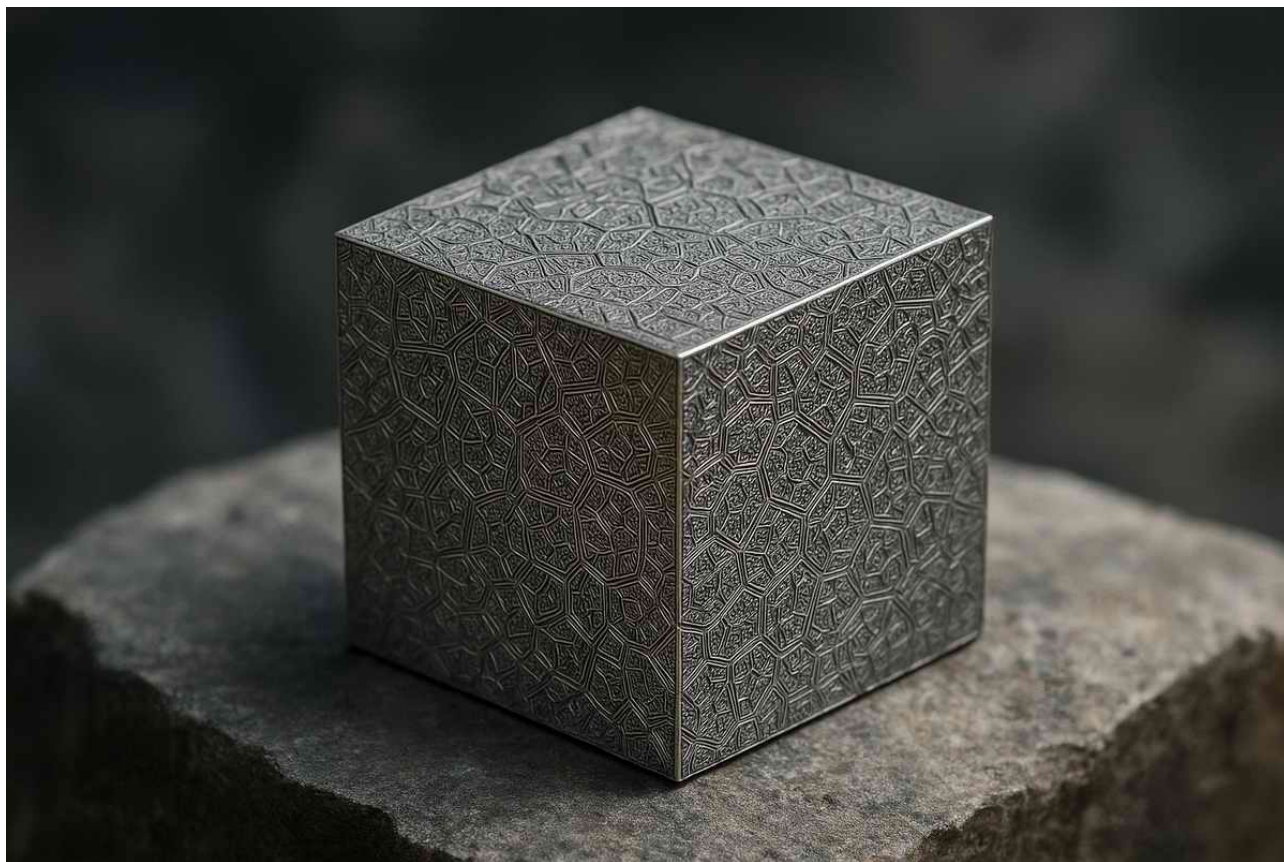


Квазикристаллы оказались фундаментально стабильными: конец 40-летней научной загадке



Дата публикации: 12.08.2025

Квазикристаллы — удивительное состояние вещества, находящееся на границе между строгим порядком кристаллов и хаотичной структурой стекла, — на протяжении сорока лет оставались предметом ожесточённых научных споров. В отличие от обычных кристаллов, их атомная решётка никогда не повторяется, но при этом сохраняет высокий уровень упорядоченности. Теперь, благодаря первому в истории квантово-механическому моделированию этих структур, удалось показать, что квазикристаллы являются не случайными и нестабильными образованиями, а фундаментально устойчивыми формами материи. Это открытие меняет наше понимание законов кристаллографии и открывает возможности для создания материалов с уникальными свойствами, нарушающими привычные правила.

История квазикристаллов началась в 1984 году, когда израильский исследователь Даниэль Шехтман, изучая сплав алюминия и марганца, обнаружил атомную структуру с пятикратной симметрией. Это было революционным открытием, так как считалось, что подобная симметрия

невозможна в твёрдых телах. Первоначально идея вызвала скептицизм, но вскоре квазикристаллы были синтезированы в других лабораториях и даже обнаружены в метеоритах, возраст которых исчисляется миллиардами лет. В 2011 году за своё открытие Шехтман получил Нобелевскую премию по химии, однако вопрос о том, что делает квазикристаллы стабильными, оставался открытым.

Обычные кристаллы формируются так, чтобы химические связи минимизировали энергию системы — это энтальпийная стабилизация. Стекло и аморфные материалы, напротив, удерживаются в своём состоянии благодаря энтропии — множеству возможных расположений атомов. Квазикристаллы оказались уникальным промежуточным случаем: их структура локально упорядочена, как в кристаллах, но не имеет дальнедействующего периодического повторения. Чтобы определить их природу, исследователи применили новый метод квантового моделирования, в котором анализировались не бесконечные структуры, а конечные наночастицы, извлечённые из квазикристаллического массива. Вычисляя энергию таких фрагментов и масштабируя результаты, удалось экстраполировать поведение всей структуры.

Моделирование показало, что два известных квазикристалла — сплав скандия с цинком и сплав иттербия с кадмием — стабилизированы по энтальпии. Это значит, что они занимают минимально возможное энергетическое состояние для своих атомных комбинаций, и их образование не требует экстремальных условий охлаждения. Такой результат опровергает давнюю гипотезу, что квазикристаллы — лишь «замороженные» нестабильные фазы.

Решающую роль в исследовании сыграл прорыв в вычислительных методах. Стандартные алгоритмы моделирования требуют обмена информацией между всеми процессорами, что делает расчёты чрезвычайно ресурсоёмкими. Новый подход использовал взаимодействие только между соседними процессорами и эффективно задействовал графические ускорители суперкомпьютеров. Это позволило увеличить скорость вычислений до ста раз и сделать возможным моделирование даже сложных аморфных материалов, интерфейсов между кристаллами и дефектов решётки — ключевых элементов будущих квантовых технологий.

Открытие фундаментальной стабильности квазикристаллов имеет далеко идущие последствия. Понимание того, как формировать упорядоченные структуры без повторяющегося рисунка, может привести к созданию инженерных материалов с уникальными электронными, оптическими и механическими характеристиками. Они могут использоваться в сверхпрочных покрытиях, новых типах фотонных кристаллов, термоэлектрических материалах и элементах квантовых устройств. Теперь, когда спор о природе квазикристаллов

завершён, перед наукой открывается возможность целенаправленно проектировать вещества, которые раньше считались невозможными.

Ссылка: «Стабильность квазикристаллов и кинетика зародышеобразования в теории функционала плотности» [DOI: 10.1038/s41567-025-02925-6](https://doi.org/10.1038/s41567-025-02925-6).