**Концепция элементарных ячеек для описания структуры икосаэдрических квазикристаллов**

***Мадисон П.А.1,2***

*Ассистент*

*1Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»  
кампус в Санкт-Петербурге, Санкт-Петербург, Россия*

*2Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: palmadis@mail.ru*

Икосаэдрические квазикристаллы представляют фундаментальный интерес для современного материаловедения [1]. Ранее нами были выведены правила подстановок для зоноэдрального разбиения Соколара–Стейнхардта и на их основе был разработан эффективный итерационный алгоритм генерации икосаэдрических упаковок [2,3]. Алгоритм был существенно оптимизирован, благодаря чему стала возможной относительно быстрая генерация крупных фрагментов икосаэдрических упаковок, содержащих десятки миллионов элементарных ячеек.

Для описания структуры икосаэдрических квазикристаллов в качестве альтернативы многомерному подходу предлагается концепция (квази-) элементарных ячеек [4]. По аналогии с периодическими кристаллами структуру икосаэдрических квазикристаллов предлагается описывать с помощью элементарных ячеек. Разница лишь в том, что вместо одной элементарной ячейки следует использовать четыре, а для заполнения ячейками всего пространства вместо трансляций следует использовать итерационный алгоритм инфляций и дефляций. При этом икосаэдрические упаковки описываются как списки ячеек, для каждой из которых задается ее тип, положение и ориентация. На основе разработанного алгоритма сгенерированы достаточно крупные фрагменты всех трех типов упаковки Соколара–Стейнхардта, которые наглядно иллюстрируют основные структурные особенности и иерархические мотивы икосаэдрических квазикристаллов.

Показана принципиальная возможность расчета интенсивностей рефлексов при структурном анализе квазикристаллов без привлечения методов многомерной кристаллографии. Для этого надо сначала рассчитать парциальные структурные факторы для каждого типа элементарных ячеек, а затем усреднить их по объему квазикристалла с использованием выведенных правил подстановок.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда за счет гранта  
№ 23-23-00392,* [*https://rscf.ru/project/23-23-00392/*](https://rscf.ru/project/23-23-00392/)*.*

**Литература**

1. Бобков А.А., Кононова И.Е., Мошников В.А. Материаловедение микро- и наносистем. Иерархические структуры / под ред. В. А. Мошникова. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ “ЛЭТИ”, 2017, 204 с.

2. Madison A.E., Madison P.A. Looking for alternatives to the superspace description of icosahedral quasicrystals // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2019. V. 475. I. 2221. #20180667.

3. Madison A.E., Madison P.A. Structure of icosahedral quasicrystals within the  
multiple-cell approach // Struct. Chem. 2020. V. 31. I. 1. P. 485–505.

4. Мадисон А.Е., Мадисон П.А., Мошников В.А. Концепция элементарных ячеек в теории квазикристаллов // ЖТФ. 2024. Т. 94, № 4, *в печати*.