

**Свердліченко Д.Ю., Карлова А.О., Іванова І.М.**

*Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, пр.Берестейський 37,  
email: im\_ivan@ukr.net*

## **НОВІ ДОСЯГНЕННЯ У ФІЗИЦІ ТВЕРДОГО ТІЛА: КВАЗІКРИСТАЛИ ТА ЇХ ВЛАСТИВОСТІ**

***Анотація.** Наведено загальні відомості та характеристики квазікристалів відповідно до даних актуальних досліджень за заданою темою. Проаналізовано перспективи застосування та деякі пов'язані сучасні технології в сферах промисловості.*

***Abstract.** This work provides general facts on characteristics of quasicrystals according to the data of the latest research in the field, which includes surface analysis of potential applications and related technological innovations.*

***Ключові слова:** квазікристали, квазітрансляція, квазіперіодичність, квазіплощини, мозаїка Пенроуза.*

***Key words:** quasicrystals, quasitranslation, quasiperiodicity, lattice quasilanes, Penrose tiling*

До квазікристалів [1-7] відносять такі тверді тіла, в яких розташування атомів підпорядковується концепції квазіперіодичної трансляції, та в яких відсутня ротаційна симетрія ґратки. Такі матеріали проявляють сукупність унікальних властивостей, притаманних кристалічним металічним і аморфним тілам, та мають широкі перспективи прикладного застосування.

Квазікристали мають ротаційну симетрію 5-го, 8-го, 10-го або 12-го порядку, яка є недопустимою в реальних кристалах. Вперше, такі структури були відкриті Даніелем Шехтманом [2] при вивченні сплаву  $Al_{0,86}Mn_{0,14}$ , який було отримано за швидкого охолодження із розплавленого стану. Сплав розсіював пучок електронів і рентгнівських променів, які надавали чітку дифракційну картину, що мала точкову симетрію 5-го порядку. За пропозицією Джона Кана ці структури надалі були названі “шехтманітами”.

За ротаційної симетрії 5-го порядку існування періодичної тривимірної ґратки неможливе, але дослід Шехтмана емпірично показував

саме таку симетрію. Згодом виявилось, що це є квазіперіодичність з математичної точки зору. Це стало підставою для впровадження терміну “квазікристали”.

Для подальшого опису подібних структур, в якості моделі, було запропоновано адаптувати мозаїку Пенроуза, що в місяцях розташування вузлів містила б в собі атоми сплаву (рис.1).

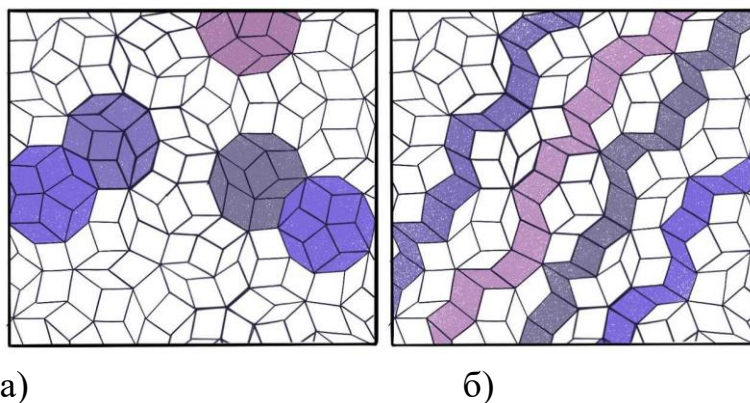


Рис.1. Мозаїка Пенроуза. Збереження орієнтації, утворених ромбами, десятикутників – а), квазіплощини заданої моделі атомної структури – б).

На прикладі такої двомірної мозаїки [1-7], в структурі ґратки можна вирізнити форми правильних десятикутників, просторова орієнтація яких є уніфікованою за всією площиною такої моделі (рис.1а), що свідчить про наявність дальнього орієнтаційного порядку [1-7] та структурних квазіплощин (рис.1б), що (за аналогією до вузлових у кристалічних тілах) надає можливість проводити дифракційний аналіз.

За допомогою дифракційного аналізу таких матеріалів (рис.1) бачимо заштриховані ромби, сторони яких паралельні заданому напрямку, утворюють системи приблизно рівновіддалених паралельних квазіплощин. Таких систем для даної моделі налічується 5, та їх взаємні перетини відбуваються під кутом  $72^\circ$ . В дифракційних картинах, через відсутність обмеженості умовами періодичної трансляції, можуть спостерігатись попередньо заборонені порядки ротаційної симетрії.

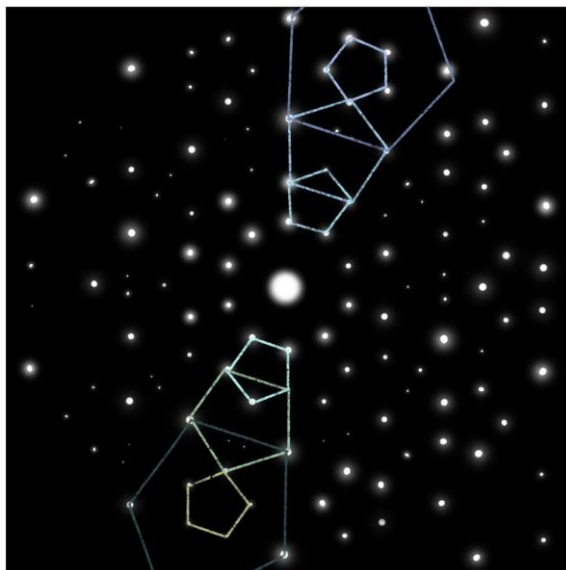


Рис.2. Дифракційна картина Лауе з вираженням, забороненим для кристалічних структур, 5-тим порядком ротаційної симетрії.

За отриманими дифракційними картинами (рис.2) можна побачити, що вони мають певні схожі властивості, але для квазікристалічного тіла розташування сукупності дифракційних піків інтенсивності чітко відповідає поворотній симетрії 5-го порядку. Така дифракційна картина визначається набором систематично розташованих піків інтенсивності, що задовільняють умовам дифракції Брегга при відбитті від зазначених квазіплощин зразка. На цьому засновується одна з методик подальшого аналізу просторової структури атомної будови досліджуваного квазікристалічного тіла.

Через переважання ковалентних зв'язків в структурі таких матеріалів, квазікристали мають виражені металічні властивості, які проявляються в наявності електронів провідності та в міцності міжатомних з'єднань. Разом з цим, такі матеріали мають «псевдо щілини» в енергетичному спектрі, що, в сукупності з наявними ковалентними зв'язками, зумовлює зниження їхнього електричного опору при підвищенні температури. Така поведінка, зазвичай, є властивою напівпровідникам, в енергетичних рівнях яких має місце заборонена зона між зонами валентності та провідності.

При дослідженні масивних квазікристалів було виявлено, що за кімнатної температури вони дуже крихкі та нееластичні. Але, суттєва еластичність за локального навантаження вказує на перспективи для практичного використання (зокрема, для дисперсного зміцнення металів) [7].

За механічної дії на квазікристал природа його деформації має переважно дислокаційний характер. Дислокації квазікристалів [7] мають фононну і фазонну компоненти  $\vec{b} = \vec{b}_{\text{фон}} + \vec{b}_{\text{фаз}}$ , де фононна компонента зумовлює трансляційну складову дислокації, фазонна компонента – сприяє формуванню фазонних дефектів, які порушують атомну структуру квазікристалу та можуть переміщуватися в межах зазначеної структури за сприяння процесів дифузії.

Наразі однозначно проглядається тенденція до пошуку нових сполук з квазікристалічними властивостями. Так в роботах [3-5] використовуються технології штучного інтелекту для моделювання та пошуку оптимальних сплавів на основі алюмінію та інших металів.

Отже квазікристали, як окремий вид твердих тіл, мають цілий ряд унікальних характеристик, подекуди невластивих речовинам, схожим за структурою на кристалічні. У подальших прогнозах розвитку за даною темою вбачаємо поглиблені дослідження нових структур сплавів квазікристалів та використання таких для виробництва функціональних самозбірних і самовідновлюваних матеріалів [6], які можуть застосовуватися в оптиці та електроніці.

## ЛІТЕРАТУРА

- [1] D. Levine and P. J. Steinhardt, Quasicrystals. I. Definition and Structure, Phys. Rev. B 34, 596 (1986).
- [2] 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 (1984).
- [3] C. Liu, E. Fujita, Y. Katsura, Y. Inada, A. Ishikawa, R. Tamura, K. Kimura, and R. Yoshida, Machine Learning to Predict Quasicrystals from Chemical Compositions, Adv. Mater. 33, 2102507 (2021).
- [4] Y. Iwasaki, K. Kimura, and K. Kitahara, Three-Center Bonds in an Al–Pd–Co Quasicrystalline Approximant: Wannier Function-Based Chemical Bonding Analysis, J. Phys. Chem. C 127, 20945 (2023).
- [5] C. Liu et al., Quasicrystals Predicted and Discovered by Machine Learning, Phys. Rev. Mater. 7, 093805 (2023).
- [6] X. Zeng, B. Glettner, U. Baumeister, B. Chen, G. Ungar, F. Liu, and C. Tschierske, A Columnar Liquid Quasicrystal with a Honeycomb Structure That Consists of Triangular, Square and Trapezoidal Cells, Nat. Chem. 15, 625 (2023).

[7] Ю.В. Мільман, М.О. Єфімов, Квазікристали — нова атомна структура твердого тіла і матеріали з комплексом незвичайних властивостей, Вісн. НАН України. — № 1. — С. 41-48. — 2012.