

01

Принципы структурного дизайна фотонных квазикристаллов

© А.Е. Мадисон

Национальный исследовательский университет „Высшая школа экономики“, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alex_madison@mail.ru

Поступило в Редакцию 18 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 24 мая 2024 г.

Принято к публикации 5 июня 2024 г.

Разрабатывается теория строения икосаэдрических квазикристаллов на основе теории разбиений и концепции элементарных ячеек. Предложен алгоритм, включающий в себя заполнение нескольких типов элементарных ячеек атомами согласно правилам локального соответствия и заполнение пространства ячейками посредством инфляций и дефляций. Теория позволяет осуществлять дизайн структур икосаэдрических квазикристаллов всех трех типов в рамках обеих групп икосаэдрической симметрии, в том числе правых и левых энантиоморфных форм.

Ключевые слова: фотонные кристаллы, икосаэдрические квазикристаллы, разбиение, правила подстановок.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.19.58650.19962

Апериодический порядок открывает перспективы для создания новых материалов и структур с необычными свойствами. В настоящее время ведутся интенсивные исследования с целью создания новых типов квазикристаллических сплавов, метаматериалов, материалов из неатомарных строительных блоков, аperiодических детерминированных структур [1,2]. Особый класс структур с аperiодическим порядком образуют фотонные квазикристаллы [3–5]. Дизайн возможных структур фотонных кристаллов долгое время основывался на аналогиях с периодическими кристаллическими решетками. Аperiодические фотонные материалы могут предоставить принципиально новые возможности для контроля и управления световыми потоками вплоть до реализации мечты о сказочной „шапке-невидимке“ [6]. При отсутствии в природе аналогов создаваемых материалов важную роль приобретает выработка теоретических принципов для целенаправленного дизайна их структур [7]. Многомерный подход [8,9] для дизайна структур фотонных квазикристаллов имеет ограниченную применимость, вследствие чего приобретают актуальность альтернативные методы [10–12].

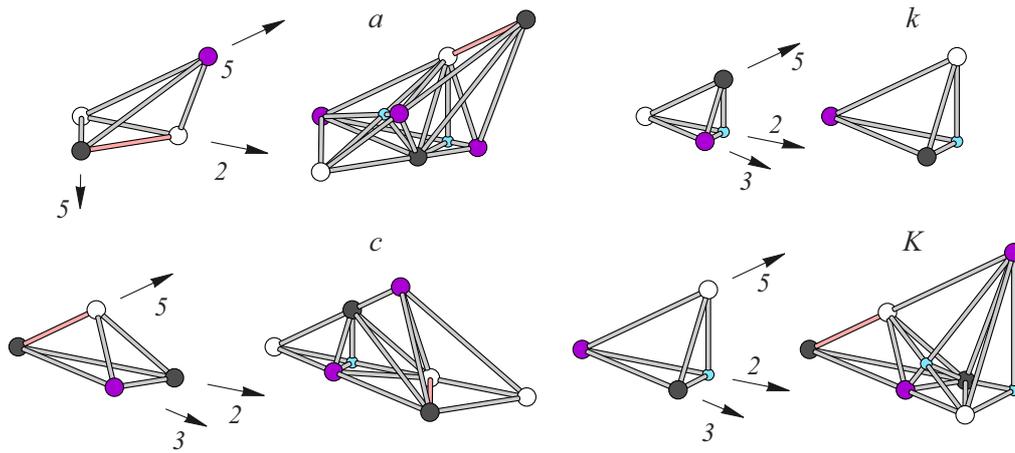
Нами разрабатывается теория строения икосаэдрических квазикристаллов на основе теории разбиений и концепции элементарных ячеек [13–17]. Задача структурного дизайна создаваемого фотонного квазикристалла сводится к двум подзадачам: заполнение пространства ячейками и заполнение ячеек атомами. Для заполнения пространства ячейками используется итерационный алгоритм инфляций и дефляций вместо трансляций, а вместо одной элементарной ячейки следует использовать копии нескольких типов ячеек. Элементарные ячейки должны удовлетворять правилам локального соответствия. Способ заполнения ячейки конкретными атомами должен однозначно определяться ее типом.

Хорошо известны два разбиения, которые получаются посредством проецирования из 6D-пространства и со-

гласуются с концепцией элементарных ячеек: разбиение Соколара–Стейнхардта на четыре типа зоноэдров [18] и *ABCK*-разбиение Данцера на четыре типа тетраэдров [19]. Они характеризуются разными инфляционными множителями, хотя сам Данцер указывал на их полную эквивалентность в смысле взаимной локальной выводимости [20], т.е. полиэдры одного из них могут быть рассечены на части меньшего размера, которые затем могут быть заново сгруппированы в полиэдры второго разбиения (см. [21], с. 235). Следовательно, должно существовать некое разбиение на субъединицы меньшего размера, из которых можно собрать оба разбиения.

Существует три типа икосаэдрических квазикристаллов (P , I , F), которые получаются при проецировании шестимерных аналогов примитивной, объемно центрированной и гранецентрированной кубических решеток соответственно [22]. Разбиение Соколара–Стейнхардта строится на шести базисных векторах и соответствует P -типу. Разбиение Данцера выводится из решетки корней D_6 , в соответствии с чем оно должно отвечать F -типу. Схема центрирования политопа F -типа получается путем объединения примитивной шестимерной гиперкубической решетки с несколькими ее сдвигами и включает в себя P -тип (одна исходная подрешетка) и I -тип (объединение двух подрешеток) в качестве подмножеств (см. [9], с. 177). Следовательно, должны существовать три типа взаимосогласованных разбиений, которые могли бы быть положены в основу структурного описания всех трех типов икосаэдрических квазикристаллов.

Первое — разбиение Соколара–Стейнхардта на золотые зоноэдры. Второе — разбиение Данцера [19], но вместо четырех тетраэдров Данцера (A , B , C , K) мы используем их уменьшенные в τ раз копии (a , b , c , k), где τ — золотое сечение. В третьем интересующем нас разбиении базовый набор ячеек образуют три тетраэдра Данцера A , C , K , уменьшенные в τ раз, и один тетраэдр



Правила подстановок для $ackK$ -разбиения. Ребра тетраэдров ориентированы вдоль соответствующих осей симметрии икосаэдра. Вершины разных типов обозначены различными цветами: А (белые), В (черные), С (сиреневые), F (голубые). Множитель инфляции равен τ . Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи.

K первоначального размера (a, c, k, K). Заметим, что базовый набор тетраэдров $ackK$ -разбиения также выводится из решетки корней D_6 путем проецирования ее многогранника Вороного [23]. Эквивалентное разбиение (с точностью до инфляции) упоминалось в работе Данцера [19] в разделе „Нерешенные проблемы“. Основным вопросом заключался в том, являются ли два указанных выше тетраэдрических разбиения в определенном смысле изоморфными друг другу и, если нет, в чем их принципиальное отличие. Проблема несколько десятилетий оставалась в статусе нерешенной, а упомянутое Данцером второе тетраэдрическое разбиение — практически неизученным. Настоящая работа восполняет этот пробел.

Правила подстановок для $ackK$ -разбиения представлены на рисунке. Подстановки характеризуются матрицей подстановок или транспонированной к ней матрицей композиции. Во втором случае можно использовать формальное матричное уравнение с обычным правилом умножения „строка на столбец“:

$$\text{infl} \begin{pmatrix} a \\ c \\ k \\ K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ c \\ k \\ K \end{pmatrix}.$$

В разбиении существует четыре типа вершин. Мы используем прямой шрифт для обозначения вершин (А, В, С, F) и курсивный шрифт для тетраэдров (напомним, что для обозначения тетраэдров Данцера традиционно используются прописные буквы А, В, С, К, а для уменьшенных в τ раз их копий мы используем строчные буквы a, b, c, k). Вершины А, В, С в итоговых разбиениях соответствуют трем типам узлов с локальной икосаэдрической симметрией. После каждой итерации они циклически меняются местами: $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$. Поэтому множитель инфляции равен золотому сечению τ , а множитель самоподобия упаковки в целом

равен τ^3 . Существует два типа ребер [АВ] одинаковой длины, различающихся правилами локального соответствия. Ребра второго типа на рисунке выделены светло-красным цветом (цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи), чтобы подчеркнуть аналогию с соответствующими ребрами зоноэдрального разбиения [13–17].

Имеет место точное взаимное соответствие между $ackK$ -разбиением и разбиением Соколар–Стейнхардта. Изначально узлы С в зоноэдральном разбиении отсутствовали [18]. Они были добавлены нами [13]. Если добавить еще узлы F в центры граней триаконтаэдров и в эквивалентные им позиции, то абсолютно все узлы в обоих разбиениях совпадут. Зоноэдры — вытянутый ромбоэдр (GR), ромбический додекаэдр (RD), ромбический икосаэдр (RI) и ромбический триаконтаэдр (RT) — складываются из тетраэдров в соответствии с уравнением

$$\begin{pmatrix} GR \\ RD \\ RI \\ RT \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 6 & 12 & 0 \\ 8 & 12 & 4 & 4 \\ 10 & 10 & 0 & 40 \\ 0 & 0 & 0 & 120 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ c \\ k \\ K \end{pmatrix}.$$

Если узлы С в зоноэдрах разных типов считать разными, то зоноэдры могут быть использованы в качестве элементарных ячеек при описании квазикристаллов P-типа.

Если внутрь зоноэдров добавлены узлы С, зоноэдры разбиты на тетраэдры так, как описано выше, а все тетраэдры одного типа эквивалентны друг другу, то такая упаковка соответствует квазикристаллам I-типа. Тетраэдры получающегося $ackK$ -разбиения могут быть использованы в качестве элементарных ячеек. При их декорировании конкретными атомами следует учитывать возможные неэквивалентные позиции: четыре типа узлов (три из которых обладают локальной икосаэдрической симметрией), 10 позиций на различных ребрах, 12

позиций на различных гранях и четыре позиции внутри каждого из тетраэдров.

Чтобы получить икосаэдрическую упаковку F -типа, нужно $ackK$ -разбиение перестроить в $abck$ -разбиение Данцера. Для этого в нем достаточно представить все тетраэдры K как объединения двух тетраэдров b и k (при этом на ребре [CF] каждого тетраэдра K появится по одному дополнительному узлу C):

$$\begin{pmatrix} a \\ c \\ k \\ K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ k \end{pmatrix}.$$

Итак, любой икосаэдрический квазикристалл может рассматриваться как упаковка элементарных ячеек. Трём типам квазикристаллов (P , I , F) соответствуют три типа разбиений, каждое со своим базовым набором элементарных ячеек. Все три разбиения согласуются с многомерным подходом, причем процедура проектирования из шестимерного пространства является безальтернативной. Все узлы квазирешетки P -типа являются подмножеством узлов квазирешетки I -типа, которые в свою очередь являются подмножеством узлов квазирешетки F -типа. Имеет место полное согласие с теоретически выведенными значениями инфляционного множителя: для P -типа множитель инфляции равен τ^3 , а для I - и F -типов он равен τ [24].

Для каждого из трех типов квазикристаллов существует три варианта упаковок с глобальной икосаэдрической симметрией, которые локально изоморфны друг другу и генерируются по единым правилам в зависимости от выбора стартовой конфигурации. Поясним это на примере I -типа. Если взять тетраэдр k , умножить его группой икосаэдра I_h и получившиеся 120 копий объединить вокруг вершины A , то получится первая стартовая конфигурация. Аналогичным образом получаем еще две конфигурации — объединяя 120 копий тетраэдра c вокруг вершины B либо 120 копий тетраэдра K вокруг вершины C . Для P - и F -типов стартовые конфигурации выбираются эквивалентным образом из аналогичных полиэдров. Следовательно, как в разбиении на зоноэдры с коэффициентом инфляции τ^3 , так и в обоих разбиениях Данцера на различные наборы тетраэдров с коэффициентом инфляции τ всегда существует в точности три типа узлов с локальной симметрией икосаэдра (A , B , C) и, как следствие, три типа характерных икосаэдрических кластеров.

Если для каждого из базовых тетраэдров все его 120 копий (полная орбита ячейки в группе I_h) заполняются атомами одинаковым образом, то получающаяся в итоге структура будет центросимметричной и будет соответствовать группе симметрии I_h . Если же хотя бы для одного из базовых тетраэдров сам тетраэдр и его зеркальную копию считать различными, то в итоге в структуре будет отсутствовать центр инверсии, и она будет соответствовать группе симметрии I . Такой вариант

декорирования ячеек естественным образом приводит к появлению правых и левых энантиоморфных форм.

Таким образом, теория, основанная на использовании трех типов разбиений, базовые ячейки которых декорируются конкретными атомами с учетом правил локального соответствия, позволяет решать практически все задачи структурного дизайна икосаэдрических квазикристаллов. Концепция элементарных ячеек позволяет описывать структуры икосаэдрических квазикристаллов всех трех типов (P , I , F) в рамках обеих групп симметрии (I_h , I), причем для нецентросимметричных структур возможен учет явления энантиоморфизма. Разбиение на зоноэдры и два разбиения на тетраэдры полностью согласуются между собой и с многомерным подходом, вследствие чего они могут быть использованы при уточнении структур квазикристаллических сплавов.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда за счет гранта № 23-23-00392 (<https://rscf.ru/project/23-23-00392/>).

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] *Optics of aperiodic structures. Fundamentals and device applications*, ed by L. Dal Negro (Pan Stanford Publ., Singapore, 2014). DOI: 10.1201/b15653
- [2] Y. Nagaoka, J. Schneider, H. Zhu, O. Chen, *Matter*, **6**, 30 (2023). DOI: 10.1016/j.matt.2022.09.027
- [3] A. Poddubny, E. Ivchenko, *Physica E*, **42**, 1871 (2010). DOI: 10.1016/j.physe.2010.02.020
- [4] W. Man, M. Megens, P. Steinhardt, P.M. Chaikin, *Nature*, **436**, 993 (2005). DOI: 10.1038/nature03977
- [5] S.Y. Jeon, H. Kwon, K. Hur, *Nat. Phys.*, **13**, 363 (2017). DOI: 10.1038/nphys4002
- [6] S. Boriskina, *Nat. Photon.*, **9**, 422 (2015). DOI: 10.1038/nphoton.2015.107
- [7] E.G. Noya, C.K. Wong, P. Llombart, J.P.K. Doye, *Nature*, **596**, 367 (2021). DOI: 10.1038/s41586-021-03700-2
- [8] W. Steurer, T. Haibach, in *International tables for crystallography*, ed. by U. Shmueli (Springer, Dordrecht, 2006), vol. B, ch. 4.6, p. 486–532. DOI: 10.1107/97809553602060000568
- [9] W. Steurer, S. Deloudi, *Crystallography of quasicrystals. Concepts, methods and structures* (Springer, Berlin–Heidelberg, 2009). DOI: 10.1007/978-3-642-01899-2
- [10] M. Baake, U. Grimm, *Acta Cryst. A*, **76**, 559 (2020). DOI: 10.1107/S2053273320007421
- [11] M. Widom, M. Mihalkovič, *Isr. J. Chem.*, online version (2023). DOI: 10.1002/ijch.202300122
- [12] C.L. Henley, *Phys. Rev. B*, **43**, 993 (1991). DOI: 10.1103/PhysRevB.43.993
- [13] A.E. Madison, *RSC Adv.*, **5**, 5745 (2015). DOI: 10.1039/C4RA09524C

- [14] A.E. Madison, RSC Adv., **5**, 79279 (2015).
DOI: 10.1039/C5RA13874D
- [15] A.E. Madison, P.A. Madison, Proc. Roy. Soc. A, **475**, 20180667 (2019). DOI: 10.1098/rspa.2018.0667
- [16] A.E. Madison, P.A. Madison, Struct. Chem., **31**, 485 (2020).
DOI: 10.1007/s11224-019-01430-w
- [17] А.Е. Мадисон, П.А. Мадисон, В.А. Мошников, ЖТФ, **94** (4), 561 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.04.57526.284-23 [A.E. Madison, P.A. Madison, V.A. Moshnikov, Tech. Phys., **69**, 528 (2024)].
- [18] J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt, Phys. Rev. B, **34**, 617 (1986).
DOI: 10.1103/PhysRevB.34.617
- [19] L. Danzer, Discrete Math., **76**, 1 (1989).
DOI: 10.1016/0012-365X(89)90282-3
- [20] L. Danzer, Z. Papadopolos, A. Talis, Int. J. Mod. Phys. B, **7**, 1379 (1993). DOI: 10.1142/S0217979293002389
- [21] M. Senechal, *Quasicrystals and geometry* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [22] Л.С. Левитов, Ж. Ринер, Письма в ЖЭТФ, **47** (12), 658 (1988). http://jetpletters.ru/ps/182/article_3109.pdf [L.S. Levitov, J. Rhyner, JETP Lett., **47**, 760 (1988). http://jetpletters.ru/ps/1099/article_16620.pdf].
- [23] P. Kramer, Z. Papadopolos, M. Schlottmann, D. Zeidler, J. Phys. A, **27**, 4505 (1994).
DOI: 10.1088/0305-4470/27/13/024
- [24] P. Kramer, Z. Papadopolos, D. Zeidler, in *Symmetries in science V*, ed. by B. Gruber, L.C. Biedenharn, H.D. Doebner (Springer, Boston, 1991), p. 395–427.
DOI: 10.1007/978-1-4615-3696-3_19