

ПОИСК АЛЬТЕРНАТИВ МНОГОМЕРНОМУ ОПИСАНИЮ ИКОСАЭДРИЧЕСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Мадисон А.Е.

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29,
e-mail: alex_madison@mail.ru*

Открытие квазикристаллов Шехтманом¹ причисляют к важнейшим вехам в развитии современной кристаллографии. Оно привело к смене парадигмы в нашем понимании природы химических структур. Под термином кристалл мы теперь понимаем любое твердое тело, обладающее существенно дискретной дифракционной картиной. Согласно более строгому математическому определению аперриодический кристалл – это распределение дискретных точечных масс, обладающее дискретным Фурье-образом.

Структуру квазикристаллов обычно описывают в рамках многомерной кристаллографии при помощи проецирования на 3D подпространство². Нами предлагается альтернативный подход, основанный на использовании разбиения Соколара-Стейнхардта совместно с формализмом квази-элементарных ячеек³. Четыре типа ячеек заполняют пространство без зазоров и перекрытий. Каждая ячейка декорируется конкретными атомами и ассоциирована с триадой: тип, положение и ориентация. Ключевыми идеями предлагаемого подхода являются разложение икосаэдрической группы на стабилизатор и орбиту, оригинальные правила подстановок для квази-элементарных ячеек и рекурсивные правила инфляций/дефляций для заполнения всего пространства⁴⁻⁶. Наш метод доказал свою эффективность в области фотонных квазикристаллов⁷. Аналогичный подход может быть адаптирован и к другим типам, в том числе с симметрией 7-го порядка^{8,9}.

Литература

1. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J.W. Phys. Rev. Lett., 1984, 53, 70.
2. Steurer W., Deloudi S. Crystallography of quasicrystals. Concepts, methods and structures. – Berlin, Germany: Springer, 2009.
3. Madison A.E., Madison P.A. Proc. Roy. Soc. A, 2019, 475, 20180667.
4. Madison A.E. Struct. Chem., 2015, 26, 923.
5. Madison A.E. RSC Adv., 2015, 5, 5745.
6. Madison A.E. RSC Adv., 2015, 5, 79279.
7. Jeon S.Y., Kwon H., Hur K. Nature Phys., 2017, 13, 363.
8. Madison A.E. Struct. Chem., 2017, 28, 57.
9. Madison A.E. Struct. Chem., 2018, 29, 645.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России, проект № 16.8549.2017/8.9.