Февраль 2002 г. УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК *Том 172, № 2*

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Объединенная научная сессия Отделения общей физики и астрономии Российской академии наук и Объединенного физического общества Российской Федерации

(26 сентября 2001 г.)

26 сентября 2001 г. в конференц-зале Физического института им. П.Н. Лебедева РАН состоялась Объединенная научная сессия Отделения общей физики и астрономии Российской академии наук и Объединенного физического общества Российской Федерации. На сессии были заслушаны доклады:

1. **Галиулин Р.В.** (Институт кристаллографии РАН, Москва). *Кристаллографическая картина мира*.
2. **Лозовик Ю.Е.** (Институт спектроскопии РАН, Троицк). *Структура и плавление классических и квантовых кристаллов*.
3. **Векилов Ю.Х.** (Московский государственный институт стали и сплавов, Москва). *Электронная проводимость икосаэдрических квазикристаллов*.

Краткое содержание докладов 1, 3 публикуется ниже.

PACS numbers: 05.45.Df, **61.46.+w**, 61.50.Ah

Кристаллографическая картина мира

Р.В. Галиулин

1. Введение

Свою статью об устойчивости простых веществ [1] Ф. Дайсон начинает с извинения за то, что доказательство чрезвычайно длинно, сложно и некрасиво. Поэтому необходимо, чтобы кто-нибудь другой рассмотрел всю проблему в целом с иной, новой точки зрения. Предлагаемая работа основана на концепции, что минимума энергии вещество достигает, кристаллизуясь. Эта концепция следует из рассуждений Р. Фейнмана: если атомы где-то разместились так, что их расположения отвечают самой низкой энергии, то в другом месте атомы создадут такое же расположение [2]. Последние достижения геометрии и кристаллографии [3, 4] позволяют это рассуждение сделать геометрически строгим и распространить его на любые дискретные состояния вещества (кварки, нейтроны, атомы, молекулы, супергалактики).

2. Газ Делоне

В 1924 г. выдающийся геометр Б.Н. Делоне представил оригинальный метод исследования дискретных множеств [5], который впоследствии был назван методом пустого шара Делоне. Рассмотрим систему точек (систему Делоне [6,7]), удовлетворяющую двум требованиям:

1) r-дискретность — имеется кратчайшее расстояние между точками системы Делоне;

2) R-однородность — пространство покрывается шарами радиуса R, описанными вокруг всех точек системы Делоне.

В общем виде системы Делоне могут быть приняты за модель идеального газа — газа Делоне. Если $r = \text{const}$ для всех точек системы (т.е. кратчайшее расстояние между всеми точками одно и то же), то такие системы Делоне представляют все расположения центров жестких шаров в шаровых упаковках. Несмотря на общность требований, системы Делоне весьма содержательны с математической точки зрения и весьма естественны с точки зрения физики. Приведем некоторые общие свойства систем Делоне.

Лемма 1. $r \leqslant 2R$.

Заметим, что центры атомов большинства реальных атомных структур образуют системы Делоне, для которых $r \geqslant R$.

Лемма 2. Для построения многогранника Дирихле–Вороного любой точки системы Делоне достаточно точек этой системы, попавших в шар радиуса $2R$, описанный вокруг этой точки, а диаметр многогранника не превосходит величины R.

Лемма 3. Система Делоне $2R$-связна, т.е. любые две точки системы можно соединить ломаной, вершинами которой являются точки системы, а звенья не превосходят по длине $2R$.

3. Конденсат Делоне

Рассмотрим теперь шар, не содержащий в себе точек системы Делоне. Будем раздувать его до тех пор, пока он не коснется какой-либо точки системы Делоне. Увеличивая радиус пустого шара так, чтобы на его

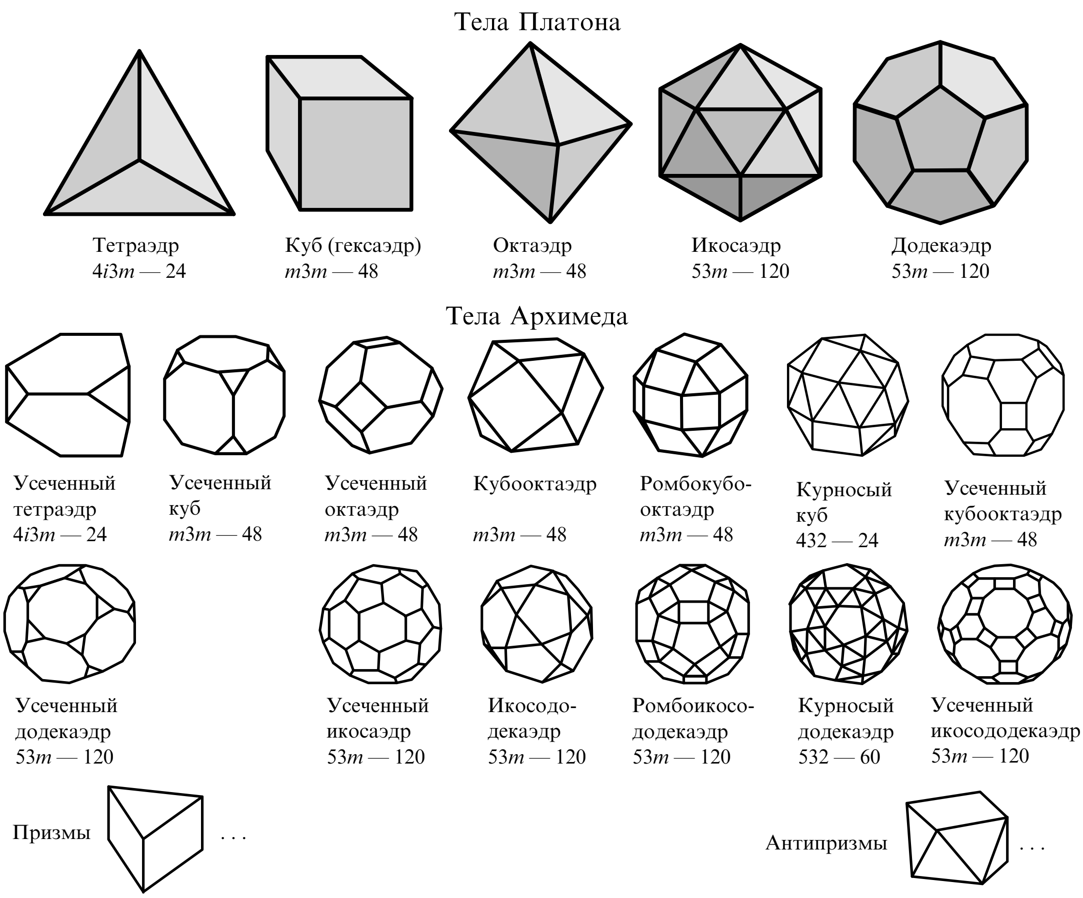

Рис. 1. Правильные и полуправильные изогоны.

поверхности оставались точки, которых он коснулся, получим, наконец, трехмерный комплекс точек этой системы. Выпуклая оболочка, натянутая на эти точки, называется многогранником Делоне. Все такие многогранники образуют разбиение, которое называют триангуляцией Делоне. Триангуляция Делоне в последнее время становится одним из главных методов вычислительной геометрии и вычислительной физики [8].

Лемма 4. Для любой системы Делоне, расположенной на сфере, триангуляция Делоне есть реберная сетка многогранника, вписанного в сферу.

Лемма 5. Если триангуляция Делоне для конечной системы точек на двумерной сфере комбинаторно правильная (т.е. какие бы две точки ни взять, существует комбинаторно-топологическое преобразование, переводящее эти точки друг в друга и всю систему в себя), то она комбинаторно эквивалентна какому-либо из тел Платона, тел Архимеда и двух бесконечных последовательностей призм и антипризм (рис. 1).

Лемма 6. Триангуляция Делоне любой орбиты точек на евклидовой плоскости комбинаторно эквивалентна какой-либо из сеток Кеплера, т.е. изогонально правильных сеток, составленных из правильных многоугольников.

Физическая суть триангуляции Делоне состоит в том, что она содержит все наиболее важные связи в атомных структурах — аморфных и кристаллических [9]. Заметим также, что радиус r для атомных структур (аморфных и кристаллических) вычисляется экспериментально, а сверху он ограничен соотношением леммы 1. Триангуляция Делоне однозначна, а ее ребра не превосходят по длине $2R$. При добавлении новой точки в систему Делоне или при удалении точки из системы реберная сетка триангуляции меняется только в небольшой окрестности этой точки. По этим причинам триангуляция Делоне становится мощным методом изучения дискретного вещества. Она однозначно характеризует топологию его связей.

4. Идеальный кристалл

Приемлемое для физики строгое определение идеального кристалла в настоящее время возможно только на основе систем Делоне.

Возьмем точку в произвольной системе Делоне и соединим ее со всеми остальными точками этой системы. Такая конструкция называется глобальной звездой данной точки в данной системе Делоне. В общем случае глобальные звезды для разных точек в данной системе Делоне разные. Система Делоне называется правильной (идеальным кристаллом), если глобальные звезды Делоне всех ее точек конгруэнтны. Иными словами, каждая точка системы равно окружена всеми другими ее точками. Из равенства окружения точек следует, что какие бы две из них ни взять, существует преобразование, переводящее первую точку во вторую и всю систему в себя. Полная совокупность таких преобразований образует группу, которая и называется федоровской или пространственной кристаллографической группой. Геометрически федоровская группа определяется как дискретная группа с конечной фундаментальной областью [10]. (Фундаментальной областью группы называется часть пространства, внутри которой нет точек, эквивалентных по преобразованиям группы, но любая точка пространства эквивалентна точке из этой совокупности.) Имеется 219 таких абстрактно различных групп [11]. Если же учитывать энантиоморфные пары, то получается 230 федоровских групп. Основные унитарные представления федоровских групп приведены в [12].

Таким образом, идеальным кристаллом называется любая совокупность атомов или конечных групп атомов, эквивалентных по федоровской группе. Кристалл определяется через федоровскую группу. Заметим, что федоровские группы n-мерны и существуют во всех пространствах постоянной кривизны [13].

С точки зрения законов сохранения [14], кристаллографической симметрии соответствует неразличимость атомов. В кристалле и только в нем атомы могут быть абсолютно неотличимы.

5. Локальная теория роста кристаллов

Однако вышеприведенное определение идеального кристалла не вскрывает причин его зарождения и роста, поскольку нет физических причин, позволяющих каждому атому до бесконечности контролировать его окружение другими атомами. Поэтому было найдено другое, локальное, определение правильности в духе фейнмановских рассуждений [3, 15].

Теорема Штогрина. Если каждая точка системы Делоне на евклидовой плоскости ра́вно окружена другими ее точками в круге радиуса $4R$, то такая система Делоне правильная, т.е. является идеальным двумерным евклидовым кристаллом.

В другой, более удобной для изучения процессов конденсации вещества формулировке локальная теорема была передоказана Л. Данцером [16].

Теорема Данцера. Если из конечного числа точек и конечного числа условий, наложенных на их продолжение, система Делоне восстанавливается однозначно, то такая система является идеальным кристаллом.

Из теоремы Данцера следует, что утверждение о том, что квазикристаллы как узоры Пенроуза — не игра ума, а экспериментально обнаруженные объекты, равносильно утверждению, что можно точно измерить длину диагонали квадрата. Однако квазикристаллы можно рассматривать и как идеальные кристаллы пространства Лобачевского [17].

6. Велика ли щель между хаосом и порядком

В мире существует только два предельных и практически недостижимых для материи состояния: хаос (газ Делоне) и идеальный кристалл (правильная система Делоне). Все остальные состояния дискретной и однородной материи можно рассматривать как промежуточные между этими двумя. Если вещество получает такое количество энергии, которое способно его разрушить, оно смещается к хаосу, в противном случае — тратит эту энергию на упорядочение. А идеальный порядок (его называют еще дальним порядком) может быть только в кристаллах. "Кристаллы — это смерть", — отмечал создатель современной кристаллографии Е.С. Федоров [18], и эта мысль аналогична рассуждениям Фейнмана [2].

Рассмотрим теперь, насколько велика щель между идеальным кристаллом и хаосом в случае евклидовой плоскости. Из приведенных выше рассуждений следует, что если каждая частица дискретной однородной материи будет одинаково окружена в круге радиуса $4R$, то получится идеальный кристалл. При уменьшении радиуса этого окружения начнут появляться двойники, т.е. системы Делоне, обладающие неоднозначным продолжением из выделенного конечного множества точек. При радиусе одинакового окружения меньше, чем $2R$, появятся системы Делоне, у которых островки одинакового окружения станут одномерными, что и ведет к хаосу. Таким образом, для критерия одинакового окружения (могут быть и другие критерии) щель между хаосом и идеальным кристаллом не больше $2R$.

Поскольку хаос строго описать нельзя, то кристаллы являются своего рода реперами для описания других состояний вещества. В частности, имеется надежда описать структуры жидкостей, как систем Делоне, у которых при малых сдвигах частиц меняется топология триангуляции Делоне.

В 1988 г. М.И. Штогрин доказал [19], что имеются правильные разбиения евклидовой плоскости на планигоны, в которых центры действия этих планигонов образуют хаотические системы. Результат Штогрина до сих пор не осмыслен ни математиками, ни физиками.

7. Топологическая правильность

В 1916 году А.В. Шубников поставил следующую задачу [20]. Пусть на плоскости одинаковые атомы имеют равное конечное число связей друг с другом. Сколько разных двумерных кристаллических структур при этом получится? Оказалось, что имеется только 11 комбинаторно различных типов, и каждый из этих типов можно представить сеткой Кеплера [21]. Таким образом, для возникновения двумерного кристалла не имеют значения длины связей между атомами и величины углов между этими связями; необходимо лишь, чтобы в вершинах сетки сходилось одинаковое число связей. Потом эти связи и углы имеют возможность, не разрываясь, выровняться таким образом, что узлы этой сетки образуют правильную систему Делоне. Следовательно, значения метрических параметров не играют существенной роли в двумерном кристаллообразовании. Для трехмерного пространства этот вопрос пока остается открытым.

8. Орбифолды

Точное представление независимой области федоровской группы состоит в том, что эквивалентные между собой точки границ "склеивают" между собой. Так в топологии появляются компактные, локально евклидовы многообразия (орбифолды) [22, 23]. Но такая склейка может иметь и физический смысл — независимую область можно так склеить по граничным точкам, что все свободные химические связи окажутся скомпенсированными. Такой орбифолд может быть принят за модель нанокристалла. Свободные атомы тоже можно рассматривать как компактные многообразия.

Релаксация огромных напряжений может осуществляться путем распада структуры кристалла на нанокристаллы [24]. Распад кристалла на нанокристаллы возможен как при понижении температуры, так и при повышении давления. Распад структуры может происходить и отдельными нанокристаллами (нульмерный распад), и отдельными, линейно связанными нанокристаллами (одномерный распад), и отдельными слоями (двумерный распад). Разбиение кристалла на иерархическую систему блоков (каждый блок снова разбивается на блоки, которые в совокупности составляют фрактал) —

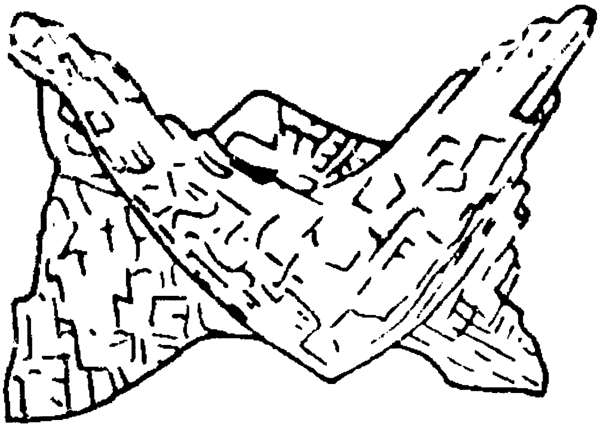

Рис. 2. Кристалл доломита.

это тоже переход его структуры в нанокристаллическое состояние. При росте кристалла нанокристалл (отдельный нейтральный атом или совокупность атомов, входящих в независимую область структуры), размыкая замкнутые на себя связи и соответствующие связи на поверхности затравки, плавно встраивается в его структуру.

Заряд орбифолда нейтрален, что в совокупности с очень малыми размерами (одна или несколько независимых областей) способствует "всюдности" (в смысле Вернадского) таких образований. Тонкодисперсные минералы, по-видимому, и существуют в виде орбифолдов. Но при достижении определенных размеров орбифолд уже не в состоянии самозамкнуться, и тогда начинается их агрегация (не обязательно в кристалл).

9. Неевклидовы структуры

Тяготение минералов к геометрии Лобачевского наглядно проявляется на седлообразных кристаллах доломита (рис. 2). Их поверхность можно рассматривать как кусочек плоскости Лобачевского. Но вся эта плоскость не может быть вложена в евклидово пространство без напряжений [25], которые и превращают это образование в доломитовую муку — весьма естественную фазу для доломита.

Первым чисто сферическим кристаллом следует считать фуллерен C_{60} — *двумерный сферический алмаз* (графит — *двумерный евклидов алмаз*) [26]. Поскольку пространства постоянной кривизны, в которых только и могут расти кристаллы, локально евклидовы, до определенных размеров (своих для каждого вида) кристалл может расти сообразно своей внутренней геометрии. Далее из-за неоднородности реального пространства (как это следует из общей теории относительности) или из-за неевклидовости внутренней геометрии в растущем кристалле появляются напряжения.

Чтобы избавиться от напряжений, кристалл организует дефекты: двойникуется, делает пропуски, захватывает чужеродные атомы, сгибает винтообразно плоскость роста (винтовая дислокация), обрывает плоскости роста (краевая дислокация), распадается на блоки и даже изгибает пространство [27]. Совершенные кристаллы алмаза всегда сильно напряжены. По этой причине в их структуре всегда имеются атомы азота.

Заметим также, что зоны роста в кристалле считаются его дефектами. Однако на основе римановой геометрии была построена теория конечного зонарного кристалла [28].

10. Фракталы

Существует мнение, что фрактальными свойствами могут обладать только дефектные кристаллы [29]. Однако неоднозначность выбора границ фундаментальной области федоровских групп (исключая кокстеровские группы) допускает и фрактальные границы. Иными словами, идеальный кристалл может быть составлен из частиц с фрактальными границами. В рамках поиска новых подходов к задаче высокотемпературной сверхпроводимости движение электрона в кристалле было задано самым простым нелинейным уравнением, обладающим периодичностью [30, 31]. *Аттракторами* (точками притяжения) при таком движении будут точки одномерной решетки (рис. 3). На комплексной плоскости узлы этой решетки являются целочисленными точками действительной оси. Чтобы визуально проследить это движение, всем точкам, находящимся в одной области Дирихле узла одномерной решетки приписывают одинаковый цвет, который точки сохраняют при движении. Так получается фрактал, состоящий из гантелевидных областей. При соответствующем увеличении любой граничной между цветами точки картина будет повторяться. Это свойство фрактала называется масштабной инвариантностью. В центре каждой из таких гантелей располагается область хаоса — места, в которых экспериментальными методами в принципе ничего нельзя установить.

11. Кристаллоподобная модель Вселенной

Астрономами замечено, что спиральные галактики с точностью до второстепенных деталей, обладают осями второго порядка [32]. Если бы наш мир был двумерным, то из этого следовало бы, что центры галактик во Вселенной образуют правильную систему точек. В случае трехмерного евклидова пространства все допустимые расположения осей второго порядка известны. Но если оси второго порядка галактик соответствуют одной из федоровских групп пространства Лобачевского, то очень трудно увидеть эту правильность. Она будет казаться просто хаосом. Поэтому не исключена возможность, что обозреваемая часть Вселенной является фрагментом кристаллической структуры из пространства Лобачевского [33]. В настоящее время имеется уже много публикаций, связанных с

Рис. 3. Фрактал.

кристаллоподобной моделью Вселенной (см., например, [34]).

Заметим теперь, что нейтроны в нейтронной звезде тоже образуют кристаллы. Продолжая эту аналогию, можно ожидать, что если нейтронная звезда схлопнется, т.е. раздавит нейтроны, то получится кристалл, сложенный из кварков — черная дыра. Гравитационный коллапс черной дыры (как кристалла), по-видимому, и приводит к Большому взрыву. Возможно, об этом свидетельствует анизотропия реликтового излучения, которая может помочь определить симметрию взорвавшегося кристалла [35].

Список литературы

1. Дайсон Ф, в кн. *Устойчивость и фазовые переходы* (М.: Мир, 1973) с. 17
2. Фейнман Р, Лэйтон Р, Сэндс М *Фейнмановские лекции по физике* Т. 7 (М.: Мир, 1977)
3. Делоне Б Н, Долбилин Н П, Штогрин М И, Галиулин Р В *ДАН СССР* **227** 19 (1976)
4. Галиулин Р В *Кристаллография* **43** 366 (1998)
5. Delaunay B N, in *Proc. Intern. Mathematical Congress, Toronto, 1924* (Toronto: Univ. of Toronto Press, 1928) p. 695
6. Галиулин Р В *Кристаллография* **25** 901 (1980)
7. Галиулин Р В *Кристаллографическая геометрия* (М.: Наука, 1984)
8. Агиштейн М Э, Мигдал А А, в кн. *Эксперимент на дисплее. Первые шаги вычислительной физики* (Ред.-сост. Р З Сагдеев) (М.: Наука, 1989) с. 141
9. Медведев Н Н *Метод Вороного – Делоне в исследовании структуры некристаллических систем* (Новосибирск: Изд-во СО РАН НИЦ ОИГГМ, 2000)
10. Винберг Э Б, Шварцман О В "Дискретные группы движений пространств постоянной кривизны", в сб. *Итоги науки и техники. Сер. Современные проблемы математики. Фундаментальные направления* Т. 29 *Геометрия-2* (М.: ВИНИТИ, 1988) с. 147
11. Галиулин Р В *Природа* (12) 20 (1991)
12. Фаддеев Д К *Таблица основных унитарных представлений федоровских групп* (М.: ИАН, 1961)
13. Galiulin R V *Sci. Spectra* (14) 54 (1998)
14. Нетер Э, в кн. *Вариационные принципы механики* (М.: Физматгиз, 1959) с. 611
15. Штогрин М И, Дисс. ... докт. физ.-мат. наук (М.: МИАН, 2000)
16. Danzer L, в сб. *Тез. Межд. Федоровской конференции, посвященной 100-летию вывода федоровских групп* (Л.: Горный институт, 1991) с. 47
17. Антонюк П Н, Галиулин Р В, Макаров В С *Природа* (7) 28 (1993)
18. Федоров Е С *Изв. С.-Петерб. биол. лабор.* **7** (1) 25 (1906); **7** (2) 9 (1906)
19. Штогрин М И *Мат. заметки* **44** 262 (1988)
20. Шубников А В *Изв. Имп. АН. Сер. 6* **10** (9) 755 (1916)
21. Делоне Б Н *Изв. АН СССР. Сер. Матем.* **23** 365 (1959)
22. Никулин В В, Шафаревич И Р *Геометрии и группы* (М.: Наука, 1983)
23. Фоменко А Т *Наглядная геометрия и топология* (М.: Изд-во МГУ, 1998)
24. Akchurin M Sh, Regel V R *Chem. Rev.* **XXX** 1 (1998)
25. Позняк Э Г, Попов А Г *Уравнение синус-Гордона: геометрия и физика. Математика и кибернетика* (М.: Знание, 1991)
26. Галиулин Р В *Материаловедение* **6** 2 (1999)
27. Кузьменков Л С, в кн. *Процессы реального кристаллообразования* (Отв. ред. Н В Белов) (М.: Наука, 1977) с. 221
28. Rudnev S V, in *Computing Math. Appl.* Vol. 16 (5 – 8) (1988) p. 597
29. Иванова В С и др. *Синергетика и фракталы в материаловедении* (М.: Наука, 1994)
30. Антонюк П Н, Галиулин Р В *Доклады РАН* **341** 610 (1995)
31. Галиулин Р В *Наука и жизнь* (8) 59 (1995)
32. Ефремов Ю Н *Очаги звездообразования в галактиках* (М.: Наука, 1989)
33. Ivanenko D D, Galiulin R V, in *Problems on High Energy Physics and Field Theory: Proc. XVII Workshop Dedicated to the 140th Birth Anniversary of Henri Poincare Protvino, 1994* (Eds A P Samokhin, G L Rcheulishvili) (Protvino: State Research Centre of Russia, Institute of High-Energy Physics, 1995) p. 180
34. Einasto J et al. *Nature* **385** 139 (1997)
35. Шаров А С, Новиков И Д *Человек, открывший взрыв Вселенной: Жизнь и труд Эдвина Хаббла* (М.: Наука, 1989)

PACS numbers: 61.44.Br, 71.23.Ft, 72.15.Rn

Электронная проводимость икосаэдрических квазикристаллов

Ю.Х. Векилов

Квазикристаллы характеризуются апериодическим атомным дальним порядком и симметрией вращения, запрещенной для периодических структур (наличие осей вращения пятого, восьмого, десятого и двенадцатого порядков). Первое отличает квазикристаллы от аморфных объектов (стекол), второе — от кристаллов и несоизмеримых структур. Квазикристаллы обычно являются сплавами металлических элементов, но их свойства отличаются от свойств кристаллических и аморфных металлических фаз. Как и у металлов, у квазикристаллов имеются конечный электронный вклад в теплоемкость, но он примерно на порядок ниже, чем определяемый в приближении почти свободных электронов (псевдощель и, соответственно, низкая плотность состояний $N(E_{\mathrm{F}})$ на уровне Ферми). Низкая плотность состояний на уровне Ферми, однако, не может объяснить аномально малую низкотемпературную электропроводность квазикристаллов. Сопротивление квазикристаллов уменьшается с ростом температуры и возрастает с увеличением структурного порядка и отжига дефектов. Отношение сопротивлений $\mathcal{R} = \rho(4{,}2\ \mathrm{K})/\rho(300\ \mathrm{K})$ у большинства стабильных квазикристаллов порядка нескольких единиц, а у икосаэдрического сплава i-Al – Pd – Re, для совершенных образцов которого $\rho(4{,}2\ \mathrm{K}) \geqslant 1$ ом см, $\mathcal{R}$ достигает 200 и выше в зависимости от совершенства образца. Проводимость квазикристаллов представляется в виде $\sigma = \sigma(0) + \Delta\sigma(T)$, где $\sigma(0)$ — проводимость при нулевой температуре, зависящая от структурного беспорядка, а $\Delta\sigma(T)$ — температурнозависящая часть, которая также может зависеть от структурного беспорядка. Практически для всех квазикристаллов зависимость от температуры степенна́я, $\Delta\sigma(T) \sim T^{\beta}$, где показатель β меняется в пределах $1/\sqrt{2} \leqslant \beta \leqslant 1{,}5$ в интервале температур от сверхнизких до 700 – 1000 К. При высоких температурах чаще всего наблюдается линейная зависимость. Успешное объяснение степенно́й температурной зависимости проводимости и ее величины при $T = 0$ К было дано в работе Буркова и др. [1] в модели поверхности Ферми с большим числом электронных и дырочных карманов.

Недавние эксперименты на совершенных квазикристаллах i-Al – Pd – Re, однако, показали, что при $T \leqslant 10$ К проводимость следует закону Мотта

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left[-\left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/4}\right],$$

описывающему прыжковую проводимость с переменной длиной прыжка. Это означает, что объект находится в состоянии изолятора (ферми-стекла), когда плотность состояний на уровне Ферми конечна, а электронные состояния локализованы. Локализация электронов играет важную роль в низкотемпературном электронном транспорте для аморфных сплавов, гранулированных металлических пленок и легированных полупроводников. Для этих