

Лекция 12

Структуры интерметаллидов.

Квазикристаллы.

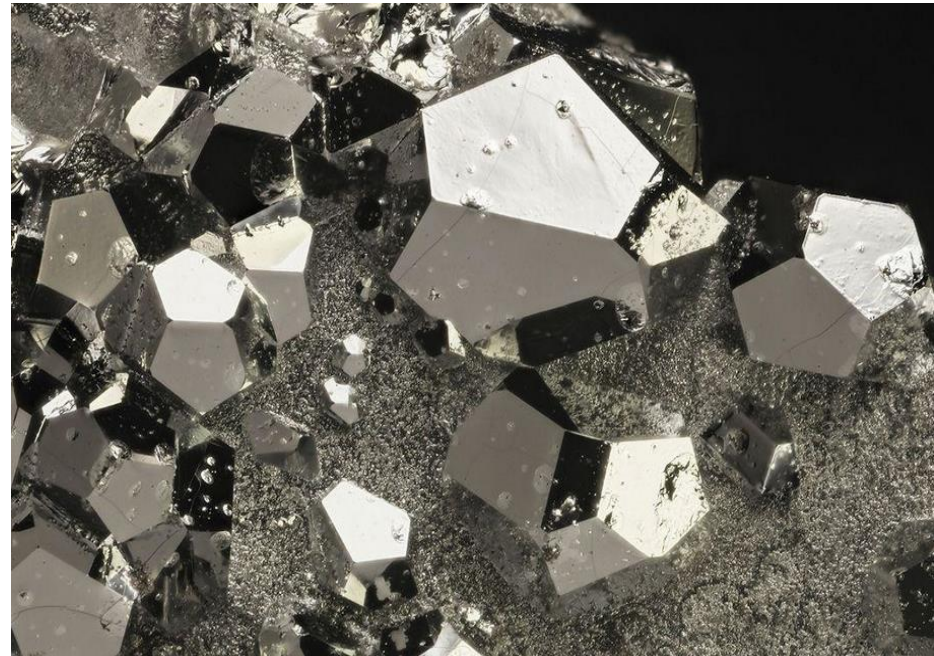
«Некристаллографическая симметрия»

Квазикристалл — одна из форм организации твердых тел, наряду с кристаллами и аморфными телами (стёклами), характеризующаяся с одной стороны запрещенной в классической кристаллографии симметрией, с другой стороны - наличием дальнего порядка.

Ах как похожи!?

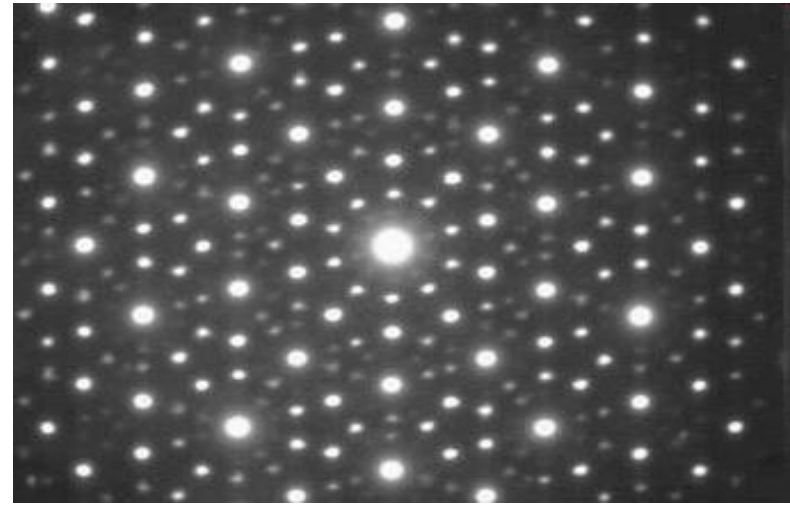


Пирит FeS_2



Техногенный минерал $\text{Si}_{61}\text{Cu}_{30}\text{Ca}_7\text{Fe}_2$

Квазикристаллы



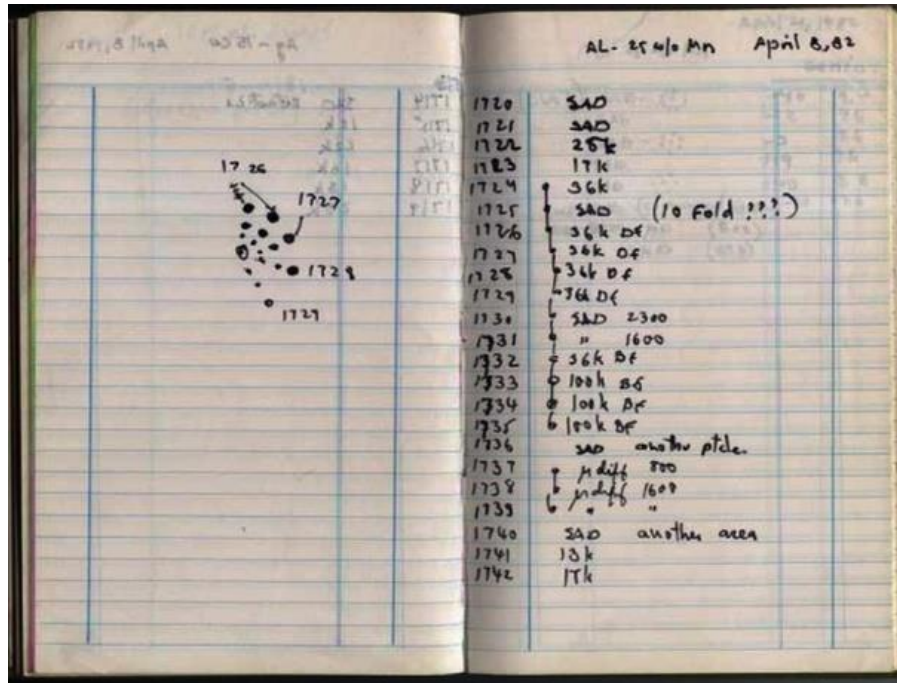
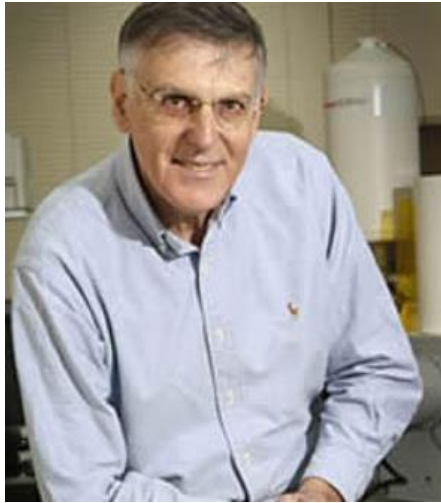
Дифракционная картина



В отличие от жидкостей и аморфных тел **в квазикристаллах сохраняется дальний порядок**. Главная особенность – запрещенная вращательная симметрия **при сохранении**, четкости рефлексов

Подтверждение XRD на большом кристалле в 1987г.

Открытие квазикристаллов



Дан Шехтман –
Нобелевский лауреат 2011г.

Утром 8 апреля 1982 года инженер Д.Шехтман произнес «**Нет такого зверя**» и сделал в лабораторном журнале «**10-го порядка???**». Получив еще несколько снимков, Шехтман нашел аналогию между структурой этого интерметаллида и икосаэдром, обладающим осью 5-го порядка. Публикация 1984г в журнале *Physical Review Letters*.

Далее были установлены соединения с осями 7, 8, 10, 12.

Но путь к признанию у квазикристаллов был не быстр и тернист. Только в 2011 году была присуждена **Нобелевская премия** за это открытие.



The Nobel Prize in Chemistry 2011 was awarded to Dan Shechtman "for the discovery of quasicrystals".





Л.Полинг: “There is no such thing as quasi-crystals, only quasi-scientists”.

LESSONS THAT I LEARNED

Finally, I would like to re-emphasize some of the lessons that life has taught me.

Be a professional: In any endeavor that you choose in any field, strive to be the best. Choose what you like or what you are good at, and become an expert in that field. I promise you, you will have a wonderful career.

Tenacity - упорство: If you discover something, hold on to it like a Rottweiler, and do not let go until you analyze what it is. In most cases, it will be an artifact, but in some cases, you will have made a great discovery. Do not let go.

Believe in yourself: If you have mastered your field, believe in yourself. Be your own worst critic, but if you have thoroughly checked your results and verified that they are real, take pride in your discovery and defend it.

Courage: Last but not least, you must have courage. Even when the top leaders in your field say that you are talking nonsense, you must have the courage to say that they are wrong.

УРОКИ, КОТОРЫЕ Я ИЗВЛЕК

Будьте профессионалом: в любом деле, которое вы выберете, стремитесь быть лучшим.

Выберите то, что вам нравится или в чём вы хороши, и станьте экспертом в этой области. Обещаю, вас ждёт прекрасная карьера.

Упорство: если вы что-то открыли, держитесь за это, как ротвейлер, и не отпускайте, пока не проанализируете, что это такое. В большинстве случаев это будет артефакт, но в некоторых случаях вы сделаете великое открытие.

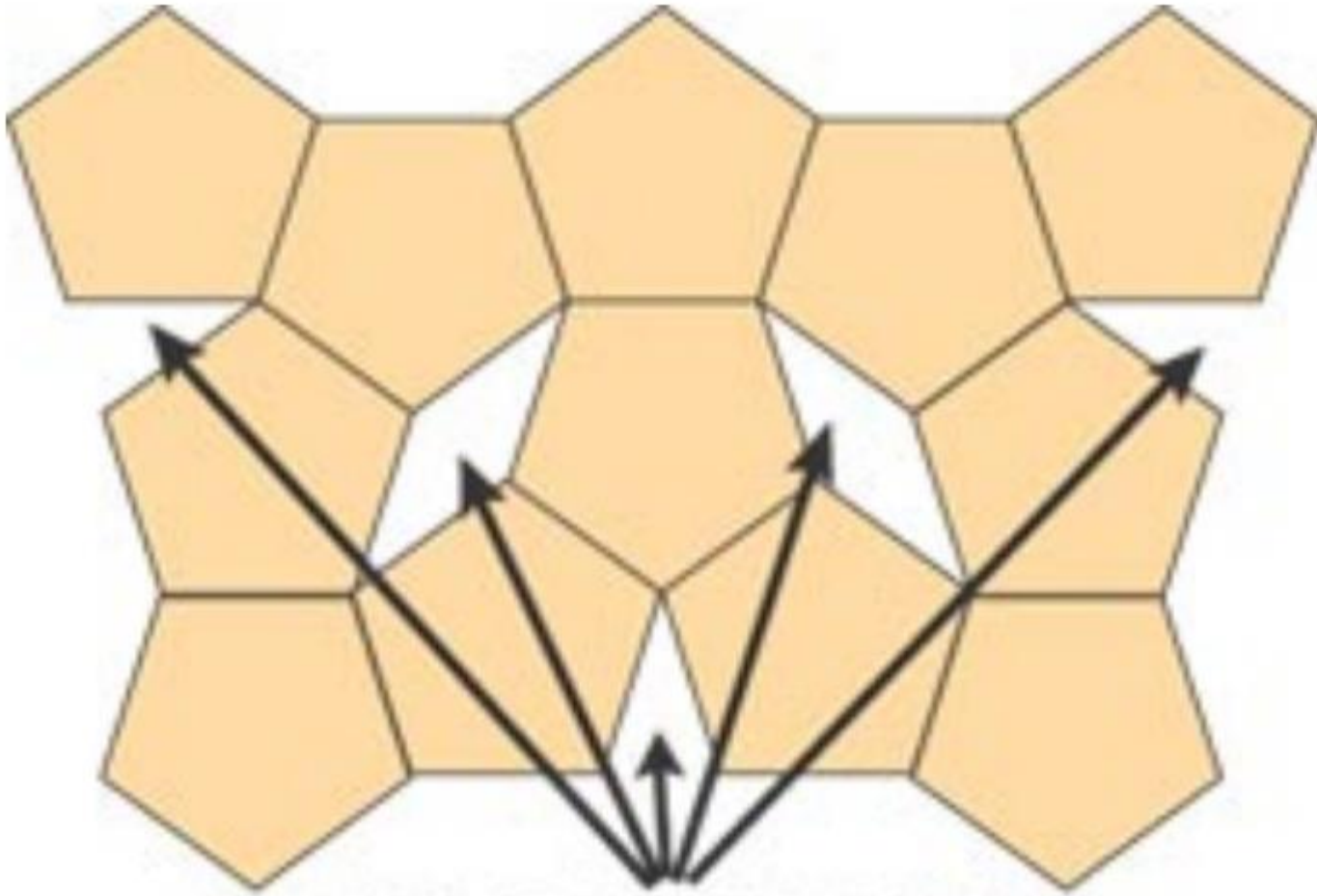
Не отпускайте. Верьте в себя: если вы мастерски владеете своей областью, верьте в себя. Будьте своим собственным строжайшим критиком, но если вы тщательно проверили свои результаты и убедились в их реальности, гордитесь своим открытием и защищайте его.

Смелость: и последнее, но не менее важное: у вас должно быть мужество. Даже когда ведущие специалисты в вашей области говорят, что вы говорите чушь, у вас должно быть мужество сказать, что они неправы.

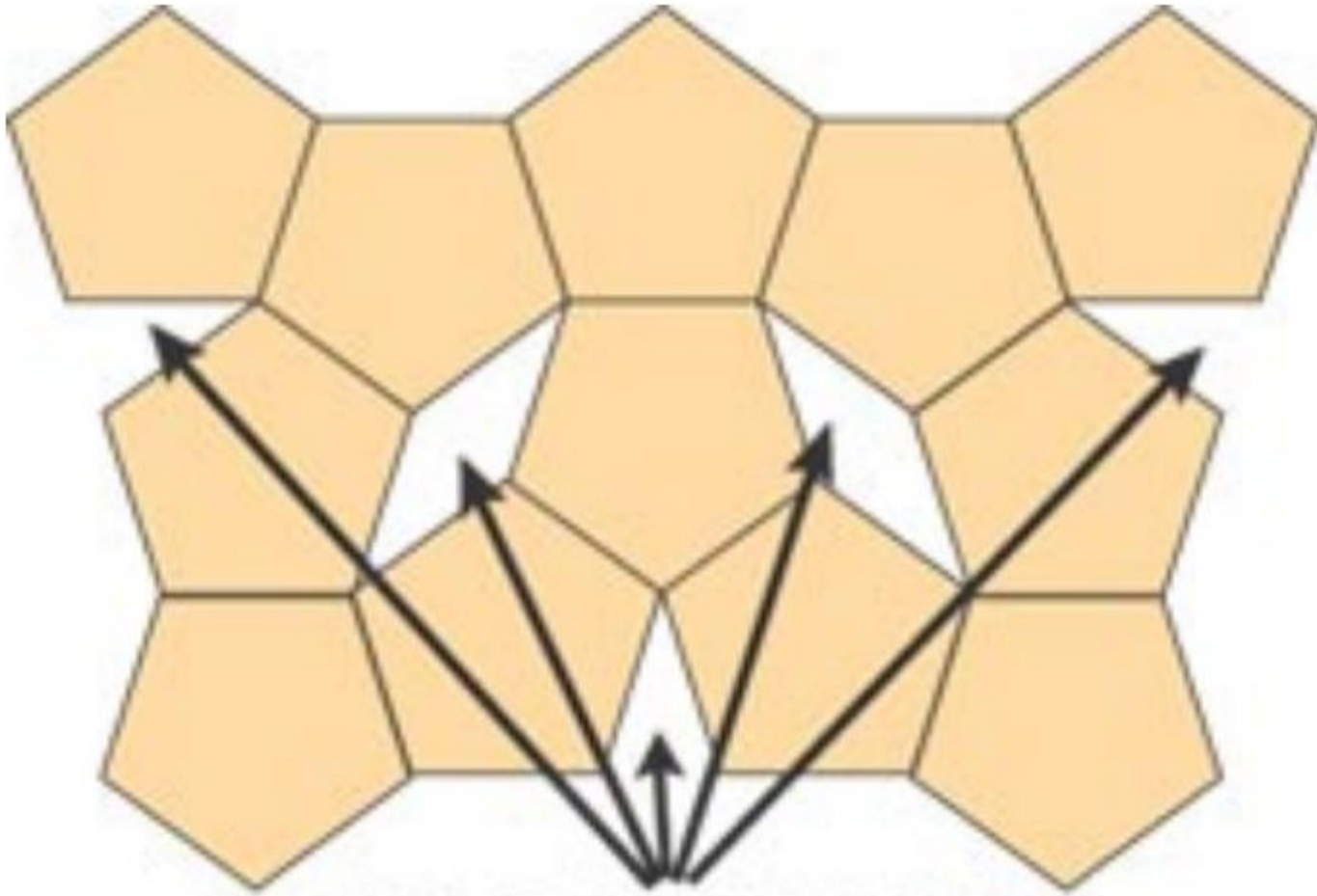
**Цветки многих растений обладают осью 5-го порядка,
которая до последнего времени не наблюдалась в
неживой природе**



**Сетка из правильных пятиугольников имеет
пустые места - несогласования**



**И все таки она существует!
Ось пятого порядка есть!**



Пятерные оси существуют среди платоновых тел (правильных многогранников).

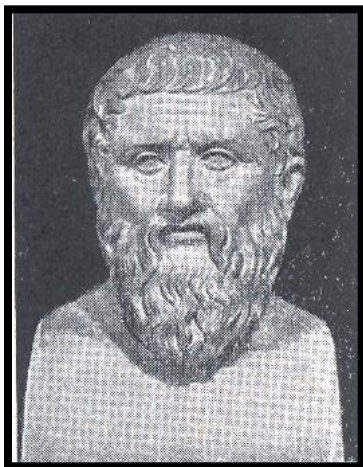
У правильных многогранников

все вершины и грани одинаковы

все грани – правильные многоугольники

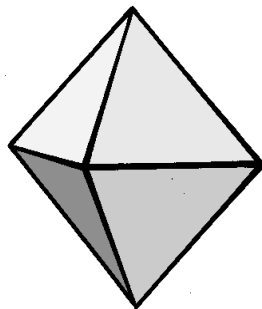
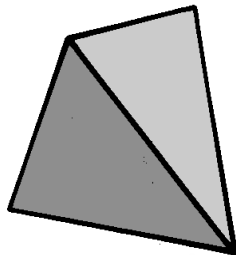
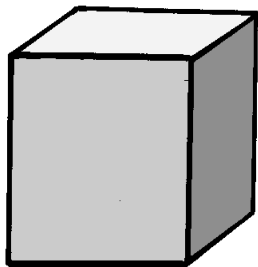
Легко вывести все возможные правильные многогранники, учитывая, что сформировать вершину могут не меньше трех граней, а сумма углов при вершине не превышает 360° :

- 3 равносторонних треугольника с углом 60° . $60^\circ \times 3 = 180^\circ$ **тетраэдр**
- 4 равносторонних треугольника с углом 60° . $60^\circ \times 4 = 240^\circ$ **октаэдр**
- 5 равносторонних треугольников с углом 60° . $60^\circ \times 5 = 300^\circ$ **икосаэдр**
- 6 таких треугольников дают уже $60^\circ \times 6 = 360^\circ$ - **нельзя!**
- 3 квадрата ($90^\circ \times 3 = 270^\circ$) **гексаэдр**
- 3 правильных пятиугольника ($108^\circ \times 3 = 324^\circ$) **додекаэдр**
- 3 правильных шестиугольника ($120^\circ \times 3 = 360^\circ$) – **нельзя!**

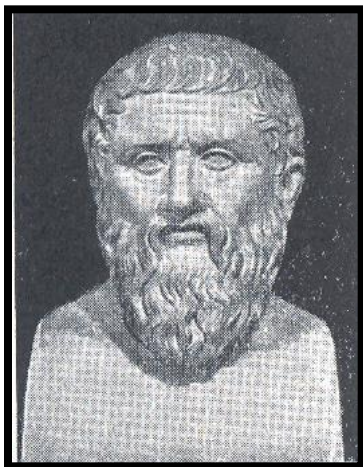


Платон
(428 – 348 гг. до.н.э)

Из 5 платоновых тел в кристаллах встречаются только 3: гексаэдр, тетраэдр и октаэдр

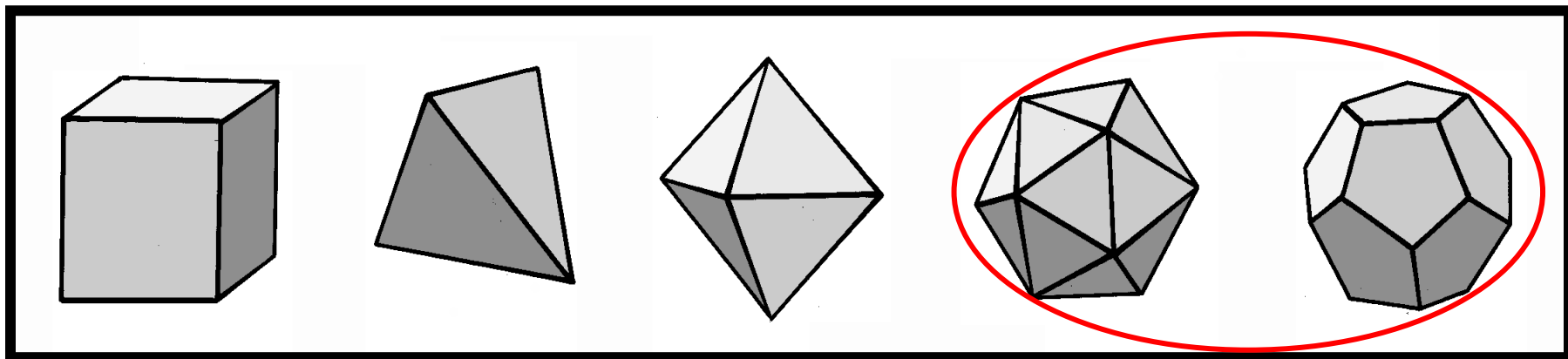


В «изгои» попали правильный пентагон-додекаэдр и икосаэдр, что связано с наличием в их классах симметрии осей пятого порядка, которые до недавних пор считались запрещенными в объектах с дальним порядком.



5 платоновых тел – 5 правильных многогранников

Платон
(428 – 348 гг. до.н.э)



Формула Эйлера (Декарта):

$$V+G=P+2$$

	V	G	V+G	P	P+2
тетраэдр	4	4	8	6	8
гексаэдр	8	6	14	12	14
октаэдр	6	8	14	12	14
икосаэдр	12	20	32	30	32
додекаэдр	20	12	32	30	32

Додекаэдр - двенадцатигранник, выпуклый объем которого ограничен в пространстве двенадцатью равносторонними и равными пятиугольниками. В каждой вершине соединяются три **пятиугольника**.

Икосаэдр - двадцатигранник, выпуклая поверхность которого, составлена двадцатью равносторонними и равными треугольниками. При вершинах соединяются по **пять** треугольников.

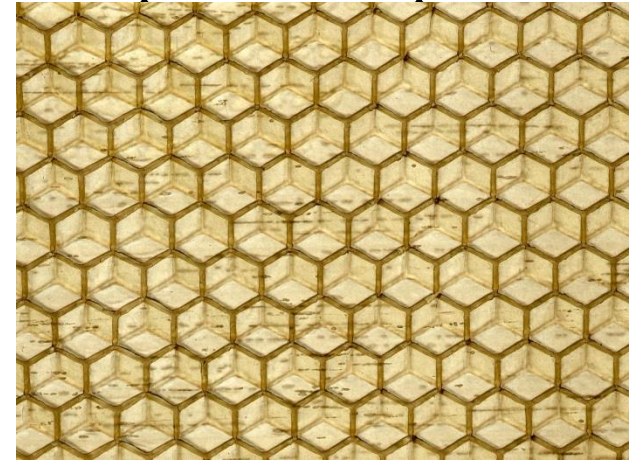
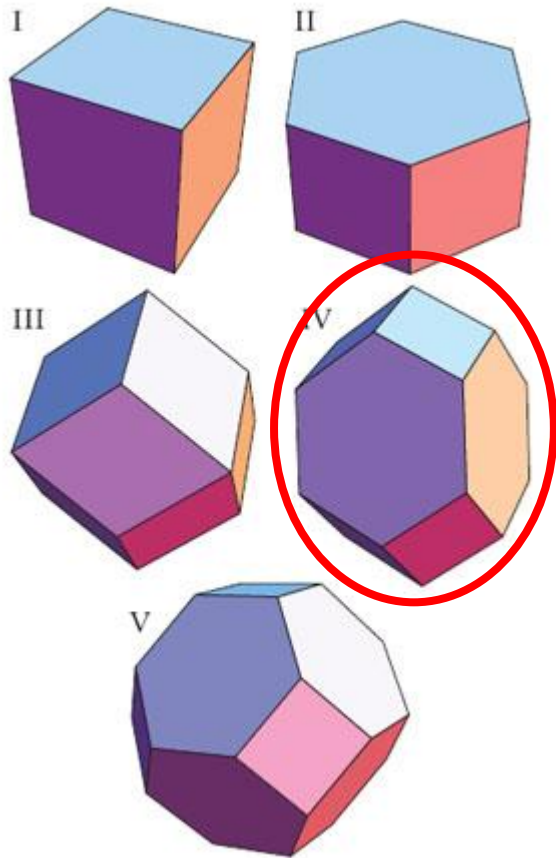
Правда же, удивительно, что правильные многоугольники так отличаются по свойствам

Если шестиугольники выложить на стол, станет ясно, что они покрывают плоскость без зазоров (пчелы!). Это свойственно также треугольникам и квадратам.



Последние наряду с пятиугольниками могут образовывать объемные тела. А вот сложить из шестиугольников, не деформировав их, объемное тело, невозможно. (3 правильных шестиугольника ($120^\circ \times 3 = 360^\circ$) – **нельзя!**)

Поэтому пчелам, как большим любителям шестиугольников, для построения объемных сот приходится «выкручиваться»: объемная форма сот - комбинация гексагональной призмы и тетрагональной бипирамиды, один из параллелоэдров Федорова

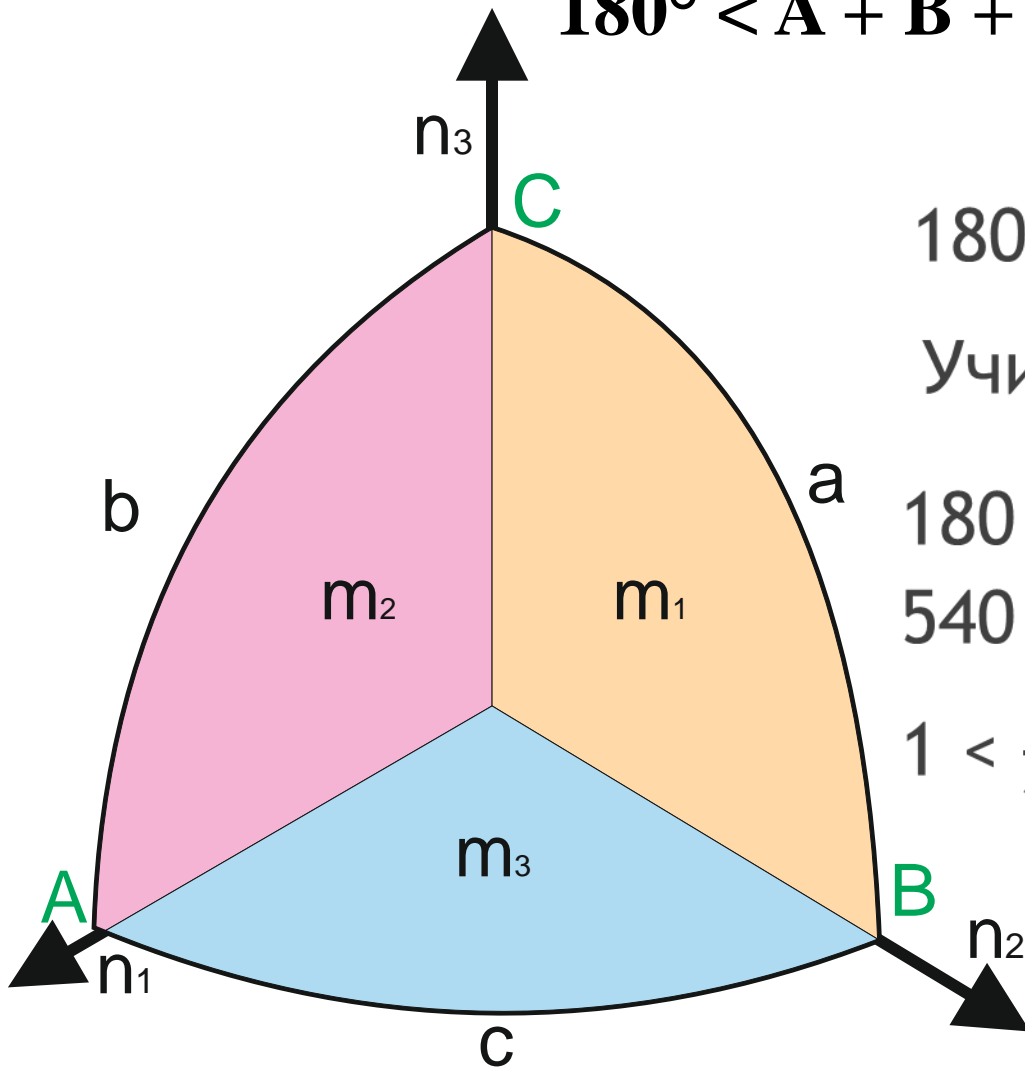


Теорема Эйлера

(о пересечении осей высших порядков)

Сумма углов треугольника в «сферическом» мире:

$$180^\circ < A + B + C < 540^\circ$$



$$180^\circ < 2\alpha_1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_3 < 540^\circ.$$

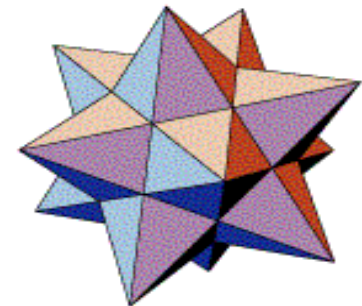
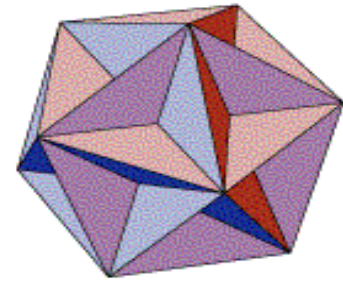
Учитывая, что $n = \frac{360^\circ}{\alpha}$

$$180^\circ < \frac{360^\circ}{2n_1} + \frac{360^\circ}{2n_2} + \frac{360^\circ}{2n_3} < 540^\circ$$

$$1 < \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} < 3$$

Возможные комбинации осей для всех многогранников

Комбинация осей	Неравенство Эйлера	Примеры многогранников
332	$\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{2} = 1,17 > 1$	Тетраэдры, пентагон-додекаэдры (кубические), тригон-три-тетраэдры, тетрагон-три тетраэдры, пентагон-три тетраэдры
333	$\frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 1!$	Не существуют
432	$\frac{1}{4} + \frac{1}{3} + \frac{1}{2} = 1,46 > 1$	Кубы, октаэдры, и др
532	$\frac{1}{5} + \frac{1}{3} + \frac{1}{2} = 1,03 > 1$	Пентагондодекаэдры (платоновы), икосаэдры и др
632	$\frac{1}{6} + \frac{1}{3} + \frac{1}{2} = 0,997 < 1$	Не существуют
542	$\frac{1}{5} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} = 0,95 < 1$	Не существуют



Тетраэдр



Гексаэдр (куб)



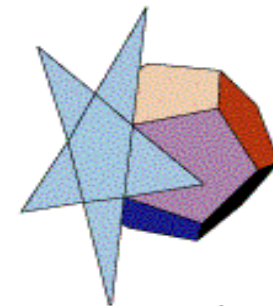
Октаэдр



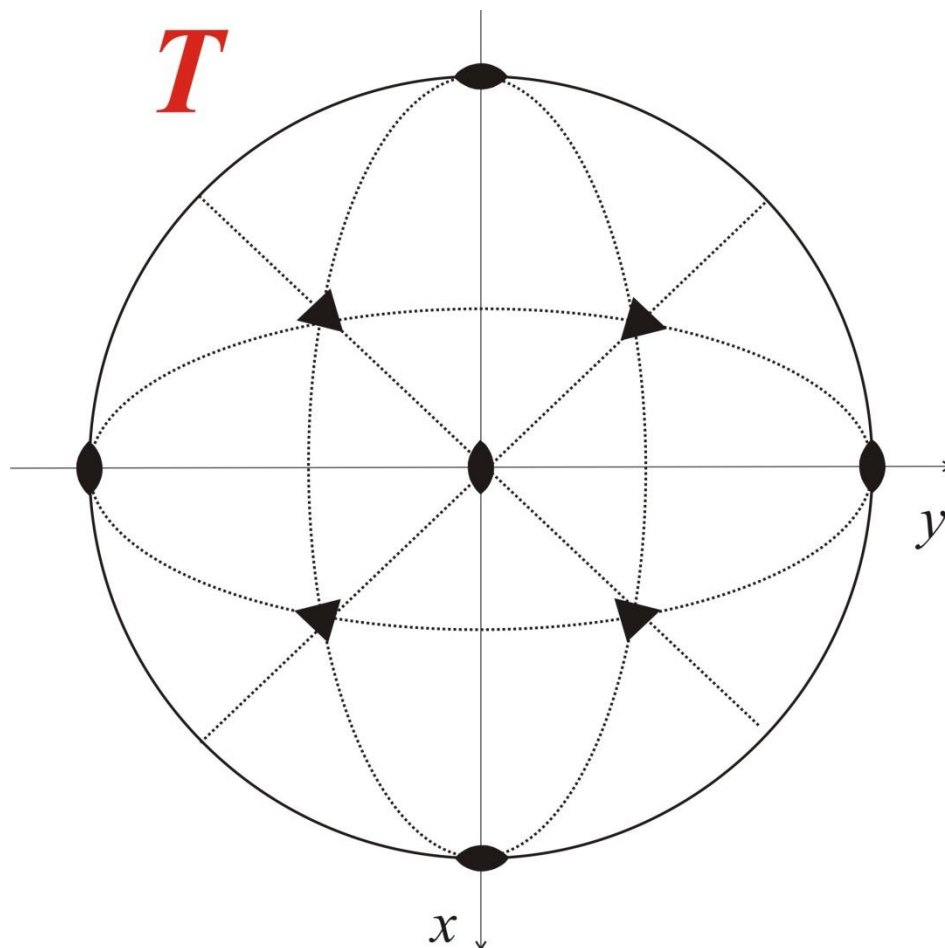
Додекаэдр



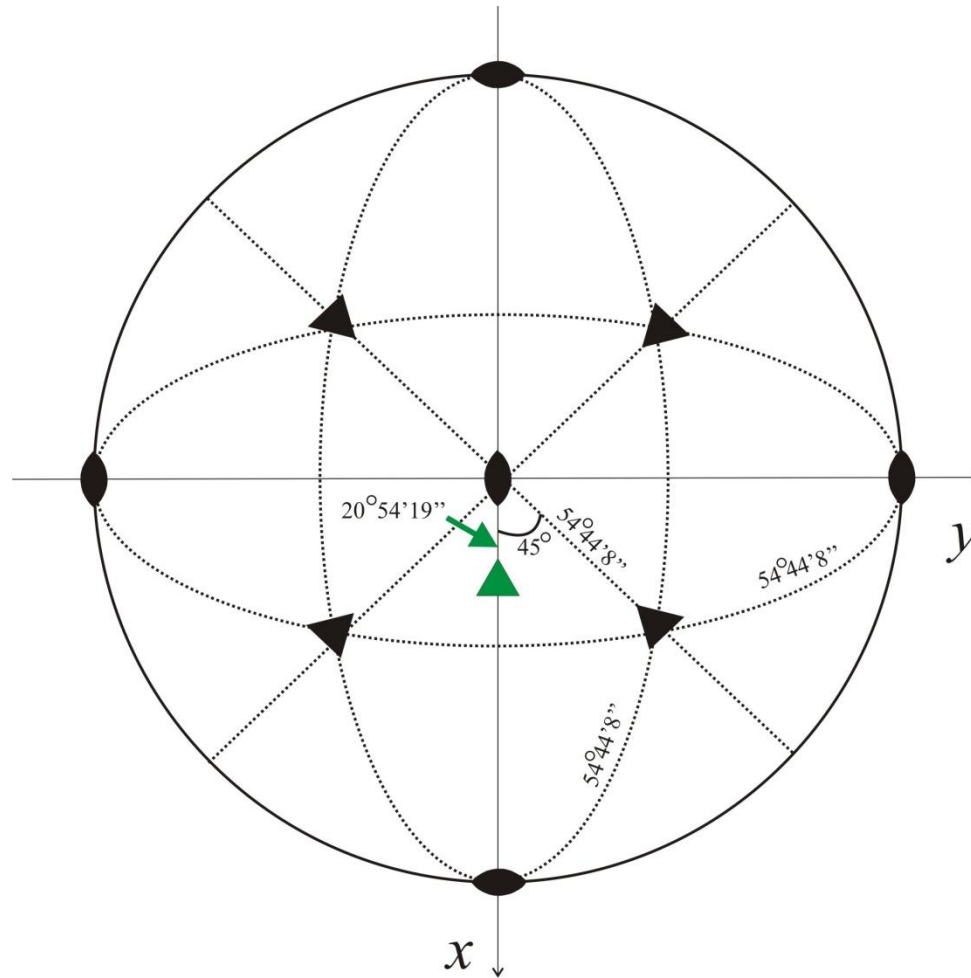
Икосаэдр



Вариант $L_5 - L_3 - L_2$ разрешает существование многогранников, причем высокосимметричных! Давайте попробуем разобраться в этом сочетании осей.



Для этого возьмем за основу известный нам класс T

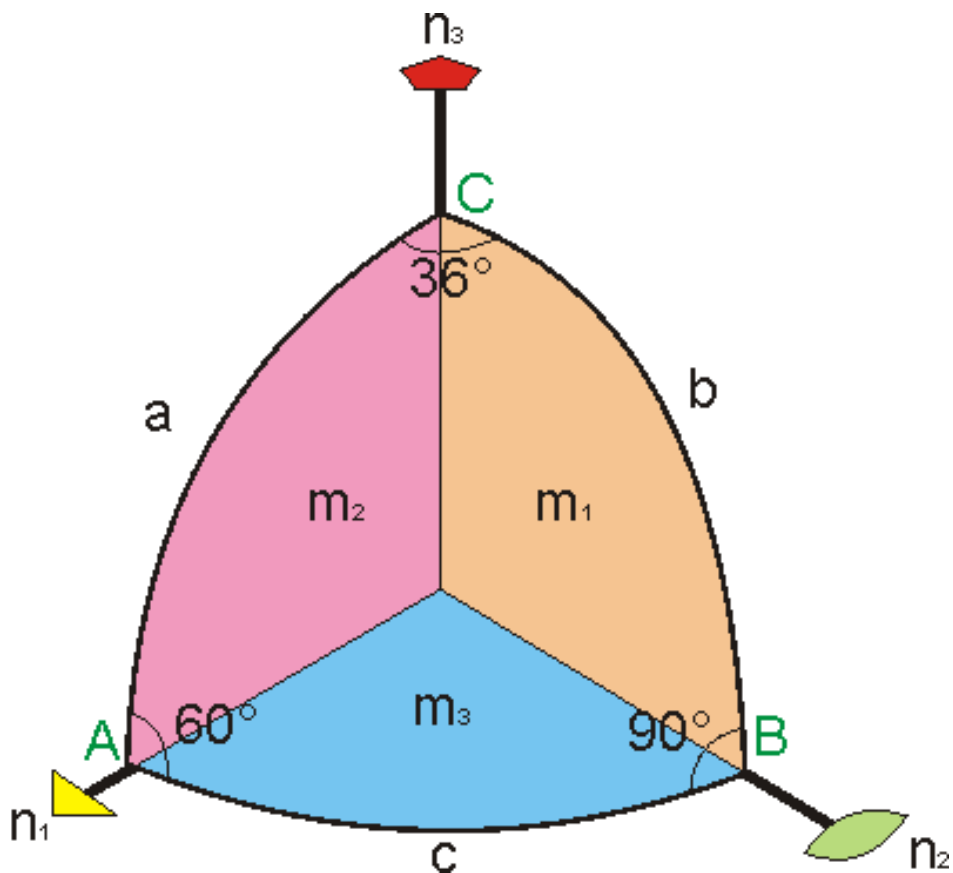


Введем еще одну **ось третьего порядка** в строго определенном месте!

Теорема косинусов в «сферическом» мире выглядит так

$$\cos A = \cos B \cos C + \sin B \sin C \cos a$$

Позволяет найти сторону по трем известным углам при его вершинах.

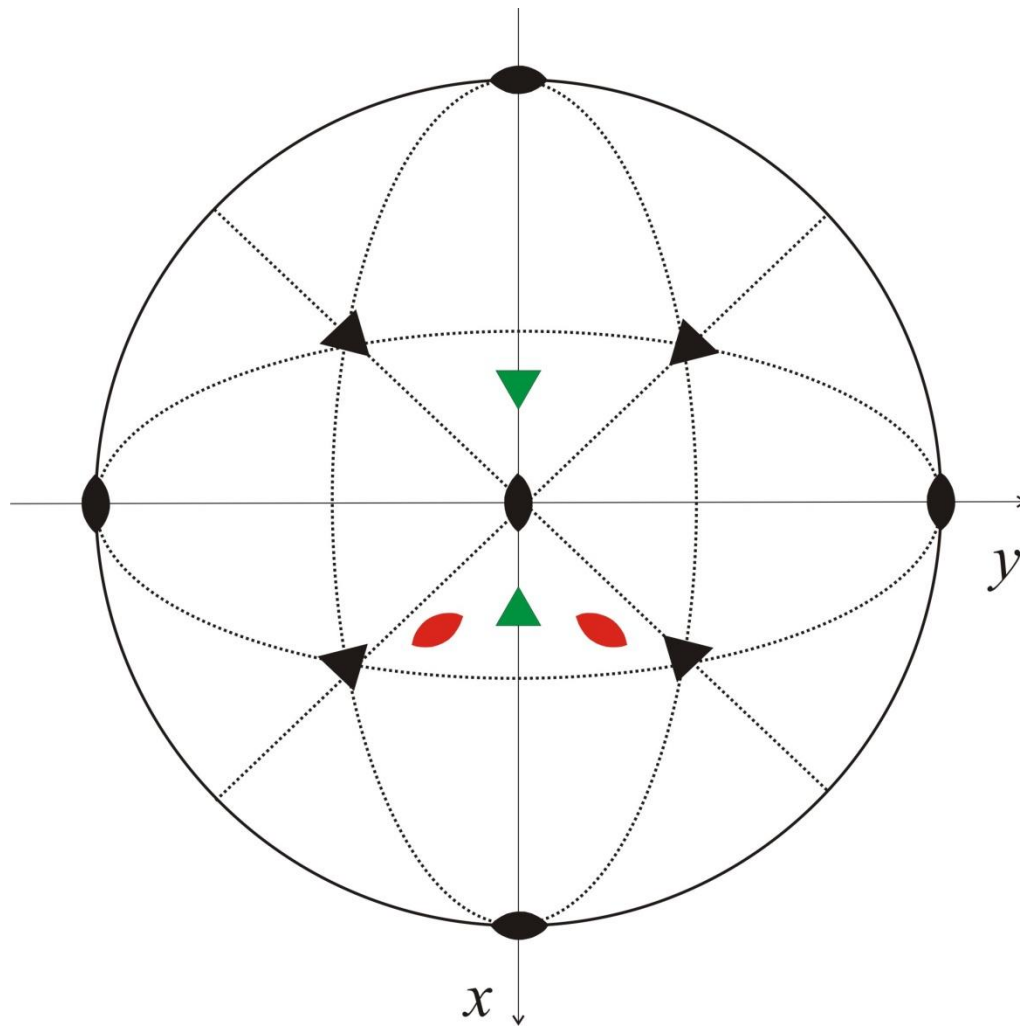


$$\cos a = \frac{\cos A - \cos B \cos C}{\sin B \sin C}$$

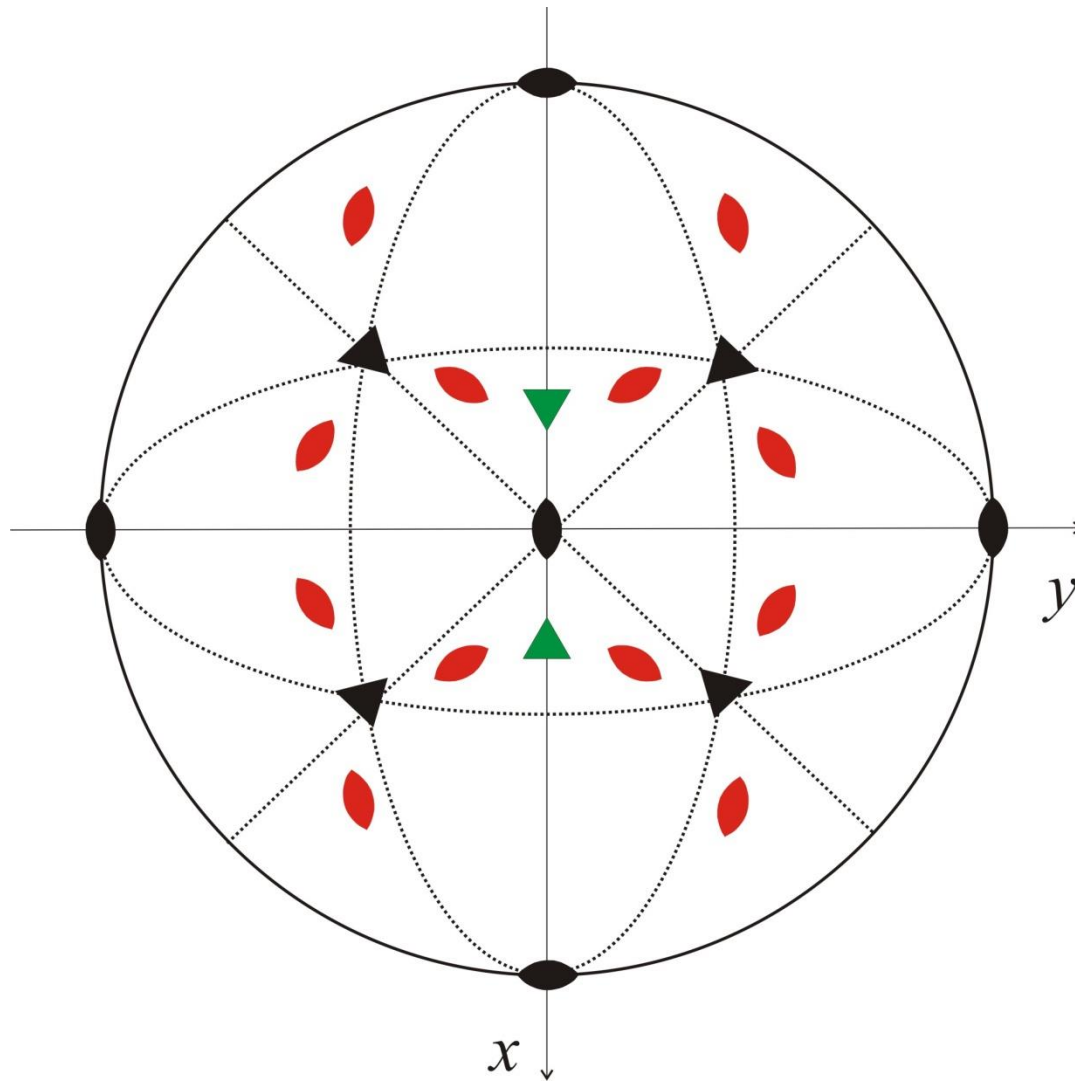
$$a \approx 37^\circ 22' 29''$$

$$b \approx 31^\circ 43' 3''$$

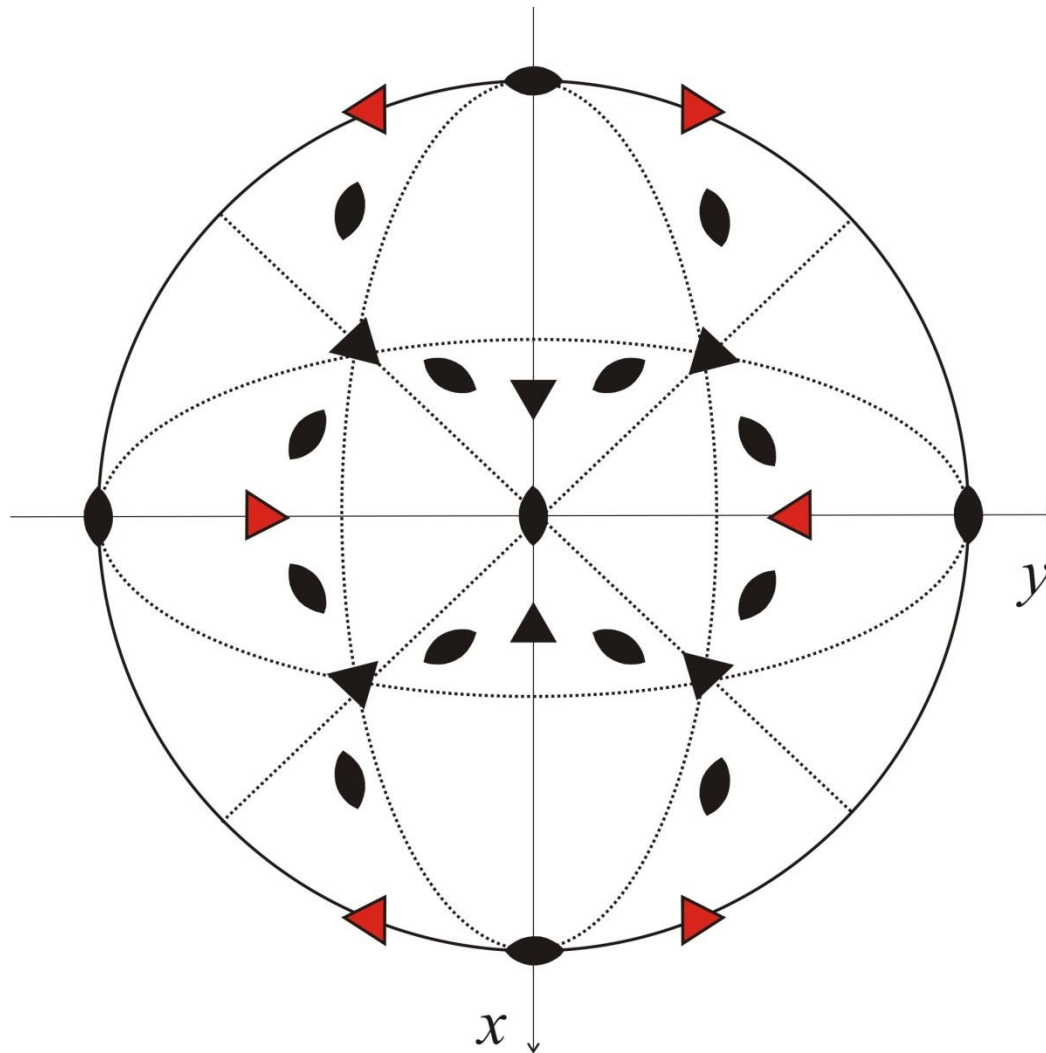
$$c \approx 20^\circ 54' 19''$$



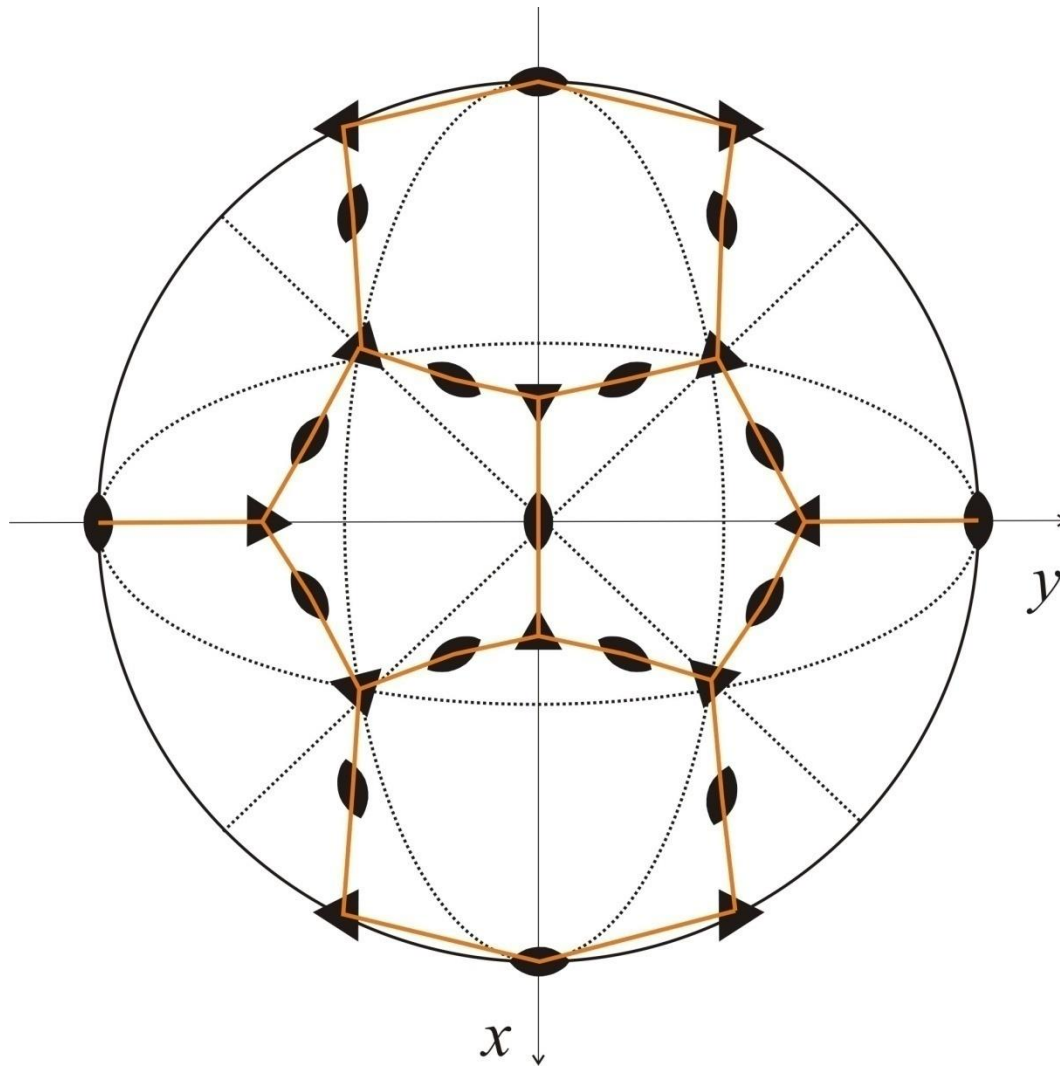
- 1) Размножим ее осью 2_z , получим еще одну ось **3**
- 2) Подействуем **зеленой L_3** на L_{2z} и с удивлением обнаружим, что **размноженные оси второго порядка** равноудалены от «черной» и «зеленой оси L_3



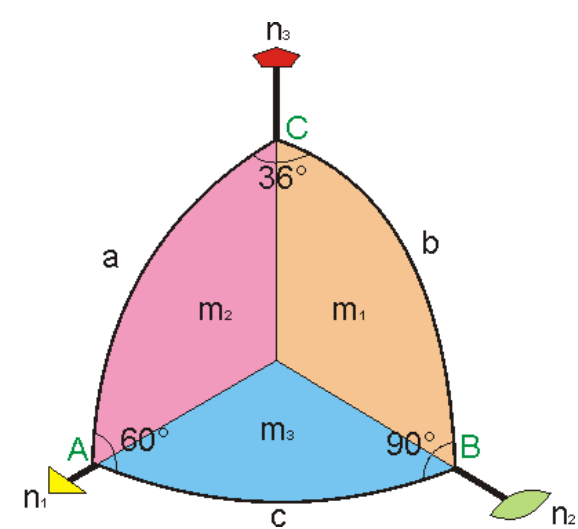
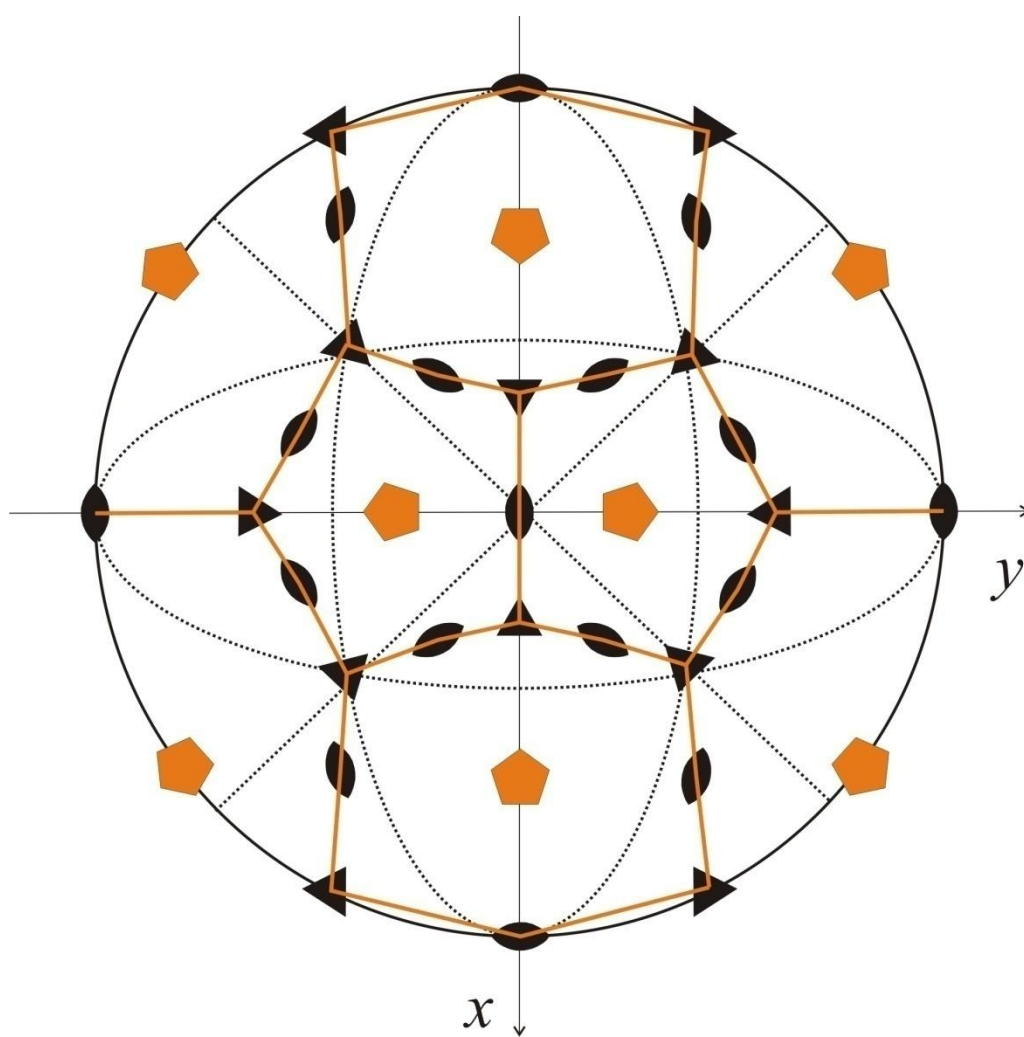
Размножаем с помощью **зеленых** и черных L_3 оси L_2 получим всего **12** новых осей второго порядка, показанных на рисунке **красным цветом**



**Доразмножаем с помощью осей L_2 оси L_3 получим еще 4!
(значков 6, но некоторые на экваторе и отмечаются оба выхода)
новых оси третьего порядка, показанных на рисунке красным
цветом. Итого всего на чертеже $10L_3$**



Обнаруживаем, что сфера проекций разделилась на 12 секторов, оконтуренных чередующимися осями L_3 и L_2 . Если соединить выходы осей L_3 прямыми отрезками (ребрами) получим правильный додекаэдр!



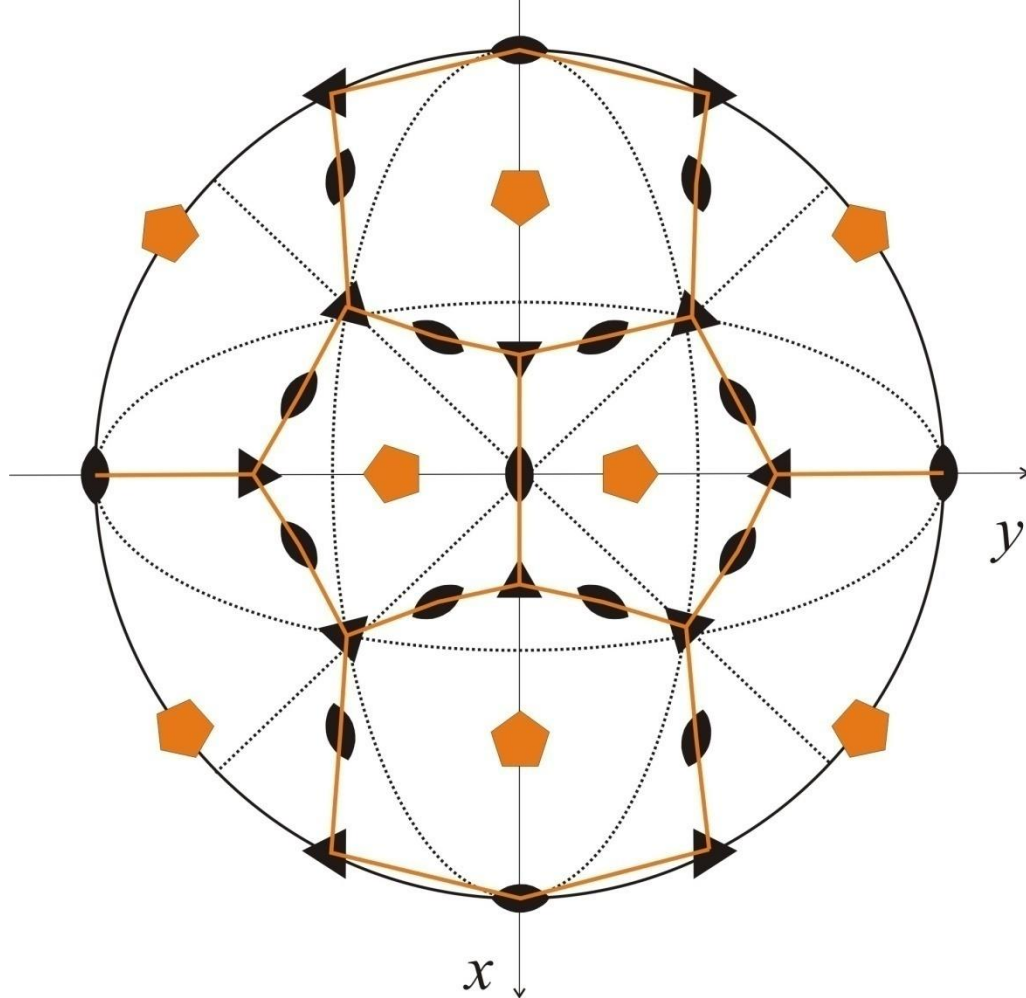
$$a \approx 37^\circ 22' 29''$$

$$b \approx 31^\circ 43' 3''$$

$$c \approx 20^\circ 54' 19''$$

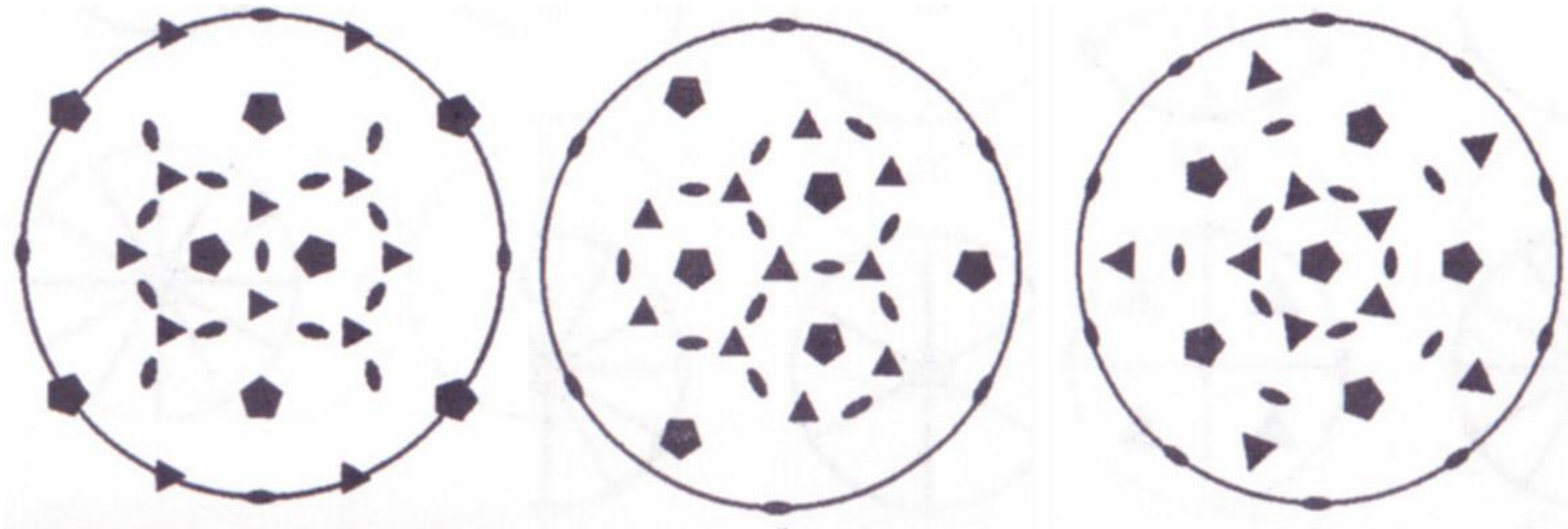
В центре сектора возникнут оси L_5 (в количестве 6)

Дальнейшие размножения не приводят к появлению новых осей симметрии. Давайте подсчитаем сколько.

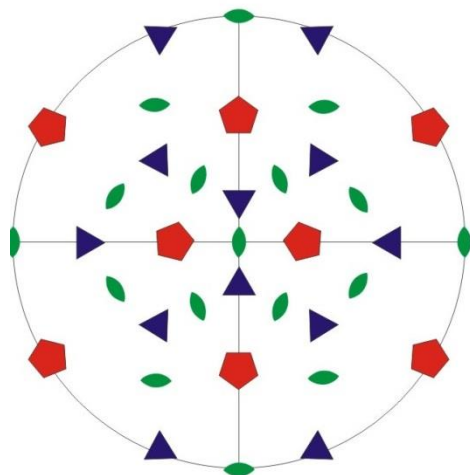


Группа Y: $6L_5 10L_3 15L_2$ с порядком группы 60 ($5 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 2$)

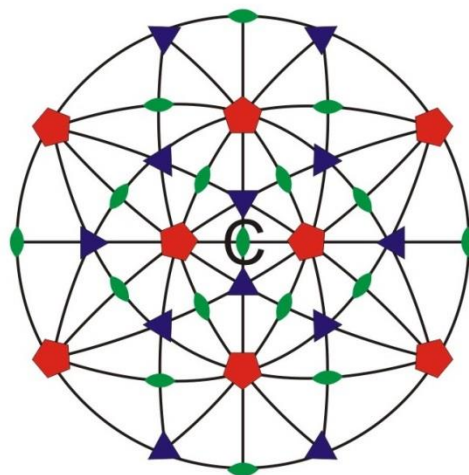
(самый высокосимметричный из 32 классов симметрии кристаллических многогранников обладает размножающей способностью всего лишь 48).



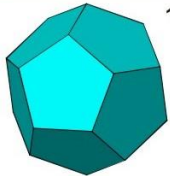
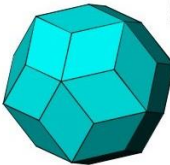




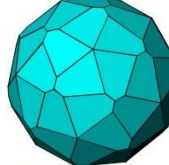

Эту группу часто рисуют, выбирая направление экваториальной плоскости перпендикулярно не L_2 , а L_3 или L_5 .
Красиво во всех вариантах, не так ли?



Группа I - $6L_5, 10L_3, 15L_2$

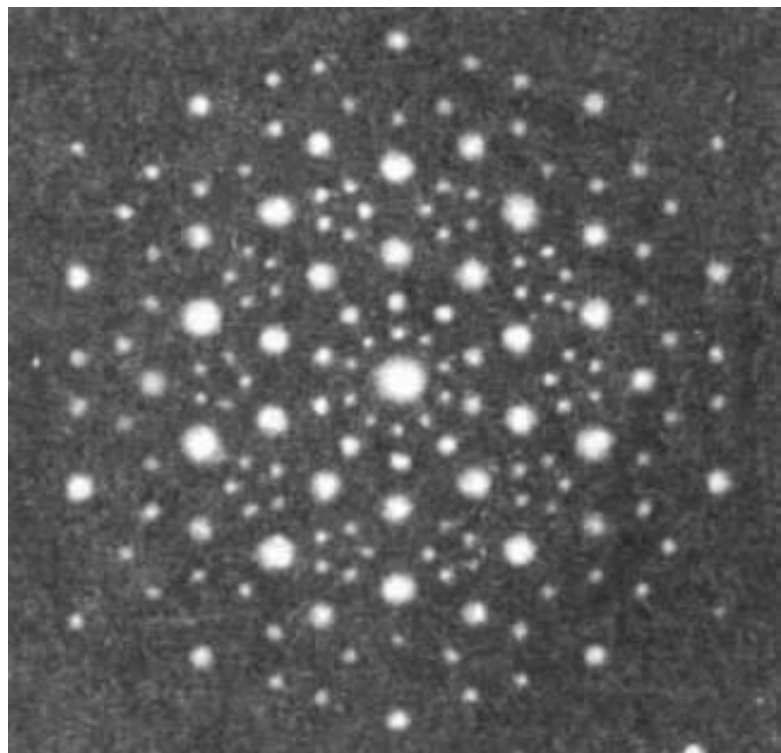


Группа I_h - $6L_5, 10L_3, 15L_2, 15PC$

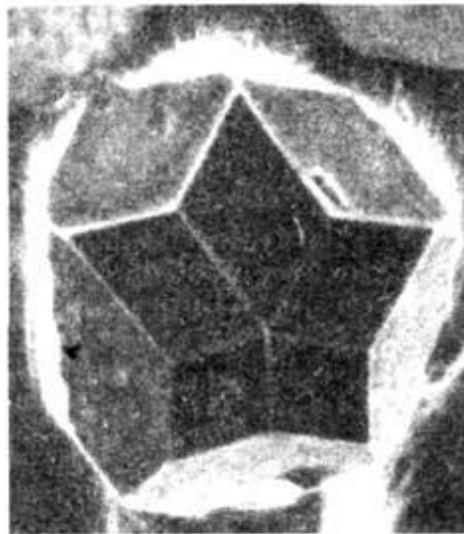
 <p>1</p> <p>Правильный пентагондодекаэдр</p>	 <p>2</p> <p>Ромбический триаконтаэдр</p>	 <p>3</p> <p>Икосаэдр</p>	 <p>4</p> <p>Пирамидальный икосаэдр (тригон-три-икосаэдр)</p>	 <p>5</p> <p>Пирамидальный додекаэдр (тригон-пента-додекаэдр)</p>	 <p>6</p> <p>Триаксис-икосаэдр (тетрагон-три-икосаэдр) (тетрагон-пента-додекаэдр)</p>	 <p>7</p> <p>Пентагональный пентагон-изоэдр (левый - правый) (пентагон-пента-додекаэдр)</p>	 <p>8</p> <p>Гексаксис-икосаэдр (тригон-дека-додекаэдр)</p>
<p>12 граней CCГ - $L_5 (I)$ CCГ - $L_5 5P (I_h)$</p>	<p>30 граней CCГ - $L_2 (I)$ CCГ - $L_2 2P (I_h)$</p>	<p>20 граней CCГ - $L_3 (I)$ CCГ - $L_3 3P (I_h)$</p>	<p>60 граней CCГ - $1 (I)$ CCГ - $P (I_h)$</p>	<p>60 граней CCГ - $1 (I)$ CCГ - $P (I_h)$</p>	<p>60 граней CCГ - $1 (I)$ CCГ - $P (I_h)$</p>	<p>60 граней общая форма класса I</p>	<p>120 граней общая форма класса I_h</p>

Первые квазикристаллы были получены напылением на быстро вращающемся диске с понижением температуры около 1000 000 000 градусов в секунду .

Таким образом весьма неравновесные. Сейчас существует большое количество равновесных квазикристаллов, полученных в результате медленного охлаждения.



Электроннограмма квазикристалла Al_6Mn .



а



б

а) Al_6CuLi_3 -триаконтаэдрическая огранка монокристаллического зерна

б) $AlCuFe$ додекаэдрическая огранка монокристаллического зерна

- Квазикристаллы образуются при скорости охлаждения $10^4 - 10^6$ К/с
 - Известно более 260 квазикристаллов
- Вначале получали в биметаллических системах: Al – Mn, Ni-Cr, Cd-Yb и др. В дальнейшем – в трех- и более компонентных системах: Al-Cu-Fe, Al-Mn-Si и др.
- В системе Al-Pd-Re было получено $Al_{70}Pd_{20}Re_{10}$ ие)

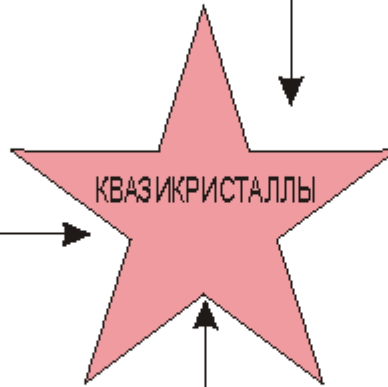
ALLOY COMPOSITIONS KNOWN TO FORM THE ICOSAHEDRAL PHASE

Al-содержащие

Al	Al-Co				
	Al-Cr	Al-Cr-Ge	Al-Cr-Si	Al-Cr-Mn-Si	Al-Cr-Zr-Mn
	Al-Fe	Al-Fe-Mn	Al-Fe-Si	Al-Fe-Mn-Si	
	Al-Mn	Al-B-Mn	Al-Ge-Mn	Al-Ni-Mn	Al-Ru-Mn
	Al-Ni				
	Al-Pt				
	Al-Ti				
	Al-V				
	Al-Cu	Al-Cu-Li Al-Cu-Fe	Al-Cu-Mn	Al-Cu-Mn-Zn	Al-Cu-V
		Al-Ag-Mg Ga-Mg-Zn	Al-Au-Li	Al-Zn-Li	Al-Mg-Zn

Способствуют повышению прочности металлических сплавов. В отличие от металлов проводимость с ростом температуры увеличивается. Большинство диамагнитны. Обладают малой теплопроводностью.

В 1956г. кристаллографы
Ф. Франк и Д.Каспер описали
плотноупакованные структуры интерметаллидов
с локальной икосаэдрческой симметрией и
предсказали структуры с дальним
икосаэдрическим порядком



В 1977 году опубликован
материал про аperiodические
мозаики Пенроуза



Гости из другого измерения.
В настоящее время на основе новых достижений
алгебраической геометрии метод описания
конденсированных сред используя
многомерные пространства
(E6, E8).

Сплав AlCuFe
(алюминий-медь-железо)
привлек внимание химиков
своей странной дифракцией еще
в 1939 году,

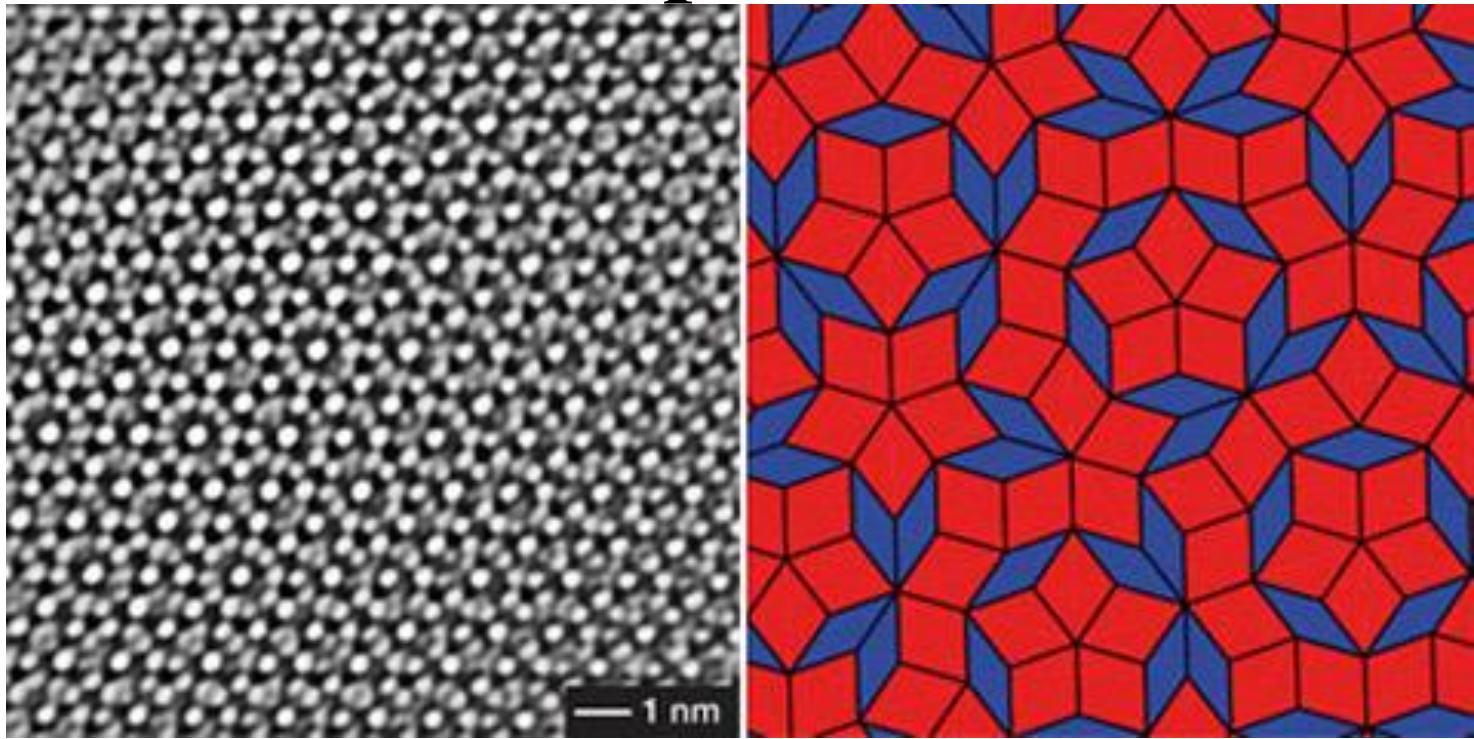


Как же устроены квазикристаллы?

Для объяснения структуры квазикристаллов необходимо отказаться от кристаллической решетки в ее обычной форме. Существует две модели представления строения квазикристаллов:

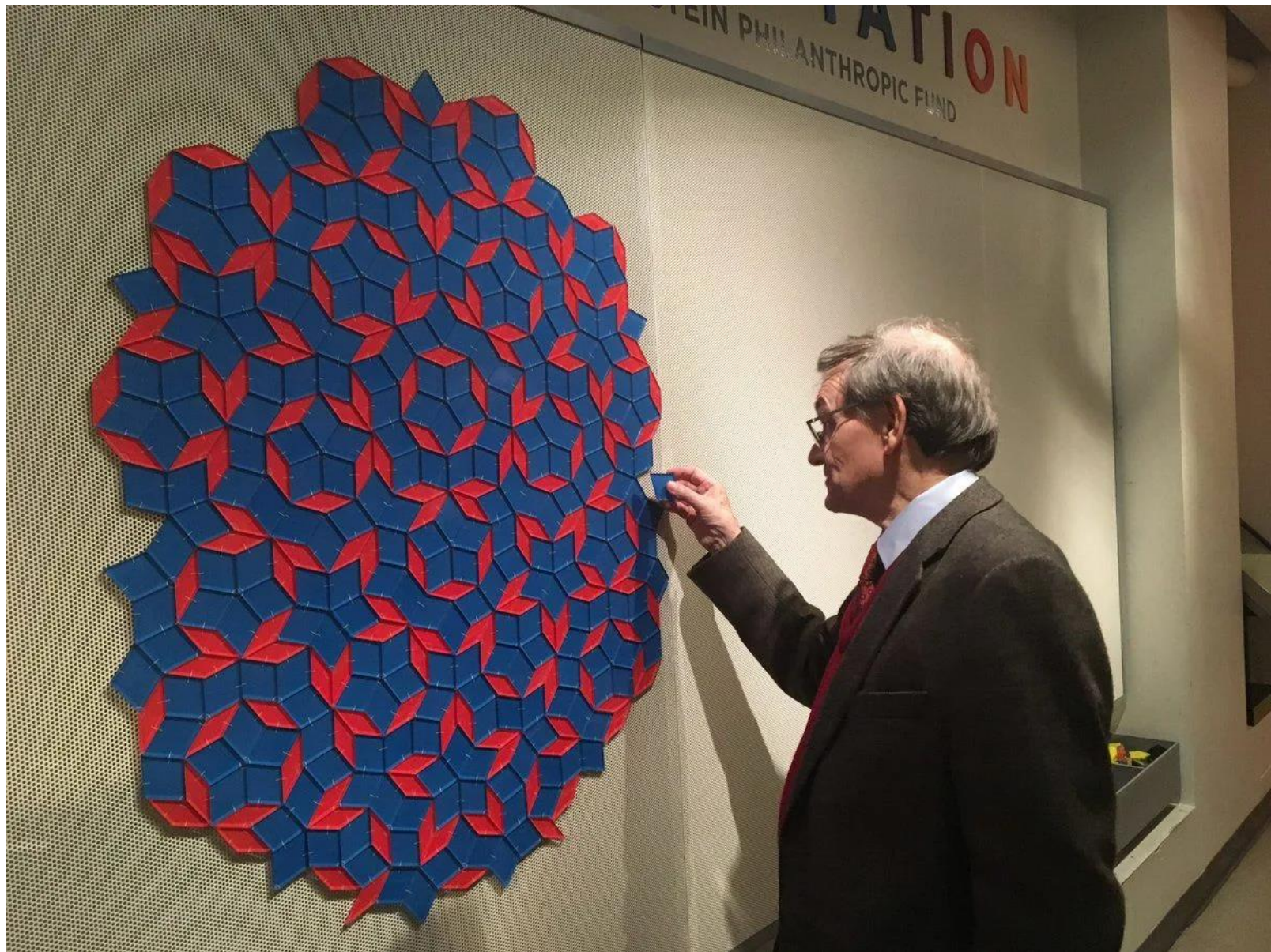
1. Представление структуры квазикристаллов в виде трансляционной шестимерной решетки,
2. Аппроксимация структуры квазикристаллов аперiodическими трехмерными мозаиками, построенными по принципу двумерной мозаики Пенроуза.

Квазикристаллы



«Невозможно идеальной» называют решётку квазикристалла учёные. Слева показан снимок одного из найденных зёрен, полученный с помощью трансмиссионного электронного микроскопа высокого разрешения (HRTEM). Справа: мозаика Пенроуза. Не правда ли похоже? (фото Science/AAAS)

Представление строения квазикристаллов на основе геометрического принципа мозаики Пенроуза



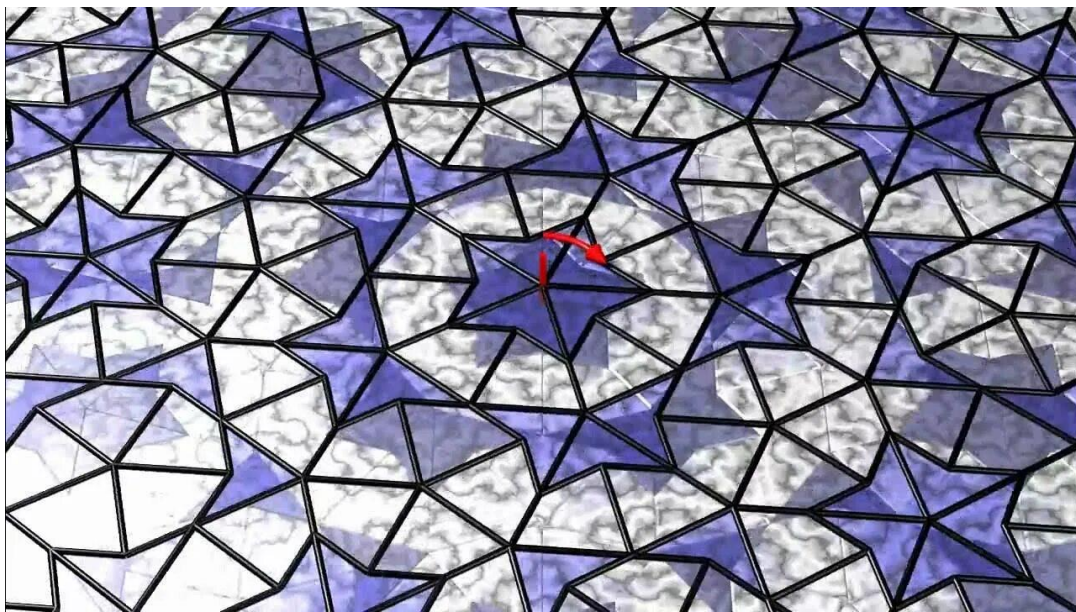
Представление строения квазикристаллов



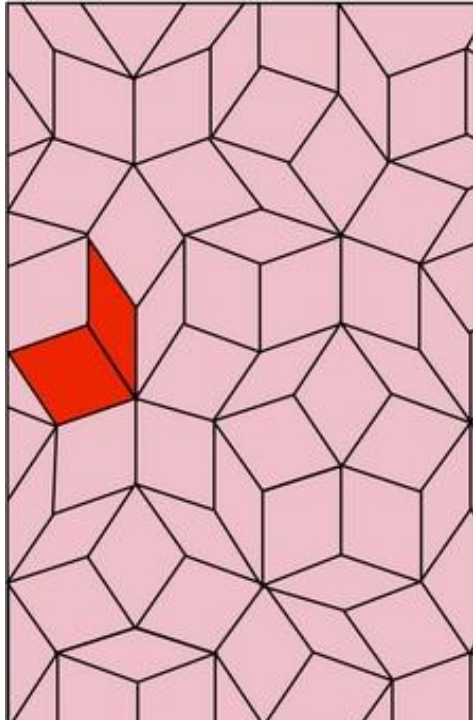
Роджер Пенроуз

Лауреат нобелевской премии по физике 2020 года «за открытие того, что образование чёрных дыр следует из общей теории относительности».

Представление строения квазикристаллов

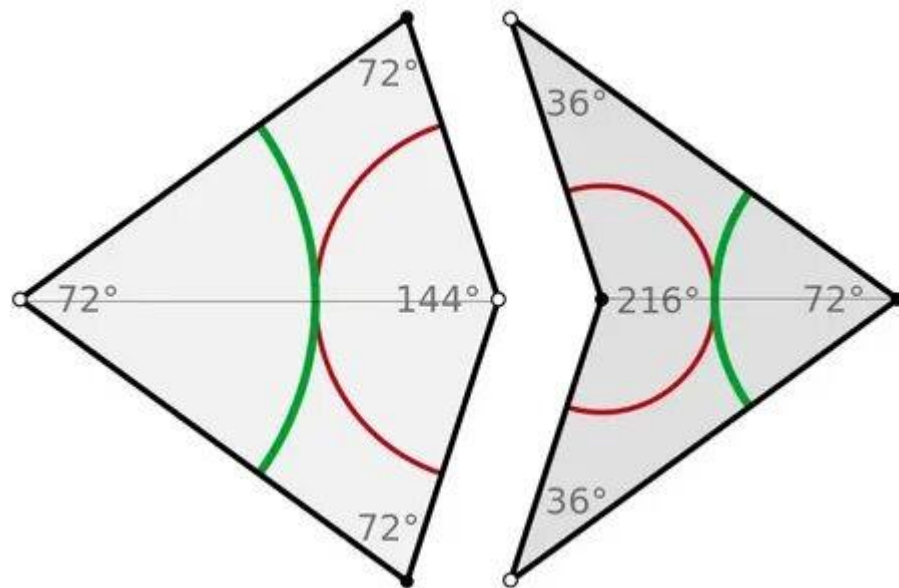


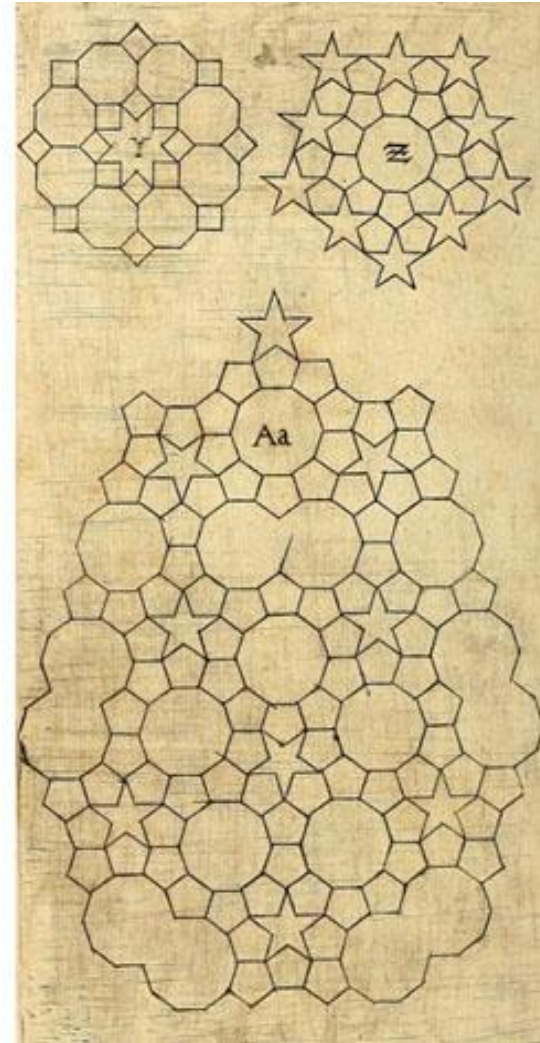
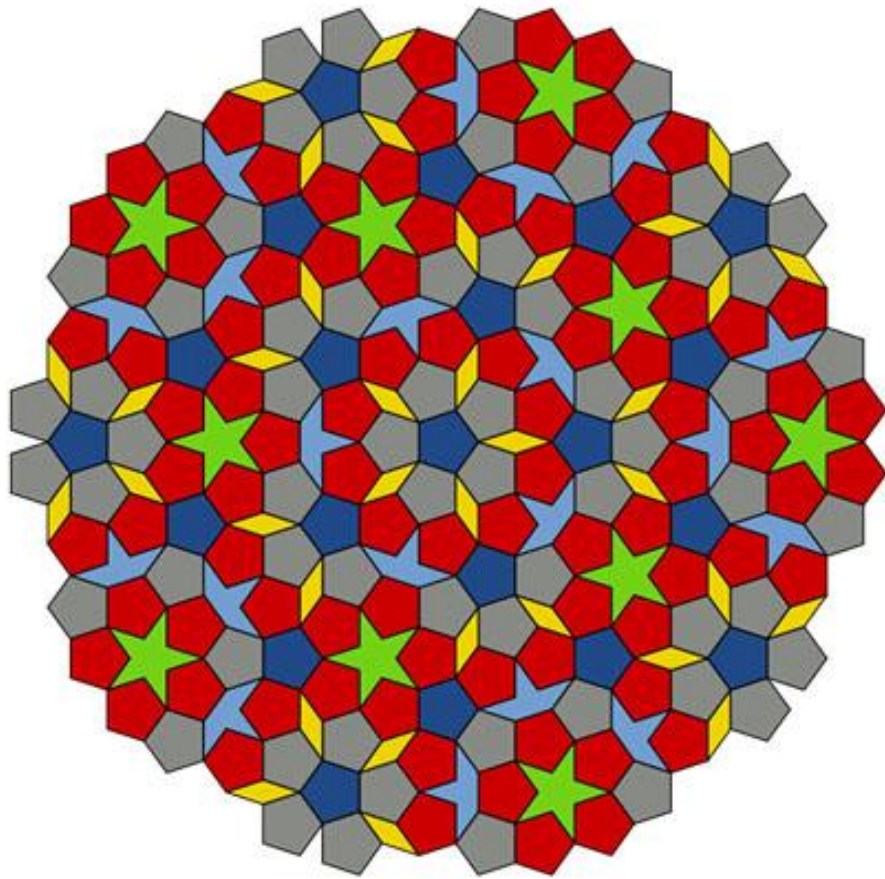
Мозаика Пенроуза - это аperiodическое замощение плоскости с помощью двух фигур. Это могут быть «змеи» и «дротики», или толстые и тонкие ромбы. Отношение числа «толстых» ромбов к «тонким» равно числу $\tau = 1,618$, называемым золотым сечением



Толстый ромб:
72 и 108°

Тонкий ромб:
36 и 144°





Фрагмент мозаики Пенроуза и рисунок
из И. Кеплера *Harmonices Mundi*

Леонардо Пизанский (1170-1250)

Сын (figlio) Боначчи (Фибоначчи)

- "Пусть в первый день января в огороженном месте имеется пара кроликов (самка и самец). Эта пара кроликов производит новую пару кроликов в первый день февраля и затем в первый день каждого следующего месяца. Каждая новорожденная пара кроликов становится зрелой уже через месяц и затем через месяц дает жизнь новой паре кроликов. Возникает вопрос: сколько пар кроликов будет в огороженном месте **через год**, то есть через 12 месяцев с начала размножения?"

Ключевой
структурный
параметр
квазикристаллов
– золотое
сечение

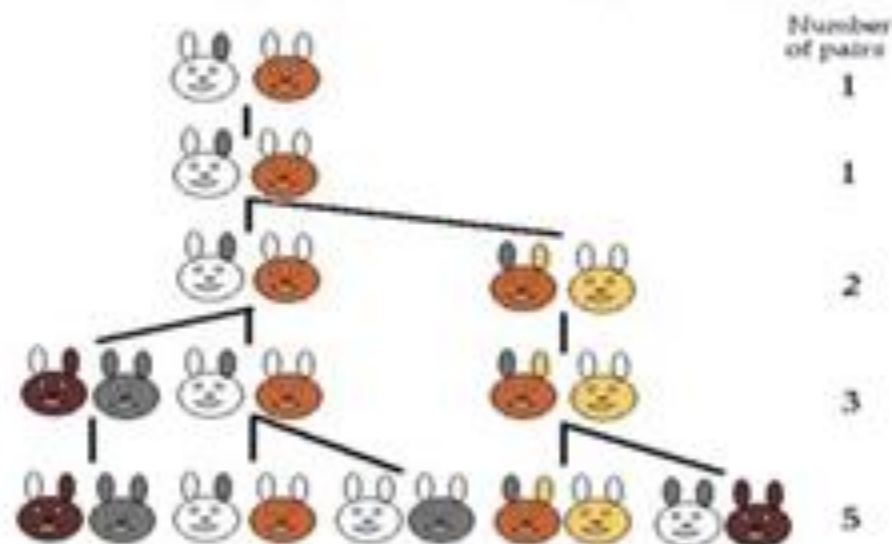


1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233

Последовательность Фибоначчи

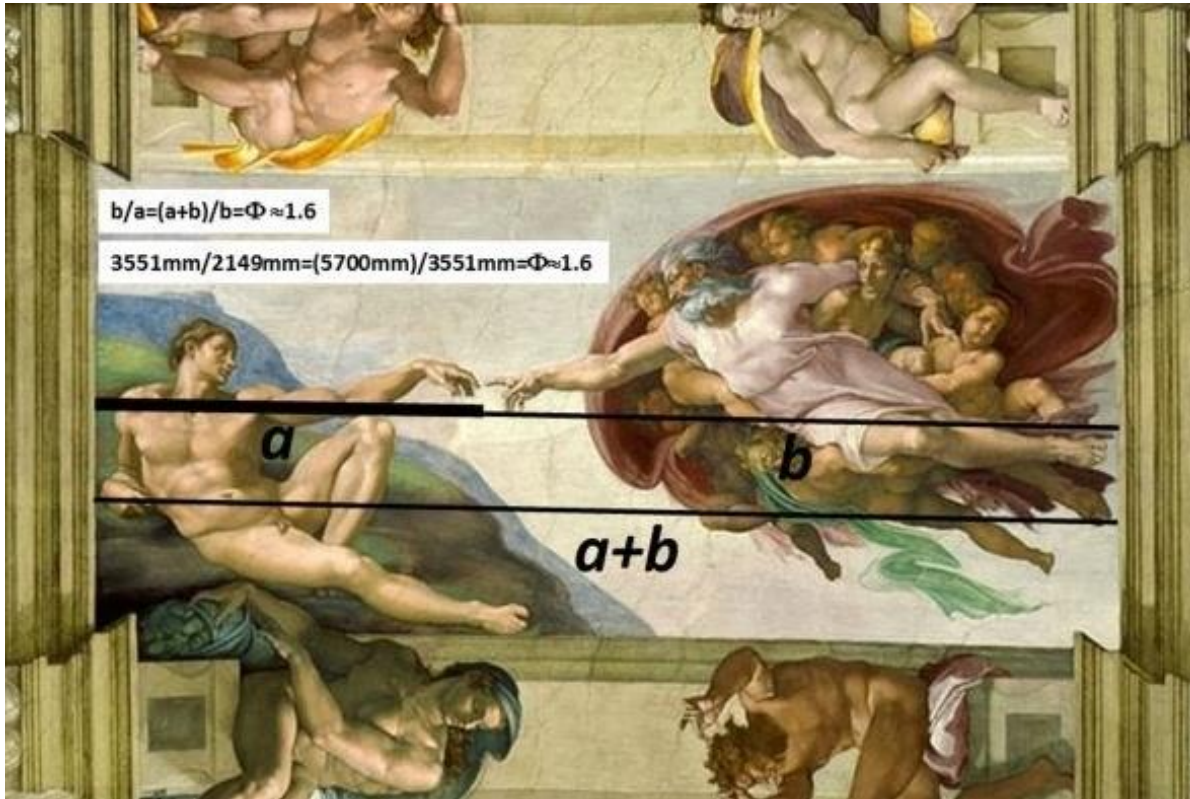
В январе Саше подарили пару новорождённых кроликов. Через два месяца они дали первый приплод - новую пару кроликов, а затем давали приплод по паре кроликов каждый месяц.

Каждая новая пара также даёт первый приплод (пару кроликов) через два месяца, а затем - по паре кроликов каждый месяц. Сколько пар кроликов будет у Саши в декабре?



Числа 1, 1, 2, 3, 5, 8, ... образуют так называемую **последовательность Фибоначчи**, названную в честь итальянского математика, впервые решившего соответствующую задачу ещё в начале XIII века.

Микеланджело Буонарроти. Сотворение Адама – 1511г.

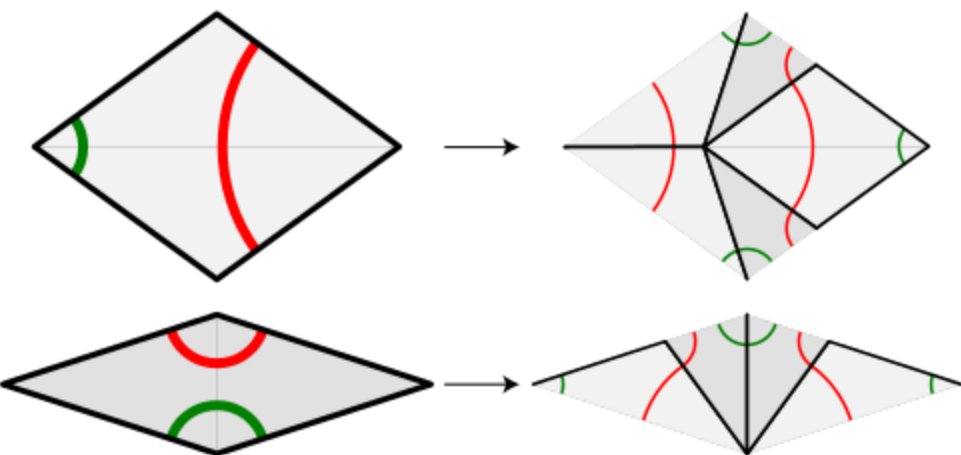


Фреска
Сикстинской
капеллы в
Ватикане

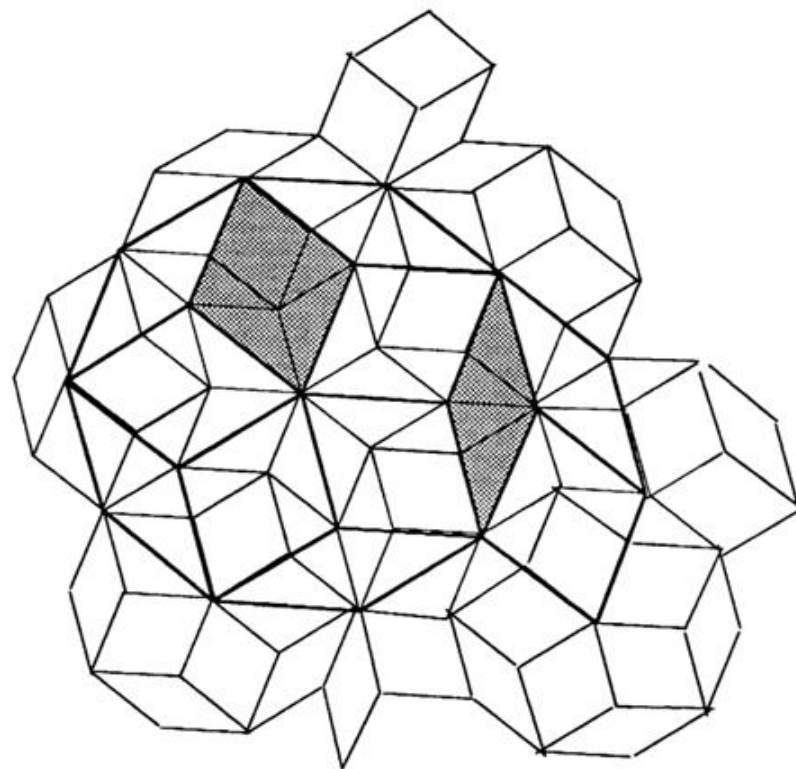
$$b/a = (a + b)/b = \Phi \sim 1.618$$

Притягивает взгляд. Акцент на стремлении
Бога к человеку, а человека – к Богу

Свойства мозаик Пенроуза (самоподобие)

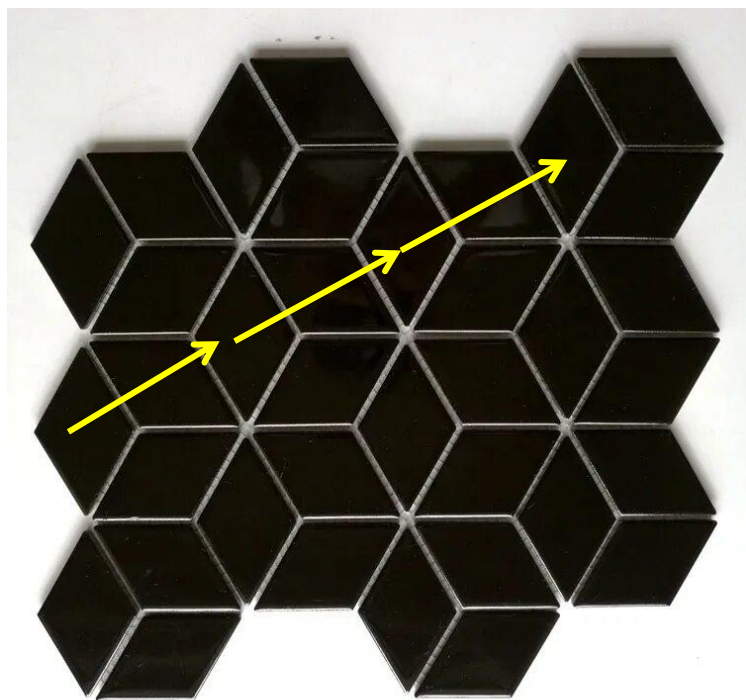


Правила разбиения ромбов для
наблюдения **дефляции** мозаики
Пенроуза

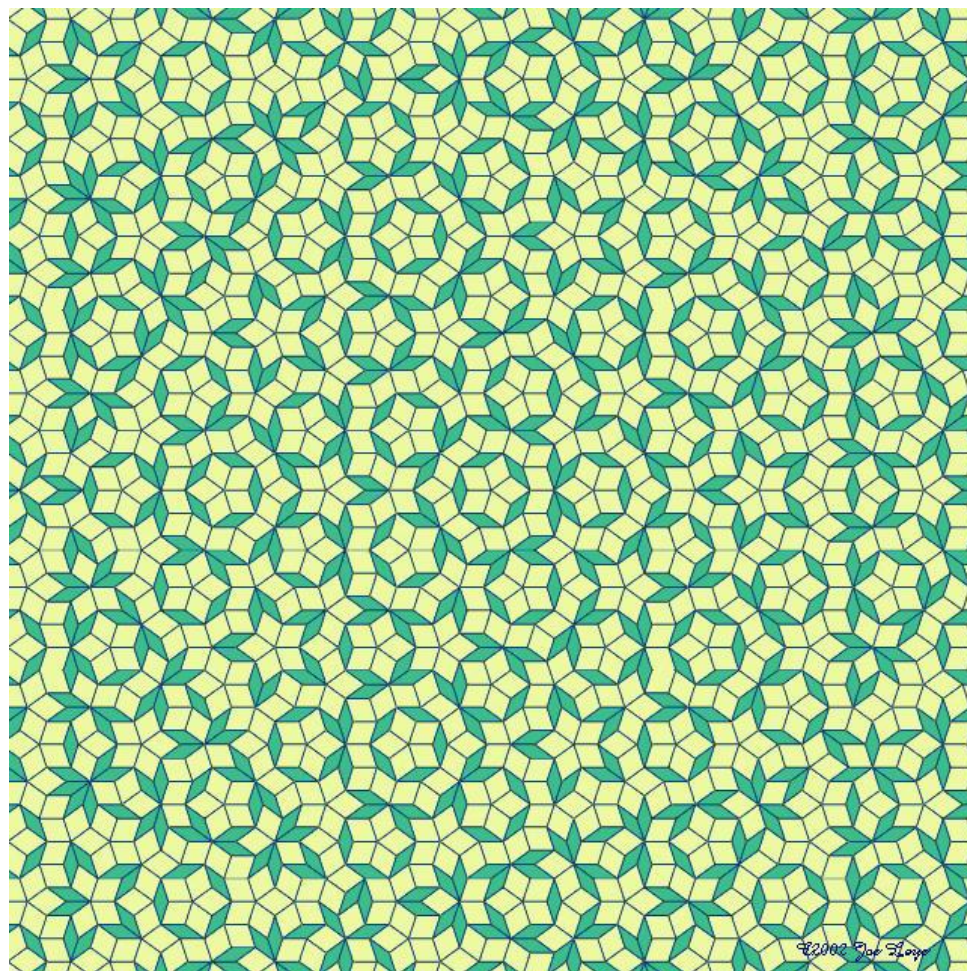


Инфляция (расширение)
мозаики Пенроуза

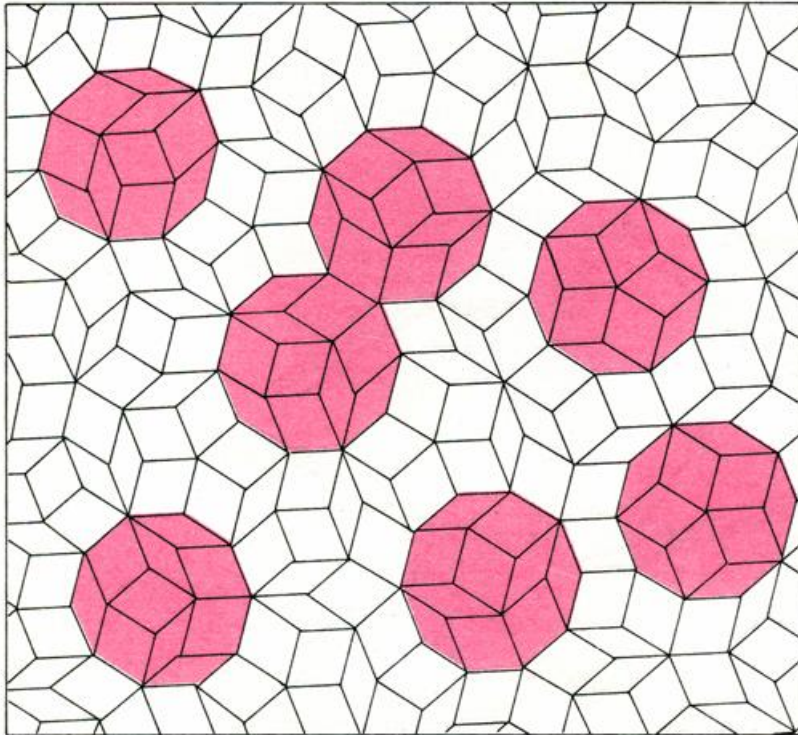
Дальний и ориентационный порядок в периодической структуре обеспечен трансляцией



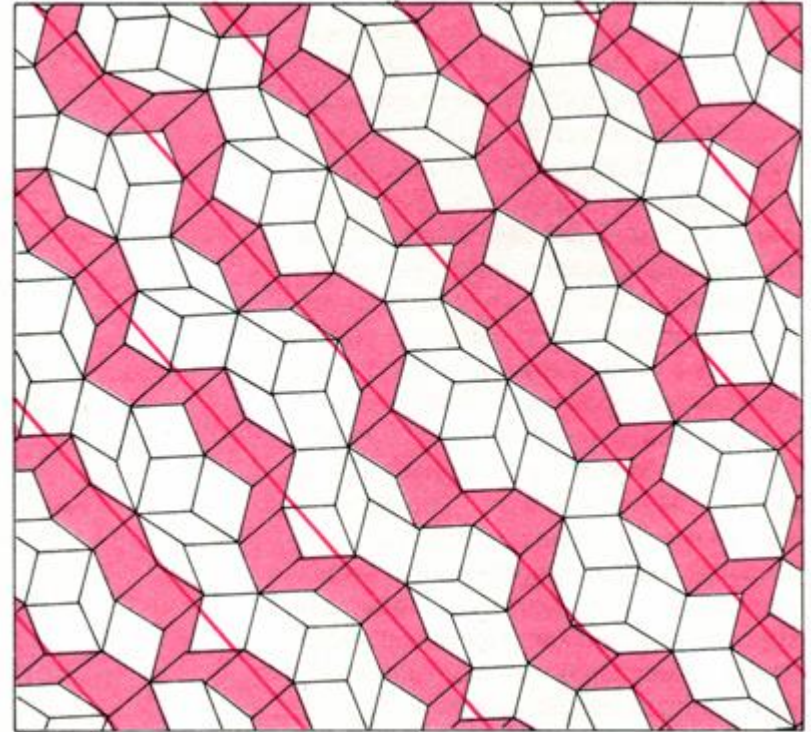
Как же реализуется дальний и ориентационный порядок в аperiodической структуре?



«Ориентационный» порядок и «дальний» порядок в квазипериодических структурах

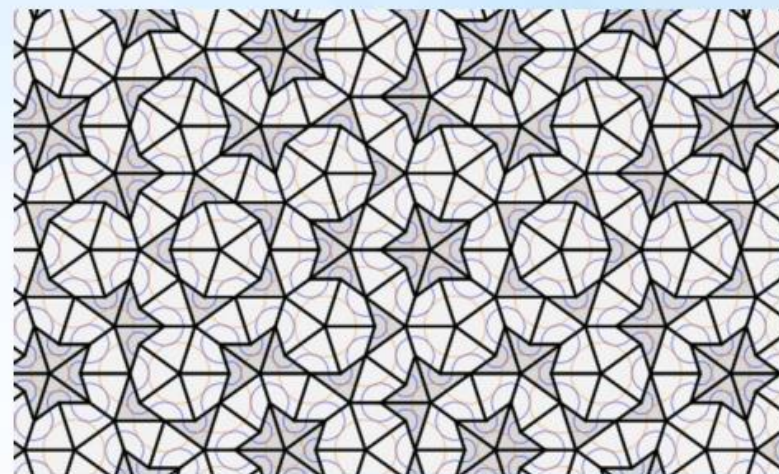
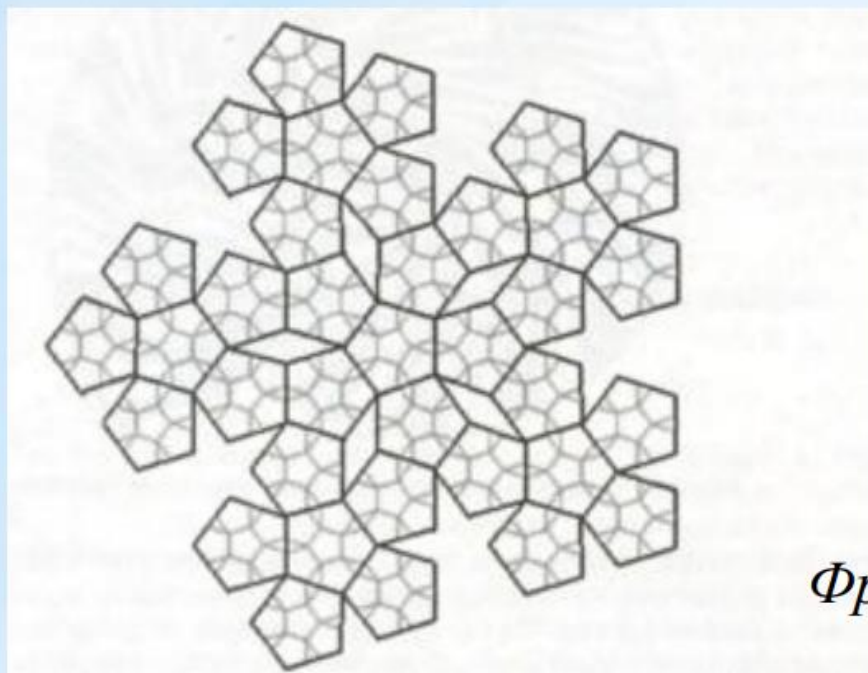


Десятиугольники Гуммелта

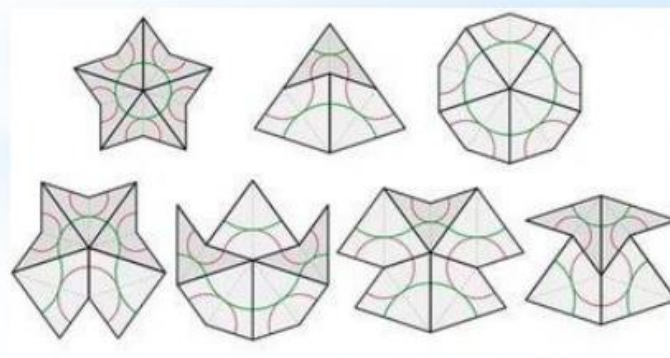
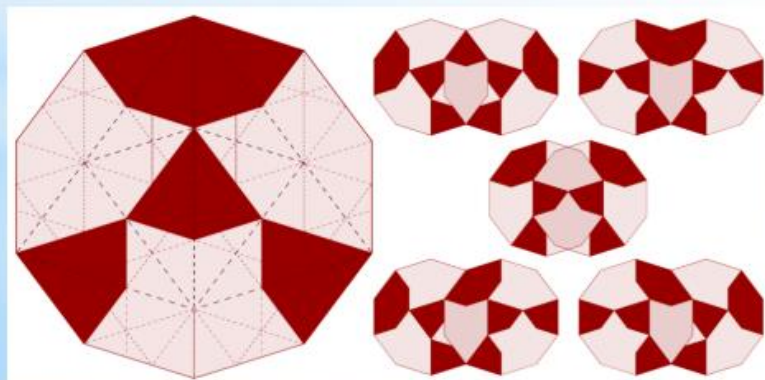


Квазиплоскости

*Апериодическое покрытие Гуммельта как двумерный аналог
взаимопроникающих полиэдров Франка-Каспера*

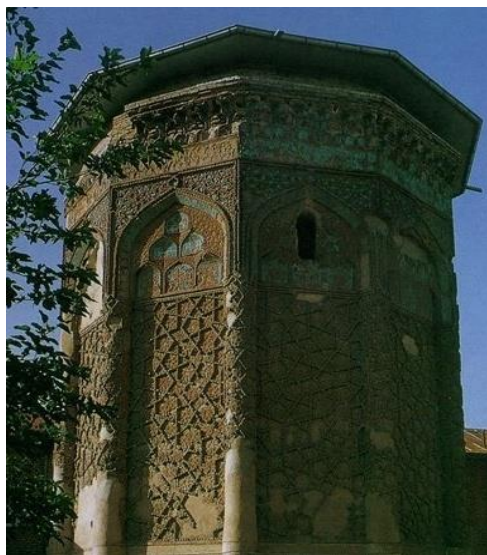


Фрагмент мозаики Пенроуза Звезда

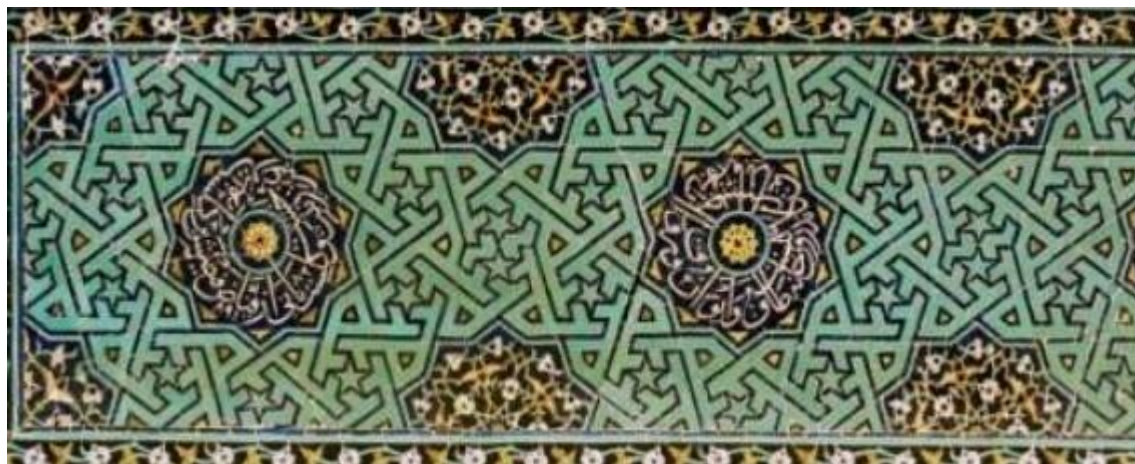


Десятиугольники Гуммельта

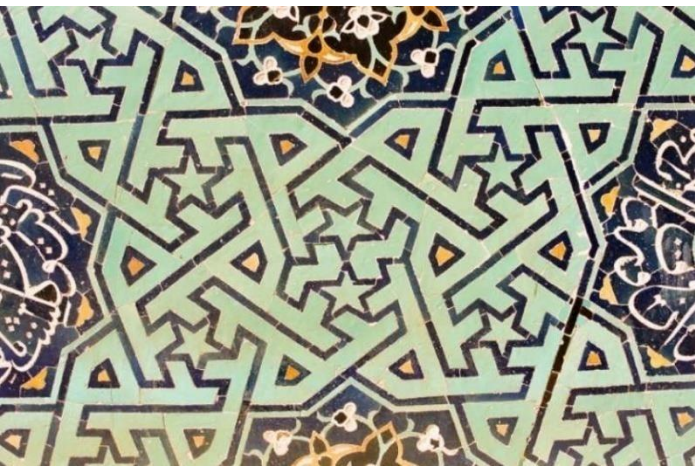
Восточные орнаменты – прообразы квазикристаллов



The Blue Tomb, W Iran,
1196-97гг.



Фрагменты Мечети Джамах
(Jameh) XIV-XVв., Йезд, Иран

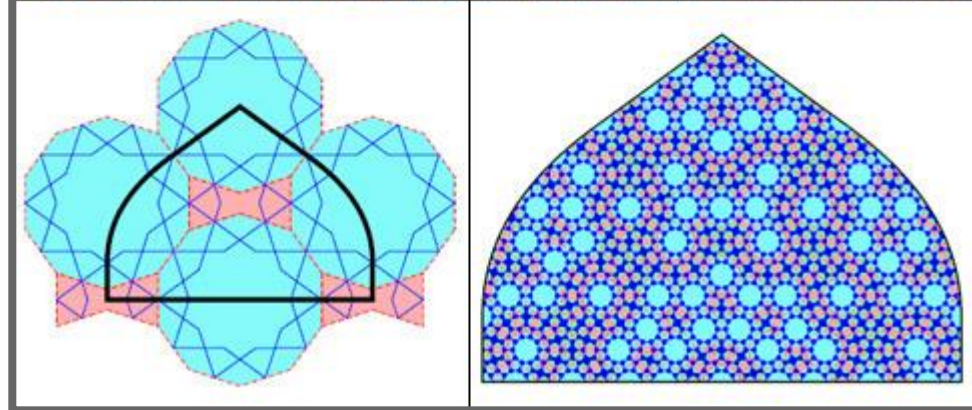
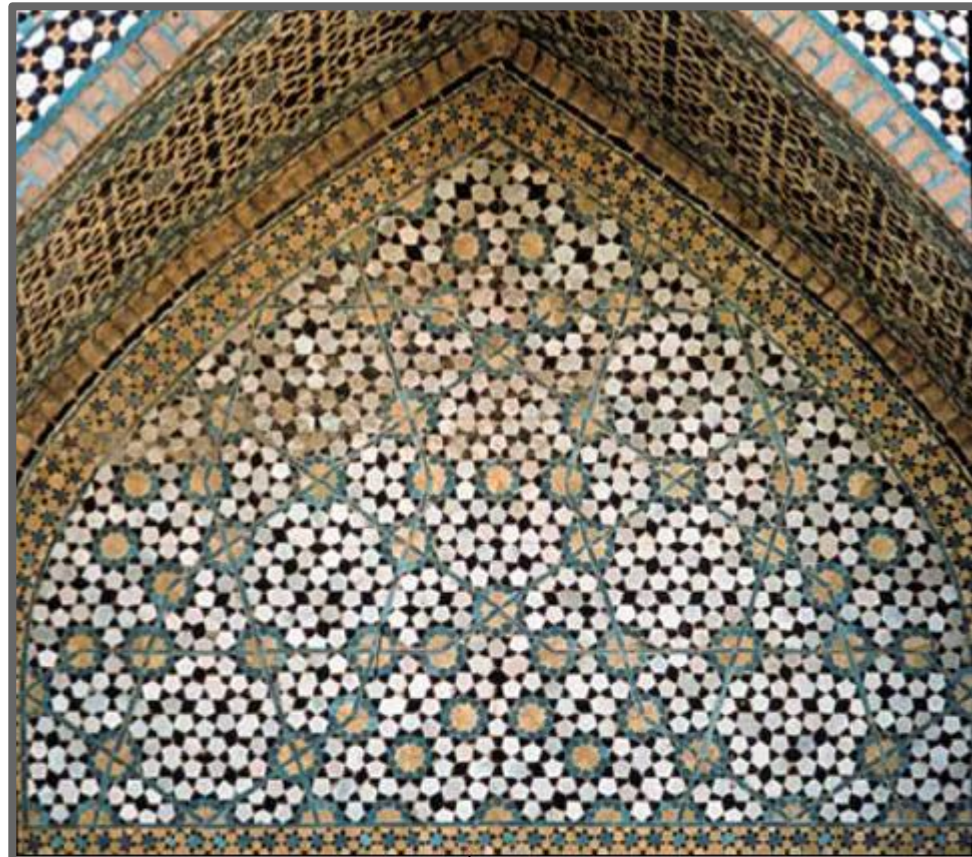


Р.Пенроуз запатентовал свою мозаику и в 1997 году выиграл суд у компании *Kleenex*, которая производила туалетную бумагу с тиснением в виде мозаики Пенроуза. На самом деле

эти орнаменты известны много раньше.

Портал мечети в Иране

Апериодические плоские узоры часто использовались в росписи древних арабских храмов, так как создают эффект «разбегающегося пространства».



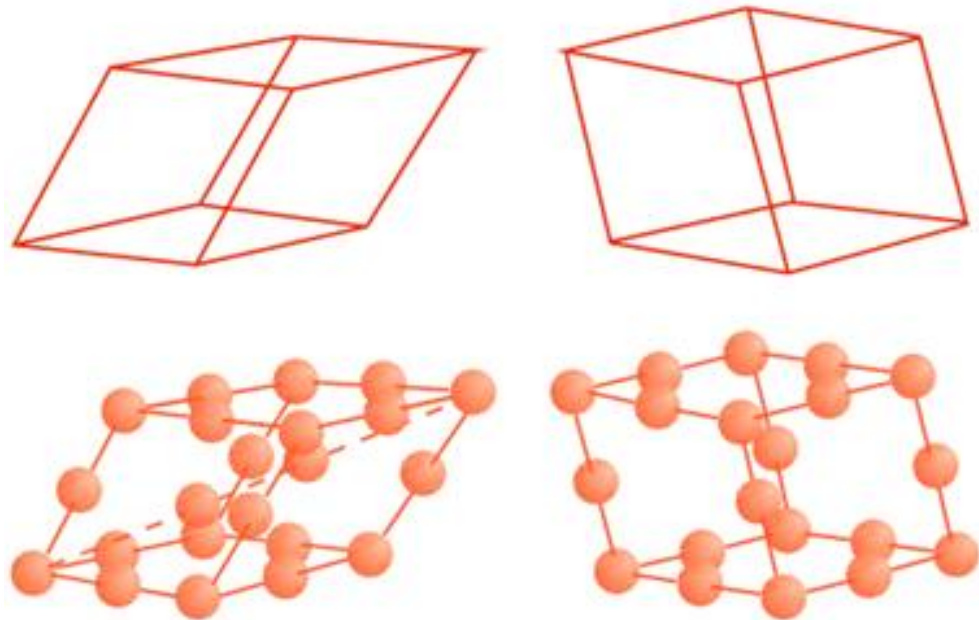


1995 г. Дан Шехтман(слева)
и Алан Маккей (справа).

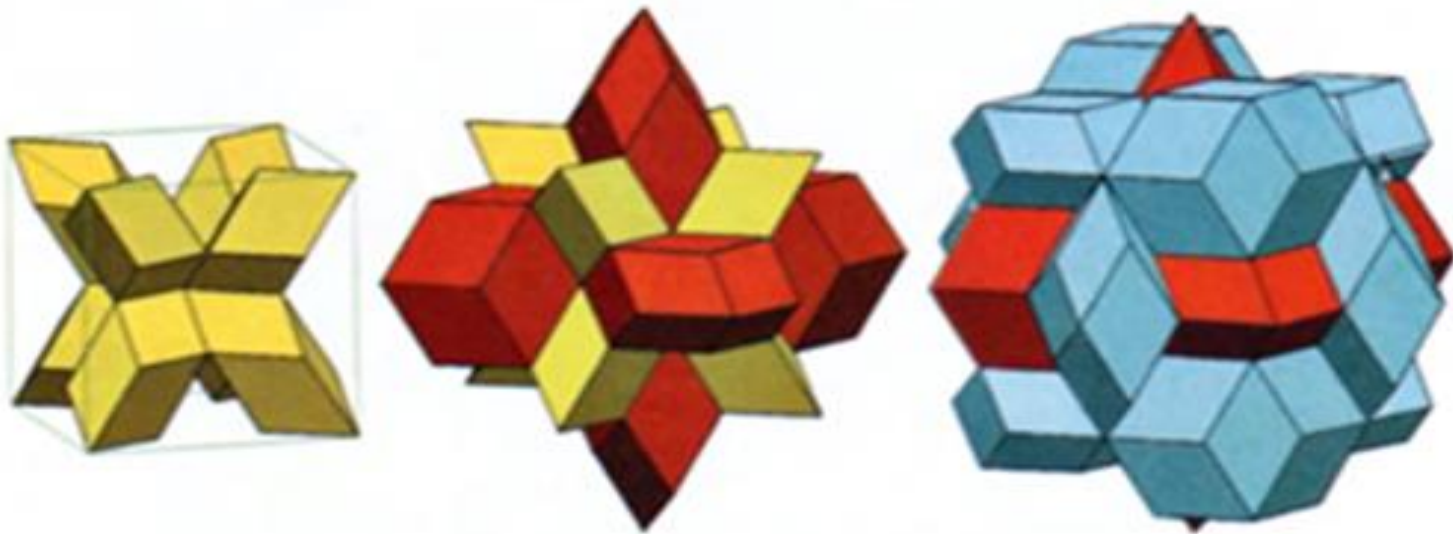
В год открытия Д.Шехтманом квазикристаллов (1982 г.) **Алан Маккей** взял одну из мозаик Пенроуза [Hargittai & Hargittai, 2020], умозрительно расставил в ее вершинах атомы и рассчитал, **какую дифракционную картину** давал бы подобный гипотетический плоский кристалл. Обнаружилось, что такая дифракционная картина должна обладать **осью симметрии 5-го порядка.**



Позже вместе с **Робертом Амманом** он смоделировал так называемую решетку Аммана–Маккея – неперiodическое разбиение пространства на многогранники с аналогичным свойством – если в вершинах многогранника расставить атомы, то **соответствующая дифракционная картина должна обладать неклассической симметрией.**

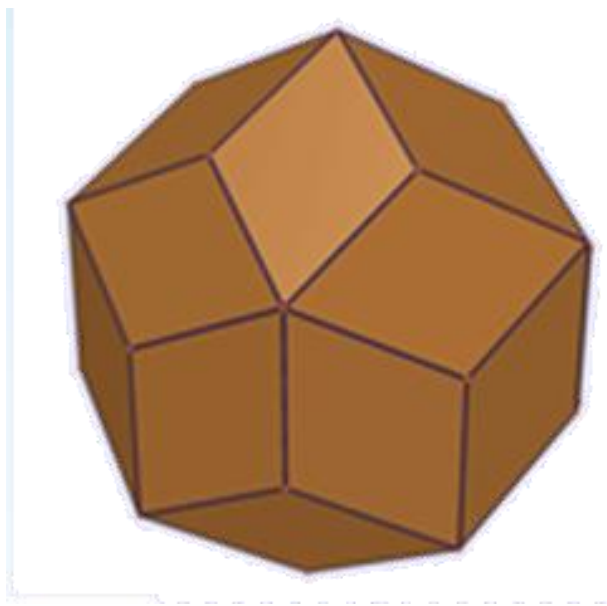


В трехмерном варианте ромбы мозаики Пенроуза превращаются в ромбоэдры (ромбоэдры Аммана или Ковалевского), грани которых - ромбы Пенроуза. Структуру квазикристаллов можно представить их совокупностью, в которой атомы занимают позиции в вершинах, на ребрах или внутри таких ромбов.

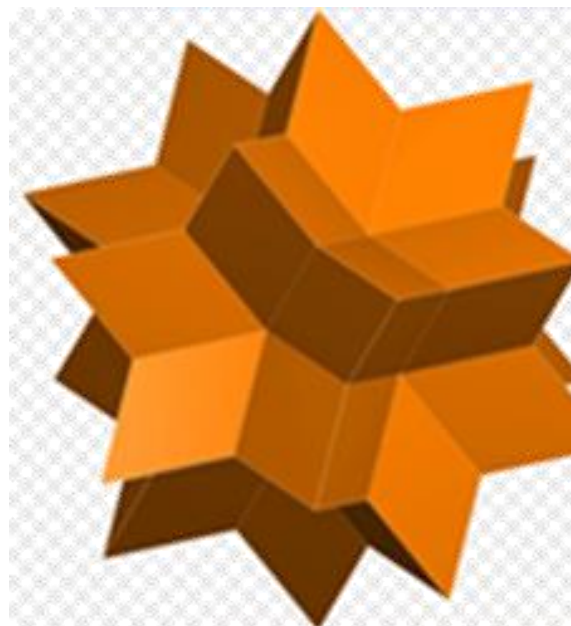


Периодическая упаковка «вытянутых» ромбоэдров и ромбических додекаэдров

Из ромбоэдров Аммана можно составить такие икосаэдрические многогранники, которые играют большую роль в квазикристаллах.

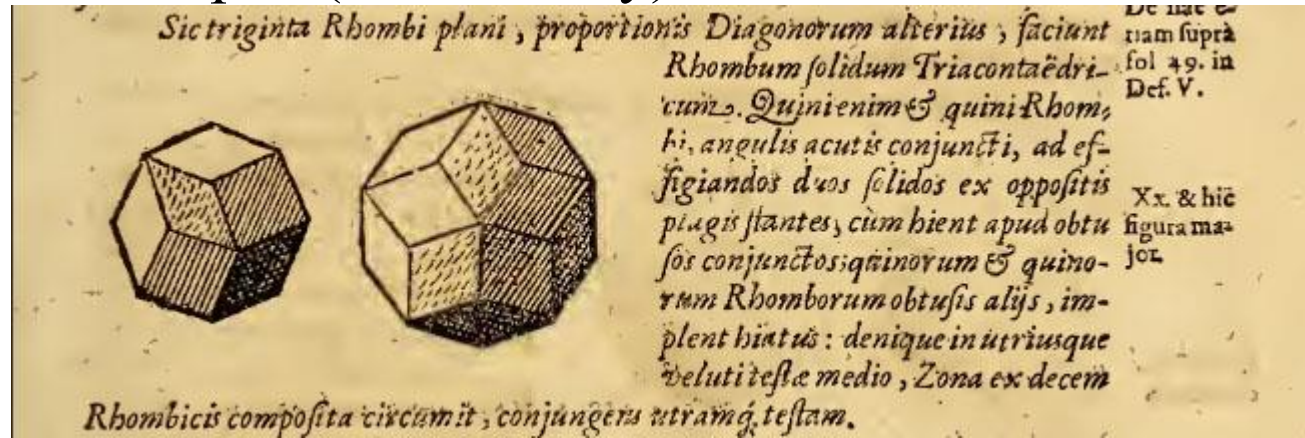


Триаконтаэдр

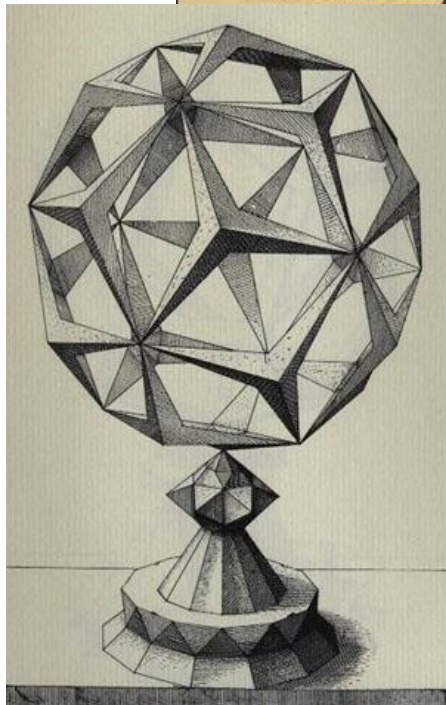


Гексаконтаэдр

Все математики безоговорочно признают приоритет Кеплера в открытии ромбического триаконтаэдра, который он описывает в книге *Harmonices Mundi* — «Гармония мира» (в 1619 году)



**Иоганн Кеплер
(1571–1630)**



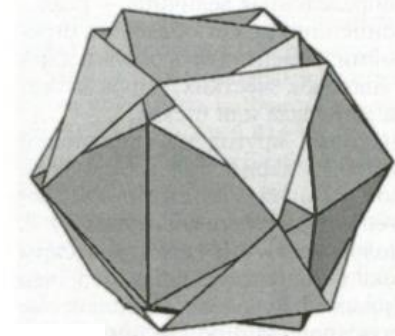
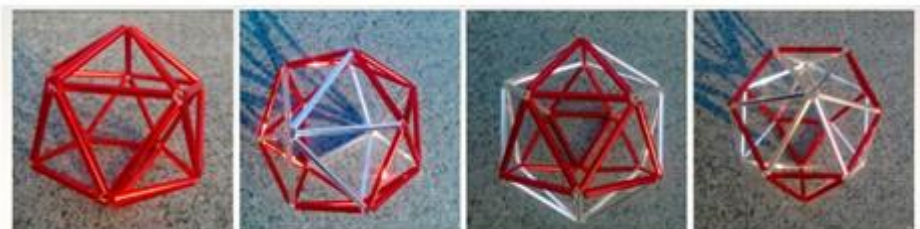
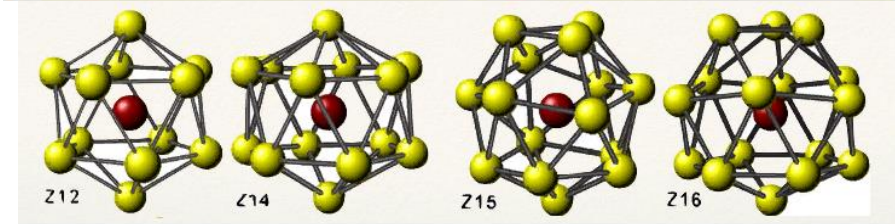
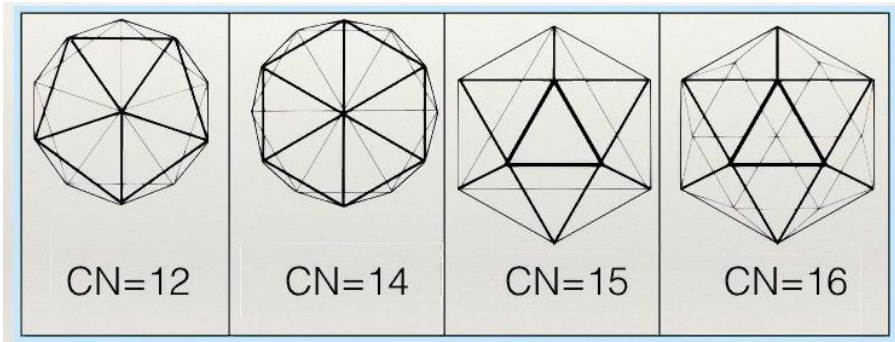
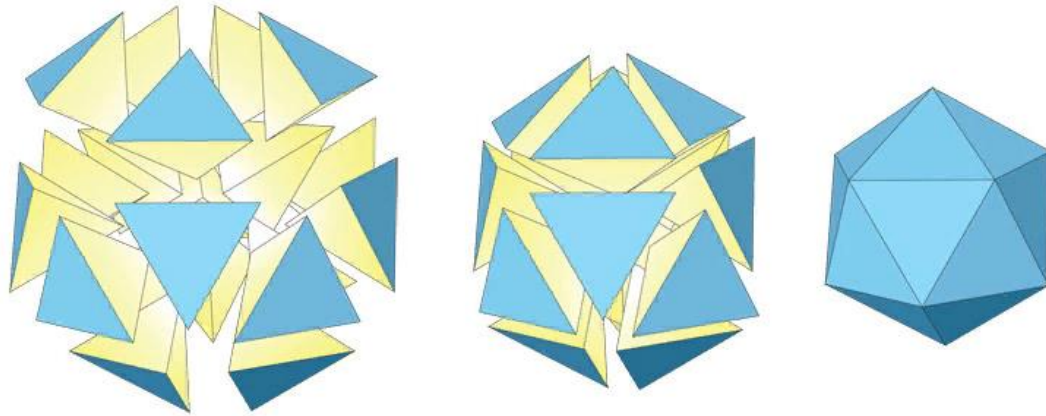
Но в 1568 году Венцель Ямницер опубликовал книгу *Perspectiva Corporum Regularium*, в которой представлен тот же триаконтаэдр



**Венцель Ямницер
(1508–1585)**

Кластерный подход к квазикристаллам.

Во многих сложных интерметаллидах можно выделить группировки (кластеры), которые в какой-то мере отражают процессы роста



Трансформация Бакминстера–Фуллера, связывающая кубоктаэдр и икосаэдр

Фазы Франка –Каспера можно рассматривать как промежуточные структуры между кристаллическим квазикристаллическим состоянием вещества.

Фрактальная симметрия и кластерная иерархия интерметаллидов



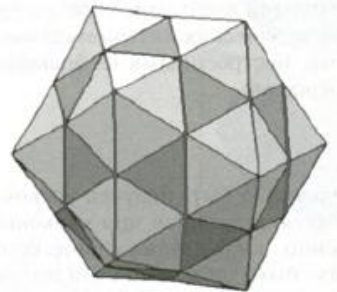
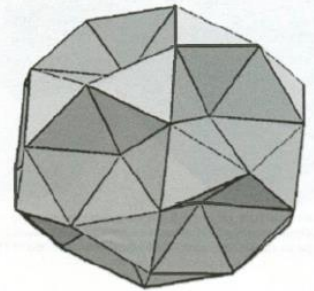
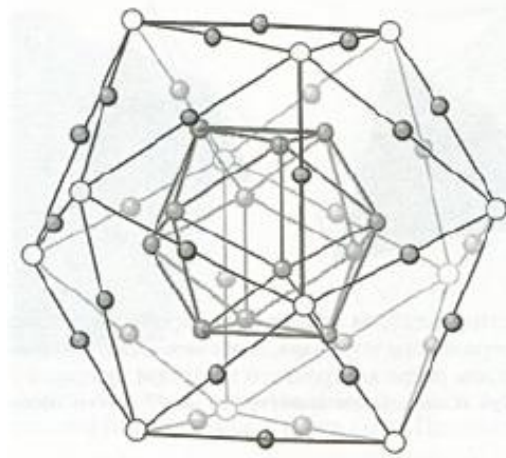
Икосаэдр Маккея.

Является общей структурной особенностью многих комплексных сплавов и квазикристаллов. Можно построить, наращивая оболочки октаэдров и тетраэдров на первичном икосаэдре.

Первичный икосаэдр (12 шаров) покрывается слоем из 20 октаэдров, что дает 30 шаров

Вогнутые участки закрываются вложенным слоем из 60 тетраэдров, что добавляет еще 12 шаров

Слои октаэдров и тетраэдров могут добавляться неограниченно. Число шаров в кластере $n(10n^2+15n+11)/3$



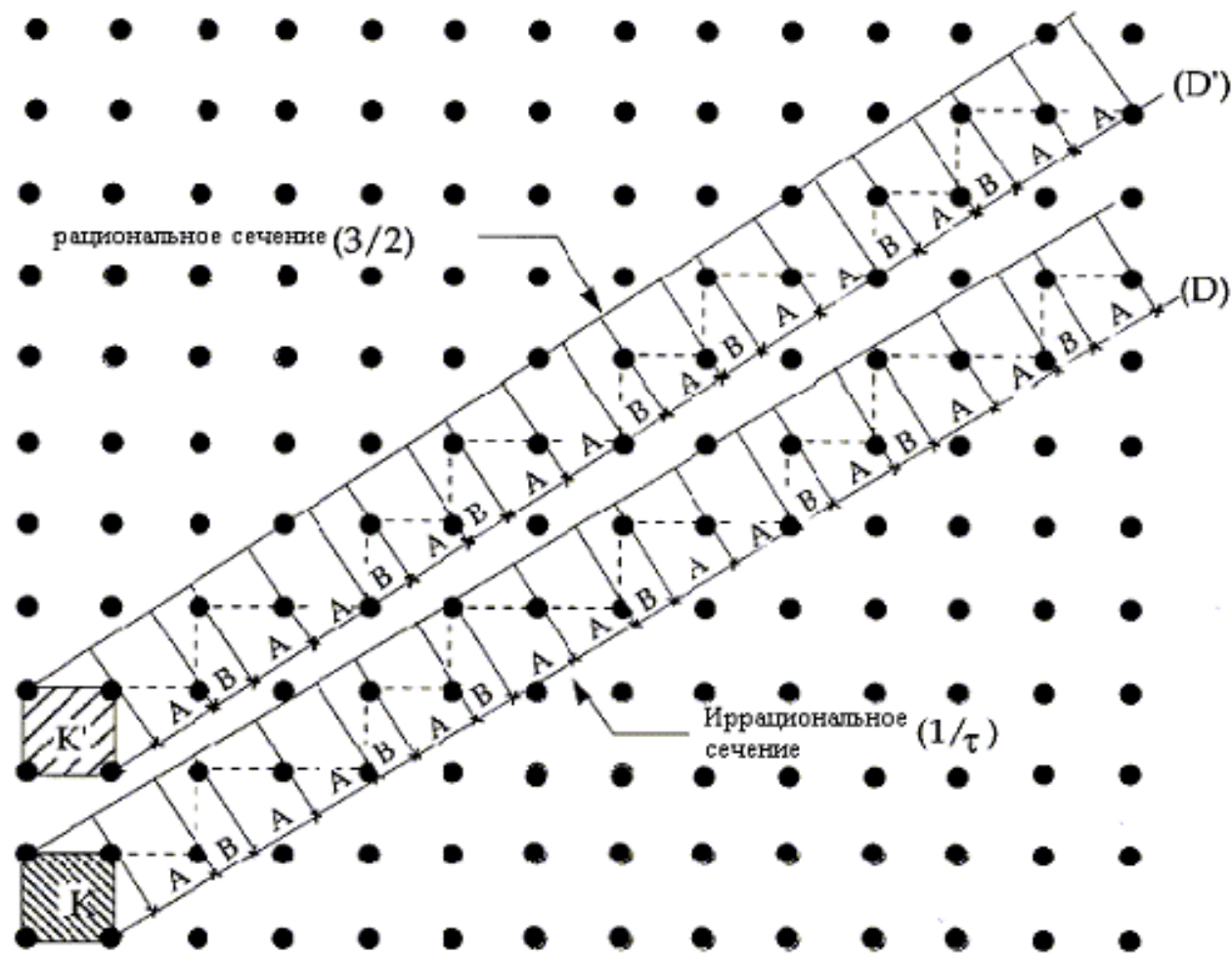
Квазикристаллы как проекции шестимерного пространства на трёхмерное.

Метод описания структуры икосаэдрических квазикристаллов основан на том, что группа икосаэдра содержится в группе симметрии *шестимерного гиперкуба*, которая совместима с трансляционной инвариантностью в шестимерном пространстве.

Координатные оси направлены по осям пятого порядка.

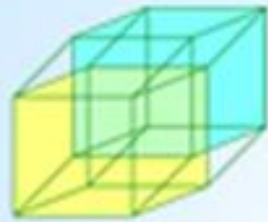
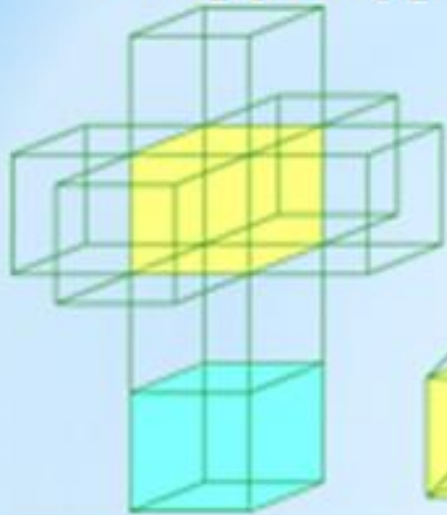
Произвольный шестимерный периодический кристалл с такой симметрией может быть использован для построения трёхмерной структуры. Для этого трёхмерное пространство рассматривается как гиперплоскость в шестимерном и часть атомов шестимерного кристалла, близкая к ней, проектируется на гиперплоскость. Таким образом, можно получить различные трёхмерные структуры и, в частности, узор Пенроуза. *Выбор пространства др. размерности и гиперплоскости в нём позволяет описать структуры с произвольными симметриями.*

Проецирование двумерной периодической решетки на одномерную



Структуры квазикристаллов как шестимерная

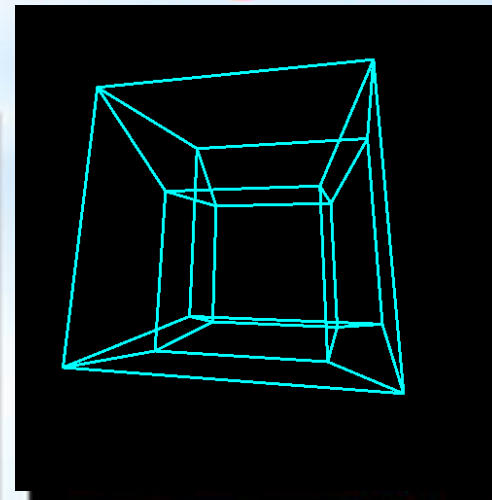
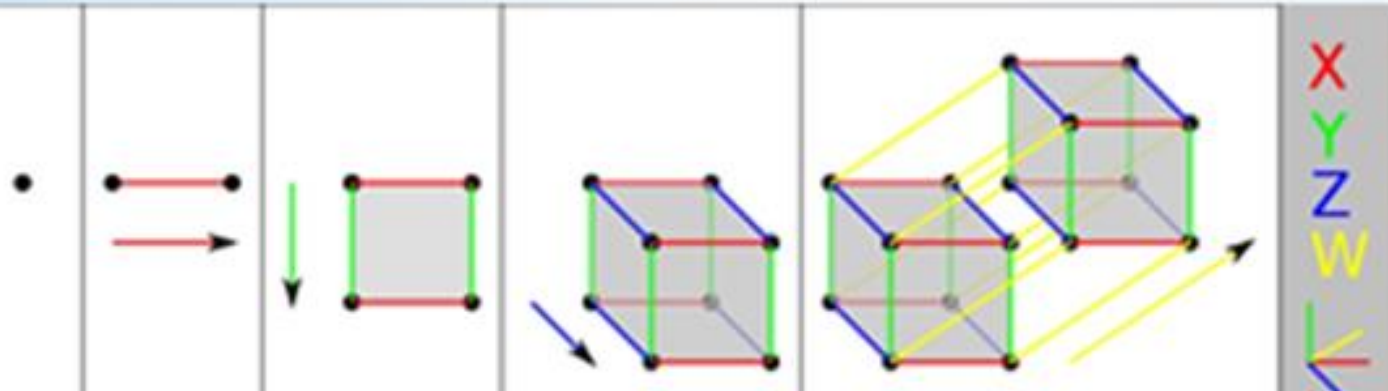
периодическая решетка



Трехмерный куб: 8 вершин, 12 ребер,
6 граней



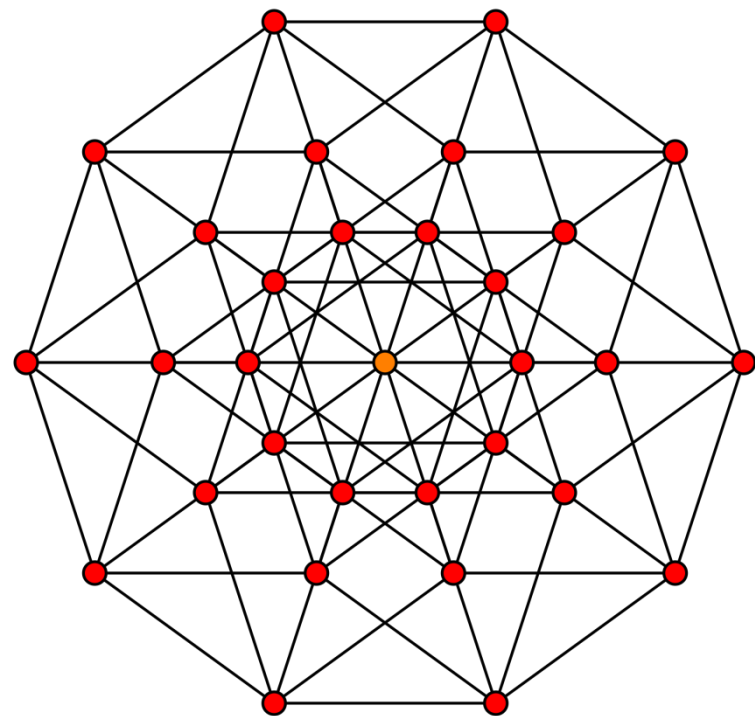
Четырехмерный куб: 16 вершин, 32 ребра,
24 грани, 8 кубов
тессеракт



Пятимерный куб:

32 вершины, 80 ребер,
80 квадратов, 40 кубов

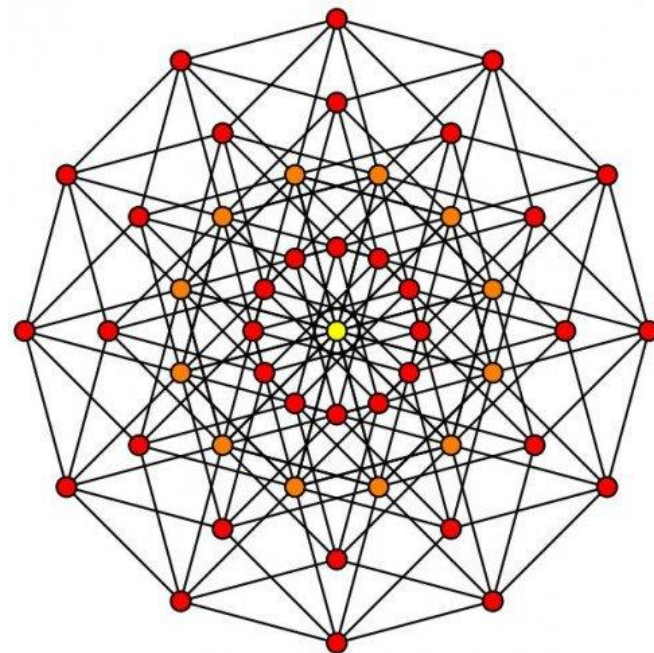
пентеракт



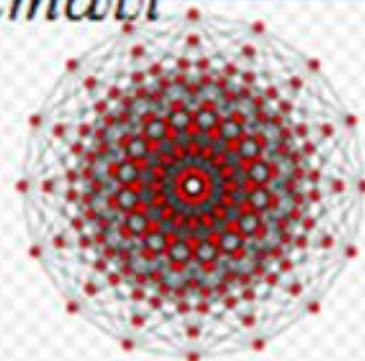
Шестимерный куб:

64 вершины, 192 ребра,
240 граней, 160 кубов

гексеракт



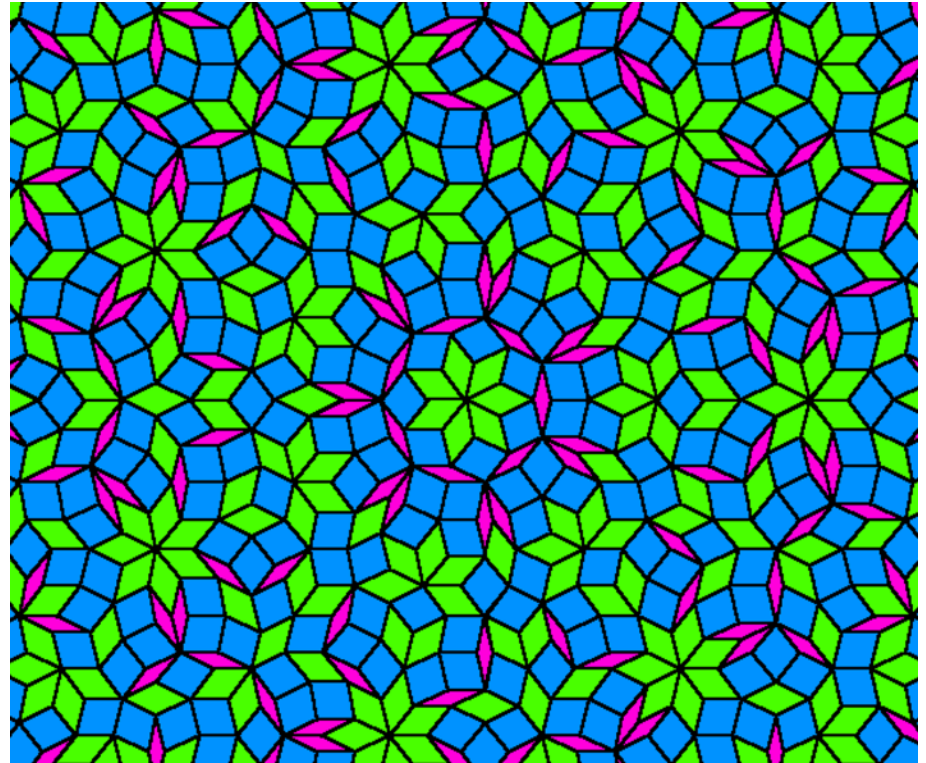
Для описания перехода квазикристалл-кристалл было успешно применено проецирование фрагментов 8-мерной решетки E8 в трехмерное пространство.



Эту чудовищно симметричную решетку в 1877 году придумали российские математики Коркин и Золотарев.

Она состоит из векторов, все координаты которых целые числа, а их сумма — четная. У такой решетки за вычетом сдвигов 696 729 600 преобразований. Первая координационная сфера в этой размерности содержит 240 узлов и представляет собой 2 вложенных друг в друга четырехмерных икосаэдра. Проецирование вдоль различных элементов симметрии позволяет получить структуры конденсированных фаз и, соответственно, описать переходы между ними.

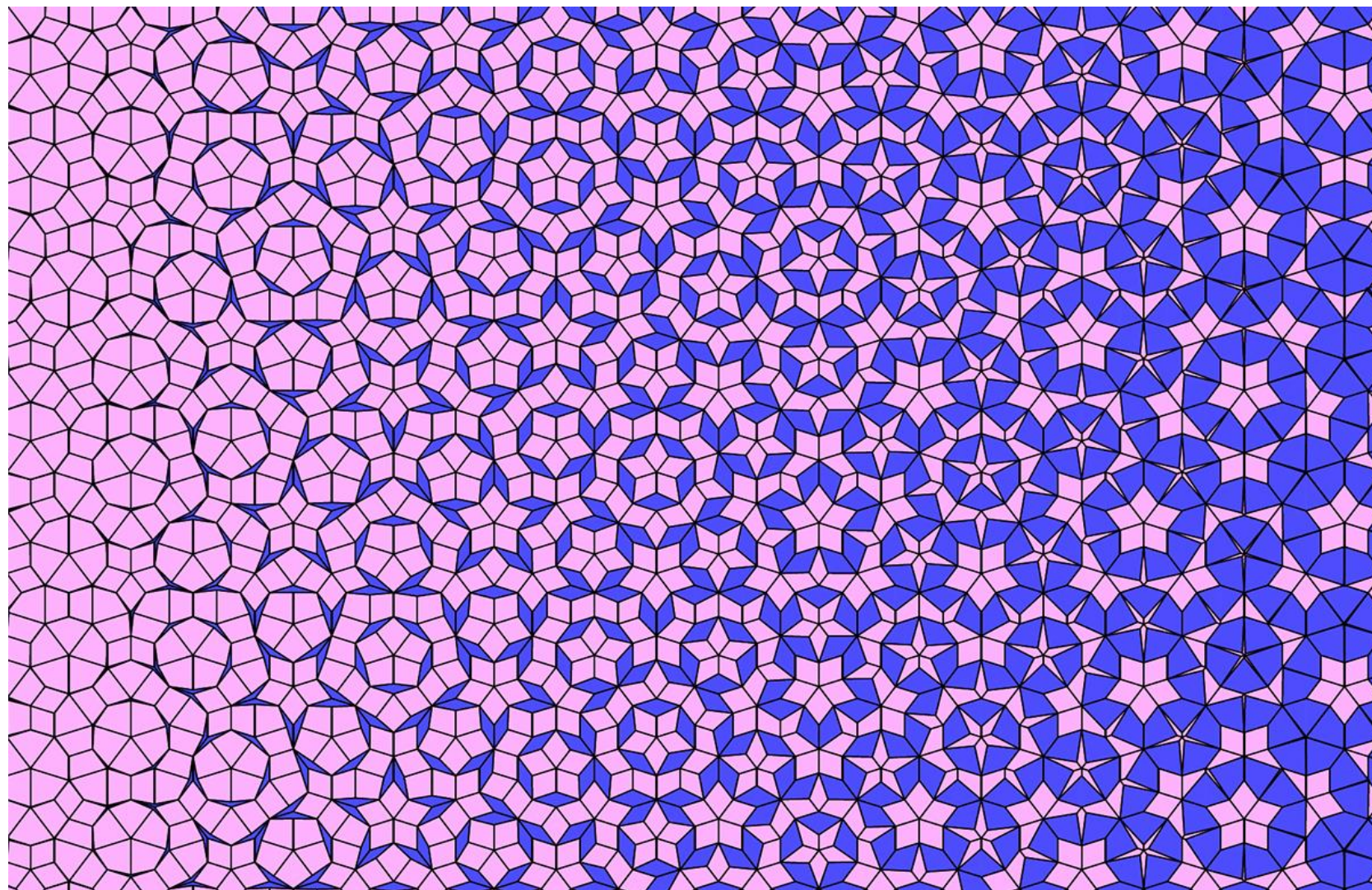
Сейчас квазикристаллы уже нашли широкое технологическое применение. Перспективным является направление увеличения механической прочности сплавов, содержащих квазикристаллы — ведь они абсолютно изотропны к механическим воздействиям (проявляют одинаковые упругие свойства во всех направлениях).



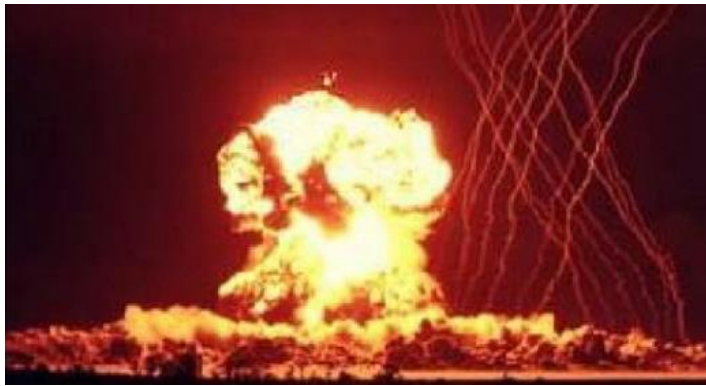
Мозаика с осью 7-го порядка, состоящая из 3-х типов ромбов

В настоящее время известны сотни видов квазикристаллов, имеющих точечную симметрию икосаэдра, а также с осями 10-ого, 8-ого и 12-ого порядка). Причем среди них есть и такие, которые являются аперриодическими только в одном направлении.

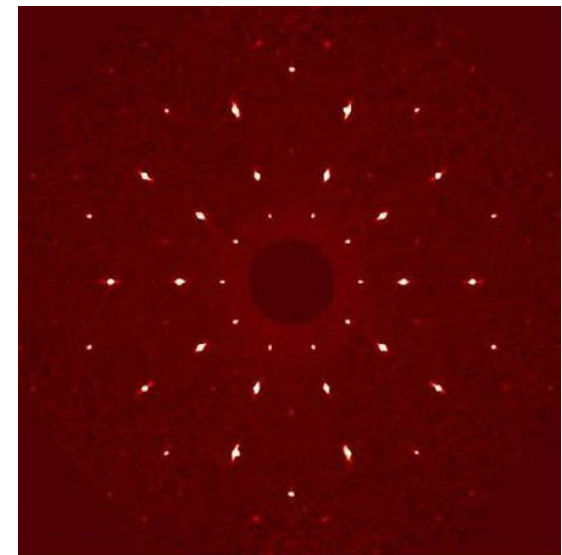
Квазикристаллы представляют собой не классический, а деформированный вариант мозаики Пенроуза, и атомы в них образуют хорошо различимые кластеры. Более точный рисунок плоской квазикристаллической решетки выглядит вот так:



Применение	Свойства	КК сплавы
Дисперсно-упрочняющие частицы в алюминиевых сплавах и сталях	Твердость и высокие механические свойства при повышенных температурах	Системы на основе Al—Fe—Cr, мартенситно-старяющие стали
Термические барьеры в турбинах и двигателях внутреннего сгорания	Низкая теплопроводность	Al—Co—Cr—Fe, Al—Cu—Fe
Аккумуляция водорода	Высокая адсорбирующая способность к водороду	КК на основе Ti
<i>Непригорающие покрытия для посуды и защитные покрытия в химически активных средах</i>	Сопротивление коррозии, высокая твердость, низкая поверхностная энергия	Al—Cu—Fe—Cr



США Штат Нью-Мексико, полигон Аломогордо



Первое в истории человечества испытание ядерного оружия в условиях полигона произошло 16 июля 1945г. и получило название Тринити (испытание). На месте взрыва в результате сплавления окрестного песка, испытательной вышки и подводящих медных проводов образовался стекловидный материал, названный *тринититом*.



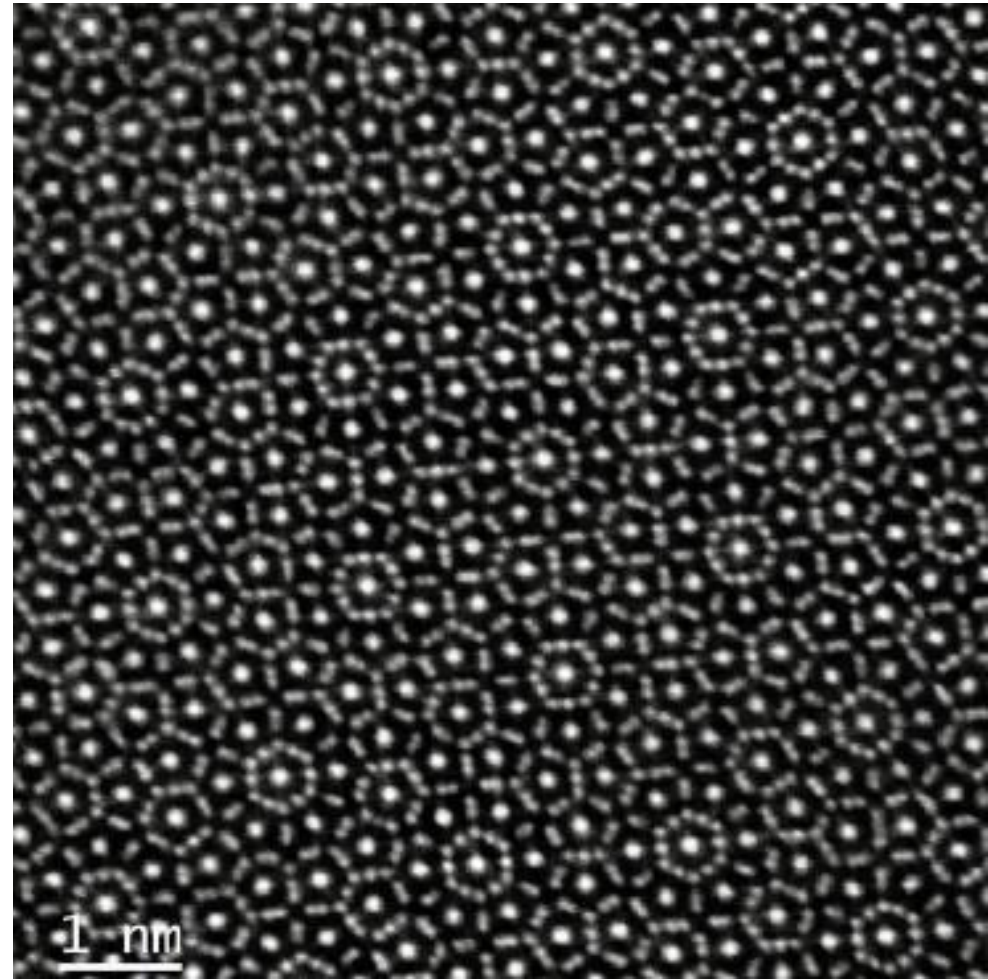
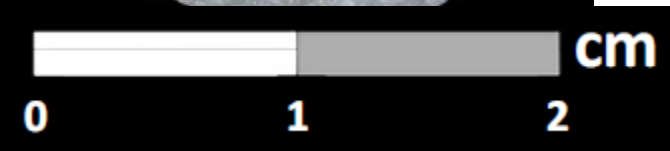
Совсем недавно был исследован образец красного тринитита с составом $\text{Si}_{61}\text{Cu}_{30}\text{Ca}_7\text{Fe}_2$, оказавшийся техногенным квазикристаллом с икосаэдрической симметрией. Оценка термодинамических параметров его ударной кристаллизации (температура $\sim 1,500$ °С и интервал давлений 5-8 ГПа) позволяет отметить подобие этих условий с условиями образования квазикристаллов, связанных с уже известными метеоритами (Bindi et al., PNAS, 2021)

<https://doi.org/10.1073/pnas.2101350118i>

Находка квазикристалла в фульгурите fulgurite (стекловидная трубка из расплавленного при ударе молнии в ЛЭП песка; 2008г. т-ра 1710°C); Песчаные дюны Небраска. Состав $Mn_{72.3}Si_{15.6}Cr_{9.7}Al_{1.8}Ni_{0.6}$; ось 12-го порядка; PNAS 2023 Vol. 120 No. 1 e2215484119; doi: 10.1073/pnas.2215484119



SEM-BSE –
изображение
обведенной
области.
Не природный
объект,

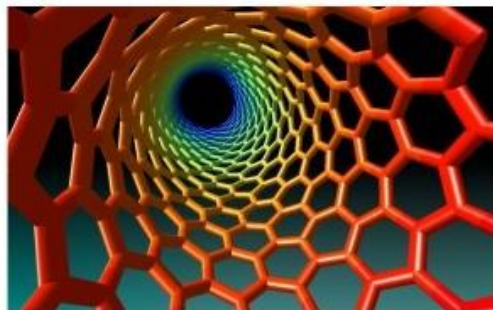


Картирование образца в сканирующем просвечивающем электронном микроскопе.

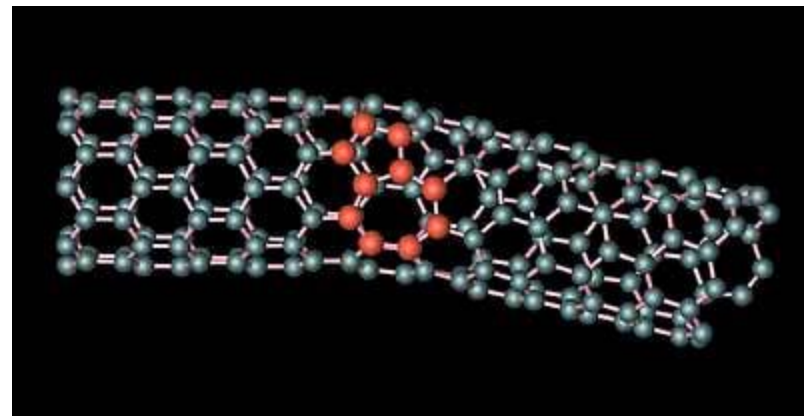
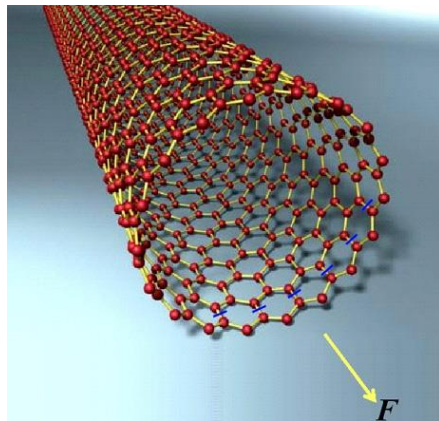
Икосаэдрическая симметрия присутствует

- в нанотрубках** (углеродных цилиндрах толщиной в один или несколько атом) и
- в фуллеренах** (стабильных каркасных молекулах углерода, состоящих из четного количества атомов).
- в отдельных молекулах и атомных кластерах**

Углеродные нанотрубки



изображение нанотрубки



Углеродные нанотрубки являются относительно молодым открытием. Наука имеет дело с ними с 1991 года. Однако за это время удалось их достаточно изучить, чтобы не удивляться уникальным свойствам. Известные распространенные формы углерода: графит и алмаз - дали собрату свои лучшие свойства, но усиленные в десятки и сотни раз. С одной стороны, это проводимость превышающая проводимость меди, с другой – прочность намного большая чем у лучших сортов стали.

*Нанотрубки используются
человечеством около тысячелет*



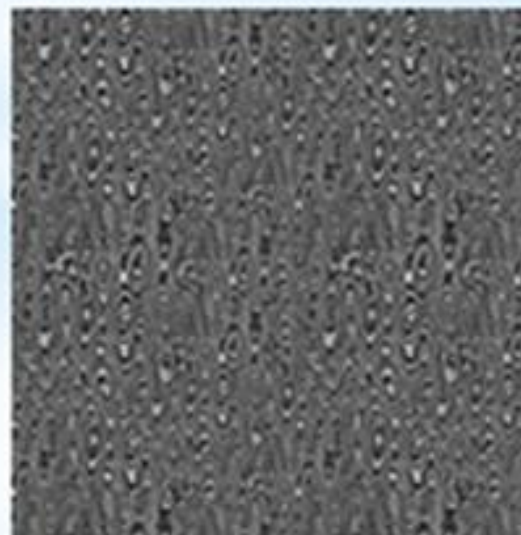
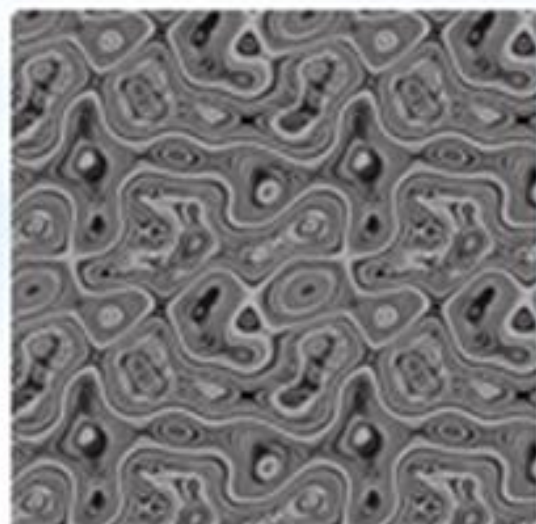
*В романе В. Скотта «Талисман» Ричарда Львиное
Сердце и султан Саладин расхваливали друг перед другом
достоинства своего оружия. Ричард одним ударом
разрубил рукоять стальной булавы, а Саладин -
поставленную на ребро шелковую подушку. А так же
рассек в воздухе мягкий вуалевый платок .*

«Лезвие сабли скользнуло так молниеносно и
легко, что подушка, казалось, сама разделилась
на две половины, а не была разрезана».

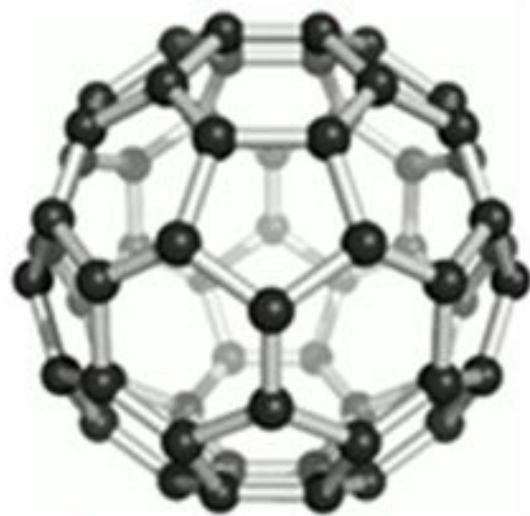




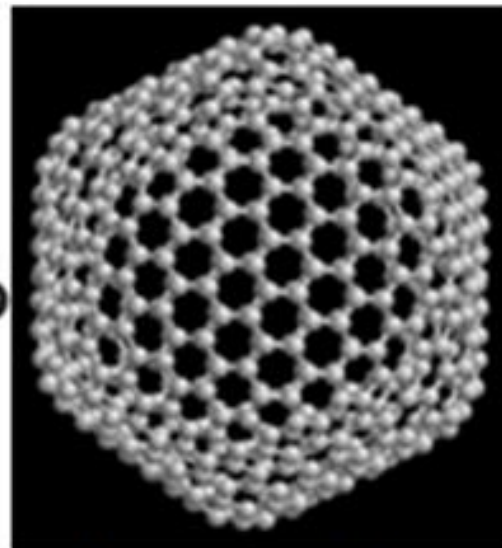
Ближе всех к раскрытию секрета дамасской стали, похоже подошли немецкие ученые-кристаллографы из Дрезденского технического университета. Изучив молекулярную структуру сабли XVII века под электронным микроскопом, они обнаружили в лезвии углеродные нанотрубки и нановолокна из цементита (карбида железа).



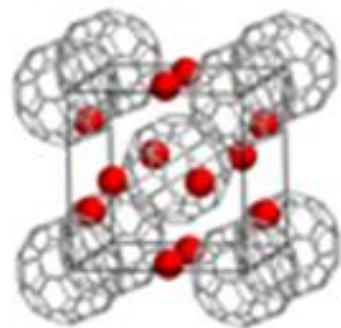
Фуллерены - молекулярные соединения углерода представляющие собой выпуклые замкнутые многогранники, составленные из чётного числа трёхкоординированных атомов углерода.



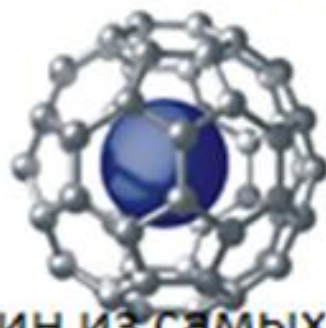
Фуллерен C_{60}



Фуллерен C_{540}



Фуллерид

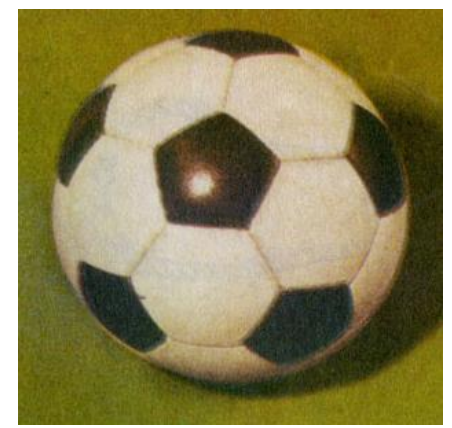
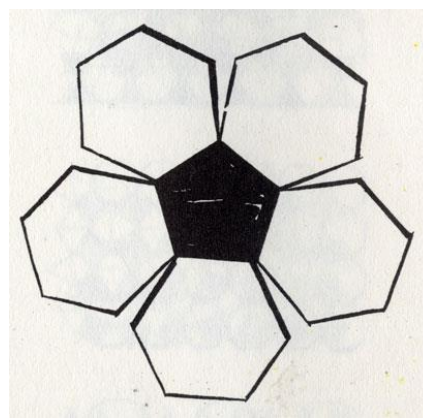


один из самых известных геодезических куполов

Р. Б. Фуллер

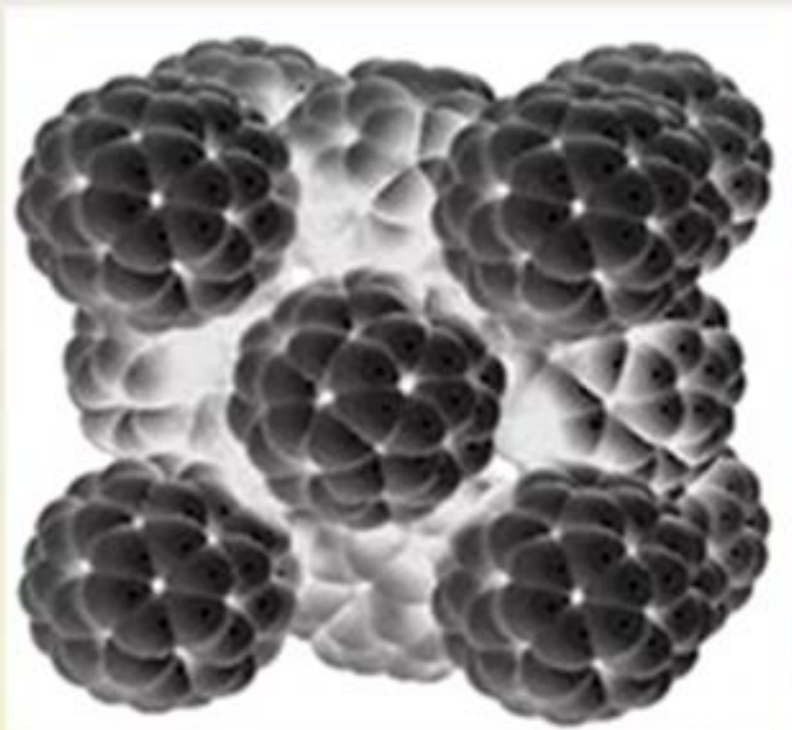


Монреальская биосфера –



У большинства современных мячей покрышка состоит из изогнутых многоугольников. Она весит около 300 г при окружности мяча около 64 см и составляется из 12 черных и 20 белых «полей». Ребро каждого многоугольника независимо от числа его углов имеет в длину 4,3 см.

Таким образом футбольный мяч представляет собой усеченный икосаэдр или, с точки зрения простых форм, **комбинацию икосаэдра и додекаэдра**. Одновременно он же – модель фуллерена C_{60} .



ФУЛЛЕРИТ

Кристалл, образованный молекулами фуллерена, получил название **фуллерит**.

Это **молекулярный кристалл**, т.е. минимальным элементом его структуры является не атом, а **молекула углерода**.

Он относится к веществам, являющимся связующим звеном между органическими и неорганическими веществами..

Кристаллическая структура фуллерита

Чистый фуллерит необходимо **хранить в темноте**, т.к. под влиянием света он разлагается.

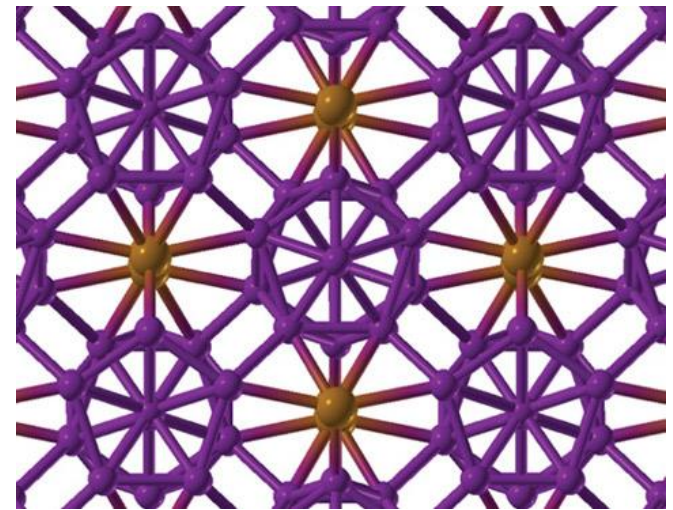
Фуллерит имеет **плотность $1,7 \text{ г/см}^3$** , что значительно меньше плотности графита ($2,3 \text{ г/см}^3$) и алмаза ($3,5 \text{ г/см}^3$).

По электрическим свойствам он **является полупроводником**.

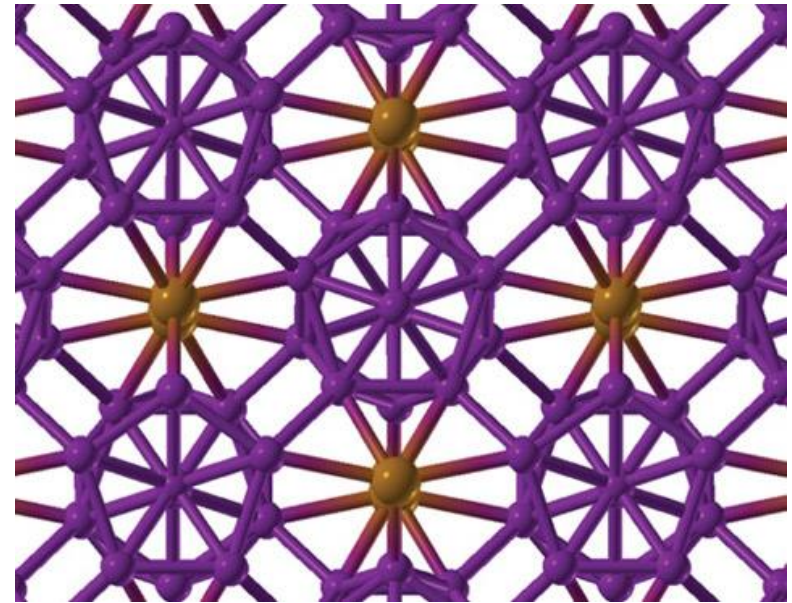
**Икосаэдрическая симметрия присутствует
внутри кристаллических структур
(кластеры атомов)**

Соединение, устроенное и ведущее себя будто сложное (то есть "собранное" из разных элементов), но на деле состоящее всего из одного элемента периодической таблицы, синтезировала и изучила международная группа специалистов из России, США, Италии и Китая под руководством Артёма Оганова

Новое соединение — это борид бора. Его химическая формула — B_{28} , а существует оно только при очень высоких давлениях и температуре (свыше 190 тысяч атмосфер и 1400 градусов Цельсия).



В отличие от известных крупных молекул из одного элемента (например фуллеренов), где все атомы равноправны, здесь имеются две отличные структурные единицы: икосаэдрический кластер B_{12} и кластер B_2 , которые, чередуясь, формируют кристаллическую решётку, схожую по форме с таковой у хлорида натрия. Одна ячейка такой системы насчитывает в сумме 28 атомов бора — отсюда и формула



Новое состояние бора авторы работы называют частично ионизированной фазой, поясняя, что у кластеров B_{12} и B_2 — различные электронные свойства, так что в общей структуре между ними происходит перенос заряда, как это было бы между двумя разными химическими элементами.

При этом такое перераспределение влияет на свойства получающегося вещества — его диэлектрическую константу, степень поглощения инфракрасного излучения и так далее.

<http://www.nature.com/nature/journal/v457/n7231/full/nature07736.html>

Икосаздрическая симметрия *в живых организмах*

*Морские звезды и
медузы и ... вирусы!*



Иллюстрация: М. В. Вильямс. Морские звезды и медузы.



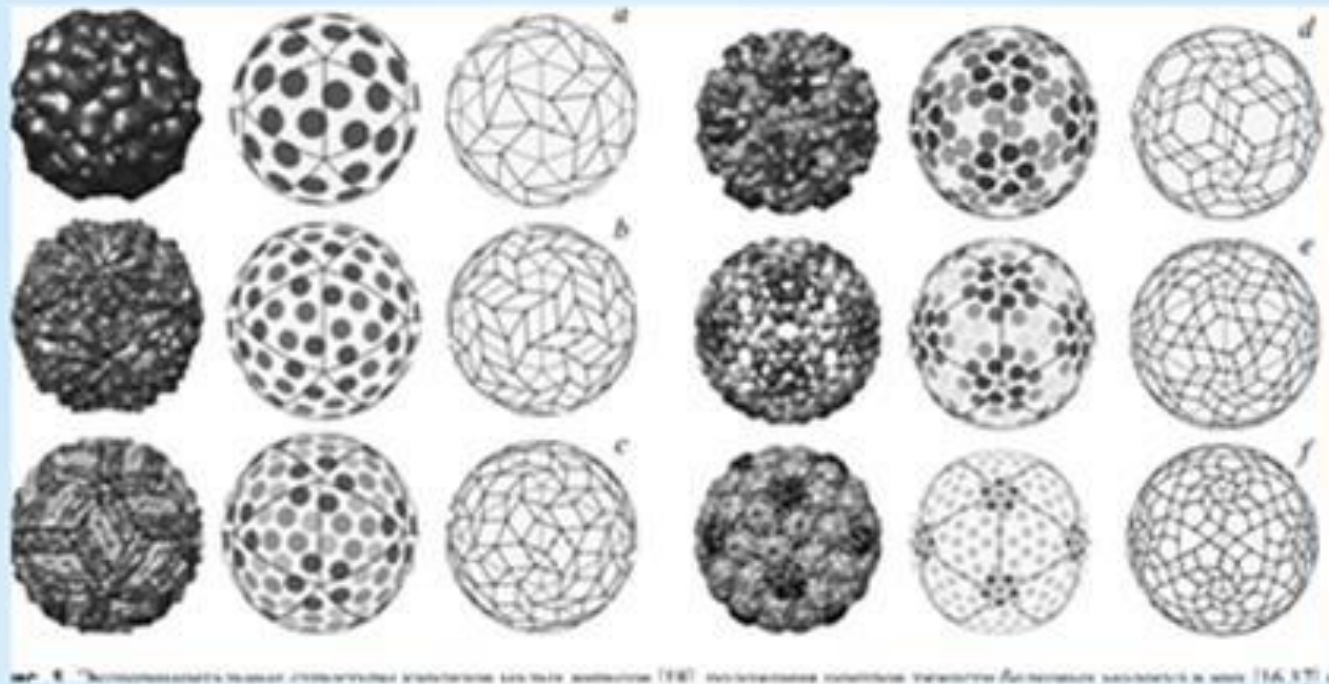
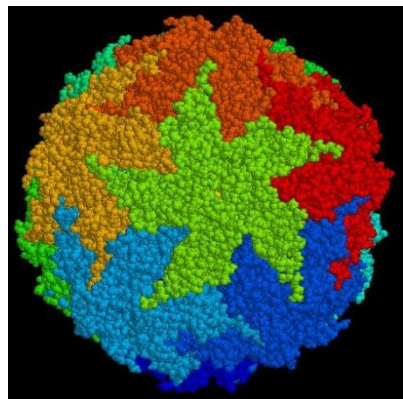


рис. 8. Электронномикроскопическая реконструкция структуры оболочки вируса табачной мозаики (198) — использование принципа трансформации Делоне для построения и моделирования (116, 117) и

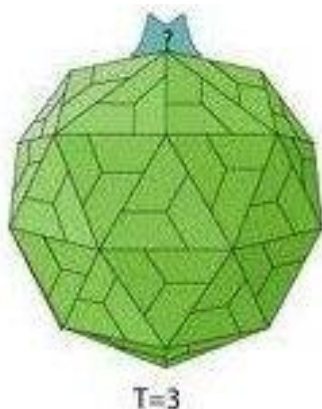
Каждая из пятиугольных граней капсида декорирована хиральным образом перестроенной пентагональной квазирешеткой Пенроуза. При этом протеины располагались в вершинах разбиения, состоящего из трех типов плиток — пятиугольников, узких и широких ромбов.

Капсид (от лат. capsula – ящик)– это белковая оболочка, в которую упакована вирусная нуклеиновая кислота. Капсид защищает вирусный геном от воздействия внешних факторов, а у безоболочечных вирусов обеспечивает его проникновение в клетку.

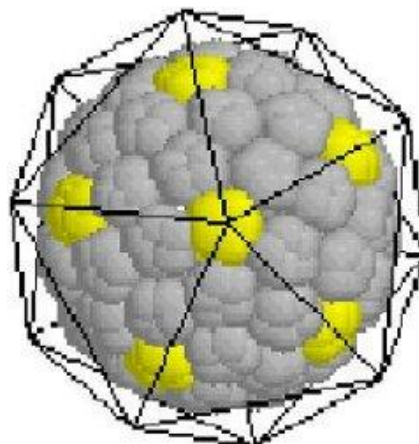
При увеличении числа белковых субъединиц, образующих капсид, связи между ними перестают быть эквивалентными, и субъединицы начинают группироваться с образованием морфологических структур - капсомеров, хорошо различимых в электронном микроскопе: в вершинах икосаэдра группируется по 5 структурных субъединиц (**пентоны**), а на гранях - по 6 структурных субъединиц (**гексоны**)



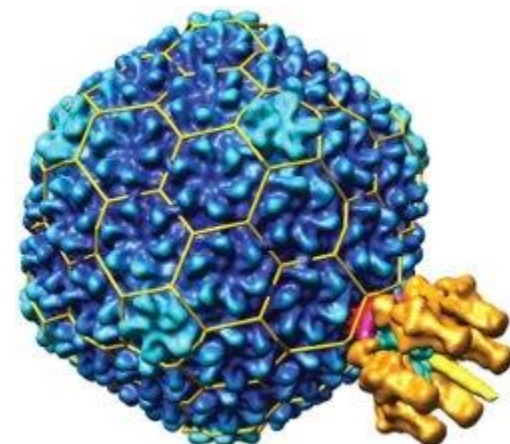
Капсид вируса-сателлита вируса мозаики проса



Икосаэдрический капсид бактериофага MS2, состоящий из 180 структурных субъединиц.



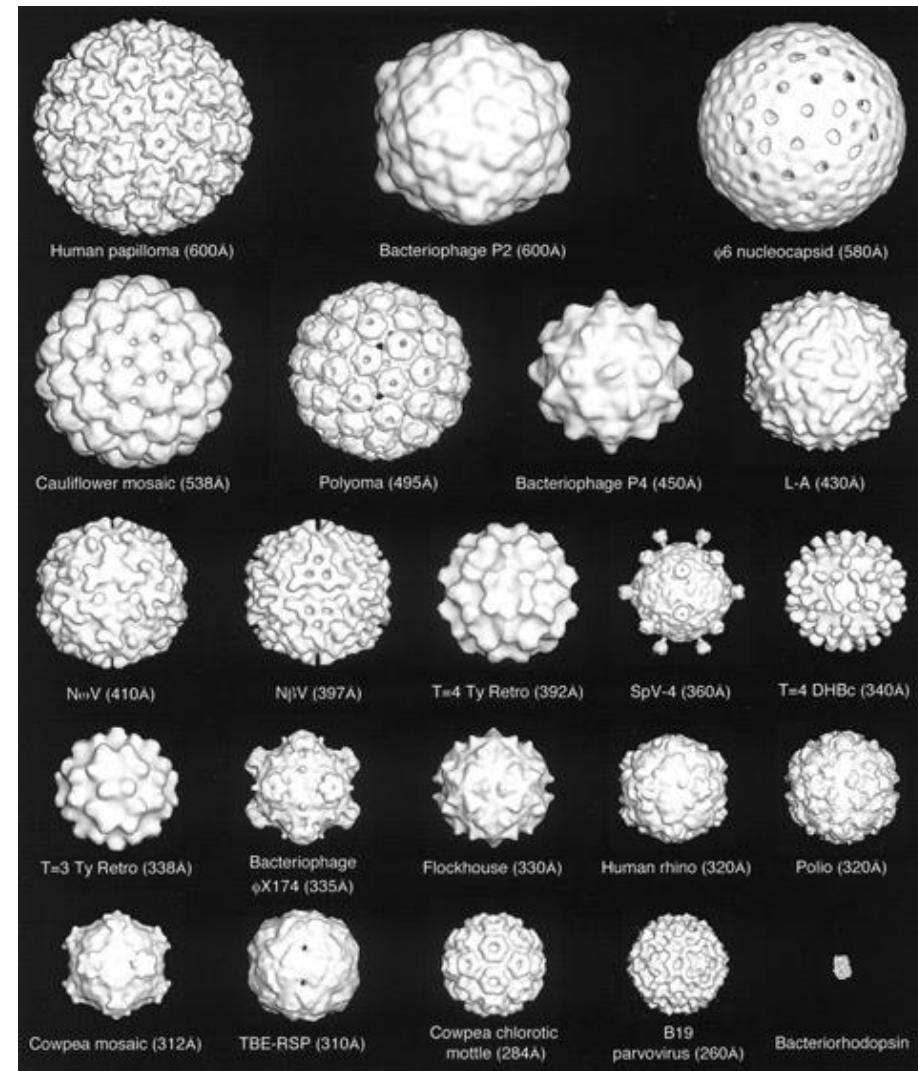
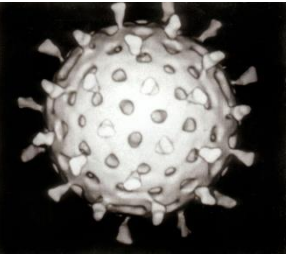
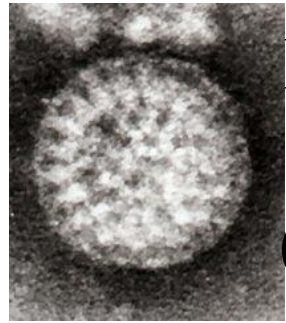
Модель капсида вируса SV-40. Желтым цветом выделены пентоны, серым – гексоны



Икосаэдрический капсид, в котором из структурных субъединиц формируются пентоны (выделены голубым) и гексоны (выделены синим).

Почему же вирусам так нравятся икосаэдры?

Вирус ротавирусной
инфекции
(«кишечный грипп»)
под электронным
микроскопом и его
компьютерная
реконструкция



**Икосаэдр имеет
минимальную
площадь поверхности
при заданном объеме**

Капсиды различных вирусов



В 1992 году Международный союз кристаллографии официально переопределил, что такое «кристалл» - новая формулировка звучит как «any solid, having an essentially discrete diffraction diagram», то есть **«любое твердое вещество, обладающее отчетливо дискретной дифракционной картиной».**



26 КОНГРЕСС МЕЖДУНАРОДНОГО СОЮЗА КРИСТАЛЛОГРАФОВ ПРОШЕЛ В МЕЛЬБУРНЕ₈₁
(АВСТРАЛИЯ) 22–29 АВГУСТА 2023

Поворотная симметрия 5-го порядка, играющая важную роль в квазикристаллах, наиболее ярко проявляется в переходной области между статично неживым и податливо гибким живым миром природы. Внутреннее строение квазикристаллов служит своеобразным началом движения от застывших кристаллических форм к подвижным живым структурам. Другими словами, квазикристаллы можно рассматривать как переходную форму от устойчивых и предсказуемых трансляционных конструкций, несущих малый объём информации, к подвижности, к свободному движению, к более информационно насыщенным структурам. Это имеет серьёзное философско-познавательное значение и требует глубокого анализа.