании процесса мартенситного превращения также может быть использована фигура, строящаяся по некоторому регулярному алгоритму (см. рис. 6). В методе, развитом Э. Хорбогеном [3], в качестве геометрического аналога при моделировании мартенситного превращения рассматривается треугольный ковер Серпинского, состоящий из α мартенсита и β остаточного аустенита.

Р и с. 6. Моделирование мартенситного превращения с помощью ковра Серпинского

Как видно из рис. 6, геометрическая модель мартенситного превращения (регулярный ковер Серпинского) строится путем бесконечного повторения одной и той же операции.

Интересно отметить, как в указанных выше самоподобных фигурах меняется соотношение структурных элементов. В ковре Серпинского, как видно из рис. 6, отношение числа темных и светлых треугольников составляет 3:1, 9:4, 27:13, 81:40, 243:121 и т.д. На каждом шаге построения ковра число темных треугольников d_n и число светлых треугольников l_n возрастают следующим образом:

$$d_n = 3 \cdot d_{n-1} + 1, \quad d_1 = 0, \quad (5)$$

$$l_n = 3 \cdot l_{n-1}, \quad l_1 = 1. \quad (6)$$

Из выражений (5) и (6) следует, что с ростом числа шагов отношение l_n/d_n стремится к нулю.

В двумерной же модели квазикристалла, как видно из рис. 5, отношение числа широких и узких ромбов в каждой звездообразной фигуре составляет 1:1, 4:3, 7:5, 3:2 и т.д. Известно [2], что в бесконечной мозаике Пенроуза рассматриваемое отношение точно равно величине «золотого сечения» $K_2 \approx 1,618$. Следовательно, с ростом звездообразной фигуры отношение числа широких и узких ромбов в каждой фигуре стремится к пределу K_2 , являющемуся иррациональным числом.

Из вышеизложенного вытекает предположение о том, что самоподобные фигуры, применяющиеся при описании кристаллических структур, могут быть связаны с рациональными числами, а при описании квазикристаллических — с иррациональными.

Таким образом, строение кристаллов и квазикристаллов, как и их поведение, должно, безусловно, подчиняться некоторым общим закономерностям, выявление которых может быть весьма продуктивным способом исследования различных видов твердого тела.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Шаскольская М. П.* Кристаллография. М.: Высш. шк., 1984. 375 с.
2. *Стивенз П. В., Гуолдман А. И.* Структура квазикристаллов // В мире науки, 1991. № 6. С. 14–21.
3. *Иванова В. С. и др.* Синергетика и фракталы в материаловедении. М.: Наука, 1994. 383 с.
4. *Фавстов Ю.К.* Кристаллография мартенситного превращения // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер.: Техн. науки, 2004. Вып. 20. С. 105–109.
5. *Новиков И. П.* Теория термической обработки металлов. М.: Металлургия, 1986. 480 с.
6. *Кащенко М. П.* Волновая модель роста мартенсита при α - γ -превращении в сплаве на основе железа. Екатеринбург, 1993. 224 с.

Поступила 29.03.2006 г.