

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Jaroslav Fiala
Kvazikrystaly

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 36 (1991), No. 6, 336--346

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/139006>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1991

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

Kvazikrystaly

Jaroslav Fiala, Plzeň

Úvod

V roce 1984 objevili badatelé pracující v laboratořích amerického Národního úřadu pro standardy nový materiál, který jak se zdálo porušoval jeden z nejstarších a nejzákladnějších zákonů fyziky pevných látek. Vysokým stupněm uspořádanosti své struktury připomínal krystaly, ale přitom jevil symetrii, jež je pro jakoukoli krystalickou látku zakázaná. Další zkoumání prokázala, že mikrostruktura tohoto materiálu je jakýmsi novým druhem pořádku, který se liší od toho, co známe u krystalů i od poměrů u látek amorfních. Látky s takovou strukturou tvoří spojovací články mezi krystalickými látkami a materiály, jimž říkáme skla, a které vznikají tak rychlým ochlazením taveniny, že její atomy nemají dost času na to, aby vytvořily během tuhnutí pravidelnou prostorovou mřížku. Proto byly tyto nové materiály nazvány kvazikrystaly.

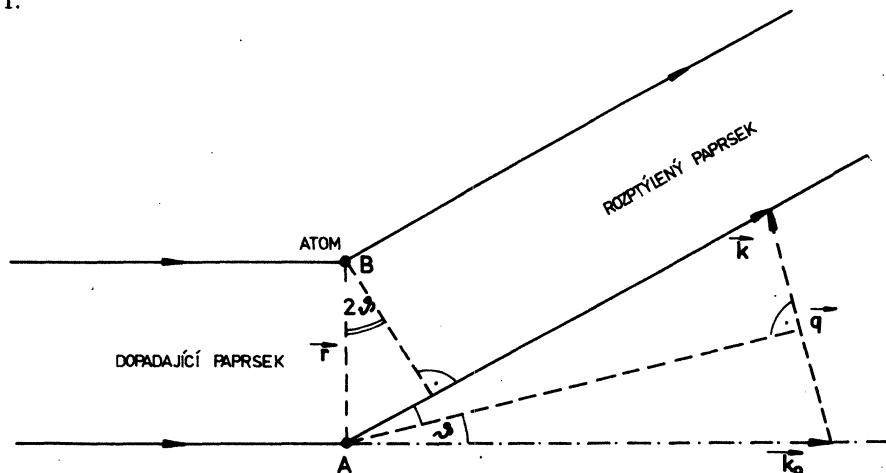
Od krystalů ke kvazikrystalům

„Pravé“ krystaly jsou velmi přísně uspořádaným aglomerátem atomů nebo molekul. Je to třírozměrná periodická struktura, jejíž identické „základní buňky“ — stavební bloky krystalu, které obsahují jedno a totéž shodné uspořádání atomů — na sebe pravidelně navazují a periodicky vyplňují prostor. Každé krystalové struktury je vlastní určitá symetrie. Říkáme například, že krystal má trojčetnou rotační symetrii, když otočením o 120° (tedy o jednu třetinu úplné obrátky) nabude jeho struktura úplně shodnou dispozici, jakou měla před otočením. (Elementárním příkladem obrazce, který má trojčetnou rotační symetrii, je rovnostranný trojúhelník.) Krystaly mohou mít také čtyřčetnou nebo šestičetnou rotační symetrii (jakou má čtverec nebo pravidelný šestiúhelník). Krystal však nemůže mít pětičetnou rotační symetrii ze stejného důvodu, z jakého není možné sestavit rovinnou mozaiku — vyplnit beze zbytku a bez překrývání rovinu — pomocí dlaždic jednoho druhu, jež by měly pětičetnou symetrii (pomocí dlaždic ve tvaru pravidelného pětiúhelníka).*) Proto bylo pro většinu krystalografů a odborníků zabývajících se fyzikou kondenzovaného stavu velkým překvapením, když Daniel Shechtman, Ilan Blech, Denis Gratias a John W. Cahn uveřejnili zprávu [1]

*) Důvod je prostý: Úhel mezi stranami přilehlých pravidelných n -úhelníků je $\alpha = \pi - 2\pi/n$. Chceme-li těmito n -úhelníky právě vyplnit rovinu, tedy vyplnit ji tak, aby se n -úhelníky nepřekrývaly,

o krystalografických vlastnostech slitiny hliníku s manganem, která byla získána velmi rychlým ochlazením taveniny. Svazek elektronů, který nechali procházet tenkou fólií z této slitiny, se rozptýlil a na fotografické emulsi vytvořil difraktogram — soubor ostrých stop — obsahující pětičetnou symetrii. Z toho, že difrakční stopy byly ostré, plynulo, že jde o strukturu dokonale uspořádanou na dlouhou vzdálenost (neboť to je nezbytné k tomu, aby elektrony odražené jednotlivými atomy byly ve fázi [2, 3] obr. 1). A přitom symetrie difraktogramu svědčila o pětičetné symetrii vnitřní struktury slitiny. Další badatelé pak brzo nato objevili celou řadu jiných slitin s podobnými vlastnostmi.

Obr. 1.



Podrobná analýza elektrogramů pak vysvětlila důvod těchto neobvyklých vlastností. Základním stavebním kamenem struktury většiny krystalů jsou taková platonská tělesa jako krychle, čtyřstěn a osmistěn. Nově objevené zvláštní materiály mají na rozdíl od toho strukturu vybudovanou na bázi jiného Platonova tělesa, totiž ikosaedru: dvacetistěnu, jehož povrch je tvořen dvaceti rovnostrannými trojúhelníky. Ve fyzikální literatuře se o ikosaedru až do té doby konspirativně mlčelo. Mnoho renomovaných knih uvádělo, že „ikosaedr není pro fyziku nikterak užitečný“. Důvodem tohoto skepticismu je fakt, že ikosaedr jeví pětičetnou symetrii — v každém z jeho vrcholů se stýká pět stěn, a proto nemůže sloužit jako buňka struktury krystalů.

Jak se těm novým slitinám podařilo obejít obecně uznávaný princip krystalografie? Odpověď na tuto otázku se podařilo nalézt na základě studia mikrostruktury

ale aby mezi nimi také nezůstaly žádné mezery, pak musí být 2π celistvým násobkem α . Tedy zlomek

$$f = \frac{2\pi}{n-2}$$

musí být celé číslo. f se rovná 6, 4, 3 pro trojúhelníky, čtverce a šestiúhelníky, ale 3,333...; 2,8; 2,666...; 2,571...; 2,5; 2,4... pro pětiúhelníky, sedmiúhelníky, osmiúhelníky atd., takže rovinná mozaika může mít trojčetnou, čtyřčetnou a šestičetnou osu symetrie, nemůže však mít pětičetnou osu, ani osy symetrie více než šestičetné.

rychle chlazených slitin a pomocí matematické teorie teselace (= rozdělení roviny na disjunktní části, které ji jako mozaiku celou vyplní).

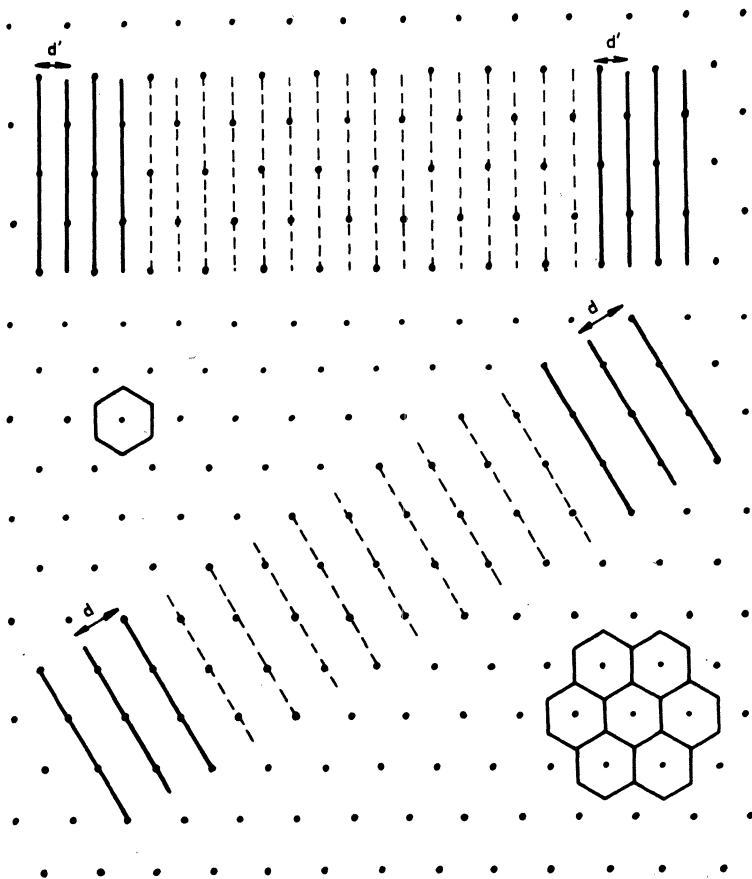
Abychom pochopili strukturu kvazikrystalů, vyjdeme ze stavebních principů, které platí pro obyčejné krystaly. Krystaly jeví dva druhy uspořádání na dlouhou vzdálenost, totiž tzv. orientační pořádek a translační pořádek. Tyto kategorie můžeme ilustrovat na jedné z nejjednodušších struktur, kterou je rovinná síťka tvořená rovnostrannými trojúhelníky, v jejichž vrcholech jsou středy kulečnickových koulí představujících atomy (viz obr. 2). V této dvojrozměrné mřížce leží každý atom uvnitř šestiúhelníkové „klíčky“ tvořené jeho šesti nejbližšími sousedy. Tento šestiúhelník s jedním atomem uprostřed je základní buňkou krystalu: krystal může být „rozparcelován“ na periodickou mozaiku tvořenou šestiúhelníky. Protože všechny šestiúhelníky jsou stejně orientovány — jejich odpovídající si strany jsou vzájemně rovnoběžné — říkáme, že krystal jeví orientační pořádek na dálku.

Jiný druh pořádku na dálku, se kterým se v krystalu setkáváme, můžeme vyjevit, když v mřížce zakreslíme soustavu rovnoběžných přímek. Jestliže to provedeme tak, aby každý atom ležel na nějaké přímce, vytvoří ty přímky ekvidistantní osnovu rovnoběžek. Je tedy možné přesunout několik přímek této osnovy z jedné části krystalu do jiné části tak, že dojde k přesné koincidenci. Známe-li strukturu krystalu v jedné jeho malé části, můžeme předpovědět přesnou polohu a vzdálenost přímek strukturální mřížky v libovolné jeho jiné části: krystal jeví translační pořádek.

V krystalu je mnoho osnov takových paralelních přímek, jež se liší svou orientací; také „interlineární distance“ (vzdálenosti mezi sousedními přímkami osnovy) jsou obecně různé pro různé osnovy. V trojrozměrném krystalu uvažujeme namísto přímkových osnov osnovy mřížkových rovin. Když na krystal necháme dopadat paprsek rtg záření nebo svazek elektronů, dochází odrazem na mřížkových rovinách k jeho rozptýlu. Určíme-li směry, do kterých je záření rozptylováno a změříme-li intenzitu každého rozptýleného svazku, zjistíme, které rovinné osnovy musí v krystalu existovat; často můžeme určit i přesné polohy atomů. A právě tímto způsobem byly kvazikrystaly objeveny. Ostré stopy na difraktogramu, který získal Shechtman se svými spolupracovníky, prozrazovaly, že atomy jsou uspořádány do mřížkových rovin a přitom pětičetná symetrie difraktogramu dokazovala, že nemůže jít o obvyklý krystal.

Abychom pochopili, proč krystal nemůže mít pětičetnou symetrii, učiňme myšlenkový pokus vyplnit rovinu nikoli šestiúhelníkovými, ale pětiúhelníkovými buňkami. Pravidelné pětiúhelníky, nejjednodušší útvary, které mají pětičetnou symetrii, nemohou být základními buňkami krystalu. Pětiúhelníkové buňky totiž na rozdíl od šestiúhelníků nemůžeme sméstnat tak, aby nezůstal prázdný prostor: když k sobě přiložíme dva pětiúhelníky shodnými stranami, nepodaří se nám pak už žádným způsobem připojit k nim ještě třetí pětiúhelník tak, aby těsně přiléhál k oběma dvěma prvním pětiúhelníkům. Vždycky zůstane nějaká mezera, nevyplněné místo, jež je konkrétním případem toho, co se ve fyzice kondenzovaného stavu označuje jako defekt směstnání. A stejně tak jako ve dvojrozměrném prostoru, ani v trojrozměrném prostoru nelze zcela těsně sméstnat útvary, jež mají pětičetnou symetrii tak, aby vzniklé uspořádání bylo zcela dokonalé (tj. bez mezer).

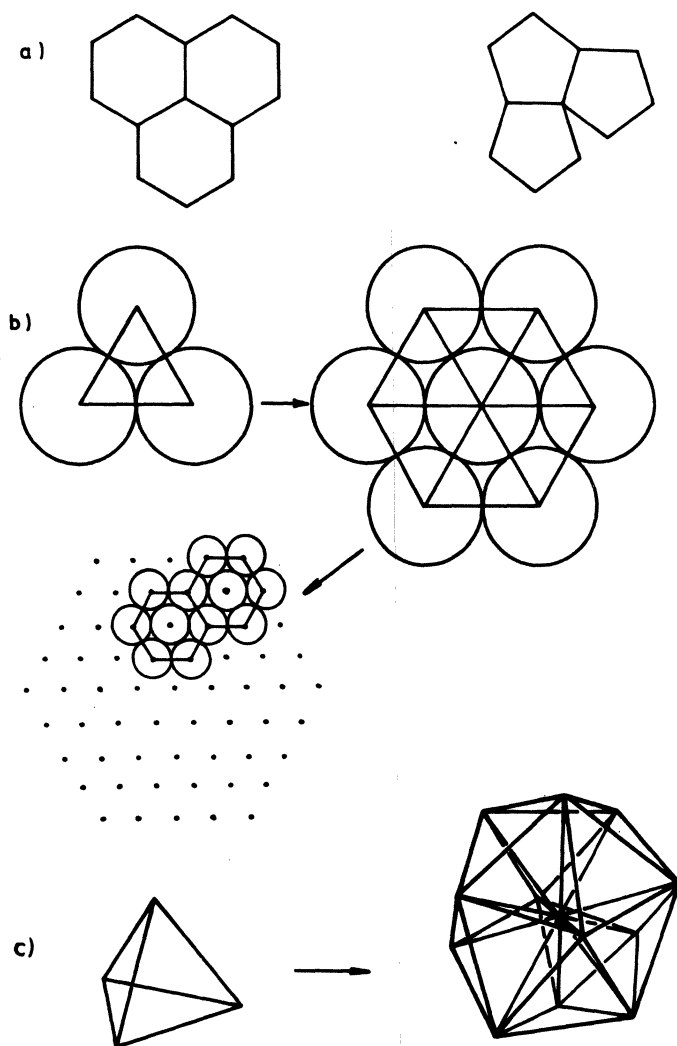
Ve dvojrozměrném prostoru reprezentuje šestiúhelník optimální stavební jednotku



Obr. 2. Pravidelná síť bodů ilustruje dva druhy pořádku na dlouhou vzdálenost, jenž je vlastní krystalům. Síťku můžeme rozdělit na šestiúhelníky, které mají ve svém středu „atom“. Protože šestiúhelníky v jedné části krystalu (vpravo dole) mají tutéž orientaci jako šestiúhelníky v kterékoli jiné části krystalu (vlevo uprostřed), říkáme, že síť (dvojměrná mřížka) jeví „orientační pořádek na dálku“. „Translační pořádek na dálku“ v krystalu je demonstrován osnovou rovnoběžných přímek, které jsou zakresleny do sítky v pásu táhnoucím se z jejího levého dolního rohu do pravé střední části. Když se tyto přímky, jimž v trojrozměrném krystalu odpovídají mřížkové roviny, disponují tak, aby každý atom ležel na některé z nich, pak vzdálenost mezi sousedními přímkami osnovy bude konstantní v celém krystalu. Poloha a orientace těchto přímek v jakékoli části krystalu bude tedy určena rovnoběžným posuvem, translací přímek z libovolné jiné části krystalu. Existuje mnoho takových osnov rovnoběžných přímek; pro ilustraci je jiná osnova zakreslena v pásu vyplňujícím horní část sítě. Vzdálenost mezi sousedními přímkami se může měnit od osnovy k osnově.

pro vybudování nejtěsněji směstnané struktury: středy tří kruhů, které se vzájemně dotýkají, tvoří trojúhelník a šest takových trojúhelníků vytváří šestiúhelník složený ze sedmi kruhů (obr. 3). Je pozoruhodné, že analogická úvaha nás přivede k tomu, že ikosaedr (jenž nemůže být pro svou pětičetnou symetrii elementární stavební jednotkou dokonalého, bezchybného uspořádání) by měl být přirozenouází pro vybudování směstnané struktury v třírozměrném prostoru: čtyři tuhé koule, jež mohou představovat atomy, a které se vzájemně dotýkají, tvoří čtyřstěn, tetraedr („pyramidální“ útvar,

do něhož bývají zpravidla složeny dělové koule v historických expozicích středověkých hradů) a 20 takových čtyřstěnů s malými distorzemi vytváří ikosaedr složený ze 13 atomů.



Obr. 3. Těsné směstnání stejných útvarů, jež mají pětičetnou symetrii, není možné. Tři šestiúhelníky lze těsně směstnat tak, aby mezi nimi nezůstala žádná mezera, ale s pětiúhelníky to není možné (a). Ve dvou rozměrech (b) je šestiúhelník optimální stavební jednotkou těsně směstnaných agregátů: vždy tři kruhy v těsné koordinaci tvoří trojúhelník, šest těsně směstnaných trojúhelníků vytváří šestiúhelník a šestiúhelníky pak vyplňují bez mezer celou rovinu. V třírozměrném prostoru (c) vytvářejí čtyři vzájemně se dotýkající koule čtyřstěn a 20 čtyřstěnů lze složit v téměř dokonalý ikosaedr. Ikosaedry však mají pětičetnou symetrii (v každém z jejich vrcholů se stýká pět trojúhelníkových stěn) a nelze je tedy složit tak, aby bez mezer vyplnily celý prostor; nemohou proto sloužit jako základní stavební buňka krystalové struktury.

Co se stane, když se pokusíme směstnat koule tak, aby vytvořily ikosaedr? Ikosaedr složený ze 13 atomů především není dokonalý. Mezi 12 atomy, které jsou situovány na jeho povrchu, jsou malé mezery, jakési trhlinky; každý atom je od svých sousedů na povrchu asi o 5 % dále než od centrálního atomu. Stejně jako pětiúhelníky na rovině atomy nemohou být stejně daleko od všech svých sousedů. A když na tento základní ikosaedr začneme „nabalovat“ další vrstvy částic, nedokonalost směstnání se bude ještě zvětšovat; trhlinky na povrchu struktury, tj. mezery mezi atomy v povrchových vrstvách, budou čím dál tím širší.

Ikosaedrické uspořádání na krátkou vzdálenost

Kdybychom se pokoušeli vybudovat z ikosaedrů celý krystal, bude mít konstrukce tím více — a tím větších — poruch, čím bude rozlehlejší. „Ikosaedrický řád“ se tedy nemůže stát osnovou regulární struktury celého makroskopického krystalu. Jako stavební princip pro malé objemy je však ikosaedrické uspořádání velice efektivní. Už v roce 1952 Sir Charles Frank z univerzity v Bristolu vyslovil předpoklad, že husté podchlazené kapaliny (kapaliny ochlazené na teplotu nižší, než je jejich bod tuhnutí, aniž po určité době ke ztuhnutí skutečně došlo) jsou aglomerátem obrovského množství malých strukturních elementů, jež mají všechny ikosaedrickou symetrii. Domníval se, že v takových kapalinách je mnoho oblastí v nichž malé shluky atomů vytvořily ikosaedrické zárodky. A že v případě, že takováto podchlazená kapalina (či tavenina) ztuhne a změní se ve sklo ještě před tím, než zkrystalizuje, bude také struktura skla složená z malých ikosaedrických klastrů nějakým způsobem pospojovaných. Atomy ve skle budou tedy jevit ikosaedrický pořádek na krátkou vzdálenost v mnoha velmi malých oblastech.

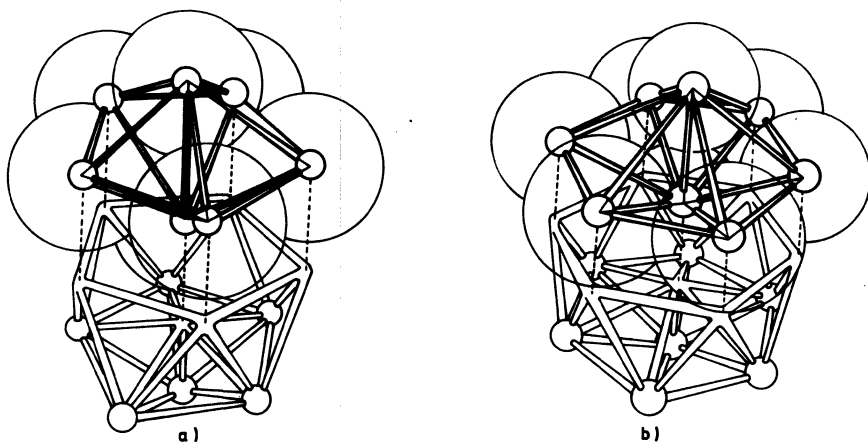
Zdá se, že Frankova předpověď byla správná. Na začátku 60. let se v laboratoři poprvé podařilo ochladit roztavený kov tak rychle, že ztuhl dříve, než mohl zkrystalizovat. A koncem 60. a začátkem 70. let bylo zjištěno, že strukturu těchto kovových skel lze na atomové úrovni velmi dobře popsat jako nepravidelné uspořádání tuhých koulí. Toto uspořádání obsahuje řadu motivů, jež jsou různými fragmenty ikosaedru, takže ikosaedrický pořádek je skutečně důležitým stavebním principem struktury rychle ochlazených kapalin a kovových skel.

Jedno velmi jednoduché kovové sklo je slitina hořčíku a zinku. Příbuzná intermetalická sloučenina $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ sehrála velkou úlohu při studiu kvazikrystalů. Rychlým ochlazením taveniny tohoto složení lze získat kvazikrystal. Při ještě rychlejším ochlazení dostaneme (kovové) sklo, v jehož struktuře je mnoho malých oblastí s ikosaedrickou symetrií. Jestliže taveninu $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ ochladíme pomaleji, ztuhne jako krystal, v jehož struktuře můžeme opět vystopovat malé oblasti, jež mají ikosaedrickou symetrii, byť krystal jako celek není (samozřejmě) tvořen pouze těmito ikosaedry. Ikosaedry jsou mírně deformovány a pospojovány do skeletu, který má kubickou symetrii. Zakázané ikosaedrické uspořádání na dálku tedy ve struktuře opravdu není. Zato se zdá, že ikosaedrická symetrie, která se vyskytuje lokálně, na krátkou vzdálenost jak ve sklovité, tak i v krystalické modifikaci slitiny $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$, má nějakou souvislost s globální ikosaedrickou symetrií, jež se uplatňuje na dlouhou vzdálenost v modifikaci kvazikrystalické.

Přirozené defekty, inherentní uspořádání ikosaedrů na krátkou vzdálenost, jsou v krystalickém $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ „vyspraveny“ dodatečnými atomy, které „záplatují trhliny“ na povrchu ikosaedrických klastrů; ikosaedrická symetrie klastrů je tím ovšem narušena. Výsledná konfigurace částic je tvořena mírně deformovanými čtyřstěny, v jejichž vrcholech leží jednotlivé atomy; vazby jsou orientovány podél hran čtyřstěnů. Čtyřstěny se dotýkají stěnami a každá hrana, resp. vazba, je sdílena několika čtyřstěny. A obdobné je to také se strukturou skelné modifikace $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$.

Každá vazba je společná čtyřem, pěti nebo šesti deformovaným čtyřstěnům; většina

vazeb je sdílěna pěti čtyřstěny. Takové uskupení pěti čtyřstěnnů kolem společné vazby je vlastně fragmentem ikosaedru. Na místě, kde se takový motiv ve struktuře objeví, bude mít slitina ikosaedrické uspořádání na krátkou vzdálenost. A aby se vyplnily mezery, jež při každém pokusu sestavit strukturu z pouhých ikosaedrů nutně zůstanou, musí být asi 10 % vazeb sdílěno nikoli pěti, ale šesti čtyřstěny (obr. 4).



Obr. 4. Konfiguraci atomů v kondenzovaném aglomerátu částic lze chápat jako těsné uspořádání mírně deformovaných čtyřstěnnů, jež sdílejí společné vazby. Většina vazeb je společná pro pět čtyřstěnnů (a), které dohromady tvoří fragment ikosaedru. Aby se vyplnily mezery, jež v sestavě takových ikosaedrů nakonec vždycky zůstanou, musí být některé vazby sdílěny šesti čtyřstěny (b), které dohromady tvoří fragment tělesa, jež je podobné ikosaedru, ale má šestičetnou osu symetrie.

Ukazuje se, že všechny šestičetné a čtyřčetné vazby jsou ve struktuře disponovány podél čar, jež nazýváme klínové disklinace. Klínové disklinace nemohou uvnitř materiálu začínat ani končit a při nízkých teplotách se také jen zřídka protínají. Je-li roztavený kov rychle ochlazen, mohou se disklinace „zamotat“, čímž vznikne kovové sklo. Je-li tavenina chlazená pomaleji, mají klínové disklinace dost času na to, aby se vzájemně poprotínaly, spojily a vytvořily pravidelné periodické sítě. V mnohých slitinách je materiál tvořen regulární sítí šestičetných vazeb, jíž je protkána jinak čistě ikosaedrická matrice. Takovému typu struktury říkáme Frankova-Kasperova fáze. Ve Frankově-Kasperově fázi slitiny $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ jsou hořčíkové atomy umístěny v polohách, jež jsou spojeny šestičetnými vazbami, zatímco menší atomy hliníku a zinku zaujímají zbylé ikosaedrické polohy.

Kovová skla a Frankovy-Kasperovy fáze jsou příkladem toho, jak může vzniknout lokální ikosaedrické uspořádání na krátkou vzdálenost a jak může být vkomponováno do struktury krystalu, který ikosaedrické uspořádání na dálku nemá. K tomu, abychom pochopili podstatu ikosaedrického uspořádání na dálku ve struktuře kvazikrystalů, budeme potřebovat několik pojmů a úvah z matematické teorie teselace.

Penrosova mozaika

Teselace (dělení roviny na disjunktní části, které celou rovinu vyplní) může být uži-

tečnou analogií při úvahách o krystalech. Tak jako krystal zaplní třírozměrný prostor základními buňkami, dláždění nebo mozaika vyplní dvojrozměrný prostor dlaždicemi, resp. „kameny“. Například dvojrozměrné uspořádání šestiúhelníků má osnovy mřížkových přímek a orientační symetrii na dálku v přímé analogii k rovinným osnovám a globální orientační symetrii třírozměrného krystalu. Pokusíme se proto najít nějakou teselaci, která by měla určité rysy, jež by připomínaly neobvyklé vlastnosti pozorované u kvazikrystalů.

Teselace, která je nejlepším modelem pro kvazikrystaly, byla objevena deset let před objevem kvazikrystalů. V roce 1974 se Roger Penrose, teoretický fyzik z oxfordské univerzity, zabýval problematikou aperiodické teselace roviny: jak vytvořit rovinnou mozaiku z více než jednoho druhu dlaždic. Vymyslel teselaci, která vyžaduje pouze dvě základní buňky — kosočtverce, jejichž úhly jsou 36° a 144° u jednoho a 72° a 108° u druhého. Kosočtverce se sestavují v mozaiku podle určitých „kompozičních pravidel“. Podíl počtu „širokých kosočtverců“ (72°) a „úzkých kosočtverců“ (36°) je v nekonečné Penrosově teselaci roven (přesně!) zlatému řezu ($\doteq 1,618$). Toto číslo je iracionální a to znamená, že v Penrosově mozaice nelze definovat jedinou elementární buňku. Taková buňka by totiž musela obsahovat celistvý počet obou kosočtverců, a to ve stejném poměru jako v nekonečné teselaci; iracionální číslo však nelze vyjádřit podílem dvou celých čísel.

Tedy stejně jako kvazikrystaly, ani Penrosova teselace nemá onu vlastnost, jež je základním atributem toho, co máme na mysli, když hovoříme o „krystalové struktuře“ — nelze ji totiž vytvořit z jediné základní stavební jednotky (buňky). Má však mnoho jiných vlastností, jež připomínají krystal. V Penrosově mozaice například nalezneme mnoho pravidelných desetiúhelníků. A všechny tyto desetiúhelníky mají jednu a tutéž orientaci, stejně jako šestiúhelníky v dvojrozměrném modelu krystalu tvořeném stejně velkými vzájemně se dotýkajícími kružnicemi. Penrosova teselace má tedy orientační pořádek na dálku, se kterým se setkáváme u krystalů.

Penrosova teselace má dokonce jistý druh translačního pořádku na dálku. Aby se to stalo patrné, stačí v mozaice barevně vyznačit všechny kosočtverce, které mají strany rovnoběžné s určitým směrem. Zbarvené kosočtverce vytvoří nepravidelné klikaté pásy, jež lze přibližně vyrovnat přímkami. Ty přímky budou rovnoběžné a přibližně stejně daleko od sebe vzdálené. Takto v průměru (statisticky chápáno) má Penrosova teselace translační i orientační pořádek.

Jako kvazikrystaly má Penrosova teselace také pětičetnou symetrii. Vybarvené kosočtverce Penrosovy mozaiky se řadí do pěti osnov rovnoběžných přímek, jež jsou rovnoběžné se stranami pětiúhelníka. Protínají se v úhlech, které jsou násobky 72° , tedy jedné pětiny 360° . Atomy uspořádané do Penrosovy mozaiky rozptylují elektrony nebo Rentgenovo záření podobně jako krystal. Vzniklý difrakční obrazec bude mít pětičetnou symetrii bez ohledu na to, do kterého místa mozaiky dopadající paprsek zaměříme. Odchytky od regulárnosti přímkových osnov Penrosovy teselace se při difrakci projeví podobně jako odchytky atomů od ideální polohy v krystalu důsledkem teplotních kmitů (poměrně nevýraznými změnami difrakčního obrazce). A zůstanou zachovány i při absolutní nule.

Třírozměrný model struktury kvazikrystalů

Jako první vyslovil předpoklad o tom, že Penrosovy teselace by mohly mít nějakou souvislost se strukturou reálných materiálů, Alan L. MacKay z Birkbeckovy koleje londýnské univerzity v r. 1981. V roce 1984 Peter Kramer a Reinhardt Neri z univerzity v Tübingenu a nezávisle na nich Dov I. Levine a Paul J. Steinhardt z pennsylvánské univerzity zkonstruovali třírozměrné analogon Penrosovy teselace, které — jak se ukázalo — má velmi úzký vztah ke struktuře kvazikrystalů.

Třírozměrná Penrosova teselace má podobně jako její dvojrozměrný protějšek orientační i translační pořádek na dálku. A navíc její ikosaedrickou symetrii obdobně jako dvojrozměrná Penrosova teselace symetrii pětičetnou.

Základními stavebními jednotkami třírozměrné teselace jsou dva klence neboli romboedry (tělesa omezená šesti kosočtverečnými stěnami, vypadající jako zmáčkнутá krychle). Vnitřní úhly v romboedrech jsou stejné jako úhly, které spolu svírají určité vazby v ikosaedrických klastrech atomů. Podíl počtu romboedrů jednoho a druhého druhu v nekonečné třírozměrné Penrosově teselaci je roven zlatému řezu, a proto ani tato teselace nemůže být zbudována z jediné základní buňky, stejně jako to nejde u kvazikrystalů. Způsob, jakým by podle výpočtů Penrosova teselace rozptylovala záření, jeví pozoruhodnou shodu s experimentálními výsledky získanými difrakcí na skutečných kvazikrystalech.

Třírozměrná Penrosova „mozaika“ je výborným východiskem pro pochopení uspořádání atomů v kvazikrystalu. Popsat strukturu libovolné dané kvazikrystalické látky v termínech třírozměrné Penrosovy teselace znamená najít způsob, jakým jsou atomy uloženy ve dvou základních romboedrech. Mluví se o atomové „dekoraci“ elementárních buněk, která musí splňovat řadu podmínek, např. zachování skutečných proporcí jednotlivých atomů v aglomerátu romboedrů, které tvoří látku jako celek. To je samozřejmě mnohem obtížnější než určit strukturu klasického krystalu, kdy stačí najít dekoraci jediné základní buňky, která se pak ve struktuře už jenom periodicky opakuje.

Penrosova teselace, jak je realizována v kvazikrystalech, je novým pojetím krystalinity. Protože dvě „základní buňky“ nejsou ve struktuře kvazikrystalu uloženy periodicky, má každá buňka poněkud odlišné okolí. V důsledku toho se budou síly působící mezi vzdálenými atomy měnit od buňky k buňce, což bude způsobovat rozdíly v poloze atomů v jednotlivých buňkách. Mají-li Penrosovy romboedry popisovat strukturu dané kvazikrystalické látky adekvátně, nesmějí tyto rozdíly být velké.

V reálných materiálech nejsou pravděpodobně kompoziční pravidla určující ideální vzájemné uložení Penrosových romboedrů zcela striktně dodržena. Lze ukázat, že malé skupiny Penrosových buněk mohou být lokálně přeskupeny tak, že se na tom místě sice poruší kompoziční pravidla Penrosovy teselace, ale globálně zůstane její řád v hrubých rysech zachován. Tak například kostky dvojrozměrné Penrosovy mozaiky lze vyjmout z jednotlivých pravidelných desetiúhelníků, jež jsou v této mozaice zabudovány a o kterých jsme hovořili výše, zdeformovat je a naskládat do těch desetiúhelníků zpátky tak, že řečená kompoziční pravidla budou na některých místech porušena. Orientace desetiúhelníků se tím však nezmění a kvazikrystal si jako celek zachová svůj orientační pořádek na dálku. Deformace nenaruší integritu přímkové

zabudovány a o kterých jsme hovořili výše, zdeformovat je a naskládat do těch desetiúhelníků zpátky tak, že řečená kompoziční pravidla budou na některých místech porušena. Orientace desetiúhelníků se tím však nezmění a kvazikrystal si jako celek zachová svůj orientační pořádek na dálku. Deformace nenaruší integritu přímkové osnovy: klikatý pás zbarvených kosočtverců, který daná přímka osnovy aproximuje, bude na tom místě zalomen třeba vpravo místo vlevo, ale celkový směr pásu zůstane zachován. Takováto změna struktury zachová v hrubých rysech i charakter difrakce rtg záření či elektronů na materiálu.

Penrosovy teselace tvoří také spojovací článek mezi krystalovou strukturou Frankových-Kasperových fází, jež se vyskytují v mnoha slitinách a ikosaedrickým pořádkem na dálku v kvazikrystalech. Christofer Henley z Cornellovy univerzity a Veit Elser z AT&T Bellových laboratoří například ukázali, že základní buňka Frankovy-Kasperovy fáze $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ může být chápána jako mírně deformovaný fragment Penrosovy teselace.

Ikosaedrická symetrie, jež je výrazným lokálním rysem Frankovy-Kasperovy fáze, je v globálu (jako charakteristika uspořádání na dálku) pro tuto fázi zcela anulována účinkem systematického periodického opakování taktó deformovaného motivu Penrosovy mozaiky celým krystalem. V kvazikrystalu však uvedená lokální ikosaedrická konfigurace „prorůstá“ celým materiálem podle kompozičních pravidel Penrosovy teselace, čímž vzniká makroskopický kvazikrystal. A Henley a Elser ukázali, jak správně Penrosovy klence dekorovat, abychom vnitřní strukturu kvazikrystalické modifikace $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ adekvátně popsali. Ikosaedrický pořádek je v této fázi slitiny zachován na dlouhou vzdálenost přesto, že v její struktuře nalezneme síť diskлинаčních čar podobnou té, která se vyskytuje u Frankových-Kasperových fází.

Závěr

Další analýzy a strukturní studie byly provedeny i pro jiné slitiny, které se mohou vyskytovat v kvazikrystalických polymorfních modifikacích. O kvazikrystalech se publikovalo již několik tisíc prací, mezi nimi řada přehledných, jež můžeme čtenářům doporučit k hlubšímu seznámení s touto problematikou [4–10].

Koncepce kvazikrystalinity je novým kvalitativně vyšším stupněm našeho chápání struktury pevných látek. Přejít od ideálního modelu periodického krystalu ke kvazikrystalům je jednou z cest, jimiž se na tomto poli blížíme poznání reálné skutečnosti.

L i t e r a t u r a

- [1] SHECHTMAN D., BLECH I., GRATIAS D., CAHN J. W.: *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984), 1951.
- [2] KRATOCHVÍL B., JENŠOVSKÝ L.: *Úvod do krystalochemie*. Praha: SNTL 1987, 240.
- [3] KRAUS I.: *Úvod do strukturní rentgenografie*. Praha: Academia 1985, 236.
- [4] NELSON D. R.: *Scientific American* 254 (1986), 43.
- [5] JANOT CH., DUBOIS J.-M., DE BOISSIEU M.: *American Journal of Physics* 57 (1989), 972.
- [6] STEURER W.: *Zeitschrift für Kristallographie* 190 (1990), 179.
- [7] BRATKOVSKIJ A. M., DANILOV JU. A., KUZNECOV G. I.: *Fizika metallov i metalovedenje* 68 (1989), 1045.

- [8] DVOŘÁK V.: Čs. čas. fyz. A 38 (1988), 1.
[9] DVOŘÁK V.: Čs. čas. fyz. A 38 (1988), 105.
[10] MACKAY A. L.: *Symmetry* 1 (1990), 3.

Jak organizovat konferenci

I. M. James*)

Tak Vy tedy organizujete konferenci! Blahopřeji — ale (jako starý praktik) jsem zvědav, zda si dobře uvědomujete, do čeho se pouštíte! Je to hotová noční můra — všechny ty věci, o kterých píš, se mi skutečně staly. Na štěstí ne všechny najednou.

V den příjezdu telefonuje nejvýznamnější host, že nepřijde. V důsledku stávky železničářů přijede většina účastníků až na druhý den ráno ještě před svítáním. Přednášející, který měl zahajovat konferenci, je zadržen imigračními úřady, protože neměl v pořádku vízum. Hotel, kde všichni bydlí, Vám právě oznámil, že nedopatřením nebyla do předběžného rozpočtu zahrnuta místní turistická daň, a také, že nepřijímají platby kreditními kartami. Přijedou někteří lidé, kteří nebyli pozváni. Posluchárna rezervovaná pro zahájení konference — a je to jediná, která se pro tento účel hodí — byla omylem rezervována i pro jinou akci. V rozmnožovně se porouchal stroj. Několik lidí je nespokojeno s ubytováním a chtějí do jiného hotelu. Jiní se domnívali, že musí odcestovat během posledního dne přednášek a chtějí změnit všechny cestovní dispoziice. Jeden účastník chce k lékaři a jiný zase potřebuje zubaře. Zavazadla ještě dalšího účastníka nejsou k nalezení a někomu ukradli pas a cestovní šeky. A tak dále.

Co kdybych postupně probral některé z mnoha bodů, které ve svém postavení musíte mít na zřeteli. Předpokládám, že Vám jde o takovou obyčejnou konferenci — řekněme ne více než 100 účastníků — ale některé moje body se budou vztahovat na jakoukoli konferenci bez ohledu na počet účastníků a na dobu jejího trvání. Hned na začátku bych rád řekl jednu věc: Vy sám musíte mít možnost se celé konference plně účastnit. Znamená to vše pečlivě a podrobně naplánovat, aby se v průběhu konference nedělo nic, co by odvádělo Vaši pozornost — samozřejmě s výhradou událostí zcela nepředvídatelných. Je jisté, že budou problémy, avšak věřím, že krátce po zahájení

*) IOAN JAMES je savilský profesor geometrie v Oxfordu. Pomáhal organizovat četné konference, zejména pak většinu periodicky se opakujících Oxfordských topologických symposií. Adresa: *Mathematical Institute, Oxford University, Oxford, England OX1 3LB.*