

# Квазикристаллы и Нобелевская премия за 2011 год в области ХИМИИ

Владимир Е. Дмитриенко

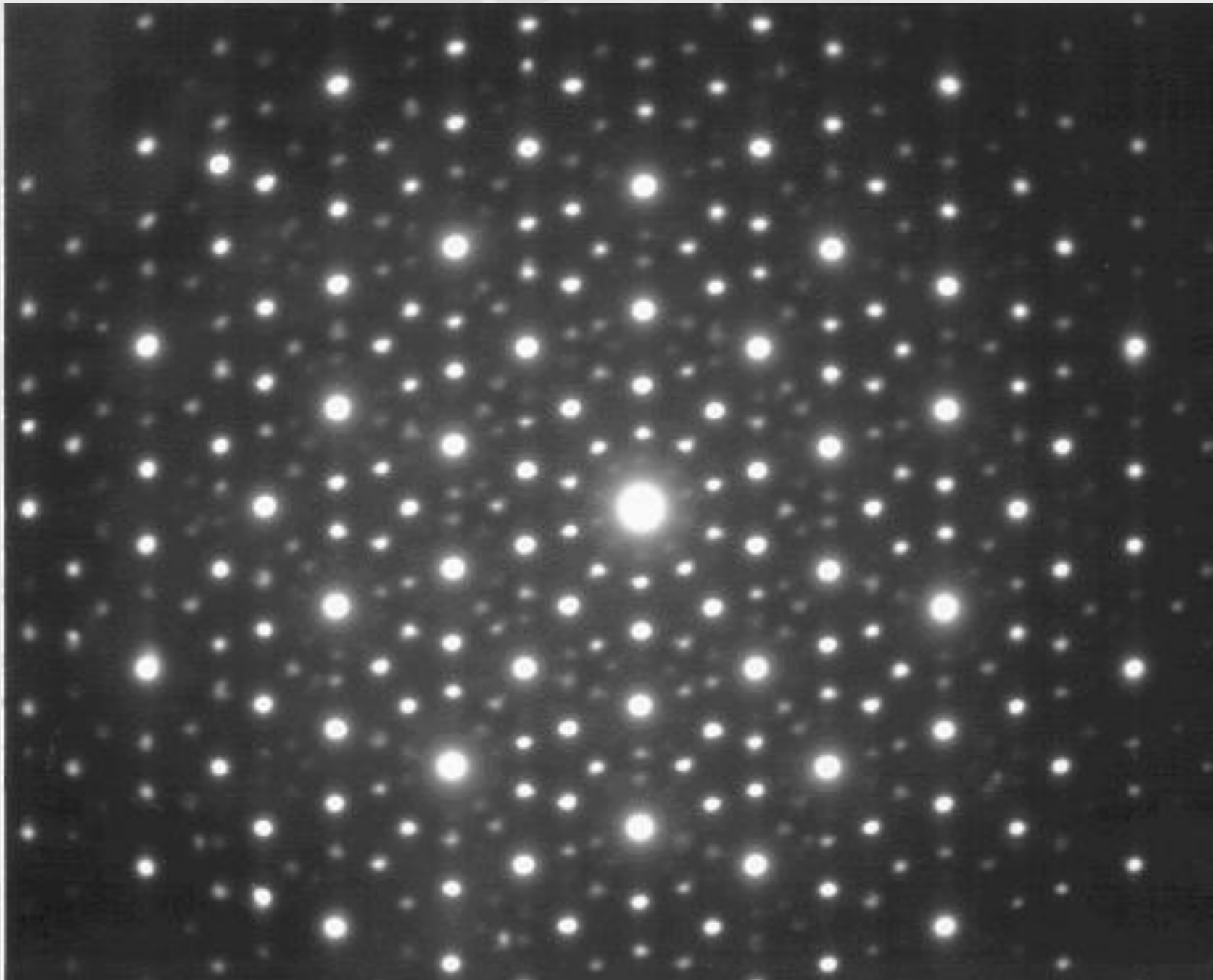
Вячеслав А. Чижиков

*Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова*

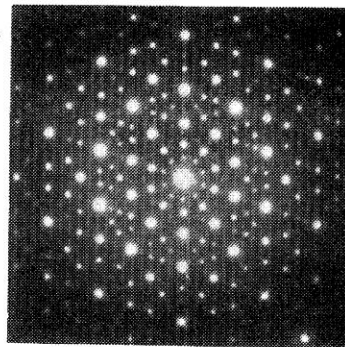
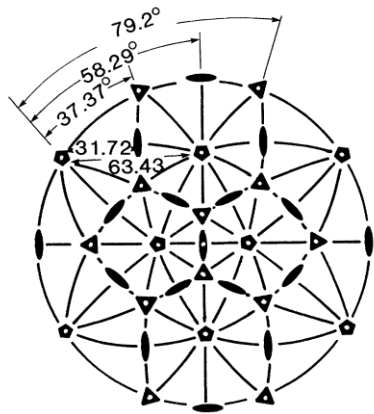
1. Введение
2. Аперидичность и некристаллографическая симметрия
3. Структурные особенности (самоподобие, кластеры, ...)
4. Аппроксиманты (кубические и др.)
5. Рост квазикристаллов
6. Применения?

Дифракционная картина с осью 10(5) (Shechtman et al., Phys.Rev.Lett. 1984)

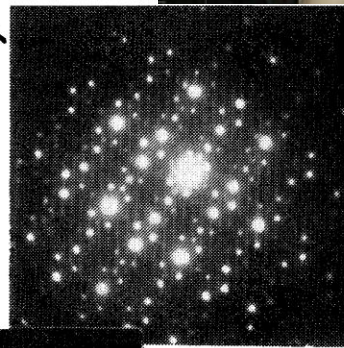
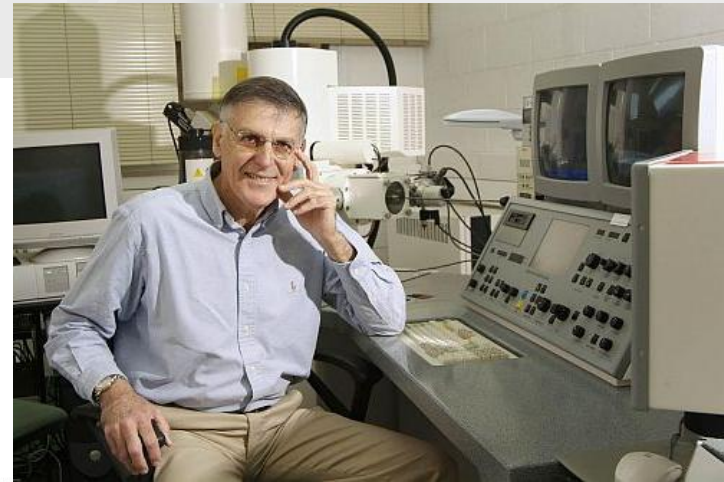
$\text{Al}_6\text{Mn}$



# Дифракционные картины с симметрией 2,3,5 (Shechtman et al., Phys.Rev.Lett.1984)

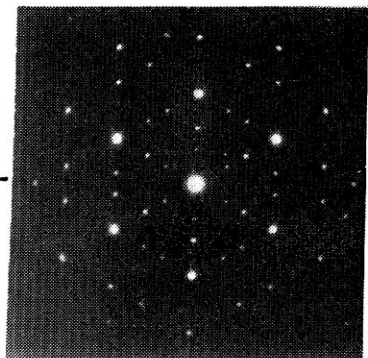


63.43°

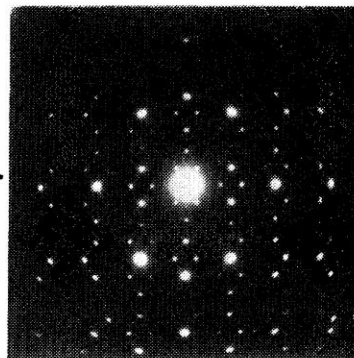


31.72°

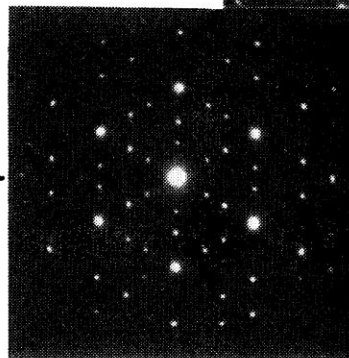
36°



79.2°



58.29°



37.38°

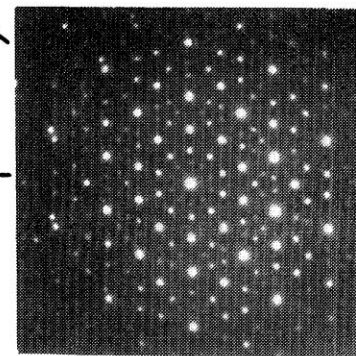


FIG. 1. Stereographic projection of the symmetry elements of the icosahedral group  $m\bar{3}5$ .

FIG. 2. Selected-area electron diffraction patterns taken from a single grain of the icosahedral phase. Rotations match those in Fig. 1.

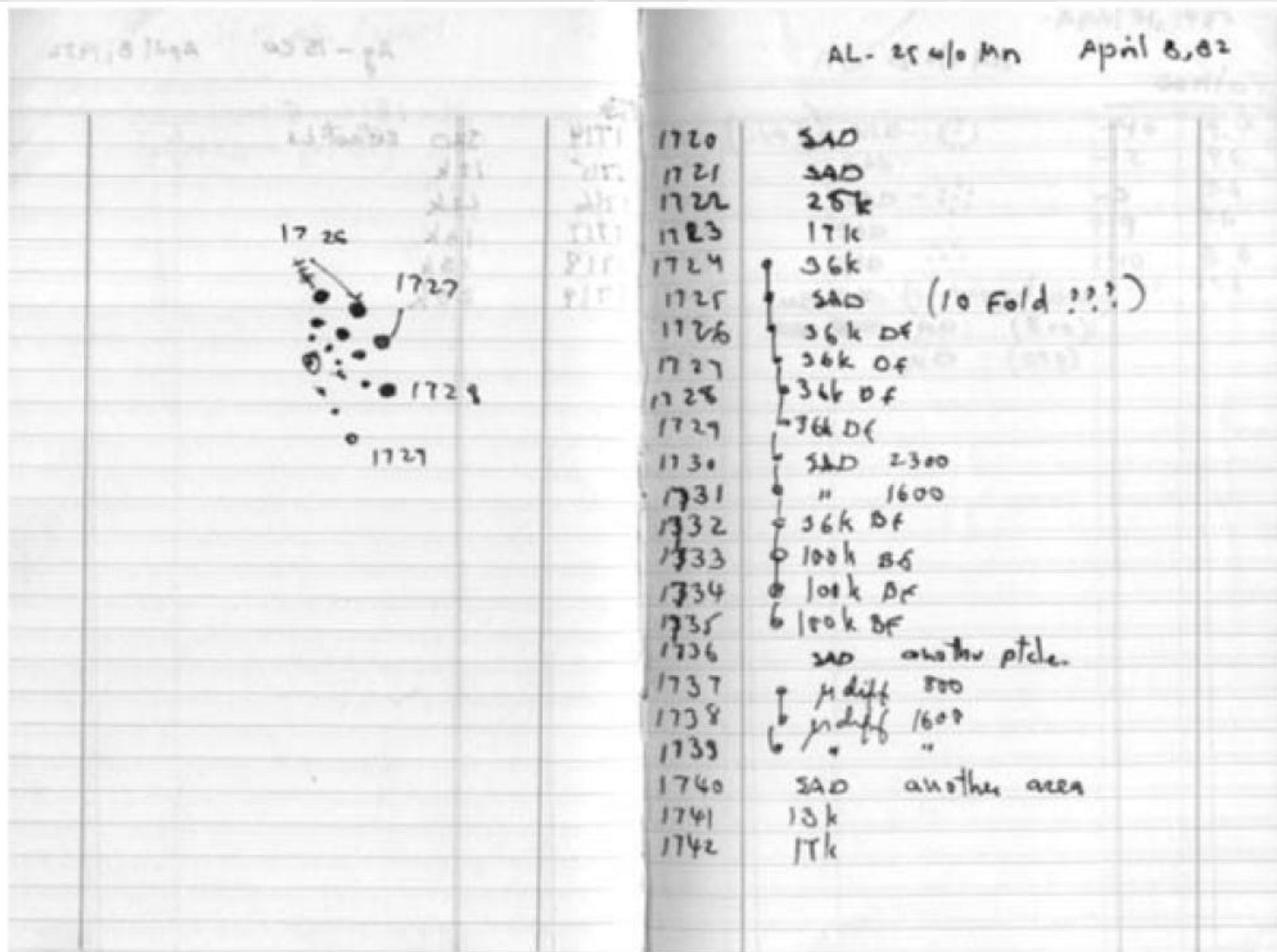


Fig. 1.12. Shechtman's notebook, in which the discovery of the icosahedral phase was written down: April 1982. (Courtesy Dan Shechtman)



# Казус Полинга

Pauling, L. (1985). Apparent icosahedral symmetry is due to directed multiple twinning of cubic crystals. *Nature*, **317**, 512.

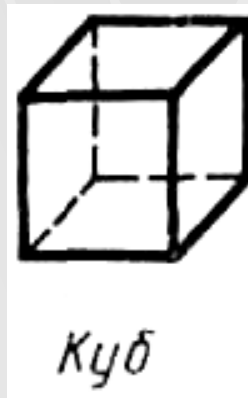
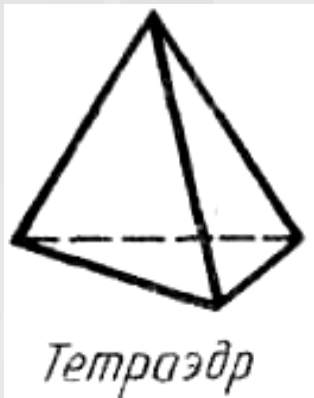
Pauling, L. (1987). So-called icosahedral and decagonal quasicrystals are twins of an 820-atom cubic crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 365.

**TABLE I.** The meridional ( $P$ - $P$ ) diffraction maxima of the  $\text{MnAl}_6$  icosatwin fivefold-axis ED photograph (Ref. 3). Values of intensity,  $I$ ; radius,  $R$ ; observed and calculated interplanar distances,  $d_{\text{obs}}$  and  $d_{\text{calc}}$ ; and indices. Scale  $Rd = 75.6 \text{ mm } \text{\AA}$ ,  $a_0 = 23.36 \text{ \AA}$ .

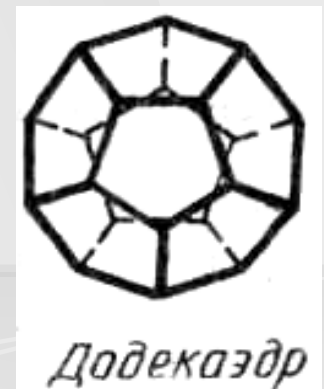
	$I$	$R$ (mm)	$d_{\text{obs}}$ ( $\text{\AA}$ )	$d_{\text{calc}}$ ( $\text{\AA}$ )	$hkl$
1	vvw	9.1	8.3	8.26	220
2	w	14.0	5.40	5.51	330
3	s	22.8	3.32	3.304	550
4	vs	36.6	2.066	2.065	880
5	vw	45.5	1.662	1.652	10100
6	vvw	50.5	1.497	1.502	11110
7	s	59.2	1.277	1.271	13130
8	w	73.2	1.033	1.032	16160
9	vw	81.8	0.924	0.918	18180
10	w	95.6	0.791	0.787	21210

# Кристаллографические и некристаллографические точечные симметрии

## ● Кристаллографические

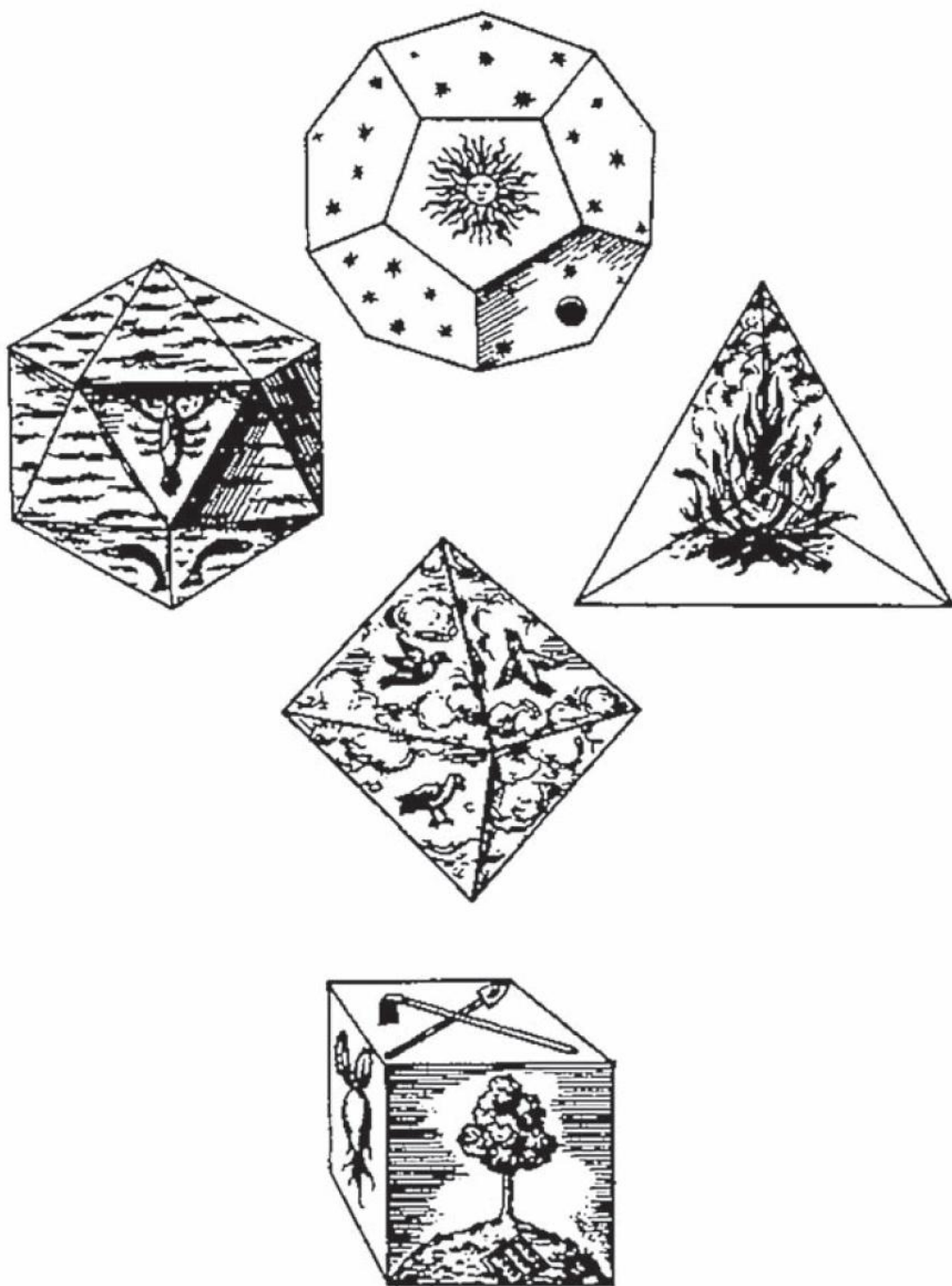


## ● Некристаллографические



# Немного истории...

- Правильные многогранники были известны еще в Древней Греции и даже в каменном веке.
- Придумать правильные многогранники, по-видимому, было нетрудно: часть из них — это формы природных кристаллов. Например, монокристалл поваренной соли ( $\text{NaCl}$ ) — это куб.
- Существует предположение, что додекаэдр древние греки увидели, рассматривая кристаллы пирита ( $\text{FeS}_2$ ), **аппроксимант!** Имея додекаэдр, несложно получить икосаэдр: его вершинами являются центры граней додекаэдра.
- У древнегреческого мыслителя Платона четыре многогранника олицетворяли четыре стихии:
  - **тетраэдр — огонь,**
  - **куб — землю,**
  - **октаэдр — воздух,**
  - **икосаэдр — воду,**
- А **додекаэдр** олицетворял **ВСЁ МИРОЗДАНИЕ (или пятый элемент, квинтэссенция).**



# Греческая физика мира

Рис. 1.1. Пять платоновых тел и четыре элемента: из «Гармонии мира» Кеплера (Kepler, 1619)



# Привет от кристаллографов неолита

28

ГЛАВА 1. Введение

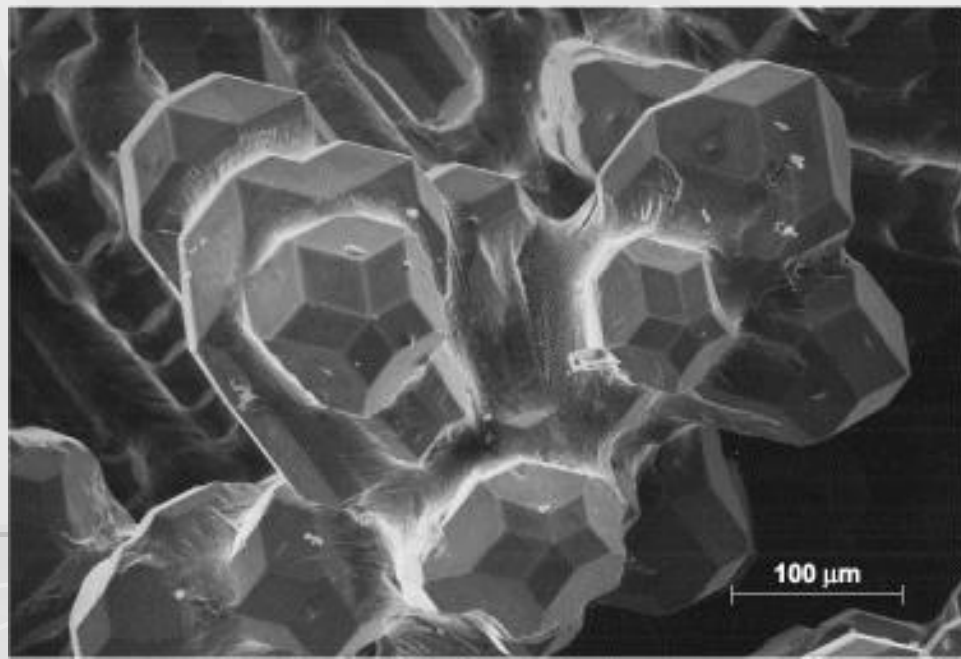
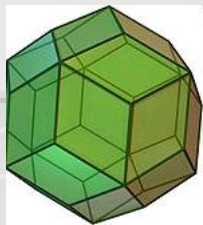


**Рис. 1.2.** Камни из Шотландии эпохи неолита, покрытые резьбой, соответствующей правильным многогранникам, музей Ашмолеан, Оксфорд. Их назначение неизвестно. Фото Грэхема Чаллифура для книги Критчлоу (Critchlow, 1979). Воспроизведено с любезного разрешения Грэхема Чаллифура и Кейт Критчлоу

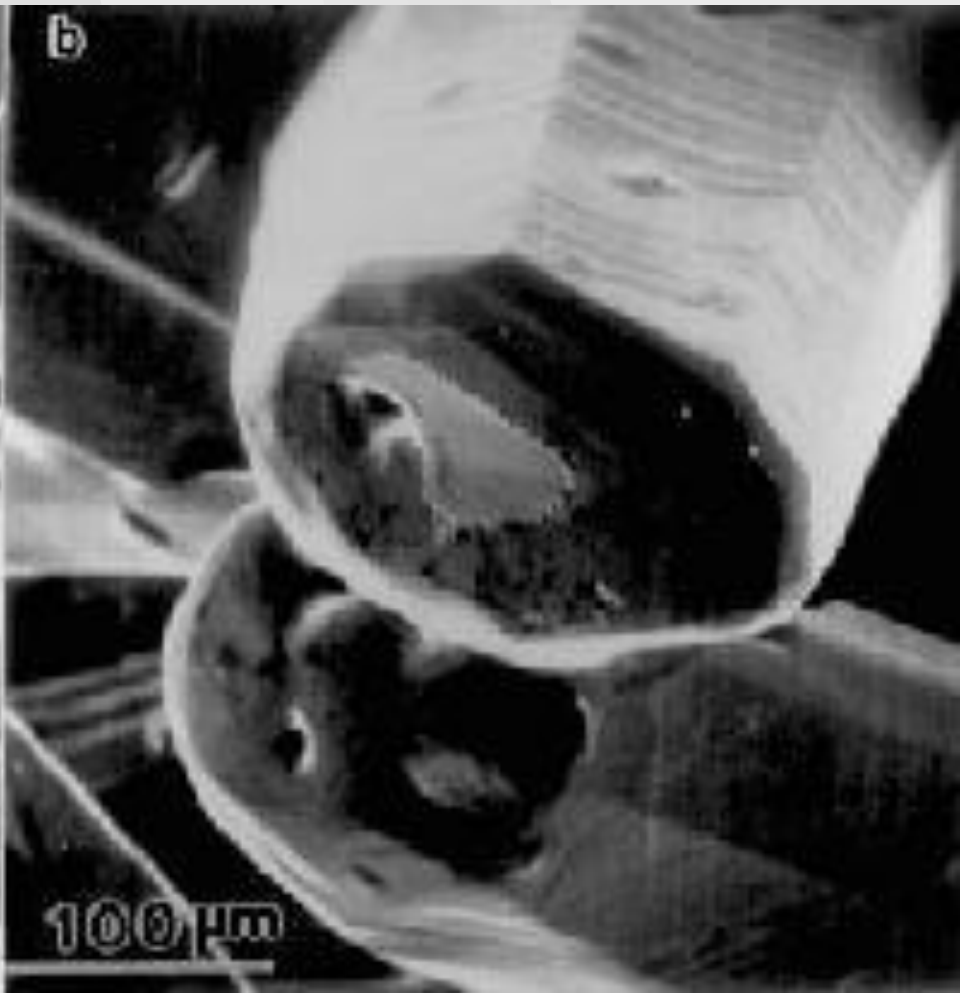
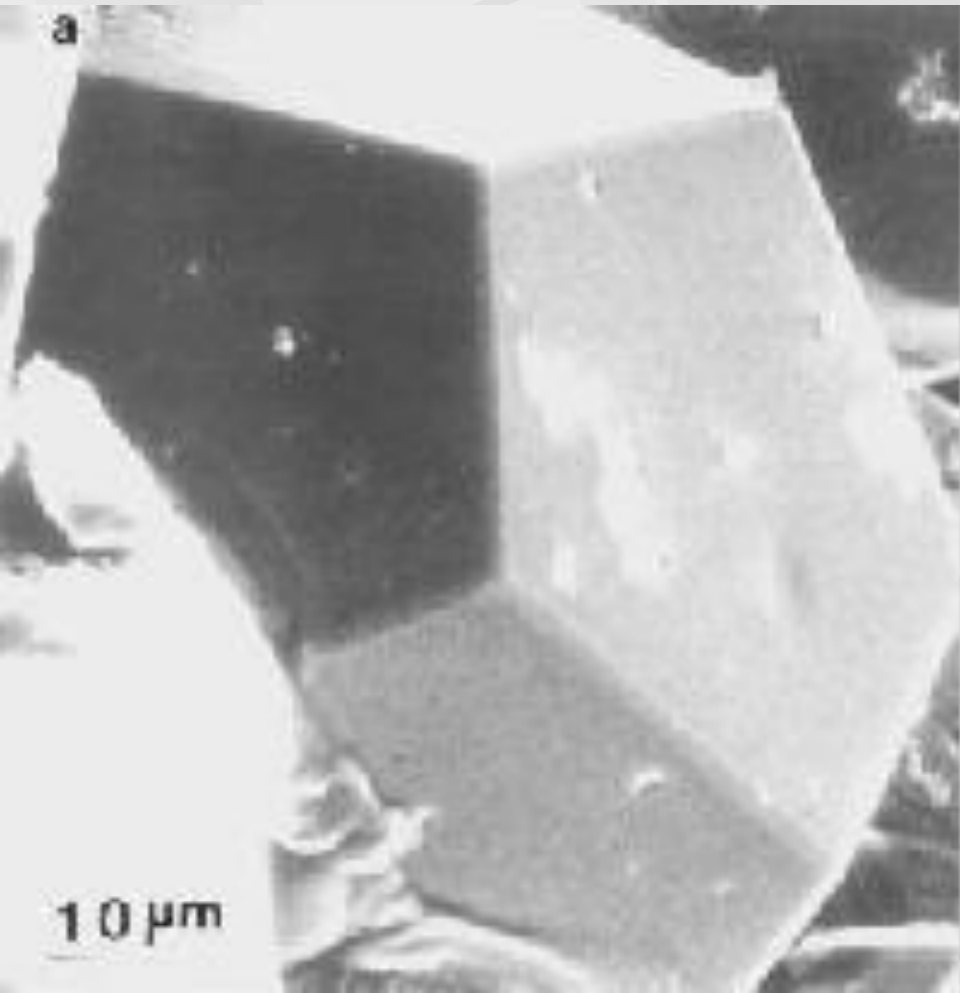
# Экспериментально наблюдались:

- икосаэдрические: оси 5,3,2, плоскости  $m$
- пентагональные: ось 5
- октагональные: ось 8
- декагональные: ось 10
- додекагональные: ось 12

*триаконтаэдр*



# Моноквазикристаллы: икосаэдрический и декагональный



# периодическая, ..., аperiodическая...

- периодическая:  $f(x) = \sum f_n \exp(inx)$

- квазипериодическая:

$f(x) = \sum_{n_1 \dots n_m} f_{n_1 \dots n_m} \exp[ix(n_1 k_1 + \dots + n_m k_m)]$ , т.е. несколько взаимно несоизмеримых периодов

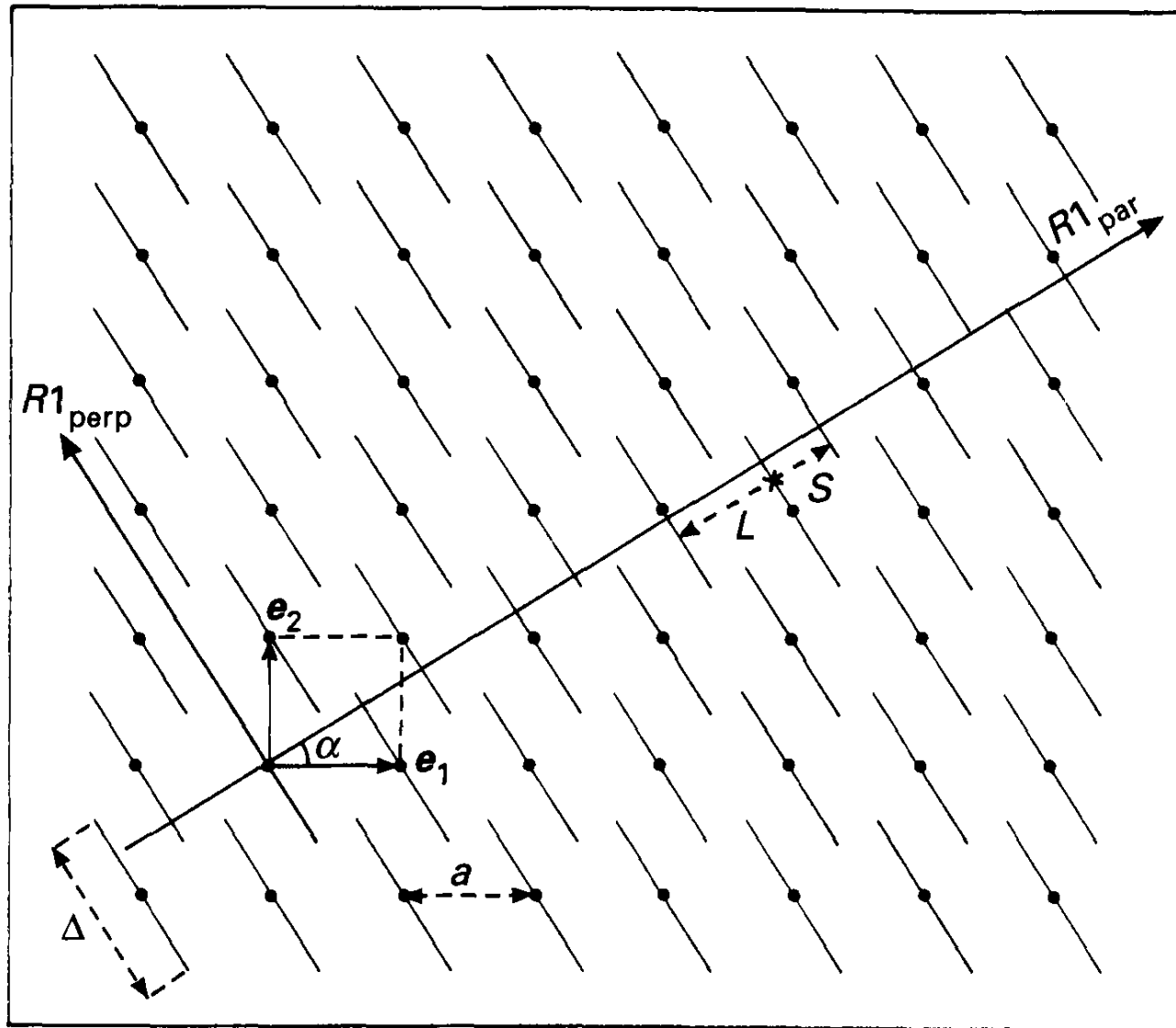
Такую функцию можно представить как сечение **многомерной периодической функции**

$f(x_1, \dots, x_m) = \sum_{n_1 \dots n_m} f_{n_1 \dots n_m} \exp[i(n_1 x_1 + \dots + n_m x_m)]$

линией, заданной уравнениями  $x_1 = k_1 x, \dots, x_m = k_m x$

- почти периодическая:  $m = \infty$





**FIG. 1.30** Illustration of the cut-projection method. The basis associated with the 2-dim square lattice is a single line segment perpendicular to the physical 1-dim space. The cut of this 2-dim structure by  $R1_{\text{par}}$  is a Fibonacci chain.

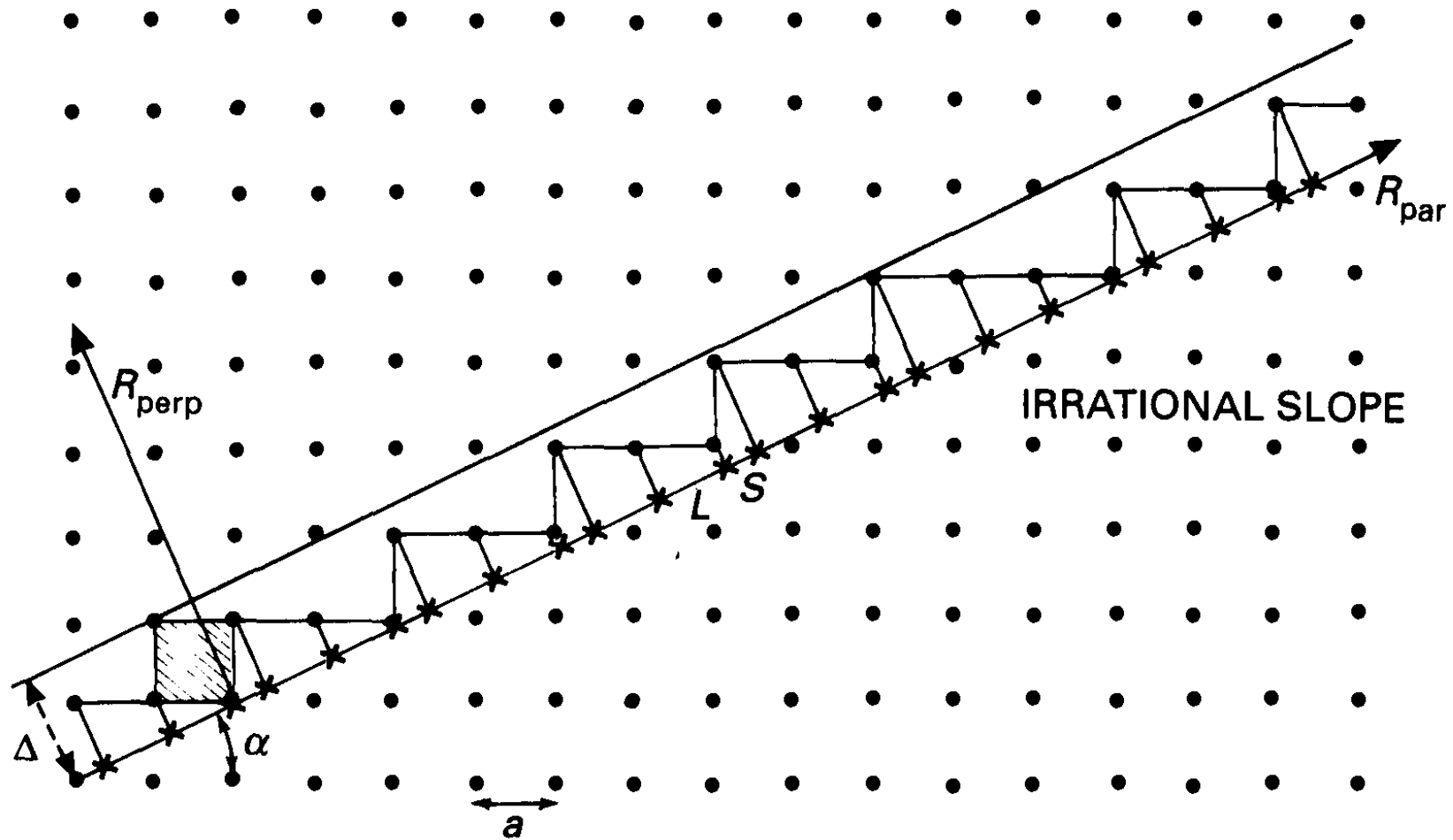


FIG. 1.28 A 1-dim illustration of the strip/projection method. The slope of  $R_{\text{par}}$  is irrational. Sites of the portion of the square lattice inside the strip project on  $R_{\text{par}}$  in a perfectly ordered non-periodic structure made of two tiles of incommensurate sizes. With a slope of  $R_{\text{par}}$  equal to  $\tau$ , the Fibonacci chain is obtained.

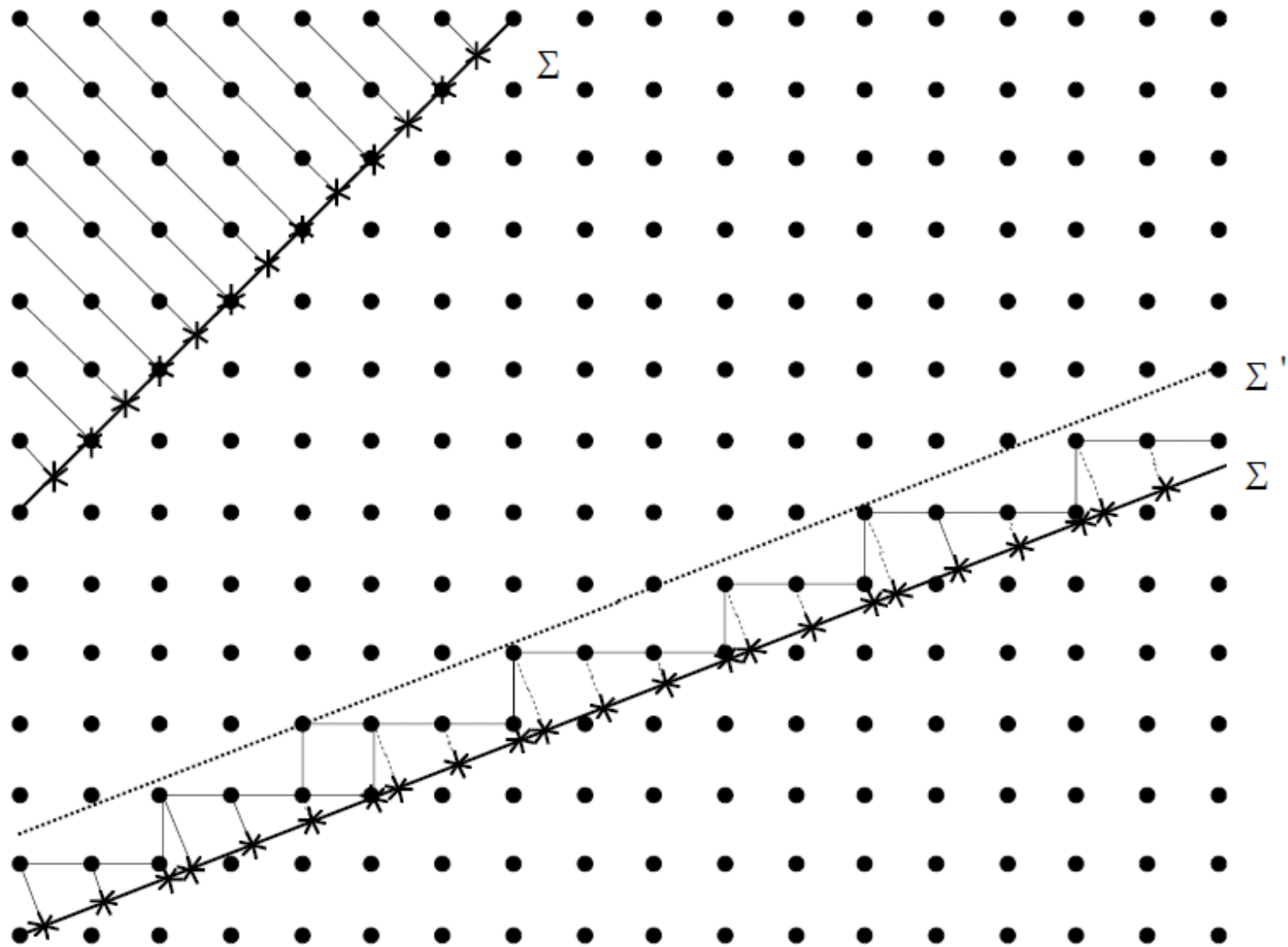


Figure 2.9. Illustration in  $d + n = 2$  dimensions of the crystallography of periodically modulated and quasicrystalline materials. A 2D square lattice projects onto a line  $\Sigma$  either as a 1D periodic structure when the slope of  $\Sigma$  is rational (upper left corner) or as an incommensurate aperiodic structure when the slope is irrational (central part).

# Аппроксиманты Фибоначчи

1/0: A.A.A.A.A.A.A.A подстановка:  $A \rightarrow AB, B \rightarrow A$

1/1: AB.AB.AB.AB.AB.AB.AB.AB.AB.AB

2/1: ABA.ABA.ABA.ABA.ABA.ABA.ABA

3/2: ABAAB.ABAAB.ABAAB.ABAAB

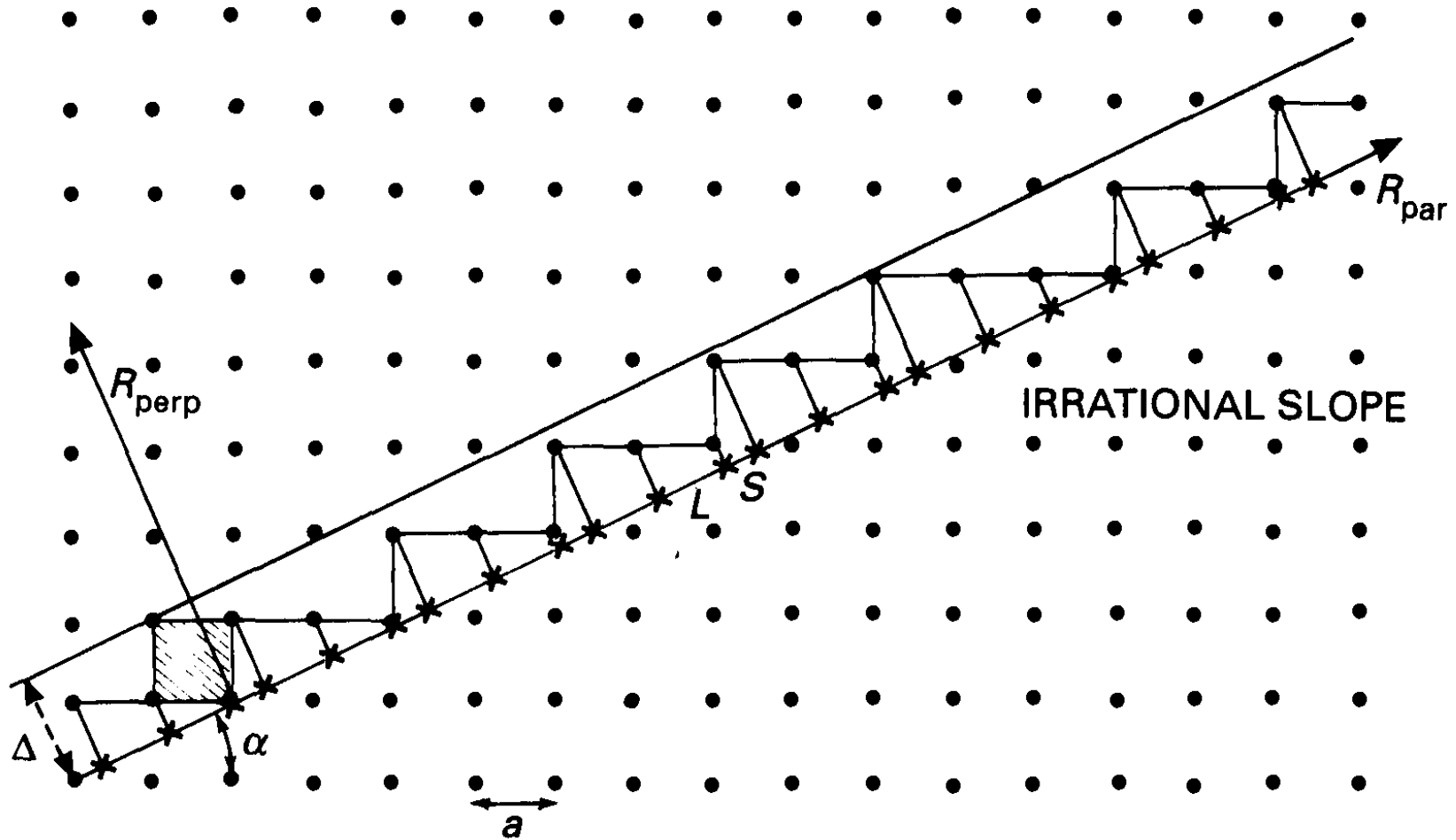
5/3: ABAABABA.ABAABABA.ABAABABA

$\tau$  : ABAABABAABABAABABAABABAAB

Числа Фибоначчи:  $F_{n+2}=F_{n+1}+F_n, F_0=0, F_1=1;$

0,1,2,3,5,8,13,21,34,55,89,...  $\tau=(1+5^{1/2})/2=1.618034$





$$R_{\text{par}} = m + \tau n, \quad R_{\text{perp}} = \tau m - n;$$

FIG. 1.28 A 1-dim illustration of the strip/projection method. The slope of  $R_{\text{par}}$  is irrational. Sites of the portion of the square lattice inside the strip project on  $R_{\text{par}}$  in a perfectly ordered non-periodic structure made of two tiles of incommensurate sizes.

With a slope of  $R_{\text{par}}$  equal to  $\tau$ , the Fibonacci chain is obtained.

# Penrose

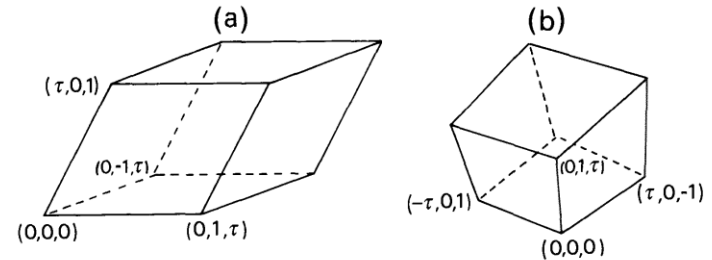
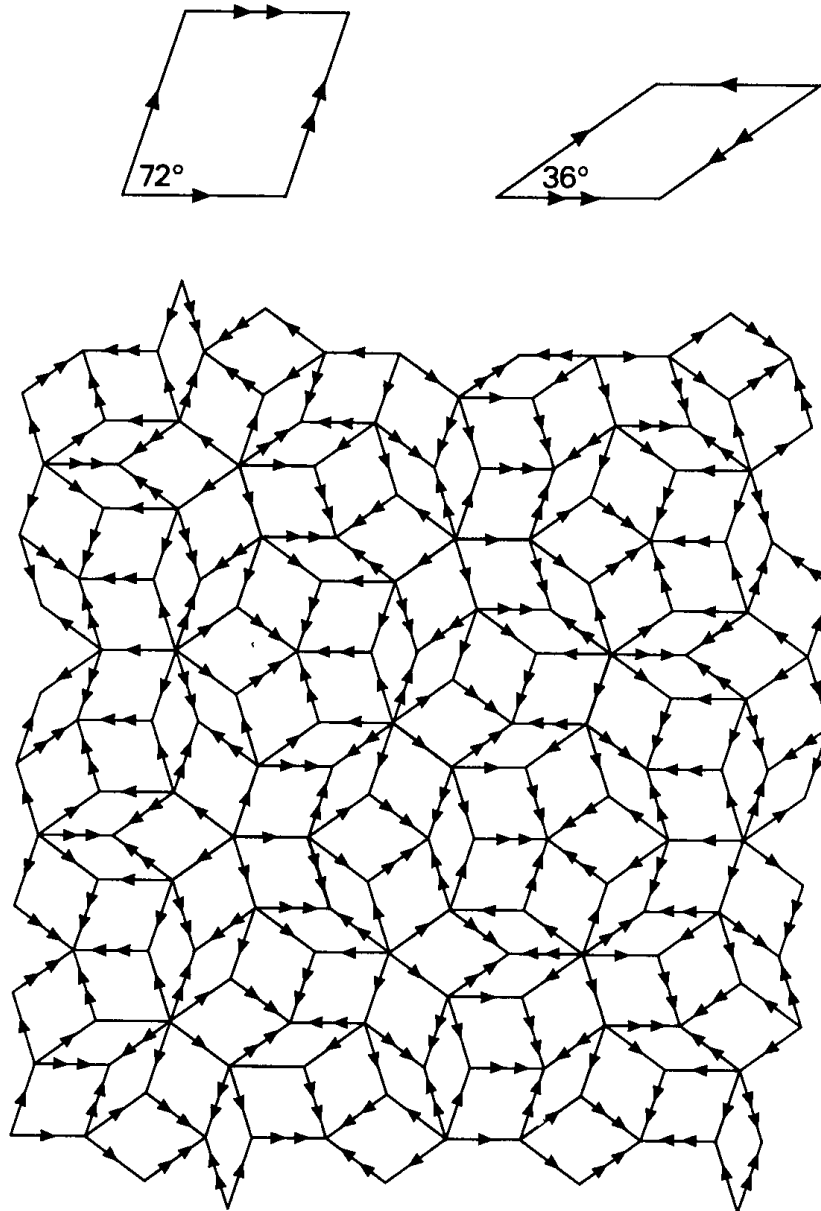


FIG. 1.23 Schematic of (a) prolate and (b) oblate rhombohedra that can be used for 3-dim Penrose tiling. Vertex coordinates are given in a frame of three orthogonal 2-fold axes of a regular icosahedron.

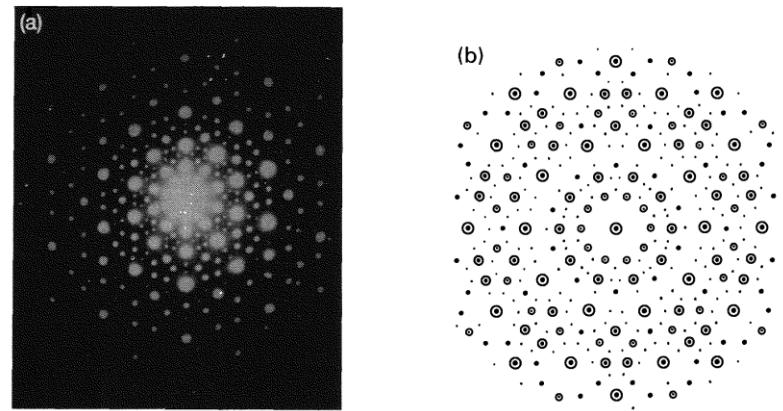


FIG. 1.24 Electron diffraction pattern of an AlMn quasicrystal (5-fold zone axis) (a) compared with the computed Fourier pattern of a 3-dim Penrose tiling (b) and as obtained perpendicular to a 5-fold axis.

## 6-мерное пространство

FIG. 1.21 Two-dimensional Penrose tiling with two lozenges as unit cells and edge matching rules (see text).

# Дифракция в квазикристалле

Калугин,  
Китаев,  
Левитов  
1985

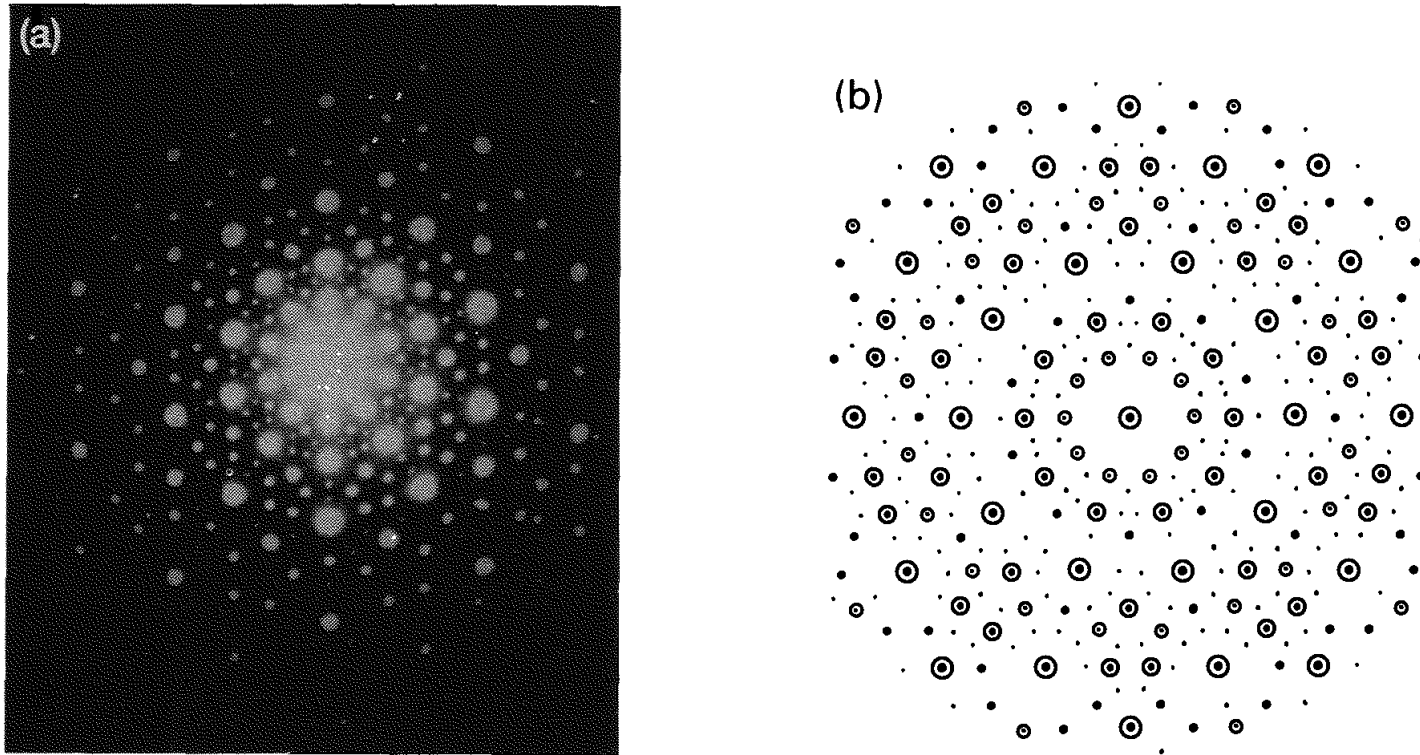
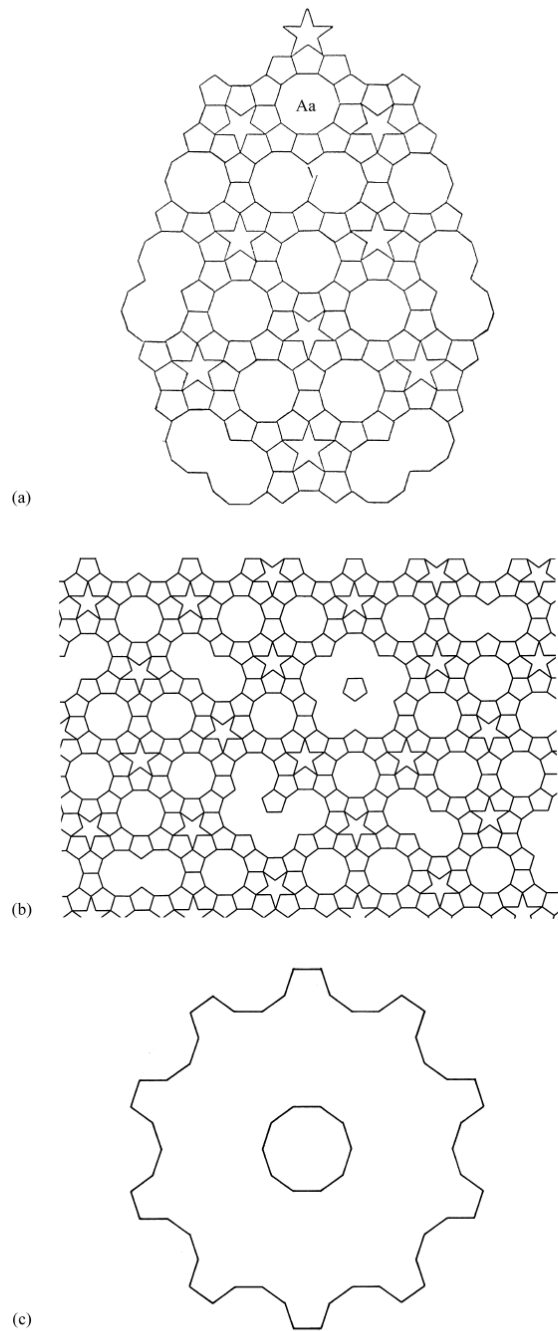


FIG. 1.24 Electron diffraction pattern of an AlMn quasicrystal (5-fold zone axis) (a) compared with the computed Fourier pattern of a 3-dim Penrose tiling (b) and as obtained perpendicular to a 5-fold axis.

$$\mathbf{Q}_{\text{par}} = (m_x + \tau n_x)\mathbf{x} + (m_y + \tau n_y)\mathbf{y} + (m_z + \tau n_z)\mathbf{z}$$

$$\mathbf{Q}_{\text{perp}} = (\tau m_x - n_x)\mathbf{x} + (\tau m_y - n_y)\mathbf{y} + (\tau m_z - n_z)\mathbf{z}$$



# ab Kepler

## Фазонные прыжки атомов

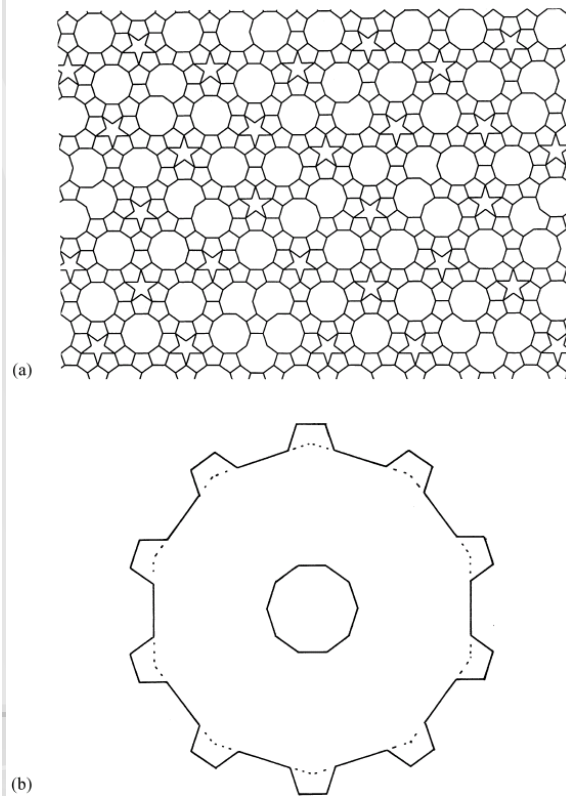


Fig. 2. Kepler's Aa tiling: (a) original patch [2]; (b) computed patch based upon the acceptance domain; (c) acceptance domain.

Fig. 3. A modified version of the Aa tiling: (a) tiling; (b) acceptance domain.



# Свойства квазипериодических структур

- Каждый атом имеет уникальное окружение
- Сколь угодно большие куски повторяются бесконечное число раз
- Понятие симметрии изменяется! Например, при повороте можно совместить сколь угодно большие куски, но не всю структуру.
- Самоподобие (инфляция)
- Фазонная свобода: **несчетное** множество макроскопически эквивалентных структур
- Дифракционная картина состоит из  $\delta$ -пикув, но она всюду плотная в обратном пространстве

# Где находятся атомы?

## Как атомы узнают свои места?

- Аппроксиманты в сплавах с известной кристаллической структурой
- Дифракция нейтронов с изотопным замещением
- Анализ EXAFS (локальное окружение)
- Рентгеноструктурный анализ атомных поверхностей в перпендикулярном пространстве
- Модели роста квазикристаллов

# 1/1 аппроксимант (Bergman), $a \approx 14 \text{ \AA}$

JEGLIČ *et al.*

PHYSICAL REVIEW B **75**, 014202 (2007)

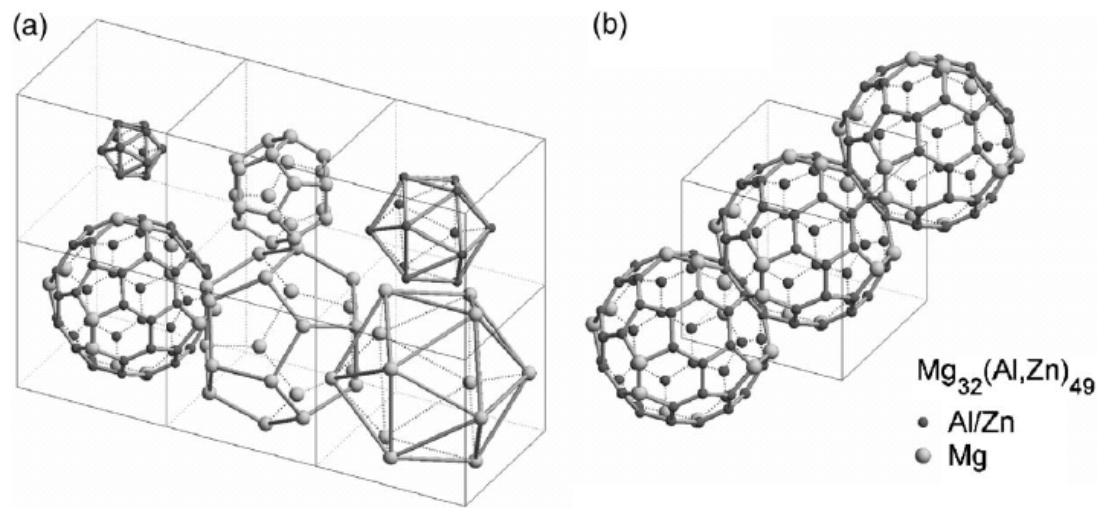


FIG. 7. (a) Six successive shells of the Bergman icosahedral cluster (see text). (b) The structure of the Bergman phase is obtained by a body-centered packing of these clusters by sharing a hexagonal plane of the fourth shell (the soccer ball).

$\approx 160$  атомов на ОЦК ячейку

# 1/1 аппроксимант (Маскау), $a \approx 12.5 \text{ \AA}$

SIMONET *et al.*

PHYSICAL REVIEW B 72, 024214 (2005)

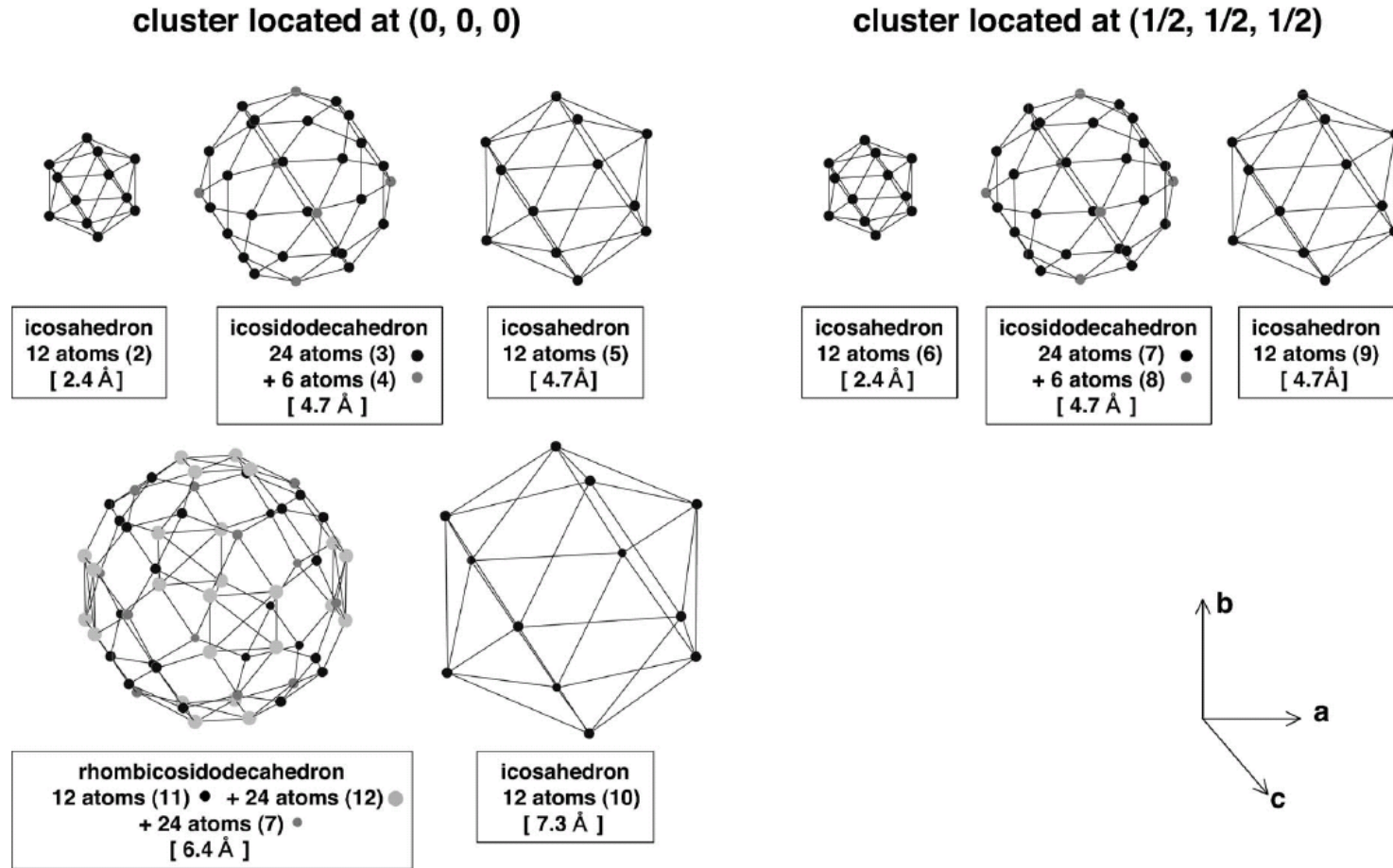
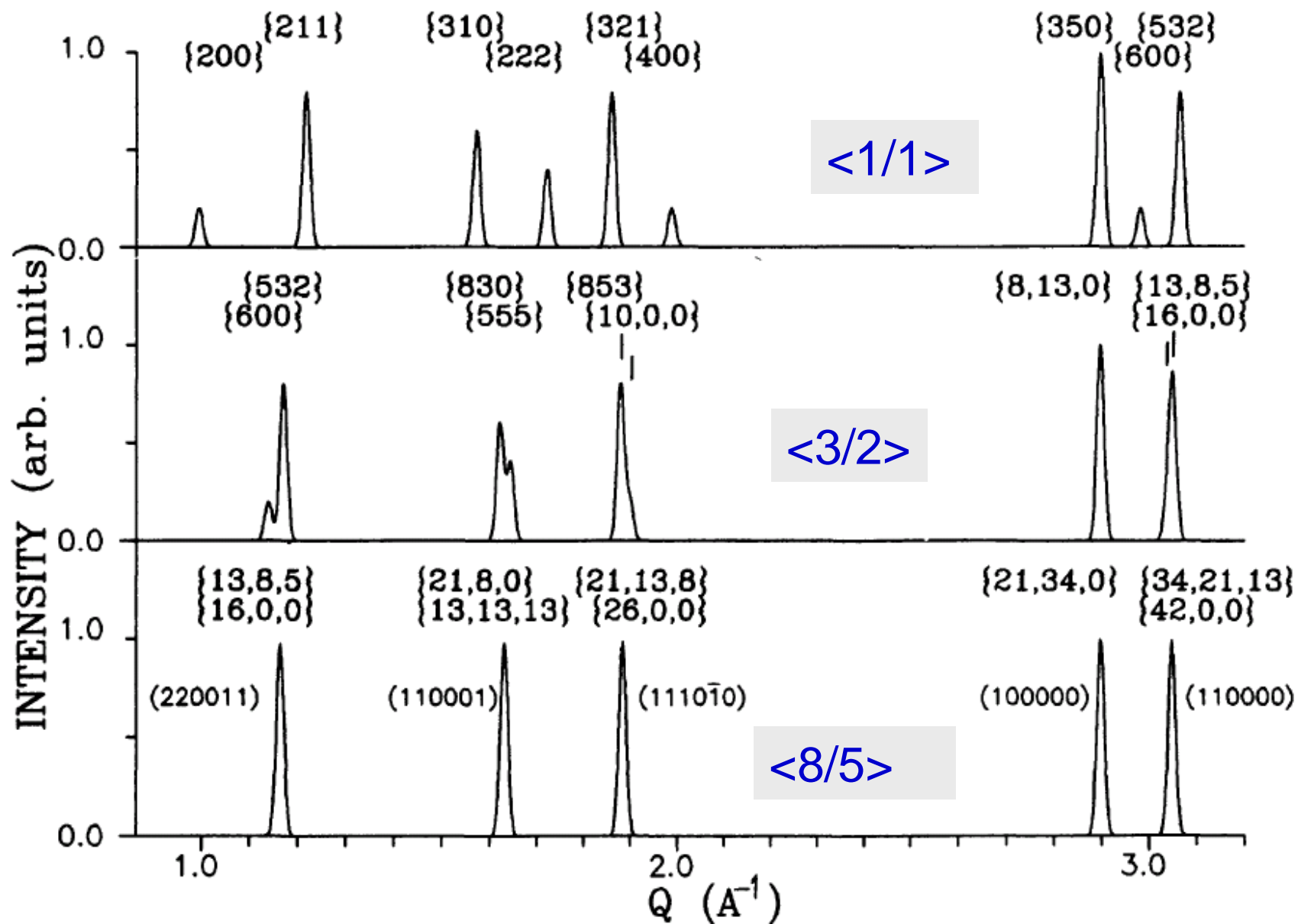


FIG. 2. Atomic structure of the clusters with icosahedral symmetry centered at (0, 0, 0) and (1/2, 1/2, 1/2) in 1/1 approximants in the Al(Si)-Cu-Fe system. For each cluster, the concentric shells with increasing size are shown separately. The crystallographic sites used to build each shell are indicated. Their labels (numbers within parentheses) follow the notations of Tables I and III. The average radius of the shell is indicated. In the  $\alpha$ -Al(Si)-Cu-Fe approximant, an additional atom (not represented in the figure) occupies the (0, 0, 0) position and induces an important disorder in the first shell, which loses its icosahedral character. The chemical decoration of these clusters is given in Table I.

# Рентгеновская дифракция в кубических аппроксимантах





# Электронная дифракция в квазикристалле

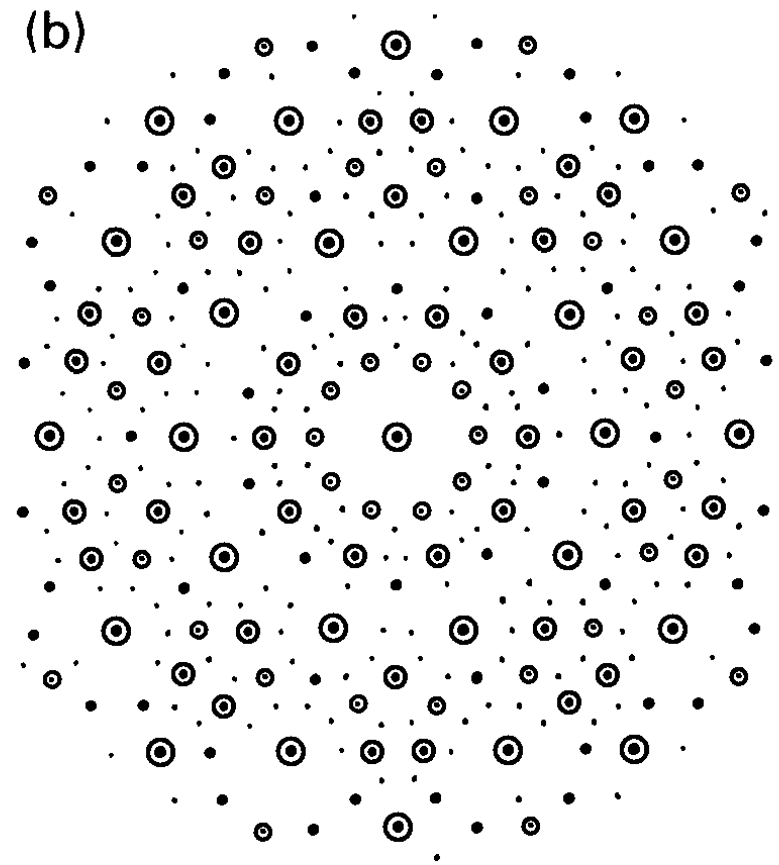
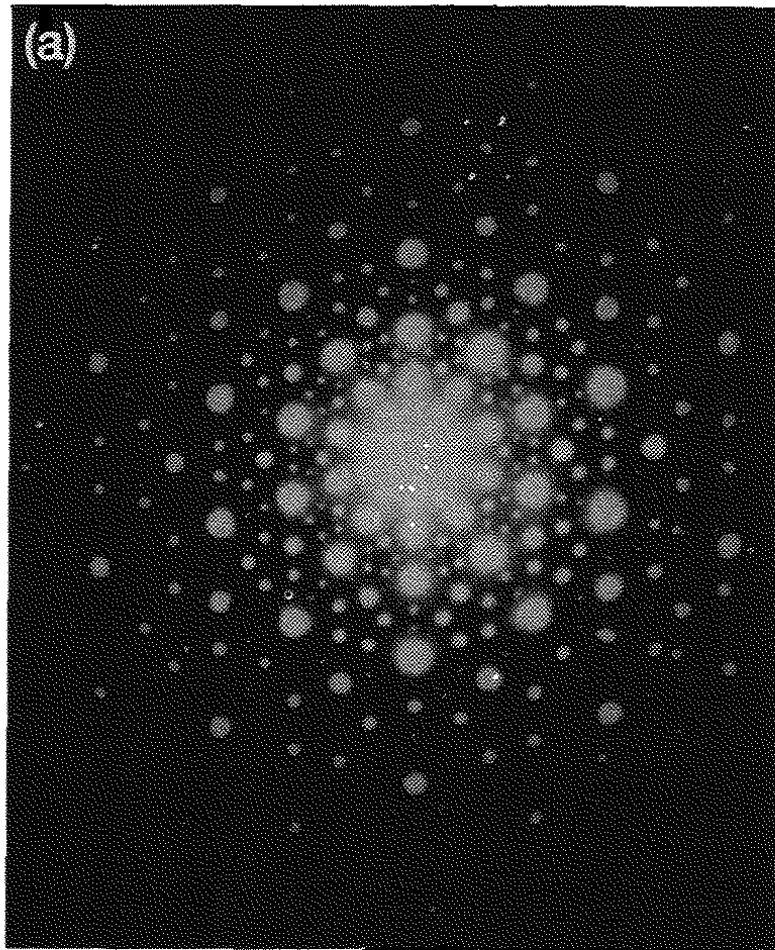


FIG. 1.24 Electron diffraction pattern of an AlMn quasicrystal (5-fold zone axis) (a) compared with the computed Fourier pattern of a 3-dim Penrose tiling (b) and as obtained perpendicular to a 5-fold axis.



# Электронная дифракция в кубических аппроксимантах

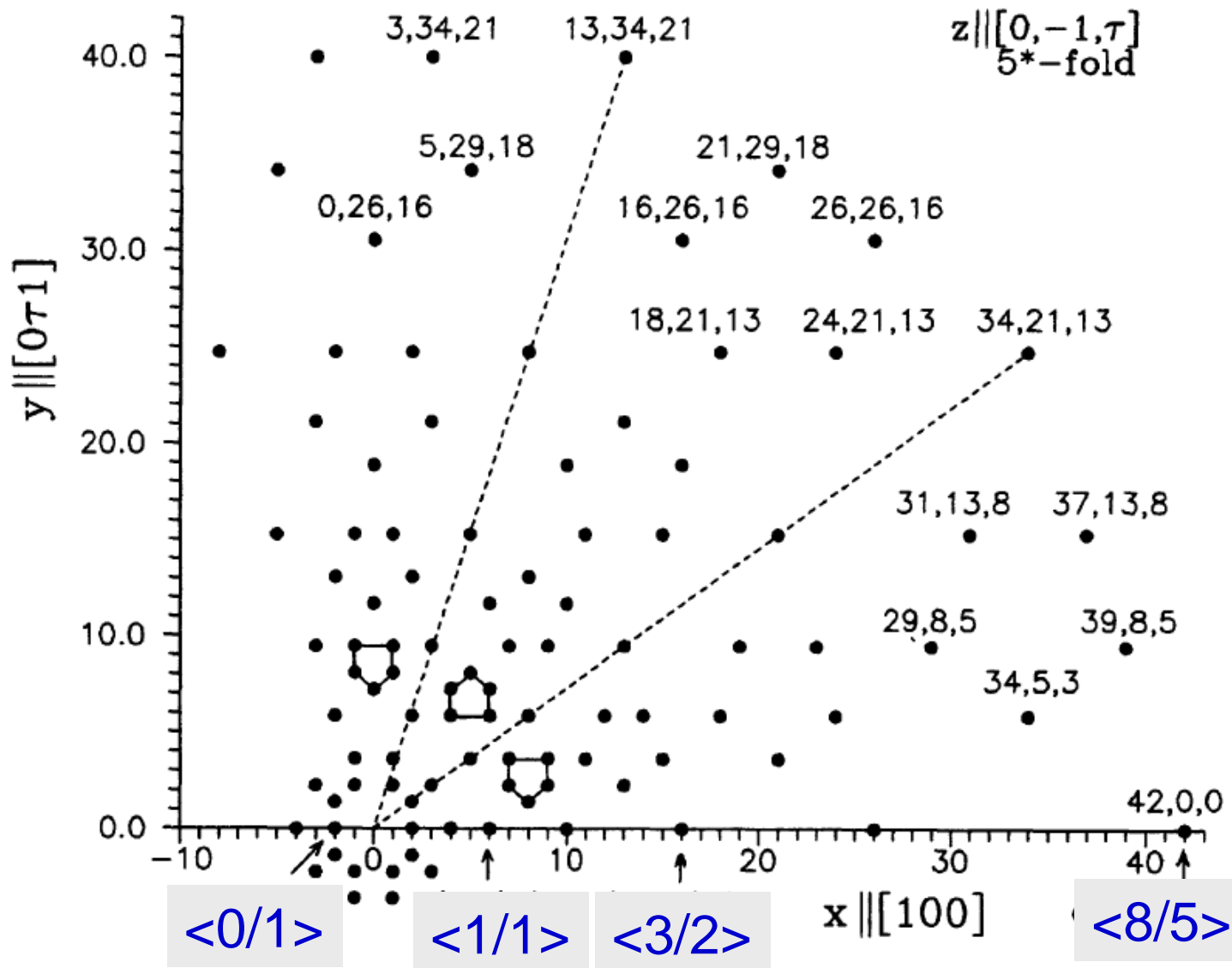
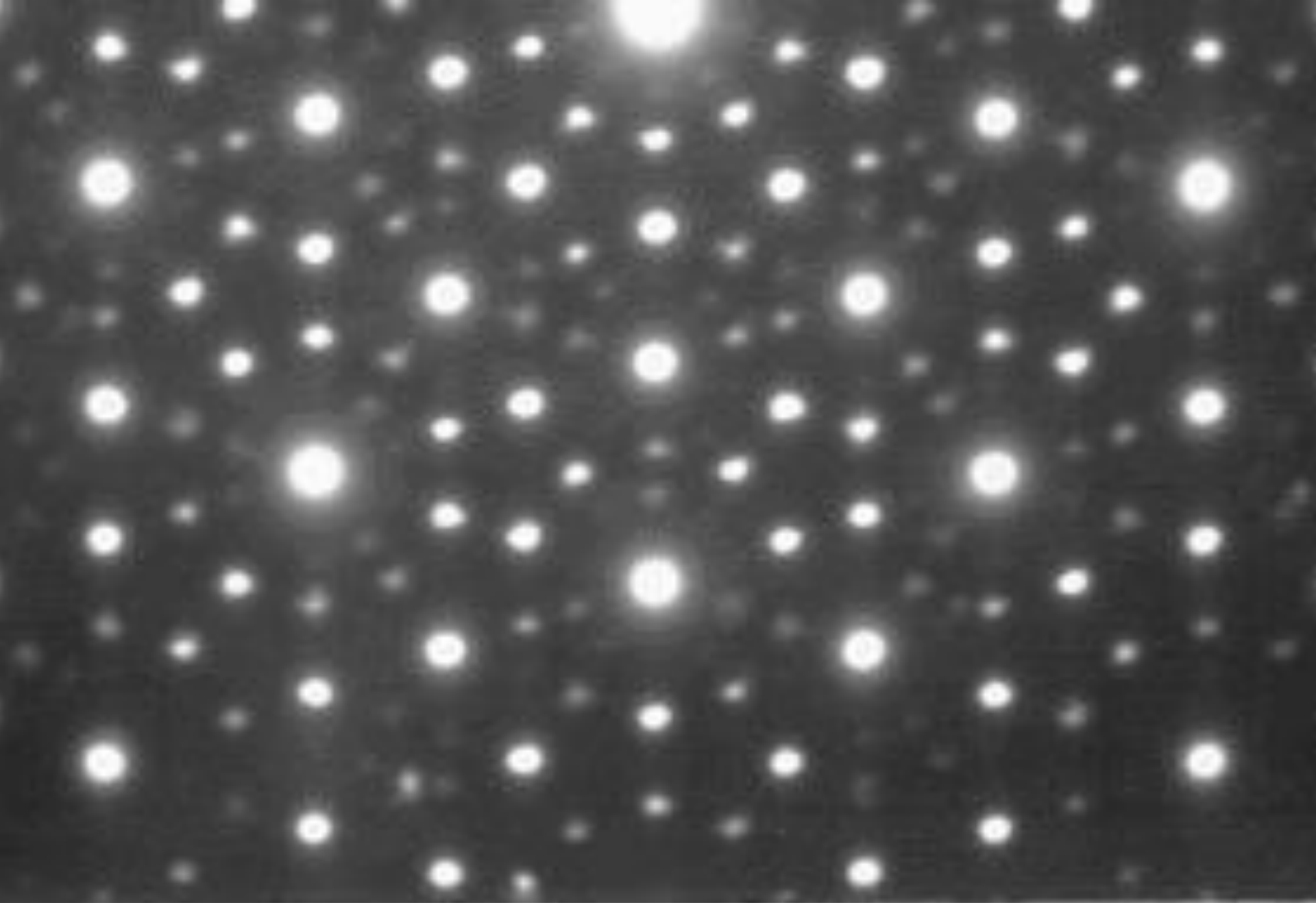


Fig. 3. — Universal pseudo-fivefold electron-diffraction pattern of the Fibonacci crystals



Дифракционная картина с симметрией??? (Shechtman et al., Phys.Rev.Lett. 1984)

# Сравнение с экспериментом AlMnSi

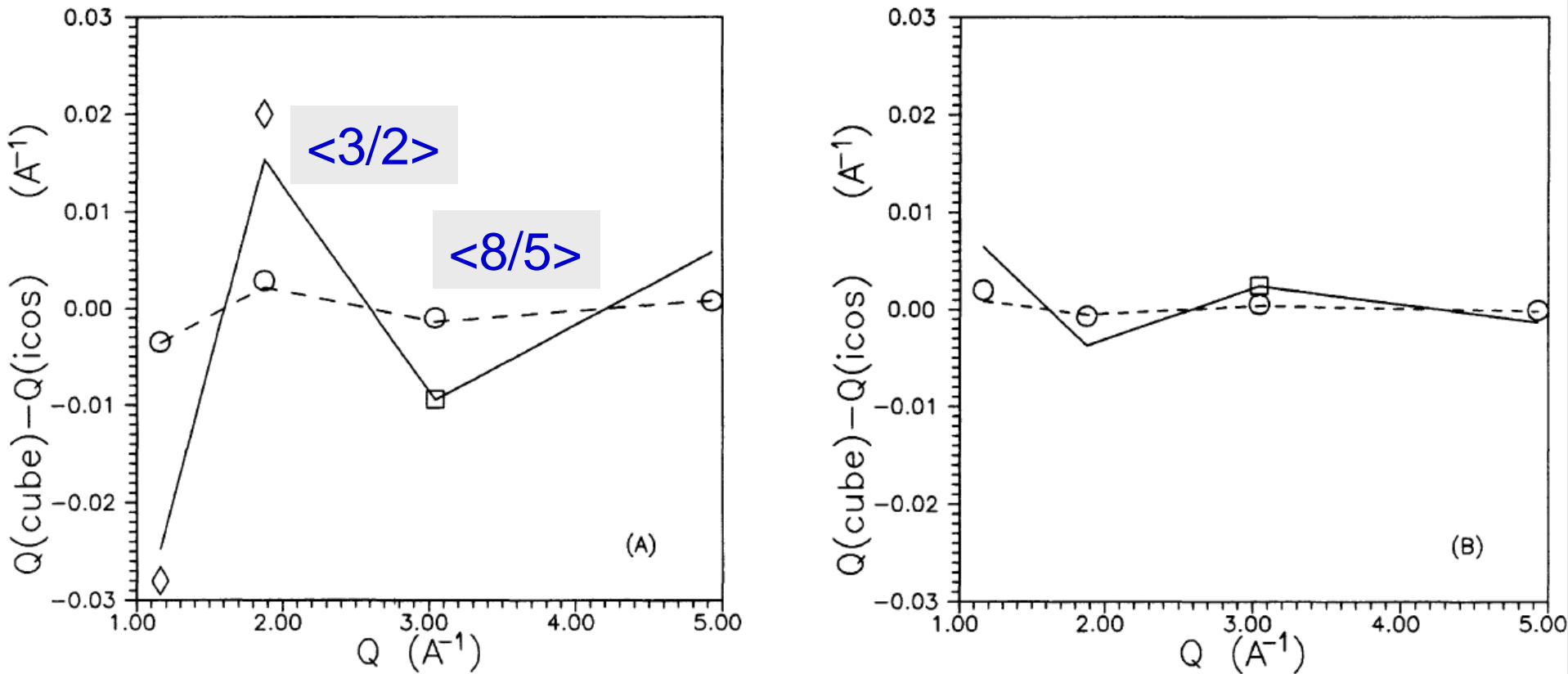


Fig. 7. — The deviations of cubic reflections from their icosahedral positions in different Fibonacci crystals : (A) for the twofold  $\{2F_i, 0, 0\}$  reflections and (B) for the pseudo-twofold  $\{F_{i+1}, F_i, F_{i-1}\}$

# Аппроксимант MnSi, структура B20, пространственная группа $P2_13$

$x, x, x;$

$x_{\text{Si}} = 0.846$  (0.845)

$x_{\text{Mn}} = 0.138$  (0.155)

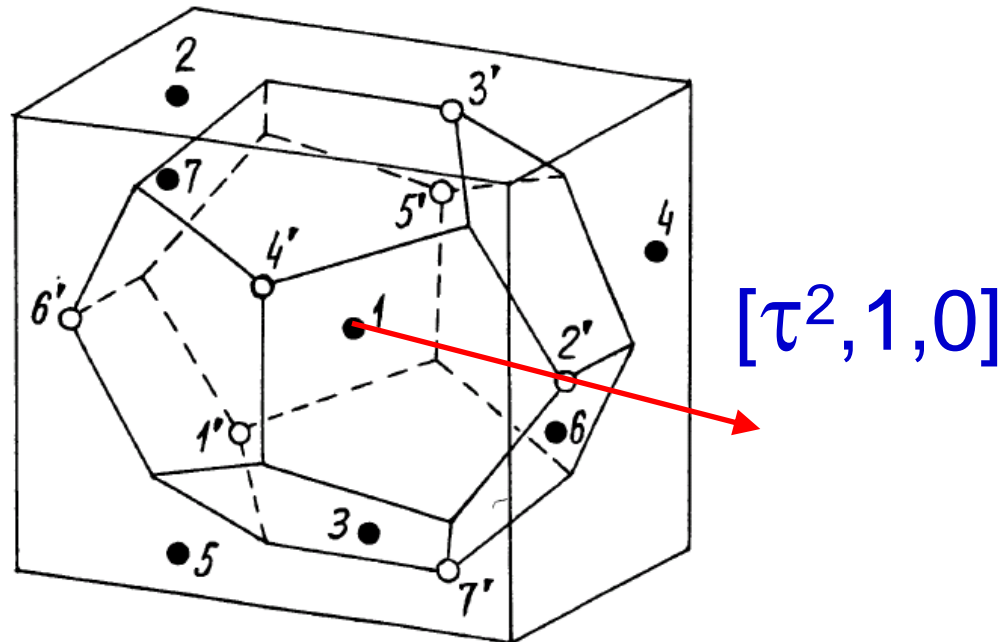
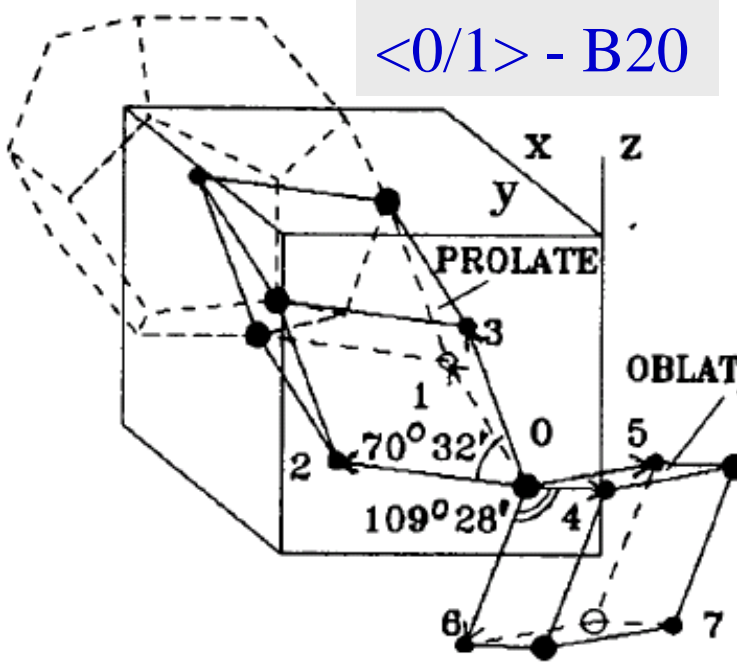


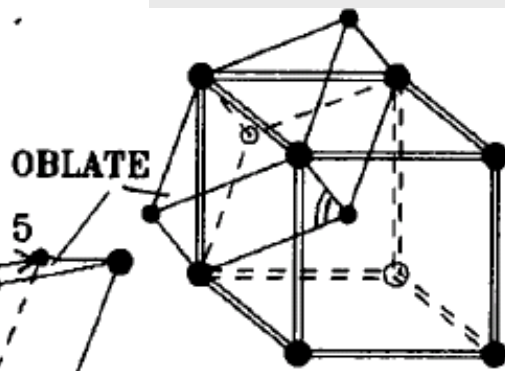
Fig. 6. — Idealized MnSi structure. Cube with the inscribed dodecahedron shows the unit-cell dimensions (conventional unit cell has another origin [20]). Full circles : A-atoms and empty circles : B-atoms. Atom 1 is at the center of the cube and atom 1' is at the cube diagonal ; the rest atoms are at the cube faces.

$\langle 0/1 \rangle$  - B20



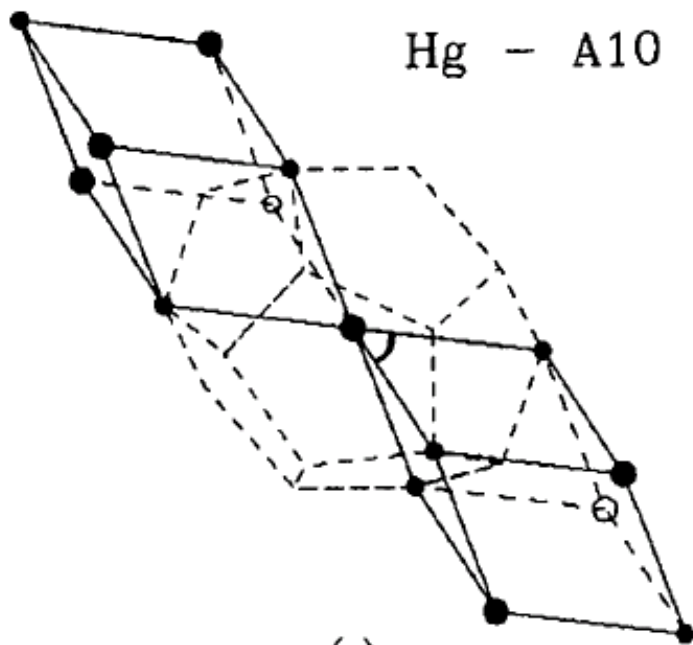
(a)

$\langle 1/-1 \rangle$  - B2



(b)

Hg - A10



(c)

Додекаэдрическое  
локальное  
упорядочение в  
простых  
аппроксимантах

# Al-Mg-Zn, $Pa\bar{3}$ space group, about 704 atoms

S. Spiekermann, G. Kreiner, 1998

---

# Ca-Cd, $Pa\bar{3}$ space group, about 712 atoms

C.P. Gomez, S. Lidin, 2001

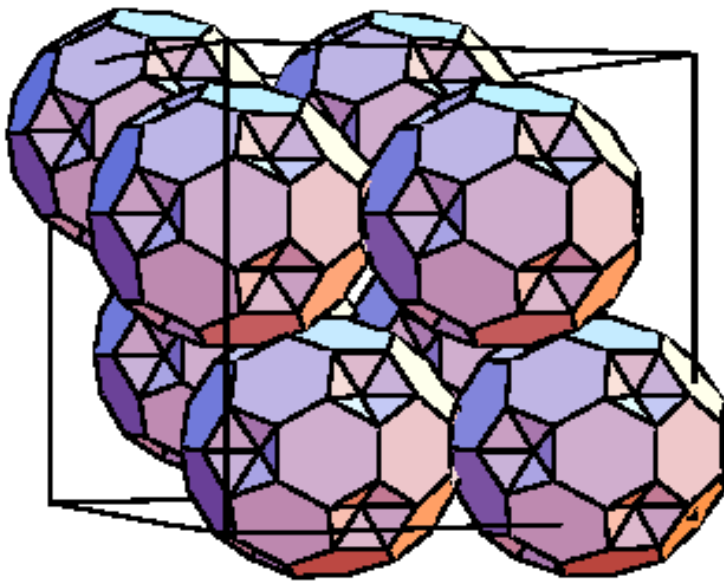
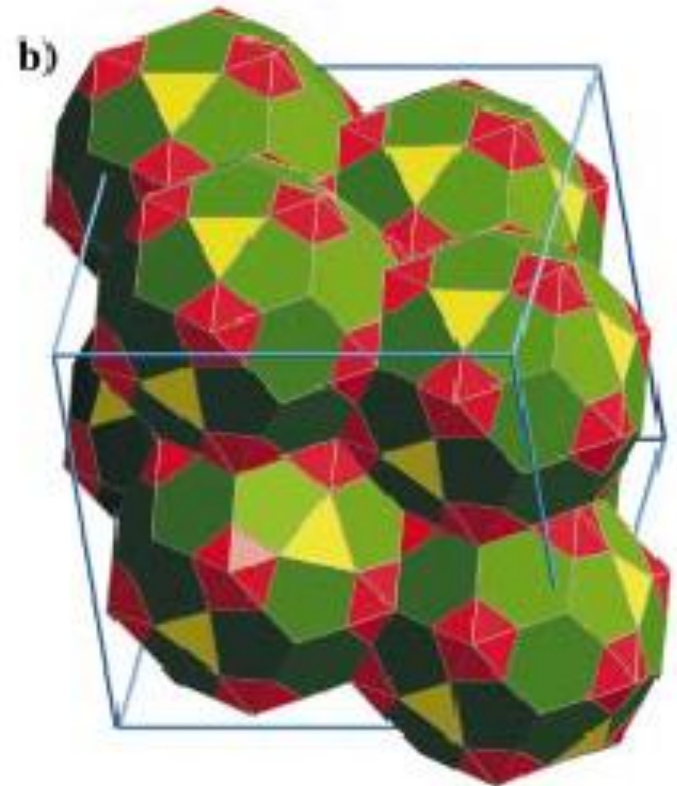
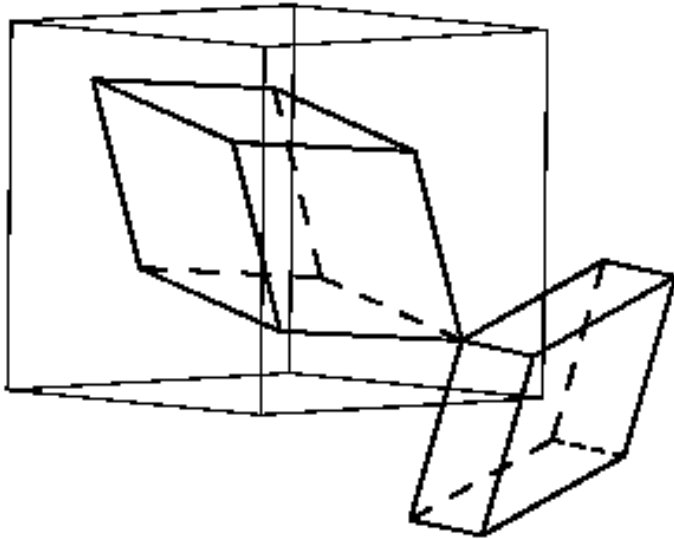


Fig. 1: Each unit cell of the 2/1-approximant contains eight Bergman clusters.





# Al-Rh-Si, $Pm\bar{3}$ , about 563 atoms

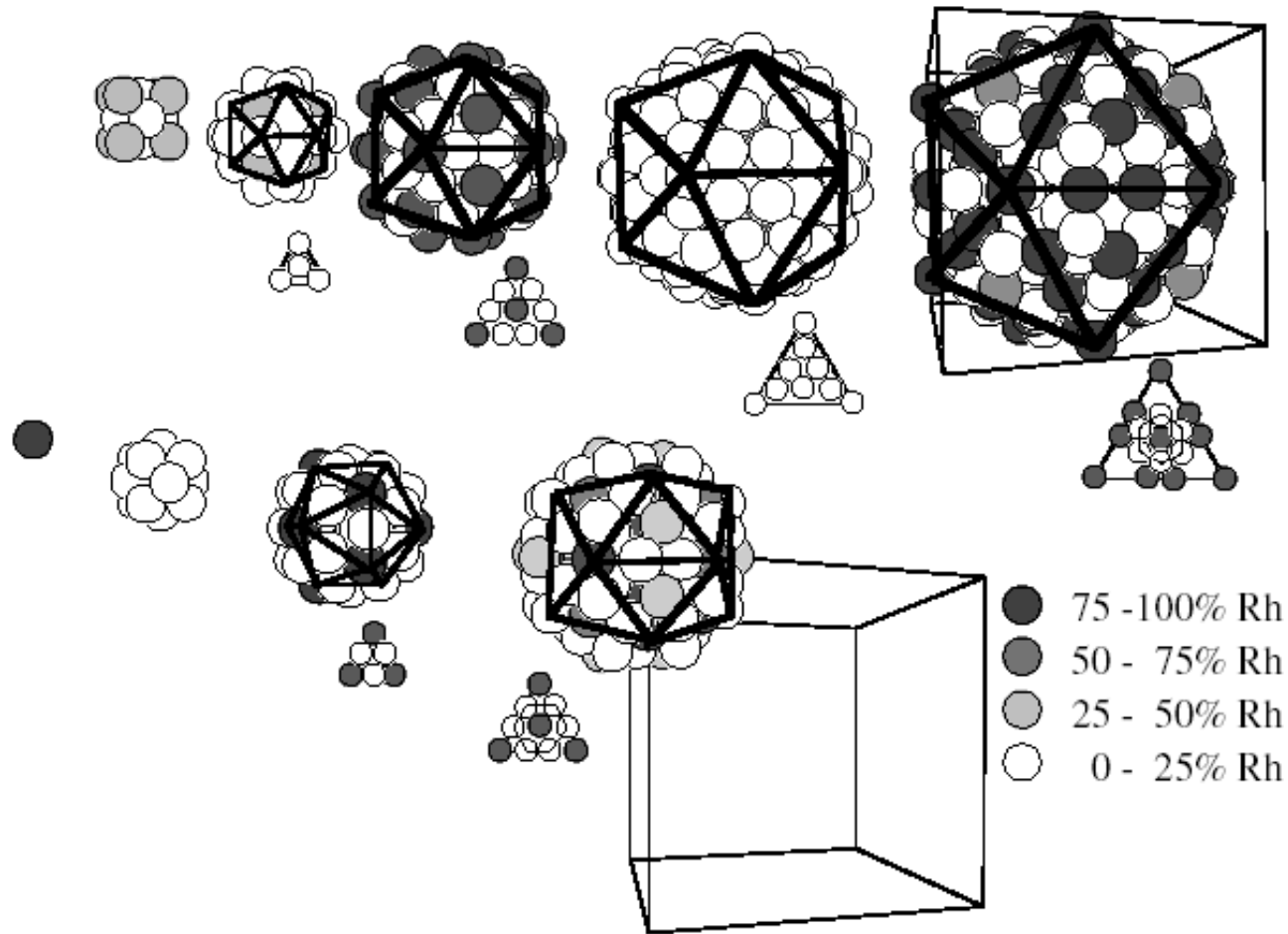
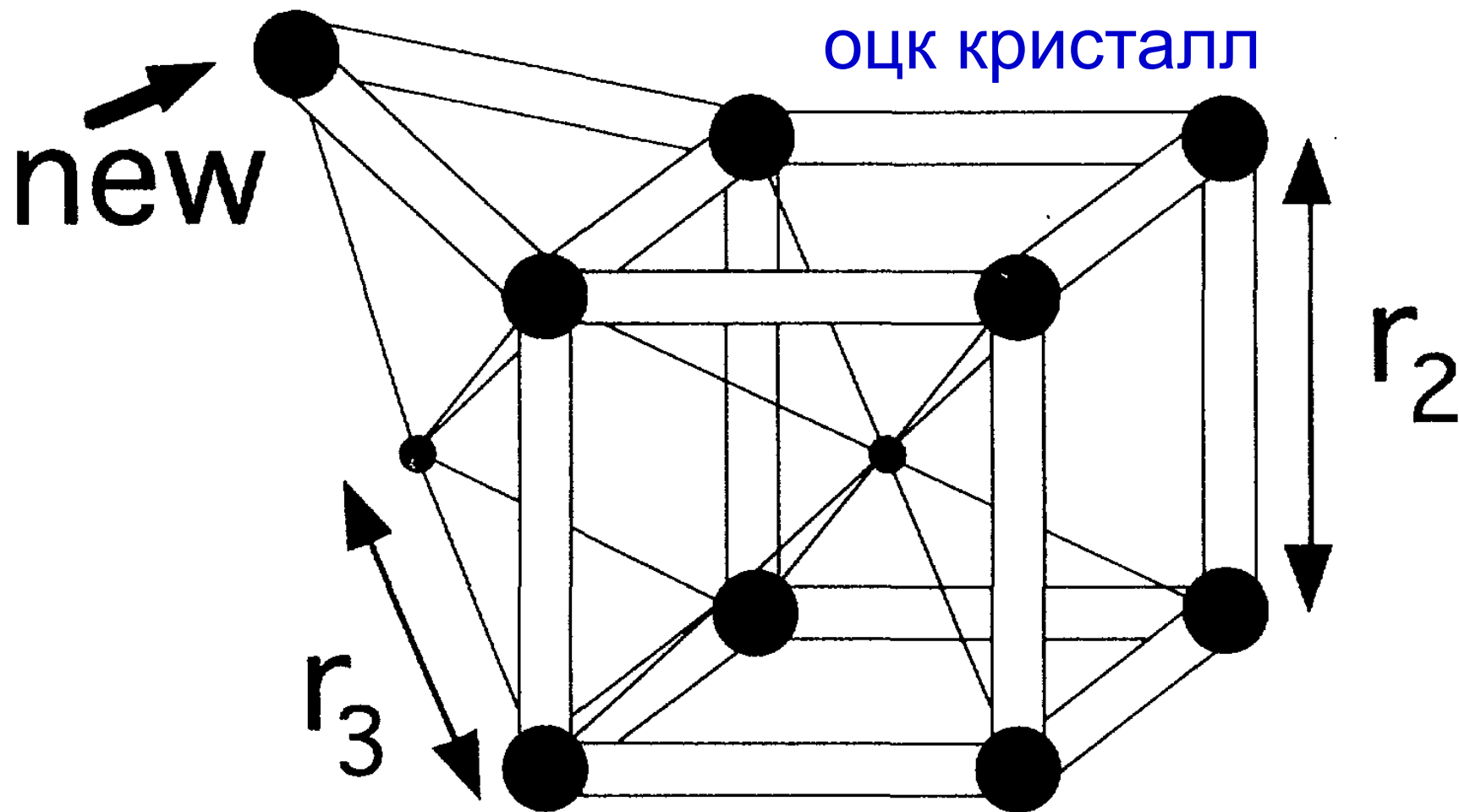


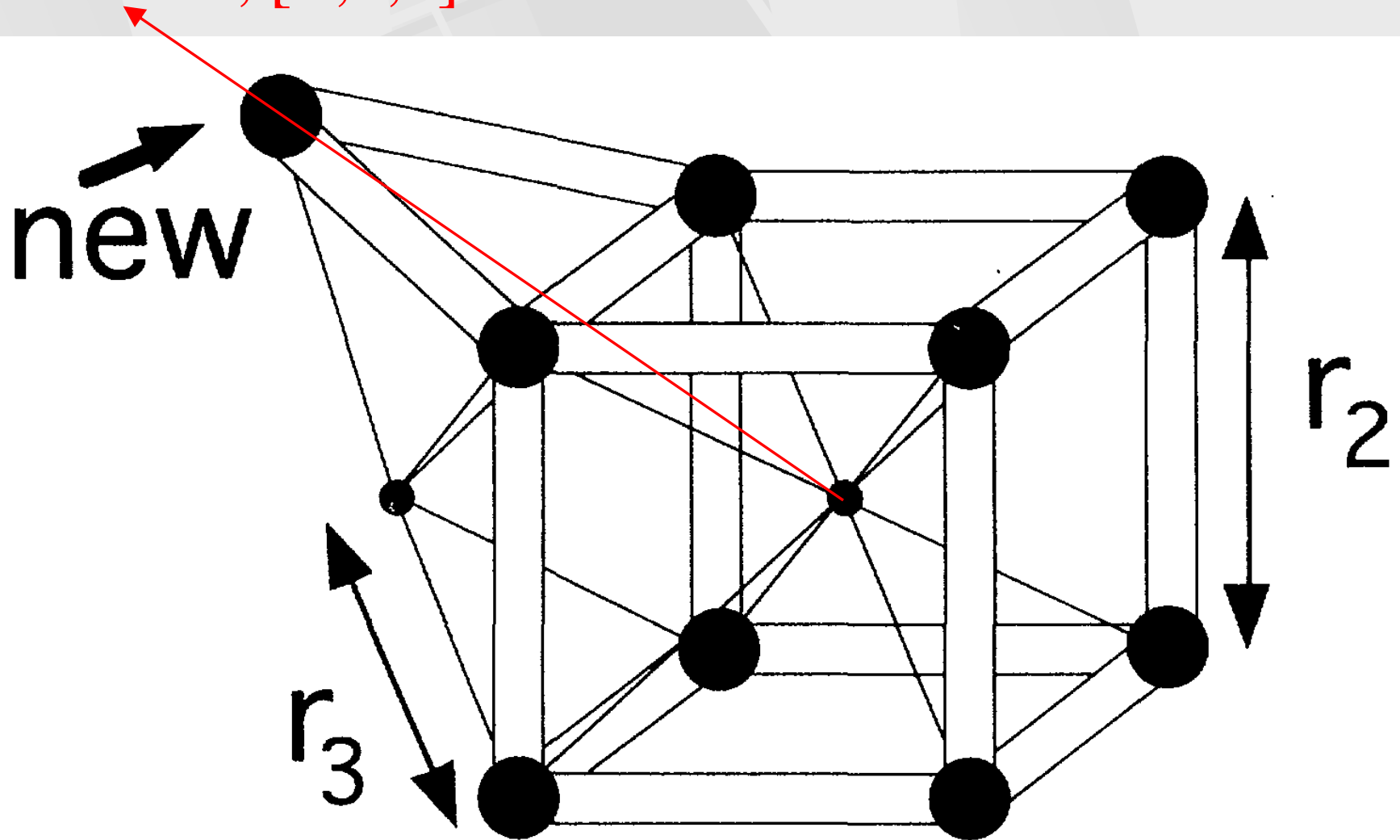
Fig. 4. Atomic clusters exist at the body center (top panel) and vertices (bottom panel) in the unit cell of the  $Al_{65}Rh_{27}Si_8$   $2/1-2/1-2/1$  approximant. Atomic arrangements on the triangular faces of each icosahedral atomic shell are shown below each atomic shell. Open circles and filled circles indicate (Al, Si) and Rh atoms, respectively. The atomic sites in which Al and Re coexist together are expressed as gray circles. The depth of the gray color indicates the Re occupancy in each mixed site; the darker the color is, the more the Re exist. The triangles decorated by circles indicate the atom arrangements on the triangular faces of the icosahedral cluster shells. Note that the seven atoms on the faces along the  $[111]$  direction in the fifth shell of the larger cluster centered at the body center are shared by the third shell in the small cluster centered at the vertices. Seven atoms constructing hexagons in the triangular surfaces of the outermost shells in the large cluster at body center of the unit cell are shared with the outermost shells in the small icosahedral clusters at vertices.

# От куба до икосаэдра один шаг

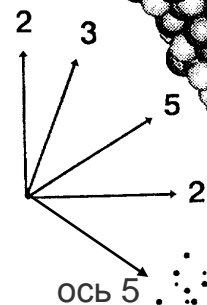
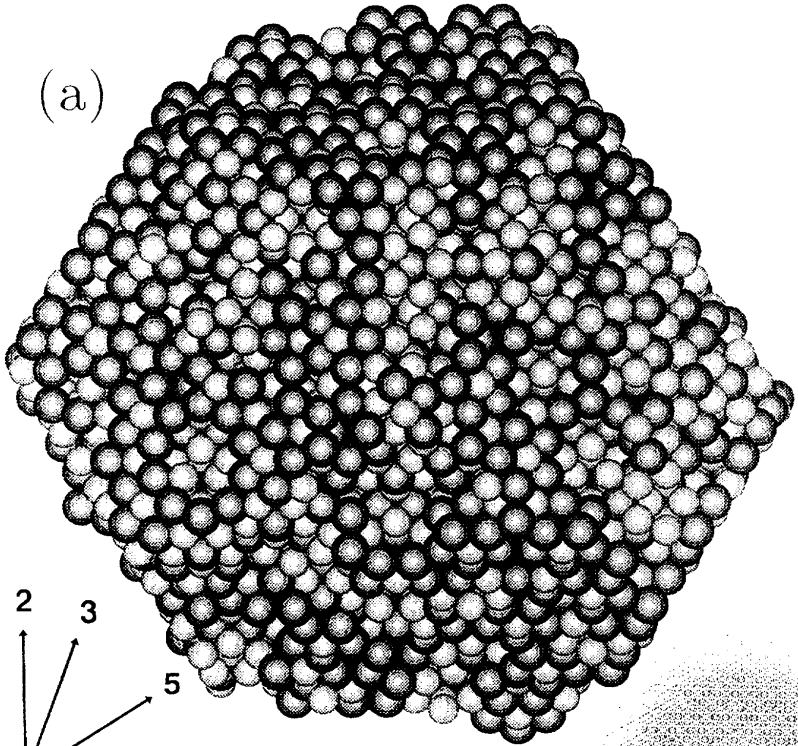


# От куба до икосаэдра один шаг

5-fold,  $[\tau, 1, 0]$



(a)

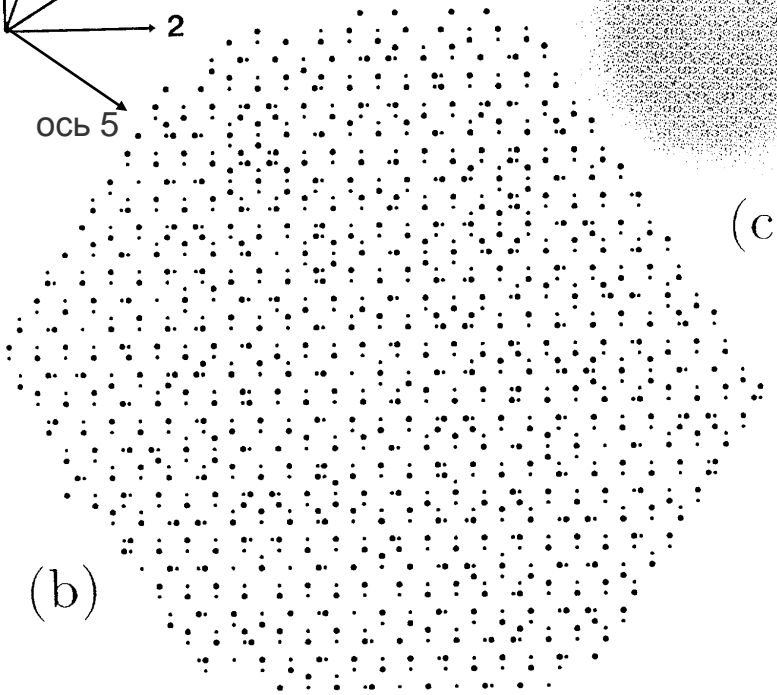


Начало роста, видна огранка  
плоскостями  $\perp$  осям 5

(c)

← перпендикулярное пространство

(b)



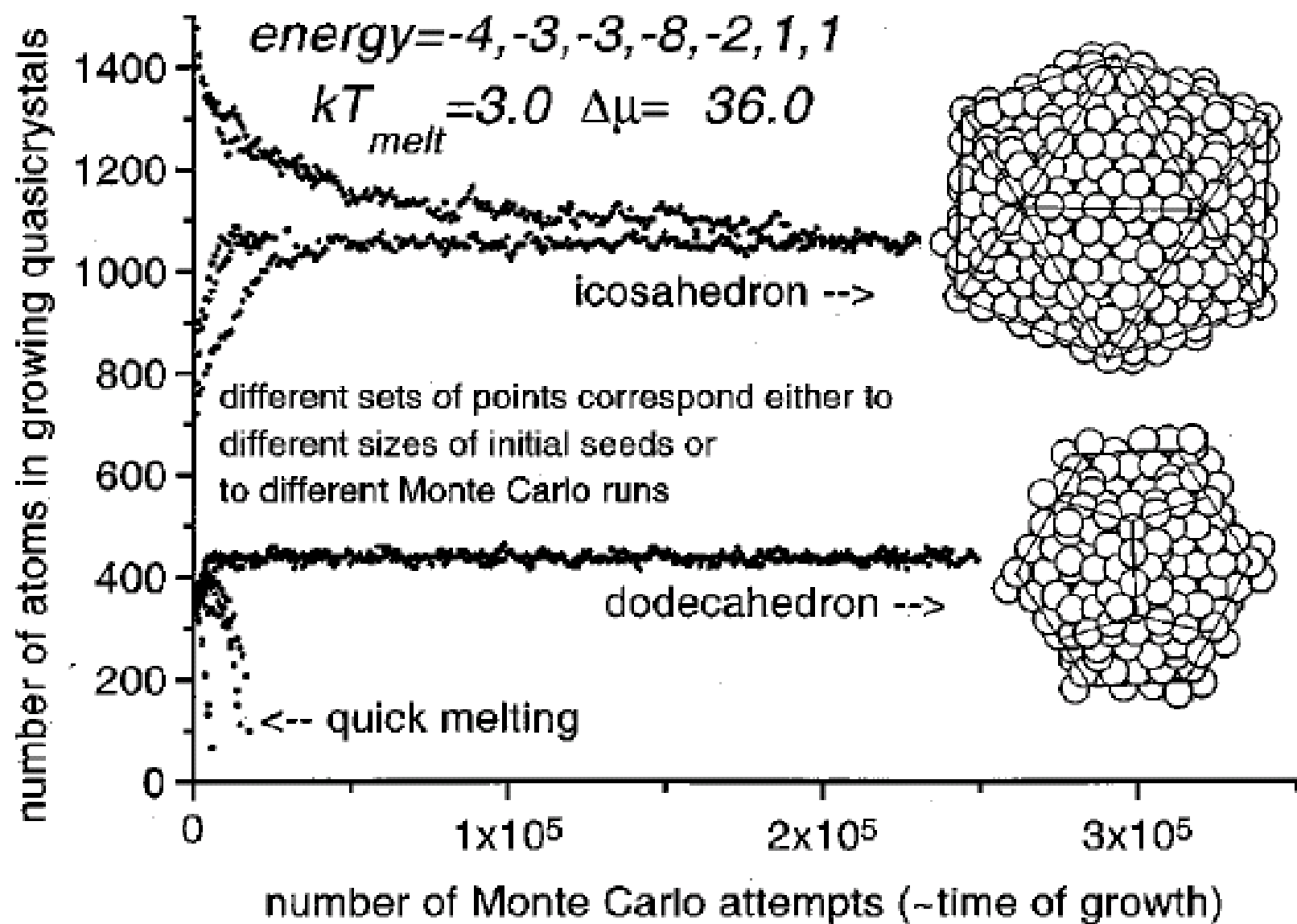
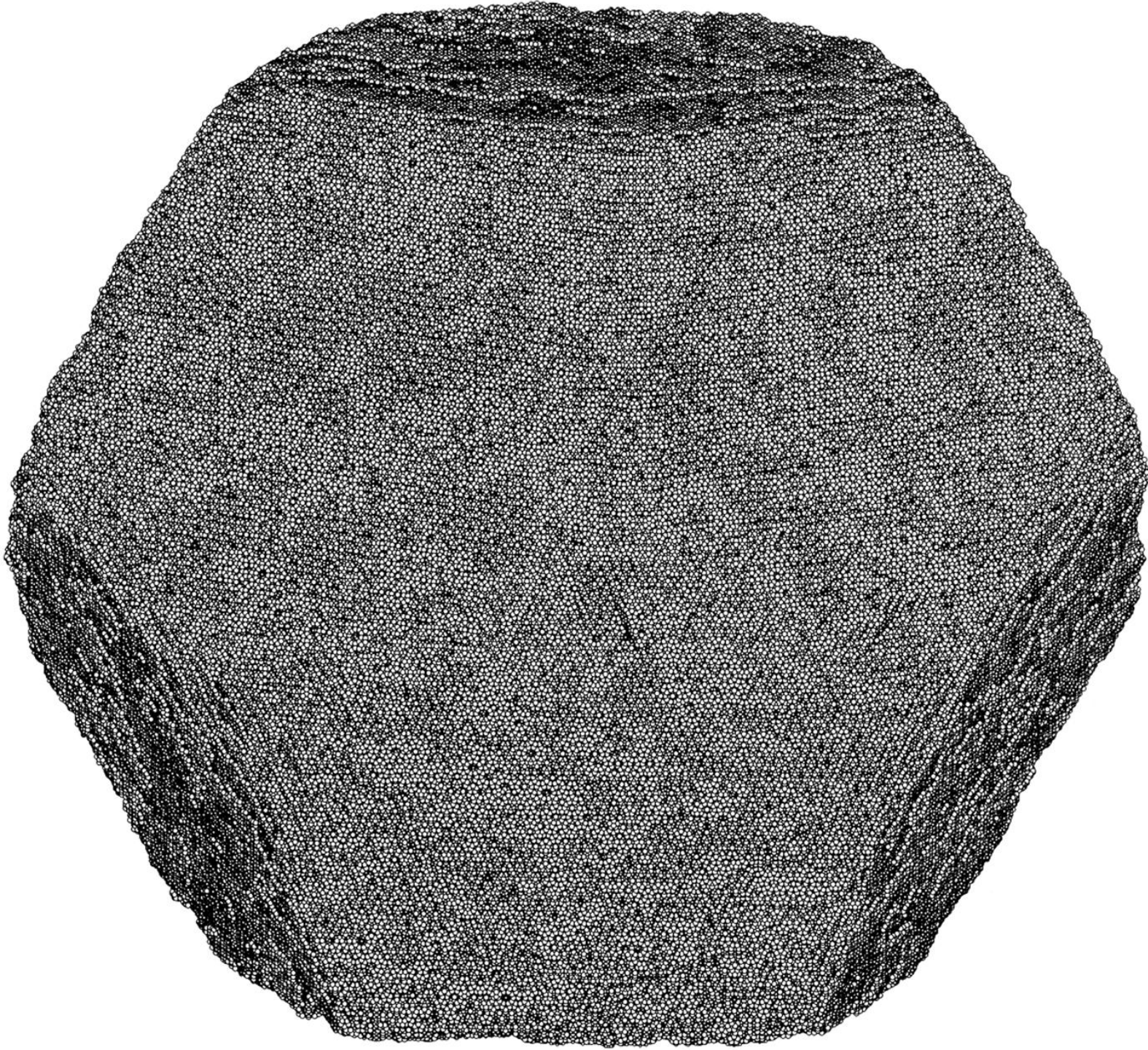


FIG. 7. Formation of stable clusters; different sets of points correspond either to different initial seeds or to different runs of the Monte Carlo process.

$10^7$  атомов





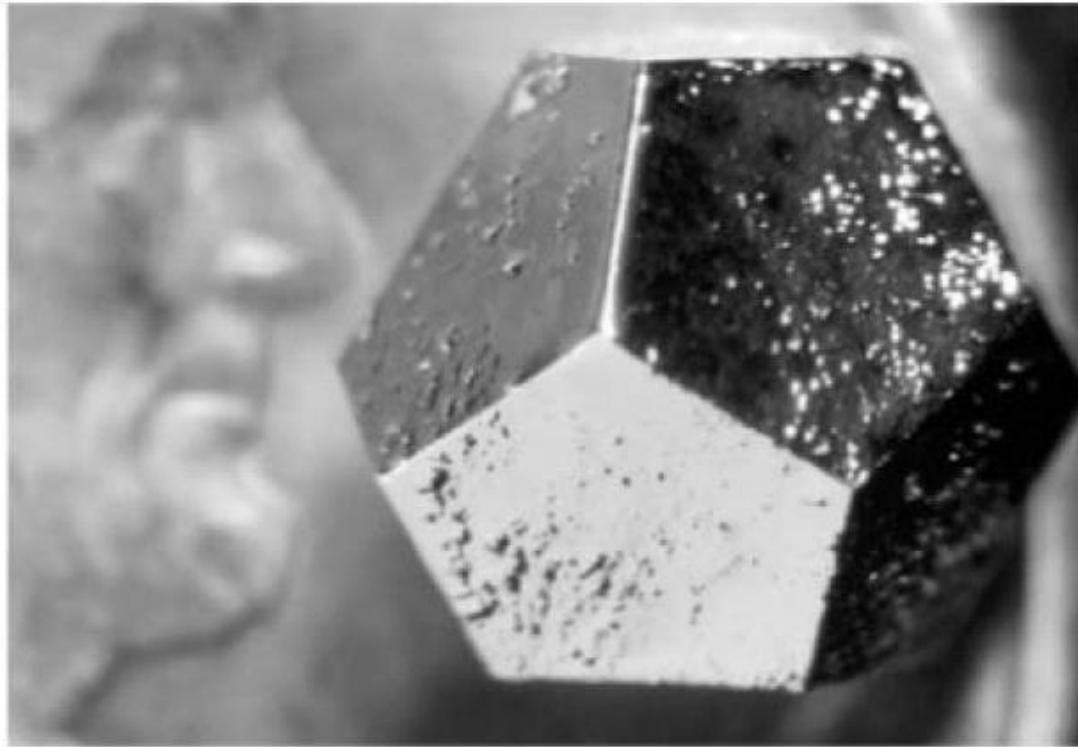
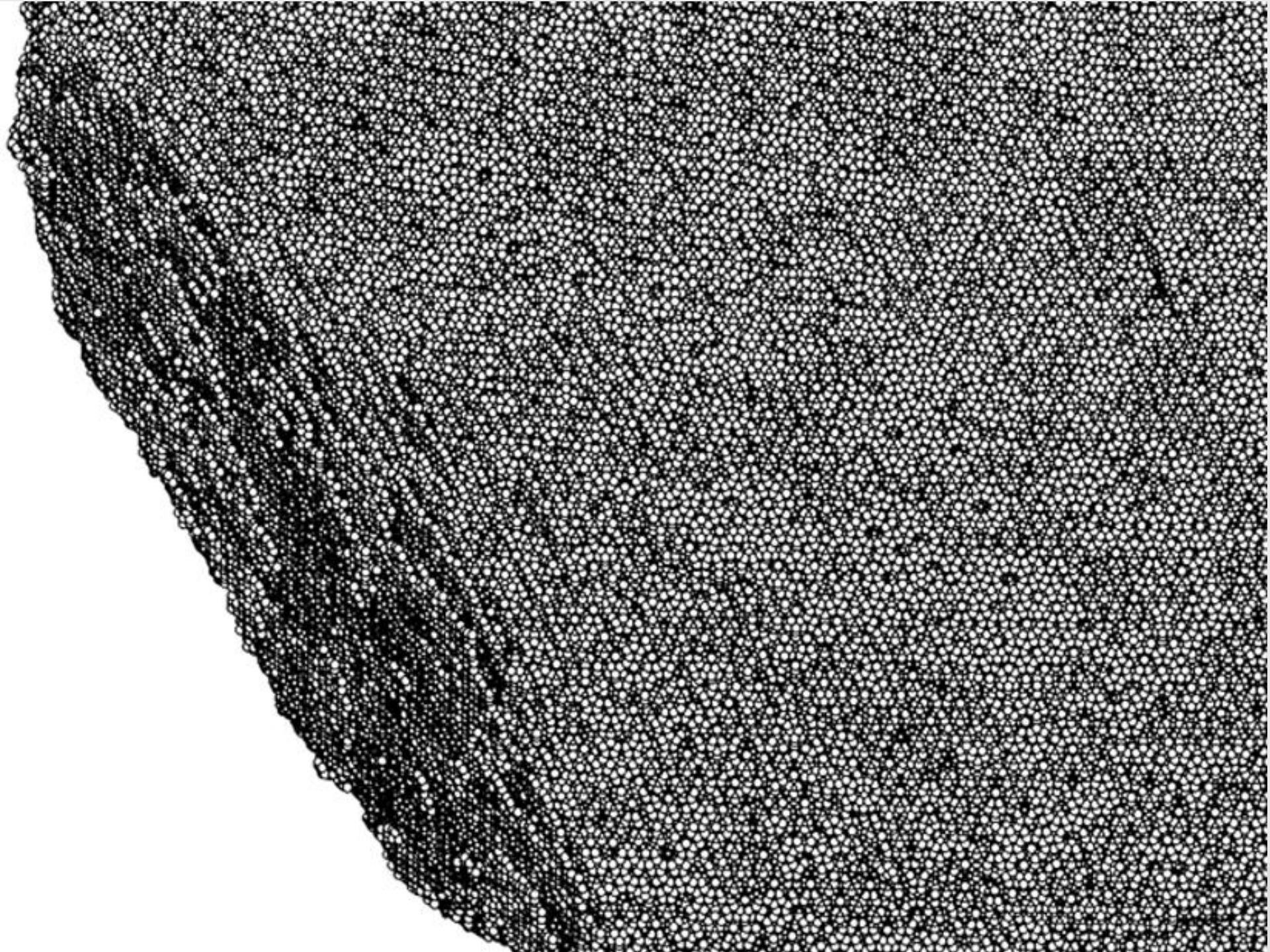
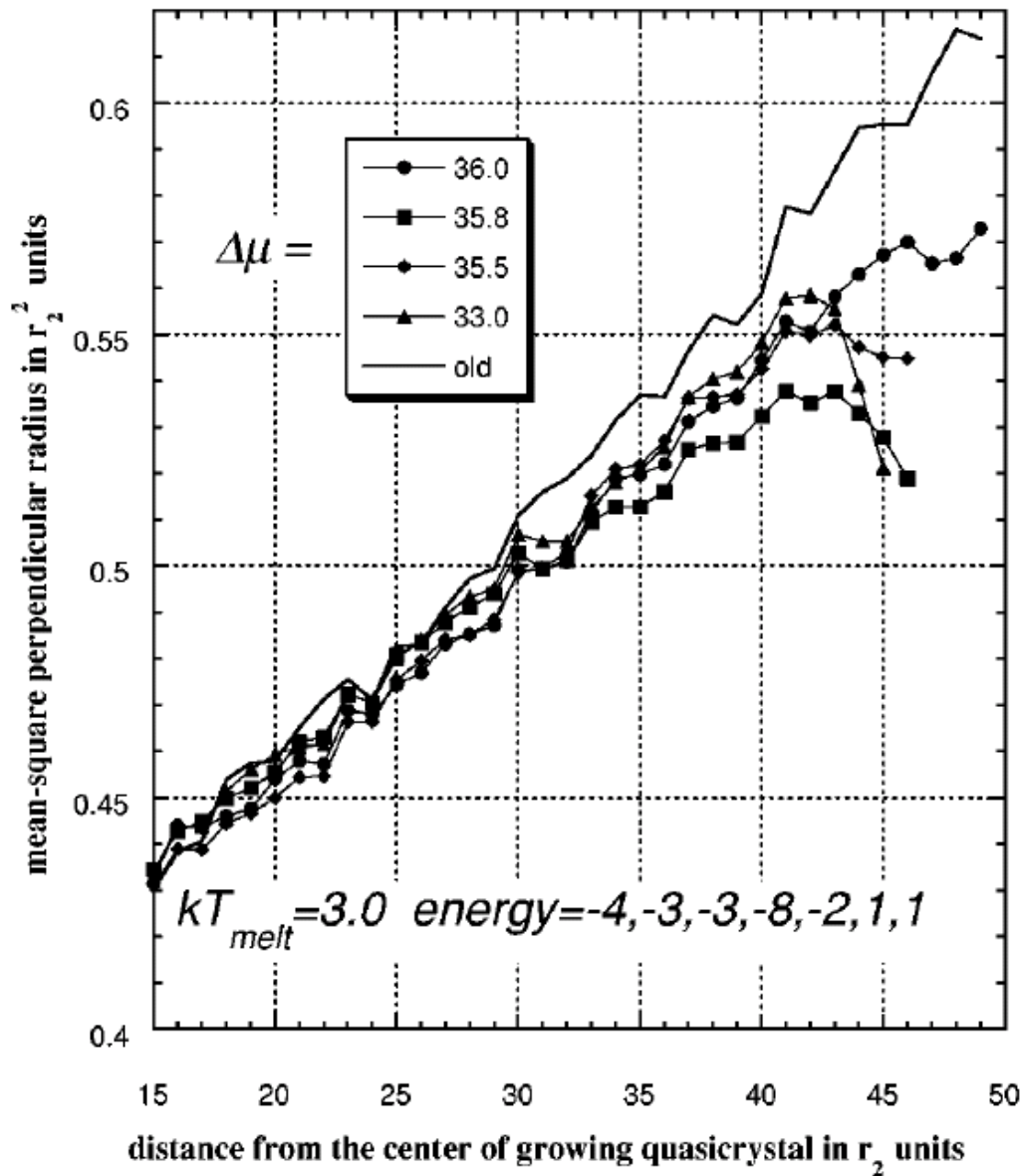
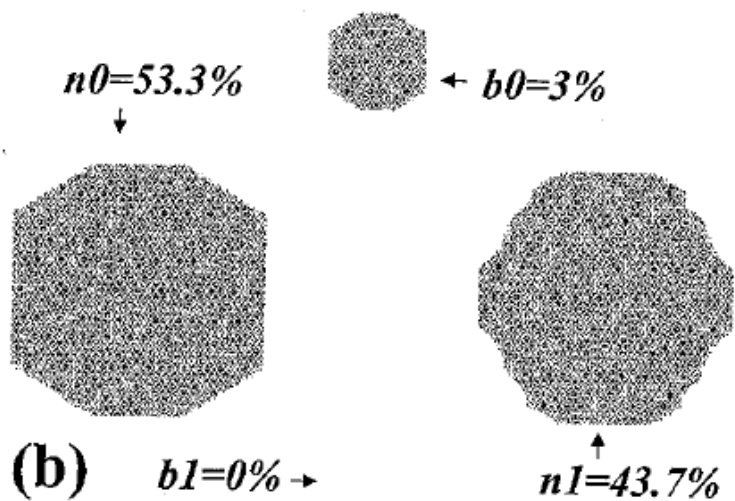
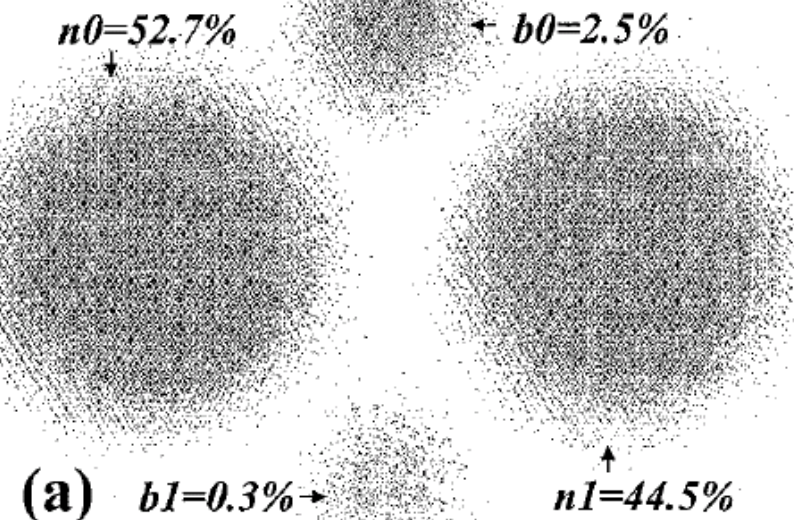
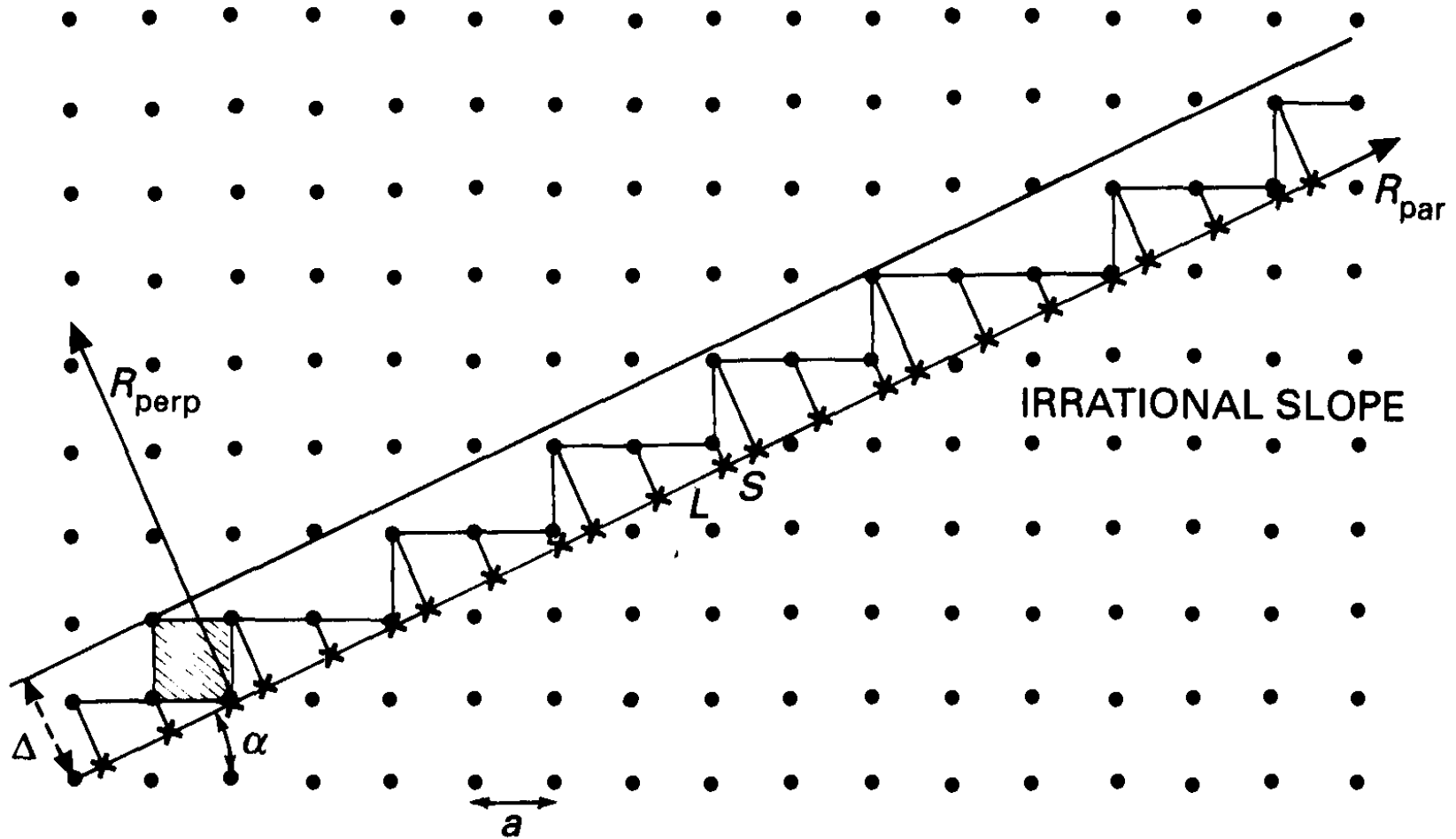


Fig. 1.17. Specimen of icosahedral HoMgZn. Quasicrystals may have the shape of a dodecahedron. Six Miller indices are needed in this case. Photograph courtesy of I. R. Fisher (Stanford) and P. C. Canfield (Ames Laboratory)



# Вид в перпендикулярном пространстве





$$R_{\text{par}} = m + \tau n, \quad R_{\text{perp}} = \tau m - n;$$

FIG. 1.28 A 1-dim illustration of the strip/projection method. The slope of  $R_{\text{par}}$  is irrational. Sites of the portion of the square lattice inside the strip project on  $R_{\text{par}}$  in a perfectly ordered non-periodic structure made of two tiles of incommensurate sizes.

With a slope of  $R_{\text{par}}$  equal to  $\tau$ , the Fibonacci chain is obtained.



# 3d атомные поверхности в $\perp$ пространстве

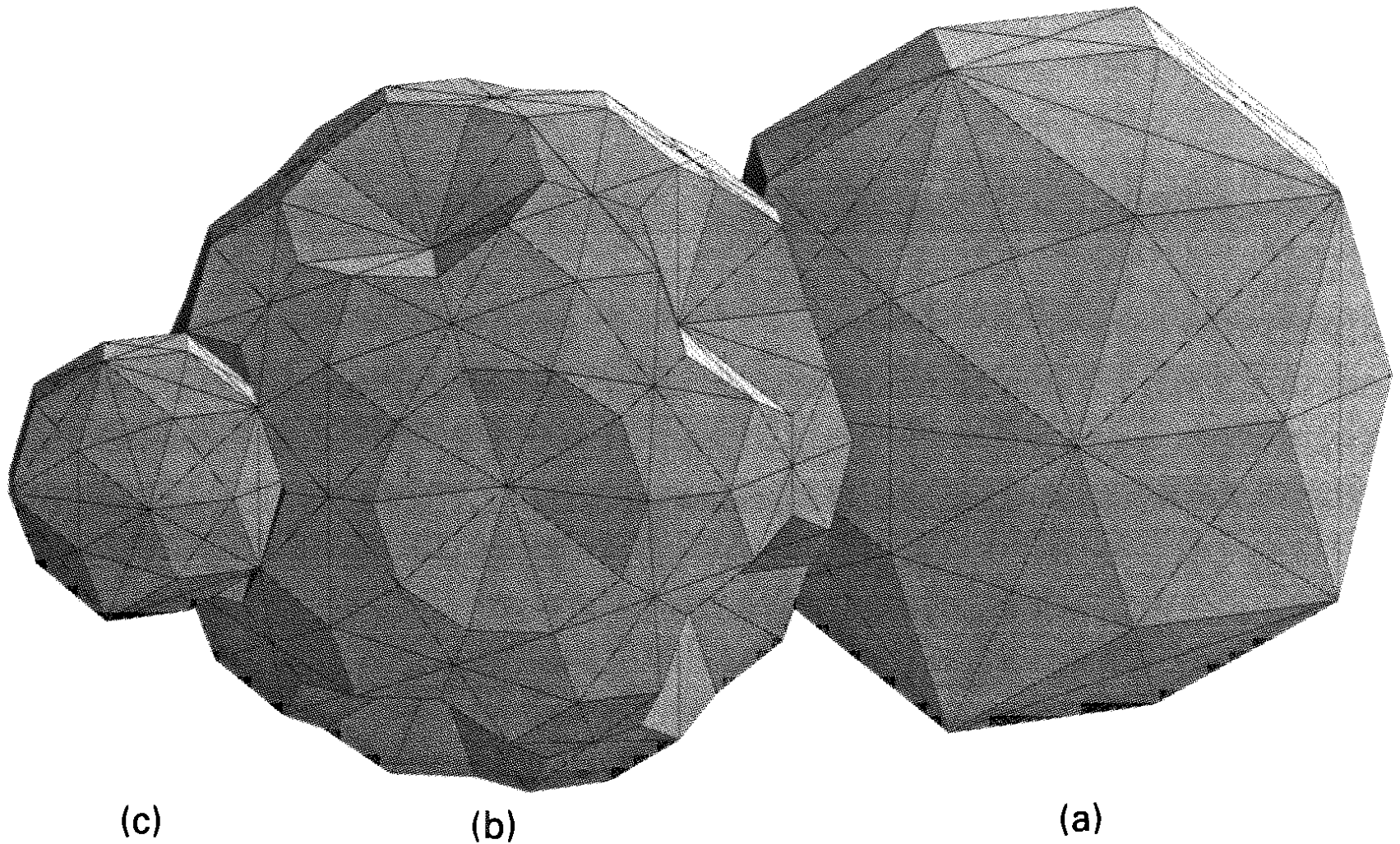
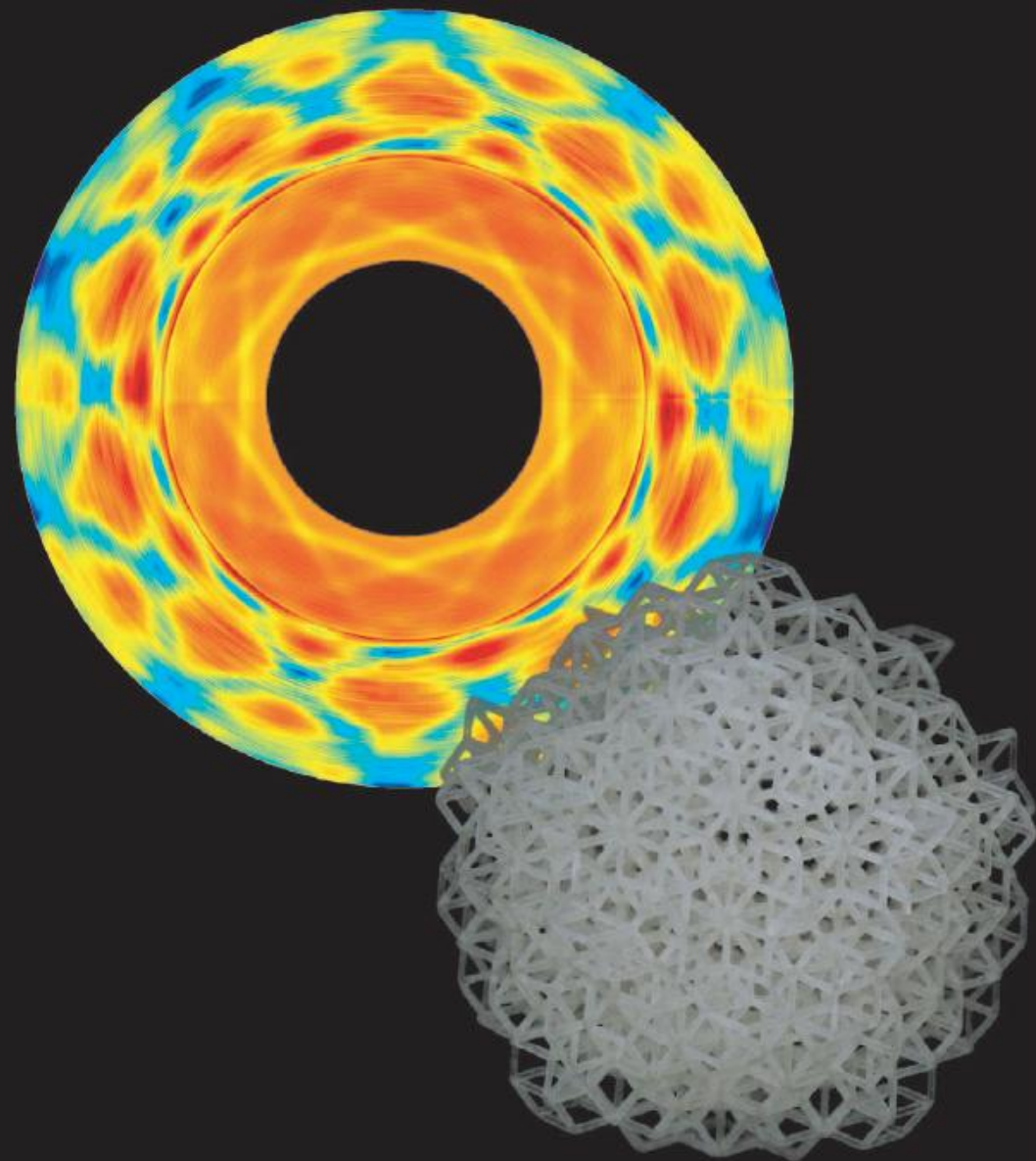


FIG. 4.24 Suggested atomic surfaces for the icosahedral AlFeCu system at sites (a)  $n_1$ , (b)  $m_2$ , and (c)  $bc_1$ <sup>[31-33]</sup> (courtesy of M. Quiquandon).

# Photonic and phononic quasicrystals



**materialstoday** JULY-AUGUST 2006 | VOLUME 9 | NUMBER 7-8

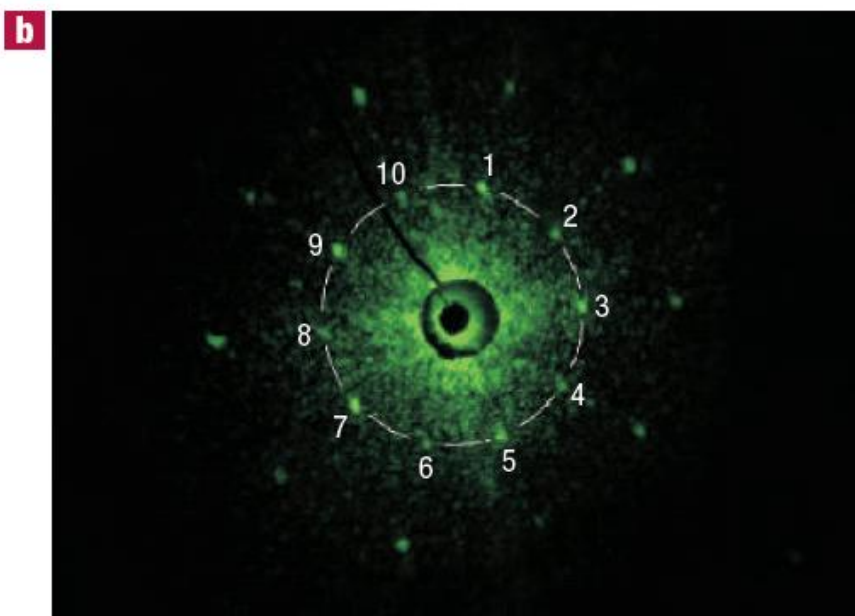
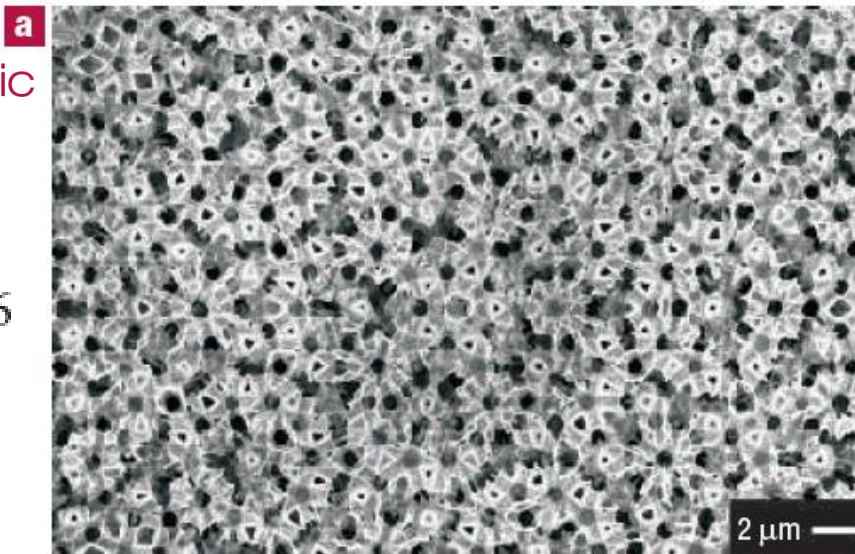
*Icosahedral photonic quasicrystal (white polymer structure) and a visualization of the Brillouin zone of a three-dimensional quasicrystal (the ring with yellow lines indicates nearly symmetrical zone boundaries). (Courtesy of Paul Steinhardt.)*



# Three-dimensional silicon inverse photonic quasicrystals for infrared wavelengths

ALEXANDRA LEDERMANN<sup>1,2\*</sup>, LUDOVICO CADEMARTIRI<sup>3</sup>, MARTIN HERMATSCHWEILER<sup>1,2</sup>,  
COSTANZA TONINELLI<sup>4</sup>, GEOFFREY A. OZIN<sup>3</sup>, DIEDERIK S. WIERSMA<sup>4</sup>, MARTIN WEGENER<sup>1,2</sup>  
AND GEORG VON FREYMAN<sup>2,5</sup>

nature **materials** | VOL 5 | DECEMBER 2006

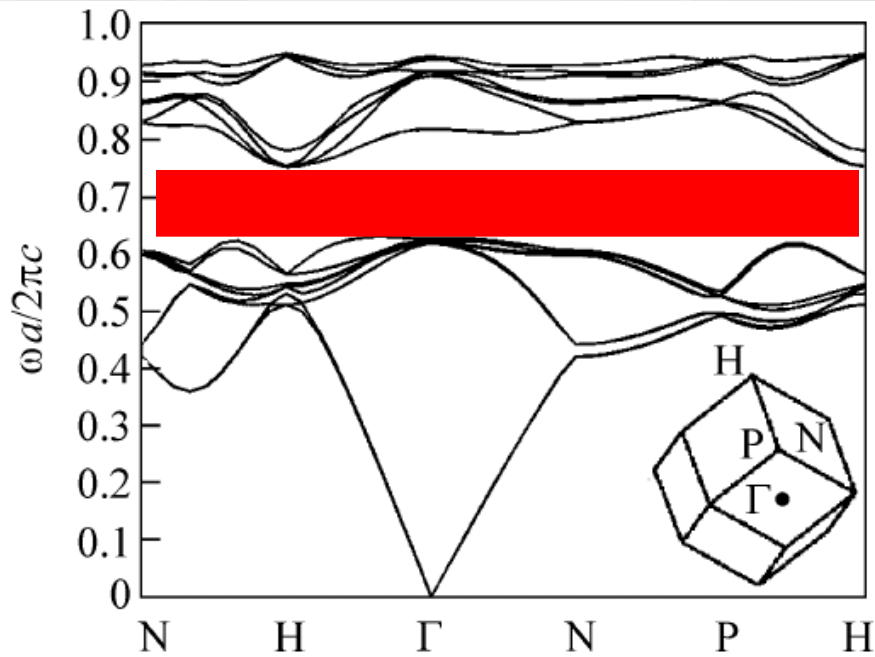


**Figure 3** Silicon inverse quasicrystal. **a**, Electron micrograph showing the inverse of the template depicted in Fig. 2a. **b**, Corresponding Laue diagram (compare with Fig. 2b).

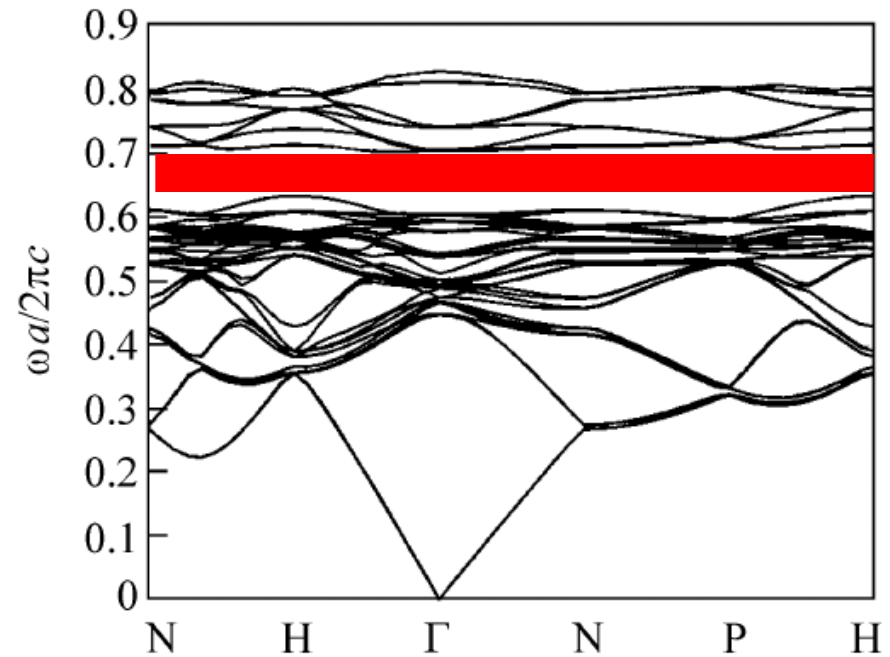
# Three-Dimensional Photonic Quasicrystal with a Complete Band Gap

P. N. Dyachenko<sup>a</sup>, Yu. V. Miklyaev<sup>a</sup>, and V. E. Dmitrienko<sup>b</sup>

JETP Letters, **86**, 240 (2007).



**Fig. 1.** Band structure of the 1/0DR approximant. The dielectric filling factor is  $f = 22.7\%$ , and the relative permittivity is  $\epsilon = 12$ . The size of the complete band gap is  $\Delta\omega/\omega_m = 17.6\%$ .



**Fig. 2.** Band structure of the 1/1DR approximant. The relative permittivity is  $\epsilon = 12$  and the dielectric filling factor is  $f = 23.8\%$ . The size of the complete band gap is  $\Delta\omega/\omega_m = 10.3\%$ .

## Выводы

- Вполне возможно, что в  $Al_6Mn$  Шеффтман наблюдал аппроксиманты. Но открыл квазикристаллы!
- Полного ответа на вопрос «Почему растут квазикристаллы?» пока нет.
- Очевидных применений тоже нет.
- Нужны идеи и, может быть, Нобелевская премия их стимулирует.

Спасибо!

# Определение пространственных групп кубических аппроксимантов и фаз рефлексов из теории Ландау

2. Попробуем теперь установить, к каким именно кубическим пространственным группам могут принадлежать рассматриваемые структуры. Для этого используем описание перехода изотропная жидкость — кристалл в рамках теории Ландау, в которой параметром порядка являются фурье-гармоники плотности  $\rho_{\mathbf{G}}$ <sup>2,3</sup>. Хотя такой подход заведомо не годится для количественного описания процесса кристаллизации, можно надеяться, что качественные результаты, такие как пространственная симметрия упорядоченной фазы и знаки фурье-гармоник  $\rho_{\mathbf{G}}$  окажутся правильными. Так как нас интересует структура низкотемпературной фазы, а не температура перехода, мы выберем свободную энергию  $F$  в простейшем виде

$$F = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} (-\rho^3 + \rho^4) = - \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2} \rho_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2} \rho_{-\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2} + \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3} \rho_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2} \rho_{\mathbf{G}_3} \rho_{-\mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_3}, \quad (1)$$

где  $V$  — объем, а  $\rho(\mathbf{r})$  — плотность кристалла. Рассмотрим функционал (1) для групп  $T^1$ - $P23$  и  $T^4$ - $P2_13$ , которые являются подгруппами всех остальных кубических групп. Ис-

*$Pm\bar{3}$ ,  $Pa\bar{3}$ ,  $Im\bar{3}$ ,  $I2_13$*



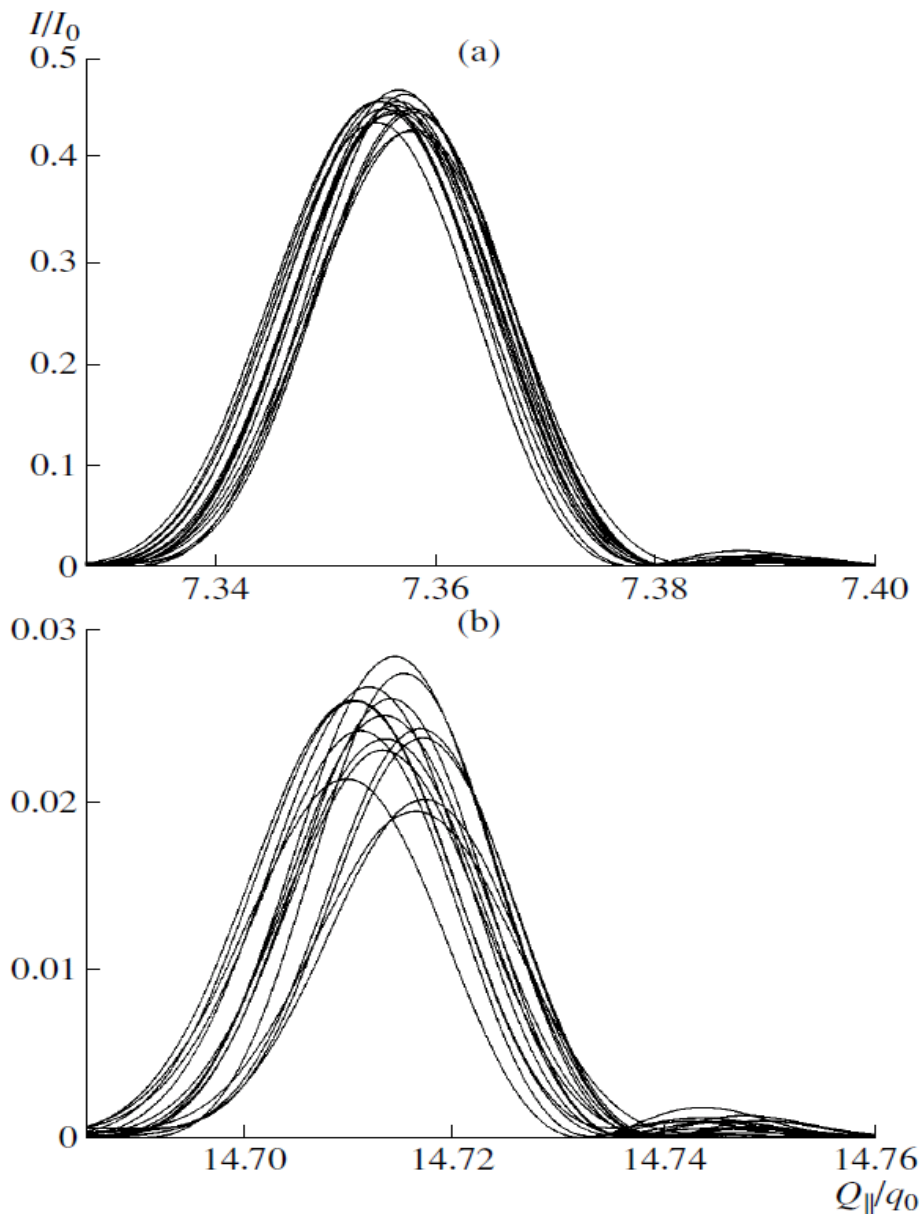
# Малые и средние аппроксиманты

Table 1. Positions of atoms and icosahedral holes in cubic approximants with DLO

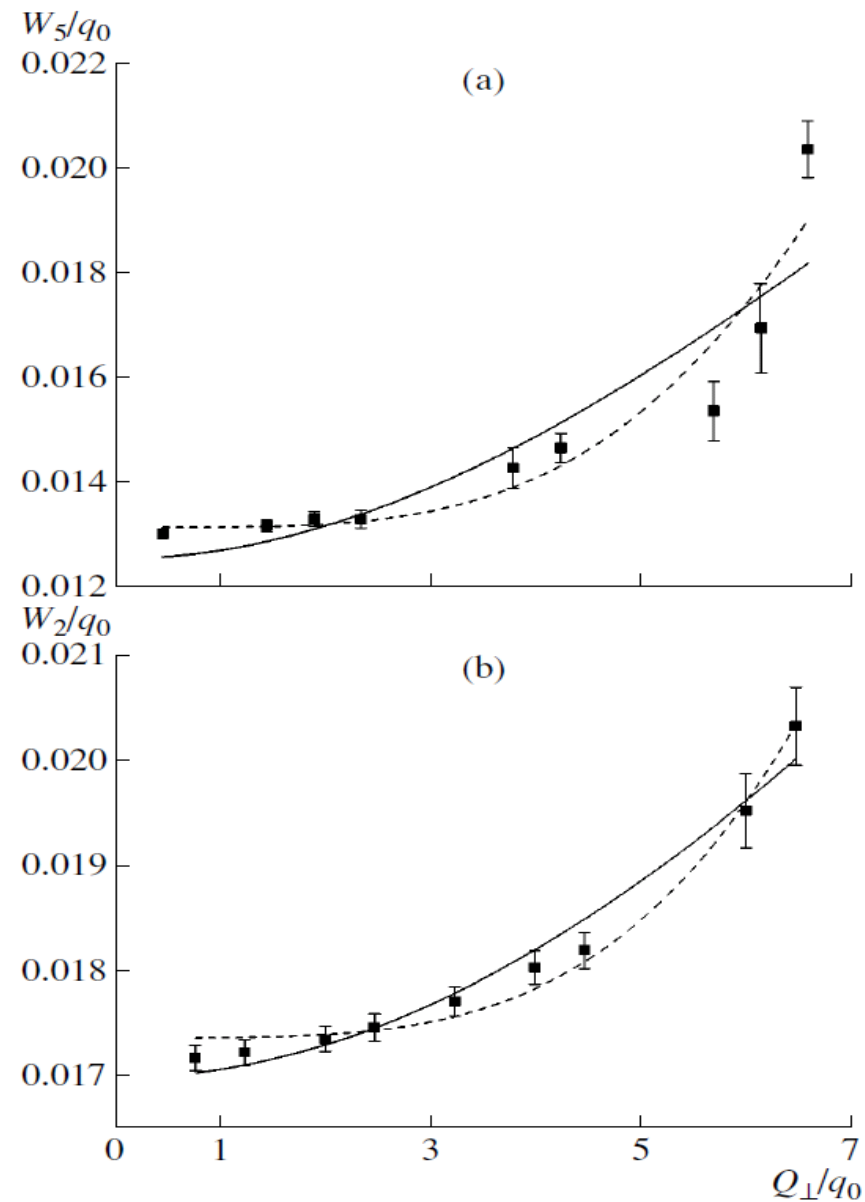
The hole marked by an asterisk is not icosahedral. Experimental values are given for the first compound of each approximant; for  $\alpha$ -AlMnSi we take those positions that are less distorted by the atoms in the  $i$ -holes.

Label	Examples	Elser-Henley notations	Theoretical $(x,y,z)$ coordinates in a unit cell	Experimental $(x,y,z)$ coordinates in a unit cell	$(N'_b N_b N_c)$ or $(N'_a N_a)$	Six-dimensional indices
$\langle 1/1 \rangle$	FeSi	1/-1	(0,0,0)	(0,0,0)	(068)	000000
	AlPd		(0.5,0.5,0.5)	(0.5,0.5,0.5)	(068)	000111
$\langle 2/1 \rangle_a$	FeSi	0/1	(0.845,0.845,0.845)	(0.844,0.844,0.844)	(067)	111000
	AlPd		(0.155,0.155,0.155)	(0.136,0.136,0.136)	(067)	000000
$\langle 2/1 \rangle_b$	PdF <sub>2</sub>	0/1	(0.345,0.345,0.345)	(0.343,0.343,0.343)	(067)	000111
	FeS <sub>2</sub>		(0.655,0.655,0.655)	(0.657,0.657,0.657)	(067)	000000
	Pyrites		(0,0,0)	(0,0,0)	-	*hole
$\langle 3/2 \rangle$	Au <sub>3</sub> NaSi	1/0	(0.095,0.095,0.095)	(0.097,0.097,0.097)	(067)	000000
	Au <sub>3</sub> NaGe		(0.214,0.095,0.405)	(0.226,0.133,0.408)	(066)	001000
			(0.405,0.405,0.405)	(0.381,0.381,0.381)	(39)	$i$ -hole
$\langle 5/3 \rangle_a$	Al <sub>5</sub> Li <sub>3</sub> Cu	1/1	(0.191,0.191,0.191)	(0.187,0.187,0.187)	(067)	000000
	Mg <sub>32</sub> (AlZn) <sub>49</sub>		(0,0.118,0.191)	(0,0.094,0.154)	(075)	010000
	Au <sub>4</sub> Na <sub>3</sub> Si <sub>2</sub>		(0,0.309,0.118)	(0,0.305,0.117)	(076)	010100
	Au <sub>3</sub> Na <sub>2</sub> Sn		(0.118,0.191,0.382)	(0.157,0.190,0.406)	(066)	000001
			(0.427,0,0.5)	(0.404,0,0.5)	(156)	110012
			(0.191,0,0.5)	(0.199,0,0.5)	(058)	101001
			(0.191,0.309,0)	(0.175,0.301,0)	(39)	$i$ -hole
			(0,0,0)	(0,0,0)	(0,12)	$i$ -hole
$\langle 5/3 \rangle_b$	$\alpha$ -AlMnSi	1/1	(0.118,0.191,0.309)	(0.115,0.187,0.300)	(076)	000000
	$\alpha$ -AlFeSi		(0.5,0.191,0.309)	(0.5,0.180,0.308)	(067)	100100
	Sc <sub>57</sub> Rh <sub>13</sub>		(0.5,0.118,0.118)	(0.5,0.120,0.117)	(065)	101100
	Hf <sub>54</sub> Os <sub>17</sub>		(0.118,0.118,0.118)	(0.164,0.100,0)	(067)	001000
			(0.5,0.5,0.118)	(0.5,0.5,0.122)	(156)	111110
			(0,0,0.236)	?	(156)	100010
			(0,0,0)	?	(068)	001111
	(0.309,0,0.5)	(0.290,0,0.5)	(2,10)	$i$ -hole		

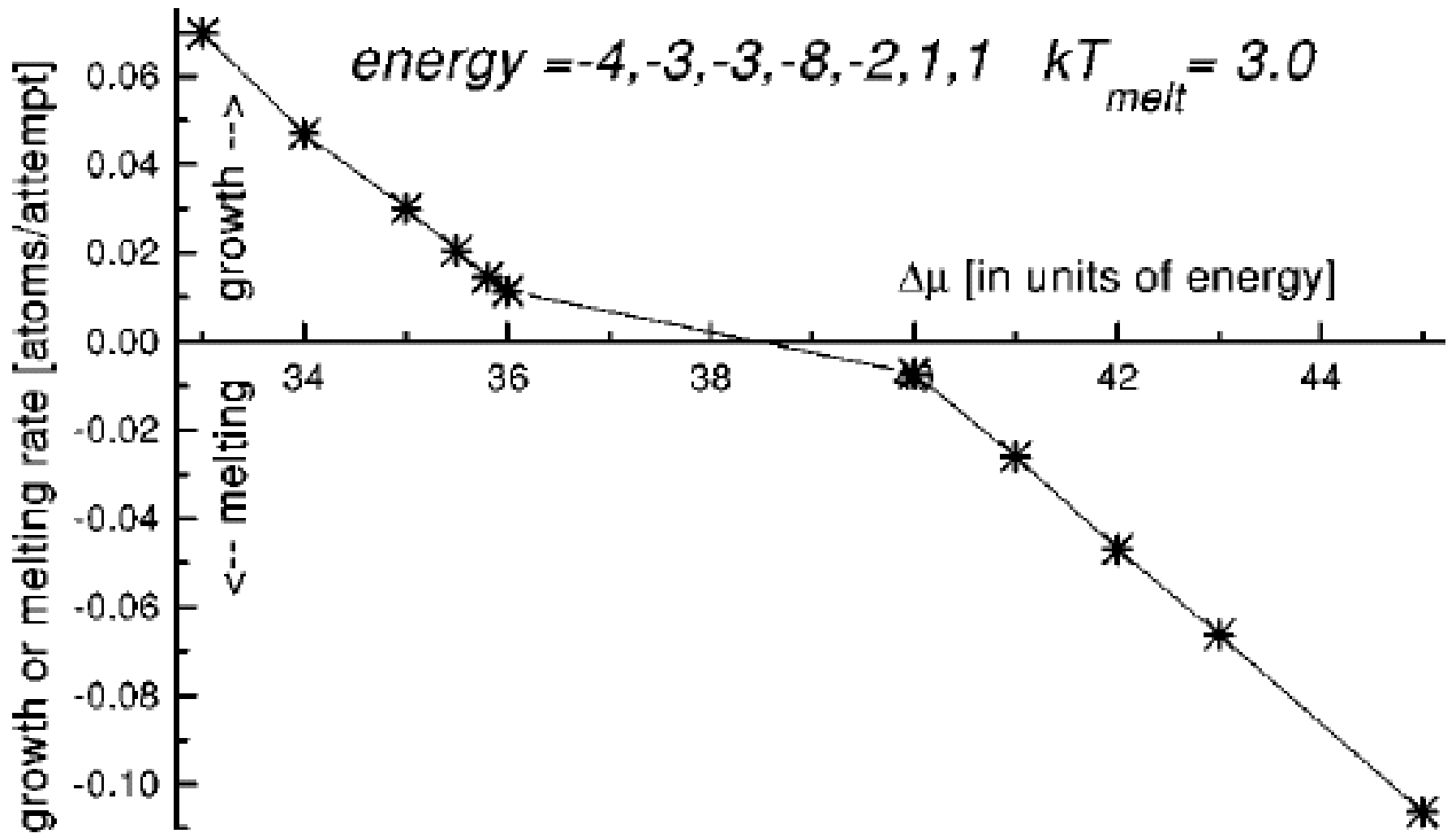




**Fig. 3.** Diffraction peaks along the twofold symmetry axes: (a)  $(00001\bar{1})$  and (b)  $(00002\bar{2})$ . The curves were calculated along all the fifteen twofold axes.



**Fig. 4.** Spectral width of reflections as a function of the magnitude of the perpendicular wave-vector component  $Q_{\perp}$  for reflections located along the (a) fivefold and (b) twofold



Скорость роста(плавления) в зависимости от  
переохлаждения(перегрева)

# Как подавить рост кристалла?

← координационные сферы в квазикристалле

← потенциал взаимодействия

← расстояния в перпендикулярном пространстве

