

05

## Теория строения икосаэдрических квазикристаллов: общие принципы

© А.Е. Мадисон,<sup>1</sup> П.А. Мадисон<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский университет „Высшая школа экономики“,  
190121 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,  
197022 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: alex\_madison@mail.ru

Поступило в Редакцию 28 июня 2024 г.

В окончательной редакции 30 октября 2024 г.

Принято к публикации 30 октября 2024 г.

Предложена единая теория строения икосаэдрических квазикристаллов, в рамках которой возможно описание всех трех типов квазирешеток ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ) и обеих икосаэдрических групп симметрии. Теория базируется на совместном применении трех типов разбиений, для каждого из которых используется свой базовый набор элементарных ячеек и свои правила подстановок. По аналогии с обычными кристаллами, задача описания структуры квазикристалла распадается на два этапа: заполнение пространства ячейками и заполнение ячеек атомами с той лишь разницей, что вместо одной элементарной ячейки используются ячейки нескольких типов, а для заполнения пространства ячейками вместо трансляций используется итерационный алгоритм инфляций и дефляций.

**Ключевые слова:** икосаэдрические квазикристаллы, правила подстановок, упаковки.

DOI: 10.61011/JTF.2024.12.59274.216-24

### Введение

Предлагаемая вниманию читателей статья открывает серию работ по теории строения икосаэдрических квазикристаллов. В ней мы рассматриваем возможные структурные типы икосаэдрических квазикристаллов, единый подход к построению икосаэдрических упаковок, а также общие для всех структурных типов свойства. В последующих работах мы намереваемся по отдельности детально рассмотреть особенности построения квазирешеток различных типов и явление энантиоморфизма в них.

Икосаэдрические квазикристаллы были открыты Д. Шехтманом [1], за что он был удостоен Нобелевской премии. Редакция журнала Nature причислила это открытие к одной из ключевых вех в развитии современной кристаллографии [2], особо подчеркнув также вклад А. Маккея, предсказавшего возможность существования квазикристаллов на основе моделирования дифракции от разбиения Пенроуза [3], и П. Стейнхардта, давшего первое теоретическое объяснение квазикристаллического дальнего порядка [4,5].

Задача структурного анализа квазикристаллов отнюдь не является решенной [6]. Известно, что икосаэдрические квазикристаллы могут быть трех типов:  $P$ ,  $I$ ,  $F$  [7,8]. Они являются аналогами примитивной, объемно-центрированной и гранецентрированной кубических решеток и должны получаться при проецировании из  $6D$ -пространства соответствующим образом центрированных шестимерных кубических решеток. Однако наглядных иллюстраций соответствующих  $3D$ -квазирешеток до сих пор никем представлено не было. Вообще говоря, проецирование из метрических про-

странств высокой размерности (не обязательно евклидовых) открывает путь к дизайну потенциально возможных иерархических структур самого общего типа, при этом истинную химическую или физическую природу упаковываемых субъединиц следует рассматривать как второстепенный фактор [9].

Исторически первый способ описания структуры квазикристаллов основывался на теории разбиений. Соколар и Стейнхардт показали, что все пространство можно закономерным образом заполнить четырьмя типами зоноэдров по принципу „сторона к стороне“ без зазоров и перекрытий [5]. Удивительно, но зоноэдральное разбиение практически никогда не использовалось на практике при расшифровке реальных структур. Позже Данцер ввел в рассмотрение разбиение пространства на четыре типа тетраэдров, также обладающее глобальной икосаэдрической симметрией [10], а затем опубликовал работу, в которой содержалось утверждение о полной эквивалентности тетраэдрического и зоноэдрального разбиений [11]. На самом деле речь шла лишь об их взаимной локальной выводимости, т.е. о том, что плитки одного из них можно рассечь на части меньшего размера, которые затем можно заново сгруппировать в плитки второго разбиения [12]. Ниже нами показано, что в действительности разбиение Соколар–Стейнхардта и разбиение Данцера характеризуются разными множителями инфляции, содержат разное число узлов и порождают квазирешетки разных типов ( $P$  и  $F$  соответственно). Интересный факт: в основополагающей работе Данцера [10] в разделе „Нерешенные проблемы“ вскользь упоминается еще одно тетраэдрическое разбиение, которому с тех пор в научной литературе

не было уделено практически никакого внимания. Мы его исследовали [13] и пришли к выводу, что оно является тем самым недостающим третьим разбиением, с помощью которого порождается квазирешетка  $I$ -типа.

Разбиение на вытянутые и сплюснутые ромбоэдры, которое называют также  $3D$ -разбиением Пенроуза или разбиением Амманна–Крамера–Нери [14], нередко используется на практике при расшифровке структур многокомпонентных сплавов [15,16]. Основной проблемой при этом является неоднозначность процедуры проецирования из  $6D$ -пространства, так как определенные области пространства можно заполнить двумя типами ромбоэдров сразу несколькими эквивалентными способами. Точная икосаэдрическая симметрия структуры при этом нарушается и сохраняется лишь в среднем. Такие дефекты называются фазонами [17]. С другой стороны, как для зоноэдрального, так и для обоих тетраэдрических разбиений процедура проецирования из  $6D$ -пространства является вполне однозначной, и никаких фазонных перескоков (phason flips) при этом не возникает. Возникает вопрос: фазоны присущи истинной структуре квазикристалла, или они есть следствие неудачно выбранной модели?

Существует мнение, что квазикристаллы вообще не могут быть представлены как упаковки идентичных элементарных ячеек, а наиболее стабильную, энергетически предпочтительную конфигурацию атомов представляет собой упаковка взаимно перекрывающихся кластеров [18]. Могут использоваться один или несколько характерных кластеров, структура которых определяется в результате дифракционных экспериментов либо на основе проецирования  $6D$ -решеток, либо на основе аналогии со строением кристаллических аппроксимантов [19–22].

Основным методом структурного анализа квазикристаллов на сегодняшний день является метод проецирования из  $6D$ -пространства (strip projection); в своем современном виде он подробно изложен в работах [23,24]. Метод сводится к двум шагам: сначала на основе экспериментальных данных создается  $6D$ -модель структуры икосаэдрического квазикристалла в виде распределения шестимерных гиператомов в шестимерном гиперкубе (элементарной ячейке периодической  $6D$ -решетки), а затем проводится непосредственно само проецирование некоторого ее среза в физическое  $3D$ -пространство (cut-and-project). Полученная проекция анализируется в рамках предварительно выбранной структурной модели, параметры которой уточняются путем подгонки расчетных интенсивностей к экспериментальным данным. Подчеркнем: разные авторы выбирают те или иные структурные модели, исходя из своих личных интуитивных предпочтений. Известны модель на основе двух типов ромбоэдров [15,16], модель на основе неполного набора зоноэдров [25], модель взаимно перекрывающихся триаконтаэдров [26,27], модель канонических ячеек [28] и несколько других на основе неполных и смешанных наборов.

Проецирование считается лучшей альтернативой разбиениям [29]. В частности, Сенешаль придерживается

мнения, что „математики открыли модели разбиений, но они оказались нереалистичными“. Она отмечает: „На второй стадии квазикристаллической революции разбиения отступили на задний план, а кластеры вышли на первый. Мы по-прежнему нуждаемся в полиэдрах: но не для того, чтобы осуществлять разбиение пространства, а чтобы содержать кластеры“ [30].

Какие проблемы могут возникнуть в методе проецирования? Во-первых, чтобы построить  $6D$ -модель, нужны коэффициенты Фурье. Это подразумевает, что исследуемый материал уже синтезирован. С другой стороны, основным, магистральным направлением современного материаловедения является создание материалов, не имеющих аналогов в природе. В частности, в последнее время наблюдается значительный рост интереса к фотонным и фононным кристаллам, а также метаматериалам [31]. Для дизайна потенциально возможных структур фотонных квазикристаллов [32] или квазикристаллов из неатомарных субъединиц [33] метод проецирования едва ли применим.

Чтобы понять следующую проблему, рассмотрим простейший случай — получение одномерной  $LS$ -последовательности Фибоначчи путем проецирования наклоненной под иррациональным углом квадратной решетки на прямую линию [34]. Все ребра квадрата, служившего в  $2D$ -пространстве элементарной ячейкой, были эквивалентны, но после проецирования одно из них порождает длинный отрезок ( $L$ ), другое — короткий ( $S$ ), а еще два отбрасываются. Ребра ориентированы к линии проекции под разными углами и претерпевают искажения с разными аспектными отношениями. Если поменять местами учтенную и отброшенную пару, получится фазонный дефект. Еще один важный момент: результат проецирования двух соседних квадратов различен!

При проецировании  $6D \rightarrow 3D$  имеет место аналогичная ситуация. Например, в решетке корней  $D_6$  все узлы эквивалентны, а в порождаемом ею разбиении Данцера — 3 типа неэквивалентных узлов с локальной икосаэдрической симметрией [10]. Еще один пример — генерация разбиения Соколар–Стейнхардта из примитивной  $6D$ -решетки. Из расположенного в начале координат элементарного гиперкуба при проецировании получается ромбический триаконтаэдр. В соседней с ним области получается кластер с тетраэдрической симметрией, образованный тремя ромбическими додекаэдрами и четырьмя ромбоэдрами. Результаты проецирования соседних одинаковых элементарных ячеек могут кардинально отличаться друг от друга в зависимости от их положения по отношению к окну проецирования. Если это проигнорировать, то структурная модель, скорее всего, сведется к перекрывающимся триаконтаэдрам со статистически разупорядоченными тетраэдрами внутри, а точная икосаэдрическая симметрия будет утеряна.

Центральной проблемой рентгеноструктурного анализа является фазовая проблема. Каким образом она может быть решена для нецентросимметричных структур в

шестимерном пространстве? Ведь переход от функции Паттерсона к распределению атомов основывается на стереохимических критериях, а разная степень искажения при проецировании эквивалентных направлений ставит под вопрос их применимость. В обзоре [35] перечислены типичные проблемы, возникающие при расшифровке структур классических кристаллов, и указываются характерные „симптомы“ часто совершаемых ошибок — неправильно выбранной группы симметрии, некорректной идентификации атомов в определенных позициях, некорректного определения решетки Бравэ, ошибок в определении локальной симметрии узлов и т.п. При этом отмечается, что ошибочные структуры, как правило, имеют очень хорошие значения  $R$ -фактора. Задача определения истинной структуры квазикристаллов ничуть не менее проблемна.

Анализируя различные варианты многомерного подхода, мы пришли к выводу, что при его реализации не исключен риск принудительной подгонки экспериментальных данных под некорректную структурную модель. По нашему мнению, отказ от использования икосаэдрических разбиений Соколара–Стейнхардта и Данцера является неоправданным и был вызван недостаточной степенью проработки теоретических аспектов проблемы. Ранее нами были выведены правила подстановок для зонноэдрального разбиения Соколара–Стейнхардта, и на их основе был разработан алгоритм его построения [36–38]. Аналогичный подход был применен к разбиению Данцера и установленному нами недостающему третьему разбиению [13], что в рамках концепции элементарных ячеек [39] позволило описывать структуры икосаэдрических квазикристаллов всех трех типов  $P$ ,  $I$ ,  $F$  и обеих групп симметрии  $(I, I_h)$ . Ниже изложены основные принципы предлагаемой нами единой теории.

## 1. Общие принципы

Если поменять порядок действий — сначала осуществить проецирование „пустой“ решетки, а уже затем заполнять ячейки получившегося разбиения конкретными атомами — то возникает полная аналогия с обычными периодическими кристаллами с той лишь разницей, что вместо одной элементарной ячейки используются ячейки нескольких типов [39]. Аналогами решеток Бравэ становятся три типа квазирешеток —  $(P, I, F)$ . Для заполнения пространства ячейками вместо трансляций используется итерационный алгоритм инфляций и дефляций, при этом копии ячеек могут иметь различную ориентацию. Эквивалентность противоположных граней элементарного параллелепипеда уступает место правилам локального соответствия. По аналогии с тем, как в элементарной ячейке периодического кристалла рассматриваются позиции общего и частного положения (позиции Вайкоффа), в элементарных ячейках квазикристаллических упаковок также можно систематизировать позиции атомов с определенной локальной симметрией и кратностью, но из-за

требований локального соответствия некоторые позиции могут одновременно присутствовать в ячейках сразу нескольких типов. Единый подход применим для обеих икосаэдрических групп  $(I, I_h)$ . Внутренняя симметрия распределения атомов внутри конкретной ячейки определяется подгруппой-стабилизатором, а ее возможные ориентации в пространстве — соответствующей орбитой согласно лемме Бернсайда (иначе называемой также леммой Коши–Фробениуса). Учет правил локального соответствия приводит к повышению симметрии некоторых позиций на гранях зонэдров по сравнению с симметрией подгруппы-стабилизатора, а в случае нецентросимметричной группы может даже повыситься их кратность. При программной реализации алгоритма построения икосаэдрических упаковок любой ее фрагмент и сама упаковка в целом описываются как списки ячеек, для каждой из которых задается ее тип, положение и ориентация (правила подстановок и стартовые конфигурации также задаются списками ячеек). Несмотря на все перечисленные отличия, суть остается неизменной: квазикристалл — это упаковка ячеек.

Наш подход основан на совместном использовании трех разбиений. Первое из них — это разбиение Соколара–Стейнхардта [5]. Для него базовый набор элементарных ячеек образуют 4 типа „золотых“ зонэдров: вытянутый ромбоэдр ( $GR$ ), ромбический додекаэдр Билинского ( $RD$ ), ромбический икосаэдр Федорова ( $RI$ ), ромбический триаконтаэдр Кеплера ( $RT$ ). Для двух других в качестве элементарных ячеек используются тетраэдры Данцера:  $A, B, C, K$  [10]. Алгоритм построения  $ABCK$ -разбиения Данцера достаточно подробно изложен в работе [40].

Заметим, что при выводе зонноэдрального разбиения [5] использовалась шестимерная кубическая решетка  $Z^6$  (с минимальной нормой 1), а при выводе тетраэдрического  $ABCK$ -разбиения [10] использовался целочисленный вид решетки корней  $D_6$  (так называемая „шахматная“ решетка). Необходимо привести все решетки к единому масштабу. Вместо тетраэдров  $A, B, C, K$  мы используем их уменьшенные в  $\tau$  раз копии, где  $\tau$  — золотое сечение. Для уменьшенных тетраэдров мы используем обозначения  $a, b, c, k$  [13]. Увеличение масштаба в  $\tau$  раз соответствует однократной инфляции, что сопровождается циклической сменой типов узлов в вершинах тетраэдров  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ . Для обозначения узлов Данцер использовал римские цифры [11], а мы использовали буквенные обозначения [36–39]. Во избежание путаницы мы используем наклонный шрифт для обозначения тетраэдров ( $A, B, C, K$ ) и прямой шрифт для обозначения узлов ( $A, B, C, F$ ). При уменьшении масштаба мы не просто формально уменьшаем линейные размеры тетраэдров — мы также обязаны циклически (в обратном порядке) менять типы вершин. Еще раз отметим, что Данцер указывал на существование двух базовых наборов тетраэдров:  $\{A, B, C, K\}$  и  $\{A, C, K, \tau K\}$ , но второму варианту не уделил особого внимания [10]. После уменьшения масштаба получаются  $abck$ - и  $ackK$ -разбиения; оба имеют фундаментальное значение [13].

## 2. Три типа квазирешеток: $P$ , $I$ , $F$

Квазирешетки в теории квазикристаллов играют роль решеток Бравэ. Три типа икосаэдрических квазикристаллов иллюстрирует рис. 1. Слева изображены три типа кубических решеток: примитивная ( $sc$ ), объемно-центрированная ( $bcc$ ) и гранецентрированная ( $fcc$ ), а справа — их шестимерные аналоги ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ).

Трем типам квазикристаллов соответствуют три различные схемы центрирования политопов в  $6D$ -пространстве, при проецировании которых получаются три типа разбиений, каждое со своим базовым набором элементарных ячеек и со своими правилами подстановок. Примитивная  $6D$ -решетка порождает зоноэдральное разбиение Соколара–Стейнхардта, центрирование  $I$ -типа — тетраэдрическое  $ackK$ -разбиение, центрирование  $F$ -типа — тетраэдрическое  $abck$ -разбиение Данцера. Центрирование политопов не меняет узлов элементарного гиперкуба первоначально выбранной примитивной решетки, оно приводит лишь к добавлению новых узлов внутри. Следовательно, квазирешетки  $I$  и  $F$ -типов должны содержать все узлы квазирешетки  $P$ -типа в качестве подмножества. Сгруппировав и объединив соответствующие тетраэдры, мы обязаны вновь получить зоноэдры. Иными словами, все три типа разбиений согласуются между собой, согласуются типы узлов и правила подстановок.

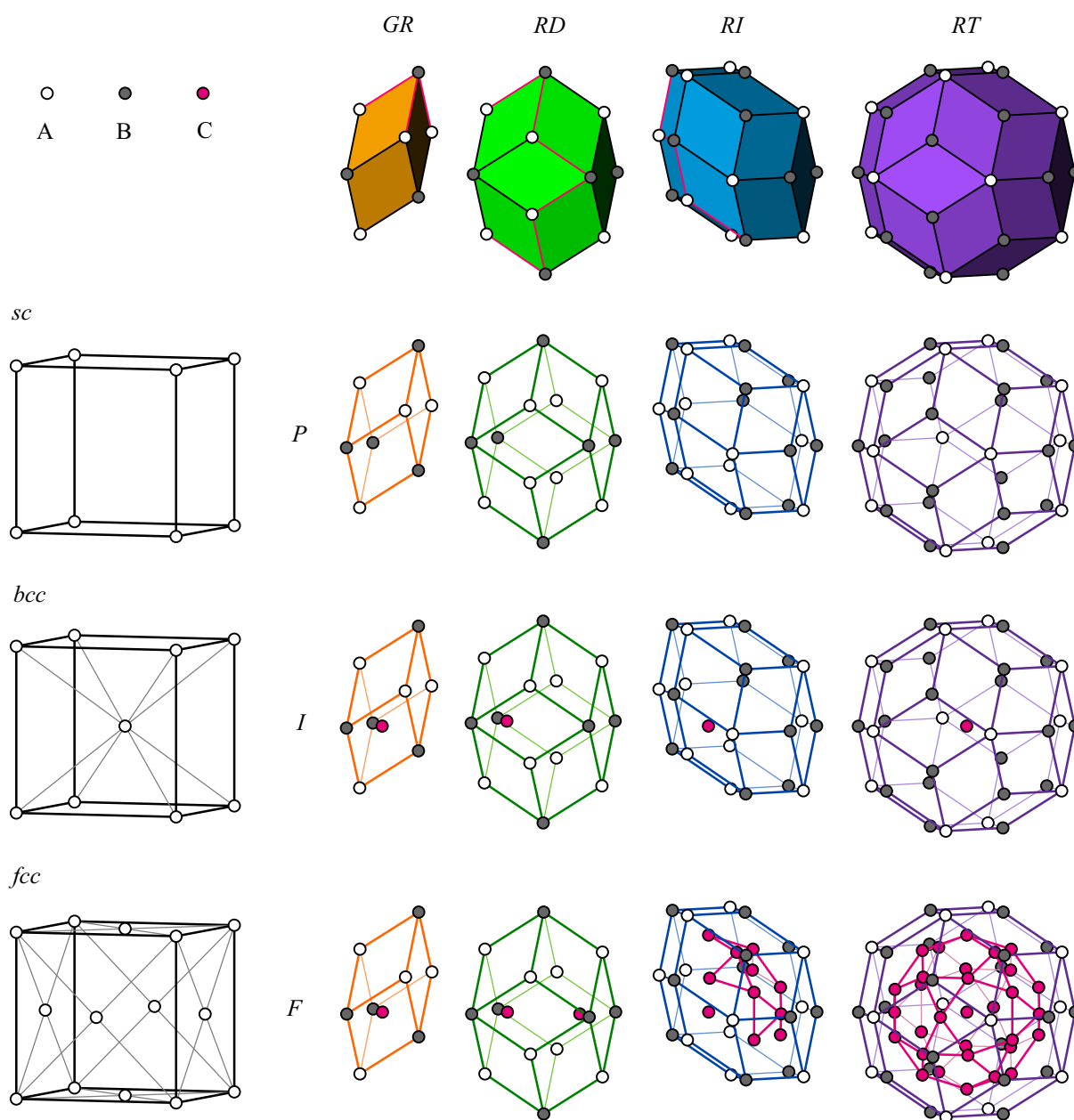
В трехмерном пространстве примитивная кубическая решетка ( $sc$ ) порождается вектором  $[100]$  и эквивалентными ему векторами. Аналогично, примитивная кубическая  $6D$ -решетка (целочисленная решетка  $Z^6$ ) порождается единичным базисным вектором  $[100000]$  и эквивалентными ему векторами, получаемыми циклической перестановкой координат. Их проецирование дает шесть векторов, направленных вдоль осей пятого порядка (к вершинам икосаэдра). Если центр окна проецирования совместить с центром  $6D$ -гиперкуба, то результатом проецирования будет триаконтаэдр с двумя типами вершин ( $A$  и  $B$ ). Все его ребра — это проекции вектора  $[100000]$  и ему эквивалентных. Если центр окна проецирования совместить с одной из вершин  $6D$ -гиперкуба, то результатом проецирования будет звезда ромбоэдров (гексеконтаэдр); 12 ребер, выходящих из центра звезды — это проекции векторов  $[\pm 100000]$  и им эквивалентных.

Ромбоэдр — это искаженная проекция  $3D$ -куба, ромбический додекаэдр — проекция  $4D$ -гиперкуба (тессеракта), ромбический икосаэдр — проекция  $5D$ -гиперкуба, и, наконец, триаконтаэдр — это проекции  $6D$ -гиперкуба. Куб имеет  $2^3 = 8$  вершин, и все они отображаются на соответствующие вершины ромбоэдра. Тессеракт имеет  $2^4 = 16$  вершин, но только 14 из них отображаются на соответствующие вершины додекаэдра Билинского. Проекции двух оставшихся узлов оказываются внутри ромбического додекаэдра и к тому же совпадают. Если их учесть, то получится разбиение ромбического додекаэдра на вытянутые и сплюснутые ромбоэдры (как

в разбиении Амманна–Крамера–Нери), что неизбежно влечет за собой неоднозначность проецирования и возникновение фазонных дефектов. При проецировании  $5D$ -гиперкуба только 22 узла из 32 отображаются на вершины ромбического икосаэдра, а при проецировании  $6D$ -гиперкуба только 32 узла из 64 отображаются на вершины триаконтаэдра. Если не отбросить „лишние“ узлы, то икосаэдрическая симметрия будет неизбежно нарушена. Поэтому используется правило — в качестве базового полиэдра разбиения следует взять выпуклую внешнюю оболочку спроецированного политопа и всех его подструктур ( $convex\ hull$ ). В итоге получается разбиение на зоноэдры.

В квазирешетке  $P$ -типа существует только 2 типа узлов ( $A$  и  $B$ ). Все ребра имеют одинаковую длину, но несмотря на это существует 2 типа ребер. В итоговой упаковке ребра разных типов не должны соприкасаться. Особые ребра второго типа [36] выделены на рис. 1 цветом. Ребра всегда параллельны осям пятого порядка и соединяют узлы альтернативных типов. Узлов  $C$ , вообще говоря, в этой квазирешетке нет. Строго говоря, позиции типа  $C$  являются не узлами квазирешетки, а особыми точками. Мы их добавили в разбиение Соколара–Стейнхардта, что значительно упростило процедуру его построения и позволило правильно учесть все три типа характерных икосаэдрических кластеров [36,37]. Точки  $C$ , оказавшиеся внутри разных зоноэдров, в квазикристаллах  $P$ -типа не эквивалентны друг другу. В узлах  $A$  и  $B$  возникает два типа характерных кластеров. Точки  $C$  внутри триаконтаэдров обладают икосаэдрической симметрией и являются центрами характерных кластеров третьего типа. Точки  $C$  внутри остальных зоноэдров ничем не отличаются от соседних точек на соответствующих осях симметрии. В дальнейшем мы по-прежнему будем называть точки  $C$  узлами, если речь будет идти об общих свойствах разных типов квазирешеток, и будем говорить о них как о точках частного положения только применительно к примитивной квазирешетке и только при необходимости подчеркнуть различия при строгой трактовке этих понятий с точки зрения кристаллографии.

В трехмерном пространстве объемно-центрированная кубическая решетка ( $bcc$ ) получается как объединение примитивной кубической решетки с ее сдвигом на вектор  $\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]$ . Аналогично в шестимерном пространстве центрирование  $I$ -типа получается путем объединения примитивной кубической  $6D$ -решетки с ее сдвигом на вектор  $\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]$ . Добавляется одна единственная подрешетка. После проецирования в  $3D$ -пространстве добавляются центры триаконтаэдров и по одному эквивалентному узлу  $C$  внутрь каждого из остальных зоноэдров. Очевидно,  $6D$ -гиперкуб отображается на триаконтаэдр, а центр гиперкуба — в центр триаконтаэдра. Если тот или иной  $6D$ -гиперкуб оказывается не точно посередине окна проецирования и частично выходит за его рамки, то проецировать следует не весь политоп, а



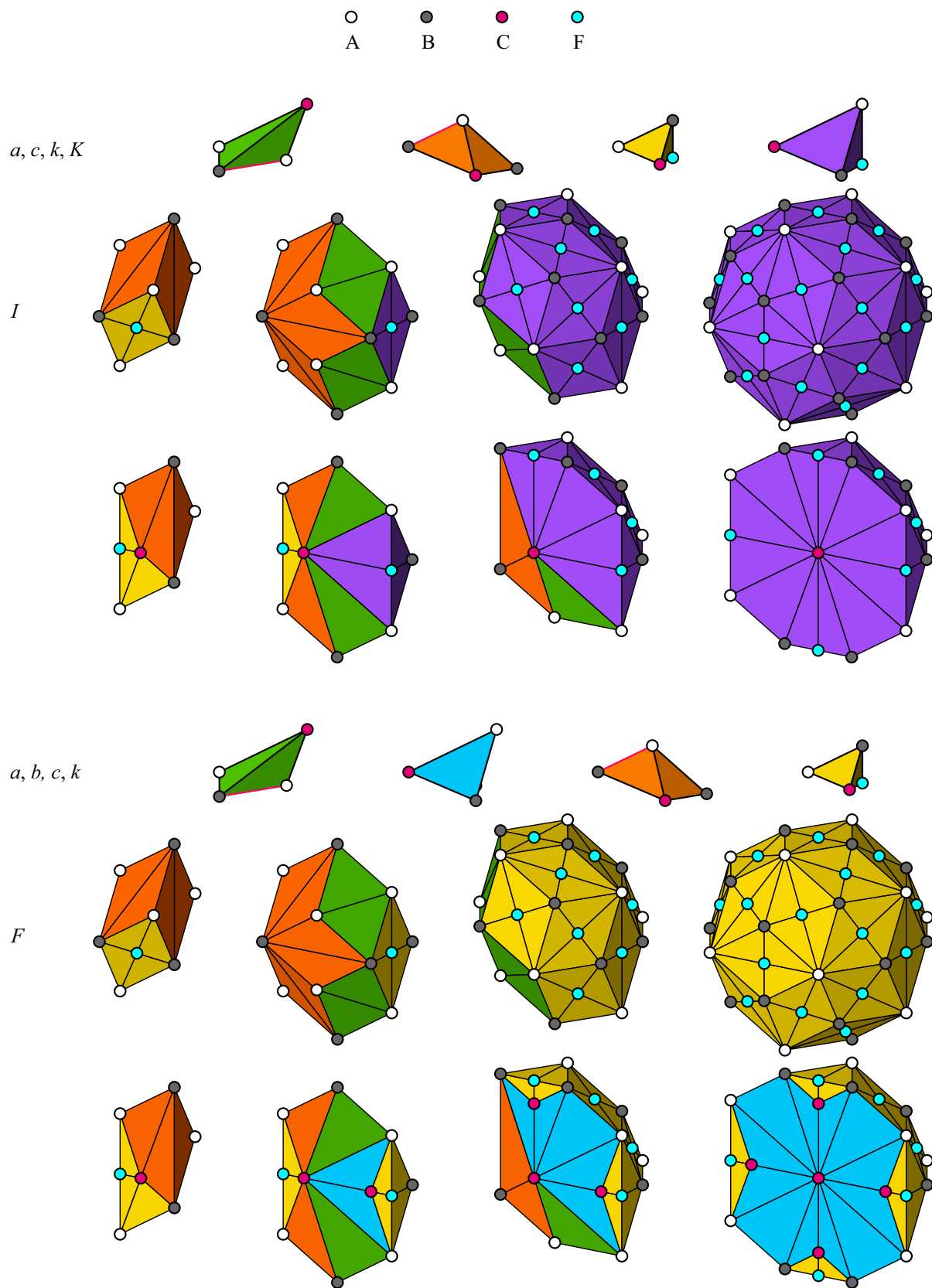
**Рис. 1.** Три типа икосаэдрических квазирешеток ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ) как упаковки зонотронов. Вверху — зонотроны  $GR$ ,  $RD$ ,  $RI$ ,  $RT$ ; три типа неэквивалентных узлов ( $A$ ,  $B$ ,  $C$ ) выделены цветом (белые, черные и красные соответственно); особые ребра зонотронов также выделены цветом (пояснения в тексте); слева — элементарные ячейки примитивной ( $sc$ ), объемно-центрированной ( $bcc$ ) и гранецентрированной ( $fcc$ ) кубических решеток; справа — зонотроны квазирешеток  $P$  (вершины зонотронов образуют узлы  $A$  и  $B$ , внутри зонотронов дополнительных узлов нет),  $I$  (внутри каждого зонотрона появляется по одному дополнительному узлу  $C$ ) и  $F$  (внутри зонотронов появляются кластеры из узлов  $C$  в форме икосододекаэдра и его фрагментов).

лишь его подструктуру меньшей размерности. В результате получаются различным образом ориентированные в пространстве зонотроны меньших размеров с асимметрично расположенным узлом  $C$  внутри.

Если добавить точки  $F$  в центры граней триконотронов и в эквивалентные им позиции (строго говоря, они не являются узлами), а затем соединить между собой соответствующим образом узлы  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и точки  $F$ , то получится тетраэдрическое  $ackK$ -разбиение [13].

Ромбические грани окажутся рассеченными на части в зависимости от их типа (рис. 2). Ромбы первого типа будут поделены на четыре части, а на пересечении диагоналей появятся точки  $F$ . Ромбы второго и третьего типов окажутся поделенными пополам длинной и короткой диагоналями соответственно.

Тетраэдрическое  $ackK$ -разбиение есть подразбиение зонотродального. Зонотроны складываются из тетраэдров в соответствии с уравнением композиции (см. рис. 2,



**Рис. 2.** Тетраэдрические упаковки *I* и *F*-типов: базовые наборы ячеек, схемы объединения тетраэдров в зоноэдры, схемы формирования зоноэдров из тетраэдров в разрезе; сверху — для *ackK*-разбиения (упаковка *I*-типа); внизу — для *abck*-разбиения (упаковка *F*-типа). Вершины тетраэдров разных типов выделены цветом: А — белые, В — черные, С — красные, F — бирюзовые.

вверху):

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

Квазирешетка  $F$ -типа получается из решетки корней  $D_6$  и строится на базе разбиения Данцера. Тетраэдры Данцера получаются в результате проецирования ее  $6D$ -политопа Вороного [41,42]. Систему корней решетки  $D_6$  образуют векторы  $[\pm 1 \pm 10000]$  и все эквивалентные им векторы, получаемые циклической перестановкой шести координат. Результатом проецирования корневого политопа является икосододекаэдр [43]. Чтобы все три типа квазирешеток были согласованы между собой, необходимо изменить масштаб решетки  $D_6$ , представив ее как объединение примитивной кубической  $6D$ -решетки со сдвигами на вектор  $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0000]$  и эквивалентные векторы.

Схема центрирования опять аналогична трехмерному случаю, для которого гранецентрированная кубическая решетка (fcc) получается путем объединения примитивной кубической решетки с ее сдвигами на вектор  $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0]$  и эквивалентными. Однако есть и отличие. Схема центрирования  $F$ -типа в пространствах четной размерности включает в себя центрирование  $I$ -типа в качестве подмножества. Следствием этого является то, что если структура квазикристалла (не обязательно икосаэдрического) выводится путем проецирования из пространства четной размерности, то квазирешетка  $F$ -типа содержит все до единого узлы квазирешетки  $I$ -типа, а та, в свою очередь, — все до единого узлы квазирешетки  $P$ -типа.

В результате проецирования решетки корней  $D_6$  при согласованном выборе масштаба внутрь триаконтаэдра (проекция  $6D$ -гиперкуба) добавляется 30 узлов  $C$  в форме икосододекаэдра (проекция корневого политопа решетки  $D_6$ ). Внутри ромбического икосаэдра появляется фрагмент икосододекаэдра из десяти дополнительных узлов. Внутри ромбического додекаэдра появляется один дополнительный узел, а вытянутый ромбоэдр остается без изменений (рис. 1).

Квазирешетка  $F$ -типа можно рассматривать либо как  $abck$ -разбиение Данцера, либо как упаковку зоноэдров, декорированных дополнительными узлами  $C$ . Как уже отмечалось, множество узлов квазирешетки  $F$ -типа включает в себя все узлы квазирешетки  $I$ -типа в качестве подмножества. Тетраэдрическое  $abck$ -разбиение Данцера является подразбиением  $ackK$ -разбиения согласно уравнению композиции:

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

Оно также является подразбиением зоноэдрального разбиения Соколар–Стейнхардта (рис. 2, внизу):

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

Обратим внимание на одно важное общее свойство элементарных ячеек всех трех базовых наборов: нормали ко всем граням всех тетраэдров Данцера и всех зоноэдров всегда направлены параллельно глобальным осям симметрии второго порядка.

Процедура вывода трех типов квазирешеток и соответствующих им разбиений является взаимно согласованной, однозначной и практически безальтернативной. Ни в одном из рассмотренных нами случаев не возникает фазонных дефектов (хотя при желании они могут быть введены в рассмотрение искусственным образом). По нашему мнению, любое иное разбиение будет иметь ограниченную применимость: оно либо представляет собой узко специфичный частный случай, либо сводится к одному из трех базовых разбиений. В частности, разбиение Моссеры–Садока сводится к случаю проецирования решетки корней  $D_6$  [44–46].

Итак, структура любого икосаэдрического квазикристалла может рассматриваться как упаковка зоноэдров. Правила построения таких упаковок [35–39] являются общими для всех типов; разница лишь в способе декорирования элементарных ячеек конкретными атомами. Для квазикристаллов  $P$ -типа способы заполнения зоноэдров атомами являются в значительной степени независимыми друг от друга. Согласованными друг с другом должны быть только позиции атомов на соприкасающихся гранях различных зоноэдров, так, чтобы не нарушались правила локального соответствия. Для квазикристаллов  $I$  и  $F$ -типов зоноэдры разбиваются на субъединицы меньшего размера — тетраэдры Данцера. В результате позиции атомов внутри разных зоноэдров оказываются полностью согласованными друг с другом так, чтобы декорирование одинаковых тетраэдров внутри разных зоноэдров было бы одинаковым.

### 3. Энантиоморфизм икосаэдрических квазикристаллов

Икосаэдрические квазикристаллы могут характеризоваться двумя группами симметрии  $I_h$  и  $I$ , т.е. с центром инверсии и без него. Уточнение структуры экспериментально полученных многокомпонентных квазикристаллических сплавов проводят, как правило, в предположении centrosymmetric группы. Обоснований такому предположению обычно не дается, теоретический базис для альтернативного случая проработан явно недостаточно.

Наглядным примером многогранника с симметрией  $I$  служит соединение пяти тетраэдров (polyhedral

compound). Впервые он был описан в монографии М. Брюкнера [47]. Его эстетическая привлекательность дала вдохновение Эшеру на создание малой скульптурной формы (М.К. Эшер, „Многогранник с цветами“, клен, 1958, резьба по дереву) [48]. Правая и левая энантиоморфные формы соединения пяти тетраэдров представлены нами на рис. 3, *a*. С какой бы стороны ни посмотреть на получившиеся многогранники, в одном случае мы всегда будем видеть узор только из правых винтов, а в другом случае — только из левых. Они переводятся друг в друга посредством зеркального отражения, которое, как известно, в нецентросимметричной группе  $I$  отсутствует.

Возникает вопрос: можно ли осуществить дизайн бесконечной квазикристаллической структуры на основе некоей заданной конфигурации атомов или заданных полиэдров (в том числе — асимметричных), заполнив ими элементарные ячейки? Наш подход позволяет решить эту проблему. Простейший пример приведен на рис. 3, *b*. Соединение пяти тетраэдров, будь то правая или левая форма, можно вписать внутрь триаконтаэдра, отождествив вершины тетраэдров с соответствующими вершинами додекаэдра. Триаконтаэдры, декорированные правыми либо левыми многогранниками, можно использовать в качестве элементарных ячеек для генерации упаковки. Таким способом можно получить простейшие правые и левые структуры  $P$ -типа.

В общем случае любой из трех типов квазикристаллов ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ) может иметь симметрию любой из двух икосаэдрических групп ( $I$ ,  $I_h$ ). Проще всего объяснить это на примере квазикристаллов  $I$ -типа и соответствующего ему тетраэдрического  $ackK$ -разбиения.

Начнем с группы  $I_h$ . Существуют три типа узлов с икосаэдрической симметрией ( $A$ ,  $B$ ,  $C$ ). Следовательно, для генерации упаковки надо сначала сформировать три стартовые конфигурации. Надо взять три базовых тетраэдра ( $c$ ,  $k$ ,  $K$ ) в какой-то ориентации, выбранной в качестве начальной (рис. 2), и подействовать на них всеми 120 элементами симметрии группы  $I_h$ . Получится по 120 копий каждого из тетраэдров (орбиты ячеек в группе симметрии  $I_h$ ), объединенные в многогранники с икосаэдрической симметрией. Это и есть искомые стартовые конфигурации (базовый тетраэдр  $a$  при их формировании не используется). Остается лишь применить к тетраэдрам итерационный алгоритм инфляций и дефляций и заполнить ячейки полученной упаковки конкретными атомами.

В центросимметричной группе все 120 копий каждого из тетраэдров являются эквивалентными. Для группы  $I$  ячейки в ориентациях, полученных из начальной при помощи собственных и несобственных вращений, следует считать различными. В группе  $I_h$  есть 60 поворотных элементов симметрии (подгруппа чистых вращений икосаэдра  $I$ ). Полученные с их помощью 60 ориентаций базовых тетраэдров  $c$ ,  $k$ ,  $K$  будем считать „правыми“, остальные — „левыми“. Исключение составляет базовый тетраэдр  $a$ , для которого надо либо сменить

начальную ориентацию (рис. 2), либо порядок определения правых и левых ориентаций заменить на противоположный. В итоге получится упаковка тетраэдров по типу „сторона к стороне“, причем правый тетраэдр всегда будет соседствовать с левым и наоборот вне зависимости от конкретного его типа ( $a$ ,  $c$ ,  $k$ ,  $K$ ). Теперь достаточно заселить правые и левые ячейки разными способами, и задача дизайна структуры нецентросимметричного икосаэдрического квазикристалла решена. Если поменять правила заселения правых и левых ячеек на зеркальные, то получится зеркальная (энантиоморфная) структура.

Для квазикристаллов  $F$ -типа процедура построения энантиоморфных форм полностью аналогична и не требует дополнительных объяснений. Отличие заключается лишь в том, что для них используется другой базовый набор ячеек. Для квазикристаллов  $P$ -типа следует воспользоваться правилами заполнения зоноэдров с учетом их собственной симметрии [38]. Другой вариант — ввести „фиктивные“ позиции  $C$  и так называемые контекстно обусловленные правила для тетраэдров, образующих разные зоноэдры.

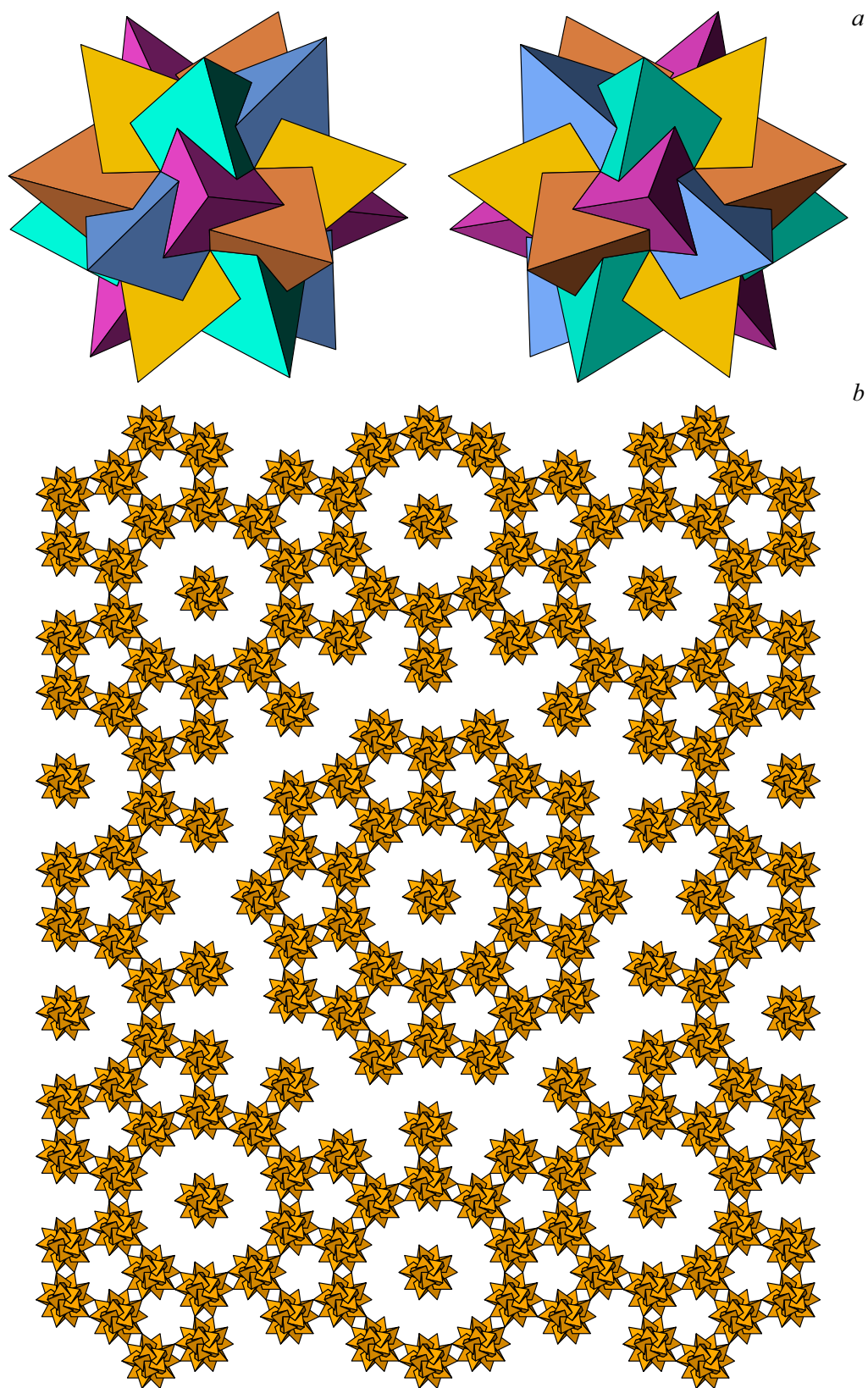
#### 4. Характерные икосаэдрические кластеры: три типа узлов, три типа кластеров

Как нами уже отмечалось, в любой икосаэдрической структуре всегда существует в точности три типа узлов с локальной икосаэдрической симметрией. В зависимости от выбранного варианта стартовой конфигурации применение итерационного алгоритма инфляций и дефляций порождает три локально изоморфных варианта упаковок ячеек. Декорирование ячеек атомами порождает три типа характерных кластеров. Поскольку для любого из трех типов икосаэдрических квазикристаллов ячейки либо изначально являются зоноэдрами ( $P$ ), либо могут быть сгруппированы в зоноэдры ( $I$ ,  $F$ ), особенности строения трех типов кластеров можно анализировать на основе упаковок зоноэдров. Соответствующие проекции вдоль осей симметрии второго, третьего и пятого порядков представлены на рис. 4. Большие фрагменты упаковок в проекции вдоль оси пятого порядка обсуждались нами ранее [39].

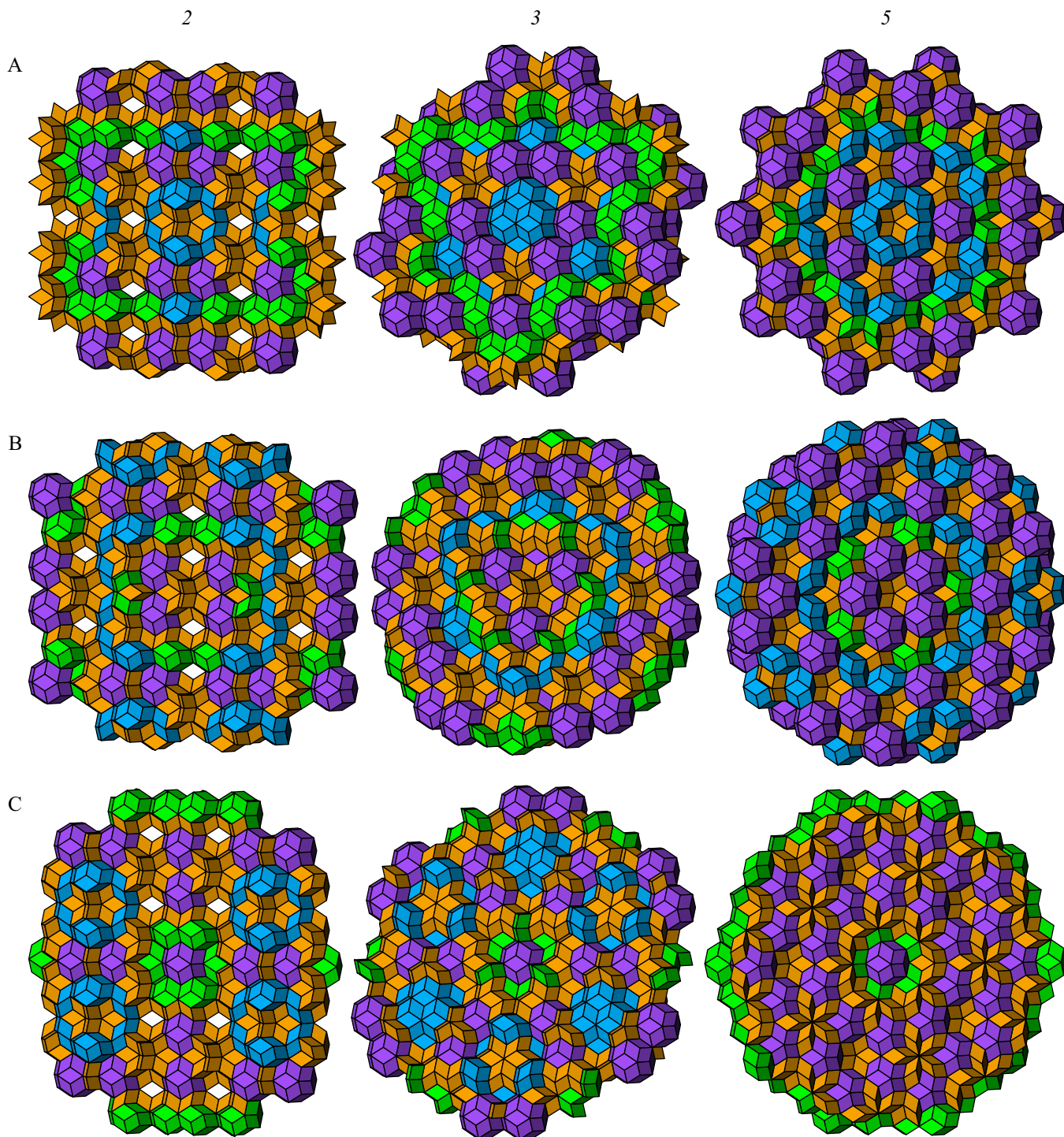
Если направить оси координат вдоль осей симметрии второго порядка и ориентировать упаковку так, чтобы плоскость рисунка совпала с плоскостью  $xu$ , то одна из осей второго порядка окажется перпендикулярной плоскости рисунка и совпадет с осью  $z$ . Ближайшая к ней ось третьего порядка окажется в плоскости  $uz$ , а ближайшая ось пятого порядка — в плоскости  $xz$ . Слои, представленные на рис. 4, вырезаны перпендикулярно этим конкретным осям, при этом для наглядности они немного развернуты в пространстве.

Поясним важное общее свойство характерных кластеров — их структуры не являются независимыми. Суть в том, что коэффициент инфляции и коэффициент





**Рис. 3.** Энантиоморфизм в икосаэдрических структурах: *a* — соединение пяти тетраэдров, правая и левая формы; *b* — пример нецентросимметричной структуры гипотетического икосаэдрического квазикристалла *P*-типа (левые формы соединения пяти тетраэдров отождествлены с триаконтаэдрами, слой вырезан перпендикулярно оси пятого порядка, в слое показаны только соединения тетраэдров).



**Рис. 4.** Три типа характерных икосаэдрических кластеров: в любой икосаэдрической упаковке три типа узлов (А, В, С) порождают три типа характерных икосаэдрических кластеров; слои зонэдров вырезаны перпендикулярно осям второго, третьего и пятого порядков.

самоподобия — это разные понятия. Разницу проще всего объяснить на примере разбиения Пенроуза. В нем два типа неэквивалентных узлов и, как следствие, два типа характерных конфигураций („звезда“ и „солнце“). Правило подстановок для него хорошо известно, множитель инфляции равен  $\tau$ . После первой итерации „звезда“ и „солнце“ преобразуются друг в друга, и только после

второй итерации оба характерных разбиения совмещаются сами с собой. Таким образом, коэффициент самоподобия равен  $\tau^2$ . Аналогичным свойством обладает разбиение Данцера. Множитель инфляции для него равен  $\tau$ , а коэффициент самоподобия равен  $\tau^3$  [11]. Согласно выводам работы [42], коэффициент самоподобия для икосаэдрических разбиений всех трех типов равен  $\tau^3$ .

Множитель инфляции должен быть равен  $\tau^3$  для  $P$ -типа и  $\tau$  для  $I$  и  $F$ -типов. Подчеркнем, что в рамках нашего подхода эти требования полностью выполняются.

Если атомы локализованы в позициях  $A$ ,  $B$  и на гранях зоноэдров, то эти позиции всегда должны заполняться по единым правилам вне зависимости от того, в кластерах какого типа они появляются. Для икосаэдрических квазикристаллов  $P$ -типа конфигурации таких атомов образуют в характерных кластерах определенные взаимосогласованные „каркасы“. В остальном же конкретная структура характерных кластеров остается в достаточной степени вариативной.

Гораздо более строгие ограничения накладываются на возможную структуру кластеров в квазикристаллах  $I$  и  $F$ -типов. После каждой инфляции и дефляции типы узлов циклически меняются местами  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ . Предположим, нас интересует идеализированная структура многокомпонентного сплава, в котором узлы трех типов заселены тремя типами атомов. Пусть имеется кластер, в центре которого расположен узел  $A$ , а на некотором расстоянии  $r$  от него находятся 12 узлов  $B$  в форме икосаэдра. После первой итерации произойдут замены:  $r \rightarrow \tau r$ ,  $A \rightarrow C$ ,  $B \rightarrow A$ . После второй итерации произойдут замены:  $\tau r \rightarrow \tau^2 r$ ,  $C \rightarrow B$ ,  $A \rightarrow C$ . Это означает, что если в кластере  $A$  есть икосаэдр из атомов  $B$  на расстоянии  $r$ , то в кластере  $C$  должен быть икосаэдр из атомов  $A$  на расстоянии  $\tau r$ , а в кластере  $B$  должен быть икосаэдр из атомов  $C$  на расстоянии  $\tau^2 r$ . После третьей итерации глобальная упаковка совмещается сама с собой. Образуются суперкластеры (кластеры из кластеров); характерные конфигурации воспроизводятся в увеличенном масштабе на расстоянии  $\tau^3 r$ . Это свойство было экспериментально установлено для взаимного расположения кластеров Тсая [26].

Итак, в структуре любого икосаэдрического квазикристалла всегда существует в точности три типа характерных кластеров, ассоциированных с тремя типами неэквивалентных узлов. Кластеры, появляющиеся в узлах разных типов, не могут быть одинаковыми (см. иллюстрации в работе [39]). Если структура того или иного квазикристалла интерпретируется на базе только одного или двух характерных икосаэдрических кластеров, то такую структуру следует признать недостаточно изученной. Если экспериментальный метод или теоретический подход не позволяет выявить все три типа кластеров, то такой результат, по нашему мнению, является негативным и требует критического переосмысления.

## Заключение

Нами предлагается единая теория строения икосаэдрических квазикристаллов, в рамках которой возможно описание всех трех типов квазирешеток ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ), обеих икосаэдрических групп симметрии ( $I$ ,  $I_h$ ), а также правых и левых энантиоморфных форм для нецентросимметричного случая. Теория базируется на совместном

использовании трех типов разбиений, для каждого из которых используется свой базовый набор элементарных ячеек и свои правила подстановок. По аналогии с обычными кристаллами задача описания структуры квазикристалла распадается на два этапа: заполнение пространства ячейками и заполнение ячеек атомами с той лишь разницей, что вместо одной элементарной ячейки используются ячейки нескольких типов, а для заполнения пространства вместо трансляций используется итерационный алгоритм инфляций и дефляций.

Дизайн возможной перспективной структуры создаваемого фотонного или фононного квазикристалла (так же как и структурный анализ экспериментально синтезированного квазикристалла) подразумевает следующую последовательность действий:

- Определение типа квазирешетки; он предопределяет конкретный тип используемого разбиения, базовый набор элементарных ячеек и правила подстановок для них. При уточнении структуры экспериментально синтезированных сплавов наиболее вероятный тип квазирешетки определяется на основе анализа правил структурного погасания рефлексов.

- Анализ собственной симметрии ячеек; подгруппа-стабилизатор определяет внутреннюю симметрию ячейки и правила заполнения ячеек атомами, а орбита — ее возможные ориентации в пространстве. Заметим, что для тетраэдрических разбиений и группы симметрии  $I_h$  подгруппа-стабилизатор является тривиальной и содержит единственный тождественный элемент, а 120 возможных пространственных ориентаций элементарных ячеек образуют их орбиты.

- Выбор стандартных ориентаций и стартовых конфигураций ячеек.

- Определение группы симметрии квазикристалла (с центром инверсии или без него).

- Генерация упаковки (заполнение пространства) на основе правил подстановок; упаковка задается списком ячеек, для каждой из которых задается ее тип, положение и ориентация.

- Установление правил декорирования ячеек атомами; они должны удовлетворять симметрии подгруппы-стабилизатора и правилам локального соответствия между различными типами ячеек.

- Заполнение ячеек атомами и генерация структуры; определение характерных кластеров и характерных мотивов их взаимного расположения.

- Анализ и уточнение полученной структуры.

## Благодарности

Авторы выражают искреннюю благодарность С.В. Козыреву и В.А. Мошникову за полезные обсуждения.

## Финансирование работы

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

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn. *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 70 (1984). DOI: 10.1103/PhysRevLett.53.1951
- [2] R. Daw. *Nature*, **511** (Suppl 7509), 18 (2014). DOI: 10.1038/nature13366
- [3] A.L. Mackay. *Physica A*, **114**, 609 (1982). DOI: 10.1016/0378-4371(82)90359-4
- [4] D. Levine, P.J. Steinhardt. *Phys. Rev. B*, **34**, 596 (1986). DOI: 10.1103/PhysRevB.34.596
- [5] J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt. *Phys. Rev. B*, **34**, 617 (1986). DOI: 10.1103/PhysRevB.34.617
- [6] W. Steurer. *Acta Cryst. A*, **74**, 1 (2018). DOI: 10.1107/S2053273317016540
- [7] Л.С. Левитов, Ж. Ринер. *Письма в ЖЭТФ*, **47** (12), 658 (1988). [http://jetpletters.ru/ps/182/article\\_3109.pdf](http://jetpletters.ru/ps/182/article_3109.pdf) [L.S. Levitov, J. Rhyner, *JETP Lett.*, **47** (12), 760 (1988). [http://jetpletters.ru/ps/1099/article\\_16620.pdf](http://jetpletters.ru/ps/1099/article_16620.pdf)]
- [8] L.S. Levitov, J. Rhyner. *J. Phys. France*, **49**, 1835 (1988). DOI: 10.1051/jphys:0198800490110183500
- [9] V.Ya. Shevchenko, A.E. Madison, A.L. Mackay. *Acta Cryst. A*, **63**, 172 (2007). DOI: 10.1107/S0108767307002723
- [10] L. Danzer, *Discrete Math.*, **76** (1), 1 (1989). DOI: 10.1016/0012-365X(89)90282-3
- [11] L. Danzer, Z. Papadopolos, A. Talis. *Int. J. Mod. Phys. B*, **7** (6-7), 1379 (1993). DOI: 10.1142/S0217979293002389
- [12] M. Senechal, *Quasicrystals and geometry* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995)
- [13] А.Е. Мадисон. *Письма в ЖТФ*, **50** (19), 17 (2024). DOI: 10.61011/PJTF.2024.19.58650.19962
- [14] P. Kramer, R. Neri. *Acta Cryst. A*, **40**, 580 (1984). DOI: 10.1107/S0108767384001203
- [15] S. van Smaalen, J.L. de Boer, Y. Shen. *Phys. Rev. B*, **43**, 929 (1991). DOI: 10.1107/S2053273319017339
- [16] I. Buganski, J. Wolny, H. Takakura. *Acta Cryst. A*, **76**, 180 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.43.929
- [17] M. de Boissieu. *Chem. Soc. Rev.*, **41**, 6778 (2012). DOI: 10.1039/C2CS35212E
- [18] E. Abe, Y. Yan, S. Pennycook. *Nature Mater.*, **3**, 759 (2004). DOI: 10.1038/nmat1244
- [19] M. Duneau, D. Gratias. In: *Coverings of Discrete Quasiperiodic Sets*, ed. P. Kramer, Z. Papadopolos (Springer Tracts in Modern Physics, Springer, Berlin, Heidelberg, 2002), v. 180, p. 23, DOI: 10.1007/3-540-45805-0\_2
- [20] A.P. Tsai. *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **9**, 013008 (2008). DOI: 10.1088/1468-6996/9/1/013008
- [21] P. Guyot, M. Audier. *C. R. Phys.*, **15**, 12 (2014). DOI: 10.1016/j.crhy.2013.10.005
- [22] S. Lidin. In: *Handbook of Solid State Chemistry*, ed. by R. Dronskowski, S. Kikkawa, A. Stein (Wiley-VCH, Weinheim, 2017), p. 73, DOI: 10.1002/9783527691036.hssevol1002
- [23] W. Steurer, T. Haibach. In: *International Tables for Crystallography Volume B: Reciprocal Space*, ed. by U. Shmueli (Springer, Dordrecht, 2006), v. B, Ch. 4.6, p. 486. DOI: 10.1107/97809553602060000568
- [24] W. Steurer, S. Deloudi. *Crystallography of quasicrystals. Concepts, methods and structures* (Springer, Berlin–Heidelberg, 2009), DOI: 10.1007/978-3-642-01899-2
- [25] A. Yamamoto, H. Takakura, A.P. Tsai. *Phys. Rev. B*, **68**, 094201 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevB.68.094201
- [26] H. Takakura, C. Pay Gómez, A. Yamamoto, M. de Boissieu, A.P. Tsai. *Nature Mater.*, **6**, 58 (2007). DOI: 10.1038/nmat1799
- [27] T. Yamada, H. Takakura, H. Euchner, C. Pay Gómez, A. Bosak, P. Fertey, M. de Boissieu. *IUCrJ*, **3**, 247 (2016). DOI: 10.1107/S2052252516007041
- [28] M. Mihalkovič, M. Widom. *Phil. Mag.*, **86** (3-5), 519 (2006). DOI: 10.1080/14786430500333356
- [29] M. Baake, U. Grimm. *Acta Cryst. A*, **76**, 559 (2020). DOI: 10.1107/S2053273320007421
- [30] M. Senechal. *Труды МИАН*, **288**, 281 (2015). DOI: 10.1134/S0371968515010203 [M. Senechal. *Proc. Steklov Inst. Math.*, **288**, 259 (2015). DOI: 10.1134/S0081543815010204]
- [31] A.R. McGurn. *Introduction to Photonic and Phononic Crystals and Metamaterials* (Springer, Cham, 2020), DOI: 10.1007/978-3-031-02384-2
- [32] A. Poddubny, E. Ivchenko. *Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostructures*, **42**, 1871 (2010). DOI: 10.1016/j.physe.2010.02.020
- [33] Y. Nagaoka, J. Schneider, H. Zhu, O. Chen. *Matter*, **6**, 30 (2023). DOI: 10.1016/j.matt.2022.09.027
- [34] W. Steurer. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **50**, 10775 (2011). DOI: 10.1002/anie.201107163
- [35] R.L. Harlow. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, **103**, 327 (1996). DOI: 10.6028/jres.101.034
- [36] А.Е. Мадисон. *RSC Adv.*, **5**, 5745 (2015). DOI: 10.1039/C4RA09524C
- [37] А.Е. Мадисон. *RSC Adv.*, **5**, 79279 (2015). DOI: 10.1039/C5RA13874D
- [38] А.Е. Мадисон, П.А. Мадисон. *Struct. Chem.*, **31**, 485 (2020). DOI: 10.1007/s11224-019-01430-w
- [39] 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** (4), 528 (2024).]
- [40] A. Al-Siyabi, N. Ozdes Koca, M. Koca. *Symmetry*, **12**, 1983 (2020). DOI: 10.3390/sym12121983
- [41] P. Kramer, Z. Papadopolos, M. Schlottmann, D. Zeidler. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **27**, 4505 (1994). DOI: 10.1088/0305-4470/27/13/024
- [42] 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. DOI: 10.1007/978-1-4615-3696-3\_19
- [43] J.C. Baez. *Not. Am. Math. Soc.*, **70**, 821 (2023). DOI: 10.1090/noti2685
- [44] R. Mosseri, J.F. Sadoc. In: *The Structure of Non-Crystalline Materials, 1982: Proc. 2nd Int. Conf.*, Cambridge, 12-15 July 1982, ed. by P.H. Gaskell, J.M. Parker, E.A. Davis (London, NY, Taylor & Francis, 1982), p. 137, ISBN: 978-0800230777
- [45] N. Ozdes Koca, R. Koc, M. Koca, A. Al-Siyabi. *Acta Crystallogr. A*, **77** (2), 105 (2021). DOI: 10.1107/S2053273320015399
- [46] P. Kramer, Z. Papadopolos. *Can. J. Phys.*, **72**, 408 (1994). DOI: 10.1139/p94-057
- [47] M. Brückner. *Vielecke und Vielfläche — Theorie und Geschichte* (Leipzig, Teubner, 1900) M. Brückner. *Vielecke und Vielfläche — Theorie und Geschichte*. Classic Reprint Series (London, Forgotten Books, 2018)
- [48] D. Schattschneider. In: *Proceedings of Bridges 2019: Mathematics, Art, Music, Architecture, Education, Culture*, ed. by S. Goldstine, D. McKenna, K. Fenyvesi (Phoenix, Tessellations Publishing, 2019), p. 347.