

КОНКУРЕНЦИЯ МАСШТАБОВ КАК МЕХАНИЗМ (КВАЗИ)КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Р.Е. Рыльцев^{1,3}, Б.Н. Клаумов², Н.М. Щелкачев³

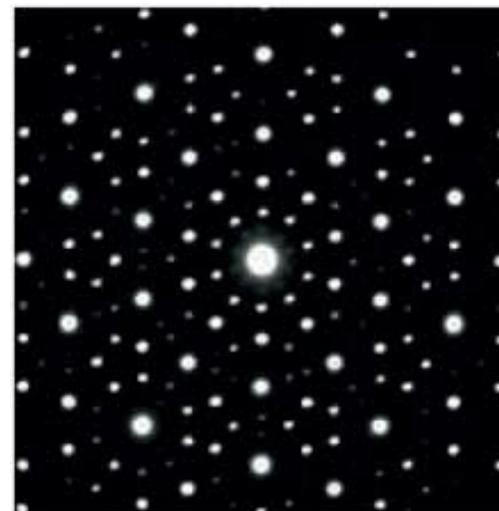
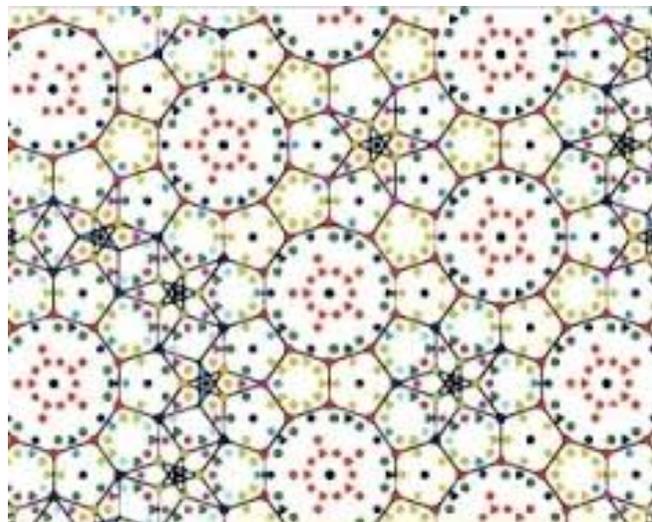
1 – Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург

2 – Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

3 – Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН, Москва

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ:
Гранты № 14-13-00676, 14-12-01185*

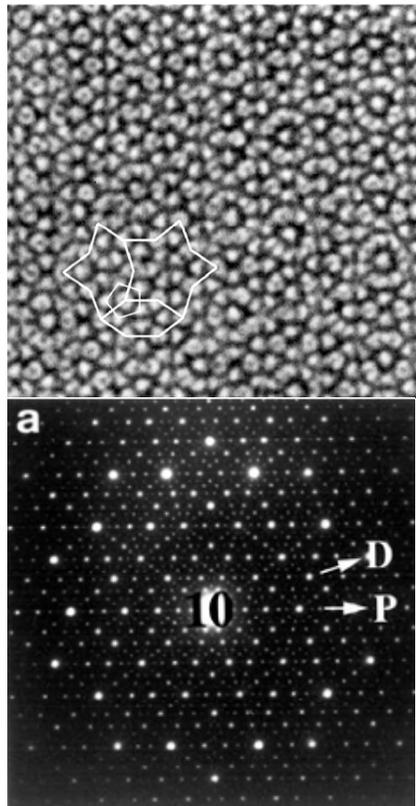
Квазикристалл — твёрдое тело, характеризующееся симметрией, запрещённой в классической кристаллографии, и наличием дальнего порядка. Обладает наряду с кристаллами дискретной картиной дифракции.



D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. Cahn, PRL **53**, **20** (1984)

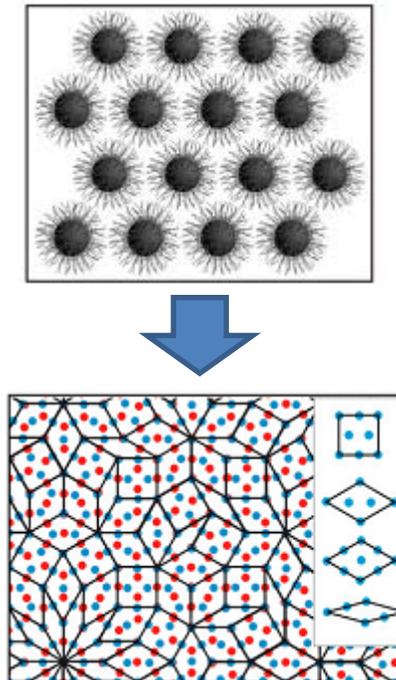
Квазикристаллизация в системах различной природы

Металлические сплавы



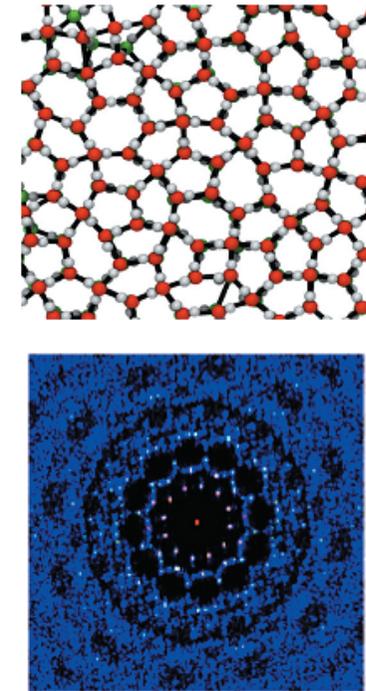
X. By et.al., Phil. Mag. Lett.,
74, 247 (1996)

Мягкая материя



S. Fisher et. al,
PNAS **108**, 1810 (2011)

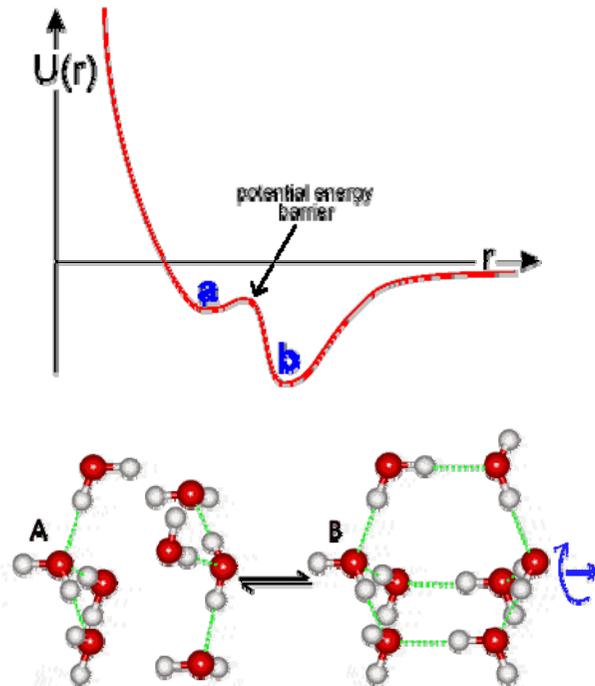
Вода (в конфайнменте)



J.C. Johnston et. al,
J. Chem. Phys **133**,
154516 (2010)

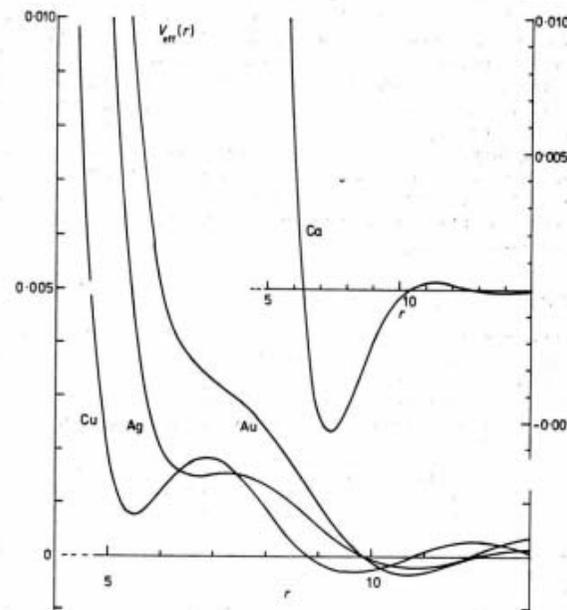
Мультимасштабность – универсальное свойство

Эффективный потенциал для воды



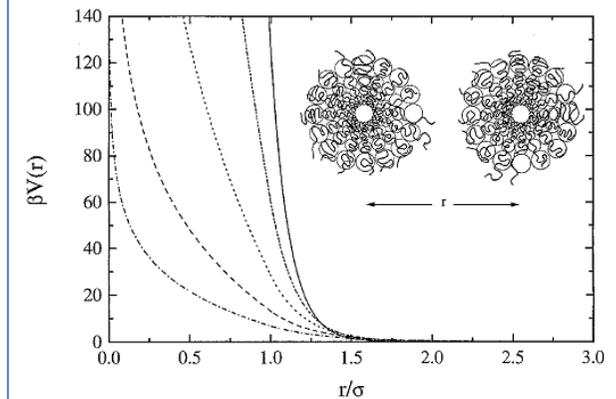
O. Mishima and H.E. Stanley
Nature, 396, 329 (1998)

Эффективные потенциалы для металлов



J.K. Lee,
Interatomic Potentials and
Crystalline Defects, 1981

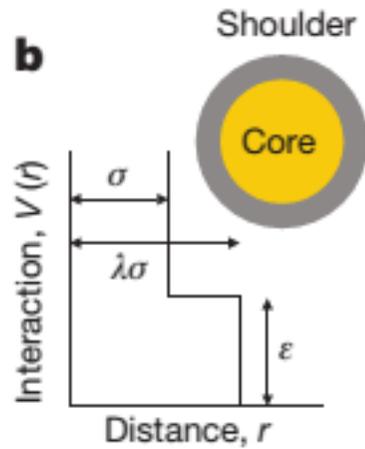
Эффективные потенциалы для коллоид-полимерных систем



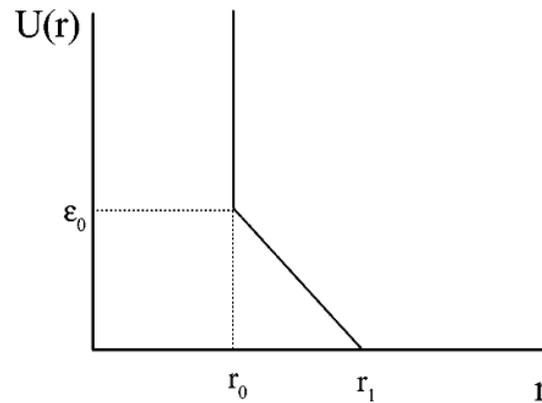
C. Likos, H. Lowen et. al.
PRL 80, 4450, (1998)

Моделирование квазикристаллов

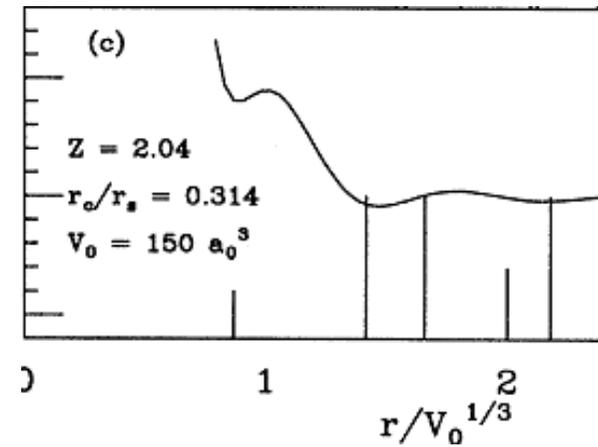
Dotera, Nature 2014



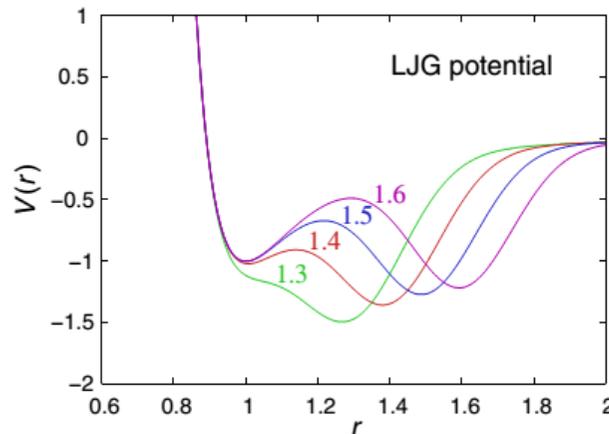
Jagla, PRE 1998



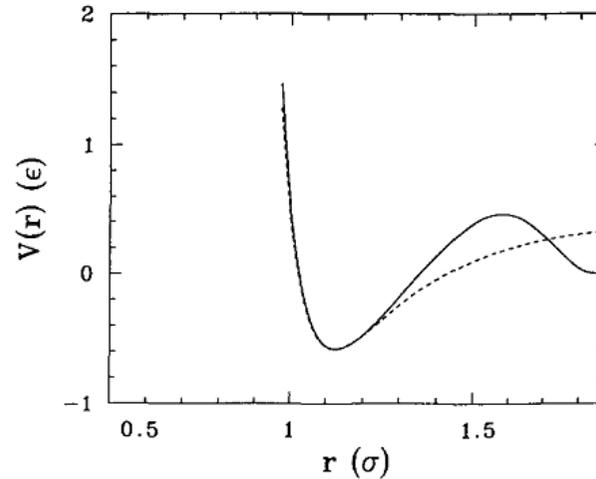
Smith, PRB 1991



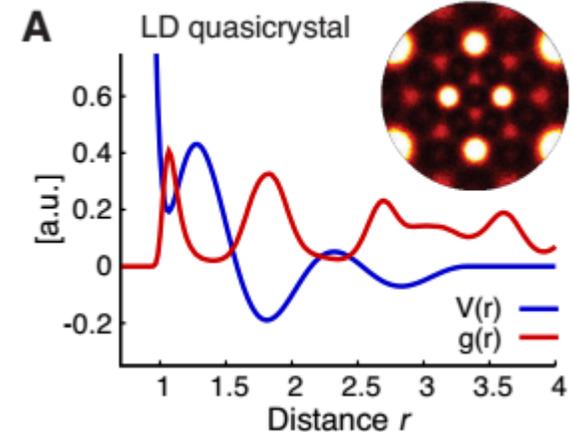
Engel, PRL 2007



Dzugutov, PRL 1993

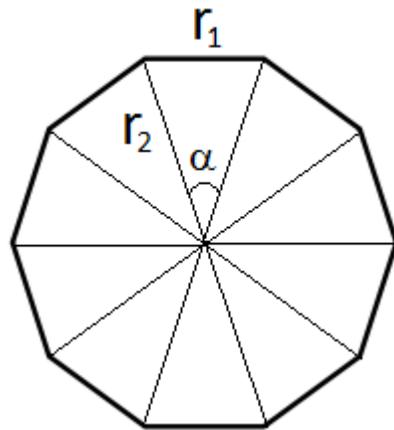


Engel, Nature 2015



Стабильность квазикристаллов

2D



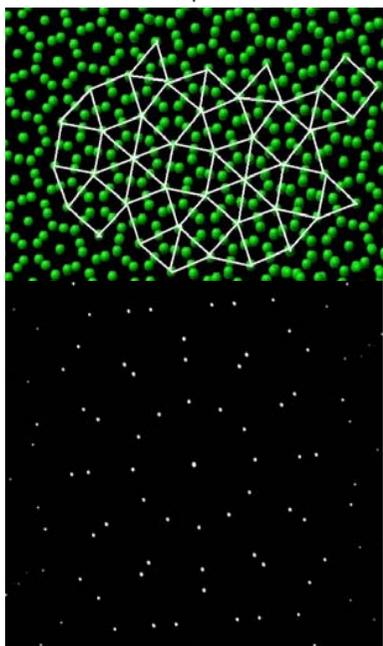
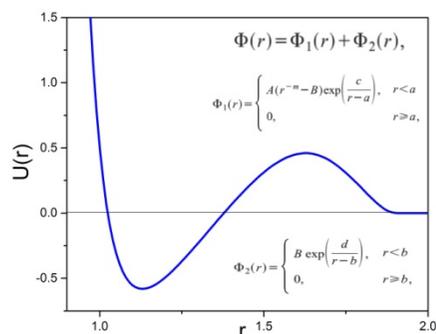
$$\frac{r_2}{r_1} \approx 2 \cos\left(\frac{\pi}{n}\right)$$

3D

???

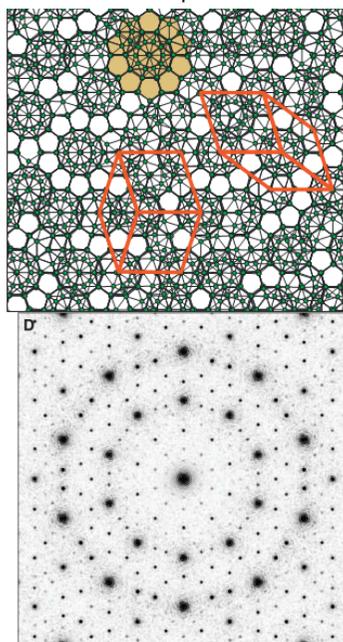
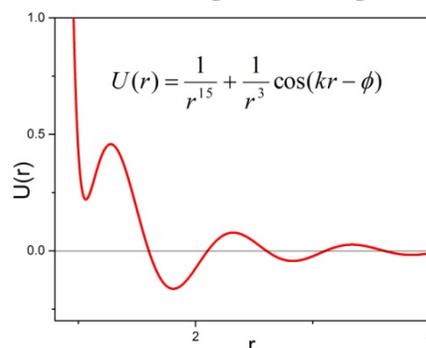
Однокомпонентные 3D квазикристаллы

Додекагональный (12-fold)



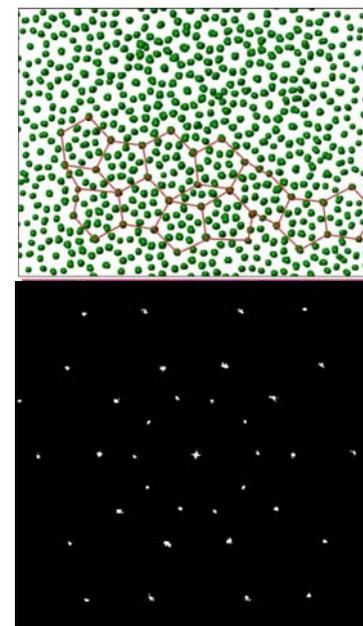
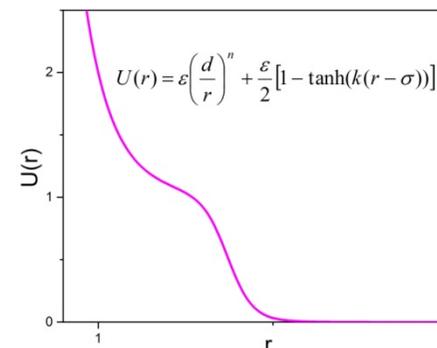
M. Dzugutov,
PRL 70, 2924 (1993)

Икосаэдрический (5-fold)



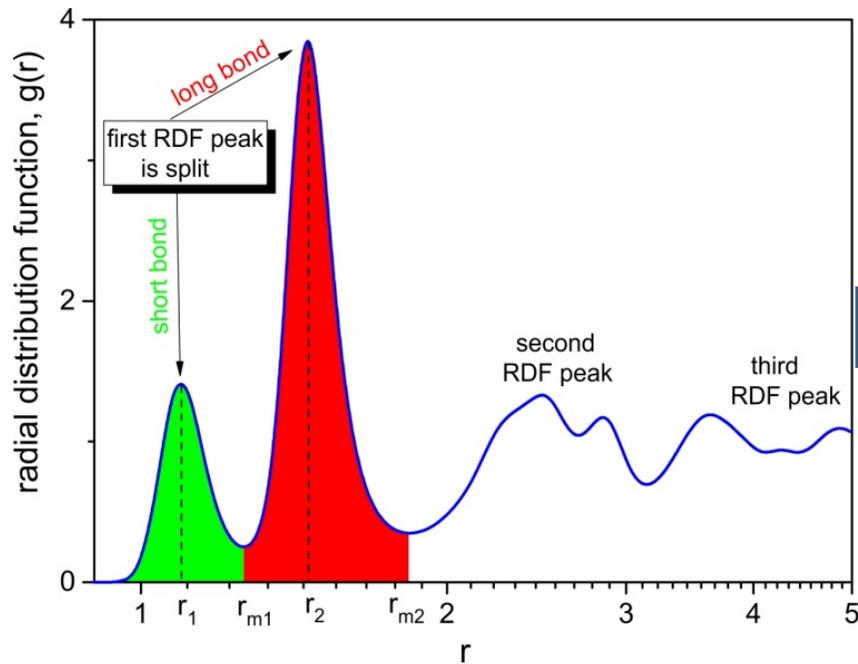
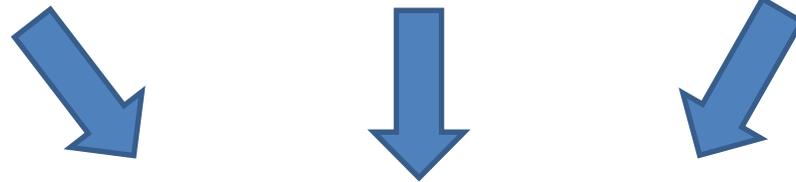
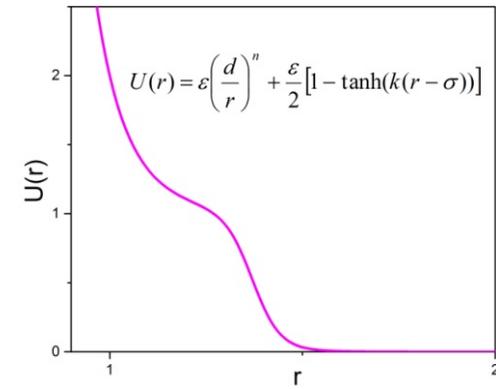
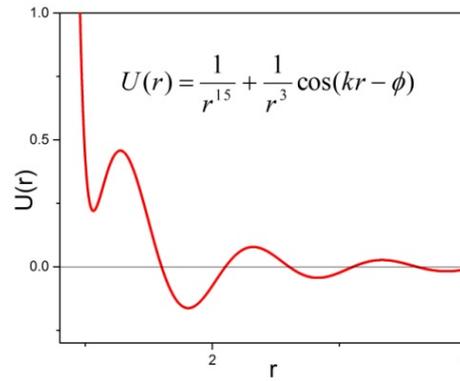
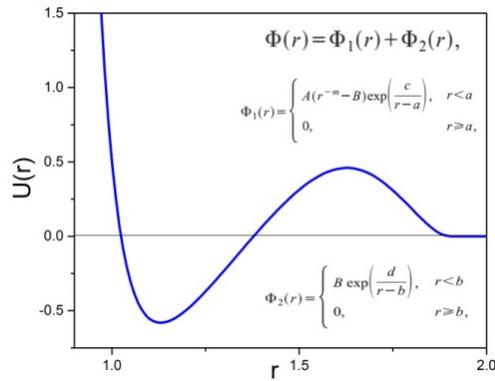
M. Engel et. al.,
Nature Mat., 14, 109 (2015)

Декагональный (10-fold)



R. Rytsev et. al.,
Soft Matter, 11, 6991 (2015)

Стабильность 3D квазикристаллов



Эффективные параметры

$$\lambda = \frac{r_2}{r_1}$$

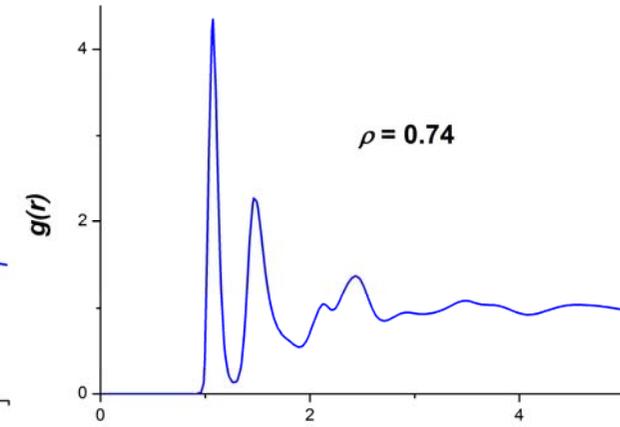
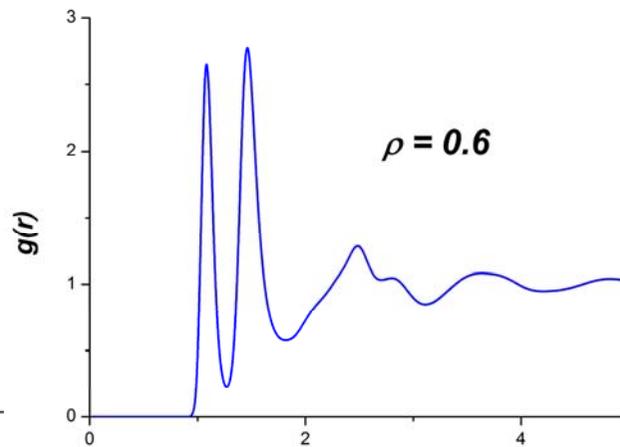
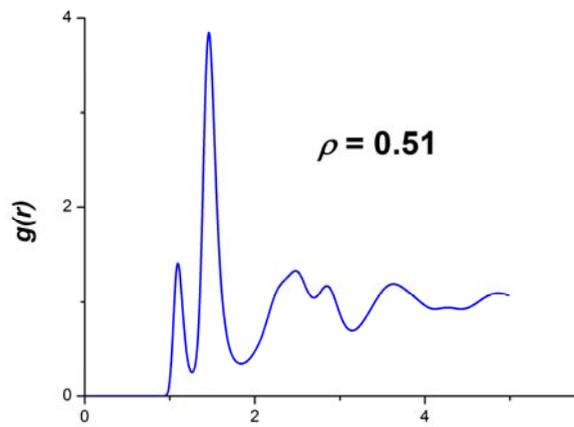
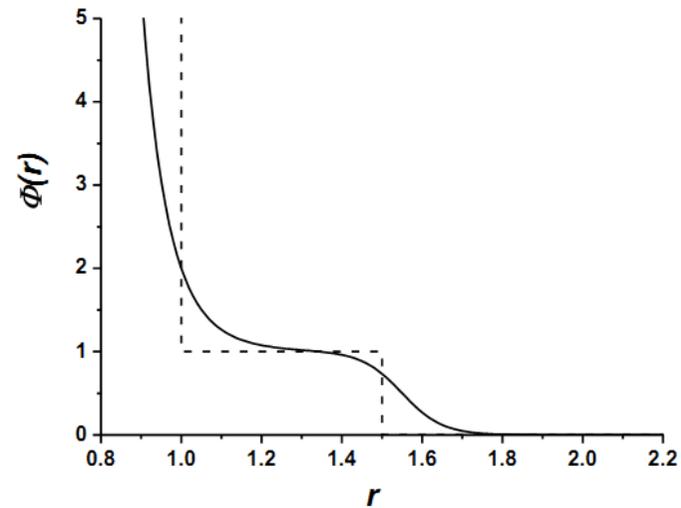
$$\phi = \frac{n_1}{n_1 + n_2}$$

ВЫВОДЫ

- 1. Квазикристаллический порядок может формироваться в простых однокомпонентных системах с чисто отталкивающим (soft-matter like) взаимодействием.**
- 2. Образование аксиально симметричных квазикристаллов и некоторых кристаллических фаз может быть эффективно предсказано посредством двух универсальных (потенциал независимых) безразмерных параметров, определяемых структурой жидкой фазы.**

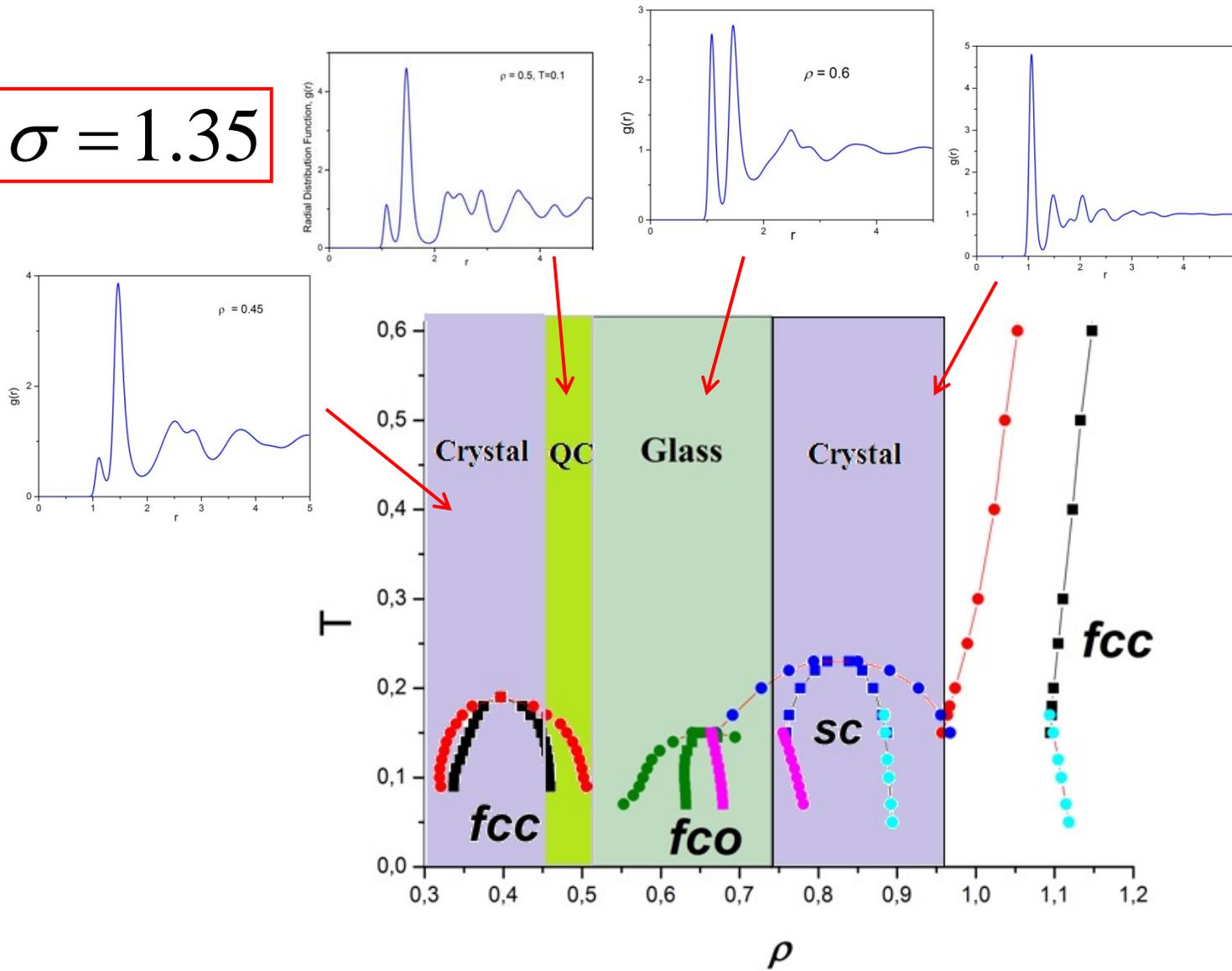
Модель RSS (repulsive step shoulder)

$$\Phi(r) = \varepsilon \cdot \left[\left(\frac{d}{r} \right)^n + \frac{1}{2} (1 - \tanh[k_0(r - \sigma)]) \right]$$

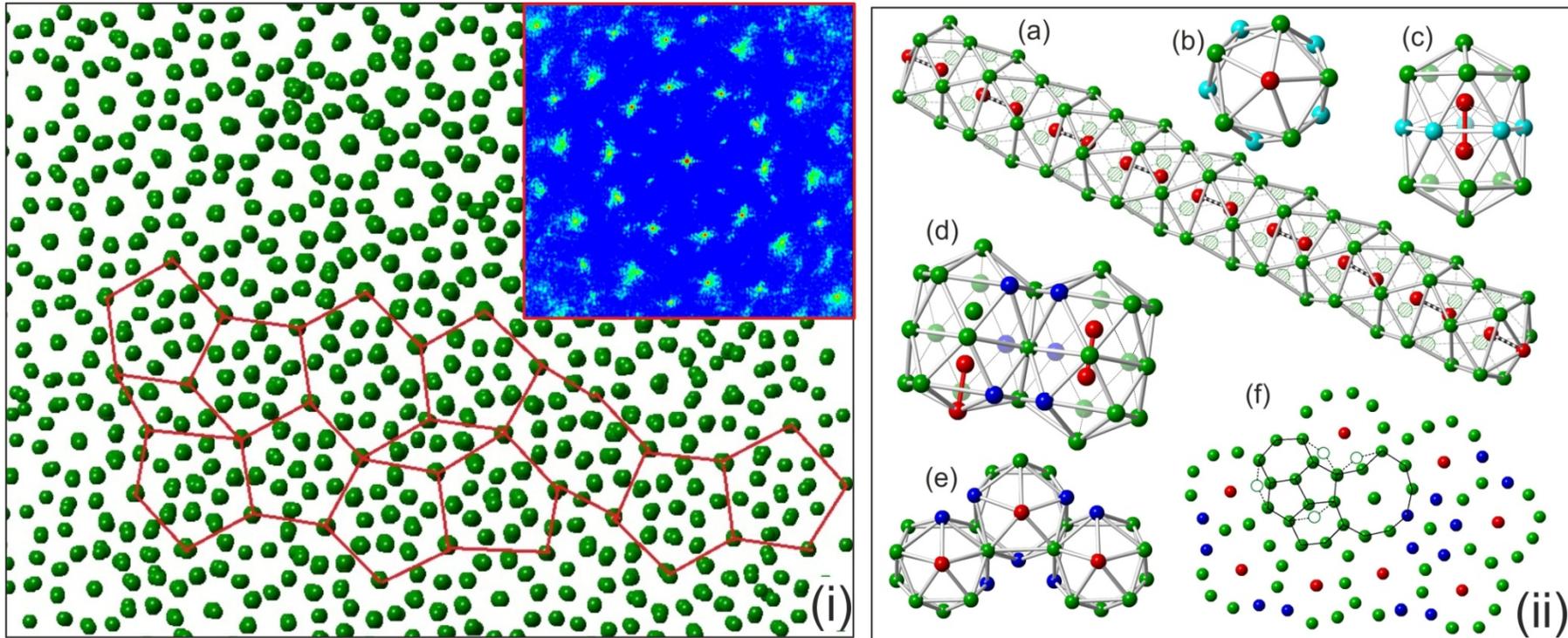


Область существования QC

$$\sigma = 1.35$$



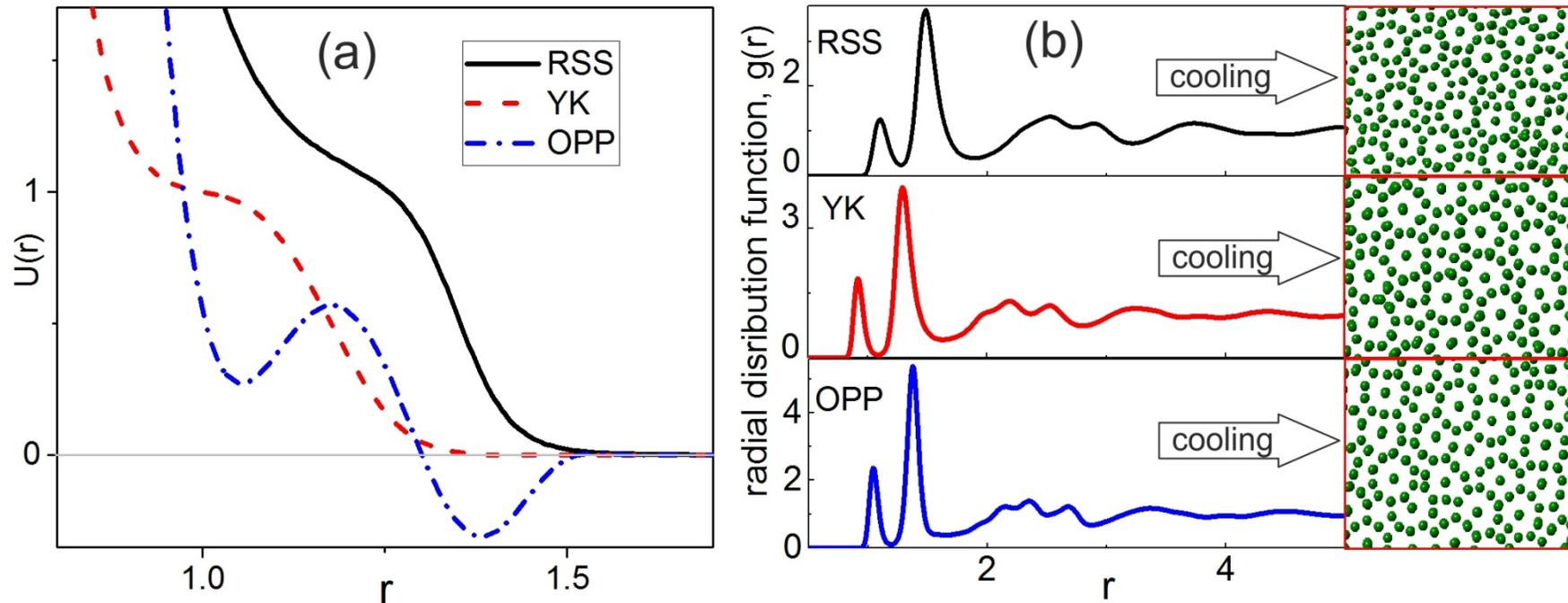
Структура декагонального квазикристалла



Значения эффективных параметров

$$\lambda \in (1.34 - 1.4) \quad \phi \in (0.06 - 0.15)$$

Универсальность эффективных параметров: декагональный квазикристалл

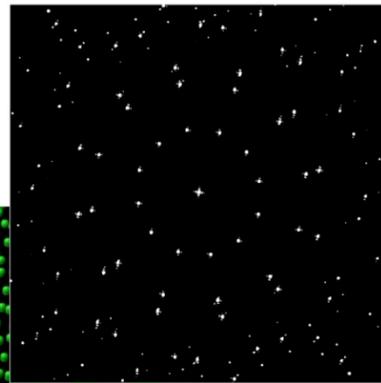
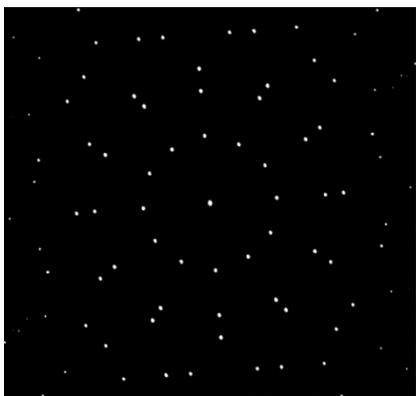
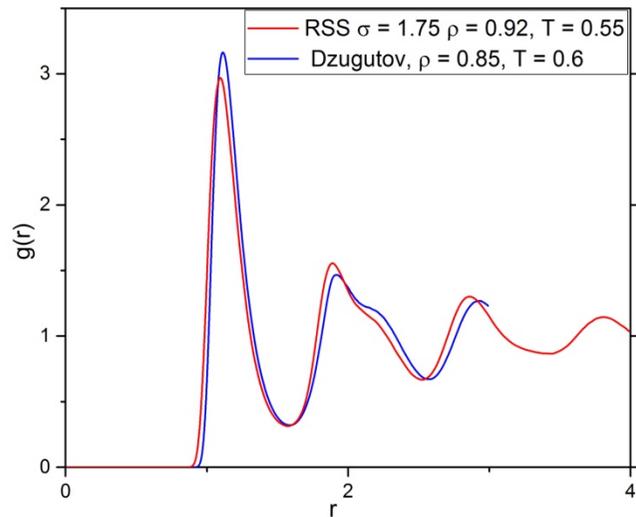
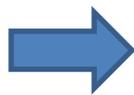
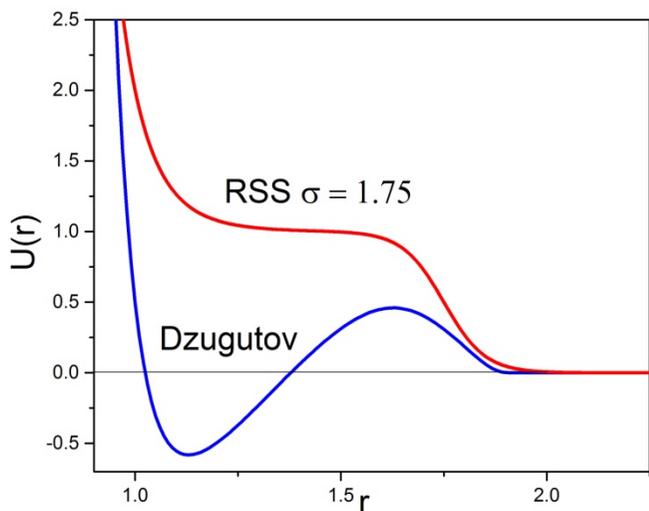


RSS: $\rho = 0.447, T = 0.11 (\lambda = 1.35, \phi = 0.11)$

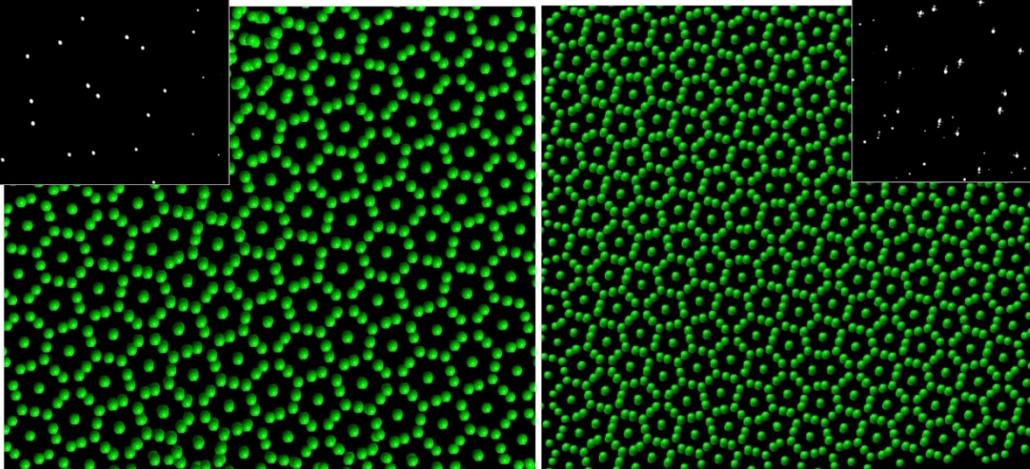
YK: $\rho = 0.74, T = 0.09 (\lambda = 1.4, \phi = 0.106)$

OPP: $\rho = 0.62, T = 0.16 (\lambda = 1.33, \phi = 0.15)$

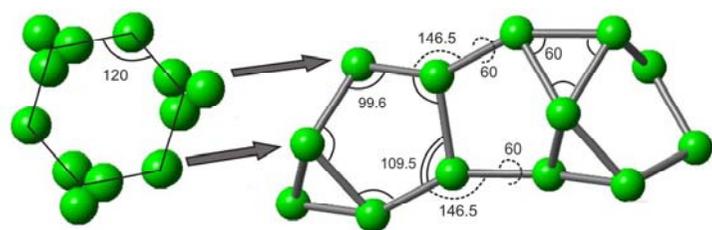
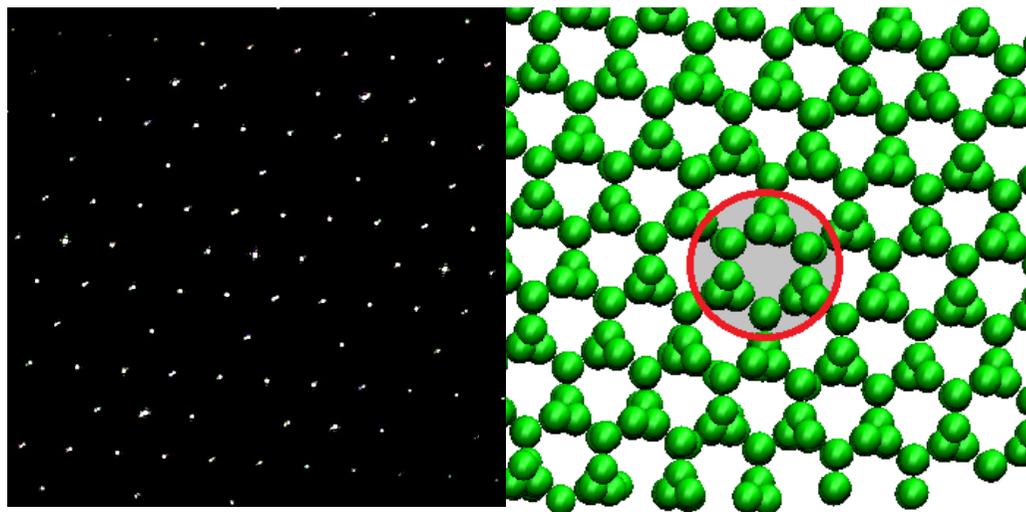
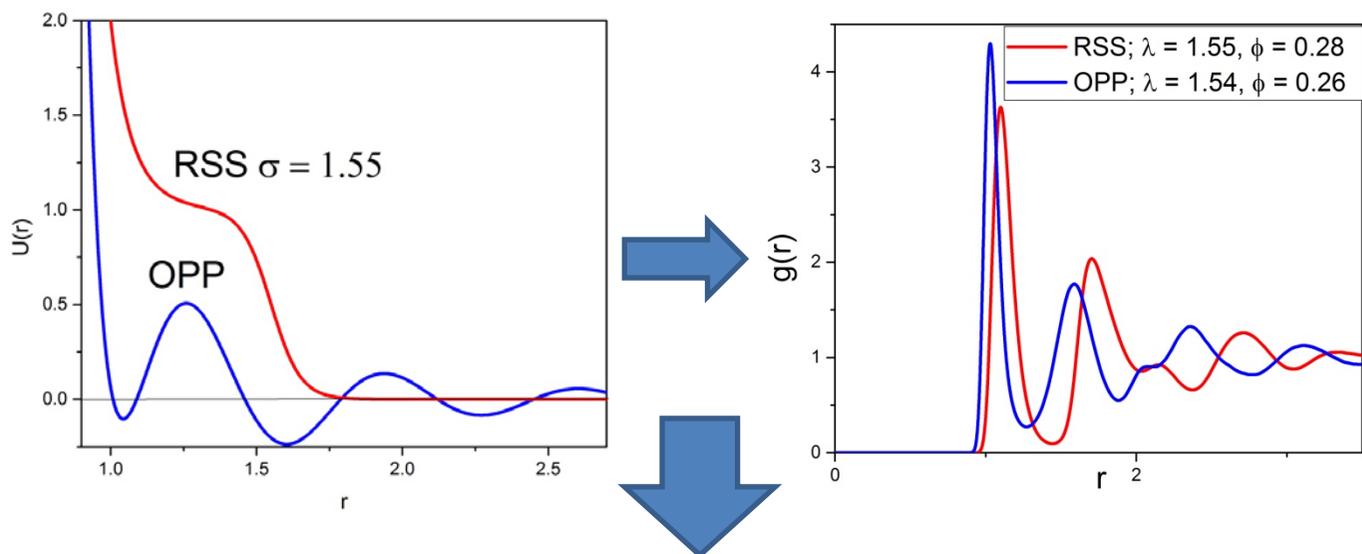
Универсальность эффективных параметров: ДОДЕКАГОНАЛЬНЫЙ квазикристалл



$$\lambda \approx 1.7 \quad \phi \approx 0.4$$



Универсальность эффективных параметров: кристаллические фазы



Группа симметрии
 $P4_1 32$ (Li)

Y. Ma, A. Oganov, Y. Xie PRB 78, 014102 (2008)

ВЫВОДЫ

- 1. Квазикристаллический порядок может формироваться в простых однокомпонентных системах с чисто отталкивающим (soft-matter like) взаимодействием.**
- 2. Образование аксиально симметричных квазикристаллов и некоторых кристаллических фаз может быть эффективно предсказано посредством двух универсальных безразмерных параметров, определяемых структурой жидкой фазы.**

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ