

# 准晶

吴晋渊 18307110155

准晶的发现可以追溯到Shechtman等报道的快速冷却的Al-Mn合金的衍射图样中观察到的正二十面体对称性<sup>[7]</sup>。正二十面体对称性包含一个 $C_5$ 对称轴，而不可能有一个晶格具有这种类型的对称性——它不在晶体允许的32种点群中<sup>[5]</sup>。

## 1 准晶的几何结构

## 2 准晶相变的金斯堡-朗道理论

本节将以文献<sup>[1]</sup>为例，介绍准晶相变的金斯堡-朗道理论。我们采用金斯堡-朗道理论的标准处理方法，假定系统的状态可以使用一个空间中的连续、平滑的序参量描述，系统的行为可以使用一个仅仅关于序参量的自由能完整描述，通过对称性写下自由能的形式，并分析自由能中各参数变动时系统是否发生对称性自发破缺，以及发生后系统基态的性质。虽然金斯堡-朗道理论通常是用于处理二级相变的，但是如果序参量在两相交界处变化足够平缓，从而能够保证系统在相变点附近的行为仍然可以使用。使用金斯堡-朗道理论处理固液相变已经成为常见的方法<sup>[4,9]</sup>。事实上，对有明确、不连续的两相交界的一级相变，基于金斯堡-朗道理论的相场方法<sup>[6]</sup>也常常在数值模拟中被使用，以避免显式追踪相边界<sup>[2]</sup>。

考虑一个具有平移不变性和（连续）旋转不变性的液体。液体结晶属于结构相变，故序参量大体上是密度。对一个最一般的系统，序参量选取是否正确、系统自由能是否还依赖于序参量以外的（无法直接从系统的哈密顿量出发获得序参量），但对液体，自由能总是可以写成密度的一个泛函<sup>[3,8]</sup>。通常的液体的低能状态是均匀的，而无论是晶体还是准晶依照定义密度分布都不是完全均匀的，如果特定条件下能够形成准晶，那么准晶态必定相较于其它状态在某种意义上更加稳定，即系统自由能最低的状态将不再是密度处处为常数的状态。因此可以将密度的 $\mathbf{q} \neq 0$ 的傅里叶分量 $\rho(\mathbf{q})$ 视作结晶的序参量；出现非零的 $\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle$ 意味着出现对称性自发破缺，有晶体或是准晶序形成。根据涉及的波矢的个数，液体的自由能的展开式子形如下式：

$$F[\rho] = \sum_{\text{all } \mathbf{q}'\text{'s}} r \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} + u (\rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}})^2 + w \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{p}} \rho_{-\mathbf{p}} + v_3 \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{\mathbf{q}_3} \delta^3(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3) \\ + v_4 \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{\mathbf{q}_3} \rho_{\mathbf{q}_4} \delta^3(\sum_i \mathbf{q}_i) + v_5 \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{\mathbf{q}_3} \rho_{\mathbf{q}_4} \rho_{\mathbf{q}_5} \delta^3(\sum_i \mathbf{q}_i) + \dots, \quad (1)$$

其中的 $\delta$ 函数保证了理论的空间平移不变性；空间旋转不变性保证了系数仅仅依赖于 $\mathbf{q}_i$ 的模长。据此自由能可以计算 $\rho(\mathbf{r})$ 的期望值。如果发现 $\rho(\mathbf{r})$

我们考虑一个特殊的液体，在其中 $v_4$ 不重要，

## 3 准晶构型的生长

在说明了理论上确实可以存在稳定的准晶相之后，我们讨论

## 参考文献

- [1] Per Bak. Symmetry, stability, and elastic properties of icosahedral incommensurate crystals. *Phys. Rev. B*, 32:5764–5772, Nov 1985.
- [2] William J Boettinger, James A Warren, Christoph Beckermann, and Alain Karma. Phase-field simulation of solidification. *Annual review of materials research*, 32(1):163–194, 2002.
- [3] Robert Evans, Martin Oettel, Roland Roth, and Gerhard Kahl. New developments in classical density functional theory. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28(24):240401, apr 2016.
- [4] Mauro Fabrizio. Ice-water and liquid-vapor phase transitions by a ginzburg-landau model. *Journal of Mathematical Physics*, 49:102902–102902, 10 2008.
- [5] D F Johnston. Group theory in solid state physics. *Reports on Progress in Physics*, 23(1):66–153, jan 1960.
- [6] Nikolas Provatas and Ken Elder. *Phase-field methods in materials science and engineering*. John Wiley & Sons, 2011.
- [7] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53:1951–1953, Nov 1984.
- [8] Michael te Vrugt, Hartmut Löwen, and Raphael Wittkowski. Classical dynamical density functional theory: from fundamentals to applications. *Advances in Physics*, 69(2):121–247, Apr 2020.
- [9] Gyula I. Tóth and Nikolas Provatas. Advanced ginzburg-landau theory of freezing: A density-functional approach. *Phys. Rev. B*, 90:104101, Sep 2014.