Письма в ЖЭТФ, том 121, вып. 8, с. 662 – 666

Мозаичная структура квазикристаллов из трех гексагональных атомных слоев

Л. А. Чернозатонский[1)]

Институт биохимической физики РАН, 119334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 марта 2025 г.
После переработки 15 марта 2025 г.
Принята к публикации 16 марта 2025 г.

Предложена ранее не рассматриваемая плиточная структура мозаики квазикристалла из трех гексагональных монослоев с вращательной симметрией 18-го порядка (3QC) при сведении их трех решеток в плоскость. Учет трехмерности плиток на картине мозаик для *Ван-дер-Ваальс*-разнесенных в таком 3QC объекте из одноатомных (C, Si, Ge и др.) решеток приводит к "цветной" симметрии 6-порядка входящей в симметрию 18-го порядка модели неразделенных решеток. Для 3QC из двухатомных (BN, MoS_2 и др.) решеток цветная мозаика имеет симметрию 3-порядка.

DOI: 10.31857/S0370274X25040197, EDN: AUIPXV

Введение. Название "квазикристаллы" впервые появилось в работе [1] для обозначения нового класса упорядоченных структур с дальним порядком и вращательной симметрией в отличие от трансляционного порядка 3D-кристаллов [2]. С пионерской работы Д. Шехтмана и др. [3], где впервые был получен Al–Mn сплав со строго доказанной с помощью дифракции электронов на его атомах структурой симметрии 5-го порядка. Пример плоского ее варианта был опубликован в 1974 году Р. Пенроузом [4]. С тех пор икосаэдрические мозаики с малым набором типов равносторонних плиток носят его имя. Николас Говерт де Брёйн предложил общий, основанный на привлечении многомерных решеток метод построения таких непериодических структур, в том числе и мозаик Пенроуза [5]. Как известно, мозаика квазикристалла играет главную роль в описании его структуры.

После открытия Геймом и Новоселовым графена – 2D кристалла с гексагональной атомной структурой [6] начался поток исследований 2D кристаллов, в частности структур из нескольких молекулярно-связанных таких слоев [7]. А в последнее время большое внимание обращается к так называемым двумерным квазикристаллам (2D-QC), составленным из двух или трех свернутых 2D слоев с гексагональной атомной структурой [8–11]. В первом случае многие эксперименты на бислойных 2D-QC опирались на представление их структуры в виде мозаики додекагонального 12-го порядка, предложенную еще в 1986 г. П. Стампфли [12]. Мозаика на основе сетки из свернутых в плоскости двух перпендикулярных гексагональных решеток строилась из трех видов равносторонних плиток: ромб с углом 30°, треугольник и квадрат со стороной – параметром мозаики P, равным ≈ 3.6 параметра элементарной ячейки а гексагональной решетки), углы плиток которых располагались в "узлах" – центрах колец образованных двумя из разных решеток гексагонами с близко расположенными своими центрами на расстоянии $\delta \leq 0.1a$. Центр квазикристалла – (0)-узел, в котором сходятся двенадцать 30° ромбов, есть центр вращения двух гексагонов с атомами на одной окружности идеального кольца – представлен на рис. 1a. Во всех остальных узлах из-за квазикристаллического порядка сетки ко́льца атомов не являются идеально круглыми. Недавно была рассмотрена модель 2D квазикристалла симметрии 18-го порядка (3QC) из трех гексагональных графеновых решеток (см., рис. S29 в статье [10]), однако его описание останавливалось только на схеме розетки из сходящихся в центральном 0-узле 18-ти 20° ромбов – рис. 1b. Построения графеновых 3QC мозаик ранее не проводились.

В данной работе, используя реконструированный метод построения П. Стампфли, рассматривается новая мозаика 3QC из плиток четырех типов (20°-ромб, 40°-ромб, треугольник, 80°-ромб) с равными сторонами длиной $8a$ – параметром мозаики. Построение, как и в [12], основано на рассмотрении сетки теперь уже трех гексагональных $(-20, 0, 20)$ решеток повернутых относительно друг друга под углом 20°.

Методы и результаты. Вначале мы используем представление свернутых гексагональных реше-

1) e-mail: chernol-43@mail.ru

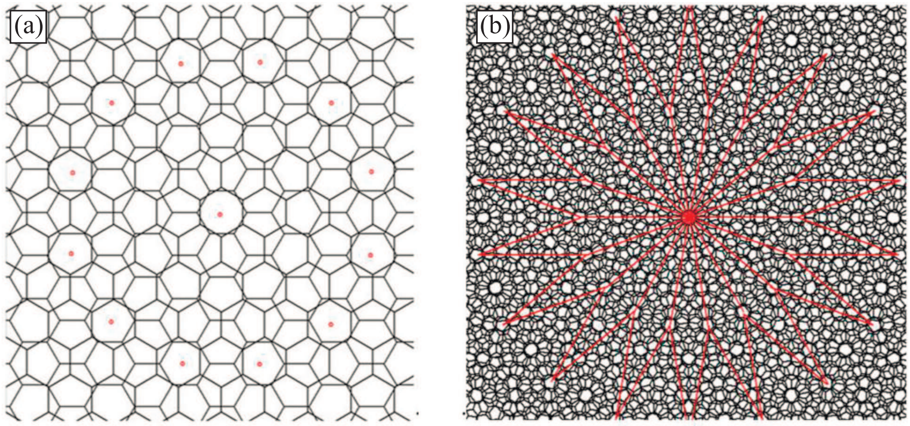

Рис. 1. (Цветной онлайн) Схемы центральных областей квазикристаллов в модели сведенных в одну плоскость гексагональных решеток с тонкими линиями: (a) – 2QC сетка из двух свернутых под 30о углом решеток [12] и (b) – 3QC сетка трех свернутых под 20° решеток [9] с вращательными симметриями 12-го и 18-го порядка. Красными точками и линиями обозначены, соответственно, первые 12 узлов мозаичной 2QC розетки и розетка из 18-ти 20° ромбов

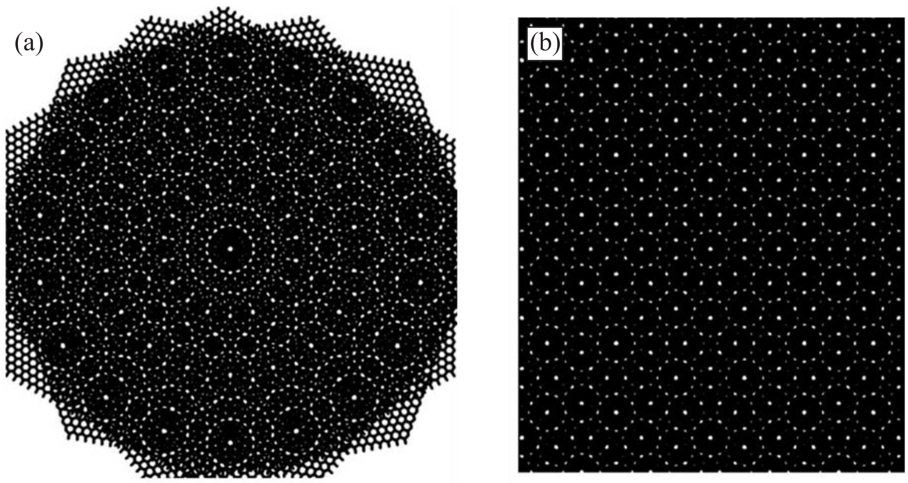

Рис. 2. Схемы центральных областей квазикристаллических сеток в модели гексагональных решеток с широкими линиями, наглядно представляющие симметрию квазикристаллов по распределению наибóльших по размеру белых пятен: (a) – 18-го порядка для 3QC и (b) – 12-го порядка для 2QC

ток с широкими ($\delta \leq 0.5a$) линиями – рис. 2. Оно позволяет выявить размещение сетки больших белых пятен (диаметра $\approx a$) на сетке при таком методе ее описания.

Сопоставляя узлы, отстоящие от 0-центра по радиусу $R1 = P$ на рис. 2 с первыми узлами мозаик на рис. 1, нетрудно определить расположение розеток мозаик квазикристаллов 3QC и 2QC.

На рисунке 3 приведен 20° сектор 3QC квазикристалла, заполненный мозаичными плитками, т.е. без учета реальной толщины, как у П. Стампфли [12]. Следующим шагом выделяем сектор 20° на полученной схеме с белыми пятнами – рис. 2. Из двух узлов центральных 20° ромбов, расположенных на окружности радиуса $R2 = P2\cos 20°$, проводим окружности радиусом, равным параметру P, которые пересекаются в следующем узле, отстоящим от 0-центра на расстояние $R3 = P(1 + 2\cos 20°)$. Он является вершиной ближайшего 40° ромба. Пересечением P-окружности, проведенной из точки 40° ромба с границами сектора, определяем положения вершин 80° ромба на окружностях из центра с радиусами $R4 = R3 + P\cos 40°$ $R5 = R4 + P\cos 40°$ (и т.д.). Из дальней от центра вершины 80° ромба, повторяя ту же процедуру, находим вершины 60° ромба, составленного из двух треугольников.

Таким же способом получаем точки-узлы "лежащих" 40° ромбов на радиусах 6, 7 и 8 (рис. 3). Последовательно повторяя ту же процедуру с дальними от 0-центра вершинами уже найденных ром-

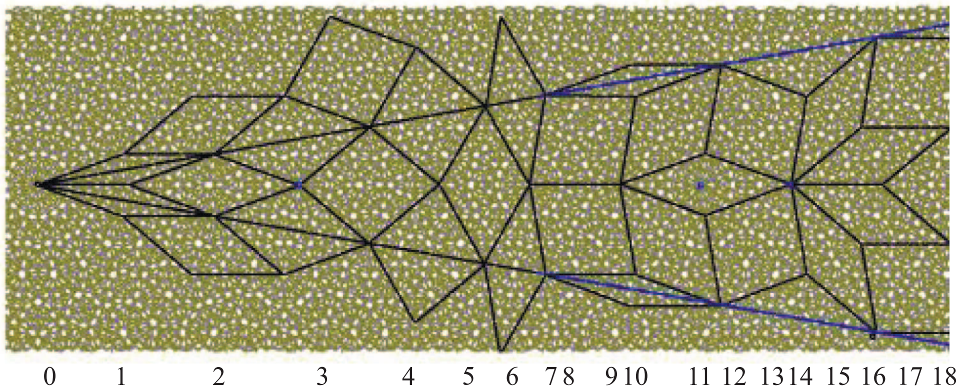

Рис. 3. (Цветной онлайн) 20° сектор 3QC мозаики, в котором располагаются плитки всех типов. Цифрами указаны расположенные на радиусах R_i вершины ромбических плиток мозаики (узлы атомной сетки). Синими точками на биссектрисе обозначены узлы, в каждом из которых большое белое пятно находится внутри трех решеточных гексагонов размером, близким к идеальной окружности самого большого белого пятна 0-центра

бов, определяем положение следующих по дальности от 0-центра мозаики. Восстанавливая на картине рис. 2 и 3 тонкие линии трех гексагональных решеток, мы можем восстановить положение гексагонов трех решеток в окрестности любого узла муаровой сетки. Такая, как в любом квазикристалле, 3QC мозаика обладает свойством инфляционного плиточного заполнения плоскости. Инфляционная расширяющаяся картина (инфляция (с лат. *inflation* – "вздутие") возникает при увеличении параметра мозаики P плиток на фактор $(1 + 2\cos 20^\circ)$. На рисунке 4 показан только один 20° ромб розетки последующей инфляционной 3QCi мозаики, возникающей без поворота 3QC мозаичной сетки (в отличие от мозаики StI, где она повернута от первоначальной на 15° [12].

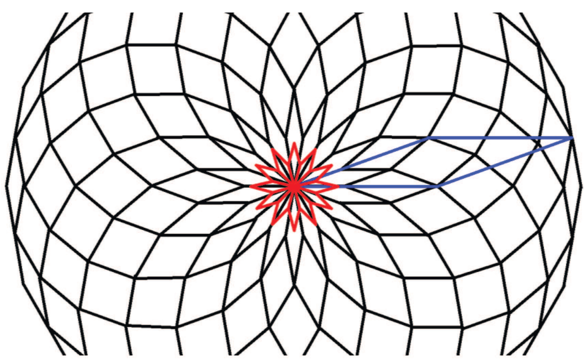

Рис. 4. (Цветной онлайн) Вид сеток мозаик квазикристаллов из одних и тех же гексагональных решеток на площади круга радиусом $R8$: 3QC (черный цвет) и 2QC (красный цвет – только розетка мозаики). Для сравнения, синим цветом обозначен 20° ромб розетки инфляционной 3QD мозаики

Трехмерность 3QD квазикристалла из разнесенных на расстояние Ван-дер-Ваальса трех атомных решеток требует построить на плоскости 3QD мозаику на сетке трех решеток, придавая каждой свой цвет – рис. 5 для выделения разной внутренней структуры ее ромбов, которая меняется с поворотом в соседнем ромбе. Отметим, что такая процедура проводилась ранее в работе [14] для мозаики свернутого биграфена с двухцветной для двух гексагональных сеток вращательной симметрией 6 порядка, в отличие от 12-й симметрии мозаики без учета трехмерности биграфена.

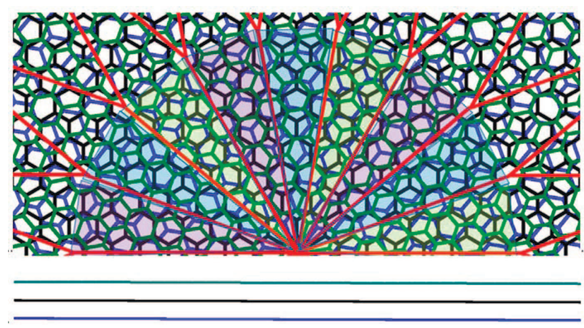

Рис. 5. (Цветной онлайн) Схема центра 3QC сетки из трех свернутых гексагональных решеток, выделенных разными цветами ("-20" – зеленый верхний, "0" – черный средний, "20" – синий нижний)

Три плитки 3QC мозаики, сходящиеся в 0-центре 20°-ромбов в трех соседних секторах (рис. 5) оказываются с различной повернутой на 20° внутренней структурой. Они повторяются в мозаичной картине при повороте на угол 60°. Таким образом оказывается, что плитки одного и того же типа имеют разное решеточное строение в каждой тройке соседних секторов мозаики (все решетки в одной плоскости – рис. 6) в отличие от одноцветной мозаики с 18-тью

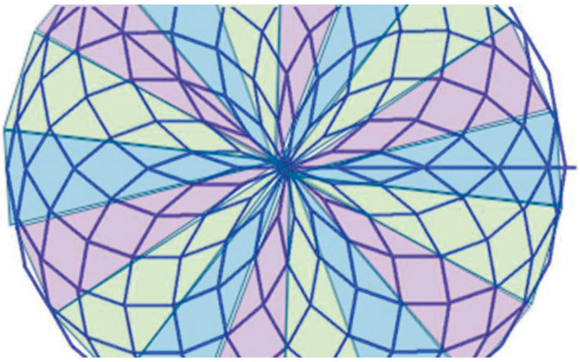

Рис. 6. (Цветной онлайн) Мозаика 3QC квазикристалла с выделенными цветными секторами с разной внутренней структурой

одинаковыми секторами (рис. 1b), где все три решетки неразличимы в модели с их переносом в одну плоскость. Следовательно, 3QC объект имеет цветную вращательную симметрию 6-го порядка – аналог цветной симметрии Белова для 3-х мерных кристаллов с магнитной структурой [13]. В схеме новой цветной мозаики 3QC квазикристалла из трех разно-повернутых секторов (рис. 6) видна ее симметрия 6-го порядка при 3-мерном расположении гексагональных решеток.

Заключение. Таким образом, мы представляем метод построения мозаики квазикристаллов из трех гексагональных атомных слоев, применимый не только к графенам, но и к другим 2D одноатомным слоям (силиценам, германенам, и др. [7]), а также для двухатомных ((BN, MoS_2 и др.) и др.) решеток, цветная мозаика такого 3QC квазикристалла имеет симметрию 3-порядка и шесть разных по решеточному строению секторов. Так, при плоском построении мозаики трехмерного 3QD квазикристалла применено ее трехцветное представление, по которому по внутреннему узору плиток точно определяются средний, верхний и нижний слои гексагональных решеток. Установление этого факта дает возможность определять отдельные свойства квазикристаллов, связанных с их цветной вращательной симметрией, подобно свойствам кристаллов, обладающих описываемой цветными группами симметрий Белова [13]. Отметим, что реконструированный метод Стампфли был ранее приложен к построению цветных мозаик для квазикристаллов из свернутого биграфена (GQC) с симметрией 6-го порядка [14] или из двух свернутых h-BN слоев без центра инверсии в диамановом BN-квазикрислалле с симметрией 3-го порядка – квазикристалле BN-2QC с адсорбированными H(F) атомами [16]). Поэтому такая мозаика строится из шести секторов разных цветов, аналогично ранее рассмотренному (рис. 5) построению мозаики 3QC квазикристаллов из гексагональных одноатомных решеток.

Как известно, в биграфеновом квазикристалле в окрестности колец происходит локализация электронной плотности из-за сильного электрон-электронного взаимодействия в близко расположенных атомах, что проявляется в виде узких "плоских" минизон электронного спектра, которые играют основную роль в уникальных свойствах таких графеновых структур. Так, было показано в обзоре [10], что фрактальные узоры локализованных состояний 2QC спектра согласуются с его мозаичной структурой. Недавно и в геликоидальном трехслойном графене было теоретически показано существование топологических зон и коррелированных состояний [14]. Поэтому в 3QC в узлах описанной нами мозаики также следует ожидать подобных особенностей, которые могут проявиться в его электронном и оптическом спектрах.

Квазикристаллы из трех атомных слоев могут служить платформой для создания новых псевдодвумерных алмазо-подобных материалов с адсорбированными атомами на их поверхностях (аналогов QC диаманов [13, 15]), которые будут обладать новыми физическими свойствами, связанными с описанной нами симметрией 3QC структур. Изменение симметрии в таких 3QC относительно симметрии монослоя и бислоя позволяет исследовать возможности применения таких QC в качестве элементов опто- и механо-электрических наноустройств. Используя цветное изображение мозаики (рис. 5), можно не только находить дефекты на каждом из слоев при рассмотрении атомной картины квазикристалла методами электронной микроскопии, на которой трудно различить атомы столь близко расположенных слоев (см., например, [7–10]), но и выявить особенности их оптических свойств и комбинационного рассеяния света при вращении его поляризации в оптоэлектронных экспериментах на 3QC квазикристаллах.

Рассмотренная мозаика будет подспорьем в нахождении особенностей новых трехслойных 3QC квазикристаллов.

Автор благодарен В. М. Бухштаберу, Н. П. Долбилину и В. А. Демину за неоднократные обсуждения и ценные замечания.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики имени Н. М. Эмануэля Российской академии наук. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. D. Levine and P. J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. **53**, 2477 (1984).
2. V. A. Koptsik, *General Results of Crystal Structure Analysis of Minerals*, ed. by A. S. Marfunin, Springer, Berlin, Heidelberg (1994), p. 50.
3. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
4. R. Penrose, Bull. Inst. Mathematic and Its Applications **21**, 226 (1974).
5. N. G. de Bruijn, Nederl. Acad. Wetensch. Indag. Mat. **43**(1), 39 (1981).
6. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
7. K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, and A. H. Castro Neto, Science **353**(6298), aac9439 (2016).
8. S. J. Ahn, P. Moon, T. H. Kim, H. W. Kim, H. C. Shin, E. H. Kim, H. W. Cha, S. J. Kahng, P. Kim, M. Koshino, Y. W. Son, C. W. Yang, and J. R. Ahn, Science **361**, 782 (2018).
9. W. Yao, C. Bao, Y. Zhang, K. Zhang, K. Bao, C. K. Chan, C. Chen, J. Avila, M. C. Asensio, J. Zhu, and S. Zhou, Proc. Natl Acad. Sci. USA **115**, 6928 (2018).
10. C. S. Tsang, X. Zheng, T. Yang, Z. Yan, W. Han, L. W. Wong, H. Liu, S. Gao, K. H. Leung, C.-S. Lee, S. P. Lau, M. Yang, J. Zhao, and T. H. Ly, Science **386**, 198 (2024).
11. K. J. U. Vidarte and C. Lewenkopf, Frontiers in Carbon **3**, 1496179 (2024); DOI: 10.3389/frcrb.2024.1496179.
12. P. Stampfli, Helv. Phys. Acta **59**, 1260 (1986).
13. В. В. Белов, В. И. Тархова, Кристаллография **1**(1), 4 (1956).
14. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, A. G. Kvashnin, and D. G. Kvashnin, Appl. Surf. Sci. **572**, 151362 (2022).
15. L. Q. Xia, S. C. de la Barrera, A. Uri, A. Sharpe, Y. H. Kwan, Z. Zhu, K. Watanabe, T. Taniguchi, D. Goldhaber-Gordon, L. Fu, T. Devakul, and P. Jarillo-Herrero, Nature Phys. **21**, 239 (2025).
16. L. A. Chernozatonskii and A. I. Kochaev, Crystals **13**(3), 421 (2023).